「分子研リポート 2015」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　2015 年度の実施状況 38
3-3-3　共同利用研究実施件数一覧 59
3-4　国際交流と国際共同研究 61
3-4-1　外国人客員部門等及び国際交流 61
3-4-2　岡崎コンファレンス 64
3-4-3　日韓共同研究 68

3-5　大学院教育 69
3-5-1　特別共同利用研究員 69
3-5-2　総合研究大学院大学二専攻 70
3-5-3　オープンキャンパス・分子研シンポジウム 74
3-5-4　夏の体験入学 74
3-5-5　総研大アジア冬の学校 75
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 76
3-5-7　統合生命科学教育プログラム 77

4．研究支援等 79
4-1　技術課 80
4-1-1　技術研究会 80
4-1-2　技術研修 82
4-1-3　人事 84
4-1-4　受賞 84
4-2　安全衛生管理室 85
4-3　社会との交流 86
4-3-1　自然科学研究機構シンポジウム 86
4-3-2　大学共同利用機関シンポジウム 87
4-3-3　分子科学フォーラム 87
4-3-4　分子研コロキウム 88
4-3-5　岡崎市民大学講座 89
4-3-6　その他 90
4-4　理科教育への協力 91
4-4-1　スーパーサイエンスハイスクール 91
4-4-2　あいち科学技術教育推進協議会 91
4-4-3　国研セミナー 92
4-4-4　小中学校での出前授業 93
4-4-5　職場体験学習 95
4-4-6　その他 95
4-5　一般公開 97
4-6　見学者受け入れ 98

5．各種事業 101
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） 103
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） 104
5-3　イメージング・サイエンス（自然科学研究機構） 106
5-3-1　経緯と現状 106
5-3-2　実施された主な行事 107
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） 108
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） 109

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）.....120
5-6-1 はじめに.....120
5-6-2 TCCI の活動について.....121
5-6-3 謝辞.....126
5-7 ポスト「京」重点課題⑤
「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）.....127
5-7-1 はじめに.....127
5-7-2 重点課題⑤研究課題について.....127
5-7-3 重点課題⑤実施体制について.....128
5-7-4 平成 27 年度について.....129
5-7-5 今後の課題と取組みについて.....129
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）.....130
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）.....132
5-10 分子科学国際共同研究拠点の形成.....133
5-10-1 分子科学アジアコア多国間国際共同事業.....133
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）.....134
5-10-3 その他の実施内容.....134
5-11 研究大学強化促進事業（文部科学省）.....137

６．研究領域の現状.....139
6-1 論文発表状況.....139
6-2 理論・計算分子科学研究領域.....140
理論分子科学第一研究部門.....140
計算分子科学研究部門.....151
6-3 光分子科学研究領域.....160
光分子科学第一研究部門.....160
光分子科学第二研究部門.....165
光分子科学第三研究部門.....169
光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）.....178
光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）.....181
光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）.....183
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）.....186
6-4 物質分子科学研究領域.....199
電子構造研究部門.....199
電子物性研究部門.....204
分子機能研究部門.....207
6-5 生命・錯体分子科学研究領域.....219
生体分子機能研究部門.....219
生体分子情報研究部門.....237
錯体触媒研究部門.....242
錯体物性研究部門.....250
6-6 協奏分子システム研究センター.....255
階層分子システム解析研究部門.....255
機能分子システム創成研究部門.....272

７．点検評価と課題.....281
7-1　運営顧問による点検評価.....282
7-1-1　分子研全体の評価.....282
7-1-2　個別研究領域の評価.....285
7-2　研究顧問による点検評価.....297
7-2-1　Graham R. Fleming 研究顧問.....297
7-3　外国人運営顧問による点検評価.....302
7-3-1　Ron Naaman 外国人運営顧問.....302
7-3-2　Peter J. Rossky 外国人運営顧問.....302
7-4　国際諮問委員による点検評価.....303
7-4-1　David Wales 国際諮問委員.....303

８．研究施設の現状と将来計画.....307
8-1　極端紫外光研究施設（UVSOR）.....308
8-2　協奏分子システム研究センター.....309
8-3　分子制御レーザー開発研究センター.....310
8-4　機器センター.....313
8-5　装置開発室.....315
8-6　計算科学研究センター.....316
8-7　岡崎統合バイオサイエンスセンター.....319

９．資料.....321
9-1　評議員（1976 ～ 1981）.....321
9-2　評議員（1981 ～ 2004）.....322
9-3　運営顧問（2004 ～）.....326
9-4　外国人評議員（1976 ～ 2004）.....327
9-5　外国人運営顧問（2004 ～）.....328
9-6　運営に関する委員会委員（1975 ～ 1981）.....329
9-7　運営協議員（1981 ～ 2004）.....330
9-8　運営会議委員（2004 ～）.....334
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.....336
9-10 自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則.....337
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.....340
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 28 年度）.....341

1．序　　言

分子科学とは，豊かな自然において多様な物質循環，エネルギー変換を司っている「分子」についての知識を深め，卓越した機能をもつ分子系を創成することを目指す学問です。分子科学研究所は，そのような分子科学の研究の中核拠点として実験的研究および理論的研究を行うとともに，広く研究者の共同利用に供することを目的として1975年に設立された大学共同利用機関です。国際的な中核共同研究センターとして，国内外の分子科学研究を先導すると同時に，生命科学・天文科学などをふくむ，分子が関与する広汎な関連分野と協同して，科学の新たな研究領域を創出することも目標としており，現在，理論・計算分子科学，光分子科学，物質分子科学，生命・錯体分子科学の４つの研究領域，さらに協奏分子システム研究センター（2013年４月から発足）や極端紫外光研究施設を始めとする７つの研究施設・センター，などを擁し，分子の構造と反応と機能についての先鋭的な基礎研究を進め分子の新たな可能性を探っています。

このリポートには，2015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」，そして（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ニクス研究」,（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」,（５)「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」,（６)「ポスト「京」重点課題⑤」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 を使った事業は，予算がなくなった時点で発展的に見直し，現在，研究所の予算をベースに他の獲得予算も追加しながら，東アジアに限らず欧米まで拡大した分子研独自の国際インターンシッププログラム（IMS-IIP）として制度化して実施しています。

分子研の人の流れは常に活発であり，2015年度には多くの助教の若いメンバーが就任し，研究所は若い活気にあふれています。2016年度には多くの PI の人事選考が予定され，分子研の次の躍進の始まりの年になります。

2015年度は法人化２期目の６年間の最終年度であり，５月の初めに運営顧問の齋藤軍治教授，増原宏教授，廣田襄教授 , 研究顧問の柳田敏雄教授，さらに諸熊奎治教授，増田秀樹教授の６名の先生方に，分子科学研究所の活動の評価をしていただきました。2015年10月上旬に Fleming 教授（研究顧問）が３日間にわたり来所し，この６年間を通じて同氏から頂いた研究方向，またその実施についての提言などがいかに反映されたかについて検証していただきました。また11月中旬には英国ケンブリッジ大学の Wales 教授によって理論研究グループを中心に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。これらの貴重な評価，提言が本リポートに掲載されています。

2016年４月には，東京大学の川合眞紀教授が新所長として就任され，分子科学の新たな躍進が始まります。川合先生のもと分子科学研究所がさらに発展し，日本・世界の学問の発展に大きく貢献していくことを祈念しています。私自身，この６年間，分子科学の府であるこの研究所を大いに楽しみました。その間，多くの方に支えられてきましたこと感謝に堪えません。

2016年３月

自然科学研究機構

分子科学研究所　所長

大峯　巖

2．分子科学研究所の概要

2-1　研究所の目的

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

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

2-2　沿　　革

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

1965. 12.13　日本学術会議は，「分子科学研究所」（仮称）の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
1973. 10.31　学術審議会は,「分子科学研究所」（仮称）を緊急に設立することが適当である旨, 文部大臣に報告した。
1974.　4.11　文部大臣裁定により，東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室（室長：井口洋夫前東京大学物性研究所教授，定員３名）及び分子科学研究所創設準備会議（座長：山下次郎前東京大学物性研究所長，学識経験者 35 人により構成）が設置された。
1974.　7.　6　分子科学研究所創設準備会議において，研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
1975.　4.22　国立学校設置法の一部を改正する法律（昭 50 年法律第 27 号）により「分子科学研究所」が創設され，初代所長に赤松秀雄前横浜国立大学工学部長が任命された。 同時に，分子構造研究系（分子構造学第一研究部門，同第二研究部門），電子構造研究系（基礎電子化学研究部門），分子集団研究系（物性化学研究部門，分子集団研究部門），機器センター，装置開発室，管理部（庶務課，会計課，施設課，技術課）が設置された。
1975. 12.22　外国人評議員の設置が制度化された。
1976.　5.10　理論研究系（分子基礎理論第一研究部門, 同第二研究部門), 相関領域研究系（相関分子科学研究部門），化学試料室が設置された。
1976. 11.30　実験棟第１期工事（5,115 m^2）が竣工した。
1977.　4.18　相関領域研究系相関分子科学研究部門が廃止され，相関領域研究系（相関分子科学第一研究部門，同第二研究部門），電子計算機センター，極低温センターが設置された。
1977.　4.　大学院特別研究学生の受入れが始まる。
1977.　5.　2　国立学校設置法の一部を改正する法律により生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所，生理学研究所）が設置されたことに伴い，管理部を改組して分子科学研究所管理局とし，生物科学総合研究機構の事務を併せ処理することとなった。管理局に庶務課，人事課，主計課，経理課，建築課，設備課，技術課が置かれた。
1978.　3.　7　分子科学研究所研究棟（2,752 m^2）が竣工した。
1978.　3.11　装置開発棟（1,260 m^2），機器センター棟（1,053 m^2），化学試料棟（1,063 m^2）が竣工した。
1978.　4.　1　電子構造研究系に電子状態動力学研究部門，電子構造研究部門が，分子集団研究系に基礎光化学研究部門が設置された。
1979.　3.　1　電子計算機センター棟（1,429 m^2）が竣工した。
1979.　3.24　実験棟第２期工事（3,742 m^2），極低温センター棟（1,444 m^2）が竣工した。

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

2004. 3. 8　山手３号館（統合バイオサイエンスセンターなど）（10,757 m^2）が竣工した。

2004. 4. 1　国立大学法人法により，国立天文台，核融合科学研究所，基礎生物学研究所，生理学研究所，分子科学研究所が統合再編され，大学共同利用機関法人自然科学研究機構が創設された。岡崎国立共同研究機構管理局が，大学共同利用機関法人自然科学研究機構岡崎統合事務センターとなり，総務部（総務課，国際研究協力課），財務部（財務課，調達課，施設課）に改組された。

2004. 4. 1　理論研究系が理論分子科学研究系に改組された。計算分子科学研究系（計算分子科学第一研究部門，計算分子科学第二研究部門，計算分子科学第三研究部門）が設置された。分子スケールナノサイエンスセンターに，先導分子科学研究部門が設置され，界面分子科学研究部門，分子クラスター研究部門が廃止された。極端紫外光実験施設が，極端紫外光研究施設に改組された。安全衛生管理室が設置された。

2004. 4. 1　第六代研究所長に中村宏樹分子科学研究所教授が任命された。

2005. 5.20　分子科学研究所創設 30 周年記念式典が挙行された。

2007. 4. 1　研究系及び錯体化学実験施設が廃止され，理論･計算分子科学研究領域（理論分子科学第一研究部門，理論分子科学第二研究部門，計算分子科学研究部門，理論・計算分子科学研究部門），光分子科学研究領域（光分子科学第一研究部門，光分子科学第二研究部門，光分子科学第三研究部門，光分子科学第四研究部門），物質分子科学研究領域（電子構造研究部門，電子物性研究部門，分子機能研究部門，物質分子科学研究部門），生命・錯体分子科学研究領域（生体分子機能研究部門，生体分子情報研究部門，錯体触媒研究部門，錯体物性研究部門，生命･錯体分子科学研究部門）の４つの研究領域が設置された。極端紫外光科学研究施設に，光加速器開発研究部門，電子ビーム制御研究部門，光物性測定器開発研究部門，光化学測定器開発研究部門が設置（名称変更）された。分子スケールナノサイエンスセンターに，ナノ分子科学研究部門，ナノ計測研究部門，ナノ構造研究部門が設置され，分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門，ナノ触媒・生命分子素子研究部門，ナノ光計測研究部門が廃止された。分子制御レーザー開発研究センターに，先端レーザー開発研究部門，超高速コヒーレント制御研究部門，極限精密光計測研究部門が設置された。機器センターが新たに設置された。広報室及び史料編纂室が設置された。

2010. 3.30　実験棟改修第１期工事（耐震及び全面改修）が竣工した。

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

2011. 3.30　実験棟改修第２期工事（耐震及び全面改修）が竣工した。

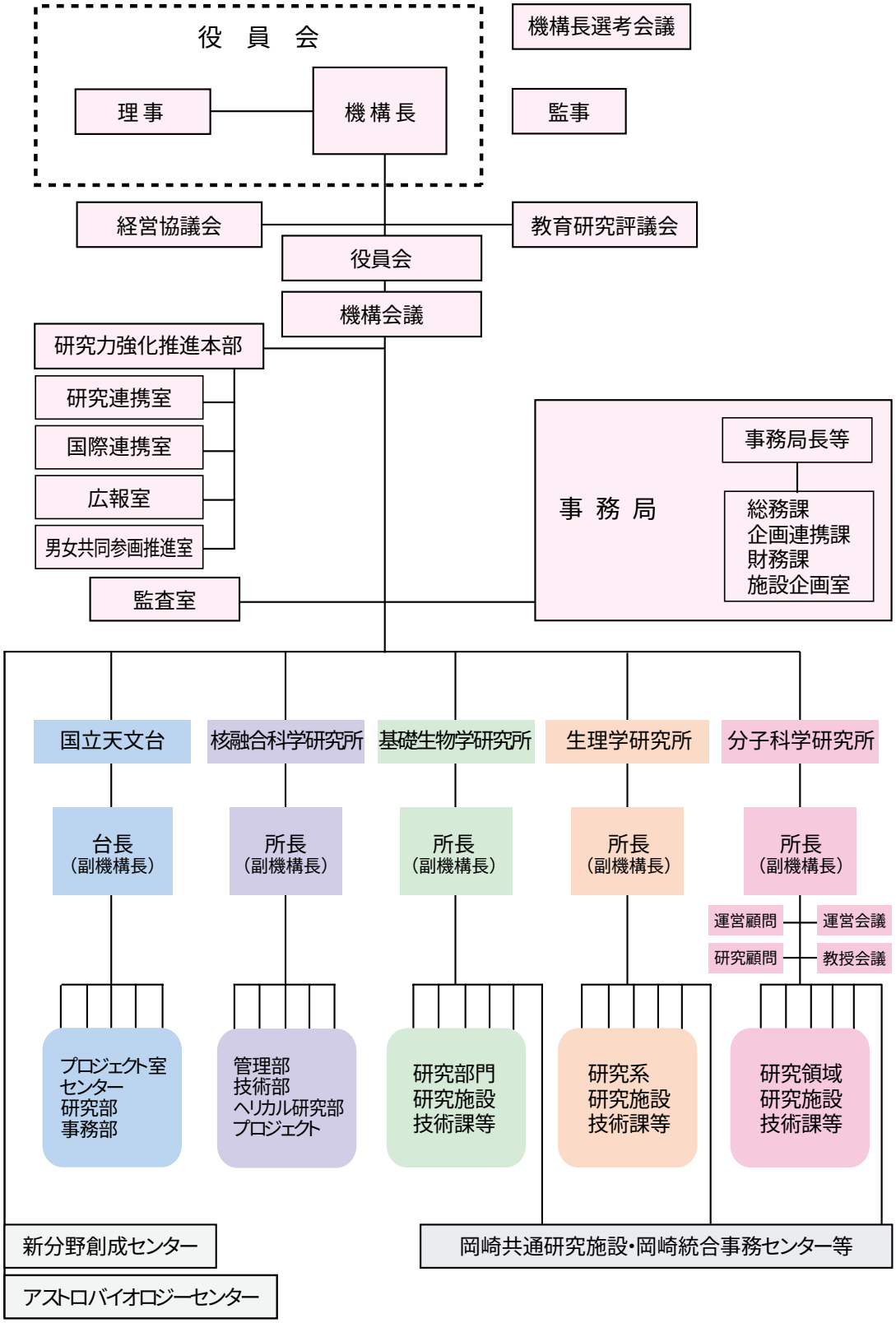
2013. 4. 1　分子スケールナノサイエンスセンターが廃止され，協奏分子システム研究センター（階層分子システム解析研究部門，機能分子システム創成研究部門，生体分子システム研究部門）が設置された。

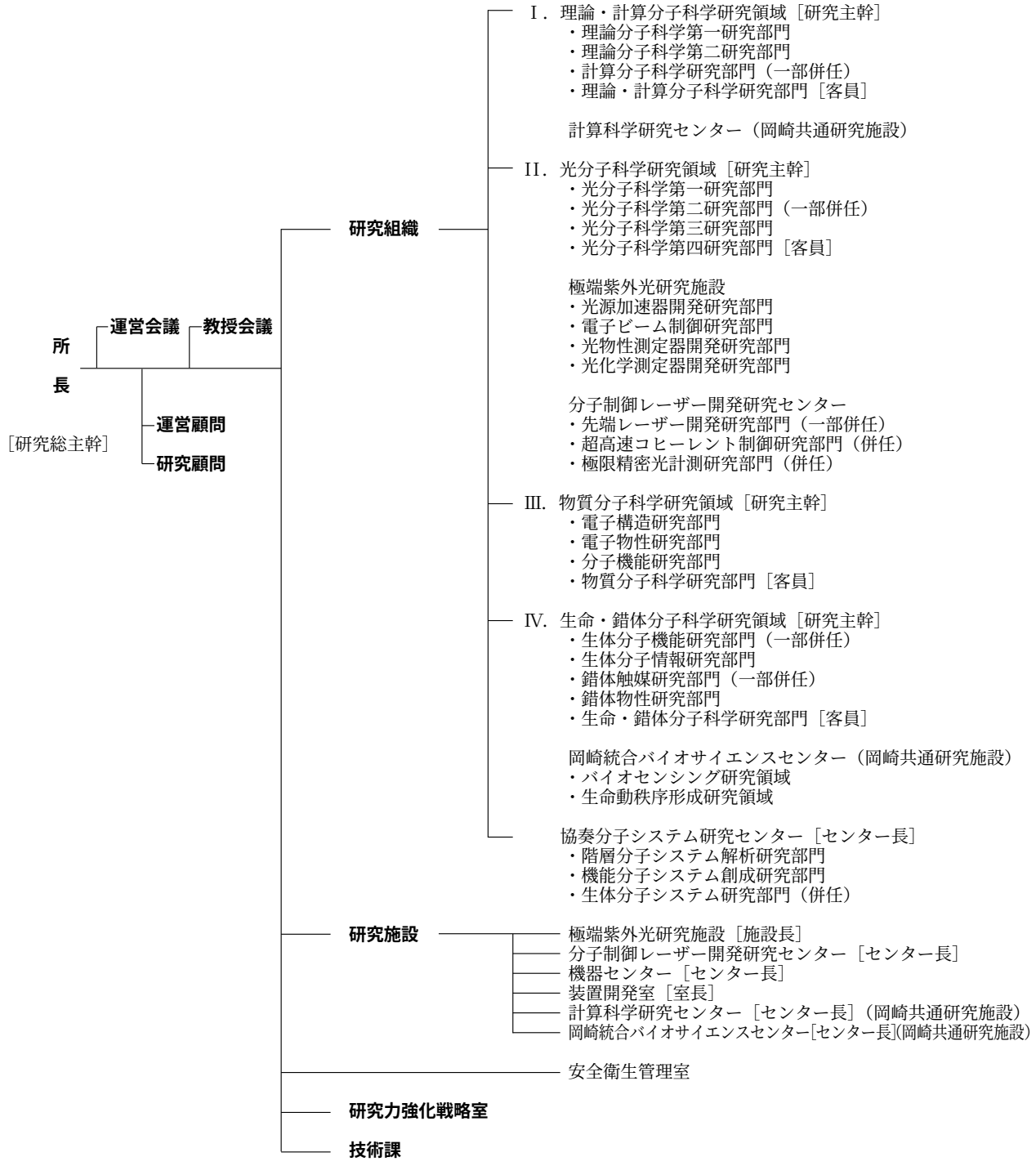
2013. 10. 1　広報室及び史料編纂室が廃止され，研究力強化戦略室が設置された。

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当なため，形式的には機構長の諮問組織的な位置付けで，その都度，各研究所別に大学共同利用機関長選考委員会を設置することにした。その委員は教育研究評議会と経営協議会の機構外委員も候補に加えて，機構外から機構長によって選ばれる。一方，機能②については必要に応じて各研究所で適当な内部組織（所長の諮問組織）を構成することになった。その結果，分子科学研究所では運営顧問制度（外国人評議員に代わる外国人運営顧問も含む）を発足させた。第一期中期計画期間（2004年度～2009年度）の6年間の運営顧問は国内4名，海外2名で運用してきたが，第二期中期計画期間（2010年度～2015年度）の最初の3年間は，国際的な研究機関としての運営面を中心に諮問するため，海外2名で運用した。4年目となり，国内3名を新たに追加した。

運営顧問（2015年度）

齋　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（2015年度）

NAAMAN, Ron	イスラエル国ワイツマン科学研究所教授
ROSSKY, Peter J.	米国ライス大学自然科学研究部部長・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（2015年度）

FLEMING, Graham	カリフォルニア大学バークリー校研究担当副学長
柳　田　敏　雄	大阪大学教授

2-4-3　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.	カナダマックマスター大学教授　放射光分野
WALES, David	英国ケンブリッジ大学教授　生命分子科学（理論）分野
BERRY, R. Stephen	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原案を作成して，それについて運営会議で審議する。その他，共同研究以外の重要事項について運営会議の下に専門委員会を設定することが可能である。

運営会議委員（任期 2014.4-2016.3）（◎：議長　○：副議長）

	朝　倉　清　[illegible]	北海道大学触媒科学研究所教授
	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　嵜　　亨	九州大学大学院理学研究院教授
	水　谷　泰　久	大阪大学大学院理学研究科教授
	森　　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　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

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はいるが，法制化された任期があるわけではない。なお，平成11年１月から法人化直前の平成16年３月までに採用された助教（平成15年４月以前は研究系の助教だけ）には６年の任期（法制化された任期）と３年ごとの再任が規定されたが，法人化による見直しによって，６年の任期を越えて勤務を継続する場合は再任手続きを経たのち，任期のない助教に移行した。

人事選考部会委員（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　嵜　　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（2015年度）

【所外委員】

（日本化学会推薦）

栗　原　和　枝　（東北大教授）　　原　田　　明　（阪大院特任教授）

渡　辺　芳　人　（名大院教授）

（日本物理学会推薦）

首　藤　　啓　（首都大教授）　　山　本　　智　（東大院教授）

（日本放射光学会推薦）

足　立　伸　一　（高エネ機構教授）

（錯体化学会推薦）

伊　東　　忍　（阪大院教授）

（分子科学会推薦）

大　内　幸　雄（東工大院教授）　　小　林　昭　子　（日大上席研究員）

高　橋　　聡　（東北大教授）　　菱　川　明　栄　（名大院教授）

松　本　吉　泰　（京大院教授）　　吉　澤　一　成　（九大教授）

（日本生物物理学会推薦）

神　取　秀　樹　（名工大院教授）

【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	2015.5.11~13, 10.7~10, 2016.3.2~4, 3.24~26
将来計画委員会	研究所の将来計画について検討する。	所長，研究総主幹， 教授数名，准教授数名	委員会規則	―
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	2016.2.9
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	2016.3.17
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	2015.9.2, 2016.2.25
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	2015.8.28, 2016.2.22
装置開発室運営委員会	装置開発室の運営に関する重要事項。	（原則） 室長 研究教育職員８ 技術職員若干名 所外の研究者及び技術者若干名 技術課長	委員会規則	2015.10.7
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	2015.6.17, 9.15, 12.22, 2016.3.4 （メール審議）
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	2015.4.1, 6.15, 7.21, 9.29, 11.9, 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		2015.4.7, 6.5, 7.3, 9.4, 10.2, 11.6, 12.7, 2016.1.7, 2.5, 3.4
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	2015.4.21, 5.19, 6.16, 7.22, 9.15, 10.20, 11.17, 12.15, 2016. 1.15, 2.16, 3.15
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	2015.7.7
岡崎情報ネットワーク管理運営委員会	岡崎情報ネットワークの管理運営に関する必要事項。	研究総主幹，教授１ 計算科学研究センター長 責任担当所長 岡崎情報ネットワーク管理室次長（教授）	委員会規則	2016.3.7
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	2015.4.22~28（メール審議），6.1, 7.28, 10.2, 11.9, 2016.1.7
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	2015.7.13, 2016.1.28
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	2016.2.5
岡崎情報図書館運営委員会	情報図書館の運営に関する重要事項。	館長，教授１ 准教授１	委員会規則	2016.3.29
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	2015.4.21, 5.19, 6.16, 7.21, 8.17, 9.7, 10.20, 11.17, 12.15, 2016.1.19, 2.16, 3.15

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	2015.9.4, 10.20
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	2015.4.30, 7.8
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	2016.2.10
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	2016.3.11
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	2015.6.30
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	2015.7.13
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	2015.7.13, 9.9
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	―
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	2015.5.14, 7.6, 9.9, 11.11, 2016.1.13, 3.9
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	2015.9.7, 12.11
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	2016.2.19
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	2015.9.18, 12.18, 2016.2.5

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
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
平　田　文　男	名誉教授
廣　田　榮　治	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

物故名誉教授

赤　松　秀　雄
井　口　洋　夫
花　崎　一　郎
丸　山　有　成

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
BAGCHI, Biman	外国人研究職員（Indian Institute of Science） '15.5.29 ～ 12.11
KIM, Hyung	外国人研究職員（カーネギーメロン大学） '15.9.14 ～ 12.13
森　　俊　文	助　教
甲　田　信　一	研究員
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
	石　村　和　也	特任研究員
	加　藤　隆　士	特任専門員

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（IMS フェロー）
	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）
	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）
	河　津　　励	特任研究員（横浜市立大学生命ナノシステム科学研究科勤務）

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）
	JACK, Calum Neilson	学振外国人特別研究員　'15.7.1 ～ '16.3.31
	大　島　康　裕	教　授（委嘱）（東工大院理）

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
	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
上　羽　貴　大　　助　教
BUSSOLOTTI, Fabio　　研究員
KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika　　特別訪問研究員
片　伽　英　樹　　助　教

光分子科学第四研究部門（客員研究部門）
井　村　考　平　　教　授（早稲田大先進理工）
山　田　豊　和　　准教授（千葉大院融合科学）
平　原　　徹　　准教授（東工大院理工）

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
中　村　高　大　　特任研究員
YU, Liwei　　特任研究員

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　　教　授（委嘱）（北陸先端大マテリアルサイエンス）
永　井　篤　志　　助　教
TIAN, Yukui　　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
DALAPATI, Sasanka　　学振外国人特別研究員　'15.4.1 ～ '17.3.31
HUANG, Ning　　研究員
西　村　勝　之　　准教授
奥　下　慶　子　　特任助教（分子科学研究所特別研究員）

物質分子科学研究部門（客員研究部門）
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（東京理科大理）

生命・錯体分子科学研究領域　研究主幹（併）　魚　住　泰　広

生体分子機能研究部門
青　野　重　利　　教　授（兼）（岡崎統合バイオサイエンスセンター）
吉　岡　資　郎　　助　教
村　木　則　文　　特任助教（分子科学研究所特別研究員）
加　藤　晃　一　　教　授（兼）（岡崎統合バイオサイエンスセンター）
矢　木　真　穂　　助　教
谷　中　冴　子　　特任助教（分子科学研究所特別研究員）
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
黒　井　邦　巧	研究員（IMS フェロー）

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
PAN, Shiguang	学振外国人特別研究員　'15.4.1 ～ '17.3.31
永　長　　誠	研究員
平　田　修　一	研究員
ROY, David	特任研究員
間　瀬　俊　明	特別訪問教授（特別訪問研究員）
樫　山　儀　恵	准教授
泉　関　督　人	助　教
藤　波　　武	研究員
山　西　克　典	研究員

錯体物性研究部門

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	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
MIRIAN, Najmeh Sadat	研究員（IMS フェロー）

電子ビーム制御研究部門

大　東　琢　治	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
出　田　真一郎	助　教

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
古　池　美　彦	助　教
阿　部　　淳	研究員
古　賀　信　康	准教授
小　杉　貴　洋	助　教
古賀（巽）理恵	特任研究員
鹿　野　　豊	特任准教授(若手独立フェロー)
石　﨑　章　仁	特任准教授(若手独立フェロー)
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
山　本　浩　二	助　教
鈴　木　敏　泰	准教授
阪　元　洋　一	助　教
黒　田　康　弘	研究員
東　林　修　平	助　教
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
KAUSAS, Arvydas	研究員
ZHENG, Lihe	研究員
YAHIA, Vincent	研究員
LIM, Hwanhong	研究員
佐　藤　庸　一	特任研究員
南　出　泰　亜	特別訪問研究員
縄　田　耕　二	特別訪問研究員
藤　　貴　夫	准教授
野　村　雄　高	助　教
白　井　英　登	特任助教(分子科学研究所特別研究員)

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)

機器センター　センター長(併)　横　山　利　彦

中　尾　　聡	研究員
野　田　一　平	研究員
井　上　三　佳	特任研究員
金　子　　靖	特任専門員
冨　宅　喜代一	特別協力研究員

装置開発室　室長(併)　山　本　浩　史

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
堀　米　利　夫	特任専門員
神　谷　美　穂	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)

生命動秩序形成研究領域

加　藤　晃　一	教　授
矢　木　真　穂	助　教(兼)
石　井　健太郎	研究員
飯　野　亮　太	教　授
中　村　彰　彦	助　教
栗　原　顕　輔	特任准教授
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 中村永研

極端紫外光技術一係

林　憲志	係長

極端紫外光技術二係

蓮本正美	係長
近藤直範	主任
酒井雅弘	主任
手島史綱	主任

極端紫外光技術三係

山崎潤一郎	係長

光計測技術係

岡野泰彬	主任
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

岩橋建輔	係長
松尾純一	技術職員

計算科学技術二係

長屋貴量	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 2016 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，特任制度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実施している。特任制度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。平成 27 年度より，新規採用の研究教育職員は原則，年俸制に移行することになった。特任制度の年俸制ではなく，任期は定めず，毎年度末に業績評価が実施される。

(2)　創立以来の人事異動状況（2016 年１月１日現在）

①　専任研究部門等（分子研のみ　岡崎共通研究施設は含まず　休職・休業含む）

職名 / 区分	所　長	教　授	准教授	助　教	技術職員	若手独立フェロー / 特任准教授	分子科学研究所特別研究員 / 特任助教	IMS フェロー
就任者数	7	48	79	271	155	3	21	227
転出者数	6	37	66	233	122	0	13	221
現　　員	1	11(4)	13	38	33(1)	3	8	6

（　）は委嘱で外数。

②　客員研究部門

職　名 / 区　分	教　授	准教授
就任者数	148	159
現　　員	6	6

③　外国人客員研究部門

職　名 / 区　分	分子エネルギー変換研究部門 *		極端紫外光研究部門 *		外国人客員 **
	教　授	助教授	教　授	助教授	教　授
就任者数	34	29	34	22	15

＊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

2016.1.1

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(2)	0(3)	7	11(5)		11(5)
物質分子科学研究領域		2(3)	2(2)	3(1)	7(6)		7(6)
生命・錯体分子科学研究領域		1(6)	3(1)	8(3)	12(10)		12(10)
研究施設		3(6)	6(2)	14	23(8)		23(8)
技術課						33(1)	33(1)
小計	1	11(22)	13(10)	38(4)	63(36)	33(1)	96(37)
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	15(23)	14(10)	39(10)	69(43)	33(1)	102(44)

（　）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	2011 年度	2012 年度	2013 年度	2014 年度	2015 年度
人件費	1,187,453	1,126,099	1,068,438	1,118,692	1,174,409
運営費，設備費	2,983,850	2,133,268	2,766,023	2,287,785	2,197,850
施設費	0	31,269	322,686	22,820	21,492
合計	4,171,303	3,290,636	4,157,147	3,429,297	3,393,751

寄付金

区　分	2011 年度	2012 年度	2013 年度	2014 年度	2015 年度
件数（件）	10	11	10	23	18
金額（千円）	7,409	13,340	7,125	21,648	18,140

共通研究施設を除く

科学研究費補助金

区　分	2011 年度	2012 年度	2013 年度	2014 年度	2015 年度
件数（件）	58	61	60	68	56
金額（千円）	312,600	236,700	222,310	265,990	239,580

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

2015 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	5	6	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		7	1	8
若手研究	（Ｓ）	0	0	0
若手研究	（Ａ）	8	0	8
若手研究	（Ｂ）	10	3	13
基盤研究	（Ｓ）	0	0	0
基盤研究	（Ａ）	5	0	5
基盤研究	（Ｂ）	8	2	10
基盤研究	（Ｃ）	7	0	7
特別研究員奨励費		2	0	2
特別研究員奨励費	外国人	3	0	3
研究活動スタート支援		1	1	2
奨励研究		0	0	0
合計		56	13	69

＊分担金受入件数を除く

受入額一覧　　（単位：千円）

研究種目		分子科学研究所	岡崎共通研究施設	合計
学術創成研究費		0	0	0
特別推進研究		0	0	0
新学術領域研究	領域	11,400	57,800	69,200
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		8,700	1,500	10,200
若手研究	（S）	0	0	0
若手研究	（A）	54,900	0	54,900
若手研究	（B）	14,500	6,300	20,800
基盤研究	（S）	0	0	0
基盤研究	（A）	52,500	0	52,500
基盤研究	（B）	28,700	4,400	33,100
基盤研究	（C）	7,400	0	7,400
特別研究員奨励費		2,400	0	2,400
特別研究員奨励費	外国人	3,500	0	3,500
研究活動スタート支援		1,100	0	1,100
奨励研究		0	0	0
合計		185,100	71,100	256,200

＊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	2011 年度	2012 年度	2013 年度	2014 年度	2015 年度
件数（件）	5	10	8	5	2
金額（千円）	27,730	42,025	133,667	31,328	55,218

2015 年 12 月 31 日現在

受託研究

区　分	2011 年度	2012 年度	2013 年度	2014 年度	2015 年度
国	4	4	1	2	2
独立行政法人等	22	24	16	20	17
大学等	1	2	6	3	3
民間企業他	0	1	2	1	2
合計件数（件）	27	31	25	26	24
合計金額（千円）	828,934	1,287,601	884,761	932,110	975,100

（岡崎共通研究施設を含む）
2015 年 12 月 31 日現在

2-7　岡崎共通施設

2-7-1　岡崎情報図書館

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

現在（2015.12）岡崎情報図書館は雑誌 1,512 種（和 292，洋 1,220），単行本 96,357 冊（和 13,160，洋 83,197）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 m^2，鉄筋コンクリート造２階建てで，大型スクリーン及びAV機器等を備えた 200 余名が参加可能な大会議室，120 名の中会議室，100 名の小会議室などが設けられている。中・小会議室はそれぞれ会議等の目的に応じて２分割して使用することもできる。

2-7-3　岡崎共同利用研究者宿泊施設

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

三島ロッジ	室数　シングル：60 室　ツイン：14 室　ファミリー：14 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，ネオ糖脂質による未分化細胞に対するアポトーシス誘導，Q スイッチ固体レーザー，ヒドリドイオン導電体 $Ba_2Li_{1-x}Sc_xH_{3-2x}O_{1+2x}$ $(0 \leq x \leq 1)$ とその製造方法など多岐にわたっている。特許取得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 26 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），平成 27 年度は，個人有０件，機構有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）であった（平成 27 年 11 月 30 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た。平成 26 年度からは，分子研全体の国際インターンシッププログラム（IMS-IIP）に組み込む形でアジア版 IMS-IIPA と名前を変え，事業を継続している。EXODASS から IMS-IIP に変わるにあたり，滞在期間を３ヶ月以内から６ヶ月以内に延長する（若手教員は１～２ヶ月），募集を原則として MOU 提携校に限る（MOU 提携校以外からも受入れは可能であるが，わざわざ宣伝はしていない）など，分子研独自のインターンシップ制度として，より戦略的な運用を図っている。

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

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開発と光・電子機能物質の理論設計
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，反応や物性を光で制御すること，及びそれに必要となる高度な光源開発を目的として研究を行う

光分子科学第一研究部門

研究目的　主としてレーザー光源を用いた先端的分光法, 顕微鏡法等を用いて, 分子とその集合体の高精度・高精細な構造を明らかにすると同時に，新たな光機能の開拓や物質特性の光制御を目指した研究を行う

研究課題　1, 極めて高い空間分解能を持つ先端的分光法による，分子集団の励起ダイナミクス，微粒子系における励起状態と増強電場の研究
2, 高強度かつ高コヒーレント光による分子運動の量子状態操作法の開拓，並びに，分子構造や反応ダイナミックス研究への適用

光分子科学第二研究部門
研究目的　物質の量子論的な性質を，デザインされた光電場で詳細に観察し制御するための新しい方法論と，それを支える高度な光源の開発を目指した研究を行う
研究課題　1, 高度にデザインされたレーザー場を用いて，原子・分子及びその集合体の量子ダイナミクスを精密に観測・制御するための研究

光分子科学第三研究部門
研究目的　真空紫外光や軟Ｘ線を用いた新奇な励起分子ダイナミクスの開拓と，それに関る動的プロセスの解明及び制御を目指した研究を行う
研究課題　1, 軟Ｘ線分光による分子及び分子集合体の光化学・光物性研究
2, レーザー光及び放射光を用いた光化学反応の研究

光分子科学第四研究部門（客員）
研究目的　比較的簡単な分子から，固体表面に吸着した分子やナノ構造体，さらに生体内分子までを広く対象とし，高度な時間分解・空間分解分光法，極端紫外光や特殊波長レーザー等を用いた光学測定によりそれらの性質を明らかにする
研究課題　1, 貴金属ナノ構造体及びその分子との結合系の光学特性に関するイメージング計測による研究
2, プローブ顕微鏡による分子認識機能および局所電子スピン状態の研究
3, 光電子分光法によるトポロジカル物性の研究

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ニクスの研究

2, サブサイクル超短光パルス発生装置や，光パルス評価法，超高速分光装置の開発

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示す新たな現象や有用な機能の発見を目指し，新規分子・物質の開発やそれらの高次集積化と，電子・光物性，反応性，触媒能，エネルギー変換などの研究を行う。また，分子・分子集合体の物性・機能の起源を解明するため，主として分光法に基づいた新たな観測技術開発に努める

電子構造研究部門

研究目的　　表面の物理的・化学的新機能とその機構解明

研究課題　1, 物質科学・表面科学のための新しい分光学的計測手法の開発

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, 固体 NMR を用いた生体分子・分子材料の構造・物性解析

物質分子科学研究部門（客員）

研究目的　　物質分子科学の関連領域との交流を通した新しい先端的研究分野の開拓

研究課題　1, 有機材料と電気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ニクスの中核センターとしての役割を果たしている。

機器センター

目　的　　機器センターは, 新規物質開発を行う上で基盤設備となる汎用物性測定装置, 汎用化学分析装置, 及び汎用分光計測装置を集中管理し，さらに，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，文部科学省受託研究ナノテクノロジープラットフォーム分子・物質合成の代表機関・実施機関の運営を担っている。

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)。

(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。

（ア)「課題研究（一般)」申請者が設定した研究課題で申請するもの。

（イ)「課題研究（新分野形成支援)」あらかじめ設定された下記の課題の中から一つを選び，申請するもの。

(i)　理論と実験の融合による水溶液の特異性と生体分子の機能発現の解明

(ii)　乱雑量子系における多体相互作用の研究

(iii)　分子性物質の機能性科学

(iv)　新しい駆動原理に立脚する分子変換・エネルギー変換

(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　2015 年度の実施状況

(1)　課題研究

課　題　名	提案代表者	
π電子物性科学の第三フェイズ～多自由度が拮抗するしなやかな複雑電子系の科学～	理化学研究所基幹研究所	加藤　礼三
元素戦略触媒	分子科学研究所	魚住　泰広

(2)　協力研究

課　題　名（通年）	代　表　者	
３重項－３重項消光によるアップコンバージョン過程の理論研究	筑波大学数理物質系	重田　育照
ピコ秒紫外－赤外二重共鳴分光実験と理論計算による S2 電子状態の解析	広島大学大学院理学研究科	江幡　孝之
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	大阪府立大学大学院理学系研究科	藤原　秀紀
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	信州大学繊維学部	新井　亮一
コヒーレントフォノンの量子状態推定と制御	東京工業大学応用セラミックス研究所	中村　一隆
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	島根大学教育学部	西山　　桂

高性能テラヘルツ波光源に向けた波長変換効率の励起時間依存性	理化学研究所テラヘルツ光源研究チーム	縄田　耕二
円偏光高輝度 UV 照射による有機無機複合材料中のキラル構造誘起	東京理科大学理学部	秋津　貴城
BL1U における大強度ガンマ線発生と同位体イメージングへの応用	京都大学エネルギー理工学研究所	全　　炳俊
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
円偏光アンジュレータ高次光が持つ新奇な性質の解明	広島大学放射光科学研究センター	佐々木茂美
凝縮系水分子に対する多電子同時計測	富山大学理学部	彦坂　泰正
精密有機合成を指向した金属クラスター触媒の開発	大阪大学大学院工学研究科	櫻井　英博

課　題　名（前期）

代　表　者

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
赤外フェムト秒パルスレーザーの開発	福井大学大学院工学研究科	川戸　　栄
軟Ｘ線吸収分光法による酸素生成触媒のオペランド観測	慶應義塾大学理工学部	吉田　真明
常温接合を用いた高機能固体レーザーの開発	中央大学理工学部	庄司　一郎
解離イオンから探るトリフルオロプロペンの分子内転位とオージェスペクトル変化	広島大学大学院理学研究科	岡田　和正
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	慶應義塾大学理工学部	古川　良明
ピコ秒レーザーを用いた THz 波パラメトリック発生の高効率化	名古屋大学大学院工学研究科	村手　宏輔
軟Ｘ線分光による水・分子液体中のイオン液体の電子状態の研究	高エネルギー加速器研究機構物資構造科学研究所	足立　純一
水の局所構造と動的挙動 ; 超短パルスレーザー分光と理論計算の interplay	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永　圭介
植物の光合成反応中心における初期電荷分離過程の分子論的機構に関する理論的研究	琉球大学理学部	東　　雅大
励起子ポラリトン凝縮高励起状態の研究	横浜国立大学大学院工学府	堀切　智之
分子動力学法によるヒトタンパク質ー薬物相互作用の解析	神戸大学大学院理学研究科	小堀　康博
光電子分光法による有機金属界面のエネルギー準位接合評価	千葉大学大学院融合科学研究科	米澤恵一朗
有機分子の電子状態の次元依存性	千葉大学大学院融合科学研究科	山田　豊和
暗視野顕微鏡法によるクラミドモナスの遊泳パターン解析	宇部工業高等専門学校	島袋　勝弥
導電性高分子／ポルフィリン間における励起エネルギー移動機構の解明と発光増幅特性に関する研究	島根大学大学院総合理工学研究科	水野　　斎
多体系の「かたちに潜む知恵」の解析と制御のためのゲージ理論	岩手大学人文社会科学部	花見　仁史
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ュドベリ列の漸次的生成	上智大学理工学部	東　　善郎
グラム陽性細菌のヘム取り込み系におけるヘム輸送タンパク質の構造と機能	北海道大学大学院理学研究院	内田　　毅

課　題　名（後期）

代　表　者

分子動力学法によるヒトタンパク質－薬物相互作用の解析	神戸大学大学院理学研究科	小堀　康博
光電子分光法による有機金属界面のエネルギー準位接合評価	千葉大学大学院融合科学研究科	米澤恵一朗
時間分解赤外分光法によるレチナールタンパク質の構造ダイナミクスの解析	岡山大学大学院医歯薬学総合研究科	塚本　　卓
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	慶應義塾大学理工学部	古川　良明
植物の光合成反応中心における初期電荷分離過程の分子論的機構に関する理論的研究	琉球大学理学部	東　　雅大
準安定多価分子イオンの生成機構の解明	新潟大学自然科学系理学部	副島　浩一
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	九州シンクロトロン光研究センター	金安　達夫
Passive Q-switched Laser を用いたマルチパルスレーザー点火の特性評価	大阪大学工学部	赤松　史光
励起子ポラリトン高励起状態の研究	横浜国立大学大学院工学府	堀切　智之
多体系の「かたちに潜む知恵」の解析と制御のためのゲージ理論	岩手大学人文社会科学部	花見　仁史
水の局所構造と動的挙動 ; 超短パルスレーザー分光と理論計算の interplay	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永　圭介
生体利用を目的とする光応答一酸化炭素放出錯体の創出	大阪府立大学大学院理学研究科	中島　　洋
ニトロキシドラジカル液晶の磁気ドメイン構造の円二色性イメージング測定	大阪大学大学院基礎工学研究科	内田　幸明
アルドキシム脱水酵素の反応機構について	富山県立大学工学部	浅野　泰久
軟Ｘ線分光による水・分子液体中のイオン液体の電子状態の研究	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	足立　純一
人工光合成半導体光電極のための超広帯域光電変換 III 族窒化物薄膜の電子状態の解明	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	園田　早紀

(3) 研究会

① 【分子研研究会（一般）】
膜タンパク質内部のプロトン透過を考える
2015 年 4 月 20 日（月）～ 21 日（火） 岡崎コンファレンスセンター大会議室

4 月 20 日（月）
セッション１　　チャネル型経路のプロトン透過
ディスカッションリーダー：難波啓一，北尾彰朗

9:00	難波啓一	はじめに
9:05	神取秀樹（名工大）	趣旨説明
9:30	平田文男（立命館大）	分子チャネルの透過機構と蛋白質の構造揺らぎ：統計力学的研究
9:55	藤吉好則（名大）	水チャネルにおけるプロトン透過制御機構とその重要性
10:45	安井正人（慶応大）	脳のアクアポリンの機能と関連疾患
11:10	岡村康司（阪大）	電位センサー機能の多様性と共通原理について
11:35	中川敦史（阪大）	電位依存性プロトンチャネルの構造
13:30	老木成稔（福井大）	イオンチャネルのプロトン透過：細胞毒ナノチューブ polytheonamide B の整流性プロトン透過
13:55	古谷祐詞（分子研）	イオンチャネルの分子機構解明への赤外分光解析による挑戦
14:20	吉田紀生（九大）	チャネルロドプシンのイオン輸送経路探索・液体論によるアプローチ
15:10	伊藤政博（東洋大）	細菌べん毛モーターのイオン選択透過機構を探る
15:35	北尾彰朗（東大）	細菌べん毛モーター固定子のイオン透過メカニズム
16:00	難波啓一（阪大）	細菌べん毛モーターの回転機構におけるプロトン透過の役割

16:25 - 16:35　写真撮影
16:35 - 18:30　ポスターセッション
（16:45 - 17:30　奇数番号説明時間，17:30 - 18:15　偶数番号説明時間）
18:30 - 20:30　懇親会@岡崎コンファレンスセンター中会議室

4 月 21 日（火）
セッション２　　トランスポーター型経路のプロトン透過
ディスカッションリーダー：神取秀樹，飯野亮太

9:00	神取秀樹	２日目のはじめに
9:05	林　重彦（京大）	タンパク質の pKa 制御とプロトン能動輸送の分子機構
9:30	神山　勉（名大）	バクテリオロドプシンはプロトン／水分子・対輸送体である
9:55	井上圭一（名工大）	H^+ ポンプと Na^+ ポンプ：２つのロドプシンから見えるもの
10:45	小倉尚志（兵庫県大）	プロトンポンプ機能に必要な部品の働き
11:10	月原冨武（兵庫県大）	チトクロム酸化酵素のプロトンポンプ機構
11:35	重田育照（筑波大）	チトクロム *c* 酸化酵素におけるプロトン輸送の構造的仕掛け
13:30	飯野亮太（岡崎統合バイオ）	回転型 ATPase によるイオンの輸送を考える
13:55	村田武士（千葉大）	V-ATPase のイオン輸送メカニズム
14:20	石谷隆一郎・濡木　理（東大）	プロトンで駆動されるトランスポーターの分子機構
15:10	杉田有冶（理研）	膜輸送タンパク質におけるプロトン対抗輸送の役割
15:35	塚崎智也（奈良先端大）	プロトン駆動型タンパク質分泌モーター SecDF
16:00	池口満徳（横浜市大）	多剤排出トランスポーター AcrB でのプロトン透過と機能

16:25 - 17:00　総合討論

ポスター発表プログラム

P01　光誘起陽イオンチャネル ChR の水素結合環境とプロトン移動を考える
○伊藤奨太[1]，加藤英明[2]，大石賢実[2]，谷口怜哉[2]，岩田達也[1]，濡木　理[2]，神取秀樹[1]（[1]名工大院工，[2]東大院理）

P02　腸内連鎖球菌由来の V-ATPase の 1 分子回転計測
○上野博史[1,2]，皆川慶嘉[2]，宗行英朗[1]，野地博行[2]，村田武士[3]，飯野亮太[4]
([1]中央大理工，[2]東大院工，[3]千葉大院理，[4]岡崎統合バイオ・分子研）

P03　パッチクランプ法による大腸菌呼吸鎖の末端酸化酵素の H^+-pump の機能解析
○宇野正晃[1]，駒澤光祐[1]，黒田照夫[2]，川崎　寿[1]，矢部　勇[1]（[1]東京電機大先端科学，[2]岡山大院医歯薬）

P04　光駆動ナトリウムイオンポンプのイオン取込みと選択性
○加藤善隆，井上圭一，吉住　玲，橋本優一，神取秀樹（名工大院工）

P05　電位依存性プロトンチャネルの疎水性バリアを形成するアミノ酸残基の役割
○川鍋　陽，岡村康司（阪大院医）

P06　趣旨説明
神取秀樹（名工大院工）

P07　ビブリオ菌のべん毛固定子タンパク質 PomA/PomB 複合体のナノディスク再構成
○郷原瑞樹，竹川宜宏，小嶋誠司，本間道夫（名大院理）

P08　イオン透過を担う固定子の集合に共役した細菌べん毛モーターの活性化機構
○小嶋誠司[1]，朱世偉[1]，高尾真登[2]，李娜[1]，佐久間麻由子[1]，西野優紀[1]，本間道夫[1]，今田勝巳[2]（[1]名大院理，[2]阪大院理）

P09　ドメイン運動の階層的な解析により描かれる SERCA の反応による構造変化
○小林千草[1]，小池亮太郎[2]，太田元規[2]，杉田有治[1,3,4,5]
([1]理研 AICS，[2]名大情報科学，[3]理研杉田理論分子科学研，[4]理研 QBiC，[5]理研 iTHES）

P10　カリウムイオンをポンプするロドプシンの創成
○今野雅恵[1]，井上圭一[1,2]，加藤英明[3]，濡木　理[3]，神取秀樹[1]（[1]名工大院工，[2]JST さきがけ，[3]東大院理）

P11　H^+ ポンプ型ロドプシン AR3 の H^+ チャネルへの機能転換
○鈴木悠斗[1]，井上圭一[1,2]，林　重彦[3]，須藤雄気[4,5,6]，神取秀樹[1]
([1]名工大院工，[2]JST さきがけ，[3]京大院理，[4]岡山大医歯薬，[5]JSTCREST，[6]分子研）

P12　Na^+ 駆動型べん毛モーター固定子 MotPS の生育 pH の異なる 2 種類の Bacillus 属細菌における中性環境におけるイオン透過性の差異の解明
○高橋優嘉[1]，野口有希奈[2]，伊藤政博[1,2]（[1]東洋大バイオナノ，[2]東洋大院生命）

P13　Protons Observed by Neutron Protein Crystallography
○田中伊知朗[1]，日下勝弘[1]，山田太郎[1]，細谷孝明[1]，矢野直峰[1]，片桐政樹[1]，新村信雄[1]，大原高志[2]（[1]茨城大，[2]JAEA）

P14　アミノ酸排出輸送体のＸ線結晶構造解析
○土屋雄俊，道喜慎太郎，石谷隆一郎，濡木　理（東大院理）

P15　クライオ電子顕微鏡法による Na^+ 駆動型べん毛モーター固定子 MotPS 複合体の高分解能構造解析
○寺原直矢，加藤貴之，南野　徹，難波啓一（阪大院生命機能）

P16　中性子構造解析によるプロトン伝達経路の直接観測
○中村彰彦[1]，石田卓也[2]，五十嵐圭日子[2]，鮫島正浩[2]，日下勝弘[3]，山田太郎[3]，田中伊知朗[3]，新村信雄[3]
([1]岡崎統合バイオ，[2]東大院農生，[3]茨城大）

P17　高分解能ステップ計測で紐解く細菌べん毛モーターの動作機構
○中村修一[1,4]，森本雄祐[2,4]，上池伸徳[4]，曽和義幸[3]，南野　徹[4]，難波啓一[2,4]
([1]東北大院工，[2]理研 QBiC，[3]法政大生命科学，[4]阪大院生命機能）

P18　光合成水分解反応におけるチロシン Y_Z を経由するプロトン移動機構
○中村　伸，長尾　遼，野口　巧（名大院理）

P19　アスパラギン酸／アラニン交換輸送体（AspT）の構造変化解析
鈴木聡美，木村拓哉，宮本あかり，○七谷　圭，阿部敬悦（東北大院農）

P20　細菌べん毛モーター固定子 MotA/B のモデリングと分子シミュレーション
○西原泰孝，北尾彰朗（東大分生研）

P21　真正細菌ロドプシンのナトリウムポンプ，クロライドポンプからプロトンポンプへの機能転換
○野村祐梨香[1]，井上圭一[1,2]，神取秀樹[1]（[1]名工大，[2]JST さきがけ）

P22　小胞体 Ca^{2+} 恒常性に関わるイオンチャネルの結晶化
○平泉将浩[1]，石谷隆一郎[1]，服部素之[2]，濡木　理[1]（[1]東大院理，[2]復旦大学（中国））

P23　大腸菌由来 NO_3^-/NO_2^- 対向輸送体 NarK のＸ線結晶構造解析
○福田昌弘[1]，竹田弘法[1]，加藤英明[1,4]，道喜慎太郎[1]，伊藤耕一[2]，Andrés D. Maturana[3]，石谷隆一郎[1]，濡木　理[1]
([1]東大院理，[2]東大新領域，[3]名大院生命農，[4]Stanford Univ.）

P24　V_1-ATPase の化学力学共役スキーム解明に向けたハイブリッド *Enterococcus hirae* V_1-ATPase の回転観察
○皆川慶嘉[1]，上野博史[1]，野地博行[1]，村田武士[2]，飯野亮太[3]（[1]東大院工，[2]千葉大院理，[3]岡崎統合バイオ・分子研）

P25　腸内連鎖球菌 V-ATPase のクライオ位相差電子顕微鏡単粒子構造解析
○村田和義[1]，村田武士[2]，上野博史[3]，飯野亮太[4]（[1]生理研，[2]千葉大院理，[3]中央大理工，[4]岡崎統合バイオ・分子研）

P26　細胞内局所 pH と細胞機能の関係
○森本雄祐[1]，上田昌宏[1,2]（[1]理研生命システムセンター，[2]阪大院理）

P27　プロトン還元触媒作用を有する Ni(II) 錯体に関する理論的研究
○山田健太（理研）

P28　光駆動ナトリウムポンプ KR2 のポンプスイッチにおける Asn112 の重要性
○吉住　玲[1]，井上圭一[1,2]，加藤英明[3]，濡木　理[3]，神取秀樹[1]（[1]名工大院工，[2]JST さきがけ，[3]東大院理）

P29　溶液中会合イオンの解離カイネティクスの多様性：分子動力学シミュレーションによる自由エネルギー地形解析
○米谷佳晃（原研分子シミュレーション）

② 【アジア連携分子研研究会】
Supramolecular Dynamics at the Interface of Chemistry and Biology
2015 年 6 月 12 日（金）～ 13 日（土） 分子科学研究所山手地区 3 号館 2 階西大会議室

June 12 (Friday)

10:00-10:10	Opening remarks by Takafumi UENO
Session I	*Chairperson: Takahiro HOHSAKA*
10:10-10:40	Susumu UCHIYAMA (Osaka University) “Quantitative Analysis of Protein-Protein Interactions”
10:40-11:10	Ryota IINO (Institute for Molecular Science) “Dynamic Motions of Individual Molecular Motors”
11:10-11:40	Seok-Cheol HONG (Korea University) “Single-Molecule Methods Reveal the Conformational Dynamics and Energetics of DNA Molecules”
11:40-13:30	Photo and Lunch
Session II	
13:30-14:00	Takayuki UCHIHASHI (Kanazawa University) “High-Speed Atomic Force Microscopy: A New Tool for Studying Protein Dynamics at Work”
14:00-14:30	Takumi YAMAGUCHI (Institute for Molecular Science) “Paramagnetic Lanthanide-Tagging for NMR Characterization of The Conformational Dynamics of Oligosaccharides”
Session III	
14:50-15:20	Nobuyasu KOGA (Institute for Molecular Science) “Protein Design from Scratch for Understanding Principles for Folding”
15:20-15:50	Hironari KAMIKUBO (Nara Institute of Science and Technology) “Designing an Artificial Protein by Using a Kind of Building Blocks Responsible for Structure and Function”
Session IV	
16:10-16:40	Masumi TAKI (The University of Electro-Communications) “Artificial Molecule Evolution via the 10BASE$_d$-T”
16:40-17:10	Takahiro HOHSAKA (Japan Advanced Institute of Science and Technology) “Incorporation of Nonnatural Amino Acids by Expanding the Genetic Code and its Application to Fluorescence Analysis of Proteins”

June 13 (Saturday)

Session V	
9:30-10:00	Junqiu LIU (Jilin University) “Protein Assembly and Enzymetic Functionality”
10:00-10:30	Teruyuki KOMATSU (Chuo University) “Protein Nano- and Micro-Tubes as Smart Biomaterials”
Session VI	
10:50-11:20	Takafumi UENO (Tokyo Institute of Technology) “Protein-Based Supramolecular Coordination Materials”
11:20-11:50	Takaki KOIDE (Waseda University) “Collagen Triple Helix, A Unique Peptide Scaffold for Biotools and Biomaterials”
Session VII	
13:30-14:00	Hsin-Yun HSU (National Chiao-Tung University) “Engineering of Novel Peptides for Ubiquitome Discovery and Self-Assembled Drug Delivery System”
14:00-14:30	Tomohisa SAWADA (The University of Tokyo) “Metal-Directed Short Peptide Folding and Assembly”
Session VIII	
14:50-15:20	Sheng-Hsien CHIU (National Taiwan University) “Sodium Ions Template the Formation of Rotaxanes From BPX26C6 and Nonconjugated Amide and Urea Functionalities”
15:20-15:50	Kazunori SUGIYASU (National Institute for Materials Science) “Living Supramolecular Polymerization”

Session IX

16:10-16:40 Takahiro MURAOKA (Tokyo Institute of Technology)
"Bioinspired Multi-Block Amphiphiles"

16:40-17:10 Daisuke SUZUKI (Shinshu University)
"Control of Spatio-Temporal Structures for Polymer Microspheres toward Advanced Soft Materials"

17:10-17:20 Closing remarks by Ryota IINO

③ 【分子研研究会（一般)】
キラル磁性×光学物性研究会
2015 年 6 月 27 日（土）～ 28 日（日） 分子科学研究所研究棟 201 号室

6 月 26 日（金）

16:00-19:00 受付

6 月 27 日（土）

9:00- 受付

9:30-10:30 趣旨説明＋概要・全体像
井上　克也（広島大学理学研究科）

10:30-11:30 「近接場光学顕微鏡によるキラルなプラズモンの可視化」
岡本　裕巳（分子科学研究所）

13:00-14:00 「フェロイクの光学応答」
有馬　孝尚（東京大学新領域新創成科学研究科／理化学研究所）

14:00-15:00 「キラル磁性体のスピン位相と光の相互作用」
岸根　順一郎（放送大学自然の理解部門）

15:30-16:30 「円偏光を用いたドメイン構造の可視化と制御」
大隅　寛幸（理化学研究所 SPring-8）

16:30-17:30 「パルス中性子源を活用した無機キラル磁性体研究」
高阪　勇輔（広島大学理学研究科）

18:00-21:00 意見交換会

6 月 28 日（日）

9:00 受付

9:30-10:30 「ナノ構造体における光磁気応答」
信定　克幸（分子科学研究所）

10:30-11:30 「マルチフェロイック関連物質における対掌性」
木村　剛（大阪大学基礎工学研究科）

13:00-13:40 「Application of Templated Plasmonic Substrates in Chiroptical Spectroscopy」
JACK, Calum（School of Chemistry, University of Glasgow）

13:40-14:40 「光の軌道角運動量と固体中電子スピン」
余越　伸彦（大阪府立大学工学研究科）

14:40-15:40 「希土類金属間化合物のキラル磁性」
大原　繁男（名古屋工業大学工学研究科）

15:40-15:50 閉会，アナウンス

④ 【学協会連携分子研研究会】
軟X線イメージングの描く未来
2015 年 9 月 7 日（月）～ 8 日（火） 分子科学研究所研究棟 201 号室

■：軟X線イメージング技術開発
技術開発の現状と展望

▲：ユーザー利用研究
ユーザー視点での到達点と問題点，そして将来への期待

●：軟X線イメージングへの期待
軟X線イメージング技術を利用していない研究者から，技術開発に対する新たなシーズ

◆：異なるアプローチのイメージング
異種のアプローチによるイメージング技術，軟X線イメージングの技術的立ち位置を明確にする

9 月 7 日（月）

13:30 〜 13:40　『主旨説明』大東琢治（分子研）
13:40 〜 14:10　■『STXM ビームライン BL4U の現状と応用観察手法の開発』大東琢治（分子研）
14:10 〜 14:40　▲『走査型透過Ｘ線顕微鏡を用いたゴム材料の構造観察』金子房恵（住友ゴム工業）
14:40 〜 15:10　■『EUV リソグラフィーとマスク観察顕微鏡』原田哲男（兵庫県立大学）
15:10 〜 15:40　●『EUV 照明を用いたマスクブランクス欠陥の観察』宮井博基（レーザーテック）

16:00 〜 16:30　■『立命館大学 SR センター透過型軟Ｘ線顕微鏡ビームラインの現状と今後の展開』竹本邦子（関西医科大）
16:30 〜 17:00　●『軟Ｘ線顕微法によるコネクトミクスの可能性』水谷治央（Harvard Univ.）
17:00 〜 17:50　招待講演『軟Ｘ線顕微鏡の期待と展望』青木貞雄（総合科学研究機構）
18:00 〜 20:00　Poster Session，技術交流会

9 月 8 日（火）

9:00 〜 9:50　招待講演『軟Ｘ線顕微分光の現状と将来展望』荒木　暢（Diamond Light Source）
9:50 〜 10:20　■『広視野を 30nm 解像する EUV 顕微鏡の開発』豊田光紀（東北大）

10:40 〜 11:10　●『軟Ｘ線吸収分光による固－液相不均一系触媒反応のその場観察』湯沢勇人（分子研）
11:10 〜 11:40　■『コンパクト STXM の開発とサステナブル科学への展開』武市泰男（KEK）
11:40 〜 12:10　▲●『軟Ｘ線顕微鏡による太陽系始原天体物質中の有機物分析』上椙真之（JAXA）

13:00 〜 13:40　UVSOR 施設見学
13:40 〜 14:10　◆『光電子顕微鏡（PEEM）による軟Ｘ線顕微分光と磁気ダイナミクス解析』大河内拓雄（JASRI/SPring-8）
14:10 〜 14:40　◆『中性子イメージングの現状と今後の展望』篠原武尚（JAEA/J-PARC）
14:40 〜 15:10　▲『走査型透過軟Ｘ線顕微鏡を用いたリチウムイオン電池の正極活物質の劣化挙動観察』山重寿夫（トヨタ自動車）

15:30 〜 16:00　■◆『Recent Developments in the Fabrication of X-Ray Imaging Optics』Anthony Beaucamp（京都大学）
16:00 〜 16:30　◆『ベクトルビームを用いたレーザー顕微鏡における高空間分解能イメージング』小澤祐市（東北大）
16:30 〜 17:00　■『レーザー生成多価イオンプラズマ水の窓軟Ｘ線光源』東口武史（宇都宮大）
17:00　Closing Remark

⑤ 【分子研研究会（一般）】
理論計算分子科学ワークショップ：計算法とシミュレーションの新展開
2015 年 10 月 22 日（木） 分子科学研究所研究棟 201 号室

12:30 － 13:30　受付
13:30 － 13:40　初めに
13:40 － 14:10　岡本祐幸（名古屋大学）
「拡張アンサンブル法による量子化学シミュレーション」
14:10 － 14:40　Yasuyuki Ishikawa（プエルトリコ大）
「Relativistic Multireference Møller-Plesset Perturbation Theory Calculations」

15:10 － 15:40　八木　清（理化学研究所）
「最適化座標に基づく振動状態理論の開発と応用」
15:40 － 16:10　中嶋隆人（理化学研究所）
「NTChem と相対論的分子理論」
16:10 － 16:40　中辻　博（量子化学研究協会）
「化学と量子化学と研究の楽しさ」

17:00 － 19:00　意見交換会（懇親会）

⑥ 【分子研研究会（一般）】
局所と大域：データサイエンスと階層性の創発
2015 年 11 月 27 日（金） 分子科学研究所研究棟 201 号室

14:30 － 14:40　鹿野　豊（分子研）
はじめに
14:40 － 15:30　平　理一郎（基礎生物学研究所）
覚醒脳の高次元神経活動の記録と解析

15:40 – 16:10　日高　昇平（JAIST）
非線形数理解析の展開と高次神経活動の解析

16:20 – 16:50　新井　賢亮（ボストン大学）
非線形振動子系としての神経活動データの解析

17:00 – 17:30　長谷川　裕記（核融合科学研究所）
連結階層モデルを用いた大規模シミュレーション

17:40 – 17:50　平　理一郎（基礎生物学研究所）
おわりに

⑦ 【分子研研究会（一般）】
高輝度・高強度赤外光源の現状と展望
2016 年 2 月 11 日（木）～ 12 日（金） 岡崎コンファレンスセンター

2 月 11 日（木）

11:00-11:10　主旨説明　全炳俊（京都大学）

座長：木下豊彦（高輝度光科学研究センター）

11:10-11:40　中赤外自由電子レーザーの現状と世界的動向
全炳俊（京都大学）

11:40-12:10　高輝度・高強度赤外光源の現状と将来展望
木村真一（大阪大学）

12:10-12:40　次期放射光光源計画と赤外
浜　広幸（東北大学）

座長：並河一道（東京学芸大学）

13:50-14:20　赤外放射光を利用した強相関電子系分子性導体の研究
佐々木孝彦（東北大学）

14:20-14:50　赤外放射光を利用した高圧での光物性
岡村英一（徳島大学）

14:50-15:20　中赤外自由電子レーザー利用研究の現状
築山光一（東京理科大学）

座長：加藤政博（分子科学研究所）

15:40-16:10　大強度・高安定テラヘルツ自由電子レーザーの開発
磯山悟朗（大阪大学）

16:10-16:40　THz 自由電子レーザー利用研究
入澤明典（大阪大学）

16:40-17:10　コンパクト ERL を用いた大強度赤外光源の開発
本田洋介（高エネルギー加速器研究機構）

17:10-18:10　ポスター

18:30-　懇親会

2 月 12 日（金）

座長：冨澤宏光（JASRI）

09:00-09:30　超短赤外光パルスレーザー光源の最先端
藤　貴夫（分子科学研究所）

09:30-10:00　高輝度テラヘルツ波発生および高感度検出とその応用
南出泰亜（理化学研究所）

10:00-10:30　中赤外レーザーを用いた手のひらサイズの非侵襲血糖値センサーの開発
青山　誠（日本原子力研究開発機構）

座長：全炳俊（京都大学）

10:50-11:20　赤外放射光の現状と将来展望
池本夕佳（高輝度光科学研究センター）

11:20-12:20　総合討論　司会：全炳俊（京都大学）

ポスター発表リスト

P01：テラヘルツ波パワーの絶対値測定による電子ビーム診断
平　義隆（産業技術総合研究所）

P02：京大炉ライナックにおける高強度遠赤外光源開発と利用研究
高橋俊晴（京都大学）

P03：日本大学 LEBRA における高強度 CTR 光源開発の現状と展望
清紀　弘（産業技術総合研究所）

P04：小型電子線型加速器 LEENA によるテラヘルツ光源開発の現状
橋本　智（兵庫県立大学）

P05：赤外顕微鏡を用いた女性毛髪のイメージング研究
渡邉紘介（(株)ミルボン）

P06：高圧合成白金族窒化物の赤外分光
駒淵　舞，曽田一雄（名古屋大学）

P07：顕微赤外吸収分光を利用した半導体ナノワイヤ中のドーパント不純物の状態評価
深田直樹（物質・材料研究機構）

P08：赤外顕微鏡ビームラインの現状と応用
家路豊成（立命館大学）

P09：タンパク質の構造と機能に及ぼす赤外自由電子レーザーの照射効果
川崎平康（東京理科大学）

P10：アミノ酸の光学異性化の赤外顕微観察
亀井　俊（大阪大学）

P11：日大 LEBRA における FEL とその利用
野上杏子（日本大学）

P12：赤外自由電子レーザー照射による温度上昇の時間分解測定
千葉朋幸（東京理科大学）

P13：フェムト秒赤外レーザーを用いた生体分子ダイナミクスの観測
久保　稔（理化学研究所）

P14：層状鉄酸化物 $LuFe_2O_4$ における光誘起磁気相転移のテラヘルツポンププローブ分光
伊藤桂介（東北大学）

P15：高輝度・高強度赤外光源強度マップ
全炳俊（京都大学）

P16：産総研 S バンド小型リニアック施設における高強度テラヘルツ波を用いた利用研究
～水溶液計測と実環境計測～
黒田隆之助（産業技術総合研究所）

P17：ニュースバルにおける赤外ビームラインの検討
庄司善彦（兵庫県立大学）

P18：UVSOR-III における峡帯域コヒーレントエッジ放射の研究
保坂将人（名古屋大学）

P19：赤外 FEL 共振器によるゼプト秒硬Ｘ線パルス発生の可能性
羽島良一（日本原子力研究開発機構）

⑧ 【アジア連携分子研研究会】
日韓生体分子科学セミナー
2016 年 2 月 15 日（月）～ 17 日（水） 岡崎コンファレンスセンター

February 15 (Mon)

10:00-10:25	Steven P. Gross (UC Irvine, and KIAS) Single molecular motor heterogeneity and its implications for ensemble function
10:25-10:45	Akihiko Nakamura (IMS) Analysis of functional structure of cellulase by neutron crystallography
10:45-11:10	Ryota Iino (IMS) Direct observation of intermediate states during the stepping motion of kinesin-1
11:10-11:35	Sota Sato (Tohoku Univ. & JST) Biological functions implanted in artificial supramolecules 2
11:35-11:55	Takayoshi Watanabe (Japan Adv. Inst. of Sci. & Tech.) Novel method for site-specific protein pegylation using aromatic amine-containing non-natural amino acid
13:30-13:55	Keehyoung Joo (KIAS) Contact Assisted Protein Structure Modeling by Global Optimization in CASP11
13:55-14:20	Nam Ki Lee (POSTECH) New single-molecule FRET method for observing fast dynamics and its application for dsDNA bending dynamics
14:20-14:45	Masahide Terazima (Kyoto Univ.) Time-resolved study on conformation change and inter-domain change during protein reactions
14:45-15:10	Kunihiro Kuwajima (Tokyo Univ.) The H/D-exchange kinetics of a fully unfolded protein studied by the DMSO-quenched and 2D NMR techniques
15:40-16:00	Balachandran Manavalan (KIAS) StrRate: Structure-based protein folding type classification and folding rate prediction

16:00-16:20 Seung Hwan Hong (KIAS)
Template based modeling by dynamic fragment assembly: revisited

16:20-16:45 Ji-Joon Song (KAIST)
Understanding molecular Architecture of Huntington's disease protein

17:30- Banquet

Februry 16 (Tue)

10:00-10:25 Fumio Hirata (Ritsumeikan Univ.)
Multi-scale dynamics simulation of protein based on the generalized Langevin equation combined with 3D-RISM theory

10:25-10:45 InSuk Joung (KIAS)
Efficient sampling of transition pathways using nudged elastic band and conformational space annealing

10:45-11:10 Hisashi Okumura (IMS)
Pressure induced structural change of proteins by molecular dynamics simulations

11:10-11:35 Seokmin Shin (Seoul National Univ.)
The two faces of self-assembly of peptides

11:35-12:00 Jooyoung Lee (KIAS)
Atomistic mechanism of conformational transition of adenylate kinase investigated by Lorentzian structure-based potential

13:30-13:55 Chaok Seok (Seoul National Univ.)
Galaxy7TM: Modeling and docking of G-protein coupled receptors

13:55-14:15 Takumi Yamaguchi (Japan Adv. Inst. of Sci. & Tech.)
Design and creation of Lewis X-expressing glycoclusters toward functional analyses of oligosaccharides in membrane systems

14:15-14:40 Kazushi Kinbara (Tokyo Inst. of Tech.)
Development of Stimuli-Responsive Multiblock Amphiphilic Molecules Mimicking Multipass Transmembrane Proteins

14:40-15:05 Weontae Lee (Yonsei Univ.)
NMR and X-ray crystallographic studies on syndecan, proteogylcan: Structure, function and diseases

15:35-16:00 Shinobu Itoh (Osaka Univ.)
Activation mechanism of fungal tyrosinase

16:00-16:25 Masafumi Odaka (Akita Univ.)
Time-resolved crystallography of the reaction intermediate of nitrile hydratase: Revealing a role for the cysteinesulfenic acid ligand as a catalytic nucleophile

16:25-16:50 Shuji Akiyama (IMS)
Atomic-scale origins of slowness in the cyanobacterial circadian clock

16:50-17:15 Dong Hae Shin (Ewha Womans Univ.)
Structural properties of GmhA and GmhB from *Burkholderia thailandensis*

18:00- Free Discussion

February 17 (Wed)

10:00-10:25 Takeshi Uchida (Hokkaido Univ.)
Heme uptake proteins from *Vibrio cholerae*

10:25-10:50 Hiroshi Sugimoto (RIKEN/SPring-8)
Structural mechanism of the heme transporter complex from pathogenic bacteria

10:50-11:10 Norifumi Muraki (IMS)
Crystal structures of HtaA and HmuT, heme uptake proteins from *Corynebacterium glutamicum*

11:10-11:35 Jeong-Yong Suh (Seoul National Univ.)
Structural basis for the preferential interaction of auxin-response transcriptional repressor with different transcription factors

11:35-11:55 Saeko Yanaka (IMS)
Affinity improvement of antibody through mutational modification of the conformational dynamics

13:30-13:55 Susumu Uchiyama (Osaka Univ.)
Mass spectrometry of protein-ligand interactions

13:55-14:20 Takafumi Ueno (Tokyo Inst. of Tech.)
Protein Crystals for Designing Biohybrid Solid Materials

14:20-14:45 Tadashi Satoh (Nagoya City Univ.)
Structural insights into the working mechanisms of multi-domain enzymes involved in ER protein quality control

14:45-15:05 Jaeyoung Byeon (Soongsil Univ.)
Protein contact prediction based on information theory

15:35-16:00 Julian Lee (Soongsil Univ.)
Prediction of protein rigid domains and hinge residues based on graph theory and elastic network model

16:00-16:25 Takahiro Kosugi (IMS)
De novo design of protein function

16:25-16:50 Changbong Hyeon (KIAS)
Mapping allosteric signaling of G protein-coupled receptors

⑨ 【アジア連携分子研研究会】
日中機能性超分子アーキテクチャーシンポジウム
2016 年 2 月 24 日（水）～ 26 日（金） 岡崎コンファレンスセンター

February 23 (Tuesday)

14:00 ~ 17:30 Registration at the Hall of Okazaki Conference Center

18:00 ~ 20:00 Welcome Reception at Okazaki Conference Center

February 24 (Wednesday)

8:55 Opening Remark by Donglin Jiang

Chairperson: Hiromitsu Maeda (9:00 ~ 10:30)

9:00 ~ 9:30 Xinchen Wang (Fuzhou University)
Photocatalytic Water Splitting by Graphitic Carbon Nitride Polymers

9:30 ~ 10:00 Masato Ikeda (Gifu University)
Biomolecule Responsive Supramolecular Hydrogel-Enzyme Hybrids

10:00 ~ 10:30 Zhishan Bo (Beijing Normal University)
Highly Efficient Planar Perovskite Solar Cells via Modification of *c*-TiO_2 Surface with Self-Assembled Fullerene Derivative Monolayer

Chairperson: Zhishan Bo (10:50 ~ 12:20)

10:50 ~ 11:20 Tomoki Ogoshi (Kanazawa University)
Pillar[n]arene-Based Supramolecular Assemblies in Bulk State

11:20 ~ 11:50 Bien Tan (Huazhong University of Science and Technology)
Soluble Hypercrosslinked Polymers from Single Polymer Folding

11:50 ~ 12:20 Shigehisa Akine (Kanazawa University)
Helix Inversion of Helical Multinuclear Complexes Controlled by Molecular Recognition

12:20~ 13:30 Photo and Lunch

Chairperson: Tomoki Ogoshi (13:30 ~ 15:30)

13:30 ~ 14:00 Shuichi Hiraoka (The University of Tokyo)
Self-Assembly Process of Coordination Capsules and Cages

14:00 ~ 14:30 Mingjie Liu (Beihang University)
Bioinspired Functional Hydrogels Embedded with Semiconducting Nanosheets

14:30 ~ 15:00 Shiki Yagai (Chiba University)
Metastable Molecular Assemblies: an Entrance to Dynamic Materials

15:00 ~ 15:30 Yuanzhi Tan (Xiamen University)
Molecular Carbon Nano-materials

Chairperson: Bien Tan (15:30 ~ 18:20)

15:50 ~ 16:20 Itaru Osaka (Riken)
Control of Electronic and Ordering Structures in π-Conjugated Polymers for High-Performance Organic Electronic Devices

16:20 ~ 16:50 Weiwei Li (Institute of Chemistry, CAS)
Semi-Crystalline Diketopyrrolopyrrole Polymers for Field-Effect Transistors and Polymer Solar Cells

16:50 ~ 17:20 Gaku Fukuhara (Osaka University)
Supramolecular Allosteric Amplification-Sensing with Polymer Hosts

17:20 ~ 17:50 Wenke Zhang (Jilin University)
The Study of Polymer Interactions in Supramolecular Assemblies Using Single-Molecule Force Spectroscopy

18:30 ~ 20:30 Dinner and Poster Session

February 25 (Thursday)

Chairperson: Shuichi Hiraoka (9:00 ~ 10:30)

9:00 ~ 9:30 Donglin Jiang (JAIST)
Structural Diversity of Covalent Organic Frameworks

9:30 ~ 10:00 Tsuneaki Sakurai (Kyoto University)
Noncontact Evaluation of Carrier Transport Property for Designed π-Electronic Molecular Assembly

10:00 ~ 10:30 Zhen Li (Wuhan University)
The Modification of the Functionality of π-Molecules through the Structural Adjustment

Chairperson: *Zhen Li (10:50 ~ 12:20)*

10:50 ~ 11:20 Atsushi Wakamiya (Kyoto University)
Molecular Design for p-Type Buffer Materials toward Highly Efficient Perovskite Solar Cells

11:20 ~ 11:50 Jia Guo (Fudan University)
Polymer Frameworks Constructing Functional Composite Microspheres

11:50 ~ 12:20 Tsuyohiko Fujigaya (Kyushu University)
Bottom-up Functionalization of Carbon Nanotube for Highly Durable Electrocatalyst

12:20~ 13:30 Lunch and Poster Session

Chairperson: *Atsushi Wakamiya (13:30 ~ 15:30)*

13:30 ~ 14:00 Hiromitsu Maeda (Ritsumeikan University)
π-Electronic Ion-Pairing Supramolecular Assemblies

14:00 ~ 14:30 Wenhua Li (Beijing Normal University)
Colloidal Synthesis of Functional Nanomaterials and Their Optoelectronic Application

14:30 ~ 15:00 Yanhong Xu (Jilin Normal University)
Designed Synthesis and Multifunctional Application Studies of Conjugated Microporous Polymers

15:00 ~ 15:30 Yulan Chen (Tianjin University)
Bischler-Napieralski Cyclization towards 1,10-phenanthroline-analogous *S,N*-heteroacenes

Chairperson: *Stefan Kaskel (15:30 ~ 17:50)*

15:50 ~ 16:20 Yasuhiro Ishida (Riken)
Single-crystal-like Soft Materials: Magnetic Orientation of Three-dimensional Polymer Networks

16:20 ~ 16:50 Shijie Ren (Sichuan University)
Functional Conjugated Microporous Polymers: Preparation and Application

16:50 ~ 17:20 Yoshinori Takashima (Osaka University)
Stimuli Responsive Supramolecular Materials Formed from Host and Guest Polymers

17:20 ~ 17:50 Long Chen (Tianjin University)
Synthesis and Self-Organization of Large Polyaromatic Hydrocarbons

18:30 ~20:30 Banquet

February 26 (Friday)

Chairperson: *Yasuhiro Ishida (9:00 ~ 10:30)*

9:00 ~ 9:30 Stefan Kaskel (Technische Universität Dresden)
Supramolecular Assembly of Highly Porous Materials

9:30 ~ 10:00 Feng Shi (Beijing University of Chemical Technology)
Precise Macroscopic Supramolecular Assembly and Applications

10:00 ~ 10:30 Yuh Hijikata (Nagoya University)
Theoretical Approaches for Dynamic Self-Assembly Materials

Chairperson: *Long Chen (10:50 ~ 11:20)*

10:50 ~ 11:20 Huanli Dong (Institute of Chemistry, CAS)
High Mobility Emissive Organic Semiconductor: Design, Synthesis and Device Applications

Closing Remark Zhishan Bo

Poster Section (Presentation on 24 February 18:00 ~ 20:00)

Poster 1 Cuihong Li (Beijing Normal University)
Non-Fullerene Electron Acceptors for Wide Band Gap Polymer Organic Solar Cells

Poster 2 Ayako Baba, Tatsuo Kojima, and Shuichi Hiraoka (The University of Tokyo)
Self-Assembly Mechanism of Pt(II)-Linked Coordination Macrocycles

Poster 3 Hiromitsu Maeda and Atsuko Kuno (Ritsumeikan University)
Synthesis of Amide-Contained Anion-Responsive π-Electronic Molecules

Poster 4 Cheng Gu[1] and Donglin Jiang[1,2] ([1]IMS; [2]JAIST)
Highly Photofunctional Porous Organic Polymer Films

Poster 5 Shumpei Kai, Tatsuo Kojima, and Shuichi Hiraoka (The University of Tokyo)
The Self-Assembly Mechanism of Pd_2L_4 Coordination Cages

Poster 6 Enquan Jin[1,2] and Donglin Jiang[1,3*] ([1]IMS; [2]Sokendai; [3]JAIST)
sp^2-Carbon-Based Covalent Organic Framework

Poster 7 Masanori Nakagawa, Tatsuo Kojima, and Shuichi Hiraoka (The University of Tokyo)
Self-Assembly Process of Pd_2L_4 Cage Complex Constructed from U-Shaped Rigid Ditopic Ligand

Poster 8 Sasanka Dalapati[1] and Donglin Jiang[1,2*] ([1]IMS; [2]JAIST)
An Alternative to the Aggregation Induced Emission

Poster 9 Naomi Orito, Tsuneaki Sakurai, and Shu Seki (Kyoto University)
Development of Electroactive Foldamers Composed of Planar π-Conjugated Systems and Flexible Chains

Poster 10 Ning Huang[1] and Donglin Jiang[1,2*] ([1]IMS; [2]JAIST)
Tailor-Made Pore Surface Engineering in Covalent Organic Frameworks for Performance Screening

Poster 11 Ryohei Yamakado and Hiromitsu Maeda (Ritsumeikan University)
Ion-Pairing Assemblies Based on Various Receptor–Anion Complexes

Poster 12 Qing Xu[1,2] and Donglin Jiang[1,3*] ([1]IMS; [2]Sokendai; [3]JAIST)
Carbonized Covalent Organic Frameworks for Oxygen Reduction Reaction

Poster 13 Hiromitsu Maeda and Shunsuke Kaname (Ritsumeikan University)
Synthesis of Cyclic Anion-Responsive π-Electronic Molecules and Their Assemblies

Poster 14 Ping Wang[1,2] and Donglin Jiang[1,3*] ([1]IMS; [2]Sokendai; [3]JAIST)
Design and Synthesis of Triangular Covalent Organic Framework

Poster 15 Wakana Naito and Hiromitsu Maeda (Ritsumeikan University)
Chirality Induction of π-Electronic Systems by Inner Modifications

Poster 16 Shanshan Tao[1,2] and Donglin Jiang[1,3*] ([1]IMS; [2]Sokendai; [3]JAIST)
Proton Conduction in Crystalline, Mesoporous, Covalent Organic Frameworks

Poster 17 Yohei Haketa, Yuya Bando, and Hiromitsu Maeda (Ritsumeikan University)
Ion-Pairing Assemblies Based on π-Electronic Anions

Poster 18 Lipeng Zhai[1,2] and Donglin Jiang[1,3*] ([1]IMS; [2]Sokendai; [3]JAIST)
Covalent Organic Frameworks for Carbon Dioxide Capture

Poster 19 Yuya Matsuta, Daisuke Sakamaki, and Shu Seki (Kyoto University)
Synthesis and Electronic Properties of Triphenylamine Derivatives with Small Internal Reorganization Energy Stemming from Nonbonding Character in Frontier Orbitals

⑩ 【分子研研究会（一般）】
金属錯体の非対称配位圏設計と異方集積化が拓く新物質創成科学
2016 年 3 月 5 日（土）～ 6 日（日） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

3 月 5 日（土）

13:00–13:10 趣旨説明
塩谷　光彦（東京大学大学院理学系研究科）

13:10–13:40 大坪　主弥（京都大学大学院理学研究科）
「多孔性金属－有機ナノチューブにおけるプロトン輸送空間」

13:40–14:20 二瓶　雅之（筑波大学数理物質系化学域）
「外部刺激応答性環状四核錯体の水素結合による集積化」

14:20–15:10 村橋　哲郎（東京工業大学大学院理工学研究科）
「拡張π - 共役系不飽和炭化水素を用いた金属集積」

15:30–16:00 雨夜　徹（大阪大学大学院工学研究科）
「πボウルスマネンの金属錯体」

16:00–16:40 三宅　弘之（大阪市立大学大学院理学研究科）
「アミノ酸誘導体配位子からなる錯体ヘリシティーの創生と動的構造変換プログラミング」

16:40–17:30 八島　栄次（名古屋大学大学院工学研究科）
「ラセン構造に由来するキラル物質の創成と機能開発」

18:00–20:00 懇親会

3 月 6 日（日）

9:00– 9:40 荘司　長三（名古屋大学大学院理学研究科）
「外部添加因子による生体触媒の反応空間制御」

9:40–10:30 江原　正博（分子科学研究所）
「非対称配位場をもつ金属錯体の光学物性と触媒活性：理論計算化学からのアプローチ」

10:40–11:20 楊井　伸浩（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）
「フォトン・アップコンバージョンを示す錯体システムの構築」

11:20–12:10 唯　美津木（名古屋大学物質科学国際研究センター）
「金属錯体・クラスターの固定化による表面配位圏の設計」

12:10–12:20 閉会挨拶

⑪ 【分子研研究会（一般）】
触媒の分子科学：理論と実験のインタープレイ最前線
2016 年 3 月 9 日（水）～ 10 日（木） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

3 月 9 日（水）

13:00–13:05 開会・司会　長谷川淳也（北海道大学）

13:05–13:35 中嶋　敦（慶応義塾大学，JST-ERATO，KiPAS）
“ 金属ナノクラスターの触媒活性のサイズ効果：気相と液相の革新的実験アプローチ ”

13:35–14:05 石川敦之（早稲田大学）
“ 金属ナノ粒子による CO 酸化反応に関する理論的研究：CO 被覆率及び担体効果の検討 ”

14:05–14:35 福岡　淳（北海道大学）
“ 低温エチレン酸化と冷蔵庫触媒の実用化 ”

14:35–15:05 奥村光隆（大阪大学）
“ 触媒機能発現に関するヘテロ接合効果の理論的研究 ”

司会　武次徹也（北海道大学）

15:35–16:05 町田正人（熊本大学）
“ 遷移元素を取り込んだ CeO_2 表面構造による貴金属代替触媒機能 ”

16:05–16:35 邨次　智（名古屋大学）
“ 酸化物表面と金属錯体を駆使した触媒創出：構造と機能 ”

16:35–17:05 古山通久（九州大学）
“ 不均質系触媒および電極触媒における実測－計算協働：構造の観点からの一考察

17:05–17:35 田中庸裕（京都大学）
“ 自動車排ガス触媒のメカニズム――自動車用触媒の貴金属低減に向けて ”

18:00– 懇親会

3 月 10 日（木）

司会　奥村光隆（大阪大学）

09:30–10:00 武次徹也（北海道大学）
“ 触媒反応への理論化学からのアプローチ：実験との協働と概念の提案 ”

10:00–10:30 佃　達哉（東京大学）
“ 貨幣金属クラスター触媒の開発 ”

10:45–11:15 榊　茂好（京都大学）
“ 複合金属微粒子の構造と電子状態 ”

11:15–11:45 小林久芳（京都工芸繊維大学）
“ 最近の酸化チタン表面の光触媒作用の研究 ”

11:45–12:15 薩摩　篤（名古屋大学）
“ ガルバニック析出法によるバイメタル触媒：Ag-Ni と Pd-Co の例を中心に ”

司会　江原正博（分子研）

13:30–14:00 山口和也（東京大学）
“ マンガン酸化物をベースとした酸化触媒および新反応の開発 ”

14:00–14:30 福田良一（分子科学研究所）
“ 触媒系の電子状態と反応機構の解明にむけた理論計算による取り組み ”

14:45–15:15 吉澤一成（九州大学）
“ アンモニア合成反応における理論と実験のインタープレイ ”

15:15–15:45 北川　宏（京都大学）
“ ナノ物質における状態密度エンジニアリング ”

15:45–15:50 閉会　江原正博（分子科学研究所）

(4) 若手研究会等

課　題　名	提案代表者	
第 55 回分子科学若手の会夏の学校講義内容検討会	京都大学大学院理学研究科	田 中　駿 介

(5) 岡崎コンファレンス

課　題　名	提案代表者	
テンソル積状態のアルゴリズムと応用	分子科学研究所	鹿 野　　豊

(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 整備	分子科学研究所	手島　史綱
XAFS による Mg 基板上へ作製した Si 添加ハイドロキシアパタイト多孔体のライン分析の検討	東北大学金属材料研究所	佐藤　充孝
MTB 触媒用 Mo/H-MFI の炭化経時変化の L 殻 XANES による検討	埼玉工業大学工学部	有谷　博文
第三周期元素の K 吸収端プリエッジスペクトルの温度依存性解析	早稲田大学理工学術院	山本　知之
軟X線吸収分光法を用いた絶縁材料のその場観察	九州シンクロトロン光研究センター	小林　英一
単結晶性金属ドープ単分子膜の電子構造の研究	産業技術総合研究所計測フロンティア部門	細貝　拓也
価電子帯および内殻光電子分光法による有機ヘテロ界面に発生する「バンドの曲がり」の精密評価	東京理科大学理工学部	中山　泰生
Determination of the Interface Electronic Structure of L-Cysteine with Noble Metal Nanoparticles	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika
真空紫外励起でのワイドギャップホウ酸塩の固有発光と多重自励起子生成およびエネルギー移動	秋田大学大学院工学資源学研究科	小玉　展宏
高発光量パイロシリケート型シンチレータの探索とそのメカニズムの解明	東北大学金属材料研究所	黒澤　俊介
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
深紫外発光アルミン酸亜鉛蛍光体の基礎物性評価	静岡大学大学院工学研究科	小南　裕子
窒化炭素発光デバイス材料の発光測定	福井大学大学院工学研究科	福井　一俊
VUV Spectroscopy for the Inorganic Materials Doped with Lanthanide Ions	分子科学研究所	田中　清尚
異方的近藤半導体の偏光真空紫外反射スペクトル	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
NaCl 単結晶中の不純物イオン間の励起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
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	富山大学	彦坂　泰正
マルチフェロイック酸化物中の磁性元素の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本　知之
BL4B 整備	分子科学研究所	岩山　洋士
EUV 高次高調波用の高反射率多層膜ミラーの開発	東北大学多元物質科学研究所	豊田　光紀
固体惑星の EUV 分光に関する基礎実験	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉川　一朗
２元系アモルファス半導体における光誘起真空紫外吸収変化の組成依存性	岐阜大学工学部	林　浩司
紫外光誘起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解明	山形大学理学部	北浦　守
不純物中心の観測を利用した太陽電池グレードシリコンの結晶評価	東北学院大学工学部	原　明人
BL6B の整備	分子科学研究所	手島　史綱
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
赤外顕微円二色性イメージングの開発と生体試料への応用	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
新奇原子層物質の低エネルギー高分解能 ARPES	東北大学原子分子材料科学高等研究機構	高橋　隆
清浄ペンタセン単結晶の価電子バンド構造の深さ分解解析	東京理科大学理工学部	中山　泰生
パイロクロア型イリジウム酸化物で開拓する強相関系トポロジカル量子相	東京大学物性研究所	近藤　猛
トポロジカル絶縁体／磁性絶縁体超格子の電子構造	東京工業大学大学院理工学研究科	平原　徹
有機半導体における電子格子相互作用の検出	分子科学研究所	解良　聡
電荷・スピンストライプ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
Local Orbital Angular Momentum Studies on Bulk Spin-Split Bands in GaAs, InSb and CdTe Using Low Photon-Energy Circular-Dichroism in ARPES	分子科学研究所	田中　清尚
Circular Dichroism ARPES Studies on Magnetic Impurity Topological Insulator	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	豊田工業大学	松波　雅治
擬一次元有機導体 $(TMTTF)_2X$ の低励起エネルギー角度分解光電子分光：モット局在－電荷秩序相転移に伴う電子状態変化の直接観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤　孝寛
鉄系超伝導体 NdFe(As,P)(O,F) 単結晶の角度分解光電子分光によるフェルミ面と超伝導ギャップの観測	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のバンド構造と表面電子構造	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
中性子輝尽性蛍光体における蛍光寿命特性	山形大学理学部	大西　彰正
高速シンチレータ材料におけるエネルギー移動と内殻励起の寄与の定量的解析	東北大学大学院工学研究科	越水　正典
太陽ライマンα線偏光観測ロケット実験 CLASP のウィットネスサンプル評価	国立天文台	成影　典之
VUV エリプソメトリーの整備	福井大学大学院工学研究科	福井　一俊
真空紫外反射によるニオブリン酸ガラス中のニオブイオンの電子状態の研究	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
角度分解紫外光電子分光法を用いた自己組織化単分子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

金属ナノ構造の量子化電子状態と吸着有機分子軌道との界面電子構造に関する研究	東京理科大学理工学部	中山　泰生
Development and Maintenance of the BL-8B	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika
有機／金属界面への低エネルギー光照射による光電子放出現象の解明	近畿大学理工学部	田中　仙君
クラスター内包フラーレンの紫外光電子スペクトル	岡山大学安全衛生推進機構	宮崎　隆文
Dimerization and Band Formation in Organic Thin Films	分子科学研究所	解良　聡
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
光電子イメージング装置と可視域発光測定用ガスセルの性能評価	九州シンクロトロン光研究センター	金安　達夫
原子核乾板の最小電離粒子に対する感度評価	名古屋大学エコトピア科学研究所	中村　光廣
光学反射率による半導体 In_2Se_3 のバンドギャップの観測	分子科学研究所	出田真一郎
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
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
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

（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 整備	分子科学研究所	手島　史綱
MTB 触媒用 Mo/H-MFI の炭化経時変化の L 殻 XANES による検討	埼玉工業大学工学部	有谷　博文
第三周期元素の K 吸収端プリエッジスペクトルの温度依存性解析	早稲田大学理工学術院	山本　知之
単結晶性金属ドープ単分子膜の電子構造の研究	産業技術総合研究所計測フロンティア部門	細貝　拓也
価電子帯および内殻光電子分光法による有機ヘテロ界面に発生する「バンドの曲がり」の精密評価	東京理科大学理工学部	中山　泰生
Determination of the Interface Electronic Structure of L-Cysteine with Noble Metal Nanoparticles	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika
真空紫外励起でのワイドギャップホウ酸塩の固有発光と多重自励起子生成およびエネルギー移動	秋田大学大学院工学資源学研究科	小玉　展宏
高発光量パイロシリケート型シンチレータの探索とそのメカニズムの解明	東北大学金属材料研究所	黒澤　俊介
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
深紫外発光アルミン酸亜鉛蛍光体の基礎物性評価	静岡大学大学院工学研究科	小南　裕子
窒化炭素発光デバイス材料の発光測定	福井大学大学院工学研究科	福井　一俊
VUV Spectroscopy for the Inorganic Materials Doped with Lanthanide Ions	分子科学研究所	田中　清尚
NaCl 単結晶中の不純物イオン間の励起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
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	富山大学	彦坂　泰正
マルチフェロイック酸化物中の磁性元素の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本　知之
BL4B 整備	分子科学研究所	岩山　洋士
固体惑星の EUV 分光に関する基礎実験	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉川　一朗
２元系アモルファス半導体における光誘起真空紫外吸収変化の組成依存性	岐阜大学工学部	林　浩司
紫外光誘起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解明	山形大学理学部	北浦　守
不純物中心の観測を利用した太陽電池グレードシリコンの結晶評価	東北学院大学工学部	原　明人
BL6B の整備	分子科学研究所	手島　史綱
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
赤外顕微円二色性イメージングの開発と生体試料への応用	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
トポロジカル絶縁体／磁性絶縁体超格子の電子構造	東京工業大学大学院理工学研究科	平原　徹
中性子輝尽性蛍光体における蛍光寿命特性	山形大学理学部	大西　彰正
高速シンチレータ材料におけるエネルギー移動と内殻励起の寄与の定量的解析	東北大学大学院工学研究科	越水　正典
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
角度分解紫外光電子分光法を用いた自己組織化単分子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
金属ナノ構造の量子化電子状態と吸着有機分子軌道との界面電子構造に関する研究	東京理科大学理工学部	中山　泰生
有機／金属界面への低エネルギー光照射による光電子放出現象の解明	近畿大学理工学部	田中　仙君
クラスター内包フラーレンの紫外光電子スペクトル	岡山大学安全衛生推進機構	宮崎　隆文
窒化処理により析出する合金窒化物の局所構造解析	東北大学金属材料研究所	佐藤　充孝
水熱合成した AlPO-5 試料の構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平　敦
軟Ｘ線吸収分光法を用いた電圧印加中の金属／酸化物界面反応の研究	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

希土類イオン添加酸化物の真空紫外励起による遷移スペクトル測定と元素添加および合成条件に伴う変化の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野　正人
化合物半導体放射線検出器材料の研究	大阪電気通信大学工学部	大野　宣人
ワイル半金属関連物質の低エネルギー高分解能 ARPES	東北大学原子分子材料科学高等研究機構	高橋　　隆
電子ドープ型銅酸化物高温超伝導体の超伝導ギャップ	東京大学大学院理学系研究科	藤森　　淳
イリジウム酸化物の角度分解光電子分光測定で実証する強相関系トポロジカル量子相	東京大学物性研究所	近藤　　猛
有機半導体における電子格子相互作用の検出	分子科学研究所	解良　　聡
BL7U 光電子エンドステーションの整備	分子科学研究所	田中　清尚
高分解能角度分解光電子分光による三層系銅酸化物高温超伝導体の電子構造解明	分子科学研究所	出田真一郎
Fe 周囲の局所構造及び Fe 面間距離を制御した $AFe_2(As,P)_2$ ($A = Ba_{1-y}Sr_y$, $Sr_{1-y}Ca_y$, Eu) のフェルミ面，超伝導ギャップの研究	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のギャップ内準位のスピン偏極性	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
エピタキシャルグラフェンにおけるフォノンおよび局所的周期構造による光電子散乱現象	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
高品質 CrO_2(001) 膜の電子構造研究	岡山大学大学院自然科学研究科	横谷　尚睦
ARPES Studies of Hole Doped Transition Metal Dichalcongenide ($W_{1-x}Ta_xSe_2$ and $Mo_{1-x}Ta_xSe_2$)	Inchon National University	PARK, Seung Ryong
イリジウム酸化物の真空紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	藤岡　　淳
CLASP 光学素子の汚染・経年変化モニターと CLASP2 に用いるマグネシウム輝線用光学素子の開発・評価	国立天文台	成影　典之
真空紫外領域における $Ca_xSr_{1-x}F_2$ 単結晶の真空紫外光学特性評価	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野　晋吾
逆光電子分光用分光システムの構築	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
オプトセラミックスの真空紫外領域における光学特性	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	清水　俊彦
原子核乾板の荷電粒子に対する検出能力の評価	名古屋大学エコトピア科学研究所	中村　光廣
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
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
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

(7)　施設利用

① 機器センター

光センサーとアンテナ分子の相互作用解析	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	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	名古屋工業大学大学院物質工学	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	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
キレートカルベン金属錯体の合成と構造解析	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	静岡大学工学部	植田　一正

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装置の開発	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
サブテラヘルツ分光測定用温度可変セル	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永　圭介
ヘリウム準安定励起原子を用いた衝突実験装置の製作	電気通信大学大学院情報理工学研究科	山北　佳宏
光イオン・光電子断層画像観測装置の開発	東京工業大学大学院理工学研究科	水瀬　賢太

（後期）

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装置の開発	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

③ 計算機利用

格子欠陥系X線光電子分光の第一原理的研究	慶應義塾大学理工学部	山内　　淳
生体分子の機能発現反応に関する理論的研究	千葉大学大学院薬学研究院	星野　忠次
触媒分子系および生体分子系の量子化学と反応動力学	北海道大学触媒化学研究センター	長谷川淳也
拡張アンサンブル法による蛋白質分子の折り畳みシミュレーション	名古屋大学大学院理学研究科	岡本　祐幸

複合電子系の構造，電子状態，反応過程，溶媒和構造に関する理論的研究	京都大学福井謙一記念研究センター	榊　茂好
Rigged QED 理論に基づく局所量に関する研究	京都大学大学院工学研究科	立花　明知
金属蛋白質の電子構造制御に関する理論的研究	広島市立大学大学院情報科学研究科	鷹野　優
生体分子の構造と機能に関する理論的研究	広島大学大学院理学研究科	相田美砂子
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
複雑分子系の化学反応のシミュレーション	京都大学福井謙一記念研究センター	諸熊　奎治
ナノ・バイオ物質の電子状態・構造・機能の相関	東京大学大学院工学系研究科	押山　淳
革新的量子科学と大規模シミュレーション科学の創造	量子化学研究協会研究所	中辻　博
色素増感太陽電池に関する理論的研究	産業技術総合研究所エネルギー技術研究部門	北尾　修
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
遷移金属触媒を用いた分子精密変換反応の機構解析	東京大学大学院工学系研究科	野崎　京子
量子化学計算を利用した化学反応の多面的解析	大阪大学大学院薬学研究科	川下理日人
理論電子および振動スペクトルによる 1- ナフトール -(アンモニア)n クラスターおよびフェノール -(アンモニア)n クラスターの基底状態プロトン移動のサイズ依存性に関する研究	東京工業大学資源化学研究所	宮崎　充彦
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と反応経路自動探索の多角的展開	北海道大学大学院理学研究院	武次　徹也
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
超原子価窒素および硫黄・セレン化合物の構造と物性	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
アンサンブル分子ドッキングによるリガンド分子配座探索	金沢大学理工研究域	齋藤　大明
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
超臨界水の並進ダイナミクス解析	徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部	吉田　健
光合成酸素発生中心 $CaMn_4O_5$ クラスターの構造，電子・スピン状態および反応性に関する理論的研究	大阪大学ナノサイエンス教育研究センター	山口　兆
有機半導体成長過程の理論的研究	岩手大学工学部	西館　数芽
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
種々の溶媒環境下でのグアニン四重鎖構造の自由エネルギー地形	甲南大学先端生命工学研究所	杉本　直己
ミオシン VI およびミオシン V のプロセッシブ運動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
タンパク質機能と分子自己組織化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
蛋白質による DNA 加水分解における溶媒の役割	九州工業大学情報工学部	入佐　正幸
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
量子分子科学計算ソフトウェア NTChem の開発とナノサイズ分子の分子機能の解明・設計への応用	理化学研究所計算科学研究機構	中嶋　隆人
生体分子のマルチコピーマルチスケールシミュレーション	横浜市立大学大学院生命医科学研究科	森次　圭
非共有結合相互作用ならびに抗体－リガンド間相互作用の量子化学計算	北里大学一般教育部	江川　徹
Ni@Ag バイメタル触媒の CO 酸化反応に関するミクロキネティクス	名古屋大学大学院工学研究科	沢邊　恭一
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	髙橋　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
ナノカーボンの転位・解離反応の動力学理論	東北大学大学院理学研究科	河野　裕彦
分子軌道法計算による有機反応および有機分子構造の設計と解析	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
化学反応および光化学・光物理過程のメカニズムとそれに対する反応場の影響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
タンパク質粗視化モデルに関する理論的研究	金沢大学理工研究域	川口　一朋
環境中および生体内の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	伊藤　彰浩
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
クラスターイオンの幾何構造，反応性および移動度計算	東北大学大学院理学研究科	大下慶次郎
蛋白質の構造変化と機能発現に関する理論的研究	京都府立大学大学院生命環境科学研究科	リントゥルオト正美
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
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
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	渕上壮太郎
刺激応答性高分子 PNIPAM の相転移メカニズムの解明	岡山大学大学院自然科学研究科	望月　建爾
蛋白質構造変化に伴う最適な反応座標を探索する計算科学研究	近畿大学先端技術総合研究所	米澤　康滋
銀イオン交換ゼオライトを触媒としたメタン活性化及び転化反応の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
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
分子集合体の分子動力学シミュレーション	北里大学理学部	米田　茂隆
分子凝集状態における複合化学反応過程に関する理論的研究	名古屋大学大学院情報科学研究科	長岡　正隆
液体界面の分子構造と振動スペクトルの理論研究	富山大学大学院理工学研究部	石山　達也
両親媒性分子の水和構造と熱力学	名古屋大学大学院工学研究科	吉井　範行
３重項－３重項消光によるアップコンバージョン過程の理論研究	筑波大学大学院数理物質科学研究科	重田　育照
X線回折散乱実験と分子シミュレーションを用いた生体分子の動的構造の解析	慶應義塾大学理工学部	苣口　友隆
振電相互作用に関する理論的研究	京都大学大学院工学研究科	佐藤　徹
半導体固体中の複合不純物がつくる分子性リドベルグ状態を介した電子トンネル現象の第一原理的研究	千葉大学大学院理学研究科	中山　隆史
金属錯体の反応性と物性に関する理論的研究	近畿大学理工学部	畑中　美穂
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
分子内および分子間電子移動の研究	神奈川大学理学部	田仲　二朗
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研究	高エネルギー加速器研究機構	岩野　薫
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
マルチスケール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
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
有機ラジカルの電子状態の ab initio MO 計算	奈良女子大学研究院自然科学系	竹内　孝江
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
配向性非晶質有機半導体材料の設計指針確立に向けた幾何構造・電子構造・振動モードの計算	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レーザー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域	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	産業技術総合研究所ゲノム情報研究センター	亀田　倫史
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
化学反応および分子特性に関する理論研究	神奈川大学理学部	松原　世明
量子化学と統計力学に基づく複雑化学系の理論的研究	京都大学大学院工学研究科	佐藤　啓文
セルロース結晶表面の溶媒和ダイナミクス挙動と結晶性セルロース結合性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
窒素ドープグラフェンの合成における N ドープ位置の制御	東京大学大学院理学系研究科	小幡　誠司
キラリティ誘導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
Ornstein-Zernike 型積分方程式理論による溶媒和自由エネルギーの高精度推算法の開発	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
共鳴禁止にもとづくアジド化合物のクリック反応性向上に関する研究	東京医科歯科大学生体材料工学研究所	吉田　優
貴金属フリー燃料電池用材料の計算化学研究	産業技術総合研究所ナノシステム研究部門	崔　隆基
励起状態における超高速化学結合ダイナミクスの観測と解明	理化学研究所	倉持　光
様々な新奇熱応答性高水分子溶液の分子動力学シミュレーション	北海道大学大学院工学研究科	佐藤信一郎
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
金属クラスター上での化学反応の理論的解析	豊田工業大学クラスター研究室	市橋　正彦
分子シミュレーションによる分子集合体の研究	名古屋文理大学	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
リパーゼによる脂肪族ジカルボン酸ジエステルの酵素加水分解に関する研究	明星大学理工学部	松本　一嗣
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

量子化学計算による炭素 1 原子を含む分子の酸化還元反応過程の解明	早稲田大学国際教養学部	稲葉　知士
生命関連星間分子の生成機構に関する理論的研究	明治学院大学法学部	髙橋　順子
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
第一原理量子論による次世代新原理メモリの設計指針の獲得	名古屋大学大学院工学研究科	白石　賢二
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	産業技術総合研究所ナノシステム研究部門	森下　徹也
光解離反応の量子制御に関する理論的研究	日本原子力研究開発機構	黒崎　　譲
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	産業技術総合研究所ナノシステム研究部門	石田　豊和
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	髙橋　卓也
量子化学計算による触媒機能の解明	星薬科大学薬学部	坂田　　健
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
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
遷移金属原子を含む有機金属クラスターの幾何構造と電子物性の解明	慶應義塾大学大学院理工学研究科	増渕継之助
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	大阪大学大学院工学研究科	櫻井　英博
計算化学的手法によるネオジム触媒を用いたイソプレン重合における立体規則性発現機構の解明	広島大学大学院工学研究科	田中　　亮
アゾベンゼン類似体における励起状態光化学反応機構の解明	お茶の水女子大学理学部	近藤未菜子
腸管出血性大腸菌（O-157）感染症に対する薬剤の開発にかかわる分子動力学シミュレーション	国立国際医療研究センター	尾又　一実
凝縮系における緩和および反応ダイナミクスの理論研究	分子科学研究所	斉藤　真司
擬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
アミロイド線維の形成機構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
分子・分子集合体の運動状態制御と実時間イメージング	分子科学研究所	水瀬　賢太
ナノサイズ分子の２次の摂動（MP2）法による構造最適化並列計算プログラムの開発	分子科学研究所	石村　和也
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
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
湾曲π共役分子の理論研究	分子科学研究所	東林　修平
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
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
カリウムチャネルでのイオン透過のメゾスコピックな過程の解明とその濃度，電位依存性	福井大学医学部	老木　成稔
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
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
13 族元素を含む高反応性化学種の性質の解明	中央大学理工学部	山下　　誠
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
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
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	中澤日出樹
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
縮合多環芳香環部位を有する環状アセチレン分子の自己会合挙動の解明	群馬大学大学院理工学府	加藤真一郎
DNA と金属錯体との相互作用	中央大学理工学部	千喜良　誠
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
NMR 計測と分子動力学計算を活用した糖鎖および複合糖質のコンフォメーション解析	分子科学研究所	山口　拓実
ピンサー型錯体を用いた触媒反応の反応機構解析	分子科学研究所	浜坂　　剛
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
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
小分子活性化を指向した遷移金属錯体の分子設計と理論計算	東京工業大学大学院理工学研究科	石田　　豊
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
多孔体触媒細孔内での有機分子の挙動および反応性に関する理論的研究	東京大学大学院総合文化研究科	増井　洋一
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理学研究科	太田　雄大
動的螺旋分子における螺旋反転反応機構の理論的研究	日本女子大学理学部	村岡　　梓
金属分子クラスターの構造と化学反応経路の量子化学的研究	電気通信大学大学院情報理工学研究科	山北　佳宏
原子核の量子効果を考慮した多成分系理論の開発と応用計算	岐阜大学工学部	宇田川太郎
ダブルハイブリッド密度汎関数法を用いたフラーレン生成熱の高精度計算	理化学研究所	川島　雪生

分子とナノ表面の励起電子状態と陽電子状態の第一原理計算	東京理科大学理学部	渡辺　一之
有害化合物の鉱物表面へ吸着構造の解明	東京大学大学院理学系研究科	田中　雅人
優れた光増感能力を有する有機色素設計の理論的検討	立教大学理学部	三井　正明
QM/MM 計算による光合成水分解反応の分子メカニズムの研究	名古屋大学大学院理学研究科	野口　　巧
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	群馬大学大学院理工学府	久新荘一郎
水素結合性の超臨界流体中での溶質－溶媒水素結合	同志社大学理工学部	木村　佳文
金属錯体の電子構造制御と反応機構解明	分子科学研究所	正岡　重行
一価アニオン性多座配位子を有する鉄触媒を用いたオレフィン重合触媒の探索	東京大学大学院工学系研究科	伊藤　慎庫
π拡張反応の機構解明研究と触媒反応設計	名古屋大学大学院理学研究科	伊藤　英人
分子スケールからみる液体中のナノ粒子の正確な輸送挙動と Stokes-Einstein の関係	新潟大学大学院自然科学研究科	石井　良樹
水の局所構造と動的挙動；超短パルスレーザー分光と理論計算の interplay	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永　圭介
Optical properties of nanocarbon systems	東京工業大学大学院理工学研究科	Juhasz Gergely
Hras-GTP 複合体内外における水分子の動き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
定電位電極表面における分子の吸着構造と拡散過程の第一原理シミュレーション	京都大学学際融合教育研究推進センター	胡　　春平
ポテンシャルエネルギー面に基づいた回転異性体（配座異性体）の配座探索	杏林大学保健学部	田中　　薫
Zero-multipole summation 法の分子動力学シミュレーションへの応用	東京大学大学院新領域創成科学研究科	桜庭　　俊
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
分子動力学法によるヒトタンパク質－薬物相互作用の解析	神戸大学大学院理学研究科	小堀　康博
低原子価ゲルマニウム配位子を有する錯体を用いたσ結合活性化	東北大学大学院理学研究科	渡邉　孝仁
シクロデキストリンによるβ - ラクタム系抗生物質の包接挙動のエネルギー解析	近畿大学生物理工学部	藤澤　雅夫
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
機能性パイ電子系物質の電子物性	京都大学大学院工学研究科	関　　修平
7 員環配位子トロポロンのノンイノセント挙動	北里大学理学部	吉田　　純
プロテインキナーゼ C C1 ドメインリガンドの結合様式の予測	香川大学農学部	柳田　　亮
多核有機金属分子ワイヤーの電子構造の解明	東京工業大学資源化学研究所	田中　裕也
籠型配位子を用いた遷移金属錯体の合成と反応	大阪大学大学院理学研究科	畑中　　翼
水素発生と貯蔵を行う遷移金属触媒の分子設計	産業技術総合研究所太陽光発電研究センター	津留崎陽大
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
量子化学計算によるガス状化学物質と O_3·OH との反応機構の解明	国立環境研究所	古濱　彩子
両親媒性物質－水 2 成分系における温度に対する表面張力特異性の解明	東京理科大学理工学部	金子　敏宏
多孔性材料表面での吸着分子の挙動に関する理論研究	東京大学大学院総合文化研究科	尾中　　篤
Ctr4 タンパク質における Cys/Trp モチーフの構造と機能	東北大学大学院薬学研究科	平松　弘嗣
高濃度エマルジョンのジャミング転移点近傍における非線形シア応答の MD シミュレーション	大阪大学大学サイバーメディアセンター	吉野　　元
第一原理計算準拠の分極関数の開発と種々の振動分光スペクトル計算	京都大学大学院理学研究科	谷村　吉隆
6-7 族金属錯体の構造および反応性に関する理論研究	岡山大学大学院自然科学研究科	浅子　壮美
クライオ電子顕微鏡によるタンパク質の単粒子構造解析	生理学研究所	村田　和義
プロティックなピンサー型配位子を有する遷移金属錯体の合成と反応性	東京工業大学大学院理工学研究科	戸田　達朗
計算分子分光学：分子の構造および反応に関する計算化学	お茶の水女子大学理学部	平野　恒夫
高効率太陽電池設計に向けた有機無機界面における分子構造・電子状態の解明	東京大学先端科学技術研究センター	城野　亮太
シンクロトロン光源及び自由電子レーザーに関する研究	分子科学研究所	加藤　政博
緑青色蛍光タンパク質（CFP）の電子励起状態の研究	東邦大学理学部	細井　晴子
新規有機化合物変換反応の開発を指向した理論化学的検討	愛知教育大学理科教育講座	赤倉松次郎
多環π共役系分子の光励起種・イオン種の理論的・実験的振動分光による構造の決定	青山学院大学理工学部	坂本　　章
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
質量分析によるペプチドのラジカル分解過程の解析	産業技術総合研究所計量標準総合センター	浅川　大樹
計算機化学に基づくゼオライト骨格構造及びアルミニウム含有量・位置の骨格エネルギーへの影響の研究	東京大学大学院工学系研究科	大久保達也
植物由来ポリフェノール化合物と標的タンパク質の相互作用の分子動力学的解析	名城大学薬学部	金田　典雄
放射線損傷による DNA 構造変化の分子動力学シミュレーション	日本原子力研究開発機構	米谷　佳晃
第一原理レプリカ交換法による Li クラスタの安定性研究	計算科学振興財団	西川　武志

量子化学文献データーベースの開発	首都大学東京大学院理工学研究科	波田　雅彦
化学反応経路自動探索プログラム GRRM14	東北大学大学院理学研究科	大野　公一

（計算物質科学イニシアティブ利用枠）

分子における電子の動的過程と多体量子動力学	東京大学大学院総合文化研究科	高塚　和夫
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
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	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
全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開	名古屋大学大学院工学研究科	岡崎　　進
拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明	名古屋大学大学院理学研究科	岡本　祐幸
太陽電池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
ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス	横浜国立大学大学院工学研究科	大野かおる

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 ～ '08		'09		'10		'11		'12		'13		'14		'15		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	107	879	1	28	0	0	1	13	1	21	2	27	1	11	2	32	人数：登録人数
協力研究	3,825	5,446	119	412	122	316	108	292	123	329	64	183	64	206	60	200	〃
招へい協力研究	195	197	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	〃
所長招へい	4,154	4,154	148	148	148	148	78	78	93	93	156	156	103	103	103	103	人数：旅費支給者
研究会	324	5,434	5	110	6	137	4	105	10	207	10	254	6	162	11	93	〃
若手研究会等	1	12	1	10	1	14	1	11	1	19	1	21	2	38	1	16	〃
岡崎コンファレンス	—	—	—	—	—	—	—	—	1	29	1	18	1	34	1	—	〃
施設利用 I	1,927	4,350	60	179	66	166	98	266	60	254	41	105	44	191	15	52	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)	4,736	15,789	171	676	170	666	190	668	190	813	204	786	199	751	209	746	〃
協力研究 (ナノプラット)	429	914	36	86	35	94	25	64	15	51	52	123	63	147	62	168	〃
施設利用 (ナノプラット)	212	515	39	107	25	89	20	35	52	150	132	378	174	453	181	593	〃
合計	15,910	37,690	580	1,756	573	1,630	525	1,532	546	1,966	663	2,051	657	2,096	645	2,003	
経費	545,194		—		—		—		—		—		—		—		千円

＊施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用　　（'15 年度の数値は，2015.12.25 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 ～ '08		'09		'10		'11		'12		'13		'14		'15		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	15	15	0	0	0	0	4	4	6	6	1	1	1	1	1	1	人数：旅費支給者
研究会	41	713	2	44	1	1	2	68	4	63	1	37	1	37	1	30	〃
施設利用	2,831	13,817	147	660	140	659	139	682	136	706	142	732	125	649	116	705	件数：許可件数 人数：許可人数
合計	3,309	16,149	149	704	141	660	145	754	146	775	144	770	127	687	118	736	
経費	230,477		—		—		—		—		—		—		—		千円

（'15 年度の数値は，2015.12.25 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
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
14	1	1	10	17	129	158
合計	43	38	345	197	1,272	1,895

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
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
14	17	4	11	18	22	24	1	61	158
合計	212	61	133	191	310	364	19	605	1,895

表３　海外からの研究者（2015年度）

１．外国人運営顧問			
NAAMAN, Ron	イスラエル	ワイツマン科学研究所教授	
ROSSKY, Peter J.	アメリカ	ライス大学自然科学研究部部長・教授	
２．分子科学研究所外国人研究職員			
BAGCHI, Biman	インド	Indian Institute of Science	'15. 5.29–'15.12.11
KIM, Hyung Joon	アメリカ	Carnegie Mellon University	'15. 9.14–'15.12.13
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
PAN, Shiguang	中国	分子科学研究所 IMS フェロー	'15. 4. 1–'17. 3.31
DALAPATI, Sasanka	インド	分子科学研究所 IMS フェロー	'15. 4. 1–'17. 3.31
JACK, Calum Neilson	イギリス	分子科学研究所 IMS フェロー	'15. 7. 1–'16. 3.31
４．国際共同研究			
RASTI, Soroush	イラン	Sharif University of Technology 大学院生	'15. 4. 1–'15. 5.10
RILHAC, Vincent	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'15. 4. 1–'15. 8.24
SIMOEN, Marine	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'15. 4. 1–'15. 8.24
GOUILLARD, Louis	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'15. 4. 1–'15. 8.24
LIVACHE, Clement	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'15. 4. 1–'15. 8.24
QUINARD, Benoit	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'15. 4. 1–'15. 8.24
CANDEL, Gaelle	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'15. 4. 1–'15. 8.24
CHOUHAN, Lata	インド	Indian Institute of Technology 学部学生	'15. 5. 5–'15. 7.15
THAMMAPORN, Ratsupa	タイ	Kasetsart University 大学院大学院生	'15. 5.31–'15. 7.31
CHIU, Chao-Wen	台湾	National University of Kaohsiung 准教授	'15. 6.28–'15. 7. 5
WANG, Yu-Fu	台湾	Tamkang University 大学院生	'15. 6.28–'15. 7. 5
ZHANG, Yu-Xiang	中国	University of Science and Technology 大学院生	'15. 6.28–'15.11. 1
JUNG, Sung Won	韓国	浦項工科大学校大学院生	'15. 7.25–'15. 8. 1
SOHN, Yeong-Sup	韓国	浦項工科大学校大学院生	'15. 7.17–'15. 8. 1
KWON, Ki Won	韓国	浦項工科大学校大学院生	'15. 7.17–'15. 8. 1
KIM, Keun Su	韓国	浦項工科大学校助教	'15. 7.20–'15. 7.22
RANCAN, Fiorenza	ドイツ	ベルリン自由大学研究員	'15. 8.23–'15. 8.29
KLOSSEK, Andre	ドイツ	ベルリン自由大学研究員	'15. 8.23–'15. 8.30
SCHULZ, Robert	ドイツ	ベルリン自由大学大学院生	'15. 8.23–'15. 8.30
RUEHL ECKART, Gunther Adolf	ドイツ	ベルリン自由大学教授	'15. 8.24–'15. 8.29
FLESCH, Roman	ドイツ	ベルリン自由大学助教	'15. 8.24–'15. 8.31
YAMAMOTO, Kenji	ドイツ	ベルリン自由大学大学院生	'15. 8.23–'15. 8.31
LAI, Yu-Ling	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 非常勤研究員	'15. 9. 1–'15. 9. 5
LIN, Ming-Wei	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center ポスドク研究員	'15. 9. 1–'15. 9. 5
CHANG, Lo-Yueh	台湾	National Tsing Hua University 大学院生	'15. 9. 1–'15. 9. 5
VISOOTSAT, Akasit	タイ	Kasetsart University 大学院生	'15. 8.31–'15.11.30
CHUENIM, Vorrapol	タイ	Chulalongkorn University 大学院生	'15. 9. 1–'15.11.30
YEW, Hanchoi	マレーシア	University of Malaya 大学院生	'15. 8.31–'15.11.30
CHEN, Chi-Liang	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 研究員	'15.12. 8–'15.12.12
５．所長招へい協力研究員			
MUNRO, Ian	イギリス	Manchester University 名誉教授	'15. 4. 8–'15. 4.16
GEORGESCU, Iulia	イギリス	Nature Physics, Senior Editor	'15.10. 5–'15.10. 6
CHIN, Cheng	アメリカ	The University of Chicago 教授	'15. 4. 1–'16. 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	'15. 4. 1–'16. 3.31
７．招へい研究員			
MIRIAN, Najmeh	イラン	Institute for Reserch in Fundamental Sciences 研究員	'15. 5.10–'15. 5.19 '15. 8. 9–'15. 8.15

LEE, Sze Koon	マレーシア	University of Malaya 大学院生	'15. 5.11–'15. 5.17
			'15. 8.12–'15. 9.30
DANG, JingShuang	日本	大阪大学大学院工学研究科 Postdoctral Fellow	'15. 4. 1–'15. 4. 1
KOBAYASHI, Rika	オーストラリア	Austoralian National UniversityAcademic Consultant	'15. 6.23–'15. 6.24
AMOS, Roger	オーストラリア	Australian National UniversityManager	'15. 6.23–'15. 6.24
GUPTA, Aditi	インド	The International Institute of Information Technology, Hyderabad 大学院生	'15. 7. 1–'15. 9.27
UDAYAKUMER, Deva Priyakumar	インド	The International Institute of Information Technology,Hyderabad 准教授	'15. 7. 1–'15. 8. 3
MILLER, Dwayne	ドイツ	Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter 教授	'15. 5.24–'15. 5.26
ZHANG, Wei	アメリカ	University of Colorado 准教授	'15. 7.16–'15. 7.19
NOONIKARA, Anurag	インド	Indian Institute of Science Education and Research Mohali 大学院生	'15. 7.20–'15. 8.30
O-THONG, Sompong	タイ	Thaksin University 助教	'15. 8.11–'15. 8.14
PISUTPAISAL, Nipon	タイ	King Mongkut's University 助教	'15. 8.10–'15. 8.14
KALATHINGAL, Mahroof	インド	Indian Institute of Science Education and Trivandrum 大学院生	'15. 9. 1–'15.11.30
CHIPOT, Christophe	フランス	University of Lorraine 教授	'15. 9. 6–'15. 9.13
FRITZ, Torsten	ドイツ	Friedrich-Schiller University 教授	'15. 9. 2–'15. 9. 4
CONFESOR, Mark Nolan P.	フィリピン	Mindanao State University 准教授	'15. 8.23–'15. 8.25
RESERVA, Rosario	フィリピン	Mindanao State University 大学院生	'15. 8.23–'15. 8.25
JEREZ, Michael Jade	フィリピン	Mindanao State University 大学院生	'15. 8.23–'15. 8.25
KREMER, Kristof	ドイツ	Friedrich-Alexander-University 大学院生	'15. 9.26–'15.10. 3
TUKIAINEN, Mikko	フィンランド	University of Turku 大学院生	'15.10. 7–'15.11. 6
ISHIKAWA, Yasuyuki	プエルトリコ	University of Puerto Rico 教授	'15.10.20–'15.10.26
横山知大	オランダ	Delft University of Technology ポスドク研究員	'15. 9.29–'15.10. 2
BORNALES, Jinky	フィリピン	Mindanao State University 教授	'15.11. 8–'15.11.19
PORTUGAL, Renato	ブラジル	National Laboratory for Scientific Computing 教授	'15.11.13–'15.11.20
JEX, Igor	チェコ	Czech Technical University 教授	'15.11.13–'15.11.19
DI FRANCO, Carlo	イギリス	Imperial College London 助教	'15.11.11–'15.11.19
XU, Jian	中国	Chinese Academy of Sciences 教授	'15.11. 2–'15.11. 2
HU, Chin-Kun	台湾	The LSCP,Academia Sinica 研究員	'15.11.26–'15.12. 2
AKA, Gerard	フランス	フランス国立パリ高等化学学校教授	'15.12. 4–'15.12.13
DENG, Hexiang	中国	Wuhan University 教授	'15.11.15–'15.11.16
新井賢亮	アメリカ	Boston University ポスドク研究員	'15.11.26–'15.11.29

８．岡崎コンファレンス

SHAM, Tsun-Kong	カナダ	University of Western Ontario 教授	'16. 1.11–'16. 1.14
CHEN, Lin X.	アメリカ	Argonne Natl. Laboratory 教授	'16. 1.11–'16. 1.14
CRAMER, Stephen P.	アメリカ	University of California, Davis 教授	'16. 1.11–'16. 1.14
FISCHER, Peter	アメリカ	University of California, Santa Cruz 教授	'16. 1.11–'16. 1.14
ROGALEV, Andrei	フランス	Europian Synchrotron Radiation Facility 研究員	'16. 1.11–'16. 1.14
BANULS, Mari Carmen	ドイツ	Max-Planck-Institut für Quantenoptik 助教	'16. 1.11–'16. 1.14
CHA, Min Chul	韓国	Hanyang University 教授	'16. 1.11–'16. 1.14
CHUNG, Myung-Hoon	韓国	Hongik University 教授	'16. 1.11–'16. 1.14
HE, Yin-Chen	ドイツ	Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems 博士研究員	'16. 1.11–'16. 1.14
HUANG, Ching-Yu	アメリカ	State University of New York at Stony Brook 博士研究員	'16. 1.11–'16. 1.14
KAO, Ying-Jer	台湾	National Taiwan University 教授	'16. 1.11–'16. 1.14
KIM, Paniin	韓国	Sungkyunkwan University 大学院生	'16. 1.11–'16. 1.14
LEE, Hyunyong	韓国	Sungkyunkwan University 博士研究員	'16. 1.11–'16. 1.14
NATTAPONG, Paiboonvorachat	タイ	Chulalongkorn University 講師	'16. 1.11–'16. 1.14
POILBLANC, Didier	フランス	CNRS and Universite de Toulouse 教授	'16. 1.11–'16. 1.14
POLLMANN, Frank	ドイツ	Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme 教授	'16. 1.11–'16. 1.14
RAN, Ying	アメリカ	Boston College 助教	'16. 1.11–'16. 1.14
SANDVIK, Anders	アメリカ	Boston University 教授	'16. 1.11–'16. 1.14
TU, Wei-Lin	フランス	Université Toulouse III - Paul Sabatier 大学院生	'16. 1.11–'16. 1.14
VIDAL, Guifre	カナダ	Perimeter Institute for Theoretical Physics 教授	'16. 1.11–'16. 1.14
WANG, Ling	中国	Beijing Computational Science Research Center 助教	'16. 1.11–'16. 1.14
XIANG, Tao	中国	Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences 教授	'16. 1.11–'16. 1.14
XIE, Zhiyuan	中国	Renmin University of China 准教授	'16. 1.11–'16. 1.14
YANG, Liping	中国	Chongqing University 講師	'16. 1.11–'16. 1.14
YANG, Shu	カナダ	Perimeter Institute for Theoretical Physics 博士研究員	'16. 1.11–'16. 1.14

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 原子與分子科学研究所	台湾	分子科学研究所と中央研究院原子與分子科学研究所との間の分子科学における協力に関する覚書	共同研究（物質関連分子科学，原子，分子との光科学，理論と計算の分子科学）	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
物質エネルギーヘルムホルツベルリンセンター	ドイツ	物質エネルギーヘルムホルツベルリンセンターと分子科学研究所との分子科学分野における独日共同研究プロジェクトに関する覚書	分子科学分野における学術交流及び共同研究等の実施	2015. 1.16	2016. 6.20	所長	所長
インド科学教育研究所コルカタ校	インド	自然科学研究機構分子科学研究所とインド科学教育研究所コルカタ校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	2015.10. 7	2019.10. 6	校長	所長
インド科学研究所	インド	自然科学研究機構分子科学研究所とインド科学研究所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	2015.10. 7	2019.10. 6	事務局長	所長

（2015.12.31 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 27 年度は下記の第 75 回岡崎コンファレンスを開催した。

会 議 名：第 75 回岡崎コンファレンス
“Tensor Network States: Algorithms and Applications 2016”
期　　間：2016 年 1 月 11 日（月）〜14 日（木）
場　　所：岡崎コンファレンスセンター
組織委員：西野　友年（神戸大学），堀田　知佐（東京大学），引原　俊哉（群馬大学），奥西　巧一（新潟大学），
藤堂　眞治（東京大学），Tao Xiang（中国科学院物理研究所），Ying-Jer Kao（国立台湾大学），
Guifre Vidal（ペリメータ理論物理学研究所），鹿野　豊（分子科学研究所）
内　　容：

テンソルネットワーク状態とは量子多体系の計算ツールとして近年，世界中で注目を集めている。その代表的な例としては，密度行列繰り込み群法（DMRG）を基礎とした 1 次元のエネルギーギャップのある系に有効な行列積状態（MPS），N 次元のエネルギーギャップのある系に有効な射影エンタングルメントペア状態（PEPS），エネルギーギャップがない系に有効なマルチスケールエンタングルメント繰り込み群法（MERA）などが挙げられる。DMRG がプリンストン大学の Garnet Kin-Lic Chan らによって量子化学計算に応用され手法も多様化していったように，量子多体系を記述する方法論としてテンソルネットワーク状態は有効であることが指摘されている。プリンストン大学の Garnet Kin-Lic Chan は惜しくもインフルエンザのために岡崎には来ることが出来なかったが，Skype を用いて香港から講演を行い，今後のテンソルネットワーク状態の研究の可能性について示唆し，本会議の中でも議論が何度もわき上がった。そして近年，ペリメータ理論物理学研究所の Guifre Vidal らが提唱したテンソルネットワーク繰り込み群法と呼ばれる新しい方法論が開発され，臨界現象を伴う多体系の計算が深化出来る可能性があることが本人により指摘され，同じくペリメータ理論物理学研究所 Shuo Yang により最適化方法に多角的な検討を行うことが出来た。最終日には，東京大学の今井浩らにより，テンソルネットワーク状態とグラフ理論の密接なる関係性に関しても指摘があり，数値計算

方法として有効であると考えるにたる傍証を様々に集めることが出来た。更に,「計算物質科学イニシアティブ」(CMSI)との共催事業であった。

外国人招待講演者を以下に挙げる。

Garnet Chan (Princeton University, U.S.A.)

Anders Sandvik (Boston University, U.S.A.)

Guifre Vidal (Perimeter Institute for Theoretical Physics, Canada)

Ying-Jer Kao (National Taiwan University, Chinese Taiwan)

Tao Xiang (Institute of Physics, Chinese Academy of Science, China)

Frank Pollmann (Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Germany)

Ying Ran (Boston College, U.S.A.)

Didier Poilblanc (CNRS and Universite de Toulouse, France)

Mari Carmen Banuls (Max-Planck-Institut für Quantenoptik, Germnay)

Shuo Yang (Perimeter Institute for Theoretical Physics, Canada)

また，日本人招待講演者を以下に挙げる。

Takeshi Yanai (Institute for Molecular Science, National Institutes of Natural Sciences)

Naoki Nakatani (Hokkaido University)

Tsuyoshi Okubo (Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo)

Hiroshi Imai (University of Tokyo)

プログラム等は以下のようであった。

The 75th Okazaki Conference

Tensor Network States: Algorithms and Applications 2016

Date: January 11–14, 2016

Site: Okazaki Conference Center (OCC), Conference Room B (1st floor)

Aim

Tensor networks are recognized as one of the most promising numerical tools to study quantum many body systems; representatives are the matrix product state (MPS), the multi-scale entanglement renormalization ansatz (MERA), and the projected entangled-pair states (PEPS), and Density Matrix Renormalization Group (DMRG). By now, the concept covers various fields including material science, quantum chemistry, and lattice gauge theories, and it is desired to share ideas among these fields.

This workshop will focus on the recent developments on tensor network based algorithms and applications. It will host the discussion of current problems and developments among the leading researchers, aiming to promote interactions between selected fields from statistical mechanics to condensed matter, from quantum chemistry to nano-technology and high energy physics.

Program

January 11, 2016

9:30-	Registration
(1st Session Chair: Ying-Jer Kao)	
9:50-10:00	Opening Remarks
10:00-11:00	**Guifre Vidal** (Perimeter Institute for Theoretical Physics) “Tensor network renormalization: scale invariance on the lattice”
11:00-12:00	**Shuo Yang** (Perimeter Institute for Theoretical Physics) “Loop optimization for tensor network renormalization”
12:00-13:30	Lunch

(2nd Session Chair: Kouichi Okunishi)

13:30-14:30 **Ying-Jer Kao** (National Taiwan University)
"Tree tensor network strong disorder renormalization group on a disordered antiferromagnetic Ising chain in external fields"

14:30-15:30 **Tsuyoshi Okubo** (University of Tokyo)
"Ground state properties of frustrated honeycomb and kagome lattice antiferromagnets"

15:30-16:00 Coffee Break

(3rd Session Chair: Chisa Hotta)

16:00-17:00 **Frank Pollmann** (Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme)
"Many-body localization: Entanglement and efficient numerical simulations"

17:00-17:30 **Tomotoshi Nishino** (Kobe University)
"Phase transition of classical Ising model on 2D fractal lattice"

17:30-18:00 **Ling Wang** (Beijing Computational Science Research Center)
"Tensor network approach to quantum phase transition"

January 12, 2016

(4th Session Chair: Toshiya Hikihara)

10:00-10:30 **Liping Yang** (Chongqing University)
"The fine structure of the entanglement entropy in the O(2) model"

10:30-11:00 **Yin-Chen He** (Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems)
"Kagome chiral spin liquid and symmetry protected topological phases"

11:00-12:00 **Didier Poilblanc** (CNRS and Universite de Toulouse)
"PEPS representation of chiral and non-chiral topological spin liquids"

12:00-13:30 Lunch

(5th Session)

13:30-14:30 Poster Session

14:30-15:00 Coffee Break

(6th Session Chair: Synge Todo)

15:00-16:00 **Anders Sandvik** (Boston University)
"Unusual finite-size scaling in a system with two divergent length scales"

16:00-17:00 **Ying Ran** (Boston College)
"Symmetric tensor networks—algorithms to sharply identify classes of quantum phases distinguishable by short-range physics"

17:00-18:00 **Mari Carmen Banuls** (Max-Planck-Institut für Quantenoptik)
"Almost conserved local quantities"

19:00- Banquet at Okazaki New Ground Hotel

January 13, 2016

(7th Session Chair: Tomotoshi Nishino)

10:00-11:00 **Tao Xiang** (Institute of Physics, Chinese Academy of Science)
"Renormalization of frustrated Heisenberg antiferromagnets"

11:00-11:30 **Ching-Yu Huang** (State University of New York at Stony Brook)
"Transition of a Z3 topologically ordered phase to trivial and critical phases"

11:30-12:00 **Kouichi Okunishi** (Niigata University)
"Snapshot spectrum and critical phenomenon for the 2D classical spin system"

12:00-13:30 Lunch

(8th Session Chair: Guifre Vidal)

13:30-13:40 Remark by Director **Iwao Ohmine**

13:40-13:50 Conference Photo Session

13:50-14:50 **Garnet Chan** (Princeton University)
"Tensor networks—some new directions (Skype Presentation)"

14:50-15:50 **Naoki Nakatani** (Hokkaido University)
"QC-DMRG Algorithm on the Tree Tensor Network States (TTNS)"

15:50-16:30 Coffee Break

(9th Session Chair: Tao Xiang)

16:30-17:00 **Nattapong Paiboonvorachat** (Chulalongkorn University)
"Electronic Structure of Porphin by Semi-empirical HF-DMRG Calculations "

17:00-17:30 **Takeshi Yanai** (Institute for Molecular Science)
"Quantum chemistry with density matrix renormalization group"

17:30-18:00 **Hideo Sekino** (Toyohashi University of Technology)
"Time Evolution of MPS by QCA"

January 14, 2016

(10th Session Chair: Yutaka Shikano)

10:00-11:00	**Hiroshi Imai** (University of Tokyo) “Tree Tensor Network, Quantum Computing, and Graph Minor Theory”
11:00-11:30	**Hidefumi Hiraishi** (University of Tokyo) “Parameterized algorithms to compute Ising partition function via graph decompositions”
11:30-12:00	**Hikaru Kawauchi** (Kanazawa University) “Tensor renormalization group analysis of CP(N-1) model”
12:00-12:30	**Zhiyuan Xie** (Renmin University of China) “Some recent applications of tensor renormalization group”
12:30-14:00	Lunch
14:00-18:00	Free Discussion
18:00	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 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 回シンポジウムを 2015 年 7 月に釜山で開催予定であったが, 6 月に韓国で流行した MERS（中東呼吸器症候群）により，延期されることになった。今回は，このような予想しない計画変更を迫られたが，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 ～2005	06	07	08	09	10	11	12	13	14	15
北海道大学	12										
室蘭工業大学	2										
東北大学	13									3	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										1
東京大学	31		2	4	3	3	1	1			
東京工業大学	42								1	1	3
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	12
愛知教育大学		1									
名古屋工業大学	17						2	1		3	1
豊橋技術科学大学	39			1							
三重大学	7										
京都大学	42	1	1	1	2			1	1		
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	26			1				2	2	1	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	16										
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	13	8	5	4	4	4	2	3	2	2	1
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	4
計	617	16	17	17	17	17	27	30	24	27	26

＊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（2015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	7	8	19
機能分子科学専攻	9	7	19
計	16	15	38

在籍学生数（2015年12月現在） 単位：人　（年度別）

入学年度専攻		2011	2012	2013	2014	2015	計	定　員
構造分子科学専攻	５年一貫	1	3	2	4	3	13	2
	博士後期	0	0	1	6	4	11	3
機能分子科学専攻	５年一貫	1	0	0	1	3	5	2
	博士後期	0	0	3	1	1	5	3

学位取得状況　単位：人　（年度別）

専　攻	1991 ～ 2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	90(11)	5	5(1)	7	5	2	2	6	4	2	2	130(12)
機能分子科学専攻	74(14)	5	1	4	3	5	1	3	6	1(3)	2	105(17)

（　）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 ～ 2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015
構造分子科学専攻	120	11(1)	8(1)	5(1)	5(3)	5(1)	1(1)	6(2)	5(4)	11(4)	7(3)
機能分子科学専攻	108	4	5(1)	5(2)	7(2)	4(2)	6(2)	8(2)	4	2(1)	4(3)

（　）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		
	1989-2013年度	2014年度	2015年度	1989-2013年度	2014年度	2015年度
中　国	27	4	1	11		
フランス				1		
ロシア				1		
バングラディッシュ	6			2		
インド	1			2		
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	1	4		
マレーシア			1			

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～'13 年度	'14 年度	'15 年度	'89～'13 年度	'14 年度	'15 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		1(1)	3			9(1)
東京大学	7			9			16
東京農工大学	1						1
東京工業大学	2(2)		1(1)	3			6(3)
お茶の水女子大学	4			1			5
電気通信大学	1			2			3
横浜国立大学	1						1
新潟大学				1			1
長岡技術科学大学	1						1
富山大学	1						1
福井大学				1			1
金沢大学	2			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	1	16		1	32(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					1(1)	5(1)
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)
奈良工業高等専門学校						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(1)	1		1(1)	6(2)
東邦大学	1(1)			2			3(1)
日本大学				2(1)			2(1)
法政大学	3(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	39(3)	5	3	30(3)			77(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（2015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	13	13	26
准教授	20	8	28
講　師	3	2	5
助　教	11	14	25
大学・公的機関等研究職	35	32	67
民間企業	25	16	41
その他	24	21	45
計	131	106	237

3-5-3　オープンキャンパス・分子研シンポジウム

2015年5月29日（金）に分子研シンポジウム2015を開催し，引き続き30日（土）に分子研オープンキャンパス2015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，分子研や総研大への理解を深めていただくことを目的としている。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９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５名の先生方に講演をお願いした。参加登録者数は，所内は掌握していないが，所外からは70名であった（オープンキャンパス・分子研シンポジウムいずれか一方のみを含む)。参加者構成は，沖縄から東北まで，学部学生37名，大学院生20名，教員・研究者10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	修士課程	教員・その他	民　間	合　計
北海道	2	0	2	0	4
東　北	0	0	0	0	0
関　東	15	8	2	0	25
甲信越	1	1	0	0	2
北　陸	1	0	0	0	1
東　海	3	0	2	2	7
近　畿	7	10	3	1	21
中　国	3	0	0	0	3
九州・沖縄	5	1	1	0	7
合　計	37	20	10	3	70

3-5-4　夏の体験入学

2015年８月４日（火）から７日（金）までの４日間，分子科学研究所において，第12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，13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(火)：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(水)，６日(木)：配属研究室にて研究体験
８月７日(金)：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	千葉大学	学部３年	量子論におけるダイナミクスとは何であるかを紙と鉛筆・計算機を駆使して体感しよう！	信定　准教授
2	大阪市立大学	学部４年	金属タンパク質を対象とした研究を体験してみよう	青野　教授
3	愛知工業大学	学部３年	キラル分子を合成し，その機能を探索する	椴山　准教授
4	新潟大学	学部２年	光を使って原子の集団を制御しよう	大森　教授
5	筑波大学	学部３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	大阪市立大学大学院	博士１年	金属タンパク質を対象とした研究を体験してみよう	青野　教授
7	名古屋大学	学部２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
8	立命館大学	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
9	東京大学	学部３年	遷移金属ナノ触媒を作る！	魚住　教授
10	立命館大学	学部３年	遷移金属ナノ触媒を作る！	魚住　教授
11	法政大学	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
12	神戸大学	学部４年	レーザーから発生する光パルスの測定	藤　准教授
13	立命館大学	学部３年	タンパク質で生物時計を作ってみよう	秋山　教授

3-5-5　総研大アジア冬の学校

2015年12月１日（火）から４日（金）の期間，核融合科学研究所・分子科学研究所において，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12回目である。今回の冬の学校は，核融合科学研究所との共同開催であった。海外からの応募者は93名あり，これを書類選考で絞り込み，19名を受け入れた。その国籍別の内訳はタイ６名，中国２名，ベトナム２名，インドネシア３名，台湾１名，マレーシア３名，ネパール１名，インド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７名，日本国内からの参加者が５名あり，講師を除く参加者は合計31名であった。今回は，テーマを“Multiple Approaches to Future Energy”とし，エネルギーに関連する核融合科学・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も行われた。期間中，最初の３日間を核融合科学研究所（土岐）で行った後，最終日は場所を分子研に移して講義や施設見学が行われた。講演者は下記のとおりである。

OKAMURA, Shoichi (NIFS)
“Introduction to the Magnetic Confinement Fusion: Achievements and Challenges”
GOTO, Motoshi (NIFS, SOKENDAI)
“Fundamentals of Plasma Spectroscopy and its Application for the Fusion Plasma”

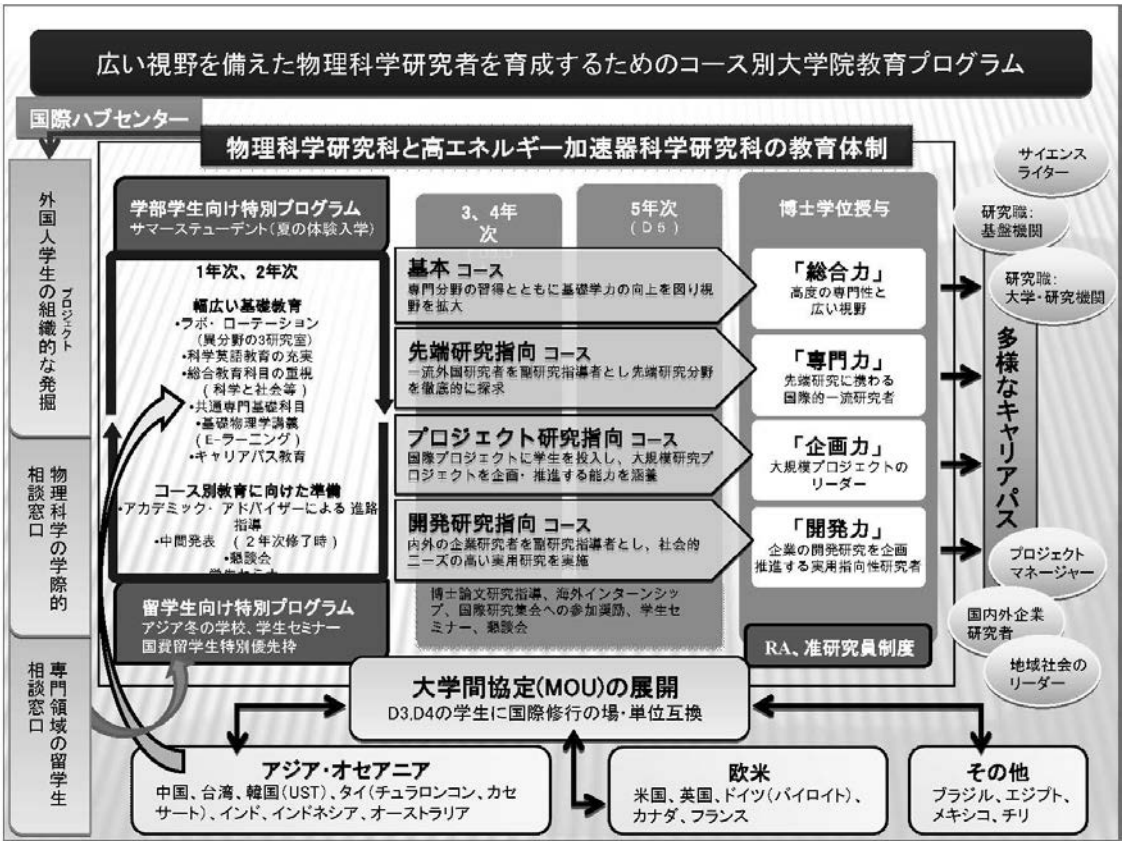
HORIUCHI, Ritoku (NIFS, SOKENDAI)
“Basis of Particle-In-Cell (PIC) Simulation and its Extensions”
SUGAMA, Hideo (NIFS, SOKENDAI)
“Theory and Simulation of Magnetized Fusion Plasmas”
ITO, Atsushi (NIFS, SOKENDAI)
“Multiscale Simulation Research for Plasma-material Interaction”
JIANG, Donglin (IMS, SOKENDAI)
“Two-Dimensional Organic Frameworks Challenging for Energy Issues”
EHARA, Masahiro (IMS, SOKENDAI)
“Elements Strategy for Catalysts and Batteries”
MASAOKA, Shigeyuki (IMS, SOKENDAI)
“Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation”

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

2009～2011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」が実施され，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，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た。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。これを継続する位置づけのものとして2012～2015年度において, 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」が実施されている。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専攻が参加している。

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。

2016年度からは第３期中期計画に入り，総研大のカリキュラムが大きく変わろうとしているためやや流動的な状況ではあるが，海外インターンシップを中心にできる限り本プログラムの長所を継続できるよう調整が進められているところである。



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。2015 年度は，総研大からの支援を受け，プログラムを継続実施している（http://ibep.ims.ac.jp/index.html）。

2015 年度の本プログラムの活動を以下に要約する。

(1)　講義

講義は原則英語で行われ，遠隔地講義配信システムを利用して現地，遠隔地専攻に差がなく受講できるようにしている。本年度は，10 科目（①統合生命科学入門，②統合生命科学シリーズ，③構造生体分子科学，④基礎生体分子科学，⑤生体分子シミュレーション入門，⑥バイオインフォマティクス演習，⑦統合進化学，⑧分子細胞生物学 II，⑨メカノシステムバイオロジー，⑩生物情報学（システム生物学特論，ゲノム生物学，バイオインフォマティクス特論，生物統計学基礎，生物情報処理））に，「統合生命科学実践コース」の 1 科目を新たに加えた。統合生命科学実践コースは，講義と実地演習（実験実習）からなる複合科目で，5 年間の集大成として企画された。

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

本年度は，総研大からの支援を受け，構造分子科学専攻の青野重利教授がオーガナイザーで「バイオセンシング研究領域」というタイトルで 8 月に開催された。海外から多くの参加者があり，また若手や留学生から活発な議論があり盛会であった。

本プログラムの経験を活かした，将来の専攻・研究科を超えた異分野融合教育が行われる必要があろう。

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。特に法人となってからは，全国の分子科学コミュニティの連帯を強めるために研究支援部門を強化してきた。法人化後に新設された部門には,「安全衛生管理室」,「 広報室 」,「史料編纂室」があり，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 2015 年 4 月 1 日現在で 33 名である。技術職員は，主に研究施設に配属され，それぞれの持つ高い専門技術で研究教育職員と協力し，先端的かつ独創的な研究を技術面から支え，大学共同利用機関の使命を果たすために努力している。各施設に配属された技術職員の対応する技術分野は広範囲に渡っている。機械，電気，電子，光学，情報，といった工学知識や各要素技術の技能を基に支援業務として実験機器の開発，システム開発等を行い，物理・化学・生命科学を基に物質の構造解析や化学分析等を支援している。この様に技術職員の持っているスキルを活用し，UVSOR やスパコン，レーザーシステム，X 線解析装置，電子顕微鏡，ESR，SQUID，NMR など大型設備から汎用機器の維持管理，施設の管理・運用も技術職員の役割としている。さらに，科学の知識を基に研究所のアウトリーチ活動も職務として担い，広報に関する業務，出版物の作成も行っている。所内の共通業務としてネットワークの管理・運用，安全衛生管理も技術課の業務として行っている。安全衛生管理では，研究所の性質から毒物・劇物・危険物など薬品知識や低温寒剤等高圧ガスの知識, 放射線管理, その他技術的な側面から毎週職場巡視を行い, 分子研の安全衛生管理に寄与している。

技術職員が組織化されたのは，1975 年に創設された分子科学研究所技術課が日本で最初である。技術職員が組織化したことで直接待遇改善につながったが，組織化の効果はそれだけでなく，施設や研究室の狭い枠に留まっていた支援を広く分子科学分野全体の研究に対して行うことができるようになり，強力な研究支援体制ができあがった。支援体制の横のつながりを利用し，岡崎 3 機関の岡崎統合事務センターと技術課が協力して最良の研究環境を研究者に提供することを目標に業務を推進している。しかし，事務組織とは違って分子研の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 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	
平成 27	山形大学	平成 27 年 9 月 10-11 日	機器・分析	
	山口大学	平成 28 年 3 月 3-4 日	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 28 年 3 月 17-18 日	機械工作，実験装置，計測制御，真空・低温，情報処理	

4-1-2　技術研修

1995 年度より，施設に配属されている技術職員を対象として，他研究所・大学の技術職員を一定期間，分子研の附属施設に受け入れ技術研修を行っている。分子研のような大学共同利用機関では，研究者同士の交流が日常的に行われているが，技術者同士の交流はほとんどなかった。他機関の技術職員と交流が行われれば，組織の活性化，技術の向上が図れるであろうという目的で始めた。この研修は派遣側,受け入れ側ともに好評だった。そこで,一歩進めて,他研究機関に働きかけ，受け入れ研修体制を作っていただいた。そうした働きかけの結果，1996 年度より国立天文

台が実施し，1997 年度には高エネルギー加速器研究機構，1998 年度からは核融合科学研究所が受け入れを開始し現在も続いている。法人化後は，受け入れ側の負担や新しい技術の獲得には大きく寄与していないため，実施件数は少なくなってきた。そこで，2007 年度からセミナー形式で外部より講師を招き，併せて他機関の技術職員も交えて「技術課セミナー」を行っている。この「技術課セミナー」は今後，様々な技術分野のトピックを中心に定期的に開催する予定である。2015 年度は所外から 3 名の講師を招き開催した。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
平成 26 年度	10

表 3　平成 27 年度技術研修受入状況（2015.4.1 ～ 2016.3.31）

氏　　名	所　　属	受入期間	備　　考
千葉　　寿	岩手大学技術部	H27.6.18～6.20	第 10 回自然科学研究機構技術研究会発表及び電子回路技術研修
田中　高紀	大阪大学産業科学研究所総合解析センター	H27.8.6 ～ 8.7	技術職員の研修企画の手法について
岡田　則夫	国立天文台	H27.12.4	超精密加工技術研修
中村　昇太	スタジオミダス（株）	H28.3.30～3.31	技術課セミナー「3D プリンタ造形技術の基礎と応用」
川上　　勝	山形大学	H28.3.30～3.31	技術課セミナー「3D プリンタ造形技術の基礎と応用」
千賀　淳哉	（株）デザインココ	H28.3.30～3.31	技術課セミナー「3D プリンタ造形技術の基礎と応用」

4-1-3　人　事

技術職員人事は, 法人化されてからは, 広く人材を確保するために, 国立大学法人等採用試験や公募採用も取り入れ, 即戦力，より高度な専門技術を持つ人材の採用を行ってきた。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。雇い入れ時の安全衛生教育は年度初旬に定例として行うほか，講習テキストと講習会 DVD を用意し, 年度途中の採用者に対しても, 随時安全衛生教育が可能となるよう配慮している。

また長期滞在する外国人研究者に対しては，英文の安全衛生講習会テキストならびに英語版講習会 DVD を作成し，これらの教材を用いた安全衛生教育を行っている。安全衛生に必要な情報は，安全衛生管理室の WEB ページ（http://info.ims.ac.jp/safety/）にまとめて掲載しており，必要な規則や書式に即座にアクセス可能である。また，安全衛生管理室員全員のメールアドレスが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 27 年度には試薬管理システムを内閣サイバーセキュリティーセンターが定める「リスク評価の対象とする業務領域」に該当するものと認識し，その基礎資料を作成した。

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。

第18回：「生き物たちの驚きの能力に迫る」，学術総合センター一橋記念講堂，2015年3月22日。

第19回：「宇宙から脳まで　自然科学研究の“ビッグバン”―コンピューターが切り開く自然科学の未来―」，名古屋大学豊田講堂，2015年9月15日。

第20回：「生命の起源と進化～地球から系外水惑星へ～」，学術総合センター一橋記念講堂，2016年3月13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「分子研リポート 2006」を参照)。第７回では, 加藤晃一教授が自らの体験に基づいて「研究の醍醐味とは何か」を伝える講演を行った。第 11 回では，大峯巖所長が「水の揺らめきの世界；揺らぎと反応と生命」というタイトルで講演を行った。第 14 回は, 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きている。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」, 2015 年 11 月 29 日にはアキバ･スクエアにて第６回「研究者に会いに行こう！—大学共同利用機関博覧会—」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ーによるシミュレーション CG（第３回, 第４回, 第５回, 第６回), および各種の大型分子模型（第４回，第５回，第６回)，研究者トーク（第６回）等を通じて研究活動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うけ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
105	2015. 5.14	野菜がおいしくビタミンも増加 ——LED が拓く近未来の植物工場	吉田　淳一 （千歳科学技術大学特任教授）
106	2015.10.17	宇宙の光で見えない分子を探る	繁政　英治 （分子科学研究所准教授）
107	2015.10.17	「はやぶさ」１号２号が拓く宇宙探査	國中　　均 （宇宙航空研究開発機構（JAXA） 宇宙探査イノベーションハブハブ長）
108	2016. 2. 5	生物活性分子の新しい世界	上杉　志成 （京都大学教授）

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ーンストーミングの様な場を提供できることを目指している。コロキウム終了後には飲み物を片手にリラックスした雰囲気で更に議論を掘り下げるような懇談会も毎回開催している。

以下は 2015 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
868	2015. 4. 1	Biosensing with a Twist: Detection and Characterization of Biomaterials with Sculpted EM Fields	Prof. Malcolm Kadodwala （Glasgow University）
869	2015. 4. 8	Combining Ultrafast Optical and Core-Level Spectroscopies for the Study of Chemical Dynamics	Prof. Majed Chergui （Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne）
870	2015. 5.25	Mapping Atomic Motions with Ultrabright Electrons: The Chemists' Gedanken Experiment Enters the Lab Frame	Prof. R. J. Dwayne Miller （Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter/University of Toronto）
871	2015. 6.19	機能性分子を自在に操る時代を目指して：局在電子系の物理 Toward Holding the Molecular Functionality: Physics on Localized Electron System	解良　　聡 （分子科学研究所教授）
872	2015. 9.18	マイクロ流体デバイス技術の創薬・医療応用 Microfluidic Devices for Pharmaceutical/ Medical Applications	竹内　昌治 （東京大学生産技術研究所教授）

873	2015.10. 5	The Science of Peer-Review	Dr. Iulia Georgescu （Senior Editor, Nature Physics）
874	2015.10. 8	Photosynthetic Light Harvesting from Individual Complexes to the Grana Membrane	Prof. Graham R. Fleming （University of California, Berkeley）
875	2015.10.16	スピン流の物理と応用 Physics and Application of Spin Current	齊藤　英治 （東北大学金属材料研究所教授）
876*	2015.11. 6	The Mystery of Water; X-Rays Provide Unique Insights	Prof. Anders Nilsson （Stockholm University）
877	2015.11.17	Optical Control of Atomic Interactions at Nano-Kelvin Temperatures	Prof. Cheng Chin （University of Chicago）
878	2015.11.18	Quantum Localization in Laser-Driven Molecular Rotation	Prof. Ilya Sh. Averbukh （Weizmann Institute of Science）
879	2015.11.20	Path from Microscopics to Phenomenological Theories: Examples from Physical Chemistry and Condensed Matter Physics	Prof. Biman Bagchi （Indian Institute of Science）
880	2015.11.20	Computer Simulation Study of Carbon-Based Supercapacitors with an Ionic Liquid Electrolyte	Prof. Hyung Kim （Carnegie Mellon University）
881	2016. 1.15	迅速合成触媒が拓く生命機能分子・ナノ炭素分子のサイエンス	伊丹健一郎 （名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所教授）
882	2016. 1.28	Molecular Quantum Gas—a New Frontier for Quantum Physics and Chemistry	Prof. Jun Ye （University of Colorado/NIST）
883	2016. 2.19	Technology and Applications of High-Power Femtosecond Longwave Lasers	Prof. Andrius Baltuška （Vienna University of Technology）
884	2016. 3. 1	Implementation of the Quantum Ising Model in Large Arrays of Individual Rydberg Atoms	Dr. Antoine Browaeys （Institut d’Optique, CNRS）
885	2016. 3. 1	Hot Rydberg Atoms	Prof. Robert Löw （University of Stuttgart）
886	2016. 3. 3	The Chirality Induced Spin Selectivity (CISS) Effect—From Spintronics to Electron Transfer in Biology	Prof. Ron Naaman （Weizmann Institute of Science）
887	2016. 3.30	Electronic Excited State Relaxation in Complex Systems: Two Stories of Harmony between Theory and Experiment	Prof. Peter Rossky （Rice University）

＊森野レクチャーならびに UVSOR シンポジウムとの共同開催

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	物の性質は何できまるか
1987 年度	齋藤　一夫	生活を変える新材料
1988 年度	井口　洋夫	分子の世界
1991 年度	吉原經太郎	光とくらし
1994 年度	伊藤　光男	分子の動き
1997 年度	齋藤　修二	分子で宇宙を見る
2000 年度	茅　　幸二	原子・分子から生命体までの科学
2003 年度	北川　禎三	からだで活躍する金属イオン
2006 年度	中村　宏樹	分子の科学，独創性，そして東洋哲学
2009 年度	平田　文男	生命活動における『水』の働き
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，協議会の会員である市内の中小企業との交流会を平成 19 年度に開催し，この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。また岡崎商工会議所主催で隔年開催される「岡崎ものづくりフェア」へ大学・研究機関として展示ブースを設けて参加している。これらは主に技術課の機器開発班と電子機器開発班が中心となり，地域の民間企業からの施設利用やナノプラットフォーム事業の利用促進の広報として貢献している。

(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きている。岡崎市内の高等学校には，文部科学省に応募して採択されたスーパーサイエンスハイスクール（以下 SSH と略す）研究指定校，愛知県教育委員会より指定を受けた愛知スーパーハイスクール研究校，さらに，科学技術振興機構（JST）のサイエンスパートナーシッププロジェクト（SPP）に応募して採択された SPP 実施校など，理科教育の充実を目指して独自の取り組みを行っているところも多い。分子研は，岡崎の 3 研究所で連携しつつ，もしくは単独で，これらの高校の活動に協力している。一方，小中学校を対象とした事業としては，出前授業・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），第 7 回（2015 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	シンクロトロン放射とは （加速器・分光器・測定器の見学）	渡邊　　誠　助教授 春日　俊夫　助教授
6	1986.10. 4	人類は元素をいかに利用してきたか	齋藤　一夫　教　授
9	1987. 6.13	レーザーの応用について	吉原經太郎　教　授
12	1987. 9.26	コンピュータで探る分子の世界	柏木　　浩　助教授
15	1988. 7. 2	目で見る低温実験・発光現象と光酸化現象	木村　克美　教　授
18	1988.10.29	人工光合成とは何か	坂田　忠良　助教授
21	1989. 6.24	星間分子と水――生命を育む分子環境――	西　　信之　助教授
24	1989.10.21	常温での超伝導は実現できるか	那須奎一郎　助教授
27	1990. 6.23	目で見る結晶の生成と溶解 ――計算機による実験（ビデオ）――	大瀧　仁志　教　授
30	1990.10.20	電気と化学	井口　洋夫　所　長
33	1991. 6.22	自己秩序形成の分子科学 ――分子はどのようにしてリズムやパターンを作り出すか――	花崎　一郎　教　授
37	1991.12.14	からだと酸素，そしてエネルギー：その分子科学	北川　禎三　教　授
39	1992. 7. 7	サッカーボール分子の世界	加藤　立久　助教授
42	1992.11.13	炭酸ガスの化学的な利用法	田中　晃二　教　授
45	1993. 6.22	化学反応はどのように進むか？	正畠　宏祐　助教授
48	1993.10. 1	宇宙にひろがる分子の世界	齋藤　修二　教　授
51	1994. 6.21	分子の動き	伊藤　光男　所　長
54	1995. 6.20	生体内で活躍する鉄イオン――国境なき科学の世界――	渡辺　芳人　教　授
57	1996. 6.28	分子を積み上げて超伝導体を作る話	小林　速男　教　授
60	1997. 6.13	生体系と水の分子科学	平田　文男　教　授
63	1998. 6.12	電子シンクロトロン放射光による半導体の超微細加工 ――ナノプロセスとナノ化学――（UVSOR 見学）	宇理須恆雄　教　授
66	1999. 6. 8	レーザー光で，何が見える？　何ができる？	猿倉　信彦　助教授
69	2000. 6. 6	マイクロチップレーザーの可能性	平等　拓範　助教授
72	2001. 6. 5	ナノメートルの世界を創る・視る	夛田　博一　助教授
75	2002. 6. 4	クラスターの科学――原子・分子集団が織りなす機能――	佃　　達哉　助教授
78	2003. 6.24	科学のフロンティア――ナノサイエンスで何ができるか？	小川　琢治　教　授
81	2004. 6.22	生命をささえる分子の世界――金属酵素のしくみを探る	藤井　　浩　助教授
84	2005. 6.28	環境に優しい理想の化学合成	魚住　泰広　教　授
87	2006. 6.20	電気を流す分子性結晶の話	小林　速男　教　授
90	2007. 6.15	光で探る生体分子の形と機能	小澤　岳昌　准教授

93	2008. 6.17	宇宙の光を地上で作る――シンクロトロン光源――	加藤　政博　教　授
96	2009. 6. 9	化学結合をいかに教えるか	平本　昌宏　教　授
101	2010.11. 9	生命の営みと「水」 ――化学・物理の理論とコンピュータで探る分子スケールの生命現象――	平田　文男　教　授
104	2011.11. 1	原子のさざ波と不思議な量子の世界	大森　賢治　教　授
105	2012. 6. 5	電気はどうして流れるのか	中村　敏和　准教授
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
115	2015.11.10	タンパク質で出来たナノサイズの機械が動く仕組みを探る	飯野　亮太　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	計算機シュミレーションで見る原子・分子の世界	伊藤　　暁　助　　教
常磐中	2011.10.19	光の不思議	寺内かえで　技術職員
六ツ美中	2012. 1.17	魔法の物質「触媒」ってなんだろう？	唯　美津木　准 教 授
竜南中	2012. 1.27	分子と光の秘密	平本　昌宏　教　授
矢作北中	2012. 2.14	目で見えないものを見る光	岡本　裕巳　教　授
額田中	2012. 6.21	植物から学ぶ人工光合成	正岡　重行　准 教 授
岩津中	2012. 6.29	魔法の物質「触媒」ってなんだろう？	唯　美津木　准 教 授
甲山中	2012. 7.11	分子と光の秘密	平本　昌宏　教　授
竜南中	2012.10.19	計算機シミュレーションで見る原子・分子の世界	伊藤　　暁　助　　教
矢作中	2012.11. 8	光と分子	長坂　将成　助　　教

城北中	2013. 2.12	小さすぎる世界を覗いてみよう	鹿野　豊　特任准教授
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
岩津中	2015. 7.16	生き物の「分子」と「進化」	塚本　寿夫　助　教
新香山中	2015.10.28	分子に光があたると何がおこるのか？	飯田　健二　助　教
翔南中	2015.11.11	キラル分子と私たち～キラル分子の建築家を目指して～	椴山　儀恵　准教授
福岡中	2015.11.12	分子の光と秘密	平本　昌宏　教　授
甲山中	2015.11.30	シミュレーションで見る生物とタンパク質	森　俊文　助　教
矢作北中	2015.12. 4	タンパク質～生命の営みを支える分子～	向山　厚　助　教
城北中	2016. 2.12	タンパク質の奏でる生体リズム～生物はどのようにして時間をはかるのか？～	秋山　修志　教　授

岡崎市立小豆坂小学校（親子おもしろ科学教室）

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

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，岡崎市立常磐中学校，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
2015	4	8	岡崎市立翔南中学校，岡崎市立竜海中学校，岡崎市立東海中学校，岡崎市立竜南中学校

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，来場者に体験頂いた。2012 および 2015 年には，水分子のシミュレーションに関する展示を行った。３次元映像を通して計算機中の水分子と対話できる本展示は老若男女を問わず大変好評であり，分子科学研究所の研究活動や後日開催の一般公開の宣伝として大変役立った。

(2)　未来の科学者賞

岡崎３機関では，2009 年度より理科教育並びに科学の将来の発展に資することを目的とし，豊かな発想や地道な努力の積重ねなど特色のある自由研究を行った児童又は生徒を褒賞するため，岡崎市小中学校理科作品展に出展された自由研究課題の中から，岡崎３機関の各研究所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行っており，分子科学研究所においては，2012 年 10 月 20 日の一般公開日に，選考委員会により選出された小学生８名，中学生２名の計 10 名，2015 年 10

月 17 日の一般公開日に, 選考委員会により選出された小学生 7 名, 中学生 4 名の計 11 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。 2015 年度は， 9 月に同校の式方式により表彰を行った。

4-5　一般公開

科学の楽しさや奥深さ―それらの体感（験）を通じて分子科学研究所をより身近に感じて頂くため，３年に１度の頻度で一般公開を実施している（岡崎３研究所での輪番公開）。2015 年は分子研の公開の年（第 14 回）にあたり,「学びと発見！　ちいさな分子が未来をつくる」をテーマに 10 月 17 日（土）に開催された。

見学者の利便性を考慮して，会場を「計算機センター１階」「実験棟」「南実験棟３階」「UVSOR」「岡崎コンファレンスセンター」の５ヶ所とした。体験型の展示は実験棟４階および南実験棟３階に集中配置し，入場者の動線を考慮しつつ，随所に見学用の展示を散在させた（スパコン，UVSOR，NMR 等）。市民公開講座（分子科学フォーラム特別版）では,所内より繁政英治先生に, また宇宙航空研究開発機構より國中均先生にご講演頂いた。第 13 回（2012 年）にならってタッチラリーを導入し，入場者数や見学者の現在位置などをリアルタイムで追跡した。多方面にわたる緻密な広報活動の甲斐もあって，今回，総来場者数は 2,600 名強にまで回復した。「おかざえもん」が応援に駆けつけた会場は活気に満ち溢れ，その様子は複数のメディア（東海愛知新聞，ミクスネットワーク株式会社，株式会社 CBC テレビ）の取材を受け，一部取り上げられた。



東海愛知新聞 2015. 10. 18(日) 1面

分子研が一般公開

岡崎 装置見学やCGで体感

岡崎市明大寺町の自然科学研究機構分子科学研究所で十七日、研究施設内や研究内容を一般公開するイベントが開かれた。同機構では、隣接の生物学、分子科学の三研究所が持ち回りで一般公開を実施。今年は分子研の研究者らが、同研究所と岡崎コンファレンスセンターを会場に企画した。研究所内の各棟では幅広い分野の研究内容について研究員や農示による紹介が行われ、研究に利用されている極端紫外光研究施設や核磁気共鳴装置といった先端研究設備も公開された。体験コーナーもあり、来場者は三次元コンピューターグラフィックスで表現した分子の世界を体感したり、電磁誘導や超伝導を通して電気が流れる仕組みを学んだりした。ほかに、岡崎コンファレンスセンターでは同研究所の繁政英治准教授や宇宙航空研究開発機構の國中均さんによる特別講演も。さらにオカザえもんも会場に駆けつけた。



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
第 14 回	2015.10.17 (Sat)	入場者　2600 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	山梨県立日川高等学校 愛知県立岩津高等学校　ほか
2015	14	203	ライオン株式会社，星城高等学校，愛知教育大学，立命館高等学校，東海大付属高輪台高等学校，浜松南高等学校，松阪高等学校，山梨県立日川高等学校，核融合科学研究所土岐市プラズマ研究会，豊田西高等学校，静岡県立榛原高等学校，わかやま産業振興財団，中部経済産業局，市邨高等学校，多摩六都科学館，愛知県産業科学技術課

（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
2015	1	2

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ニクス連携事業（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ニクス連携事業は 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ニクス連携事業（レーザー分子科学）に関連するものとして，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。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が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・電顕相関３次元イメージング―」など）。これが上述の提案に代わるものとして，「イメージング・サイエンス」に係る具体的な機構内連携研究を推進した。平成20年度には，岡崎統合バイオサイエンスセンター（生理研）の永山教授（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，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を呼び，全国から多くの先端研究者が自ずから集う先端ナノテク分子・物質合成拠点を形成し，支援者と利用者双方の若手を育成できる環境を構築することを目標にしている。

表 1 には平成 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），スピンコーター（ミカサ社製 MS-A100）］	山本浩史室長 鈴井光一課長 青山正樹技術職員 高田紀子技術職員 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 鈴井光一課長 青山正樹技術職員 近藤聖彦技術職員	装置開発室 技術課 装置開発室 装置開発室
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 XFlash6|10。表面凹凸の影ができにくく高感度な EDS 検出器を搭載。温度を –20 〜 50℃程度で変えられるステージも利用可能。 ［日立ハイテクノロジー社製 SU6600（ショットキー型電子銃, 空間分解能 1.2 nm (30 kV)，3.0 nm (1 kV)），低真空機能 EDS（BrukerAXS 社製 FQ5060/XFlash6）］	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 ［MoKα，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	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, RhKα	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-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)］	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（± 7 T，2–400 K，300–800 K，DC)，QuantumuDesign 社製 MPMS-XL7（± 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 ［≥ 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の高感度・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　川椙　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研究センター　太田　仁
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-$(BEDT\text{-}TTF)_2I_3$ 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研究機構　佐藤　宗太
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究科　鵜飼　光子

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	冨田　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
インドールプ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
Spirulina platensis 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プ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反応阻害機構の解析	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ビ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
新規ポリオキソメタレート錯体の電気化学的酸化還元反応メカニズムの解析	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	ESR E680	名古屋大学理学研究科	三野　広幸
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	SQUID-XL7	愛媛大学大学院理工学研究科	白旗　　崇
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	920NMR 800NMR 600NMR 固体 iTC200	名古屋市立大学大学院薬学研究科	矢木　宏和
ドープ型 $BiFeO_3$ 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	九州大学先導物質化学研究所	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_2FeAl 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	TEM	東京理科大学理学部	根岸　雄一
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	SQUID-MS7 SQUID-XL7 熱分析 VP-DSC iTC200	核融合科学研究所	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	TEM	名城大学理工学部	小澤　理樹
新規ナノ磁性体およびマルチフェロイックスの磁気物性	ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	広島大学大学院理学研究科	井上　克也
BNC 薄膜のスピントロニックス	SQUID-XL7	静岡大学工学部	小林健吉郎
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-MS7 SQUID-XL7 CCD-1 CCD-2 CCD-3	岐阜大学教育学部	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気的相互作用の研究	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	上椙　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) 錯体の磁気的性質	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気的性質の研究	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
有機ビラジカルドープ試料の 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ーチング機構の詳細解明	UVSOR(STXM)	静岡県立大学環境科学研究所	光延　　聖
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	上椙　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	薮田ひかる
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	上椙　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	薮田ひかる
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 $CH_3NH_3PbI_3$/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 $Ce_2Zr_2O_x$ 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	冨田　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
	代表者：中井　浩巳（早大先進理工）
	機能性分子設計−光機能分子と非線形外場応答分子の光物性
	代表者：江原　正博（分子研）
第４部会	太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算
	代表者：山下　晃一（東大院工）
	バイオマス利用のための酵素反応解析
	代表者：吉田　紀生（九大高理）

図２　TCCI で支援する特別支援課題

5-6-2　TCCI の活動について

(1)　推進体制について

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

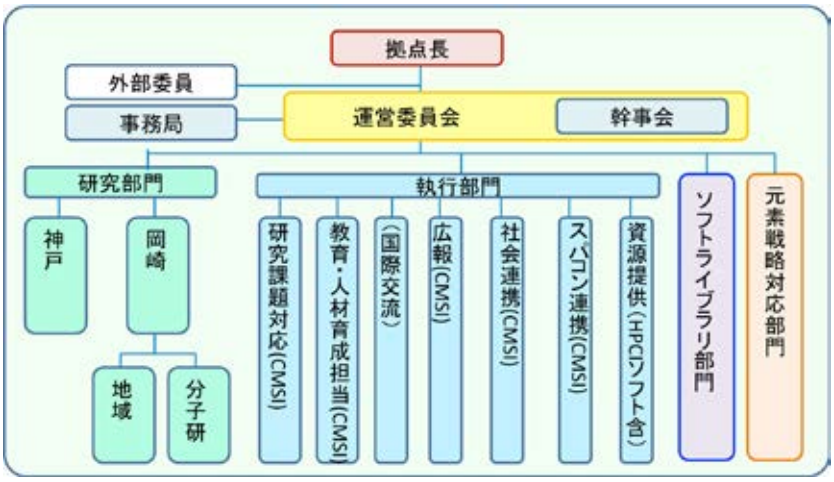


図 3　計算分子科学研究拠点（TCCI）体制

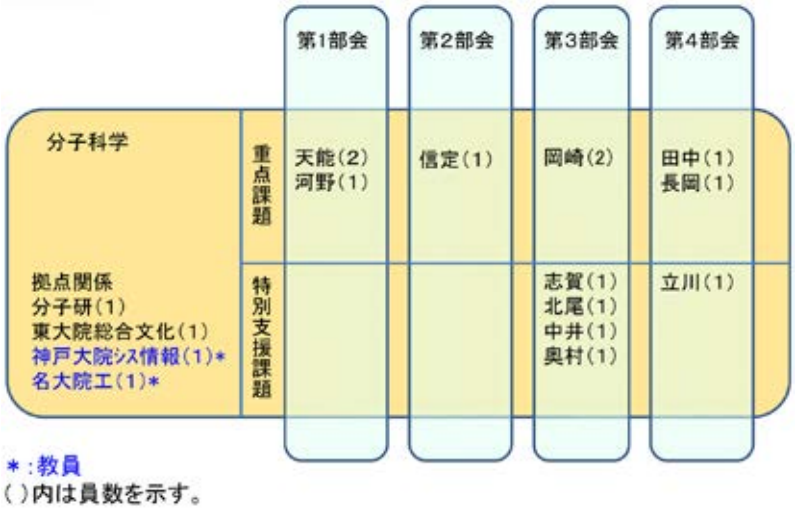


図 4　CMSI 研究員・教員配置

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

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６－１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 －基礎から応用まで－	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 －基礎から応用まで－	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 －基礎から応用まで－	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 －基礎から応用まで－	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 －基礎から応用まで－	**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）	自然科学研究機構　岡崎コンファレンスセンター（岡崎市）
	講師5名、参加者44名（内、民間企業5名）	
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）	自然科学研究機構　岡崎コンファレンスセンター（岡崎市）
	講師5名、参加者52名（内、民間企業0名）	
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）	自然科学研究機構　岡崎コンファレンスセンター（岡崎市）
	講師5名、参加者45名（内、民間企業7名）	
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）	自然科学研究機構　岡崎コンファレンスセンター（岡崎市）
	講師5名、参加者数42名(内、民間企業2名）	
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）**	**自然科学研究機構　岡崎コンファレンスセンター（岡崎市）**
	講師5名、参加者数61名(内、民間企業4名）	

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）	東大駒場ファカルティハウス（目黒区）
	参加者61名（内、民間企業11名）	
2nd International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Molecular Science	2013年1月28日（月）	早稲田大学理工学部（新宿区）
	参加者51名（内、民間企業5名）	
3rd International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Molecular Science	2014年2月4日（火）	東大山上会館（文京区）
	参加者35名（内、民間企業4名）	
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）	東大工学部6号館64講義室（文京区）
	参加者42名（内、民間企業4名）	
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）**	**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）**
	参加者36名（内、民間企業0名）	

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）野村昴太郎、大学院生	2014年5月31日～6月8日	ブダペスト工科経済大学（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**

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７－１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。

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% の提供して，研究推進に貢献してきた。

④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。

⑤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さん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，何等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⑤「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⑤について紹介する。

5-7-2　重点課題⑤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 CO_2 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，CO_2，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 CO_2 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。ハイドレートの有効利用，高効率触媒の開発，CO_2 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)　基盤アプリの設計開発

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⑤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。

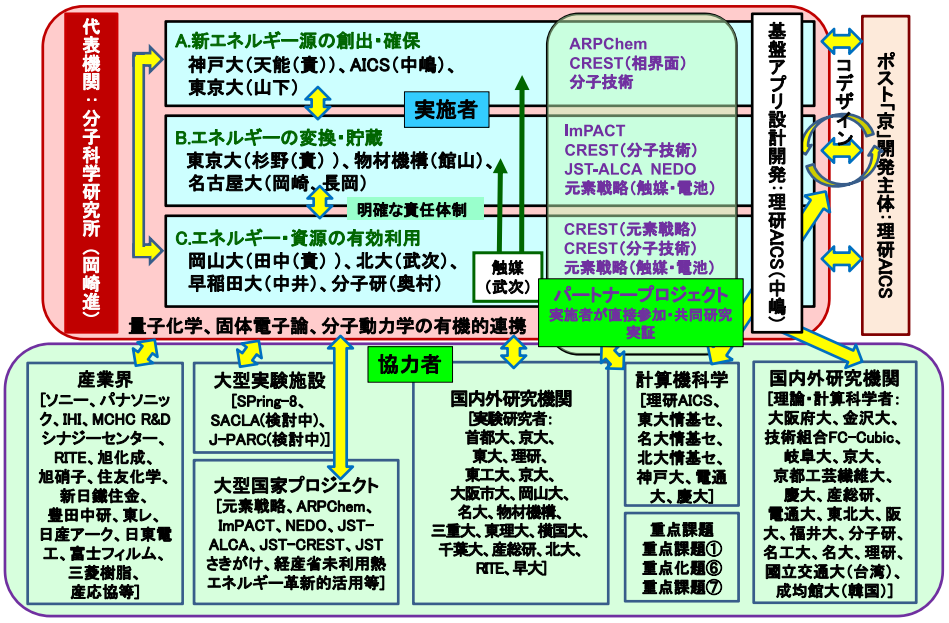


図１　実施体制

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お願いします。

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 厚の大口径擬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，供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ものと考えられる。

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的プロジェクトである。とくに平成 24 年度からは東アジアとの学術交流は，国内研究機関との学術交流や共同利用と比較して時間的にも予算的にも大きな差異がないことから，東アジア地域との学術交流・研究会開催は原則として通常の共同利用における研究会申請において取り扱うこととし，発展的に取り扱われつつある。

平成 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，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 $CH_3NH_3PbI_3$/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 27 年度は昨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

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
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
2014.9. ～ 2015.8.	2015	193	40

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) 生体分子における構造変化動力学に関する理論研究

b) 時計タンパク質 KaiC の概日リズムの分子機構に関する理論研究

c) 光合成細菌における励起エネルギー移動に関する理論研究

d) 過冷却水に関する理論研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 近年，超高速分子動力学シミュレーション専用機 ANTON により，ミリ秒スケールのトラジェクトリデータの計算が可能になった。そこで, 我々は, 運動の時間スケールの違いにより構造変化の基底を構築する方法を提案するとともに, それにより抽出された遅い（幾つかの）運動を反応座標として構造変化（folding/unfolding）の自由エネルギー面を描くとともに，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，多様な構造変化経路およびその速度論を明らかにした。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) シアノバクテリアの概日リズムは３つのタンパク質により制御されており，その中でも，とくに時計タンパク質 KaiC が重要であることが知られている。さらに，秋山らによる実験から，KaiC の C1 リングの ATP 加水分解反応が概日リズムの周期と強い相関があることも明らかにされた。KaiC の ATP 加水分解はモノマーあたり１日に約 11 個しか分解されず，モータータンパク質に比べ極めて遅い反応であるが，その反応は安定に維持されている。さらに，秋山らによる構造解析の結果から, ATP 加水分解の前後で C1 リングの主鎖の *cis–trans* 異性化, ATP 近傍の水の配置がモータータンパク質とは異なることが明らかにされた。そこで，秋山グループとともに，KaiC の ATP 加水分解反応の詳細の解析を行った。

c) 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については未だに明らかにされていない。我々は, Fenna-Matthews-Olson（FMO）タンパク中を例として各色素のエネルギー準位やその揺らぎを解明するため方法論の開発を進めている。その結果，FMO タンパク中の色素のエネルギー準位が如何に決まっているのかを初めて明らかにした。さらに，各色素の構造やタンパク質や水など色素周辺の環境により励起エネルギーが如何に揺らいでいるのかについても明らかにした。

d) 水の熱力学的異常性は，温度低下とくに融点以下で，急激に増す。等圧熱容量および複素熱容量の温度依存性の理論解析から, 約 220 K で水が fragile–strong 転移を示すことを明らかにした。より低い温度の過冷却水の構造･熱力学･

動力学的性質を解析し，室温の液体状態から見られるパーコレートした高密度液体（HDL）が 220 K 以下で細分化され，さらに 195 K 以下で減少，小型化するとともに，低密度液体（LDL）が主成分となりパーコレートすることを明らかにし，約 195 K 以下での HDL のクラスター数およびクラスターサイズの減少によりダイナミクスが遅延化することによる新たな動的転移が存在することを見出した。また，約 195 K 以下では，LDL と HDL の転移が遅くなり動的不均一性も抑制されることも明らかにした。また，約 195 K 以下の過冷却水は基本的に LDL による一成分系とみなすことができるため，その温度以下の過冷却水の密度は，通常の液体のように温度低下とともに増加することも示した。

B-1) 学術論文

T. MORI and S. SAITO, “Dynamic Heterogeneity in the Folding/Unfolding Transitions of FiP35,” *J. Chem. Phys.* **142**, 135101 (7 pages) (2015).

J. ONO, S. TAKADA and S. SAITO, “Couplings between Hierarchical Conformational Dynamics from Multi-Time Correlation Functions and Two-Dimensional Lifetime Spectra: Application to Adenylate Kinase,” *J. Chem. Phys. (Special Topic: Multidimensional Spectroscopy*) **142**, 212404 (13 pages) (2015).

J. ABE, T. HIYAMA, A. MUKAIYAMA, S. SON, T. MORI, S. SAITO, M. OSAKO, J. WOLANIN, E. YAMASHITA, T. KONDO and S. AKIYAMA, “Atomic-Scale Origins of Slowness in the Cyanobacterial Circadian Clock,” *Science* **349**, 312–316 (2015).

S. IMOTO, S. S. XANTHEAS and S. SAITO, “Ultrafast Dynamics of Liquid Water: Energy Relaxation and Transfer Processes of the OH Stretch and the HOH Bend,” *J. Phys. Chem. B* **119**, 11068–11078 (2015).

B-4) 招待講演

S. SAITO, “Hydrogen Bond Network Dynamics in Supercooled Water,” International 6th THz-Bio Workshop 2015, Seoul (Korea), April 2015.

S. SAITO, “Couplings between Multi-Scale Conformational Fluctuations: Towards Understanding of Emergence of Function of Biomolecule,” Workshop of Theoretical Chemistry, Sungyunkwan University, Swon (Korea), April 2015, cancelled due to schedule conflict.

S. SAITO, “Couplings between Multi-Timescale Conformational Fluctuations,” Korea-Japan Symposium on Molecular Science, Busan (Korea), July 2015, cancelled due to MERS.

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, 2016–).

日中韓理論化学ワークショップ幹事 (2013–).

学会の組織委員等

4th International Conference on Coherent Multidimensional Spectroscopy, Local Organizing Committee (2008).

International Symposium on Reaction Dynamics of Many-Body Chemical Systems, Chair (2009).

12th Japan-Korea Joint Symposium on Molecular Science, Local Organizing Committee (2009).

7th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, Local Organizing Committee (2011).

13th Korea-Japan Joint Symposium on Molecular Science, Co-Chair (2011).

Time Resolved Vibrational Spectroscopy 2013, Local Organizing Committee (2013).

IMS Workshop on “Hierarchical Molecular Dynamics: From Ultrafast Spectroscopy to Single Molecule Measurements,” Chair (2013).

14th Japan-Korea Joint Symposium on Molecular Science, Chair (2013).

1st China-Japan-Korea Tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry, Organizing Committee (2013).

15th Korea-Japan Joint Symposium on Molecular Science, Co-Chair (2015).

2nd China-Japan-Korea Tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry, Co-Chair, Organizing Committee (2015).

Asia Academic Seminar 2015, Organizing Committee (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

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2015).

情報学研究所運営委員会委員 (2010–).

東北大学金属研究所計算材料科学センター 運営委員会委員 (2015–).

核融合科学研究所外部評価委員会数値実験炉研究プロジェクト専門部会国内専門委員 (2012, 2015).

その他

High Performance Computing infrastructure（HPCI）コンソーシアム運営委員会委員 (2013–).

計算科学イニシアティブ（CMSI）第一部会メンバー (2012–).

計算科学イニシアティブ（CMSI）スパコン連携小委員会委員 (2012–).

計算物質科学人材育成コンソーシアム次世代研究者育成委員会委員 (2015–).

ポスト「京」重点課題⑤運営委員会委員 (2015–).

計算物質科学スパコン共用事業運営委員会委員 (2015–).

計算科学研究機構人材育成タスクフォースWG 委員 (2015–).

計算基礎科学ネットワーク拠点分子科学分野委員 (2012–).

National Research Foundation of Korea 審査員 (2015).

自然科学研究機構研究連携委員会委員 (2012–).

自然科学研究機構国際連携委員会委員 (2012–).

自然科学研究機構新分野創生センターイメージングサイエンス研究分野併任 (2012–).

総合研究大学院大学教育研究委員会委員 (2015).

総合研究大学院大学インターンシップ制度検討分科会委員 (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,「生体分子シミュレーション入門」, 2015年 12月10日–11日.

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(B),「タンパク質の動的構造と機能発現ダイナミクスの分子論的解明」, 森　俊文 (2015年度–2018年度).

科研費研究活動スタート支援,「天然変性タンパク質の動的構造と機能発現機構の分子論的解明」, 森 俊文 (2014年度).

科研費基盤研究(B),「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ッ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),「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ックス理論の構築」, 斉藤真司 (2006年度–2009年度).

科研費基盤研究(B),「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，タンパク質の動的理解は未だに十分に進んでいない。そこで，タンパク質の構造変化を凝縮系反応とみなし，タンパク質の構造変化が如何に起こるのかに挑む。また，生体分子の機能発現解明に関する解析を進める。その一つとして，時計タンパク質KaiC の概日リズムの解明に挑む。そのために，KaiC におけるATP の加水分解と構造揺らぎ・変化が如何に共役しているのか，C1 およびC2 リングにおける反応および構造変化などを解析し，最終的に，秋山教授らとともに，システムとしての概日リズムの分子機構の理解を目指す。二つ目の課題として，Fenna-Matthews-Olson タンパク質における高効率な励起エネルギー移動の分子論的解明を目指す。また，三つ目の課題として，ポリセオナミドB（pTB）の膜内挿入・イオン透過機構の解析を行い，イオンチャネルにおけるイオン透過に関する包括的理解の獲得とともに，イオン一チャネル系を単純な化学反応系とみなし，凝縮系化学反応に関する基本的理解の解析を行う。これらの生体分子に関する理論研究に加え，過冷却水の動力学，とくにガラス化が如何に進むのか，その際に運動がどのように変化していくのかなどに関する理論研究に挑む。

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開発と光・電子機能物質の理論設計

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) 実験技術の飛躍的な進展の結果，最近では，極めて精密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局所ナノ領域での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・電子機能が発現することが期待できる。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）を開発してきた。ナノ構造体の光励起の結果生成する近接場光には，電場の２次の高調波成分が含まれていることを理論的に導き，この近接場光を用いると容易にナノ構造体の２光子励起過程を誘起できることを明らかにした。また，理化学研究所スーパーコンピュータ「京」を使い，実在系物質の光励起電子ダイナミクスとしては，世界最大規模の計算を進めた。

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ミ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，誘電体表面と吸着物質から成るヘテロ界面系を対象として，その光応答の誘電率依存性を明らかにした。

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（カー・パリネロ）分子動力学計算を用いて，固体表面担持金属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。本年度は，グラフェン上の金クラスター及びその一部を安価な銅原子に代替した担持金属クラスターの CO 酸化触媒反応メカニズムの解明を行った。触媒反応は Langmuir-Hinshelwood 型反応で進行することを明らかにし，金原子を代替した銅原子は，触媒活性サイトとして機能する事も見出した。

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。過去の研究でしばしば指摘されている金 25 量体とは異なる新規構造を実験グループが見出し，その理論解析を我々のグループが行った。

B-1) 学術論文

M. YAMAGUCHI, K. NOBUSADA and T. YATSUI, “Nonlinear Optical Response Induced by a Second-Harmonic Electric-Field Component Concomitant with Optical Near-Field Excitation,” *Phys. Rev. A* **92**, 043809 (9 pages) (2015).

C. ZENG, Y. CHEN, C. LIU, K. NOBUSADA, N. L. ROSI and R. JIN, “Gold Tetrahedra Coil Up: Kekulé-Like and Double Helical Superstructures,” *Sci. Adv.* **1**, e1500425 (6 pages) (2015).

C. LIU, T. LI, G. LI, K. NOBUSADA, C. ZENG, G. PANG, N. L. ROSI and R. JIN, “Observation of Body-Centered Cubic Gold Nanocluster,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **54**, 9826–9829 (2015).

K. KOIZUMI, K. NOBUSADA and M. BOERO, “Reaction Pathway and Free Energy Landscape of Catalytic Oxidation of Carbon Monoxide Operated by a Novel Supported Gold–Copper Alloy Cluster,” *J. Phys. Chem. C* **119**, 15421–15427 (2015).

K. IIDA, M. NODA and K. NOBUSADA, “Control of Optical Response of a Supported Cluster on Different Dielectric Substrates,” *J. Chem. Phys.* **142**, 214702 (9 pages) (2015).

M. YAMAGUCHI, K. NOBUSADA, T. KAWAZOE and T. YATSUI, “Two-Photon Absorption Induced by Electric Field Gradient of Optical Near-Field and Its Application to Photolithography,” *Appl. Phys. Lett.* **106**, 191103 (5 pages) (2015).

S. SHARMA, W. KURASHIGE, K. NOBUSADA and Y. NEGISHI, “Effect of Trimetallization in Thiolate-Protected $Au_{24-n}Cu_nPd$ Clusters,” *Nanoscale* **7**, 10606–10612 (2015).

A. DAS, C. LIU, H. Y. BYUN, K. NOBUSADA, S. ZHAO, N. L. ROSI and R. JIN, “Structure Determination of $Au_{18}(SR)_{14}$,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **54**, 3140–3144 (2015).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. NODA, K. ISHIMURA and K. NOBUSADA, “Program Package of Photoinduced Electron Dynamics: GCEED (Grid-Based Coupled Electron and Electromagnetic field Dynamics),” *JPS Conf. Proc.* **5**, 011010 (7 pages) (2015).

B-4) 招待講演

K. NOBUSADA, “Interface Electronic Properties between a Gold Core and Thiolate Ligands: Effects on Absorption Spectra in $Au1_{33}(SPh\text{-}tBu)_{52}$,” International Symposium on Monolayer Protected Clusters, Yamanaka Dormitory-Naito Seminar House, Yamanashi, July 2015.

K. NOBUSADA, “Optoelectronic Functional Fields Induced by Near-Field Light Excitation,” Core-to-Core Sweden-Japan Workshop, KTH (Royal Institute of Technology), Kista (Sweden), November 2015.

K. NOBUSADA, “Near Field Excitation Dynamics in Nanostructures Contacting with Environment,” CECAM-Workshop “Open quantum systems computational methods,” The University of Hon Kong, Hong Kong (China), November 2015.

K. NOBUSADA, “Nonlinear Optical Response in Nanostructures Induced by Optical Near-Field,” International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM) 2015, Hawaii Convention Center, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

信定克幸,「近接場光励起に基づく光・電子機能性ナノ物質の理論設計」,日本物理学会第７０回年次大会, 領域 11・領域 3・領域 9 合同シンポジウム『京』が拓いた物性物理, 早稲田大学, 東京, 2015年 3月.

信定克幸,「光・電子異方的機能反応場を持つナノ構造体の理論設計」, 特別企画：配位シナジー：融合物質科学の新展開, 日本化学会第９５回春季年会, 日本大学理工学部船橋キャンパス, 船橋, 2015年 3月.

信定克幸,「ナノ構造体における光磁気応答」, 分子研研究会＆広島大学研究拠点形成事業「スピンキラリティを軸にした先端材料コンソーシアム」2015年度第2回トピカルミーテング「キラル磁性×光学物性研究会」, 分子科学研究所, 岡崎, 2015年6月.

信定克幸,「白金代替クラスター触媒の理論設計：触媒活性サイト導入と凝集抑制」, 触媒・電池元素戦略研究拠点第7回公開シンポジウム, 京都大学桂キャンパス, 京都, 2015年9月.

信定克幸," Optical near-field excitation in nanostructures with novel functions due to light and electron dynamical correlations, " 第2回CMRI 研究会, 仙台国際センター , 仙台, 2015年10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 (2013–2015).

その他

筑波大学計算科学研究センター共同研究委員会委員 (2015–).

ハイパフォーマンスコンピューティング研究運営委員会運営委員 (2015–).

ポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」課題実施準備委員 (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,「基礎理論化学」, 2015年7月7日–10日.

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ックスの理論と材料物性」, 信定克幸 (2006年–2010年).

科研費基盤研究(B),「近接場光励起による金属表面の局所電子ダイナミクスの理論」, 信定克幸 (2009年–2013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–2017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–2014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高い可能性を持っている。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・電子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。

柳　井　　毅（准教授）（2007 年 1 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：量子化学，理論化学，計算化学

A-2) 研究課題：

a) 密度行列繰り込み群に基づく多参照電子状態理論の開発

b) 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

c) エキシマー発光分子，フォトクロミック有機分子の光化学反応機構の理論解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 当研究グループでは，化学反応や分光特性などを高精度にモデリングする高精度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，有機機能性分子，生体反応中心などの共役分子の光化学･スピン物性，金属化合物の擬縮重電子状態などに表れる「複雑な電子状態」であり，その解明は大変興味が持たれている一方で，理論的な取り扱いはチャレンジングな問題（多参照問題）である。多参照電子状態を正しく記述するためのキーとなる物理は，原子間スケールで擬縮退した電子状態に由来する強い電子相関効果であり，この相関効果の問題の複雑さは分子サイズに対して指数関数的に複雑化し，既存の量子化学計算法ではこの現象を効率よく高精度で計算することができない。これまで，当研究室では，このような距離スケールな強い複雑な電子相関を記述するための厳密対角化法，ab initio 密度行列繰り込み群（DMRG）法の新しい実装を開発してきた。この手法を利用し，従来不可能だと思われたサイズの大規模な多参照計算を実現してきている。

b) 電子スピン共鳴法（EPR）は，電子スピンが主役となる化学や物理を解析する重要な分光法であり，金属錯体の反応性や電子的特性を理解する上で重要な情報を与える。その詳細な解析には，理論の情報が不可欠であるが，EPR で観測される物理量は，波動関数の精度を鋭敏に反映することから，精密な計算は困難であった。当グループでは最近，これらの磁気的な物理量を極めて高精度に計算する新しい電子状態理論を開発し，計算プログラムに実装した。本理論は，密度行列繰り込み群（DMRG）法に基づいており，DMRG 波動関数から物理量を評価する方法である。この理論を強い電子相関を示す開殻系分子に適用し，電子相関とスピン相関がこれらの物理量を評価する上で極めて重要であることを示し，DMRG 法の磁気分光学における有用性を実証した。さらに，重原子を含む系に対する相対論的手法や，Δg- 値を線形応答理論および擬縮重摂動理論に基づいて評価する方法の開発を行い，その性能を検証した。

c) 電子励起状態は基底状態よりも遙かに理解が難しく，超高速分光法を用いた高度な実験的解析が行われる一方で，その解釈において理論計算（第一原理計算や量子化学計算と呼ばれる）の役割は重要になっている。励起状態を精密に計算するには，複数の電子配置を基底関数としてその量子的な重ね合わせ状態として電子波動関数を表すことが求められる（多配置法）。近年広く用いられる密度汎関数理論は，単一配置法として分類され，二電子・多電子励起，それに起因する禁制状態に対して誤った記述を与える等の問題点が知られる。本研究では，DMRG 法に基づき，エキシマー発光分子やフォトクロミック化合物に対して多状態のポテンシャル曲面を高精度計算できる拡張開発を行い，それらの電子状態の解析を行っている。エキシマー発光では豊田中央研白井博士と，フォトクロミックでは筑波大重田教授と共同で研究を進めている。

B-1) 学術論文

T. YANAI, Y. KURASHIGE, W. MIZUKAMI, J. CHALUPSKÝ, T. N. LAN and M. SAITOW, "Density Matrix Renormalization Group for Ab Initio Calculations and Associated Dynamic Correlation Methods: A Review of Theory and Applications," *Int. J. Quantum Chem.* **115**, 283–299 (2015).

T. N. LAN, Y. KURASHIGE and T. YANAI, "Scalar Relativistic Calculations of Hyperfine Coupling Constants Using Ab Initio Density Matrix Renormalization Group Method in Combination with Third-Order Douglas-Kroll-Hess Transformation: Case Studies of 4d Transition Metals," *J. Chem. Theory Comput.* **11**, 73–81 (2015).

Y. ISHIKAWA, S. KIMURA, K. TAKASE, K. YAMAMOTO, Y. KURASHIGE, T. YANAI and T. MURAHASHI, "Modulation of Benzene or Naphthalene Binding to Palladium Cluster Sites by the Backside-Ligand Effect," *Angew. Chem., Int. Ed.* **54**, 2482–2486 (2015).

T. N. LAN, J. CHALUPSKÝ and T. YANAI, "Molecular *g*-Tensors from Analytical Response Theory and Quasi-Degenerate Perturbation Theory in Framework of Complete Active Space Self-Consistent Field Method," *Mol. Phys.* **113**, 1750–1767 (2015).

T. YANAI, G. I. FANN, R. J. HARRISON and G. BEYLKIN, "Multiresolution Quantum Chemistry in Multiwavelet Bases: Excited States from Time-Dependent Hartree–Fock and Density Functional Theory via Linear Response," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 31405–31416 (2015).

S. HORIUCHI, Y. TACHIBANA, K. YAMAMOTO, S. KAWAMATA, K. TAKASE, T. MATSUTANI, K. MASAI, Y. KURASHIGE, T. YANAI and T. MURAHASHI, "Remarkable Metal Binding Ability of Carotenes: Decanuclear Homo- and Heterometal Chains Stabilized by β-Carotene Sandwich," *Nat. Commun.* **6**, 6742 (8 pages) (2015).

P. PANDIT, K. YAMAMOTO, T. NAKAMURA, K. NISHIMURA, Y. KURASHIGE, T. YANAI, G. NAKAMURA, S. MASAOKA, K. FURUKAWA, Y. YAKIYAMA, M. KAWANO and S. HIGASHIBAYASHI, "Acid/Base-Regulated Reversible Electron Transfer Disproportionation of N–N linked Bicarbazole and Biacridine Derivatives," *Chem. Sci.* **6**, 4160–4173 (2015).

M. SAITOW, Y. KURASHIGE and T. YANAI, "Fully Internally Contracted Multireference Configuration Interaction Theory Using Density Matrix Renormalization Group: A Reduced-Scaling Implementation Derived by Computer-Aided Tensor Factorization," *J. Chem. Theory Comput.* **11**, 5120–5131 (2015).

B-4) 招待講演

T. YANAI, "Ab initio quantum chemistry using density matrix renormalization group," International Workshop on New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations—Methodologies and Algorithms for Fermion Many-Body Problems, The University of Tokyo, Tokyo, February 2015.

T. YANAI, "Advanced multireference theory based on density matrix renormalization group," Recent Advances in Electronic Structure Theory, Nanjing (China), June 2015.

T. YANAI, "Advanced multireference theory using ab initio density matrix renormalization group," The 6th Japan-Czech-Slovak Symposium for Theoretical and Computational Chemistry, Bratislava (Slovakia), October 2015.

T. YANAI, "Advanced multireference theory based on density matrix renormalization group: Theory and applications," ICIQ-FIFC Spain-Japan Joint Symposium on Theoretical and Computational Chemistry of Complex Systems, Tarragona (Spain), November 2015.

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–2015年.

京都大学大学院理学研究科化学専攻, 特別講義「計算化学の電子状態理論」, 2015年度後期.

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).

科研費新学術領域研究（研究領域提案型）「高次複合光応答分子システムの開拓と学理の構築」（公募研究),「高位電子励起状態の高精度計算に向けた電子論の開発と光化学分子への応用」, 柳井　毅 (2015年度–2016年度).

B-11) 産学連携

（株）豊田中央研究所,「エキシマー発光に関する発光機構の理論的解明」, 柳井　毅 (2015年).

C)　研究活動の課題と展望

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

A-2) 研究課題：

a) 高精度電子状態理論の開発と光電子過程への応用

b) 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) 電子共鳴状態を研究する手法として，複素吸収ポテンシャル（Complex Absorbing Potential，CAP）に基づく射影型 CAP/SAC-CI 法を開発している。簡便な Soft Box ポテンシャルが一般的に利用されているが，共鳴状態の寿命がポテンシャルの形状パラメータに大きく依存する等の課題があった。そこで，分子の周囲を滑らかに囲む新しい smooth Voronoi ポテンシャルを開発した。このポテンシャルを用いると，緩和法や CAP 法において，共鳴位置や寿命に関してパラメータ依存性が少なく, 安定に計算できることを示した。さらに, 空間的に広がった構造のクラスターや比較的大規模系の共鳴状態に適用できることを示した。このポテンシャルに基づく CAP/SAC-CI 法をヘテロ環状化合物や DNA および RNA 塩基の電子付加共鳴状態に適用し，電子透過スペクトルの実験と良い一致が得られた。特に，最低エネルギー状態だけでなく，より高い電子共鳴状態についても計算できることを示した。

b) 高圧力と光照射を組み合わせることで，新しい光化学が展開されている。高圧力（GPa オーダー）の効果を単分子の多様な電子状態計算において考慮する事ができる新たな方法を開発し，分子の電子励起状態に対する圧力の効果を考察した。高圧力環境に束縛された基底及び励起電子状態を記述するため，PCM SAC-CI 法を PCM-XP（extreme pressure）モデルに拡張した。PCM-XP SAC/SAC-CI 法では，様々な電子状態にある分子系を，分極する媒質により柔軟に閉じ込めることができ，超高圧力下にある分子を単分子の量子化学計算でモデル化できる。この方法を用い，フラン分子の励起エネルギーの圧力依存性を明らかにした。圧力に対する励起エネルギー変化は電子状態に大きく依存し，特にリドベルグ状態は圧力をかけると大きく不安定化する。その結果，価電子励起とリドベルグ励起のエネルギー順序が圧力によって逆転するという知見が得られた。また高圧力の効果が，エネルギーだけでなく，電子構造にも影響を与えることを明らかにした。

c) 実験と協力し，水の酸化反応を効率的に行うルテニウム錯体の分子設計を行った。この錯体は，化学的および電気化学的に酸素発生が確認された単核のルテニウム錯体としては最初の例である。この光錯体触媒による水の酸化反応は，配位子のリモート N ヘテロカルベン，すなわちリガンドのプロトン化による Ru=C 結合の生成が鍵となっている。この Ru=C 結合をさらに効率的に生成するためにリガンドの分子設計を行った。UV-Vis 光吸収，^{13}C NMR，結合次数，エネルギー分割の解析によって，より強い Ru=C 結合を生成するキレート配位子の理論設計を行った。

d) 低温で C–Cl 結合を活性化する凝縮相金・パラジウム合金微粒子触媒を開発している。この反応の理論解析のために，合金微粒子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 計算によって求めた。本反応系は逆ハロゲン効果（Cl > Br >> I）を示すが，溶媒和自由エネルギー計算に基づいて，パラジウム錯体のリーチングが要因であり，金・パラジウムの組成比によることを理論的に明らかにした。また, 凝縮相金微粒子触媒によるフェニルボロン酸のホモカップリング反応について，全反応メカニズムを明らかにした。メタンの C–H 活性化は重要かつ挑戦的な課題として認識

されている。Fe および Fe–O をドープしたグラフェンが効率的に C–H 結合解離およびメタノールへの変換を行う可能性を理論的に示した。また，DNA 塩基が配位した金クラスターによって，CO 酸化のエネルギー障壁を制御できること，酸化反応メカニズムを変換できることを示した。酸化ニオブ表面が，カルボン酸とアミンの直接アミド形成反応に対して高い活性をもつことが見出された。数種類の金属酸化物表面における C=O 結合活性化について検討し，共有結合型の配位によって結合活性化が行われること，触媒活性が金属酸化物のコンダクションバンドの p, d- バンド中心と相関があることを示した。

B-1) 学術論文

S. IMPENG, P. KHONGPRACHA, J. SIRIJARAENSRE, M. EHARA and J. LIMTRAKUL, “Methane Activation on Fe- and FeO-Embedded Graphene and Boron Nitride Sheet: Role of Atomic Defects in Catalytic Activities,” *RSC Adv.* **5**, 97918–97927 (2015).

R. N. DHITAL, K. BOBUATONG, M. EHARA and H. SAKURAI, “Gold/Palladium Alloy for Carbon–Halogen Bond Activation: An Unprecedented Halide Dependence,” *Chem. –Asian J.* **10**, 2669–2676 (2015).

T. SOMMERFELD and M. EHARA, “Complex Absorbing Potential with Voronoi Isosurfaces Wrapping Perfectly Around Molecules,” *J. Chem. Theory Comput.* **11**, 4627–4633 (2015).

R. N. DHITAL, M. EHARA and H. SAKURAI, “Gold/Palladium Bimetallic Nanoparticles for C–X Bond Activations: A Unique Effect of Gold,” *J. Synth. Org. Chem., Jpn.* **73(11)**, 1130–1140 (2015).

S. RAI, M. EHARA and U. DEVA PRIYAKUMAR, “Nucleobases Tagged to Gold Nanoclusters Cause a Mechanistic Crossover in the Oxidation of CO,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 24275–24281 (2015).

S. KARANJIT, M. EHARA and H. SAKURAI, “Mechanism of the Aerobic Homocoupling of Phyenylboronic Acid on Au_{20}^{-}: A DFT Study,” *Chem. –Asian J.* **10**, 2397–2403 (2015). (Inside Cover)

K. TAKAGI, K. KUSAFUKA, Y. ITO, K. YAMAUCHI, K. ITO, R. FUKUDA and M. EHARA, “Synthesis and Optical Properties of Imidazole and Benzimidazole-Based Fused π-Conjugated Compounds: Influence of Substituent, Counter Anion, and π-Conjugated System,” *J. Org. Chem.* **80**, 7172–7183 (2015).

N. TAKAGI, K. ISHIMURA, R. FUKUDA, T. MATSUI, T. NAKAJIMA, M. EHARA and S. SAKAKI, “How Can We Understand Au_8 Cores and Entangled Ligands of Selenolate- and Thiolate-Protected Gold Nanoclusters $Au_{24}(ER)_{20}$ and $Au_{20}(ER)_{16}$ (E = Se, S; R = Ph, Me)? Theoretical Study,” *J. Am. Chem. Soc.* **137**, 8593–8602 (2015).

T. YANG, S. NAGASE, T. AKASAKA, J. M. POBLET, K. HOUK, M. EHARA and X. ZHAO, “(2 + 2) Cycloaddition of Benzyne to Endohedral Metallofullerenes $M_3N@C_{80}$ (M = Sc, Y): A Rotating-Intermediate Mechanism,” *J. Am. Chem. Soc.* **137**, 6820–6828 (2015).

R. FUKUDA, M. EHARA and R. CAMMI, “Modeling Molecular Systems at Extreme Pressure by an Extension of the Polarizable Continuum Model (PCM) Based on the SAC-CI Method: Confined Electronic Excited States of Furan as a Test Case,” *J. Chem. Theory Comput.* **11**, 2063–2076 (2015).

C. ADAMO, T. LE BAHERS, M. SAVARESE, L. WILBRAHAM, G. GARCÍA, R. FUKUDA, M. EHARA, N. REGA and I. CIOFINI, “Exploring Excited States Using Time Dependent Density Functional Theory and Density Based Indexes,” *Coord. Chem. Rev.* **304-305**, 166–178 (2015).

T. SOMMERFELD and M. EHARA, "Short-Range Stabilizing Potential for Computing Energies and Lifetimes of Temporary Anions with Extrapolation Methods," *J. Chem. Phys.* **142**, 034105 (9 pages) (2015).

T. FUKUSHIMA, R. FUKUDA, K. KOBAYASHI, G. F. CARAMORI, G. FRENKING, M. EHARA and K. TANAKA, "Proton Induced Generation of rNHC Ru Complex," *Chem. –Eur. J. (communication)* **21**, 106–110 (2015).

B-3) 総説，著書

Y. MORISAWA and M. EHARA, "Electronic Structure and Transition in the Far-Ultraviolet Region," in *Far and Deep Ultraviolet Spectroscopy—Beyond Conventional Photonics*, Y. Ozaki and S. Kawata, Eds., Springer, pp. 29–54 (2015).

B-4) 招待講演

M. EHARA, "Theoretical Studies on the Bond Activation in Heterogeneous Catalysis," Pacifichem 2015, Interplay between Theory and Experiment in Catalytic Research (#277), Honolulu (U.S.A.), December 2015.

M. EHARA, "Solvent Effects in Excited States: PCM SAC-CI Study," Pacifichem 2015, Recent Progress in Molecular Theory for Excited-State Electronic Structure and Dynamics (#142), Honolulu (U.S.A.), December 2015.

M. EHARA, "Elements Strategy for Catalysts and Batteries," SOKENDAI Asian Winter School (AWS2015), Gifu (Japan), December 2015.

M. EHARA, "Unique Bond Activations and Reactions on Heterogeneous Catalysts," ICIQ-FIFC Joint Symposium on "Theory and Computations of Complex Chemical Systems," Tarragona (Spain), November 2015.

M. EHARA, "High Throughput Computations of Solvent Effects Using PCM SAC-CI Approach," Joint Spanish-Japanese Symposium: Computational Approaches for the Study of Chemical and Biological Systems, Madrid (Spain), November 2015.

M. EHARA, "Recent Developments and Applications of SAC-CI," Kwansei Gakuin International Symposium: Frontiers of Quantum Chemistry, Nishinomiya (Japan), November 2015.

M. EHARA, "Recent Developments and Applications of SAC-CI," The 6th Japan-Czech-Slovakia International Symposium on Theoretical Chemistry (JCS-2015), Bratislava (Slovakia), October 2015.

M. EHARA, "Recent Developments and Applications of SAC-CI," CECAM Workshop, Charge Transfer Modeling in Chemistry: New Methods and Solutions for a Long-Standing Problem, Paris (France), April 2015.

M. EHARA, "Bond Activation on Supported Nanocluster Catalysts," Asian Academic Seminar 2015, Kolkata (India), March 2015.

R. FUKUDA, "Electronic Excitation of Molecules in Solution Calculated Using the Symmetry-Adapted Cluster Configuration Interaction (SAC-CI) Method in the Polarizable Continuum Model (PCM)," Computational Chemistry Symposium in 11th International Conference of Computational Methods in Science and Engineering (ICCMSE 2015), Athens (Greece), March 2015.

R. FUKUDA, "Electronic excitation and charge transfer in polarizable media studied by the symmetry-adapted cluster-configuration interaction (SAC-CI) method," CECAM workshop "Charge Transfer Modeling in Chemistry: New methods and solutions for a long-standing problem," Paris (France), April 2015.

R. FUKUDA, "Electronic structure and catalytic activity of alloy nanoclusters," Pacifichem 2015: Symposium (#277) Interplay between Theory and Experiment in Catalytic Research, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

江原正博,「担持金属クラスターの触媒作用に関する理論解析」, 触媒討論会「界面分子変換」, 三重, 2015年 9月.

江原正博,「不均一系触媒の理論計算科学」, スーパーコンピュータワークショップ FY2015, 愛知, 2015年 9月.

江原正博,「金属微粒子触媒の理論化学」, シンポジウム「革新的量子化学の展開」, 京都, 2015年 5月.

江原正博,「触媒・電池元素戦略研究拠点における実験と理論の協力強化に向けて」, 計算分子科学研究拠点(TCCI)第4回産学連携シンポジウム, 東京, 2015年 1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, 2015–2016).

触媒学会元素戦略研究会世話人会委員 (2013–).

触媒学会界面分子変換研究会世話人会委員 (2015–).

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, Vice Chair, Organization Committee (2012–2013).

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

Pacifichem 2015: Symposium (#277) Interplay between Theory and Experiment in Catalytic Research, Corresponding Symposium Organizer (2014–2015).

学会誌編集委員

Journal of Computational Chemistry, Editor (2012–).

Theoretical Chemistry Accounts, Editorial Board (2015–).

Theoretical Chemistry Accounts, Special Issue of Charge Transfer Modeling in Chemistry, Guest Editor (2015–2016).

The Chemical Record, Editorial Board (2015–).

The Chemical Record, Special Issue of “Challenges in Catalysis: From Theory to Experiment,” Guest Editor (2015–2016).

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–).

計算物質科学人材育成コンソーシアムイノベーション創出人材育成委員会委員 (2015).

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」, 2015年 4月 23日–24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–2015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–2015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，高精度電子状態理論を基盤として，光の関わる化学現象や微粒子およびバルク触媒を主たる対象とした，新しい化学概念を構築することを目的として研究を進めている。近年，電子状態理論では大規模化が進展し，ナノ材料やバイオ系への応用が展開している。しかし，複雑な励起状態や固体表面などに対して信頼性のある情報を提供できる理論は未だ開発途上にあり，さらに高めていく必要がある。また，ダイナミクスや統計力学も化学現象を解明するために重要である。これらの理論化学によって，化学現象の本質を研究することを目指している。先ずは，高機能化と大規模化の観点から我々の方法を発展させるとともに，固体表面を高精度に記述できる理論開発を行う。また，光機能性分子の電子過程の研究では，励起状態における構造緩和や分子間相互作用について検討し，分子システムとしての機能設計へと展開させたい。表面ー分子系の電子状態を適切に表現できる方法を確立し，微粒子触媒，バルク触媒，表面光化学を理論的に解析する。元素戦略プロジェクトで重要課題である自動車触媒や化成品合成触媒に関する研究を実施する。

奥　村　久　士（准教授）（2009 年 5 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：理論生物物理学，理論化学物理学

A-2) 研究課題：

a) アミロイド線維の末端構造の理論的解明

b) 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) 親水性／疎水性界面におけるアミロイドβペプチドの構造の理論的研究

d) 詳細つり合い条件を課さない焼き戻し法の開発

e) 高速分子動力学シミュレーションプログラム GEMB の開発

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て折りたたみ，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 40 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（Aβ）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。アミロイド線維の伸長は，その末端に Aβ 1 分子が順次結合してβシート構造に変化するために起きる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。しかし，アミロイド線維の末端部分の領域は非常に小さいため実験では観察困難である。そこで分子動力学シミュレーションによりアミロイド線維末端の構造を調べた。その結果，一方の端では 2 本のβシートが離れているのに対し，もう一方では閉じたままになっていることを発見した。その原因も解明した。この発見はアミロイド線維の伸長機構を理解するのに役立つと考えられる。

b) アミロイド線維形成の初期過程の機構を解明するため，我々が以前開発したレプリカ置換分子動力学法により，陽的な水中での Aβ フラグメントの凝集過程を調べた。その結果，以下のことを解明した。①2 つの Aβ フラグメントが近づくにつれ，まず疎水性残基の多い C 末で短い分子間βシート構造を形成する。その後βシート構造が伸びて最終的に長い反平行βシート構造を作る。②分子間βシート構造を作る直前に分子内でのβシート構造（βヘアピン構造）が増え，これが分子間βシート構造の形成を促進させる。③多量体を形成する際に 2 量体 →3 量体 →4 量体と 1 分子ずつ成長する。

c) Aβ ペプチドによるアミロイド線維形成は糖鎖と脂質膜の界面，あるいは水と空気の界面のような親水性／疎水性界面で促進されることが実験的に報告がされている。アミロイド線維中で分子間βシート構造を形成する残基の多くが，糖鎖／脂質界面では単量体の時にαヘリックス構造を形成していることも明らかになっている。我々は親水性／疎水性界面での単量体構造を詳細に解明するため，水／真空界面での Aβ ペプチドの分子動力学シミュレーションを行った。その結果，糖鎖／脂質界面での実験と同様なαヘリックス構造を形成していることが分かった。また，界面近傍に存在する残基の中に伸びた構造を形成しやすい残基が存在することも明らかにした。このような伸びた構造を形成する残基がアミロイド線維形成を促進している可能性がある。

d) タンパク質など生体分子系の分子動力学シミュレーションを素朴に行うと自由エネルギー極小状態にとらわれ，十分な構造サンプリングできない。この問題を解決するための方法として開発されてきた手法の 1 つである焼き戻し法では，シミュレーション中にモンテカルロ法を用いて温度を変化させることで構造サンプリングの効率を向上させる。これまでのモンテカルロ法にはメトロポリス法や熱浴法などがあるが，これらは詳細つり合い条件を満たす手法で

あった。しかし正しい統計アンサンブルを生成するためには，より緩い条件であるつり合い条件さえ満たせば十分である。最近，提案された諏訪－藤堂法はつり合い条件だけを満たす手法であり，従来の方法よりも効率的なモンテカルロ計算が可能になる。我々は諏訪－藤堂法を焼き戻し法に適用し，水分子系に応用した。その結果，①諏訪－藤堂法を用いた焼き戻し法の方がより速く緩和し，②メトロポリス法よりも温度の個数をおよそ 25% 減らせることが分かった。この方法は今後，生体分子系の分子動力学シミュレーションにおいて有用になると期待される。

e) 大規模・長時間にわたる分子動力学シミュレーションを行うため，これまでに独自の高速分子動力学プログラム GEMB（Generalized-Ensemble Molecular Biophysics）を開発してきた。このプログラムの特長は①拡張アンサンブル法を用いて効率よく構造サンプリングを行う，②シンプレクティック解法を用いて安定かつ高速に計算できることである。2015年度はこのプラグラムの MPI による並列化に取り組んできた。並列化効率を測定したところ，水だけの系ではあるが，実効並列化率 99.99994394% という非常に高い並列化計算性能を達成した。今後，この高速計算プログラムをスパコン上で用いることで大規模・長時間分子動力学シミュレーションを実現できると考えている。

B-1) 学術論文

Y. MORI and H. OKUMURA, “Simulated Tempering Based on Global Balance or Detailed Balance Conditions: Suwa-Todo, Heat Bath, and Metropolis Algorithms,” *J. Comput. Chem.* **36**, 2344–2349 (2015).

H. NISHIZAWA and H. OKUMURA, “Comparison of Replica-Permutation Molecular Dynamics Simulations with and without Detailed Balance Condition,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 074801 (6 pages) (2015).

K. INAGAKI, T. SATOH, S. G. ITOH, H. OKUMURA and K. KATO, “Redox-Dependent Conformational Transition of Catalytic Domain of Protein Disulfide Isomerase Indicated by Crystal Structure-Based Molecular Dynamics Simulation,” *Chem. Phys. Lett.* **618**, 203–207 (2015).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

S. G. ITOH and H. OKUMURA, “Replica-permutation method to enhance sampling efficiency,” *Mol. Simul.* **41**, 1021–1026 (2015), *Proceedings of the 3rd International Conference on Molecular Simulation, Kobe, Japan, 2013*.

Y. MORI and H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulation study on the high-pressure behaviour of an AK16 Peptide,” *Mol. Simul.* **41**, 1035–1040 (2015), *Proceedings of the 3rd International Conference on Molecular Simulation, Kobe, Japan, 2013*.

B-4) 招待講演

奥村久士,「各種統計アンサンブルの生成法」, 第9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, 岡崎, 2015年 10月.

奥村久士,「アミロイド線維の分子動力学シミュレーション」, 第2回新学術領域研究「動的秩序と機能」若手研究会, 西浦温泉ホテルたつき, 蒲郡, 2015年 10月.

奥村久士,「分子動力学法の基礎と液体系・生体分子系への応用」, 第２７回液体の化学夏の学校, 国立大洲青少年交流の家, 大洲, 2015年 9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, 兵庫県立淡路夢舞台国際会議場, 淡路, 2015年 8月.

奥村久士,「アミロイド線維の形成初期過程と破壊の分子動力学シミュレーション」, スーパーコンピュータワークショップ２０１５, 分子科学研究所, 岡崎, 2015年1月.

伊藤　暁,「分子動力学シミュレーションにおける統計アンサンブル生成法」, 第２７回液体の化学夏の学校, 国立大洲青少年交流の家, 大洲, 2015年９月.

森　義治,「分子動力学法におけるサンプリング効率向上手法の開発：拡張アンサンブル法とその様々な分子系への応用」, 計算統計物理学研究会第6回研究会, 名古屋大学, 名古屋, 2015年 11月.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations for oligomerization and disruption of amyloid-β fibril,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015 (Pacifichem 2015), Honolulu (U.S.A.), December 2015.

H. OKUMURA, “Assembly and disassembly of Aβ amyloid fibrils by molecular dynamics simulations,” Okazaki Institute for Integrative Bioscience Retreat, Okazaki (Japan), December 2015.

H. OKUMURA, “Nonequilibrium molecular dynamics simulation of amyloid-fibril disassembly by supersonic cavitation,” International workshop on complex phenomena from molecule to society, Tokyo (Japan), November 2015.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations for aggregation and disaggregation of amyloid-β peptides,” 2015 Taiwan International Workshop on Biological Physics and Complex Systems, Taipei (Taiwan), June 2015.

H. OKUMURA, “Nonequilibrium and generalized-ensemble molecular dynamics simulations for amyloid fibril,” 11th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering, Athens (Greece), March 2015.

H. OKUMURA, “All-atom molecular dynamics simulations for amyloid fibril assembly and disassembly,” The 3rd International Symposium “Dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions,” Shima (Japan), January 2015.

H. OKUMURA, “Thermodynamics and free energy calculation,” 11th Thai Summer School of Computational Chemistry “Replica exchange molecular dynamics simulation,” Nan (Thailand), January 2015.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulation and temperature replica-exchange method,” 11th Thai Summer School of Computational Chemistry “Replica exchange molecular dynamics simulation,” Nan (Thailand), January 2015.

S. G. ITOH, “New Molecular Dynamics Simulation Methods to Enhance Conformational Sampling for Biomolecules,” 理論セミナー, 東京大学物性研究所, 柏, 2015年5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).

伊藤　暁, 平成２５年度日本生物物理学会中部支部講演会優秀発表者賞 (2014).

伊藤　暁, 新学術領域研究「動的秩序と機能」第3回国際シンポジウムポスター発表賞 (2015).

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１２運営委員 (2015–2016).

日本生物物理学会中部支部会幹事 (2013–2015).

分子シミュレーション研究会幹事 (2011–2014).

学会の組織委員等

分子シミュレーションスクール実行委員 (2011–).

自然科学における階層と全体シンポジウム実行委員 (2012–).

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).

その他

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」第3部会研究担当者 (2010–), 広報小委員会委員 (2010–2014).

B-8) 大学での講義，客員

名古屋大学理学部,「物性生物物理総合講義」, 2015年10月22日.

B-10) 競争的資金

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト,「シミュレーションと実験の連携によるアミロイド線維形成の機構解明」, 奥村久士 (2015年度).

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

① Aβペプチドからなるアミロイド線維に右端または左端からAβ１分子を結合させる分子シミュレーションを行い，アミロイド線維が伸長する過程を再現する。右端と左端にAβ１分子が結合する時の自由エネルギー変化を計算し，アミロイド線維の伸長方向と伸長が一方でしか起きない理由を定量的に明らかにする。さらにアミロイド線維の末端およびAβ１分子が結合時にどのような構造変化を起こすのか調べる。

② 一般的にアミロイド線維の生成はまず数個のペプチドが集合・離散を繰り返しながらアミロイド線維の核を生成し，ある程度の大きさを超える核が生成されると，成長してアミロイド線維が伸長する。これまでどのアミロイド線維についてもこれら全ての過程を全原子モデルで調べた理論研究はない。そこで短いペプチドについて，100本以上のバラバラのモノマー状態から核生成過程，伸長過程を経て平衡状態に至る動的秩序形成過程の全貌を全原子分子動力学シミュレーションで明らかにする。この計算によりペプチドが自律的に集合する物理化学的メカニズムを解明する。

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ダイナミクス

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) ナノ構造物質の観察と，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，近接場分光イメージング装置の開発を行い，並行して試料の測定を行っている。着任後測定装置の構築に取り組み，基本的なシステムの完成後プラズモン物質を中心にナノ光学の研究に用いてきた。光学像の横方向分解能は 50 nm 程度である。現在これを主に二つの方向で展開している。極めて短い寿命を持つプラズモンの動的過程を直接観測する目的で超高速近接場計測を行うため，超短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。これにより次項に述べるプラズモンの時空間ダイナミクスの観測に成功した。また近接場円二色性イメージングの装置開発を進め，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。

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，また微粒子凝集体では微粒子間空隙に生じる強い光場が観測できることを見いだし，所外との共同研究も積極的に行いその展開を図った。それには対象とする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，体系的に光場の空間構造と分光特性の近接場測定を進めている。また前項で述べた通り，プラズモンのダイナミクスを直接観測可能な超高速近接場計測系が完成し,プラズモンの位相緩和を時間分解イメージングで直接観測したほか,複数のプラズモンモードをコヒーレントに励起した後のプラズモン波束の運動を可視化することに成功した。これはナノ物質の励起の時空間コヒーレント制御に向けた重要なステップに位置付けられると考えている。

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ことを見出し，また局所的な強い光学活性がその付近の微視的な電子の流れにより生じるのではなく，ナノ構造内の遠隔的な電磁気学相互作用で現れていることが明らかになる等，幾つかの基礎的に重要な結果が得られている。また高い対称性を持つアキラル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，英国との共同研究として開始した。また金属ナノ構造における局所的に強くねじれた光の特性を更に解明し制御するための実験法の開発も，継続して推進している。

B-1) 学術論文

M. K. HOSSAIN, M. KITAJIMA, K. IMURA and H. OKAMOTO, “A Topography-Metrology Correlation in Nanoscale Probed by Near-Field Scanning Optical Microscopy,” *Plasmonics* **10**, 447–454 (2015).

Y. NISHIYAMA, K. IMAEDA, K. IMURA and H. OKAMOTO, “Plasmon Dephasing in Single Gold Nanorods Observed By Ultrafast Time-Resolved Near-Field Optical Microscopy,” *J. Phys. Chem. C* **119**, 16215–16222 (2015).

Y. NISHIYAMA, K. IMURA and H. OKAMOTO, “Observation of Plasmon Wave Packet Motions via Femtosecond Time-Resolved Near-Field Imaging Techniques,” *Nano Lett.* **15**, 7657–7665 (2015).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. NISHIYAMA, T. NARUSHIMA, K. IMURA and H. OKAMOTO, “Real Space and Real Time Observation of Plasmon Wavepacket Dynamics in Single Gold Nanorod,” *Ultrafast Phenomena XIX*, Springer, pp. 691–693 (2015).

B-3) 総説，著書

H. OKAMOTO, T. NARUSHIMA, Y. NISHIYAMA and K. IMURA, “Local Optical Responses of Plasmon Resonances Visualised by Near-Field Optical Imaging,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 6192–6206 (2015).

岡本裕巳,「近接場分光」,「発光の事典　基礎からイメージングまで」, 木下, 太田, 永井, 南編, 朝倉書店, pp. 165–170 (2015).

B-4) 招待講演

H. OKAMOTO, “Near-Field Imaging Measurements of Local Circular Dichroism in Gold Nanostructures,” 応用物理学会関西支部セミナー , 吹田, 2015年 2月.

岡本裕巳,「近接場光学顕微鏡によるキラルなプラズモンの可視化」, 分子研研究会「キラル磁性×光学物性研究会」, 岡崎, 2015年 6月.

H. OKAMOTO, “Local Optical Activity in Metal Nanostructures Visualized by Near-field Circular Dichroism Microscopy,” PIERS (Progress In Electromagnetics Research Symposium) 2015 in Prague, Prague (Czech Republic), July 2015.

H. OKAMOTO, “Imaging Local Optical Activity in Metal Nanostructures by Near-Field Circular Dichroism Microscopy,” The 10th Asia-Pacific Conference on Near-Field Optics, Hakodate (Japan), July 2015.

H. OKAMOTO, “Circular Dichroism Nanoscopy of Metal Nanostructures,” The 5th Asian Spectroscopy Conference, Sydney (Australia), September 2015.

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).

橋谷田俊, 日本化学会第９５春季年会学生講演賞 (2015).

橋谷田俊, 第9回分子科学討論会分子科学会優秀ポスター賞 (2015).

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).

2nd Optical Manipulation Conference, Optics & Photonics International Congress 2015, Program Committee (2015).

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–).

学術誌編集委員

Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews, Advisory Board (2012–).

その他

スーパーサイエンスハイスクール（愛知県立岡崎高等学校）活動支援 (2003, 2004).

総合研究大学院大学物理科学研究科副研究科長 (2010–2012).

総合研究大学院大学物理科学研究科研究科長 (2012–2014).

分子科学研究所運営会議議長 (2014–).

B-10) 競争的資金

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

科学技術振興機構さきがけ研究,「プラズモニック物質の波動関数の光制御とその応用」, 井村考平 (2008年).

科研費挑戦的萌芽研究,「ナノ円二色性イメージングの開発と分子集合体キラリティ」, 岡本裕巳 (2009年–2011年).

科研費基盤研究(S),「ナノドット配列における結合励起状態の時空間特性と励起場制御」, 岡本裕巳 (2010年–2015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).

科研費特別研究員奨励費,「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–2015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–2015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がけ研究,「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–).
科研費基盤研究(A),「キラルなプラズモン励起による不斉光化学場の展開」, 岡本裕巳 (2015年–).
科研費挑戦的萌芽研究,「金属ナノ構造に誘起される局所的円偏光電場による磁性体中の磁化制御」, 岡本裕巳 (2015年–).
科研費特別研究員奨励費,「金ナノ構造体の強い局所光学活性によるキラル光化学反応場の開拓」, 橋谷田俊 (2015年–).

C) 研究活動の課題と展望

近接場分光イメージングによるナノ構造物質の光学特性に関する研究を推進し，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，金属ナノ構造による光の局在化や増強などの性質・機能に関する新たな情報と方法論を提供し，多くの追随研究を生んだと考えている。また並行して継続的に測定波長域の拡大や,試料設計･作成のための新装置導入,近接場計測装置の高度化等を進め,研究を次のフェーズに発展させる用意も進めてきた。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を実現し，金属ナノ構造の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るなど，一つの山を越える段階に到達したと考えている。これを更に今後どのように展開するか，可能性を探ることが一つの課題である。今一つのベクトルとして進めている近接場円二色性イメージングの開発とナノ物質のキラリティの研究では,金属ナノ構造の円二色性イメージングによって，その光学活性の特性，起源等について独自の実験的情報を得ることができた。対称性の高いアキラルな構造でも局所的に強い光学活性を示すという，ユニークな成果も得られた。近接場円二色性イメージングはキラル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，今後様々なナノ構造光学活性物質の機能解明のための有力な実験手法になることを期待している。この実験手法で得られた成果をもとに，金属ナノ構造と分子のキラルな電磁気学的相互作用に基づく新たな物質機能の研究へ展開することも，高いポテンシャルを持つものとして重点的に考えており，すでに国外との共同研究を開始している。また物質および光のキラリティは磁性との相関においても興味が持たれ，ナノ光学の観点からこの方向への研究展開についても検討を開始した。一方これらとはやや異なる研究課題として,微粒子の光トラッピングに関わる独自の新たな研究萌芽（非線形共鳴光トラッピング）を見出しており（数年前に発表済），国内で関連する研究を行っている研究者が集まり，それらの今後の展開について議論を開始している。機会があればこれも展開させたい。

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を照射すると，「振動波束」と呼ばれる局在波が結合軸上を行ったり来たりするような状態を造り出す事ができる。波束の発生に際して，数フェムト秒からアト秒のサイクルで振動する光電場の位相は波束を構成する各々の振動固有状態の量子位相として分子内に保存されるので，光学サイクルを凌駕する精度で光の位相を操作すれば波束の量子位相を操作することができる。我々はこの考えに基づき，独自に開発したアト秒位相変調器（APM）を用いて，二つのフェムト秒レーザーパルス間の相対位相をアト秒精度で操作するとともに，このパルス対によって分子内に発生した二つの波束の相対位相を同様の精度で操作する事に成功した。さらに，これらの高度に制御された波束干渉の様子を，ピコメートルレベルの空間分解能とフェムト秒レベルの時間分解能で観測する事に成功した。
b) APM を用いて，分子内の２個の波束の量子干渉を自在に制御する事に成功した。また，この高精度量子干渉をデコヒーレンス検出器として用いる事によって，熱的な分子集団や固体中の電子的なデコヒーレンスを実験的に検証した。さらに，固体パラ水素中の非局在化した量子状態（vibron）の干渉を観測し制御する事に成功した。
c) 光子場の振幅情報を分子の振動固有状態の量子振幅として転写する量子メモリーの開発を行なった。ここでは，フェムト秒光パルス対によって分子内に生成した２個の波束間の量子位相差をアト秒精度で操作し，これらの干渉の結果生成した第３の波束を構成する各振動固有状態のポピュレーションを観測することによって，光子場の振幅情報が高精度で分子内に転写されていることを証明することができた。また，フェムト秒光パルス対の時間間隔をアト秒精度で変化させることによって波束内の固有状態のポピュレーションの比率を操作できることを実証した。さらに，固体パラ水素中の振動量子状態（vibron）の位相情報の２次元分布を操作し可視化することによって，固体２次元位相メモリーの可能性を実証することに成功した。
d) 分子メモリーを量子コンピューターに発展させるためには，c) で行ったポピュレーション測定だけでなく，位相の測定を行う必要がある。そこで我々は，c) の第３の波束の時間発展を別のフェムト秒パルスを用いて実時間観測した。

これによって，ポピュレーション情報と位相情報の両方を分子に書き込んで保存し，読み出すことが可能であることを実証した。振動固有状態の組を量子ビットとして用いる量子コンピューターの可能性が示された。さらに，分子波束を用いた量子フーリエ変換を開発した。

e) 分子の振動波束を構成する振動固有状態の振幅と位相を強レーザー場で制御することに成功した。

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

g) バルク固体中の原子の超高速２次元運動をフェムト秒単位で制御し画像化する新しい光技術を開発した。

B-1) 学術論文

H. KATSUKI, K. OHMORI, T. HORIE, H. YANAGI and K. OHMORI, “Manipulation and Visualization of Two-Dimensional Phase Distribution of Vibrational Wave Functions in Solid Parahydrogen Crystal,” *Phys. Rev. B* **92**, 094511 (9 pages) (2015).

B-3) 総説，著書

大森賢治，編著,「アト秒科学～1兆分の1秒スケールの超高速現象を光で観測・制御する～」, 化学同人 (2015). ISBN-13:978-4795818055

B-4) 招待講演（* 基調講演）

K. OHMORI, “Direct Observation of Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly-Correlated Ultracold Rydberg Gas,” Perspectives in Nano Information Processing: An international conference and workshop, Cambridge (U.K.), December 2015.*

K. OHMORI, “Direct Observation of Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly-Correlated Ultracold Rydberg Gas,” The 12th US-Japan Seminar on many body quantum systems, Madison (U.S.A.), September 2015.*

K. OHMORI, “Direct Observation of Ultrafast Quantum Many-Body Dynamics in a Strongly-Correlated Ultracold Rydberg Gas,” The 12th Femtochemistry Conference, Hamburg (Germany), July 2015.*

K. OHMORI, “Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly-Correlated Ultracold Rydberg Gas,” Gordon Research Conference on “Atomic Physics,” Newport (U.S.A.), June 2015.*

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

文部科学省科学技術・学術審議会量子科学技術委員会専門委員（主査代理） (2015–).

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– .

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。特に最近は，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, H. YUZAWA and N. KOSUGI, “Development and Application of In Situ/Operando Soft X-Ray Transmission Cells to Aqueous Solutions and Catalytic and Electrochemical Reactions,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **200**, 293–310 (2015).

H. YUZAWA, M. NAGASAKA and N. KOSUGI, “In Situ Soft X-Ray Absorption Spectroscopy Applied to Solid–Liquid Heterogeneous Cyanopyrazine Hydration Reaction on Titanium Oxide Catalyst,” *J. Phys. Chem. C* **119**, 7738–7745 (2015).

T. BRANDENBURG, T. PETIT, A. NEUBAUER, K. ATAK, M. NAGASAKA, R. GOLNAK, N. KOSUGI and E. F. AZIZ, “Fluorination-Dependent Molecular Orbital Occupancy in Ring-Shaped Perfluorocarbons,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 18337–18343 (2015).

T. PETIT, H. YUZAWA, M. NAGASAKA, R. YAMANOI, E. OSAWA, N. KOSUGI and E. F. AZIZ, “Probing Interfacial Water on Nanodiamonds in Colloidal Dispersion,” *J. Phys. Chem. Lett.* **6**, 2909–2912 (2015).

M. YOSHIDA, Y. MITSUTOMI, T. MINEO, M. NAGASAKA, H. YUZAWA, N. KOSUGI and H. KONDOH, “Direct Observation of Active Nickel Oxide Cluster in Nickel–Borate Electrocatalyst for Water Oxidation by In Situ O K-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. C* **119**, 19279–19286 (2015).

Y. F. WANG, S. B. SINGH, M. V. LIMAYE, Y. C. SHAO, S. H. HSIEH, L. Y. CHEN, H. C. HSUEH, H. T. WANG, J. W. CHIOU, Y. C. YEH, C. W. CHEN, C. H. CHEN, S. C. RAY, J. WANG, W. F. PONG, Y. TAKAGI, T. OHIGASHI, T. YOKOYAMA and N. KOSUGI, "Visualizing Chemical States and Defects Induced Magnetism of Graphene Oxide by Spatially-Resolved-X-Ray Microscopy and Spectroscopy," *Sci. Rep.* **5**, 15439 (2015).

K .YAMAMOTO, R. FLESCH, T. OHIGASHI, S. HEDTRICH, A. KLOSSEK, P. PATOKA, G. ULRICH, S. AHLBERG, F. RANCAN, A. VOGT, U. BLUME-PEYTAVI, P. SCHRADE, S. BACHMANN, M. SCHAEFER-KORTING, N. KOSUGI and E. RÜHL, "Selective Probing of the Penetration of Dexamethasone into Human Skin by Soft X-Ray Spectromicroscopy," *Anal. Chem.* **87**, 6173–6179 (2015).

H. YAMANE and N. KOSUGI, "Systematic Study on Intermolecular Valence-Band Dispersion in Molecular Crystalline Films," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **204**, 61–67 (2015).

I. SONG, J. S. GOH, S.-H. LEE, S. W. JUNG, J. S. SHIN, H. YAMANE, N. KOSUGI and H. W. YEOM, "Realization of a Strained Atomic Wire Superlattice," *ACS Nano* **9**, 10621–10627 (2015).

B-3) 総説, 著書

長坂将成, 大東琢治, 小杉信博,「軟X線吸収分光法による電気化学反応の局所構造解析」, *分析化学* **64(3)**, 163–172 (2015).

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*, Chapter 3 (2015).

B-4) 招待講演

N. KOSUGI, "Quantum Chemical Approaches to Molecular X-Ray Spectroscopy," Workshop on Prediction and Interpretation of Core-Level (K-, L-Edge, *etc.*) Spectroscopy (PICKLES2015), The Molecular Foundry, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkley (U.S.A.), October 2015.

N. KOSUGI, "Molecular inner-shell spectroscopy from isolated to interacting systems and its application to in situ/operando spectroscopy," Advanced Light Source Seminar, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkley (U.S.A.), October 2015.

M. NAGASAKA, "Soft X-Ray Absorption Spectroscopy of Liquid and Application to In Operando Observations," SXET (Soft X-Ray in Energy and Time), Berlin (Germany), August 2015.

M. NAGASAKA, "Soft X-Ray Absorption Spectroscopy of Liquid and Its Application to Electrochemical Reaction," The 74th Okazaki Conference "Frontier of X-Ray Absorption Spectroscopy and Molecular Science," Okazaki (Japan), February 2015.

H. YAMANE, "Systematic Examination of Valence-Band Dispersion in 3D and 2D Crystalline Films of Organic Semiconductors," 3rd JSPS-NSFC Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Okazaki (Japan), December 2015.

山根宏之,「放射光を用いた精密電子分光による有機薄膜・界面の構造と電子状態の相関の系統的解明」, 第9回分子科学討論会, 東京工業大学大岡山キャンパス, 東京, 2015年9月.

H. YAMANE, "Quantitative Determination of Weak Electronic Interaction in Organic Thin Films and Interfaces using High-Resolution Photoemission Spectroscopy," 日本化学会第９５春季年会･アジア国際シンポジウム―物理化学, 日本大学船橋キャンパス, 船橋, 2015年3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, 2015–2017), 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 (2014–2015).

学会の組織委員等

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

ICESS 電子分光及び電子構造国際会議国際諮問会議委員 (2006–), 副議長 (2015–).

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

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

ICESS-8,9,10,12 電子分光及び電子構造国際会議国際プログラム委員 (2000, 2003, 2006, 2012).

IWP 光イオン化国際ワークショップ国際諮問委員・プログラム委員 (1997, 2000, 2002, 2005, 2008, 2011).

DyNano2010 短波長放射光によるナノ構造及びダイナミクス国際ワークショップ諮問委員 (2010, 2011).

SXET 軟Ｘ線周波数領域及び時間領域に関する国際ワークショップ共同議長 (2015).

台湾軟X線散乱国際ワークショップ組織委員 (2009).

COREDEC 内殻励起における脱励起過程国際会議プログラム委員 (2001).

ICORS2006 第２０回国際ラマン分光学会議プログラム委員 (2006).

IWSXR 軟X線ラマン分光及び関連現象に関する国際ワークショップ組織委員長 (2006).

XAFS Ｘ線吸収微細構造国際会議実行委員(1992), 組織委員(2000), プログラム委員(1992, 2000), 国際諮問委員(2003).

ICFA-24 次世代光源に関する先導的ビームダイナミクス国際ワークショップ組織委員 (2002).

日仏自由電子レーザーワークショップ副議長 (2002).

日独セミナー Present State and Perspectives of Accelerator-based Photon Sources 日本側代表 (2013).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

文部科学省科学技術・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 (2014–2015), 国際事業委員会書面審査員 (2009–2010, 2014–2015).

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), 物質構造科学研究所運営会議委員(2015–).

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 AOFSRR 国際諮問委員及びプログラム委員 (2007, 2009).

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

SPring-8 評価委員会委員 (2002, 2003, 2004), 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 (2013–2014).

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

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

台湾放射光科学国際諮問委員会委員(2008–2011).

台湾中央研究院研究計画審査委員 (2010–2012).

フィンランド Oulu 大学物理学科教授選考外部専門委員 (2010).

フランスCNRS ANR 基盤研究審査員 (2010–2012).

フランスUPMC(Paris 6)/CNRS Multi-scale Integrative Chemistry (MiChem) プロジェクト外部審査委員 (2011, 2014).

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，欧米の最先端軟X線高輝度光源施設と連携をとりながら相補的な国際共同に貢献している。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らえた。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いる。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

J.-P. YANG, F. BUSSOLOTTI, Y.-Q. LI, X.-H. ZENG, S. KERA, J.-X. TANG and N. UENO, "The Role of Gap States on Energy Level Alignment at an α-NPD/HAT(CN)$_6$ Charge Generation Interface," *Org. Electron.* **24**, 120–124 (2015).

F. BUSSOLOTTI, J.-P. YANG, M. HIRAMOTO, T. KAJI, S. KERA and N. UENO, "Direct Detection of Density of Gap States in C_{60} Single Crystal by Photoemission Spectroscopy," *Phys. Rev. B* **92**, 115012 (7 pages) (2015).

S. KERA and N. UENO, "Photoelectron Spectroscopy on the Charge Reorganization Energy and Small Polaron Binding Energy of Molecular Film," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **204**, 2–11 (2015).

B-3) 総説，著書

F. BUSSOLOTTI, S. KERA and N. UENO, "Pentacene becomes Mott-hubbard insulator by potassium doping," 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, **vol. 209**, Chapter 5 (2014).

B-4) 招待講演

S. KERA, "Electronic states of functional molecular materials probed by low-energy excitation," The 62nd AVS (American Vacuum Society) International Symposium and Exhibition, SanJose (U.S.A.), October 2015.

S. KERA, "Impacts of local/nonlocal electron–phonon coupling on HOMO band," The 8th edition of the international workshop on Electronic Structure and Processes at Molecular-Based Interfaces (ESPMI-8), Tucson (U.S.A.), October 2015.

S. KERA, "A perspective from the students of Professor Nobuo Ueno," Symposium to Honor the Career of Prof. Nobuo Ueno, Tucson (U.S.A.), October 2015.

S. KERA, "Electron–phonon coupling in organic semiconductor materials," 2015 Japan-Taiwan International Workshop on Spectroscopy and Surface Science, Chiba (Japan), June 2015.

T. UEBA, "Electronic excitation and relaxation dynamics at the rubrene/graphite interface probing by two-photon photoemission," The 3rd International Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Okazaki (Japan), December 2015.

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

JSPS-NSFC joint 3rd Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Chair (IMS, Okazaki 2015).

第２９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 (2015).

第７６回応用物理学会秋季学術講演会プログラム編成委員 (2015).

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),「パ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。今年度，新たに助教が着任し，高感度紫外光電子分光装置，気相光電子分光装置，逆光電子分光装置，スポット分析型低速電子線回折装置の立ち上げを完了した。今後，超短パルスレーザー光源の立ち上げを進め，時間分解測定への発展を急ぎたい。X線定在波分光や飛行時間型角度分解光電子分光などの先端分析実験は，引き続き国外放射光施設における共同利用実験を進める。実験データの理論解析を進めるために，国内外の理論グループとの連携を深める予定である。UVSOR 放射光施設利用実験の展開として，長期課題による有機固体専用角度分解光電子分光装置の立ち上げが完了し，外部ユーザーへの利用が開始された。今後はアンジュレータラインにおける有機固体系の新奇実験装置開発について検討を開始したい。

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大幅な向上，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り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-2) 国際会議のプロシーディングス

S. SASAKI, A. MIYAMOTO, M. HOSAKA N. YAMAMOTO, T. KONOMI and M. KATOH, “Analyses of Light’s Orbital Angular Momentum from Helical Undulator Harmonics,” *Proc. 6th Internat. Particle Accel. Conf. (Richmond, 2015),* 1563 (2015).

K. ITO, M. HOSAKA, A. MANO, T. TAKANO, Y. TAKASHIMA, K. HAYASHI, M. KATOH and N. YAMAMOTO, “Development of Pulsed Multipole Magnet for Aichi SR Storage Ring,” *Proc. 6th Internat. Particle Accel. Conf. (Richmond 2015),* 1616 (2015).

M. KATOH, H. KENJI, J. YAMAZAKI, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, M. ADACHI, T. KONOMI and N. YAMAMOTO, "Recent Developments of UVSOR-III," *Proc. 6th Internat. Particle Accel. Conf. (Richmond, 2015)*, 1619 (2015).

M. HOSAKA, D. OODAKE, N. YAMAMOTO, Y. TAKASHIMA, H. ZEN, S. BIELAWSKI, C. SZWAJ, T. KONOMI, J. YAMAZAKI and M. KATOH, "Narrow Band Coherent Edge Radiation at UVSOR-III," *Proc. 6th Internat. Particle Accel. Conf. (Richmond, 2015)*, 1613 (2015).

B-3) 総説，著書

加藤政博,「30周年を迎えたUVSOR 施設の現状と展望」, *放射光（Journal of Japanese Society for Synchrotron Radiation Research）* **27(3)**, 172–178 (2014).

加藤政博,「分析化学における放射光の利用――日本の放射来施設；軟X線領域」, *ぶんせき* **9**, 372 (2015).

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).

伊藤圭也, 第12回日本加速器学会年会賞（ポスター部門）(2015).

宮内智寛, 第12回日本加速器学会年会賞（ポスター部門）(2015).

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–2014年.

高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設, 客員教授 2015年– .

名古屋大学シンクロトロン光研究センター , 客員教授, 2006年– .

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「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),「シンクロトロン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トロン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。

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基礎特性の研究，またその発生法と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。

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) 銅酸化物高温超伝導体の中でも高い超伝導転移温度（T_c）を示す物質の一つである Bi2223 の電子状態を，UVSOR BL7U において角度分解光電子分光測定を行うことで明らかにした。装置の改良により角度分解能を向上させたことで，これまで報告されていなかった新しいエネルギーバンドが存在することを世界に先駆けて観測した。これは単位胞中に３つある CuO_2 面のうち外側の２枚の電子が相関することによって引き起こされている可能性がある。今後このエネルギーバンドの分散の詳細を観測しその起源を明らかにすることで，高温超伝導との関連を調べる予定である。

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，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では，新しい角度分解光電子分光装置を共同開発し，従来は検出できなかったスリットに垂直方向の電子を，電子レンズにより取り込むことで，広い運動量空間の電子状態を簡単に測定できるようになった。また同時に角度分解能が大幅に向上した。この機能を応用することで３次元のスピン分解角度分解光電子分光測定が可能となると考えられる。ビームラインは2016年度より高分解能角ビームラインとしてユーザー利用を開始する。

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。BL5U 用に開発した冷却可能な 5 軸マニピュレータは試料部において 5 K，参照用金部で 4 K という低温を達成し，放射光施設の光電子分光装置としては世界でもトップクラスである。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ないため，その性能を十分生かすことができていない。そこで試料部において 5 K を目指して新たに 6 軸マニピュレータの開発を進めている。2016年度からビームラインへ導入する予定である。

B-1) 学術論文

M. HASHIMOTO, E. A. NOWADNICK, R.-H. HE, I. M. VISHIK, B. MORITZ, Y. HE, K. TANAKA, R. G. MOORE, D. H. LU, Y. YOSHIDA, M. ISHIKADO, T. SASAGAWA, K. FUJITA, S. ISHIDA, S. UCHIDA, H. EISAKI, Z. HUSSAIN, T. P. DEVEREAUX and Z.-X. SHEN, “Direct Spectroscopic Evidence for Phase Competition between the Pseudogap and Superconductivity in $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$,” *Nat. Mater.* **14**, 37–42 (2015).

T. HIRAHARA, T. SHIRAI, T. HAJIRI, M. MATSUNAMI, K. TANAKA, S. KIMURA, S. HASEGAWA and K. KOBAYASHI, "Role of Quantum and Surface-State Effects in the Bulk Fermi-Level Position of Ultrathin Bi Films," *Phys. Rev. Lett.* **115**, 106803 (5 pages) (2015).

T. KOBAYASHI, K. TANAKA, S. MIYASAKA and S. TAJIMA, "Importance of Fermi Surface Topology for In-Plane Resistivity Anisotropy in Hole- and Electron-Doped $Ba(Fe_{1-x}TM_x)_2As_2$ (TM = Cr, Mn and Co)," *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 094707 (5 pages) (2015).

B-4) 招待講演

田中清尚,「UVSOR におけるスピン分解角度分解光電子分光」, 応用物理学会東海支部開催第２６回基礎セミナー , 名古屋大学, 名古屋, 2015年 8月.

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-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・スピンスト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).

自然科学研究機構新分野創成センターイメージングサイエンス研究分野プロジェクト,「ディフレクターを用いた新しい高分解能運動量空間電子状態イメージング」, 田中清尚 (2015年).

C) 研究活動の課題と展望

４月に新しい助教が着任し,研究をする体制が整いつつある。UVSOR のBL5Uにおいては高分解能角度分解光電子分光ビームラインとしては一応の立ち上げが終了したものの, スピン分解に向けて開発するべきことはまだ多い。今年度はBL5U, BL7U の高分解能化･高精度化が大きく進んだ。高分解能を利用した実験を行いつつ, スピン分解の開発を進めていきたい。

光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

繁　政　英　治（准教授）（1999 年 5 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：軟X線分子分光，光化学反応動力学

A-2) 研究課題：

a) 角度分解高分解能電子分光法による内殻励起原子分子の電子緩和過程
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) 短波長強レーザー場中の原子分子過程
d) 内殻励起分子に特有な光解離ダイナミクス

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) BL6U は，40 ～ 400 eV の光エネルギー範囲において，分解能 10000 以上かつ光強度 10^{10} 光子数／秒以上の性能を有しており，低エネルギー領域における世界最先端ビームラインの一つである。2009 年初秋以降，気体の高分解能電子分光を行うための実験装置の整備を開始し，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った。これにより，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実験が定常的に行えるようになった。電子エネルギー分析器をアンジュレータの偏光方向に対して回転させることにより，電子放出の偏光依存性に関する情報も取得可能である。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。
b) 円偏光アンジュレータ放射の高次光は，光渦の性質を持ち合わせてい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。昨年度から，光渦光子によるイオン化に関する実験研究を開始した。極紫外域の光渦が利用可能な BL1U に，電子画像観測装置を持ち込んで，ヘリウム原子からの光電子角度分布測定を行った。複数回のビームタイムにより，実験方法を確立すると共に，問題点の洗い出しにより，電子画像観測装置の性能安定性を向上させる改良を施し，BL5B においてその動作確認を行った。次回以降のビームタイムでは，より信頼性の高いデータの取得を目指す。
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。SCSS で得られたヘリウム原子からの複数の超蛍光の競合する過程について，計算機シミュレーションを援用し，競合する超蛍光が発展，抑制されるメカニズムを明らかにした。来年度から稼働が予定されている，極紫外から軟X線の FEL 施設，SCSS+ での利用研究に向けて，発光分光装置の立ち上げを進めている。
d) 内殻励起分子の光解離ダイナミクスについて，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独自の研究及び協力研究として進めている。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。メチル基を含む多原子分子の内殻光イオン化後の解離過程において，結合の組み換え反応による H_3^+ の生成が特定の二価イオン状態によることを明らかにした。現在，観測対象を分子クラスターに拡げるべく装置の開発研究を行っている。

B-1) 学術論文

Y. HIKOSAKA, M. FUSHITANI, A. MATSUDA, T. ENDO, Y. TOIDA, E. SHIGEMASA, M. NAGASONO, K. TONO, M. YABASHI, T. ISHIKAWA and A. HISHIKAWA, "Five-Photon Sequential Double Ionization of He in Intense Extreme-Ultraviolet Free-Electron Laser Fields," *Phys. Rev. A* **90**, 053403 (5 pages) (2014).

H. IWAYAMA, J. R. HARRIES and E. SHIGEMASA, "Transient Charge Dynamics in Argon-Cluster Nanoplasmas Created by Intense Extreme-Ultraviolet Free-Electron-Laser Irradiation," *Phys. Rev. A* **91**, 021402(R) (5 pages) (2015).

K. NAKAJIMA, J.R. HARRIES, H. IWAYAMA, S. KUMA, Y. MIYAMOTO, M. NAGASONO, C. OHAE, T. TOGASHI, M. YABASHI, E. SHIGEMASA and N. SASAO, "Simultaneous Measurements of Super-Radiance at Multiple Wavelengths from Helium Excited States: I. Experiment," *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 054301 (7 pages) (2015).

J. R. HARRIES, H. IWAYAMA, M. NAGASONO, T. TOGASHI, M. YABASHI, S. KUMA, K. NAKAJIMA, Y. MIYAMOTO, C. OHAE, N. SASAO and E. SHIGEMASA, "A Streak Camera Study of Superfluorescence at Multiple Wavelengths from Helium Atoms Excited Using Free Electron Laser Pulses," *J. Phys. B* **48**, 105002 (9 pages) (2015).

T. KANEYASU, M. ITO, K. SOEJIMA, Y. HIKOSAKA and E. SHIGEMASA, "Site-Specific Formation of Metastable OCS^{2+} Studied by Auger-Electron−Ion Coincidence Method," *J. Phys. B* **48**, 125101 (6 pages) (2015).

Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU, P. LABLANQUIE, F. PENENT, E. SHIGEMASA and K. ITO, "Multiple Auger Decay of the Neon 1s-Core-Hole State Studied by Multielectron Coincidence Spectroscopy," *Phys. Rev. A* **92**, 033413 (6 pages) (2015).

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, 2012–2014, 2015–).

日本放射光学会渉外幹事 (2007–2009).

学会の組織委員等

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

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

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

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

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

第22回化学反応討論会実行委員 (2006).

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

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

第2回AOFSRR（放射光研究アジアー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

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2014–2015).

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, 2013–2015).

（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ロン光研究センター , 客員准教授, 2007年9月– .

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「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

我々の専用ビームライン，BL6U での研究については，実験研究手法の二本の柱として，二次元電子分光を含む高分解能電子分光法及び電子・イオン同時計測分光法を駆使して研究を進める。観測対象としては，周期律表の第2周期元素及び第3周期元素を含む分子の 1s 及び 2p 内殻励起領域を中心とし，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解離過程や安定性について詳細に調べる。これらにより，電子緩和過程と解離の競合や，解離過程における結合組み換え反応など，内殻励起分子に特有な光解離ダイナミクスや二価分子イオンの安定性に対する電子状態の果たす役割に関する理解を深めたい。一方，BL1U における極紫外域の光渦を利用した電子分光実験については，より高精度な測定を実現するために，ビームライン上流に四象限スリットやマスクの設置を含むビームライン整備を継続する。来年度の前半までには，分光ビームラインを整備し，分光された光渦光子による実験を行う予定である。また，短波長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，及びクラスターの挙動に関する研究については，発光分光法による実験研究を継続する。特に，これまで観測例の無いEUV や軟X線領域における超蛍光観測の実現を目指して観測装置の開発研究を進める。

先端レーザー開発研究部門（分子制御レーザー開発研究センター）

平　等　拓　範（准教授）（1998 年 2 月 1 日着任）

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

A-2) 研究課題：

a) マイクロドメイン構造制御に関する研究

b) マイクロドメイン光制御に関する研究

c) マイクロ固体フォトニクスの展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

分子科学に関連して重要な波長域にレーザーの高輝度光を展開する為の固体レーザー，非線形波長変換法につき包括的な研究を進めている。特には近年のマイクロ固体フォトニクス［マイクロチップ Nd:YVO_4 レーザー（1990年），Yb:YAG レーザー（1993年），セラミックレーザー（1997年），バルク擬似位相整合（QPM）素子：大口径周期分極反転 MgO:$LiNbO_3$（PPMgLN）（3mm 厚2003年，5mm 厚2005年，10mm 厚2012年）］を先導すると共に，共同研究を通し赤外域分子分光などにその展開を図っている。国際誌の雑誌編集，特集号企画から国際シンポジウム・会議の企画提案，開催に積極的に参加する事でその成果を内外に発信している。

a) マイクロドメイン構造，界面（粒界面，結晶界面，さらには自発分極界面）を微細に制御する固相反応制御法の研究として，レーザーセラミックス，レーザー素子，分極反転素子の作製プロセスの高度化を図っている。特に，固体レーザーの発光中心である希土類イオンのスピン・軌道角運動量を利用したマイクロドメインの配向制御は，これまで不可能だった異方性セラミックスによるレーザー発振を成功させただけでなく原理的にはイオンレベルでの複合構造を可能とするなど，新たなフォトニクスを創出するものと期待される。

b) 光の発生，増幅，変換の高度制御を可能とする為の研究として，希土類イオンの発光･緩和機構の解明，固体中の光，エネルギー伝搬，さらにはマイクロドメイン構造と光子及び音子の相互作用機構解明，非線形光学過程の解明，モデル化を進めている。Yb レーザーの機構解明，Nd レーザーの直接励起可能性，希土類レーザーの励起光飽和特性，YVO_4 の高熱伝導率特性の発見，実証に繋がったばかりでなく，マイクロ共振器の高輝度効果，レーザー利得と非線形光学過程の量子相関などの興味深い展開も見せている。特にレーザー科学発展の中で生じたパルスギャップ領域であるサブナノ秒からピコ秒の便利な光源開拓に関する貢献，パルスギャップレーザーによる新現象の解明などが期待できる。

c) 開発した光素子を用いた新規レーザー，波長変換システムの開発と展開を図っている。これまでにもエッジ励起セラミック Yb:YAG マイクロチップレーザーによる高平均出力動作，手のひらサイズ高輝度温度ジャイアントパルスマイクロチップレーザー，ジュール級（~1 J）出力エネルギーで Nd:YAG レーザーからの変換効率 80% に至る高効率・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 VUV 光（波長:118 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

S. C. KUMAR, J. WEI, J. DEBRAY, V. KEMLIN, B. BOULANGER, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and M. EBRAHIM-ZADEH, "High-Power, Widely Tunable, Room-Temperature Picosecond Optical Parametric Oscillator Based on Cylindrical 5%MgO:PPLN," *Opt. Lett.* **40**, 3897–3900 (2015).

W. KONG, M. TSUNEKANE and T. TAIRA, "Diode Edge-Pumped Passively Q-Switched Microchip Laser," *Opt. Eng.* **54**, 090501 (3 pages) (2015).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. NAWATA, T. NOTAKE, H. ISHIZUKI, Y. TOKIZANE, Y. TAKIDA, S. HAYASHI, T. TAIRA and H. MINAMIDE, "Efficient Wavelength-Conversion from Terahertz to Near Infrared Using a Slant-Stripe-Type Periodically Poled $LiNbO_3$," *Optical Terahertz Science and Technology (OTST) 2015*, poster#5 (2015).

K. NAWATA, T. NOTAKE, H. ISHIZUKI, Y. TAKIDA, Y. TOKIZANE, S. HAYASHI, T. TAIRA and H. MINAMIDE, "Effective Photon Conversion from THz to NIR in a Slant-Stripe-Type Periodically Poled $LiNbO_3$," *The 4th Advanced Lasers and Photon Sources (ALPS'15), OPIC'15*, ALPSp14-54 (2015).

T. TAIRA, "Overview of Optical/Laser Technological Advances Leading to Practical Laser Ignition Systems," *The 3rd Laser Ignition Conference (LIC'15)*, T3A.2 (2015).

M. TSUNEKANE and T. TAIRA, "Long Time Operation of Composite Ceramic Nd:YAG/Cr:YAG Micro-Chip Lasers for Ignition," *The 3rd Laser Ignition Conference (LIC'15)*, T4A.3 (2015).

A. KAUSAS and T. TAIRA, "Passively Q-Switched Composite Sapphire/Nd:YVO_4 Micro-Laser for Nano-Scale Imaging Mass Spectroscopy," *The 3rd Laser Ignition Conference (LIC'15)*, W4A.2 (2015).

L. ZHENG, T. TAIRA, J. REN, P. LOISEAU, G. AKA and D. RYTZ, "1 MW Peak Power at 266 nm in Nonlinear $YAl_3(BO_3)_4$ (YAB) Single Crystal," *CLEO 2015*, JTu5A.33 (2015).

T. TAIRA, "Giant Micro-Photonics for High-Power Mid-IR Generation," *SPIE/SIOM Pacific-Rim Laser Damage 2015*, 9532-115 (2015).

Y. SATO, J. AKIYAMA and T. TAIRA, "Optical Amplification in Anisotropic Yb:FAP Laser Ceramics," *CLEO/Europe-EQEC 2015*, CA-P.8 (968) (2015).

T. TAIRA, A. KAUSAS and L. ZHENG, "Lens-Free Microchip Green Laser at 1 kHz," *2015 Nonlinear Optics (NLO)*, NTu3B.2 (2015).

T. TAIRA, "Giant Micro-Photonics for Laser Ignition," *9th International Physics Conference of Physical Union (BPU9)* (2015).

T. TAIRA, "Giant Micro-Photonics for High-Brightness Lasers," *The 11th Pacific Rim Conference of Ceramics Societies (PACRIM 11)*, WeF3-1 (2015).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, "Mid-Infrared Optical-Parametric Generation Pumped by Sub-Nanosecond Microchip Laser," *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, AM3A.4 (2015).

S. C. KUMAR, J. W. WEI, A. J. DEBRAY, V. KEMLIN, B. BOULANGER, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and M. EBRAHIM-ZADEH, "High-Power, Widely Tunable, Room-Temperature, Picosecond Optical Parametric Oscillator Based on Cylindrical MgO:PPLN," *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, AM3A.8 (2015).

A. KAUSAS and T. TAIRA, "> MW, mJ-High-Brightness Giant-Pulse Nd:YVO_4 Microchip Laser by Cross-Section Control," *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATh3A6 (2015).

T. TAIRA, "Domain Controlled Devices for Giant Micro-Photonics," *11th Laser Ceramics Symposium (LCS2015)*, Tu-I-9 (2015).

B-3) 総説，著書

M. BAUDISCH, H. PIRES, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, M. HEMMER and J. BIEGERT, "Sub-4-Optical-Cycle, 340-MW Peak Power, High Stability Mid-IR Source at 160 kHz," *J. Opt.* **17**, 094002 (5 pages) (2015).

T. TAIRA, T. Y. FAN and G. HUBER, "Introduction to the Issue on Solid-State Lasers," *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **21**, 0200303 (3 pages) (2015).

平等拓範,常包正樹,金原賢治,「レーザー点火」,「革新的燃焼技術による高効率内燃機関開発最前線」, 第1編 第1章 第2節, 21–43 (2015).

K. NAWATA, T. NOTAKE, H. ISHIZUKI, F. QI, Y. TAKIDA, S. FAN, S. HAYASHI, T. TAIRA and H. MINAMIDE, "Sensitive Terahertz-Wave Detector Using a Quasi-Phase-Matched $LiNbO_3$ at Room Temperature," *Proc. of SPIE* **9136**, 913614 (6 pages) (2014).

B-4) 招待講演

平等拓範,「ジャイアントパルスマイクロチップレーザー」, 第2回先端計測技術の応用展開に関するシンポジウム, 日本鉄鋼協会評価・分析・解析部会「先端レーザ応用技術を適用した鉄鋼材料・プロセスのモニタリング・解析技術フォーラム」, 仙台, 2014年12月.

T. TAIRA, "Anisotropic RE:FAP laser Ceramics by Micro-Domain Control," Laboratoire Pour l'Utilisation des Lasers Intenses, Ecole Polytechnique, Palaiseau (France), April (2015).

T. TAIRA, "Overview of Optical/Laser Technological Advances Leading to Practical Laser Ignition Systems," The 3rd Laser Ignition Conference (LIC'15), Argonne (U.S.A.), April 2015.

T. TAIRA, "Giant Micro-Photonics for High-Power Mid-IR Generation," SPIE/SIOM Pacific-Rim Laser Damage 2015, Shanghai (China), May 2015.

平等拓範,「レーザーイグニッション」, 日本学術振興会第２９８回光エレクトロニクス第１３０委員会, 東京理科大学森戸記念館, 東京, 2015年7月.

T. TAIRA, "Giant Micro-Photonics for Laser Ignition," 9th International Physics Conference of Physical Union (BPU9), Istanbul (Turkey), August 2015.

T. TAIRA, "Giant Micro-Photonics for High-Brightness Lasers," The 11th Pacific Rim Conference of Ceramics Societies (PACRIM 11), Jeju (Korea), August–September 2015.

T. TAIRA, “Domain Controlled Devices for Giant Micro-Photonics,” 11th Laser Ceramics Symposium (LCS2015), Xuzhou (China), November–December 2015.

B-5) 特許出願

特願 2014-242148,「透光性生体留置デバイス及びその利用」, 平等拓範, 佐藤庸一, 鍋倉淳一(生理研), 和氣弘明(生理研)(自然科学研究機構), 2014年.

特願 2015-207278,「Qスイッチ固体レーザー装置」, 井上光輝, 高木宏幸, 後藤太一, 平等拓範(豊橋技術科学大学, 自然科学研究機構), 2015年.

B-6) 受賞, 表彰

斎川次郎, 応用物理学会北陸支部発表奨励賞 (1998).

平等拓範, 第23回(社)レーザー学会業績賞(論文賞)(1999).

平等拓範, 第1回(財)みやぎ科学技術振興基金研究奨励賞 (1999).

平等拓範, 他, 第51回(社)日本金属学会金属組織写真奨励賞 (2001).

庄司一郎, 第11回(2001年秋季)応用物理学会講演奨励賞 (2001).

平等拓範, 他, (社)日本ファインセラミックス協会技術振興賞 (2002).

平等拓範, 文部科学省文部科学大臣賞(第30回研究功績者) (2004).

NICOLAIE PAVEL, The ROMANIAN ACADEMY Awards, The “Constantin Miculescu” Prize (2004).

斎川次郎, 佐藤庸一, 池末明生, 平等拓範, 第29回(社)レーザー学会業績賞(進歩賞)(2005).

秋山　順, 愛知県若手研究者奨励事業第2回「わかしゃち奨励賞(優秀賞)」(2008).

平等拓範, 第24回光産業技術振興協会櫻井健二郎氏記念賞 (2008).

秋山　順, 第26回(2009年春季)応用物理学会講演奨励賞 (2009).

栗村　直, 平等拓範, 谷口浩一, 三菱電線工業(株)平成21年度発明考案表彰(アメリカ特許 7106496号「波長変換用, 光演算用素子」他) (2010).

平等拓範, 米国光学会(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 (2009-2017).

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 (2012–2018).

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).

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).

3rd Pacific-rim Laser Damage (PLD 14), 国際会議プログラム委員会委員 (2013–2014).

SPIE Photonics West 2015—Components and Packaging for Laser Systems (Conference 9346), 国際会議プログラム委員会委員 (2014–2015).

SPIE/SIOM Pacific Rim Laser Damage 2015, 国際会議国際委員会委員 (2015).

The 11th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies (PacRim-11), III. NANOTECHNOLOGY AND STRUCTURAL CERAMICS, Symposium 16—Transparent Ceramics, 幹事 (2015).

Materials Committee, Advanced Solid State Lasers (ASSL) 2015, 国際会議プログラム委員会委員 (2015).

Nonlinear Optics (NLO) 2015, 国際会議諮問委員 (2015).

SPIE Photonics West 2016—Components and Packaging for Laser Systems II (Conference LA105), 国際会議プログラム委員会委員 (2015–2016).

（社）レーザー学会学術講演会第３６回年次大会プログラム委員（担当：B. レーザー装置主査）(2015–2016).

Optics & Photonics International Congress 2016 (OPIC2016), 国際会議組織委員会委員 (2015–2016).

Nonlinear Optics (NLO) 2017, 国際会議諮問委員 (2015–2017).

SPIE Photonics Europe 2016—Laser Sources and Applications (EPE111), 国際会議委員会共同議長 (2015–2016).

米国光学会 The Optical Society (OSA), Charles Hard Townes Award, 表彰委員会委員（Award Committee）(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 (2011–2016).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A)(2)（一般),「次世代セラミックレーザー」, 平等拓範 (2003年–2005年).

科学技術振興機構福井県地域結集型共同事業,「光ビームによる機能性材料加工創成技術開発」, サブグループ研究代表 平等拓範 (2000年–2005年).

産学官共同研究の効果的な推進,「輻射制御直接励起マイクロチップレーザー」, 平等拓範 (2002年–2004年).

地域新生コンソーシアム,「ヒートシンク一体型Yb:YAG マイクロチップデバイスの開発」, 平等拓範 (2004年–2005年).

NEDO,「カラーリライタブルプリンタ用高効率小型可視光光源“ Tri Color Laser ”の研究開発」, 再委託（研究代表　リコー）(2004年–2006年).

科学技術振興機構研究成果活用プラザ東海, 実用化のための育成研究,「光波反応制御内燃機関をめざしたマイクロレーザーの研究開発」, 平等拓範 (2006年–2008年).

科学技術振興機構先端計測分析技術・機器開発事業,「イオン化光源としてのマイクロチップレーザーの開発」, 再委託（研究代表　東京工業大学）(2007年–2009年).

科研費若手研究(B),「マグネシウム添加タンタル酸リチウムを用いた高効率・高出力中赤外レーザー発生」, 石月秀貴 (2007年–2008年).

科学技術振興機構産学共同シーズイノベーション化事業, 育成ステージ,「車載型マイクロレーザ点火エンジンの低燃費・高出力特性の実証研究」, 研究リーダー , 平等拓範（シーズ育成プロデューサ　(株)日本自動車部品総合研究所）(2008年–2011年).

科研費基盤研究(B),「小型可搬な広帯域波長可変中赤外レーザーの開発研究」, 平等拓範 (2009年–2011年).

科学技術振興機構先端計測分析技術・機器開発プログラム（機器開発タイプ),「次世代質量イメージングのためのUV マイクロチップレーザーを用いた計測システムの開発」, 平等拓範 (2010年–2013年).

科研費基盤研究(C),「超短パルス発生への適用を目指した傾斜型擬似位相整合デバイスの研究」, 石月秀貴 (2010年–2012年).

科学技術交流財団平成２４年度共同研究推進事業,「エンジン点火用高輝度マイクロチップレーザー」, 研究統括者　平等拓範 (2012年–2013年).

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

科研費基盤研究(A),「マイクロ固体フォトニクスによる次世代レーザー点火・燃焼計測」, 平等拓範 (2015年–2017年).

B-11) 産学連携

（株）コンポン研究所,「マイクロ固体フォトニクスの基礎研究」, 平等拓範 (2015年).

三菱電機（株),「高ピーク小型レーザの波長制御技術」, 平等拓範 (2015年).

C) 研究活動の課題と展望

先端的レーザー光源の中で，特にビーム高品質化（空間特性制御）ならびに短パルス化（時間特性制御）などの高輝度化，そしてスペクトルの高純度化を広い波長領域（スペクトル特性制御）でコンパクト化と同時に実現することは，極めて重要な課題である。すでに，マイクロ固体フォトニクスは，医療，バイオ，エネルギー，環境，ディスプレー，光メモリ分野での展開が図られつつある。特にエネルギー分野からエンジンのレーザー点火への期待は高い。一方で，コヒーレントX線からテラヘルツ波発生, 超高速レーザーの極限であるアト秒発生, さらには量子テレポーテ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フェムト秒ポンプ･プローブ分光法に応用したことである。この装置によって，半導体におけるキャリアのダイナミクスを，赤外吸収スペクトルの変化によって, 観測することができた。2 μm から 20 μm までの波長領域でキャリアのスペクトルを計測したのは, 世界ではじめてのことである。

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によって，四光波混合過程における入射光と信号光との位相スペクトルの関係について，新しい知見を得ることができた。非常に広帯域な信号光が発生される場合, 差周波混合と光整流過程が同時に起こり，それぞれの過程で発生する信号光の位相が異なるため，位相スペクトルに特徴的な構造が現れることを明らかにした。このことは，信号光のパルス幅にも影響を与えるので，単一サイクルパルスを発生させることに，非常に重要となる知見である。

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。前年度に製作したツリウム添加フッ化物ファイバーレーザーを改良し，41 fs で 1.9 μm を中心波長としたパルスを連続的に発生させる発振器を製作することができた。また, 以前, 励起光源は単一モードのレーザーを用いていたが，多モードのレーザーを励起光源として使えることを示した。多モードのレーザーは, 単一モードのレーザーよりもはるかに安いため，今後の製品化を進めるときに，非常に重要となる。

B-1) 学術論文

Y. NOMURA, Y.-T. WANG, A. YABUSHITA, C.-W. LUO and T. FUJI, “Controlling the Carrier-Envelope Phase of Single-Cycle Mid-Infrared Pulses with Two-Color Filamentation,” *Opt. Lett.* **40**, 423–426 (2015).

Y. NOMURA, M. NISHIO, S. KAWATO and T. FUJI, “Development of Ultrafast Laser Oscillators Based on Thulium-Doped ZBLAN Fibers,” *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **21**, 0900107 (7 pages) (2015).

H. SHIRAI, T.-T. YEH, Y. NOMURA, C.-W. LUO and T. FUJI, “Ultrabroadband Mid-Infrared Pump–Probe Spectroscopy Using Chirped-Pulse Up-Conversion in Gases,” *Phys. Rev. Appl.* **3**, 051002 (5 pages) (2015).

T. FUJI, H. SHIRAI and Y. NOMURA, "Ultrabroadband Mid-Infrared Spectroscopy with Four-Wave Difference Frequency Generation," *J. Opt.* **17**, 094004 (2015).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. FUJI, H. SHIRAI, C. DUCHESNE and Y. FURUTANI, "Attenuated total reflectance infrared spectroscopy with chirped-pulse upconversion," *CLEO2015: Science&Innovations*, STu4N.6 (2015).

H. SHIRAI, T.-T. YEH, Y. NOMURA, C.-W. LUO and T. FUJI, "Ultrabroadband mid-infrared pump-probe spectroscopy using chirped-pulse upconversion," *CLEO2015: Science&Innovations*, STh1H.2 (2015).

T. FUJI, H. SHIRAI, C. DUCHESNE and Y. FURUTANI, "Single-shot attenuated total reflectance infrared spectroscopy with chirped-pulse upconversion," *CLEO/Europe2015*, CF-P.30 (2015).

B-3) 総説，著書

T. FUJI, Y. NOMURA and H. SHIRAI, "Generation and characterization of phase-stable sub-single-cycle pulses at 3000 cm^{-1}," *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **21**, 8700612 (12 pages) (2015).

藤　貴夫，野村雄高，白井英登,「7 フェムト秒中赤外光パルスの発生と分光計測応用」, *光学* **44**, 68–73 (2015).

藤　貴夫，野村雄高,「四光波差周波混合により発生する単一サイクルパルスのキャリア・エンベロープ位相」, *レーザー研究* **43**, 512–516 (2015).

B-4) 招待講演

野村雄高，藤　貴夫,「電場波形を測定可能な周波数分解光ゲート法」, レーザー学会学術講演会第３５回年次大会, 東京都港区, 2015年1月.

藤　貴夫,「超広帯域赤外光パルス発生と位相制御」, 第6回超高速光エレクトロニクス研究会, 柏, 2015年1月.

藤　貴夫,「超短パルス発生・制御からみた分極反転デバイスへの期待」, 第６２回応用物理学会春季学術講演会, 平塚, 2015年3月.

T. FUJI, H. SHIRAI and Y. NOMURA, "Generation and application of phase-stable sub-cycle mid-infrared pulses," PhotonicsNorth2015, HIGHPOWER-10-16-5, Ottawa (Canada), June 2015.

T. FUJI and Y. NOMURA, "Carrier-envelope phase of single-cycle pulses generated through filamentation," Ultrafast Optics 2015, no. 45, Beijing (China), August 2015.

T. FUJI, "Waveform characterization of ultrashort pulses," OPTIC2015, 2015-FRI-S0302-o001, Hsinchu (Taiwan), December 2015.

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).

藤　貴夫，野村雄高，白井英登, レーザー学会業績賞（進歩賞）(2015).

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 (2015–2016).

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).

CLEO/USA2015座長 (2015).

CLEO/Europe2015座長 (2015).

レーザー学会「ファイバーレーザー技術」専門委員会委員 (2015–). (野村雄高)

B-8) 大学での講義, 客員

ウィーン工科大学, 博士論文審査員(Tadas Balciunas), 2015年 7月 27日.

福井大学大学院工学研究科, 電気・電子工学特別講義, 2015年 7月 30日–31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,「ツリウム添加ファイバーによるフェムト秒レーザーの開発」, 野村雄高 (2012年–2013年).

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).

光科学技術研究振興財団研究助成,「自己参照による光電場波形の直接計測」, 藤　貴夫 (2015年–2016年).

科研費若手研究(B),「単一サイクル赤外光パルスを用いた高速赤外吸収分光」, 白井英登 (2015年–2016年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携プロジェクト,「新規赤外フェムト秒レーザーによる超深部シナプス内分子活性化イメージング」, 藤　貴夫 (2015年–2017年).

天田財団一般研究開発助成,「高出力 2μm 超短パルスレーザー光源の開発」, 野村雄高 (2015年–2017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。また, 本研究室で独自に開発した新しい光電場波形計測法を用いて, 非線形光学における新規の現象を観測することができた。今後も, 光電場波形に敏感な現象を本手法で観測し, 新しい光科学の知見を得ることに期待している。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 41 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。現在, 増幅器の開発を進め, 様々な分野へ応用することを考えている。

6-4　物質分子科学研究領域

電子構造研究部門

横　山　利　彦（教授）（2002 年 1 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：表面磁性，Ｘ線分光学，磁気光学

A-2) 研究課題：

a) 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

b) 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

c) Ｘ線吸収分光，Ｘ線磁気円二色性などを用いた磁性材料等の構造・物性解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 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（PEFC）電極触媒の in situ 測定を継続して行っている。発電中の PEFC カソードにおける濡れた Pt/C 電極が印加電圧に依存して白金の酸化状態をどのように変えるか，詳細な変化を検出することに成功した。

b) シンクロトロン放射光と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ダイナミクスを，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（シンクロトロン放射光）あるいはピコ秒（Ｘ線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。Ｘ線自由電子レーザー SACLA を用いた酸化タングステン (VI) のサブピコ秒光励起過程追跡に成功し，プレスリリースを行った。

c) メタ磁性転移（反強磁性－強磁性）を示す FeRh 規則合金薄膜の格子揺らぎ・局所熱膨張をＸ線吸収分光法により解析し，転移機構モデルを提唱した。また，分子研シンクロトロン放射光施設 UVSOR-III BL4B を用いた高磁場極低温Ｘ線磁気円二色性法（XMCD）を共同利用公開し，様々な磁性薄膜の磁気特性検討について国内外との共同研究を広く実施している。

B-1) 学術論文

Y. WAKISAKA, Y. UEMURA, T. YOKOYAMA, H. ASAKURA, H. MORIMOTO, M. TABUCHI, D. OHSHIMA, T. KATO and S. IWATA, “Anomalous Structural Behavior in the Metamagnetic Transition of FeRh Thin Films from a Local Viewpoint,” *Phys. Rev. B* **92**, 184408 (7 pages) (2015). DOI: 10.1103/PhysRevB.92.184408

Y. F. WANG, S. B. SINGH, M. V. LIMAYE, Y. C. SHAO, S. H. HSIEH, L. Y. CHEN, H. C. HSUEH, H. T. WANG, J. W. CHIOU, Y. C. YEH, C. W. CHEN, C. H. CHEN, S. C. RAY, J. WANG, W. F. PONG, Y. TAKAGI, T. OHIGASHI, T. YOKOYAMA and N. KOSUGI, “Visualizing Chemical States and Defects Induced Magnetism of Graphene Oxide by Spatially Resolved-X-Ray Microscopy and Spectroscopy,” *Sci. Rep.* **5**, 15439 (2015).

J. OKABAYASHI, S. MIYASAKA, K. HEMMI, K. TANAKA, S. TAJIMA, H. WADATI, A. TANAKA, Y. TAKAGI and T. YOKOYAMA, “Investigating Orbital Magnetic Moments in Spinel-Type MnV_2O_4 Using X-Ray Magnetic Circular Dichroism,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 104703 (5 pages) (2015).

K. EGUCHI, T. NAKAGAWA, Y. TAKAGI and T. YOKOYAMA, "Direct Synthesis of Vanadium Phthalocyanine and its Electronic and Magnetic States in Monolayer and Multilayer on Ag(111)," *J. Phys. Chem. C* **119**, 9805–9815 (2015).

M. KATO, K. KIMIJIMA, M. SHIBATA, H. NOTSU, K. OGINO, K. INOKUMA, N. OHTA, H. UEHARA, Y. UEMURA, N. OYAIZU, T. OHBA, S. TAKAKUSAGI, K. ASAKURA and I. YAGI, "Deprotonation of a Dinuclear Copper Complex of 3,5-Diamino-1,2,4-Triazole for High Oxygen Reduction Activity," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 8638–8641 (2015).

B-3) 総説，著書

Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA and Y. IWASAWA, "*In situ* observation of fuel cells by ambient-pressure hard X-ray photoelectron spectroscopy," *SPring-8 Research Frontiers 2014*, 64–65 (2015).

高木康多，横山利彦,「燃料電池電極の即時観察法」, *エネルギーデバイス* **2**, 58–64 (2015).

B-4) 招待講演

横山利彦,「X線吸収微細構造分光の将来展望」, 第５６回高圧討論会シンポジウム「コヒーレント放射光を利用した新しい高圧力科学 III」, 広島, 2015年 11月.

横山利彦,「XAFS の解釈」, 日本 XAFS 研究会夏の学校, 八王子, 2015年 9月.

横山利彦,「XAFS 関連研究の現状と今後の展望：光源検討委員会での将来光源に関する議論」, 第１８回日本 XAFS 討論会（JXAFS18), つくば, 2015年 7月.

T. YOKOYAMA and Y. TAKAGI, "Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy of Polymer Electrolyte Fuel Cells under Working Conditions," New Trends in X-Ray Absorption and Photoelectron Spectroscopy and Multiple Scattering Theory (MSNano), Chiba, July 2015.

横山利彦，田渕雅夫，朝倉清高,「XAFS 関連研究の現状と今後の展望」, 日本放射光学会年会（JSR2015）「趣旨説明・光源検討委員会での将来光源に関する議論」, 立命館大, 草津, 2015年 1月.

高木康多,「光電子分光によるオペランド計測」, ２０１５年真空・表面科学合同講演会, つくば, 2015年 12月.

高木康多,「硬X線分光法を用いたPt/C 電極の酸化反応のその場観察」, 第８回新電極触媒シンポジウム&宿泊セミナー , 三島, 2015年 10月.

高木康多,「雰囲気制御型光電子分光装置による燃料電池電極触媒のin situ 測定」, 第７回岩澤コンファレンス, 千葉, 2015年 9月.

高木康多,「雰囲気光電子分光実験～表面化学の改革！　反応ガス中での触媒反応の進行を原子・分子レベルで直接視る！～」, 日本表面科学会関東支部第1回関東支部セミナー表面・薄膜分析シリーズ Vol.1, 東京都文京区, 2015年 5月.

Y. TAKAGI, "In Situ Observation of Fuel Cell Electrodes by Near Ambient Pressure HAXPES," The 6th International Conference on Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy HAXPES 2015, Hsinchu (Taiwan), March 2015.

上村洋平,「時分割XAFS による光触媒の構造・キャリアダイナミクス」, 第３５回表面科学学術講演会, つくば, 2015年 12月.

上村洋平,「放射光及び XFEL での時間分解 XAFS による構造ダイナミクス」, 第７回岩澤コンファレンス, 千葉, 2015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 研究会会長 (2015–).

日本 XAFS 研究会幹事 (2001–2007, 2010–2014).

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 (1998–2015).

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).

名古屋工業大学人事部会外部委員 (2015).

本多記念会本多記念研究奨励賞選考委員 (2012, 2013, 2015).

B-8) 大学での講義, 客員

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

受託研究, NEDO 固体高分子形燃料電池利用高度化技術開発事業「普及拡大化基盤技術開発」触媒・電解質・MEA 内部現象の高度に連成した解析, セル評価／ MEA における性能発現および耐久劣化機構の解析に基づく設計基盤技術の確立／ MEA 劣化機構解明,「雰囲気制御型硬X線光電子分光法を用いた燃料電池触媒の in-situ 状態解析」, 横山利彦 (2015年–2017年).

科研費基盤研究(A)(一般),「微量元素高速時間分解X線吸収分光の開発と機能性材料への展開」, 横山利彦 (2015年–2017年).

科研費若手研究(A),「大気圧硬X線光電子分光装置の開発と燃料電池電極触媒のオペランド測定」, 高木康多 (2015年–2016年).

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ー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).

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).

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).

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きた。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。現在, 薄膜・表面磁性研究はUVSOR-III でのX線磁気円二色性を用いた共同研究のみを継続しており, 装置が安定に順調に運転さ

れているため次年度以降も精力的に共同研究を進める。

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，既にプレスリリース2件を含めて十分な成果が挙がっている。今年度もFeRh 薄膜で論文を発表した。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，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きたが，2015年度は，開発した雰囲気制御型硬X線光電子分光システムを用いた燃料電池動作下（湿った酸素中）での電圧依存硬X線光電子分光測定を行った。現状では 4000 Pa 程度が測定最大圧力であるが，100,000 Pa（= 大気圧）まで測定できるシステムに改良中であり，次年度中に完成させる。

2013年7月に着任した上村洋平助教は，シンクロトロン放射光やX線自由電子レーザーを用いたナノ・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っている。これまでの高速時間分解X線吸収分光測定は，ポンプレーザーとプローブX線の繰返し周波数の大きな相違に基づくパルスピッキングの必要性から，高速で低エネルギー分解能のX線検出器の利用を余儀なくされており，そのため測定試料が高濃度に限られていた。現在，Photon Factory Advanced Ring のシングルバンチ運転と高繰り返しレーザーを完全同期させ，高エネルギー分解能X線検出器を用いた超微量元素の高速時間分解X線吸収分光法を開発中である。

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

T. NAKAMURA, K. FURUKAWA, T. TERAUCHI and Y. KOBAYASHII, “Microscopic Evidence of a Metallic State in the One-Pot Organic Conductor, Ammonium Tetrathiapentalene Carboxylate,” *Phys. Status Solidi RRL* **9**, 480–484 (2015).

P. PANDIT, T. NAKAMURA and S. HIGASHIBAYASHI, “Synthesis and Acid-Responsive Electron Transfer Disproportionation of Non- and Tetramesityl-Substituted 1,1’,9,9’-Bicarbazole,” *Chem. Lett.* **44**, 1336–1338 (2015).

K. YAMAMOTO, T. NAKAMURA and S. HIGASHIBAYASHI, “Acid-Regulated Electron Transfer Disproportionation of a Non-Substituted Tetramethyl-Biacridine Derivative,” *Chem. Lett.* **44**, 1229–1231 (2015).

S. JIN, M. SUPUR, M. ADDICOAT, K. FURUKAWA, L. CHEN, T. NAKAMURA, S. FUKUZUMI, S. IRLE and D. JIANG, “Creation of Superheterojunction Polymers via Direct Polycondensation: Segregated and Bicontinuous Donor–Acceptor π-Columnar Arrays in Covalent Organic Frameworks for Long-Lived Charge Separation,” *J. Am. Chem. Soc.* **137**, 7817–7827 (2015).

P. PANDIT, K. YAMAMOTO, T. NAKAMURA, K. NISHIMURA, Y. KURASHIGE, T. YANAI, G. NAKAMURA, S. MASAOKA, K. FURUKAWA, Y. YAKIYAMA, M. KAWANOE and S. HIGASHIBAYASHI, “Acid/Base-Regulated Reversible Electron Transfer Disproportionation of N–N linked Bicarbazole and Biacridine Derivatives,” *Chem. Sci.* **6**, 4160–4173 (2015).

B-4) 招待講演

中村敏和,「多周波パルスESR による分子性固体の電子状態研究」, 第５４回電子スピンサイエンス学会年会（SEST2015）シンポジウム「量子スピン系のESR 研究」, 朱鷺メッセ, 新潟, 2015年 11月.

中村敏和,「多周波パルスESR 分光法の物性物理への応用」, 日本物理学会第７０回年次大会　シンポジウム「スピン分光法の最近の現状と展望」, 早稲田大学, 東京, 2015年 3月.

B-6) 受賞，表彰

中村敏和, 科研費審査委員の表彰 (2015).

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).

電子スピンサイエンス学会運営理事 (2006–2011).

電子スピンサイエンス学会副会長 (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).

日本化学会化学便覧基礎編改訂６版編集委員会委員 (2015–2018).

学会の組織委員等

Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006, Novosibirsk, Russia, International Organizing Committee, 組織委員 (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, 組織委員 (2007).

Asia Pacific EPR Society—EPR Symposium 2008, Cairns, Queensland, Australia, International Advisory Committee, 組織委員 (2008).

第3回分子科学討論会2009（名古屋), プログラム委員 (2009).

第49回電子スピンサイエンス学会年会（名古屋), プログラム委員 (2010).

Asia Pacific EPR/ESR Symposium 2012, Oct. 11th–15th, 2012, Beijing, China, International Organizing Committee, 組織委員 (2012).

Joint Conference of APES2014, IES and SEST2014 (APES-IES-SEST2014), Nov. 12th–16th, 2014, Nara, Japan, プログラム委員長，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).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2013–2015).

学会誌編集委員

電子スピンサイエンス学会編集委員 (2003).

電子スピンサイエンス学会編集委員長 (2004–2005).

電子スピンサイエンス学会編集アドバイザー (2006–2013).

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,「機能物性科学」, 2015年5月12日–6月23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ダイナミックス研究」, 中村敏和 (2008年–2011年).

科研費特定領域研究「１００テスラ領域の強磁場スピン科学」(公募研究),「シアノバクテリア由来光化学II複合体の高磁場ESRによる研究」, 中村敏和 (2008年–2009年).

科研費特定領域研究,「分子導体における電荷の遍歴性と局在性の研究」, 代表者　薬師久弥(中村敏和は準代表者で実質独立)(2003年–2007年).

科研費挑戦的萌芽研究,「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」(公募研究),「光誘起機能性材料のアドバンスドESR によるスピンダイナミクス研究」, 古川　貢(2009年–2010年).

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

C)　研究活動の課題と展望

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

分子機能研究部門

平　本　昌　宏（教授）（2008 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：有機半導体，有機太陽電池，有機エレクトロニクスデバイス

A-2) 研究課題：

a) 有機半導体単結晶のホール効果測定

b) 超バルクヘテロ接合有機単結晶太陽電池の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 有機単結晶にドーピングして pn 制御し，ホール効果測定によって，キャリアタイプ，キャリア移動度，キャリア濃度を決定することに, 世界で初めて, 成功した。具体的には, ルブレン単結晶表面上に, ルブレンを超低速蒸着（0.003 nm/s）すると, 六角形の結晶の方位が揃ってホモエピ成長し, アクセプター（$FeCl_3$）ドーピングにも成功した。この, アクセプタードープルブレン単結晶において，変調磁場に同期して変化する Hall 起電圧を観測できた。キャリアタイプはホールで，100 ppm までのキャリア濃度増大（約 1000 倍）と，それ以上の濃度での，散乱による移動度低下を観測した。以上の結果は，有機単結晶エレクトロニクス分野を開拓する基礎となる成果である。

b) 人工的に設計可能な，有機単結晶多層膜の作成技術を確立し，光電流を横方向（膜面方向）に取り出すタイプの, 超バルクヘテロ接合セルの作製に成功した。これまで，有機太陽電池は，ドナー性とアクセプター性の有機半導体を混合した，バルクヘテロ接合が用いられてきたが，光生成したホールと電子を取り出す膜厚方向のルート形成が困難で，人工的設計が不可能であった。今回，膜面方向に 10 cm^2/Vs の超高速ホール，電子移動度を示す，有機単結晶膜を組み合わせることで，ミリメータオーダーの膜面方向長距離キャリア輸送に成功し，超バルクヘテロ接合セルが，高性能の光電変換能力を示すことを実証した。超バルクヘテロ接合は，有機太陽電池分野で，これまでにない新しいセル設計コンセプトで，効率を大幅に向上できるポテンシャルを秘めている。

B-1) 学術論文

Y. YAMASHINA, Y. SHINMURA, N. ISHIYAMA, T. KAJI and M. HIRAMOTO, “Mapping of Band-Bending for Organic *pn*-Homojunctions,” *J. Appl. Phys.* **117**, 125501 (5 pages) (2015).

M. KIKUCHI, Y. SHINMURA, T. KAJI, T. KONO, Y. YOSHIDA and M. HIRAMOTO, “Doping Induced Photocurrent Enhancement in Organic Solar Cells Using High Photovoltage Organic Semiconductor,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **54**, 111601 (5 pages) (2015).

C. OHASHI, Y. SHINMURA, M. KUBO and M. HIRAMOTO, “ppm-Doping Effects in the Simplest n^+p-Homojunction Organic Photovoltaic Cells,” *Org. Electron.* **27**, 151–154 (2015).

F. BUSSOLOTTI, J. YANG, M. HIRAMOTO, T. KAJI, S. KERA and N. UENO, “Direct Detection of Density of Gap States in C_{60} Single Crystals by Photoemission Spectroscopy,” *Phys. Rev. B* **92**, 115102 (6 pages) (2015).

B-3) 総説，著書

平本昌宏，新村祐介,「有機半導体のpn制御と有機薄膜太陽電池」,*日本真空学会誌*, **58**, pp. 91–96 (2014).

平本昌宏,「有機半導体のドーピングによるpn制御」,「粉体・微粒子分野における分析事例集」, 技術情報協会（株）編, 11月刊 (2015).

平本昌宏,「有機半導体のセブンナイン（99.99999%, 7N）超高純度化」,「粉体・微粒子分野における分析事例集」, 技術情報協会（株）編, 11月刊 (2015).

平本昌宏,「第3分子導入による共蒸着膜の結晶化相分離」,「粉体･微粒子分野における分析事例集」, 技術情報協会（株）編, 11月刊 (2015).

B-4) 招待講演

M. HIRAMOTO, “Bandgap Science for Organic Solar Cells,” EMN (Energy Materials Nanotechnology) Meeting on Photovoltaics, Orlando (U.S.A.), January 2015.

M. HIRAMOTO, “Bandgap Science for Organic Solar Cells,” JSPS-DST, Asian Academic Seminar and School 2015, “Spectroscopy, Theoretical Chemistry and Chemistry of Materials,” Indian Association for the Cultivation of Science, Kolkata (India), March 2015.

M. HIRAMOTO, “Bandgap Science for Organic Solar Cells,” Invited Lecture; Department of Materials, Imperial College, London (U.K.), May 2015.

M. HIRAMOTO, “Bandgap Science for Organic Solar Cells,” 2015 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM), C-1 Organic and Perovskite Photovoltaics, Sapporo (Japan), September 2015.

M. HIRAMOTO, “Bandgap Science for Organic Solar Cells,” 3rd Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, JSPS-NSFC Bilateral Program, Okazaki Conference Center, Okazaki (Japan), December 2015.

平本昌宏,「有機半導体のpn制御と太陽電池応用」, 有機デバイス・材料研究討論会, 主催：電子情報通信学会, エレクトロニクスソサエティ, 協賛：電気学会, 自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター, 2015年1月.

平本昌宏,「有機太陽電池のためのバンドギャップサイエンス」, CREST「太陽光を利用した独創的クリーンエネルギー生成技術の創出」研究領域第3回公開シンポジウム, 豊田工業大学, 名古屋, 2015年1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」, 第5回PHOENICS国際シンポジウム, 熊本大学百周年記念館, 熊本, 2015年2月.

平本昌宏,「分子デバイス展開1」（有機半導体のpn制御と有機太陽電池応用), 所長招聘研究会「分子導体研究の展開」井口先生, 丸山先生を偲んで, 分子科学研究所, 岡崎, 2015年4月.

平本昌宏,「有機太陽電池のためのバンドギャップサイエンス」, 異分野融合ワークショップ「有機太陽電池の現状と展望」, 奈良先端大学院大学, 生駒, 2015年11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 (2009–2014).

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).

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).

ERATO (戦略的創造研究推進事業)追跡評価評価委員(評価委員長:阿知波首都大学東京名誉教授) (中村活性炭素クラスタープロジェクト(2004–2009) 追跡評価) (2015.7–10).

NEDO (新エネルギー・産業技術総合開発機構)「次世代材料評価基盤技術開発/有機薄膜太陽電池材料の評価基盤技術開発」研究評価委員会(分科会)委員(中間評価) (2015.8.19–11.4).

学会誌編集委員

Japanese Journal of Applied Physics (JJAP) 誌編集委員 (2001–2002, 2004–2007).

Japanese Journal of Applied Physics (JJAP) 誌ゲストエディター (2005).

競争的資金等の領域長等

東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究「有機半導体デバイスの基礎と応用」研究代表者 (2003–2005).

さきがけ「太陽光と光電変換」研究領域　領域アドバイザー (2009–).

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

その他

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).

岡崎ビジネス大賞評価委員 (2012).

岡崎ものづくり協議会学識委員 (2011–).

B-8) 大学での講義，客員

大阪大学ナノ高度学際教育研究訓練プログラムナノ社会人教育夜間講義, 大阪大学中之島センター,「有機太陽電池(I)(II)」, 2015年1月6日.

B-9) 学位授与

新村祐介,「Effects of Doping in Photovoltaic Organic Semiconductor Films」, 2015年3月, 博士（理学）.（論文博士）

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 (2006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).

NEDO（新エネルギー・産業技術総合開発機構), エネルギー・環境新技術先導プログラム「pn 制御有機半導体単結晶太陽電池の開発」, 平本昌宏, (2015年–2016年).

B-11) 産学連携

日本化薬(株), NEDO エネ環プロジェクトにおいて共同研究, 平本昌宏 (2015年).

C) 研究活動の課題と展望

NEDO エネルギー・環境新技術先導プログラム「pn 制御有機半導体単結晶太陽電池の開発」(代表：平本, 分担：伊崎(豊橋技科大), 内藤(大阪府大), 池田(日本化薬(株))の遂行のために, 研究員4名(新村, 菊池, 廣田, 久保(～ 6/30))を雇用している。また, 博士課程学生2名(大橋(D 2), 新宅(D 1)), タイ国マヒドール大, Thidarat Kunawong (D2, 2015.11–2016.3)が在籍している。

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」が, 2015.3 に終了し, 評価A^+であった。この成果を海外学会で積極的に発表した。

NEDO プロジェクトでは, 先のCREST プロジェクトによって開拓した, 有機 pn 制御技術を, キャリアハイウェー構造を持ち, 100 cm^2/Vs に達する超高速移動度を示す, 有機単結晶膜の形成技術と結合して, 超バルクヘテロ接合セルなど, 超高性能有機太陽電池へのブレイクスルーを起すことを目指している。最終目標は, 有機単結晶エレクトロニクス分野を確立することである。

2週に1度, 1日かけて研究報告とディスカッションを強力に行っている。CREST-NEDO 研究員の新村が, 論文博士学位を取得した。Kunawong 氏が加わったため, 報告会を英語で行なうようになった。研究員, 研究室の国際化をさらに進める。

江　　東　林（准教授）（2005 年 5 月 1 日～ 2015 年 12 月 31 日）*)

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) 新奇な２次元高分子の合成および新しい機能の開拓に成功した。三角形トポロジーを有する２次元高分子を合成し，超高密度π電子系を構築した（*Nat. Commun.* 2015）。化学的に安定な２次元高分子を合成し，有機触媒機能を開拓した（*Nat. Chem.* 2015）。２次元高分子の蓄電機能（*Angew. Chem., Int. Ed.*，*Sci. Rep.* 2015），CO_2 貯蔵機能（*J. Am. Chem. Soc.*，*Angew. Chem., Int. Ed.* 2015），電荷分離機能（*J. Am. Chem. Soc.* 2015）および光応答機能（*Angew. Chem., Int. Ed.* 2015）を明らかにした。

b) 多孔性共役高分子に関して，薄膜作製手法の確立（*Angew. Chem., Int. Ed.* 2015）と新規な機能発現に成功した。光捕集アンテナ機能（*Sci. Rep.* 2015），高蛍光性機能（*Angew. Chem., Int. Ed.* 2015），光電変換機能（*Angew. Chem., Int. Ed.* 2015），触媒機能（*Sci. Rep.* 2015）を開拓した。

B-1) 学術論文

C. GU, N. HUANG, Y. CHEN, L. QIN, H. XU, S. ZHANG, F. LI, Y. MA and D. JIANG, "π-Conjugated Microporous Polymer Films: Designed Synthesis, Conducting Properties and Photoenergy Conversions," *Angew. Chem., Int. Ed.* **54**, 13594–13598 (2015). (Hot Paper)

X. CHEN, M. ADDICOAT, E. JIN, H. XU, T. HAYASHI, F. XU, N. HUANG, S. IRLE and D. JIANG, "Designed Synthesis of Double-Stage Two-Dimensional Covalent Organic Frameworks," *Sci. Rep.* **5**, 14650 (2015).

H. XU, J. GAO and D. JIANG, "Stable, Crystalline, Porous, Covalent Organic Frameworks As A Platform for Chiral Organocatalysis," *Nat. Chem.* **7**, 905–912 (2015). (Highlighted by Chemistry World, Chemeurope.Com., Phys.Org. and Synthlett, Press release by IMS)

C. GU, N. HUANG, Y. WU, H. XU and D. JIANG, "Design of AIE-Based Highly Photofunctional Porous Polymer Films with Controlled Thickness and Prominent Microporosity," *Angew. Chem., Int. Ed.* **54**, 11540–11544 (2015).

S. DALAPATI, M. ADDICOAT, S. JIN, T. SAKURAI, J. GAO, H. XU, S. IRLE, S. SEKI and D. JIANG, "Rational Design of Crystalline Supermicroporous Covalent Organic Frameworks with Triangular Topologies," *Nat. Commun.* **6**, 7786 (2015).

X. CHEN, J. GAO and D. JIANG, "Designed Synthesis of Porphyrin-Based Two-Dimensional Covalent Organic Frameworks with Highly Ordered Structures," *Chem. Lett.* **44**, 1257–1259 (2015).

N. HUANG, R. KRISHNA and D. JIANG, "Tailor-Made Pore Surface Engineering in Covalent Organic Frameworks: Systematic Functionalization for Performance Screening," *J. Am. Chem. Soc.* **137**, 7079–7082 (2015).

S. JIN, M. SUPUR, M. ADDICOAT, K. FURUKAWA, L. CHEN, T. NAKAMURA, S. FUKUZUMI, S. IRLE and D. JIANG, "Creation of Superheterojunction Polymers via Direct Polycondensation: Segregated and Bicontinuous Donor-Acceptor π-Columnar Arrays in Covalent Organic Frameworks for Long-Lived Charge Separation," *J. Am. Chem. Soc.* **137**, 7817–7827 (2015).

N. HUANG, X. DING, J. KIM, H. IHEE and D. JIANG, "A Photoresponsive Smart Covalent Organic Framework," *Angew. Chem., Int. Ed.* **54**, 8704–8707 (2015). (VIP)

Y. WU, J. GAO and D. JIANG, "π-Electronic Covalent Organic Framework Catalyst: π-Walls as Catalytic Beds for Diels-Alder Reactions Under Ambient Conditions," *Chem. Commun.* **51**, 10096–10098 (2015). (Front Cover)

F. XU , H. XU, X. CHEN, D. WU, Y. WU, H. LIU, C. GU, R. FU and D. JIANG, "Radical Covalent Organic Frameworks: A General Strategy to Immobilize Open-Accessible Polyradicals and High-Performance Capacitive Energy Storage," *Angew. Chem., Int. Ed.* **54**, 6814–6818 (2015).

X. CHEN, M. ADDICOAT, E. JIN, L. ZHAI, H. XU, N. HUANG, Z. GUO, L. LIU, S. IRLE and D. JIANG, "Locking Covalent Organic Frameworks with Hydrogen Bonds: General and Remarkable Effects on Crystalline Structure, Physical Properties, and Photochemical Activities," *J. Am. Chem. Soc.* **137**, 3241–3247 (2015).

C. GU, N. HUANG, F. XU, J. GAO and D. JIANG, "Cascade Exciton-Pumping Engines with Manipulated Speed and Efficiency in Light-Harvesting Porous π-Network Films," *Sci. Rep.* **5**, 8867 (2015).

F. XU, S. JIN, H. ZHONG, D. WU, X. YANG, X. CHEN, H. WEI, R. FU and D. JIANG, "Electrochemically Active, Crystalline, Mesoporous Covalent Organic Frameworks on Carbon Nanotubes for Synergistic Lithium Battery Energy Storage," *Sci. Rep.* **5**, 8225 (2015).

N. HUANG, X. CHEN, R. KRISHNA and D. JIANG, "Two-Dimensional Covalent Organic Frameworks for Carbon Dioxide Capture via Channel-Wall Functionalization," *Angew. Chem., Int. Ed.* **54**, 2986–2990 (2015).

B-4) 招待講演（* 基調講演）

D. JIANG, "Porous Organic Films for Optoelectronic Applications," The 7th International Symposium on Advanced Materials and Nanotechnology (AMN-7), Nelson (New Zealand), February 2015.* (Keynote Lecture)

D. JIANG, "Porous Polymer Nanofilms with AIE Skeletons," The 2nd International Symposium on Aggregation-Induced Emission, Guangzhou (China), May 2015.

D. JIANG, "Two-Dimensional Polymers and Covalent Organic Frameworks," The 13th International Conference on Polymer Advanced Technologies (PAT2015), Hangzhou (China), June 2015.

D. JIANG, "Two-Dimensional Polymers and Covalent Organic Frameworks," 8th International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT2015), Singapore, June–July 2015.

D. JIANG, "Conjugated Microporous Polymers," 8th International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT2015), Singapore, June–July 2015.

D. JIANG, "Covalent Organic Frameworks," Commemorative Golden Jubilee Chemistry Conference, Singapore, August 2015.

D. JIANG, "Covalent Organic Frameworks for Electrochemical Energy Storage and Power Supply," 250th American Chemical Society National Meeting, Boston (U.S.A.), August 2015.

D. JIANG, “Supramolecular Interactions as A Powerful Tool for the Structural Design and Functional Control of Covalent Organic Frameworks,” China NANO2015, Beijing (China), September 2015.

D. JIANG, “Two-Dimensional Covalent Organic Frameworks,” 1st International Symposium on Energy Chemistry and Materials, Fudan University, Shanghai (China), October 2015.* (Keynote lecture)

D. JIANG, “Covalent Organic Frameworks: A Platform for Crystalline Organic Optoelectronics,” 1st European Conference on Metal Organic Frameworks and Porous Polymers, Potsdam (Germany), October 2015.* (Keynote lecture)

D. JIANG, “Two-Dimensional Covalent Organic Frameworks for Challenging Energy Issues,” Pacifichem 2015, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

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

The Second International Symposium on Dendrimer, Local Organizing Committee (2000).

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

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

Japan-China Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Hokkaido, August 2–5, Co-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, Co-Organizer (2010).

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

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

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

The 4th International Conference on Metal–Organic Frameworks and Open Framework Compounds, Kobe, September 28–October 2, Local Organizing Committee (2014).

China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Tianjin University, December 10–14, Co-Organizer (2014).

Frontiers of Organic Porous Materials: Structures, Properties and Applications, Symposium 223 in Pacifichem 2015@ Hawai, Honolulu, Co-Organizer (2015).

B-8) 大学での講義，客員

復旦大学高分子専攻,「Advanced Porous Materials」, 2015年12月12日.

清華大学化学専攻,「Two-Dimensional Polymers」, 2015年10月28日.

総合研究大学院大学物理科学研究科アジア冬の学校,「Two-Dimensional Organic Frameworks Challenging for Energy Issues」, 2015年12月3日.

B-9) 学位授与

Hong XU,「Design and Functions of Imine-Linked Covalent Organic Frameworks」, 2015年3月, 博士(理学).

Ning Huang,「Design and Functions of Porous Organic Polymers」, 2015年9月, 博士(理学).

Yang Wu,「Design, Synthesis, and Functionalization of π-Electronic Two-dimensional Covalent Organic Frameworks」, 2015年9月, 博士(理学).

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).

B-11) 産学連携

トヨタ自動車(株), 共同研究,「燃料電池電極触媒用カーボン担体の研究開発」, 江　東林 (2015年).

日立化成(株), 共同研究,「 耐熱性二次元高分子 」, 江　東林 (2015年).

C)　研究活動の課題と展望

二次元高分子の本質に迫る。

＊）2016年1月1日北陸先端科学技術大学院大学マテリアルサイエンス研究科教授

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) 中性脂質二重膜表面で誘起されるアミロイド β 会合状態の固体 NMR を用いた構造解析

b) 固体 NMR^{13}C 同種核間複数距離同時評価のための実験法および解析法の検討

c) *Spirulina platensis* の高磁場固体 NMR による構造解析

d) カーボンブラック充填ポリイソプレンゴムの超高磁場固体 NMR による構造解析

e) 酸化劣化に伴うゴム構造変化の固体 NMR による解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) アミロイド β ペプチド（Aβ）は，アルツハイマー病の原因分子と考えられおり，凝集して不溶性のアミロイド線維を形成する。近年，同ペプチドは，細胞膜上で線維化が促進されると考えられており，中性脂質からなる脂質二重膜表面に結合して誘起される $A\beta_{40}$ 会合状態の立体構造解析を，固体 NMR を用いて行ってきた。^{13}C 安定同位体標識された同ペプチドを中性脂質 DMPC 膜に結合させた試料を用いて，マジック角試料回転（MAS）下で，^{13}C 同種核間および ^{13}C-^{15}N 異種核相関二次元 NMR を用いて，観測された全信号の連鎖帰属を行った。帰属信号の等方化学シフト値の解析から，各残基での二次構造を決定した。さらに，^{13}C 同種核間磁気双極子相互作用に基づく同種核間相関 NMR 法を用いて，隣接分子間の相関信号を観測し，隣接分子間の相対配座の解析を行った。以上の解析から，$A\beta_{40}$ が，同脂質膜結合初期段階で，24 残基目から C 末端まで分子間で平行 β シート構造を取って会合していることを解明し, その会合体構造の決定に成功した。

b) 分子の立体構造，およびパッキングが既知の絹モデルペプチドを用いて，MAS 下でスピン拡散に基づく固体 NMR^{13}C 同種核間相関 NMR 実験から，複数の原子間距離情報に基づいた構造評価法の検討を行った。一般的手法，および短時間で強い相関信号が得られる改良型手法の双方を用いて，スピン拡散時間を変化させた複数のスペクトルを測定した。前者の相関信号の強度変化の解析手法を後者の手法に適用し，既知の構造に基づく相関ピークの増加曲線と実験結果の比較検討を行った。暫定的な解析結果から, 後者の改良型手法では, より再現性が高い相関ピーク増加曲線が得られることが判明した。

c) 藻類の１種 *Spirulina platensis* は，生育温度および pH 変化の制御により，特異的な形状を取り，そのらせんピッチおよびサイズの制御が可能である。本研究では，固体 NMR を用いて，この *Spirulina* の形態変化に伴う外套膜の分子レベルでの構造や運動性の変化の解析を試みた。測定には，異なる培養条件下で生育した形態と株，薬品処理の異なる *Spirulina platensis* 個体をそのまま凍結乾燥して試料とし，920MHz NMR を用いて天然存在比同位体を観測し，高感度スペクトルを得た。測定対象が個体であり，様々な分子由来の複雑なスペクトルを与える。このため，主成分分析により，特徴的なスペクトル変化を検出し，*Spirulina* のらせん形状制御と相関が示唆されるスペクトル領域の抽出を試みた。一次解析から，各株での糖鎖構造の違いに関する明確な相関が得られた。

d) 工業用すすの一種，高耐摩耗性カーボンブラック（CB）は，イソプレンゴム（IR）への添加によりゴム全体の強度を向上させる充填剤である。本研究では, 同ゴム複合体中の CB と IR の界面, および CB から離れた IR の各構造ドメインにおいて, IR 由来の信号を観測し, 同複合体中での CB 添加による IR の局所的な分子構造変化に関する知見を得ることを目的とした。920MHz 超高磁場 NMR を用いて高速 MAS 下で先鋭な ^{1}H NMR スペクトルを観測した。CB 充填 IR の過酸化物架橋後試料及び CB 未充填 IR の未架橋試料の T_2 緩和時間測定では, 特徴的な緩和現象の変化が観測されたため検討を行っている。

e) 加硫ゴム製品は，長期間の使用による酸化により架橋密度が増加し，これ伴う硬化により性能低下を生じる。既存

研究では，イソプレンゴムでの硫黄架橋点構造に関する知見が得られているが，酸化劣化により形成される架橋点構造に関する分子論的な情報はなく，酸化劣化後の酸素含有量や物性変化量の量的関係が得られているに過ぎない。本研究では, ゴムの酸化劣化機構の解明を目的として, 固体 NMR を用いて酸化に伴うゴム構成分子の局所構造変化, および分子運動性変化などの分子情報の取得を試みた。920MHz NMR を用いて高感度で天然存在比同位体を観測し，運動性選択的スペクトルの測定および解析に基づき構造変化部位を特定した。さらに緩和時間解析により局所的運動性変化を同定し，酸化劣化に伴う架橋点構造，および物性変化の解析を行っている。

B-1) 学術論文

P. PANDIT, K. YAMAMOTO, T. NAKAMURA, K. NISHIMURA, Y. KURASHIGE, T. YANAI, G. NAKAMURA, S. MASAOKA, K. FURUKAWA, Y. YAKIYAMA, M. KAWANOE and S. HIGASHIBAYASHI, "Acid/Base-Regulated Reversible Electron Transfer Disproportionation of N–N linked Bicarbazole and Biacridine Derivatives," *Chem. Sci.* **6**, 4160–4173 (2015).

S. ITO, W. WANG, K. NISHIMURA and S. NOZAKI, "Formal Aryne/Carbon Monoxide Copolymerization to Form Aromatic Polyketones/Polyketals," *Macromolecules* **48**, 1959–1962 (2015).

T. ASAKURA, T. OHATA, S. KAMETANI, K. OKUSHITA, K. YAZAWA, Y. NISHIYAMA, K. NISHIMURA, A. AOKI, F. SUZUKI, H. KAJI, A. S. ULRICH and M. P. WILLIAMSON, "Intermolecular Packing in *B. mori* Silk Fibroin: Multinuclear NMR Study of the Model Peptide $(Ala\text{-}Gly)_{15}$ Defines a Heterogeneous Antiparallel Antipolar Mode of Assembly in the Silk II Form," *Macromolecules* **48**, 28–36 (2015).

T. IIJIMA, T. SHIMIZU and K. NISHIMURA, "^{2}H NMR Pure-Quadrupole Spectra for Paramagnetic Solids," *J. Magn. Reson.* **251**, 57–64 (2015).

B-4) 招待講演

西村勝之,「固体NMR を用いた分子科学研究」, 生命分子ダイナミクスの探求を目指す次世代NMR 研究会, 岡崎, 2015年1月.

M. YAGI-UTSUMI, K. NISHIMURA and K. KATO, "NMR characterization of conformational transition of amyloid-β peptide promoted on ganglioside clusters," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015 (Pacifichem2015), Honolulu (U.S.A.), December 2015.

K. OKUSHITA and T. ASAKURA, "Structure of *Bombyx mori* silk fibroin determined with NMR," 9th European Solid Mechanics Conference (ESMC2015), Leganés-Madrid (Spain), July 2015.

K. OKUSHITA and T. ASAKURA, "Structure of *Bombyx mori* silk fibroin studied with NMR," The 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem2015), Honolulu (U.S.A.), December 2015.

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).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2004–2009).

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 (2013–2016).

第51回NMR 討論会プログラム委員 (2012).

学会誌編集委員

日本生物物理学会欧文誌*Biophysics*, Advisory board (2005–2009).

Global Journal of Biochemistry, Editorial Board (2010–2013).

B-8) 大学での講義，客員

名古屋大学リトリート研修,「920 MHz NMR 講習」, 2015年11月17日.（奥下慶子）

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C),「非標識固体試料解析のための固体NMR 新規測定法開発」, 西村勝之 (2013年–2015年).

科研費基盤研究(C),「固体NMR による新規室温磁場配向膜を用いた膜表在性タンパク質脂質結合機構の解明」, 西村勝之 (2010年–2012年).

科研費萌芽研究,「試料状態変調型固体NMR プローブ開発とその適用」, 西村勝之 (2008年–2009年).

（財）新世代研究所研究助成,「生体含水試料のための低発熱型新規固体NMR ナノ構造解析法開発」, 西村勝之 (2005年).

科研費若手研究(B),「脂質膜結合生理活性ペプチド立体構造解析のための低発熱型固体NMR 測定法開発と適用」, 西村勝之 (2004年–2005年).

科研費若手研究(B),「スペクトル解析を容易にする常磁性物質の固体重水素 NMR 法の開発」, 飯島隆広 (2012年–2014年).

科研費若手研究(B),「揺動磁場下の固体高分解能NMR—二次元展開と高速化—」, 飯島隆広 (2008年–2009年).

科研費若手研究(B),「新規な多量子コヒーレンス生成法に基づく固体高分解能NMR」, 飯島隆広 (2006年–2007年).

科研費基盤研究(C),「タンパク質分子内情報伝達の分子機構」, 谷生道一 (2012年–2014年).

B-11) 産学連携

（株）新日鉄住金化学,「炭素材料の構造解析」, 西村勝之 (2015年).

（株）横浜ゴム,「酸化劣化に伴うゴム構造変化の解析法に関する研究」, 奥下慶子 (2015年).

C) 研究活動の課題と展望

昨年度1年間は一人で研究を行ってきたが，本年度より特任助教の奥下さんが新たに本グループに加わった。しかし，依然としてグループの規模は小さく，メンバーの増員が必要であると考えている。ここ数年間，所内外の研究グループと共同研究を通して生体分子の構造解析を行ってきた。いずれの共同研究も目標を順調に達成できている。今後，これまで培った研究ノウハウを生かし，特に脂質膜と相互作用する生体分子に関して，さらに所内外の研究グループとの共同研究を加速させたいと考えている。また生体分子に加え，所外からの分子材料の構造解析研究の依頼もあり，これらを対象とした測定法の開発研究も進めて行きたい。本年度は，念願だった当グループのNMR 分光器の更新が叶ったため，今後，共通機器で共同研究の測定を行いつつ，開発研究をグループ所有の分光器で行うことで，さらに研究を加速させたいと考えている。

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) 最近，ビタミン B12（アデノシルコバラミン）が光センサーとして機能し，光に応答した遺伝子発現の制御に関与していることが報告され，ビタミン B12 の新規な生理機能として注目を集めている。*Thermus thermophilus* に含まれる CarH は，カロテノイド色素合成酵素の発現を光依存的に制御している転写調節因子であり，アデノシルコバラミンを光センサーとして利用していると考えられているが，その構造や機能については不明な点が多く残されている。我々は，暗所で調製したアデノシルコバラミン結合型 CarH（AdoCbl-CarH）は，四量体構造を有しているが，これに可視光を照射すると単量体へと解離することを明らかにした。光照射による四量体から単量体への高次構造変化は不可逆的な変化であり，光照後のサンプルを暗所に戻しても四量体へと戻ることはなかった。CarH による DNA 結合反応の予備的な検討実験の結果，四量体構造を有している AdoCbl-CarH が DNA 結合能を有している一方で，単量体構造の CarH は DNA 結合能を示さないことが分かった。CarH による光センシング，および光による CarH の機能制御の分子機構を明らかにするためには，光感知前後での CarH の構造情報が必要不可欠である。そこで，CarH の結晶構造解析を行い，暗所で調製した AdoCbl-CarH の結晶構造解析に成功した。得られた結晶構造中で CarH は四量体を形成しており，光感知前の状態にある CarH の構造を反映していると考えられる。CarH プロトマーは三つのドメイン（N 末端側から順に DNA 結合ドメイン，helix-bundle ドメイン，Rossman-fold ドメイン）から構成されていた。現在，得られた構造を基に，CarH による光センシングの分子機構解明を進めている。

b) コリネバクテリア中に含まれるヘム取り込み系を対象とし，一連のヘム取り込みタンパク質の構造と機能の解明を進めている。本系は，コリネバクテリアの細胞表層に存在し，ヘムの結合・輸送に関与する HtaA-HtaB タンパク質と，細胞内へのヘム輸送に関与する HmuT-HmuU-HmuV タンパク質から構成されている。今年度の研究では，HmuT の結晶構造決定に成功した。HmuT は N 末端ドメインと C 末端ドメインが一本の α ヘリックスにより連結された構造をとっており，２つのドメイン間に形成されたクレフトにヘム 1 分子が結合していた。ヘムは N 末端ドメイン中の His141 と C 末端ドメイン中の Tyr240 を軸配位子とする６配位構造をとっていた。ヘム軸配位子として機能する Tyr240 は，その近傍に存在する Arg242 と水素結合を形成していた。Arg242 を Ala に置換した変異体も，野生型と同様にヘムを結合することから，この水素結合は，少なくとも HmuT のヘム結合能には影響を及ぼさないことが分かった。HmuT に結合したヘムは，ヘムの α-γ メソ炭素軸回りに互いに 180 度回転した二種類の配向が混在していた。

B-3) 総説，著書

N. MURAKI, C. KITATSUJI and S. AONO, “A new biological function of heme as a signaling molecule,” *J. Porphyrins Phthalocyanines* **19**, 9–20 (2015).

B-4) 招待講演

S. AONO, “Molecular Mechanisms of Heme Acquisition in *Corynebacterium glutamicum* Revealed by X-Ray Crystallography,” 5th Georgian Bay International Conference on Bioinorganic Chemistry, Parry Sound (Canada), May 2015.

S. AONO, “Structural basis for heme transport by HmuT in *Corynebacterium glutamicum*,” 227th The Electrochemical Society Meeting, Chicago (U.S.A.), May 2015.

S. AONO, “Regulation of heme homeostasis in Gram positive bacteria,” 17th International Conference on Biological Inorganic Chemistry (ICBIC-17), Beijing (China), July 2015.

N. MURAKI, Y. OKAMOTO and S. AONO, “Molecular Mechanisms of Heme Homeostasis in Gram-positive Bacteria,” Pacifichem 2015, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

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, 2012–2015).

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, 2014–2015).

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-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).

科研費挑戦的萌芽研究,「環境汚染物質に対する自発集積能を有する高感度汚染検出システムの構築」, 青野重利 (2015年–2016年).

C) 研究活動の課題と展望

生物は，様々な外部環境の変化に応答・対応しながら，生体内の恒常性を維持している。我々の研究グループでは，生物にとって最も重要な遷移金属イオンである鉄イオンの細胞内恒常性維持に興味をもち，細胞内の鉄イオンの恒常性維持機構解明を目的とした研究に取組んでいる。なかでも，鉄イオンを含む化合物であるヘム分子に着目し，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) 細胞内でタンパク質の運命決定を司る分子システムやアミロイド形成タンパク質を対象とした所内・国内・海外との共同研究を実施した。例えば，NMR とX線結晶構造解析ならびに分子動力学計算（奥村 G との共同研究）を駆使して，小胞体フォールディング補助酵素プロテインジスルフィドイソメラーゼが活性部位の酸化還元状態の変化に応じて基質認識ドメインの空間配置を変化させるメカニズムを明らかにした。さらに，1963 年の発見以来長い研究の歴史を持つ本酵素の基質認識様式の構造基盤を初めて明らかにすることに成功した。また，小胞体内で糖タンパク質のフォールディング状態が不全なタンパク質の存在を感知してそれにシャペロンが認識する目印（糖鎖非還元末端のグルコース残基）を付ける酵素である UGGT を活用して，安定同位体標識を施したシャペロン認識糖鎖を作出する方法論を開発し，詳細な NMR 構造解析を行う道筋をつけた。一方，固体 NMR 分光法を利用することによりアルツハイマー病の発症にかかわるアミロイドβタンパク質の膜存在下での集合中間体の構造解析を行うとともに（西村 G との共同研究),本タンパク質を捕捉して排除へと導くタンパク質 SorLA による分子認識機構を解明した（阪大蛋白研・高木淳一博士との共同研究)。さらに，ヒト免疫不全ウイルス逆転写酵素と一連の阻害剤との相互作用を NMR を用いて解析し，それらの阻害活性と阻害剤結合状態の酵素の化学シフトの相関関係を明らかにすることができた（カセサート大・Supa Hannongbua 博士との共同研究)。抗体の Fc 領域の NMR スペクトルの帰属を公開して医薬産業界からのニーズに応えるとともに，本糖タンパク質をモデル分子として遺伝子組み換えタバコや生きたカイコを用いた糖タンパク質安定同位体標識技術の開発も行った。

b) 生化学・分子生物学・超分子化学的アプローチにより様々な生体分子のアッセンブリーのメカニズムの解明に取り組むとともに，人工分子の自己組織化を利用した生体分子科学研究のツール開発を行った。非共有結合を保持した状態での質量分析法をはじめとする生化学的分析手段を駆使することにより，酵母のカーゴ受容体ホモログが pH に依存して離合集散する仕組みを明らかにすることができた。さらに，多数のサブユニットから構成されるタンパク質分解装置プロテアソームの形成過程は，非天然型のサブユニット集合体（α7 サブユニットのみから形成される 14 量体）の生成と，これが他のサブユニットとの相互作用を通じて崩壊するスクラップ・アンド・ビルドの過程を含み得ることが示された（統合バイオ・内山 G との共同研究)。一方，二段階の秩序化により構築したπ- スタック錯体の一次元集積体の磁場配向性の，生体分子の NMR 解析への応用可能性を示すとともに，生体分子と人工超分子のハイブリッドによるサイボーグ超分子を創生して糖鎖クラスターとアミロイドβタンパク質との相互作用解析に応用した（東北大 WPI-AIMR・佐藤宗太博士，東大院工・藤田 誠博士との共同研究)。この他，糖の円偏光二色性スペクトルにおける同位体効果の発見と量子化学計算に基づく解釈（横浜市大・立川仁典博士との共同研究）をはじめ，新たな研究の芽が順調に育ちつつある。

B-1) 学術論文

K. INAGAKI, T. SATOH, S. G. ITOH, H. OKUMURA and K. KATO, "Redox-Dependent Conformational Transition of Catalytic Domain of Protein Disulfide Isomerase Indicated by Crystal Structure-Based Molecular Dynamics Simulation," *Chem. Phys. Lett.* **618**, 203–207 (2015).

M. OGAWA, S. SAWAGUCHI, T. KAWAI, D. NADANO, T. MATSUDA, H. YAGI, K. KATO, K. FURUKAWA and T. OKAJIMA, "Impaired *O*-Linked *N*-Acetylglucosaminylation in the Endoplasmic Reticulum by Mutated EGF Domain-Specific *O*-Linked *N*-Acetylglucosamine Transferase Found in Adams-Oliver Syndrome," *J. Biol. Chem.* **290**, 2137–2149 (2015).

S. SATO, R. TAKEUCHI, M. YAGI-UTSUMI, T. YAMAGUCHI, Y. YAMAGUCHI, K. KATO and M. FUJITA, "Self-Assembled, π-Stacked Complex as a Finely-Tunable Magnetic Aligner for Protein RDC Observation," *Chem. Commun.* **51**, 2540–2543 (2015).

Y. KITAGO, M. NAGAE, Z. NAKATA, M. YAGI-UTSUMI, S. TAKAGI-NIIDOME, E. MIHARA, T. NOGI, K. KATO and J. TAKAGI, "Structural Basis for Amyloidogenic Peptide Recognition by SorLA," *Nat. Struct. Mol. Biol.* **22**, 199–206 (2015).

H. YAGI, N. FUKUZAWA, Y. TASAKA, K. MATSUO, Y. ZHANG, T. YAMAGUCHI, S. KONDO, S. NAKAZAWA, N. HASHII, N. KAWASAKI, T. MATSUMURA and K. KATO, "NMR-Based Structural Validation of Therapeutic Antibody Produced in *Nicotiana benthamiana*," *Plant Cell Rep.* **34**, 959–968 (2015).

H. YAGI, M. NAKAMURA, J. YOKOYAMA, Y. ZHANG, T. YAMAGUCHI, S. KONDO, J. KOBAYASHI, T. KATO, E. Y. PARK, S. NAKAZAWA, N. HASHII, N. KAWASAKI and K. KATO, "Stable Isotope Labeling of Glycoprotein Expressed in Silkworms Using Immunoglobulin G as a Test Molecule," *J. Biomol. NMR* **62**, 157–167 (2015).

S. H. KANG, H. S. JUNG, S. J. LEE, C. I. PARK, S. M. LIM, H. PARK, B. S. KIM, K. H. NA, G. J. HAN, J. W. BAE, H. J. PARK, K. C. BANG, B. T. PARK, H. S. HWANG, I.-S. JUNG, J. I. KIM, D. B. OH, D. I. KIM, H. YAGI, K. KATO, D. K. KIM and H. H. KIM, "Glycan Structure and Serum Half-Life of Recombinant CTLA4Ig, an Immunosuppressive Agent, Expressed in Suspension-Cultured Rice Cells with Coexpression of Human β1,4-Galactosyltransferase and Human CTLA4Ig," *Glycoconjugate J.* **32**, 161–172 (2015).

N. NAKAGAWA, H. YAGI, K. KATO, H. TAKEMATSU and S. OKA, "Ectopic Clustering of Cajal-Retzius and Subplate Cells Is an Initial Pathological Feature in *Pomgnt2*-Knockout Mice, a Model of Dystroglycanopathy," *Sci. Rep.* **5**, 11163 (2015).

S. SATO, Y. YOSHIMASA, D. FUJITA, M. YAGI-UTSUMI, T. YAMAGUCHI, K. KATO and M. FUJITA, "A Self-Assembled Spherical Complex Displaying a Gangliosidic Glycan Cluster Capable of Interacting with Amyloidogenic Proteins," *Angew. Chem., Int. Ed.* **127**, 8555–8559 (2015).

M. YAGI-UTSUMI, T. SATOH and K. KATO, "Structural Basis of Redox-Dependent Substrate Binding of Protein Disulfide Isomerase," *Sci. Rep.* **5**, 13909 (2015).

H. YAGI, Y. ZHANG, M. YAGI-UTSUMI, T. YAMAGUCHI, S. IIDA, Y. YAMAGUCHI and K. KATO, "Backbone ^{1}H, ^{13}C, and ^{15}N Resonance Assignments of the Fc Fragment of Human Immunoglobulin G Glycoprotein," *Biomol. NMR Assignments* **9**, 257–260 (2015).

K. INAGAKI, T. SATOH, M. YAGI-UTSUMI, A.-C. LE GULLUCHE, T. ANZAI, Y. UEKUSA, Y. KAMIYA and K. KATO, "Redox-Coupled Structural Changes of the Catalytic *a*' Domain of Protein Disulfide Isomerase," *FEBS Lett.* **589**, 2690–2694 (2015).

Y. ISODA, H. YAGI, T. SATOH, M. SHIBATA-KOYAMA, K. MASUDA, M. SATOH, K. KATO and S. IIDA, "Importance of the Side Chain at Position 296 of Antibody Fc in Interactions with FcγRIIIa and Other Fcγ Receptors," *PLoS One* **10**, e0140120 (2015).

K. ISHII, H. ENDA, M. NODA, M. KAJINO, A. KIM, E. KURIMOTO, K. SATO, A. NAKANO, Y. KOBAYASHI, H. YAGI, S. UCHIYAMA and K. KATO, "pH-Dependent Assembly and Segregation of the Coiled-Coil Segments of Yeast Putative Cargo Receptors Emp46p and Emp47p," *PLoS One* **10**, e0140287 (2015).

R. THAMMAPORN, M. YAGI-UTSUMI, T. YAMAGUCHI, P. BOONSRI, P. SAPARPAKORN, K. CHOOWONGKOMON, S. TECHASAKUL, K. KATO and S. HANNONGBUA, "NMR Characterization of HIV-1 Reverse Transcriptase Binding to Various Non-Nucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors with Different Activities," *Sci. Rep.* **5**, 15806 (2015).

S. NINAGAWA, T. OKADA, Y. SUMITOMO, S. HORIMOTO, T. SUGIMOTO, T. ISHIKAWA, S. TAKEDA, T. YAMAMOTO, T. SUZUKI, Y. KAMIYA, K. KATO and K. MORI, "Forcible Destruction of Severely Misfolded Mammalian Glycoproteins by the Non-Glycoprotein ERAD Pathway," *J. Cell Biol.* **211**, 775–784 (2015).

T. ZHU, T. YAMAGUCHI, T. SATOH and K. KATO, "A Hybrid Strategy for the Preparation of ^{13}C-Labeled High-Mannose-Type Oligosaccharides with Terminal Glucosylation for NMR Study," *Chem. Lett.* **44**, 1744–1746 (2015).

Y. KANEMATSU, Y. KAMIYA, K. MATSUO, K. GEKKO, K. KATO and M. TACHIKAWA, "Isotope Effect on the Circular Dichroism Spectrum of Methyl α-D-Glucopyranoside in Aqueous Solution," *Sci. Rep.* **5**, 17900 (2015).

K. ISHII, M. NODA, H. YAGI, R. THAMMAPORN, S. SEETAHA, T. SATOH, K. KATO and S. UCHIYAMA, "Disassembly of the Self-Assembled, Double-Ring Structure of Proteasome α7 Homo-Tetradecamer by α6," *Sci. Rep.* **5**, 18167 (2015).

B-3) 総説，著書

Y. ZHANG, T. YAMAGUCHI, T. SATOH, M. YAGI-UTSUMI, Y. KAMIYA, Y. SAKAE, Y. OKAMOTO and K. KATO, "Conformational dynamics of oligosaccharides characterized by paramagnetism-assisted NMR spectroscopy in conjunction with molecular dynamics simulation," *Adv. Exp. Med. Biol.* **842**, 217–230 (2015).

G. MANDAL, H. YAGI, K. KATO and B. P. CHATTERJEE, "Structural heterogeneity of glycoform of alpha-1 acid glycoprotein in alcoholic cirrhosis patients," *Adv. Exp. Med. Biol.* **842**, 389–401 (2015).

加藤晃一,「糖鎖構造学研究の新展開」, *BIOTOVO* **23**, 2–3 (2015).

T. SATOH, T. YAMAGUCHI and K. KATO, "Emerging structural insights into glycoprotein quality control coupled with *N*-glycan processing in the endoplasmic reticulum," *Molecules* **20**, 2475–2491 (2015).

山口拓実，加藤晃一,「糖鎖の立体構造を描き出す」, *生物物理* **55**, 81–83 (2015).

M. YAGI-UTSUMI and K. KATO, "Structural and dynamic views of GM1 ganglioside," *Glycoconjugate J.* **32**, 105–112 (2015).

加藤晃一，稲垣直之,「離合集散が織りなす生命分子機能の研究フロンティア」, *実験医学* **33**, 1316–1320 (2015).

加藤晃一，佐藤匡史,「生命分子の自己組織化のダイナミクス」, *化学工業* **66**, 32–37 (2015).

蜷川　暁，加藤晃一，森　和俊,「糖鎖依存的構造異常タンパク質分解に必須な糖鎖刈り込み機構を解明～革新的ゲノム編集技術によって従来のモデルを一新～」, *化学と生物* **53**, 571–573 (2015).

佐藤匡史，加藤晃一,「糖タンパク質の細胞内輸送」,「糖鎖の新機能開発・応用ハンドブック～創薬・医療から食品開発まで～」, 秋吉一成，津本浩平，加藤晃一，鷹羽武史，深瀬浩一，古川鋼一編, エヌ・ティー・エス, pp. 144–149 (2015).

矢木宏和，加藤晃一,「HPLC マッピング法による糖鎖プロファイリング」,「糖鎖の新機能開発・応用ハンドブック～創薬・医療から食品開発まで～」, 秋吉一成，津本浩平，加藤晃一，鷹羽武史，深瀬浩一，古川鋼一編, エヌ・ティー・エス, pp. 243–249 (2015).

山口拓実，加藤晃一,「NMR」,「糖鎖の新機能開発・応用ハンドブック～創薬・医療から食品開発まで～」, 秋吉一成，津本浩平，加藤晃一，鷹羽武史，深瀬浩一，古川鋼一編, エヌ・ティー・エス, pp. 265–271 (2015).

佐藤宗太，加藤晃一，藤田　誠,「生命現象の解明に挑むサイボーグ超分子――機能を維持したまま生体分子クラスターを人工分子に移植」, *化学* **70**, 31–36 (2015).

K. KATO and T. YAMAGUCHI, "Paramagnetic NMR probes for characterization of the dynamic conformations and interactions of oligosaccharides," *Glycoconjugate J.* **32**, 505–513 (2015).

B-4) 招待講演

T. YAMAGUCHI, Y. SAKAE, M. YAGI-UTSUMI, Y. ZHANG, S. YAMAMOTO, Y. OKAMOTO and K. KATO, "Elucidation of the molecular basis of oligosaccharide functions by NMR spectroscopy and molecular dynamics simulation," The 3rd International Symposium on "Dynamical Ordering of Biomolecular Systems for Creation of Integrated Functions," Shima (Japan), January 2015.

加藤晃一,「NMR を利用した抗体の高次構造解析」, 平成２６年度先駆的医薬品・医療機器研究発掘支援事業成果発表会――彩都産学官連携フォーラム 2015――, 大阪, 2015年 1月.

K. KATO, "Structural views of glycans in physiological and pathological contexts," CU-IMS workshop, Bangkok (Thailand), January 2015.

K. KATO, "Conformational dynamics and interactions of oligosaccharides and glycoconjugate," The 4th International Symposium on Drug Discovery and Design by NMR, Yokohama (Japan), February 2015.

加藤晃一,「複合糖質の構造生物学と創薬」, 第4回岐阜構造生物学・医学・論理的創薬研究会シンポジウム, 岐阜, 2015年 3月.

加藤晃一,「生命分子の自己組織化のダイナミクス」, 日本化学会第９５回春季年会, 船橋, 2015年 3月.

加藤晃一,「糖鎖をみる」, 第4回バイオイメージング研究会, 東京, 2015年 5月.

T. YAMAGUCHI and K. KATO, "Paramagnetic Lanthanide-Tagging for NMR Characterization of The Conformational Dynamics of Oligosaccharides," IMS Asian International Symposium "Supramolecular Dynamics at the Interface of Chemistry and Biology," Okazaki (Japan), June 2015.

矢木-内海真穂，加藤晃一,「ガングリオシドクラスターを舞台とする神経変性疾患関連タンパク質の構造転移」, 第１５回日本蛋白質科学会年会, 徳島, 2015年 6月.

加藤晃一,「糖鎖の３次元構造ダイナミクスと分子間相互作用」, 第2回蛋白質工学研究会ワークショップ, 徳島, 2015年 6月.

加藤晃一,「生命分子システムの動的秩序形成の探査・創生・展開」, 第1回秩序化分子システム仙台ワークショップ, 仙台, 2015年 7月.

加藤晃一, 山口拓実, 矢木-内海真穂, 栗原顕輔, 佐藤匡史,「生命分子の動的秩序形成におけるミクローマクロ相関の探査と設計原理の探求」, 新学術領域「動的秩序と機能」平成２７年度全体班会議, 淡路, 2015年 8月.

K. KATO, "NMR Views of Fate Determination and Functional Regulation of Proteins Mediated by Sugar Chains," The 19th International Society of Magnetic Resonance Conference," Shanghai (China), August 2015.

K. KATO, M. YAGI-UTSUMI, T. YAMAGUCHI, H. YAGI and T. SATOH, "Structural Views of Glycan Functions in Physiological and Pathological Contexts," 9th International Conference on Proteoglycans and 10th Pan-Pacific Connective Tissue Societies Symposium, Seoul (Korea), August 2015.

谷中冴子,「NMR を用いた動的構造解析から, ヒト主要組織適合複合体における, ゆらぎの役割を考える」, 第3回生体分子サイエンスセミナー , 神奈川, 2015年 8月.

加藤晃一,「生命分子システムの動的秩序の探査・創生・展開」, 第１３回糖鎖科学コンソーシアムシンポジウム, 名古屋, 2015年 10月.

加藤晃一,「糖鎖の構造生命科学」, 名古屋大学 IGER セミナー , 名古屋, 2015年 10月.

K. KATO, "NMR views of physiological and pathological roles of glycans," The 47th Annual Meeting of Korean Magnetic Resonance Society, Buyeo (Korea), November 2015.

加藤晃一,「神経変性疾患関連するアミロイド形成タンパク質の多様な分子間相互作用」, 大阪大学蛋白質研究所セミナー 包括脳ネットワーク研究会　第6回神経科学と構造生物学の融合研究会, 岡崎, 2015年 11月.

矢木-内海真穂, 佐藤匡史, 山口拓実, 加藤晃一,「神経変性疾患関連タンパク質と分子シャペロンとの相互作用の構造基盤」, 第３８回日本分子生物学会年会　第８８回日本生化学会大会合同大会（BMB2015), 神戸, 2015年 12月.

K. KATO, M. YAGI-UTSUMI, H. YAGI, S. YANAKA, T. YAMAGUCHI and T. SATOH, "Structural insights into protein-fate determination in cells," Okazaki Institute for Integrative Bioscience Retreat 2015, Okazaki (Japan), December 2015.

K. KATO, "NMR characterization of dynamic conformational ensembles and interactions of carbohydrate chains," The 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), Honolulu (U.S.A.), December 2015.

B-5) 特許出願

特願 2015-102175,「未分化細胞のアポトーシス誘導剤」, 加藤晃一, 矢木宏和, 山口拓実, ヤンゲンエイ（公立大学法人名古屋市立大学, 大学共同利用機関法人自然科学研究機構), 2015年.

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).

矢木真穂, The 3rd International Symposium of "Dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions" Poster Presentation Award (2015).

Sikdar Arunima, The Winter School of Sokendai/ Asian CORE Program Poster Presentation Award (2015).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本バイオイメージング学会評議員 (1995–).

日本生化学学会評議員 (2002–), 代議員 (2005–).

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 (2010–2014, 2015–).

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 (2014–2015).

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–).

第13回糖鎖科学コンソーシアムシンポジウム世話人代表 (2015).

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 (2012–2014).

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–).

大阪大学蛋白質研究所専門委員会委員 (2014–), 同委員長 (2015).

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 (2010–2015).

Glycobiology, Editorial board member (2011–).

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

Scientific Reports, Editorial board member (2015–).

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 (2013–2015).

B-8) 大学での講義, 客員

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」「生命薬科学研究入門」「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」, 2015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」, 2015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, グリーン自然科学国際教育研究プログラム(博士課程リーディングプログラム自然科学連携講義)「構造生物学特論I・II」, 2015年.

The Winter School of Sokendai/Asian CORE Program, “Dynamic orchestration of proteasomes, Intracellular protein degradation machines,” Okazaki (Japan), 2015年1月16日.

B-10) 競争的資金

特定非営利活動法人バイオものづくり中部,「糖鎖分科会」, 加藤晃一 (2005年–2006年).

科研費特定領域研究「グライコミクス」,「NMR を利用した構造グライコミクス」, 加藤晃一 (2005年–2006年).

科研費萌芽研究,「味覚修飾タンパク質クルクリンの機能発現メカニズムの解明と応用」, 加藤晃一 (2005年–2006年).

ノバルティス研究奨励金,「NMR 構造生物学によるパーキンソン病発症メカニズムの解明」, 加藤晃一 (2006年).

科研費基盤研究(B),「タンパク質分解における糖鎖修飾系とユビキチン修飾系のクロストークの構造的基盤」, 加藤晃一 (2006年–2007年).

科研費新学術領域研究「揺らぎが機能を決める生命分子の科学」（計画研究),「NMR を利用したタンパク質および複合糖質の揺らぎの検出とその機能連関の探査」, 加藤晃一 (2008年–2013年).

科研費基盤研究（B),「ポスト小胞体品質管理における細胞内レクチンの分子認識と超分子形成の構造基盤の解明」, 加藤晃一 (2009年–).

科研費若手研究（スタートアップ),「細胞内レクチンとCa 結合タンパク質との連携による生体機能発現の分子基盤の探究」, 神谷由紀子 (2009年–2010年).

科研費若手研究（研究活動スタート支援),「オリゴ糖鎖ナノクラスターの精密構築と生体分子認識機構の解明」, 山口拓実 (2009年–2010年).

科研費特定領域研究「 タンパク質社会」（公募研究),「 糖鎖認識を介したタンパク質社会の秩序維持機構の構造基盤の解明」, 神谷由紀子 (2010年–2011年).

科研費研究活動スタート支援,「アミロイド線維末端の特異構造の解明に基づく線維伸長メカニズムの理解」, 矢木真穂 (2011年–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–2015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–2015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ミクロ―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–).

科研費若手研究(B),「NMR データに基づく配座空間探査による動的糖鎖コードの解読」, 山口拓実 (2015年–).

科研費若手研究(B),「 ガングリオシド糖脂質クラスター上におけるアミロイドβ の構造転換の精密解析」, 矢木真穂 (2015年–).

科研費基盤研究(A),「 多元的構造生物学アプローチによるプロテアソーム形成機構の解明と創薬への展開」, 加藤晃一 (2015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の研究推進のための国際活動支援」, 加藤晃一 (2015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 (2015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 (2015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 (2015年).

大陽日酸（株),「タンパク質の安定同位体標識技術の開発」, 加藤晃一 (2015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 (2015年).

C)　研究活動の課題と展望

生命分子素子がダイナミックな集合離散を通じて動的な秩序構造を形成するメカニズムを明らかにするとともに，生命分子集団の自己組織系に内在する精緻にデザインされた不安定性をあぶり出し，機能発現にいたる時空間的展開の原理を理解することを目指す。そのために，生命システムの動的秩序形成におけるミクロ―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の運命決定システムや，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。さらに，超分子科学と生命分子科学の融合研究を推し進めるとともに，国際共同研究の推進にも注力する。

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，分子機械，分子モーター，１分子計測，構造解析

A-2) 研究課題：

a) リニア分子モーターキネシン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，キチナーゼのエネルギー変換機構の解明

c) 回転分子モーター V-ATPase 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) キネシンは２本足で歩く生体分子モーターである。我々は直径 40 ナノメートルの金ナノ粒子をプローブとしてキネシンの片足に結合させ，足の動きの可視化に成功した（*Nature Chemical Biology* 印刷中）。微小管結合状態と非結合状態の足を明確に識別でき，浮いた足は進行方向に対し右側で大きく揺らぐ（ブラウン運動）することを明らかにした。この右側への偏りは，キネシンの両足を繋ぐ「脚」（ネックリンカー）の位置を考えると説明可能であり，微小管に結合した足の構造を反映していることが明らかとなった。また，浮いた状態の持続時間の ATP 濃度依存性から，片足が浮いた状態で起こる化学反応素過程（微小管に結合した足への ATP の結合，結合した ATP の異性化または浮いた足からの ADP の解離）の速度定数を定量的に求めることができた。また，両足を繋ぐ脚を 1.5 倍（7 アミノ酸残基）長くするとまっすぐ歩けずに，後ずさりや左右にふらふらする酔っ払いのような千鳥足になった。さらに脚をアミノ酸残基 1 個分だけ短くすると，足が前になかなか着地できず浮いている時間が長くなり，鈍足になることが明らかとなった。この結果から，キネシンの２つの足にかかる張力の大きさが一方向に速く歩くために重要であることが示され，脚の長さは進化の過程で最適化されていることが示唆された。

b) エキソ型セルラーゼやキチナーゼは結晶性多糖を加水分解しながら連続的に直進運動するリニア分子モーターである。しかしながら，キネシンやミオシン等の ATP 駆動のリニア分子モーターとは運動機構が全く異なる。我々はセルラーゼ，キチナーゼの作動機構の解明を目指し，１分子計測，構造解析，非天然分子創造という複合アプローチで研究を行っている。これまでに，細菌 *Cellulomonas fimi* 由来セルラーゼ *Cf*Cel6B の触媒ドメインの結晶構造を 1.3 Å の分解能で明らかにし，先行研究で構造が解かれているカビ *Trichoderma reesei* 由来の *Tr*Cel6A と比較することに成功した。さらに *Cf*Cel6B，*Tr*Cel6A の１分子蛍光観察により結晶性セルロース分解反応の素過程（結合・分解・解離）の速度定数を全て明らかにすることにも成功し，構造と動態の相関解析に成功した（投稿準備中）。

c) 腸内連鎖球菌由来 Na^+ 輸送性 V-ATPase（EhV_oV_1）は，ATP 加水分解反応のエネルギーで回転運動して Na^+ イオンを能動輸送する分子モーターであり，親水性部 EhV_1 を単離すると ATP を分解しながら回転する。EhV_1 の化学力学共役機構を明らかにするため，回転運動と蛍光性 ATP の結合解離との同時計測を行い，ATP が結合後，240–360 度の遷移（ステップ）の過程で生成した ADP の解離が起こることを明らかにした。この結果は，EhV_1 の３つの触媒部位の１つのみに変異が入ったハイブリッド型 EhV_1 の回転計測からも支持された。

B-1) 学術論文

Y. OBAYASHI, R. IINO and H. NOJI, “A Single-Molecule Digital Enzyme Assay Using Alkaline Phosphatase with a Cumarin-Based Fluorogenic Substrate,” *Analyst* **140**, 5065–5073 (2015).

S. ENOKI, R. IINO, Y. NIITANI, Y. MINAGAWA, M. TOMISHIGE and H. NOJI, "High-Speed Angle-Resolved Imaging of Single Gold Nanorod with Microsecond Temporal Resolution and One-Degree Angle Precision," *Anal. Chem.* **87**, 2079–2086 (2015).

A. YUKAWA, R. IINO, R. WATANABE, S. HAYASHI and H. NOJI, "Key Chemical Factors of Arginine Finger Catalysis of F_1-ATPase Clarified by an Unnatural Amino Acid Mutation," *Biochemistry* **54**, 472–480 (2015).

A. NAKAMURA, T. ISHIDA, K. KUSAKA, T. YAMADA, S. FUSHINOBU, I. TANAKA, S. KANEKO, K. OHTA, H. TANAKA, K. INAKA, Y. HIGUCHI, N. NIIMURA, M. SAMEJIMA and K. IGARASHI, ""Newton's Cradle" Proton Relay with Amide-Imidic Acid Tautomerization in Inverting Cellulase Visualized by Neutron Crystallography," *Sci. Adv.* **1**, e1500263–e1500263 (2015).

B-3) 総説，著書

R. IINO, H. UENO, Y. MINAGAWA, K. SUZUKI and T. MURATA, "Rotational mechanism of *Enterococcus hirae* V_1-ATPase by crystal-structure and single-molecule analyses," *Curr. Opin. Struct. Biol.* **31**, 49–56 (2015).

R. IINO, S. SAKAKIHARA, Y. MATSUMOTO and K. NISHINO, "Single-cell detection and collection of persister bacteria in a directly accessible femtoliter droplet array," *Methods in Molecular Biology* **1333**, 101–109 (2015).

飯野亮太,「薬剤排出トランスポーター活性のマイクロデバイスによる計測」, *化学療法の領域* **31**, 440–448 (2015).

中村彰彦，石田卓也，鮫島正浩，五十嵐圭日子,「反転型セルラーゼの巨大結晶作製と中性子／X線共構造解析」, *日本結晶学会誌* **57**, 59–65 (2015).

B-4) 招待講演

R. IINO, "Dynamics of linear and rotary molecular motors revealed by gold nanoprobes," Pacifichem 2015, Technical Symposia, Physical, Theoretical & Computational: Interplay between Chemistry and Dynamics in Biomolecular Machines, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

R. IINO, "Single-molecule analysis of energy conversion mechanism of molecular motor," IMS Workshop "Grand Design of Molecular Systems; Dynamic, Correlation and Harmony," Okazaki (Japan), October 2015.

R. IINO, "High speed single-molecule measurement of conformational dynamics of molecular motors probed by gold nanorod," KAKENHI International Symposium on "Studying the Function of Soft Molecular Systems," Tokyo (Japan), July 2015.

R. IINO, "Dynamic motions of individual molecular motors," IMS Asian Internatiional Symposium "Supramolecular Dynamics at the interface of Chemistry and Biology," Okazaki (Japan), June 2015.

R. IINO, "Watching dynamic motions of individual molecular motors with gold nanoprobes," PACCON2015, Bangkok (Thailand), January 2015.

R. IINO, "Single-molecule high-speed imaging analysis of ATP-driven molecular motors," 第53回生物物理学会年会シンポジウム "Formation of spatiotemporal dynamic ordering mediated by ATP hydrolysis," 金沢, 2015年9月.

飯野亮太,「回転型ATPaseによるイオンの輸送を考える」, 分子研研究会「膜タンパク質内部のプロトン透過を考える」, 岡崎, 2015年 4月.

飯野亮太,「生体回転超分子モーターの作動メカニズム」, 日本化学会第９５春季年会特別企画シンポジウム, 船橋, 2015年 3月.

飯野亮太,「金ナノプローブで探る生体分子モーターのダイナミクス」, 日本化学会第９５春季年会中長期企画シンポジウム, 船橋, 2015年3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 (2014–2016).

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).

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).

Frontiers in Bioengineering and Biotechnology, Associate Editor (2015.4.29–).

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 (2012.4.2–2018.3).

B-8) 大学での講義, 客員

名古屋工業大学大学院工学研究科, 非常勤講師,「未来材料創成工学特別講義II」, 2015年10月.

B-10) 競争的資金

自然科学研究機構新分野創成センターイメージングサイエンス研究分野プロジェクト,「金ナノロッドの高速高精度光学イメージングによる生体分子モーターの複合1分子計測」, 飯野亮太 (2015年).

科研費基盤研究(B),「ナトリウムイオン輸送性V-ATPaseのエネルギー変換機構の解明」, 飯野亮太 (2015年–2017年).

科研費研究活動スタート支援,「セルロース分解酵素のモーター運動に寄与する構造要素の解明」, 中村彰彦 (2015年–2016年).

科研費新学術領域研究「動的秩序と機能」(公募研究),「ATP駆動サイボーグ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).

科研費特別研究員奨励費,「ダブルドメインセルラーゼの吸着バランス制御による結晶性多糖構造分解反応の促進」, 中村彰彦 (2013年–2014年).

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).

B-11) 産学連携

大幸財団自然科学研究助成,「回虫精子アメーバ運動の完全再構成にむけたプロテオーム解析」, 飯野亮太 (2015年).

ATI 研究助成,「省エネルギーリニアモーターの運動性を決める構造的要素の解明」, 中村彰彦 (2015年–2016年).

C) 研究活動の課題と展望

リニア分子モーターキネシンについては，微小管に結合した足が結合したまま向きを変え，この向きの変化が2つの足の協調に重要であるという説がある。金ナノロッドをプローブに用い，微小管に結合した足の向きの変化の検出に取り組む。リニア分子モーターセルラーゼ，キチナーゼについては，運動素過程（ポーズとステップ）の可視化が重要な課題である。構造からステップサイズは1 nm と予測されている。高時間・高空間分解能1分子計測によりキチナーゼの1 nm ステップを可視化してエネルギー変換機構を明らかにする。また，ドメイン交換した非天然セルラーゼを創造し，天然型の性能を凌駕する分子を創りだす。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。

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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 両親媒性分子からなる中空状集合体ベシクルを，人工細胞の細胞膜として利用する。ベシクル型人工細胞が肥大増殖するには, 外部より膜分子の原料を取り込み, ベシクル内部でベシクルを構成する膜分子への変換が要請されるが, その変換反応を促す触媒はベシクルの調製時に混入させるしか方法がなかった。そこで本研究課題では，この触媒分子をベシクルが自己で生産することを目標とした。当研究で用いる触媒分子はその原料をベシクルが取り込み内部で合成されるが，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。現在，ベシクル内部で触媒を合成し，さらに膜分子の前駆体を取り込みベシクルが肥大分裂するダイナミクスを観察することができた。論文投稿中である。

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。本研究課題では，分子集合体ににあえて異種の膜分子前駆体を添加し，その増殖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。この指針に基づき分子を設計した。現在，自己生産するオクチルアニリンの油滴に膜分子前駆体を添加すると，自己生産するベシクルへと形態変化する系を構築しており，論文を投稿中である。

B-1) 学術論文

K. KURIHARA, Y. OKURA, M. MATSUO, T. TOYOTA, K. SUZUKI and T. SUGAWARA, “A Recursive Vesicle-Based Model Protocell with a Primitive Model Cell Cycle,” *Nat. Commun.* **6**, 8352 (2015).

B-4) 招待講演

栗原顕輔,「内部で触媒を生成するベシクル」, 複雑生命システム動態研究教育拠点セミナー , 東京, 2015年 3月.

K. KURIHARA, “Catalyst-producing system in a self-reproducing giant vesicle,” International Workshop on Challenge to Synthesizing Life, Hakone (Japan), August 2015.

栗原顕輔,「化学で創る人工細胞」, 名大分子研リトリート研修, 岡崎, 2015年 11月.

栗原顕輔,「触媒生成システムを内包する自己生産ベシクルの構築」, 第４６回中部化学関係学協会支部連合秋季大会, 三重, 2015年 11月.

B-7) 学会および社会的活動

その他

あいち科学技術教育推進協議会発表会「科学三昧ｉｎあいち 2014」英語発表指導 (2014).

愛知教育大学付属岡崎中学校取材 (2015).

B-8) 大学での講義，客員

総合研究大学院大学,「統合生命科学教育プログラム」, 2015年11月.

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(B),「交差触媒系を内包するベシクル型人工細胞の構築」, 栗原顕輔 (2015年–2017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,「 生命材料物質の組み立て場としてみた原始細胞膜の基礎的研究」, 栗原顕輔 (2015年–2016年).

B-11) 産学連携

日本科学協会笹川科学研究助成金,「 自己増殖するベシクル型人工細胞を用いた生命起源への挑戦」, 栗原顕輔 (2015年–2016年).

野口研究所野口遵研究助成金,「 ドラッグデリバリーシステムを志向した自律構築型リポソームの開発」, 栗原顕輔 (2015年–2016年).

クリタ水・環境化学振興財団研究助成金,「 生命誕生における水の汚れの重要性」, 栗原顕輔 (2015年–2016年).

豊秋奨学会海外渡航費助成,「内部で触媒システムを生成する人工細胞の構築」, 栗原顕輔 (2015年).

C) 研究活動の課題と展望

本研究では，構成的アプローチの考え方から，既知の分子で「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。この目標を達成するために，現在の細胞と同じ物性をもつ両親媒性分子で，人工細胞モデルを構築することが両課題で共通となっている。課題Aでは，境界膜の生産を加速させる触媒を内部で合成する人工細胞モデルを構築している。本研究では，触媒も膜分子もアルデヒドとデシルアニリンの脱水縮合によるイミン結合形成機構を利用することで，分子を合成しているが，この反応は可逆でもあるのでベシクル膜を破壊する加水分解反応も同時に起こる。本系では，平衡を膜分子及び触媒分子生成方向に偏らせることでこれを回避したが，派生実験として平衡を偏らせることなく，触媒と膜分子生産がアニリンを介することで連動し，その生産反応が振動する系も現在構築している。また，課題Bでは同じくイミン結合形成を利用しているが，油状のオクチルアニリンを用いて別相にすることで可逆反応を偏らせて，自己生産する油滴系を構築できた。今後の課題としては，より生命らしい細胞を実現するために情報を持つ分子の封入が望まれる。現在の系では封入が困難だが，ベシクルの調製法や組成を改良することでこの課題を解決できると考えられる。

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) チャネルロドプシンの光誘起構造変化に関する赤外分光解析
b) 脊椎動物と無脊椎動物の「非視覚」の光受容を担うタンパク質の解析
c) 哺乳動物カリウムイオンチャネルタンパク質の機能制御メカニズムの解析
d) 耐熱性ロドプシン TR が起こす光反応の分子機構，およびその特異性の解明
e) 急速溶液交換法を用いた新規赤外分光計測系の構築
f) ウシ由来オプシンへの匂い物質結合の赤外分光解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) チャネルロドプシンは光で開閉するイオンチャネルであり，神経細胞などでの生体電気信号を調節する光遺伝学（オプトジェネティクス）と呼ばれる研究手法で用いられている。本研究では，２種類のチャネルロドプシン 1 および 2 の光応答特性の違いを明らかにするため，両者のキメラタンパク質の赤外分光解析を行なった。カルボン酸のプロトン化状態の変化の違いについて部位特異的変異体を用いた解析も行なった。その結果，キメラタンパク質がチャネルロドプシン 2 と異なる構造変化を起こすことや, Glu129（チャネルロドプシン 2 では Glu90）の脱プロトン化がチャネルの脱感作にはたらいていることを示唆する結果を得た。研究成果は *J. Biol. Chem.* 誌に発表した。
b) 多くの動物は，視覚以外にも概日時計の調節などの用途に光情報を用いている。このような「非視覚」の光受容を担うタンパク質は，視覚を担う光受容タンパク質とは異なる分子特性を持つと考えられる。今年度は，哺乳類の非視覚の光受容機能を担うメラノプシンが，自発的に光受容能を失う特性を持つことで，活動環境からの強い光入力にも細胞応答が飽和しないようにはたらくことを示唆する結果を得て, その成果を *J. Biol. Chem.* 誌に発表した。また，無脊椎動物では，脳内にエンセファロプシンという光受容タンパク質が存在し，それらが非視覚の光受容を担うと考えられている。そこで種々の無脊椎動物のエンセファロプシンの分子特性を解析し，動物種ごとに，吸収する光の波長が大きく異なることを見出した。
c) 細胞が機能するためには，カリウムイオンを選択的に透過するイオンチャネル（カリウムチャネル）が重要である。カリウムチャネルには，様々な種類のものが存在し，その中でも TWIK-1 というチャネルは，外部環境に応じて，カリウムイオン選択性が「緩く」なる。赤外分光解析を用いて，イオン選択性を生み出す選択フィルタ部位と種々のイオンとの相互作用が,「普通」のカリウムチャネルとは異なることを明らかにし，フィルタ部位にある２つの特異なアミノ酸残基によってもたらされるという結果を得た。また，生化学的解析から，細胞外領域のイオン出入り口付近の残基が，糖鎖修飾されていることも見出した。すなわちフィルタ部位と共に細胞外領域の糖鎖修飾が，TWIK-1 の環境依存的なイオン透過制御に関わる可能性が示唆された。
d) Thermophilic Rhodopsin（TR）は好熱菌から発見された初めてのロドプシンであり，その熱安定性の分子機構に興味が持たれている。この TR の光反応を様々な温度で時間分解赤外分光法により調べた。その結果，TR の光反応中で起こるプロトン移動と骨格構造変化のタイミングが温度により変わることが分かり，速度定数の変化とは別に，TR

の反応機構自体が変化することを見出した。また，部位特異的変異体での結果から，プロトン移動に関わる残基の特定もできている。得られた反応中間体間の時定数の温度依存性から，各ステップにおける活性化エネルギーも決定することができた。本研究は岡山大学薬学部の須藤雄気教授，塚本卓助教との共同研究として進めている。

e) 圧縮ガスで動作するシリンジポンプによる急速溶液交換装置の測定条件の改良を試みた。この実験系は以前に立ち上げたものであるが，溶液交換直後の赤外吸収の時間変化に反応とは関係のない物理的な要因による吸収変化が乗ってしまい，時間変化の解析の妨げになっていた。ガス圧や試料セル流路の種類の選択などでいくつかの検討を行ったところ，溶液の交換量を増加させることで上記の変化をなくすことができた。

f) ウシ由来ロドプシンは G タンパク質共役受容体（GPCR）と呼ばれる膜タンパク質ファミリーの１種であるため，同じく GPCR に属する嗅覚を司る受容体のモデルになる可能性がある。そこで発色団を排除したロドプシン（オプシン）への匂い物質の結合を全反射赤外分光法（ATR）で調べた。その結果，匂い物質結合に伴うカルボン酸やタンパク質骨格由来の吸収変化の信号を得ることができた。また，部位特異的変異体の計測から，匂い物質結合時に相互作用するグルタミン酸残基を特定することもできた。本研究はカナダのトロント大学医学部の Oliver P. Ernst 教授，森住威文研究員との共同研究として進めている。

B-1) 学術論文

A. INAGUMA, H. TSUKAMOTO, H. E. KATO, T. KIMURA, T. ISHIZUKA, S. OISHI, H. YAWO, O. NUREKI and Y. FURUTANI, “Chimeras of Channelrhodopsin-1 and -2 from *Chlamydomonas reinhardtii* Exhibit Distinctive Light-Induced Structural Changes from Channelrhodopsin-2,” *J. Biol. Chem.* **290**, 11623–11634 (2015).

Y. FURUTANI, H. SHIMIZU, Y. ASAI, S. OIKI and H. KANDORI, “Specific Interactions between Alkali Metal Cations and the KcsA Channel Studied Using ATR-FTIR Spectroscopy,” *Biophys. Physicobiol.* **12**, 37–45 (2015).

Y. INOKUCHI, T. EBATA, T. IKEDA, T. HAINO, T. KIMURA, H. GUO and Y. FURUTANI, “New Insights into Metal Ion-Crown Ether Complexes Revealed by SEIRA Spectroscopy,” *New J. Chem.* **39**, 8673–8680 (2015).

H. TSUKAMOTO, Y. KUBO, D. L. FARRENS, M. KOYANAGI, A. TERAKITA and Y. FURUTANI, “Retinal Attachment Instability is Diversified Among Mammalian Melanopsins,” *J. Biol. Chem.* **290**, 27176–27187 (2015).

M. KOYANAGI, S. WADA, E. KAWNO-YAMASHITA, Y. HARA, S. KURAKU, S. KOSAKA, K. KAWAKAMI, S. TAMOTSU, H. TSUKAMOTO, Y. SHICHIDA and A. TERAKITA, “Diversification of Non-Visual Photopigment Parapinopsin in Spectral Sensitivity for Diverse Pineal Functions,” *BMC Biol.* **13**, 73 (2015).

E. KAWNO-YAMASHITA, M. KOYANAGI, S. WADA, H. TSUKAMOTO, T. NAGATA and A. TERAKITA, “Activation of Transducin by Bistable Pigment Parapinopsin in the Pineal Organ of Lower Vertebrates,” *PLoS One* **10**, e0141280 (2015).

K. KUROI, K. OKAJIMA, M. IKEUCHI, S. TOKUTOMI, T. KAMIYAMA and M. TERAZIMA, “Pressure-Sensitive Reaction Yield of the TePixD Blue-Light Sensor Protein,” *J. Phys. Chem. B* **119**, 2897–2907 (2015).

B-3) 総説，著書

H. KANDORI, Y. FURUTANI and T. MURATA, “Infrared Spectroscopic Studies on the V-ATPase,” *Biochim. Biophys. Acta, Bioenerg.* **1847**, 134–141 (2015).

Y. FURUTANI, “Molecular Mechanisms for Ion Transportation of Microbial Rhodopsins Studied by Light-Induced Difference FTIR Spectroscopy,” in *Optogenetics—Light-Sensing Proteins and Their Applications—*, Y. Hiromu, H. Kandori and K. Amane, Eds., 63–76 (2015).

黒井邦巧，寺嶋正秀,「タンパク質の反応と揺らぎ」, *生物物理* **55**, 235–241 (2015).

B-4) 招待講演

古谷祐詞，塚本寿夫,「赤外差分光法によるイオンチャネルタンパク質の分子機構研究」, 自然科学研究機構プロジェクト合同シンポジウム「脳神経情報の階層的研究」「機能生命科学における揺らぎと決定」, 生理学研究所, 岡崎, 2015年 3月.

Y. FURUTANI, “Structural Changes of Bacteriorhodopsin Studied by Time-Resolved Polarized FTIR Spectroscopy,” 第3回研究成果報告会さきがけ「光エネルギーと物質変換」領域, 日本大学理工学部, 船橋, 2015年3月.

古谷祐詞,「イオンチャネルの分子機構解明への赤外分光解析による挑戦」, 分子研研究会「膜タンパク質内部のプロトン透過を考える」, 岡崎コンファレンスセンター , 岡崎, 2015年 4月.

Y. FURUTANI, “Infrared Difference Spectroscopy is a Key Technique for Deciphering the Molecular Mechanisms of Ion Pump and Channel Proteins,” OIIB (Okazaki Institute for Integrative Bioscience) Summer School 2015, Okazaki Conference Center, Okazaki (Japan), August 2015.

古谷祐詞,「赤外分光法によるレチナールタンパク質の機能発現機構の解明」, 第２９回カロテノイド研究談話会, 首都大学東京, 八王子, 2015年 9月.

黒井邦巧,「光センサータンパク質TePixD の反応過程における過渡的揺らぎ」, 第５３回日本生物物理学会年会若手招待講演, 金沢, 2015年 9月.

黒井邦巧,「過渡回折格子法への圧力条件適用によるタンパク質の揺らぎ検出」, 第５６回高圧討論会生命科学シンポジウム, 広島, 2015年 11月.

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，岡本基土, 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), 理事 (2015–2016).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2010, 2011, 2012, 2013, 2015).

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).

分子科学会顕彰委員会委員 (2014–2015).

日本分光学会中部支部幹事 (2012–2015).

学会の組織委員等

第15回レチナールタンパク質国際会議実行委員 (2012–2014), 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

総合研究大学院大学物理科学研究科,「構造生体分子科学」, 2015年12月3日–4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).

総合研究大学院大学学融合推進センター公募型研究事業事業枠II「学融合共同研究」,「動物が「見えない光」を受容するメカニズム——化学と生理学を融合したアプローチ——」, 古谷祐詞 (2015年–2016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).

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).
上原記念生命科学財団研究奨励金,「メラノプシンを用いたカルシウムシグナリングの光制御」, 塚本寿夫 (2015年).
科研費研究活動スタート支援,「温度圧力条件下の赤外分光法による耐熱性ロドプシンの光反応機構の解明」, 黒井邦巧 (2015年–2016年).

C) 研究活動の課題と展望

昨年度に引き続き，様々な共同研究の成果を論文として発表することができた。塚本助教が中心となって進めていたメラノプシンの研究成果を発表し，プレスリリースも行なった。ほ乳動物イオンチャネルについても論文にまとめるべく研究を継続している。2015年4月から黒井博士がIMS フェローとしてグループに加わり，圧力という新たな軸を時間分解赤外分光計測に導入することで，タンパク質の動的な構造変化における圧力効果を解明することを目指している。具体的には熱耐性ロドプシン（TR）を研究対象とし，ダイアモンドアンビルセル，加圧装置を導入して，TR の光反応を様々な圧力および温度条件下で測定し，TR の反応機構や構造安定性を熱力学的に検討していく予定である。また，オプシンへの匂い物質結合研究も共同研究先と連携を取りながら成果として取りまとめる予定である。本年度，急速溶液交換装置の計測条件の最適化を行なったので，来年度からメリビオース輸送体を用いて基質の結合や解離過程に伴う構造変化の時間分解計測に再び取り組む（スペインのEsteve Padrós 教授およびVíctor A. Lórenz-Fonfría 博士との共同研究）。一方，タイのチュラロンコン大からのインターンシップ生（Monpichar Srisa-Art 博士やAkkapol Suea-Ngam ら）とは，マイクロ流路と電気化学計測および分光計測を組み合わせた計測系の構築を行なっており，さらに発展させることを期待している。

錯体触媒研究部門

魚　住　泰　広（教授）（2000 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：有機合成化学，有機金属化学

A-2) 研究課題：

a) 完全水系メディア中での触媒反応

b) 自己集積型金属錯体触媒の設計・開発

c) 新しい遷移金属錯体の創製

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) パラジウム，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

T. OSAKO, K. TORII and Y. UOZUMI, “Aerobic Flow Oxidation of Alcohols in Water Catalyzed by Platinum Nanoparticles Dispersed in an Amphiphilic Polymer,” *RSC. Adv.* **5**, 2647–2654 (2015).

T. OSAKO and Y. UOZUMI, “Mechanistic Insights into Copper-Catalyzed Azide-Alkyne Cycloaddition (CuAAC): Observation of Asymmetric Amplification,” *Synlett* **26**, 1475–1479 (2015).

G. HAMASAKA, F. SAKURAI and Y. UOZUMI, “A Palladium NNC-Pincer Complex: An Efficient Catalyst for Allylic Arylation at Parts per Billion Levels,” *Chem. Commun.* **51**, 3886–3888 (2015).

F. SAKURAI, G. HAMASAKA and Y. UOZUMI, “Development of an Aquacatalytic System Based on the Formation of Vesicles of an Amphipilic Palladium NNC-Pincer Complex,” *Dalton Trans.* **44**, 7828–7834 (2015).

A. OHTAKA, T. OKAGAKI, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI, T. SHINAGAWA, O. SHIMOMURA and R. NOMURA, “Application of “Boomerang” Linear Polystyrene-Stabilized Pd Nanoparticles to a Series of C–C Coupling Reactions in Water,” *Catalysts* **5**, 106–118 (2015).

T. OSAKO, K. TORII, A. TAZAWA and Y. UOZUMI, “Continuous-Flow Hydrogenation of Olefins and Nitrobenzenes Catalyzed by Platinum Nanoparticles Dispersed in an Amphiphilic Polymer,” *RSC Adv.* **5**, 45760–45766 (2015).

G. HAMASAKA, F. SAKURAI and Y. UOZUMI, "A Vesicular Self-Assembled Amphiphilic Palladium NNC-Pincer Complex-Catalyzed Allylic Arylation of Allyl Acetates with Sodium Tetraarylborates in Water," *Tetrahedron* **71**, 6437–6441 (2015).

G. HAMASAKA, H. TSUJI and Y. UOZUMI, "Organoborane-Catalyzed Hydrogenation of Unactivated Aldehydes with a Hantzsch Ester as a Synthetic NAD(P)H Analogue," *Synlett* **26**, 2037–2041 (2015).

H. OHTA, K. YAMAMOTO, M. HAYASHI, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI and Y. WATANABE, "Low Temperature Hydrodeoxygenation of Phenols under Ambient Hydrogen Pressure to Form Cyclohexanes Catalyzed by Pt Nanoparticles Supported on H-ZSM-5," *Chem. Commun.* **51**, 17000–17003 (2015).

T. SATO, A. OHNO, S. SARKAR, Y. UOZUMI and Y. M. A. YAMADA, "A Convoluted Polymeric Imidazole Palladium Catalyst: Structural Elucidation and Investigation of the Driving Force for the Efficient Mizoroki-Heck Reaction," *ChemCatChem* **7**, 2141–2148 (2015).

B-4) 招待講演

Y. UOZUMI, "Development of Heterogeneous Catalysis in Water Driven by "Umbrella Effect,"" Lectures at Institut de Chimei Moleculaire de I' Universite de Bourgogne, Bourgogne (France), March 2015.

Y. UOZUMI, "Heterogeneous Cross-Coupling Catalysis in Water," Seminar at Institut de Physique et de Chimie des Matériaux de Strasbourg, Strasbourg (France), March 2015.

Y. UOZUMI, "Heterogeneous Cross-Coupling Catalysis in Water," 7th Spanish-Portuguese-Japanese, Organic Chemistry Symposium, Seville (Spain), June 2015.

Y. UOZUMI, "Molecular Architecture-Based Administration of Catalysis in Water via Self-Assembly of Amphiphilic Palladium Pincer Complex," 17th International Symposium on relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis, Utrecht (The Netherlands), July 2015.

Y. UOZUMI, "Molecular Architecture-Based Administration of Catalysis in Water via Self-Assembly of Amphiphilic Palladium Pincer Complex," The 6th Japsnese-Sino Symposium on Organic Chemistry for Young Scientists Organizing Committee, Sendai (Japan), September 2015.

B-6) 受賞，表彰

魚住泰広, 有機合成化学協会研究企画賞 (1992).

魚住泰広, 日本薬学会奨励賞 (1997).

山田陽一, 日本薬学会奨励賞 (2005).

魚住泰広, 第6回グリーン・サスティナブル・ケミストリー賞，文部科学大臣賞 (2007).

魚住泰広, 平成18年度日本化学会学術賞 (2007).

山田陽一, 文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2008).

山田陽一, Thieme Chemistry Journal Award (2008).

魚住泰広, 井上学術賞 (2010).

浜坂　剛, 第1回「名古屋大学石田賞」(2012).

大迫隆男, 有機合成化学協会研究企画賞 (2013).

魚住泰広, 文部科学大臣表彰科学技術賞 (2014).

大迫隆男, 第4回自然科学研究機構若手研究者賞 (2015).

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・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発プロジェクト　研究チームリーダー (2008–2012).

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

中国湖北省三峡大学, 楚天学者講座教授, 2014年 8月– .

B-9) 学位授与

櫻井扶美恵,「Development of Aquacatalytic Systems Based on the Self-Assembly of Amphiphilic Pincer Palladium Complexes」, 2015年9月, 博士(理学).

辻　裕章,「ホウ素触媒による有機分子変換反応の開発」, 2015年9月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A)（一般研究),「水中で機能する高分子分散型複合金属ナノ触媒の創製」, 魚住泰広 (2003年–2006年).

科研費特定領域研究(計画研究：研究項目番号A03),「理想化学変換プロセスを実現する新しい水中機能性個体触媒の開発」, 魚住泰広 (2006年–2009年).

経済産業省・戦略的技術開発グリーンサスティナブルケミカルプロセス基盤技術開発,「高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発」, 魚住泰広 (2009年–2012年).

科学技術振興機構CREST 研究,「水中での精密分子変換を実現するナノ遷移金属触媒創造」, 魚住泰広 (2002年–2008年).

科研費若手研究(B),「高分子マトリックス化金属固相触媒の創製」, 山田陽一 (2004年–2007年).

科研費若手研究(B),「水中分子変換を実現する高分子担持銅触媒の創製」, 大迫隆男 (2010年–2011年).

科学技術振興機構CREST 研究,「反応媒体駆動原理の確立と革新的触媒プロセスの開発」, 魚住泰広 (2011年–2016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–2015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–2015年).

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」, 魚住泰広 (2014年–2019年).

C)　研究活動の課題と展望

2000年にゼロからのスタートを切った精密有機分子変換反応のaqueous-switching, heterogeneous-switching の試みも十分な成果と蓄積を得て，現時点では高度な立体選択機能を合わせ持った触媒の開発に至り，さらには数段階の炭素−炭素結合形成を経る多段階有機合成の全工程・全操作を有機溶剤を全く用いずに実現しつつある。その過程で従来の有機合成手法では獲得し得ない疎水性相互作用に立脚した新規な反応駆動概念を提案することができた。特に均一触媒系でさえ未開拓であった高立体選択的不斉Suzuki カップリング反応を水中不均一で達成したことは大きな成果である。またナノパラジウム粒子の高分子マトリクス内での発生・分散と固定化に成功し，アルコール酸化やハロゲン化芳香族の脱ハロゲン反応など，グリーン化学の中心課題を解決してきた。他の金属種(W，Ru，Rh，Cu)に適用範囲を拡張しつつある。今後さらに基礎科学的論証を重ねる予定である。さらに金属架橋高分子の自己集積触媒の開発に注力しつつあり，マイクロ流路内の層流界面での自己集積錯体触媒膜の創製に成功した。

独自に開発した高立体選択的不斉ユニットであるpyrroloimidazolone 骨格ならではの有効な利用を推進しつつあり，上述の水中不斉触媒プロセスの達成に加えて，新しいピンサー型錯体触媒の設計・開発に至っている。その過程で見いだしたリガンド導入法によるピンサー錯体構築は従来の種々のピンサー型錯体調製と全く異なる錯体形成経路を経ることから，従来法では合成困難であった立体規制に富むピンサー型錯体の自在調製に道筋をつけた。

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2011年10月から課題研究を推進しつつある（2016年度終了予定）。これまでに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」において十分な進展がみられた。また鉄触媒,銅触媒,有機触媒の開発にも取り組み「元素代替戦略」にも成果を上げつつある。また，自己集積錯体触媒研究は理化学研究所フロンティア研究に指名され同研究所に場所を移して展開中である。すなわち，魚住グループの大きな研究の柱はCREST–NEDO–CREST–ACCEL，理研へと発展的に移行している。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。2015年度には間瀬俊明博士をACCEL 研究プロジェクトマネージャーとして強力な研究推進体制を整え，さらに同博士を本研究所特別教授としてお招きすることとなった。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。なかでも自己集積型超分子触媒開発研究に於いては分子高次構造に立脚した分子変換反応駆動を確認しており，さらなる展開を進めつつある。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。

椥　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) プロトンを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) 異なる２つの酸性官能基を有するキラルブレンステッド酸触媒を設計・開発した。特に，ピリジノアゾエステルとジエン類とのヘテロ Diels–Alder 反応において，カルボン酸－リン酸を触媒として用いることにより，位置選択性，エナンチオ選択性，ジアステレオ選択性の完全制御を達成した。

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-1) 学術論文

N. MOMIYAMA, H. OKAMOTO, M. SHIMIZU and M. TERADA, “Synthetic Method for 2,2’-Disubstituted Fluorinated Binaphthyl Derivatives and Application as Chiral Source in Design of Chiral Mono-Phosphoric Acid Catalyst,” *Chirality* **27**, 464–475 (2015).

N. MOMIYAMA, T. NARUMI and M. TERADA, “Design of a Brønsted Acid with Two Different Acidic Sites: Synthesis and Application of Aryl Phosphinic Acid–Phosphoric Acid as a Brønsted Acid Catalyst,” *Chem. Commun.* **51**, 16976–16979 (2015).

B-4) 招待講演

椥山儀恵,「水素原子・ハロゲン原子が創り出す不斉空間・不斉反応」, 第3回慶應有機化学若手シンポジウム, 慶應義塾大学矢上キャンパス, 横浜, 2015年 5月.

N. MOMIYAMA, “Asymmetric Reaction Space Created by Hydrogen and Halogen Atom,” RSC Road Show Japan, Kyoto, June 2015.

B-6) 受賞，表彰

椥山儀恵, 大学女性協会第17回守田科学研究奨励賞 (2015).

椥山儀恵, 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).

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).

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

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

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

椴山儀恵, The Elizabeth R. Norton Prize for Excellence in Research in Chemistry (2003).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

総研大アジア冬の学校２０１４主催 (2014).

その他

岡崎市立翔南中学校出前授業「中学生のためのサイエンスセミナー」(2014).

B-8) 大学での講義，客員

The Winter School of SOKENDAI/Asia Core Program 2014, “Asymmetric Reaction Space Created by Hydrogen and Halogen Atom,” Okazaki (Japan), 2015年1月14日.

B-10) 競争的資金

第２８回ノバルティス研究奨励金,「不斉1，3−アルキル移動反応の開発を基軸とする医薬品候補化合物の合成」, 椴山儀恵 (2015年–2016年).

平成２７年度徳山科学技術振興財団研究助成,「ハロゲン化ペルフルオロアリールの創製と触媒機能創出」, 椴山儀恵 (2015年–2016年).

２０１５年度ヨウ素研究助成金,「キラルヨウ素結合供与体触媒の設計・開発を基盤とする不斉合成」, 椴山儀恵 (2015年–2016年).

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」, 椴山儀恵 (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」, 椴山儀恵 (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—キラルブレンステッド酸触媒による新規アリル化反応の開発」, 椴山儀恵 (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」, 椴山儀恵 (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」, 椴山儀恵 (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」, 椴山儀恵 (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」, 椴山儀恵 (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」, 椴山儀恵 (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「金属ー配位子錯結合」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) 多電子酸化還元反応を促進する金属錯体触媒の開発

b) 金属錯体を対象とした光電気化学的挙動の評価

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) 水の四電子酸化による酸素発生反応を促進する金属錯体触媒の開発および機能改良に取り組んだ。具体的には，酸素発生反応の律速段階となりうる酸素－酸素結合生成過程を効率よく進めるため，金属錯体触媒の第二配位圏に適切な化学修飾を施し，酸素発生反応速度の飛躍的な向上に成功した。

b) 溶存する金属錯体分子が光吸収に伴って引き起こす電子移動過程を理解するため，光照射下で電気化学測定が可能な光電気化学測定システムを開発した。また，開発した測定システムを用いて，CO_2 還元能を持つ鉄ポルフィリンの測定を試みることにより，光照射が触媒反応中間体に与える影響を電気化学的に観測することに成功した。

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，反応活性点と高い対称性（D_{4h}）を併せ持つパドルフィール型二核錯体に，分子間アレーン－パーフルオロアレーン相互作用が可能な官能基を導入し，自己集合を促すことで，反応活性点が細孔内に配置された多孔性フレームワークの構築に成功した。

B-1) 学術論文

N. NARITA, T. ENOMOTO, S. MASAOKA and N. KUSAKABE, “Titania May Produce Abiotic Oxygen Atmospheres on Habitable Exoplanets,” *Sci. Rep.* **5**, 13977 (2015).

G. NAKAMURA, M. KONDO, M. CRISALLI, S. K. LEE, A. SHBATA, P. C. FORD and S. MASAOKA, “Syntheses and Properties of Phosphine-Substituted Ruthenium(II) Polypyridine Complexes with Nitrogen Oxides,” *Dalton Trans.* **44**, 17189–17200 (2015).

T. ITOH, M. KONDO, H. SAKAMOTO, K. WAKABAYASHI, M. KANAIKE, K. ITAMI and S. MASAOKA, “Porous Frameworks Constructed by Non-Covalent Linking of Substitution-Inert Metal Complexes,” *Dalton Trans.* **44**, 15334–15342 (2015).

A. FUKATSU, M. KONDO, Y. OKABE and S. MASAOKA, “Electrochemical Analysis of Iron Porphyrin-Catalyzed CO_2 Reduction under Photoirradiation,” *J. Photochem. Photobiol., A* **313**, 143–148 (2015).

M. YOSHIDA, M. KONDO, S. TORII, K. SAKAI and S. MASAOKA, “Oxygen Evolution Catalysed by a Mononuclear Ruthenium Complex bearing Pendant -SO_3^- Groups,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **54**, 7981–7984 (2015).

P. PANDIT, K. YAMAMOTO, T. NAKAMURA, K. NISHIMURA, Y. KURASHIGE, T. YANAI, G. NAKAMURA, S. MASAOKA, K. FURUKAWA, Y. YAKIYAMA, M. KAWANO and S. HIGASHIBAYASHI, "Acid/Base-Regulated Reversible Electron Transfer Disproportionation of N–N linked Bicarbazole and Biacridine Derivatives," *Chem. Sci.* **6**, 4160–4173 (2015).

T. KOSHIYAMA, N. KANDA, K. IWATA, M. HONJO, S. ASADA, T. HATAE, Y. TSUJI, M. YOSHIDA, M. OKAMURA, R. KUGA, S. MASAOKA and M. OHBA, "Regulation of Cerium(IV)-Driven O_2 Evolution Reaction using Composites of Liposome and Lipophilic Ruthenium Complexes," *Dalton Trans.* **44**, 15126–15129 (2015).

B-3) 総説，著書

M. OKAMURA and S. MASAOKA, "Design of Mononuclear Ruthenium Catalysts for Low-Overpotential Water Oxidation," *Chem. –Asian J.* **10**, 306–315 (2015).

B-4) 招待講演

S. MASAOKA, "Water Oxidation Catalyzed by Multinuclear Metal Complexes," Pacifichem 2015, Hilton Hawaiian Village, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

S. MASAOKA, "Water Oxidation Catalyzed by Multinuclear Metal Complexes," Third International Symposium on the Photofunctional Chemistry of Complex Systems (ISPCCS2015), Makena Beach Resort, Wailea-Makena (U.S.A.), December 2015.

S. MASAOKA, "Possible photosynthetic reactions on habitable exoplanets," 12th German-Japanese Colloquium at the University of Kiel, Zoologisches Museum, University of Kiel, Kiel (Germany), December 2015.

S. MASAOKA, "Molecular Catalysts for Water Oxidation," 10th China-Japan Joint Symposium on Metal Cluster Compounds, Fuzhou Yishan Hotel, Fuzhou (China), October 2015.

正岡重行,「金属錯体を触媒とする多電子酸化還元反応」, 東京工業大学講演会, 東京工業大学, 大岡山, 2015年10月.

正岡重行,「人工光合成を志向した金属錯体化学」, 第2回辰巳午会化学シンポジウム, 分子科学研究所, 岡崎, 2015年8月.

S. MASAOKA, "Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation," Metals in Biology in Wako, Suzuki Umetaro Hall, RIKEN, Wako (Japan), June 2015.

S. MASAOKA, "Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation," The Third China-Japan Joint Symposium on Inorganic and Nanomaterial Science, Tsinghua University, Beijing (China), June 2015.

正岡重行,「多核金属錯体を触媒とする水の酸化反応」, 日本化学会年会中長期テーマシンポジウム「小分子変換の最前線――金属錯体・半導体光触媒によるエナジーイノベーション――」, 日本大学, 船橋, 2015年3月.

正岡重行,「光合成・人工光合成・系外惑星の光合成～分子科学的考察に基づく光合成の一般化～」, 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」, KKR ホテル, 熱海, 2015年3月.

正岡重行,「多核金属錯体による多電子酸化還元反応」, 第2回東北大学研究会プログラム「金属錯体の固体物性最前線――金属錯体と固体物性物理と生物物性の連携新領域を目指して――」, 東北大学, 仙台, 2015年2月.

S. MASAOKA, "Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation," Joint IMS-CU Workshop, Chulalongkorn University, Bangkok (Thailand), January 2015.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON), KMUTT, Bangkok (Thailand), January 2015.

正岡重行,「金属錯体を触媒とする酸素発生反応」, 分子研研究会「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」, 分子研, 岡崎, 2015年1月.

B-6) 受賞, 表彰

榎本孝文, 第27回配位化合物の光化学討論会ポスター賞 (2015).

榎本孝文, 2015年度総研大物理科学学生セミナー Adobe 賞 (2015).

榎本孝文, 伊豆 仁, 深津亜里紗, 2015年度総研大物理科学学生セミナー優秀発表賞 (2015).

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

錯体化学会副事務局長 (2015–).

錯体化学会理事 (2015–).

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

日本化学会第5回CSJ 化学フェスタ実行委員 (2015).

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

Scientific Reports, Nature Publishing Group, Editorial Board (2015–).

日本化学会「化学と工業」編集委員 (2013–).

その他

中高生向けワークショップ, とよた科学体験館,「金属錯体（さくたい）のふしぎ～人工光合成への挑戦～」, 豊田 (2015.2).

B-8) 大学での講義, 客員

名城大学理工学部, 非常勤講師,「錯体化学」, 2015年度後期.

東京工業大学理工学研究科, 非常勤講師,「応化特別講義A」, 2015年10月21日.

名古屋大学大学院理学研究科, 客員准教授, 2013年4月– .

Sokendai Asian Winter School 2015, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” Okazaki (Japan), 2015年12月4日.

B-9) 学位授与

中村　豪,「Synthesis and Redox Reactivity of Phosphine-Substituted Ruthenium(II) Polypyridine Complexes」, 2015年3月, 博士（理学）.

B-10) 競争的資金

科研費新学術領域（公募研究),「鉄五核触媒の分子構造制御に基づく低過電圧酸素発生」, 正岡重行 (2015年–2016年).

科研費若手研究(A),「反応性超分子フレームワーク: 反応場の構築と反応の可視化」, 近藤美欧 (2015年–2018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,「光合成モジュールの人為的再構成によるサイボーグ植物の創出」, 正岡重行 (2015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,「低温度星まわりの生命居住可能惑星において起こり得る光合成反応の分子科学的考察」, 正岡重行 (2015年).

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CO_2還元反応系の構築」, 近藤美欧 (2012年–2017年).

科研費挑戦的萌芽研究,「二次元反応場への金属錯体集積と水を基質とする革新的多電子物質変換」, 正岡重行 (2012年–2013年).

科研費若手研究(B),「高効率触媒界面の構築を目指した錯体プラットフォームの開発」, 近藤美欧 (2012年–2013年).

第5回資生堂女性研究者サイエンスグラント,「界面電子移動プログラミングによる水の完全光分解系の構築」, 近藤美欧 (2012年–2013年).

学融合推進センター公募研究事業事業枠③女性研究者支援,「界面電子移動反応を利用した水の完全光分解システムの創成」, 近藤美欧 (2012年).

科学技術振興機構さきがけ研究「光エネルギーと物質変換」領域,「水の可視光完全分解を可能にする高活性酸素発生触媒の創製」, 正岡重行 (2009年–2012年).

科研費若手研究(B),「水の分解反応に対する非貴金属系高活性金属錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2009年–2010年).

科学技術振興機構重点地域研究開発推進プログラム「シーズ発掘試験A（発掘型）」,「有機−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).

B-11) 産学連携

ライオン(株)研究開発本部寄付金,「 金属錯体系電子移動反応触媒研究の発展を奨励する研究費」, 正岡重行 (2015年).

C) 研究活動の課題と展望

我々の研究グループでは, 太陽光エネルギーを貯蔵可能な化学エネルギーに変換できる次世代科学技術「人工光合成」の達成に向けて, 金属錯体を対象とした基礎研究を進めている。2015年は, a) 多電子酸化還元反応を促進する金属錯体触媒の開発, b) 金属錯体を対象とした光電気化学的挙動の評価, c) 金属錯体の規則配列による反応場構築, を並行して推進し, それぞれ重要な研究成果を得ることができた。今後は, a) に関しては, 水の四電子酸化反応に対する触媒機能の向上(反応速度上昇, 過電圧低下等)に加え, 多電子還元反応(CO_2還元, N_2還元等)に対する触媒の開発にも取り組みたい。b) では, 我々が開発した光電気化学測定システムをより多様な光電子移動系, 光触媒反応系に展開したいと考えている。c) では, 2015年までに構築した反応性フレームワークの触媒機能評価を行い, 特異な反応場が触媒機能に与える影響を調査する。以上の研究を推進し, 錯体型人工光合成システムの創出に向けた学術基盤を確立したい。

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) X線溶液散乱による生体分子システムの動的構造解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 時計タンパク質 KaiC は藍藻生物時計の中心振動体であり，ATPase 活性を約24時間周期で変動させる。KaiC の原子分解能構造と機能の相関を検証し, わずか 10 ナノメートルという小さな生体分子に, 地球の自転周期（約24時間）を生み出す構造基盤がデザインされていることを突き止めた。

また, 六量体 KaiC の機能発現機構を理解する上で単量体化した KaiC を利用することの重要性が指摘されていたが, ヌクレオチドを除去することで得られる単量体 KaiC が溶液中で非常に不安定であることが問題となっていた。幅広い緩衝液のスクリーニングによりリン酸バッファー中で単量体 KaiC が極めて安定に存在しうることを突き止めた。これにより，KaiC の ATPase 活性および自己リン酸化／自己脱リン酸化活性の前定常解析に向けた技術基盤が整備された。

b) 生体分子システム（時計タンパク質，抗酸化酵素，受容体など）のX線溶液散乱を記録し，散乱データと結晶構造の比較や低分解能モデルの構築を通して，分子システムの動的構造解析を行った。

B-1) 学術論文

A. MUKAIYAMA, M. OSAKO, T. HIKIMA, T. KONDO and S. AKIYAMA, “A Protocol for Preparing Nucleotide-Free KaiC Monomer,” *Biophysics* **11**, 79–84 (2015).

J. ABE, T. B. HIYAMA, A. MUKAIYAMA, S. SON, T. MORI, S. SAITO, M. OSAKO, J. WOLANIN, E. YAMASHITA, T. KONDO and S. AKIYAMA, “Atomic-Scale Origins of Slowness in the Cyanobacterial Circadian Clock,” *Science* **349**, 312–316 (2015).

B-3) 総説，著書

向山　厚，阿部　淳，孫　世永，秋山修志,「タンパク質の化学反応が細胞内の時を計る」, *実験医学* **33**, 3119–3122 (2015).

B-4) 招待講演

秋山修志,「概日時計システム研究におけるbioSANS への期待と展望」, 第3回Neutrons in Biology 研究会, 日本原子力研究開発機構・原子力科学研究所, 東海, March 2015.

S. AKIYAMA, “KaiC as Circadian Pacemaker of Cyanobacterial Circadian Clock,” European Biological Rhythms Society (EBRS)/World Congress of Chronobiology (WCC) meeting, Manchester (U.K.), August 2015.

S. AKIYAMA, “KaiC as Circadian Pacemaker of Cyanobacterial Circadian Clock,” The 53rd Annual Meeting of the Biophysics Society of Japan, Kanazawa University, Kanazawa, September 2015.

秋山修志,「藍藻の時計タンパク質に内包された概日周期と遅さの根源」, 藍藻の分子生物学２０１５, かずさアカデミアホール, 木更津, November 2015.

秋山修志,「藍藻生物時計システムに見られる貫階層性」, 蛋白研セミナー「第6回神経科学と構造生物学の融合研究会」, 岡崎コンファレンスセンター , 岡崎, November 2015.

向山　厚,「時計タンパク質KaiC に書き込まれた生物時計の発振周期」, 第２２回日本時間生物学会学術大会, 東京大学, 東京, November 2015.

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).

阿部　淳, 日本生物物理学会中部支部優秀発表賞 (2014).

向山　厚, 日本時間生物学会学術大会優秀ポスター賞 (2015).

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 (2013–2015).

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).

The Winter School of Sokendai/Asian CORE Program (Jan. 13–16, 2015), Organizer (2015).

X線溶液散乱２０１５春の学校（May 21–23, 2015）, 主催 (2015).

X線溶液散乱２０１５秋の学校（Oct 5–7, 2015）, 主催 (2015).

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 (2013–2015).

日本結晶学会「日本結晶学会」会誌編集委員 (2010–2012).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究,「時間と共に離合集散を繰り返す分子機械のX線小角散乱・動的構造解析」, 秋山修志 (2005年–2009年).

科研費若手研究(B),「異常分散・X線小角散乱を利用した無配向生体高分子の2原子間距離計測」, 秋山修志 (2007年–2010年).

科研費若手研究(A),「時を生み出すタンパク質KaiCにおけるATPase自己抑制･温度補償機構」, 秋山修志 (2010年–2013年).

科研費挑戦的萌芽研究,「多チャンネル・セルを用いたハイスループットX線小角散乱」, 秋山修志 (2012年–2014年).

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

研究グループを2012年度に立ち上げ，それ以降，藻類のタンパク質時計システムを題材とした研究に取り組んできた。中核分子（KaiC）の原子分解能構造と概日周期の因果関係を原著論文として発表し，グループ発足時に掲げた将来計画の第一段階を完遂した。2015年度からは第二段階の計画に沿って，温度補償制御の構造基盤の解明，一分子計測，高等生物の時計システム研究に取り組む。

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

望みの機能を持ったタンパク質分子を自在にデザインすることが可能になれば，細胞の制御・設計や医療への貢献，さらには新規酵素やマテリアル開発による産業への応用が期待される。我々は，タンパク質分子を主鎖構造を含めて完全にゼロからデザインすること，加えて自然界のタンパク質分子を大きく改造することにより，望みのタンパク質分子を創製する理論と技術の開発を行った。

a) αβ 型タンパク質構造のデザイン。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。本研究では，テーラメイドに自在にタンパク質立体構造をデザインする技術の開発を目指して，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ルールの拡張を行った。拡張したルールを使って様々なトポロジーや形，そして大きさの αβ タンパク質構造を計算機を用いてデザインし，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) α ヘリックスからなるタンパク質構造のデザイン。複数の α ヘリックスが集まった構造は極めて多様な構造を生み出し，またその構造は柔軟であり機能発現に重要な役割を果たしている。そこで，α ヘリカルなタンパク質構造を自在にデザインするための手法の開発を行った。まず，自然界のタンパク質構造を解析することにより，ヘリックス同士をつなぐループに典型的なループパターンが存在することを明らかにし，次にこれらループパターンを組み合わせることにより多様なタンパク質主鎖構造のモデリングに成功した。

c) 動的機能を発現する自然界のタンパク質分子の改造。自然界には，ATP 加水分解のエネルギーを利用して構造変化することにより機能を発現する分子モータータンパク質が存在する。このようなモータータンパク質がどのようにして動的機能を発現しているのか，F_1-ATPase および V_1-ATPase を改造することにより，そのメカニズムに迫った。

B-1) 学術論文

Y.-R. LIN, *N. KOGA, R. TATSUMI-KOGA, G. LIU, A. F. CLOUSER, G. T. MONTELIONE and *D. BAKER, “Control over Overall Shape and Size in De Novo Designed Proteins,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **112**(40), E5478–5485 (2015).

B-4) 招待講演（* 基調講演）

N. KOGA,「創って分かるタンパク質分子の動作原理」, 定量生物の会第7回年会, 九州大学, 福岡市, 2015年1月.

N. KOGA, “Protein design from scratch for understanding principles for folding,” Supramolecular Dynamics at the interface of Chemistry and Biology, アジア連携分子研研究会, 分子科学研究所, 岡崎市, 2015年6月.

N. KOGA,「タンパク質分子デザインの現状と展望」, CBI 学会, 東京工業大学キャンパス・イノベーションセンター , 東京, 2015年 6月.

N. KOGA,「主鎖二面角パターンを用いたタンパク質立体構造デザイン」, 第15回日本蛋白質科学会年会, ワークショップ：天然モノと人工モノ, 両面から迫る最新のタンパク質構造観, あわぎんホール, 徳島市, 2015年 6月.

N. KOGA, “Design of ideal protein structures,” The 15th KIAS Conference on Protein Structure and Function, Korea Institute for Advanced Study, Seoul (Korea), 2015年9月.*

N. KOGA, “A synthetic approach to understanding protein molecules,” JST CREST-PRESTO joint international symposium, Structural Biological Dynamics: From Molecules to Life with 60 trillion Cells, The University of Tokyo, Tokyo (Japan), 2015年11月.

N. KOGA, “De novo design of various alpha-beta protein structures,” 理化学研究所横浜キャンパス, 横浜, 2015年12月.

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-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会平成27年度分野別専門委員：タンパク質設計・ドラッグデザイン (2015).

B-8) 大学での講義, 客員

中央大学理工学部物理学科, 物理学特別講義第三, 2015年 9月 4日.

総合研究大学院大学物理科学研究科,「基礎生体分子科学」, 2015年 11月 24日.

総合研究大学院大学物理科学研究科,「構造生体分子科学」, 2015年 12月 1日.

The Winter School of Sokendai Asian CORE, “Protein design from scratch,” 岡崎カンファレンスセンター（岡崎市）, 2015年1月16日.

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(A),「改造して理解するモータータンパク質 F_1-ATPase の動作原理」, 古賀信康 (2015年–2019年).

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–2017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DC1,「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–2006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。望みの機能を持つタンパク質分子を自在にデザインするための手法の確立を目指して，①タンパク質分子の構造と機能を完全にゼロからデザインすること，②進化の産物である自然界のタンパク質を大きく改造すること，これら2本柱で研究を進める。計算機および生化学実験のための準備は整ってきたので，来年度からは計算機デザインと生化学実験のサイクルをいかに多く回すかが重要となる。

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) シングレットフィッションは一つの一重項励起状態から二つの三重項励起状態が生じる過程でありペンタセンなどの有機結晶で観測されており，有機太陽電池の光電変換効率を向上させる新たな指針の一つとして注目されている。数百ピコ秒程度でフィッションが起こる分子系が存在する一方，ペンタセンやその誘導体のいくつかでは数百フェムト秒程度で起こることが分光実験によって示されている。多くの研究グループが実験，理論の両面から研究を進めているが，フィッションの反応速度を支配する機構の詳細は現状では未解明である。本研究では，電子移動を記述する理論モデルを基にフィッションのハミルトニアンを構築し量子ダイナミクス理論に基づいてフィッション過程のダイナミクスを計算した。本研究の理論モデルは文献の分光実験で得られた数種類のペンタセン誘導体における反応速度を再現することができた。このモデルに基づき，一重項励起状態と三重項励起状態間のエネルギーギャップ，電荷移動状態のエネルギーの値がどのような条件であるときに超高速のフィッションが実現し得るのかを検討し，自由エネルギー曲面の解析によってフィッションの反応速度，ダイナミクスにおける電子励起状態のエネルギー依存性について議論した。

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，電子励起がエネルキー地形の勾配に従って拡散するという描像で議論されてきた。このエネルギー地形は *in vitro* のサンプルを用いた分光実験とX線結晶構造の情報により決定され，また色素の電子状態の揺らぎとタンパク質の局所的な歪みの間には線形応答論が成り立つことが前提とされてきた。しかし，そのような議論では環境変動に応じた「高い効率で起こるエネルギー移動」と「過剰摂取したエネルギーを熱放出させる制御機構」という一見相反する２つの機構の自律的スイッチング・環境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物理化学機構を明らかにすべく，超高速分光と単一分子分光の実験のグループと共同で色素タンパク質複合体のコンフォメーション変化とその原因，またコンフォメーション変化に伴う色素の再配置・エネルギー地形変化の可能性の検討している。

B-1) 学術論文

D. M. MONAHAN, L. V. WHALEY-MAYDA, A. ISHIZAKI and G. R. FLEMING, “Influence of Weak Vibrational-Electronic Couplings on 2D Electronic Spectra and Inter-Site Coherence in Weakly Coupled Photosynthetic Complexes,” *J. Chem. Phys.* **143**, 065101 (11 pages) (2015).

Y. FUJIHASHI, G. R. FLMIENG and A. ISHIZAKI, “Impact of Environmentally Induced Fluctuations on Quantum Mechanically Mixed Electronic and Vibrational Pigment States in Photosynthetic Energy Transfer and 2D Electronic Spectra,” *J. Chem. Phys.* **142**, 212403 (12 pages) (2015). (Invited)

B-2) 国際会議のプロシーディングス

D. M. MONAHAN, L. V. WHALEY-MAYDA, A. ISHIZAKI and G. R. FLEMING, "Interpreting Oscillations in Numerically Exact Simulations of 2D Electronic Spectra," *Ultrafast Phenomena XIX*, 553–556 (2015).

B-3) 総説，著書

石﨑章仁,「新著紹介, K. A. Dill and S. Bromberg, Molecular Driving Forces; Statistical Thermodynamics in Chemistry, Physics, Biology, and Nanoscience, Second Edition (Garland Science, London and New York, 2011)」, *日本物理学会誌* **70 (12)**, p. 946 (2015).

B-4) 招待講演

石﨑章仁,「凝縮相量子ダイナミクスの理論とその光合成初期過程への展開」, 東京大学物性科学研究所, 柏市, 2015年 12月.

A. ISHIZAKI, "Impacts of environmentally induced fluctuations on quantum mixtures in energy/charge transfer reactions and 2D electronic spectra," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015 (PACIFICHEM 2015), Honolulu (U.S.A.), December 2015.

A. ISHIZAKI, "Non-Markovian quantum dynamical aspects in photosynthetic light harvesting systems," CECAM Workshop 2015: Open Quantum Systems Computational Methods, Hong-Kong (China), December 2015.

石﨑章仁,「光合成光捕集系における電子励起エネルギー移動:光学応答と量子動力学」, 立命館大学, 大津市, 2015年 11月.

A. ISHIZAKI, "Title: N/A," EMN Meeting on Ultrafast Research: Energy Material Nanotechnology, Las Vegas (U.S.A.), November 2015.（スケジュールの不都合により辞退）

石﨑章仁,「実時間量子散逸系の理論とその光合成初期過程への展開」, 第9回物性科学領域横断研究会：凝縮系科学の最前線, 東京大学, 東京都文京区, 2015年 11月.

A. ISHIZAKI, "Influences of quantum mechanically mixed electronic and vibrational pigment states in photosynthetic energy transfer and 2D electronic spectra," The 1st Mueunjae Symposium on "Chemistry & Light," Pohang University of Science and Technology, Pohang (Korea), August 2015.

石﨑章仁,「高速レーザー分光と量子動力学理論で探る光合成捕集系の電荷／エネルギー移動ダイナミクス」, 日本学術振興会 181委員会研究会「生命革新機能と分子複合技術――生物の驚異的機能は人工的にできるのか?」大阪大学, 豊中市, 2015年 7月.

A. ISHIZAKI, "Impacts of Environmentally Induced Fluctuations on Quantum Mixing in Energy/Charge Transfer Reactions and 2D Electronic Spectra," The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC) Satellite Meeting "Recent Advances in Quantum Dynamics and Thermodynamics of Complex Systems," Peking University, Beijing (China), June 2015.

A. ISHIZAKI, "Impacts of environmentally induced fluctuations on quantum mechanical mixtures in energy/charge transfers and 2D electronic spectra," The 3rd Workshop on Coherent Energy Transport and Optimization in Photosynthesis, Nanyang Executive Centre, Singapore, May 2015.

A. ISHIZAKI, "The primary steps of photosynthesis explored with laser spectroscopic experiment & quantum dynamic theories," The Lee Group, Department of Chemistry, Sungkyunkwan University, Suwon (Korea), April 2015.

A. ISHIZAKI, “Impacts of environmentally induced fluctuations on quantum mechanical mixtures in energy/charge transfers and 2D electronic spectra,” The Schlau-Cohen Group, Department of Chemistry, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge (U.S.A.), April 2015.

A. ISHIZAKI, “Impact of Environmentally Induced Fluctuations on Quantum Mechanically Mixed Electronic and Vibrational States in Photosynthetic Energy Transfer and 2D Electronic Spectra,” Asian Academic Seminar 2015, Kolkata (India), March 2015.

A. ISHIZAKI, “The Primary Steps of Photosynthesis Explored with Nonlinear Laser Spectroscopic Experiments and Quantum Dynamics Theories,” 名古屋大学リトリート分子科学研究所研修“New Research Frontier of Molecular Science; Harmonic Cooperation between Theory and Experiment,” Okazaki (Japan), January 2015.

A. ISHIZAKI, “Quantum Dynamical Aspects in Photosynthetic Energy Transfer,” The Second China-Japan-Korea tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry (CJK-WTCC-II), Kobe (Japan), January 2015.

B-6) 受賞，表彰

石﨑章仁, 第１０回凝縮系科学賞 (2015).

石﨑章仁, 日本物理学会第１０回若手奨励賞 (2015).

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) 組織委員・物理化学 (2015).

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回化学ソルベー会議, scientific secretary (2010).

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・学術政策研究所科学技術動向研究センター , 専門調査員 (2015).

その他

The Netherlands Foundation for Fundamental Research on Matter, external reviewer (2013,2015).

Research Grant Council of Hong Kong, external reviewer (2012).

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」, 石﨑章仁 (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」, 石﨑章仁 (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 (2012–2013).

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

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

C) 研究活動の課題と展望

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り，本年より有機分子結晶におけるシングレットフィッション過程の理論解析など光合成エネルギー移動の理解に基づいた分子デバイス研究へと新たな展開を試みている。また，自然科学として当面の大きな課題は光合成光捕獲系が示す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にある。多重の階層を跨ぐかもしれない問題の複雑さと現在の研究グループの小ささを鑑みて，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) 固体中の準粒子ダイナミクス

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) 光と固体の相互作用により, 固体中に起こる光反応の結果として様々な準粒子ダイナミクスを解析することが出来る。電子とホールからなる励起子や固体中の整列した原子の集団振動であるフォノンの量子ダイナミクスを解析する実験系の提案とその解析に着手した。中でも超短パルスを用いたコヒーレント振動状態の生成理論に関して，パルス幅の影響を考慮した理論体系を構築することに成功した。

b) 原子・分子での振動基底状態の実現はサイドバンド冷却と呼ばれるレーザー冷却技術を用いて実現することが出来る。しかし，物理系のスケールが大きくなるとサイドバンド冷却限界の上昇により，振動基底状態の実現が出来なくなる。そこで，共振器内に物理系を結合させることにより冷却ダイナミクスの変化が起こり，その変化を解析することによりサイドバンド冷却限界を超えた冷却領域が実現する。そのような冷却方法の開発およびマクロ量子系での基礎理論を構築する研究に着手した。

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た方法論を提示した。

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

A. HOSOYA, K. MARUYAMA and Y. SHIKANO, “Operational Derivation of Boltzmann Distribution with Maxwell’s Demon Model,” *Sci. Rep.* **5**, 17011 (9 pages) (2015).

K. G. NAKAMURA, Y. SHIKANO and Y. KAYANUMA, “Influence of Pulse Width and Detuning on Coherent Phonon Generation,” *Phys. Rev. B* **92**, 144304 (7 pages) (2015).

G. DI MOLFETTA, L. HONTER, B. B. LUO, T. WADA and Y. SHIKANO, “Erratum to: Massless Dirac Equation from Fibonacci Discrete-Time Quantum Walk,” *Quantum Stud.: Math. Found.* **2**, 253–254 (2015).

G. DI MOLFETTA, L. HONTER, B. B. LUO, T. WADA and Y. SHIKANO, “Massless Dirac Equation from Fibonacci Discrete-Time Quantum Walk,” *Quantum Stud.: Math. Found.* **2**, 243–252 (2015).

Y. TUREK, H. KOBAYASHI, T. AKUTSU, C. -P. SUN and Y. SHIKANO, "Post-Selected von Neumann Measurement with Hermite–Gaussian and Laguerre–Gaussian Pointer States," *New J. Phys.* **17**, 083029 (17 pages) (2015).

Y. TUREK, W. MAIMAITI, Y. SHIKANO, C.-P. SUN and M. AL-AMRI, "Advantages of Nonclassical Pointer States in Postselected Weak Measurements," *Phys. Rev. A* **92**, 022109 (8 pages) (2015).

S. GOTO, "Legendre Submanifolds in Contact Manifolds as Attractors and Geometric Nonequilibrium Thermodynamics," *J. Math. Phys.* **56**, 073301 (30 pages) (2015).

B-3) 総説，著書

Y. SHIKANO, "These from Bits," in *It From Bit or Bit From It?* Chapter **10**, 113–118 (2015).

B-4) 招待講演

Y. SHIKANO, "On Lesson from Material Databases," Pacifichem 2015 symposium on "Machine Learning Meets First-Principles Simulation for Materials Discovery," Hawaii Convention Center, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

Y. SHIKANO, "Visualizing a quantum state," International Conference on Quantum Foundations 2015 (ICQF15), National Institute of Technology, Patna (India), December 2015.（VISA申請不備のためキャンセル）

Y. SHIKANO, "Visualizing a quantum state," 17th SPVM National Physics Conference, Cavite State University, Indang (Philippines), October 2015.

鹿野　豊,「量子動力学シミュレーション」, ２０１５年度日本数学会秋季総合分科会「量子ウォークと関連する話題」（応用数学分科会スペシャルセッション）, 京都産業大学, 京都, 2015年９月.

鹿野　豊,「弱測定による量子現象の可視化」, 東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究「量子測定の物理と情報通信」第1回研究会, 東北大学電気通信研究所, 仙台, 2015年９月.

Y. SHIKANO, "Lesson from Activities of Gender Equality Promotion by the Physical Society of Japan (JPS)," Association of Asia Pacific Physics Society—Women in Physics Workshop 2015 (AAPPS workshop 2015), Sofitel Ambassador Hotel, Seoul (South Korea), August 2015.

鹿野　豊,「量子ウォークにおける確率」, 科学における確率, 統計数理研究所, 立川, 2015年７月.

Y. SHIKANO, "Toward Quantum Phononics—As an example of coherent phonon in diamond—," The 3rd Awaji International Workshop on Electron Spin Science & Technology: Biological and Materials Science Oriented Applications (AWEST2015), Awaji Yumebutai International Conference Center, Awaji (Japan), June 2015.

Y. SHIKANO, "Introduction to Discrete-Time Quantum Walk," Symposium on Computing Science, Mindanao State University, Iligan Institute of Technology (MSU-IIT), Iligan (Philippines), May 2015.

Y. SHIKANO, "Statistical analysis on Complex systems (Lectures)," Tropical School and Workshop on Analytic and Computational Methods for Complex Systems: The Case of Polymer Conformations, Research Center for Theoretical Physics, Central Visayan Institute Foundation, Jagna (Philippines), May 2015.

Y. SHIKANO, "Deformed Statistical Mechanics," Tropical School and Workshop on Analytic and Computational Methods for Complex Systems: The Case of Polymer Conformations, Research Center for Theoretical Physics, Central Visayan Institute Foundation, Jagna (Philippines), May 2015.

鹿野　豊,「ダイヤモンド窒素格子欠陥中の電子スピンを用いた計測手法」, 第７０回日本物理学会年次大会「スピン分光法の最近の現状と展望」（領域3，領域7，領域5）, 早稲田大学早稲田キャンパス, 東京, 2015年 3月.

鹿野　豊, "Visualizing Quantum Nature," Symposium on Quantum Fields in Dynamical Nature, on the occasion of Professor Izumi Ojima's retirement, 京都大学北部キャンパス北部総合教育研究棟内益川ホール, 京都, 2015年 3月.

鹿野　豊,「実験家の協働で見えてきた統計的考え方の重要性と期待」, 第9回日本統計学会春季集会, 明治大学中野キャンパス, 東京, 2015年 3月.

鹿野　豊,「量子計算機の現状と展望」, Small-workshop on Communications between Academia and Industry for Security (SCAIS), 九州大学西新プラザ, 福岡, 2015年 1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 (2007).

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–).

学会誌編集委員

Scientific Reports, Editorial Board Member (2015–).

Advances in Mathematical Physics, Special Issue "The Theory of Quantum Simulation, Quantum Dynamics, and Quantum Walks," Guest Editor (2014).

Frontier in Mathematical Physics, Review Editor (2013–).

Journal of Computational and Theoretical Nanoscience, Special Issue "Theoretical and Mathematical Aspects of the Discrete Time Quantum Walk," Guest Chief-Editor (2013).

Quantum Information Processing, Special Issue on Quantum Walk, Guest Editor (2012).

その他

総合研究大学院大学先導的共同研究企画ワーキンググループ委員 (2015–).

青森県立三本木高等学校出前授業「どうやって安全に通信しようか？」(2015).

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

東京工業大学応用セラミック研究所, 客員准教授, 2015年 4月– .

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

分子科学研究所着任以前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イメージング科学との融合により研究テーマとして発展した部分はある。しかし，分子科学研究所着任以後に始めた振動状態に関する研究テーマに関しては結果が出始めているものの，本格的な軌道にのせることは大変厳しい状況である。特に，日常的に議論を行うために所内において理論と実験の協奏的関係を構築し，分子科学研究の基礎である振動状態分光に関する知見を取り込む必要性がある。また，研究グループとしての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インターンシップの学生などを確保してきたが,数ヶ月単位の滞在では新しい研究テーマを展開するには短すぎる期間である。現在の研究グループの状況を踏まえ，グループリーダー鹿野の残された在任期間の中で恒常的な研究活動を維持・発展するための制度的・構造的欠陥を克服する戦略と実行力が現在の課題である。

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，蓄電・発電デバイス

A-2) 研究課題：

a) H^- 導電性酸水素化物の物質探索

b) H^- のイオン導電現象を利用した新規イオニクスデバイスの創成

c) 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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 当グループがこれまでおこなってきた H^- 導電体 $La_{2-x-y}Sr_{x+y}LiH_{1+x+y}O_{3-y}$ の研究から得られた知見を基に物質探索を進め，新たに $Ba_2LiH_{3-2x}O_{1+x}$ と Ba_2ScHO_3 の合成に成功した。$Ba_2LiH_{3-2x}O_{1+x}$ は，300 ºC で 10^{-2} S·cm^{-1} を越える極めて高い H^- 導電特性を示した。一方，Ba_2ScHO_3 は，これまで報告された酸水素化物とは異なる H^- の配位環境をとることが分かり，今後の酸水素化物の物質設計に資する固体化学的に有益な知見を得た。

b) $La_{2-x-y}Sr_{x+y}LiH_{1+x+y}O_{3-y}$ が全固体電池の固体電解質として利用できることを明らかにした。また，水素透過性の Pd を電極に用いた固体電池の電気化学測定から，$H_2 + 2e^- \Leftrightarrow 2H^-$ の反応が Pd 電極で可逆的に進行することを確認した。

c) 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 $Li_{1.2}MO_2$ (M = Ni, Co, 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 $Li_{1.2}MO_2$ 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。

B-1) 学術論文

S. TSUSHIMA, W. HUNG, P. DEEVANHXAY G. KOBAYASHI, R. KANNO and S. HIRAI*, “In Situ X-Ray Visualization of the Lithiation Process in a Porous Graphite Electrode in an Operating Li-Ion Cell,” *ChemElectroChem* **2**, 1535–1540 (2015).

R. SAKUMA, H. HASHIMOTO, G. KOBAYASHI, T. FUJII, M. NAKANISH, R. KANNO, M. TAKANO and J. TAKADA*, “High-Rate Performance of Bacterial Iron-Oxide Electrode Material for Lithium-Ion Battery,” *Mater. Lett.* **139**, 414–417 (2015).

B-4) 招待講演

G. KOBAYASHI, “Hydride Conduction in Oxyhydrides,” 20th International Conference on Solid State Ionics, Keystone (U.S.A.), June 2015.

B-5) 特許出願

特願 2015-228680,「ヒドリドイオン導電体およびその製造方法」, 小林玄器，渡邉明尋，菅野了次，平山雅章（自然科学研究機構，東京工業大学), 2015 年.

B-6) 受賞，表彰

G. KOBAYASHI, International Conference on Materials for Advanced Technologies 2009, Best Poster Award (2009).

G. KOBAYASHI, The American Ceramics Society Spriggs Phase Equilibria Award (2010).

小林玄器, 手島精一記念研究賞（博士論文賞)(2011).

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).

第56回電池討論会実行委員 (2015).

B-8) 大学での講義，客員

東京理科大学理学部, 集中講義「特別研究」, 2015年10月3日.

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).

科研費若手研究(A),「新規イオニクスデバイスの開発に向けたヒドリド導電性物質の探索」, 小林玄器 (2015年–2018年).

C) 研究活動の課題と展望

①H^- 導電性酸水素化物の物質探索および新規イオニクスデバイスの創製（研究課題a), b)）

着任時から一貫して取り組んできたH^- 導電性酸水素化物の物質探索については，$Ba_2LiH_{3-2x}O_{1+x}$ の合成に成功したことで大きく進展した。$Ba_2LiH_{3-2x}O_{1+x}$ が 300–400 ºC で示すH^- 導電特性（$\sigma \geq 10^{-2}$ S·cm^{-1}）は，プロトン（H^+）による従来の水素のイオン輸送では達成できなかった特性である。プロトン（H^+）による水素のイオン伝導では，水または酸化物イオンとの結合を介してH^+ が伝導するため，水を固体内に結晶水として留めることができない，またはH–O 結合の束縛が強いなどの理由から，中温域（200–400 ºC）で優れた導電特性が得られない。これに対し，H^- は固体内を単独でホッピング伝導できるため，この温度域で高い導電率が得られた可能性がある。今後は，これまで得られた知見を基に，更なる導電率の向上を目指して物質探索を継続する。また，物質探索と並行してH^- のイオン導電機構や拡散係数などを明らかにし，組成・構造・物性の関連性をより詳細に解明することで，H^- 導電体の研究を固体イオニクスの新たな研究分野として確立・体系化したい。

H^- のイオン導電現象の電池反応への応用に関しては，実際に，合成した酸水素化物を固体電解質に用いた固体電池を作製し，H_2 ガスを活物質としたH^-/H_2 の酸化還元反応を観測した。今後は，新しい発電・蓄電デバイスの創成を目的として，正極側の反応を検討したい。また，これまで合成した酸水素化物の熱的・電気的安定性を調べ，電池材料としての可能性を多角的に検証する。

② 電極／電解質界面の制御（研究課題 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，研究課題 b) の新規イオニクスデバイスの創成にフィードバックする。

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)$_2$Cu[N(CN)$_2$]X (X = Cl, Br) の薄膜単結晶を用いたFETを作製し，その電気的特性を測定した。モット絶縁体中では電子間に働くクーロン反発と格子整合のために本来金属的であるべきキャリアの伝導性が極端に低い状態が実現しているが，トランジスタのゲート電界により静電キャリアドーピングが行われると実効的なクーロン反発が遮蔽されて金属的な伝導性が復活する。こうした原理による伝導性スイッチングはこれまでの半導体デバイスではほとんど使われてこなかったが，我々のグループが世界に先駆けて原理検証したものである。本年は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。EDLT を用いると，これまで困難であった p 型領域でのホール効果測定が可能となり，その結果有機モット絶縁体において初めてフェルミアーク由来と思われる輸送現象を観測することに成功した。

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 $SrTiO_3$ を選択し，その表面に Al_2O_3 を ALD（Atomic Layer Deposition）成長させることによってボトムゲート用の基板を作製した。この基板に κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu[N(CN)$_2$]Br の薄膜単結晶を載せて低温まで温度を下げると，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。このような超伝導トランジスタに，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 n 型領域への拡張を行った。

c) 我々は以前の研究において，分子性導体の結晶中にハロゲン結合を利用した超分子ネットワーク構造を構築し，絶縁性の被覆構造とその中を貫通する伝導性ナノワイヤーとからなる複合構造を形成した。こうしたナノワイヤーは結晶構造の中で三次元的に周期配列しているため，結晶の並進対称性を使った配線材料として利用できる可能性がある。そのため，現在このようなナノワイヤーの物性と配列様式を改良するための研究を行っている。

B-1) 学術論文

Z. QIU, M. URUICHI, D. HOU, K. UCHIDA, H. M. YAMAMOTO and E. SAITOH, "Spin-Current Injection and Detection in κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu[N(CN)$_2$]Br," *AIP Adv.* **5**, 057167 (7 pages) (2015).

M. SUDA, R. KATO and H. M. YAMAMOTO, "Light-Induced Superconductivity Using a Photo-Active Electric Double Layer," *Science* **347**, 743–746 (2015).

B-3) 総説, 著書

山本浩史，須田理行,「光でオン・オフ可能な超伝導スイッチの開発」,*自動車技術* **69(9)**, 114–115 (2015).

山本浩史,「電界誘起相転移」,「分子性物質の物理」, 朝倉書店, 第 5 章, 103–125 ページ (2015).

山本浩史，須田理行,「物理科学, この1年：世界初の有機超伝導トランジスター」, *パリティ* **30**, 23–25 (2015).

J. MANNHART, H. HILGENKAMP and H. M. YAMAMOTO, "Thee-Terminal Device," in *Reference Module in Materials Science and Materials Engineering*, Saleem Hashmi, Ed. (2015).

B-4) 招待講演

H. M. YAMAMOTO, "Switching of organic superconductivity by electric-field, strain, and light," Pacifichem2015, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

H. M. YAMAMOTO, "Sheathed Nanowires Aligned by Crystallographic Periodicity," 3CG, Hong Kong (China), December 2015.

H. M. YAMAMOTO, "Field-/Light-induced Phase Transitions in organic FET interfaces," WPOO3-2015, Okazaki (Japan), December 2015.

H. M. YAMAMOTO, "Phase-transition Transistors Based on Organic Materials," Molecular Designs for Advanced Materials: Workshop and Conference, Chiang Mai (Thailand), November 2015.

H. M. YAMAMOTO, "Photo-Induced Superconductivity Observed at Organic Field-Effect-Transistor Interface," ISS2015, Tokyo (Japan), November 2015.

H. M. YAMAMOTO, "Organic Phase-Transition Transistors with Strongly-Correlated Electrons," ISCOM2015, Munich (Germany), September 2015.

H. M. YAMAMOTO, "Thin-Film Single Crystals for Organic Superconducting Transistor," ICCOSS2015, Niigata (Japan), June 2015.

H. M. YAMAMOTO, "Field-induced superconductivity in an organic FET," EM-NANO2015, Niigata (Japan), June 2015.

H. M. YAMAMOTO, "Light-induced superconductivity using photo-active electric double layer," Asian Academic Seminar 2015, Kolkata (India), March 2015.

H. M. YAMAMOTO, "Organic Field-Effect-Transistors with Light-Tunable Superconducting Channel," PACCON2015, Bangkok (Thailand), January 2015.

H. M. YAMAMOTO, "Switching of organic superconductivity by electric-field, strain, and light," AIMR seminar, Sendai (Japan), November 2015.

山本浩史,「強相関有機デバイスを用いた物性物理とエレクトロニクス」, 応物教室談話会, 名古屋大学, 名古屋, 2015年 10月.

H. M. YAMAMOTO, “Field-, Strain-, and Light-induced Superconductivity in Organic FETs,” Seminar in Max Plank Institute Stuttgart, Stuttgart (Germany), September 2015.

山本浩史,「有機相転移トランジスタと強相関物性物理」, 物性夏の学校, 岐阜, 2015年 7月.

山本浩史,「光で超伝導を操る分子システムの開発」, 分子システム研究会, 2015年 5月.

山本浩史,「有機Mott 絶縁体のFET 構造による電子相制御」, 物理学会, 早稲田大学, 東京, 2015年 3月.

山本浩史,「強相関電子材料を用いた有機エレクトロニクス」, 九大OPERA セミナー, 福岡, 2015年 2月.

山本浩史,「有機強相関トランジスタによる物性科学」, 東北大学理学部物理学科コロキウム, 仙台, 2015年 1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

日本化学会東海支部常任幹事 (2015–).

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–).

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

アジア科学セミナー組織委員 (2014–2015).

総研大アジア冬の学校実行委員 (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

名古屋大学大学院工学研究科,「応用物理量子物性」, 2015年 10月.

東京工業大学大学院総合理工学研究科,「半導体電子物性」, 2015年 10月–2016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– .

東北大学大学院理学系研究科,「強相関電子物理学特論」, 2015年 11月.

東北大学大学院理学系研究科, 委嘱教授, 2015年 4月– .

B-10) 競争的資金

科研費新学術領域研究（公募研究),「π電子系強相関物質を用いた歪み制御型相転移デバイスの開発」, 須田理行 (2015年–2017年).

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～ 2015 年 3 月 31 日）*)

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：オリゴマーサイズのサンドイッチ構造の構築を達成。

b) 二次元金属シートサンドイッチ錯体の創成展開：パラジウムシート配位サイトにおけるベンゼンおよびナフタレンの安定バインド様式を解明。

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：ヘテロ芳香族化合物に対する二核配位様式を解明。

B-1) 学術論文

K. YAMAMOTO, M. TERAMOTO, K. USUI and T. MURAHASHI, "Anti Dinuclear Adducts of Cycloheptatriene and Cycloheptatrienyl Ligands: Anti-$[Pd_2(\mu\text{-}C_7H_8)(PPh_3)_4][BF_4]_2$ and anti-$[M_2(\mu\text{-}C_7H_7)(PPh_3)_4][BF_4]$ (M = Pd, Pt)," *J. Organomet. Chem.* **784**, 97–102 (2015).

Y. ISHIKAWA, S. KIMURA, K. YAMAMOTO, Y. KURASHIGE, T. YANAI and T. MURAHASHI, "Modulation of Benzene or Naphthalene Binding to Palladium Cluster Sites by the Backside-Ligand Effect," *Angew. Chem., Int. Ed.* **54**, 2482–2486 (2015).

S. HORIUCHI, Y. TACHIBANA, M. YAMASHITA, K. YAMAMOTO, K. MASAI, K. TAKASE, T. MATSUTANI, S. KAWAMATA, Y. KURASHIGE, T. YANAI and T. MURAHASHI, "Multinuclear Metal-Binding Ability of a Carotene," *Nat. Commun.* **6**, 6742 (2015).

K. YAMAMOTO, Y. ISHIKAWA, S. KIMURA, K. TAKASE and T. MURAHASHI, "Dinuclear Palladium(I) Sandwich Complexes of Furan and Toluene," *C. R. Chim.* **18**, 785–789 (2015).

B-4) 招待講演

T. MURAHASHI, "Chemistry of Multinuclear Sandwich Complexes," Pure and Applied Chemistry International Conference 2015 (PACCON 2015), Bangkok (Thailand), January 2015.

T. MURAHASHI, "Metal Assembly in Organometallic Sandwich Frameworks," 10^{th} China-Japan Joint Symposium on Metal Cluster Compounds, Fuzhou (China), October 2015.

T. MURAHASHI, "Multinuclear Sandwich Complexes Containing Extended π-Conjugated Hydrocarbon Ligands," PACIFICHEM 2015, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

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 ―さきがけ 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 (2012–2014).

錯体化学会副事務局長 (2012–2015).

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がけ研究,「炭素鋳型法による低次元性ナノ金属集合体のビルドアップ型創製」, 村橋哲郎 (2005年–2009年).

科研費特定領域研究（計画研究),「遷移金属多核錯体の高精度金属核配列制御」, 村橋哲郎 (2006年–2009年).

科研費若手研究(B),「メタロセン型パラジウムクラスター分子の創製および反応性」, 村橋哲郎 (2007年–2008年).

住友財団基礎科学助成,「拡張π―共役炭素間に固定された多核金属種の動的集合性及び反応性の解明」, 村橋哲郎 (2009年–2010年).

科学技術振興機構さきがけ研究,「光化学的手法による天然有機色素の金属バインディング機能創出」, 村橋哲郎 (2010年–2013年).

科研費挑戦的萌芽研究,「メタロセン型異種混合金属クラスターの創製」, 村橋哲郎 (2011年–2012年).

徳山科学技術振興財団研究助成,「メタロセン型後周期遷移金属クラスター触媒の開発」, 村橋哲郎 (2012年–2013年).

科研費若手研究(A),「後周期遷移金属を用いたメタロセノイドクラスターの創製と反応解明」, 村橋哲郎 (2012年–2014年).

科研費新学術領域研究（計画研究),「柔ら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).

科研費基盤研究(B),「サンドイッチ構造を基盤とする金属シートクラスターの創成」, 村橋哲郎 (2015年–2017年).

科研費挑戦的萌芽研究,「バイメタリック金属クラスターの一原子金属配列制御と金属交換」, 村橋哲郎 (2015年–2016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，*Nat. Commun.* 2015 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。2015年度にオリゴマーサイズの構築にも成功しており，今後も合成研究をさらに展開していくことにより，多核サンドイッチ化合物の一般性を確立できる可能性がある。また，適用できる金属元素の種類を増やす検討も必要である。一方，多様な種類の多核サンドイッチ化合物が入手できるようになってきたため，多核サンドイッチ化合物の基本的物性や反応性の解明にも着手できるようになってきた。既に，いくつかの興味深い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。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，アレーン類やヘテロ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することに成功している。アレーン類の二核付加反応や三核シートおよび四核シート上でのアレーンバインド様式等を明らかにしている（*J. Am. Chem. Soc.* 2011, *Angew. Chem.* 2015 など）。

＊）2015年4月1日東京工業大学大学院理工学研究科教授

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) フラーレン類やカーボンナノチューブの芳香族性は未だよく理解されておらず，理論家の間でも議論の対象となっている。実験的には，NMR の遮蔽効果が環電流の合計としての情報を与える。C_{60} の場合，He や Xe 原子，水素や水分子を中心に置いた内包フラーレンが知られており，それらの NMR が溶液中で測定されている。例えば，$H_2@C_{60}$ の ^{1}H NMR では，–1.44 ppm にシングレットが観測されているが，これは溶液中の水素分子と比較して 5.98 ppm も高磁場シフトしている。[*n*] シクロパラフェニレン(CPP)はナノフープと呼ばれ, アームチェアー型カーボンナノチューブの最小モデルであり，C_{60} には [5]CPP の構造が含まれている。CPP の環中心における遮蔽効果は，CPP の芳香族性を判断するよい指標となりうる。フラーレンと異なり，CPP 環内に原子や小さな分子をとどめておくことは困難である。そのため，環中心近くに共有結合によってつながれたグループをもつ誘導体を設計する必要がある。この目的のために，[8]CPP の誘導体である３種のテトラシクロ（2,7- カルバゾール）合成した。一つの化合物は，隣り合ったアンチ型カルバゾールの間に 5,5- ジメチルノナンが架橋されており，共有結合によりつながれたメタンプローブとして利用することができる。環中心近くに固定されたメチル基は，ローカル環電流によって強く遮蔽されており，^{1}H NMR で –2.70 ppm にシングレットを示した。次に DFT の NMR 計算によって得られた nucleus-independent chemical shift（NICS）値を用い，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をそれぞれ可視化した。ローカル環電流によりナノフープ環内は完全にジアトロピックとなり, パラトロピック領域は環外のみに存在する。また, [5]CPP から [7]CPP ではパラトロピックのグローバル環電流が生じ，[8]CPP 以上ではほとんど発生しないことが分かった（論文投稿中)。

B-1) 学術論文

F. ANGER, H. GLOWATZKI, A. FRANCO-CAÑELLAS, C. BÜRKER, A. GERLACH, R. SCHOLZ, Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI, N. KOCH and F. SCHREIBER, “Interface Dipole and Growth Mode of Partially and Fully Fluorinated Rubrene on Au(111) and Ag(111),” *J. Phys. Chem. C* **119**, 6769–6776 (2015).

B-10) 競争的資金

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。

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。

特に今年は法人化２期目の最終年度に当たり，齋藤軍治教授，増原宏教授，廣田襄教授 , 研究顧問の柳田敏雄教授, さらに諸熊奎治教授, 増田秀樹教授の６名の先生方に５月はじめの４日間, ヒヤリング, 研究現場の視察などを実施し，分子科学研究所の活動の評価をして戴いた。

Graham Fleming 教授は光化学研究の世界的リーダーであり，元 UC，Berkeley 校の研究担当副学長である。 2015 年 10 月上旬に Fleming 教授（研究顧問）が３日間にわたり来所し，この６年間を通じて同氏から頂いた研究方向, またその実施についての提言などがいかに反映されたかについて検証して戴いた。

また 11 月中旬には英国ケンブリッジ大学の Wales 教授によって理論研究グループを中心にヒヤリングが実施され, 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いた。

（大峯　巖）

7-1　運営顧問による点検評価

分子科学研究所・外部評価報告書

評価委員名（代表的な肩書）：各担当領域

齋藤軍治（京大名誉教授）：協奏分子，物質，ナノプラット事業

廣田　襄（京大名誉教授）：光，協奏分子，物質，および，全体のまとめ

増原　宏（阪大名誉教授）：光，協奏分子

増田秀樹（名工大名誉教授）: 生命・錯体，協奏分子，統合バイオ

諸熊奎治（分子研名誉教授）: 協奏分子，理論・計算

柳田敏雄（阪大名誉教授）：協奏分子，統合バイオ

ヒアリング実施日： 2015年5月11日～13日（3日間）

7-1-1　分子研全体の評価

(1)　まえがき

分子科学研究所は化学と物理の学際領域である分子科学における大学共同利用研究所として1975年にスタートし，創立以来豊かな研究費と整備された装置に支えられて多くの優れた成果を生み出して国際的に評価される分子科学研究のセンターとして機能してきた。現在でも論文引用度指数などに示されるようにその研究成果は国際的に見て高い水準を維持している。人材育成の面では，物理化学分野を中心に我が国の大学における研究・教育のリーダーとして活躍する人材を多数輩出して我国における分子科学の発展に大きく貢献した。しかし，創立から40年が経ち，分子科学および分子科学を取り巻く状況と大学における研究環境も大きく変化した。分子科学の領域は現在では生命科学，物質科学を含む分子に関わる広範な領域と関わりを持つ分野に広がっている。このような変化に対応して，分子研では2007年に従来の6研究系（理論，電子構造，分子構造，分子集団，極端紫外光，相関）を3領域（理論・計算, 光, 物質）に大綱化し, さらに第4領域として生命･錯体の研究領域を創出した。2013年からは大峯所長のリーダーシップのもと，意欲的な新構想に取り組み，ナノサイエンスセンターを見直して，第5の研究領域として新たな分野創成を目指す「協奏分子システム研究センター」を発足させ，それを補完するメゾスコピック系の時間変化を追求する極限的な計測の研究センターの設立も構想されている。これらの新構想は極めて意欲的で興味深いものであり，今後の展開に大きな期待がもたれる。

分子研は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ともに，生命科学・天文科学などを含む，分子が関与する広範な関連分野の研究者と共同して科学の新たな研究領域を創出する任務をもつ。創立以来，国際研究拠点として様々な取組をして研究のグローバル化を先導してきたが，この面でのリーダーシップを維持するにはさらなる努力が必要であろう。

人事政策の面では，分子研では創立以来研究系の教授，准教授は完全独立で，助教を含めて内部昇格なしの人事政策を採用してきた。これは従来の日本の大学の慣行を打破した画期的な政策で，大きな成果をあげてきたと評価される。これにより分子研における人事の高い流動性を保持するだけでなく，大学における人事の流動性を促進するのに大きく貢献してきた。また，新たな試みとして2011年からは27～30歳の研究者をターゲットに若手独立フェロー制度をスタートさせるなど，新たな頭脳循環型の人材育成を含む改革に取り組んでいる。

一方で，大学院生が少なく，各研究グループの規模が小さいために研究活動を大きく展開することが難しいという

問題をずっと抱えてきた。国内，国際的にますますグローバル化が進展し競争が激化する環境の中で，いかにして分子研が国際研究拠点としての卓越性を維持して発展できるであろうか。本評価では，とくに新しい制度とその取組み，および個別分野について点検・評価し，将来のあり方について提言する。

(2) 新しい制度と取組について

① 若手独立フェローについて

アメリカなどでは，学位取得後の若手研究者が 20 代の後半に独立して自分の研究室を持って独自の発想で研究を行って大きな成果をあげてきた例が良く知られている。従来の日本の講座制のもとでは若手が独自に自分の研究プログラムを展開することは一般には難しかった。分子研では以前から准教授が独立して研究できる環境を作ってきたが，2011 年から 5 年任期の特任准教授として「若手独立フェロー」の新しい制度をスタートさせ，博士号取得後 2 年以内，あるいは海外の博士研究員でとくに将来性が期待され，独自の着想で新しい分子科学を切り拓く意欲のある若手研究者を採用した。このシステムは日本では画期的な試みで高く評価される。現在 3 名の若手独立フェローが協奏分子システム研究センターに在任しているが，いずれも将来が期待される非常に優れた研究者であり，この制度が良く機能して大きな成果が得られることを期待する。

② 新しい研究領域「協奏分子システム研究センター」について

分子研は 2013 年に従来の，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 つの研究領域を基礎として，次世代分子科学の新分野の創成を目指して，4 領域にまたがる協奏分子システム研究センターを発足させた。これは，“ 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る「分子の知恵」を学び，卓越した機能をもつ分子系を創成する ” ことを目指すもので，その中心に 2 つのセンターを構想した。一つは卓越した機能をもつ協奏的分子系の創成を目指すセンター CIMoS（Research Center of Integrative Molecular Systems）で，もう一つはメゾスコピック系の時空間変化を追求する極限的な計測を開発するセンターである。発足以来 CIMoS を中心に意欲的な人事や分野間の連携を目指した新しい取り組みを行って，すでに相当な成果をあげている。具体的な成果や懸念される点などに関しては個別研究領域の評価の項で論じるが，これまでの経過は今後の発展に大きな期待を抱かせるものである。

(3) 課題と提言

① 分子研の visibility と将来に関して

分子研の visibility が低下して求心力が弱くなってきているという指摘がある。これに関しての受け止め方は分野によって異なる。一般論としては，分子研創立当時と比べて大学の研究環境が相対的に良くなったこともあって，研究施設等で整備されている，限られた最先端設備を使った研究を除いては分子研でなければできない研究が少なくなり，マンパワーの問題もあって国内では分子研の魅力が薄れたことは否めないであろう。しかし現在でも国際的にみて非常にレベルの高い visible な研究も多く行われている。重要なことは，分子研の持つ利点を生かして新しい分子科学を創造し，真に国際的な分子科学のセンターとしての役割を果たすにはどうすべきかである。今回の評価では，大峯所長のリーダーシップのもとに次代の分子科学創成のための新プログラムのスタートが切られ，新しい研究の芽が育ちつつあることが実感された。これを今後大きく育てることが重要であろう。

② マンパワー，研究グループの規模の問題

これまでの外部評価において常に指摘されてきた課題の一つは，分子研では大学院生が少なく，研究グループが小さいために研究活動が限られるという問題である。この問題の深刻さは分野によって異なり，新物質の合成に依存する物質分子科学や生命・錯体分子科学の分野でとくに大きい。期待されて着任した若手教授が短期間で大学に移る例がしばしば見られるのは主としてこの問題に起因している。1988 年に総研大が開学した当初は，大学に比べて恵まれた研究環境に惹かれて分子研での研究を志す優秀な学生も比較的多く，総研大は多くの人材を育てることにも成功した。しかし，大学院重点化や大学法人化以後，大型機器の導入などで大学の研究環境は整備され，この面での分子研の優位は失われた。また，大学院生確保のための競争が激化し，大学生の学力低下の一般的傾向もあって，総研大が優秀な院生を確保することが次第に難しくなっている。分子研では多くの学生，研究者を擁して活発な研究活動を行っているグループもあるが，規模が小さい研究グループが多い。この問題をいかにして克服すべきであろうか。各グループの基本構成を助教２名，あるいは助教１名，博士研究員１名にしたり，海外から選抜した優秀な院生をインターンシップとして半年程度, 研究に従事させたり, 近隣の大学から院生を１年程度, 特別共同利用研究員（受託院生）として受け入れたりするなどの努力も見られるが，知恵を絞ってさらなる改善を図ってほしい。ありきたりの提言であるが，以下のような点での一層の努力を望む。

・ 大型の競争的資金を獲得し，優れた研究の魅力によって国内および海外から若手研究者（PD），学生を多く集める努力をもっとする。
・ JSPS のプログラムなどを利用して外国人 PD を増やす努力をする。また，懇意な外国人研究者を通じて優秀な外国人学生・PD を増やすように努める。これは国際交流の点からも望ましいことである。
・ 学生の多くいる大学との兼務（兼担）あるいは共同研究で，研究グループを大きくする努力をする。

③ 人事に関して

a) 内部昇格禁止の方針に関して

原則として内部昇格を禁止してきた人事方針は前述したように大きな成果をあげてきた。しかし今後もこの方針を続けるべきかに関しては，意見の分かれるところである。外国人運営顧問からは，しばしばこの方針に疑問が出されてきた。分子研は単独の研究所ではなく，大学と連携して絶えず新しい分野を創り出し，優秀な研究者を生み出し育成した後に大学に送り出すための頭脳循環拠点であることを考慮すると，続けることが望ましいとする意見は強いが，分子研を取り巻く環境も変化しており，研究所としての卓越性を維持するためには考え直す必要があるとする意見もある。内部昇格がないので転出を前提に研究計画や自己のキャリアーの将来を考えざるを得ず，若手が長期的な視野に立った意欲的な研究や，分子研の将来に関わる問題に責任を持って取り組む事が難しくなるとの指摘もある。これまでも UVSOR の加速器グループの場合のように特別な場合には内部昇格もあったが，厳密な審査を経て内部昇格を認める柔軟な方針を含め，将来を見据えた方針の慎重な検討が望まれる。

b) 女性・外国人研究者に関して

国際的な研究機関を目指しながら，常勤教員の外国人研究者が２人というのは問題ではなかろうか。もっと優秀な外国人研究者を獲得する努力が必要であろう。また，女性の研究者の数も極めて少ない。もともと分子科学分野の女性研究者の数が少ない現状を無視して数だけを論じるのは問題であろうが，政策的にもまず数を増やすのが先決であるとの意見もある。外国人および女性研究者を増やすための積極的な方策を検討して頂きたい。

④　国際協力と交流に関して

分子研は国際研究拠点としてグローバル化を実現するため，創立以来様々な努力を重ねてきた。最近では，国際若手招聘プログラム，国際インターンシップ，研究集会の国際化強化，国際諮問委員会制度の発足など，新しい試みに取り組んできた。分子研が分子科学における世界のセンターになるためには，国際的な頭脳・人材の相互交流のさらなる強化が必須であり，それに関しては 2013 年度の評価において，具体的な提案がされている（分子研リポート 2013）。国際的な活動の強化のためには，外国人研究者へのきめ細かな対応や国際共同研究のコーディネーターとしての役割など多くのサポートの仕事がある。分子研では最近導入された URA 制度をいち早く利用して対応を始めており，この面では改善が進んでいる。しかし，国際活動の強化のための最大の問題点は，分子研との共同研究を希望する外国人研究者の数が十分でないという問題である。分子研の研究者は自分の研究に忙しく国際活動までなかなか手が回らないのが現状であろうが，運営上の工夫などでこの問題をできるだけ改善するよう望みたい。

7-1-2　個別研究領域の評価

(1)　光分子科学研究領域

①　全体的な評価

光分子科学研究領域のカバーする分野は，光源開発と光計測・制御の二つに大別される。光源開発ではコヒーレント放射光源と広い波長範囲のレーザー光源，超短パルスレーザー光源の開発と応用研究が，光計測・制御では，量子ダイナミクスのコヒーレント制御，ナノ物質の光学イメージング・光制御，真空紫外光・X線による励起分子ダイナミクス，無機・有機固体の新規物性に関わる電子状態の解明が行われてきた。これらの研究分野はいずれも光分子科学における重要で先端的な研究分野であり，国際的にも競争の激しい分野である。分子研の光分子科学研究領域の研究者は極めて優秀で，プラズモンを駆使したレーザー顕微鏡化学，アト秒レーザー化学，マイクロチップレーザーやセラミックレーザーの開発，UVSOR を利用する溶液中化学反応の研究など，それぞれ特色あるテーマを選んでレベルの高い研究を行ってきた。出版，論文，受賞，招待講演の実績，最近の外国人運営顧問による点検評価などに示されるように，国際的に高く評価される業績をあげてきている。

②　個別評価

全体としてこの分野の研究者は個人として優れた研究者が多いと高く評価する。説明を受けたグループについて特に印象に残った点をあげる。

大森グループ

大胆な発想でアト秒領域の量子エンジニアリング技術を開発し，世界最速のスパコンより 1000 倍速くナノより小さい分子コンピュータや，固体中の原子の運動を 10 兆分の 1 秒単位で制御し画像化する技術を開発して，国際的に極めて高い評価を得ている。またこの技術を利用して古典論と量子論の境界にある現象を探索解明しようとしており，分子科学として興味ある現象の発見・解明においても画期的な成果が得られるものと期待している。

岡本グループ

近接場顕微鏡を用いて金属ナノ構造による電場増強，プラズモン波および局所的光学活性の可視化に世界に先駆けて成功し，これを用いてユニークな研究を展開していることを高く評価する。最近ではサブ 20 fs 近接場超高速計測

によるプラズモン波運動の可視化，金属ナノ構造の CD イメージング，キラル金属ナノ構造の近接場 CD イメージングなどに取り組んでいる。これらは光マニピュレーションにおける非線形光学効果の探索，超解像光トラッピング法の開発，さらにはキラルナノ光学の開拓など野心的な課題につながる。今後分子研におけるメゾスコピック測定法の開発で中心となって活躍することが期待される。

小杉グループ

気体と固体，その分子間相互作用系の解析から，リアルな系の空間分解測定へシフトし，さらに時間変化する反応系へと対象を発展させてきた。具体的な例をあげると，その場観測が可能な軟Ｘ線吸収分光法の確立とその顕微分光への展開により溶液中の反応系の局所電子状態解析を可能にし，弱い分子間相互作用系の高分解光電子分光測定によるバンド形成や水素結合形成の機構の解明など，UVSOR の特徴を生かした高度な研究がある。今後は脂質と分子の相互作用の研究など，より複雑な生体系への展開も大いに期待している。

解良グループ

光電子分光の精密測定や強拡大 log スケール測定，高配向試料作製・評価などを駆使して，有機半導体の電子状態のわずかな変化，バンドギャップ中の電子準位，移動度の内部要因（バンド分散，電子・振動結合）を研究しようとしている。着任後の日が浅いので，分子研における業績の評価は難しいが，分子固体のバンドギャップ中の電子を検出して状態密度の定量的評価に成功するなど，今後の展開が期待される。

(2) 極端紫外光研究施設（UVSOR）

① 全体的な評価

最近の高度化によって真空紫外光，軟Ｘ線領域での放射光源としては世界トップレベルの性能を持ち，世界の加速器を用いる研究の厳しい競争のもとで装置の性能を生かした特徴のある研究を推進することに成功して，ユニークな研究成果をあげている。優秀なリーダーやスタッフの献身的な努力により，少人数にもかかわらず施設は良く運営されており，国内外の研究者の要望に良く対応できる施設として機能している好印象を受けた。現在の施設は既存の装置で満たされてやや手狭な印象を受けるが，今後，古い装置は新しい高性能なものに置き換えることでここ当分はレベルの高い研究を維持できるであろう。将来的には分子研として適正な規模を保ちながら，光源の進歩などに対応して今後も世界のトップレベルの水準を維持して分子科学の発展に寄与する施設であることを期待したい。

② 個別評価

加藤グループ

マンパワーや資金の限られた条件下で，特徴のある高水準の装置を開発するための戦略も明確であり，分子科学として意味のある世界レベルの研究を可能にした実績を高く評価する。加速器によるコヒーレントなトポロジカル光の発生とその応用など大変興味深い研究展開も予定されている。装置の開発・運営とグループとしての研究との両立をユニークなマネージにより実現している。

田中グループ

高輝度，高エネルギー分解能にビームラインを改良し，スピン分解，角度分解光電子分光装置を開発整備するとと

もに，12 K の測定温度を 4 ～ 5 K に下げ，高いエネルギー分解能の測定を可能にしている。たとえばスピン分解で従来の一万分の一の分解能を達成し，スピントロニクスへの展開も視野に入れており今後の活躍が期待される。

繁政グループ

小グループであるが, 励起の非局在化や解離に関して UVSOR の特徴を生かしたユニークでレベルの高い研究を行っている。電子多重同時計測法による多電子放出過程, 短波長レーザーによる非線形光学過程, 二次元電子分光法と電子・イオン同時計測法による内殻励起分子の脱励起過程を研究する一方，渦光を用いた原子分子の分光研究もねらうなど今後が期待される。

(3) 分子制御レーザー開発研究センター

① 全体的な評価

このセンターは 2007 年の分子研再編の際にミッションが見直され，新しいレーザー光源の開発，レーザーを中心とした光科学研究方法論の開拓とレーザー分子科学の推進，UVSOR と連携したコヒーレント光源の開発を主なミッションとして設定された。そのいずれのミッションにおいても高く評価される成果をあげてきている。これらのミッションは次に構想されているメゾスコピック計測研究センターの構築において中心的な役割を果たすことが期待される。

②個別評価

平等グループ

超小型で強力なパルス・マイクロチップレーザーを開発するとともに，社会的にもインパクトのある応用の可能性を示すなど，マイクロ固体フォトニクスの基礎・応用において文句のない大活躍をしている。たとえば，核融合に向けたレーザー点火に加え，レーザーエンジン点火，THz 波発生と分光光源，粒子加速，単一微粒子の履歴解析，質量イメージング，ウェアラブルレーザーなどへの展開の先鞭をつけている。光拠点，ImPACT，NEDO，JST 先端計測などの研究資金を獲得するとともに，理研，阪大，生理研，KEK，コンポン研，核融合研などと共同研究を推進している。

藤グループ

赤外超短光パルスの発生，評価，光電場振動の直接計測技術の開発，チャープパルスとの相性がよい減衰全反射赤外分光装置などで顕著な業績をあげている。また，分子研内の研究グループとの共同研究にも積極的で評価できる。

(4) 物質分子科学研究領域

① 全体的な評価

創立以来，広い物質分子科学の領域の中で，分子研は分子性固体の電導性に重点をおいた分子物性研究を中心テーマとして研究してきた。しかし， 2000 年頃から次第に新規な研究分野の開拓に挑み，現在もまだその過程にあると考えられる。現在この領域の専任の PI は 5 名で少ないが，協奏分子システム研究センター所属の PI の何人かは実質的には物質分子科学の研究に携わっており，物質分子科学研究の新しい芽が育っている印象を受けた。

この分野のミッションは，a) 新規分子性材料の高機能化と b) 革新的分子物性計測法の開発，とされている。a) に関しては，新規な分子・集合体の創成において幾つかの注目すべき進展があったと評価される。b) に関しては，全く新規と言える測定法の開発と言えないにしても，測定法の顕著な改良と新しい物質系への応用に関して注目すべき成

果が得られている。しかし，この分野の研究グループは，江グループ以外はグループの規模が小さく，このために研究を大きく発展させるのが難しい状況が続いており，この点での改善が望まれる。

② 個別評価

山本，小林グループは協奏分子システム研究センター所属であるが，ここに入れる。また，平本グループは都合により評価できなかったので記載していない。

山本グループ

有機モット FET は，先端研究課題に属し，特に光照射によるダイポールの発生に誘起される光誘起超伝導は，有機・無機を問わず世界初の発生機構として注目される。今後，１光子の照射により多数分子が広領域でダイポールを発生するドミノ効果機構を用いた光誘起超伝導の開発，バンド充填制御が可能ならば超伝導転移温度を最適の状態密度に整合させることが課題である。κ-$(ET)_2Cu[N(CN)_2]Br$ 薄膜 FET の電荷注入による超伝導発現は，有機物として最初の例であり，重要な仕事である。光誘起超伝導と同様に，状態密度の最適化による T_c 制御が望まれる。光誘起超伝導・FET 超伝導測定において，試料はモット絶縁体－超伝導体を用いており，超伝導から外れたモット絶縁体を用いて電荷注入超伝導を誘起し，かつ T_c 制御をするとインパクトはより大きいであろう。

小林グループ（若手独立フェロー）

ヒドリド移動と電気化学デバイスは，将来性のある課題である。ヒドリド移動は生体内での酵素酸化還元系（NADH ↔ NAD）に関係し，ヒドロゲナーゼによる H_2 分解にも関係するのではとの意見もある。バルク固体中におけるヒドリド移動機構を詳細に調べること自体も，まだ十分になされていない。H^- は soft base であり，周囲の元素種に依存してイオンサイズが大きく変化するので，どのような母体に入れるかにより，斬新な機能や提唱されている高エネルギー密度の電気デバイスの開発が期待できるが，応用を先行するのではなく基礎技術を詰めることが大事である。a) 汎用合成法の開発，b) 良質単結晶作成法の開発，c) 水素種（H^+，$H^\bullet$，H^-）の確認と移動速度・経路・機構の測定・解析が重要であろう。ヒドリド移動に関連する，よりスケールの大きいテーマの検討を望みたい。

横山グループ

紫外磁気円二色性電子顕微鏡を高感度で測定できる条件を見出して，磁性薄膜の磁気構造の解明に利用するなど，紫外およびＸ線磁気円二色性顕微分光の分野で，ユニークで先導的な成果をあげてきたことは評価できる。しかし，研究グループが小さいためか，研究の広がりがこれまで限られてきたことは否めない。最近，このグループは燃料電池などの実材料をその動作下で評価・解析する手法として雰囲気制御硬Ｘ線光電子分光装置を開発した。まだ，時間分解や，空間分解の観察で改善の余地がある印象を受け，現時点ではこの方法の有効性やインパクトに関して判断しかねるが，将来の発展に期待したい。

中村グループ

外部研究者との連携によって，以下のような新しい研究の芽が見られた。a) 自己ドープ型水素結合有機導体，b) COF の光誘起電荷移動，c) 遷移金属配位錯体（Ni トリアリールアミン，Ru 二核錯体）の電子状態，d) ビラジカルのスピン多重項スイッチ。これらは, 興味深い研究であるが, 共同研究における中村グループの学術的な貢献･個性をしっかり打ち出す必要がある。

江グループ

大きな将来性をうかがわせる研究であり，COF 研究の創始と展開は，学術における大きな潮流を開拓しているものと評価される。制御項目として，a) 2 次元網サイズ（縦・横），b) 平坦性，c) ポアサイズ，d) ポアパターン，e) 挿入分子種，f) 積層における厚さ，などを一つ一つ解決しつつ，g) 機能（包接機能，電子機能）の開拓を展開している。物質・機能開発研究としてインパクトの大きい研究内容である。本研究を世界に広げる工夫，たとえば，グループ内に多国籍研究者を増やすなど，が今後必要であろう。MOF の研究者も，MOF は共有結合のみから成ると主張しているので，MOF では不可能な機能を COF で創成することが，インパクトのある課題となる。

西村グループ

このグループは膜タンパク質のような生体分子系の研究に適した固体高分解能核磁気共鳴法の開発を目指して，独自の測定法，装置および解析法の開発を試みてきた。この面においては着実な成果を積み重ねてきたと評価されるが，まだこの分野で大きなインパクトを与えるような成果を得るところまでは達していない。このグループも小グループであることによる問題を抱えている。

(5) 協奏分子システム研究センター

① 全体的な評価

2013 年に発足したばかりであるが，本センターは秋山教授のリーダーシップのもと，分子の「個」と「分子集合」，そしてその極限にある「生命体」を結ぶ斬新な機能をもつ分子システムの創成をミッションとして活発な活動を開始した。分子の挙動・性質が高次構造体を形成し分子集団を形成した時に発現される機能にどう結びつくのか，分子システムの構成要素の理解から多重の階層を超えてどう機能に繋がるかを解明するのは時宜を得た研究テーマである。採用された研究者はいずれも極めて優秀で，分子研の新しい息吹を感じさせ期待は大きい。しかし，次のような懸念も指摘された。

現在のメンバーの研究分野は，生体分子，光伝導体，グラフェンなどと多岐にわたっており，これをどのようにまとめてセンターとしての共通のゴールを設定して世界にインパクトのある研究を出せるかが問われる。センターの研究者自身の発想で，共通のゴールに向けた緊密な共同研究のプロジェクトを立案し，概算要求ばかりでなく外部資金にも応募して推進する体制の確立が望まれる。この分野の研究者は併任の教員が多く，この人員でこのミッションの遂行ができるのか不安であり，もっと専任の人材を集める必要がある。

「協奏」の視点は面白いが，成果をその視点のみで見ると，機能性の幅を狭める恐れがある。たとえば，スイッチ機能，局在と非局在（モット絶縁体 vs 金属・超伝導）は協奏と競争の混合機能である。

しかし，次の意見に代表されるように，このセンターに対する期待は大きい。「このセンターのミッションは，多種多様な分子反応がオーケストラのように調和して卓越した高次の構造形成，機能発現につながるかを解明することを目指している点で生命機能の研究にとって必須とも言える研究課題である。オーケストラには楽譜があり指揮者が個々の奏者をコントロールするが，生命システムにはそれらがない，すなわち，自発的，自律的に調和のとれた組織ができ機能する。これが，問題を極めて難しくしている。分野を問わず，この困難な問題にアプローチする確立した研究方法は存在しない。その意味で，本センターは極めてチャレンジングな，しかし，極めて重要な課題に挑戦しようとしており，将来がとても楽しみである。」

このセンターの活動をさらに発展させるには，今後分子研全体との人事交流を深め，新しい人事で協奏分子システ

ムの研究にふさわしい人材を補強して陣容を整える必要があろう。グループ内の異なる分野の研究者間のコミュニケーションを良くするために，オフィスの間の壁を除いて広い共通スペースを作るなどの新しい試みも行われており，その成果が期待される。

② 個別評価

山本，小林グループについては物質分子科学分野の評価の項に記載

秋山グループ

このグループは蛋白質時計の研究でこれまでに大きな成果を挙げている。本グループが研究している生物時計の研究は，時間と階層のつながりを含む協奏的システムの研究として，極めて適した課題である。計測など基盤技術の開発も充実しており，また，他グループとの連携も積極的に行っている。時を刻むという生物の根源的な視点から生物システムの研究にアプローチし，本ミッションの成功例となることを期待する。

面白い独創的テーマで，優れた計測・解析成果と評価できる。計測・解析の次に来る制御を可能（例えば 24 時間周期 → 1 時間周期）にするには，時間周期とどのような分子パラメータ（分子サイズ・分子種・元素・分子形状・電子状態など）・集合体パラメータ（分子積層様式・集合体電子状態など）・環境パラメータ（温度・圧・濃度・pH など）・分子間相互作用（幾何的，電子的など）が支配的に協奏・競争しているのかを明らかにする必要があり，興味深い展開が期待できる。この内容を膨らませて，よりスケールの大きいテーマとすることを望む。

古賀グループ

蛋白質をゼロからスタートして，独自の仮説と計算でタンパク質の構造と機能を自在に設計することを目指し，かなりのレベルまで成功している。夢ではないと思わせる迫力がある。タンパク質の設計が自在にできれば，分子システムも自在に操作できる可能性が出てきて，協奏的分子システムの研究を大きく進展させると期待される。

熱のこもった取り組みで何か新しい結果が出てくる予感をもった。ゼロからスタートしてタンパク質の構造をデザインしており，タンパク質機能のデザインの可能性に期待を抱かせる研究である。

鈴木グループ

曲面グラフェン分子の開発は，重要な課題であるが，世界的に研究者人口の少ない分野である。また，合成の困難さから大きな研究体制（実働部隊）での勝負が必要であろうが，現時点での鈴木 G は大きいとは言えず，結果として少ない論文業績にとどまらざるを得ない。

(6) 生命・錯体分子科学研究領域

① 全体的な評価

本研究領域は，（旧）錯体化学実験施設と岡崎統合バイオサイエンスセンターを母体として 2007 年に発足したもので，錯体分子科学と生命分子科学の分野から構成されているが，その立ち位置がやや不明確な印象を受ける。現在のミッションは，「生物が示す多様な機能の発現と制御を分子レベルで理解，解明し，また一歩進んで生命化学現象と通底する化学反応の設計開発を推進する。」とあり，そのために金属錯体の研究が重要であるとの認識に立っていると思われる。したがって生命化学を軸とした統一的な学際的な融合があっても良いのではなかろうか。本領域は主に

山手地区に配置されており，生理研や基生研との交流も可能であり，さらなる融合と交流を期待したい。

錯体分子科学分野の問題点の一つは，過去 10 年程の間に新任の教授，助教授が短期間で他大学へ転出するケースが多く，分子研で研究を大きく展開できていないケースが多いことである。これは大学と比較した場合の大学院生等のマンパワー不足が主な原因と考えられるが，今後の人事においては分子研を拠点として研究を大きく発展させる意欲と能力のある人物を見極めて採用することが必要であろう。また，分子研としては，大学にない研究面での魅力を錯体分子科学分野の研究者に示すことが望まれる。

現在，本研究領域の錯体分子科学分野には，錯体触媒研究部門と錯体物性研究部門があり，両者とも活発に研究が遂行されて優れた成果が出ている。これらの研究は上述のミッションには合致した研究でもある。しかし，従来の金属錯体化学の立場から見れば，やや本流を離れた領域においての研究と思われる。今日の化学研究における錯体化学の重要性を考えると，錯体化学分野での本流の研究に関与する研究における優れた研究者も分子研に存在することが，分子研および錯体化学分野の双方にとって望ましいことであろう。

② 個別評価

魚住グループ

魚住グループの研究の主軸として 20 年近く遂行してきた水中での有機分子変換反応，中でも両親媒性高分子担体を反応場とした遷移金属錯体触媒や遷移金属ナノ粒子触媒による有機分子変換反応については今でも非常に注目されている。錯体触媒の精緻な分子設計, 触媒をマイクロ流路反応装置内に膜状に発生させる技術, 分子の自己集積によって疎水性反応場を自発的に発生させる技術の創出等で，有機分子変換反応システムの構築により是非とも 21 世紀の有機化学反応研究にパラダイムシフトを分子科学研究所から創発してもらいたい。このグループの研究はグリーンケミストリーの観点から世界中が期待する成果を創出しており，多くの受賞へと結びつく大きな研究成果に結実している。また，同じく 20 年以上にわたる不斉触媒の開発研究および触媒の超活性を目指す触媒開発研究についても成果を挙げており，分子科学研究所における錯体触媒化学をさらに先導する研究へと展開してもらいたい。

正岡グループ

人工光合成を主たる研究テーマとして，水からの高活性な酸素発生触媒について金属錯体を用いて挑戦的に研究を遂行している。単核ルテニウム錯体を用いた研究では，これまで酸素発生触媒作用は 2 つ以上の金属イオンが必要とされてきたが, 単核錯体であっても進行することを示しており, 今後の研究展開に大きな影響を与える。またその結果, 酸素発生触媒機能の発現に，多電子酸化還元能，フレキシブルな構造，隣接する配位不飽和金属イオンの存在の 3 要素が重要との結果に至っており，今後の研究展開に大きな影響を与えるであろう。五核鉄錯体を用いた研究では，水の四電子酸化に対して極めて高い活性を示すことを見出しており，大きな期待が持たれているが，酸素発生過電圧を下げることが課題である。時流に振り回されることなく，しっかりと地に足のついた研究を遂行してもらいたい。

椴山グループ

水素結合やハロゲン結合等の非共有性相互作用基を活用した不斉分子触媒や不斉合成反応の研究を遂行し，キラルな有機化合物の効率的合成を狙いとしており，生物体内で行われている反応解明にも繋がる興味深い研究である。そ

して光学活性置換型ホモアリルアミンの 1,3- アルキル移動反応は不斉転写を伴わないとされてきたが，この相互作用を利用することで極めて高い不斉転写率で 1,3- 移動反応が進行することを証明する等，興味深い結果を発表してきた。また，ハロゲン結合を利用してハロゲン結合供与体が触媒として機能することを初めて見出してきた。これらは水素結合やハロゲン結合が適度に強度や相互作用方向をコントロールし不斉反応を誘導していることを示しており，不斉分子触媒や不斉合成反応の開発において極めて重要な役割を果たしていることを示しており，大きな意義がある。これらの結果は生体高分子であるタンパク質の折りたたみ構造や酵素反応における特異な反応性が人工キラル分子により簡易に達成できることをも示しており，生体反応の解釈にも貢献できるかもしれない。金属の代わりに意図的に相互作用の弱い非共有性相互作用基等の水素結合を用いていると考えられるが，できれば金属錯体触媒の性質をも取り込んだ，幅広い錯体触媒研究部門の発展に臨んでもらいたい。

古谷グループ

赤外差スペクトル法による分子の振動エネルギー変位を最大限に利用した研究であり，物理化学系研究者の才能を十二分に活かした極めて高度な研究手法であると考えられる。その手法を用いてイオン輸送タンパク質の機能発現における分子機構や膜タンパク質の構造－活性相関，そしてカリウムイオンチャネルタンパク質のイオン選択機構に関する研究を遂行し，それらの非常に重要な分子機構の解明に繋げている。また，元岡崎統合バイオサイエンスセンターの桑島グループとの共同研究を遂行する等，その技術，能力を最大限に活かす努力をしている。手法ありきも重要であるが，生物側から見た時，必ずしも赤外分光法だけがベターとは思われないので，できれば，違う目から見たときの現象の重要性も知るために，他の手法も取り入れ総合的にアプローチするような研究姿勢も重要ではないだろうか。まだまだ若いので，世の中の考え方そのものを変えるような大きなコンセプトを提案できる研究へと繋げてもらいたい。

(7) 岡崎統合バイオサイエンスセンター

① 全体的な評価

現在，生命科学は飛躍的に発展している。これは，遺伝子操作技術をベースにした分子生物学の進歩によるところが大きい。しかし，これらの研究は主に生命を構成する要素の解析が中心で，真に生命機能を理解するためには，これら要素が作るシステムを分子レベルで理解することが必須である。このような状況のなか，岡崎統合バイオサイエンスセンターが，果敢にも異分野を融合して分子から人間に至る階層をつなぎ，複雑でダイナミックな生命機能の理解に挑戦していることは頼もしい限りである。戦略的にも，３研究所の得意分野を生かしてバイオセンシング，時空間設計，動的秩序形成の３研究領域に焦点を当てて具体的に現実的に研究を進めようとしているところは高く評価できる。

分子研，生理研，基生研の中でも生命に関わり互いに共通する学際領域の諸問題に対し諸方面からアプローチし，分子レベルの新しいバイオサイエンスを切り開くことをミッションとして設立されており，大きな期待が寄せられている。事実，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，いずれも非常に高いレベルの研究が遂行され，分子と生命を繋ぐコンセプトを創出するべく励んでおり，３研究所のバイオ研究分野の統合を意識した素晴らしい研究成果を出していると思われる。

② 全体的な提言

分子に関して高い技術や多くの知見をもつ分子研が生命科学に挑戦することは，日本の生命科学を推進するにあた

り極めて強力なパワーとなる。本センターでの分子研の役割は様々な生体分子反応を統合し生命を分子システムとして理解することなので，そのために分子科学の研究をどのように生命システムに展開させるのか，より具体的に課題を絞って実効的戦略を立てられることを期待する。また，ダイナミックシステムの理解には，数理や情報科学の視点が必要で，新たにそれらの分野を取り込むとより強力になると思われる。“ 異分野融合 ”, “ 階層を超える ” は，言葉にするのは簡単であるが，実行するのは非常に難しい。特に個人の自由な発想を重視する大学では難しい。ある程度ミッションをかけ，個々の研究室レベルを超える規模の研究が必要であり，個々の研究者の本気で取り組む覚悟とセンター長の強いリーダーシップを期待する。

コンセプトの創出とその仕掛け：分子と生命との間のギャップが大き過ぎ，どう繋ぐかに対するコンセプトが出せるかには当然のことながらまだ道遠しではあるが各研究者にそれに対する努力が感じられる。研究者らの意欲をさらに引き上げるためにも何らかのブレークスルーを提案できる仕掛けを考えてもいいのではないか。

③　個別評価

加藤グループ

生命科学の今後の最大の課題と言ってもよい，多くの部品が自律的に集合し，調和して働く仕組みの解明に，所内外で新学術領域やオリオンプロジェクトを組織し，大規模に研究を推進，展開している。生命分子科学と超分子科学を結ぶ分子科学の視点で生命科学に新風を吹き込むと期待される。グループの研究としては，シャペロニンや糖鎖の構造学的研究が高く評価できる。次の課題として，細胞の理解を念頭に，如何に複数の異なる分子システムが自律的に調和をとって働くのかというより高次の秩序構造と機能も視野に入れてほしい。

青野グループ

バイオセンシングの研究として，ヘムを活性中心とするセンサー蛋白質の構造的研究で成果を挙げている。特に，乳酸菌の細胞内ヘム濃度調節に関与する蛋白質群の発現制御因子 HrtR タンパク質の構造的研究は興味深い。今後の研究課題として，生理研との連携も考え，できる限り哺乳動物に近い細胞におけるバイオセンシングの研究も視野に入れてほしい。

飯野グループ

回転分子モーターを中心に，能動輸送分子機械の計測，構造解析，分子シミュレーション，設計／人工合成，操作を統合的に行い，分子機械設計学に挑戦している。F_1ATP 合成酵素の研究で成果を挙げており，十分実現可能な課題設定で研究を進めている。生物分子機械を自在に設計し操作することは生命科学の夢とも言うべきもので，今後の進展が大いに期待される。

栗原グループ（特任准教授）

生命をシステムとして考える研究において，多種多数の要素を含む複雑反応を自在に操作できる系を構築することは非常に有効である。人工細胞はその最も期待されるモデルである。本グループが挑戦している交差触媒系を内包するモデル人工細胞，ペプチド合成システムを内包するモデル人工細胞は，現段階ではまだ単純なダイナミックスの研究に留まる未熟なモデルではあるが, それなりに成果を挙げており, 近い将来に期待する様々な複雑な反応ダイナミックスを研究する強力な研究モデルシステムに発展すると大いに期待される。

(8) 理論・計算分子科学研究領域および計算科学研究センター

① 全体的な評価

研究領域として，５人の教授，准教授（他に特任准教授の若手独立フェロー）が，それぞれの専門分野で，優秀な成果を上げていると言える。特に，柳井グループは国際量子分子科学アカデミー賞，日本化学会進歩賞等を受賞し，その独創的な研究が国際的にも極めて高く評価されている。

分子研の常ではあるけれども，博士研究員，大学院生などを含めて，研究者の数が５研究室で 20 名位程度であり，研究者数が不足している。新しいアイディアをさらに発展させるためには，研究者数を増やす必要がある。外部資金による博士研究員の雇用, 学振外国人特別研究員等の推薦等, いろいろなチャネルを通じてのさらなる努力が望まれる。

2015 年６月現在，永瀬教授，平田教授定年退職後２年を経過しているにもかかわらず，その後任が任命されていない事は極めて残念である。それぞれ事情は有るかもしれないが，元々研究グループの少ない分子研では，教授や准教授の補充は研究活動を推進するため最優先事項である。今後も，欠員人事は出来るだけ早く任命してほしい。

今後，研究領域の更なる発展のためには，教授，准教授いずれも，従来もっとも得意としていた研究テーマからはみ出した，新しい展開を期待したい。教授，准教授はいずれも比較的若いので，今後今までと全く異なる研究テーマで大発展する可能性がある。分子研および日本には優秀な実験研究者が沢山いるので，彼らとの共同研究を積極的に推進し，新しい分子科学を構築してほしい。

計算科学研究センターも，ハードウェアーの一層の充実等によって，利用が極めて活発に行われており，分子科学の理論・計算分子科学に，大変大きな寄与をしている。

また，次世代スーパーコンピューター戦略，ポスト「京」重点課題，元素戦略プロジェクトなど，日本の理論・計算分子科学の国内の中核としての役割も，今後もますます重要になってくると思われる。一層積極的な参画を期待したい。

② 個別評価

協奏分子システム研究センター所属の理論系の若手独立フェロー２名（石﨑，鹿野）のグループは都合により評価できなかったので記載していない。

斉藤グループ

多体分子系の不均一動力学の理論研究を中心に，水の動的性質，たんぱく質の構造変化などの解明に，非常にレベルの高い成果をあげている。大変実力があり，今後の分子研を背負っていくグループであるが，今の所やや狭い範囲にとどまっている感じがする。今後，異なる階層に属する構造揺らぎ，構造変化，化学反応を統一的に理解したいというゴールに向け，もっと大胆に進んでいって欲しい。このためには，もう少し大きな研究グループが必要で，より積極的に研究者を確保する必要があると思われる。さらに，研究領域の国内および世界的リーダーとしての役割も，どんどん果たして欲しい。

江原グループ

従来から活発に研究を進めてきた高精度励起状態理論，とくに SAC-CI 法とその応用，および，この数年新しく手をつけた金属クラスターや固体表面における触媒反応の研究を中心に，複雑系の幅広い量子化学的研究に顕著な成果をあげてきている。後者の不均一系触媒反応の分野は，いまだ方法論の開発も十分でなく，理論化学が活躍できる多

くの問題をかかえている。今後，個々の問題の解決に限らず，この分野に大きなインパクトを与えるような，理論的方法論や問題意識の展開を望みたい。東南アジアを含む海外および国内との共同研究も多く，分子研理論の顔としての役割も果たし始めていることにも，大いに期待している。

信定グループ

電子状態理論，電子動力学理論，分子動力学理論などのいろいろな方法論を組み合わせて，光，電子，原子核の相互作用の動的挙動の理論的方法の開発を行うとともに，これらの方法を応用して，近接場光励起ダイナミックス，担体クラスター触媒，MOF による水素貯蔵などに素晴らしい研究成果を上げ，機能性物質の理論解明と設計に向けて多彩な研究を展開させている。外部資金プロジェクトへの参加も積極的に行っている。

柳井グループ

高精度電子状態計算法，とくに，密度行列再規格化法の展開，この為のプログラムの開発に，非常にオリジナリティの高い研究成果をあげている。さらに，この新しい方法を遷移金属生体触媒系，遷移金属水分解触媒，大きなパイ共役系など，電子相関が強く従来法では取り扱いが困難であった幾つかの化学的に極めて重要な分子系にタイムリーに適用し，その成果が注目を浴びている。今後，電子相関理論のさらなる発展と理論的にさらに困難な系への適用を期待する。

奥村グループ

分子動力学シミュレーションの手法の開発と生体系への応用を中心に優れた研究成果をあげている。とくに，タンパクの動的挙動に関し，レプリカ交換法を母体に，独自の新しい方法の開発に積極的に取り組んでいることが注目される。アミロイド繊維の成長など，今後医療への応用を目指すということであり，その目的のためには，これらの方法とコースグレイン法あるいはまったく別の方法との組み合わせなどを駆使して，いかに実際の問題に適用できるかが鍵になると思われ，新しい発展を期待している。

(9) その他の研究施設と技術職員等の支援の在り方

① 機器センター

機器センターの業務は，a) 共通機器の維持，管理，運用，b) 寒剤の供給，c) 大学連携設備ネットワーク関連，d) ナノテクノロジープラットフォーム関連業務，である。

共通機器は多くの所内外の利用が続いており，寒剤の供給も円滑で，利用者の満足度は高い。しかし，一方で装置の老朽化も憂慮されており，更新の必要性の高いもの，利用頻度の高いものから継続的，計画的に更新を進める必要があろう。

機器センターに関わる教員は，現在は併任のセンター長のみであるが，センター全体の状況を見渡して将来計画を立てられる教員の存在が望ましい。

② 装置開発室

装置開発室に求められる業務は，a) 最先端の装置開発，b) 日常的に必要な部品の製作，c) その他，に大別される。

a) 分子研に期待される独創的な研究では，市販品では得られない性質・品質の最先端の装置の開発が必要とされる。

従来この面では日本の大学は欧米の大学に比べて著しく劣っていた。創立以来，分子研は大学では見られない優れた陣容の技術スタッフと設備で，所内外の要望によく対応してきた。今後もこれを維持し，業務としての継続性を確保してゆくことは重要であるが，時代の変化に対応して，解析・シミュレーション技術の高度化，微細加工の進化，3Dプリンターの活用，各種物性評価手段の習得などの新規技能を獲得してゆくことが求められる。

b) 日常的に必要な部品の製作を，外注では難しい迅速性・小回りの利くサービスで行って所員の要望で応えることである。

c) その他，講習，新技術の調査，習得，アウトリーチなどの活動

a)，b) に関してはほぼ良好な活動状況にあると判断されるが，c) に関しては，他研究機関との技術交流が装置開発室の発展には重要である。また，職員の年齢構成がやや高年齢に偏っており，若手の人材育成が急務であると同時に，高年齢の職員の何らかの昇進方法や他機関への転出の仕組みがあると良いと思われる。

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 7–10, 2015 Visit to the Institute for Molecular Science, Okazaki

This visit focused on overviews of the four departments and the Research Center of Integrative Molecular Systems (CIMoS). The symposium on October 8 and some individual meetings on October 9, along with continuing discussions with Director General Ohmine on October 10, gave me the opportunity to go into a few areas in more detail.

In looking back over the period of Director Ohmine's leadership there have been a series of very high-quality improvements to IMS, which should ensure the continued success of the Institute going into the future. I believe that Director Ohmine can look back at the new faculty, the new types of position, and the new projects with considerable satisfaction.

Overall the impression was of very high quality work, in some areas clearly defining the state-of-the-art globally despite the by-now well understood (after many years of visits to IMS!) IMS problem of severely limited group size, which is limiting achievement of the full potential of the very talented faculty.

I will first discuss CIMoS. CIMoS constitutes a significant effort to enhance collaboration among synergistic activities at IMS. IMS should be very pleased that a scientist of Professor Akiyama's stature is willing to lead CIMoS at a time when his own research is going extremely well in an exciting area. I find the broad goal of CIMoS—to understand the logical structure of information flow and control in multiscale (both temporal and spatial) systems to be very exciting. High-profile papers are already appearing from this project. The new types of positions and the young researchers can give an energy and vibrancy to this program and, I very much hope, produce an outcome that is more than the sum of the individual contributions. I applaud the various strategies being tried to increase interactions. The success of these approaches is very important: In my view IMS is not (or should not be) just like a university department. As an independent institute it has the opportunity to focus a greater concentration of effort on particularly significant areas of research in a similar manner to the distinction between US National Laboratories and major research universities. Of course I don't mean that only large multi-PI efforts should be done at IMS. In my opinion is will be an important task of the new Director-General to find the right balance between these two types of approaches.

I was also very pleased to see the outward-facing activities of CIMoS, especially in bringing in young scientists and the establishment of Schools and Intern programs.

Theory continues to be a strong component of the overall IMS effort, complemented by an effective Research Center of Computational Science (RCCS). Interactions between theorists and experimentalists seem effective in a number of areas. Two areas where I have some degree of expert knowledge are the areas covered by Professor Saito and Associate Professor Ishizaki. Both of these scientists are defining the state of the art in molecular simulation and in condensed phase quantum dynamics and IMS is lucky to have both of these superb theorists. In addition to providing an important facility, RCCS has also played an educational role with

workshops and schools on supercomputing, electronic structure, and molecular simulation.

Similarly to the RCCS, the IMS Instrument Center provides a resource for both in-house and external researchers. The Instrument Center seems to be doing a very effective job but its constrained budget is of concern if it is to stay at the state-of-the-art, and contribute fully to the national Nanotechnology Platform.

The Department of Materials Molecular Science is doing significant work in thin film photovoltaics, various types of magnetic resonance, 2D materials, and UV and X-Ray spectroscopy.

Life and Coordination-Complex Molecular Science was discussed with characteristic vigor by Professor Uozumi. The Okazaki Institute for Integrative Bioscience was established in 2000 to facilitate interdisciplinary research and has several leading and well-funded researchers. Both Professor Kato and Professor Uozumi described very exciting and far-reaching programs. Professor Uozumi's efforts to remake chemical synthesis for green chemistry are important and compelling. The Dynamical Ordering and Integrated Functions program has the impressive goal of creating artificial self-assembling systems exhibiting biological properties and if successful could lead to a redefinition of the scope and functionality of molecular science. The Orion project of Associate Professor Kurihara is both bold and imaginative, though as I noted last year has some large, well-financed competition internationally. The study of molecular machines by Professor Iino is superb. All the projects in this area and in the Functional Coordination Chemistry Division seemed internationally competitive and I have only mentioned above the ones where I have enough knowledge of the international fields to express a specific opinion.

Finally I turn to the Department of Photomolecular Science, which includes UVSOR. I was pleased to hear of the new projects and improvements at UVSOR. Professor Ohmori leads this department and is a well-known figure internationally. His work is well recognized with a number of recent awards, and involvement in the MEXT Photon Frontier Network. My impression is that the work in this department was somewhat more siloed than in other parts of IMS, and given the historical importance of photon science to IMS's impact internationally, I find this of potential concern. Professor Ohmori made a proposal to decrease the number of full professor groups and increase the size of the remaining groups. His comparison points are with Max Planck Institutes and Fritz Haber Institutes in Germany. However, the size of groups under the direction of leaders in these institutes is anomalously large compared to any other country. Perhaps as a starting point to address the group size issue at IMS this is a useful starting point, but I am not persuaded that narrowing the range of expertise at IMS would ultimately be in the best interests of IMS. Nonetheless I feel an open discussion of such a topic with both the new Director-General and the outgoing Director-General could lead to new ideas for addressing this general problem at IMS.

Of course, from my perspective, there is more to be done. As I have noted several times, tackling the issue of the impossibility of promotion from Associate Professor to Full Professor is the most important internal issue for IMS. The current system has the potential to limit the engagement of the associate professors in the general affairs of the Institute, and simply focus on building their individual portfolios so as to maximize their chances for a good university full professor position. I understand well the reason for the policy in the early days of IMS, but now, after regular visits to IMS over a 27-year period, I see the promotion policy as a self-

inflicted limitation on the ability of IMS to be more than the sum of its parts.

However viewing IMS overall, and especially the changes in the past six years, IMS is well placed to make truly path-breaking contributions to the challenges and opportunities for Molecular Science in the coming decade. It has been a pleasure and a privilege to get to know and appreciate the Institute in some detail.

Graham R. Fleming
Campus Chief Scientist
Chancellor's Principal for International Research Collaborations
Melvin Calvin Distinguished Professor of Chemistry
University of California, Berkeley

November 19, 2015

訳文

分子科学研究所訪問リポート（2015 年 10 月 7 日～ 10 日）

今回の訪問では主に，四つの研究領域と協奏分子システム研究センター（CIMoS）について評価を行った。10 月８日にシンポジウムを開催し，さらに 10 月９日に個々の研究者と面談することで詳しい説明を受けるとともに，10 月 10 日には大峯所長と懇談の機会をもった。

大峯所長の在任期間を振り返ってみると，分子研には，将来に向けてのさらなる成功を保証する非常に質の高い向上がみられた。大峯所長は，新たに採用した職員，新しいタイプのポジション，あらたな研究プロジェクト等，彼が関与した事柄について，大きな満足をもって振り返ることができると確信している。

分子研では非常に質の高い研究が行われているというのが，全体的な感想である。これまでによく分かっていたつもりではあるが（何年にもわたって分子研を訪問した後で），いくつかの研究分野は，世界の最先端を走っている。分子研の問題は，研究グループのサイズが非常に小さいことであり，このことは，非常に能力がある研究職員の潜在的能力をフルに発揮することを制限している。

まず最初に CIMoS について論評したい。CIMoS は，分子研内の相乗的な共同研究を活性化するために多大なる尽力を払っている。秋山教授が，彼自身の研究が非常に順調に進行している時期に，CIMoS を率いることを厭わずにいることを，分子研は大いに感謝しなくてはならない。多重階層（時間的および空間的に）における情報の伝搬と制御の論理的構造を理解するという，CIMoS が掲げている広範な目標は，非常に興味深いものである。非常に興味深い論文が，本プロジェクトからすでに生み出されている。新しいタイプのポジションや若手研究者が，本プログラムに活力と活気をもたらしており，個々の研究者の寄与を寄せ集めたもの以上の結果が生み出されることを大いに期待している。研究者間の交流を強化しようとする様々な戦略的取り組みは，大いに称賛されるものである。このような取り

組みが成功を収めていることは，非常に重要なことである。私が思うに，分子研は単に大学の学科のようなものではない（あるいは，そのようであってはいけない）。アメリカの国立研究所と有力な研究大学間での違いと同じように，独立した研究機関として，分子研が特定の重要な研究分野に注力することも可能である。もちろん，私は，複数の PI からなる大きな研究グループのみで分子研の研究を実施すべきであると言っているわけではない。私見を述べれば，このような二つの方向性の間で，正しいバランスを見つけることが，次期所長の重要な任務であろう。

CIMoS のアウトリーチ活動，特に，若手研究者や指導的立場にある研究者を出前授業やインターンプログラムに引き込んでいることには感心した。

計算科学研究センター（RCCS）によって効果的に補完されている，理論・計算分子科学研究領域は，分子研全体の活動の中でも強力な構成要素の一つである。理論研究者と実験研究者間での交流は，多くの研究分野で効果的になされているように思う。私が専門的な知識を有している二つの研究分野は，斉藤教授と石崎准教授が研究対象としている分野である。斉藤教授と石崎准教授は，分子シミュレーションおよび凝縮相における量子ダイナミクスの最先端を明らかにしつつある。彼らのようなすばらしい理論研究者がいることは，分子研にとって非常に幸運なことである。RCCS は，重要な研究施設としてだけではなく，ワークショップやスーパーコンピューター，電子構造，分子シミュレーションなどを対象としたスクールプログラムを実施することにより，教育的な役割も果たしている。

RCCS と同様，分子研機器センターも，所内および所外の研究者に研究リソースを提供している。機器センターは非常に効率的に業務を実施しているようであるが，限られた予算の中で最先端の状況を維持し，ナノテクノロジープラットフォーム事業に対して十分な貢献ができるのかどうか懸念がある。

物質分子科学研究領域では，薄膜光電池，各種磁気共鳴，２次元材料，紫外およびＸ線分光などで顕著な成果を挙げている。

生命・錯体分子科学研究領域については，元気あふれる魚住教授から説明を受けた。岡崎統合バイオサイエンスセンターは，学際領域の研究を促進するため，2000 年に設立され，指導的で十分な予算を獲得した研究者が在籍している。加藤教授と魚住教授から，非常に興味深く，遠大な研究プログラムについての説明があった。これまでの化学合成反応をグリーンケミストリーに再構築しようとしている魚住教授の努力は，非常に重要で説得力をもつものである。加藤教授が領域代表を務めている新学術領域研究「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」では，生物が有する特徴を示す人工的な自己集合システムを構築するという，すぐれた目標を掲げている。もしこの目標が達成されれば，分子科学の範囲や機能性についての再定義が必要となるであろう。昨年指摘したように，規模が大きく予算も潤沢な研究グループとの国際的な競合はあるものの，栗原特任准教授が実施しているオリオンプロジェクトは，果敢で構想力に富んでいる。飯野教授の分子機械に関する研究は，大変に素晴らしいものである。本研究分野ならびに錯体物性研究部門で実施されているすべての研究は，国際的にも競争力をもったものである。ここでは，私が意見を述べるための十分な知識をもっている研究分野に限定して言及した。

最後に，UVSOR を含めた光分子科学研究領域について述べる。UVSOR の新規プロジェクトと高度化は，喜ばしい

ことである。大森教授が本研究領域の主幹を務めており，彼は国際的にもよく知られている。最近多くの賞を受賞していることからも分かるように，彼の研究は広く知られており，文部科学省の光フロンティアネットワーク事業にも関与している。分子研の他の研究領域と比べ，本研究領域の研究が，やや自分たちの中で閉じこもりがちであるというのが私の印象である。光科学が，歴史的にみても，分子研の国際的重要性を高めたことを考えると，この点は懸念事項である。大森教授は，教授グループの数を減らすことで，残ったグループのサイズを大きくすることを提案した。彼が比較対象としたのは，ドイツのマックス・プランク研究所やフリッツ・ハーバー研究所である。しかしながら，これらの研究所では，研究リーダーが率いるグループのサイズは，他のどの国と比べても，非常に大きなものである。この点は，分子研における研究グループのサイズの問題を考える際の出発点であろう。私は，分子研がカバーする研究分野を狭くすることが，分子研にとって最大の利益をもたらすとは確信できない。とは言うものの，この点に関して新旧二人の所長がオープンな議論をすることで，分子研が抱えているこの問題に対応するための新しいアイデアが生まれるのではないかと思っている。

私の考えでは，他にも取り組まねばならないことは多々ある。何度か指摘しているように，准教授から教授への内部昇進が禁止されていることをどうするかは，分子研にとって最も重要な問題である。現在の制度は，准教授が研究所全般の活動に寄与することを制限し，彼らが一流大学の教授ポストを得るチャンスを最大化するために個々の研究成果を挙げることのみに集中することになっている。分子研が設立された初期の段階においては，この制度を取る確かな理由があったことは理解している。しかし，27 年間に渡り定期的に分子研を訪問してきた上で考えるに，現在，この制度は，分子研が単なる個々の足しあわせ以上のものとなるための足かせとなっているように思われる。

しかしながら，分子研全体，なかでも過去 6 年間の変化を見渡してみると，来るべき 10 年に向けて，分子研は，分子科学の挑戦と可能性に対して真に先駆的な取り組みをなしていると評価される。分子研のことを詳しく知り，評価することができたのは，私の喜びであり，光栄とするところである。

Graham R. Fleming
Campus Chief Scientist
Chancellor's Principal for International Research Collaborations
Melvin Calvin Distinguished Professor of Chemistry
University of California, Berkeley

2015 年 11 月 19 日

7-3　外国人運営顧問による点検評価

7-3-1　Ron Naaman 外国人運営顧問

2016 年 3 月 2 日～ 3 日の 2 日間にわたって，Ron Naaman 外国人運営顧問による外部評価を実施した。今年度は主に，物質分子科学研究領域，ならびに協奏分子システム研究センターに所属する研究グループを対象として評価を実施した。Ron Naaman 教授による評価レポートについては，分子研リポート 2016 に掲載予定である。

7-3-2　Peter J. Rossky 外国人運営顧問

2016 年 3 月 29 日～ 31 日の 3 日間にわたって，Peter J. Rossky 外国人運営顧問による外部評価を実施した。今年度は主に，理論・計算分子科学研究領域，ならびに協奏分子システム研究センターに所属する理論研究グループを対象として評価を実施した。Peter J. Rossky 教授による評価レポートについては，分子研リポート 2016 に掲載予定である。

7-4　国際諮問委員による点検評価

7-4-1　David Wales 国際諮問委員

原文

External Assessment of Theory Groups in the Institute for Molecular Science, Okazaki

David J. Wales, November 2015

This report for the Director General is based on three visits to IMS in November 2013, March/April 2014, and November 2015. A detailed diary of meetings and notes appears in the two earlier reports.

Overall, the standard of research in the theory groups at IMS remains very strong, and is clearly internationally competitive, leading the field in several areas. The key principle upon which the academic structure of IMS is based, namely that internal promotion is not available, has been maintained. In my opinion, this principle probably contributes to the strength of the Institute, and moreover, leads to a healthy population of key academic positions in leading Japanese universities from IMS. This flux should help to constantly refresh the state of theoretical molecular science in Japan and prevent stagnation. I recommend that that the Institute should continue this policy, so long as it is clearly understood whenever a new appointment is made.

It is very pleasing to note that significant progress has been made in addressing some of my previous recommendations. In particular, the issue of gender balance has received serious attention. The appointment of several female Assistant Professors represents an important achievement, which will pave the way for further progress in the future. I believe it is especially important for IMS to set an example here, since research faculty at IMS are leading candidates for Full Professorships at leading Japanese universities in the future. Providing the best female researchers with the support they need, and nurturing them, at IMS, will surely strengthen Japanese science. The Assistant Professors who have been recruited will largely be embedded within existing groups. In the future, it is important to extend this diversity to Associate and Full Professor positions.

The Full Professors whom I met during my visits were all clearly conducting research at an internationally competitive level.
Prof. Shinji Saito is working on projects united by the theme of spatio-temporal heterogeneous dynamics. He has made cutting-edge contributions to understanding the dynamics of liquid water, nonlinear spectroscopy, especially 2D infrared measurements, energy transfer, and recently, dynamical heterogeneity in supercooled liquids.
Prof. Katsuyuki Nobusada is studying photoinduced quantum dynamics in nanostructures. He writes his own codes to solve coupled Maxwell and Schrödinger equations in an iterated fashion, using a grid representation to avoid basis set dependence. The objective is to analyse photoinduced electron dynamics in nanoparticles, quantum dots, and absorbate-surface systems.
Prof. Takeshi Yanai is working on strongly correlated systems, with applications to conjugated π centres and analysis of π to π^* transitions, including molecules such as β carotene, as well as photosynthetic units. These results are compared with experiments from some of the leading groups in the field.
Prof. Masahiro Ehara is working on a wide variety of interesting projects. He exploits detailed treatments of electronic structure to calculate properties for comparison with experiment, and has achieved a number of impressive applications in spectroscopy, materials science, and catalysis.

Prof. Hisashi Okumura is concerned with thermodynamic sampling schemes for biomolecular applications. His group have developed a permutational replica exchange approach, which utilises Suwa-Todo sampling to provide feasible acceptance ratios. It would be interesting to see some benchmark calculations that compare the efficiency with alternative procedures.
Associate Professors *Yutaka Shikano* and *Akihito Ishizaki* both made enthusiastic presentations of their research, which involves interesting and ambitious projects that aim to address fundamental and practical issues in terms of molecular structure and measurement (Shikano) and light harvesting and coherence (Ishizaki).
Prof. Shuji Akiyama is a experimentalist interested in the slow dynamics of proteins such as KaiC, which forms part of the circadian clock in cyanobacteria. There are many important open questions in this field, and the approximate 24 hour periodicity involved has proved difficult for theory and simulation to treat. Nevertheless, significant progress has been made experimentally, using X-ray crystallography, solution scattering, and various other physicochemical methods.

Recommendations:
(1) Ensure that a mentoring scheme exists to support junior appointments. Ideally, every Assistant Professor should have someone to turn to for informal advice. This should probably be a Full Professor in a different field, someone distinct from colleagues who work in related areas, who can provide a different perspective. To make such arrangements as informal as possible, it helps to advertise a pool of Mentors, so that junior faculty can choose who to approach themselves. Undertaking a mentoring role can be encouraged by recognising that some time commitment is involved, and counting this contribution on a comparable scale to committee work.
(2) I think there is still a need to improve the social infrastructure somehow. The best solution would be a Faculty Club, perhaps with a coffee shop to attract people to mix informally.

I was assured that a strong plan for appointment of the next Director General in place. If the leadership and vision of the current Director can be maintained then the Institute should continue to progress, and maintain its position as the flagship for research in molecular science in Japan.

訳文

理論グループの外部評価

David J. Wales (University of Cambridge) 2015 年 11 月

これは，2013 年 11 月，2014 年 3 , 4 月および 2015 年 11 月の 3 度の分子研訪問に基づく報告である。

全体として分子研の理論グループの研究レベルは非常に高く，いくつもの研究領域で分野をリードしており国際的にも高い競争力をもっている。内部昇進禁止という分子研のアカデミック構造の基本原理も守られている。この原理が分子研の強さの一因であり，さらに，主要な大学の重要なポジションの堅実な母集団となっていると思われる。この人の流れが日本における理論分子科学の状態を常にリフレッシュすることに役立ち，停滞を防いでいる。新しい雇用の際に内部昇進禁止が十分に理解されている限り，分子研がこのポリシーを継続することを勧める。

以前の私の提言のいくつかの取り組みが進んでいることをとてもうれしく思う。とくに，男女数の均等はとても重

要な問題である。何名かの女性助教を採用したことは，将来のさらなる進展の道を開くこととなる大きな成果である。分子研の教員は日本の主要な大学の教授の主たる候補者であるため，分子研が女性教員雇用に関するこのような規範を示すことは分子研にとって極めて重要であろう。分子研で非常に優秀な女性研究者に対し必要なサポートを行い育成することにより，日本の化学は必ず強化していくことであろう。これまでに採用された助教は既存のグループに配属されているだろうが，将来は，女性採用が准教授および教授へと広がっていくことも大切と思う。

滞在中に面談した教授は，全員明らかに国際競争力の高い研究を進めている。

斉藤教授は，時空間不均一動力学として纏められる研究を行っている。水のダイナミクス，非線形分光とくに二次元赤外分光法, エネルギー移動, そして最近では, 過冷却液体の動的不均一性の理解に関する最先端の研究を行っている。

信定准教授は，ナノ構造体の光誘起量子ダイナミクスの研究を行っている。基底関数依存性を避けるため grid 表示を用いて，Maxwell 方程式と Schrödinger 方程式のカップルした方程式を解く独自のプログラムを開発している。ナノ粒子，量子ドット，吸着子－表面系の光誘起電子ダイナミクスの解析を目標としている。

柳井准教授は，光合成系とともに，β カロテンのような分子の π 共役系や π–π* 遷移の解析を通して，強相関系について調べている。それらの結果を，その分野の有力な実験グループの結果と比較している。

江原教授は，興味深い様々なプロジェクトに取り組んでいる。電子状態の詳細な取り扱いによる物性の計算を行い，実験と比較している。また，分光，物質科学，触媒におけるいくつものすぐれた応用研究に成功している。

奥村准教授は，生体分子に応用するためのサンプリング法の研究に携わっている。彼のグループでは，諏訪－藤堂によるサンプリングを用いた置換レプリカ交換法を開発している。他の方法と効率を比較したベンチマーク計算を示すと面白いと思う。

鹿野准教授と**石崎准教授**は分子構造と計測（鹿野）と光捕集系とコヒーレンス（石崎）に関する基礎的でかつ実際上重要な問題の解決を目指した興味深い野心的な研究について説明した。

秋山教授は, シアノバクテリアの概日時計を構成する KaiC のタンパク質の遅いダイナミクスに関する実験研究を行っている。この分野では，多くの重要な未解決問題があり，約 24 時間の周期を理論および計算的に取り扱うのは困難である。しかし，X 線結晶構造解析，溶液散乱やそのほかの物理化学的方法を用い実験的に非常に大きく進展させた。

提言

(1)　若手研究者をサポートするためのメンターの配置。理想的に，各助教に日常的にアドバイスをする人を付ける。これには，助教とは異なる見方のできるように，助教とは異なる分野の教授が良いであろう。各助教が適当な人と話をできるようにするために，メンター集団を大きくするのが良い。メンターには責任あり，委員会の仕事に匹敵することであることでメンターを引き受けてくれるように促すことができると思う。

(2)　何らかの形での所内の基盤整備が必要と思う。気軽に皆が交流できるコーヒーショップのあるファカルティクラブが最善の解決策であろう。

次期所長任命の計画が整っていることを確信している。現所長のもっていた指導力と展望が維持されれば，分子研は進歩し続け，日本における分子科学研究の最重要研究機関の地位を維持していくことであろう。

８．研究施設の現状と将来計画

共同利用設備を充実させ，大学等の共同利用研究者の研究支援を行うことが大学共同利用機関の主要な役目のひとつである。1975年の研究所発足当初から装置開発室と機器センターを設置し，1976年に化学試料室，1977年に極低温センターを設置した。さらに1979年には電子計算機センターに大型計算機を導入し，1983年から極端紫外光実験施設（UVSOR施設）で放射光源装置が運転を開始した。これらの施設では単に設備を設置するだけではなく，共同利用支援業務を滞りなく行うために技術職員を充実させた。また，高度な研究を進めるためには研究開発が不可欠であり，研究職員も配置した。

流動性の高い分子科学研究所の場合，着任後の研究立ち上げスピードの速さが重要である。また，各研究グループサイズが小さいことも補う必要がある。このような観点でも施設を充実させることが重要である。それによって，転出後もこれらの施設の共同利用によって研究のアクティビティを維持することが可能である。研究者が開発した優れた装置が転出後，共同利用設備として施設の管理となって，さらに広く共同利用されるケースもある。このように，研究所として見た場合，施設の充実は研究職員が流動していくシステムそのものを支援することになる。従って，施設の継続的な運営が重要であり，毎年，所全体に定員削減，人件費削減の要請があっても施設の技術職員については手を付けず技術の向上に努め，絶えず技術レベルの高い人材を確保するようにした。技術職員が研究所外に出かけその高い技術力で研究支援するなどの技術交流を可能とした。さらに長期戦略が必要な施設には教授を置くことで，現在は，施設所属の研究職員であっても流動性を保てる方向になっている。

現在，極端紫外光研究施設（UVSOR施設），計算科学研究センター（組織的には岡崎共通研究施設のひとつ）が大型設備を有し，計画的に高度化，更新を行うことで世界的にトップクラスの共同利用を実施している。国内外の超大型の放射光施設やスーパーコンピュータ拠点との連携を図りつつ，差別化・役割分担を行い，機動性を活かした特徴ある共同利用が進んでいる。分子制御レーザー開発研究センター（1997年設置），分子スケールナノサイエンスセンター（2002年設置），機器センター（2007年に旧機器センター，旧極低温センター，旧化学試料室の機能を再構築して設置）は本来の共同利用支援業務を行う一方で，それぞれ最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点事業，ナノテクノロジーネットワーク事業，大学連携研究設備ネットワーク事業をそれぞれ受託し，特定分野の重点的な強化，大学等の研究を支えるシステム作りを行ってきた。また，装置開発室は高度な特殊装置・コンポーネント開発にその高い技術力を活かすべく，研究所外からの依頼に対応することで共同利用施設としての役目を果たしている。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 14 本が稼働しており，１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，2016 年度中の利用開始を準備している。

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継続して進めている。

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７名（秋山教授，山本教授，古賀准教授，鈴木准教授，石﨑特任准教授，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），兼任 PI が１名（村橋教授）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。

2015 年度は国内外の大学や研究機関との共同研究成果が多数発表された。特筆すべき研究成果として，階層分子システム解析研究部門では，生物時計システムを題材とした実験（秋山グループ）と理論（斉藤グループ）の共同研究が科学雑誌「*Science*」に掲載された。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では，山本グループが光を用いた超伝導のスイッチング技術を「*Science*」誌に発表した。国内外のメディアでも多数紹介されるなど，その学術的な新規性・重要性が高く評価されている。

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だ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・フォトニクス」のプログラムにより，既に当時，組織横断的なつながりを持つ機会が増えていた。そこで，この新研究領域を創設することにより，放射光関連の研究グループとの間の壁も取り払い，本研究所における光分子科学研究をさらに活性化することを目指したのである。第二の点は機器センターの再設置であった。本研究所には以前，同センターが設置されていたが，その後，極低温センターと化学試料室と共に廃止され，レーザーセンターと分子物質開発研究センターが設置され，後者は更に分子スケールナノサイエンスセンターへと改組された。しかし，共通機器を一括して管理運営し，所内外の研究者の共同利用を促進する必要が改めて認識され機器センターが再度設置されることとなった。これに伴って，レーザーセンターが管理運営していた共通機器の大部分が機器センターに移管されることになった。

この措置により，レーザーセンターは従来の共同利用に関する業務を大幅に圧縮することができ，センターとしての活動の重点を開発研究に移すことが可能となった。そこで改組後のレーザーセンターでは，光分子科学研究領域の研究グループと密接な連携をとりながら，分子研におけるレーザー関連光分子科学の開発研究の中心として機能することを重要なミッションと考えることとなった。ただし，光分子科学研究領域の研究グループとレーザーセンターの役割の違いを認識しておく必要がある。光分子科学研究領域の各研究グループではそれぞれの興味のもとで光分子科学の研究分野を開拓し，先端的研究を展開するのに対して，レーザーセンターのミッションは，光分子科学の先端的研究とその将来的な発展に必要な，光源を含む装置，方法論の開発，及びそれらの技術の蓄積に重点がおかれるべきである。光分子科学研究領域とレーザーセンターのインタープレイにより生まれた技術や方法論を蓄積するだけではなく，開発された手法，装置や部品を所内外に提供・共同利用に供する点で，研究領域における各グループの研究活動との差が存在する。

ただし，技術や方法論の開発段階においては，各グループの研究活動とレーザーセンターの活動を明瞭に区別する

ことは，しばしば困難である。従って，レーザーセンターと研究グループの人的な相互乗り入れは不可欠であり，平成 19 年度の組織再編に際しては，光分子科学研究領域及び UVSOR に属する数名の教授・准教授がレーザーセンターに併任する形で運営することとなった。このような組織で，光分子科学の新分野を切り拓くための装置，方法論の開発と技術蓄積を行う開発研究施設という位置づけで，レーザーセンターを運営している。開発された装置や方法論の技術的蓄積も既に始まっており，今後，所内外の分子科学者との先端的な共同研究を遂行するためのリソースとして提供することが望まれる。

これまでの所内，特にレーザーセンター内と光分子科学研究領域内における議論，及び所外委員を含むセンター運営委員会等の席において，レーザーセンターの機能・ミッションに関しても議論を重ねてきた。そこでの意見として，高いポテンシャルを持つ部門間の有機的な繋がりを考え，高い視点から見た共有点や一致点（例えば光による時間・空間を分解する研究手法）を探ること，レーザーを使って新しい実験的方法論を作って行くことが必要ではないか，という議論があった。またそれに向けて，レーザーセンターを光分子科学に関わる研究者が幅広く議論を行う場として有効活用することが必要との意見もあった。前者はまさに数年前の組織再編時に掲げた理想に沿うものであり，それに向けてレーザーセンターを議論の場として有効活用して行く必要があると考えている。エクストリーム・フォトニクスの活動としての所内セミナーの開催時に，そのような機会を持つことを，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（光分子科学研究領域より併任），大島康裕教授（東工大より兼務）

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，及びその他の技術的課題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。研究所単位での予算要求が難しくなっている現状のある中で，所内措置としての組織再編を視野に入れる必要もあるかもしれない。

8-3-2　共同研究の状況

平成 27 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。特にコンポン研と（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，透明化を試み，次世代高強度レーザーとして期待の高い異方性材料である Yb:FAP レーザーセラミックスの開発の成功を経て，最近，世界で始めての実験に成功した。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 μm 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。前年度までは，2 μm を発振波長としたフェムト秒パルスレーザー発振器を製作した。今年度は，発振器出力を増幅することを試みた。増幅の方法は，Tm:$YAlO_3$ を増幅媒質とした再生増幅器であり，これまでに 10^6 ほどの増幅に成功しており，パルス幅も 500 fs 程度まで圧縮することができた。

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。また，文部科学省受託研究ナノテクノロジープラットフォーム（2012～2021年度）分子・物質合成の代表機関・実施機関の運営を担っている。機器センターには，センター長（併任）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，2015年度からはナノプラットフォーム室を統合し，実質的な運用事務もすべて機器センターが行っており，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。2015年度から，機器センター所有の設備のうち所外公開装置はすべてナノプラットフォームにて運用する体制となった。これにより，X線回折，熱分析装置，ナノ秒・ピコ秒レーザーなどが新たにナノプラットフォームを通した利用となった。また，理化学研究所より移管された2台のNMR装置（Bruker AVANCE80，AVANCE600）は2013年秋より本格的な供用が開始されており，安定に動作している。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，既に多くの利用がある。

2015年度においては，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年度に配置した技術支援員1名（NMR，熱分析等担当）に加え，博士研究員1名（高磁場NMR担当），技術支援員1名（TEM等担当）を配置した。博士研究員1名は分子機能研究部門の特任助教となったが，現在まで920MHz NMRを用いた共同研究を担当している。

所外委員を含む機器センター運営委員会では，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数年以上前に導入されたもので老朽化が進み，かなり高額の修理を頻繁に実施せざるを得ない状況になっている。全てを同時に更新することは予算的な制約からほぼ不可能であり，緊急性・使用頻度を考慮

して順次更新を進めるプランを策定して，分子研全体の設備マスタープランへ組み込む必要がある。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。今後，技術職員の定年退職等によって技術の継承が必要となることが予想されており，そのための対策も行っていく。

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。2015 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。

2016 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うるための汎用性があるばかりでなく，ユーザーサイドの PC クラスタでは不可能な大規模計算を実行できる性能を有する。

まず，超高速分子シミュレータは富士通製の 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。

ハードウェアに加え，利用者が分子科学の計算をすぐに始められるようにソフトウェアについても整備を行っている。量子化学分野においては，Gaussian 09，Gamess，Molpro，Molcas，Turbomole，分子動力学分野では，Amber，

NAMD, Gromacs がインストールされている。これらを使った計算は全体の約半数を占めている。さらに, 量子化学データベース研究会の活動を支援し，同会から提供された量子化学文献データベースをホームページから検索できるようにしている。これまでに合計 131,771 件のデータが収録されている。

共同利用に関しては，2015 年度は 227 研究グループにより，総数 832 名にもおよぶ利用者がこれらのシステムを日常的に利用している。近年，共同利用における利用者数が増加傾向にあり，このことは計算科学研究センターが分子科学分野や物性科学分野において極めて重要な役割を担っており，特色のある計算機資源とソフトウエアを提供していることを示している。

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「複雑な研究対象へと挑戦する計算分子科学」と２つのウィンタースクール「第５回量子化学ウインタースクール～基礎理論～」と「第９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）
運用管理クラスタ	
	型番：富士通 PRIMERGY RX200S7（16 ノード）
	OS：Linux
	総メモリ容量：512 GB（32 GB × 16 ノード）
高速ネットワーク装置	
	型番：Force10 S4810

8-7　岡崎統合バイオサイエンスセンター

岡崎統合バイオサイエンスセンターは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			○	○	○					
榊　米一郎	豊橋技科大学長	○	○~'84.3.31										
島村　　修	相模中央研最高顧問 理事	○	○										
田島弥太郎	遺伝研所長	○											
馬場　宏明	北大応電研所長	○	○	○	○								
福井　謙一	京大工教授, 京都工繊大学長, 基礎化学研究所長	○	○	○	○	○	○						
藤巻　正生	お茶女大家政教授, お茶女大学長	○	○	○									
向坊　　隆	東大名誉教授	○											
森　大吉郎	宇宙研所長	○	○ '83.11.25 死亡										
亀谷　哲治	星薬科大学長		○	○									
角戸　正夫	姫路工大学長		○	○									
本多　波雄	豊橋技科大学長		○ '84.4.16~	○	○	○							

氏　名	所　属	第1期 '81.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31	第9期 '97.6.1～ '99.5.31	第10期 '99.6.1～ '01.5.31	第11期 '01.6.1～ '03.5.31	第12期 '03.6.1～ '04.3.31
田中　郁三	東工大理教授,理学部長,学長，学位授与機構長		○	○	○	○	○						
中嶋　貞雄	東大物性研所長		○										
小田　稔	宇宙研所長		○'84.2.16~	○	○								
斎藤　喜彦	慶應大理工教授			○	○								
森田　正俊	豊田中研代表取締役			○	○	○							
伊東　椒	東北大理教授, 徳島文理大薬教授			○	○	○							
鈴木　進	東北大金材研所長			○									
豊沢　豊	東大物性研所長, 中央大理工教授			○	○	○	○						
平野　龍一	東大名誉教授			○	○								
藤田　栄一	大阪薬科大学長, 京大名誉教授				○	○	○						
西原　春夫	早稲田大学総長				○	○							
倉田　道夫	三菱瓦斯化学(株) 顧問				○	○							
朽津　耕三	長岡技科大教授, 城西大理教授				○	○	○	○					
田丸　謙二	東京理科大理教授				○	○	○						
早川　幸男	名大学長				○'87.7.22~	○	○ '92.2.5 死亡						
千原　秀昭	阪大理教授，(社)化学情報協会専務理事				○	○	○	○					
米澤貞次郎	近畿大理工学総合研教授，近畿大理工教授				○	○	○	○					
赤池　弘次	統計数理研究所長					○	○	○					
三ヶ月　章	日本学術振興会学術相談役，東大名誉教授					○	○						
伊藤　昌壽	東レ(株)相談役最高顧問						○	○	○				
佐々木慎一	サイエンスクリエイト(株)常任顧問						○	○	○				
佐野　博敏	東京都立大学長						○						
櫻井　英樹	東北大理学部長, 東北大理教授						○	○					
松永　義夫	神奈川大理教授						○	○	○				
秋本　俊一	学士院会員							○	○				

氏　名	所　属	第1期 '81.6.1～'83.5.31	第2期 '83.6.1～'85.5.31	第3期 '85.6.1～'87.5.31	第4期 '87.6.1～'89.5.31	第5期 '89.6.1～'91.5.31	第6期 '91.6.1～'93.5.31	第7期 '93.6.1～'95.5.31	第8期 '95.6.1～'97.5.31	第9期 '97.6.1～'99.5.31	第10期 '99.6.1～'01.5.31	第11期 '01.6.1～'03.5.31	第12期 '03.6.1～'04.3.31
岩村　秀	九大有機化学基礎研究センター教授							○	○				
加藤　延夫	名大総長							○	○	○			
黒田　晴雄	東京理科大総合研教授							○	○	○			
塩野　宏	成蹊大法教授							○	○	○			
田中　久	前京都薬科大学長							○	○				
堀　幸夫	金沢工業大副学長							○	○				
森本　英武	(株)豊田中央研顧問							○	○				
守谷　亨	東京理科大理工教授							○	○				
大瀧　仁志	立命館大理工教授								○	○			
清水　良一	統数研所長								○	○	○		
田隅　三生	埼玉大理教授，理学部長								○	○			
土屋　荘次	早稲田大理工学総合研究センター客員教授								○	○	○	○	○
又賀　昌一	(財)レーザー技術総合研第5研究部長								○	○			
丸山　和博	京都工繊大学長								○	○			
大塚　榮子	(独)産業技術総合研フェロー									○	○	○	○
京極　好正	(独)産業技術総合研生物情報解析研究センター長									○	○	○	
後藤　圭司	豊橋技科大学長									○	○	○	○
高橋　理一	(株)豊田中央研代表取締役所長									○	○	○	○
中西　敦男	学術著作権協会常務理事									○	○		
細矢　治夫	お茶水女子大理教授									○	○	○	○

氏　名	所　属	第1期 '81.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31	第9期 '97.6.1～ '99.5.31	第10期 '99.6.1～ '01.5.31	第11期 '01.6.1～ '03.5.31	第12期 '03.6.1～ '04.3.31
本多　健一	東京工芸大学長									○	○		
安岡　弘志	東大物性研所長									○			
山崎　敏光	理化学研RIビーム科学研究室研究協力員									○	○	○	○
荻野　博	放送大学宮城学習センター所長										○	○	○
木原　元央	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設長										○		
近藤　保	豊田工業大客員教授										○	○	○
佐原　眞	国立歴史民俗博物館長										○	○	
廣田　襄	京大名誉教授										○	○	○
福山　秀敏	東大物性研所長										○	○	○
松尾　稔	名大総長										○		
山村　庄亮	慶應大名誉教授										○	○	○
蟻川　芳子	日本女子大理教授											○	○
飯吉　厚夫	中部大学長											○	○
石谷　炯	(財)神奈川科学技術アカデミー専務理事											○	○
海部　宣男	国立天文台長											○	○
木村　嘉孝	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所長											○	
北川源四郎	統計数理研究所長												○
木下　實	東大名誉教授												○
小間　篤	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所長												○

9-3　運営顧問（2004 ～）

氏名・所属（当時）	2004. 5.19 ～ 2006.3.31	2006. 4.1 ～ 2008.3.31	2008. 4.1 ～ 2010.3.31	2013. 4.1 ～ 2015.3.31	2015. 4.1 ～ 2016.3.31
加藤　伸一　豊田中央研究所代表取締役	○	○	○		
小間　篤　高エネルギー加速器研究機構理事 物質構造科学研究所長	○				
土屋　荘次　(台湾)国立交通大学講座教授 東京大学名誉教授	○	○	○		
益田　隆司　電気通信大学長	○				
江崎　信芳　京都大学化学研究所長		○			
野口　宏　中日新聞編集局文化部長		○	○ (~2008.7.31)		
時任　宣博　京都大学化学研究所長			○		
田中　宏明　中日新聞編集局文化部長			○ (2008.8.1~)		
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	'15. 4. 1 ～ '16.3.31
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						○	
NAAMAN, Ron イスラエル国ワイツマン科学研究所教授							○
ROSSKY, Peter J. 米国ライス大学自然科学研究部部長・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　昌一　阪大基礎工教授	○				
村田　好正　学習院大理教授	○	○ （東大物性研助教授）	○	○	
山寺　秀雄　名大理教授	○				
吉田　善一　京大工教授	○				
和田　昭充　東大理教授	○	○			
廣田　榮治　分子研教授		○ （委員長）	○ （委員長）	○ （委員長）	○ （委員長）
伊東　　椒　東北大理教授		○	○		
大木　道則　東大理教授		○	○		
大瀧　仁志　東工大総合工研教授		○	○		
馬場　宏明　北大応用電研教授		○	○		
福井　謙一　京大工教授		○	○	○	
齋藤　喜彦　東大理教授		○		○	○
諸熊　奎治　分子研教授		○	○	○	
吉原經太郎　分子研教授		○			
霜田　光一　東大理教授			○	○	
武内　次夫　豊橋技科大教授			○	○	
山本　常信　京大理教授			○	○	
岩村　　秀　分子研教授			○		
坂田　忠良　分子研助教授			○		
木下　　実　東大物性研助教授				○	
黒田　晴雄　東大理教授				○	○
山下　雄也　名大工教授				○	○
高谷　秀正　分子研助教授				○	
花崎　一郎　分子研教授				○	○
安積　　徹　東北大理助教授					○
志田　忠正　京大理助教授					○
鈴木　　洋　上智大理工教授					○
伊達　宗行　阪大理教授					○
田仲　二郎　名大理教授					○
千原　秀昭　阪大理教授					○
土屋　荘次　東大教養助教授					○
永沢　　満　名大工教授					○
務台　　潔　東大教養助教授					○
藤田純之佑　名大理教授					○
塚田　　捷　分子研助教授					○

9-7　運営協議員（1981 ～ 2004）

◎　会長（議長）　　人－人事選考部会に属する運営協議員
（副）　副会長（副議長）　共－共同研究専門委員会

氏　名	所　属	第 1 期 '81.5.1 ～ '83.4.30	第 2 期 '83.5.1 ～ '85.4.30	第 3 期 '85.5.1 ～ '87.4.30	第 4 期 '87.5.1 ～ '89.4.30	第 5 期 '89.5.1 ～ '91.4.30	第 6 期 '91.5.1 ～ '93.4.30	第 7 期 '93.5.1 ～ '95.4.30	第 8 期 '95.5.1 ～ '97.4.30	第 9 期 '97.5.1 ～ '99.4.30	第 10 期 '99.5.1 ～ '01.4.30	第 11 期 '01.5.1 ～ '03.4.30	第 12 期 '03.5.1 ～ '04.3.31
伊藤　憲昭	名大工教授	○共											
大野　公男	北大理教授	○人	○										
角戸　正夫	阪大蛋白研所長	○(副)											
朽津　耕三	東大理教授	○人	○人										
鈴木　洋	上智大理工教授	○											
千原　秀昭	阪大理教授	○人	○										
土屋　荘次	東大教養学教授	○共 (共~'82.4.30)		○									
豊沢　豊	東大物性研教授	○人											
廣田　襄	京大理教授	○人 (人~'82.3.31)		○人	○(副)・人								
米澤貞次郎	京大工教授	○共 (共'82.5.1~)											
井口　洋夫	分子研教授	◎人	◎人	◎									
岩村　秀	分子研教授	○人・共	○人	○人	○ ~'87.5.31								
木村　克美	分子研教授	○共	○共	○人・共	○人・共	○ (◎'90.1.29~)	○ (◎~'92.3.31)						
花崎　一郎	分子研教授	○	○	○	○	○共	○人・共	○人・共	○				
廣田　榮治	分子研教授	○人	○人	○人	○	○ (◎~'90.1.16)							
藤山　常毅	分子研教授	○ ('82.4.30 死亡)											
諸熊　奎治	分子研教授	○人・共 (共~'82.4.30)	○人	○人	○共	○人	○人 (◎~'92.2.14)						
吉原經太郎	分子研教授	○人・共	○人・共	○人・共	○人	○人		○人	◎				
田中　郁三	分子研教授(客員) (東工大理教授)	○											
笛野　高之	分子研教授(客員) (阪大基礎工教授)	○	○人										

氏　名	所　属	第1期 '81.5.1～ '83.4.30	第2期 '83.5.1～ '85.4.30	第3期 '85.5.1～ '87.4.30	第4期 '87.5.1～ '89.4.30	第5期 '89.5.1～ '91.4.30	第6期 '91.5.1～ '93.4.30	第7期 '93.5.1～ '95.4.30	第8期 '95.5.1～ '97.4.30	第9期 '97.5.1～ '99.4.30	第10期 '99.5.1～ '01.4.30	第11期 '01.5.1～ '03.4.30	第12期 '03.5.1～ '04.3.31
山寺　秀雄	分子研教授(客員)(名大理教授)	○											
田仲　二朗	名大理教授	○	○人										
伊藤　光男	東北大理教授		○	○(副)人									
木村　雅男	北大理教授		○○共										
黒田　晴雄	東大理教授		○共										
高柳　和夫	宇宙研教授		○	○									
中島　　威	東北大理教授		○人										
中村　宏樹	分子研教授	○(共'82.5.1~)	○共	○	○人	○人	○共	○人	○	○	◎共	○人	○人
丸山　有成	分子研教授(客員)(お茶女大理教授)		○	○	○	○人	○人	◎					
山本　明夫	分子研教授(客員)(東工大名誉教授)		○		○	○							
茅　　幸二	慶應大理工教授			○共	○共	○共							
菅野　　暁	東大物性研教授			○	○								
坪村　　宏	阪大基礎工教授			○人									
細矢　治夫	お茶女子理教授			○人	○人								
又賀　　昇	阪大基礎工教授			○共	○~'88.3.31								
松永　義夫	北大理教授			○人	○人								
北川　禎三	分子研教授			○共	○人・共	○人・共	○	○人	○人	○	○ '00.4.1~	◎	◎
齋藤　一夫	分子研教授			○									
青野　茂行	金沢大院自然科学研究科長				○	○							
安積　　徹	東北大理教授				○人	○人							
原田　義也	東大教養学教授				○人	○(副)人							
松尾　　拓	九大工教授				○共								
丸山　和博	分子研教授(客員)(京大理教授)			○	○ '88.6.1~								
大瀧　仁志	分子研教授				○ '88.4.1~	○	○共						
薬師　久彌	分子研教授				○ '88.9.1~	○共	○人	○人	○共	○共	○共	○人	○人

氏　名	所　属	第1期 '81.5.1～'83.4.30	第2期 '83.5.1～'85.4.30	第3期 '85.5.1～'87.4.30	第4期 '87.5.1～'89.4.30	第5期 '89.5.1～'91.4.30	第6期 '91.5.1～'93.4.30	第7期 '93.5.1～'95.4.30	第8期 '95.5.1～'97.4.30	第9期 '97.5.1～'99.4.30	第10期 '99.5.1～'01.4.30	第11期 '01.5.1～'03.4.30	第12期 '03.5.1～'04.3.31
木田　茂夫	分子研教授				○~'88.3.31								
岩田　末廣	分子研教授					○人	○人	○ '94.4.1~	○人	○人	○~'00.3.31		
志田　忠正	京大理教授					○人	○人						
田隅　三生	東大理教授					○人	○						
仁科雄一郎	東北大金材研教授					○共	○						
村田　好正	東大物性研教授					○	○(副)						
中筋　一弘	分子研教授					○	○人	○人 (~'94.3.31)					
飯島　孝夫	学習院大理教授						○人	○(副)					
伊藤　公一	大阪市立大理教授						○人	○人					
小川禎一郎	九大総合理工教授						○共	○共					
小尾　欣一	東工大理教授						○共	○					
京極　好正	阪大蛋白研教授						○人	○人					
田中　晃二	分子研教授						○	○共	○人	○人	○共	○共	○共
齋藤　修二	分子研教授						○ ~'92.4.1	○共	○共	◎共			
川崎　昌博	北大電子科学研教授							○人	○人				
近藤　　保	東大理教授							○人	○(副)人				
斎藤　軍治	京大理教授							○	○				
塚田　　捷	東大理教授							○共	○共				
山口　　兆	阪大理教授							○人	○人				
宇理須恆雄	分子研教授							○共 ('94.5.1~)	○共	○共	○	○共	○共
中村　　晃	分子研教授							○					
小杉　信博	分子研教授								○人	○人	○共	○人	○人
渡辺　芳人	分子研教授								○共	○共	○人	○~'02.3.31	
大澤　映二	豊橋技科大工教授								○	○共			
生越　久靖	福井高専校長								○	○			
小谷　正博	学習院大理教授								○人	○人			
西　　信之	分子研教授								○人	○人	○人	○共	○共
三上　直彦	東北大院理教授								○共	○人			
岡田　　正	阪大院基礎工教授									○	○共		
加藤　重樹	京大院理教授									○人	○人		

氏　　名	所　　属	第１期 '81.5.1～ '83.4.30	第２期 '83.5.1～ '85.4.30	第３期 '85.5.1～ '87.4.30	第４期 '87.5.1～ '89.4.30	第５期 '89.5.1～ '91.4.30	第６期 '91.5.1～ '93.4.30	第７期 '93.5.1～ '95.4.30	第８期 '95.5.1 ～ '97.4.30	第９期 '97.5.1～ '99.4.30	第10期 '99.5.1～ '01.4.30	第11期 '01.5.1～ '03.4.30	第12期 '03.5.1～ '04.3.31
小谷野猪之助	姫路工業大理教授									○共	○共		
関　　一彦	名大物質科学国際研究セ教授									○人	○人		
田中　武彦	九大院理教授									○人	○人		
簾野　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										○	○	○
河口　宏夫	東大院理教授										○人	○人	○人
松本　和子	早稲田大理工教授										○人	○人 (~'02.3.31)	
平田　文男	分子研教授										○人	○人	○人
藤井　正明	分子研教授										○人	○人	
阿久津秀雄	阪大蛋白研教授											○	○
宇田川康夫	東北大多元研教授											○(副)人	○(副)人
太田　信廣	北大電子科学研教授											○人	○人
川合　眞紀	理化学研主任研究員											○	
榊　　茂好	九大有機化学基礎セ教授											○人	○人
菅原　　正	東大院総合文化教授											○共	○共
魚住　泰広	分子研教授											○ '02.4.1~	○
西川　惠子	千葉大院自然科学教授												○
岡本　裕巳	分子研教授												○人
加藤　隆子	核融合科学研教授												○

9-8　運営会議委員（2004～）

◎　議長　　人－人事選考部会に属する委員
（副）　副議長　　共－共同研究専門委員会に属する委員

氏名・所属（当時）	第1期 2004. 4. 1～ 2006. 3.31	第2期 2006. 4. 1～ 2008. 3.31	第3期 2008. 4. 1～ 2010. 3.31	第4期 2010. 4. 1～ 2012. 3.31	第5期 2012. 4. 1～ 2014. 3.31	第6期 2014. 4. 1～ 2016. 3.31
阿久津秀雄　阪大たんぱく質研所長	○共					
阿波賀邦夫　名大院理教授	○人	○人				
太田　信廣　北大電子科研教授	○人					
加藤　隆子　核研研究･企画情報セ教授	○					
榊　　茂好　京大院工教授	○人					
田中健一郎　広大院理教授	○人	○(副)人				
寺嶋　正秀　京大院理教授	○人	○人				
西川　恵子　千葉大院自然教授	○(副)					
藤田　　誠　東大院工教授	○	○				
前川　禎通　東北大金材研教授	○	○				
宇理須恆雄　分子研教授	○共	○共	◎共			
小川　琢治　分子研教授	○	○ ~'07.9.30				
北川　禎三　分子研教授(岡崎統合バイオ)	○ ~'05.3.31					
岡本　裕巳　分子研教授	○ '05.4.1~	○人	○人	○共	○共	◎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	○	○
藥師　久彌　分子研教授	○人	◎共 '07.4.1~	○共			
齊藤　真司　分子研教授				○人	○人	○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		
冨宅喜代一　神戸大院理名誉教授			○(副)人	○(副)人		
山下　正廣　東北大院理教授			○人	○人		
渡辺　芳人　名大副総長，教授			○	○		
山縣ゆり子　熊本大院薬教授				○	○	
上村　大輔　神奈川大理教授				○	○	
山内　　薫　東大院理教授				○	○	
森　　健彦　東工大院理工教授				○人	○人	
佃　　達哉　東大院理教授				○人	○人	
朝倉　清高　北大触媒セ教授				○	○	○
神取　秀樹　名工大院工教授				○	○(副)人	○(副)人
河野　裕彦　東北大院理教授				○	○共	○
寺嵜　　亨　九大院理教授				○人	○人	○人
水谷　泰久　阪大院理教授				○人	○人	○人
大西　　洋　神戸大院理教授						○共
鈴木　啓介　東工大院理工教授						○
高田　彰二　京大院理教授						○
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）

<table>
<tr><td rowspan="2">法第４条第１項第１号に掲げる教育研究組織に該当する組織</td><td rowspan="2">該当する職</td><td rowspan="2">分子研規則による種別</td><td rowspan="2">任　期</td><td colspan="2">任期更新に関する事項</td></tr>
<tr><td>可　否</td><td>任　期</td></tr>
<tr><td rowspan="2">分子科学研究所に置かれる研究領域及び研究施設</td><td rowspan="2">助教</td><td>５年に満たない任期を残す者</td><td>分子研規則による残任期間</td><td rowspan="2">可</td><td rowspan="2">任期を定めずに採用</td></tr>
<tr><td>５年を越える任期を残す者</td><td>５年</td></tr>
</table>

9-10　自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

平成16年4月1日
分研規則第4号

自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

（目的）

第1条　この規則は，自然科学研究機構分子科学研究所（以下「研究所」という。）の設置目的及び社会的使命を達成するため，研究活動等の状況について自己点検・評価，及び外部の者による評価（以下「外部評価」という。）を行い，もって研究所の活性化を図ることを目的とする。

（点検評価委員会）

第2条　研究所に，前条の目的を達成するため分子科学研究所点検評価委員会（以下「委員会」という。）を置く。

2　委員会は，次に掲げる者をもって組織する。

一　研究所長

二　研究総主幹

三　研究主幹

四　研究施設の長

五　本部研究連携室の研究所所属の研究教育職員

六　技術課長

七　その他研究所長が必要と認めた者

3　前項第7号の委員の任期は，2年とし，再任を妨げない。

（委員長）

第3条　委員会に委員長を置き，研究所長をもって充てる。

2　委員長に事故があるときは，研究総主幹がその職務を代行する。

（招集）

第4条　委員会は，委員長が招集し，その議長となる。

（点検評価委員会の任務）

第5条　委員会は，次に掲げる事項について企画，検討及び実施する。

一　自己点検・評価及び外部評価の基本方針に関すること。

二　自己点検・評価及び外部評価の実施に関すること。

三　自己点検・評価報告書及び外部評価報告書の作成及び公表に関すること。

四　独立行政法人大学評価・学位授与機構が行う評価に係る諸事業への対応に関すること。

五　その他自己点検・評価及び外部評価に関すること。

（点検評価事項）

第６条　委員会は，次の各号に掲げる事項について点検評価を行うものとする。

一　研究所の在り方，目標及び将来計画に関すること。

二　研究目標及び研究活動に関すること。

三　大学等との共同研究体制及びその活動に関すること。

四　大学院教育協力及び研究者の養成に関すること。

五　研究教育職員組織に関すること。

六　研究支援及び事務処理に関すること。

七　国立大学法人総合研究大学院大学との連係及び協力に関すること。

八　施設設備等研究環境及び安全に関すること。

九　国際共同研究に関すること。

十　社会との連携に関すること。

十一　学術団体との連携に関すること。

十二　管理運営に関すること。

十三　学術情報体制に関すること。

十四　研究成果等の公開に関すること。

十五　財政に関すること。

十六　点検評価体制に関すること。

十七　その他委員会が必要と認める事項

２　前項各号に掲げる事項に係る具体的な点検評価項目は，委員会が別に定める。

（専門委員会）

第７条　委員会に，専門的事項について調査審議するため，専門委員会を置くことができる。

２　専門委員会に関し必要な事項は，委員会が別に定める。

（点検評価の実施）

第８条　自己点検・評価又は外部評価は，毎年度実施する。

（点検評価結果の公表）

第９条　研究所長は，委員会が取りまとめた点検評価の結果を，原則として公表する。ただし，個人情報に係る事項，その他委員会において公表することが適当でないと認めた事項については，この限りではない。

（点検評価結果への対応）

第10条　研究所長は，委員会が行った点検評価の結果に基づき，改善が必要と認められるものについては，その改善に努めるものとする。

（庶務）

第 11 条　委員会の庶務は，岡崎統合事務センター総務部総務課において処理する。

（雑則）

第 12 条　この規則に定めるもののほか，委員会の運営に関し必要な事項は，委員会の議を経て研究所長が定める。

附則

1　この規則は，平成 16 年 4 月 1 日から施行する。

2　この規則施行後，第 2 条第 2 項第 7 号により選出された最初の委員の任期は，同条第 3 項の規定にかかわらず，平成 18 年 3 月 31 日までとする。

9-11　自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則

平成16年4月1日
分研規則第5号

自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則

（設置）

第1条　自然科学研究機構分子科学研究所（以下「研究所」という。）に，研究所の将来計画について検討するため，将来計画委員会（以下「委員会」という。）を置く。

（組織）

第2条　委員会は，次の各号に掲げる委員をもって組織する。

一　研究所長

二　研究総主幹

三　研究所の教授数名

四　研究所の准教授数名

五　その他分子科学研究所長（以下「研究所長」という。）が必要と認めた者

2　前項第3号，第4号及び第5号の委員の任期は，1年とし，再任を妨げない。ただし，補欠の委員の任期は，前任者の残任期間とする。

3　前項の委員は，研究所長が委嘱する。

（委員長）

第3条　委員会は，研究所長が招集し，その委員長となる。

（専門委員会）

第4条　委員会に，専門的な事項等を調査検討させるため，専門委員会を置くことができる。

（委員以外の者の出席）

第5条　委員長は，必要に応じて，委員以外の者を委員会に出席させ，意見を聴取することができる。

（庶務）

第6条　委員会の庶務は，岡崎統合事務センター総務部総務課において処理する。

附則

1　この規則は，平成16年4月1日から施行する。

2　この規則施行の後最初の任命に係る委員の任期は,第2条第2項の規定にかかわらず,平成17年3月31日までとする。

附則

この規則は，平成19年4月1日から施行する。

9-12　大学共同利用機関法人自然科学研究機構年度計画（平成 28 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。）の役割と機能を更に充実させ，国際的に高い水準の研究成果を上げる。

・【1–1】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，その役割と機能を更に充実させ，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。

・【1–2】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。平成 27 年度に実施した中間自己評価の結果を踏まえ，国際的先端研究の推進支援，国内の共同利用・共同研究の推進支援，国内外への情報発信・広報力強化，若手・女性・外国人研究者の支援及び大学研究力強化ネットワークの構築に取り組む。

【２】アストロバイオロジーセンターにおいて，第一線の外国人研究者の招へい，若手研究者の海外派遣に取り組むとともに，大学等と連携して国際的かつ先端的な共同利用・共同研究を推進し，当該分野の国際的研究拠点を形成する。（戦略性が高く意欲的な計画）

・【2–1】宇宙生命探査に向けた研究を行うための外国人研究者を招へいする。また，アストロバイオロジー関連の研究機関や国際研究会等に若手研究者を派遣する。

・【2–2】系外惑星探査及び宇宙生命探査のための大学の拠点と連携するとともに，NASA アストロバイオロジー研究所とも連携した国際的研究拠点の形成を進める。

【３】機関の枠を超え，異分野連携による新分野の創成を恒常的に担う新分野創成センターにおいて，新分野の萌芽促進及び分野間連携研究プロジェクト等を通じた次世代の学問分野の育成を行う。また，既存の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を融合発展させた次世代生命科学センター（仮称）を平成 30 年度に創設する。併せて，機構の５機関による機関間連携ネットワークによる共同利用・共同研究事業を推進し，新分野の萌芽を見出だす基盤を整備するとともに，新たな研究者コミュニティの形成を促す。

・【3–1】新分野創成センター新分野探査室において，次世代の新分野となり得る研究活動の探査を進めるとともに，分野間連携研究プロジェクトを通じて新たな学問分野の創出を視野に入れた発展的な異分野連携の取組を推進する。

・【3–2】新分野創成センターの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の融合発展を促進するための研究プロジェクト等を実施する。また，岡崎３機関の融合領域形成を目指したオリオンプロジェクト，及び岡崎３機関外からの活動を取り込んだバイオネクストプロジェクトを推進し，次世代生命科学センター（仮称）創設に向けた準備を開始する。

・【3–3】機関間連携ネットワークによる共同研究事業を推進し，ネットワークの構築及び若手研究者の育成について具体的方策を検討し実施する。

各分野の特記事項を以下に示す。

（国立天文台）

【４】すばる望遠鏡及び超広視野主焦点カメラ（HSC）を用いて，従来の約 10 倍の天域にわたって遠方宇宙を探査することにより，天体の形成過程や宇宙の大規模構造の起源についての研究を推進する。また，太陽系及び太陽系外の惑星形成領域を観測するための装置（分光器，撮像器等）を開発し，惑星の形成過程や，太陽系外惑星の性質についての研究を推進する。第３期中期目標期間終了時までに，次世代観測装置として超広視野主焦点分光器を東京大学等と共同で開発し，初期宇宙，銀河の進化，暗黒物質，暗黒エネルギー等の研究を推進する。

・【4–1】すばる望遠鏡及びそ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，超広視野主焦点分光器（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。

【５】アジア，北米，欧州の国際共同科学事業であるアタカマ大型ミリ波サブミリ波干渉計（アルマ望遠鏡）を用いて，太陽系外の惑星形成や銀河形成の解明に取り組むとともに，生命の起源に関する様々な物質の探査を行う。アルマ望遠鏡の運用継続のため国際分担責任を果たすとともに，第３期中期目標期間終了時までに，次世代のバンド１受信機 66 台の組立てを完了する。

・【5–1】アルマ望遠鏡の運用・保守体制の定常化を図り，アルマ望遠鏡の本格運用（共同利用観測）を継続する。観測時間の確保や運営への参加を強化するとともに，アジア地域の中核機関としてユーザーコミュニティとの連携を強化し，高い研究成果を上げる。また，アルマの機能・性能を拡充強化するための基礎開発を進める。

【６】日米中印加の国際共同事業である 30m 光学赤外線望遠鏡（TMT）の建設を推進し，日本の役割として望遠鏡本体構造の製作，主鏡分割鏡の製造及び一部研磨加工，第一期観測装置の製作を行う。

・【6–1】TMT 計画で日本が分担している主鏡分割鏡材の製作及び研磨加工を実施する。TMT の建設を担う TMT 国際天文台の共通経費を分担し，建設に向けた諸手続きを進めるとともに，望遠鏡本体構造及び観測装置・科学研究の検討，国内での共同利用にむけた運用計画の策定を進める。

【７】大型望遠鏡，次世代観測装置，超高速計算機等の開発研究，整備及び運用を行い，科学技術の発展向上に寄与する。このため全国の大学等と先端的開発研究を進める。

・【7–1】先端技術センターにおいて，全国の大学等と共同して，大型低温レーザー干渉計型重力波望遠鏡「かぐら（KAGRA）」の防振系をはじめとした様々な装置の開発を進める。

・【7–2】KAGRA の初期運用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。

・【7–3】野辺山宇宙電波観測所においては，大阪府立大学等と連携し，新しい受信機の開発を行う。

【８】地上からの天文学（地上に設置した望遠鏡やスーパーコンピュータを用いた研究）の推進を軸として，将来の観測装置開発のための基礎的技術研究を推進し，新たな科学技術の基盤の創成に寄与する。

・【8–1】地上の天文学で培われたノウハウをもとにして，スペース天文学の将来の観測装置に必要な基礎的開発研究を進める。位置天文観測衛星計画では，超小型衛星の「Nano-JASMINE」に関して，近い将来の打ち上げに備えて，データ解析等の準備を進める。さらに，より大きなサイズの衛星計画である「小型 JASMINE」に関しては，更なる概念検討と技術実証実験を進める。

・【8–2】小惑星探査機「はやぶさ２」運用計画の詳細化と統合サイエンスの検討のために，レーザー高度計（LIDAR）データを用いた地形解析による探査機精密位置決定のシミュレーション，アルベド観測キャリブレーションデータの取得，ダスト観測運用の検討を進める。木星系探査機「JUICE」搭載レーザー高度計（GALA）の基本設計と詳細設計を実施する。

・【8-3】打ち上げ後 10 年目に入る太陽観測衛星「ひので」の科学運用を宇宙航空研究開発機構と協力して継続し,「ひので」のデータを用いて太陽活動現象・周期活動に関する新たな研究成果を得る。その成果をもとに，科学衛星や観測ロケット等の飛翔体を使用した新たな太陽観測計画の実現に向けて，計画案の策定と基礎開発研究を進める。次期太陽観測衛星 SOLAR-C 計画については，科学課題を精査・尖鋭化し，計画実現を可能とする国際協力体制の構築に努める。

【９】東アジア地域の大学・天文学研究機関との連携を強化するため，東アジア天文台の運用（望遠鏡の共同運用）や若手研究者の育成（研究員の受入れ等）を共同で行う。

・【9-1】米国ハワイ島にある東アジア天文台（EAO）の運用を東アジア中核天文台連合（EACOA）加盟天文台・研究所と協力して行うと共に，EAO ボード会議，EACOA 台長会議を東京（三鷹）の国立天文台で開催する。また，３年に一度開催予定の東アジア天文学会議（EAMA）を EACOA 加盟機関と協力して韓国，ソウル大学で開催する。若手研究者の育成を目的とした EACOA Fellowship（東アジア中核天文台連合博士研究員給費制度）を継続して行う。

（核融合科学研究所）

【１０】ヘリカル方式の物理及び工学の体系化と環状プラズマの総合的理解に向けて，大型ヘリカル装置（LHD）の更なる性能向上を目指し，プラズマ制御，加熱及び計測機器，並びに安全管理設備の整備を進めて，重水素実験を実施する。これにより，第３期中期目標期間終了時までに，イオン温度１億 2,000 万度を達成し，核融合炉に外挿可能な超高性能プラズマを実現する。また，重水素放電におけるイオンの内部輸送障壁形成や粒子リサイクリング特性等に関する水素同位体効果を，共同研究を基盤とする学術研究により検証する。

・【10-1】大型ヘリカル装置（LHD）において，中性子をはじめとする放射線計測機器の整備・調整，絶対感度較正を完了させるとともに，安全管理設備を整備し，放射線管理区域等の安全管理体制を確立し，重水素実験を開始する。さらに，重水素放電におけるイオンの内部輸送障壁形成や粒子リサイクリング特性等に関する水素同位体効果を検証するため，これまでの軽水素実験で得られたデータの解析を進め，軽水素実験の総括を行う。

【１１】プラズマシミュレータ（スーパーコンピュータシステム）を有効活用して，数値実験炉の構築に向けたコアプラズマから周辺プラズマ・プラズマ対向壁までを含むシミュレーションコードの整備・拡張・高精度化及び統合化のための研究を進めるとともに，平成 31 年度中において，プラズマシミュレータの性能を現行機種と比べて４倍以上に向上させ，それに対応した各種３次元コードの最適化を行う。また, 平成 31 年度までに, コアプラズマにおける乱流輸送のモデル化と統合輸送コードへの組み込み，第３期中期目標期間終了時までに，各種輸送コードに複数イオン種効果を取り込む。さらに，第３期中期目標期間終了時までに，タングステンを中心とするプラズマ対向材の物性値評価に必要であるプログラミングの改善や新たなモデルの構築により分子動力学的シミュレーション技法を開発する。並行して, 上記目標を達成するための支援研究として, LHD プラズマを始めとする磁場閉じ込めプラズマの３次元平衡，輸送，不安定性，非線形発展についての実験結果との照合によりコードの完成度を高めるとともに，関連する基礎物理等に関するシミュレーション研究を行う。

・【11-1】数値実験炉の構築に向けて，コアプラズマから周辺プラズマ・プラズマ対向壁までを含む要素物理コードを統合化するための①シミュレーションコードの整備・拡張，②物理過程のモデル化，③統合輸送コードへの組込みの検討，を行う。さらに，上記計画の支援研究として，LHD プラズマをはじめとする磁場閉じ込めプラズマの３次元平衡，輸送，不安定性，非線形発展及び関連する基礎物理等に関するシミュレーション研究を行う。

【１２】核融合炉の早期実現を目指し，平成 28 年度でヘリカル炉の概念設計をまとめ，各開発課題の数値目標を具体化する。炉設計の精密化の推進，それと連動した基幹機器の高性能化と高信頼性，規格基準の確立に向けた開発研究を推進することにより，第３期中期目標期間終了時までに，大型高磁場超伝導マグネットと先進ブランケットシステムの実規模試作の工学設計をまとめるとともに，ヘリカル炉に向けた学術研究ロードマップを報告書にまとめる。並行して，第２期で立ち上げた大型設備である「熱・物質流動ループ」や「大口径強磁場導体試験装置」等の拡充と拠点化による国内外との共同研究の機能強化，及び規格・基準構築に向けての知見の集積化による核融合工学の体系化と学際研究への寄与を図るとともに，関連技術の産業界への展開・促進を図る。

・【12-1】ヘリカル炉の概念設計をまとめ，各開発課題の数値目標を具体化するとともに，ヘリカル炉の基本設計の改良を段階的に推進する。連動して，①超伝導マグネットの実規模導体開発，②高磁場大型設備である「熱・物質流動ループ」による腐食評価，③低放射化高性能材料の設計・製作・性能評価，④超高熱流機器の高性能・長寿命化，⑤高効率粒子排気装置等の実機能実証研究，を段階的に推進する。さらに，第２期で立ち上げた大型設備等による共同研究の機能強化，他分野や産業界との連携等を促進する。これらに基づいて，ヘリカル炉に向けた学術研究ロードマップを検討する。

（基礎生物学研究所）

【１３】多様な生物現象の基本原理を解明するために，最先端解析技術を用いて，細胞の構造・機能，発生・分化，神経系の働きや行動の制御，共生，進化，外部環境に対する応答等の機構を研究する。遺伝子やタンパク質解析技術や多様な先端顕微鏡によるバイオイメージング技術の高度化を進め，分子から個体レベルで統合的に解明することによって，世界を先導する独創的な生物学研究を推進する。

・【13-1】細胞の分化機構，発生現象を司るメカニズム，多様な形質や共生系の進化，外部環境への適応や恒常性の維持等，生物現象の基盤を成す分子メカニズムの解明を進める。そのために，遺伝子の働き，細胞の機能，エネルギー受容，生物間共生の機構などについて，バイオイメージング，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生物学研究の推進を図る。

【１４】社会性や共生といった高次な生物現象を研究するために適した数種の新規生物種の繁殖及び遺伝子改変技術を確立し，生物資源を充実させる。

・【14-1】新規モデル生物の開発に向けて，大学等と共同利用・共同研究を実施し，繁殖・飼育技術の確立，遺伝子情報の整備を進める。

【１５】バイオイメージング関連施設の国内ネットワークの構築，欧米を含む国際ネットワークへの参加を第３期中期目標期間終了時までに実現する。

・【15-1】研究デザインの策定から機器や画像解析手法の提供を含めた，バイオイメージング研究の統合支援体制を整備し，国内のバイオイメージングネットワークとの連携を進める。また，Euro-BioImaging を中心とした，欧州のネットワークの情報収集を進める。

（生理学研究所）

【１６】生体の働きを担う機能分子の構造と動作・制御メカニズム及び細胞機能への統合，代謝調節・循環調節等の動的適応性の遺伝子・分子・細胞的基盤，循環や脳神経情報処理機構の構造的及び分子・細胞的基盤等の解明を目的とする研究を行うとともに，これらの病態への関わりを研究する。

・【16-1】生体機能分子の構造と作動機構及び細胞における役割の解明を目指す研究を進める。特に，シナプス可塑性に寄与するリン酸化酵素分子の働き，膜タンパク質の修飾機構について明らかにする。

・【16-2】代謝調節，循環調節及び神経情報処理の，動的側面と分子細胞機構の解明を目指す研究を進める。特に，膜タンパク質の発現量の変化に伴うシグナリングの変化及び病態との関連，摂食嗜好性の脳内メカニズムについて明らかにする。

【１７】認知・行動・感覚などの高次脳機能の脳内メカニズム，心理現象のメカニズムや社会的行動等の神経科学的基盤の解明に迫る。そのための革新的脳情報抽出手法及び神経活動やネットワーク機能の操作手法の導入・改良を行う。
・【17–1】認知・行動・感覚などの高次脳機能の脳内メカニズム，心理現象のメカニズムや社会的行動等の神経科学的基盤の解明を目指す研究を進める。特に，質感の脳内表現，顔認知の生後発達について明らかにする。
・【17–2】革新的脳情報抽出手法及び神経活動やネットワーク機能の操作手法の導入・改良のため，神経細胞の広範囲な３次元再構築を可能とするアレイトモグラフィーの導入や，高効率逆行性遺伝子導入ウィルスベクターの開発を行う。
【１８】脳－人体の働きとそのしくみについて，分子から個体を統合する空間的・時間的関連，及び多臓器連関の統合的理解のため，7 テスラ超高磁場 MRI によるイメージング等の生体情報計測技術の高度化を行う。また，新規パラメータの取得法や，大規模データ解析法の開発を行う。
・【18–1】脳－人体の働きとそのしくみについて，分子から個体を統合する空間的・時間的関連，及び多臓器連関の統合的理解を目指す研究を進める。そのため，昨年度始動した 7 テスラ超高磁場 MRI の共同利用を開始するとともに，新規パラメータの取得法や，大規模データ解析法の開発に着手する。

（分子科学研究所）
【１９】量子力学，統計力学，分子シミュレーション等の理論的・計算化学的方法により，小分子系から生体分子，ナノ物質などの高次複雑分子系に至る様々な分子システムの構造・性質とその起源を解明するとともに，新たな機能開拓に向けた研究を行う。
・【19–1】理論・計算分子科学研究領域が中心となって，量子力学，分子シミュレーション，統計力学に基づく理論・計算手法の開発を行い，金属錯体，触媒，機能性分子，ナノ構造体，生体分子系などの構造，反応，ダイナミクス，機能に関する基礎的理論・計算科学研究を推進する。また生命・錯体分子科学研究領域，協奏分子システム研究センターと連携して，複雑な生体分子システムにおける階層間コミュニケーション（分子の性質・揺らぎとシステム全体の高次機能の相関）の理論的解析，生体分子複合体や金属錯体が関与する分子反応系の開発，新規タンパク質のデザイン等の研究を行う。
【２０】光分子科学の新たな展開を可能とする様々な波長域や高強度の光・電磁波を得るための高度な光源の開発及び先端的な分光法の開発を行うとともに，分子システムに内在する相互作用と高次機能発現機構の解明や高次機能と動的挙動の光制御に関する研究を行う。
・【20–1】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・制御法の開発を行う。それらを用いて，原子分子集合体における強相関多体ダイナミクスの観測と制御，ナノ構造物質の特徴的な分光特性とそのダイナミクス･機能発現機構の研究，有機分子積層膜，溶液，固液界面などの分子間相互作用系や化学反応系の局所電子構造の研究を進める。協奏分子システム研究センターと連携し，先端的分光学手法を駆使した生体関連物質の動態観測や遷移金属錯体の電子状態解析，分子システムに含まれる少数分子の顕微観察と光制御に関わる研究も進める。
【２１】多様な分子計測法を駆使して金属錯体，ナノ物質，生体分子とそのモデル系が示す高次機能や協同現象に対する分子レベルの機構解明に関する研究を行うとともに，新規な電気的・磁気的・光学的特性や高効率な物質変換・エネルギー変換を目的とした新たな分子物質や化学反応系の設計・開発を行う。
・【21–1】物質分子科学研究領域と協奏分子システム研究センターの連携により，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，及びこれらの分子性物質や生体関連物質・燃料電池などの新規物性探索，さらには分子の多重集積化による新規機能性分子システムの探索と評価を行う。また生命・錯体分子科学研究領域が中心となり，生体系における分子機能発現原理の探究ならびに新しい駆動原理に基づく触媒創製研究を行う。特に生体分子複合体，金属錯体，有機触媒が関与する物質輸送，エネルギー変換，物質変換に焦点を当てた分子反応系の開発研究を推進する。

（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
【２２】学術研究推進の基本である各研究者の自由な発想による挑戦的な研究活動を促進するため，新たな方向性を探る研究や学際的研究を推進する研究グループの形成支援，若手研究者の支援，競争的資金の獲得支援，国際的環境の整備等を強化する。
・【22–1】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助成，学際的研究への重点配分などを行い，個人の自由な発想に基づく学術研究等を進展させる。
【２３】該当する各機関が行う大型プロジェクトに関しては，プロジェクトを適切に推進するための体制構築及びその不断の点検を実施するとともに，リーダーやプロジェクトマネージャーなど推進体制を見直す。また，プロジェクトの達成目標に関し，研究者コミュニティの意見を踏まえ，各機関の運営会議等において迅速且つ適切な意思決定を行う。また，プロジェクトの推進に当たっては，立地する地元自治体や地元住民の理解を得て進めることが必要不可欠であることから，市民との懇談会や地元自治体との密な協議を通したリスクコミュニケーションを着実に実施する。
・【23–1】研究者コミュニティの意見を反映させつつ，プロジェクト間の連携強化や，主任研究員制度（仮称）の導入等により，研究推進体制を見直すとともに，柔軟な組織運営を推進する。
・【23–2】プロジェクトの達成に関し，研究者コミュニティの意見を踏まえ，各機関の運営会議等において迅速且つ適切な意思決定を行う体制を整備する。
・【23–3】市民との懇談会など地元住民等との情報共有を行い，適切なリスクコミュニケーションを図る。
【２４】アストロバイオロジーセンターにおいては，系外惑星探査，宇宙生命探査，装置開発の各プロジェクト推進のために，海外機関から最先端の研究者を招へいするなど，国内外の第一線の研究者の配置及び研究支援体制の構築により，国際的かつ先端的な研究を推進できる体制を整備する。当該研究拠点の外国人研究者の割合を，第３期中期目標期間終了時までに 20% 以上とする。新分野創成センターにおいては，恒常的な新分野の萌芽促進及び育成の仕組みを整備する。また，既存の研究分野について，新たな学問動向を踏まえて融合発展を図る等の見直しを行うことができる体制を整備する。（戦略性が高く意欲的な計画）
・【24–1】宇宙生命探査プロジェクト室を新設し，生命科学との連携を図る。系外惑星探査プロジェクト室では，観測装置を保守･運用し，系外惑星研究を推進する。アストロバイオロジー装置開発室では TMT 望遠鏡等のためのハビタブル地球型惑星観測装置の概念設計を進める。以上の研究・開発のために，特任教員・研究員・事務員の体制整備を進める。
・【24–2】アストロバイオロジー装置開発のための外国人教員を混合給与により雇用し，ハビタブル地球型惑星観測装置に関連するコロナグラフ及び超補償光学の基礎開発を行う。
・【24–3】新分野創成センター新分野探査室において，次世代の新分野となり得る研究活動の探査に必要な体制を検討するとともに，機構本部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の融合発展後の新分野に関する検討組織を立ち上げ，組織形態及び事業内容の検討を開始する。

2　共同利用・共同研究に関する目標を達成するための措置

（1）共同利用・共同研究の内容・水準に関する目標を達成するための措置

【２５】各機関の我が国における各研究分野のナショナルセンターとしての役割を踏まえ，国際的かつ先端的な共同利用・共同研究を推進し，一層の機能強化につなげる。公募型の共同利用･共同研究については，申請から審査，採択，成果報告･公表，分析に至るまでを統合的に管理する自然科学共同利用・共同研究統括システム（NINS Open Use System：NOUS）（仮称）の基盤を平成 31 年度までに整備し，第３期中期目標期間終了時までに共同利用・共同研究の成果内容・水準を把握するとともに，大学の機能強化への貢献度を明らかにする。（戦略性が高く意欲的な計画）

・【25–1】各機関の研究施設の高性能化・高機能化を進め，より国際的に水準の高い共同利用・共同研究を推進する。
・【25–2】自然科学共同利用・共同研究統括システム（NOUS）の基本設計，外部データベースとの連携について検討する。

【２６】自然科学大学間連携推進機構（NINS Interuniversity Cooperative Association：NICA）（仮称）を構築し，各機関における個別の大学間連携を集約し，より広くかつ柔軟に大学の研究力強化を推進する。

・【26–1】自然科学大学間連携推進機構（NICA）の構築を目指し，関係大学の長または研究担当理事等との従来の各機関における個別の大学間連携を集約する仕組みについての協議を開始する。

【２７】頭脳循環拠点の機能を強化し，優秀な若手研究者の育成と活発な人材交流を通して新たな分野を大学で展開させるなど，大学の機能強化に貢献する。

・【27–1】運営会議等において，大学と連携しつつ研究分野の動向を調査し，萌芽的分野を育成するために，若手研究者を大学から採用するとともに，育成した人材を大学に輩出することで新たな分野の拡大を図る。

各分野の特記事項を以下に示す。

（国立天文台）

【２８】天文学分野において，研究者コミュニティの意見をとりまとめ，その総意に基づいて，大型研究基盤施設及び設備の建設･開発・運用を行うとともに，国内観測拠点の整理・統合を進める。アルマ望遠鏡の使用に関する東アジア地域の窓口機関として，日本を含む東アジア地域の研究者に対し，観測提案の準備，観測データ解析，論文化等の支援を行う。自然科学大学間連携推進機構（仮称）の一環として，光学赤外線分野及び電波 VLBI 分野等における大学間連携を促進し，全国の大学等及び海外の研究機関等が保有する観測装置を連携させた共同利用・共同研究システムを構築するなど，大学等における天文学・宇宙物理学の発展に貢献する。さらに，共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため，すばる望遠鏡の共同利用率を 90% に，天文シミュレーションシステムの共同利用率を 100% に維持する。

・【28–1】すばる望遠鏡，アルマ望遠鏡の運用及び TMT（30m 光赤外線望遠鏡）実現をめざしつつ，研究者コミュニティとの窓口として，専門委員会等及びユーザーズ･ミーティング等を開催し，現状分析や天文学の動向を見ながら，国内観測拠点の整理･統合を検討する。特にすばる望遠鏡の共同利用率を 90% に，天文シミュレーションシステムの共同利用率を 100% に維持する。
・【28–2】岡山天体物理観測所では，現時点で国内最大規模（口径 1.8 m）の天体高分散分光施設を維持・運用し，天体の視線速度の測定で世界トップクラスの精度を提供して，大学等における天文学・宇宙物理学の発展，特に太陽系外惑星系の探索に貢献する。
・【28–3】名古屋大学，京都大学等と協力して，「ひので」衛星等によって取得された太陽観測データとその解析環境を全国の研究者に引き続き提供し，研究を支援する。全国の大学等と協力して，将来の太陽飛翔体観測に有効な観測装置の共同開発を既存の地上望遠鏡を用いて進める。

（核融合科学研究所）

【２９】LHD による重水素プラズマ実験，プラズマシミュレータによる大規模シミュレーション及び大型試験設備を活用した炉工学研究を高度な共同利用・共同研究として国内外に展開する。国内においては，その質を上げること，国外については，その機会を増やすことを目標とする。自然科学大学間連携推進機構（仮称）の一環としての双方向型共同研究を始めとする大学間ネットワークを整備・活用した共同研究を先導することにより，大学からの研究成果創出に資する。２国間・多国間協定に基づく連携事業については限られた予算の中で研究計画を重点化し，より高い成果を目指す。国際熱核融合実験炉（ITER）等の国際事業に対しても，卓越した研究拠点として連携協定の下，大学とともに核融合科学研究所が知見を持つ分野で更なる連携協力を図る。また，共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため，大型ヘリカル装置及びプラズマシミュレータの共同利用率を 100% に維持する。

・【29–1】LHD 計画プロジェクトでは，実験参加及びデータ利用による共同研究を促進するための体制上，技術上の方策を，研究者コミュニティとの議論に基づいて図る。また，情報の即時性，実験データの公開性，実験遂行計画の意思決定の透明性の確保に努める。さらに，LHD における重水素実験に向けた本体，加熱，計測，データ解析ツールの説明書を新たに英文でも作成し，国内外の共同研究者に公開する。共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため，LHD の共同利用率を 100% に維持する。
・【29–2】数値実験炉研究プロジェクトでは，①グレードアップしたプラズマシミュレータの利用環境の整備，②シンポジウム・講習会・報告会等の開催によるシミュレーション科学の普及，を通じて理論・シミュレーションによる共同研究を積極的に推進する。共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため，プラズマシミュレータの共同利用率を 100% に維持する。
・【29–3】核融合工学研究プロジェクトでは，ヘリカル炉の設計の精密化のため，大型試験設備を活用した国内外との共同研究の展開を図るとともに，日米科学技術協力事業において原型炉プラズマ対向機器開発のための要素技術の工学的評価（PHENIX 計画）を推進する。
・【29–4】２国間・多国間協定等に基づく連携事業において，特に，ヘリカル型装置 W7-X の実験を開始したマックスプランクプラズマ物理研究所との連携を進める。また，ITER 等の国際事業については，国際トカマク物理活動や，幅広いアプローチ事業等との連携を推進する。

（基礎生物学研究所）

【３０】生物機能解析センターの機能を更に高度化し，遺伝子発現や代謝産物の定量的解析，分子や細胞，組織，個体レベルでの時空間動態観察など，統合的な解析を可能にするために，次世代シーケンサーや先端顕微鏡などの設備の高度化，技術支援員などの充実を図る。また，共同利用・共同研究の一部を国際的にも開かれたものとし，第３期中期目標期間中に 20 件程度の国際共同利用・共同研究を実施する。自然科学大学間連携推進機構（仮称）の一環として，大学サテライト７拠点との連携により，生物遺伝資源のバックアップ保管数を毎年度対前年度比で約 10% 程度増加させる。また新規生物遺伝資源保存技術開発共同利用研究を年間 10 件程度採択するとともに，凍結保存カンファレンスを定期開催（第３期中期目標期間中に６回）し，生物学・材料科学・有機合成化学の異分野間連携を推進する。さらに得られた成果を中心に保存技術講習会を大学サテライト拠点と共同で開催する。大学間連携による昆虫，海生生物など新規モデル生物開発拠点を形成し，特徴ある生物機能をもつ生物をモデル化することにより，新たな生物機能の解明を目指す研究を推進する。さらに，共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため，大型スペクトログラフの共同利用率を 90% に維持する。また，先端バイオイメージング支援プラットフォーム（光学顕微鏡技術支援，画像解析技術支援等）の形成などを通じて，生命科学を包括した支援体制を構築し，我が国の当該分野の高度化及び国際ネットワーク形成を推進する。

・【30–1】生物機能解析センター，モデル生物研究センター，新規モデル生物開発センターを中心に，最新の研究ニーズに対応できる設備を整備する。これにより，大学間連携による共同利用・共同研究の基盤を強化する。IBBP（大学連携バイオバックアッププロジェクト）センターでは，生物遺伝資源の新規保存技術の開発を推進し，生物資源の保存の側面から大学等の研究を支援する。基生研コンファレンス等を通じて，国際共同利用・共同研究の核となる活動を進め，その結果としてさらなる関連研究者ネットワークを更に拡張し，充実させる。
・【30–2】IBBP の活動においては，自然科学大学間連携推進機構（仮称）の一環として，大学サテライト 7 拠点との連携により，生物遺伝資源のバックアップ保管数を前年度比で約 10% 程度増加させる。新規生物遺伝資源保存技術開発共同利用研究を実施する。また，凍結保存カンファレンスを開催し，成果の普及を行う。
・【30–3】実験計画の策定から顕微鏡機器や画像解析手法の提供を含めた，先端バイオイメージング研究の統合支援体制を整備し，共同利用・共同研究を推進する。共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため，大型スペクトログラフの共同利用率を 90% に維持する。

（生理学研究所）
【３１】分子から細胞，組織，システム，個体にわたる機能生命科学（生理学）及び脳科学分野の共同利用・共同研究拠点としての機能を強化する。年間，共同研究件数 100 件，生理研研究会 20 件を維持する。自然科学大学間連携推進機構（仮称）の一環としての 7 テスラ超高磁場 MRI 装置等を用いた脳・人体機能イメージングネットワークを構築し，全国の大学等研究機関との共同研究体制を確立する。先端光学・電子顕微鏡を用いた共同研究は，新規の共同研究者を開拓する。研究者へのニホンザルの提供については，安全でユーザーのニーズに沿った付加価値の高い個体の提供を目指し，他機関と協力し，品質信頼性の更なる向上に取り組むとともに，長期的供給体制の整備を継続する。遺伝子改変に用いるウィルスベクターの作成と提供についても更に推進する。また，共同利用研究の国際公募を実施し，国際共同研究を推進する。さらに，共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため，7 テスラ超高磁場 MRI 装置の共同利用率を 60% に維持する。また，先端バイオイメージング支援プラットフォーム（電子顕微鏡技術支援，機能的磁気共鳴画像技術支援等）の形成などを通じて，生命科学を包括した支援体制を構築し，我が国の当該分野の高度化を推進する。
・【31–1】年間，共同研究件数 100 件，生理研研究会 20 件を維持する。
・【31–2】7 テスラ超高磁場 MRI 装置による計画共同研究を開始し，初年度において共同利用率 60% を目指すとともに，次年度の本格的実施に向けて全国の大学等研究機関との連携ネットワークの整備を進める。
・【31–3】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，運営体制を見直し，疾病も含めた危機管理対策の強化を行い，安定供給につなげる。プロジェクトの一本化，繁殖からリタイアしたサルの飼養について検討を始める。
・【31–4】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，引き続き維持する。
・【31–5】三次元走査型電子顕微鏡（3D-SEM）を用いた，革新的なコネクトミクス技術を応用した研究を継続する。さらに，神経細胞などを広範囲に追跡して３次元再構築することのできるアレイトモグラフィーのシステム構築を進める。
・【31–6】先端バイオイメージング支援プラットフォーム（電子顕微鏡技術支援，機能的磁気共鳴画像技術支援等）形成などを通じて，生命科学を包括した支援体制を構築し，我が国の当該分野の高度化を推進するとともに，脳科学研究分野の基盤となる取組についてその構築の検討を進める。

（分子科学研究所）
【３２】先端的な放射光光源やレーザーを用いた光科学実験装置，分子計算に最適化された大型計算機，種々の先端的分子計測装置を整備・強化し，それらを用いた分子システムの構造・機能・物性等の研究に対する高度な共同利用・共同研究を国際的に推進する。総合的及び融合的な新分野として，協奏分子システム研究センターにおいて新たな機能を持つ分子システムを創成するとともに，その機能解析のための新たな分子科学計測手法を開拓する共同研究拠点を形成する。また，共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため，極端紫外光研究施設（UVSOR）の共同利用率を 85% に，分子シミュレータの共同利用率を 100% に維持する。
・【32–1】極端紫外光研究施設において，共同利用率を 85% 以上に維持するため，高輝度放射光源装置の調整運転の効率化を進めると共に，ナノスケール軟Ｘ線透過吸収顕微鏡やスピン・角度・空間分解光電子顕微鏡を含む高性能な装置群の共同利用・共同研究を国際的に推進する。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によってレーザー・放射光同期実験等を推進する。
・【32–2】協奏分子システム研究センターにおいては，新たな機能を持つ分子システムを創成するとともに，装置開発室の共同利用との連携や機器センターが担当する「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」プロジェクトとの連携を通じて，先端的計測設備の相互利用による効率的な運用と構造機能物性評価に関する共同利用・共同研究を推進する。
・【32–3】計算科学研究センターにおいて，スーパーコンピュータ及び汎用コンピュータの計算資源を 100% 共同利用に提供し，機能性分子の構造や反応性，タンパク質の構造揺らぎ・構造形成や機能に関する理論・計算分子科学研究を推進する。また，ポスト「京」など関連する計算物質科学のプロジェクトへの各種支援を行う。

（分野連携型センター）
【３３】機構における新たな学問分野の創出を目指し，新分野の探査・萌芽促進・育成を担う新分野創成センター並びに国際的共同研究拠点を目指すアストロバイオロジーセンター及び次世代生命科学センター（仮称）等を設置し，共同利用・共同研究，各種研究プロジェクトの実施等に取り組む。また，岡崎３機関が共同運営する岡崎統合バイオサイエンスセンターについては，バイオネクストプロジェクト及びオリオンプロジェクトを推進してその機能を強化した上で，岡崎３機関の関連部門も含めた必要な組織改革を行い，平成 30 年度に創設する次世代生命科学センター（仮称）の中核組織として再編・統合する。
・【33–1】（新分野創成センター）「次世代生命科学センター（仮称）」の設置に向けて，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において，融合発展の方向に沿った研究プロジェクト等を実施するとともに，必要に応じ合同教授会議を開催する。
・【33–2】（アストロバイオロジーセンター）宇宙における生命探査を目的とするアストロバイオロジーセンターとしての機能強化を推進し，公募等による共同研究及びプロジェクト研究を実施する。
・【33–3】（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では新たな公募研究を開始し，次世代生命科学に必要な連携研究組織を形成する。またバイオネクストプロジェクトにおいては岡崎３機関外との共同利用研究を推進し，ネットワークを形成する。

（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

【３４】自然科学共同利用・共同研究統括システム：NOUS（仮称）を構築し，大学の機能の強化への貢献度を把握するため，各機関の IR 機能の連携による機構全体の IR 機能体制の整備を行う。（戦略性が高く意欲的な計画）

・【34–1】自然科学共同利用・共同研究統括システム（NOUS）作業部会を中心とする機構全体にわたる研究評価・IR 担当職員の連絡体制を整備する。

・【34–2】各機関の研究力強化戦略室において，共同利用・共同研究等を通した大学の機能強化への貢献度を把握するため，共同利用・共同研究の成果等の収集・分析を行う。

・【34–3】各機関における共同利用・共同研究については，外部委員を含む共同利用委員会による審査のほか，電子申請システムの活用，相談窓口の設置など，共同利用研究者のニーズを踏まえた共同利用・共同研究体制を整備する。

【３５】自然科学大学間連携推進機構：NICA（仮称）を通じ，大学との緊密な連携の下に，天文学，核融合科学，分子科学，基礎生物学，生理学の各分野における大学の研究力強化に貢献するため，平成 30 年度までに，資源配分や支援内容の総合的な意見集約のシステムを構築する。

・【35–1】自然科学大学間連携推進機構（NICA）の構築に関する各大学等との協議体制を整備する。

・【35–2】各機関における双方向型，大学連携型，ネットワーク型等の共同利用・共同研究については，相手機関の実態調査を行うなど，更なる連携強化を図る。

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

【３６】総合研究大学院大学（以下「総研大」という。）との連係協力に関する協定に基づき，また，機構長の経営協議会への参加，教育担当理事のアドバイザリーボードへの参加等を通じて緊密に連係し，大学共同利用機関としての最先端の研究設備，各分野の基礎研究を支える基盤的設備等の研究環境を活かし，世界の一線で活躍できる若手研究者を育成すると同時に，学術の広範な知識を備え将来様々な分野で活躍するための総合的な能力及び高い研究倫理を大学院生に涵養する。そのため，下記の基盤機関において，それぞれ特色ある大学院教育を実施する。

◆国立天文台（天文科学専攻）
◆核融合科学研究所（核融合科学専攻）
◆基礎生物学研究所（基礎生物学専攻）
◆生理学研究所（生理科学専攻）
◆分子科学研究所（構造分子科学専攻・機能分子科学専攻）

・【36–1】総合研究大学院大学（以下「総研大」という。）の経営協議会への機構長の参加，教育担当理事のアドバイザリーボードへの参加等を通じ，機構本部と総研大葉山本部の緊密な連絡体制を構築する。

・【36–2】総研大の基盤機関として最先端の研究環境を活かした特色ある大学院教育を行うとともに，研究科や専攻の枠を越えた分野横断型の教育プログラムを実施し，学術の広範な知識を備え，世界の一線で活躍できる若手研究者を育成する。

【３７】全国の国公私立大学の大学院教育に寄与するため，特別共同利用研究員，連携大学院などの制度を通じて大学院教育を実施する。

・【37–1】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るとともに，連携大学院などの制度を通じて，大学院教育に協力する。

（２）人材養成に関する目標を達成するための措置

【３８】総研大との密接な連係・協力によって，国内外より優秀な大学院生の受け入れを促進するとともに，国費の支援を受けた学生以外の学生に対するリサーチアシスタント制度の適用率を 90% 以上に維持する。海外の大学・研究機関と協定し，国際インターンシップなどにより，第３期中期目標期間において第２期を上回る学生，若手研究者を受け入れる。また，総研大の学生及びこれに準じた体系的な教育プログラムを履修する学生は，学位取得までの間に１回以上，海外での国際会議への参加又は研修を受けることとする。さらに，外国人留学生や若手研究者の就学，研究のサポート体制を充実するため，英語による就学・研究活動に関する各種情報提供及び外部資金獲得に関する支援を行う。

・【38–1】リサーチアシスタント制度の充実等を通じて国内外より優秀な大学院生の受け入れを促進する。

・【38–2】海外の大学・研究機関からの国際インターンシップによる受け入れ等を通じて，若手研究者の受け入れを促進する。

・【38–3】総研大の学生及びこれに準じた体系的な教育プログラムを履修する学生が，学位取得までの間に１回以上，海外で開催される国際会議や研修へ参加するための学生の渡航費・滞在費の確保に努めるなど支援体制を充実させるとともに，海外連携機関との交流を通じてその機会の拡大を図る。

・【38–4】外国人留学生等に対して，寄附金等を用いた経費支援や外国人サポートデスクの活用により支援を行うとともに，若手研究者に対しては，外部資金獲得のトレーニングや海外渡航費の支援等により，就学・研究のサポート体制を充実する。

【３９】海外の学生，若手研究者に教育・研究の場を提供するため，サマー・ウィンタースクールなどの研修会・教育プログラム等を毎年度５回以上実施する。また，中高生などの次世代の科学への関心を高めるため，毎年度５名程度，選考によって選んだ若手研究者による公開講演会を行う。

・【39–1】海外の学生，若手研究者に教育・研究の場を提供するため，総研大事業「夏の体験入学」，「アジア冬の学校」をはじめとしたサマー・ウィンタースクールなどの研修会，教育プログラムを５回以上実施する。

・【39–2】研究者人材の獲得を見据え，中高生などの次世代の科学への関心を高めるため，選考によって選んだ各機関１名ずつの若手研究者による公開講演会を行う。

【４０】世界トップレベルの研究機関への若手研究者の派遣や，30 歳前後の若手研究者に独立した研究室を与える「若手独立フェロー制度」や研究費助成を通じた若手研究者支援により，人材育成の取組を一層強化する。

・【40–1】機構内の国際協力プログラムや，競争的研究資金による国際連携事業を活用し，若手研究者を世界トップレベルの研究機関へ派遣する。

・【40–2】若手独立フェロー制度をはじめとした若手研究者の研究費支援制度の充実により，人材育成の取組を強化する。

４　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

【４１】機構及び各機関がそれぞれの地域などと協力して，出前授業，各種の理科・科学教室への講師派遣を行うなど，理科教育を通して，国民へ科学の普及活動を強化するとともに，地域が求める教育研究活動に貢献する。

・【41–1】各機関において，小中学校を対象とした出前授業や文部科学省等が主導する理科教育事業への協力を通じて，科学の普及を進めるとともに，市民講座や地元自治体と連携した実験教室の開催を通じて，地域が求める教育研究活動に貢献する。

【４２】社会人学び直しなどの生涯教育を通じた社会貢献を目的として，専門的技術獲得のためのトレーニングコースや，小中学校の理科教員を対象とした最新の研究状況を講演するセミナーを実施する。

・【42–1】小中学校や高等学校の理科教員を対象としたセミナーや見学の受入，社会人入学の受入，及び専門的技術獲得のためのトレーニングコースの実施などにより，生涯教育を通じた社会貢献を果たす。

【４３】民間等との共同研究や受託研究等を受け入れるとともに，最先端の研究成果や活用可能なコンテンツについて，産業界等との連携を図り技術移転に努めるとともに，第３期中期目標期間終了時において，基礎的な自然科学が産業界のイノベーションに如何に貢献したかに関する実績を取りまとめ，社会へ発信する。
・【43-1】民間等との共同研究や受託研究等を受け入れるとともに，民間等との窓口を広げ，最先端の研究成果や活用可能なコンテンツについて，産業界等との連携を図り技術移転に努める。

５　その他の目標を達成するための措置
（１）グローバル化に関する目標を達成するための措置
【４４】機構長のリーダーシップの下，機構が締結した国際交流協定等に基づき，グローバル化の進展に対応した国際的拠点形成のための研究者交流事業や国際共同事業を推進する。
・【44-1】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，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。
【４５】各機関においては，各機関が締結した国際交流協定などに基づき，海外の主要研究拠点との研究者交流，共同研究，国際シンポジウム及び国際研究集会等をそれぞれ毎年度１回以上開催し，連携を強化する。
・【45-1】各機関が締結した国際交流協定などに基づき，海外の主要研究拠点との研究者交流，共同研究，国際シンポジウム及び国際研究集会等の実施を通じて連携を強化する。
【４６】国内外の優秀な研究者を集め，国際的な研究機関として広い視点を取り込むため，外国人研究者の採用を促進し，外国人研究者の割合を第３期中期目標期間終了時までに 8% に引き上げる。
・【46-1】海外の連携機関との間で混合給与を活用し，国際公募を積極的に実施することにより，外国人研究者の採用を促進する。
【４７】国際間の研究交流を促進するため，及び第一線の国際的研究者の能力を活用するため，外国人研究者の招へいを６年間で約 20% 増加させる。
・【47-1】外国人客員制度の見直しや戦略的国際研究交流加速事業により，外国人研究者の招へいを促進する。
【４８】機構の研究活動の国際的評価や国際共同事業等の推進のため，ネット会議等の利用を含めた国際的な会議・打合せの回数を６年間で約 20% 増加させる。
・【48-1】機構の研究活動の国際的評価や国際共同事業等の推進のため，ネット会議等の利用を含めた国際的な会議・打合せを積極的に行う。
【４９】本機構のグローバリゼーションを推進するための基盤を整備するため，来訪外国人の要望にきめ細かく対応した外国人研究者の宿泊施設の確保やサポートスタッフの拡充などを行う。
・【49-1】グローバリゼーションを推進するための基盤を整備するため，会議における同時通訳等のサポートの拡充，滞在時の各種手続き支援，アンケート調査の実施などを通して，外国人研究者へのサービスの改善を図る。

（２）大学共同利用機関法人間の連携に関する目標を達成するための措置
【５０】４大学共同利用機関法人間の連携を強化するため，大学共同利用機関法人機構長会議の下で，計画・評価，異分野融合・新分野創成，事務連携などに関する検討を進める。特に，４機構連携による研究セミナー等の開催を通じて異分野融合を促進し，異分野融合・新分野創成委員会において，その成果を検証して次世代の新分野について構想する。また，大学共同利用機関法人による共同利用・共同研究の意義や得られた成果を４機構が連携して広く国民や社会に発信する。
・【50-1】大学共同利用機関法人機構長会議の下の評価検討委員会，異分野融合・新分野創成委員会及び事務連携委員会において４機構が連携して各種検討を進める。
・【50-2】４機構連携による研究セミナー等を開催するとともに，異分野融合・新分野創成委員会においてその成果を検証する。
・【50-3】大学共同利用機関法人による共同利用・共同研究の意義や得られた成果を４機構が連携して広く国民や社会に発信するため，ターゲットを絞った戦略的な内容とするなどパンフレットの作成過程において一層の検討を加える。

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
【５１】社会のニーズを的確に反映し，幅広い視点での自立的な運営改善に資するため，経営協議会及び教育研究評議会からの指摘事項等への対応を１年以内に行うとともに，フォローアップを毎年度実施する。
・【51-1】役員会や経営協議会，教育研究評議会等を開催して，研究の促進や運営改善に向けた不断の点検を行う。特に，外部委員の意見・指摘事項等についての対応を１年以内に行うとともに，フォローアップを実施し，必要な改善を行う。
【５２】専門分野ごと又は境界領域・学際領域ごとに，外部評価における提言や外部の学識経験者からの指導・助言に基づき，指摘から１年以内に，研究活動計画，共同利用・共同研究等における重要事項の改善を行う。
・【52-1】各機関の運営会議等や外部評価において，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１年以内に実施し，効率的な運営を進める。また，分子科学研究所では，豊富な学識経験者を顧問に任命し，その指導・助言に基づき改善を進める。
【５３】機構長のリーダーシップの下で機構の強みや特色を生かし，教育，研究，社会貢献の機能を最大化できるよう，権限と責任が一致した意思決定システムの確立や，法人運営組織の役割分担を明確化するとともに，新たに対応が求められる事案については，担当理事を明確化する。また機構長を補佐する体制の強化を図る。
・【53-1】権限と責任が一致した意思決定システムの確立や法人運営組織の役割分担を明確化するための関係規程の見直しを検討する。また，新たに対応が求められる事案については，担当理事を明確化することにより機構長を補佐する体制の強化を図る。
【５４】監事機能の強化を図るとともに，サポート体制を強化するため，監事が機構長選考方法や法人内部の意思決定システムをはじめとした法人のガバナンス体制等についても監査するとともに，内部監査組織と連携する。
・【54-1】監事機能の強化を実効的なものとするため，監事と機構長の定期的な意見交換の機会を検討する。また，監事と内部監査組織が連携して機構全体の監査を行うとともに，情報共有が図れる体制の構築を検討する。
【５５】優秀な若手・外国人の増員や研究者の流動性向上などにより教育研究の活性化を図るため，クロスアポイントメントを含む混合給与及び研究教育職員における年俸制の活用による人事・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，業績評価体制を明確化し，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し，年俸制職員の割合を第３期中期目標期間終了時までに全研究教育職員の 25% 以上に引き上げる。また，若手研究者の割合は，第３期中期目標期間中において全研究教育職員の 35% 程度を維持する。
・【55-1】混合給与の導入を進めるとともに，年俸制導入に関する計画等に基づき年俸制の活用を進める。
【５６】職員の研究に対するインセンティブを高めるため，職員の適切な人事評価を毎年度行い，問題点の把握や評価結果に応じた処遇を行う。また，URA（University Research Administrator）などの高度な専門性を有する者等，多様な人材の確保と，そのキャリアパスの確立を図るため，URA と研究教育職員等との相互異動など多様な雇用形態のロールモデルを構築する。
・【56-1】職員の適切な人事評価を行い，問題点の把握や評価結果に応じた処遇を行う。また，URA のキャリアパスの確立に向けた検討を行う。

【５７】技術職員，事務職員の資質と専門的能力の向上を図るため，職能開発，研修内容を充実するとともに，自己啓発の促進並びに研究発表会，研修等への積極的な参加を促す。事務職員については，機構全体を対象として，各役職・業務に応じた研修を毎年度５回以上実施する。

・【57–1】技術職員については，技術研究会の内容の見直しを行い，技術交流を発展させる。事務職員については，機構全体を対象として，各役職・業務に応じた研修を５回以上実施する。

【５８】女性研究者を積極的に採用し，女性研究者の割合を第３期中期目標期間終了時までに 13% に引き上げる。また，新たな男女共同参画推進アクションプログラムを設定･実行することにより，男女共同参画の環境を整備･強化する。さらに，出産，育児，介護支援など様々なライフステージにおいて柔軟な就労制度を構築する。

・【58–1】新たな男女共同参画推進アクションプランの策定と実行を通して，男女共同参画の環境を整備・強化し，女性研究者を積極的に採用する施策を講じる。また，ライフステージにおける柔軟な就労制度の構築を進める。

２　教育研究組織の見直しに関する目標を達成するための措置

【５９】各分野の研究動向の詳細な把握の上で，機構長のリーダーシップの下，機構長を議長とした研究基盤戦略会議において，機能強化及び資源の再配分の方針の策定を行うとともに，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。

・【59–1】各分野の最新の研究動向を踏まえ，研究基盤戦略会議において，機能強化及び資源の再配分の方針を策定するとともに，アストロバイオロジーセンターの運営の評価を行う。

【６０】研究基盤戦略会議における機能強化の方針，資源の再配分を始めとした組織改革の方針に基づき，各機関等において，教育研究組織の再編・改革等を行う。

・【60–1】研究基盤戦略会議における機能強化や組織改革の方針，及び運営の評価に基づき，アストロバイオロジーセンターにおいて組織の見直し等を行うとともに，各機関において研究動向を踏まえた組織の改編を行う。

３　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

【６１】事務局と各機関及び他機構の事務部門との連携を強化し，事務の共同実施等による事務処理の効率化を進める。また，テレビ会議システムによる会議開催を促進し，機構内会議に占めるテレビ会議の比率を，前年度比１以上とする。さらに，経費の節減と事務等の合理化を図るため，第３期中期目標期間終了時までに，すべての機構内会議においてペーパーレス化を導入する。

・【61–1】経費の節減と事務等の合理化を図るため，職員向け Web サイトの充実による情報共有の効率化や，テレビ会議システムによる会議開催を促進する。また，役員会及び機構会議等の各種会議において，ペーパーレス化を導入する。

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

【６２】外部研究資金の募集等の情報を広く収集し，周知を徹底することにより，応募，申請を促し，受託研究等収入，共同研究等収入，寄附金収入，科学研究費助成事業収入など多様な収入源を確保する。

・【62–1】外部研究資金その他の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

【６３】人件費以外の経費について，増減要因の分析を踏まえ，毎年度，経費の節約方策を定める。また，不使用時の消灯やペーパーレスなど経費の節減に関する教職員の意識改革を行う。さらに，各機関や他大学等の節約方法に関する情報の共有化を通じ，経費の削減につなげる。

・【63–1】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及びこれを踏まえた節約方策を定めるほか，各機関の節減事例を共有し，契約方法を見直すなど経費削減に努める。

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

【６４】固定資産について，各機関の使用責任者による実地検査を行い，６年間ですべての資産の実地検査を行う。また，資産管理部署においても使用状況を定期的に検証し，利用率の低い資産や所期の目的を達した資産については，機構全体的な観点から活用方策を検討するなど，資産の不断の見直しを行う。

・【64–1】各機関の使用責任者による実地検査のほか，資産管理部署による使用状況の確認を実施し，所期の目的を達成し，活用されていない資産を公開した Web ページの情報内容について周知徹底を図るとともに，人事流動性を活かした柔軟な資産の受入・移譲を通じて，固定資産の有効活用を図る。

【６５】機構直轄管理の施設の運用促進に取り組むとともに，これまでの運用状況を踏まえ，将来に向けた運用計画を検討し，平成 30 年度までに，運用継続の可否を含めた結論を得る。

・【65–1】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」については，平成 29 年度以降の運用について検討し，結論を得る。さらに，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」については，運用の促進を図る。

IV　自己点検・評価及び当該状況に係る情報の提供に関する目標を達成するためにとるべき措置

１　評価の充実に関する目標を達成するための措置

【６６】国際的見地から研究体制及び共同利用・共同研究体制について，様々な機構外の者の意見を反映させ，定期的に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，当該意見に応じて見直しを行う。

・【66–1】国際的見地から研究体制及び共同利用・共同研究体制について，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。

【６７】本機構の業務運営を改善するため，各機関の IR 機能の連携により機構全体の IR 機能を強化するとともに，平成 30 年度に機構全体の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。

・【67–1】従来の研究分析ツールに加え，研究者ごとの分析や将来的な NOUS との連携を見据えた新たな分析ツールを導入するとともに，当該分析ツールを機関間の連携を密にして活用することにより，業務運営を改善するための機構全体の IR 機能を強化する。

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

【６８】機構シンポジウムを毎年度２回実施するとともに，ホームページ，プレスリリース，定期刊行物などの充実や，一般公開の実施を通して，本機構の研究を含む諸活動の状況を，積極的に社会に発信する。特に，国際化の観点から，英文のホームページを更に充実させ，そのアクセス数を増やすとともに，海外へのプレスリリース件数を６年間で 20% 増加するなど，多様な伝達手段を活用し，海外への情報発信をより積極的に行う。

・【68–1】機構本部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，シンポジウムや一般公開の開催，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。また海外への発信力を強化するため，積極的に海外へプレスリリースを行うとともに，英文による情報発信の強化方策を検討する。

Ⅴ　その他業務運営に関する重要目標を達成するためにとるべき措置

1　施設設備の整備・活用等に関する目標を達成するための措置

【６９】グローバル化の推進やイノベーションの創出など教育研究の質の向上の観点から，国の財政措置の状況を踏まえ，キャンパスマスタープランの年次計画に沿った研究施設・設備等の充実を図る。

・【69–1】教育研究の質の向上に対応するため，各機関のキャンパスマスタープランの年次計画に沿った研究施設・設備等の充実のための計画的な整備並びに予算確保を図る。

【７０】施設マネジメントポリシーの点検・評価に基づき，重点的かつ計画的な整備を進め，施設整備の見直しを毎年度実施し，施設の効率的かつ効果的な活用を図る。

・【70–1】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。

【７１】施設・設備の安全性・信頼性を確保し，所要の機能を長期間安定して発揮するため，計画的な維持・保全を行う。

・【71–1】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

【７２】施設・設備及び機器の安全管理，教育研究及び職場環境の保全並びに毒物劇物，放射性同位元素，実験動物，遺伝子組み換え生物等の適正な管理を行うため，既存の安全管理・危機管理体制を検証し，体制の見直しを行う。また，関係行政機関との防災に係る相互協力体制を確立させ，毎年度，連携した訓練を行う。

・【72–1】施設・設備及び機器の安全管理を徹底し，事故・故障の未然防止に努めるとともに，毒物劇物，放射性同位元素，実験動物，遺伝子組み換え生物等の適正な管理を徹底する。また，防災マニュアルの見直しを行い，役職員への周知を徹底するとともに，関係行政機関と連携した防災訓練を行う。

【７３】職員の過重労働及びそれに起因する労働災害を防止するため，労働災害の要因調査・分析を行うとともに，メンタルヘルスケアのためのストレスチェック及び講習会を毎年度実施する。

・【73–1】職員の過重労働に起因する労働災害の防止策について，安全衛生委員会等で検討し，長期間に渡る過重労働が見られる部署に対する是正指導など，必要な対策を講じる。また，メンタルヘルスケアのためのカウンセリングやストレスチェックを行う。

【７４】情報システムや重要な情報資産への不正アクセスなどに対する十分なセキュリティ対策を行うとともに，セキュリティに関する啓発を行う。また，本機構のセキュリティポリシーや規則などを毎年度見直し，それらを確実に実行する。

・【74–1】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い，セキュリティの向上に努めるとともに，情報セキュリティポリシーの周知徹底やセキュリティセミナーの実施を通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有用な情報やセキュリティインシデントの迅速な機構内共有を図る。

3　法令遵守に関する目標を達成するための措置

【７５】職員就業規則などの内部規則の遵守を徹底するため，幹部職員を含む全職員を対象とした服務規律やハラスメント等に関する研修を毎年度実施する。

・【75–1】職員就業規則などの内部規則の遵守を徹底するため，幹部職員を含む全職員を対象とした服務規律やハラスメント等に関する研修を実施し，周知徹底を図る。

【７６】研究活動における不正行為及び研究費の不正使用を防止するため，組織の管理責任体制を明確化し，e ラーニングによる研究倫理教育，各種啓発活動の実施，競争的資金等の不正使用防止に係るコンプライアンス教育等を毎年度実施するとともに，その効果を定期的に検証し，実効性を高める。

・【76–1】研究活動における不正行為及び研究費の不正使用を防止するため，各機関の管理責任者による不正行為防止計画及び不正使用防止計画の実施状況の検証を行う。また，e ラーニングによる研究倫理教育を実施するとともに，各種啓発活動の実施，競争的資金等の不正使用防止に係るコンプライアンス教育等を実施する。