「分子研リポート 2016」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　運営会議 9
2-4-4　運営会議人事選考部会 9
2-4-5　運営会議共同研究専門委員会 10
2-4-6　学会等連絡会議 10
2-4-7　教授会議 11
2-4-8　主幹・施設長会議 11
2-4-9　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　2016 年度の実施状況 38
3-3-3　共同利用研究実施件数一覧 54
3-4　国際交流と国際共同研究 56
3-4-1　外国人客員部門等及び国際交流 56
3-4-2　岡崎コンファレンス 60
3-4-3　日韓共同研究 71

3-5　大学院教育 73
3-5-1　特別共同利用研究員 73
3-5-2　総合研究大学院大学二専攻 74
3-5-3　オープンキャンパス・分子研シンポジウム 78
3-5-4　夏の体験入学 78
3-5-5　総研大アジア冬の学校 80
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 80
3-5-7　統合生命科学教育プログラム 81

4．研究支援等 83
4-1　技術課 84
4-1-1　技術研究会 84
4-1-2　技術研修 87
4-1-3　人　事 88
4-1-4　受　賞 88
4-2　安全衛生管理室 89
4-3　社会との交流 90
4-3-1　自然科学研究機構シンポジウム 90
4-3-2　大学共同利用機関シンポジウム 91
4-3-3　分子科学フォーラム 92
4-3-4　分子研コロキウム 92
4-3-5　岡崎市民大学講座 94
4-3-6　その他 94
4-4　理科教育への協力 95
4-4-1　スーパーサイエンスハイスクール 95
4-4-2　あいち科学技術教育推進協議会 95
4-4-3　国研セミナー 96
4-4-4　小中学校での出前授業 97
4-4-5　職場体験学習 99
4-4-6　その他 100
4-5　一般公開 101
4-6　見学者受け入れ 102

5．各種事業 105
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） 107
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） 110
5-3　イメージング・サイエンス（自然科学研究機構） 112
5-3-1　経緯と現状 112
5-3-2　実施された主な行事 113
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） 114
5-5　ナノテクノロジープラットフォーム事業「分子・物質合成プラットフォーム」
（文部科学省） 115

5-6　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
5-6-1　はじめに.....127
5-6-2　重点課題⑤研究課題について.....127
5-6-3　重点課題⑤実施体制について.....128
5-6-4　平成 28 年度の活動について.....129
5-6-5　今後の課題と取組みについて.....129
5-7　最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム（文部科学省）.....130
5-8　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
5-9　分子科学国際共同研究拠点の形成.....133
5-9-1　国際共同研究事業の財源.....133
5-9-2　分子研国際インターンシッププログラム（IMS-IIP）.....134
5-9-3　分子研アジア国際インターンシッププログラム（IMS-IIPA）.....135
5-9-4　短期外国人研究者招へいプログラム.....136
5-9-5　分子科学アジアコア多国間国際共同事業.....137
5-10 研究大学強化促進事業（文部科学省）.....139
5-11 自然科学研究における機関間連携ネットワークによる拠点形成事業（自然科学研究機構）.....140

6．研究領域の現状.....141
6-1　論文発表状況.....141
6-2　理論・計算分子科学研究領域.....142
理論分子科学第一研究部門.....142
理論分子科学第二研究部門.....153
計算分子科学研究部門.....157
理論・計算分子科学研究部門.....167
6-3　光分子科学研究領域.....171
光分子科学第一研究部門.....171
光分子科学第二研究部門.....176
光分子科学第三研究部門.....181
光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）.....190
光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）.....193
光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）.....195
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）.....199
6-4　物質分子科学研究領域.....214
電子構造研究部門.....214
電子物性研究部門.....218
分子機能研究部門.....221
6-5　生命・錯体分子科学研究領域.....227
生体分子機能研究部門.....227
生体分子情報研究部門.....244
錯体触媒研究部門.....248
錯体物性研究部門.....255
6-6　協奏分子システム研究センター.....260
階層分子システム解析研究部門.....260
機能分子システム創成研究部門.....274

７．点検評価と課題.....281
7-1　外国人運営顧問による点検評価.....282
7-1-1　Ron Naaman 外国人運営顧問.....282
7-1-2　Peter J. Rossky 外国人運営顧問.....287
7-2　UVSOR 施設の点検評価.....295

８．研究施設の現状と将来計画.....297
8-1　極端紫外光研究施設（UVSOR）.....298
8-2　協奏分子システム研究センター.....299
8-3　分子制御レーザー開発研究センター.....300
8-4　機器センター.....303
8-5　装置開発室.....305
8-6　計算科学研究センター.....306
8-7　岡崎統合バイオサイエンスセンター.....309

９．資　　料.....311
9-1　歴代所長.....311
9-2　評議員（1976 ～ 1981）.....312
9-3　評議員（1981 ～ 2004）.....313
9-4　運営顧問（2004 ～）.....317
9-5　外国人評議員（1976 ～ 2004）.....318
9-6　外国人運営顧問（2004 ～）.....319
9-7　運営に関する委員会委員（1975 ～ 1981）.....320
9-8　運営協議員（1981 ～ 2004）.....321
9-9　運営会議委員（2004 ～）.....325
9-10 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.....327
9-11 自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則.....328
9-12 自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則.....331
9-13 大学共同利用機関法人自然科学研究機構中期目標（第三期，平成 28 ～ 34 年度）.....332
9-14 大学共同利用機関法人自然科学研究機構中期計画（第三期，平成 28 ～ 34 年度）.....334
9-15 大学共同利用機関法人自然科学研究機構年度計画（平成 29 年度）.....339

1．序　　言

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

このリポートには，2016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）「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」，（2）「ポスト「京」重点課題⑤：エネルギーの効率的な創出，変換・貯蔵，利用の新規基盤技術の開発」，（3）「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」，（4）「ナノテクノロジープラットフォーム」，（5）理研との共同による「エクストリームフォトニクス研究」，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（1）分子研国際インターンシッププログラム（IMS-IIP）と（2）分子研国際若手研究者招聘プログラムなどの特徴ある国際共同を推進しています。前者は，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目的として，日本国際協力センターの21世紀東アジア青少年大交流計画（JENESYS Program）を使った事業として開始しました。その予算がなくなった時点で発展的に見直し，現在，自然科学研究機構及び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，2016年度には多くの助教の若いメンバーと同時に，理論・計算分子科学研究領域に石崎章仁教授，藤田貴敏特任准教授（若手独立フェロー），岡崎圭一特任准教授（若手独立フェロー）が着任され，分子研の新たな飛躍への期待が高まりました。

2016年度は法人化第３期の初年度にあたります。新たに菊池昇豊田中央研究所長，畫馬明浜松ホトニクス社長，瀧川仁東京大学物性研所長そして，松本吉泰京都大学教授に運営顧問に就任いただきました。12月７日に岡崎にて運営顧問会議を開催し，分子研の活動を紹介し今後の運営に対する助言をいただきました。2016年３月上旬には，イスラエルのワイツマン科学研究所のRon Naaman教授，３月下旬には米国ライス大学のPeter J. Rossky教授によって物質分子科学研究領域，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の研究グループを中心にヒアリングをしていただきました。各グループの研究内容の評価とともに，研究所の全体的な運営に関する貴重な提言もいただきました。両教授からの貴重な評価，提言が本リポートに掲載されています。

第２期中期計画の６年間，分子科学研究所を世界トップレベルの研究所として牽引されてきた大峯巖先生は昨年３月31日に任期満了で退職され，４月１日付で分子研の名誉教授になられました。４月１日から所長としてこの素晴らしい研究所の運営に携われることは，私にとって大きな喜びであると同時に，大峯前所長が守って来られた分子研のブランドをさらに継続することに大きな責任を感じています。2016年７月からは，岡本裕巳教授を研究総主幹とする新しい運営体制が始まりました。これまで以上に輝く研究所であり続けるために，多くの皆様のお知恵とお力添えを賜りたく，お願い申し上げます。

2017年３月

自然科学研究機構

分子科学研究所　所長

川合　眞紀

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。

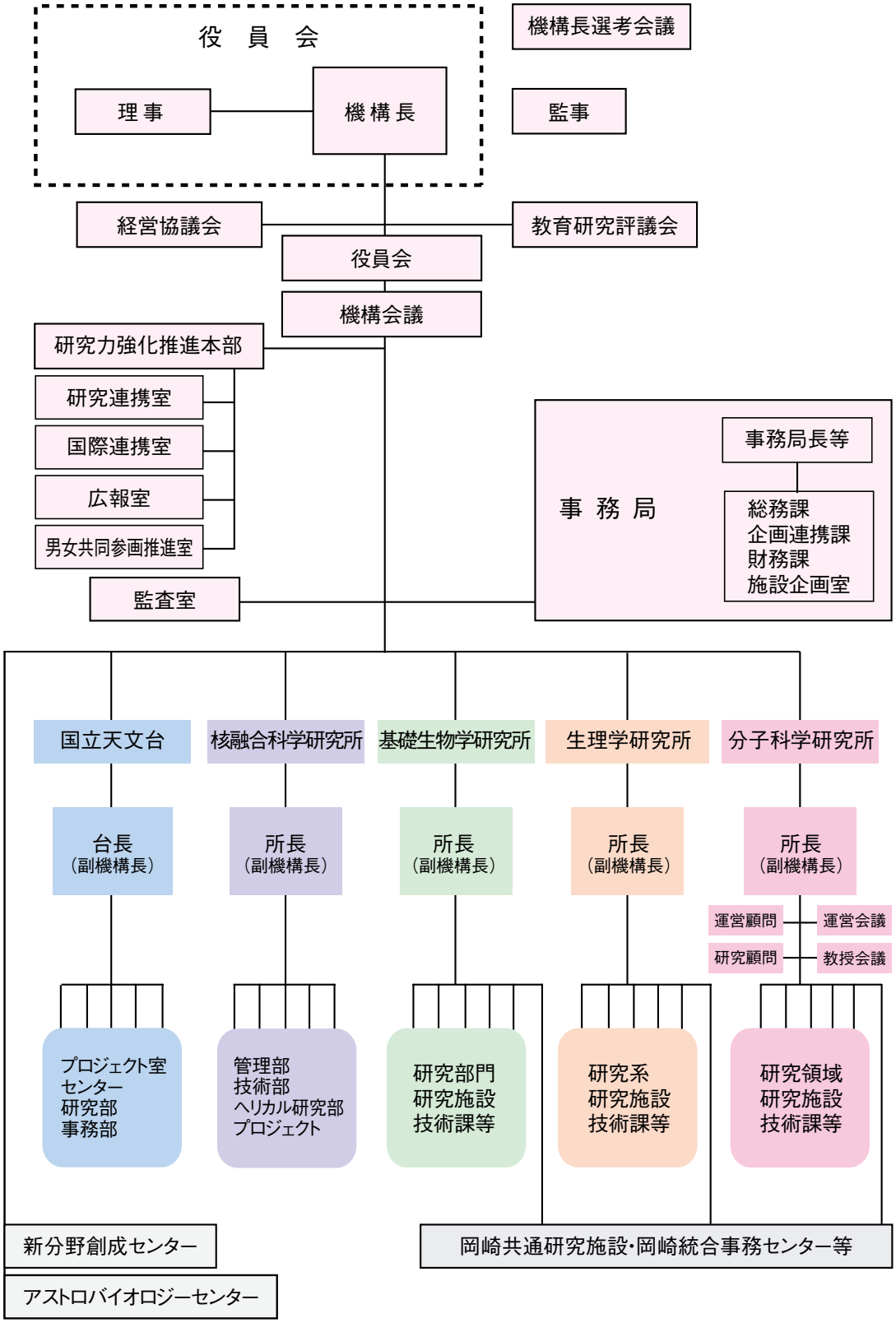
2013. 10. 1　広報室及び史料編纂室が廃止され，研究力強化戦略室が設置された。

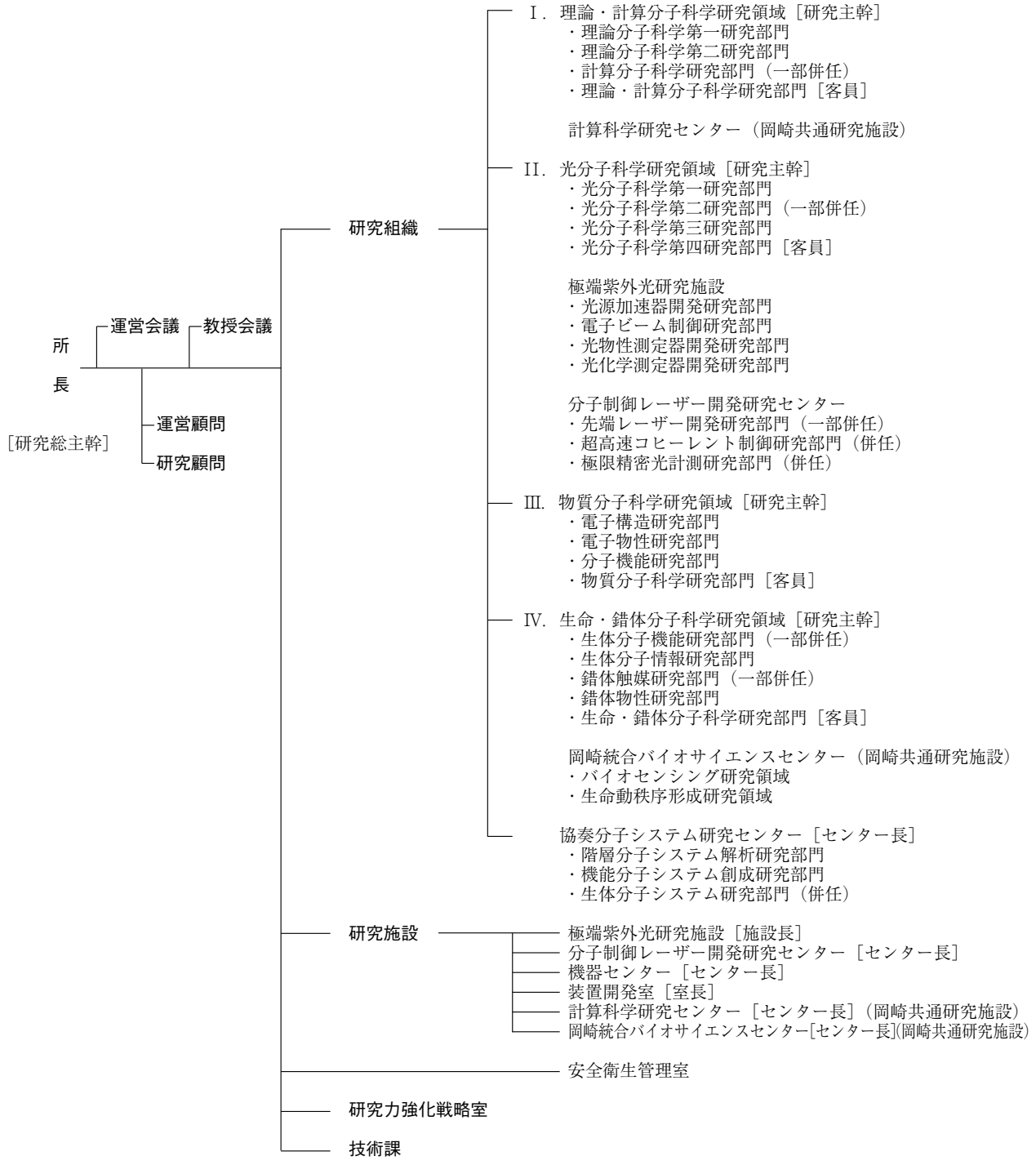
2013. 12. 6　極端紫外光研究施設創設 30 周年記念式典が挙行された。

2016. 4. 1　第八代研究所長に川合眞紀東京大学大学院新領域創成科学研究科教授，理化学研究所理事長特別補佐が任命された。

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。第三期中期計画期間（2016年度～2021年度）に入り，体制を見直すこととなり，当面国内の４名で運用を開始した。

運営顧問（2016年度）

菊　池　　昇	株式会社豊田中央研究所代表取締役所長
晝　馬　　明	浜松ホトニクス株式会社代表取締役社長
瀧　川　　仁	東京大学物性研究所所長・教授
松　本　吉　泰	京都大学大学院理学研究科教授

外国人運営顧問（2016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。第三期中期計画期間に体制を見直すこととしており，具体的な人選は現在進行中である。

2-4-3　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 2016.4-2018.3）（◎：議長　○：副議長）

○	有賀　哲也	京都大学大学院理学研究科教授・副学長
	大西　洋	神戸大学大学院理学研究科教授
	米田　忠弘	東北大学多元物質科学研究所教授
	鈴木　啓介	東京工業大学理学院化学系教授
	高田　彰二	京都大学大学院理学研究科教授
	高原　淳	九州大学先導物質化学研究所教授
	田原　太平	理化学研究所田原分子分光研究室主任研究員
	西原　寛	東京大学大学院理学系研究科教授
	森　初果	東京大学物性研究所教授
	山口　茂弘	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
	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
	解良　聡	光分子科学研究領域教授
	小杉　信博	光分子科学研究領域教授
	斉藤　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

2-4-4　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（2016，2017 年度）（○：部会長）

有　賀　哲　也	（京大院教授）	秋　山　修　志	（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）
西　原　　寛	（東大院教授）	加　藤　晃　一	（統合バイオ教授）
森　　初　果	（東大物性研教授）	解　良　　聡	（分子研教授）
山　口　茂　弘	（名大 ITbM 教授）	○山　本　浩　史	（分子研教授）

2-4-5　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（2016，2017 年度）（○：委員長）

大　西　　洋	（神戸大院教授）	小　杉　信　博	（分子研教授）
北　川　　宏	（京大院教授）	斉　藤　真　司	（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）
中　澤　康　浩	（阪大院教授）	西　村　勝　之	（分子研准教授）
○青　野　重　利	（統合バイオ教授）	藤　　貴　夫	（分子研准教授）
魚　住　泰　広	（分子研教授）		

2-4-6　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（2016年度）

【所外委員】

（日本化学会推薦）

栗　原　和　枝　（東北大多元研教授）　　原　田　　明　（阪大院特任教授）

渡　辺　芳　人　（名大物質科学セ教授）

（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　（東北大多元研教授）　　菱　川　明　栄　（名大物質科学セ教授）

松　本　吉　泰　（京大院教授）　　吉　澤　一　成　（九大先導研教授）

（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）　　斉　藤　真　司　（分子研教授）

横　山　利　彦　（分子研教授）

2-4-7　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。

2-4-8　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。

2-4-9　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	−
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	2017.3.17
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	2016.8.4, 2017.2.14
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	2017.2.27
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	2016.10.17
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	2016.6.3, 9.12, 12.7, 2017.2.27 （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	2016.6.3, 7.1, 8.4, 9.7, 10.3, 10.20, 12.2

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		2016.4.5, 6.10, 7.1, 10.14, 12.2, 2017.3.3
特別共同利用研究員受入審査委員会	他大学大学院からの学生の受入れ及び修了認定等に関する諸事項の調査，審議を行う。	各研究主幹及び各研究領域の教授又は准教授１名	委員会要領	随時持ち回り審議

設置根拠の欄　分子科学研究所で定めた規則，略式で記載。記載なきは規定文なし。
表以外に，分子研コロキウム係，自衛消防隊組織がある。

(2)　岡崎３機関の各種委員会等

会議の名称	設置の目的・審議事項	分子研からの委員	設置根拠等	実施日
岡崎３機関所長会議	研究所相互に関連のある管理運営上の重要事項について審議するとともに円滑な協力関係を図る。	所長	所長会議運営規則	2016.4.19, 5.17, 6.21, 7.19, 9.20, 10.20, 11.15, 12.20, 2017.1.17, 2.21, 3.21
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	2016.7.7
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	−
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	2016.5.18, 7.29, 9.28, 12.5
岡崎共同利用研究者宿泊施設委員会	宿泊施設（ロッジ）の運営方針・運営費に関すること。	担当責任所長 教授１	委員会規則	2016.7.29, 2017.1.16
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	2017.1.16
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	2017.3.24
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	2016.4.29, 5.17, 6.21, 7.19, 8.16, 9.20, 10.18, 11.15, 12.20, 2017.1.17, 2.21, 3.13

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	2016.10.20
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	2016.5.9, 7.5, 12.2
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	2017.2.6
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	2016.8.25, 2017.3.2
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	2016.7.5
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	－
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	2016.6.29
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	2016.5.11, 7.13, 9.12, 11.7（メール審議）， 2017.1.11, 3.8
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	2016.10.17, 12.2
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	2016.4.8
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	2016.12.2
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	2016.5.30

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*

川　合　眞　紀	所　長
岡　本　裕　巳	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
大　峯　　巖	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）　斉　藤　真　司

理論分子科学第一研究部門

斉　藤　真　司	教　授
森　　俊　文	助　教
甲　田　信　一	助　教
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
竹　内　　嵩	特任研究員
柳　井　　毅	准教授
XIONG, Xiao-Gen	学振外国人招へい研究者　'16.4.1 ～ '17.1.31
加　藤　隆　士	特任専門員

理論分子科学第二研究部門

石　崎　章　仁	教　授

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）
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）
石　村　和　也	特任研究員

理論・計算分子科学研究部門（客員研究部門）

重　田　育　照	教　授（筑波大院数理物質系）
加　藤　　毅	准教授（東大院理）
永　田　勇　樹	准教授（独 Max-Planck Inst.）
藤　田　貴　敏	特任准教授（若手独立フェロー）
岡　崎　圭　一	特任准教授（若手独立フェロー）

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
LE, Quang Khai	研究員
大　島　康　裕	教　授（委嘱）（東工大理学院化学系）

光分子科学第二研究部門

大　森　賢　治	教　授
武　井　宣　幸	助　教
武　田　俊太郎	助　教
田　中　　陽	特任助教（分子科学研究所特別研究員）
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
MEISSNER, Matthias	研究員（IMS フェロー）
米　澤　恵一朗	学振特別研究員
KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika	特別訪問研究員
片　㑹　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（東工大理学院物理学系）
岸　本　哲　夫	准教授（電気通信大院情報理工）

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
CHAVEANGHONG, Suwilai	研究員
中　村　高　大	特任研究員
YU, Liwei	特任研究員
小　出　明　広	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
浅　田　瑞　枝	特任助教(分子科学研究所特別研究員)

分子機能研究部門

平　本　昌　宏	教　授
伊　澤　誠一郎	助　教
西　村　勝　之	准教授
永　井　篤　志	助　教
GU, Cheng	学振外国人特別研究員　'14.4.1 ～ '16.6.30

物質分子科学研究部門（客員研究部門）

中　村　雅　一	教　授（奈良先端大物質創成）
吉　川　浩　史	准教授（関西学院大理）
田　嶋　尚　也	准教授（東邦大理）

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	助　教
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)
福　田　真　悟	特任研究員
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　池　美　彦	助　教(併)
古　谷　祐　詞	准教授
塚　本　寿　夫	助　教

錯体触媒研究部門

魚　住　泰　広	教　授
大　迫　隆　男	助　教
浜　坂　　剛	助　教
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
PUTRA, Anggi Eka	研究員
YAN, Shuo	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）
椴　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

正　岡　重　行	准教授
近　藤　美　欧	助　教
KOOMBIL KUMMAYA, Praneeth V.	研究員
岡　村　将　也	特別訪問研究員

生命・錯体分子科学研究部門（客員研究部門）

生　越　専　介	教　授（阪大院工）
荘　司　長　三	准教授（名大院理）
當　舎　武　彦	准教授（理研放射光）

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
藤　本　將　輝	助　教

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
森　脇　由　隆　　学振特別研究員
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）
小　林　玄　器　　特任准教授（若手独立フェロー）
斉　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
川　口　玄　太　　特任助教（分子科学研究所特別研究員）
鈴　木　敏　泰　　准教授
阪　元　洋　一　　助　教
東　林　修　平　　助　教
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
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）　解　良　　聡
横　山　利　彦　　教　授（併）
中　尾　　聡　　研究員
野　田　一　平　　研究員
大　原　三　佳　　特任研究員
遠　山　　遊　　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)　岡　本　裕　巳
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)
村　木　則　文　　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
鈴　木　達　哉　　特任研究員
飯　野　亮　太　　教　授
中　村　彰　彦　　助　教
河　合　文　啓　　研究員
栗　原　顕　輔　　特任准教授
WEN, Hsin-I　　研究員
倉　橋　拓　也　　助　教(兼)

計算科学研究センター　センター長(併)　斉　藤　真　司
斉　藤　真　司　　教　授(兼)
江　原　正　博　　教　授
PRIYAKUMAR, U. Deva　学振外国人招へい研究者　'16.4.18 ～ '16.6.16
奥　村　久　士　　准教授
伊　藤　　暁　　助　教(兼)
西　澤　宏　晃　　学振特別研究員
石　田　干　城　　助　教(兼)
大　野　人　侍　　助　教

技術課　課長　鈴　井　光　一

機器開発技術班　班長

機器開発技術一係

水　谷　伸　雄	係　長

機器開発技術二係

近　藤　聖　彦	主　任
高　田　紀　子	係　員
中　野　路　子	係　員

（機器開発技術班）

木　村　幸　代	特任専門員
小　杉　優　太	特任専門員

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
手　島　史　綱	主　任

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
矢　野　隆　行	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

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	係　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	係　員

計算科学技術二係

長　屋　貴　量	係　員

計算科学技術三係

内　藤　茂　樹	主　任
澤　　昌　孝	係　員

学術支援班　班長　山　中　孝　弥

学術支援一係

賣　市　幹　大	係　員

学術支援二係

内　山　功　一	係　長

（極端紫外光研究施設）

稲　垣　裕　一	特任専門員

＊　整理日付は2017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。平成 29 年度より，新たに主任研究員制度の運用を開始するほか，法人化によって長らく運用を停止していた流動研究部門制度についても多少の制度変更を加えた上での運用再開を検討している。

(2)　創立以来の人事異動状況（2017 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	8	49	79	276	155	5	23	228
転出者数	7	37	66	237	123	1	17	226
現　　員	1	12(2)	13	39	32	4	6	2

（　）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	151	166
現　　員	4	9

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

2017.1.1

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		2(3)	2(3)	5	9(6)		9(6)
光分子科学研究領域		4(2)	0(4)	7	11(6)		11(6)
物質分子科学研究領域		2(2)	2(2)	4(1)	8(5)		8(5)
生命・錯体分子科学研究領域		1(5)	3(2)	9(3)	13(10)		13(10)
研究施設		3(7)	6(2)	14	23(9)		23(9)
技術課						32	32
小計	1	12(19)	13(13)	39(4)	65(36)	32	97(36)
岡崎統合バイオサイエンスセンター		3	0	1(4)	4(4)		4(4)
計算科学研究センター		1(1)	1	(2)	2(3)		2(3)
合計	1	16(20)	14(13)	40(10)	71(43)	32	103(43)

（　）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	2012 年度	2013 年度	2014 年度	2015 年度	2016 年度
人件費	1,126,099	1,068,438	1,118,692	1,174,409	1,173,853
運営費，設備費	2,133,268	2,766,023	2,287,785	2,197,850	2,136,073
施設費	31,269	322,686	22,820	21,492	31,528
合計	3,290,636	4,157,147	3,429,297	3,393,751	3,341,454

寄付金

区　分	2012 年度	2013 年度	2014 年度	2015 年度	2016 年度
件数（件）	11	10	23	18	12
金額（千円）	13,340	7,125	21,648	18,140	15,920

共通研究施設を除く

科学研究費補助金

区　分	2012 年度	2013 年度	2014 年度	2015 年度	2016 年度
件数（件）	61	60	68	56	65
金額（千円）	236,700	222,310	265,990	239,580	487,690

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，当該年度の支払請求額を計上

2016 年度科学研究費助成事業　　2016 年 12 月 15 日現在

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		1	0	1
新学術領域研究	領域	7	7	14
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		5	1	6
若手研究	（S）	0	0	0
若手研究	（A）	8	0	8
若手研究	（B）	12	2	14
基盤研究	（S）	0	0	0
基盤研究	（A）	7	0	7
基盤研究	（B）	7	2	9
基盤研究	（C）	10	0	10
特別研究員奨励費		4	1	5
特別研究員奨励費	外国人	1	0	1
研究活動スタート支援		3	1	4
奨励研究		0	0	0
合計		65	14	79

＊分担金受入件数を除く

受入額一覧　（単位：千円）

研究種目		分子科学研究所	岡崎共通研究施設	合計
学術創成研究費		0	0	0
特別推進研究		157,400	0	157,400
新学術領域研究	領域	55,100	56,000	111,100
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		4,300	1,500	5,800
若手研究	（S）	0	0	0
若手研究	（A）	40,300	0	40,300
若手研究	（B）	16,700	1,800	18,500
基盤研究	（S）	0	0	0
基盤研究	（A）	57,300	0	57,300
基盤研究	（B）	23,000	8,300	31,300
基盤研究	（C）	13,300	0	13,300
特別研究員奨励費		3,500	600	4,100
特別研究員奨励費	外国人	1,100	0	1,100
研究活動スタート支援		3,400	1,000	4,400
奨励研究		0	0	0
合計		375,400	69,200	444,600

＊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，当該年度の支払請求額を計上

共同研究

区　分	2012 年度	2013 年度	2014 年度	2015 年度	2016 年度
件数（件）	10	8	5	4	9
金額（千円）	42,025	133,667	31,328	61,750	46,443

2016 年 12 月 31 日現在

受託研究

区　分	2012 年度	2013 年度	2014 年度	2015 年度	2016 年度
国	4	1	2	2	2
独立行政法人等	24	16	20	17	15
大学等	2	6	3	3	4
民間企業他	1	2	1	2	1
合計件数（件）	31	25	26	24	22
合計金額（千円）	1,287,601	884,761	932,110	998,355	936,655

（岡崎共通研究施設を含む）
2016 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（2016.12）岡崎情報図書館は雑誌 1,514 種（和 292，洋 1,222），単行本 96,465 冊（和 13,159，洋 83,306）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兼ね備えた職員証・入構証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，112 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。平成 27 年度より，三島ロッジの一部を大学院生用のシェアハウスとして貸与している。

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当初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，皮膚レーザー治療器，波長変換素子，パラジウム触媒による高効率炭素－炭素結合形成，含窒素環状化合物誘導体合成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27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９件，平成28年度は，個人有０件，機構有９件であった（平成28年12月31日現在)。

３．共同研究と大学院教育

大学共同利用機関としての分子科学研究所は，所外の分子科学及び関連分野の研究者との共同研究を積極的に推進しており，全国の研究者からの共同研究の提案を運営会議で審議し，採択された共同研究に対しては旅費及び研究費の一部を支給している。また，海外の研究者との共同研究に対しては，研究者の派遣及び相手国研究者招へいのために国際共同研究事業を行っている。特に，東アジア地域での分子科学の急速な発展に対応して，平成 18 年度から 22 年度において，日本学術振興会の支援により分子科学研究所が中心となり，アジアでの分子科学の協力研究体制の拠点ネットワークを作る目的で日本，韓国，中国，台湾の研究者が一堂に会するアジア研究教育拠点事業（Asian CORE プログラム）を行い，新領域創出による共同研究の萌芽を見いだす機会を設けた。平成 23 年度からは，このような取組をアジア地区に限定することなく，より国際的に発展・拡充するため，分子科学国際共同研究拠点形成事業を開始した。また，分子科学研究所は 21 世紀東アジア青少年大交流計画（JENESYS; Japan-East Asia Network of Exchange for Students and Youths）に積極的に参画し，毎年，ASEAN 諸国の拠点大学及び公募で選考された若手研究者と大学院学生を招へいし，人材の育成に努めてきた。また，平成 23 年度からは，post-JENESYS プログラムとして EXODASS（EXchange prOgram for the Development of Asian Scientific Society）プログラムを立ち上げ，アジア地区の若手研究者に，分子科学研究所に２週間～３ヶ月間滞在し，研究を行う機会を提供することにより，アジア地区における基礎研究の発展と研究ネットワーク構築に寄与した。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，凝縮系における反応・構造変化動力学と物性・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

理論分子科学第二研究部門

研究目的　　主として量子力学・統計力学に立脚した凝縮相分子系における動的現象および機能発現の理論計算研究

研究課題　1，凝縮相化学過程の量子ダイナミクス理論

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（若手独立フェロー）

研究目的　1，分子集合体の光電子物性とダイナミクスに関する理論・計算科学的研究
2，生体分子マシンの機能ダイナミクスの理論・計算手法による解明と，そのデザイン原理の探求

研究課題　1，有機半導体の励起子ダイナミクスの解析
2，機能性π共役系の光電子物性の解析
3，生体分子マシンの機能ダイナミクスの全原子・粗視化 MD 計算による解析
4，一分子実験・MD 計算データの統計力学的モデリング

理論・計算分子科学研究部門（客員）

研究目的　1，複合光応答をする分子の光物性の理論計算
2，分子の量子動力学計算のための理論開発と応用
3，水界面におけるミクロな構造とそのダイナミクスに関する研究

研究課題　1，３重項－３重項消光に基づくアップコンバージョン機構の理論解析
2，動的な厳密有効ポテンシャル理論の開発
3，グラフェンを使った水の浄化の研究

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，強相関・極低温リュードベリ原子気体を用いた超高速・多体電子ダイナミクスに関する研究

2，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

3，光電子分光法によるトポロジカル物性の研究

4，局所分光法による有機薄膜電子状態の次元依存性に関する研究

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・生体分子等の物性・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　　分子・物質材料の物理的・化学的新機能と機構解明

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　　分子集合体・生体分子の物性と機能

研究課題　１, 開殻系分子集合体や生体分子の磁気共鳴研究

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　　物質分子科学のコミュニティ交流を通した新しい先端的研究分野の開拓

研究課題　１, 有機系熱電材料とフレシキブル熱電変換デバイス

２, 分子性材料を電極とする二次電池の開発

３, ディラック電子系有機導体をチャネルとした FET 製作と量子輸送

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　　タンパク質や複合糖質等の生体分子が示す多彩な機能発現の詳細な分子機構を明らかにするとともに，生体分子や人工細胞の設計・創成を行う

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，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

3，生体分子モーターのエネルギー変換機構の解明，新規設計と実証

4，合成両親媒性分子を用いたベシクル型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，有機金属錯体触媒における反応中間体錯体と反応生成物との相関性を評価する手法の確立

2，生体触媒の基質特異性変換による高難度物質変換

3，酵素タンパク質の超分子複合体形成による効率的な細胞内連続化学反応の分子機構の解明

研究課題　1，不斉ニッケル触媒による反応中間体錯体と鏡像体過剰率との相関に関する研究

2，基質類似物質による酸化酵素の活性化とガス状アルカン水酸化

3，嫌気呼吸に関わる酵素タンパク質の複合体形成とその機能的意義の解明

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，ナノスケール曲面を有するグラフェン半導体分子
3，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，ポスト「京」重点課題アプリケーション開発　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」，同重点課題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」，科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業「計算物質科学人材育成コンソーシアム」の３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)」分子科学に関連した新しい研究分野開拓のための準備研究

(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　2016 年度の実施状況

(1)　課題研究

課　題　名	提案代表者	
生体微量元素科学の新基軸	大阪大学大学院工学研究科	伊東　忍
量子計測を用いた振動状態分光	分子科学研究所	鹿野　豊

(2)　協力研究

課　題　名（通年）	代　表　者	
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
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
シリセン・ゲルマネンヘテロ構造の電子状態測定	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	高村由起子
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
軟Ｘ線オペランド分光を利用した革新的水分解触媒の創生	慶應義塾大学理工学部	吉田　真明
熱変性を利用したタンパク質ミスフォールディング過程の理解と神経変性疾患	慶應義塾大学理工学部	古川　良明
キラルソフトマトリックス中のアキラル錯体への偏光照射によるキラル分子配向誘導	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
高強度 THz 励起時間分解光電子分光装置の開発	大阪大学大学院生命機能研究科	渡辺　浩
桂皮酸メチル誘導体の $^1n\pi^*$ 状態の探索と光異性化機構の解明	広島大学大学院理学研究科	江幡　孝之
環境適合型発光バイオマーカーを指向した希土類ナノ粒子の表面構造解析と化学修飾	島根大学教育学部	西山　桂

合成学的アプローチによる複合糖質の動的構造解析	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	山口　拓実
全反射照明蛍光・暗視野顕微鏡を利用した V_1-ATPase の回転運動と ATP 加水分解反応の同時計測	東京大学大学院工学系研究科	上野　博史
LZMW を利用したキネシンと ATP の１分子蛍光計測	京都大学大学院工学研究科	横川　隆司
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
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
緑色植物の光化学系 II における初期電荷分離過程の分子論的機構解明	琉球大学理学部	東　雅大
強度スクイーズド状態を用いた分子分光の応用可能性	北海道大学大学院情報科学研究科	松岡　史晃
メタフォトニックスによる赤外域分子輝線多重渡蔽光学素子の開発	岩手大学人文社会科学部	花見　仁史
結晶性イオン導電材料の合成と構造解析	東京工業大学大学院総合理工学研究科	鈴木　耕太
準安定３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
軌道角運動量を運ぶ円偏光アンジュレータ高次光の利用研究探索	広島大学放射光科学研究センター	佐々木茂美
高効率なスピン偏極電子検出器の開発に向けた表面の化学状態制御法の創出	東京大学大学院理学系研究科	岡林　潤

課　題　名（前期）	代　表　者	
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
第1級芳香族アミンとアルコールを用いた含窒素環骨格の直接的触媒合成法の開発	山形大学工学部	皆川　真規
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
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
改良型人工タンパク質ナノブロックによる自己組織化ナノ構造複合体の創製と解析	信州大学繊維学部	新井　亮一
生命現象へ現実的に適応可能な Vicsek モデルの拡張	東京理科大学理学部	住野　豊
常温接合を用いたダイヤモンドとレーザー結晶との複合構造高出力レーザーの開発	中央大学理工学部	庄司　一郎
解離イオンとオージェスペクトルから探るジフルオロキセノンの内殻励起状態	関西学院大学理工学部	河野　光彦
異方性二次元キラルナノ構造体における円二色性の起因の解明	早稲田大学理工学術院先進理工学研究科	朝日　透
磁気ドメイン制御型 Q スイッチレーザーの小型化	豊橋技術科学大学電気・電子情報工学系	後藤　太一
キラルプラズモンとキラル磁性結晶	大阪府立大学大学院工学研究科	戸川　欣彦
水中における金属ナノ粒子を触媒とする反応の機構に関する研究	大阪工業大学工学部	大高　敦
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
2μm レーザーによる遠・中赤外光パルス発生の研究	香川大学工学部	鶴町　徳昭

課　題　名（後期）	代　表　者	
キラルプラズモンとキラル磁性結晶	大阪府立大学大学院工学研究科	戸川　欣彦
超薄膜液体の電気・光物性測定	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	田島　裕之
UVSOR における高調波加速空胴の開発研究	名古屋大学大学院工学研究科	持箸　晃
偏極量子ビーム照射による生体有機物ホモキラリティ研究	広島大学放射光科学研究センター	松尾　光一
第1級芳香族アミンとアルコールを用いた含窒素環骨格の直接的触媒合成法の開発	山形大学工学部	皆川　真規
蛋白質の構造変化における「弱い」相互作用の解析	京都大学大学院理学研究科	今元　泰
人工タンパク質ナノブロックによる自己組織化ナノ構造複合体の創製と解析及びまとめ	信州大学繊維学部	新井　亮一
レーザー超音波を用いた航空機構造の検査におけるレーザー照射条件の最適化	東京大学生産技術研究所	岡部　洋二
常温接合を用いたダイヤモンドとレーザー結晶との複合構造高出力レーザーの開発	中央大学理工学部	庄司　一郎
磁気ドメイン制御型 Q スイッチレーザーの小型化	豊橋技術科学大学電気・電子情報工学系	後藤　太一
2μm レーザーによる遠・中赤外光パルス発生の研究	香川大学工学部	鶴町　徳昭
解離イオンとオージェスペクトルから探るジフルオロキセノンの内殻励起状態	関西学院大学理工学部	河野　光彦
２価の多原子分子イオンの解離ダイナミクス	富山大学大学院医学薬学研究部	彦坂　泰正
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
抗 HIV 感染薬効メカニズムについての分子動力学シュミレーション	国立国際医療研究センター	尾又　一実
生命現象へ現実的に適用可能な Vicsek モデルの拡張	東京理科大学理学部	住野　豊
ダブルパルス励起における誘導放出の量子干渉への影響についての研究	奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科	香月　浩之
水中における金属ナノ粒子を触媒とする反応の機構に関する研究	大阪工業大学工学部	大高　敦
ペンタセン単結晶清浄表面の角度分解紫外光電子分光法による研究	東京理科大学理工学部	中山　泰生
中赤外線レーザーが神経変性疾患原因凝集体を解離する過程の分子科学シュミレーション	群馬大学大学院保健学研究科	中村　和裕
分子シミュレーションによるアミロイド線維の解離機構の解明	東京理科大学総合研究院	川崎　平康
希ガスの時間分解蛍光分光	上智大学理工学部	東　善郎
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

(3) 研究会

① 【分子研研究会（一般)】
超機能分子の創成：合成，計測，数理が織りなす社会実装分子の戦略的設計と開発
2016 年 6 月 27 日（月）～ 28 日（火） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

June 27, 2016 (Mon)

13:00-13:10 Opening remarks by Prof. Takafumi Ueno

Session I (13:10-14:40) *Chairman: Prof. Uchihashi*

13:10-13:40 Kazuya Watanabe (Tokyo Univ. Pharm. Life Sci.)
"Connecting intracellular catabolism to external electrodes"

13:40-14:10 Ryota Iino (Institute for Molecular Science)
"Our approaches toward 'real' engineering of protein molecular machines"

14:10-14:40 Chun-Biu Li (Hokkaido Univ.)
"Single Molecule Time Series Analyses of F_1-ATPase to Unveil the Roles of ATP Hydrolysis"

Session II (15:00-16:00) *Chairman: Prof. Iino*

15:00-15:30 Nobuhiro Yanai (Kyushu Univ.)
"Photon upconversion in self-assembled molecular systems"

15:30-16:00 Waka Nakanishi (National Institute for Materials Science)
"Control of molecular machines at 2D-interface"

Session III (16:20-17:20) *Chairman: Prof. Kinbara*

16:20-16:50 Takayuki Uchihashi (Kanazawa Univ.)
"Visualization of Functional Dynamics of Biological Molecules by High-Speed AFM"

16:50-17:20 Nobuyasu Koga (Institute for Molecular Science)
"Design of various α-β and myriad all-α protein structures"

17:20-17:50 Tatsuya Nojima (Tokyo Tech)
"Protein Condensate: Development of Integrated-Protein Liquid Material"

18:30- Dinner

June 28, 2016 (Tue)

Session IV (9:30-10:30) *Chairman: Prof. Ueno*

9:30-10:00 Satoru Nagatoishi (Univ. of Tokyo)
"Thermodynamics of the interaction between proteins and small compounds in drug discovery"

10:00-10:30 Ryoichi Arai (Shinshu Univ.)
"Self-assembling supramolecular nanostructures created from de novo protein nano-building blocks"

Session V (10:50-11:50) *Chairman: Prof. Nagatoishi*

10:50-11:20 Kenya Furuta (Advanced ICT Research Institute)
"Creating novel biomolecular motors based on dynein and actin-binding proteins"

11:20-11:50 Takafumi Ueno (Tokyo Tech)
"Biosupramolecular materials designed by protein assemblies"

Session VI (13:30-14:30) *Chairman: Prof. Arai*

13:30-14:00 Takehiro Sato (Spiber Inc.)
"Proteins: The New Frontier in Material Science"

14:00-14:30 Kazuaki Kato (Univ. of Tokyo)
"Molecular designs for soft and hard materials of polyrotaxanes"

Session VII (14:50-15:50) *Chairman: Prof. Furuta*

14:50-15:20 Kazushi Kinbara (Tokyo Tech)
"Design of synthetic molecules mimicking structure and function of proteins"

15:20-15:50 Tsutomu Hamada (JAIST)
"Physical design of artificial cell membranes"

Session VIII (16:10-17:10) *Chairman: Prof. Hamada*

16:10-16:40 Hideki Nabika (Yamagata Univ.)
"Spatiotemporal Organization under Continuous Flow: Design from Chemical and Mathematical Approaches"

16:40-17:10 Yusuke Maeda (Kyushu Univ.)
"Physics of optothermal diffusiophoresis: From the origin of life to molecular manipulation"

17:10-17:25 Closing remarks Prof. Ryota Iino

② 【分子研研究会（一般)】
有機金属化学の大潮流
2016 年 9 月 2 日（金）～ 3 日（土） 岡崎コンファレンスセンター

9 月 2 日（金）

13:00 – 13:10 開始の挨拶

13:10 – 14:10 「アリル化・脱アリル化」
北村 雅人（名古屋大学大学院創薬科学研究科教授）
座長：菅 誠治（岡山大学大学院自然科学研究科教授）

14:10 – 15:10 「芳香族化合物の遷移金属触媒反応」
三浦 雅博（大阪大学大学院工学研究科教授）
座長：佐藤 哲也（大阪市立大学大学院理学研究科教授）

15:30 – 16:30 「分子活性化」
茶谷 直人（大阪大学大学院工学研究科教授）
座長：上野 聡（東京工科大学工学部講師）

16:30 – 17:30 「光エネルギーを反応促進力として使う」
村上 正浩（京都大学大学院工学研究科教授）
座長：伊丹 健一郎（名古屋大学 ITbM 拠点長，名古屋大学理学研究科教授，JST-ERATO 研究総括）

18:00 – 懇親会

9 月 3 日（土）

9:00 – 10:00 「二重活性化型不斉触媒の創出」
笹井 宏明（大阪大学産業科学研究所教授）
座長：荒井 孝義（千葉大大学院理学研究科教授）

10:00 – 11:00 「フォトレドックス触媒反応：可視光（太陽光）で促進される有機電子移動触媒反応」
穐田 宗隆（東京工業大学科学技術創生研究院化学科教授，生命科学研究所所長）
座長：引地 史郎（神奈川大学工学部教授）

11:00 – 12:00 「新しい反応活性種創製法の開発」
岩澤 伸治（東京工業大学大学院理工学研究科教授）
座長：櫻井 英博（大阪大学大学院工学研究科教授）

12:00 – 閉式の挨拶

③ 【アジア連携分子研研究会】
Japan-Korea-Taiwan Bioinorganic Chemistry Symposium
（日韓台生物無機化学シンポジウム）
2016 年 9 月 29 日（木）～ 30 日（金） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

September 29 (Thu)

9:00- 9:10 Opening (Shinobu Itoh)

Chair: Masahito Kodera (Doshisha Univ.)

9:10- 9:40 Wonwoo Nam (Ewha Womans Univ., Korea)
"Metal-Oxygen Intermediates in Dioxygen Activation Chemistry"

9:40-10:10 Way-Zen Lee (National Taiwan Normal Univ., Taiwan)
"O_2 Activation by a Bio-Mimic of Co-HPCD"

10:10-10:40 Yasuhiro Funahashi (Osaka Univ., Japan)
"Formation of Dioxygen Adducts in Biomimetic Dicopper and Tricopper Systems"

Chair: Hiroshi Fujii (Nara Women's Univ.)

11:00-11:30 Jaeheung Cho (DGIST, Korea)
"Reactivity of Metal(III)-peroxo and -hydroperoxo Intermediates"

11:30-12:00 Chien-Ming Lee (National Taitung Univ., Taiwan)
"Characterization of Coordinatively Unsaturated Mn(II)/Mn(III) Complexes and the Reactivity toward Dioxygen"

Chair: Koichiro Ishimori (Hokkaido Univ.)

13:00-13:30 Shiro Hikichi (Kanakawa Univ., Japan)
"Dioxygen Activation on Mononuclear Non-Heme Iron and Cobalt Complexes"

13:30-14:00 Yutaka Hitomi (Doshisha Univ., Japan)
"Novel Iron-Based Superoxide Dismutase Mimics"

Chair: Takashi Hayashi (Osaka Univ.)

14:00-14:30 Yunho Lee (KAIST, Korea)
"CO_2 Conversion at a Single Nickel Center"

14:30-15:00 Tzung-Wen Chiou (National Tsing Hua Univ., Taiwan)
"[Ni^{III}(OMe)]-Mediated Reductive Activation of CO_2 Affording a Ni(k^1-OCO) Complex"

Chair: Hideki Masuda (Nagoya Inst. Tech.)

15:15-15:45 Tsai-Te Lu (Chung Yuan Christian Univ., Taiwan)
"The Choice of NO vs. NO^-: From the Spectroscopic Characterization to In Vivo Study of Fe-NO Complexes"

15:45-16:15 Chih-Neng (Sodio) Hsu (Kaohsiung Medical Univ., Taiwan)
"Chelation or Dimerization on the Asymmetrical β-Diketiminato Copper and Zinc Complexes"

Chair: Yoshitsugu Shiro (Univ. Hyogo & RIKEN)

16:15-16:45 Chen-Hsiung Hung (Academia Sinica, Taiwan)
"N-Confused Porphyrin Complexes: Effective Compounds as Functional Models for Nitrite Reductase and Nitric Oxide Reductase"

16:45-17:15 Shigeyuki Masaoka (IMS, Japan)
"Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation"

18:00- Banquet

September 30 (Fri)

Chair: Takahiko Kojima (Univ. Tsukuba)

9:00- 9:30 Takafumi Ueno (Tokyo Inst. Tech., Japan)
"Multi-Bioinorganic Functions Designed with Protein Cage"

9:30-10:00 Seung Jae Lee (Cheonbuk National Univ., Korea)
"Oxidation of Methane through Component Interaction from Type II Methanotrophs"

10:00-10:30 Osami Shoji (Nagoya Univ., Japan)
"Non-Native Substrate Hydroxylation Catalyzed by Cytochrome P450s Utilizing False Recognition of Target Substrates"

Chair: Shinobu Itoh (Osaka Univ.)

10:45-11:15 Woon Ju Song (Seoul National Univ., Korea)
"Design of a *De Novo* Metallo-Hydrolase with *In Vivo* Catalytic Activity"

11:15-11:45 Akira Onoda (Osaka Univ., Japan)
"Biohybrid Catalysts Harboring a Synthetic Catalyst within a Protein Cavity"

11:45-12:15 Toshitaka Matsui (Tohoku Univ., Japan)
"Functional Coupling of Mono- and Dioxygenase Chemistries in a Single Active Site Promotes Unique Heme Degradation"

Chair: Yoshio Hisaeda (Kyushu Univ.)

13:15-13:45 Shun Hirota (NAIST, Japan)
"Structure and Function of Heme Protein Oligomers Constructed by Domain Swapping"

13:45-14:15 Kiyoung Park (KAIST, Korea)
"Spectroscopic and Computational Elucidation of Binuclear Non-Heme Iron Enzyme Intermediates"

14:15-14:45 Hiroshi Nakajima (Osaka City Univ., Japan)
"Engineering of Electron Transfer Protein for Biofunctional Materials"

Chair: Shigetoshi Aono (IMS)

15:00-15:30 Mi Hee Lim (UNIST, Korea)
"Engineering Structure-Mechanism-Based Chemical Regulators for Distinct Pathological Factors in Alzheimer's Disease"

15:30-16:00 Yun-Ming Wang (National Chiao Tung Univ., Taiwan)
"Water-Soluble Dinitrosyl Iron Complex (DNIC): A Nitric Oxide Vehicle Triggering Cancer Cell Death via Apoptosis"

16:00-16:10 Closing (Shigetoshi Aono)

④ 【分子研研究会（一般）】
若い世代が創る次世代型分子触媒の開発とその展望
2016 年 11 月 10 日（木）～ 11 日（金） 分子科学研究所山手３号館２階西大会議室

11 月 10 日（木）

時間	演題	講演者
座長：大迫 隆男		
13:30-13:40	開会挨拶	國信 洋一郎
13:40-14:00	光エネルギーを活用する二酸化炭素の固定化反応	石田 直樹
14:00-14:20	キラルなグアニジン触媒を用いる速度論的光学分割法の展開	中田 健也
14:20-14:40	コバルト触媒を活用する二酸化炭素固定化反応の新展開	藤原 哲晶
14:40-15:00	分子触媒とタンパク質反応場の融合：バイオハイブリッド触媒で挑む反応開発	小野田 晃
15:00-15:20	配位性官能基導入による高機能性不斉有機分子触媒の創製研究	中村 修一
座長：浜坂 剛		
15:40-16:00	高分子主鎖らせんキラリティの自在制御に基づく新材料創出	長田 裕也
16:00-16:20	配位子の精密設計を基盤とする新しい金属触媒機能の開拓	鷹谷 絢
16:20-16:40	ホモエノラート等価体による分子変換を指向した含窒素複素環式カルベン触媒の創製	鳴海 哲夫
16:40-17:00	固相多点担持ホスフィンによる次世代型不均一系遷移金属触媒の開発	岩井 智弘
17:00-17:20	オニウム塩触媒の新たな可能性の探索	白川 誠司
17:20-17:40	第１遷移金属触媒を用いる有機ハロゲン化物のスタニル化およびホウ素化反応	米山 公啓
17:40-	写真撮影，ホテルチェックイン	
18:30-	懇親会	

11 月 11 日（金）

時間	演題	講演者
座長：椴山 儀恵		
9:30- 9:50	ホスフィン－ボラン化合物を配位子として活用したアリルアルコールのアリル位置換反応	小野寺 玄
9:50-10:10	β - ケトエステルの不斉 α - アリル化反応	吉田 雅紀
10:10-10:30	高次選択的 Diels–Alder 反応を制御するキラル超分子触媒の開発	波多野 学
10:30-10:50	銅触媒を用いた窒素およびリン元素導入を伴うアルケンの新規二官能基化反応の開発	平野 康次
10:50-11:10	触媒的不斉ハロゲン化反応の開発と応用	柴富 一孝
11:10-11:30	π - 相互作用を活用する自己集積型 salen 錯体の開発	今堀 龍志
座長：大迫 隆男		
12:30-12:50	合成で使える！ AZADO- 銅協働触媒を用いる高化学選択的アルコール空気酸化反応	笹野 裕介
12:50-13:10	キラルアミノホスホニウム塩を用いる触媒的分子変換	浦口 大輔
13:10-13:30	キラルリン酸触媒による動的速度論的光学分割を利用した軸不斉ビアリールの不斉合成	森 啓二
13:30-13:50	ロジウム触媒を用いた縫合反応による新規キノイド型縮環オリゴシロールの合成および物性	新谷 亮
13:50-14:10	光誘起電荷移動状態を形成する有機光触媒の開発	松原 亮介
座長：浜坂 剛		
14:30-14:50	アルコールの光触媒変換に基づく合成化学	中 寛史
14:50-15:10	光学活性アミンの不斉合成を指向した (Z)- ケチミンの立体選択的合成法の開発	加納 太一
15:10-15:30	劇的な反応加速効果と高エナンチオ選択性を実現する不斉求核触媒の開発	萬代 大樹
15:30-15:50	非共有結合性相互作用による C–H 結合変換反応の位置選択性の制御	國信 洋一郎
15:50-16:00	閉会挨拶	椴山 儀恵

⑤ 【分子研研究会（一般）】
表面科学の最先端技術と分子科学～第７回真空・表面科学若手研究会～
2016 年 12 月 2 日（金） 分子科学研究所研究棟 201 号室

9:30- 9:40	開会の挨拶
9:40-10:40	徳永　智春（名古屋大学） 「カーボンナノファイバー内部空間に閉じ込められた金属の特性変化」
10:50-11:50	羽馬　哲也（北海道大学） 「宇宙の水素と塵の表面科学」

12:50-13:50　杉本　宜昭（東京大学）
「原子間力顕微鏡を用いた単原子分子計測」
14:00-15:00　永村　直佳（物質・材料研究機構）
「放射光軟Ｘ線顕微鏡分光で探るグラフェンの異種接合界面電子状態」
15:10-16:10　飯田　健二（分子科学研究所）
「光や電圧の印加で発現する界面電子的機能の理論」
16:10-18:00　ポスターセッション
18:00-18:10　閉会の挨拶：川合　眞紀（分子科学研究所，所長）
18:45-20:45　懇親会

⑥ 【分子研研究会（一般)】
生体や物質機能の起源にせまる先端的電子スピン計測
2016 年 12 月 7 日（水）～ 8 日（木） 分子科学研究所研究棟 301 号室

12 月 7 日（水）
午後第 1 部　座長：太田 仁（神戸大学分子フォトサイエンス研究センター）
13:00-13:10　中村 敏和（分子科学研究所物質分子科学研究領域）
はじめに & 事務連絡
13:10-13:20　小堀 康博（神戸大学大学院理学研究科）
電子スピン分極イメージング法の開発による PSII 電荷分離構造の三次元映像化
13:20-13:40　荒田 敏昭（大阪大学大学院理学研究科攻）
タンパク質の活動現場と動態の ESR 解析：筋収縮調節とイオン輸送
13:40-14:00（招待講演）　平田 拓（北海道大学大学院情報科学研究科）
同位体ニトロキシルラジカルを用いる酸素分圧イメージング法の開発
14:00-14:20　松本 信洋（産業技術総合研究所）
有効磁気モーメント法によるニトロキシルラジカル試薬のフリーラジカルとしての純度分析の検討

午後第 2 部　座長：小堀 康博（神戸大学大学院理学研究科）
14:50-15:10（招待講演）　太田 仁（神戸大学分子フォトサイエンス研究センター）
神戸大学における多重極限 THz ESR の現状と将来
15:10-15:30（招待講演）　市川 和洋（九州大学先端融合医療レドックスナビ研究拠点）
多周波数帯 DNP-MRI の開発
15:30-15:50　黒田 新一（名古屋産業科学研究所）
イオン液体による結晶性共役高分子のドーピングと ESR
15:50-16:10　櫻井 敬博（神戸大学研究基盤センター）
圧力下 THz ESR 装置の開発と応用

午後第 3 部　座長：前田 公憲（埼玉大学大学院理工学研究科）
16:30-16:50　長嶋 宏樹（名古屋大学大学院理学研究科）
光駆動水分解酸素発生系 Mn_4CaO_5 の分子メカニズムに関する電子核二重共鳴計測による研究
16:50-17:10　江間 文俊（神戸大学大学院理学研究科）
時間分解 EPR 法による有機包接結晶の室温強リン光発光性励起三重項状態の電子構造
17:10-17:30　岡本 翔（神戸大学大学院理学研究科）
ヘミンのテラヘルツ ESR 測定
17:30-17:50　伊藤 慎治（九州大学先端融合医療レドックスナビ研究拠点）
ジメチルスルホキシドを用いて発生させたフリーラジカルの磁気共鳴イメージング
17:50-18:10　工藤 尚輝（新潟大学自然科学系（理学））
バルク接合太陽電池の磁気インピーダンス分光研究
18:10-18:30　齋藤 佑（山形大学大学院理工学研究科）
ニトロ化を伴う芳香族オレフィンの One-pot 重合反応における ESR 法による反応機構解析の試み
18:40-20:40　懇親会

12 月 8 日（木）
午前前半　座長：佐藤 和信（大阪市立大学大学院理学研究科）
9:00- 9:20（招待講演）　稲波 修（北海道大学大学院獣医学研究科）
酸化ストレスとミトコンドリア電子伝達系応答
9:20- 9:40（招待講演）　生駒 忠昭（新潟大学自然科学系（理学））
磁気伝導計測法による一次元的自己組織体の光伝導機構の研究
9:40-10:00　中川 公一（弘前大学地域イノベーション学系（保健））
X- バンド ESR イメージングによる皮膚角層の研究
10:00-10:20　浅野 素子（群馬大学大学院理工学府）
銅 (I) 錯体の MLCT 発光と時間分解 EPR 観測

10:20-10:40　前田 公憲（埼玉大学大学院理工学研究科）
磁気共鳴や磁場効果測定というスペクトロスコピー

午前後半　座長：稲波 修（北海道大学大学院獣医学研究科）

11:00-11:20　大久保 晋（神戸大学分子フォトサイエンス研究センター）
１次元フラストレート系 $NaCuMoO_4(OH)$ の強磁場 ESR による新奇磁性相の探索

11:20-11:40　佐藤 和信（大阪市立大学大学院理学研究科）
先端パルス ESR 技術を用いた分子スピン制御と最適化

11:40-12:00　加藤 立久（京都大学国際高等教育院）
多周波数 ESR 観測による内包フラーレン・スピン状態の決定

12:00-12:20　三野 広幸（名古屋大学大学院理学研究科）
機能性タンパク質 Photozipper の反応機構

12:20-12:40　古川 貢（新潟大学機器分析センター）
分子性機能性物質のスピンダイナミクス

12:40-12:50　おわりに

⑦ 【分子研研究会（一般)】
金属錯体の情報制御と機能連動
2016 年 3 月 6 日（月）～ 7 日（火） 分子科学研究所研究棟 201 号室

3 月 6 日（月）

13:00–13:10　趣旨説明　大場 正昭（九州大学大学院理学研究院）

13:10–13:35　越山 友美（九州大学大学院理学研究院）
「リポソームへの機能性分子の組込みと機能連動」

13:35–14:05　小野田 晃（大阪大学大学院工学研究科）
「バイオハイブリッド触媒における金属錯体とタンパク質の機能連動」

14:05–14:30　河内 岳大（東京工業大学フロンティア研究機構）
「金属と高分子を精密配置・配列した集積材料」

14:30–15:00　張 浩徹（中央大学理工学部）
「金属錯体の電子移動プロセスが拓く未来像」

15:20–15:45　楊井 伸浩（九州大学大学院工学研究院）
「錯体化学と三重項科学の融合に基づく機能発現」

15:45–16:15　小林 浩和（京都大学大学院理学研究科）
「新規ナノ材料の水素吸蔵機能と触媒への展開」

16:15–16:40　堀 彰宏（名古屋大学大学院工学研究科）
「X 線自由電子レーザーを用いた動的錯体ナノ空間の分子捕捉機能の評価」

16:40–17:10　植村 卓史（京都大学大学院工学研究科）
「MOF を使った分子情報変換重合」

17:30–18:00　宮坂 等（東北大学金属材料研究所）
「動的格子空間制御による磁気スイッチング」

18:00–18:40　西原 寛（東京大学大学院理学系研究科）
「配位プログラミングと界面」

19:30–21:30　懇親会

3 月 7 日（火）

9:00– 9:30　速水 真也（熊本大学大学院先端科学研究部）
「機能性界面および層間における錯体分子の構築」

9:30–10:00　竹延 大志（名古屋大学大学院工学研究科）
「TBA」

10:00–10:30　村橋 哲郎（東京工業大学大学院理工学研究科）
「有機金属クラスターの構造次元性転移」

10:50–11:20　正岡 重行（分子科学研究所）
「金属錯体の機能連動による触媒創出」

11:20–11:50　阿部 竜（京都大学大学院工学研究科）
「太陽光水素製造実現に向けた新規可視光応答型光触媒の開発」

11:50–12:20　石谷 治（東京工業大学大学院理工学研究科）
「金属錯体光触媒と固体光機能材料の機能連動」

12:20–12:30　閉会挨拶

(4) 若手研究会等

課 題 名	提案代表者	
第 56 回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会	東京大学大学院総合文化研究科	水野 雄太

(5) 岡崎コンファレンス

課 題 名	提案代表者	
電子動力学：時間階層性へのチャレンジ	筑波大学大学院数理物質科学研究科	重田 育照
溶液散乱による分子システム研究の最前線	分子科学研究所	秋山 修志
有機電子材料の先端分光に関する国際会議	分子科学研究所	解良 聡

(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
セリウム含有シンチレーター結晶中に共賦活したマグネシウムの局所構造解析	山形大学理学部	北浦 守
電解抽出法により抽出した合金窒化物の局所構造評価	東北大学金属材料研究所	佐藤 充孝
炭化モリブデン触媒活性種の L 殻 XANES による構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
X 線吸収スペクトルによる $RECoO_3$ における電荷保証機構の解明	早稲田大学理工学術院	山本 知之
Si 置換 ALPO-5 の構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
NEXAFS 分光法による電圧印加下での酸化膜の化学状態分析	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
有機薄膜のフロンティア軌道の重なり制御	筑波大学数理物質系	山田 洋一
分子接合剤で改質した SiO_2 および金属基板上の有機分子薄膜の電子構造と分子配向	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
Photoemission Studies of Sumanene Adsorption on Metal Surfaces	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika
Development and Maintenance of the BL-2B	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika
π 共役電子機能性金属錯体の界面電子構造の精密評価	東京理科大学理工学部	中山 泰生
Dimerization and Band Formation in Organic Thin Films	分子科学研究所	解良 聡
複合オキソアニオン由来の分子性励起子タイプ自己束縛励起子の生成と量子カッティング	秋田大学大学院工学資源学研究科	小玉 展宏
二光子励起励起スペクトル測定によるワイドギャップ化合物のバンドギャップの決定	山形大学理学部	北浦 守
バンドギャップエンジニアリングによるパイロシリケート型シンチレータの探索とその発光メカニズムの解明	東北大学未来科学技術共同研究センター	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
低温領域における紫外発光アルミン酸亜鉛蛍光体の光学的基礎物性および形成準位の評価	静岡大学学術院工学領域	小南 裕子
窒化炭素白色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
新規長残光蛍光体開発のための真空準位基準エネルギーダイアグラムの構築	京都大学大学院人間・環境学研究科	上田 純平
3d 遷移金属添加 AlN の真空紫外固体吸収／光電子収量分光同時測定による電子バンド構造の解明	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	園田 早紀
NaCl:I- 単結晶おける励起エネルギー移動メカニズムの研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
$AETiO_3$ ペロブスカイト中における微量添加 Mn イオンの価数分析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
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	富山大学大学院医学薬学研究部	彦坂 泰正
高分解能光電子分光法による Te 薄膜の電子・スピン状態測定	東京工業大学大学院理工学研究科	平原 徹
分子軌道計測技術の展開：分子間相互作用による波動関数変調	分子科学研究所	解良 聡
BL5U 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鉄系高温超伝導体 $FeTe_{1-x}Se_x$ の電子構造研究	分子科学研究所	出田真一郎
$Sm_{1-x}Y_xS$ における Black–Golden 相転移メカニズムのフェルミオロジーによる解明	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤 孝寛
微小ギャップ半導体の (111) 表面の電子構造	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
角度分解光電子分光による鉄系超伝導体 NdFe(P, As)(O, F) 単結晶のフェルミ面，超伝導ギャップ観測	大阪大学大学院理学研究科	田島 節子
Bi(111) 薄膜の格子緩和によるトポロジカル相転移	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪 嘉之

２元系カルコゲナイド系アモルファス薄膜の真空紫外吸収スペクトル評価	岐阜大学工学部	林　浩司
Ca および Mg 共賦活による Ce:GAGG シンチレーター結晶の特性改善の機構解明	山形大学理学部	北浦　守
結晶性 Si への高濃度水素ドープ技術の開発及び新種の不純物中心を利用した Si 中の炭素の高感度検出技術への展開	東北学院大学工学部	原　明人
顕微赤外分光法によるマイクロ流路上の溶液反応の観察	分子科学研究所	長坂　将成
BL6B 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
老化による疾病の早期発見のための赤外顕微キラルイメージングの開発	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
UVSOR 遠赤外光を用いた固体物性研究	大阪大学産業科学研究所	入澤　明典
ディラック・ワイル半金属におけるフェルミアーク制御：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
5d 電子系で開拓する強相関トポロジカル量子相	東京大学物性研究所	近藤　猛
表面光電効果の検証	東京大学物性研究所	石田　行章
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
有機半導体フロンティア軌道における電子格子相互作用	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
$(TMTTF)_2X$ における金属－モット局在－電荷秩序相転移に伴う準粒子バンド構造変化の系統研究	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤　孝寛
微小ギャップ半導体のバルク電子構造	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
アルカリ金属吸着グラフェンの電子格子相互作用	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
トポロジカル絶縁体・保護膜間に現れる界面状態の研究	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪　嘉之
High Resolution Photoemission Studies of the Predicted Type II Weyl Semimetal $MoTe_2$	Fudan UniversityDepartment of Physics	FENG, Donglai
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
太陽彩層・偏光分光観測ロケット実験 CLASP2 のフライト光学素子評価	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
新開発シンチレーターの真空紫外領域における光学特性計測及び計測技術への応用	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	清水　俊彦
原子核乾板の最小電離粒子に対する感度評価	名古屋大学大学院理学研究科	中村　光廣
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その組成変化に伴う変化の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野　正人
有機薄膜のフロンティア軌道の重なり制御	筑波大学数理物質系	山田　洋一
29eV 用 SiC/Mg 多層膜ミラーにおける反射スペクトル測定	京都大学大学院理学研究科	西谷　純一
分子性導体に対する軟エックス線照射による分子欠陥生成機構の解明	東北大学金属材料研究所	佐々木孝彦
フィードバック制御による BL6B 光軸の安定化	京都大学エネルギー理工学研究所	全　炳俊
太陽軟Ｘ線２次元撮像分光のための CMOS センサー評価	国立天文台	成影　典之
コヒーレント光源の利用技術の開発と固体分光への応用	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一

（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
炭化モリブデン触媒活性種の L 殻 XANES による構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷　博文
Ｘ線吸収スペクトルによる $RECoO_3$ における電荷保証機構の解明	早稲田大学理工学術院	山本　知之
Si 置換 ALPO-5 の構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平　敦
有機薄膜のフロンティア軌道の重なり制御	筑波大学数理物質系	山田　洋一
分子接合剤で改質した SiO_2 および金属基板上の有機分子薄膜の電子構造と分子配向	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平　幸司
π共役電子機能性金属錯体の界面電子構造の精密評価	東京理科大学理工学部	中山　泰生
Dimerization and Band Formation in Organic Thin Films	分子科学研究所	解良　聡
複合オキソアニオン由来の分子性励起子タイプ自己束縛励起子の生成と量子カッティング	秋田大学大学院工学資源学研究科	小玉　展宏
二光子励起励起スペクトル測定によるワイドギャップ化合物のバンドギャップの決定	山形大学理学部	北浦　守
バンドギャップエンジニアリングによるパイロシリケート型シンチレータの探索とその発光メカニズムの解明	東北大学未来科学技術共同研究センター	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

低温領域における紫外発光アルミン酸亜鉛蛍光体の光学的基礎物性および形成準位の評価	静岡大学学術院工学領域	小南　裕子
窒化炭素白色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
新規長残光蛍光体開発のための真空準位基準エネルギーダイアグラムの構築	京都大学大学院人間・環境学研究科	上田　純平
NaCl:I- 単結晶おける励起エネルギー移動メカニズムの研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相　武利
$AETiO_3$ ペロブスカイト中における微量添加 Mn イオンの価数分析	早稲田大学理工学術院	山本　知之
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	富山大学大学院医学薬学研究部	彦坂　泰正
２元系カルコゲナイド系アモルファス薄膜の真空紫外吸収スペクトル評価	岐阜大学工学部	林　浩司
Ca および Mg 共賦活による Ce:GAGG シンチレーター結晶の特性改善の機構解明	山形大学理学部	北浦　守
結晶性 Si への高濃度水素ドープ技術の開発及び新種の不純物中心を利用した Si 中の炭素の高感度検出技術への展開	東北学院大学工学部	原　明人
顕微赤外分光法によるマイクロ流路上の溶液反応の観察	分子科学研究所	長坂　将成
BL6B 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
老化による疾病の早期発見のための赤外顕微キラルイメージングの開発	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
UVSOR 遠赤外光を用いた固体物性研究	大阪大学産業科学研究所	入澤　明典
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
太陽彩層・偏光分光観測ロケット実験 CLASP2 のフライト光学素子評価	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
新開発シンチレーターの真空紫外領域における光学特性計測及び計測技術への応用	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	清水　俊彦
原子核乾板の最小電離粒子に対する感度評価	名古屋大学大学院理学研究科	中村　光廣
鉄鋼材料の浸窒焼入れ処理および焼戻し熱処理における合金元素の局所構造評価	東北大学金属材料研究所	佐藤　充孝
軟Ｘ線吸収分光法を用いた電圧印加下での ZnO/ 金属界面の化学状態変化の観察	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平　幸司
太陽軟Ｘ線２次元撮像分光のための CMOS センサー評価	国立天文台	成影　典之
人工光合成半導体光電極のための超広帯域光電変換Ⅲ族窒化物薄膜のバンド構造の解明	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	園田　早紀
水熱処理したリン酸セリウムの P の構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平　敦
光電子分光による生体関連分子の電子構造の解明	千葉大学先進科学センター	石井　久夫
有機半導体の分子間軌道相互作用によるバンド形成過程の直接観測	千葉大学大学院融合科学研究科	吉田　弘幸
Development and maintenance of the BL-2B	分子科学研究所	上羽　貴大
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その組成・構造変化に伴う変化の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野　正人
混晶半導体を用いた放射線検出材料の光物性評価	大阪電気通信大学工学部	大野　宣人
Optical Spectroscopy in the VUV Region and Excited State Dynamics of Novel Complex Phosphate and Silicate Materials Doped with Trivalent Praseodymium Ions	University of Verona	BETTINELLI, Marco
分子性導体に対する軟エックス線照射による分子欠陥生成のエネルギー依存性の解明	東北大学金属材料研究所	佐々木孝彦
ホールドープ型銅酸化物高温超伝導体のネマティック秩序	東京大学大学院理学系研究科	藤森　淳
スピン軌道結合系の薄膜界面におけるバンド構造の研究	東京大学大学院理学系研究科	岡林　潤
高分解能光電子分光法による Te 薄膜の電子・スピン状態測定	東京工業大学理学院	平原　徹
Ag(100) 上に作成した VO(100) 薄膜の角度分解光電子分光	立教大学理学部	枝元　一之
分子軌道計測技術の展開 II：分子間相互作用による波動関数変調	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
BL5U 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
高分解能鉄系高温超伝導体による鉄系超伝導体 $FeSe_{1-x}Te_x$ の電子構造の研究	分子科学研究所	出田真一郎
遷移金属シリサイド TSi_2 (T = Ta, Nb, V) の３次元角度分解光電子分光	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤　孝寛
放射光光電子分光測定による新たなトポロジカル候補物質の電子状態解析	名古屋工業大学	宮崎　秀俊
$NdFeP_{1-x}As_xO_{0.9}F_{0.1}$ (x = 0.4, 0.8) 単結晶における超伝導ギャップノードの角度分解光電子分光による直接観測	大阪大学大学院理学研究科	宮坂　茂樹
角度分解光電子分光によるディラック電子系候補物質 $NiTe_2$ のディラック点の観測	大阪大学大学院理学研究科	宮坂　茂樹
微小ギャップ半導体の (111) 表面の電子構造 II	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
低対称性基板上に形成した Bi 原子鎖の電子状態とスピン分裂構造	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪　嘉之
宇宙飛翔体搭載用の極端紫外光撮像機の性能評価	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉川　一朗
低エネルギー高分解能 ARPES による線ノード半金属の研究	東北大学原子分子材料科学高等研究機構	高橋　隆
パイロクロア型酸化物の直接バンド観察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
有機無機ペロブスカイト太陽電池材料の価電子エネルギーバンド構造の実測	東京理科大学理工学部	中山　泰生

有機半導体フロンティア軌道における電子格子相互作用 II	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
低励起光エネルギー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超伝導ギャップ構造の解明	分子科学研究所	出田真一郎
低励起エネルギー角度分解光電子分光による擬一次元有機導体におけるスピノンーホロン分散／局在状態温度依存性の系統研究	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤　孝寛
La 系及び Bi 系銅酸化物高温超伝導体における自己エネルギーの運動量依存性	京都大学大学院人間・環境学研究科	吉田　鉄平
角度分解光電子分光による $Sr_{1-y}Ca_yFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ 最適組成の超伝導ギャップの高分解能測定	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ルク電子構造 II	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
希土類化合物 $YbXCu_4$ (X = In, Cd) のフェルミ面の観測	大阪府立大学大学院工学研究科	安齋　太陽
Doping-Dependent Superconducting-Gap Measurements of Electron Doped Cuprates	Inchon National University	PARK, Seung Ryong
Acquiring Temperature Dependent Electronic Band Structure of Organic Single	Soochow University	DUHM, Steffen
原子配列のランダム性を排除した Zn-Sc 準結晶及び近似結晶における可視・真空紫外反射分光	名古屋大学大学院理学研究科	井村　敬一
$Ba_xSr_{1-x}F_2$ 単結晶の真空紫外光学特性	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野　晋吾
亜鉛ビスマスリン酸ガラスへのフッ素添加による電子状態変化の解明	産業技術総合研究所無機機能材料研究部門	北村　直之
コヒーレント光源の利用技術の開発と固体分光への応用	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一

(7)　施設利用

①　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	名古屋大学未来社会創造機構	宇理須恒雄

（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	名古屋大学未来社会創造機構	宇理須恒雄

②　計算機利用

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
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分子科学シミュレーション	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・実装とその応用	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
タンパク質中 D- アミノ酸残基の起源および機能	名城大学薬学部	小田　彰史
有機系太陽電池に関する理論的研究	産業技術総合研究所	北尾　修
相対論的量子化学計算と第一原理分子動力学計算による機能性ナノ材料および生体関連分子の構造と機能の解明	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
10 族金属錯体によるオレフィン重合の機構解析と有機デバイスを指向した芳香族化合物の設計	東京大学大学院工学系研究科	野崎　京子
有機化学反応での結合交替での水素結合の役割	奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科	山邉　信一
理論電子および振動スペクトルによるフェノール並びにカテコール溶媒和クラスターの基底状態／励起状態プロトン移動のサイズ依存性に関する研究と SINDO 非調和振動解析を用いたプロトン付加カテコールアミン類の安定構造配座の決定	東京工業大学資源化学研究所	宮崎　充彦
量子化学計算による化学反応・発光機構解析	大阪大学大学院薬学研究科	川下理日人
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

超球面探索法を用いた結晶構造の予測	和歌山大学システム工学部	山門　英雄
分子動力学及び量子化学計算を用いたセルロース関連分子および生体高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
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
立体選択的反応における溶媒効果に関する理論研究	高知大学大学院総合人間自然科学研究科	金野　大助
機械学習と分子シミュレーションの連帯による標的型分子ドッキング法の開発	金沢大学理工研究域	齋藤　大明
セルロース結晶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
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
超臨界条件下の水－有機混合溶媒の拡散解析	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
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
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
Cyclic naphthalene diimide による非標準 DNA の安定化メカニズムの解明	甲南大学先端生命工学研究所（FIBER）	杉本　直己
ミオシン VI とアクチン繊維の相互作用様式の比較計算によるミオシン VI の長距離ステップ一方向運動の解明	名古屋大学大学院工学研究科	寺田　智樹
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
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
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糖鎖が関与する抗原－抗体間相互作用の量子化学計算	北里大学一般教育部	江川　徹
金の双晶ナノクラスターにおける CO 酸化反応機構の理論研究	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	高橋　修
化学反応の量子ダイナミクスに関する理論的研究	東京大学大学院工学系研究科	山下　晃一
自在回転部位を有するナノ複合分子の構造と動力学	東北大学大学院理学研究科	河野　裕彦
分子軌道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
高圧力下のタンパク質の構造安定性に関するモデル研究	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
遷移金属錯体および生体関連物質の構造・反応・分子間相互作用に関する理論的研究	お茶の水女子大学基幹研究院	鷹野　景子
分子集合体のシミュレーション	北里大学理学部	米田　茂隆
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	早稲田大学先進理工学研究科	中井　浩巳
特異な反応場としてのマクロサイクル触媒の計算化学的研究	東京工業大学大学院理工学研究科	川内　進
タンパク質間相互作用の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有機化学反応機構の解明	茨城大学理学部	森　聖治
機能性有機材料の電子物性解析に関する理論的研究	京都大学大学院工学研究科	伊藤　彰浩
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	首都大学東京理工学研究科	波田　雅彦
生体超分子の立体構造変化と機能	東京大学分子細胞生物学研究所	北尾　彰朗
第一原理計算手法によるナノ材料の形成と機能に関する研究	三重大学大学院工学研究科	秋山　亨
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
タンパク質の構造変化と機能発現の関連性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
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
剪断された高濃度コロイド系のガラス状態追跡	大阪大学大学サイバーメディアセンター	吉野　元
ガラス系における遅いダイナミクスの理論・シミュレーション研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	金　鋼
メタノール水溶液中の PNiPA の co-non-solvency の解明	岡山大学大学院自然科学研究科	望月　建爾
軌道間相互作用がゼオライト酸点の脱プロトン化エネルギーへ及ぼす影響の解明	東京工業大学大学院総合理工学研究科	馬場　俊秀
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
リン脂質膜／水界面の分子構造と振動スペクトルの理論研究	富山大学理工学研究部	石山　達也
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
有機分子半導体における金属原子の吸着・クラスター化の研究	千葉大学大学院理学研究科	中山　隆史

分子性液体中の Stokes-Einstein の関係とナノ粒子への拡張	新潟大学大学院自然科学研究科	石井　良樹
π 拡張反応の機構解明研究と触媒反応設計およびナノグラフェン類の電子状態計算	名古屋大学大学院理学研究科	伊藤　英人
Optical and Chemical Properties of Decorated Nanotubes	東京工業大学大学院理工学研究科	Juhasz Gergely
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
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
質量分析法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	浅川　大樹
地球における輻射環境の変遷と光合成の光吸収に関する理論研究	筑波大学数理物質系	小松　　勇
遺伝子編集タンパク質のシミュレーション研究	近畿大学生物理工学部	宮下　尚之
拡張アンサンブル法による生体分子のシミュレーション	名古屋大学大学院理学研究科	永井　哲郎
MD と統計力学理論によるタンパク質高次構造形成過程の解析	九州大学大学院理学研究院	吉田　紀生
擬似化学反応による高分子ゲル材料の不均一構造形成の研究	東京大学物性研究所	首藤　靖幸
新しい量子力学計算法の開発とプロトン移動への応用	東京大学先端科学技術研究センター	渡邉　宙志
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
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
分子内および分子間電子，電子対移動の研究	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解明	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
薬物と飲食物に含まれる生理活性物質との相互作用解析	福岡大学薬学部	池田　浩人
非晶質有機半導体材料の幾何構造・電子構造・分子間相互作用エネルギーの計算	山形大学大学院理工学研究科	横山　大輔
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	亀田　倫史
化学反応および分子特性に関する理論研究	神奈川大学理学部	松原　世明
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
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
TD-DFT による金属錯体の構造最適化とスペクトル解釈	東京理科大学理学部	秋津　貴城
Ornstein-Zernike 型積分方程式理論におけるブリッジ関数に関する研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮田　竜彦
三次元パイ共役系化合物の物性評価	北里大学理学部	長谷川真士
アジドやアラインの反応性に関する理論的考察	東京医科歯科大学生体材料工学研究所	吉田　　優
分子シミュレーションを用いたクラスレートハイドレートにおけるゲスト分子の拡散性についての計算科学的研究	千葉工業大学工学部	山本　典史
様々なアーキテクチャを持つ熱応答性高分子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
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
多成分化および複合化した金属クラスター上での化学反応の実験的および理論的解明	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
ヒト血清アルブミンと有機化合物の相互作用	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
生命関連星間分子の生成機構に関する理論的研究	明治学院大学法学部	高橋　順子
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	森下　徹也
光化学反応の制御と応用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	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
理論計算による触媒機能の解明	星薬科大学薬学部	坂田　　健
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
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
両親媒性分子と水からなる分子集団の構造形成のキネティクス	名古屋大学大学院工学研究科	吉井　範行
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
多核有機金属分子ワイヤーの電子構造と電子移動能の相関の解明	東京工業大学化学生命科学研究所	田中　裕也
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	国立環境研究所環境リスク・健康研究センター	古濱　彩子
気相分子クラスターにおける分子間相互作用ダイナミクスの直接イメージング	東京工業大学大学院理工学研究科	水瀬　賢太
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
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

共役系および金属錯体分子の多参照電子状態計算	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およびタンパク質合成機構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
分子動力学計算と量子化学計算による液体の分子間相互作用の研究	分子科学研究所	長坂　将成
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
分子シミュレーションによるイオン液体の研究	分子科学研究所	石田　干城
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
ハロ酸脱ハロゲン化酵素とシステイン合成酵素の反応機構解析とそれに基づいた高機能酵素のデザイン	長浜バイオ大学	中村　卓
QM/MM 計算による光合成水分解反応の分子メカニズムの解析	名古屋大学大学院理学研究科	野口　巧
種々のカリウムチャネルにおけるイオン透過過程の解明	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
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
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
湾曲 π 共役分子の理論研究	分子科学研究所	東林　修平
DNA と金属錯体との相互作用	中央大学理工学部	千喜良　誠
高反応性ジボラン (4) および 15 族元素含有ベンゼン類縁体の性質の解明	中央大学理工学部	山下　誠
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
抗 HIV-1 阻害剤アルケニルジアリールメタン類と逆転写酵素の相互作用解析	城西大学薬学研究科	星　絢子
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
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
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
高周期 14 族元素と遷移金属間の多重結合による二水素活性化	東北大学大学院理学研究科	渡邉　孝仁
Zero-multipole summation 法の分子動力学シミュレーションへの応用	東京大学新領域創成科学研究科	桜庭　俊
原子核の量子効果を考慮した多成分分子理論の開発と応用計算	岐阜大学工学部	宇田川太郎
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
ペプチドナノリングによるアミノ酸のキラル認識に関する理論的研究	高千穂大学人間科学部	竹内　淨
安定な反芳香族縮合多環化合物の電子物性の解明	群馬大学大学院理工学府	加藤真一郎
有機分子非線形ナノデバイスの研究	大阪大学大学院理学研究科	小川　琢治
非平面型パイ共役分子の構造と物性	大阪府立大学大学院理学系研究科	津留崎陽大
ファルネシル基結合型ヒトガレクチン１の会合構造	東北大学大学院薬学研究科	中林　孝和
新規パイ共役系の物性化学研究	京都大学大学院工学研究科	関　修平
ヘテロアレーンの遷移金属中心に対する配位挙動	分子科学研究所	山本　浩二
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
新規 π 電子系の合成を基軸とした超分子集合体の創製	立命館大学薬学部	前田　大光
多核錯体におけるトロポロンを介した分子内電荷移動機構の解明	北里大学理学部	吉田　純
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	東京大学大学院工学系研究科	岡田　洋史
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
理論計算支援による骨格内アルミニウム原子位置の制御されたゼオライトの設計と合成	東京大学大学院工学系研究科	大久保達也
アルミナ表面上の液体水分子の第一電子遷移の研究	関西学院大学理工学研究科	後藤　剛喜
高反応活性遷移金属錯体の分子設計と反応に関する理論計算	東京工業大学理学院化学系	石田　豊
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
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
多孔性材料表面に吸着した有機分子の状態に関する理論研究	東京大学大学院総合文化研究科	尾中　篤
リボソームにおけるペプチド結合形成反応のメカニズムに関する量子化学計算	兵庫医科大学医学部	福島　和明
光誘起機能性と結晶構造との相関解明研究	新潟大学研究推進機構	古川　貢
オニウム型有機分子触媒による分子変換機構の理論的解析	名古屋大学大学院工学研究科	佐藤　真
金属クラスターと小分子の相互作用	東京大学大学院理学系研究科	小安喜一郎
タンパク質中のアミノ酸残基異性化反応についての計算化学的研究	金沢大学医薬保健学域薬学系	福吉　修一
多核遷移金属ポリヒドリド錯体の構造に関する研究	奈良女子大学研究院自然科学系	浦　康之
水素結合と配位結合を組み合わせた多点相互作用に基づく新規分子認識方法の開発	関西学院大学理工学部	三橋　了爾
第一原理計算及び分子動力学を用いた電流下における分子挙動に関する研究	福井大学学術研究院工学系部門	福島　啓悟
量子化学計算による金属蛋白質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
C–H 伸縮振動の和周波発生応答の計算	大阪大学大学院基礎工学研究科	大戸　達彦

バッキーキャッチャー分子における電荷移動型遷移の理論的研究	日本女子大学理学部	村岡　梓
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
金属ナノクラスター上での二酸化炭素活性化に関する研究	徳島大学薬学部	Karanjit Sangita
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
異種置換基を持つヘキサアザトリフェニレン誘導体の電子構造決定	関西学院大学理工学部	田中　大輔
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
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
担持遷移金属錯体触媒の構造決定	分子科学研究所	大迫　隆男
蛍光タンパク質 eYFP の構造ー機能相関	東邦大学理学部	細井　晴子
宇宙物理・素粒子物理に関連する分子素過程の理論化学的手法による研究	東洋大学理工学部	田代　基慶
有機デバイス材料を中心としたマルチスケール電子状態計算	鳥取大学大学院工学研究科	星　健夫
新規合金クラスターの電子状態解析	東京理科大学大学院総合化学研究科	新堀　佳紀
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
大規模材料分子系のためのダブルハイブリッド DFT 法の開発	長崎大学大学院工学研究科	Chan Bun
水素結合型強誘電体をはじめとする機能性有機物質に対する計算科学	産業技術総合研究所	下位　幸弘
粗視化モデルを用いた同一疎水コアを持つタンパク質間での熱安定性比較	三重大学総合情報処理センター	白井　伸宙
相関電子系の特異な物性に関する数値的研究	千葉大学大学院理学研究科	太田　幸則
カチオン性メタロゲルミレンの小分子に対する反応性	学習院大学理学部	猪股　航也
鉄ヒドロゲナーゼモデル錯体の酸化還元特性の研究	広島大学大学院理学研究科	水田　勉
計算科学を通した熱活性型遅延蛍光分子の発光機構の解明：分子構造と電子構造の相関研究	産業技術総合研究所	細貝　拓也
希土類ポルフィリン錯体における構造－物性相関の解明	大阪大学大学院理学研究科	山下　健一
ホウ素錯体をクロモフォアとする太陽電池色素の高性能化	名古屋工業大学工学研究科	小野　克彦
分子シミュレーションと核磁気共鳴法による糖鎖の構造・ダイナミクス解析	分子科学研究所	谷中　冴子
生体分子マシンにおけるマルチスケールな機能ダイナミクスのシミュレーション	分子科学研究所	岡崎　圭一
動的効果を考慮した生体分子の酸解離定数の導出	筑波大学大学院数理物質系	松井　亨
タンパク質単結晶テラヘルツスペクトルの振動バンド解析	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永　圭介
核融合炉ブランケットシステム用溶融塩の分子動力学シミュレーションによる物性値評価	東北大学大学院工学研究科	宍戸　博紀
量子化学計算による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
高性能有機増感剤の開発のための理論的検討	立教大学理学部	三井　正明
生体分子に結合する主鎖修飾型ペプチドの合理的設計	東京大学大学院工学系研究科	森本　淳平
ベンジリックアミド配位子を有するイリジウム錯体によるアリル位脱プロトン化反応の機構解析	東京工業大学物質理工学院	樫木　啓人
木質バイオマス中リグニンの低分子化における分子機構	京都府立大学大学院 生命環境科学研究科	細谷　隆史
発光性金属錯体および集合体の電子状態に関する計算化学的アプローチ	北海道大学大学院理学研究院	加藤　昌子
分子触媒反応における立体制御機構の理論的解明	立教大学理学部	山中　正浩
多元素協働触媒反応の反応機構研究	京都大学大学院工学研究科	仙波　一彦
数分子単位からなるモデルによるマクロ環分子性金属錯体の固体物性に関する理論的研究	熊本大学大学院先端科学研究部	藤本　斉
π クラスター分子の電子物性の解明	大阪大学大学院理学研究科	西内　智彦
曲面グラフェン分子の設計	分子科学研究所	鈴木　敏泰
有機分子触媒の構造と相互作用の解明	分子科学研究所	椴山　儀恵
化学結合開裂の活性化エネルギーに着目したタンデム質量分析計における化合物断片化の理論予測手法の開発	総合研究大学院大学生命科学研究科	田中　弥
量子化学文献データーベースの開発	首都大学東京理工学研究科	波田　雅彦
円偏光発光機能を有するヘリセン誘導体の絶対配置と励起状態の構造の決定	青山学院大学理工学部	坂本　章

（計算物質科学スパコン共用事業利用枠）

エネルギーの変換・貯蔵—電気エネルギー	東京大学物性研究所	杉野　修
エネルギー・資源の有効利用—化学エネルギー	岡山大学大学院自然科学研究科	田中　秀樹
次世代高機能半導体デバイス	東京大学大学院工学系研究科	押山　淳
「次世代機能性化学品」有機／無機界面の物性に関する計算	名古屋工業大学	尾形　修司
分子集合体の光電子物性と量子ダイナミクス	分子科学研究所	藤田　貴敏
生体分子マシンにおけるマルチスケールな機能ダイナミクスのシミュレーション	分子科学研究所	岡崎　圭一

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 ～ '09		'10		'11		'12		'13		'14		'15		'16		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	108	907	0	0	1	13	1	21	2	27	1	11	2	32	2	29	人数：登録人数
協力研究	3,944	5,858	122	316	108	292	123	329	64	183	64	206	62	205	83	243	〃
招へい協力研究	195	197	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	〃
所長招へい	4,302	4,302	148	148	78	78	93	93	156	156	103	103	128	128	62	62	人数：旅費支給者
研究会	329	5,544	6	137	4	105	10	207	10	254	6	162	11	195	7	119	〃
若手研究会等	2	22	1	14	1	11	1	19	1	21	2	38	1	16	1	14	〃
岡崎コンファレンス	–	–	–	–	–	–	1	29	1	18	1	34	1	21	3	49	〃
施設利用 I	1,987	4,529	66	166	98	266	60	254	41	105	44	191	20	52	2	6	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)	4,907	16,465	170	666	190	668	190	813	204	786	199	751	235	844	217	803	〃
協力研究 (ナノプラット)	465	1,000	35	94	25	64	15	51	52	123	63	147	64	174	70	173	〃
施設利用 (ナノプラット)	251	622	25	89	20	35	52	150	132	378	174	453	197	618	191	582	〃
合計	16,490	39,446	573	1,630	525	1,532	546	1,966	663	2,051	657	2,096	721	2,285	638	2,080	

＊施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用　　（'16 年度の数値は，2016.12.31 現在）

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

分子科学研究所ＵＶＳＯＲ共同利用研究実施一覧

年度 / 項目	'85 ～ '09		'10		'11		'12		'13		'14		'15		'16		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	4	4	6	6	1	1	1	1	1	1	0	0	人数：旅費支給者
研究会	43	757	1	1	2	68	4	63	1	37	1	37	1	30	1	41	〃
施設利用	2,978	14,477	140	659	139	682	136	706	142	732	125	649	119	732	141	742	件数：許可件数 人数：許可人数
合計	3,458	16,853	141	660	145	754	146	775	144	770	127	687	121	763	142	783	

（'16 年度の数値は，2016.12.31 現在）

3-4　国際交流と国際共同研究

3-4-1　外国人客員部門等及び国際交流

分子科学研究所では，世界各国から第一線の研究者を招き外国人研究職員として雇用したり，各種の若手研究者育成プログラムを活用し，諸外国から若手の研究者を受け入れて研究活動に参画させるなど，比較的長期間にわたる研究交流を実施している。また，当研究所で開催される国際研究集会等に参加する研究者や，研究現場，施設・設備の視察に訪れる諸外国行政機関関係者等，多くの短期的な訪問も受けて活発な国際交流が行われている。

表１　外国人研究者数の推移（過去 10 年間）　（単位：人）

年度	長期滞在者			短期滞在者		
	外国人研究職員	日本学術振興会招へい外国人研究者	特別協力研究員等	研究会	訪問者	合　計
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
15	2	2	5	31	106	146
合計	36	38	304	228	1,302	1,908

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
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
15	10	6	17	16	8	27	0	62	146
合計	205	58	129	181	300	374	14	647	1,908

表３　海外からの研究者（2016 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．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. 6.30
PAN, Shiguang	中国	分子科学研究所 IMS フェロー	'15. 4. 1–'17. 3.31
３．国際共同研究			
XU, Chengbin	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'16. 3.22–'16. 8.21
ANGOUILLANT, Robert	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'16. 3.22–'16. 8.21
HUR, Anna	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'16. 3.22–'16. 8.21
MORICE, Maximilien	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'16. 3.22–'16. 8.21
HUBERT, Souquet-Basiege	フランス	高等師範学校グランゼコール大学院生	'16. 4.18–'16. 8.12
DESFRANÇOIS, Claire	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'16. 4.22–'16. 8.21
BISWAS, Ankita	インド	IISER Kolkata 大学院生	'16. 5.23–'16. 7.23
TIRUMALASETTY, Panduranga Mahesh	インド	IISER Kolkata 大学院生	'16. 5.23–'16. 7.24
WIGGERS, Frank	オランダ	University of Twente 大学院生	'16. 5.26–'16. 6.18
DE JONG, Michel	オランダ	University of Twente 准教授	'16. 5.29–'16. 6. 4
CHIU, Chao-Wen	台湾	National University of Kaohsiung 准教授	'16. 6. 5–'16. 6.11
DONG, Chung-Li	台湾	Tamkang University 助教	'16. 6. 5–'16. 6. 8
WANG, Yu-Fu	台湾	Tamkang University 大学院生	'16. 6. 5–'16. 6.13
LU, Ying-Jui	台湾	National Chiao Tung University 大学院生	'16. 6. 6–'16. 6.13
KHODABANDEH, Aminreza	オーストラリア	University of Tasmania 大学院生	'16. 6.11–'16. 6.20
CHEN, Qiuyun	中国	Fudan University ポスドク研究員	'16. 6.19–'16. 7. 2
YAO, Qi	中国	Fudan University 大学院生	'16. 6.19–'16. 7. 2
XU, Difei	中国	Fudan University 大学院生	'16. 6.19–'16. 7. 2
LORENZ-FONFRIA, Vivtor	スペイン	バレンシア大学主任研究員	'16. 6.27–'16. 7.13
WANG, Qi	中国	Soochow University 大学院生	'16. 7. 9–'16. 7.24
JI, Ruru	中国	Soochow University 大学院生	'16. 7. 9–'16. 7.24
DUHM, Steffen	中国	Soochow University 教授	'16. 7. 9–'16. 7.24
JUNG, Sun Won	韓国	Pohang University of Scienceand Technolog 大学院生	'16. 7.15–'16. 7.30
OH, Kyung Hoon	韓国	Pohang University of Scienceand Technolog 大学院生	'16. 7.15–'16. 7.30
WU, Eric	米国	カーネギーメロン大学化学科大学院生	'16. 7.25–'16. 8.20
FISHER, Henry	ドイツ	ベルリン自由大学 Research Associate	'16. 7.30–'16. 8. 5
RUEHL, Eckart	ドイツ	ベルリン自由大学教授	'16. 7.31–'16. 8. 6
			'16. 9.18–'16. 9.25
GLANS, Anders	アメリカ	Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), Research Scientist	'16. 8.20–'16. 9. 3
LIU, Yi-Sheng	アメリカ	Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), Research Scientist	'16. 8.21–'16. 9. 3
LAI, Yu Ling	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center (NSRRC) 研究員	'16. 8.30–'16. 9. 3
LIN, Ming-Wei	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center (NSRRC) 研究員	'16. 8.30–'16. 9. 3
SHIU, Hung-Wei	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center (NSRRC) 研究員	'16. 8.30–'16. 9. 3
TOWORAKAJOHNKUN, Natthawut	タイ	Chulalongkorn University 大学院生	'16. 9. 4–'17. 1.20
KLOSSEK, Andre	ドイツ	ベルリン自由大学ポスドク研究員	'16. 9.18–'16. 9.24
YAMAMOTO, Kenji	ドイツ	ベルリン自由大学大学院生	'16. 9.18–'16. 9.26
THITIWAT, Tanyalax	タイ	Mahidol University 大学院生	'16.10.30–'17. 3.31
ASSADAWOOT, Srikhaow	タイ	Mahidol University 大学院生	'16.10.31–'17. 3.31
PHAKAWAT, Chusuth	タイ	Chulalongkorn University 大学院生	'16.11. 6–'17. 3.28
PRAPASIRI, Pongprayoon	タイ	Kasetsart University 助教	'16.11.20–'17. 1.21
KRIANGSAK, Faikhruea	タイ	Chulalongkorn University 大学院生	'16.11.20–'17. 3.31
４．所長招へい協力研究員			
BELLEMIN-LAPONNAZ, Stephane	フランス	Universite de Strasbourg, Directeur de recherche	'16. 5.19–'16. 5.21
井本　翔	ドイツ	Ruhr-Universitaet リサーチアシスタント	'16. 6.16–'16. 6.19
矢野淳子	アメリカ	Lowerence Berkeley National Lab., Senior Scientist	'16.12.15–'16.12.17

５．特別訪問研究員			
KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika	スリランカ	千葉大学特任助教	'16. 4. 1–'17. 3.31
６．招へい研究員			
KALATHINGAL, Mahroof	インド	Indian Institute of Science Education and Trivandrum 大学院生	'16. 4. 1–'16. 4.30
			'16. 9.30–'16.10.01
ZHAO, Xiang	中国	Xi'an Jiaotong University 教授	'16. 7.29–'16. 8.29
PROMKATKAEW, Malinee	タイ	Kasetsart University 大学院生	'16. 7. 3–'16. 8.21
JUNG, Sung Won	韓国	Pohang University of Science and Technology 大学院生	'16. 7.15–'16. 7.30
KIM, Jinkwang	韓国	浦項工科大学校大学院生	'16. 7.15–'16. 7.30
CAMMI, Roberto	イタリア	Universita' di Parma 教授	'16. 9. 4–'16. 9.16
HUANG, Yu-Jen	台湾	National Chiao Tung University ポスドク研究員	'16. 7.25–'16. 7.27
BRYANT, Zev	アメリカ	Stanford University 准教授	'16. 7.29–'16. 7.30
HUIJUAN, You	シンガポール	National University of Singapore 研究員	'16. 8.15–'16. 8.20
JEONG, Hyeongseop	韓国	Korea Basic Science Institute 研究員	'16. 8.17–'16. 8.21
PISUTPAISAL, Nipon	タイ	King Mongkut's University 准教授	'16. 8.17–'16. 8.21
茂木文夫	シンガポール	Temasek Laboratories 主任研究員	'16. 8.17–'16. 8.20
VISOOTSAT, Akasit	タイ	Kasetsart University 大学院生	'16. 8.12–'16. 8.25
CHALUPSKY, Jakub	チェコ	Institute of Organic Chemistry and Biochemistry AS CR, v.v.i. 研究員	'16. 9.27–'16.10.28
平田　聡	アメリカ	University of Illinois 教授	'16.11.15–'16.12.21
新井賢亮	アメリカ	Boston University ポスドク研究員	'16.10.11–'16.10.16
ZHAO, Pei	中国	Xi'an Jiaotong University ポスドク研究員	'16.11. 1–'16.12.31
ALBERTI, Andrea	ドイツ	University of Bonn, Principal investigator	'16.11.16–'16.11.21
SILBERHORN, Christine	ドイツ	University of Paderborn 教授	'16.11.18–'16.11.20
VELAZQUEZ, Luis	スペイン	Universidad de Zaragoza 教授	'16.11.16–'16.11.20
MATALONI, Paolo	イタリア	Sapienza University of Rome 教授	'16.11.17–'16.11.18
SOUQUET-BASIEGE, Hubert	フランス	Ecole normale superieure 大学院生	'16. 4.14–'16. 7.30
並木　亮	カナダ	University of Waterloo ポスドク研究員	'16. 7.23–'16. 7.30
TIRUMALASETTY, Mahesh	インド	IISER Kolkata 大学院生	'16.12. 3–'16.12.24
DUNJKO, Vedran	オーストリア	University of Innsbruck ポスドク研究員	'16.11.16–'16.11.20
QIANG, Xiaogang	イギリス	University of Bristol 研究員	'16.11.16–'16.11.21
WALMSLEY, Ian	イギリス	University of Oxford 教授	'16.11.18–'16.11.20
PERINOTTI, Paolo	イタリア	Universita di Pavia 助教	'16.11.16–'16.11.20
７．岡崎コンファレンス			
Stephan Kümmel	ドイツ	University of Bayreuth 教授	'16.11.22–'16.11.25
Matthias Dauth	ドイツ	University of Bayreuth ポスドク研究員	'16.11.22–'16.11.25
Michael Zharnikov	ドイツ	Heidelberg University 教授	'16.11.22–'16.11.25
Torsten Fritz	ドイツ	Friedrich Schiller University Jena 教授	'16.11.22–'16.11.25
Achim Schöll	ドイツ	University of Würzburg 准教授	'16.11.22–'16.11.25
Oliver Monti	アメリカ	University of Arizona 教授	'16.11.22–'16.11.25
Faris Gel'mukhanov	スウェーデン	Royal Institute of Technology 教授	'16.11.22–'16.11.25
Xianjie Liu	スウェーデン	Linköping University ポスドク研究員	'16.11.22–'16.11.25
Patrik Amsalem	ドイツ	Humboldt University, Berlin ポスドク研究員	'16.11.22–'16.11.25
Urlich Höfer	ドイツ	Philipps University of Marburg 教授	'16.11.22–'16.11.25
Payam Shayesteh	スウェーデン	Lund University ポスドク研究員	'16.11.22–'16.11.25
Niclas Johansson	スウェーデン	Lund University 准教授	'16.11.22–'16.11.25
Heiko Peisert	ドイツ	University of Tübingen 教授	'16.11.22–'16.11.25
Steffen Duhm	中国	Soochow University 教授	'16.11.22–'16.11.25
Daniel Lüftner	オーストリア	University of Graz ポスドク研究員	'16.11.22–'16.11.25
William R. Salaneck	スウェーデン	Linköping University 教授	'16.11.22–'16.11.25
Qi Wang	中国	Soochow University ポスドク研究員	'16.11.22–'16.11.25
Qian Zhang	スウェーデン	Linköping University ポスドク研究員	'16.11.22–'16.11.25
Lothar Weinhardt	ドイツ	KIT 准教授	'16.11.22–'16.11.25
Joachim Schnadt	スウェーデン	Lund University 教授	'16.11.22–'16.11.25
John McLeod	中国	Soochow University 准教授	'16.11.22–'16.11.25

Maria Hahlin	スウェーデン	Uppsala University 准教授	'16.11.22–'16.11.25
Norbert Koch	ドイツ	Humboldt University, Berlin 教授	'16.11.22–'16.11.25
Oleg V. Prezhdo	アメリカ	University of Southern California 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Thomas Miller	アメリカ	California Institute of Technology 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Neepa Maitra	アメリカ	The City University of New York 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Hans Jakob Wörner	スイス	ETH Zürich 准教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Tobias Brixner	ドイツ	University of Würzburg 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Irene Burghardt	ドイツ	Goethe University Frankfurt 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Wolfgang Domcke	ドイツ	Technical University Munich 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Ingo Barth	ドイツ	Max Planck Institute 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Oliver Kühn	ドイツ	University of Rostock 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Jörn Manz	ドイツ	Free University of Berlin 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Ali Abedi	スペイン	University of the Basque Country ポスドク研究員	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Elham Khosravi	スペイン	University of the Basque Country ポスドク研究員	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Marcio Varella	ブラジル	University of São Paulo 准教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Dmitri Svergun	ドイツ	European Molecular Biology Laboratory, Hamburg 教授	'17. 3.18–'17. 3.20
U-Ser Jeng	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 教授	'17. 3.18–'17. 3.20
Pau Bernado	フランス	Centre de Biochimie Structurale 准教授	'17. 3.18–'17. 3.20
Sangho Lee	韓国	Sungkyunkwan University 准教授	'17. 3.18–'17. 3.20
Maxim Petoukhov	ロシア	Russian Academy of Sciences 准教授	'17. 3.18–'17. 3.20
Jochen Hub	ドイツ	Institute for Microbiology and Genetics 准教授	'17. 3.18–'17. 3.20
Nozomi Ando	アメリカ	Princeton University 准教授	'17. 3.18–'17. 3.20
Frank Gabel	フランス	Institut de Biologie Structurale, Grenoble 准教授	'17. 3.18–'17. 3.20
Ralf Biehl	ドイツ	Jülich Centre for Neutron Science, Julich 准教授	'17. 3.18–'17. 3.20
Yi-Qi Yeh	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 研究員	'17. 3.18–'17. 3.20
Kuei-Fen Liao	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center, Research Assistant	'17. 3.18–'17. 3.20

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
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
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
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
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
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
物質エネルギーヘルムホルツベルリンセンター及びベルリン自由大学	ドイツ	物質エネルギーヘルムホルツベルリンセンター（HZB），ベルリン自由大学（FUB），及び分子科学研究所（IMS）の間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	2016. 6.30	2019. 6.20	研究担当所長，財務・事務担当所長（物質エネルギーヘルムホルツベルリンセンター），学長（ベルリン自由大学）	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）	2016. 9.23	2020. 9.22	自然科学部長	所長

（2016.12.31 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 28 年度は下記 3 件の岡崎コンファレンスを開催した。

会 議 名：第 76 回岡崎コンファレンス
“Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications”
期　　間：2016 年 11 月 22 日（火）～ 25 日（金）
場　　所：岡崎コンファレンスセンター
組織委員：Norbert Koch（フンボルト大学ベルリン），Joachim Schnadt（ルンド大学），Stacey Sorensen（ルンド大学），吉田弘幸（千葉大学），近藤　寛（慶応大学），吉信　淳（東京大学），小杉信博（分子科学研究所），解良　聡（分子科学研究所）
内　　容：

第 76 回は有機分子材料のアドバンス光電子分光をテーマに掲げて実行した。参加者は海外招待講演者 17 名（その多くは旅費を自己負担しての参加），国内招待講演者 12 名を含めて 92 名であり，例年の岡崎コンファレンスと比較すると比較的規模の大きな会議となった。

今世紀に入り，エネルギー・環境問題が露わに指摘されるようになり，これらを解決すべく多種多様な分野で次世代産業基盤の確立を目指した研究が進められている。特に複雑な分子化合物がおりなす多彩な機能性発現に注目が集まっており，分子材料を積極的に用いたエネルギー変換・情報変換デバイス開発などに期待が寄せられている。これらの材料群の特徴としては，固相における集合構造が極めて多彩であり，弱い相互作用で諸物性が顕著に変化しうること，また異種分子や無機材料との接触界面において，組成変化や構造変化を伴うことで，その分子特性が大きく変化していることにある。そのため，分子固体やその界面における電子論的な物理学的視点の研究が進められると同時に，電気化学・触媒反応のような化学的視点の研究も盛んである。このように比較的広範なコミュニティを抱える分野においては，積極的に異分野研究者間の接点を増やす機会を設け，新たな融合・連携を通じた分野横断型発想を啓発することも必要である。本会議では研究手法の観点からより限定的に対象を絞ることでベクトルを揃え，問題点の

明確化と基礎学術分野拡大の相乗効果を狙った。つまり「複雑系のスペクトロスコピー」を共通言語とした会議進行である。機能性の発現機構を理解するために，電子分光法による電子状態の精緻な評価は極めて重要であり，さらに将来的にはより詳細な知見を得るために，従来型計測法を打破する新しい発想に基づいた計測技術の開発も必要である。歴史的背景から，こうした複雑系の光電子分光は，日本，スウェーデン，ドイツが主導してきた。ドイツは今世紀に入ってから物理系研究者の参入が顕著であり，精密な界面構造解析を元にした電子状態議論において，若手を中心として極めて精緻な実験報告が多く発信されている。スウェーデンは実験手法の技術的な鍵となる光電子分光装置のエネルギー分析器開発の先駆的立場を維持しており，新規計測法の開発も継続されている。我が国は，関一彦教授（故人），上野信雄教授らが有機デバイスを中心にした基礎研究の発展はもちろんのこと，本会議の基盤となるコミュニティの構築に早くから国際的な視点でご尽力されてきた歴史的背景がある。また電子分光法が密接にリンクするコミュニティとして放射光施設があるが，UVSOR 施設の得意とする先端軟Ｘ線高輝度光源施設の連携・発展もコミュニティ強化には重要な因子であり，期間内に随時施設見学会を開催し，情報交換につとめた。

本会議では，機能性有機分子の固相，液相，種々の表面および界面における電子状態について，先端分光法を駆使した研究成果を報告し議論する場を提供した。議論するテーマは方法論で分けて５テーマであり，それぞれ講演は半日ずつ，計２日半となった。具体的には，1) 分子固体や液体とその表面および電極界面等における各種スペクトロスコピー，2) シンクロトロン放射光を用いた光電子分光，軟Ｘ線吸収・発光測定，3) 時間分解・多重励起・先端光電子分光測定，4) 多次元光電子分光や光電子放射顕微鏡によるイメージング測定，5) 準大気圧下や外場印加下などのオペランド分光測定である。この２日半の会期に Keynote 講演として３名の第一線の研究者を招聘した。有機分子薄膜界面の時間分解・2 光子励起光電子分光の第一人者である Höfer 教授（独）からは，“Time-resolved spectroscopy of electron transfer processes at metal/organic interfaces”と題して，複雑な光電子放出過程についての導入から先端研究成果の紹介までを網羅していただいた。有機分子のエネルギーバンド分散関係測定の第一人者である山根博士（分子研）からは，“Valence-band dispersion in organic thin films and interfaces”と題して，有機固体の分散関係測定の歴史経緯から，最先端の極微小分散関係の測定例までを紹介していただいた。雰囲気下光電子分光の第一人者である Schnadt 教授（スウェーデン）からは，“Ambient pressure XPS in the real-time monitoring of thin film growth”と題して，準大気圧下まで試料環境を変えた時の影響とその電子状態変化についての最新成果をご紹介いただいた。また分析研究者を多く抱える本コミュニティへの刺激的な話題提供として Hot News セッションを設け，分子研の山本教授に，“Electronic phase-transitions at an organic interface”と題して最近の有機系強相関材料の基礎研究の成果についてご講演いただいた。講演リストからも明らかな様に，次世代へ繋げる分野展望を意識して中堅研究者に若手研究者を加えた講演者構成とした。さらに若手研究者，学生を中心として 32 件のポスター発表があり，分野の裾の広さを感じさせるものであった。本会議では会議時間以外にも有効な議論時間を見出してもらうことを想定して，参加者には機構ロッジに宿泊してもらった。時に深夜まで議論は続いたようであり，結果として非常に活発な交流が実現でき，岡崎コンファレンスの主たる目的となっている，将来に向けての新たな友好関係が構築されたようである。

以下に海外招待講演者を挙げる。

Urlich Höfer (Marburg, Germany)

Joachim Schnadt (Lund, Sweden)

Michael Zharnikov (Heidelberg, Germany)

Oliver L. A. Monti (Arizona, U.S.A.)

Stephan Kümmel (Bayreuth, Germany)

Achim Schöll (Würzburg, Germany)

Daniel Lüftner (Graz, Austria)

Torsten Fritz (Jena, Germany)

Steffen Duhm (FUNSOM, China)

Heiko Peisert (Tübingen, Germany)

Patrik Amsalem (Humboldt Berlin, Germany)

Lothar Weinhardt (KIT, Germany)

Faris Gel'mukhanov (KTH, Sweden)

Xianjie Liu (Linköping, Sweden)

Niclas Johansson (Lund, Sweden)

Payam Shayesteh (Lund, Sweden)

Maria Hahlin (Uppsala, Sweden) canceled

以下に国内招待講演者を挙げる。

Hiroyuki Yamane（分子科学研究所）

Susumu Yamamoto（東京大学）

Hisao Ishii（千葉大学）

Yasuo Nakayama（東京理科大学）

Peter Krüger（千葉大学）

Hiroyuki Yoshida（千葉大学）

Koki Akaike（東京理科大学）

Masanari Nagasaka（分子科学研究所）

Hiroshi Kondoh（慶応大学）

Yasumasa Takagi（分子科学研究所）

Takanori Koitaya（東京大学）

Masaaki Yoshida（慶応大学）

以下にプログラムを示す。

November 22 (TUESDAY)

16:00-	REGISTRATION
17:30-19:30	RECEPTION

November 23 (WEDNESDAY)

9:10-	Opening (S. Kera)
9:20-11:50 SESSION 1 (chair N. Koch)	
9:20-	Ulrich Höfer (Marburg, Germany) *Time-resolved spectroscopy of electron transfer processes at metal/organic interfaces*
10:10-	Michael Zharnikov (Heidelberg, Germany) *Core-hole clock studies on assembles of molecular wires*
10:50-	Oliver L. A. Monti (Arizona, U.S.A.) *Electronic Structure and ultrafast dynamics at the hybrid interface of organic semiconductors with quasi-2D SnS_2*
11:20-	Susumu Yamamoto (Tokyo, JPN) *Tracking photo-excited carriers on semiconductor surfaces by VUV and soft X-ray pulses*

13:00-14:40 SESSION 2 (chair P. Krüger)

13:00- Stephan Kümmel (Bayreuth, Germany)
The Importance of the final state: Perpendicular emission, dichroism, and energy dependence in angle-resolved photoemission

13:40- Achim Schöll (Würzburg, Germany)
Orbital imaging by momentum microscopy: Determination of phase symmetry and molecular vibrations

14:10- Daniel Lüftner (Graz, Austria)
Photoemission tomography of NiTPP on Cu(100)

15:10-17:10 SESSION 3 (chair H. Yoshida)

15:10- Torsten Fritz (Jena, Germany)
Optical in-situ differential reflectance spectroscopy (DRS): A powerful tool to investigate ultrathin molecular films

15:40- Hisao Ishii (Chiba, JPN)
hν-dependent high-sensitivity photoemission spectroscopy to probe density-of-states of organic films

16:10- Yasuo Nakayama (TUS, JPN)
Functional organic and organic-inorganic-hybrid materials studied by excitation energy dependence of the photoelectron spectroscopy

16:40- Steffen Duhm (FUNSOM, China)
Lead halide perovskites: Formation mechanism and energy-level alignment with organic semiconductors

17:30-18:00 HOT NEWS (chair S. Kera)

17:30- Hiroshi M. Yamamoto (IMS, JPN)
Electronic phase-transitions at an organic interface

18:20- DINNER, Remarks by Director Maki Kawai

19:00-21:00 POSTER SESSION

P01: Qian Zhang (Linköping), *Ground-state charge transfer for NIR absorption with donor/acceptor molecules: Interactions mediated via energetics and orbital symmetries*

P02: Matthias Meissner (Jena), *Epitaxy of flexible 2D crystals*

P03: Matthias Dauth (Bayreuth), *Predicting photoemission: From the single-particle interpretation to the many-electron picture*

P04: Hirotaka Mizushima (TUS), *Modification of Au(111) Shockley surface state upon physisorption of polyethylene*

P05: Soichiro Yamanaka (TUS), *Depth distribution of the chemical states and electronic structures of $CH_3NH_3PbI_3$ thin films studied by the excitation energy dependent XPS*

P06: Takashi Yamada (Osaka), *Direct visualization of localized/delocalized nature of unoccupied states at the rubrene/graphite interface*

P07: Ryohei Tsuruta (TUS), *Improved crystallinity of C_{60} overlayer on pentacene single crystal*

P08: Jun Yoshinobu (Tokyo), *Reaction of NO on silicene/ZrB_2/Si(111)*

P09: Masataka Hikasa (TUS), *Valence band structures of the pentacene single crystal*

P10: Qi Wang (FUNSOM), *Heterostructures of CuPc and pentacene oxo-derivatives on Ag(111): A photoelectron spectroscopy study*

P11: Harunobu Koike (TUS), *Manipulation of Shockley-type surface states by organic molecule adsorption*

P12: Takumi Kumai (TUS), *Morphology and electronic structure of $PC_{61}BM$/sexithiophene interface*

P13: Hayato Yuzawa (IMS), *Local structure analysis of aqueous KSCN solutions by soft X-ray absorption spectroscopy*

P14: Kazuhisa Isegawa (Keio), *In-situ S-K XANES study of nafion in PEFCs: Changes in the chemical states due to humidity and X-ray photodecomposition*

P15: Isamu Yamamoto (Saga), *Unoccupied electronic states of 3d transition-metal phthalocyanine thin films*

P16: Senku Tanaka (Kindai), *Photoelectron spectroscopy on the organic photovoltaic films under visible light irradiation*

P17: Chiaki Numata (Chiba), *The change in the electronic structure of SnPc by bonding Cl atoms to central metal*

P18: Tatsuhiro Tago (Chiba), *Role of chlorine in phthalocyanine with the steric hindrance on Ag(111) surface*

P19: Kohei Ueda (Keio), *Operando study on NO reduction by CO on an Ir surface by combination of NAP-XPS and QMS*

P20: Yujiro Ito (Tokyo), *Local electronic structure of pentacene monolayer on Au(111) studied by UPS, MAES, and first-principles calculation*

P21: CANCELED

P22: Yuhei Kikuchi (Yokohama), *Linear and nonlinear spectroscopy of monolayer transition-metal dichalcogenides: MoS_2, $MoSe_2$, WS_2, and WSe_2*

P23: Kohei Okanda (Yokohama), *Analysis of the reaction mechanism of water and iron phthalocyanine on silver adsorbed Si(111)*

P24: Yuki Kashimoto (Chiba), *The evolution of intermolecular energy bands of occupied and unoccupied molecular orbitals in organic thin films*

P25: Takahiro Ueba (IMS), *Orbital energy rearrangement induced by weak interaction at perfluoropentacene/Ag(111) interface*

P26: Keiichirou Yonezawa (IMS), *The correlation between density of states and the Fermi level potion in a heteromolecular monolayer system*

P27: Takuma Yamaguchi (IMS), *Film growth and optical property for perfluoro-pentacene on graphene/SiC(0001)*

P28: Takuma Yamaguchi (IMS), *Interfacial electronic structure between coronene monolayer and graphite investigated by low energy photoelectron spectroscopy*

P29: Takuma Yamaguchi (IMS), *Impact of vibrational combination states in UPS spectrum for π-conjugated molecules in gas phase*

P30: Ryo Shiraishi (IMS), *Origin of the interfacial state observed at tetraphenyldibenzoperiflanthene thin films on Ag(111)*

P31: Yoichi Yamada (Tsukuba), *Stacking sumanene on surfaces*

P32: Takuji Ohigashi (IMS), *Development of scanning transmission x-ray microscopy for in situ/operando chemical analysis at UVSOR-III*

November 24 (THURSDAY)

8:40-10:30 SESSION 4 (chair S. Kera)

8:40- Hiroyuki Yamane (IMS, JPN)
Valence-band dispersion in organic thin films and interfaces

9:30- Peter Krüger (Chiba, JPN)
Theoretical analysis of electronic state and X-ray absorption spectra of transition metal phthalocyanines and porphyrins

10:00- Heiko Peisert (Tübingen, Germany)
Tuning of interactions of transition metal phthalocyanines at metal surfaces by intercalated graphene buffer layers

11:00-12:30 SESSION 5 (chair H. Ishii)

11:00- Hiroyuki Yoshida (Chiba, JPN)
Origin of the orientation dependence of ionization energy and electron affinity in molecular thin films: Impact of molecular quadrupole moment

11:30- Patrik Amsalem (Humboldt Berlin, Germany)
The electronic structure In doped molecular semiconductors

12:00- Koki Akaike (TUS, JPN)
Energetic landscape correlated with interface structure at organic heterointerfaces

12:30-13:40 PHOTO, LUNCH

13:40-15:20 SESSION 6 (chair M. Zharnikov)

13:40- Lothar Weinhardt (KIT, Germany)
Studying energy relevant materials using electron and (in-situ) soft x-ray spectroscopy

14:20- Faris Gel'mukhanov (KTH, Sweden)
Nuclear dynamics of water molecules studied by X-rays

14:50- Masanari Nagasaka (IMS, JPN)
Local structure of liquid and liquid-liquid interface studied by soft x-ray absorption spectroscopy in transmission mode

15:50-17:30 SESSION 7 (chair J. Yoshinobu)

15:50- Hiroshi Kondoh (Keio Univ, JPN)
Spectroscopic observations of catalytic reactions on Platinum group metal surfaces under near ambient pressure conditions

16:30- Xianjie Liu (Linköping, Sweden)
Understanding interfacial properties of conjugated electrolyte/electrode with its application in organic electronics

17:00- Niclas Johansson (Lund, Sweden)
Au(111) supported MnSalen: UHV to ambient pressure XPS study of a surface supported homogeneous catalyst with retained activity

17:50-18:20 UVSOR TOUR

19:00- Banquet

November 25 (FRIDAY)

8:40-10:00 SESSION 8 (chair H. Kondoh)

8:40- Joachim Schnadt (Lund, Sweden)
Ambient pressure XPS in the real-time monitoring of thin film growth

9:30- Payam Shayesteh (Lund, Sweden)
Operando APXPS study of the ALD of HfO_2 on Si(111)

10:30-12:10 SESSION 9 (chair J. Schnadt)

10:30- Yasumasa Takagi (IMS, JPN)
In-Situ near ambient pressure hard X-ray photoelectron spectroscopic study of Pt nanoparticles on a polymer electrolyte fuel cell electrode

11:00- Takanori Koitaya (Tokyo, JPN)
CO_2 activation on Zn-modified Cu surfaces studied by ambient-pressure X-ray photoelectron spectroscopy

11:30- Masaaki Yoshida (Keio, JPN)
Operando observation of oxygen evolution catalysts by XAFS

12:10-12:20 CLOSING (N. Kosugi)

13:30- EXCURSION

会 議 名：第77回岡崎コンファレンス

“International Symposium on Ultrafast Dynamics in Molecular and Material Sciences”

期　　間：2017年3月6日（月）～8日（水）

場　　所：岡崎コンファレンスセンター

組織委員：斉藤真司（分子科学研究所），重田育照（筑波大学），牛山　浩（東京大学），山下雄史（東京大学），高橋　聡（東京大学），藤井幹也（東京大学）

内　　容：

近年のレーザー技術の進展により，アト秒スケールの電子運動の直接観測に向けた実験が報告されるようになってきた。例えば，電子再衝突による高次高調波スペクトルによる分子軌道のイメージング等がなされたのは記憶に新しい。電子運動の直接観測理論・技術の需要は非常に広範囲にわたるものと考える。例えば，太陽電池や光触媒などにおいて現在でも謎となっているのは，アト秒スケールで励起した電子が如何なるダイナミクスで電荷分離を起こすか？どのような分子材料を用いれば効率的に電荷分離ダイナミクスを最適化できるのか？ということである。また生命科学においても，光合成における光電子移動過程や電子伝達系におけるタンパク質内の電子移動過程など，生命機能の根幹に関わる系が数多くあり，それが達成された時のインパクトは計り知れない。そこで，本岡崎コンファレンスでは，分子科学や材料科学を中心に，アト秒からピコ秒スケールの速いダイナミクスの分光研究，および理論研究を行なっている若手研究者を中心に，様々なトピックスの講演をしていただいた。

以下に招待講演者を挙げる。

Keynote Speakers

Prof. Wolfgang Domcke (Technical University Munich, Germany)

Prof. Toshinori Suzuki (Kyoto University, Japan)

Prof. Kazuo Takatsuka (Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Japan)

Invited Speakers (Overseas)

Prof. Ingo Barth (Max Planck Institute, Germany)

Prof. Tobias Brixner (University of Würzburg, Germany)

Prof. Irene Burghardt (University of Frankfurt, Germany)

Prof. Oliver Kühn (University of Rostock, Germany)

Prof. Neepa T. Maitra (The City University of New York, U.S.A.)

Prof. Jörn Manz (Free University of Berlin, Germany)

Prof. Thomas F. Miller (California Institute of Technology, U.S.A.)

Prof. Oleg V. Prezhdo (University of Southern California, U.S.A.)

Prof. Hans Wörner (ETH Zürich, Switzerland)

Invited Speakers (Domestic)

Prof. Shin-ichi Adachi (KEK)

Prof. Hiroaki Benten (Nara Institute of Science and Technology)

Prof. Tomotsumi Fujisawa (Saga University)

Prof. Mizuho Fushitani (Nagoya University)

Prof. Masaki Hada (Okayama University)

Prof. Yu Harabuchi (Hokkaido University)

Prof. Manabu Kanno (Tohoku University)

Prof. Reika Kanya (University of Tokyo)

Prof. Kim Hyeon-Deuk (Kyoto University)

Prof. Tomohito Otobe (National Institute for Quantum and Radiological Science and Technology)

Prof. Takeshi Sato (University of Tokyo)

Prof. Masahiro Shibuta (Keio University)

Prof. Tomohisa Takaya (Gakushuin University)

Prof. Tomokazu Yasuike (The Open University of Japan)

以下にプログラムを示す。

March 6th (Mon.)

12:00-	Registration
13:00-13:10	Opening Remarks: Yasuteru Shigeta (University of Tsukuba)

Chair: Yasuteru Shigeta

13:10-13:55	[Keynote Lecture] “Molecular science of nonadiabatic electron wavepacket” Kazuo Takatsuka (Fukui Institute for Fundamental Chemistry)
13:55-14:20	“Ultrafast molecular imaging by laser-assisted electron scattering” Reika Kanya (University of Tokyo)

Chair: Toshinori Suzuki

14:30-15:15	“Measuring attosecond electron dynamics in molecules and liquids” Hans Jakob Wörner (ETH Zürich)
15:15-16:00	“Electronic fluxes during intramolecular adiabatic attosecond charge migration” Jörn Manz (Shanxi University; Freie Universität Berlin)

Chair: Kim Hyeon-Deuk

16:10-16:35	“Single-active-electron analysis of laser-polarization effects on atomic/molecular multiphoton excitation” Manabu Kanno (Tohoku University)
16:35-17:00	“Automated search for internal conversion and intersystem crossing pathways: Application to photoreactions” Yu Harabuchi (JST PRESTO; Hokkaido University)
17:00-17:25	“Sub-cycle nonlinear response under intense laser field: Theory, Simulation, and Experiment” Tomohito Otobe (National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology)
17:40-19:10	Poster Session

March 7th (Tue.)

Chair: Kazuo Takatsuka

09:00-09:45	[Keynote Lecture] “Ultrafast nonadiabatic photochemistry of hydrogen bonds in organic and biological chromophores” Wolfgang Domcke (Technical University of Munich)

Chair: Tomohito Otobe

09:45-10:10	“Hot-carrier induced multidimensional nonequilibrium dynamics of adsorbate: CO desorption from Cu(100)” Tomokazu Yasuike (The Open University of Japan)
10:10-10:35	“Molecular Dynamics of Photofunctionalized Liquid Crystal” Masaki Hada (Okayama University)

Chair: Hiroaki Benten

10:50-11:35 "Excited state dynamics in nanoscale materials for solar energy harvesting"
Oleg Prezhdo (University of Southern California)

11:35-12:00 "Ultrafast near-IR stimulated Raman spectroscopy of photoexcited π-conjugate molecules in solution"
Tomohisa Takaya (Gakushuin University)

12:00-12:25 "Photoexcited Electron Dynamics of Organic Molecular Films Studied by Two-Photon Photoemission"
Masahiro Shibuta (Keio University)

Chair: Tomokazu Yasuike

14:00-14:45 "X-Ray Spectroscopy and Ultrafast Spin-Flip Dynamics of Transition Metal Complexes"
Oliver Kühn (University of Rostock)

14:45-15:10 "Direct observation of bond formation by femtosecond X-ray solution scattering"
Shin-ichi Adachi (KEK)

Chair: Masahiro Shibuta

15:25-16:10 "Ultrafast multidimensional space- and time-resolved spectroscopies of supramolecular structures"
Tobias Brixner (Universität Würzburg)

16:10-16:35 "Charge generation and recombination dynamics in polymer donor/polymer acceptor blend solar cells"
Hiroaki Benten (Nara Institute of Science and Technology)

16:35-17:20 "High-dimensional quantum dynamics of functional organic polymer materials: Coherence, disorder effects, and localization"
Irene Burghardt (Goethe University Frankfurt)

17:20-17:45 "Multiple exciton generation/recombination dynamics in quantum dot and hyper-structured quantum dots"
Kim Hyeon-Deuk (Kyoto University)

18:00-20:00 Banquet

March 8th (Wed.)

Chair: Wolfgang Domcke

09:00-09:45 [Keynote Lecture]
"Time and Angle-Resolved Photoelectron Spectroscopy of Non-adiabatic Dynamics in Gas and Liquid Phases"
Toshinori Suzuki (Kyoto University)

Chair: Manabu Kanno

09:45-10:10 "Time-dependent ab initio wavefunction methods for multielectron dynamics of atoms and molecules in intense laser fields"
Takeshi Sato (University of Tokyo)

10:10-10:55 "Strong-field tunnel ionization of current-carrying molecular orbitals"
Ingo Barth (Max Planck Institute of Microstructure Physics)

Chair: Reika Kanya

11:05-11:30 "Ultrafast EUV photoelectron spectroscopy of molecular Rydberg wavepacket dynamics by single-order laser high harmonics"
Mizuho Fushitani (Nagoya University)

11:30-12:15 "Electron-Ion Dynamics in Strong Fields: The Exact Factorization Perspective"
Neepa T. Maitra (The City University of New York)

Chair: Takefumi Yamashita (University of Tokyo)

13:40-14:05 "Time-resolved impulsive stimulated Raman study of green fluorescent protein: Role of a coherent low frequency mode in the excited state proton transfer"
Tomotsumi Fujisawa (Saga University)

14:05-14:50 "Path-integral methods for non-adiabatic chemical dynamics"
Thomas F. Miller III (California Institute of Technology)

14:50- Closing Remarks: Shinji Saito (Institute for Molecular Science)

Poster Session

P01 "Semiclassical computation of photoelectron signals from conical intersection dynamics"
Yasuki Arasaki and Kazuo Takatsuka

P02 "Vacuum ultraviolet photoelectron imaging of non-adiabatic dynamics in isolated molecules"
Takuya Horio and Toshinori Suzuki

P03 "Dynamics of photoionization from molecular electronic wavepacket states in intense pulse laser fields"
Takahide Matsuoka and Kazuo Takatsuka

P04 "Adiabatic electronic motion in forming covalent bond"
Michihiro Okuyama

P05 "Multiple classical trajectories can reproduce quantum nuclear motion in strong-field processes"
Yasumitsu Suzuki and Kazuyuki Watanabe

P06 “Photodynamical electron-wavepacket mechanism of water-splitting catalyzed by manganese oxides involving hydrogen-bond network”
Kentaro Yamamoto and Kazuo Takatsuka

P07 “Ultrafast annihilation dynamics of photosystem II monomer and dimer”
Yusuke Yoneda, Tetsuro Katayama, Yutaka Nagasawa, Hiroshi Miyasaka, and Yasufumi Umena

P08 “Correlated electron–nuclear dynamics: Exact factorization of the time-dependent electron–nuclear wavefunction, exact potential energy surfaces and Berry phases”
Ali Abedi

P09 “Electronic non-adiabatic dynamics in enhanced ionization of isotopologues of hydrogen molecular ion from the exact factorization perspective “
Elham Khosravi, Ali Abedi, Angel Rubio, and Neepa T. Maitra

P10 “Strong-field ionization of rotationally state-selected NO”
Kotaro Sonoda, Atsushi Iwasaki, Kaoru Yamanouchi, and Hirokazu Hasegawa

P11 “Development of classical force fields for thermal transport in methylammonium lead halide”
Tomoyuki Hata, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita, Claudia Caddeo, and Alessandro Mattoni

P12 “LHCSR3 dissipates excitation energy within the light-harvesting complex of photosystem II in green algae *Chlamydomonas reinhardtii*”
Eunchul Kim, Ryutaro Tokutsu, Makio Yokono, Seiji Akimoto, and Jun Minagawa

P13 “A development of the constant uncertainty molecular dynamics technique to simulate real-time nuclear quantum dynamics”
Taisuke Hasegawa

P14 “Glassy dynamics and Kauzmann temperature of water: Vibrational and configurational contributions revealed by quantum mechanical complex entropy”
Shinji Saito

会 議 名：第 78 回岡崎コンファレンス

“Grand Challenges in Small-Angle Scattering”

期　　間：2017 年 3 月 18 日（土）～ 20 日（月）

場　　所：岡崎コンファレンスセンター

組織委員：秋山 修志（分子科学研究所），上久保 裕生（奈良先端科学技術大学院大学），杉山 正明（京都大学）

内　　容：

Molecular systems are the main players directing energy- and material-conversions in the natural world, and they are not mere molecular aggregations. In the case of biological systems, we find complicated and dynamic behaviors of protein molecules, which are assembled and then interact further with other macromolecules under heterogeneous conditions. There is still no universal and straightforward way to visualize those structures, because the composition and stoichiometry in the system often change in a time-dependent manner.

Small-angle scattering is one of the effective analytical tools for hierarchical bio-molecular systems, providing size and shape information from sub-nanometer to micrometer in real-time. In this conference, the fundamentals of the solution scattering will be first overviewed, and then recent applications of x-ray/neutron solution scattering to the molecular system sciences will be shared with life-science students/researchers in mind. Furthermore, the organizers would like to provide an opportunity to think about an East Asian SAS community through discussions with the leading scientists invited from Taiwan and Korea SAS communities (SESSION 2).

外国人招待講演者を以下に挙げる。

Dmitri Svergun (European Molecular Biology Laboratory, Hamburg, Germany)

Pau Bernado (Centre de Biochimie Structurale, France)

Nozomi Ando (Princeton University, U.S.A.)

U-Ser Jeng (National Synchrotron Research Center, Taiwan)

Sangho Lee (Sungkyunkwan University, Korea)

Frank Gabel (Institut de Biologie Structurale, Grenoble, France)

Ralf Biehl (Jülich Centre for Neutron Science, Julich, Germany)

Maxim Petoukhov (Russian Academy of Sciences, Russia)

Jochen Hub (Institute for Microbiology and Genetics, Germany)

また，日本人招待講演者を以下に挙げる。

Hironari Kamikubo (Nara Institute of Science and Technology)

Shuji Akiyama (Institute for Molecular Science)

Masaaki Sugiyama (Kyoto University)

Satoru Fujiwara (National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology)

Tomotaka Oroguchi (Keio University)

Kazuki Ito (Rigaku Corporation)

Ryoichi Arai (Shinshu University)

Sachiko Toma-Fukai (University of Tokyo)

プログラム等は以下のようであった。

The 78th Okazaki Conference
Grand Challenges in Small-Angle Scattering
Date: March 18–21, 2017
Site: Okazaki Conference Center (OCC)
Website: https://registration.ims.ac.jp/Sas2017/
Aim

Molecular systems are the main players directing energy- and material-conversions in the natural world, and they are not mere molecular aggregations. In the case of biological systems, we find complicated and dynamic behaviors of protein molecules, which are assembled and then interact further with other macromolecules under heterogeneous conditions. There is still no universal and straightforward way to visualize those structures, because the composition and stoichiometry in the system often change in a time-dependent manner.

Small-angle scattering is one of the effective analytical tools for hierarchical bio-molecular systems, providing size and shape information from sub-nanometer to micrometer in real-time. In this conference, the fundamentals of the solution scattering will be first overviewed, and then recent applications of x-ray/neutron solution scattering to the molecular system sciences will be shared with life-science students/researchers in mind. Furthermore, the organizers would like to provide an opportunity to think about an East Asian SAS community through discussions with the leading scientists invited from Taiwan and Korea SAS communities (SESSION 2).

Program

March 18, 2017

14:00 - 18:00	Desk Opening

March 19, 2017

9:00 - 9:10	Welcome Address
9:10 - 10:10	Plenary Session 1 (chair: **Shuji Akiyama**, Institute for Molecular Science)
	Dmitri Svergun (European Molecular Biology Laboratory) “Modern small-angle scattering from biomacromolecular solutions”
10:30 - 12:00	Session 1: Challenges in Molecular Systems (chair: **Tetsuro Fujisawa**, Gifu University)
	Hironari Kamikubo (Nara Institute of Science and Technology) “Structural Exploring Multi-component Equilibrium in Biological Systems by using Continuous Titration SAXS”
	Pau Bernado (Centre de Biochimie Structurale) “Disentangling Polydispersity in Biological Systems by SAXS”
	Nozomi Ando (Princeton University) “Protein Dynamics from X-Ray Scattering and Diffraction”
12:00 - 13:00	Group Photo & Lunch
13:00 - 16:00	Poster Presentation

16:00 - 17:30 Session 2: Challenges as East Asian Core (chair: **Hironari Kamikubo**, Nara Institute of Science and Technology)

U-Ser Jeng (National Synchrotron Research Center)
"Current and Future Biological Small-angle X-ray Scattering at the National Synchrotron Radiation Research Center"

Sangho Lee (Sungkyunkwan University)
"BioSAXS studies of proteins involved in deciphering ubiquitin codes"

Shuji Akiyama (Institute for Molecular Science)
"Biological X-Ray Solution Scattering Activities at the Institute for Molecular Science"

18:00 - 20:00 Dinner Party

March 20, 2017

9:00 - 10:00 Plenary Session 2 (Canceled)

10:00 - 12:00 Session 3: Challenges in Neutron Scattering (chair: **Mamoru Sato**, Yokohama City University)

Masaaki Sugiyama (Kyoto University)
"Neutron Scattering for Bio-Molecular Systems—How to Utilize Neutron?"

Frank Gabel (Institut de Biologie Structurale)
"Small-angle neutron scattering: A powerful structural biology tool for challenging biomacromolecular complexes"

Satoru Fujiwara (National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology)
"Hydration Structures around Proteins Studied by Neutron and X-ray Small-Angle Scattering"

Ralf Biehl (Jülich Centre for Neutron Science)
"Slow internal protein dynamics in solution observed by Neutron Spinecho Spectroscopy"

13:30 - 15:00 Session 4: Challenges from Current Topics (chair: **Masaaki Sugiyama**, Kyoto University)

Kazuki Ito (Rigaku Corporation)
"Advances in Laboratory SAXS Instruments"

Ryoichi Arai (Shinshu University)
"Dynamical Ordering Nanostructures Constructed from Protein Nanobuilding Blocks"

Sachiko Toma-Fukai (University of Tokyo)
"Novel helical assembly in arginine methyltransferase 8"

15:20 - 16:50 Session 5: Challenges in Analysis and Evaluation (chair: **Satoru Fujiwara**, National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology)

Maxim Petoukhov (Russian Academy of Sciences)
"Ambiguity Assessment of Small-Angle Scattering Curves from Monodisperse Homogenious Systems"

Tomotaka Oroguchi (Keio University)
"Protein Conformational Fluctuations Investigated by X-Ray Solution Scattering and Molecular Dynamics Simulation"

Jochen Hub (Institute for Microbiology and Genetics)
"Interpretation of Solution X-Ray Scattering Data by Explicit-Solvent Molecular Dynamics"

16:50 - 17:00 Closing

March 21, 2017

10:00 - 12:00 Site Visit (for participants wishing to visit IMS, UVSOR, *etc.*)

12:00 Departure

3-4-3　日韓共同研究

分子科学研究所と韓国科学技術院（KAIST，Korea Advanced Institute of Science and Technology）の間で，1984 年に分子科学分野での共同研究プロジェクトの覚書が交わされ，日韓合同シンポジウムや韓国研究者の分子科学研究所への招聘と研究交流が行われてきた。またこの覚書は 2004 年から 4 年ごとに更新を行っている。なお，韓国側の組織体制の都合上，この覚書の中の日韓合同シンポジウムに関しては，2006 年に分子科学研究所と韓国化学会物理化学ディビジョン（Physical Chemistry Division, The Korean Chemical Society）との間のものに変更して更新されている。

日韓合同シンポジウムは第 1 回を 1984 年 5 月に分子科学研究所で開催して以来，2 年ごとに日韓両国間で交互に実施している。最近では，2005 年 3 月に第 11 回シンポジウム「分子科学の最前線」を分子科学研究所で開催した。このシンポジウムは，文部科学省の「日韓友情年 2005（進もう未来へ，一緒に世界へ）」記念事業としても認定された。その後，第 12 回シンポジウム「光分子科学の最前線」（済州島，2007 年 7 月），第 13 回シンポジウム「物質分

子科学・生命分子科学における化学ダイナミクス」（淡路島，2009年7月），第14回シンポジウム“New Visions for Spectroscopy & Computation: Temporal and Spatial Adventures of Molecular Science”（釜山，2011年7月），第15回シンポジウム“Hierarchical Structure from Quantum to Functions of Biological Systems”（神戸，2013年7月）を開催してきた。第16回シンポジウムを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，2017年7月に開催が延期された。今後も，日韓両国の研究者による活発な研究・人材交流が進むことが期待される。

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 ～ 2006	07	08	09	10	11	12	13	14	15	16
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	2
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	5	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	83	4	6	6	4	11	12	11	9	12	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	43	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	20										
名古屋市立大学	21	5	4	4	4	2	3	2	2	1	2
大阪市立大学	4										
大阪府立大学	2										
姫路工業大学	1										
学習院大学	1										
北里大学	2										
慶應義塾大学	9										
上智大学	1										
立教大学							1	1			
中央大学					1						
東海大学	3										
東京理科大学	9										
東邦大学	3										
星薬科大学	1										
早稲田大学	13										
明治大学	1										
名城大学	4										
岡山理科大学	1										
＊その他		3		1	1	3	6	6	8	4	1
計	633	17	17	17	17	27	30	24	27	26	17

＊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（2016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	7	19
機能分子科学専攻	10	7	22
計	17	14	41

在籍学生数（2016年12月現在） 単位：人　（年度別）

入学年度専攻		2012	2013	2014	2015	2016	計	定　員
構造分子科学専攻	５年一貫	3	1	2	3	5	14	2
	博士後期	0	0	6	4	1	11	3
機能分子科学専攻	５年一貫	0	0	0	3	5	8	2
	博士後期	0	1	1	1	3	6	3

学位取得状況　単位：人　（年度別）

専　攻	1991 ～ 2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	95(11)	5(1)	7	5	2	2	6	4	2	4	0	132(12)
機能分子科学専攻	79(14)	1	4	3	5	1	3	6	1(3)	3	2	108(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 ～ 2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016
構造分子科学専攻	131(1)	8(1)	5(1)	5(3)	5(1)	1(1)	6(2)	5(4)	11(4)	7(3)	6(5)
機能分子科学専攻	112	5(1)	5(2)	7(2)	4(2)	6(2)	8(2)	4	2(1)	4(3)	8(5)

（　）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		
	1989-2014年度	2015年度	2016年度	1989-2014年度	2015年度	2016年度
中　国	31	1		11		1
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		1
チェコ				1		

韓国	2					
ナイジェリア				1		
ネパール	2			3		
フィリピン				2		
ベトナム				2		
タイ	1	1		4		2
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 ～ '14 年度	'15 年度	'16 年度	'89 ～ '14 年度	'15 年度	'16 年度	
北海道大学	2			2			4
室蘭工業大学	1			1			2
東北大学	1			2(1)			3(1)
山形大学				3			3
筑波大学	1			1			2
群馬大学				1			1
千葉大学	5	1(1)	1	3			10(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	5(2)		1(1)	7		2(2)	15(5)
名古屋工業大学	1					1(1)	2(1)
豊橋技術科学大学	5			3(1)			8(1)
三重大学	1						1
京都大学	14(1)	1	1(1)	16	1		33(2)
京都工芸繊維大学	1			1			2
大阪大学	6(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)
宇部工業高等専門学校						1(1)	1(1)
北九州工業高等専門学校			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(1)	1			4(1)
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
神奈川大学			1(1)				1(1)
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	44(3)	3		30(3)		4(1)	81(7)

＊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（2016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	12	14	26
大学・公的機関等研究職	35	35	70
民間企業	25	16	41
その他	25	21	46
計	133	109	242

3-5-3　オープンキャンパス・分子研シンポジウム

2016年5月27日（金）に分子研シンポジウム2016を開催し，引き続き28日（土）に分子研オープンキャンパス2016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10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4名の先生方に講演をお願いした。参加登録者数は，所外からは61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，学部学生42名，大学院生11名，大学教員6名，中学教諭1名，民間企業1名であった。所内からの参加者数は38名と多数参加頂いた。

参加者数まとめ

	学部学生	修士課程	博士課程	教員・その他	民　間	合　計
北海道	2	0	0	0	0	2
東　北	0	0	0	0	0	0
関　東	11	1	2	2	0	16
甲信越	2	1	0	0	0	3
北　陸	0	3	0	0	0	3
東　海	10	1	0	0	0	11
近　畿	16	1	1	4	2	24
中国・四国	1	0	0	0	0	1
九州・沖縄	0	1	0	0	0	1
合　計	42	8	3	6	2	61

3-5-4　夏の体験入学

2016年8月8日（月）から11日（木）までの4日間，分子科学研究所において，第13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，定員を大幅に上回る応募（52名）を受け，選考の結果，26名の学生に参加いただいた。実施スケジュールは以下のとおりである。

8月8日（月）：オリエンテーション，UVSORと計算科学研究センターの見学
　　交流会
8月9日（火），10日（水）：配属研究室にて研究体験
8月11日（木）：体験内容報告会

参加者の内訳，体験内容，受入研究室は以下の通りである。

	所属	学年	体験内容	対応教員
1	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
2	八戸工業高等専門学校	学部４年		
3	名古屋市立大学	学部２年	タンパク質で生物時計を作ってみよう	秋山　教授
4	北海道大学	学部３年		
5	東京大学	修士２年		
6	慶應義塾大学	学部３年	タンパク質 1 分子の動きを観察してみよう	飯野　教授
7	大阪市立大学	学部３年		
8	徳島大学	学部３年	遷移金属ナノ触媒を作る！	魚住　教授
9	東京理科大学	学部３年		
10	電気通信大学	修士１年	ボース・アインシュタイン凝縮体のスピン観測実験	大森　教授
11	九州大学	修士２年		
12	京都大学	修士１年	ナノの金属ロッドを作って波動関数を見る	岡本　教授
13	名古屋大学	修士１年	分子動力学シミュレーションを学び体験する	奥村　准教授
14	名城大学	学部３年	超高真空を知る見る触る：電子波を使って分子の並びを確認しよう	解良　教授
15	北海道大学	学部３年	有機半導体セキシチオフェンの合成	鈴木　准教授
16	東京理科大学	学部３年	光シンセサイザー マイクロ固体フォトニクスからのアプローチ	平等　准教授
17	山口大学	学部４年	角度分解光電子分光による固体の電子状態の直接観測	田中　准教授
18	学習院大学	学部３年	機能性材料，有機ラジカル，生体関連物質の電子スピン共鳴観測や磁性計測	中村　准教授
19	中央大学	学部３年	有機 EL 素子の作製と発光測定	平本　教授
20	上智大学	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
21	創価大学	学部４年	膜タンパク質の物質輸送および情報変換機構の研究	古谷　准教授
22	北里大学	学部３年	金属錯体で学ぶ人工光合成	正岡　准教授
23	城西大学	学部３年		
24	名古屋工業大学	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
25	関西大学	学部３年		
26	東京工業大学	学部４年		

3-5-5　総研大アジア冬の学校

2016 年 12 月 14 日（水）から 15 日（木）の期間，岡崎コンファレンスセンターにおいて，総研大「アジア冬の学校」が開催された。総研大・物理科学研究科では，研究科内の５専攻で行っている研究・教育活動をアジア諸国の大学院生及び若手研究者の育成に広く供するために，2004 年度よりアジア冬の学校を開催してきた。分子研（構造分子科学専攻・機能分子科学専攻）での開催は今回で 13 回目である。アジア諸国から多数の応募があり，書類選考を経て，７名を受け入れた。海外からの参加者１名，所外の国内参加者１名，インターンシップ（IIP：IMS 国際インターンシッププログラム）の留学生６名，所内から 52 名の参加登録があった。今回は，「分子科学，新分野への挑戦」をテーマに，分子科学の基礎にはじまり，最先端の研究および将来展望が紹介された。また，参加者によるポスター発表が行われた。講演者は下記のとおりである。

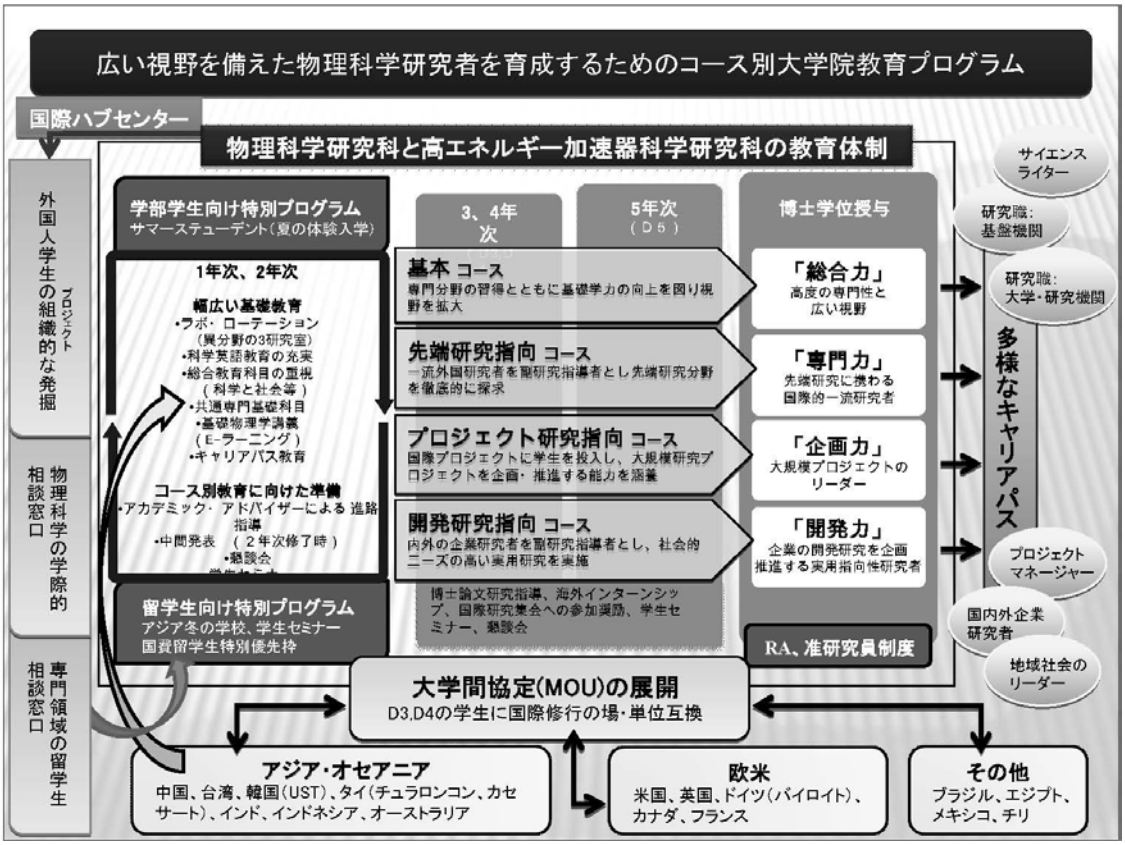
ISHIZAKI, Akihiko (IMS, SOKENDAI)
NAKAMURA, Toshikazu (IMS, SOKENDAI)

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 年度以降は，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）。

2016 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，11 科目（①統合生命科学入門，②機能生体分子科学，③イメージング科学，④生体分子シミュレーション入門，⑤生物情報学（e- バイオサイエンス概論，遺伝学，生物統計学基礎，生物情報処理），⑥生命起源論，⑦定量生物学，⑧統合生命科学実践コース，⑨発生生物学 II，⑩進化ゲノム生物学，⑪統合生命科学シリーズ）が実施された。昨年度より新設された統合生命科学実践コース（講義と実地演習からなる複合科目）では，実地演習時に遠隔地の大学院生に対し旅費支援を行い参加可能とした。講義内容とともにサポート面でも充実した科目となった。

(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，機能分子科学専攻の飯野亮太教授がオーガナイザーで「Observe, Read, Create the Life」というタイトルで 8 月に開催された。海外からも多くの参加者があり，講師や討論参加者を含めた数は 94 名に達した。2 日間にわたる講義では，若手や留学生から活発な議論があり盛会であった。2 日目の午前に実施された岡崎統合バイオサイエンスセンターのラボ見学も好評であった。

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，研究力強化戦略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 2016 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線回折装置，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	
平成 28	名古屋大学	平成 28 年 9 月 8-9 日	機器・分析	
	東京大学	平成 29 年 3 月 9-10 日	機械加工・ガラス，実験装置・大型実験，回路・計測制御，低温，情報・ネットワーク，フィールド･農林水産海洋，生命科学，分析，実験実習・社会貢献，建築・土木・資源開発，施設管理・環境安全衛生，文化財保存	

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。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
平成 27 年度	6

表３　平成 28 年度技術研修受入状況（2016.4.1 ～ 2017.3.31）

氏　　名	所　　属	受入期間	備　　考
星野　英夫	長岡技術科学大学技術支援センター	H28.8.8 ～ 8.9	技術職員の研修企画の手法について
青山　正樹	宇宙科学研究所先端工作技術グループ	H29.1.12 ～ 1.13	磁場設計技術研修
安藤　敬子	鳥取大学技術部	H29.2.15 ～ 2.16	技術討論会「PLDにおける効率的な開発とデパック手法」
伊藤　康彦	核融合科学研究所	H29.2.15 ～ 2.16	技術討論会「PLDにおける効率的な開発とデパック手法」
八幡　和志	東京大学大学院理学系研究科	H29.2.15 ～ 2.16	技術討論会「PLDにおける効率的な開発とデパック手法」
阿部　茂樹	東北大学工学部・工学研究科	H29.2.15 ～ 2.16	技術討論会「PLDにおける効率的な開発とデパック手法」
濱田英太郎	高エネルギー加速器研究機構素粒子原子核研究所	H29.2.15 ～ 2.16	技術討論会「PLDにおける効率的な開発とデパック手法」

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 28 年度において研究施設内での事故や火災などを想定した研究所独自の「安全･防災マニュアル（仮題）」の早急な整備に取り組みつつある。

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23回開催されている。

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，大峯巌所長が「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)。第21回では，正岡重行准教授が「人工光合成への挑戦～植物に学ぶ分子デザイン～」というタイトルで講演を行った。

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。

実施状況は以下の通り。

回	開催日	テーマ	会場
1	2006. 3.21	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
2	2006. 9.24	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
3	2007. 3.21	宇宙の核融合・地上の核融合	東京国際フォーラム
4	2007. 9.23	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
5	2008. 3.20	解き明かされる脳の不思議	東京国際フォーラム
6	2008. 9.23	宇宙究極の謎	東京国際フォーラム
7	2009. 3.20	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
8	2009. 9.23	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
9	2010. 3.21	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
10	2010.10.10	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
11	2011. 6.12	宇宙と生命—宇宙に仲間はいるのか II—	ナディアパーク
12	2012. 3.20	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

13	2012. 9.29	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
14	2013. 3.20	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
15	2013.10.14	アストロバイオロジー	学術総合センター一橋記念講堂
16	2014. 3. 8	天体衝突と生命進化	名古屋市科学館サイエンスホール
17	2014. 9.23	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
18	2015. 3.22	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
19	2015. 9.15	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
20	2016. 3.13	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
21	2016.10.10	地球にやさしいエネルギーの未来	東京工業大学蔵前会館
22	2017. 2.11	大隅良典基礎生物学研究所名誉教授 ノーベル生理学・医学賞受賞記念講演	岡崎市民会館
23	2017. 3. 5	現代天文学のフロンティア —系外惑星とダークな宇宙—	東京国際交流館

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。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，第７回），および各種の大型分子模型（第４回，第５回，第６回，第７回），研究者トーク（第６回，第７回）等を通じて研究活動に関する詳しい説明を行った。

実施状況は以下の通り。

回	開催日	テーマ	会場
1	2010.11.20	万物は流転する	ベルサール秋葉原
2	2011.11.26	万物は流転する II	ベルサール秋葉原
3	2012.11.17	万物は流転する～誕生の謎	東京国際フォーラム
4	2013.11.16	万物は流転する～因果と時間	東京国際フォーラム
5	2014.11.22	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	東京国際フォーラム
6	2015.11.29	研究者に会いに行こう！ —大学共同利用機関博覧会—	アキバ・スクエア
7	2016.11.27	研究者に会いに行こう！ —大学共同利用機関博覧会—	アキバ・スクエア

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
109	2016. 6. 3	化学分析で読み解く古代人の食生活	米田　　穣 （東京大学教授）
110	2016. 9. 9	クモ糸から始まる素材革命	菅原　潤一 （Spiber株式会社取締役兼執行役）
111	2017. 2. 3	タンパク質分子の合理デザイン	古賀　信康 （分子科学研究所准教授）
		分子建築の匠をめざして	椴山　儀恵 （分子科学研究所准教授）
112	2017. 3.24	生物発光が拓く生命科学と未来社会	永井　健治 （大阪大学教授）

4-3-4　分子研コロキウム

分子研コロキウムは今年度で900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2016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
888	2016. 5.20	Chiral Polytopic Ligands as Tools for the Synthesis of Metallo-Polymers. Application to Asymmetric Catalysis	Prof. Stéphane Bellemin-Laponnaz （Strasbourg University）
889	2016. 6.15	Theoretical Aspects of the Molecular Dynamics and Spectroscopy Involving in Electronically Excited States	Prof. Chaoyuan Zhu （National Chiao-Tung University）
890	2016. 7.15	放射光２次元光電子分光による構造・電子状態の 3D 解析 3D Analysis of Atomic Structure and Electronic State by Two-Dimensional Photoelectron Spectroscopy Using Synchrotron Radiation	大門　　寛 （奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科教授）
891	2016. 9.16	走査トンネル顕微鏡によるスピン・超伝導特性のナノスケール計測 Nano-Scale Characterization of Spin and Superconductivity by Scanning Tunneling Microscopy	長谷川幸雄 （東京大学物性研究所准教授）
892	2016.10.11	Building with Crystals of Light and Quantum Matter: From Clocks to Computers	Dr. Ana Maria Rey （JILA, University of Colorado/NIST）
893	2016.11.18	超柔軟有機デバイスのウェアラブルエレクトロニクス応用 Ultraflexbile Organic Devices for Wearable	染谷　隆夫 （東京大学大学院工学系研究科教授）
894	2016.11.30	What Does a Publisher Do? —from Submission to Publication and Beyond—	Dr. Hiromitsu Urakami （RSC Manager, Royal Society of Chemistry Japan）
895	2016.12.16	X-Ray Crystallography and Spectroscopy of Photosystem II Using a Femtosecond X-Ray Laser	Dr. Junko Yano （Lawrence Berkeley National Laboratory）
896	2017. 1.16	Structure and Dynamics of Water Molecules at the Water-Air and Ice Interfaces	Prof. Dr. Mischa Bonn （Max-Planck Institute for Polymer Research (MPIP)）
897	2017. 1.20	特殊ペプチド創薬:基礎研究からイノベーションへ，その一例としてのペプチドリーム社 From Basic Science to Innovation in Pseudo-Natural Peptide Drug Discovery, an Example of PeptiDream Inc.	菅　　裕明 （東京大学大学院理学系研究科教授）
898	2017. 1.23	Probing Quantum Nature of Interfacial Water at Atomic Scale	Prof. Ying Jiang （Peking University）
899*	2017. 3.13	Two Dimensional Ultrafast Spectroscopic Studies of Materials and Biological Systems	Prof. Graham R. Fleming （University of California, Berkeley）
900	2017. 3.13	Structure and Dynamics in Cold Aqueous Clusters: Quantum and Classical Perspectives	Prof. Peter J. Rossky （Rice University）
901*	2017. 3.14	Molecular Surface Science: Uncovering Reaction Mechanisms in Electronics and Catalysis	Prof. Stacey F. Bent （Stanford University）
902	2017. 3.15	結晶スポンジ法の開発とカルボニルひもの化学への展開 Development of the Crystalline Sponge Method and Chemistry of Polycarbonyl Strings	猪熊　泰英 （北海道大学大学院工学研究院准教授）

＊森野レクチャーとの共同開催

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），第８回（2016 年 12 月 27 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
118	2016.11. 1	人工光合成への挑戦～植物に学ぶ分子デザイン～	正岡　重行　准教授

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
美川中	2016. 7.13	原子，分子って何？	斉藤　真司　教　　授
翔南中	2016.11. 8	光る分子とエネルギーの話	山本　浩史　教　　授
矢作北中	2016.12. 2	身近な化学反応から学ぼう！ タンパク質のかたちとはたらき	矢木　真穂　助　　教
福岡中	2016.12. 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
城北中	2017. 2.14	宇宙の光で見えない原子・分子を探る	繁政　英治　准 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
2016	6	8	岡崎市立北中学校，岡崎市立翔南中学校，岡崎市立城北中学校，高浜市立高浜中学校，豊田市立上郷中学校，豊田市立益富中学校

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。2016 年度は，写生会が雨天により中止となったため表彰が行われなかった。

4-5　一般公開

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

回　数	実施月日	備　　考
第１回	1979.11. 9 (Fri)	創設記念一般公開
第２回	1980.11.15 (Sat)	
第３回	1981.11.14 (Sat)	３研究所同時公開
第４回	1985. 5.11 (Sat)	10 周年記念一般公開
第５回	1988.11. 5 (Sat)	入場者　1700 人
第６回	1991.10.26 (Sat)	入場者　1974 人
第７回	1994.11.12 (Sat)	入場者　2700 人
第８回	1997.11.15 (Sat)	入場者　2400 人
第９回	2000.10.21 (Sat)	入場者　1183 人
第 10 回	2003.10.25 (Sat)	入場者　1600 人
第 11 回	2006.10.21 (Sat)	入場者　2058 人
第 12 回	2009.10.17 (Sat)	入場者　1346 人
第 13 回	2012.10.20 (Sat)	入場者　1126 人
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 わかやま産業振興財団　ほか
2016	9	281	愛知県弁護士会，星城高等学校，愛知教育大学，東国大学付属女子高等学校（韓国），新潟県立高田高等学校，山梨県立日川高等学校，浜松南高等学校，東海大学附属高輪台高等学校，愛知県労働福祉協議会三河６区友の会

（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
2016	1	18

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」重点課題⑤）」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促進」）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。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」事業が平成19年度よりスタートした。このプロジェクトは，平成22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（以下「本事業」という）として経常経費化され，現在まで継続されており，機器センターが運営を担っている。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の機関が参加しており，外部公開機器の登録台数は535台（本ネットワークの予約・課金システムを通して利用できる設備），紹介のみの登録設備（各参画機関の独自の予約・課金システムを通して利用できる設備）を含めると1722台に登り（数値は平成29年1月15日現在），登録ユーザー数は10,000名を超えている。表1には利用実績件数を示した。平成19年度に始動したが，学内の共同利用（学部間利用）は十分に実施されているといえ，学外利用も順調に増加傾向にある。本事業は平成27年度が最終年度であったが，平成28年度も暫定的に1年延長して事業継続した。全国13の地域から提案され採択された設備復活再生（表2）と講習会・研修会開催（表3）などを実施した。また，平成28年度は，設備ネットワークマネージャー等の人件費ならびに予約・課金システムの全面的な更新経費が機構予算として認められた。これにより，マネージャー主導による講習会・研修会も開催し（表4），多くの参画機関への訪問・要望調査等を行った。また，予約・課金システムの仕様を，外部参画機関を含む委員会により入念に検討し，平成29年度に納入される予定である。なお，平成27年度において指摘を受けた会計検査院改善要求については処置済の運びとなった。

暫定延長された本事業は本年度で終了し，来年度以降は第3期中期計画に合わせて5年計画で新規継続する計画である。

・ 各機関が所有する研究設備を相互利用・共同利用に広く活用すること
・ 各機関が相互利用・共同利用に供与する既存の研究設備を対象とする大学連携研究設備ネットワーク予約・課金システムの運用と改善
・ 予約・課金システムに登録した研究設備の相互利用・共同利用
・ 研究設備の相互利用・共同利用を促進するための講習会等の開催，各機関の技術支援員等の人材育成を目的とした研修会等の開催
・ 他の共同利用，共用事業等との連携による相互利用・共同利用の推進

などを目的とした新規事業を本年度中に確定する。ここで，他の共同利用，共用事業等とは設備サポートセンター整備事業，国立大学法人機器･分析センター協議会，新共用システム，ナノテクノロジープラットフォーム，共用プラットフォーム等の共同利用・共用事業を指す。また，本事業は，平成29年度より，機構本部の自然科学大学間連携推進機構（NICA）計画における分子研事業としても実施され，これまでは研究者間のつながりで運営されていたネットワーク型共同研究について機関間の組織的な関係を強化し一層の発展を目指すことを目的に，連携の強化や集約による分野別予算の確保や人的・物的資源の有効活用，さらには，大学の研究力に資する方策の検討を行い，大学の機能強化へ貢献する共同研究・事業などを実現していくこととなる。

表１　大学連携研究設備ネットワーク利用実績一覧

			H19 ～ 28 合計	H24	H25	H26	H27	H28
学内			627,695	85,087	88,453	108,824	112,982	111,728
	学部間		449,373	54,772	64,711	85,214	86,544	80,219
学外			6,389	578	887	1,176	1,312	1,544
	国立大間		4,373	490	576	682	760	807
	国立大以外		2,016	88	311	494	552	737
		民間企業	854	25	162	240	226	298
合計			634,084	85,665	89,340	110,000	114,294	113,272

表２　平成 28 年度復活再生採択課題一覧

地域	大学	部署	代表者	職	課題名・設備名
東関東	千葉大	共用機器センター	桝飛雄真	准教授	透過型電子顕微鏡（日本電子・JEM-2100F）S-EK-CU-CAC-21
北陸	金沢大	理工研究域物質科学系	太田明雄	准教授	小角Ｘ線散乱装置（リガク・Nano-Viewer）
西近畿	大阪大	産業科学研究所	鈴木健之	准教授	高輝度Ｘ線回折装置（リガク・FR-E Cu）
中国	岡山大	自然生命科学研究支援センター	田村　隆	教授	CHN 元素分析装置（パーキンエルマー・2400II 型）
中国	岡山大	自然生命科学研究支援センター	田村　隆	教授	ペプチドシーケンサー（島津製作所・PPSQ-31A 型）
九州	長崎大	産学官連携戦略本部	真木俊英	准教授	二重収束型質量分析装置（JEOL・JMS-700N）
九州	長崎大	産学官連携戦略本部	真木俊英	准教授	元素分析装置（パーキンエルマー・2400II 型
九州	鹿児島大	自然科学教育研究支援センター	澤田　剛	准教授	Ｘ線光電子分析装置の雰囲気制御可能な試料導入システムの設置

表３　平成 28 年度講習会等採択課題一覧

地域	大学	部署	代表者	職	講習会名
東北	山形大	農学部	塩野義人	教授	質量分析のスキルアップ講習会 ―基礎から測定の実際まで―
東北	東北大	多元物質科学研究所	鈴木　茂	教授	３次元マイクロストレスＸ線実測システムによる残留応力測定
東関東	千葉大	共用機器センター	桝飛雄真	准教授	東関東地域研究成果報告会
西関東・甲斐	東京農工大	学術研究支援総合センター	野口恵一	准教授	相互利用機器を活用した研究推進のための実践的共同講習会の実施
中部	岐阜大	生命科学総合研究支援センター	近江靖則	准教授	３大学による共同実習・講習会を通しての共同利用機器の利用促進
中部	名古屋工業大	大型設備基盤センター	江　龍修	センター長	３大学共催による実習・講習会を通じての共用機器の利用促進
中部	豊橋技科大	教育研究基盤センター	滝川浩史	センター長・教授	３大学による共同実習・講習会を通しての共同利用機器の利用促進
北陸	福井大	産学官連携本部	岡田敬志	特命助教	核磁気共鳴装置および走査プローブ顕微鏡を用いた無機材料の評価
東近畿	奈良教育大	教育学部	山崎祥子	教授	東近畿地区の共同機器利用促進を目的とする溶液 NMR の基礎及び応用講習会

中国	鳥取大	生命機能研究支援センター	森本　稔	准教授	Thermo Scientific Exactive を用いた質量分析講習会
中国	岡山大	自然生命科学研究支援センター	多田宏子	教授	NMR System 600 オンサイトトレーニング
中国	広島大	大学院理学研究科	水田　勉	教授	超微小結晶用単結晶構造解析システムの講習会
中国	広島大	大学院工学研究院	佐野庸治	教授	共同利用促進のための講習会等の開催
中国	山口大	大学院創成科学研究科	上村明男	教授	NMR 技術指導セミナー
四国	愛媛大	学術支援センター物質科学部門	内藤俊雄	教授	単結晶 X 線回折装置・磁気共鳴装置の分析・解析合宿
四国	高知大	設備サポート戦略室	西郷和彦	副室長・特任教授	出張講習　基礎コース・応用コース

表４　分子研主催講習会・研修会開催一覧（第１回有機元素分析研究会を除いてナノテクノロジープラットフォームとの共催）

講習会・研修会名	開催日	開催場所	参加者数
第１回技術者研修会（英語による意見交換会）	H28.8.10	分子研	8 名
技術職員・技術支援員のための技術研修会（電子顕微鏡）	H28.9.7	名古屋大	27 名
第２回技術者研修会（英語による意見交換会）	H28.10.6	分子研	8 名
第３回技術者研修会（英語による意見交換会）	H28.11.14	分子研	9 名
セミナー「ナノ粒子と高分子を測る」	H28.11.21	東京国際交流館プラザ平成	69 名
第４回技術者研修会（英語による意見交換会）	H29.1.13	分子研	13 名
第５回技術者研修会（英語による意見交換会）	H29.2.21	分子研	9 名
第１回有機元素分析研究会	H29.3.3	新大阪丸ビル別館	25 名

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なかったが，平成 28 年度 11 月に蒲郡にて再開した。平成 23 年度以来の開催となったので，分子研・理研双方の PI が各自の研究の最新状況について報告し，活発な議論が行われた。

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 28 年度）

回	開催日	テーマ	講演者
62	2016. 9.15	Adiabatic Quantum Computing with Rydberg Atoms	Alexander Glätzle （PostDoc, University of Innsbruck）

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。平成28年度は６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27，28年には同様に「生物画像データ解析トレーニングコース」（平成27年12月７日－９日，平成28年12月５日－７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）

自然界の事象はミクロからマクロまでの多数の階層で構成され，それぞれの階層に固有の運動法則に支配されており，さらに階層間で相互作用しながら時間発展し，その結果全体として大変複雑な様相を示す。本プロジェクトでは，国立天文台，核融合科学研究所，分子科学研究所が連携して自然科学における階層性，構造形成等の階層横断現象の解明を目指すとともに，関連研究機関との連携を推進することにより，学際領域としてのシミュレーション科学を通じての異分野の融合の推進を目指している。本プロジェクトにおける連携研究活動として，プラズマ物質相互作用や物質創成過程などを対象とした「分子シミュレーションとその応用」，超新星残骸における部分電離プラズマのダイナミックスや核融合周辺プラズマの制御などで見られる「プラズマと中性ガスの相互作用」，微惑星形成や核融合プラズマの長時間放電などに関連した「ダスト成長」等をテーマとした連携シンポジウムを２月 14，15 日に名古屋で開催した。さらに，本プロジェクトの活動の一環として，理論・計算分子科学に関するセミナーを開催した。また，理論・計算分子科学に関する人材育成を目的とした電子状態理論，分子シミュレーションに関する講習会も開催した。

5-5　ナノテクノロジープラットフォーム事業
「分子・物質合成プラットフォーム」（文部科学省）

文部科学省「ナノテクノロジープラットフォーム」事業（平成24年度7月～平成34年度3月（予定））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り，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・物質合成から成っており，分子科学研究所は，分子・物質合成プラットフォームの代表機関・実施機関として本事業に参画しており，平成25年度以降は機器センターが事業の運営母体である共用設備運用組織としての役割を担っている。

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，産官学の研究者を問わず，ナノテクノロジー関連の分子・物質合成，化学・物理・生物の広い範囲にわたる先端機器群の共用設備供給，有機・無機機能材料合成に関するノウハウの提供，測定データの解析・解釈等も含めた総合的な支援を実施している。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掲げている。

表1には平成28年度の支援装置・プログラム一覧，表2には平成28年度の採択課題一覧，表3には平成28年度採択・実施件数日数（平成28年4月1日～平成29年3月31日実施分）を示した。

表1　平成28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·光分子科学 物質分子科学 物質分子科学 物質分子科学
走査型透過軟X線顕微鏡（STXM）	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 稲垣裕一特任専門員	UVSOR·光分子科学 UVSOR UVSOR

マイクロストラクチャー製作・評価支援	マスクレス露光装置 (（DL-1000/IMC）段差計付き マスクレス露光装置は，任意の形状をフォトマスクなしで直接描画する装置。光源は 405nmLED で，露光範囲 100 mm × 100 mm，最小線幅 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 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
	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 近藤聖彦技術職員 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
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 吉田久史技術職員 近藤聖彦技術職員	装置開発室 装置開発室 装置開発室
電解放出形走査電子顕微鏡	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）］	解良　聡センター長 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）］	解良　聡センター長 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）］	解良　聡センター長 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］	解良　聡センター長 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（微小結晶用）	微小結晶／ Rigaku MERCURY CCD-3 ［MoKα，コリメータ Φ 0.3 mm，100 K–RT，24–100 K］	解良　聡センター長 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］	解良　聡センター長 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	解良　聡センター長 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	解良　聡センター長 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 上羽貴大助教	UVSOR･光分子科学 光分子科学 UVSOR 光分子科学 UVSOR 光分子科学
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）］	解良　聡センター長 小杉信博教授 酒井雅弘技術職員	機器センター UVSOR･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）］	解良　聡センター長 中村敏和准教授 浅田瑞枝特任助教 藤原基靖技術職員 伊木志成子技術支援員	機器センター 物質分子科学 物質分子科学 機器センター 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）］	解良　聡センター長 藤原基靖技術職員 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
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）	解良　聡センター長 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	解良　聡センター長 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］	解良　聡センター長 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］	解良　聡センター長 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）］	解良　聡センター長 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。	解良　聡センター長 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］	解良　聡センター長 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］	解良　聡センター長 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］	解良　聡センター長 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］	解良　聡センター長 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］	解良　聡センター長 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］	解良　聡センター長 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］	解良　聡センター長 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）］	解良　聡センター長 加藤晃一教授 矢木真穂助教 谷中冴子特任助教 西村勝之准教授 牧田誠二技術職員 長尾春代技術支援員	機器センター 生命･錯体分子科学 生命･錯体分子科学 生命･錯体分子科学 物質分子科学 機器センター 機器センター
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）］	解良　聡センター長 加藤晃一教授 矢木真穂助教 谷中冴子特任助教	機器センター 生命･錯体分子科学 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）］	解良　聡センター長 西村勝之准教授	機器センター 物質分子科学
600MHz 溶液 NMR	^{1}H 600MHz 溶液 ［JEOL JNM-ECA600］	解良　聡センター長 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］	横山利彦教授 東林修平助教	物質分子科学 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	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　2016 年度（平成 28 年度）採択課題一覧　分子科学研究所担当分

(1) 協力研究

課　題　名	支援機器等	代　表　者
多周波 ESR による食品の計測研究	ESR E680	北海道教育大学大学院教育学研究科　鵜飼　光子
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
超高磁場 NMR 法を用いたアミロイド β ペプチドの重合開始機構の構造生物学的基盤の解明	920NMR 800NMR	国立長寿医療センター研究所認知症先進医療開発センター　柳澤　勝彦
ペプチドのゆらぎを制御する足場タンパク質の標的結合メカニズムの解明	920NMR 800NMR iTC200	東京工業大学生命理工学研究科　門之園哲哉
プレニル基転移酵素の NMR 解析	920NMR 600NMR 固体	富山大学和漢医薬学総合研究所　森田　洋行
ディラック電子系分子性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
分子性ディラック電子系デバイスの表面評価	装置開発	東邦大学理学部　田嶋　尚也
哺乳類匂い受容体の機能発現機構解明に向けた受容体輸送タンパク質 RTP の構造解析	920NMR 800NMR	東京農工大学大学院工学府　福谷　洋介
HECT ユビキチンリガーゼによるユビキチン鎖重合の反応機構	920NMR 800NMR	名古屋大学環境医学研究所　増田　雄司
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	920NMR 600NMR 固体	東京農工大学大学院工学研究院　朝倉　哲郎
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	名古屋市立大学大学院薬学研究科　矢木　宏和
$S = 1/2$ 三本鎖化合物の 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

神経変性疾患の発症に関わるタンパク質のコンフォメーション変化	SAXS	慶応義塾大学理工学部	古川　良明
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
イオン液体を利用した金属錯体修飾電極による水素製造モジュールの開発	装置開発	名古屋工業大学大学院工学研究科	猪股　智彦
NMR 解析による動的情報を活用した抗体工学への応用	920NMR 800NMR	東京大学大学院工学系研究科	津本　浩平
荷電粒子断層画像観測装置の開発と最適化	装置開発	東京工業大学大学院理工学研究科	水瀬　賢太
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超局所励起	金属錯体	関西学院大学理工学部	田中　大輔
物性測定用歪み導入機構	装置開発	名古屋大学大学院工学研究科	竹延　大志
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
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
分子運動を制限した ESIPT 色素の理論計算科学	量子計算	名古屋工業大学大学院物質工学専攻	高木　幸治
Theoretical Studies on Reaction Mechanism of Fullerenes and Metallofullerenes	量子計算	Xi'an Jiaotong University	Xiang Zhao
遷移金属触媒を用いるクロスカップリング反応の機構解明	量子計算	大阪大学大学院工学研究科	神戸　宣明
EI-MS/MS によるフルオロベンジル基を有する合成カンナビノイドの o-, m-, p- 位置異性体識別	有機合成	石川県警察本部刑事部科学捜査研究所	村上　貴哉
シャペロニンの揺らぎと相互作用の熱力学的研究	920NMR 800NMR iTC200	東京大学大学院理学系研究科	桑島　邦博
人工らせん高分子―らせんペプチド複合体の固体 NMR による構造解析	920NMR 600NMR 固体	名古屋大学大学院工学研究科	八島　栄次
Structural, Electronic, and Photophysical Properties of Photoinduced Electron Transfer in Ruthenium and Viologen Complexes of Dye-Sensitized Solar Cells: A Theoretical Investigation	量子計算	Kasetsart University	Malinee Promkatkaew
Quantum Chemical Study of Diels-Alder Reactions of Fullerenes at Extreme High Pressure	量子計算	Universita di Parma	Roberto Cammi
特殊 ESR セルの製作	装置開発	新潟大学研究推進機構	古川　貢
環状フルオロアルキル骨格を有する含フッ素透明性ポリマーの創製と分子構造解析	920NMR 600NMR 固体	茨木大学工学部	福元　博基
希釈冷凍機温度での機能性分子システムの磁場中熱容量測定の開発	有機 FET	大阪大学大学院理学研究科	中澤　康浩
有機ケイ素化合物の励起状態に関する研究	量子計算	神奈川大学理学部	辻　勇人
テトラベンゾノルコロールの電子スピンニューテーションスペクトル	ESR E680	名古屋大学大学院工学研究科	平岡　勇哉
光電子分光法による電子状態解析を活用した次世代熱電変換材料の開発指針の確立	ARUPS	名古屋工業大学大学院工学研究科	宮崎　秀俊
π スタッキング構造を有する配位高分子単結晶の FET 特性	有機 FET	神戸大学大学院理学研究科	高橋　一志
X 線溶液散乱と NMR を主体としたタンパク質の動的構造解析	SAXS	北海道大学大学院理学研究院	斉尾　智英
電子スピン共鳴によるマルチドメインタンパク質の構造変化解析	ESR E680	北海道大学大学院理学研究院	斉尾　智英
アニオン性ニッケル錯体を鍵中間体とするブタジエンの官能基化反応に関する理論研究	量子計算	大阪大学大学院工学研究科	岩崎　孝紀
X 線小角散乱法による PDI ファミリー酵素群の構造解析	SAXS	東北大学多元物質科学研究所	奥村　正樹
サブテラヘルツ～遠赤外対応温度可変用液体セル	装置開発	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永　圭介
芳香族置換反応を利用したカチノン類の o-, m-, p- 位置異性体識別	有機合成	石川県警察本部刑事部科学捜査研究所	村上　貴哉
Photoassisted Nitrous Oxide Decomposition over Water Interfaced Oxotitanium Porphyrin: Theoretical Study	量子計算	Shanghai University	Phornphimon Maitarad
Theoretical Study on Hydrodeoxygenation of Dimethyl Sulfoxide on Pt_5/MoO_3(010) Catalyst	量子計算	National Science and Technology Development Agency	Supawadee Namuangruk
原子間力顕微鏡用温度勾配印加ホルダの開発	有機 FET	奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科	中村　雅一
	800NMR	北陸先端科学技術大学院大学	山口　拓実
	800NMR	Chulalongkorn University	Kriangsak Faikhruea
	800NMR	Srinakharinwirot University	Pornthip Boonsri
	800NMR	NIST Institute for Bioscience & Biotechnology Research	Robert G. Brinson
有機無機ペロブスカイト太陽電池材料の価電子エネルギーバンド構造の実測	ARUPS	東京理科大学理工学部	中山　泰生
トポロジカル絶縁体・保護膜間に現れる界面状態の研究	ARUPS	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪　嘉之
低対称性基板上に形成した Bi 原子鎖の電子状態とスピン分裂構造	ARUPS	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪　嘉之

(2) 施設利用

課題名	支援機器等	代表者
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 EMX ESR E500 ESR E680 SQUID-MS7 SQUID-XL7	名古屋大学大学院工学研究科　忍久保　洋
バクテリア光センサーのアンテナ分子に関する研究	iTC200	日本大学生物資源科学部　高野　英晃
低放射化 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の調査	SQUID-MS7 SQUID-XL7 熱分析	核融合科学研究所　菱沼　良光
スピンクロスオーバー錯体の室温領域での双安定性発現	CCD-1 CCD-3 SQUID-MS7 SQUID-XL7 ラマン FT	九州大学先導物質化学研究所　姜　舜徹
有機分子による遷移金属錯体の構造制御と新規磁気物性探索	CCD-1 CCD-2 CCD-3 粉末X線 ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7 熱分析 ラマン 可視紫外	名古屋市立大学大学院システム自然科学研究科　藤田　渉
核内受容体と低分子の相互作用に関する研究	iTC200	岡山大学大学院医歯薬学総合研究科　加来田博貴
Rh 触媒を用いた単層カーボンナノチューブの低温成長	SEM FIB 低 SEM ESCA ラマン	名城大学理工学部　丸山　隆浩
1,2,3- トリアゾール基含有シッフ塩基配位子を用いた金属錯体の結晶構造と磁気的性質の解明	CCD-1 CCD-2 CCD-3 SQUID-MS7 SQUID-XL7 ラマン 粉末X線 ESR EMX ESR E500	岐阜大学教育学部　萩原　宏明
$BiFeO_3$ ナノ粒子，FeNi 細線，Yb-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
キュリー・ワイスの法則に基づくフリーラジカル定量分析法の精確さ向上を目的とした高周波 ESR 測定	ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7 ESR EMX	国立研究開発法人産業技術総合研究所物質計測標準研究部門　松本　信洋
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 ESR E500 600NMR 溶液	高知大学教育研究部　上田　忠治
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 EMX ESR E500 ESR E680	名古屋大学大学院理学研究科　三野　広幸
パルスレーザーデポジション法を用いた単結晶イットリウム鉄ガーネット膜の形成	ESR EMX ESR E500 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
多周波 ESR 法による祖先型光合成反応中心反応機構の解析	ESR E680	福岡大学理学部　武藤　梨沙
酸化チタンナノ粒子や酸化亜鉛ナノロッドからなるフレキシブル太陽電池	SEM ピコ秒 蛍光分光 低 SEM	城西大学理学部　見附孝一郎

π共役部位の空間配置制御による近赤外吸収材料開発とその構造解析	CCD-1 CCD-2 CCD-3 ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	静岡大学工学部	植田　一正
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	低 SEM FT ESCA	関西学院大学理工学部	橋本　秀樹
フッ素を有する置換基を配位子に導入した単一分子性伝導体の合成と物性研究	SQUID-MS7 SQUID-XL7	日本大学文理学部	周　　彪
有機金属分解法で作製した磁性体薄膜の磁気的性質の研究	ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7 蛍光分光	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
常磁性異種金属多核錯体の磁気物性評価	CCD-1 CCD-2 CCD-3 SQUID-MS7 SQUID-XL7	岐阜大学工学部	植村　一広
硫化物半導体ナノ粒子の光物性	蛍光分光 可視紫外 ピコ秒	名古屋工業大学	濱中　　泰
機能性有機結晶の構造と物性に関する研究	CCD-3 SQUID-XL7	愛媛大学大学院理工学研究科	白旗　　崇
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
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-MS7 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
X線結晶構造解析による不斉合成化合物の絶対構造の決定	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
アルカリ土類金属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
新規機能性材料の構造および物性評価	CCD-3 蛍光X線 ESCA ESR E680 ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7 熱分析 MALDI ラマン FT 蛍光分光 可視紫外 920NMR	法政大学生命科学部	緒方　啓典
酸化物ナノシート壁を有する三次元構造体の物性評価	SEM 低 SEM ラマン	名城大学理工学部	才田　隆広
高分子保護金属クラスターの電子状態に関する測定	ESCA 円二色性	大阪大学大学院工学研究科	櫻井　英博
有機ラジカル磁性体による多次元量子磁性体の低温磁気構造の解明	CCD-3 ESR EMX ESR E500	大阪府立大学大学院理学系研究科	細越　裕子
固相相変態を用いたナノ磁性粒子作製と組織および磁気特性の関係	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評価	ESR E680	大阪市立大学大学院理学研究科	鐘本　勝一
固体 NMR を用いた多孔質炭素材料の解析	600NMR 溶液 600NMR 固体	分子科学研究所	西　　信之
EPR による鉄硫黄クラスター生合成タンパク質群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

イミダゾリウム系イオン液体の分子科学的研究：分子間振動と粘度・ガラス転移温度の関係	熱分析	千葉大学大学院融合科学研究科	城田　秀明
配列データベースから設計した人工 L- アミノ酸脱水素酵素の機能解析	VP-DSC iTC200	静岡県立大学食品栄養科学部	中野　祥吾
Yb_2 分子のレーザー分光	ナノ秒エキシマ ナノ秒 YAG	京都大学大学院理学研究科	馬場　正昭
多環芳香族炭化水素のレーザー分光	ナノ秒 YAG	京都大学大学院理学研究科	国重　沙知
イオン液体中のポリヨウ素イオンの多形性とダイナミクス	600NMR 溶液	防衛大学校機能材料工学科	阿部　洋
カリウムドープ体の異常磁気の研究	ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	広島大学大学院理学研究科	井上　克也
ガラス基板上に成膜したサマリウム酸化物薄膜のバンドギャップ評価	粉末X線 ラマン 可視紫外	名古屋工業大学大学院工学研究科	宮崎　秀俊
長残光性 ZrO_2 の発光機構解明を目的とした準安定トラップ状態の観測・同定	粉末X線 ESR E680 ESR E500	東京理科大学基礎工学部	岩崎謙一郎
SrF_2 薄膜を用いた真空紫外光センサ開発	SEM 低 SEM 蛍光分光 可視紫外 ピコ秒	名古屋工業大学	小野　晋吾
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 マイクロストラクチャー 低 SEM	名古屋大学未来社会創造機構	宇理須恒雄
鉄硫黄クラスターの酸化還元状態による [NiFe] ヒドロゲナーゼ活性制御	ESR EMX ESR E500	奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科	太　虎林
紅色光合成細菌の耐熱化に関する研究	VP-DSC iTC200	神戸大学農学研究科	木村　行宏
ピリジン N オキシドを配位させた新規ポルフィリン鉄 (III) 錯体の構造と磁気特性	ESR E500 SQUID-MS7	島根大学大学院総合理工学研究科	池上　崇久
様々な金属を有するピロコルフィンの構造および磁気的性質の研究	CCD-1 CCD-2 SQUID-MS7 SQUID-XL7	島根大学大学院総合理工学研究科	井手　雄紀
光誘起磁性・伝導性の機能性メカニズム解明研究	CCD-3 ESR E680 ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	新潟大学研究推進機構	古川　貢
ドナーアクセプタ型電荷移動錯体の磁化測定	SQUID-MS7 SQUID-XL7	学習院大学理学部	開　康一
パルス ESR 法による光化学系等の電子状態解明	ESR EMX ESR E500 ESR E680	名古屋大学大学院理学研究科	三野　広幸
	SEM 低 SEM ESCA 熱分析	名古屋大学大学院理学研究科	松井　公佑
共有結合性有機フレームワーク化合物の電気伝導性起源解明	ESR EMX ESR E500 ESR E680 SQUID-MS7 SQUID-XL7	北陸先端科学技術大学院大学マテリアルサイエンス系	江　東林
分子性電気伝導体の電子状態解明	ESR EMX ESR E500 ESR E680 SQUID-MS7 SQUID-XL7	名城大学農学部	齋藤　軍治
純有機磁性金属 κ-β''-$(BEDT\text{-}TTF)_2(PO\text{-}CONHC_2H_4SO_3)$ の低温 ESR 測定 II	ESR E500	大阪大学大学院理学研究科	圷　広樹
赤外・ラマン分光法による骨基質の分子組成の解析	ラマン	愛媛大学大学院医学系研究科	大嶋　佑介
キネシンと阻害剤の熱分析	iTC200	東京理科大学薬学部	横山　英志
伝導性分子固体における分子間相互作用の研究	ラマン	愛媛大学大学院理工学研究科	山本　貴

ゴム組成物における加硫反応の分析	ESR EMX	日本ミシュランタイヤ(株)	原野　彩
シリコンクラスレート中のナトリウム原子およびガーネット結晶中のセリウムイオンの電子スピン共鳴	ESR E500	岐阜大学生命科学総合研究支援センター	山家　光男
新しい磁気光学材料に向けたナノ構造薄膜及びナノ磁性微粒子分散ガラスの磁気的性質	SQUID-MS7 SQUID-XL7	静岡大学大学院総合科学技術研究科	中嶋　聖介
射出成形製品に発生する黒点異物の物質調査と原因究明	熱分析 低 SEM ラマン SEM	(株)鈴木化学工業所	井下　邦之
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次世代高速炉サイクル研究開発センター	佐野　雄一
酸化物表面固定化ナノクラスター触媒の表面精密構造解析	ESCA 熱分析	名古屋大学大学院理学研究科	邨次　智
Pd-Ge-(希土類) 系近似結晶の構造と低温物性	CCD-1 CCD-2 SQUID-MS7 SQUID-XL7 熱分析	北海道大学大学院工学研究院	柏本　史郎
小惑星イトカワの微粒子表面に存在するクレーター元素組成分析	低 SEM SEM	宇宙科学研究所	松本　徹
金属間に結合を有する多核金属錯体の磁気的相互作用と単結晶X線構造解析	CCD-1 CCD-2 CCD-3 SQUID-MS7 SQUID-XL7	島根大学総合理工学研究科	片岡　祐介
多段階的に動的構造変化を示すブロック共重合体によるバイオミメティック材料の開発	VP-DSC iTC200	静岡理工科大学理工学部	小土橋陽平
新規な磁性伝導体の微小結晶構造解析	CCD-1 CCD-2 CCD-3	大阪府立大学大学院理学系研究科	藤原　秀紀
水熱合成法で作製した酸化ジルコニウムの発光機構の解明	ESR EMX ESR E500 ラマン 蛍光分光 可視紫外	大阪大学大学院基礎工学研究科	半澤　弘昌
pn 型分子多層膜の表面および内部構造に関する研究	低 SEM	名古屋大学物質科学国際センター	江口敬太郎
炭素ケージ内包ガドリニウム金属イオンが示す高スピン状態の決定	ESR E680 ESR E500 ESR EMX	京都大学国際高等教育院	加藤　立久
マイクロ材料試験片加工	FIB	熊本大学大学院先端科学研究部	高島　和希
電場応答スピン転移錯体の開発	CCD-1 CCD-2 CCD-3	九州大学総合理工学府	中西　匠
Lindqvist 構造を基本骨格に持つ $[VW_5O_{19}]^{3-}$ を触媒に用いた酸化反応系の開発	600NMR 溶液	中部大学工学部	石川　英里
双安定性を示す分子性伝導体の極低温構造解析	CCD-3 SQUID-MS7 SQUID-XL7	神戸大学大学院理学研究科	高橋　一志
小分子活性化錯体における電子状態の研究	ESR E500	名古屋工業大学エネルギー変換触媒研究所	増田　秀樹
アミノ酸薄膜試料の円二色性実験	円二色性	大阪大学産業科学研究所	入澤　明典
逆転写酵素のテンプレートとなる長鎖散在性反復配列 RNA の動的構造解析のためのスピンラベル測定	ESR EMX ESR E500	芝浦工業大学工学部	幡野　明彦
酸化物固体電解質の磁気的性質	SQUID-MS7 SQUID-XL7	京都大学先端イノベーション拠点施設	高見　剛
金属ナノ粒子のレーザー加工とその形状評価	低 SEM ピコ秒 可視紫外	早稲田大学	井村　考平
π–d 相互作用を有する有機超伝導体におけるスピン状態の観測	ESR E500	北海道大学大学院理学研究院	井原　慶彦
ラマン分光法による有機結晶のドミノ転移の分子ダイナミクスの研究	ラマン	愛知教育大学教育学部	日野　和之
シッフ塩基金属錯体と種々の複合系の光渦誘起分子配向	円二色性	東京理科大学理学部	秋津　貴城
抗体抗原相互作用の解析	iTC200	京都大学大学院工学研究科	菅瀬　謙治
新しいメソ多孔性炭素の開発	SEM	愛知教育大学教育学部	日野　和之

金属酵素モデル金属錯体の電子構造解析	ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7 可視紫外 600NMR 溶液	奈良女子大学研究院自然科学系	藤井　浩
高結晶性逆ペロブスカイト型窒化物磁性薄膜の成長と評価	SQUID-MS7 SQUID-XL7	静岡大学学術院工学領域	川口　昂彦
共蒸発分子誘起結晶化法により作製した薄膜の構造・成分分析	SEM 低 SEM 粉末X線 蛍光X線	東京農工大学	嘉治　寿彦
Magnetic Property Analysis for Sensing Platform	SQUID-XL7	静岡大学グリーン科学技術研究所	朴　龍洙
ホウ素錯体をクロモフォアとする太陽電池色素の高性能化	CCD-1 CCD-2 CCD-3	名古屋工業大学工学研究科	小野　克彦
NMR を用いたアニオン交換形燃料電池用アイオノマーの分子構造解析	600NMR 溶液	ダイハツ工業（株）	阿部　寛樹
非対称二座配位子を用いた遷移金属錯体における水素結合相互作用と磁気的性質	SQUID-MS7 SQUID-XL7	関西学院大学理工学部	三橋　了爾
昆虫クチクラの微細孔の解析	低 SEM	基礎生物学研究所	安藤　俊哉
BEDT-TTF 系有機導体の反強磁性－超伝導転移と電荷グラス転移の精密交流磁化率測定	SQUID-XL7	埼玉大学大学院理工学研究科	谷口　弘三
ピコ秒レーザーによる樹脂製引張試験片の低損傷切り出し加工実験	ピコ秒	産業技術総合研究所	銘苅　春隆
	ESR E500	東京理科大学	竇　彩香
放射性物質回収用吸着剤の性能向上に向けた吸着剤表面状態の評価	UVSOR(STXM)	日本原子力研究開発機構次世代高速炉サイクル研究開発センター	佐野　雄一
STXM を用いた反応場の直接分析からひも解く微生物による海洋地殻内エネルギー獲得戦略	UVSOR(STXM)	愛媛大学農学部	光延　聖
走査型軟X線顕微鏡の生体分子マッピングにおける定量化の検討	UVSOR(STXM)	東海大学工学部	伊藤　敦
STXM を用いた３次元観察法の開発	UVSOR(STXM)	分子科学研究所	大東　琢治
アイスコア試料中のエアロゾルの STXM 分析による大気酸性化の歴史の解明	UVSOR(STXM)	東京大学大学院理学系研究科	高橋　嘉夫
STXM による火星隕石中有機物の官能基組成の解明と分布状態の調査	UVSOR(STXM)	広島大学大学院理学研究科	宮原　正明
隕石母天体の衝撃変成作用による炭素物質の分子構造変化	UVSOR(STXM)	大阪大学大学院理学研究科	薮田ひかる
含水天体の加熱脱水による有機物への影響の同定	UVSOR(STXM)	京都大学大学院理学研究科	中藤亜衣子
STXM を用いた隕石有機物のその場分析	UVSOR(STXM)	横浜国立大学大学院工学研究院	癸生川陽子
Triggered Drug Release from Nanocarriers Penetrating into Cells and Skin	UVSOR(STXM)	Freie University Berlin	Eckart Rühl
The Effect of the Oxygen Vacancy at Au/CuO_x/Silicon Interface on Resistive Switching Memories	UVSOR(STXM)	Tamkang University	Way-Faung Pong
Nano-Scales Chemical Redox on LLNMO High-Capacity Cathode Materials	UVSOR(STXM)	National Synchrotron Radiation Research Center (NSRRC)	Yao-Jane Hsu
High-Pressure Soft X-Ray Spectro-Microscopy of CO_2 Fluids	UVSOR(STXM)	Lawrence Berkeley National Laboratory(LBNL)	Jinghua Guo
Comprehensive Characterization of Monolithic Polymers by Scanning Transmission X-Ray Microscopy (STXM)	UVSOR(STXM)	University of Tasmania	Ruben Dario Arrua
反強磁性 Mn 超薄膜／強磁性 Fe 超薄膜ヘテロ構造のナノスケール交換結合特性評価	UVSOR(XMCD)	東京大学物性研究所	宮町　俊生
不活性化したシリコン基板上に成長させたフタロシアニン薄膜の電子状態と磁性	UVSOR(XMCD)	横浜国立大学理工学部	大野　真也
磁性絶縁体／トポロジカル絶縁体ヘテロ構造の磁化特性	UVSOR(XMCD)	東京工業大学理学院	平原　徹
XMCD による Au/Fe 膜の垂直磁気異方性と希薄磁性トポロジカル絶縁体の強磁性発現の研究	UVSOR(XMCD)	東京大学物性研究所	松田　巌
スピネル型バナジウム酸化物の低温強磁場 XMCD による軌道秩序の評価	UVSOR(XMCD)	東京大学大学院理学系研究科	岡林　潤
走査型透過軟X線顕微鏡によるカビ臭産生シアノバクテリアの原核細胞オルガネラの同定	UVSOR(STXM)	関西医科大学医学部	竹本　邦子
STXM による火星隕石ナクライト中の炭素成分の分析～官能基組成の解明と分布および産状の調査～	UVSOR(STXM)	広島大学大学院理学研究科	宮原　正明
In Situ STXM Study of Charge-Discharge Mechanism of Nanoflaky MnO_2/Functionalized Carbon Nanotube for a Supercapacitor	UVSOR(STXM)	Tamkang University	Way-Faung Pong
Drug Release from Novel Nanocarriers in Skin	UVSOR(STXM)	Freie University Berlin	Eckart Rühl
界面拡散抑制による反強磁性 Mn 超薄膜／強磁性 Fe 超薄膜ヘテロ構造の交換結合特性の制御	UVSOR(XMCD)	東京大学物性研究所	宮町　俊生
XMCD による Au/Fe/MgO，Ag/Fe/MgO 膜の垂直磁気異方性と界面スピン軌道相互作用の間の関係に関する研究	UVSOR(XMCD)	東京大学物性研究所	松田　巌

XMCD によるスピネル型 V 酸化物の軌道磁気モーメントの評価	UVSOR(XMCD)	東京大学大学院理学系研究科	岡林　潤
鉄薄膜表面第一層の強磁性と酸素吸着効果	UVSOR(XMCD)	九州大学大学院総合理工学府	中川　剛志
原子層物質－磁性薄膜複合体の X 線磁気円二色性分光	UVSOR(XMCD)	量子科学技術研究開発機構	境　誠司
Structural Identification of Cellulose Nanocrystal/Nanofibril Hybrids and Composites	UVSOR(STXM)	University of Oulu(UOULU)	Marko Huttula
Chemical Stability of Lead(II) Thiocyanate($Pb(SCN)_2$)-Doped $FA_{0.9}CS_{0.1}Pb_{I3}$ for Solution-Processed Perovskite Solar Cells	UVSOR(STXM)	National Synchrotron Radiation Research Center	Yao-Jane Hsu
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
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板製作	マイクロストラクチャー	名古屋大学未来社会創造機構	宇理須恒雄
アスベスト／ RCF 処理液 JP-010 を添加する事による検体の経時変化の観察	マイクロストラクチャー	(株) JP カンファレンス	羽根田　晃
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
異方性を有する酸化鉄粒子の顕微 XAFS 計測	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
マイクロ流体培養系を用いたマウス精巣組織ライブイメージング系の確立	マイクロストラクチャー	基礎生物学研究所	佐藤　俊之

(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 28 年度は UVSOR(STXM) 11 件，SEM 1 件，低 SEM 3 件，CCD-3 1 件，TGA2950 他 1 件，VP-DSC 1 件，低 SEM・ラマン 1 件，SEM・FIB・低 SEM 1 件，VP-DSC・iTC200 1 件，マイクロストラクチャー 4 件，が採択された。業種別内訳は大企業 23 件・中小企業 2 件であった。

表 3　2016 年度（平成 28 年度）利用件数一覧（平成 28 年 4 月～平成 29 年 3 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	52	133	25
実施件数	41	126	25
実施日数	998	1875	152

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　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）

5-6-1　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における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）の解決に貢献することを目的とするものである。

・予定期間：平成26年度～31年度（計画変更あり），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である重点課題⑤を推進している。

5-6-2　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)　基盤アプリケーションの設計開発

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。

5-6-3　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 21 名，事務局２名＋補助者１名

・協力機関：60 機関，内企業 19 社

実施体制を図１に示す。

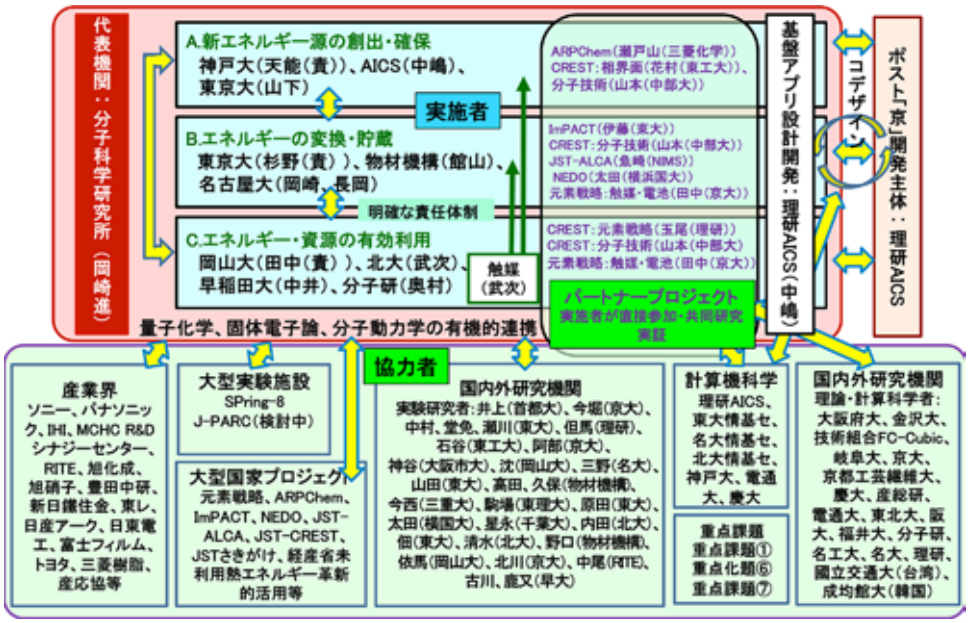


図１　実施体制

5-6-4　平成 28 年度の活動について

平成 28 年度は，平成 26 年度と平成 27 年度の「調査研究・準備研究」を経て，本格実施（４年間）を開始した。４つの基盤アプリケーションを中核に研究開発を進めており，基幹機能の開発と「京」を活用して先行的成果を幾つか創出することができた。また，11 月には触媒元素戦略研究との一層の連携を求めて第１回連携推進ワークシップを，12 月には第３回公開シンポジウム（東京大学武田ホール）を開催し，他プロジェクトとの連携，研究成果の公開や研究計画について議論を行った。

5-6-5　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・産業界への普及や，その利用人材の育成も行っていく計画である。今後の本格実施フェーズにおいて，海外の同様なプロジェクトに比して，我が国の国際競争力強化の源泉となる科学技術の創生を目指して邁進していきたい。ご支援の程よろしくお願いします。

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

文部科学省は，平成 20 年度より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９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。

平成 28 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，強相関・極低温リュードベリ原子集団における 1 フェムト秒周期の超高速・多体電子ダイナミクスをアト秒精度で観測・制御する新しい光技術を開発することに成功した［*Nat. Commun.* **7**, 13449 (2016)］。また，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。

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では，フェムト秒の時間スケールで振動する光電場について，アト秒の参照光パルスを用いることなく，計測したい光電場そのもので，電場振動を計測することに成功した。

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では，スイス ETH との共同研究において，2.2 μm 波長域における 2 サイクル光を繰り返し 100 kHz および出力 9.1 W で発生させることに成功した［*CLEO* 2017］。

時空間分解顕微分光技術の開発では，円偏光二色性計測のための新たな手法として，従来法でしばしば問題となる直線偏光二色性信号の混入を大幅低減する方法を開発し，顕微分光に組み込むことに成功した［*Sci. Rep.* **6**, 35731 (2016)］。

(2)　人材育成・施設供用

人材育成では，光と原子分子の相互作用に関する基礎学術面での教育を担当し，上述の光源要素技術開発業務へ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。その他，大森教授が中国・山西大学・量子光学国家重点実験室において光と原子分子の相互作用に関する講義を行った。岡本教授が，台湾の国立交通大学で光科学に関する講義を行った。平等准教授はスエーデン王立研究所において博士論文の審査を行った。また，藤准教授は，マックスプランク量子光学研究所およびケベック大学州立科学研究所において，光科学に関するセミナーを

行った。さらに，École Normale Supérieure（フランス）・IISER Kolkata（インド）・グラスゴー大学（英国）・Chimie ParisTech（フランス）からの短期留学生，および山西大学・量子光学国家重点実験室（中国）の若手常勤講師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。藤准教授は，香川大学から博士課程の学生１名を３か月受け入れ，教育や研究指導を行った。一方，平等准教授はソニー（株）より２名の研究員を半年間受け入れ社会人の再教育を実施した。また，各々の PI が総研大生の教育や研究指導，総研大における講義や特別セミナーでの講演を行った。

施設共用では，超高精度光干渉計を奈良先端大・ストラスブール大学（フランス）・ハイデルベルグ大学（ドイツ）・オクスフォード大学（英国）・インスブルック大学（オーストリア）・浜松ホトニクス（株）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（英国）・早稲田大学・大阪大学・大阪府立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・独 DESY・スイス ETH・仏 Neel Institute・スペイン ICFO などに協力研究の資源として提供した。一方，分子研で構築した広帯域波長可変光源を東京大学に開放し連携に貢献すると共に高輝度マイクロチップレーザーを理化学研究所，及び名古屋大学に高出力テラヘルツ波発生にかかる協力研究の資源として，また核融合研究所には核融合プラズマのコンプトン散乱計測の協力研究の資源として，さらに基礎生物学研究所には新たなレーザー材料を脳内イメージング及び脳の光刺激にかかる資源として提供した。

本ネットワークにおける供用研究の推進への寄与を目的として，大森教授が浜松ホトニクス（株）と協力して，第１回先端フォトニクス国際シンポジウム（The 1st International Symposium on Advanced Photonics in Hamamatsu = iSAP Hamamatsu）を開催した。同様に大森教授が理研の緑川克美博士と協力して，第13回エクストリームフォトニクス研究会を開催し，東西拠点の連携に貢献した。平等準教授が中心となり，第５回および第８回レーザー学会「マイクロ固体フォトニクス」専門委員会（第８回日本燃焼学会レーザー点火研究委員会を兼ねる）を開催した。

5-8　実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点
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，平成28年度で５年目を終えようとしており，当初10年計画のちょうど折り返し点を迎えた。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。ここでは昨年度分子研リポートに報告して以降の研究拠点の活動を概括する。

本プロジェクトは，２年前の中間評価を受けて，触媒・電池分野の中でもこれまでも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。

最近の外部向け事業としては，「公開シンポジウム」が平成28年３月１日に第８回，10月31日に第９回がともに京大桂キャンパスにて開催され，それぞれ100名近くの参加者を得た。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て公開で開催している「次世代ESICBセミナー」も，この１月で８回を数えている。さらに内部的な研究交流会として「触媒・電子論合同検討会」「電池・電子論合同検討会」を年２回ずつ開催し，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。合同検討会では実験・理論双方から，研究の進展の報告が行われ，ポスター発表による議論がされている。また「電子論検討会」を電子論グループの主催で開催し，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。この検討会は，参加者全員の合宿形式で行い，実験・理論間の共同研究の醸成を図ってきている。平成28年12月にホテルコンコルド浜松を会場として３回目を開催したが，最近，その成果が形になって表にでてきたところである。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13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，触媒・電池開発を先導する理論計算科学の役割をより一層前面に押し出すことが強く期待され，この分野における理論計算の役割の重要性が高まってくるものと考えられる。

5-9　分子科学国際共同研究拠点の形成

分子科学研究所は，創設以来，多くの国際共同研究を主催するとともに，外国人客員教授を始めとする優れた外国人研究者を計画的に受け入れて国際共同研究事業を推進し，国際的に開かれた研究所として内外から高い評価を得ている。近年，科学研究のグローバル化が急速に進むとともに，インドや東南アジアを含む広い意味での東アジア地区の科学研究も欧米追随ばかりでなく活性化しており，分子科学研究所においても，21 世紀にふさわしい新たな国際共同研究拠点を構築していくことが必要となっている。このような状況の中，2004 年度（平成 16 年度）の法人化の機会に分子科学重点分野を定めて国際共同研究の輪を広げる試みを開始し，その後，日本学術振興会，JENESYS（外務省），JASSO（日本学生支援機構），総合研究大学院大学等の各種支援も受けながら，自然科学研究機構・国際学術拠点形成事業や分子科学アジアコア多国間国際共同事業などを実施し，欧米及びアジア地区での国際連携を強化しつつある。さらに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，アジアと欧米を区別することなくグローバルな研究活性化と新しいサイエンスの出現が期待されており，今後，その方向に向けて分子科学研究所が活動していく必要があろう。

そこで，平成 24 年度に国際共同の在り方を大きく見直し，平成 25 年から外国人研究者に関わる諸手続や渉外事務を担当する専門員（現在は URA）を雇用し，国際的に分子科学研究所の存在感を示せるようなシステム作りを始めている。現在，以下のような財源を利用して国際共同を活性化しているが，それぞれの財源の制約に合わせた国際共同研究事業を個々に行うのではなく，分子科学研究所として自由度の高い国際共同研究体制をアジアと欧米を区別することなくグローバルに構築しながら各種財源を混合して実施するように工夫している。なお，ここでは３章に記述のある岡崎コンファレンス，ミニ国際シンポジウム，アジア連携分子研研究会，総研大アジア冬の学校，外国人客員教授については触れない（以下の国際共同研究事業の財源を一部使っているものもある）。

5-9-1　国際共同研究事業の財源

(1)　自然科学研究機構「戦略的国際研究交流加速事業」

本事業は，各機関が海外トップクラスの研究機関との国際共同研究を発展させる，あるいは新たに開始するための人的相互交流を支援するもの。特に，各機関が国際共同研究の核となるための，優れた外国人研究者の招へい，将来の国際共同研究の中核を担う若手研究者・大学院生の海外派遣及び海外からの受入れ，海外の先駆的研究者と機構所属の若手研究者との交流，等を推奨する。これにより，持続性のある国際交流関係を構築・強化し，機構における研究の国際競争力の向上を目指す。

【タイプA】海外トップレベル研究機関との国際研究交流の加速

国際共同研究を実施中または実施予定の海外研究機関等から，優れた外国人研究者を招へいする，若手研究者・大学院生を受入れる，あるいはこれらの機関に若手研究者（ポスドク・大学院生を含む）を派遣することにより，相手方機関との間で人的交流を活発化させ，国際的な研究交流を加速させるもの。

分子科学研究所として「欧米の学術協定相手機関を中心とした国際共同加速事業（H28–H30）」が採択。

欧米を相手とする IMS-IIP 事業や共同研究を支援。

(2)　自然科学研究機構「自然科学研究における機関間連携ネットワークによる拠点形成事業」

自然科学分野において，国内外の大学や研究機関との幅広い連携による共同研究を推進し，異分野連携による新たな学問分野の開拓や，自然現象シミュレーションや新技術の開発を生かした創造的研究活動を推進する，国際的にも評価される機関間連携ネットワークを構築し，分野融合型や国際的共同利用･共同研究拠点を形成することを目的とする（5-12 参照）。

【国際ネットワーク型研究加速】

シミュレーション技術や新しい計測技術の開発を生かし，複数の海外機関との連携・ネットワーク化により，創造的研究活動を推進する拠点形成を目指すもの

分子科学研究所として「分子観察による物質・生命の階層横断的な理解（H28–H33）」が採択。

欧米との国際共同研究と，アジアを相手とする IMS-IIPA 事業，分子科学アジアコア多国間国際共同事業，共同研究等を支援。

(3) 総合研究大学院大学「国際連携推進事業」

機能強化構想の一部として「国際連携教育研究環境の創出」を掲げ，また第３期中期目標において「国際的に通用する研究者人材の育成」を図り，「修了生を核とした国際的研究者コミュニティの形成」を目指す。学術交流協定の締結，ダブルディグリー制度の構築など，共同教育プログラムの開発や，将来の学生交流 (受け入れ及び派遣) を視野に入れた国際的な学術交流の促進に寄与することを目指す。

【II. 海外学生・研究者招聘事業】

共同研究・共同セミナー等を開催・実施するために，海外より学生・研究者を招聘する事業。総合研究大学院大学の教育プログラムに資する事業，海外で活躍する修了生と連携する具体的な取り組みが含まれている事業については，これまでの実績を踏まえ重点的に支援する。

分子科学研究所として「分子科学二専攻合同・アジアインターンシッププログラム（H28）」が採択。

アジアを相手とする IMS-IIPA 事業を支援。総合研究大学院大学物理科学研究科と東南アジア各国の主要大学と締結している研究教育交流協定（チュラロンコン大学とのデュアルディグリー：複数学位制度も含まれている）に基づく IMS-IIPA 事業という位置付けになっている。

(4) 理化学研究所「分子システム研究」（共同研究）

分子科学研究所との共同研究課題「分子間相互作用系の局所電子状態解析（H24–H28）」が採択。

欧米，アジアを相手とした UVSOR 施設利用の国際共同等を支援。

(5) 分子科学研究所経常経費

以上の (1) 〜 (4) はそれぞれの枠組みでの種々の制約があり，運用できないものがあるため，研究所の経常経費から補填し運用している。例えば，半年以上滞在する外国人インターン生の支援は以上の枠組みでは困難なため，国内の特別共同利用研究員（以前の受託院生）に対する RA 雇用と同基準での支援を行っている。

5-9-2 分子研国際インターンシッププログラム（IMS-IIP）

それぞれの外部資金に合うように別々に実施してきた，院生を主なターゲットにした研修生（インターン）制度を見直し，大きな枠組みで研究所が主導して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 年度に見直した。それを受けて平成 25 年度より，分子研国際インターンシッププログラム（International Internship Program: IMS-IIP）として事業化し，共著論文を書けるまで滞在して研究することのできる目安として半年間前後の中長期の招へい計画を主な対象として実施している。なお，アジア分については次節に詳細を記述したが，IMS-IIPA（アジア版 IMS-IIP）と呼ぶことでアジア地区を重視した分子研独自のスカラシップがあるように見せた上で，提携研究機関・提携大学を中心に候補者の推薦を依頼している。なお，半年以上の研修生については国内分と同一の制度に基づき特別共同利用研究員（受託院生に相当する身分）として受け入れるとともに RA 雇用して給与を支払っている。半年以内の研修生

については国内では共同利用者に相当する国際協力研究員として滞在費の補助を行っている。外国人の場合，共同利用研究者宿舎の中長期利用が可能である。

欧米及びアジアの各提携研究機関・提携大学に候補者の推薦依頼をする際には，例えば，のべ12ヶ月・人という総枠を与え，数名の推薦を依頼する形を原則としている（のべ12ヶ月だと半年滞在者２名とか４ヶ月滞在者３名の推薦が可能。ただし，滞在は３ヶ月以上という条件を課す)。各提携先にのべ何ヶ月・人の総枠を与えるかは実績を判断しながら増減している。毎年，優秀な候補者（院生と若手研究者を合計して考える場合と若手研究者は別枠とする場合がある）を推薦してくれている提携先へは先方の希望に応じて総枠を拡げている。特に，欧米とインドの提携先では順調に枠が拡大している。その一方，逆のケースもあり，先方から推薦された者をそのまま受け入れるのではなく，現地あるいはSkypeで面接選考をせざるを得ない提携先もある。特に，東南アジアでは，まだ，その段階にあるところが多い。

以上のような調整を継続しながら質の面でのレベルアップを図っているところであるが，量的な面でも，平成25年度は31名，平成26年度は39名，平成27年度は69名，平成28年度の実績は表にあるように53名の受入れを行えるまでに順調に拡大している。

	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	オランダ	イギリス	米国	合計
国際交流提携先からの受入	5	1	8	3										17
その他共同研究による受入	2	1	6	2	1	12	3	3	1	2	1	1	1	36
合計	7	2	14	5	1	12	3	3	1	2	1	1	1	53

2016.1–2016.12

5-9-3　分子研アジア国際インターンシッププログラム（IMS-IIPA）

外務省のJENESYS事業，分子研のEXODASS事業を引き継ぐ形で平成27年度よりIMS-IIPA事業として運用している。JENESYS事業，EXODASS事業の各種制限を解消し，欧米を相手に実績のあるIMS-IIP事業と同じ基準で実施するようになったので自由度が増した。今ではアジアと欧米を分ける意味もなくなりIMS-IIP事業として一括して扱っている。ただし，財源的には未だに区別が残っている。分子研はアジア地区で重点大学・拠点研究機関（タイのチュラロンコン大学・カセサート大学・マヒドン大学，マレーシアのマラヤ大学，シンガポールの南洋工科大学，インドのIISER Kolkata，中国科学院化学研究所，韓国科学技術院自然科学部，台湾中央研究院原子分子科学研究所等）を選び，MOUを直接，あるいは，総合研究大学院大学物理科学研究科を通して，締結しており，大学院生や若手研究者を一定期間招聘している。大学院生の場合は原則として５～６ヶ月，若手研究者の場合は１～６ヶ月滞在し，ホスト研究室に所属して国際共同研究を担ってもらう。分子研での研究を体験して，総研大への入学を希望する学生が毎年数名いるほか，分子研にポスドクとして戻ってくる学生もおり，分子研･総研大の研究力強化と国際化に寄与している。今後はデュアルディグリー制度などとの組み合わせによって，さらに魅力的な制度となるよう改良していく予定である。この一年の実績は上記IMS-IIP事業の実績に含まれている。

5-9-4　短期外国人研究者招へいプログラム

これまで分子科学研究所では，国内の共同利用研究者と同様，１，２週間程度の滞在（年通算では１ヶ月程度になるケースもある）で施設利用研究を実施する枠組みがなかった。そのため，短期外国人研究者招へいプログラムを設定し，中部国際空港を起点として，国内研究者と同様，分子科学研究所に滞在中の滞在費を支援することにした。海外の所属機関と中部国際空港の間の旅費については原則，支給しないが，財源によっては支給が前提のものもあるため，LCC 等の利用によって国内旅費より低額になるケースなどで例外的に支給することもある。現在のところ，施設利用のすべてにおいて，直接，海外からの申請を認めているわけではなく，UVSOR 施設のように国際的に見て競争力のある設備を利用した研究に限られているため，欧米やアジアでも中国，韓国，台湾のような科学技術が進んでいる国の研究者を対象としている。なお，研究者に随行して共同研究に参加する院生は IMS-IIP 事業の短期分として中長期分に合算してカウントすることにしている。

一方，国際協力研究については，海外からの直接申請ではなく，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短期招へい，②若手外国人研究者の短期招へいなどが「分子科学国際共同研究拠点の形成」の主要プログラムとして実施されていた。その実績は平成 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 件である。

平成 25 年度より様々な財源をもとに短期外国人研究者招へいプログラムを始めることで，従来の国際協力研究に加え，国際施設利用（協力研究的であり，単なる設備利用はない）にも拡大した結果，平成 25 年度 35 件，平成 26 年度 31 件，平成 27 年度 40 件と推移しており，平成 27 年 10 月から平成 28 年 9 月までの 1 年間は 45 件で，今や IMS-IIP 事業と合わせて分子科学研究所の国際的な存在感を高めるプログラムとなっている。

国際共同研究　　45 件（2015.10–2016.9 実施状況）

代表者	研　究　課　題　名	相手国
秋山　修志	共同研究について打合せ	台湾
飯野　亮太	Helicase の 1 分子計測についての打ち合わせ	シンガポール
飯野　亮太	V-ATPase・ATP 合成酵素研究の打ち合わせ	イギリス，日本
飯野　亮太	超解像蛍光顕微鏡についての打ち合わせ	アメリカ
飯野　亮太	電子顕微鏡トモグラフィーについての打ち合わせ	イギリス
飯野　亮太	リニア分子モーターの改変についての打ち合わせ	アメリカ
江　　東林	Bio-Inspired Materials: From Low to High Dimensions	中国
江　　東林	Pore Size and Pore Environment Design in Metal–Organic Frameworks	中国
江　　東林	Redox Reactivity and Charge Transport in Microporous Metal–Organic Frameworks	アメリカ
江原　正博	Physical Chemistry, Heterogeneous Catalysis, Dye Solar Cell, Alternative Energy	タイ
江原　正博	機能性金属微粒子を利用したハイドロゲルマイクロフォンに関する研究	中国
江原　正博	分子のアナポールモーメントに基づくパリティ・バイオレーションに関する理論研究	カナダ
江原　正博	固体表面触媒における結合活性化の理論解析	タイ
岡本　裕巳	Near-Field Imaging of Chiral Plasmonic Nanostructures and Ultrasensitive Chiral Detection	イギリス
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

加藤　晃一	NMR と計算科学的アプローチによるマルチドメインタンパク質の構造ダイナミクスの研究	韓国
加藤　晃一	NMR 法による抗菌ペプチドの立体構造解析	タイ
加藤　晃一	超高磁場 NMR を活用したタンパク質翻訳後修飾の研究	韓国
加藤　晃一	NMR を利用した N 型糖鎖の立体構造解析	ドイツ
加藤　晃一	Structural Basis of Functional Proteins for Understanding Their Working Mechanism Using Structural Biology and Biophysical Techeniques	タイ
加藤　晃一	超高磁場 NMR を活用したタンパク質翻訳後修飾の研究	韓国
解良　　聡	金属基板上の機能性分子の吸着結合長測定	中国
解良　　聡	分子ドナーアクセプタ界面の電子状態	ドイツ
解良　　聡	有機二分子混合バルク接合の構造と電子状態	ドイツ
解良　　聡	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	中国
小杉　信博	Electronic Structure of 2D Silicon Layer on h-BN/ZrB_2(0001)	オランダ
小杉　信博	Feasibility Test of Soft X-Ray Absorption Spectroscopy Applied to Microfluidics Systems	ドイツ
小杉　信博	Nano-Scaled Chemical Redox on LLNMO High-Capacity Cathode Materials	台湾
小杉　信博	The Effect of the Oxygen Vacancy at Au/CuO_x/Silicon Interface on Resistive Switching Memories	台湾
小杉　信博	細胞および皮膚への薬剤の取り込みの研究	ドイツ
小杉　信博	軟Ｘ線吸収スペクトルによる水中のナノダイヤモンドの電子状態解析	ドイツ
小杉　信博	軟Ｘ線吸収スペクトルによる水中の二酸化炭素の電子状態解析	フィンランド
斉藤　真司	イオン液体の構造とダイナミクスの理論研究	アメリカ
鹿野　　豊	ナノデバイスを用いた量子情報処理技術の実装・様々な技術的課題に対する量子情報科学の応用・複雑性と計算可能性に関する根源的な問題の追究	アメリカ
鹿野　　豊	量子情報理論の実装	カナダ
平等　拓範	Development of New UV Nonlinear Crystals	フランス
平等　拓範	マイクロチップレーザーの開発（セミナー，研究打合せ）	ロシア
平等　拓範	固体レーザーの開発（セミナー，研究打合せ）	オーストリア
平等　拓範	固体レーザーの開発（セミナー，研究打合せ）	台湾
田中　清尚	ARPES Studies of Hole Doped Transition Metal Dichalcongenides ($W_{1-x}Ta_xSe_2$ and $Mo_{1-x}Ta_xSe_2$)	韓国
田中　清尚	High Resolution Photoemission Studies of the Predicted New-Type Weyl Semimetal $MoTe_2$	中国
田中　清尚	VUV Spectroscopy for the Inorganic Materials Doped with Lanthanide Ions	オランダ
藤　　貴夫	高強度赤外パルスレーザーの開発	オーストリア
古谷　祐詞	メリビオース輸送タンパク質の赤外分光測定	スペイン
横山　利彦	Effect of Carbon Substitution on the Magnetic Properties of Nano-Architectural ZnO	台湾

5-9-5　分子科学アジアコア多国間国際共同事業

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アジア連携分子研研究会申請において発展的に取り扱うようになった。また，研究者交流も IMS-IIPA 事業や短期外国人研究者招へいプログラムで取り扱われるようになっており，分子科学アジアコア多国間国際共同事業として特に区別する意味が失われつつある。

最近の実績として，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 28 年２月には ICCAS のホストにより北京で「2016 Winter School of the Asian Core Program “Molecular sciences for Energy, Environment, and Life”」が開催され，日本・韓国・中国・台湾から 100 人超の参加者があった。今後，２年毎の開催とすることが本事業に関わるホスト間の会合で申し合わされた。次回は KAIST のホストにより平成 29 年度に開催される見込みである。

5-10　研究大学強化促進事業（文部科学省）

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

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

自然科学研究機構では，研究力強化のために①国際共同研究支援，②国内共同研究支援，③広報，④研究者支援（外国人，女性，若手）の４本柱を立てている。戦略室の中に広報機能が入ることになったため，分子研では広報室は戦略室に一本化し，従来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 28 年度は昨年度の活動に引き続き，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。

運営顧問　　2016 年 12 月 7 日

菊池　昇（株式会社豊田中央研究所　代表取締役所長）

晝馬　明（浜松ホトニクス株式会社　代表取締役社長）

瀧川　仁（東京大学物性研究所　所長・教授）

松本吉泰（京都大学大学院理学研究科　教授）

外国人運営顧問　Peter J. Rossky 教授　　2017 年 3 月 13 日 –14 日

・国際インターンシップ生の受入を継続して行った（MOU に基づくものはフランス５名，インド２名，タイ７名）。

・研究所ホームページ更新，アクセス解析を行った。

・ヨーロッパ，アジアとの連携強化のため，MOU 提携大学等での視察を行った。

2016 年 6 月　ドイツ：ベルリン自由大学，物質エネルギーヘルムホルツベルリンセンター

2016 年 6 月　タイ：カセサート大学，チュラロンコン大学，マヒドン大学

2017 年 1 月　フランス：フランス国立パリ高等化学学校

5-11　自然科学研究における機関間連携ネットワークによる拠点形成事業（自然科学研究機構）

第３期中期計画期間に入り，自然科学研究機構の研究費（運営費）の一部が，機構で統括し，機構長の裁量で各機関に配分する形をとることとなり，自然科学研究機構では「自然科学研究における機関間連携ネットワークによる拠点形成事業」として機構内で公募して選考することとなった。これは，自然科学分野における国内外の大学や研究機関との連携による共同研究を推進し，新たな学問分野の開拓も視野に入れて自然現象シミュレーションや新技術の開発を生かした創造的研究活動を推進する，国際的にも評価される機関間連携ネットワークの構築による国際的共同利用・共同研究拠点を形成することを目的としている。分子科学研究所においては，この機構内公募に対して「分子観察による物質・生命の階層横断的な理解」という６年（平成 28 ～ 33 年度）計画の事業を申請し，採択された。その内容の概略は，以下の通りである。

従前の分子観測と分子理論は，分子そのものの特性を描き出すことで分子の多様な構造と機能を解明することに大きく寄与したが，ミクロとマクロの間で起こる分子システムに特徴的な挙動を観察し，それを解釈しようという視点が重要になりつつある。従来の分子観測法・理論から一歩踏み出した，新しい発想の計測実験手法，有意な情報を取り出すデータ解析手法，及び実験結果をシミュレーションし，解析する理論的枠組みを開拓することが必要となっている。それによって，さらに新たな物質機能の開拓，生命活動の根源を探るための新たな方法論を提供することも期待される。本事業ではこの観点に立ち，分子科学研究所で実績のある分子計測法と分子理論の蓄積を元に，先端的な分子観察法と解析手法，理論・シミュレーション技法を一体的に開発する。分子観察法の開発で実績ある国内外主要研究機関との共同研究（国内外の関連研究機関からのインターンシップ受入れ等を含む）を行い，また物質科学と生命科学への利用の観点から連携ネットワークを創出し，分子観察による階層横断的な自然の理解を加速することを目的とする。

平成 28 年度は，これらのコンセプト実証のための測定手法と装置の設計を開始するとともに，計測技術確立のための試料作製に取り組んでいる。計算科学の立場からは，階層的な構造をプログラムできるよう，検討を開始した。また，計測装置の中で分子が電磁場と相互作用する際に起きうる現象について，理論的に妥当なモデルを構築するための計算を進めている。これらの将来的な生命科学への展開について可能性を議論するため，基礎生物学研究所と協力して研究会を３月に開催することとした。また海外諸機関との共同研究，インターンシップ受入れを行った。

6．研究領域の現状

6-1　論文発表状況

分子研では毎年 Annual Review（英文）を発刊し，これに発表した全ての学術論文のリストを記載している。

論文の発表状況

編集対象期間	ANNUAL REVIEW	原著論文の数	総説等の数
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
2015.9. ～ 2016.8.	2016	207	29

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) 生体分子の構造変化動力学に関する理論研究

b) 時計タンパク質 KaiC の概日リズム機構に関する理論研究

c) ポリセオナミド B のイオン透過機構に関する一分子反応機構の理論研究

d) 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

e) 水の特異性の起源，ガラス転移・Kauzmann 温度に関する理論研究

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の計算が可能になった。そこで，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し，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の自由エネルギー面および構造変化動力学の解析を行った。その結果，比較的小さなタンパク質であっても，多様な構造変化経路や天然状態には存在しない結合の生成により構造変化が非常に幅広い時間スケールをもつ不均一なダイナミクスを示すことを明らかにした。

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，最近の秋山らの実験により，KaiC の ATP 加水分解はモノマーあたり 1 日に約 11 個しか ATP を分解しない極めて遅い反応にも関わらず，概日リズムの周期と強い相関があることが明らかにされた。そこで，KaiC の ATP 加水分解反応機構からシステムとしての概日リズムの発現機構に至る幅広い時間・空間スケールの解析を進めている。

c) ポリセオナミド B（pTB）は非タンパク質構成アミノ酸を含む 48 アミノ酸残基から構成され，D- および L- アミノ酸が交互に配列し，β- ヘリックス構造をとるペプチドである。この pTB は，自発的に脂質二重膜に侵入しチャネルを形成することにより，イオンチャネルの機能を発現することが老木らにより最近明らかにされた。pTB におけるイオン透過機構の解明に向け，pTB に対するポテンシャルパラメータを新たに決定し，膜侵入の自由エネルギー・動的過程，膜内での pTB の構造およびその揺らぎ等の解析を進めている。

d) 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）タンパク質を例として，各色素のエネルギー準位およびその揺らぎを解明するための方法論の開発を進めてきた。その結果，FMO タンパク中の色素のエネルギー準位を第一原理的に求めることに成功し，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を明らかにした。

e) 水は常温付近で様々な特異的な熱力学性質を示すが，温度低下とくに融点以下でその特異性はさらに急激に増す。我々は，これまでに約 220 K の熱力学的異常性の動的起源を解明してきた。さらに，低温領域の過冷却状態を解析し，

約 195 K で液体状態の構造・動力学が変化する新しい動的転移を発見した。さらに，277 K から 195 K までは高密度および低密度液体の二状態混合系で特徴づけられる水が，195 K 以下では低密度液体状態による一成分系へと変化すること等を示した。また，多くの物質で知られているガラス転移温度 T_G と融点 T_M の間の関係（$T_G/T_M \sim 2/3$。2/3 則）の水における破綻の起源についても考察を行った。

B-1) 学術論文

T. MORI and S. SAITO, "Molecular Mechanism Behind the Fast Folding/Unfolding Transitions of Villin Headpiece Subdomain: Hierarchy and Heterogeneity," *J. Phys. Chem. B* **120**, 11683–11691 (2016).

M. HIGASHI and S. SAITO, "Quantitative Evaluation of Site Energies and Their Fluctuations of Pigments in the Fenna-Matthews-Olson Complex with an Efficient Method for Generating a Potential Energy Surface," *J. Chem. Theor. Comput.* **12**, 4128–4137 (2016).

B-4) 招待講演（* 基調講演）

S. SAITO, "Structure and dynamics of supercooled water," Pure and Applied Chemistry International Conference 2016, Bangkok (Thailand), February 2016.

S. SAITO, "Simulations of proton transfer and energy transfer in excited states," 9th International Meeting on Photodynamics and Related Aspects, Mendoza (Argentina), May 2016.

T. MORI, "Molecular Mechanism of Transition Dynamics in Protein Folding," IAS Focused Program on "Molecular Machines of Life: Simulations Meet Experiment," Hong Kong (China), May 2016.

S. SAITO, "Dynamics of water and proteins," 8th International Kasetsart University Science and Technology Annual Research Symposium, Bangkok (Thailand), June 2016.

斉藤真司,「水の構造とダイナミクス：特異的性質の起源」, 琉球大学理学部海洋自然科学科セミナー , 那覇, July 2016.

S. SAITO, "Structure and dynamics of supercooled water," Center for Chemical Dynamics in Living Cells, Chung-Ang University, Seoul (Korea), August 2016.

S. SAITO, "Structure and dynamics of supercooled water," 2016 Annual meeting EMLG-JMLG, Chania (Greece), September 2016.

S. SAITO, Structure and dynamics of supercooled water," 4th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2016), Shanghai (China), October 2016.*

斉藤真司,「揺らぎから物性・機能発現機構の解明へ」, 第3回電子状態シンポジウム, 早稲田大学, 東京, November 2016.

斉藤真司,「過冷却水の構造と動力学」, Cryopreservation Conference 2016, 岡崎, November 2016.

S. SAITO, "Structure and dynamics of supercooled water," Indo-Japan Discussion Meeting on Frontiers in Molecular Spectroscopy: From Fundamentals to Applications on Material Science and Biology, Kanpur (India), November 2016.

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).

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

Asia Academic Seminar 2015, Organizing Committee (2015).

3rd China-Japan-Korea Tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry, Organizing Committee (2017).

15th Korea-Japan Joint Symposium on Molecular Science, Co-Chair (2017).

2018 Annual meeting EMLG-JMLG, Local organizing Committee (2018).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

科学研究費委員会専門委員 (2006, 2014, 2015).

科学研究費助成事業評価委員会評価者 (2013, 2015).

情報学研究所運営委員会委員 (2010–2014).

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

National Research Foundation of Korea 審査員 (2015, 2016).

European Research Council (ERC) 審査員 (2016).

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

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–).

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–).

計算物質科学スパコン共用事業運営委員会委員 (2015–).

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」, 2016年 12月 15日–16日.

琉球大学理学部海洋自然科学科, 物理化学特別講義, 2016年 7月 19日–20日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「構造揺らぎ・構造変化に基づく生体分子の機能発現の理論的解明」, 斉藤真司 (2016年度–2020年度).

科研費新学術領域研究（研究領域提案型）（公募研究),「タンパク質の構造変化と化学反応が織り成す協働的な反応機構の解明」, 森　俊文（2016年度–2017年度).

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–2015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，専用機によりミリ秒スケールのシミュレーションが行われているタンパク質もある。しかし，タンパク質の動的理解に関しては未だに十分に進んでいない。我々は，これまで培ってきたガラスダイナミクスの知見や多次元分光法の解析手法等を用い，タンパク質の不均一な構造変化動力学の解析を進めている。今後は生体分子系における反応の動的効果の解析にも展開していきたい。さらに，pTB の膜内挿入・イオン透過の解析を行い，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，一分子反応の観点から凝縮系における反応理論の成立の基盤を明らかにしていきたい。また，生体分子の機能発現解明に関する解析として，分子からシステムレベルでの時計タンパク質KaiC の概日リズムの機構，FMO タンパク質における高効率な励起エネルギー移動機構を明らかにしていきたい。以上の研究に加え，水の特異的物性発現の起源の研究を進める。さらに，最近，我々は量子力学に基づく（複素）比熱やエントロピーの解析手法を開発した。これにより，これまで未解明であったガラス化に向かって分子性物質の運動が如何に変化するのか，Kauzmann 温度が如何に決定されるのか等に関する理論研究についても推進する。

信　定　克　幸（准教授）（2004 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：分子物理学，理論化学，計算物質科学

A-2) 研究課題：

a) ナノ構造体の光応答理論の開発と光・電子機能物質の理論設計

b) ヘテロ界面系の電子物性と光励起ダイナミクスの理論

c) 不均一系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近接場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。我々は，十数 nm 程度以下の実在系ナノ構造体の光応答を記述するためのナノ光応答理論を開発し，更に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。近接場光励起に起因する二次高調波を用いて，物質を二倍波励起できることを実証した。また，近接場光を用いると，間接バンドギャップ型半導体（例えば，シリコン）を直接的に光励起できることを明らかにした。

b) 金属，半導体，絶縁体等の異なる物質が接するヘテロ界面が生み出す電子物性は，その多彩な電子的特性解明のための基礎理学的研究に留まらず，多彩さ故に様々な機能発現の鍵を握っていることが多く，新規機能デバイス開発に関わる応用科学，さらには産業開発の分野でも高い注目を浴びている。しかし，その理論的解明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 を用いて，ヘテロ界面の電子物性を明らかにした。更に，ヘテロ界面系への電圧及び光の印加による電子物性の変化や外場に対する電気応答特性を記述するための理論及び計算手法の開発を進めた。

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。また，セリア表面での効果的な CO 酸化，NO 還元の触媒反応のメカニズム解明を行った。

d) 金とチオラートから構成されるクラスターは，その安定性と機能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。本年度は，異種金属原子のドーピングによる電子物性及び光励起ダイナミクスの変化を明らかにした。

B-1) 学術論文

M. YAMAGUCHI and K. NOBUSADA, “Large Hyperpolarizabilities of the Second Harmonic Generation Induced by Nonuniform Optical Near Fields,” *J. Phys. Chem. C* **120**, 23748–23755 (2016).

S. SHARMA, S. YAMAZOE, T. ONO, W. KURASHIGE, Y. NIIHORI, K. NOBUSADA, T. TSUKUDA and Y. NEGISHI, "Tuning the Electronic Structure of Thiolate-Protected 25-Atom Clusters by Co-Substitution with Metals Having Different Preferential Sites," *Dalton Trans.* **45**, 18064–18068 (2016).

K. KOIZUMI, K. NOBUSADA and M. BOERO, "The Absence of a Gap State and Enhancement of the Mars-van Krevelen Reaction on Oxygen Defective Cu/CeO_2 Surfaces," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 20708–20712 (2016).

Y. NIIHORI, M. EGURO, A. KATO, S. SHARMA, B. KUMAR, W. KURASHIGE, K. NOBUSADA and Y. NEGISHI, "Improvements in the Ligand-Exchange Reactivity of Phenylethanethiolate-Protected Au_{25} Nanocluster by Ag or Cu Incorporation," *J. Phys. Chem. C* **120**, 14301–14309 (2016).

K. IIDA and K. NOBUSADA, "Electric Field Effects on the Electronic Properties of the Silicene–Amine Interface," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 15639–15644 (2016).

M. YAMAGUCHI and K. NOBUSADA, "Indirect Interband Transition Induced by Optical Near Fields with Large Wave Numbers," *Phys. Rev. B* **93**, 195111 (9 pages) (2016).

M. ZHOU, H. QIAN, M. Y. SFEIR, K. NOBUSADA and R. JIN, "Effects of Single Atom Doping on the Ultrafast Electron Dynamics of $M_1Au_{24}(SR)_{18}$ (M = Pd, Pt) Nanoclusters," *Nanoscale* **8**, 7163–7171 (2016).

C. ZENG, Y. CHEN, K. IIDA, K. NOBUSADA, K. KIRSCHBAUM, K. J. LAMBRIGHT and R. JIN, "Gold Quantum Boxes: On the Periodicities and the Quantum Confinement in the Au_{28}, Au_{36}, Au_{44}, and Au_{52} Magic Series," *J. Am. Chem. Soc.* **138**, 3950–3953 (2016).

K. KOIZUMI, K. NOBUSADA and M. BOERO, "Reducing the Cost and Preserving the Reactivity in Noble-Metal-Based Catalysts: Oxidation of CO by Pt and Al-Pt Alloy Clusters Supported on Graphene," *Chem. –Eur. J.* **22**, 5181–5188 (2016).

T. YATSUI, T. TSUBOI, M. YAMAGUCHI, K. NOBUSADA, S. TOJO, F. STEHLIN, O. SOPPERA and D. BLOCH, "Optically Controlled Magnetic-Field Etching on the Nano-Scale," *Light: Sci. Appl.* **5**, e16054 (7 pages) (2016).

M. YAMAGUCHI and K. NOBUSADA, "Photodissociation Path in H_2^+ Induced by Nonuniform Optical Near Fields: Two-Step Excitation via Vibrationally Excited States," *Phys. Rev. A* **93**, 023416 (5 pages) (2016).

K. IIDA, M. NODA and K. NOBUSADA, "Interface Electronic Properties Between a Gold Core and Thiolate Ligands: Effects on an Optical Absorption Spectrum in $Au_{133}(SPh\text{-}tBu)_{52}$," *J. Phys. Chem. C* **120**, 2753–2759 (2016).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. KOIZUMI, K. NOBUSADA and M. BOERO, "Theoretical Design of a Novel Copper Doped Gold Cluster Supported on Graphene Utilizing Ab Initio Molecular Dynamics Simulations," *AIP Conf. Proc.* **1702**, 090055 (4 pages) (2015).

B-3) 総説，著書

信定克幸,「ナノ構造体における実時間・実空間光励起電子ダイナミクス」, *分子シミュレーション研究会会誌* **18 (1)**, 24–28 (2016).

B-4) 招待講演

K. NOBUSADA, "Photoelectronic properties of nanostructures at hetero-interface regions," 252nd American Chemical Society National Meeting & Exposition, DoubleTree by Hilton Hotel Philadelphia Center City, Philadelphia (U.S.A.), August 2016.

信定克幸,「近接場光励起ダイナミクスに現れる2つの本質的な物理素過程」, 理研セミナー , 理化学研究所, 和光市, 2016年6月.

飯田健二,「光や電圧の印加で発現する界面電子的機能の理論」, 7回真空･表面科学若手研究会, 分子科学研究所, 岡崎市, 2016年 12月.

野田真史,「近接場光励起ダイナミクスの可視化を用いた解析」, 第1回AVS ユーザーフォーラム, 富士ソフトアキバプラザ, 東京, 2015年 8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 (2011–2016).

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 (2015–2016).

B-8) 大学での講義, 客員

筑波大学計算科学研究センター , 共同研究員, 2004年 8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).

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と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) 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

c) 多状態多参照摂動理論の開発

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，これまで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。

c) 電子励起状態の波動関数を高精度に求める理論のフレームワークとして，多参照理論に基づく電子状態理論 DMRG-XMS-CASPT2 法を開発した。多参照理論では，波動関数は複数の電子配置の量子的重ね合わせとして記述される。CASPT2 法は既に広く利用されている高精度多参照理論として知られ，計算効率もよく大きな系への適用が期待される。本研究では，CASPT2 法を複数の励起状態を効率よく数値的安定に求めることが可能な拡張理論 XMS-CASPT2 法の実装を行い，DMRG 波動関数を参照関数とする組み合わせを実現した。この拡張理論では，相関した有効ハミルトニアンを部分空間の状態基底で表す。その有効ハミルトニアンを対角化することで状態間の摂動的電子相関を有効に記述することができる。本理論は，高性能な並列計算プログラムとして実装されており，大規模系への高い適用性を有する。

B-1) 学術論文

M. OKAMURA, M. KONDO, R. KUGA, Y. KURASHIGE, T. YANAI, S. HAYAMI, M. YOSHIDA, K. YONEDA, S. KAWATA and S. MASAOKA, "A Pentanuclear Iron Catalyst Designed for Water Oxidation," *Nature* **530**, 465–468 (2016).

S. SHIRAI, Y. KURASHIGE and T. YANAI, "Computational Evidence of Inversion of ^1L_a and ^1L_b Derived Excited States in Naphthalene Excimer Formation from *Ab Initio* Multireference Theory with Large Active Space: DMRG-CASPT2 Study," *J. Chem. Theory Comput.* **12**, 2366–2372 (2016).

R. J. HARRISON, G. BEYLKIN, F. A. BISCHOFF, J. A. CALVIN, G. I. FANN, J. FOSSO-TANDE, D. GALINDO, J. R. HAMMOND, R. HARTMAN-BAKER, J. C. HILL, J. JIA, J. S. KOTTMANN, M.-J. YVONNE OU, L. E. RATCLIFF, M. G. REUTER, A. C. RICHIE-HALFORD, N. A. ROMERO, H. SEKINO, W. A. SHELTON, B. E. SUNDAHL, W. S. THORNTON, E. F. VALEEV, Á. VÁZQUEZ-MAYAGOITIA, N. VENCE, T. YANAI and Y. YOKOI, "MADNESS: A Multiresolution, Adaptive Numerical Environment for Scientific Simulation," *SIAM J. Sci. Comput.* **38**, S123–S142 (2016).

T. SHIOZAKI and T. YANAI, "Hyperfine Coupling Constants from Internally Contracted Multireference Perturbation Theory," *J. Chem. Theory Comput.* **12**, 4347–4351 (2016).

B-4) 招待講演

T. YANAI, "Quantum chemistry with density matrix renormalization group," The 75th Okazaki Conference "Tensor Network States: Algorithms and Applications," IMS, Okazaki, January 2016.

T. YANAI, "Computational quantum chemistry with an efficient many-electron theory: Theory and applications," Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON2016), BITEC, Bangkok (Thailand), February 2016.

T. YANAI, "Advanced multireference theory based on density matrix renormalization group: theory and applications," Theory Seminar of Chemistry Department, Northwestern University, Evanston (U.S.A.), March 2016.

T. YANAI, "Recent progress in multireference dynamic correlation methods based on density matrix renormalization group," The 251st ACS meeting, San Diego (U.S.A.), March 2016.

柳井　毅,「密度行列繰り込み群に基づく拡張多状態多参照擬縮重摂動理論」, 第10回革新的量子化学シンポジウム, キャンパスプラザ京都(大学コンソーシアム京都), 京都, 2016年5月.

T. YANAI, "CASPT2 theory with DMRG reference wavefunction," The 8th Molecular Quantum Mechanics, Uppsala (Sweden), June–July 2016.

T. YANAI, "Molecular electronic structure theory based on ab initio density matrix renormalization group," Tensor Networks and Quantum Many-Body Problems (TNQMP2016), ISSP, University of Tokyo, Kashiwa, July 2016.

T. YANAI, "Molecular electronic structure theory based on ab initio density matrix renormalization group," Theory Seminar of Chemistry Department, University of Michigan, Ann Arbor (U.S.A.), July 2016.

T. YANAI, "Multireference theory based on density matrix renormalization group," Theory and Applications of Computational Chemistry 2016, Seattle (U.S.A.), August–September 2016.

柳井　毅,「金属酵素の多参照電子状態計算および鉄五核錯体の密度汎関数計算」, 触媒・電池元素戦略研究拠点第9回公開シンポジウム, 京都大学船井哲良記念講堂国際連携ホール(京大桂キャンパス), 京都, 2016年10月.

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 (2010–2016).

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).

科研費基盤研究(B),「高精度電子論に基づく磁気分光シミュレーション法による金属酵素・触媒の反応性解明」, 柳井　毅 (2016年度–2018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 (2016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。

理論分子科学第二研究部門

石　崎　章　仁（教授）（2016 年 4 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

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１つの一重項励起状態から２つの三重項励起状態に分裂する過程であり，ペンタセン等の有機結晶で観測されている。この現象を利用することで有機太陽電池の光電変換効率の向上が期待されるため，フィッションの反応速度を支配する分子機構の解明に向けて近年多くのグループによって盛んに研究されている。最近報告されたペンタセン誘導体のいくつかの超高速分光実験により，分子内振動モードが超高速のフィッション過程の実現に重要な役割を果たす可能性が示唆されている。しかし，従来の多くの量子動力学理論による研究では，分子内振動が誘起する電子状態の揺らぎの記述はタンパク質環境，溶媒による揺らぎの記述に適切である overdamped ブラウン振動子モデルによって粗視化され，分子内振動の物理的描像を無視した揺らぎの記述に基づいてフィッションの解析が行われてきた。本研究では，分子内振動による揺らぎの記述に underdamped ブラウン振動子モデルを用いることで，理論モデルと分光データの整合性の取れたフィッション反応のモデル化を試み，分子内振動モードがフィッション反応のダイナミクスに与える影響について解析した。本研究の理論モデルは分光実験によるペンタセン誘導体のフィッション速度，温度依存性，二次元電子分光の振動コヒーレンスの寿命を再現できている。このモデルの解析によって，従来の理論研究の予測と異なりフィッションのダイナミクスが分子内振動モードの振動数に非常に敏感であることを示した。また，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，分子内振動の振動数の値がどのような条件のときにフィッションの反応速度が最適化されるかを検討した。

B-1) 学術論文

Y. FUJIHASHI and A. ISHIZAKI, “Fluctuations in Electronic Energy Affecting Singlet Fission Dynamics and Mixing with Charge-Transfer State: Quantum Dynamics Study,” J. *Phys. Chem. Lett.* **7**, 363–369 (2016).

Y. FUJIHASHI, G. R. FLEMING and A. ISHIZAKI, “Influences of Quantum Mechanically Mixed Electronic and Vibrational Pigment States in 2D Electronic Spectra of Photosynthetic Systems: Strong Electronic Coupling Cases,” *J. Chin. Chem. Soc.* **63**, 49–56 (2016). (Invited)

K. SUN, Y. FUJIHASHI, A. ISHIZAKI and Y. ZHAO, “A Variational Master Equation Approach to Quantum Dynamics with Off-Diagonal Coupling in a Sub-Ohmic Environment,” *J. Chem. Phys.* **144**, 204106 (8 pages) (2016).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. TERAMOTO, N. H. LEWIS, T. OLIVER, A. ISHIZAKI and G. R. FLEMING, “Revealing the Excited State Dynamics of Betaine-30 Using Two-Dimensional Electronic-Vibrational Spectroscopy,” *International Conference on Ultrafast Phenomena (Ultrafast Phenomena 2016)*, paper UTu4A.3 (2016).

B-4) 招待講演

石﨑章仁,「Sir Martin Wood Prize Lecture：実時間量子散逸系理論の開発とその分子系励起ダイナミクスへの展開」, 大阪大学シグマホール, 豊中市, 2016年12月.

石﨑章仁,「第18回サー・マーティン・ウッド賞受賞講演：Theory of real-time quantum dissipative dynamics and its application to photosynthetic light harvesting systems」, 英国大使館大使公邸, 東京都千代田区, 2016年11月.

A. ISHIZAKI, "Interplays between quantum effects and dynamic fluctuations in photosynthetic light harvesting," Workshop of Quantum Simulation and Quantum Walks 2016, Prague (Czech), November 2016.

A. ISHIZAKI, "Interplays between quantum effects and dynamic fluctuations in photosynthetic light harvesting and application to an organic photovoltaic system," Indo-Japan Discussion Meeting on Frontiers in Molecular Spectroscopy: From Fundamentals to Applications on Material Science and Biology, Indian Institute of Technology Kanpur, Kanpur (India), November 2016.

石﨑章仁, "Interplays between quantum effects and dynamic fluctuations in photosynthetic light harvesting," 国立情報学研究所, 東京都千代田区, 2016年10月.

石﨑章仁, "Interplays between quantum effects and dynamic fluctuations in photosynthetic light harvesting," 理化学研究所, 和光市, 2016年9月.

石﨑章仁,「光合成光捕集系におけるエネルギー移動, 電荷移動：光学応答と量子ダイナミクス」, 第56回分子科学若手の会夏の学校, 京都大学, 京都市, 2016年8月.

A. ISHIZAKI, "Quantum dynamics in photosynthetic light harvesting," Solar Fuel Catalyst Workshop, Seoul National University, Seoul (Korea), May 2016.

A. ISHIZAKI, "Effects of vibrational modes on 2D electronic spectra and energy transfer dynamics in photosynthetic systems," DOE Workshop on Optimal Coherence in Chemical and Biophysical Dynamics, Washington DC (U.S.A.), April 2016.

石﨑章仁,「第10回若手奨励賞受賞講演：凝縮相量子動力学理論に基づく光合成エネルギー移動・電荷分離過程の理論研究」, 日本物理学会第71回年次大会, 東北学院大学, 仙台市, 2016年3月.

A. ISHIZAKI, "Quantum dynamics in photosynthetic light harvesting," 7th OCARINA International Symposium, Osaka City University, Osaka (Japan), March 2016.

石﨑章仁,「光合成光捕集系におけるエネルギー・電荷移動ダイナミクス：量子動力学と光学応答」, 日立製作所中央研究所, 国分寺市, 2016年3月.

石﨑章仁,「凝縮相量子ダイナミクスの理論と光合成エネルギー移動・電荷分離への展開」, 奈良女子大学理学部物理学科, 奈良市, 2016年2月.

A. ISHIZAKI, "Fluctuations in electronic energy affecting singlet fission dynamics and mixing with charge-transfer state: Quantum dynamics study," Pure and Applied Chemistry International Conference 2016 (PACCON2016), Bangkok (Thailand), February 2016.

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」, "量子と生命" 研究会, 大阪大学基礎工学研究科, 豊中市, 2016年2月.

B-6) 受賞，表彰

石﨑章仁, 第１８回サー・マーティン・ウッド賞 (2016).

A. ISHIZAKI, The Best Article Award 2016 of Journal of the Chinese Chemical Society (2016).

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

量子科学技術研究開発機構 The 1st QST International Symposium プログラム委員 (2016–2017).

The 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).

第５６回分子科学若手の会夏の学校第２分科会「凝縮相化学動力学の理論—光学応答と量子動力学」講師 (2016.8.22–25).

B-8) 大学での講義，客員

名古屋大学大学院理学研究科, 客員教授, 2016年4月–2017年3月.

東京理科大学理学部, 特別講義「生命を支える光——光合成の物理と化学」, 2016年12月3日.

総合研究大学院大学物理科学研究科,「理論化学」, 2016年7月.

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(A),「光合成光捕獲系における電子エネルギー移動ダイナミクスとその環境適応性の分子理論」, 石﨑章仁 (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，昨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。

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) 不均一系触媒の理論化学

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。最近，我々は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・外挿法や 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複雑な形状をもつ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 CAP/SAC-CI 法を，DNA や RNA の核酸塩基およびその誘導体，ニトリル及びイソニトリル基を含む分子の電子付加共鳴状態に適用し，電子透過スペクトルに新しい帰属を与えた。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。さらに，共鳴状態の though-bond 相互作用の検討や計算手法・摂動選択に関するベンチマーク計算を実施した。

b) 溶液中の光化学においては，反応分子の励起状態を介した光化学反応と，反応分子と溶媒との間での電子移動による光イオン化が競合する場合があり，光化学反応の特異性や選択性を損ねてしまう。そのため，溶液中の光化学では，競合反応を考慮した反応メカニズムの解析が重要である。その例として，ヒドロキシラジカル前駆体として知られている *N*-hydroxypyridine-2(1*H*)-thione（N-HPT）において光化学的な OH ラジカル解離反応と光イオン化反応が競合する事を，PCM SAC-CI 法による量子化学計算で明らかにした。光反応としては，最低エネルギーの ππ* 状態に励起された分子が，OH 解離の反応座標に沿った ππ* と πσ* 状態間での円錐交差を経て，解離型のポテンシャルエネルギー面に移行する。さらに基底状態との円錐交差を経て，ラジカル型の解離生成物へと反応が進行することを見出した。中性条件においては可視～近紫外光の照射により，光解離とイオン化反応が競合しうることが示された。この計算手法は，溶液中や凝集相における多くの光化学に応用可能である。

c) ピコ秒のポンプ・プローブの実験と協力して，シンナメート誘導体（p-MMC，p-MEC）の励起緩和ダイナミクスについて研究した。S_1 励起状態（$^1\pi\pi^*$）から多段階の非断熱遷移や系間交差を経て，T_1 状態（$^3\pi\pi^*$）まで緩和する経路を明らかにした。SAC-CI 法を用いて，ポンプ･プローブ実験で利用するイオン化状態の終状態に関して検討を行った。また，コンフォメーションを制御したカルボヘキサシランの励起状態について詳細に解析を行い，σ 共役によって吸収スペクトルが大きく変化する要因を明らかにした。特に，紫外・可視，磁気円二色性，直線二色性スペクトルについて，励起状態に関してコンシステントな分解を行い，観測されたスペクトルの詳細な帰属を行った。直鎖ヘキサシランの励起状態を解析し，励起状態の σ 性・π 性を明らかにし，複数の二面角の変化による状態の相互作用や擬交差を理論的に明らかにした。

d) 擬不均一系触媒である凝縮相金・パラジウム合金微粒子触媒は，室温で C–Cl 結合を活性化する。この反応の理論解析のために，合金微粒子の構造やスピン状態を遺伝的アルゴリズムおよび DFT 計算によって明らかにし，反応の全過

程のメカニズムを解明した。本反応では，ジメチルホルムアミドからの水素移動が律速段階であり，水分子を介した水素移動によって遷移状態が安定化する結果が得られた。また，保護マトリックスである高分子の構成分子（Ethylpyrrolidone, EP）と水分子, 合金クラスターの分子シミュレーションを行い, 界面のダイナミクスについて検討した。合金クラスターと EP 分子との相互作用は，水分子との相互作用よりも強いことから，EP が優先的にクラスター表面に吸着する結果が得られ，吸着構造や吸着自由エネルギーの EP 濃度依存性を明らかにした。また，動径分布関数から，クラスター表面では水分子は水素結合ネットワークを形成しているが，EP が高濃度の場合には，高エネルギーの孤立した水分子がクラスター周辺に存在し，反応に有効であることを明らかにした。

B-1) 学術論文

K. YAMAZAKI, Y. MIYAZAKI, Y. HARABUCHI, T. TAKETSUGU, S. MAEDA, Y. INOKUCHI, S. KINOSHITA, M. SUMIDA, Y. ONITSUKA, H. KOHGUCHI, M. EHARA and T. EBATA, "Multi-Step Intersystem Crossing Pathways in Cinnamate-based UV-B Sunscreens," *J. Phys. Chem. Lett.* **7**, 4001–4007 (2016).

P. ZHAO, X. ZHAO and M. EHARA, "Regioselectivity of $Sc_2C_2@C_{3v}(8)$-C_{82}: Role of the Sumanene-Type Hexagon in Diels–Alder Reaction," *J. Org. Chem.* **81**, 8169–8174 (2016).

W.-J. GUAN, P. ZHAO, Q.-Z. LI, S. NAGASE, M. EHARA and X. ZHAO, "$Sc_3N@C_s(39715)$-C_{82}: A Missing Isomer Linked to $Sc_3N@C_{2v}(39718)$-C_{82} by a Single Step Stone-Wales Transformation," *RSC Adv.* **6**, 75588–75593 (2016).

A. GUPTA, B. BOEKFA, H. SAKURAI, M. EHARA and U. DEVA PRIYAKUMAR, "Structure, Interaction and Dynamics of Au/Pd Bimetallic Nanoalloys Dispersed in Ethylpyrrolidone, Monomeric Moiety of Polyvinylpyrrolidone (PVP)," *J. Phys. Chem. C* **120**, 17454–17464 (2016).

Y. KANAZAWA, H. TSUJI, M. EHARA, R. FUKUDA, D. L. CASHER, K. TAMAO, H. NAKATSUJI and J. MICHL, "Electronic Transitions in Confomationally Controlled Peralkylated Hexasilanes," *ChemPhysChem* **19**, 3010–3022 (2016).

J. MEEPRASERT, S. NAMUANGRUK, B. BOEKFA, R. N. DHITAL, H. SAKURAI and M. EHARA, "Mechanism of Ullmann Coupling Reaction of Chloroarene on Au/Pd Alloy Nanocluster: A DFT Study," *Organometallics* **35**, 1192–1201 (2016).

R. FUKUDA and M. EHARA, "Electronic Excitation and Ionization Behavior of N-hydroxypyridine-2(1H)-thione and its Deprotonated Anion in a Polarizable Medium Studied Using Quantum Chemical Computations," *Theor. Chem. Acc.* **135**, 105 (9 pages) (2016).

S. GURTU, S. RAI, M. EHARA and U. DEVA PRIYAKUMAR, "Ability of Density Functional Theory Methods to Accurately Model the Reaction Energy Pathways of the Oxidation of CO on Gold Cluster: A Benchmark Study," *Theor. Chem. Acc.* **135**, 93 (12 pages) (2016).

Y. KANAZAWA, M. EHARA and T. SOMMERFELD, "Low-Lying π* Resonances of Standard and Rare DNA or RNA Bases Studied by the Projected CAP/SAC-CI Method," *J. Phys. Chem. A* **120**, 1545–1553 (2016).

R. ZHAO, Y. GUO, P. ZHAO, M. EHARA, S. NAGASE and X. ZHAO, "Warning to Theoretical Structure Elucidation of EndoHedral Metallofullerenes," *J. Phys. Chem. C* **120**, 1275–1283 (2016).

M. EHARA, R. FUKUDA and T. SOMMERFELD, "Projected CAP/SAC-CI Method with Smooth Voronoi Potential for Calculating Resonance States," *J. Comput. Chem.* **37**, 242–249 (2016).

S. NAMUANGRUK, S. JUNGSUTTIWONG, N. KUNGWAN, V. PROMARAK, T. SUDYOADSUK, B. JANSANG and M. EHARA, "Coumarin-Based Donor-π-Acceptor Organic Dyes for a Dye-Sensitized Solar Cell: Photophysical Properties and Electron Injection Mechanism," *Theor. Chem. Acc.* **135**, 14 (13 pages) (2015). (special issue on Health & Energy from the Sun: a Computational Perspective)

B-3) 総説，著書

R. FUKUDA and M. EHARA, "Electronic Excitation of Molecules in Solution Calculated Using the SAC-CI Method in the Polarizable Continuum Model," *AIP Conf. Proc. (ICCMSE 2015)* **1702**, 090012 (2015).

B-4) 招待講演

M. EHARA, "Recent Progress in PCM SAC-CI and CAP/SAC-CI," The 15th Theoretical Chemistry Symposium (TCS), Hyderabad (India), December 2016.

M. EHARA, "Charge Transfer Excitations Studied by the SAC-CI Method," International Workshop on Excited States in Complex Systems (ESCS 2016), Paris (France), November 2016.

M. EHARA, "Element Strategy for Catalysts and Batteries," Southeastern Louisiana University, Hammond (U.S.A.), October 2016.

M. EHARA, "Relevance of Interface Region in Supported Nanocluster Catalysts," EMN Meeting on Computation and Theory Energy Materials Nanotechnology, Las Vegas (U.S.A.), October 2016.

M. EHARA, "Recent Developments and Applications of SAC-CI," Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2016), Seattle (U.S.A.), August–September 2016.

M. EHARA, "Electronic Resonance States Studied by CAP/SAC-CI," ISTCP IX 2016 Conference, Grand Forks (U.S.A.), July 2016.

M. EHARA, "DFT Study on Nanocluster and Heterogeneous Catalysts," International Symposium on Novel Chemistry and Engineering, VISTEC, Rayong (Thailand), June 2016.

M. EHARA, "Photocatalysis on Metal Oxides: DFT study," Ninth International Congress for Innovation in Chemistry (PERCH-CIC Congress IX), Pattaya (Thailand), June 2016.

江原正博,「触媒・電池元素戦略における理論研究のアプローチ」, CSJ 化学フェスタ「 触媒・電池の創造戦略～実験と理論計算科学のインタープレイ～ 」, 東京, 2016年 11月.

江原正博,「非対称金属配位場を有する超分子系に関する理論研究」, 日本化学会「 配位アシンメトリー：非対称分子設計と異方集積化に基づく新物質科学」, 京都, 2016年 3月.

江原正博,「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」, 分子研研究会「 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」, 岡崎, 2016年 3月.

江原正博,「金属微粒子触媒の理論計算化学」, コンピュータ化学部会第９５回例会, 大阪, 2016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).

日本化学会東海支部会計幹事 (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

XIIth International Congress of Quantum Chemistry, Kyoto, Japan, Local Committee Member (2006).

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 President, 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).

Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems, Local Committee (2016).

第３３回化学反応討論会 2017実行委員 (2016–2017).

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 (2012–2013).

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 (2012–2022).

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).

シミュレーションによる「自然科学における階層と全体」連携研究委員会委員 (2016).

量子化学ウィンタースクール世話人 (2011–2016).

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 (2015–2016).

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, 集中講義「計算機化学」, 2016年4月21日–22日.

京都大学大学院工学研究科,「量子化学II」, 2016年4月–7月.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 集中講義「理論化学」, 2016年7月12日–14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– .

B-10) 競争的資金

科研費新学術領域研究「配位アシンメトリー：非対称配位圏設計と異方集積化が拓く新物質科学」（代表：塩谷光彦）（計画研究),「非対称金属配位場を有する超分子系の構造・物性・反応に関する理論研究」, 江原正博 (2016年–2020年).

科研費基盤研究(B),「複雑量子状態の理論開発とナノ・バイオ系への応用」, 江原正博 (2016年–2018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–2021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).

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。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。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したい。非対称性に関わるエキシトン・カップリングや非対称因子，錯体光化学反応に関する理論研究を実験と協力して進める。また，表面−分子系の電子状態を適切に表現できる方法を確立し，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排ガス浄化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) 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

c) 多変数レプリカ置換法の開発

d) 生体分子と金属イオンを含む系に有効な高速量子・古典混合計算法の開発

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なっている。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ことで起きるため，末端構造を明らかにすることはアミロイド線維形成を理解する上で重要である。しかし，アミロイド線維の末端領域は1～2分子しかないため，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てきた。昨年度はアミノ酸 42 残基からなる Aβ42 について調べた。今年度はアミノ酸 40 残基からなる Aβ40 についても調べ，さらに計算時間を延長し統計を増やした。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実験に先駆けて発見した。またその現象は2枚のβシートβ1とβ2の水素結合の強さの違いと Aβ アミロイド線維の形状に起因していることも解明した。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) 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。しかし，界面における分子レベルでの凝集機構はまだ分かっていない。そこで我々は親水性／疎水性界面での 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，親水性／疎水性界面ではβ1とβ2に相当する部分でβヘアピン構造を形成することが多いことが分かった。昨年度までの我々のシミュレーションにより，分子内のβシート構造，すなわちβヘアピン構造が増えると分子間でのβシート構造が形成されやすくなることが分かっている。このことから界面で形成されるβヘアピン構造が分子間βシート構造の形成を促進し，界面での凝集を加速していると考えられる。界面でβヘアピン構造が形成されやすい理由についても考察した。β1とβ2は共に界面にしか存在しないためバラバラに運動してエントロピーを高くするよりも，β1とβ2が結合してエンタルピーを低くする方が自由エネルギーを下げられるからであると考えられる。

c) 数値計算を用いた生体分子の解析には，分子力場（MM）による古典分子動力学が広く用いられる。Aβ ペプチドは金属イオンが存在すると凝集が加速されることが知られているが，分子力場を用いた計算では Aβ ペプチドと金属イオンの相互作用を充分に取り込むことができない。このような系を取り扱う手法として，一部分を量子力学（QM）的に取り扱う量子・古典混合（QM/MM）計算が注目されている。しかし，周期境界条件下でのクーロン項の計算にはこれまで Ewald 法が用いられてきたが，これには計算時間が非常にかかるという問題がある。そこで古典分子動力学計算において用いられてきた particle mesh Ewald（PME）法を QM 計算に適用し，高速 QM/MM 計算を実現す

る方法を開発した。実際この手法を水中の Aβ ペプチドと亜鉛イオンからなる系に適用したところ，従来の方法に比べて 167 倍の高速化に成功した。

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ができない。この問題を解決するために以前，我々はレプリカ置換法を開発した。この方法はレプリカ交換法を発展させた手法である。レプリカ交換法では，２つのパラメータ間でその値の交換を試みるのに対し，レプリカ置換法では３つ以上のパラメータの置換を試みる。さらにレプリカ置換法では，メトロポリス法の代わりに諏訪・藤堂の方法を用いることで，レプリカ置換の棄却率を最小化する。そのため離れたパラメータ間におけるパラメータ値の交換が発生し，サンプリング効率を向上させることができる。これまでのレプリカ置換法ではカノニカルアンサンブルにおいて，１変数のみの置換を行ってきた。今年度はレプリカ置換法を定温定圧アンサンブルに拡張し，温度と圧力の２変数を置換する定温定圧レプリカ置換法を開発した。この新しい手法をシニョリンに適応したところ，レプリカ交換法に比べてサンプリング効率を２倍以上改善することに成功した。

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。昨年度からこのプラグラムの MPI による並列化に取り組み，水分子の計算について並列化率 99.99994394% という非常に高い並列化計算性能を達成した。現在タンパク質など全ての原子についての並列化を進めている。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

H. OKUMURA and S. G. ITOH, “Structural and Fluctuational Difference between Two Ends of Aβ Amyloid Fibril: MD Simulation Predicts Only One End Has Open Conformations,” *Sci. Rep.* **6**, 38422 (9 pages) (2016).

R. GUPTA, S. SAITO, Y. MORI, S. G. ITOH, H. OKUMURA and M. TOMINAGA, “Structural Basis of TRPA1 Inhibition by HC-030031 Utilizing Species-Specific Differences,” *Sci. Rep.* **6**, 37460 (14 pages) (2016).

H. NISHIZAWA and H. OKUMURA, “Rapid QM/MM Approach for Biomolecular Systems under Periodic Boundary Conditions: Combination of the Density-Functional Tight-Binding Theory and Particle Mesh Ewald Method,” *J. Comput. Chem.* **37**, 2701–2711 (2016).

S. G. ITOH and H. OKUMURA, “Oligomer Formation of Amyloid-β(29-42) from Its Monomers Using the Hamiltonian Replica-Permutation Molecular Dynamics Simulation,” *J. Phys. Chem. B* **120**, 6555–6561 (2016).

W. KHUNTAWEE, T. RUNGROTMONGKOL, P. WOLSCHANN, P. PONGSAWASDI, N. KUNGWAN, H. OKUMURA and S. HANNONGBUA, “Conformation Study of ε-Cyclodextrin: Replica-Exchange Molecular Dynamics Simulations,” *Carbohydr. Polym.* **141**, 99–105 (2016).

S. RUIZ-BARRAGAN, K. ISHIMURA and M. SHIGA, “On the Hierarchical Parallelization of Ab Initio Simulations,” *Chem. Phys. Lett.* **646**, 130–135 (2016).

齊藤天菜，望月祐志，山崎大，石村和也,「Intel Xeon Phi 上での SMASH による並列化 DFT 計算の性能評価」, *J. Comput. Chem. Jpn.* **15**, 92–96 (2016).

B-3) 総説，著書

森　義治，奥村久士,「分子動力学シミュレーションで探るタンパク質・ペプチドの圧力変性」, *生物物理* **56**, 212–216 (2016).

伊藤　暁，奥村久士,「レア・イベントを捕えるための新たな分子シミュレーション手法――アミロイド線維形成の理解に向けた取り組み――」, *日本物理学会誌* **71**, 463–468 (2016).

B-4) 招待講演

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」, 平成２８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「生物の形態形成の多様性の細胞レベルでの共通原理の解明とそのための統計数理学的方法の開発」ミーティング, 基礎生物学研究所, 2016年12月.

奥村久士,「各種統計アンサンブルの生成法」, 第１０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, 2016年10月.

奥村久士,「分子動力学シミュレーションの基礎と生体分子の動的秩序形成研究への応用」, 第3回新学術領域研究「動的秩序と機能」若手研究会, 加賀観光ホテル, 加賀, 2016年10月.

奥村久士,「分子動力学シミュレーションによるアミロイドβペプチドの集合と離散」, 第四回CUTEシンポジウム：コンピュータ化学, 三重大学, 津, 2016年6月.

奥村久士,「分子動力学シミュレーションによるアミロイド線維の離合集散」, 日本化学会第９６春季年会特別企画「どこまで明らかになったか？　自己組織化のメカニズム：アミロイド形成から人工系」, 同志社大学, 京田辺, 2016年3月.

奥村久士,「分子動力学シミュレーションで探るアミロイドβペプチドの凝集，離散」, CAMDセミナー, 国立長寿医療研究センター, 大府, 2016年2月.

H. OKUMURA, “Computational molecular science to reveal dynamical ordering of amyloid fibril,” Okazaki Institute for Integrative Bioscience Retreat, Mikawawan Resort Linx, Nishio (Japan), November 2016.

H. OKUMURA, “Dynamical ordering of amyloid fibril studied by molecular dynamics simulations,” Thai-Japan Symposium in Chemistry, Chiang Mai University, Chiang Mai (Thailand), November 2016.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations to study dynamical ordering of amyloid fibril,” 2016 NCTS October Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, National Tsing Hua University, Hsinchu (Taiwan), October 2016.

H. OKUMURA, “Suwa-Todo algorithm in generalized-ensemble algorithms: Replica-permutation and simulated tempering methods,” Free Energy Landscape of Protein Folding and Dynamics by Simulations based on Enhanced Conformational Sampling Algorithms, Nagoya University, Nagoya (Japan), July 2016.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations for assembly and disassembly of Aβ amyloid fibrils,” 8th IKUSTAR, Kasetsart University, Bangkok (Thailand), June 2016.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations of amyloid fibrils,” 2016 NCTS March Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, National Tsing Hua University, Hsinchu (Taiwan), March 2016.

H. OKUMURA, “Pressure induced structural change of proteins by molecular dynamics simulations,” Eighth Japan-Korea Seminars on Biomolecular Sciences, Institute for Molecular Science, Okazaki (Japan), February 2016.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations of proteins under high pressure,” Pure and Applied Chemistry International Conference 2016, Bangkok International Trade & Exhibition Centre, Bangkok (Thailand), January 2016.

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 (2011–2016).

自然科学における階層と全体シンポジウム実行委員 (2012–2016).

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

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」, 2016年12月13日.

B-10) 競争的資金

自然科学研究機構岡崎統合バイオサイエンスセンターオリオン公募研究,「アミロイド線維における動秩序形成機構を解明し阻害法を開発する計算分子科学」, 奥村久士 (2016年度–2018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),「アミロイド線維の動的秩序形成過程の全貌の理論的解明」, 奥村久士 (2016年度–2017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,「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).

自然科学研究機構岡崎統合バイオサイエンスセンターオリオン公募研究,「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

a) これまで親水性／疎水性溶液界面でアミロイドβペプチド1本のシミュレーションを行ってきた。今後この界面で複数本のアミロイドβペプチドがダイナミックに離合集散する過程のシミュレーションを行う。そして，アミロイドβペプチドが自律的に集合するメカニズムを理論的に解明する。

b) Aβペプチドの凝集が金属イオンにより加速される理由を調べるため，水中に複数本のAβペプチドと金属イオンが存在する系のシミュレーションを行う。ここでは今年度我々が開発した高速なQM/MM 計算手法を用いる。Aβペプチドと金属イオンの間で配位結合が形成されるか否か，形成されるとすればどの残基との間で形成されるのか明らかにし，金属イオンによるAβペプチドの凝集加速機構を解明する。

c) アミロイド線維の生成はバラバラのモノマー状態から核生成過程を経て，アミロイド線維が伸長し平衡状態に至る。しかし，これまでのシミュレーション研究ではこの全過程を調べた研究はない。そこで比較的凝集しやすい短いペプチドについて100 本以上のモノマーから核生成過程，伸長過程を経てアミロイド線維が形成される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。このシミュレーション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。

理論・計算分子科学研究部門

藤　田　貴　敏（特任准教授（若手独立フェロー））（2016 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：理論化学，計算物質科学

A-2) 研究課題：

a) 有機半導体の励起子ダイナミクスの理論研究

b) π 共役分子集合体の構造－機能相関の理論研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 有機半導体の光物性を考えるうえで，励起子の形成や拡散を考えるのは重要である。我々は電子状態理論や量子動力学法を組み合わせることにより，有機半導体中の励起子ダイナミクスを取り扱える方法を開発した。本研究で p 型有機半導体薄膜の励起子ダイナミクスを解析した結果，有機半導体の光物性が従来考えられてきたフレンケル励起子モデルでは説明つかないこと，光励起後にフレンケル型励起子と電荷移動型励起子が混合した状態が生成することを見出だした。

b) 有機分子を使った機能性材料を設計する試みが行われており，様々の π 共役分子系の合成が行われている。本研究ではピロール環を持つ π 電子系分子結晶多形に着目し，π–π スタッキング構造と電荷移動度の関係について理論研究を行った。３種の結晶構造について電子状態計算と電荷移動理論を用いた解析を行った。３種の結晶はいずれもヘリンボーン状の結晶構造を持つにもかかわらず，スタッキング様式の違いにより電荷移動の次元性や異方性が変化することが分かった。

B-1) 学術論文

T. FUJITA, S. ATAHAN-EVRENK, N. P. D. SAWAYA and A. ASPURU-GUZIK, “Coherent Dynamics of Mixed Frenkel and Charge Transfer Excitons in Dinaphtho[2,3-*b*:2´3´-*f*]thieno[3,2-*b*]-thiophene Thin Films: The Importance of Hole Delocalization,” *J. Phys. Chem. Lett.* **7**, 1374–1380 (2016).

B-4) 招待講演

藤田貴敏,「励起子の計算物理化学――分子集合体の光物性と励起ダイナミクス――」, 第２４８回自然環境論セミナー , 神戸大学, 神戸（日本）, 2016年 3月.

藤田貴敏,「分子集合体の光物性と励起子についての理論研究」, 第 59回量子物理化学セミナー , 横浜市立大学, 横浜（日本）, 2016年 7月.

藤田貴敏,「低分子有機半導体の光物性と励起子ダイナミクス」, 日本物理学会秋季大会シンポジウム, 金沢大学, 金沢（日本）, 2016年 9月.

T. FUJITA, “Exciton Dynamics in DNTT Thin Films,” EMN Meeting on Theory and Computation, South Point Hotel, Las Vegas (U.S.A.), October 2016.

T. FUJITA, “Theoretical characterization of energy transport in the chlorosome light-harvesting antenna from green sulfur bacteria,” The 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Commodere Hotel, Gyeongju (Korea), November 2016.

T. FUJITA, “Dynamics of Frenkel and Charge Transfer Excitons in DNTT Thin Films,” The 4th Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Soochow University, Suzhou (China), December 2016.

C) 研究活動の課題と展望

今後は有機半導体のpn 接合やイオンペア分子集合体などのより複雑な系に展開したい。より複雑な系を扱う上では電子状態理論を高精度化する必要があり，特に軌道エネルギー・励起エネルギーの差や電子カップリングをより正確に計算する必要がある。フラグメント分子軌道をベースにしたカップリング計算の開発を進めており，全電子計算から準粒子の有効ハミルトニアンを導出する手法を検討中である。

岡　崎　圭　一（特任准教授（若手独立フェロー））（2016 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：理論生物物理学

A-2) 研究課題：

a) 生体分子モーター F_1-ATPase の動作メカニズムの解明

b) 一分子実験時系列データの解析手法の開発と糖鎖分解型モーターへの応用

c) タンパク質が引き起こす大規模生体膜変形メカニズムの解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) ATP 合成酵素は，バクテリアからヒトまで，あらゆる生物の生命活動に必須なエネルギー源 ATP を合成する酵素である。その ATP 合成酵素において，ATP を合成する酵素部位をなすのが F_1-ATPase である。F_1-ATPase 自体は，逆反応である ATP 加水分解エネルギーを用いて，回転軸を逆方向に回転させるモーターである。多くの一分子実験や結晶構造解析によりその化学力学共役メカニズムが明らかになってきたが，まだわからないこともある。その一つが，我々が以前取り組んだ ATP 加水分解後のリン酸解離のタイミングである。我々は，全原子分子動力学シミュレーションを用いて，リン酸解離が ADP 解離より後に起こることを示した。また，そのリン酸解離が回転力を生み出す原子レベルのメカニズムを明らかにした。もう一つの課題は，一分子実験で特定された状態（ATP 結合待ち状態，加水分解待ち状態）と原子レベルの構造との対応付けである。これについて，実験家と共同で，一分子 FRET 実験と F_1-ATPase 結晶構造の主成分解析などから，今までよくわかっていなかった ATP 結合待ち状態の構造状態について新たな情報を得ることができた。さらに，この情報を生かして，全原子シミュレーションからその原子レベルの構造を同定しようとしているところである。

b) 生体分子モーターが機能する際には，時間・空間的にマルチスケールなダイナミクスが関わっている。異なる時間・空間分解能を持つ手法である一分子実験と分子シミュレーションは，その動作メカニズムの解明においてそれぞれの強みがある。しかしながら，これらの手法から得られる結果には往々にしてギャップがあり，動作メカニズムの全貌の解明には至らないことが多い。このギャップを埋めるために，一分子実験時系列データの解析から，その背後にある状態・エネルギー地形などを推定する一般的な方法論を開発する。そして，今まで検出困難であった動作サイクル中の中間状態などを同定し，分子シミュレーションによる原子レベルのメカニズムと直接結びつけることを目指す。糖鎖分解型モーターを例にとって方法論の開発中である。

c) 細胞中で生体膜は様々な形状をしている。ミトコンドリアのクリステやゴルジ体など様々な形状・曲率を持った構造が見られるが，その形成メカニズムは必ずしも良くわかっていない。このマイクロメートルスケールの大規模生体膜変形メカニズムを粗視化モデルによるシミュレーションで明らかにする。特に，タンパク質が引き起こす膜変形に注目して，タンパク質の効果を粗視化モデルに取り入れているところである。

B-1) 学術論文

M. SUGAWA, K. OKAZAKI, M. KOBAYASHI, T. MATSUI, G. HUMMER, T. MASAIKE and T. NISHIZAKA, "F_1-ATPase Conformational Cycle from Simultaneous Single-Molecule FRET and Rotation Measurements," *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **113**, E2916–E2924 (2016).

B-4) 招待講演

K. OKAZAKI, “Mechanochemical Coupling, Elasticity and Friction of F_1-ATPase,” The 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Science, Gyeongju (Korea), November 2016.

K. OKAZAKI, “Conformational Cycle, Elasticity and Friction of F_1-ATPase,” The Tokyo Molecular Motor Show, 学習院大学, 東京, 2016年9月.

K. OKAZAKI, “Conformational Dynamics, Mechanochemical Coupling, and Viscoelasticity of F_oF_1 ATP synthase,” 野地研究室セミナー, 東京大学工学系研究科, 東京, 2016年8月.

B-6) 受賞，表彰

岡崎圭一, 日本生物物理学会若手奨励賞 (2014).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

第10回分子シミュレーションスクール世話人 (2016).

学会の組織委員等

日本生物物理学会運営委員 (2010–2011).

B-10) 競争的資金

自然科学研究機構融合発展促進研究プロジェクト,「ベイズ推定を用いた生体分子モーターの動作メカニズムの解明：一分子実験と分子シミュレーションの橋渡し」, 岡崎圭一 (2016年–2018年).

日本学術振興会海外特別研究員,「生体分子モーターにおけるアロステリック遷移の自由エネルギー計算」, 岡崎圭一 (2012年–2014年).

日本学術振興会特別研究員（PD),「分子モーターの動作機構のマルチスケールな解析：全原子・粗視化シミュレーション」, 岡崎圭一 (2009年–2012年).

日本学術振興会海外特別研究員（DC 2),「多谷エネルギー地形モデルによるタンパク質の構造変化機構のシミュレーション研究」, 岡崎圭一 (2007年–2009年).

C) 研究活動の課題と展望

2016年6月に着任して以来，生体分子マシンの機能ダイナミクスを理論的な手法で解明して，そのデザイン原理を探求する研究を進めている。単一の生体分子モーターの原子レベルのダイナミクスから，タンパク質の集合体が引き起こすマイクロメートルスケールの大規模生体膜変形まで，幅広いスケールの現象を全原子・粗視化シミュレーションや統計力学的モデリングを駆使して明らかにしていく。

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

d) 光によるナノ物質の力学操作手法の開発

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に展開している。極めて短寿命の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を開発し，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。

b) 各種形状貴金属ナノ構造体の分光及びダイナミクスのイメージング計測を行っている。微粒子及び集合体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や微粒子周辺の増強電場のイメージが得られることを見いだし，その展開を図った。電子線描画装置，フェムト秒広帯域波長可変光源等を導入し，体系的にナノ構造試料作製，光場の空間構造と分光特性の近接場測定を進めた。また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により，プラズモンの位相緩和のほか，複数のプラズモンモードを同時励起した後のプラズモン波束の運動を可視化した。これはナノ物質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。

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局所偏光解析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。

d) レーザー光を強く集光すると,その焦点に微粒子がトラップされる(光トラッピング)。この時入射光にフェムト秒レーザーパルスを用いることで，非線形誘起分極によって，従来の光トラッピングとは全く異なる挙動を示すことを，数年前に報告した。非線形効果，共鳴効果を有効利用することで，このような光による力学的マニピュレーションの自由度が格段に広がることが予想され，この研究展開を図ることを，今後の研究の今一つの柱とする。

B-1) 学術論文

T. NARUSHIMA, S. HASHIYADA and H. OKAMOTO, "Optical Activity Governed by Local Chiral Structures in Two-Dimensional Curved Metallic Nanostructures," *Chirality* **28**, 540–544 (2016).

T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, "Circular Dichroism Microscopy Free from Commingling Linear Dichroism via Discretely Modulated Circular Polarization," *Sci. Rep.* **6**, 35731 (2016).

Y. NISHIYAMA and H. OKAMOTO, "Near-Field Nonlinear CD Imaging of Single Gold Nanostructures," *J. Phys. Chem. C* **120**, 28157–28162 (2016).

B-4) 招待講演

Y. NISHIYAMA, K. IMURA and H. OKAMOTO, "Spatio-Temporal Observation of Plasmon Dynamics by Ultrafast Near-Field Microscopy," 9th Asian Conference on Ultrafast Phenomena, Manila (Philippines), February 2016.

T. NARUSHIMA, S. HASHIYADA and H. OKAMOTO, "Near-Field Circular Dichroism Imaging to Design Optically Active Nanomaterials," 11th Annual IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems (IEEE-NEMS 2016), Matsushima (Japan), April 2016.

H. OKAMOTO, Y. NISHIYAMA and K. IMURA, "Observation of Plasmon Wave Packet Motions with Ultrafast Near-Field Microscopy," 7th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META'16), Malaga (Spain), July 2016.

H. OKAMOTO, Y. JIANG and T. NARUSHIMA, "Effects of nonlinear polarization in optical trapping," PIERS (Progress In Electromagnetics Research Symposium) 2016 in Shanghai, Shanghai (China), August 2016.

H. OKAMOTO, Y. NISHIYAMA, K. IMAEDA and K. IMURA, "Near-Field Optical Imaging of Ultrafast Dynamics in Gold Nanorods," PIERS (Progress In Electromagnetics Research Symposium) 2016 in Shanghai, Shanghai (China), August 2016.

井村考平，今枝佳祐，溝端秀聡，西山嘉男，岡本裕巳,「近接場顕微分光手法の拡張とプラズモン研究への応用」, 第77回応用物理学会秋季学術講演会, 新潟, 2016年9月.

H. OKAMOTO, "Near-Field Imaging of Plasmons: Field Structures, Propagation Dynamics, Chirality," Optics & Photonics Japan 2016, OSJ-OSA Joint Symposia on Plasmonics and Digital Photonics, Tokyo (Japan), October 2016.

成島哲也,「ナノマテリアルが示す光学活性の起源を探る：円二色性ナノイメージング」, 第10回日本化学会東海支部若手研究者フォーラム～理論と実験から探る，マクロとミクロをつなぐケミストリー～, 名古屋, 2016年11月.

岡本裕巳,「キラルプラズモンの局所的光学活性」, 第4回豊田理研ワークショップ「キラル対称系の電磁応答」, 名古屋, 2016年11月.

B-5) 特許出願

特願2015-257226,「円偏光照射器，分析装置及び顕微鏡」, 岡本裕巳，成島哲也(自然科学研究機構), 2015年.

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).

西山嘉男, The 3rd Optical Manipulation Conference Outstanding Award (2016).

橋谷田俊, The Best Poster Presentation Award, NFO-14 (2016).

橋谷田俊, OSJ-OSA Joint Symposia Student Award (2016).

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).

3rd Optical Manipulation Conference, Optics & Photonics International Congress 2016, Program Committee (2016).

The 14th International Conference on Near-Field Optics, Nanophotonics and Related Techniques, Local Organizing Committee (2016).

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–).

自然科学研究機構教育研究評議員 (2016–).

B-8) 大学での講義，客員

国立交通大学（台湾),「Micro- and nano-scopic optical activity measurements」, 2016年5月6日.

総合研究大学院大学物理科学研究科,「構造光科学」, 2016年7月5日–8日.

B-10) 競争的資金

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).

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−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).

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–).

科研費特定領域研究(計画研究),「光圧を創る：物質自由度を活用した捜査の高度化」, 岡本裕巳 (2016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研究を推進し，金属ナノ構造体に関して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。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。並行して測定波長域の拡大や，試料設計・作製のための新装置導入，近接場計測装置の高度化等を行い，研究を次のフェーズに進めてきた。時間分解近接場分光では，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が, 非常に高度な技術を要する実験であり, 困難も大きい。今一つのベクトルとして進めているナノ物質のキラリティの研究では，金属ナノ構造の光学活性イメージングによって，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，新たなキラル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，一部実際の共同研究も始めた。通常の回折光学系による顕微鏡で精度の高い円二色性イメージングを可能とする装置開発も行なっており，これは物質開発，生物科学，結晶学等の様々な分野の研究者から興味を持って頂いている。一方これらとは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)を見出し数年前に発表した。時を前後して国内で光圧(散乱力，勾配力)に関する新たな展開が勃興し，関連する研究を行っている研究者が集まって，今般新学術領域研究を発足した。光圧によるナノ物質・分子の力学操作に関する新たな展開を図るべく，この研究領域にも注力していく計画である。

光分子科学第二研究部門

大　森　賢　治（教授）（2003 年 9 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：量子物理学，原子分子光物理学，量子情報科学，物理化学

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) 強相関・極低温リュードベリ原子集団の超高速・多体・電子ダイナミクスを，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

N. TAKEI, C. SOMMER, C. GENES. G. PUPILLO, H. GOTO, K. KOYASU, H. CHIBA, M. WEIDEMÜLLER and K. OHMORI, "Direct Observation of Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in an Ultracold Rydberg Gas," *Nat. Commun.* **7**, 13449 (2016).

C. SOMMER, G. PUPILLO, N. TAKEI, S. TAKEDA, A. TANAKA, K. OHMORI and C. GENES, "Time-Domain Ramsey Interferometry with Interacting Rydberg Atoms," *Phys. Rev. A* **94**, 053607 (16 pages) (2016).

H. KATSUKI and K. OHMORI, "Simultaneous Manipulation and Observation of Multiple Ro-Vibrational Eigenstates in Solid Para-Hydrogen," *J. Chem. Phys.* **145**, 124316 (9 pages) (2016).

B-3) 総説，著書

大森賢治,「アト秒精度のコヒーレント制御の開発と応用」, *月刊オプトロニクス* 2016年10月号 (2016).

B-4) 招待講演（* 基調講演）

K. OHMORI, "Many-Body Physics: The Holy Grail of Modern Sciences and Technologies," State Key Laboratory of Quantum Optics and Quantum Optics Devices, Shanxi University, Taiyuan (China), November 2016.*

K. OHMORI, "Addressing Quantum Many-Body Dynamics by Ultrafast Coherent Control with Attosecond Precision," CQD-IMS Collaborative Meeting "Rydberg Quantum Matter," Heidelberg (Germany), June 2016.*

K. OHMORI, "Many-Body Physics: The Holy Grail of Modern Sciences and Technologies," 1st International Symposium on Advanced Photonics (ISAP), Hamamatsu (Japan), April 2016.*

K. OHMORI, "Direct Observation and Control of Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly-Correlated Ultracold Rydberg Gas," OIST Mini Symposium "Rydberg Atoms for Quantum Technologies," Okinawa (Japan), March 2016.*

大森賢治,「量子力学に残された100年の謎に迫る」, 浜松ホトニクス中央研究所, 浜松（日本), 2016年7月.*

大森賢治,「アト秒精度の超高速光量子シミュレーター：超多体ダイナミクス専用プラットフォームの開発」, 計算分子科学研究拠点第6回研究会, 岡崎（日本), 2016年3月.*

大森賢治,「量子力学に残された100年の謎に迫る」, 日立中央研究所, 鳩山（日本), 2016年1月.*

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, 2010–2017).

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).

1st International Symposium on Advanced Photonics “Quantum Many-Body Science and Technology” 組織委員 (2016).

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 (2012–2016).

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–2016年.

B-10) 競争的資金

科研費特別推進研究,「アト秒精度の超高速コヒーレント制御を用いた量子多体ダイナミクスの探求」, 大森賢治 (2016年–2021年).

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。さらに，集光軟Ｘ線ビームと組み合わせることで，ナノスケール化学状態マッピングの開拓的研究に取り組んでいる。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

T. FRANSSON, Y. HARADA, N. KOSUGI, N. A. BESLEY, B. WINTER, J. J. REHR, L. G. M. PETTERSSON and A. NILSSON, “X-Ray and Electron Spectroscopy of Water,” *Chem. Rev.* **116**, 7551–7569 (2016).

T. BRANDENBURG, R. GOLNAK, M. NAGASAKA, K. ATAK, S. S. N. LALITHAMBIKA, N. KOSUGI and E. F. AZIZ, “Impacts of Conformational Geometries in Fluorinated Alkanes,” *Sci. Rep.* **6**, 31382 (7 pages) (2016).

M. W. LIN, K. C. WANG, J. H. WANG, M. H. LI, Y. L. LAI, T. OHIGASHI, N. KOSUGI, P. CHEN, D. H. WEI, T. F. GUO and Y. J. HSU, “Improve Hole Collection by Interfacial Chemical Redox Reaction at a Mesoscopic $NiO/CH_3NH_3PbI_3$ Heterojunction for Efficient Photovoltaic Cells,” *Adv. Mater. Interfaces* **3**, 1600135 (12 pages) (2016).

H. YAMANE and N. KOSUGI, “Site-Specific Organic/Metal Interaction Revealed from Shockley-Type Interface State,” *J. Phys. Chem. C* **120**, 24307–24313 (2016).

K. YAMAMOTO, A. KLOSSEK, R. FLESCH, T. OHIGASHI, E. FLEIGE, F. RANCAN, J. FROMBACH, A. VOGT, U. BLUME-PEYTAVI, P. SCHRADE, S. BACHMANN, R. HAAG, S. HEDTRICH, M. SCHÄFER-KORTING, N. KOSUGI and E. RÜHL, “Core-Multishell Nanocarriers: Transport and Release of Dexamethasone Probed by Soft X-Ray Spectromicroscopy,” *J. Controlled Release* **242**, 64–70 (2016).

B-3) 総説，著書

長坂将成，小杉信博,「軟X線透過吸収法：分子間相互作用解析のための化学シフトと測定技術」, *J. Vac. Soc. Jpn.* **59(11)**, 301–306 (2016).

大東琢治，小杉信博,「UVSOR-III の走査型透過X線顕微鏡における化学状態分析法の開発」, *放射光学会誌* **19(6)**, 287–293 (2016).

B-4) 招待講演

小杉信博,「分子の内殻励起に関する先導的実験及び理論（第６８回日本化学会賞受賞講演）」, 日本化学会春季年会, 京田辺, 2016年3月.

N. KOSUGI, “Chemical Shifts in Inner-shell Excitations arising from Molecular Interactions,” International Conference on The Future of X-Ray and Electron Spectroscopies (XRAY-2016), Uppsala (Sweden), June 2016.

N. KOSUGI, “Optimal Energy and Spatial Resolutions for in situ/operando Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” 2nd International Workshop on Soft X-Ray Science Opportunities using Diffraction-limited Storage Rings, organized by NSRL and ALS, Hefei (China), August 2016.

H. YAMANE, “Valence-Band Dispersion in Organic Thin Films and Interfaces,” Okazaki Conference “Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (ASOMEA),” Okazaki, November 2016.

B-6) 受賞，表彰

小杉信博, 第６８回日本化学会賞 (2016).

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).

小杉信博, 分子科学研究奨励森野基金研究助成 (1987).

長坂将成, 分子科学研究奨励森野基金研究助成 (2016).

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), 学会賞選考委員会委員 (2016).

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).

ASOMEA-VIII 有機電子材料のための先端分光国際ワークショップ組織委員 (2016).

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).

文部科学省科学技術・学術審議会先端研究基盤部会量子ビーム利用推進小委員会委員, 主査代理 (2016).

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, 2016), 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), ERL 総括委員会委員長 (2016).

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).

東北放射光施設計画推進室委員 (2013–2014), 第三者委員会委員 (2015), 国際評価委員会委員 (2016).

九州シンクロトロン光研究センタービームライン評価委員会委員 (2016).

台湾放射光科学国際諮問委員会委員 (2008–2011).

台湾国立シンクロトロン放射研究センター人事委員 (2015–2016).

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).

科研費基盤研究(C),「マイクロ流路を用いた溶液反応の時間分解軟X線分光法の開発」, 長坂将成 (2016年–2018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).

科研費特別研究員奨励費,「軟X線吸収分光による固液界面構造の局所電子状態解析法の開発」, 湯澤勇人 (2014年–2016年).

C) 研究活動の課題と展望

本研究グループは, 光吸収分光と光電子分光に重点を置いて, 軟X線放射光の分子科学応用を展開している。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。さらに, 内殻励起の化学シフトを高いエネルギー分解能と空間分解能で観測することによって初めて実現可能になる化学状態マッピングの手法開発に取り組んでいる。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検討し，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，弱相互作用系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

T. HOSOKAI, A. HINDERHOFER, F. BUSSOLOTTI, K. YONEZAWA, C. LORCH, T. WATANABE, A. VOROBIEV, Y. HASEGAWA, Y. YAMADA, Y. KUBOZONO, A. GERLACH, S. KERA, F. SCHRIBER and N. UENO, "Thickness and Substrate Dependent Thin Films Growth of Picene and Impact to the Electronic Structure," *J. Phys. Chem. C* **119**, 29027–29037 (2015).

Y. NAKAYAMA, Y. URAGAMI, M. YAMAMOTO, K. YONEZAWA, K. MASE, S. KERA, H. ISHII and N. UENO, "High-Resolution Core-Level Photoemission Measurements on the Pentacene Single Crystal Surface Assisted by Photo-conduction," *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 094001 (8 pages) (2016).

J.-P. YANG, W.-Q. WANG, L.-W. CHENG, Y.-Q. LI, J.-X. TANG, S. KERA, N. UENO and X.-H. ZENG, "Mechanism for Doping Induced p Type C_{60} Using Thermally Evaporated Molybdenum Trioxide (MoO_3) as a Dopant," *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 185502 (6 pages) (2016).

T. KIRCHHUEBEL, M. GRUENEWALD, F. SOJKA, S. KERA, F. BUSSOLOTTI, T. UEBA, N. UENO, G. ROUILLE, R. FORKER and T. FRITZ, "Self-Assembly of Tetraphenyldibenzoperiflanthene (DBP) Films on Ag(111) in the Monolayer Regime," *Langmuir* **32**, 1981–1987 (2016).

K. YONEZAWA, Y. SUDA, S. YANAGISAWA, T. HOSOKAI, K. KATO, T. YAMAGUCHI, H. YOSHIDA, N. UENO and S. KERA, "Charge Transfer States Appear in the π-Conjugated Pure Hydrocarbon Molecule on Cu(111)," *Appl. Phys. Express* **9**, 045201 (4 pages) (2016).

T. SCHULTZ, R. SCHLESINGER, J. NIEDERHAUSEN, F. HENNEBERGER, S. SADOFEV, S. BLUMSTENGEL, A. VOLLMER, F. BUSSOLOTTI, J.-P. YANG, S. KERA, K. PARVEZ, N. UENO, K. MÜLLEN and N. KOCH, "Tuning the Work Function of GaN with Organic Molecular Acceptors," *Phys. Rev. B* **93**, 125309 (5 pages) (2016).

Y. HE, F. BUSSOLOTTI, Q. XIN, J. P. YANG, S. KERA, N. UENO and S. DUHM, "Transient Monolayer Structure of Rubrene on Graphite: Impact on Hole-Phonon Coupling," *J. Phys. Chem. C* **120**, 14568–14574 (2016).

C. LI, J. WEI, M. SATO, H. KOIKE, Z.-Z. XIE, Y.-Q. LI, K. KANAI, S. KERA, N. UENO and J. X. TANG, "Halide-Substituted Electronic Properties of Organometal Halide Perovskite Films: Direct and Inverse Photoemission Studies," *ACS Appl. Mater. Interfaces* **8**, 11526–11531 (2016).

J. P. YANG, W. Q. WANG, F. BUSSOLOTTI, L. W. CHENG, Y. Q. LI, S. KERA, J. X. TANG, X. H. ZENG and N. UENO, "Quantitative Fermi Level Tuning in Amorphous Organic Semiconductor by Molecular Doping: Toward Full Understanding of the Doping Mechanism," *Appl. Phys. Lett.* **109**, 093302 (4 pages) (2016).

T. UEBA, J. PARK, R. TERAWAKI, Y. WATANABE, T. YAMADA and T. MUNAKATA, "Unoccupied Electronic Structure and Molecular Orientation of Rubrene; from Evaporated Films to Single Crystals," *Surf. Sci.* **649**, 7–13 (2016).

T. UEBA, T. YAMADA and T. MUNAKATA, "Electronic Excitation and Relaxation Dynamics of the LUMO-Derived Level in Rubrene Thin Films on Graphite," *J. Chem. Phys.* **145**, 214703 (9 pages) (2016).

B-4) 招待講演

S. KERA, "A perspective of quasiparticle state in organic crystals," The 18th International conference on solid states and surfaces (ICSFS18), Chemnitz (Germany), August 2016.

S. KERA, "Deep insight into electronic states of functional molecular materials," The International Conference on Electronic Materials (ICMRS-ICEM2016), Singapore, July 2016.

S. KERA, "Mass, momentum, and energy of an electron of rubrene single crystal," The 4th Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Soochow (China), December 2016.

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（International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-Ray Physics）真空紫外光物理およびX線物理国際会議国際諮問委員 (2014–).

学会の組織委員等

第３０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 (2016).

第７７回応用物理学会秋季学術講演会プログラム編成委員 (2016).

第６３回応用物理学会春季学術講演会プログラム編成委員 (2016).

The 4th Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Co-Chair (Soochow, China 2016).

学協会連携分子研研究会「表面科学の最先端技術と分子科学（第7回真空・表面科学若手研究会）」運営委員 (2016).

第７６回岡崎コンファレンス"Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications"主催者 (2016).

MPI-PKS 国際重点研究会"Prospects and Limitations of Electronic Structure Imaging by Angle Resolved Photoelectron Spectroscopy," Co-Chair (Dresden, Germany 2016).

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).

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Editorial Board (2015–).

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(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。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，

実験データの取得を開始している。立ち上げ中のラボ装置としては新規に導入した超短パルスレーザー光源を用いたシステムが残るが，二光子光電子分光および時間分解光電子分光測定への実験展開を急ぎたい。UVSOR 施設においては，外部ユーザーとしてビームタイムの申請に努め，有機固体の未踏の電子状態測定を実現すべく，アドバンス光電子分光実験を推進している。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国内で実施不可能な先端分析実験は，引き続き海外放射光施設（Diamond（英），BESSY（独），ELETTRA（伊））の利用申請により共同利用実験を進める。UVSOR 施設利用実験の新規展開として，高運動量分解・高エネルギー分解光電子顕微鏡を用いた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。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。

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。

e) 高エネルギー電子ビームによる光渦の生成に成功し，その原理の解明に世界に先駆けて成功した。自然界での光渦の生成の可能性について，研究を進めると共に，深紫外・真空紫外領域での光渦の利用法の開拓を進めている。

B-1) 学術論文

H. ZEN, Y. TAIRA, T. KONOMI, T. HAYAKAWA, T. SHIZUMA, J. YAMAZAKI, T. KII, H. TOYOKAWA, M. KATOH and H. OHGAKI, “Generation of High Energy Gamma-Ray by Laser Compton Scattering of 1.94-μm Fiber Laser in UVSOR-III Electron Storage Ring,” *Energy Procedia* **89**, 335–345 (2016).

E. TSUDA, Y. MITSUMOTO, K. TAKAKURA, N. SUNAGA, T. AKITSU, T. KONOMI and M. KATOH, “Electrochemical Tuning by Polarized UV Light Induced Molecular Orientation of Chiral Salen-Type Mn(II) and Co(II) Complexes in an Albumin Matrix,” *J. Chem. Chem. Eng.* **2**, 53–59 (2016).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

N. YAMAMOTO, X. G. JIN, K. YAMAGUCHI, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA and M. KATOH, "Time Response Measurements for Transmission-Type GaAs/GaAsP Superlattice Photocathodes," *Proc. 7th Internat. Particle Accel. Conf. (Busan, 2016)*, 2641 (2016).

M. HOSAKA, K. MIYAMOTO, S. SASAKI, K. KURODA, T. KONOMI, N. YAMAMOTO, N. S. MIRIAN and M. KATOH, "Experimental Study on Optical Vortex from A Helical Undulator at UVSOR-III," *Proc. 7th Internat. Particle Accel. Conf. (Busan, 2016)*, 2036 (2016).

H. OHGAKI, T. KII, H. ZEN, I. DAITO, H. TOYOKAWA, Y. TAIRA, T. HAYAKAWA, T. SHIZUMA, M. KATOH and J. YAMAZAKI, "Study On NRF-CT Imaging by Laser Compton Backscattering Gamma-Rays in UVSOR," *Proc. 7th Internat. Particle Accel. Conf. (Busan, 2016)*, 2007 (2016).

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).

加藤政博, 第20回超伝導科学技術賞（未踏科学技術協会） (2016).

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, 2013–2015, 2016–).

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入射効率の向上へ向けて研究を進めている。また，名古屋大学などと協力し，ビーム不安定性を抑制するための高調波空洞の開発を進める。

自由電子レーザーに関しては，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。

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。特に光渦など従来の放射光にはない特異な性質を持つ光の基礎研究からその発生法の高度化，さらに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。理論計算との比較，さらにはモデル計算によるフィッティングを行うことで単位胞中に３つある CuO_2 面のうち外側の２枚中の電子が相関することによって引き起こされていることを明らかにした。今後このエネルギーバンドの詳細な温度変化を観測することで，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。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した。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。現在はこれまでにない高効率イメージスピン検出器を開発中であり，スピン分解検出をする酸化鉄ターゲットまで電子を導くことに成功している。これらの機能をあわせることで 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。

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 4.6 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。現在試料位置で約 7 K を達成したがさらなる低温化を目指して開発を進めている。2016年度中にビームラインへ導入する予定である。

B-1) 学術論文

J. OKABAYAHI, 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).

M. NAKAYAMA, T. KONDO, Z. TIAN, J. J. ISHIKAWA, M. HALIM, C. BAREILLE, W. MALAEB, K. KURODA, T. TOMITA, S. IDETA, K. TANAKA, M. MATSUNAMI, S. KIMURA, N. INAMI, K. ONO, H. KUMIGASHIRA, L. BALENTS, S. NAKATSUJI and S. SHIN, "Slater to Mott Crossover in the Metal to Insulator Transition of $Nd_2Ir_2O_7$," *Phys. Rev. Lett.* **117**, 056403 (6 pages) (2016).

K. HAGIWARA, Y. OHTSUBO, M. MATSUNAMI, S. IDETA, K. TANAKA, H. MIYAZAKI, J. E. RAULT, P. LE FEVRE, F. BERTRAN, A. TALEB-IBRAHIMI, R. YUKAWA, M. KOBAYASHI, K. HORIBA, H. KUMIGASHIRA, K. SUMIDA, T. OKUDA, F. IGA and S. KIMURA, "Surface Kondo Effect and Non-Trivial Metallic State of the Kondo Insulator YbB_{12}," *Nat. Commun.* **7**, 12690 (2016).

T. YOSHIDA, W. MALAEB, S. IDETA, D. H. LU, R. G. MOOR, Z.-X. SHEN, M. OKAWA, T. KISS, K. ISHIZAKA, S. SHIN, S. KOMIYA, Y. ANDO, H. EISAKI, S. UCHIDA and A. FUJIMORI, "Coexistence of a Pseudogap and a Superconducting Gap for the High-T_c Superconductor $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ Studied by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy," *Phys. Rev. B* **93**, 014513 (5 pages) (2016).

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」, 界面スピン軌道結合の微視的解明と巨大垂直磁気異方性デバイスの創製第2回研究会, 京都工芸繊維大学, 京都, 2016年11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 (2014–2016).

日本放射光学会誌編集委員 (2016–).（出田真一郎）

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).

科研費若手研究(B),「角度分解光電子分光及びフェムト秒時間分解電子線回折による高温超伝導起源の解明」, 出田真一郎 (2015年–2016年).

C) 研究活動の課題と展望

これまで整備・立ち上げを進めてきたUVSOR のBL5U の高分解能角度分解光電子分光ビームラインは2016年度より運用を開始した。今後は高分解能を利用した実験を行いつつ，スピン分解測定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：原子分子分光，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進め，アンジュレータとビームライン分光器，及び電子エネルギー分析器を同時に制御できるようにした。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。アンジュレータの偏光方向に対して電子エネルギー分析器を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。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協力研究や国際共同研究として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。2014 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設置し，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，信頼性の高いデータを取得することに成功した。現状の実験条件では，光イオン化における光渦の効果は極めて小さく，検出限界を下回っていることが明らかになった。

c) 日本のＸ線自由電子レーザー（XFEL），SACLA 及びその試験加速器である SCSS において，Ｘ線や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いる。特に，FEL 光により励起された原子が集団として振る舞う量子光学効果，超蛍光に関しては，計算機シミュレーションを援用することにより，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。今年度から運用を開始した SACLA の BL1 に，我々が開発した極紫外発光観測装置を持ち込みビームライン下流に放射される極紫外領域の発光の観測を試みた。その結果，パルス状の時間構造を有する極紫外発光の観測に成功した。現在，データ解析を進めている。

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。小さな分子に関しては，内殻イオン化後に高効率で生成されるオージェ終状態としての二価分子イオンについて，準安定種の電子状態の同定や解離極限と電子状態との相関を決定することに

成功している。昨年度から，観測対象を混合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。数百分子サイズの分子クラスターに標的分子をピックアップさせることにより，液相・固相と同様の周辺環境下における標的分子の内殻励起光解離過程の観測を行っている。予備的な実験として，N_2 分子クラスター中に O_2 分子を混合し，O1s 電子を光イオン化したところ，O_2^+ のみならず，N_2^+ や N^+，更には NO^+ などが観測された。このことは，光吸収した O_2 から周辺の N_2 への電荷移行やエネルギー移行が起きていることを示唆している。更なるクラスター生成の高効率化を目指した装置開発を継続中である。

B-1) 学術論文

C. OHAE, J. R. HARRIES, H. IWAYAMA, K. KAWAGUCHI, S. KUMA, Y. MIYAMOTO, M. NAGASONO, K. NAKAJIMA, I. NAKANO, E. SHIGEMASA, N. SASAO, S. UETAKE, T. WAKABAYASHI, A. YOSHIMI, K. YOSHIMURA and M. YOSHIMURA, "Simultaneous Measurements of Superradiance at Multiple Wavelength from Helium Excited States: II. Analysis," *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 034301 (10 pages) (2016).

O. TRAVNIKOVA, T. MARCHENKO, G. GOLDSZTEJN, K. JÄNKÄLÄ, N. SISOURAT, S. CARNIATO, R. GUILLEMIN, L. JOURNEL, D. CÉOLIN, R. PÜTTNER, H. IWAYAMA, E. SHIGEMASA, M. N. PIANCASTELLI and M. SIMON, "Hard-X-Ray-Induced Multistep Ultrafast Dissociation," *Phys. Rev. Lett.* **116**, 213001 (5 pages) (2016).

H. IWAYAMA, T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA and E. SHIGEMASA, "Stability and Dissociation Dynamics of N_2^{++} Ions Following Core Ionization Studied by an Auger-Electron–Photoion Coincidence Method," *J. Chem. Phys.* **145**, 034305 (8 pages) (2016).

Y. HIKOSAKA, R. MASHIKO, Y. KONOSU, K. SOEJIMA and E. SHIGEMASA, "Electron Emission Relevant to Inner-Shell Photoionization of Condensed Water Studied by Multi-Electron Coincidence Spectroscopy," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **213**, 17–21 (2016).

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 (2006–2008, 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).

第30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 (2016).

第33回化学反応討論会実行委員 (2016).

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）

その他

公益財団法人高輝度光科学研究センター・SACLA 利用研究課題審査委員 (2016–2017).

B-8) 大学での講義，客員

新潟大学大学院自然環境科学科, 自然環境科学集中講義「原子分子物理学II」, 2016年9月5日–7日, 11月28日–30日.

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).

科研費若手研究(B),「高温ガスセルを用いた振動励起した分子の光電子分光法の開発」, 岩山洋士 (2016年–2018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，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た研究を推進して行く。観測対象としては，従来通り，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するが，混合分子クラスターに関する研究を新たに展開するためのクラスター装置の開発研究も継続する。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ついて理解を深め

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，今年度整備された分光ビームラインにおいて，分光された光渦光子による実験を行う。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，最近のSACLA での実験で観測された，超蛍光である可能性が高いEUV 領域における発光現象について，蛍光強度の試料濃度依存性を高分解能で時分割測定することにより，世界初となるEUV 領域での超蛍光観測の確証を得たい。

先端レーザー開発研究部門（分子制御レーザー開発研究センター）

平　等　拓　範（准教授）（1998 年 2 月 1 日着任）

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

A-2) 研究課題：

a) マイクロドメイン構造制御に関する研究

b) マイクロドメイン光制御に関する研究

c) マイクロ固体フォトニクスの展開

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。さらに最近，表面活性接合による異種材料接合に成功し，Distributed Face Cooling（DFC）構造による Tiny Integrated Laser（TILA）なる次世代の高性能な高集積小型レーザーに関するコンセプトが検証された。これより，新たなフォトニクスを創出できるものと期待している。

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，手のひらサイズジャイアントパルスマイクロチップレーザーからの高輝度温度光発生，マイクロチップレーザーからの UV 光（波長:266 nm）からテラヘルツ波（波長:100 ~ 300 μm），さらには高効率・高出力のナノ秒光パラメトリック発生（出力エネルギー約 1 J，効率約 80%），波長 5~12 mm に至る広帯域波長可変中赤外光発生，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

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, "High-Gain Mid-Infrared Optical-Parametric Generation Pumped by Microchip Laser," *Opt. Express* **24**, 1046–1052 (2016).

A. KAUSAS and T. TAIRA, "Giant-Pulse Nd:YVO_4 Microchip Laser with MW-Level Peak Power by Emission Cross-Sectional Control," *Opt. Express* **24**, 3137–3149 (2016).

常包正樹,平等拓範,「自動車エンジン点火用の超小型固体レーザー」, *光学* **45**, 111–113 (2016).

M. TSUNEKANE and T. TAIRA, "Direct Measurement of Temporal Transmission Distribution of a Saturable Absorber in a Passively Q-Switched Laser," *IEEE J. Quantum Electron.* **52**, 5200107 (7 pages) (2016).

T. GOTO, R. MORIMOTO, J. W. PRITCHARD, M. MINA, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, P. B. LIM, T. TAIRA and M. INOUE, "Magneto–Optical Q-Switching Using Magnetic Garnet Film with Micromagnetic Domains," *Opt. Express* **24**, 17635–17643 (2016).

R. MORIMOTO, T. GOTO, J. PRITCHARD, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, P. B. LIM, H. UCHIDA, M. MINA, T. TAIRA and M. INOUE, "Magnetic Domains Driving a Q-Switched Laser," *Sci. Rep.* **6**, 38679 (7 pages) (2016).

L. ZHENG, A. KAUSAS and T. TAIRA, ">MW Peak Power at 266 nm, Low Jitter kHz Repetition Rate from Intense Pumped Microlaser," *Opt. Express* **24**, 28748–28760 (2016).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

L. ZHENG and T. TAIRA, "Sub-Nanosecond Passively Q-Switched Monolithic Green Laser," *LASE 2016, SPIE Photonics West*, 9730-46 (2016).

V. YAHIA and T. TAIRA, "Toward GW-Class High-Brightness Microchip Laser System," *10th International Conference on Optics-photonics Design & Fabrication (ODF'16)*, 1PDb-07 (2016).

K. NAWATA, S. HAYASHI, H. ISHIZUKI, K. MURATE, K. IMAYAMA, K. KAWASE, T. TAIRA and H. MINAMIDE, "Study of Effective Terahertz-Wave Parametric Generation Depending on Pump Duration," *7th International Workshop on Terahertz Technology and Applications* (2016).

Y. SATO and T. TAIRA, "Numerical Model for Thermal Parameters in Optical Materials," *Laser Sources and Applications (Conference 9893), SPIE Photonics Europe 2016*, 9893-15 (2016).

H. H. LIM and T. TAIRA, ">0.5 MW Peak Power, Widely Pulse-Width Tunable Nd:YAG Ceramic Microchip Laser by Cavity Length Control," *The 10th Asia-Pacific Laser Symposium (APLS 2016)*, Thu-P-95 (2016).

K. HAGITA, T. IKEO, Y. ISHIKAWA, Y. HIGASHI, N. JIKUTANI, T. TAIRA and T. SUZUDO, "Multi-Pulse Oscillation of Passively Q-Switched Micro-Laser Pumped by VCSEL Module," *The 4th Laser Ignition Conference (LIC'16), OPIC'16*, LIC3-2 (2016).

V. YAHIA and T. TAIRA, "Development of a 0.3 GW Microchip-Seeded Amplifier," *The 4th Laser Ignition Conference (LIC'16), OPIC'16*, LIC3-3 (2016).

L. ZHENG and T. TAIRA, "1 kHz Repetition Rate, Giant-UV-Pulse Generation in [100] Nd:YAG/[110] Cr:YAG Micro-Laser Under Intensive Pulse Pumping," *The 4th Laser Ignition Conference (LIC'16), OPIC'16*, LICp-5 (2016).

Y. SATO and T. TAIRA, "Polarization Dependence of Saturable Absorption in Cr:YAG," *The 4th Laser Ignition Conference (LIC'16), OPIC'16*, LICp-6 (2016).

A. KAUSAS, P. LOISEAU, G. AKA, Y. ZHENG and T. TAIRA, "Temperature Stable Giant-Pulse Green Micro-Laser," *The 4th Laser Ignition Conference (LIC'16), OPIC'16*, LIC7-3 (2016).

H. H. LIM and T. TAIRA, "Minimum Air-Breakdown Energy Using Giant-Pulse Width Tunable System Based on Microchip Laser," *The 4th Laser Ignition Conference (LIC'16), OPIC'16*, LIC9-3 (2016).

S. HAYASHI, K. NAWATA, H. ISHIZUKI, K. MURATE, K. IMAYAMA, Y. TAKIDA, Y. TOKIZANE, T. TAIRA, K. KAWASE and H. MINAMIDE, "Study on Parametric Gain of Nonlinear Wavelength Conversion in a $LiNbO_3$," *The 5th Advanced Lasers and Photon Sources Conference (ALPS'16), OPIC'16*, ALPSp14-34 (2016).

M. BAUDISCH, H. PIRES, U. ELU, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and J. BIEGERT, "44 μJ, 160 kHz, few-cycle mid-IR OPCPA with chirp reversal," *CLEO 2016*, STu3I.5 (2016).

Y. SATO and T. TAIRA, "Initial Behavior of the Relaxation Oscillation at Zero-Phonon Line of Yb Gain Media," *CLEO 2016*, JTu5A.33 (2016).

T. GOTO, R. MORIMOTO, J. PRITCHARD, T. YOSHIMOTO, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, L. P. BOEY, M. MINA, T. TAIRA and M. INOUE, "Diode Laser Pumped Solid State Laser Using Magneto-Optical Q Switch," *CLEO 2016*, JTu5A.34 (2016).

C. K. D. SUDDAPALLI, J. WEI, A. J. DEBRAY, V. KEMLIN, B. BOULANGER, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and M. EBRAHIM-ZADEH, "Picosecond Mid-Infrared Optical Parametric Oscillator Based on Cylindrical MgO:PPLN," *CLEO 2016*, STh1P.2 (2016).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, "Periodic Laminar Structured Quartz for Intense-Laser Pumped Wavelength Conversion," *7th EPS-QEOD Europhoton Conference*, PO-1.13 (2016).

R. MORIMOTO, T. GOTO, J. PRITCHARD, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, P. B. LIM, M. MINA, T. TAIRA and M. INOUE, "Downsizing of Magneto–Optical Q-Switch Using Magnetic Garnet Films," *The 40th Annual Conference on MAGNETICS in Japan*, 6pB-1 (2016).

H. LIM and T. TAIRA, "Continuously Pulse Width Tunable Nd:YAG Ceramic Micro Giant-Pulse Laser for Laser Induced Breakdown," *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, JTu2A.35 (2016).

Y. SATO and T. TAIRA, "Polarization Dependence of Saturable Absorption Characteristics in Cr^{4+}:YAG," *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATu3A.3 (2016).

A. KAUSAS, P. LOISEAU, G. AKA, Y. ZHENG and T. TAIRA, "Temperature Stable Operation of YCOB Crystal for Giant-Pulse Green Micro-Laser," *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATu5A.7 (2016).

T. GOTO, R. MORIMOTO, J. PRITCHARD, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, H. UCHIDA, M. MINA, T. TAIRA and M. INOUE, "Actively Controlled Q-Wwitched Laser Using Domains in Magnetooptical Garnet Film," *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATh4A.7 (2016).

J. YUE, T. TAMADA, M. KAMATA, L. ZHENG, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, ">2 MW Peak Power at 1560 nm from Micro Giant-Pulse Laser/Amplifier with PPMgLN OPG," *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATh4A.8 (2016).

B-3) 総説，著書

D. J. HAGAN, J. DADAP, Y. LU, N. C. PANOIU, M. SHEIK-BAHAE and T. TAIRA, "Introduction: Nonlinear Optics (NLO) 2015 Feature Issue," *Opt. Mater. Express* **6**, 466–468 (2016). (Opening Article)

K. GALLO, Y. JEONG, T. TAIRA, S. JIANG and F. ILDAY, "Focus Issue Introduction: Advanced Solid State Lasers (ASSL) 2015," *Opt. Express* **24**, 5674–5682 (2016). (Opening Article)

平等拓範,「レーザ点火技術の最新動向～自動車エンジンからコージェネレーションガスエンジンまで」, *電気学会誌* **136**, 296–300 (2016).

平等拓範,「マイクロドメイン制御によるハイパワーレーザー材料」, *応用物理* **85**, 863–869 (2016).

B-4) 招待講演（* 基調講演）

平等拓範,「ジャイアントマイクロフォトニクスのエネルギー展開――ユビキタス・ハイパワーレーザー――」, 日本学術振興会 Science Café, 日本学術振興会ワシントン研究連携センター , ワシントンDC（米国), 2016年 2月.

T. TAIRA, "Laser ignitions for energy solution," 7th International Symposium on Optical Materials (IS-OM7), Lyon (France), February 2016.

平等拓範,「パネルディスカッション ニッポンの向かう先はいずこか？　導入トーク：光・レーザー先端研究における世界の潮流・国際戦略分析――Photonic Westを中心として――」, 光産業技術振興協会第4回光材料・応用技術研究会, 東京, 2016年3月.

平等拓範, "Giant Micro-Photonics for Energy—Micro-Domain Controlled Lasers Using Magnetic Field and Spin–Orbit Interaction—," 第100回磁性研ゼミナール, 豊橋技術科学大学, 豊橋, 2016年3月.

T. TAIRA, "Opening remarks for LIC," LIC plenary session, The 4th Laser Ignition Conference (LIC'16), OPIC'16, Yokohama (Japan), May 2016.* (***Plenary Talk***)

T. SUZUDO, K. HAGITA, T. IKEO, K. IZUMIYA, N. JIKUTANI, Y. HIGASH and T. TAIRA, "Total Design of High Power VCSEL Pumped Passively Q-Switched Micro-Lasers for Laser Ignition," The 4th Laser Ignition Conference (LIC'16), OPIC'16, Yokohama (Japan), May 2016.

R. BHANDARI, K. TOJO and T. TAIRA, "Development of UV Microchip Lasers for Compact MALDI Spectroscopy Systems," The 4th Laser Ignition Conference (LIC'16), OPIC'16, Yokohama (Japan), May 2016.

T. SAKAMOTO, K. OHISHI, Y. FURUKAWA, L.ZHENG and T. TAIRA, "A Flange-Mounted UV Microchip Laser for Imaging Mass Spectrometry," The 4th Laser Ignition Conference (LIC'16), OPIC'16, Yokohama (Japan), May 2016.

T. GOTO, R. MORIMOTO, J. W. PRITCHARD, T.YOSHIMOTO, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, P. B. LIM, M. MINA, T. TAIRA and M. INOUE, "Magneto–Optical Q-Switching with Magnetic Garnet Film," The 4th Laser Ignition Conference (LIC'16), OPIC'16, Yokohama (Japan), May 2016.

平等拓範,「レーザー点火技術と波及効果」, レーザー特別セミナー「自動車の安全を支える光技術」, OPTICS & PHOTONICS International Exibition 2016 (OPIC'16), パシフィコ横浜, 横浜, 2016年5月.

平等拓範,「テラヘルツ波発生用のマイクロチップレーザー」, 日本学術振興会第303回光エレクトロニクス第130委員会, 静岡大学工学部S-Port, 静岡, 2016年7月.

平等拓範,「マイクロ固体フォトニクスによる小型ジャイアントパルスレーザー」, レーザー学会東京支部セミナー第27回「若手技術者のためのレーザー応用セミナー」, 慶應義塾大学, 横浜, 2016年7月.

平等拓範,「マイクロレーザーの新展開と生体光イメージングへの可能性」, 日本学術振興会第1回光エレクトロニクス第185委員会, アクトシティ浜松, 浜松, 2016年7月.

平等拓範,「自動車へのレーザー応用加速の理由(ガイダンス)」, 光産業技術振興協会第2回光材料・応用技術研究会, 東京, 2016年8月.

T. TAIRA, "Micro-Domain Control Toward New Lasers," The 40th Annual Conference on MAGNETICS in Japan, Kanazawa (Japan), September 2016.

T. TAIRA, "Giant Micro-Photonics for Engine Ignition and Sensing," International Conference "Global/Local Innovations for Next Generation Automobiles," Sendai (Japan), October 2016.

T. TAIRA, "GW-Class Giant-Pulse Micro-Lasers by Using Domain Control," CerSJ-GOMD Joint Symposium on Glass Science and Technologies, Kyoto (Japan), November 2016.

T. TAIRA, "Giant Micro-Photonics for Engine Ignition," The Third Symposium on Combustion Diagnostics, Xi'an (China), November 2016.

T. TAIRA, "Giant Micro-photonics for Ubiquitous Power Laser," Xi'an Institute of Optics and Precision Mechanics (XIOPM), Xi'an (China), November 2016.

T. TAIRA, "Giant Micro-photonics for Ubiquitous Power Laser," University of Beijing, Beijing (China), November 2016.

T. TAIRA, "Giant Micro-Photonics for Energy," Laboratory for Nanoscale Optics, John A. Paulson School of Engineering and Applied Sciences, Harvard University, Cambridge (U.S.A.), November 2016.

平等拓範,「マイクロ固体フォトニクスによる高輝度テラヘルツ波生成」, 名古屋市工業研究所, 公益財団法人名古屋産業振興公社, テラヘルツ応用技術講演会～テラヘルツ波の応用可能性と展望～, 名古屋市工業研究所, 名古屋, 2016年11月.

T. TAIRA, "Domain Control Toward MW to Sub-GW Giant-Pulse Micro-Lasers," 12th Laser Ceramics Symposium (LCS2016), Saint-Louis (France), November 2016.

平等拓範,「接合・界面制御と固体レーザーの高性能化」, 日本学術振興会第7回接合界面創成技術第191委員会, 東京大学工学部, 東京, 2016年12月.

B-5) 特許出願

特願 2016-002667,「受動Qスイッチレーザ装置」, 平等拓範, カウシャス　アルヴィダス, 鄭麗和(自然科学研究機構), 2016年.

特願 2016-116603,「レーザ装置とその製造方法」, 平等拓範, カウシャス　アルヴィダス, 鄭麗和, ヤヒア　ヴァンサン, 安原亮(自然科学研究機構), 2016年.

特願 2016-161228,「パルス光発生装置」, 石月秀貴, 平等拓範(自然科学研究機構), 2016年.

特願 2016-174793,「選択増幅装置」, 平等拓範, ヤヒア　ヴァンサン(自然科学研究機構), 2016年.

特願 2016-211991,「レーザー部品」, 平等拓範, カウシャス　アルヴィダス, 鄭麗和(自然科学研究機構), 2016年.

特願 2016-242700,「皮膚レーザ治療器」, 高橋勉, 高橋一哲, 平等拓範(ユニタック, 自然科学研究機構), 2016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).

N. 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).

T. GOTO, R. MORIMOTO, J. PRITCHARD, N. PAVEL, T. YOSHIMOTO, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, P. B. LIM, M. MINA, T. TAIRA and M. INOUE, MORIS2015 Best Poster Award, 147th Committee on Amorphous and Nano-Crystalline Materials, Japan Society for the Promotion of Science (2015).

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 (2013–2018).

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).

米国光学会The Optical Society (OSA) フェロー (2010–).

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).

国際光工学会The International Society for Optical Engineering (SPIE)（米国）フェロー (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III」研究会座長 (2013–2015).

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

米国電気電子学会The Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE) フェロー (2014–).

科学技術交流財団「ジャイアントマイクロフォトニクスIV」研究会座長 (2015–2017).

米国光学会The Optical Society (OSA), Charles Hard Townes Award 表彰委員会委員（Award Committee） (2015–2016).

4th Laser Ignition Conference (LIC'16) 国際会議統括議長 (2015–2016).

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

日本燃焼学会「レーザー点火研究分科会」研究委員会研究分科会主査 (2016).

7th EPS（欧州物理学会）—QEOD Europhoton Conference, Research in Laser Science and Applications Prize 2016 国際会議審査員 (2016).

第２４回国際光学委員会総会（ICO-24), Nonlinear Optics カテゴリチェア (2016–2017).

5th Laser Ignition Conference (LIC'17) 国際会議プログラム委員会議長(2016–2017).

米国光学会（OSA）Advanced Solid State Lasers (ASSL) 2017 国際会議統括議長 (2016–2017).

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).

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

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

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/SIOM Pacific-Rim Laser Damage (PLD'16) 国際会議国際委員会委員 (2015–2016).

国立研究開発法人科学技術振興機構革新的研究開発推進プログラム(ImPACT)評価協力者 (2015–2017).

SPIE/SIOM Pacific Rim Laser Damage 2017 (PLD2017) 国際会議国際委員会委員 (2016–2017).

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 (2016–2017).

Materials Committee, Advanced Solid State Lasers (ASSL) 2016 国際会議プログラム委員会委員 (2016).

12th Laser Ceramics Symposium (LCS2016): International Symposium on Transparent Ceramics for Photonic Applications 国際会議プログラム委員会委員 (2016).

Optics & Photonics International Congress 2017 (OPIC2017) 国際会議組織委員会委員 (2016–2017).

The 6th Laser Display and Lighting Conference (LDC2017) 国際会議プログラム委員会委員 (2016–2017).

Advanced Lasers & Photon Sources (APLS'17) 国際会議プログラム委員会委員 (2016–2017).

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, 2015–2016).

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 (2011–2017).

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).

Nonlinear Optics (NLO) 2015 Feature Issue, *Opt. Mater. Express* **6**, 466–468 (2016), ゲスト編集委員 (2015–2016).

Advanced Solid State Lasers (ASSL) 2015 Feature Issue, *Opt. Express* **24**, 5674–5682 (2016), ゲスト編集委員 (2015–2016).

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-8) 大学での講義，客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「光エレクトロニクス」, 2016年7月19日, 9月6日.

豊橋技術科学大学, 客員教授, 2016年– .

B-10) 競争的資金

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).

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).

NEDO 戦略的省エネルギー技術革新プログラム,「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, デンソー) (2013年–2017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–2018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).

文部科学省平成２８年度技術試験研究委託事業,「先進的光計測技術を駆使した炉内デブリ組成遠隔その場分析法の高度化研究」, 再委託(研究代表原子力機構廃炉国際共同研究センター若井田育夫), 平等拓範 (2016年–2018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 (2016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 (2016年).

ソニー（株),「1.5 μm 帯高出力マイクロチップレーザーの開発」, 平等拓範 (2016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ーション等の光科学の最先端分野も, このキーワードで深化しつつあり, その学術的拠り所としての基盤構築が必要な時期となっている。

藤　　貴　夫（准教授）（2010 年 2 月 1 日着任）

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

A-2) 研究課題：超短光パルスの研究

a) 超短光パルスの超広帯域波長変換技術を使った分光法の開発発

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) 本研究室において，2 から 20 μm までの波長領域で位相の揃ったコヒーレントな赤外光パルスを発生する技術と，そのスペクトルを単一ショット（1 ms）で計測できる方法を開発した。この波長領域の光は，多くの分子振動準位と共鳴しており，非破壊で分子のダイナミクスを研究するのに適している。今年度の成果としては，その高速赤外スペクトル分光法を化学反応ダイナミクスの研究に応用したことである。この装置によって，酢酸とマグネシウムの反応ダイナミクスを，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。酢酸とマグネシウムを混合することで，酢酸マグネシウムと水素が発生するが，酢酸の CO 二重結合に由来する吸収線が，反応が進むにつれて減少し，酢酸マグネシウムにおける COO^- の伸縮モードに由来する吸収線が増加する様子がリアルタイムに観測することができた。2 から 20 μm までの波長領域で化学反応ダイナミクスをリアルタイムで計測したのは，世界ではじめてのことである。

b) 数年前に開発した超短光パルスの光電場波形を直接計測する手法を発展させ，自己参照による光電場波形計測に成功した。パルス幅 21 fs，中心波長 3.3 μm のパルスを二つに分け，その二倍波と自己回折光との干渉信号を測定することで，パルスのキャリア･エンベロープ位相を測定できた。それと同時に，第二高調波周波数分解光ゲート法によって，パルスの強度の時間変化も測定し，それらの情報を組み合わせることで，周期 11 fs で振動する光電場の波形を完全に再現することができた。自己参照によって光電場波形測定ができたことによって，測定したい光電場パルスに対して，測定用に別のパルスを用意する必要がなくなった。このことは，光科学の分野で画期的なことであり，今後の応用が期待される。

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において，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波長変換元の光源として使用すれば，より高効率に赤外光パルスを発生できると考えられる。前年度にはツリウム添加フッ化物ファイバーレーザー発振器を開発し，2 μm の波長で 41 fs のパルスを発生させることに成功した。今年度は，そのパルスを増幅するフッ化物ファイバー増幅器を製作した。発振器からの平均出力 36 mW を最大 6.9 W，すなわち約 200 倍に増幅することに成功した。さらに，この出力パルスをパルス圧縮光学系によって圧縮することにより，時間幅が 150 fs のパルスが得られた。一般的には，増幅媒質として，石英ファイバーを用いることがほとんどであるが，本研究では，フッ化物ファイバーを用いることによって，はるかに高い効率で増幅することができた。ZBLAN ファイバーは熱に弱いために増幅器には不向きと考えられてきたが，今回の結果は，超高出力が必要ない場合には ZBLAN ファイバーのほうが増幅に有利であることを意味しており，レーザー増幅のための新たな指針を示すことができた。

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. NOMURA and T. FUJI, “Development of chirped-pulse amplifier based on Thulium-doped ZBLAN fibers,” *EuroPhoton2016*, FWG-5.7 (2016).

P. MALEVICH, C. LIVACHE, Y. NOMURA, A. BALTUŠKA and T. FUJI, “2 mJ ring cavity diode-pumped Tm:YAP regenerative amplifier,” *EuroPhoton2016*, PO-2.6 (2016).

H. SHIRAI, Y. NOMURA and T. FUJI, “Self-Referenced Waveform Measurement of Few-Cycle Mid-Infrared Pulses,” *International Conference on Ultrafast Phenomena 2016*, UTh2A-5 (2016).

T. FUJI, H. SHIRAI and Y. NOMURA, “Self-referenced frequency-resolved optical gating capable of carrier-envelope phase determination,” *CLEO: Science and Innovations 2016*, SM3I-7 (2016).

B-4) 招待講演

T. FUJI, “Sub-cycle mid-infrared pulse generation through filamentation,” COFIL2016, Quebec City (Canada), September 2016.

T. FUJI, “Self-referenced light wave measurement of few-cycle pulses,” International Symposium on Attosecond Science, Tokyo (Japan), July 2016.

T. FUJI, “Self-Referenced Waveform Characterization of Ultrashort Pulses,” LPHYS’16, Yerevan (Almenia), July 2016.

T. FUJI, “Generation and characterization of sub-cycle mid-infrared pulses using THz technologies,” EMN Meeting on Terahertz, San Sebastian (Spain), May 2016.

藤　貴夫,「Development of infrared ultrafast lasers for molecular science」, 統合バイオリトリート２０１６, 西尾, 2016年 11月.

藤　貴夫, 白井英登, 野村雄高,「キャリア・エンベロープ位相も決定できる周波数分解光ゲート法」, 第１３回エクストリームフォトニクス研究会, 蒲郡, 2016年 11月.

藤　貴夫,「サブサイクル中赤外光パルス発生とその応用」, 第3回超高速光エレクトロニクス研究会, 和光, 2016年 4月.

藤　貴夫,「超短赤外光パルスレーザー光源の最先端」, 高輝度・高強度赤外光源の現状と展望, 岡崎, 2016年 2月.

野村雄高, 藤　貴夫,「2 μm 帯フェムト秒Tm 添加ZBLAN ファイバレーザー」, レーザー学会学術講演会第３６回年次大会, 名古屋, 2016年 1月.

藤　貴夫,「キャリア・エンベロープ位相も測定できる超短光パルス評価法」, レーザー学会学術講演会第３６回年次大会, 名古屋, 2016年 1月.

野村雄高,「ツリウム添加ファイバーレーザーによる 2 μm 帯超短パルスレーザーシステム」, 第４７回極限コヒーレント光科学セミナー , 柏, 2016年 11月.

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).

野村雄高, 自然科学研究機構若手研究者賞 (2016).

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）

CLEO/USA2016座長 (2016).

CLEO/USA2016座長 (2016).（野村雄高）

B-8) 大学での講義，客員

アジアコア冬の学校, 中国科学院化学研究所, 2016年 2月 27日.

総合研究大学院大学物理科学研究科,「光物理」, 2016年 7月 1日–9月 30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).

科学技術振興機構さきがけ研究「生命機能メカニズム解明のための光操作技術」領域,「長波長レーザーによる超深部顕微分光システムの開発」, 野村雄高 (2016年–2019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，自己参照による光電場波形計測に成功した。この手法によって，光電場波形計測において，波長による制限は原理的に無くなった。これまで，この手法が実証されたのは，赤外光パルスだけであるが，今後，可視光領域でも実証したいと考えている。また，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，ファイバー増幅器の開発に成功した。今後，赤外光発生のためのさらなる増幅や，多光子顕微鏡など，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。特に，世界初の完全大気圧（1 気圧）下での光電子分光測定を目指した装置がほぼ完成した。

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。

c) 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。また，国内他機関の放射光施設を利用して，様々な磁性錯体等の硬Ｘ線 XAFS 測定を行い，局所電子状態・幾何構造解析に関する共同研究を進めている。

B-1) 学術論文

N. ISHIGURO, S. KITYAKARN, O. SEKIZAWA, T. URUGA, H. MATSUI, M. TAGUCHI, K. NAGASAWA, T. YOKOYAMA and M. TADA, “Kinetics and Mechanism of Redox Processes of Pt/C and Pt_3Co/C Cathode Electrocatalysts in a Polymer Electrolyte Fuel Cell during an Accelerated Durability Test,” *J. Phys. Chem. C* **120**, 19642−19651 (2016). DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b04437

O. SEKIZAWA, T. URUGA, Y. TAKAGI, K. NITTA, K. KATO, H. TANIDA, K. UESUGI, M. HOSHINO, E. IKENAGA, K. TAKESHITA, S. TAKAHASHI, M. SANO, H. AOYAGI, A. WATANABE, N. NARIYAMA, H. OHASHI, H. YUMOTO, T. KOYAMA, Y. SENBA, T. TAKEUCHI, Y. FURUKAWA, T. OHATA, T. MATSUSHITA, Y. ISHIZAWA, T. KUDO, H. KIMURA, H. YAMAZAKI, T. TANAKA, T. BIZEN, T. SEIKE, S. GOTO, H. OHNO, M. TAKATA, H. KITAMURA, T. ISHIKAWA, M. TADA, T. YOKOYAMA and Y. IWASAWA, “SPring-8 BL36XU: Catalytic Reaction Dynamics for Fuel Cells,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **712**, 012142 (4 pages) (2016). doi:10.1088/1742-6596/712/1/012142

S. YAMAZOE, S. TAKANO, W. KURASHIGE, T. YOKOYAMA, K. NITTA, Y. NEGISHI and T. TSUKUDA, "Hierarchy of Bond Stiffnesses within Icosahedral-Based Gold Clusters Protected by Thiolates," *Nat. Commun.* **7**, 10414 (2016). DOI: 10.1038/ncomms10414

W. -J. CHUN, S. TAKAKUSAGI, Y. UEMURA, K. BANDO and K. ASAKURA, "X-Ray Absorption Fine Structure Analysis of Catalytic Nanomaterials," *X-Ray and Neutron Techniques for Nanomaterials Characterization*, Springer, 609–664 (2016). DOI: 10.1007/978-3-662-48606-1_11

B-3) 総説，著書

Y. WAKISAKA, Y. UEMURA, T. YOKOYAMA, H. ASAKURA, H. MORIMOTO, M. TABUCHI, D. OHSHIMA, T. KATO and S. IWATA, "Anomalous Structural Behavior in the Magnetic and Structural Transition of FeRh Thin Films from a Local Viewpoint," *Photon Factory Highlights 2015*, 32–33 (2016).

高木康多,「雰囲気制御型硬X線光電子分光による固体燃料電池電極のその場観察」, *表面科学* **37**, 14–18 (2016).

B-4) 招待講演

横山利彦,「XAFS の解釈」, あいちシンクロトロン光センター第5回XAFS グループ利用者研究会, 瀬戸, 2016年 3月.

横山利彦,「XAFS の解釈」, 日本XAFS 研究会夏の学校, 小樽, 2016年 9月.

T. YOKOYAMA, "Novel synchrotron radiation methodology for materials science," Pre-ICMM2016 in Nagoya (Satellite meeting of ICMM2016) New Research Crossroads in Molecular Conductors and Magnets, Nagoya, September 2016.

高木康多,「固体高分子形燃料電池の雰囲気制御型硬X線光電子分光による分析」, 第5回SPring-8 グリーンサスティナブルケミストリー研究会／第7回SPring-8先端利用技術ワークショップ, 東京, 2016年 12月.

Y. TAKAGI, "In situ study of oxidation states of platinum nanoparticles on a PEFC electrode by near ambient pressure hard X-ray photoelectron spectroscopy," KPS Fall meeting 2016, Gwangju (Korea), October 2016.

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 (1998–2016).

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, 2015).

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, 実施機関責任者 (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).

本多記念会本多フロンティア賞選考委員 (2016).

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

広島大学大学院理学研究科,「放射光科学特論II」, 2016年10月18日–20日.

名古屋大学大学院理学研究科, 客員教授, 2012年– .

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(B),「新規時間分解X線吸収分光法の開発とマイクロ秒電極反応観測への応用」, 上村洋平 (2016年–2017年).

科研費特別研究員奨励費,「軽元素スピントロニクス材料におけるX線円二色性の解明」, 小出明広 (2015年–2016年).

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−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(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).

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。

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, インバー等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く。

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雰囲気制御型硬X線光電子分光による解析を行ってきた。2017年度は, 開発した光電子分光システムの当初最大圧力(~5000 Pa)をほぼ大気圧の90,000 Paにまで引き上げて光電子分光観測に成功した。今後, より実際の動作に近い圧力下での燃料電池電極状態観測に適用できる。光電子分光は, 燃料電池中の各構成成分の電位を電極なしに観測可能な手法であり, これらの観測を進めている。さらに, 測定には通常20分程度要するが, 急激な燃料電池の電圧変化追跡等のため, 繰返し計測のもと200 msの実効時間分解計測が可能となった。

2013年度から, 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。また, シングルバンチ等の特殊運転を必要としないタイムスタンプ法時間分解XAFS測定(ns ~ μsの変化が対象)の構築を進めている。

電子物性研究部門

中　村　敏　和（准教授）（1998 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：物性物理学，物質科学，磁気共鳴

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

K. MATSUBARA, Y. FUKAHORI, T. INATOMI, S. TAZAKI, Y. YAMADA, Y. KOGA, S. KANEGAWA and T. NAKAMURA, “Monomeric Three-Coordinate N-Heterocyclic Carbene Nickel(I) Complexes: Synthesis, Structures, and Catalytic Applications in Cross-Coupling Reactions,” *Organometallics* **35**, 3281–3287 (2016).

B-4) 招待講演（* 基調講演）

T. NAKAMURA, “Pulsed and multi-frequency ESR study for material and biological sciences,” International Workshop “Novel Magnetic Resonance Techniques in Millimeter and Terahertz Waves and their Applications to Bioscience (MR-THz2016),” Kobe University, Kobe (Japan), November 2016.

T. NAKAMURA, “Magnetic Resonance Investigation for Molecular Based Conductors,” IGER International Symposium on Science of Molecular Assembly and Biomolecular Systems 2016, Nagoya University, Nagoya (Japan), September 2016.*

T. NAKAMURA, “Pulsed ESR Study on Material and Biofunctional Spin Science,” The 4th Awaji International Workshop on Electron Spin Science & Technology: Biological and Materials Science Oriented Applications (AWEST2016), Awaji Yumebutai International Conference Center, Awaji (Japan), June 2016.

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).

電子スピンサイエンス学会会長 (2016–).

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-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).

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) 有機半導体単結晶におけるドーピング効果

b) 横取り出し超格子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) 10^{-9} nm/s に達する超低速蒸着技術を開発し, ルブレン有機単結晶へ 1 ppm まで極微量ドーピングすることに成功した。ホール効果測定によって，有機単結晶は，有機アモルファス薄膜の 3% にくらべて，格段に大きいドーピングイオン化率 27% を示すことが明らかになった。電界効果（FET）移動度測定によって，ドーピングによって有機単結晶中に形成される欠陥によるトラップが, キャリア濃度, キャリア移動度に大きな影響を与えていることが明らかになった。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) 超高速ホール移動度有機半導体と超高速電子移動度有機半導体を用いたキャリアハイウェー単結晶膜を，サファイア単結晶基板上にエピタキシー技術によって作製し，さらに，両者の交互積層超格子構造を持つ，キャリア横取り出し型超格子単結晶セルを作製した。このセルにおいて，光生成電子・ホールを，約 1 ミリメータの距離で横方向に取り出すこと，および，励起子拡散効率とキャリア収集効率を両立させて 100% とすることに成功し，ブレンド接合が不必要な新しいタイプの単結晶超格子有機太陽電池の原理を実証できた。

本セルは，キャリアを横取り出しするため，いくらでも厚く積層できるので，これまでの有機太陽電池のスタンダードであったブレンド接合の限界を打ち破ることができ，可視光全域を利用することで，15% 以上の効率を示す可能性を持つと考えている。

B-1) 学術論文

Y. WATANABE, T. HARADA, H. KAWAI, T. KAJI, M. HIRAMOTO and K. NISHIYAMA, “Emission Properties of [Eu(hfa)$_3$(phen)] and [Eu(hfa)$_3$(TPPO)$_2$] Dispersed in a Fibrous Network Comprising *p*-Chlorophenol + AOT Organogels,” *J. Mol. Liq.* **217**, 51–56 (2016).

S. KATSUBE, M. KINOSHITA, K. AMANO, T. SATO, Y. KATSUMOTO, T. UMECKY, T. TAKAMUKU, T. KAJI, M. HIRAMOTO, Y. TSURUNAGA and K. NISHIYAMA, “Solvent Dependent Properties and Higher-Order Structures of Aryl Alcohols + AOT Molecular Gels,” *Langmuir* **32**, 4352–4360 (2016).

B-3) 総説，著書

平本昌宏,「ppm ドーピングによる有機半導体の pn 制御と有機太陽電池応用」,「機能性色素の新規合成・実用化動向」, 松居正樹監修, シーエムシー出版（株), 第 2 章第 1 節, pp. 151–167 (2016).

B-4) 招待講演

M. HIRAMOTO, “Bandgap Science for Organic Solar Cells,” PACCON 2016, Pure and Applied Chemistry International Conference 2016, The 4th CU-IMS Symposium: 10 Years of Fruitful Relationship and Beyond (IMS), Bangkok (Thailand), February 2016.

M. HIRAMOTO, “Recent Progress and Future of Organic Photovoltaic Cells,” Japan Society of Applied Physics, Symposium 4 “Recent Progress of Organic Electronics in Japan and Korea: For the Next Jump,” Tokyo Institute of Technology, Tokyo, March 2016.

M. HIRAMOTO, “Bandgap Science for Organic Solar Cells,” 2nd World Congress on Materials Science, Polymer Engineering, Microtechnologies, Oil, Gas and Petrochemistry, Abu Dhabi (U.A.E.), November 2016.

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６３回応用物理学会春季学術講演会シンポジウム１９「有機薄膜太陽電池の現状と今後の展望」, 東京工業大学大岡山キャンパス, 東京, 2016年 3月.

平本昌宏,「有機単結晶薄膜太陽電池」, 第１２回有機太陽電池シンポジウム――ペロブスカイト太陽電池の研究展開と有機薄膜太陽電池のポテンシャル――, 京都大学宇治キャンパス, 宇治, 2016年 7月.

平本昌宏,「有機半導体のpn 制御と有機太陽電池への応用」, 有機エレクトロニクスデバイス・材料に関する研究討論会, 大阪大学吹田キャンパス銀杏会館, 吹田, 2016年 9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」, 名古屋大学工学研究科応用物理学専攻談話会, 名古屋大学３号館, 名古屋, 2016年 11月.

B-5) 特許出願

「横方向キャリア収集型有機太陽電池」, 平本昌宏, 菊地満, 新村祐介, 廣田真樹, 阿部正宏, 貞光雄一, 内藤裕義(日本化薬株式会社, 自然科学研究機構, 大阪府立大学), 2016年.

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)」, 2016年1月5日.

名古屋大学大学院工学研究科, 集中講義「有機半導体を用いた太陽電池」, 2016年11月4日, 11月25日, 12月9日.

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–2016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),「超高速移動度有機半導体単結晶の研究」, 平本昌宏 (2016年).

C) 研究活動の課題と展望

伊澤誠一郎氏が, 新しい助教として4月1日付で着任した。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3名(新村, 菊池, 廣田)を雇用した。また, 博士課程学生2名(大橋(D 3), 新宅(D 2)), タイ国マヒドール大, Thidarat Kunawong (D2, 2015.11–2016.3)が在籍している。

NEDO プロジェクト(2015.3–2016.2)では, 超高性能単結晶有機太陽電池の原理と実際の動作を実証した。先のCREST プロジェクトによって開拓した有機pn 制御技術とあわせて, 今後, 有機単結晶エレクトロニクス分野を開拓する。

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。継続性のため, 新たな学生を確保することが重要な課題となっている。

西　村　勝　之（准教授）（2006 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：固体核磁気共鳴，構造生命科学

A-2) 研究課題：

a) 糖鎖脂質含有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 を用いた有機・無機分子材料の解析

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，凝集して不溶性のアミロイド線維を形成するが，近年 , この線維化が細胞膜上で促進されると考えられている。本研究では , 脂質膜上で形成される Aβ 会合中間体を補足し，構造解析を行うことにより，脂質膜上でのアミロイド繊維形成機構の解明を行うことを目的として，分子研の加藤（晃）先生のグループと共同研究を行ってきた。初期検討として Aβ と弱い相互作用を有する中性脂質二重膜表面に結合して誘起される $A\beta_{40}$ の会合状態の解析を固体 NMR を用いて行い，その会合中間体の立体構造解析に成功した（*PLoS One* 2016）。さらに，より生理条件に近い細胞膜モデルとなる糖脂質含有脂質二重膜上に結合した Aβ 試料の繊維化前会合状態を固体 NMR を用いて解析している。これまで調製した試料では，極性頭部の大きい糖脂質の含有により試料中の有効ペプチド濃度が低く，信号帰属に必要な一連の２次元相関 NMR で十分なスペクトル感度の確保が困難であった。本年度，試料調製法を大幅に変更し，試料中の有効ペプチド濃度の増強，さらに固体 NMR 測定法の改良により，顕著な感度向上に成功した。現在，信号帰属に必要な一連の測定および解析を行っている。

b) 有機溶剤に不溶な非晶性の有機分子材料の状態解析は有効な手段が少なく，固体 NMR は非破壊でその分子情報を得ることが可能な有効な手段の一つである。これまで，所内外の複数の研究グループとの共同研究として，固体 NMR を用いて複数の新規合成高分子，分子材料 , および高分子複合体などの分子状態，および構造解析を行ってきた。北陸先端大学院大学の江先生のグループとの共同研究として，同グループで新規合成された高分子の分子状態の解析を行った（*Nat. Commun.* 2016）。さらに , 山形大学の飯島先生との共同研究として，無機材料の分子状態解析（*Solid State Nucl. Magn. Reson.* 2016）を行った。さらに，所外の３研究グループと , 有機分子材料の固体 NMR を用いた構造解析に関して共同研究を継続中である。

B-1) 学術論文

M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and K. NISHIMURA, “Membrane-Induced Dichotomous Conformation of Amyloid β with the Disordered N-Terminal Segment Followed by the Stable C-Terminal β Structure,” *PLoS One* **11**, 0146405 (10 pages) (2016).

T. IIJIMA, T. YAMASE and K. NISHIMURA, “Molecular and Electron–Spin Structures of a Ring-Shaped Mixed-Valence Polyoxovanadate (IV, V) Studied by ^{11}B and ^{23}Na Solid-State NMR Spectroscopy and DFT Calculations,” *Solid State Nucl. Magn. Reson.* **76–77**, 15–23 (2016).

N. HUANG, L. ZHAI, D. E. COUPRY, M. A. ADDICOAT, K. OKUSHITA, K. NISHIMURA, T. HEINE and D. JIANG, “Multiple-Component Covalent Organic Frameworks,” *Nat. Commun.* **7**, 12325 (12 pages) (2016).

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-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C),「脂質膜を介した生体超分子構造形成機構の解析に資する固体NMR 測定法開発と適用」, 西村勝之 (2016年–2018年).

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).

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 (2016年).

C)　研究活動の課題と展望

しばらくの間一人で研究を行ってきた。昨年度着任した特任助教は同年度内で退職し，現在また一人で研究を行っている。所内外の複数の研究グループと共同研究を行っているが，解析対象の試料調製など人手が必要ため，メンバーの増員が必要であると考えている。生体分子に加え，所外からの分子材料の構造解析の依頼もあり，これらを対象とした測定法の開発研究も進めている。昨年度，念願だった当グループNMR 分光器の更新が叶ったが，測定に必要な固体NMR プローブは，本年度購入を行っており，稼働は年度末となる予定である。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) 細菌のヘム取り込み反応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) *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，ビタミン B12（アデノシルコバラミン）を光受容体として利用している新規な光センサータンパク質である。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，光照射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，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，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。アデノシルコバラミンは，helix-bundle ドメインと Rossman-fold ドメインに挟まれる形で結合しており，Rossman-fold ドメイン中の His177 が第６配位子としてコバルトに配位していた。アデノシル基は，helix-bundle ドメイン中の二本のヘリックスに挟まれて存在しており，Trp131 と His142 がアデノシル基周辺に位置することにより，その配向を制御していると推定された。CarH が光を感知すると，アデノシル基が光解離することにより，コバラミン周辺のコンフォメーションが変化し，その結果として四量体から単量体への高次構造変化が誘起されるものと考えられる。

b) コリネバクテリア中に含まれるヘム取り込み系は，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，細胞表層に存在するヘム輸送タンパク質 HtaA の N 末ドメイン（HtaA-N）の結晶構造決定に成功した。HtaA-N は 11 本の β-strand と 2 本の短い α-helix から構成されており，HtaA-N 1 分子あたりにヘム 1 分子が結合していた。分子表面近傍に，β-strand 間を繋ぐ二つのループ領域がヘム分子を挟み込むように存在し，疎水性アミノ酸が豊富なポケット中にヘムが結合していた。ヘム鉄は Tyr58 を軸配位子とする 5 配位構造をとっていた。Tyr58 のヒドロキシ酸素は，近傍の His111 のイプシロン位の窒素と水素結合を形成していた。HtaA-N と HtaA の C 末ドメイン（HtaA-C）および HtaB のアミノ酸配列を比較すると，HtaA-N においてヘム結合ポケットを形成する疎水性アミノ酸や，ヘム鉄の軸配位子である Tyr58，Tyr58 と水素結合している His は，HtaA-C，HtaB の対応する位置に保存されていた。このことから，HtaA-N，HtaA-C，HtaB は共通の構造基盤を有するヘム結合・輸送タンパク質であると考えられる。HtaA-N と共通のフォールディングを有する既知のヘム結合タンパク質は存在しなかった。しかしながら，これまでに報告されているヘム輸送タンパク質中に存在するヘム結合ドメイン（NEAT ドメイン）と

HtaA-N との間には，いくつかの共通する性質が見られた。HtaA-N と NEAT ドメインでは，アミノ酸配列の相同性はないが，β シート構造を骨格としているという共通点があった。また，ヘム結合部位に着目すると，いずれも Tyr がヘムの軸配位子として機能しており，軸配位子である Tyr は近傍の残基と水素結合を形成している。この水素結合は，ヘム取込み系で機能するタンパク質に共通の構造基盤であると考えられ，ヘムの結合親和性の制御に寄与していると推定される。

B-1) 学術論文

N. MURAKI and S. AONO, "Structural Basis for Heme Recognition by HmuT Responsible for Heme Transport to the Heme Transporter in *Corynebacterium glutamicum*," *Chem. Lett.* **45**, 24–26 (2015).

N. MURAKI, C. KITATSUJI, M. OGURA, T. UCHIDA, K. ISHIMORI and S. AONO, "Structural Characterization of Heme Environmental Mutants of CgHmuT that Shuttles Heme Molecules to Heme Transporters," *Int. J. Mol. Sci.* **17**, 829 (10 pages) (2016).

A. OTOMO, H. ISHIKAWA, M. MIZUNO, T. KIMURA, M. KUBO, Y. SHIRO, S. AONO and Y. MIZUTANI, "A Study of the Dynamics of the Heme Pocket and C-Helix in CooA Upon CO Dissociation Using Time-Resolved Visible and UV Resonance Raman Spectroscopy," *J. Phys. Chem. B* **120**, 7836–7843 (2016).

T. NAKAE, M. HIROTSU, S. AONO and H. NAKAJIMA, "Visible-Light-Induced Release of CO by Thiolate Iron(III) Carbonyl Complexes Bearing N,C,S-Pincer Ligands," *Dalton Trans.* **45**, 16153–16156 (2016).

B-4) 招待講演

S. AONO, "Structure and Function of Heme Acquisition System in Corynebacterium glutamicum," 229th The Electrochemical Society Meeting, San Diego (U.S.A.), May 2016.

S. AONO, "Structural Basis for Heme Acquisition in *Corynebacterium glutamicum*," 9th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-9), Nanjing (China), July 2016.

S. AONO, "New Functions of Heme: Sensing and Signaling in Biological Systems," 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Gyeongju (Korea), November 2016.

N. MURAKI, "Structural Analysis of a Novel Heme Acquisition Protein, Heme Transport-Associated (Hta) Family," 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Gyeongju (Korea), November 2016.

S. AONO, "Structural Basis for the Molecular Mechanism of Heme Acquisition in *Corynebacterium glutamicum*," 8th Asian Biological Inorganic Chemistry Conference, Auckland (New Zealand), December 2016.

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).

日本化学会生体機能関連化学・バイオテクノロジーディビジョン幹事 (2014–2015).

日本化学会生体機能関連化学・バイオテクノロジーディビジョン主査 (2016–).

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, 2012–2016).

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).

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委員・書面評価員 (2016–2017).

大阪大学蛋白質研究所専門委員会委員 (2016–).

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およびタンパク質の構造･ダイナミクス･相互作用の解析

b) 生化学・分子生物学・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) 私たちは，細胞内で新たに生み出されたタンパク質の運命が，それらが担う糖鎖の構造によって決定されていることを明らかにしてきた。そして，その分子メカニズムを立体構造解析を通じて探求している。小胞体において新生糖タンパク質が立体構造を整えるプロセスにおいては，糖鎖の非還元末端に限られた時間だけ存在しているグルコース残基が分子シャペロンによって認識される目印として機能しており，これによって糖タンパク質の折り畳みが介助されている。私たちが2016年に立体構造を解き明かしたグルコシダーゼ II は，この目印を露出させて分子シャペロンが認識可能な状態にするとともに，一定時間が経過した後にこれを取り除くという２段階の反応を司る酵素である。X線結晶構造解析によって明らかにした本酵素の立体構造により，触媒サブユニットが２段階の反応を不連続的に触媒するのに適した瓢箪型の基質結合ポケットを備えていること，そしてそれが糖鎖認識ドメインを含む調節サブユニットと会合する仕組みの詳細を理解することができた。一方，分子動力学計算と NMR 解析によって，分子シャペロンが認識する糖鎖の動的３次元構造を明らかにした。具体的には，非還元末端グルコース残基を含む 12 糖からなる３分岐糖鎖について，レプリカ交換分子動力学計算によってコンフォメーション空間を探査するとともに，酵母遺伝子破壊，化学合成，試験管内酵素反応を駆使して本糖鎖の完全 ^{13}C 標識体を作出し，還元末端に導入したランタニドイオンがもたらす常磁性効果を観測して原子の空間配置に関する情報を得た。こうした実験データによって裏付けられた分子シミュレーションにより，多様な構造を形成する糖鎖が分子シャペロンとの相互作用を通じて新たな立体構造を形成する誘導適合に基づく分子認識の仕組みを理解することができた。また，常磁性効果を利用した NMR 解析をタンパク質のコンフォメーション変化の観測に応用することにも成功した。具体的には，部位特異的にスピンラベルを施したヒト免疫不全ウイルス逆転写酵素を用いて，阻害剤の結合に伴うコンフォメーション変化を常磁性緩和促進効果を通じて検出することができた（カセサート大・Supa Hannongbua 博士らとの共同研究）。この方法は，標的タンパク質にアロステリック効果を誘起する化合物を探索するための新たなアプローチを示すものである。

b) 国内外の共同研究を通じて生命分子の構造機能に関するいくつかの新知見を得た。代表的な成果として，ジストログライカノパチーの原因遺伝子産物の遺伝子破壊細胞を利用した質量分析により α- ジストログリカンのラミニン結合性糖鎖におけるポストリン酸修飾の構造を明らかにした（台湾中央研究院・Kay-Hooi Khoo 博士らとの共同研究）。また，重水素標識を利用した中性子散乱実験を非変性質量分析と組み合わせることにより，ヒト水晶体の分子シャペロンである αB- クリスタリンの会合体の４次構造ダイナミクスおよびシアノバクテリアの時計タンパク質複合体形成の協同性とサブユニット空間配置に関する情報を得ることができた（京都大学・杉山正明博士，統合バイオ・内山 進博士らとの共同研究）。

B-1) 学術論文

M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and K. NISHIMURA, "Membrane-Induced Dichotomous Conformation of Amyloid β with the Disordered N-Terminal Segment Followed by the Stable C-Terminal β Structure," *PLoS One* **11**, e0146405 (2016).

S. SEETAHA, M. YAGI-UTSUMI, T. YAMAGUCHI, K. ISHII, S. HANNONGBUA, K. CHOOWONGKOMON and K. KATO, "Application of Site-Specific Spin Labeling for NMR Detecting Inhibitor-Induced Conformational Change of HIV-1 Reverse Transcriptase," *ChemMedChem* **11**, 363–366 (2016).

T. SATOH, T. TOSHIMORI, G. W. YAN, T. YAMAGUCHI and K. KATO, "Structural Basis for Two-Step Glucose Trimming by Glucosidase II Involved in ER Glycoprotein Quality Control," *Sci. Rep.* **6**, 20575 (2016).

J. HABCHI, P. AROSIO, M. PERNI, A. R. COSTA, M. YAGI-UTSUMI, P. JOSHI, S. CHIA, S. I. COHEN, M. B. MULLER, S. LINSE, E. A. NOLLEN, C. M. DOBSON, T. P. KNOWLES and M. VENDRUSCOLO, "An Anticancer Drug Suppresses the Primary Nucleation Reaction That Initiates the Production of the Toxic Aβ42 Aggregates Linked with Alzheimer's Disease," *Sci. Adv.* **2**, e1501244 (2016).

R. THAMMAPORN, K. ISHII, M. YAGI-UTSUMI, S. UCHIYAMA, S. HANNONGBUA and K. KATO, "Mass Spectrometric Characterization of HIV-1 Reverse Transcriptase Interactions with Non-Nucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors," *Biol. Pharm. Bull.* **39**, 450–454 (2016).

R. INOUE, T. TAKATA, N. FUJII, K. ISHII, S. UCHIYAMA, N. SATO, Y. OBA, K. WOOD, K. KATO, N. FUJII and M. SUGIYAMA, "New Insight into the Dynamical System of αB-Crystallin Oligomers," *Sci. Rep.* **6**, 29208 (2016).

H. ITO, H. KAJI, A. TOGAYACHI, P. AZADI, M. ISHIHARA, R. GEYER, C. GALUSKA, H. GEYER, K. KAKEHI, M. KINOSHITA, N. G. KARLSSON, C. S. JIN, K. KATO, H. YAGI, S. KONDO, N. KAWASAKI, N. HASHII, D. KOLARICH, K. STAVENHAGEN, N. H. PACKER, M. THAYSEN-ANDERSEN, M. NAKANO, N. TANIGUCHI, A. KURIMOTO, Y. WADA, M. TAJIRI, P. Y. YANG, W. Q. CAO, H. LI, P. M. RUDD and H. NARIMATSU, "Comparison of Analytical Methods for Profiling *N*- and *O*-Linked Glycans from Cultured Cell Lines: HUPO Human Disease Glycomics/ Proteome Initiative Multi-Institutional Study," *Glycoconjugate J.* **33**, 405–415 (2016).

M. SUGIYAMA, H. YAGI, K. ISHII, L. PORCAR, A. MARTEL, K. OYAMA, M. NODA, Y. YUNOKI, R. MURAKAMI, R. INOUE, N. SATO, Y. OBA, K. TERAUCHI, S. UCHIYAMA and K. KATO, "Structural Characterization of the Circadian Clock Protein Complex Composed of KaiB and KaiC by Inverse Contrast-Matching Small-Angle Neutron Scattering," *Sci. Rep.* **6**, 35567 (2016).

T. SATOH, T. TOSHIMORI, M. NODA, S. UCHIYAMA and K. KATO, "Interaction Mode between Catalytic and Regulatory Subunits in Glucosidase II Involved in ER Glycoprotein Quality Control," *Protein Sci.* **25**, 2095–2101 (2016).

H. YAGI, C. W. KUO, T. OBAYASHI, S. NINAGAWA, K. H. KHOO and K. KATO, "Direct Mapping of Additional Modifications on Phosphorylated O-Glycans of α-Dystroglycan by Mass Spectrometry Analysis in Conjunction with Knocking out of Causative Genes for Dystroglycanopathy," *Mol. Cell Proteomics* **15**, 3424–3434 (2016).

B-3) 総説，著書

M. YAGI-UTSUMI, T. YAMAGUCHI, R. KITAHARA and K. KATO, "NMR Explorations of Biomolecular Systems with Rapid Conformational Exchanges," in *Molecular Science of Fluctuations Toward Biological Functions*, M. Terazima, M. Kataoka, R. Ueoka and Y. Okamoto, Eds., 87–103 (2016).

A. FURUKAWA, T. KONUMA, S. YANAKA and K. SUGASE, "Quantitative Analysis of Protein-Ligand Interactions by NMR," *Prog. Nucl. Mag. Reson. Spectrosc.* **96**, 47–57 (2016).

加藤晃一，谷中冴子，矢木-内海真穂,「NMR 構造生物学がもたらす新たな創薬研究のツール」, *MEDCHEM NEWS* **26**, 195–200 (2016).

B-4) 招待講演（* 基調講演）

S. YANAKA, "The Analysis of Structural Dynamics Using NMR for the Understanding of the Protein Functions and for Designing Drugs," The 12th SOKENDAI Life Science Retreat, Kakegawa (Japan), January 2016.

加藤晃一,「糖鎖の構造生物学」, 第５７回構造生物応用研究会, 東京, 2016年 2月.

T. SATOH, T. ZHU, T. TOSHIMORI, K. SUZUKI, G. I YAN, T. YAMAGUCHI and K. KATO, "Structural Insights into N-Glycan-Mediated Fate-Determination of Glycoproteins in Cells," Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON) 2016, Bangkok (Thailand), February 2016.

S. YANAKA, K. TSUMOTO and K. SUGASE, "Affinity Improvement of Antibody through Mutational Modification of the Conformational Dynamics," 8th Japan-Korea Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation, Okazaki (Japan), February 2016.

谷中冴子,「溶液NMR を用いた蛋白質試料の測定と解析」, ２０１５年度NMR 集合研修, 岡崎, 2016年 2月.

K. KATO, "Structural Views of Functional Glycans of Pharmaceutical Interest," 6th International Symposium on "Current Trends in Drug Discovery & Research," Lucknow (India), February 2016.*

K. KATO and S. YANAKA, "Structural Study of Glycoproteins Using Antibodies as Model Systems," KIAS Seminar, Seoul (Korea), March 2016.

加藤晃一,「糖鎖の生命分子構造学」, 第３７１回CBI 学会講演会, 大阪, 2016年 4月.

K. KATO, "Structural Views of Glycoprotein Quality Control in Cells," 2nd KU-IMS Symposium, Bangkok (Thailand), June 2016.

加藤晃一,「生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」, 平成２８年度全体班会議, 長浜, 2016年 6月.

加藤晃一,「多彩な糖鎖の構造・ダイナミクス・相互作用の分子科学」, 第４３回生体分子科学討論会, 名古屋, 2016年 6月.

加藤晃一,「糖鎖の生命分子構造学の探査・創生・展開」, 生体機能関連化学部会若手の会第２８回サマースクール, 蒲郡, 2016年 7月.

K. KATO, "Platform for Integrative Biological Sciences," 28th International Carbohydrate Symposium, New Orleans (U.S.A.), July 2016.

K. KATO, "Structural Views of Glycan-Dependent Determination of Glycoprotein Fates in Cells," 28th International Carbohydrate Symposium, New Orleans (U.S.A.), July 2016.*

矢木真穂,「タンパク質の構造ダイナミクスと分子集合メカニズムの理解を目指して」, 分子研若手の会, 岡崎, 2016年 7月.

加藤晃一,「バイオ医薬品の構造解析：基礎と応用」, 技術情報協会セミナー, 東京, 2016年 8月.

K. KATO, "Dynamic Ordering of Biomolecular and Artificial Systems," OIIB Summer School 2016, Okazaki (Japan), August 2016.

M. YAGI-UTSUMI and K. KATO, "Interactions of Amyloidgenic Proteins with Membranes and Molecular Chaperones," The 17th International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems, Kyoto (Japan), August 2016.

K. KATO, "Structural Views of Glycofunctions of Biological and Pharmaceutical Interest," The 5th International Symposium on Drug Discovery and Design by NMR, Yokohama (Japan), August 2016.

K. KATO, T. YAMAGUCHI and T. SATOH, "Structural Basis of Glycoprotein-Fate Determination in Cell," The 16th KIAS Conference on Protein Structure and Function, Seoul (Korea), September 2016.

K. KATO, "Carbohydrate Dynamics That Determine Protein Fates and Functions," IGER International Symposium on Science of Molecular Assembly and Biomolecular Systems 2016, Nagoya (Japan), September 2016.

K. KATO, "Structural Basis for Dynamic Orchestration of Proteasomes," The 42nd Naito Conference, Sapporo (Japan), October 2016.

K. KATO, "Structural Insights into Proteasome Orchestration Mechanisms," The 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Gyeongju (Korea), November 2016.

M. YAGI-UTSUMI, T. SATOH and K. KATO, "Structural Basis for Interactions of Molecular Chaperones with Intrinsically Disordered Proteins," The 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Gyeongju (Korea), November 2016.

S. YANAKA, R. YOGO, H. YAGI and K. KATO, "Characterization of Antibody Interactions in Serum Environments," The 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Geongju (Korea), November 2016.

加藤晃一,「生命分子システムの秩序形成のダイナミクス」, 次世代脳プロジェクト冬のシンポジウム, 東京, 2016年12月.

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).

Y. ZHANG, 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).

Y. ZHANG, 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).

T. ZHU, 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).

A. SIKDAR, The Winter School of Sokendai/ Asian CORE Program, Poster Presentation Award (2015).

T. ZHU, 第１２回「若手の力」フォーラム平成２７年度糖鎖科学中部拠点奨励賞 (2015).

T. ZHU, The 4th International Symposium of "Dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions" Poster Presentation Award (2015).

谷中冴子, 第３２回井上研究奨励賞 (2016).

谷中冴子, 第８０回日本生化学会中部支部例会奨励賞 (2016).

與語理那, OIIB retreat 2016 Best Poster Award (2016).

柚木康弘, 第４回将来を見据えた生体分子の構造・機能解析から分子設計に関する研究会優秀発表賞 (2016).

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–), 理事 (2012–2016).

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, 2016–), 理事 (2008–2012, 2014–), 副会長 (2016–).

NPO バイオものづくり中部理事 (2008–2016).

日本蛋白質科学会理事 (2010–2014, 2015–), 副会長 (2016–).

日本糖鎖科学コンソーシアム幹事 (2012–), 常任幹事 (2016–).

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–), 副支部長 (2016–).

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 (2013–2016).

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).

第２５回バイオイメージング学会組織委員・大会長 (2016).

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専門委員会委員 (2014–), 同委員長 (2015).

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–).

独立行政法人大学評価・学位授与機構教育研究評価委員会専門委員 (2015–).

理化学研究所NMR 施設NMR 利用研究ワーキンググループ委員 (2016–).

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 (2014–2016).

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).

出前授業「身近な化学反応で学ぶ! タンパク質のかたちとはたらき」, 矢作北中学校 (2016). (矢木真穂)

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 創薬と生命」「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」, 2016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」, 2016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– .

名古屋大学大学院理学研究科, 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」, 2016年.

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),「 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–).

宇宙航空研究開発機構「きぼう」利用フィジビリティスタディ ,「神経変性疾患の発症機構解明に向けた微小重力環境下でのアミロイド線維形成と性状評価」, 加藤晃一 (2016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 (2016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 (2016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 (2016年).

C) 研究活動の課題と展望

2017年は, 新学術領域「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」および岡崎統合バイオサイエンスセンターのオリオンプロジェクトのさらなる躍進を目指すとともに, 新たな生命科学研究の方向性を模索する年となるであろう。研究プロジェクトとしては, 前年までの成果を踏まえて, 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, 生命分子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と応用に一層力を注ぐ。さらに, 超分子化学と生命分子科学の融合研究と国際共同研究の発展を推進する。

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セルラーゼ，キチナーゼのエネルギー変換機構の解明

b) 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) 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。カビ *Trichoderma reesei* 由来の *Tr*Cel6A は加水分解を行う触媒ドメイン（CD）と結合ドメイン（CBM）が糖鎖修飾されたリンカー領域で繋がった構造をしている。しかしそれぞれのドメインが分解反応においてどのような役割を担っているのか，詳細に解析した例はなかった。また，*Tr*Cel6A はセルロース上を直進運動しながら分解反応を行うと考えられていたが，実際に運動を観測した例はなかった。蛍光１分子観察により結合，運動，解離の反応時定数を解析した結果，リンカー領域でセルロースに結合し，結合ドメインで結合する結晶面の選択性を生み出している事が明らかとなった。また不活性型酵素と天然型酵素の運動を比較した結果，*Tr*Cel6A は 8.8 nm/sec の速度で直進運動し，一回の結合あたり 68 回加水分解反応を行っている事が明らかとなった。加えてドメイン構成の異なる細菌 *Cellulomonas fimi* 由来セルラーゼ *Cf*Cel6B と *Tr*Cel6A の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。その結果を基に，各ドメインを交換したキメラ酵素の創成に取り組んでいる。キチナーゼについては金ナノ粒子の修飾方法の改良と酵素への結合箇所の検討により 1.2 nm 間隔のステップ運動を検出する事に成功した。計測の精度をさらに上げる為，顕微鏡の改良を行っている。

b) 腸内連鎖球菌由来 Na^+ 輸送性 V-ATPase（EhV_oV_l）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_l を単離すると ATP を分解しながら回転する。EhV_l の化学力学共役機構を明らかにするため，ATP 加水分解反応に重要なアミノ酸残基アルギニンフィンガーに変異を導入し詳細な１分子解析を行った。その結果，反応生成物 ADP の解離に相当する素過程の同定に初めて成功した。

B-1) 学術論文

M. BABA, K. IWAMOTO, R. IINO, H. UENO, M. HARA, A. NAKANISHIA, J. KISHIKAWA, H. NOJI and K. YOKOYAMA, “Rotation of Artificial Rotor Axles in Rotary Molecular Motors,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **113**, 11214–11219 (2016).

A. NAKAMURA, T. TASAKI, D. ISHIWATA, M. YAMAMOTO, Y. OKUNI, A. VISOOTSAT, M. MAXIMILIEN, H. NOJI, T. UCHIYAMA, M. SAMEJIMA, K. IGARASHI and R. IINO, “Single-Molecule Imaging Analysis of Binding, Processive Movement, and Dissociation of Cellobiohydrolase *Trichoderma reesei* Cel6A and Its Domains on Crystalline Cellulose,” *J. Biol. Chem.* **291**, 22404–22413 (2016).

H. ISOJIMA, R. IINO, Y. NIITANI, H. NOJI and M. TOMISHIGE, "Direct Observation of Intermediate States During the Stepping Motion Of Kinesin-1," *Nat. Chem. Biol.* **12**, 290–297 (2016).

Y. MATSUMOTO, S. SAKAKIHARA, A. GRUSHNIKOV, K. KIKUCHI, H. NOJI, A. YAMAGUCHI, R. IINO, Y. YAGI and K. NISHINO, "A Microfluidic Channel Method for Rapid Drug-Susceptibility Testing of *Pseudomonas aeruginosa*," *PLoS One* **11**, e0148797 (2016).

M. TACHIOKA, N. SUGIMOTO, A. NAKAMURA, N. SUNAGAWA, T. ISHIDA, T. UCHIYAMA, K. IGARASHI and M. SAMEJIMA, "Development of Simple Random Mutagenesis Protocol for the Protein Expression System in *Pichia pastoris*," *Biotechnol. Biofuels* **9**, 199 (10 pages) (2016).

B-3) 総説, 著書

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. Mol. Biol.* **1333**, 101–109 (2016).

A. NAKAMURA, T. ISHIDA, M. SAMEJIMA and K. IGARASHI, "The use of neutron scattering to determine the functional structure of glycoside hydrolase," *Curr. Opin. Struct. Biol.* **40**, 54–61 (2016).

中村彰彦, 石田卓也, 日下勝弘, 田中伊知朗, 新村信雄, 鮫島正浩, 五十嵐圭日子, 「中性子／X線複合構造解析で酵素触媒反応におけるプロトンリレーを可視化する」, *生物物理* **56(3)**, 171–173 (2016).

中村彰彦, 石田卓也, 鮫島正浩, 五十嵐圭日子, 「中性子構造解析で明らかになった立体反転型セルラーゼのユニークな活性残基」, *バイオサイエンスとインダストリー* **74(3)**, 231–233 (2016).

中村彰彦, 石田卓也, 日下勝弘, 田中伊知朗, 新村信雄, 鮫島正浩, 五十嵐圭日子, 「中性子／X線結晶構造解析によって明らかとなった反転型セルロース加水分解酵素のプロトン伝達経路を含んだ反応機構」, *中性子科学会「波紋」* **26(3)**, 139–142, (2016).

B-4) 招待講演

R. IINO, "Watching dynamic motions of biological molecular machines," 7th RIES-Hokudai International Symposium, Sapporo (Japan), December 2016.

R. IINO, "Intermediate states during the stepping motion of kinesin-1 revealed by high-speed single-molecule imaging with gold nanoprobes," 4th Kanazawa Bio-AFM Workshop, Kanazawa (Japan), October 2016.

R. IINO, "Direct observation of intermediate states during the stepping motion of kinesin-1," Biophysical Society Thematic Meeting: Engineering Approaches to Biomolecular Motors: From in vitro to in vivo, Vancouver (Canada), June 2016.

R. IINO, "Biomass decomposition by cellulase observed at the single-molecule level," The symposium at Faculty of Science, Kasetsart University, Bangkok (Thailand), June 2016.

R. IINO, "Direct observation of intermediate states during the stepping motion of kinesin-1," 8th Japan-Korea Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation, Okazaki (Japan), February 2016.

R. IINO, "Single-molecule analysis of new molecular motors hydrolyzing crystalline polysaccharides," PACCON2016, Bangkok (Thailand), February 2016.

飯野亮太, 「金ナノプローブを用いた生体分子モーターの高速・高精度1分子計測」, 生理研研究会「電子顕微鏡ビッグデータが拓くバイオメディカルサイエンス～限界を超えるための顕微鏡技術～」, 岡崎, 2016年11月.

飯野亮太,「マイクロ・ナノデバイスを用いた1分子・1細胞ナノバイオ計測」, MNC2016技術セミナー「マイクロ・ナノバイオ技術の最前線」, 京都, 2016年11月.

飯野亮太,「金ナノプローブで生体分子の速いダイナミクスを観る」, 第25回バイオイメージング学会学術集会シンポジウム「ナノバイオイメージング：1分子から細胞までの先端手法」, 名古屋, 2016年9月.

飯野亮太,「タンパク質分子機械を観る, 操る, 壊す, 創る」, 日本化学会生体機能関連化学部会若手の会第28回サマースクール, 蒲郡, 2016年7月.

飯野亮太, "Our approaches toward 'real' engineering of protein molecular machines," 分子研研究会「超機能分子の創成：合成, 計測, 数理が織りなす社会実装分子の戦略的設計と開発」, 岡崎, 2016年6月.

飯野亮太,「機動分子科学：趣旨説明」, 日本化学会第96春季年会特別企画シンポジウム「機能を動きで実現する機動分子の科学」, 京田辺, 2016年3月.

飯野亮太,「金ナノプローブでタンパク質分子モーターのダイナミクスを観る」, 新学術領域研究「柔らかな分子系」第15回ワークショップ『ダイナミクス観測からタンパク質の「柔らかさ」を観る』, 大阪, 2016年3月.

A. NAKAMURA, "Analysis of functional structure of cellulase by neutron crystallography," 8th Japan-Korea Seminars on Biomolecular Sciences, Okazaki (Japan), February 2016.

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).

日本生物物理学会分野別専門委員（E-04. タンパク質工学） (2016).

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).

日本生物物理学会小中高校への講師派遣サポート事業講師 (2016.11–).

B-8) 大学での講義, 客員

名古屋大学IGER, 非常勤講師,「自然科学連携講義1」, 2016年11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,「金ナノプローブ表面の電場増強を利用した生体分子モーターの動きと化学反応の複合1分子計測法の開発」, 飯野亮太 (2016年).

科研費新学術領域研究「動的秩序と機能」（公募研究),「糖質加水分解サイボーグリニア分子モーターの創生」, 飯野亮太 (2016年–2017年).

科研費新学術領域研究「柔らかな分子系」（公募研究),「金属ナノプローブを用いた分子モーターの運動と構造変化の高速1分子計測」, 飯野亮太 (2016年–2017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,「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).

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–2016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).

C) 研究活動の課題と展望

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。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ステップを可視化する事ができたが，更なる解析の為に，顕微鏡の改良を行うだけでなく観測データの解析方法の改良も試みる。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加水分解駆動時の化学力学共役の完全な理解，および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。さらに，ATP結合部位（触媒サイト）やイオン結合部位を改造し，天然に存在しない新しい機能を持つ回転分子モーターを創りだす。

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) 増殖に最適な組成選択を行うベシクル系の構築

b) ペプチド合成系を内包するベシクルの創成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 分子集合体に異種の膜分子前駆体を添加し，別の分子集合体を誕生させて，その増殖ダイナミクスを見守る。自己触媒反応系を内部に持ち，増殖するオクチルアニリンの油滴に，アルデヒドを持つ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た。この成果を論文として報告した。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拡張するものである。

b) 有機化学を基礎とした細胞モデルに代謝機能，すなわち酵素を構成するタンパク質をベシクル内部で形成し，しかも増殖が可能な人工細胞はいまだ構築されていない。そこで，本研究は，ベシクル外部に存在しているアミノ酸を輸送体が捕捉することで，ベシクルの内部へと輸送し，ペプチドを化学合成する人工リボソームシステムを内包する細胞モデルの構築を目的とする。またアミノ酸を取り込んでペプチドを合成する油滴と，境界膜に化学変換できる油滴の 2 つの油滴システムを利用し，内部で高分子を合成するベシクル型人工細胞を構築する。

B-1) 学術論文

L. SHENG and K. KURIHARA, “Catalytic Amphiphile Generation in a Self-Reproducing Giant Vesicle,” *Chem. Lett.* **45**, 598–600 (2016).

L. SHENG and K. KURIHARA, “Transformation of Oil Droplets into Giant Vesicles,” *Chem. Commun.* **52**, 7786–7789 (2016).

B-4) 招待講演

K. KURIHARA, “A chemical approach to primitive cell,” The 6th Yonsei-IMS Joint Workshop, Seoul (Korea), March 2016.

栗原顕輔,「外部環境に応答する原始細胞モデルの構築」, ABC ミニワークショップ「極限環境の光合成」, 立川, 2016 年 2 月.

K. KURIHARA, “A study of the primitive cell as an assembly plant of the prebiotic materials,” The 4th Astrobiology Workshop, Tokyo (Japan), March 2016.

栗原顕輔,「柔らかい分子集合体で創る人工細胞」, 第一回オルガネラ生理学研究会, 岡崎, 2016 年 7 月.

栗原顕輔,「化学で創る人工細胞」, 細胞を創る研究会 9.0, 東京, 2016 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).

第6回CSJ 化学フェスタ２０１６ポスター審査 (2016).

朝日新聞「先端人」取材 (2016).

国際芸術祭「虹のキャラヴァンサライ・あいちトリエンナーレ２０１６」(2016).

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」, 2016年 10月–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 (2016年).

クリタ水・環境化学振興財団研究助成,「 原始海洋に誕生した細胞モデルの研究 」, 栗原顕輔 (2016年).

中部科学技術センター学術奨励研究助成,「ドラッグデリバリーシステムを指向したオリゴペプチド内包リポソームの開発」, 栗原顕輔 (2016年).

花王芸術・科学財団化学・物理学分野助成,「化学的リボソームシステムを内包するジャイアントベシクルの創成」, 栗原顕輔 (2016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し，それを足場にベシクルの大量生産に成功した。また課題b ではこれまでの「うつわ」ありきの手法ではなく，不定形な状態から代謝に必要なたんぱく質モデルを合成したのちに，「うつわ」を形成するという斬新な概念を提案した。特別な機能を持たない物質から構築される人工細胞が，どのように「生命らしい」挙動を獲得するのかを，本アプローチで解決したい。

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) 哺乳動物カリウムイオンチャネルのイオン選択性制御メカニズムの解析

b) 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

c) ウシ由来オプシンへの匂い物質結合の赤外分光解析

d) 高圧力下での時間分解赤外分光計測系の構築とバクテリオロドプシンへの適用

e) 急速溶液交換法を用いたイオンチャネル，トランスポーターの分子機構解析

f) 無脊椎動物の脳内光受容機能を担うタンパク質の解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 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。TWIK-1 というカリウムチャネルは細胞の静止膜電位の調整にはたらいているが，細胞外環境に応じてナトリウムイオンの透過性が上昇するという特異な性質を有する。TWIK-1 タンパク質を精製し，脂質小胞に再構成した試料に対して，蛍光インジケータを用いてイオンの透過機能を解析し，このチャネルタンパク質単体がナトリウムイオンを透過する特性を持つことを確認した。さらに機能解析に用いたタンパク質と脂質の組み合わせで再構成試料を作製し，より生理的な状態でのイオン交換に伴う赤外吸収変化の解析に成功した。

b) Thermophilic Rhodopsin（TR）は最近になって発見された初めての好熱菌由来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。昨年度は TR の野生型試料と変異体試料を用いて，光反応の大枠とその温度依存性について明らかにした。今年度は TR の発色団近傍にあるアスパラギン酸残基 229 番を変異させた試料の測定も加え，発色団からのプロトン移動にこの残基が不可欠であることを明らかにした。また，TR と分子系統的に近縁だが熱耐性を持たない Gloeobacter Rhodopsin（GR）と比較し，両者の光反応過程における構造変化の違いを浮き彫りにした。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。

c) 視覚ロドプシンは G タンパク質共役受容体（GPCR）と呼ばれる巨大な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と共通した分子機構が存在する。昨年度より，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）で調べている。昨年度の段階で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ていたが，SN 比の悪い結果に留まっていた。今年度はさらに実験回数を増やし SN 比を向上した。変異体を用いた計測から，匂い物質とオプシンとの結合様式について推定した。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。

d) 時間分解フーリエ変換赤外分光（TR-FTIR）法はタンパク質反応の解析に有用な手法であるが，これが物理化学的に重要な圧力摂動の下で適用されたことはほとんどない。そこで，光反応タンパク質の高圧下 TR-FTIR 測定が可能な系の構築を開始した。まず高圧セル（ダイアモンドアンビルセル）を購入し，さらに赤外分光器内でのセル位置の精密な制御と温度管理が可能な高圧セルホルダーを分子研装置開発室の協力のもと製作した。この測定系を，バク

テリオロドプシンに適用し，高圧力下での時間分解赤外差スペクトルを得ることに成功した。

e) これまでに全反射赤外計測用の結晶上に吸着させたイオンチャネルやトランスポーターなどの膜タンパク質が浸された緩衝液を急速に交換することで時間分解赤外分光計測を行う実験系を構築した。本手法をメリビオース輸送タンパク質に適用し，メリビオースやグルコースが含まれる緩衝液に急速交換することで，時間分解赤外スペクトルを得た。本研究は，スペインのバレンシア大学の Victor Lorenz-Fonfria 博士との共同研究として進めている。

f) 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。最近の研究から，Opn3 という光受容タンパク質が無脊椎動物の脳内光受容に関わることが示されている。そこで，種々の無脊椎動物の Opn3 の吸収波長特性を調べた結果，紫外領域から緑色光領域まで，動物種によって大きく異なることを見出した。また，環形動物ゴカイの Opn3 については，紫外光受容をもたらすアミノ酸残基を特定し，細胞内に紫外光シグナルを伝達するメカニズムを明らかにした。

B-1) 学術論文

M. SRISA-ART and Y. FURUTANI, "Simple and Rapid Fabrication of PDMS Microfluidic Devices Compatible with FTIR Microspectroscopy," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **89**, 196–202 (2016).

A. SAKAMOTO, T. TSUKAMOTO, Y. FURUTANI, Y. SUDO, K. SHIMADA, A. TOMITA, H. KIYOI, T. KATO and T. FUNATSU, "Live-Cell Single-Molecule Imaging of the Cytokine Receptor MPL for Analysis of Dynamic Dimerization," *J. Mol. Cell Biol.* **8**, 553–555 (2016).

K. KUROI, F. SATO, Y. NAKASONE, K. ZIKIHARA, S. TOKUTOMI and M. TERAZIMA, "Time-Resolved Fluctuation during the Photochemical Reaction of a Photoreceptor Protein: Phototropin1LOV2-Linker," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 6228–6238 (2016).

T. NAKAJIMA, K. KUROI, Y. NAKASONE, K. OKAJIMA, M. IKEUCHI, S. TOKUTOMI and M. TERAZIMA, "Anomalous Pressure Effects on the Photoreaction of a Light-Sensor Protein from *Synechocystis*, PixD (Slr1694), and the Compressibility Change of Its Intermediates," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 25915–25925 (2016).

B-3) 総説，著書

古谷祐詞,「光誘起赤外差分光法による微生物型ロドプシンのイオン輸送機構の研究」, *日本レーザー医学会誌* **36(4)**, 460–465 (2016).

古谷祐詞,「菌類のロドプシン」,「光と生命の事典」, 朝倉書店, 154–155 (2016).

塚本寿夫,「無脊椎動物オプシン」,「光と生命の事典」, 朝倉書店, 176–177 (2016).

B-4) 招待講演

Y. FURUTANI, "Molecular Mechanisms of Retinal Proteins with Involvement of Water Molecules Studied by Light-Induced Difference Infrared Spectroscopy," 26th IUPAC International Symposium on Photochemistry, Osaka City Central Public Hall, Osaka (Japan), April 2016.

古谷祐詞,「赤外分光計測によるカリウムチャネルのイオン選択機構の研究」, 第1回イオンチャネル研究会〜チャネルどんたく〜, 福岡大学病院, 福岡, 2016年7月.

古谷祐詞,「オプトジェネティクスで活躍する微生物型ロドプシンの分子機構研究」, 生化学若い研究者の会第５６回生命科学夏の学校, 旅館かつら, 宮城県白石市, 2016年 8月.

Y. FURUTANI and H. TSUKAMOTO, "Amide I vibrations could be fingerprints of ion–protein interactions of potassium ion channels with alkali metal cations," The 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Commodore Hotel, Gyeongju (Korea), November 2016.

塚本寿夫,「無脊椎動物における繊毛型オプシンの分子特性と非視覚の光受容」, 第１９回日本光生物学協会年会, 東京大学, 東京, 2016年 7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).

古谷祐詞, 清水啓史, 浅井祐介, 老木成稔, 神取秀樹, 第3回Biophysics and Physicobiology Editor's Choice Award (2016).

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 (2010–2013, 2015–2016).

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 (2014–2016).

日本分光学会中部支部幹事 (2012–2016).

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

名古屋大学大学院理学研究科,「生体物理学特別講義２」, 2016年 9月 21, 23日.

大阪大学大学院工学研究科,「CSC 集中講義」, 2016年 12月 8日–9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

これまで赤外分光法を基軸に様々な膜タンパク質の分子機構研究に取り組んできた。光受容タンパク質ロドプシンだけでなく，分子研着任後に開始したイオンチャネルやトランスポーターなど光が関与しない膜タンパク質についての研究が着実に進展している。ほ乳動物由来のカリウムチャネルは，生理研の久保教授との共同研究として，助教の塚本博士が中心になって進めている。チャネル活性が確認できる試料および実験条件を確立することに成功したので，来年度には成果として取りまとめることができるものと期待している。IMSフェローの黒井博士は，高温条件や高圧条件などでの時間分解赤外分光計測を行うなど，膜タンパク質としては極限条件下での計測に成功している。今後も赤外分光法を基軸とした研究を発展させたいが，新規計測系の構築や新たな膜タンパク質の計測などを試みることで，新たな研究の方向性を模索したい。

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) 不均一反応メディア中での触媒反応システムの構築

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触媒・ナノ構造触媒の創製

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。

b) 金属架橋高分子の自己集積触媒（架橋構造と触媒機能のハイブリッド）を開発し，さらにマイクロ流路内の層流界面での自己集積錯体触媒膜の創製に成功した。前項で開発した高分子触媒をカラムカートリッジ化することで実用性に富む連続フロー反応システムを構築した。

c) 新しいピンサー錯体の合成方法論を確立し，それらピンサー錯体分子が自発的に集積することで形成する分子集合体の三次元高次構造に立脚した新しい触媒機能システムの開拓に注力しつつある。

d) 水中での反応加速，連続フローシステムに依る効率化，ピンサー錯体触媒化学における新しい反応形式などに立脚して各種反応の ppm-ppb 触媒化を進めつつある。

B-1) 学術論文

Y. M. A. YAMADA, A. OHNO, T. SATO and Y. UOZUMI, “Instantaneous Click Chemistry by a Copper-Containing Polymeric Membrance-Installed Microflow Catalytic Reactor,” *Chem. –Eur. J.* **21**, 17269–17273 (2015).

G. SHEN, H. ZHOU, P. DU, S. LIU, K. ZOU and Y. UOZUMI, “Brønsted Acid-Catalyzed Selective C–C Bond Cleavage of 1,3-Diketones: A Facile Synthesis of 4(3H)-Quinazolinones in Aqueous Ethyl Lactate,” *RSC Adv.* **5**, 85646–85651 (2015).

Y. -H. KIN, J. HAN, B. Y. JUNG, H. BAEK, Y. M. A. YAMADA, Y. UOZUMI and Y. -S. LEE, “Production of Valuable Esters from Oleic Acid with a Porous Polymeric Acid Catalysts without Water Removal,” *Synlett* **27**, 29–32 (2016).

J. -C. HIERSO and Y. UOZUMI, “Cluster Preface: Heterogeneous Catalysis,” *Synlett* **27**, 1177–1178 (2016).

A. OHTAKA, T. KOTERA, A. SAKON, K. UEDA, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI, T. SHINAGAWA, O. SHIMOMURA and R. NOMURA, “Fluoride-Free Hiyama Coupling Reaction Catalyzed by Linear Polystyrene-Stabilized PdO Nanoparticles in Water: Specific Reactivity of PdO Nanoparticles over Pd Nanoparticles,” *Synlett* **27**, 1202–1206 (2016).

S. YAN, S. PAN, T. OSAKO and Y. UOZUMI, “Recyclable Polystyrene-Supported Copper Catalysts for the Aerobic Oxidative Homocoupling of Terminal Alkynes,” *Synlett* **27**, 1232–1236 (2016).

A. OHTAKA, M. KOZONO, K. TAKAHASHI, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI, T. SHINAGAWA, O. SHIMOMURA and R. NOMURA, "Linear Polystyrene-Stabilized Pt Nanoparticles Catalyzed Indole Synthesis in Water via Aerobic Alcohol Oxidation," *Chem. Lett.* **45**, 758–760 (2016).

H. BAEK, M. MINAKAWA Y. M. A. YAMADA, J. W. HAN and Y. UOZUMI, "In-Water and Neat Batch and Continuous-Flow Direct Esterification and Transesterification by a Porous Polymeric Acid Catalyst," *Sci. Rep.* **6**, 25925 (2016).

G. HAMASAKA and Y. UOZUMI, "The Development of a Vesicular Self-Assembled Amphiphilic Platinum NCN-Pincer Complex and Its Catalytic Application to Hydrosilylation of Alkenes in Water," *Chem. Lett.* **45**, 1244–1246 (2016).

B-4) 招待講演

Y. UOZUMI, "Amphiphilic polymeric transition metal catalyzed for coupling reaction in water," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

Y. UOZUMI, "Molecular architecture-based administration of catalysis in water via self-assembly of an amphiphilic paladdium pincer complex," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

T. OSAKO, "Development green-sustainable transition-metal catalyzed reaction systems," 日本化学会第９６回春季年会若い世代特別講演会, 京田辺(日本), 2016年3月.

Y. UOZUMI, "Molecular architecture-based administration of catalysis in water via self-assembly of amphiphilic palladium pincer complexes," JST-NTU Joint Seminar on Sustainable Synthesis and Catalysis, Singapore, August 2016.

Y. UOZUMI, "Highly active self-assembled polymeric transition metal catalysts for coupling reactions," The 51st Conference: Advances in Organic, Bioorganic and Pharmaceutical Chemistry "LIBLICE2016," Lázně Bělohrad (Czech), November 2016.

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-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–2007 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),「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).
科研費新学術研究,「高活性高分子触媒の創製と連続フローシステム化」, 魚住泰広 (2016年–).
科研費基盤研究(C),「二酸化炭素を用いた有機分子変換の環境調和型高効率フロー反応化」, 大迫隆男 (2016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きた。これまでに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, 続いてその成果を実践的に発展させる経済産業省(NEDO)プロジェクト(2008年9月−2012年2月)を展開した。一方, 環境調和型触媒反応開発からの発展的研究課題がCRETS 研究「元素戦略」に採択され(2011年10月開始)2016年度内まで継続展開中である。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」研究を進めつつある。また, 自己集積錯体触媒研究は2007年以降, 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。現時点では競争的研究資金の獲得も順調であり, 大学院生ならびに博士研究員の確保も問題ない。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。なかでも最近は未開拓元素群の触媒反応性の探索と確立, さらには分子の自己集積化に立脚した触媒機能の自発的獲得など目指した研究開発を推進しつつある。これまでの高活性触媒の設計概念と駆動原理を駆使し, 従来パーセント量の利用が常識であった化学変換触媒をppm-ppb 量のレベルへと転換すべく研究に取り組んでいる。これは触媒活性の 10^4–10^7向上を意味し,「改善」を凌駕する「飛躍」が要求される圧倒的な高活性化である。

楒　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，ピリジ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. TABUSE, H. NODA, M. YAMANAKA, T. FUJINAMI, K. YAMANISHI, A. IZUMISEKI, K. FUNAYAMA, F. EGAWA, S. OKADA, H. ADACHI and M. TERADA, “Molecular Design of a Chiral Brønsted Acid with Two Different Acidic Sites: Regio-, Diastereo-, and Enantioselective Hetero-Diels–Alder Reaction of Azopyridinecarboxylate with Amidodienes Catalyzed by Chiral Carboxylic Acid–Monophosphoric Acid,” *J. Am. Chem. Soc.* **138**, 11353–11359 (2016).

J. KIKUCHI, N. MOMIYAMA and M. TERADA, “Chiral Phosphoric Acid-Catalyzed Diastereo- and Enantioselective Mannich-Type Reaction between Enamides and Thiazolones,” *Org. Lett.* **18**, 2521–2523 (2016).

N. MOMIYAMA, H. OKAMOTO, J. KIKUCHI, T. KORENAGA and M. TERADA, “Perfluorinated Aryls in the Design of Chiral Brønsted Acid Catalysts: Catalysis of Enantioselective [4+2] Cycloadditions and Ene–Reactions of Imines with Alkenes by Chiral Mono-Phosphoric Acids with Perfluoroaryls,” *ACS Catal.* **6**, 1198–1204 (2016).

N. MOMIYAMA, K. FUNAYAMA, H. NODA, M. YAMANAKA, N. AKASAKA, S. ISHIDA, T. IWAMOTO 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,” *ACS Catal.* **6**, 949–956 (2016).

B-4) 招待講演

楒山儀恵,「キラル分子の建築家をめざして」, 豊秋奨学会平成２８年度国際学生交流同窓会, ホテルキャッスルプラザ, 名古屋, 2016年 11月.

N. MOMIYAMA, “Asymmetric Reaction Space Created by Hydrogen and Halogen Atom,” The Winter School of Asian CORE Program, Beijing (China), February 2016.

椴山儀恵,「ペルフルオロ有機物を活用する有機分子変換」, フルオラス科学研究会第9回シンポジウム, 名古屋大学ベンチャービジネスラボラトリー , 名古屋, 2016年 10月.

椴山儀恵,「水素原子・ハロゲン原子が創り出す不斉空間・不斉反応」, 有機合成のニュートレンド2016, 大阪科学技術センター , 大阪, 2016年 2月.

B-6) 受賞, 表彰

椴山儀恵, 大学女性協会第17回守田科学研究奨励賞 (2015).

椴山儀恵, 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).

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

学協会役員等

日本化学会東海支部代議員 (2015, 2016).

学会の組織委員等

総研大アジア冬の学校主催 (2015, 2016).

その他

出前授業愛知県立岡崎北高等学校 (2016).

出前授業「中学生のためのサイエンスセミナー」岡崎市立翔南中学校 (2014).

B-8) 大学での講義, 客員

豊橋技術科学大学環境・生命工学大学院, 特別講義II, 博士前期1・2年, 2016年.

B-10) 競争的資金

2016年度学術・研究助成・住友電工グループ社会貢献基金,「多点間水素結合相互作用を活用する高活性キラル分子性触媒の創製」, 椴山儀恵 (2016年–2017年).

2016年度基礎科学研究助成・住友財団,「異種酸性官能基複合型キラル分子性触媒による触媒的不斉連続反応の開発」, 椴山儀恵 (2016年–2017年).

公益財団法人豊秋奨学会平成28年度研究助成,「異なる酸性官能基の隣接位導入による超高活性キラル分子性触媒の開発」, 椴山儀恵 (2016年–2017年).

平成28年度(第26回)自然科学系学術研究助成・大幸財団,「異種酸性官能基複合型キラル分子性触媒の創製と精密合成反応の開発」, 椴山儀恵 (2016年–2017年).

２０１５年度内藤記念科学奨励金・研究助成,「ペルフルオロビナフチル誘導体の分子修飾に基づくキラルハロゲン結合供与体触媒の設計・開発」, 椴山儀恵 (2016年–2017年).

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−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) 鉄や銅などの安価な金属イオンを有する金属錯体を対象に，酸素発生触媒の開発に取り組んだ。その結果，多核構造と隣接基質活性化サイトを併せ持つ鉄錯体を利用することで，高活性な酸素発生触媒を創製できることを見出した。また，電気化学測定，分光化学測定および量子化学計算の結果から，多電子移動反応と結合生成反応がそれぞれ効率よく進行する反応機構が示唆された。

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，光化学的な CO_2 還元反応に対して活性を示す種々の金属錯体触媒を対象に光電気化学測定を行い，光照射が触媒反応に与える影響を電気化学的に観測した。

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。また，これらの多孔性フレームワークの物質変換機能についても評価した。

B-1) 学術論文

M. OKAMURA, M. KONDO, R. KUGA, Y. KURASHIGE, T. YANAI, S. HAYAMI, V. K. K. PRANEETH, M. YOSHIDA, K. YONEDA, S. KAWATA and S. MASAOKA, "A Pentanuclear Iron Catalyst Designed for Water Oxidation," *Nature* **530**, 465–468 (2016).

V. K. K. PRANEETH, M. KONDO, P.-M. WOI, M. OKAMURA and S. MASAOKA, "Electrocatalytic Water Oxidation by a Tetranuclear Copper Complex," *ChemPlusChem* **81**, 1123–1128 (2016).

K. KITAMOTO, M. OGAWA, G. AJAYAKUMAR, S. MASAOKA, H.-B. KRAATZ and K. SAKAI, "Molecular Photo-Charge-Separators Enabling Single-Pigment-Driven Multi-Electron Transfer and Storage Leading to H_2 Evolution from Water," *Inorg. Chem. Front.* **3**, 671–680 (2016).

B-3) 総説，著書

M. KONDO and S. MASAOKA, "Water Oxidation Catalysts Constructed by Bio-Relevant First-Row Metal Complexes," *Chem. Lett.* **45**, 1220–1231 (2016).

B-4) 招待講演

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” 8th Asian Biological Inorganic Chemistry Conference (AsBIC8), Auckland (New Zealand), December 2016.

S. MASAOKA, “A Pentanuclear Iron Catalyst Designed for Water Oxidation,” 5th International Symposium on Solar Fuels and Solar Cells (5th SFSC), Dalian (China), October 2016.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” Japan-Korea-Taiwan Bioinorganic Chemistry Symposium 2016, Okazaki (Japan), September 2016.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” Challenges for dream catalysis—Design of catalytically active centers from the concept of coordination, 66th JSCC conference, Fukuoka University, Fukuoka (Japan), September 2016.

S. MASAOKA, “A Pentanuclear Iron Catalyst Designed for Water Oxidation,” The 1st Japan-Australia Joint Symposium on Coordination Chemistry, Fukuoka University, Fukuoka (Japan), September 2016.

正岡重行,「植物に学ぶ触媒デザイン：水から酸素を作る鉄5核錯体」, 第4回バイオ関連化学シンポジウム若手フォーラム, 金沢駅東もてなしドーム地下イベント広場, 金沢, 2016年9月.

正岡重行,「電子状態の柔軟性が生み出す触媒機能」, 第3回機能化学研究会「構造・電子状態の柔軟性が生み出す新機能」, 猿投温泉, 豊田, 2016年8月.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” 2nd UK-Japan Workshop on Solar Fuels and CO_2 Conversion: British Embassy Tokyo, Tokyo (Japan), June 2016.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,,” 12th International Workshop on Supramolecular Nanoscience of Chemically Programmed Pigments (SNCPP16), Ritsumeikan University, Kusatsu (Japan), June 2016.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” The 21st iCeMS International Symposium “Emerging Science for Unlocking Cell’s Secrets,” iCeMS Main Building, Kyoto University, Kyoto (Japan), June 2016.

S. MASAOKA, “A Pentanuclear Iron Catalyst Designed for Water Oxidation,” The 2nd International Symposium on Chemical Energy Conversion Processes (ISCECP-2), Kyushu University, Fukuoka (Japan), May 2016.

正岡重行,「金属錯体を触媒とする酸素発生反応」, 第9回中国四国地区錯体化学研究会（錯体化学若手の会中国四国支部第1回勉強会), 関西学院大学, 2016年5月.

正岡重行,「金属錯体を触媒とする多電子酸化還元反応」, 第3回応用化学談話会, 東京大学, 東京, 2016年4月.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” Asian International Symposium—Coordination Chemistry, Organometallic Chemistry—, Doshisha University, Kyotanabe (Japan), March 2016.

正岡重行,「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」, 第4回宇宙と生命ワークショップ, 一橋大学一橋講堂, 東京, 2016年3月.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” The 4th Frontier Chemistry Center International Symposium “Future Dreams in Chemical Science and Technology: Bridges to Global Innovations,” Hokkaido University, Sapporo, February 2016.

正岡重行,「金属錯体を触媒とする多電子酸化還元反応」, 第8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, 2016年2月.

正岡重行,「人工光合成を志向した金属錯体の化学」, ABC ミニワークショップ「極限環境の光合成」, 立川グランドホテル, 東京, 2016年 2月.

S. MASAOKA, "Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation," Symposium on Hierarchy and Holism in Natural Sciences, National Astronomical Observatory of Japan, Mitaka, February 2016.

正岡重行,「鉄五核触媒の分子構造制御に基づく低過電圧酸素発生」, 新学術領域「人工光合成」第4回公開シンポジウム, 東京理科大学, 東京, 2016年 1月.

B-6) 受賞, 表彰

榎本孝文, Dalton Transactions Prize (2016).

榎本孝文, 錯体化学会第66回討論会ポスター賞 (2016).

榎本孝文, 日本化学会東海支部長賞 (2016).

S. K. LEE, The Winter School of Asian-Core Program, Poster Award (2016).

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–).

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」, 2016年度後期.

名古屋大学大学院理学研究科, 客員准教授, 2013年 4月– .

B-9) 学位授与

岡村将也,「Development of New Transition Metal Complexes Designed for Water Oxidation」, 2016年 3月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「クラスター錯体によるエネルギーキャリアのテーラーメイド合成」, 正岡重行 (2016年–2018年).

科研費研究活動スタート支援,「多核錯体への柔軟なプロトン移動能の導入と水の酸化反応への影響」, 岡村将也 (2016年–2017年).

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 (2016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。2016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，2016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，生物時計のリズム計測は長時間にわたるルーティンワークとなる。周期を高精度で見積もるためにはリズムを少なくとも３周期計測しなくてはならず，野生型の場合，72 時間（= 24 時間× 3）にわたる作業が発生する。長周期型の変異体になると計測時間は更に長くなり，ときに１～２週間の連続測定を行うこともある。従事者の負担を軽減し，またヒューマンエラーを削減するため，リズム計測を自動化するためのオートサンプラー装置／解析ソフトウェアを開発して原著論文として発表した。

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

S. KANEMURA, M. OKUMURA, K. YUTANI, T. RAMMING, T. HIKIMA, C. APPENZELLER-HERZOG, S. AKIYAMA and K. INABA, “Human ER Oxidoreductin-1α (Ero1α) Undergoes Dual Regulation through Complementary Redox Interactions with Protein Disulfide Isomerase (PDI),” *J. Biol. Chem.* **291**, 23952–23964 (2016).

Y. FURUIKE, J. ABE, A. MUKAIYAMA and S. AKIYAMA, “Accelerating In Vitro Studies on Circadian Clock Systems Using an Automated Sampling Device,” *Biophys. Physicobiol.* **13**, 235–241 (2016).

I. ANZAI, K. TOICHI, E. TOKUDA, A. MUKAIYAMA, S. AKIYAMA and Y. FURUKAWA, “Screening of Drugs Inhibiting In Vitro Oligomerizationof Cu/Zn-Superoxide Dismutase with a Mutation Causing Amyotrophic Lateral Sclerosis,” *Front. Mol. Biosci.* **3**, 40 (2016).

E. NANGO, S. AKIYAMA, S. MAKI-YONEKURA, Y. ASHIKAWA, Y. KUSAKABE, E. KRAYUKHINA, T. MARUNO, S. UCHIYAMA, N. NUEMKET, K. YONEKURA, M. SHIMIZU, N. ATSUMI, N. YASUI, T. HIKIMA, M. YAMAMOTO, Y. KOBAYASHI and A. YAMASHITA, “Taste Substance Binding Elicits Conformational Change of Taste Receptor T1r Heterodimer Extracellular Domains,” *Sci. Rep.* **6**, 25745 (2016).

Y. FURUKAWA, Y. SUZUKI, M. FUKUOKA, K. NAGASAWA, K. NAKAGOME, H. SHIMIZU, A. MUKAIYAMA and S. AKIYAMA, "A Molecular Mechanism Realizing Sequence-Specific Recognition of Nucleic Acids by TDP-43," *Sci. Rep.* **6**, 20576 (2016).

Y. FURUKAWA, I. ANZAI, S. AKIYAMA, M. IMAI, F. J. C. CRUZ, T. SAIO, K. NAGASAWA, T. NOMURA and K. ISHIMORI, "Conformational Disorder of the Most Immature Cu,Zn-Superoxide Dismutase Leading to Amyotrophic Lateral Sclerosis," *J. Biol. Chem.* **291**, 4144–4155 (2016).

B-3) 総説, 著書

J. ABE, A. MUKAIYAMA and S. AKIYAMA, "Absolute slowness encoded in the circadian clock protein KaiC," *SPring-8/SACLA Research Frontiers 2015*, 24–25 (2016).

向山　厚, 阿部　淳, 孫　世永, 秋山修志,「概日時計因子の構造や動態を調べる意義とは?」, *生物物理* **56**, 266–270 (2016).

秋山修志,「時間生物学と放射光科学の接点」, *放射光* **29**, 56–63 (2016).

阿部　淳, 向山　厚, 秋山修志,「時計タンパク質KaiCの「遅さ」が刻み込まれた原子構造」, *SPring-8/SACLA 利用者情報* **21**, 2–4 (2016).

B-4) 招待講演

S. AKIYAMA, "Cyanobacterial circadian clock system. How and why can it be so slow and stable?" Sapporo Symposium on Biological Rhythm, Sapporo (Japan), November 2016.

S. AKIYAMA, "X-Ray Solution Scattering as Research Tools for Bio-molecular Systems," The Winter School of Asian CORE Program, Beijing (China), February 2016.

A. MUKAIYAMA, J. ABE and S. AKIYAMA, "Circadian periodicity encoded in KaiC ATPase," The Winter School of Asian CORE Program, Beijing (China), February 2016.

S. AKIYAMA, "Atomic-scale origins of slowness in the cyanobacterial circadian clock," 8th Japan-Korea Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation, Okazaki (Japan), February 2016.

秋山修志,「生体分子システム研究に必要なツールとは?」, 中性子生命科学研究会「生命科学における中性子利用の現状と未来」, IQBRC 1階大会議室, 東海村, May 2016.

秋山修志,「藍藻生物時計システムにおける分子動態と貫階層性」, 次ステージ機能生命科学の展望, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, March 2016.

秋山修志,「階層横断的に機能する分子システムの構造アンサンブルとダイナミクス研究」, 第29回日本放射光学会年会, 東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト, 柏, January 2016.

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, 2016–).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2010, 2012, 2015, 2016).

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, 2016–).

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).

その他

出前授業「タンパク質の奏でる生体リズム」城北科学の日岡崎市立城北中学校 (2016).

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

2015年にKaiCのATPaseドメインを原子分解能で構造解析し，2016年は生物時計システムのリズム計測を自動化するためのオートサンプラー装置／解析ソフトウェアを開発して原著論文として発表した。これによりグループ発足時に掲げた将来計画の一部が達成された。2017年からは当初の計画に沿って，温度補償制御の構造基盤の解明，変異体の大規模リズム解析，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) 計算機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，加えて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，更には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) αヘリカルタンパク質構造のゼロからのデザイン；複数のαヘリックスが集まったαヘリカル構造は，極めて多様な構造を生み出すことができ，加えてそれらの構造は柔軟であるため，機能発現に重要な役割を果たす。そこで様々なαヘリカル構造を自在にデザインするための手法の開発を行った。自然界のタンパク質構造を解析することで，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た。次に，これらのループパターンを組み合わせることで多様な形状のαヘリカル構造の構築に成功した。さらに，計算機でデザインしたタンパク質の折り畳み能を生化学実験により調べたところ，デザインしたタンパク質は安定な構造を形成していた。

b) 折り畳みに必須なアミノ酸の種類の探索；自然界のタンパク質は 20 種類のアミノ酸からなる。タンパク質が自発的に特定の構造に折り畳むために，これら 20 種類のアミノ酸全てが必要なのかどうか明らかにすることを目的として，タンパク質の疎水性コアパッキングに重要とされる ILE および LEU を全く含まないタンパク質分子のデザインを行った。デザインしたタンパク質の折り畳み能を生化学実験により調べたところ，デザイン配列は安定な構造を形成していた。これらの研究結果は，タンパク質の折り畳みには 20 種類のアミノ酸が必ずしも必要ではないことを示唆するものである。

c) ATP 結合タンパク質のゼロからのデザイン；自然界には ATP を加水分解して動的機能を発現するタンパク質が存在する。タンパク質が ATP を加水分解するためのミニマムな装置を明らかにすることを目的とし，まず ATP を結合するタンパク質のゼロからのデザインを行った。これまでに発見した３つのルールとヌクレオチド結合に重要とされる P-loop モチーフを用いることで，計算機上で ATP 結合タンパク質のデザインを行った。

d) 自然界のタンパク質構造を改造して創るヘム結合タンパク質；ヘムを例としてこれに結合するタンパク質をデザインすることで，望みの小分子に結合するタンパク質分子をデザインする手法の開発を行った。自然界のタンパク質をベースとして，その構造に大きなポケットを持つように改造することで，計算機上でヘムを結合するタンパク質のデザインを行った。

e) 動的機能を発現する自然界のタンパク質 F-ATPase および V-ATPase 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で機能を発現するタンパク質が存在する。このような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，進化の結果により生み出された自然界のタンパク質である F-ATPase および V-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

V. SWAMINATHAN, J. MATHEW KALAPPURAKKAL, S. B. MEHTA, P. NORDENFELT, T. I. MOORE, N. KOGA, D. BAKER, R. OLDENBOURG, T. TANI, S. MAYOR, T. A. SPRINGER and C. M. WATERMAN, "Actin Retrograde Flow Actively Aligns and Orients Ligand-Engaged Integrins In Focal Adhesions," *bioRxiv* doi: http://dx.doi.org/10.1101/071852 (2016).

P. NORDENFELT, T. I. MOORE, J. MATHEW KALAPPURAKKAL, V. SWAMINATHAN, N. KOGA, T. J. LAMBERT, D. BAKER, J. C. WATERS, R. OLDENBOURG, T. TANI, S. MAYOR, C. M. WATERMAN and T. A. SPRINGER, "Direction of Actin Flow Dictates Integrin LFA-I Orientation During Leukocyte Migration," *bioRxiv* doi: http://dx.doi.org/10.1101/071936 (2016).

B-4) 招待講演

古賀信康,「生体機動分子の合理デザインに向けて：ゼロからの創製と自然界の蛋白質の改造」, 同志社大学京田辺キャンパス, 京田辺市, 2016年3月.

古賀信康,「私が欲しいタンパク質分子模型」, 技術課セミナー「3Dプリンタ造形技術の基礎と応用」, 分子科学研究所, 岡崎市, 2016年3月.

古賀信康,「タンパク質分子デザインと合成生物学への展開」, AMO 討論会, 理化学研究所, 和光市, 2016年6月.

古賀信康,「Design of various alpha-beta and myriad all-alpha protein structures」, 分子研研究会「超機能分子の創成：合成, 計測, 数理が織りなす社会実装分子の戦略的設計と開発」, 分子科学研究所, 岡崎市, 2016年6月.

古賀信康,「分子モーターの合理デザイン：ゼロからの創製と自然界のタンパク質の改造」, 分子モーター討論会, 大阪大学蛋白質研究所, 大阪市, 2016年7月.

古賀信康,「Synthetic approach for understanding molecular motors」, 統合バイオ・リトリート, 三河リゾートサンクス, 西尾市, 2016年11月.

古賀信康,「タンパク質分子の構造と機能のデザイン」, バイオスーパーコンピューティング研究会, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎市, 2016年11月.

古賀信康,「タンパク質分子の合理設計:構造と機能のデザイン」, 千葉大学第17回分子キラリティ研究センター定期ミーティング, 千葉大学, 千葉市, 2016年12月.

古賀信康,「タンパク質分子の合理設計」, 東京大学第4回応化談話会, 東京大学, 東京, 2016年12月.

T. KOSUGI, "De novo design of protein function," 8th Japan-Korea Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation, Okazaki (Japan), February 2016.

小杉貴洋,「蛋白質機能を創って理解する」, 蛋白研セミナー「構造を基盤とする蛋白質科学における未解決問題」, 東京大学, 東京, 2016年3月.

T. KOSUGI, "Protein Design from Scratch: from Structure to Function," 日本化学会第96春季年会アジア国際シンポジウム, 同志社大学京田辺キャンパス, 京田辺市, 2016年3月.

小杉貴洋,「機能を持った蛋白質を一から創る：蛋白質内化学反応の理解を目指して」, 研究会「化学反応のポテンシャル曲面とダイナミックス」, 京都大学, 京都市, 2016年3月.

小杉貴洋,「計算機による蛋白質設計：もう出来ることとまだ出来ないこと」, 第59回構造生物応用研究会, 東京大学, 東京, 2016年11月.

T. KOSUGI, “Design of Nucleotide Binding Site Toward Controlling and Understanding Molecular Motor,” 第５４回日本生物物理学会年会 シンポジウム「構成的生物学による生体分子，分子複合体，分子ネットワークの理解」, つくば国際会議場, つくば市, 2016年11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).

日本生物物理学会平成２８年度分野別専門委員：タンパク質設計・ドラッグデザイン (2016).

その他

第４８回若手ペプチド夏の勉強会（大学セミナーハウス（八王子））講師 (2016.7.31–8.2).

第５６回生物物理若手の会夏の学校（支笏湖ユースホステル（千歳市））講師 (2016.9.2–5).

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

今年度に入りグループの人数が４名増え全員で８名となった。前年度までに，計算機および生化学実験両方を用いてタンパク質をデザインするための研究環境の構築をほぼ終えていたため，今年度から加わったメンバーと新しい研究テーマをスムーズに実施することができた。また，今年度の目標であった，①ゼロからのタンパク質デザインと②自然界のタンパク質の改造の２本柱で研究を展開する体制を構築することができた。来年度はこれらの研究から，ぜひ成果を出したいと考えている。また，他研究室との共同研究についても立ち上げて行きたい。

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) マクロ量子振動基底状態

c) 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) 超短パルスレーザーを用いて固体中での原子の運動および原子からの発光を観測し，そのダイナミクスを定量的に取り扱う理論を構築している。これまで知られていたレーザー発振メカニズムではないレーザー発振メカニズムを理論的に提示し，半定量的にではあるものの理論を支持出来る可能性のある実験結果を得た。また，原子のコヒーレントな運動はマクロ物理量で記述することが出来るため，過渡反射率を計測することでラマン過程の物理を詳細に調べる理論を構築し，実験で検証することが出来た。

b) マクロな物質の振動基底状態はどのように実現されるのかという点に関しては冷却能力の物理的限界が色々と示されており，新しい冷却メカニズムを提示しなければ大きな質量を持つマクロな物体の振動基底状態は実現することは難しい。２重振り子の原理を応用することで冷却能力の物理的限界を下げることが出来るということを理論的に示すことが出来た。

c) 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。また，情報幾何学を用いたアプローチも同時に進め，数理物理的解釈を得た。

B-1) 学術論文

T. HORIKIRI, M. YAMAGUCHI, K. KAMIDE, Y. MATSUO, T. BYRNES, N. ISHIDA, A. LÖFFLER, S. HÖFLING, Y. SHIKANO, T. OGAWA, A. FORCHEL and Y. YAMAMOTO, “Erratum: High-Energy Side-Peak Emission of Exciton–Polariton Condensates in High Density Regime,” *Sci. Rep.* **6**, 35094 (2016).

S. GOTO, “Contact Geometric Descriptions of Vector Fields on Dually Flat Spaces and Their Applications in Electric Circuit Models and Nonequilibrium Statistical Mechanics,” *J. Math. Phys.* **57**, 102702 (41 pages) (2016).

Y.-X. ZHANG, S. WU, Z.-B. CHEN and Y. SHIKANO, “Ground-State Cooling of a Dispersively Coupled Optomechanical System in the Unresolved Sideband Regime via a Dissipatively Coupled Oscillator,” *Phys. Rev. A* **94**, 023823 (11 pages) (2016).

K. G. NAKAMURA, K. OHYA, H. TAKAHASHI, T. TSURUTA, H. SASAKI, S. UOZUMI, K. NORIMATSU, M. KITAJIMA, Y. SHIKANO and Y. KAYANUMA, “Spectrally Resolved Detection in Transient-Reflectivity Measurements of Coherent Optical Phonons in Diamond,” *Phys. Rev. B* **94**, 024303 (7 Pages) (2016).

T. HORIKIRI, M. YAMAGUCHI, K. KAMIDE, Y. MATSUO, T. BYRNES, N. ISHIDA, A. LÖFFLER, S. HÖFLING, Y. SHIKANO, T. OGAWA, A. FORCHEL and Y. YAMAMOTO, "High-Energy Side-Peak Emission of Exciton–Polariton Condensates in High Density Regime," *Sci. Rep.* **6**, 25655 (11 pages) (2016).

S. GOTO, R. W. TUCKER and T. J. WALTON, "The Dynamics of Compact Laser Pulses," *J. Phys. A: Math. Theor.* **49**, 265203 (11 pages) (2016).

S. GOTO, R. W. TUCKER and T. J. WALTON, "Classical Dynamics of Free Electromagnetic Laser Pulses," *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **369**, 40–44 (2016).

B-3) 総説，著書

鹿野　豊,「新著紹介，今野紀雄，量子ウォーク（森北出版, 2014）」, *日本物理学会学会誌* **71**, 711 (2016).

B-4) 招待講演

Y. SHIKANO, "Discrete-time quantum walk with feed-forward quantum coin," 4th-Yokohama Workshop on Quantum Walks at Yokohama National University, Minatomirai Campus, Yokohama, 2016年10月.

Y. SHIKANO, "Visualizing Quantum State by Weak Measurement," 2nd International Conference on Quantum Foundations 2016 (ICQF16), National Institute of Technology, Patna (India), October 2016.

Y. SHIKANO, "Phonic Interference in Bulk Solid Diamond," International Symposium on Ultrafast Intense Laser Science 15 (ISUILS15), Cassis Convention Center "Oustatu Calendal," Cassis (France), October 2016.

鹿野　豊,「全体総括と弱測定の未来」, ２０１６年日本物理学会秋季大会（物性領域）「量子測定・弱測定の理論・実験の深化～量子情報・量子基礎論・量子統計への展開～」（領域 1，領域 11), 金沢大学, 金沢, 2016年 9月.

鹿野　豊,「量子動力学シミュレーション入門～量子ウォークを例にして～」, 第６１回物性若手夏の学校（集中ゼミ), ホテルシャレードイン志賀, 山ノ内町, 2016年 7月.

鹿野　豊,「光渦ビームを用いた量子状態の可視化」, ２０１６年第４１回光学シンポジウム, 東京大学生産研究所, 東京, 2016年 6月.

Y. SHIKANO, "Observation of Aharonov-Bohm effect with quantum tunneling," Conference on Concepts and Paradoxes in a Quantum Universe, Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo (Canada), June 2016.

Y. SHIKANO, "Visualizing Quantum State," EMN Quantum Meeting 2016, Holiday Inn Resort Phuket, Phuket (Thailand), April 2016.

Y. SHIKANO, "On Nonlinear Quantum Walk," 2016 Joint Mathematics Meetings "AMS Special Session on Quantum Walks, Quantum Markov Chains, Quantum Computation and Related Topics," Washington State Convention Center, Seattle (U.S.A.), January 2016.

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

科学技術振興機構主催Gender Summit 10組織・運営委員会部会委員 (2016–).

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

総合研究大学院大学先導的共同研究ワーキンググループ委員 (2015–).

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

Interdisciplinary Information Sciences, Special Issue “Quantum walk and quantum simulation,” Guest Editor (2016–2017).

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

岩手大学基礎自然科学系公開講演会「２０歳からの海外放浪記～私の人生を変えた出来事～」(2016).

東京工業大学大学院理工学研究科基礎物理学専攻・物性物理学専攻キャリアパス講演会 (2016).

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～」(2012).

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–2016年3月.

チャップマン大学量子科学研究所, 客員助教授, 2011年11月– .

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「量子トンネル効果中の測定理論の構築」, 鹿野　豊 (2016年–2018年).

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

若手独立フェローとしての任期も残りわずかとなり，固体中の準粒子ダイナミクスに関する理論と実験に関する結果が出始めている。しかし，今後，どのような方向性に研究を発展させていくのか?残された任期の中で中長期的な研究の方向性を定めていくことが課題である。一方で，直近の課題としてはヒューマンリソースが極めて少ない中で海外からのインターンシップ学生と共に新しく研究の方向性を推進してきた。これらの研究結果をどのようにまとめていくのか？　ということに関しても同様に課題が残っている。

小　林　玄　器（特任准教授（若手独立フェロー））（2013年9月1日着任）

A-1) 専門領域：無機固体化学，固体イオニクス，電気化学，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 ℃ 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

G. KOBAYASHI*, Y. HINUMA, S. MATSUOKA, A. WATANABE, M. IQBAL, M. HIRAYAMA, M. YONEMURA, T. KAMIYAMA, I. TANAKA and R. KANNO*, "Pure H^- Conduction in Oxyhydrides," *Science* **351**, 1314–1317 (2016).

G. KOBAYASHI*, Y. IRII, F. MATSUMOTO, A. ITO, Y. OHSAWA, S. YAMAMOTO, Y. CUI, J.-Y. SON and Y. SATO, "Improving Cycling Performance of $Li[Li_{0.2}Ni_{0.18}Co_{0.03}Mn_{0.58}]O_2$ through Combination of Al_2O_3-Based Surface Modification and Stepwise Pre-Cycling," *J. Power Sources* **303**, 250–256 (2016).

M. IQBAL, K. SUZUKI, G. KOBAYASHI, G. ZHAO, M. HIRAYAMA and R. KANNO*, "Lithium Ion Conduction in Doped $LaLiO_2$ System," *Solid State Ionics* **285**, 33–37 (2016).

B-3) 総説，著書

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体」, *固体物理* **51(12)**, 825–830 (2016).

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体の開発と電解質材料への応用可能性」, *Energy Device* **3(6)**, 53–58 (2016).

B-4) 招待講演

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体の開発とエネルギーデバイスへの応用可能性」, 新化学技術推進協会エネルギー分科会講演会, 新化学技術推進協会, 東京, 2016年9月.

G. KOBAYASHI, "Material Design for H^- Conductive Oxyhydrides," Solid State Protonic Conductor–18, Oslo (Norway), September 2016.

小林玄器,「H^- 導電性酸水素化物の合成」, セラミックス協会第２９回秋季シンポジウム, 広島大学, 広島, 2016年９月.

小林玄器,「La-Sr-Li 系酸水素化物の合成とH^- 導電特性」, 新学術領域「ナノ構造情報のフロンティア開発――材料科学の新展開」第４回若手の会, つくば, 2016年７月.

小林玄器,「La-Sr-Li 系酸水素化物の合成とH^- 導電特性」, 第４回酸化物研究の新機軸に向けた学際討論会「ナノ酸化物で見える科学と物理：新展開と異分野融合」, 京都大学化学研究所, 宇治, 2016年７月.

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体の開発」, 新世代研究所第１回界面ナノ科学研究会, 湯沢グランドホテル, 新潟, 2016年７月.

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体の開発」, パナソニック社内コロキウム, パナソニック株式会社先端研究本部, 大阪, 2016年５月.

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体の開発」, 豊田中央研究所講演会, 豊田中央研究所, 長久手, 2016年４月.

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体の開発と将来展望」, 第２回構造科学と新物質探索研究会, 早稲田大学, 東京, 2016年３月.

小林玄器,「水素のアニオンであるヒドリド（H^-）を伝導する特殊なセラミックスを開発」, 元素戦略／希少金属代替材料開発第１０回合同シンポジウム, 東京国際フォーラム, 東京, 2016年２月.

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

第５１回電池討論会実行委員 (2011).

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).

第４２回固体イオニクス討論会実行委員 (2016).

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」, 2016年 11月 12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–2017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 ℃ 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 ℃）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（EDL = Electric Double Layer Transistor）を行い，熱電特性がモット絶縁体の擬ギャップによって飛躍的に向上することを見出した。また，単分子膜モット FET の作製にも取り組んでいる。

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，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ほか，そのスイッチング速度の向上を検討した。また，基板を曲げることによって，歪みの制御にも取り組んでいる。

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評価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

Y. KAWASUGI, K. SEKI, Y. EDAGAWA, Y. SATO, J. PU, T. TAKENOBU, H. M. YAMAMOTO and R. KATO, "Simultaneous Enhancement of Conductivity and Seebeck Coefficient in an Organic Mott Transistor," *Appl. Phys. Lett.* **109**, 233301 (4 pages) (2016).

Y. KAWASUGI, K. SEKI, Y. EDAGAWA, Y. SATO, J. PU, T. TAKENOBU, S. YUNOKI, H. M. YAMAMOTO and R. KATO, "Electron–Hole Doping Asymmetry of Fermi Surface Reconstructed in a Simple Mott Insulator," *Nat. Commun.* **7**, 12356 (2016).

S. YASUZUKA, S. UJI, T. KONOIKE, T. TERASHIMA, D. GRAF, E. S. CHOI, J. S. BROOKS, H. M. YAMAMOTO and R. KATO, "Shubnikov–de Haas Effect and Angular-Dependent Magnetoresistance in Layered Organic Conductor β"-(ET)(TCNQ)," *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 084701 (7 pages) (2016).

H. YAMAKAWA, T. MIYAMOTO, T. MORIMOTO, H. YADA, Y. KINOSHITA, M. SOTOME, N. KIDA, K. YAMAMOTO, K. IWANO, Y. MATSUMOTO, S. WATANABE, Y. SHIMOI, M. SUDA, H. M. YAMAMOTO, H. MORI and H. OKAMOTO, "Novel Electronic Ferroelectricity in an Organic Charge-Order Insulator Investigated with Terahertz-Pump Optical-Probe Spectroscopy," *Sci. Rep.* **6**, 20571 (2016).

B-3) 総説，著書

川椙義高，関　和弘，須田理行，山本浩史,「分子性二次元モット絶縁体におけるフィリング制御の新展開」, *固体物理* **51**, 801–814 (2016).

B-4) 招待講演

H. M. YAMAMOTO, "Electronic phase-transitions at an organic interface," Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications, Okazaki (Japan), November 2016.

H. M. YAMAMOTO, "Superconducting transition at an organic interface," Thai-Japan Symposium in Chemistry, Chiang Mai (Thailand), November 2016.

H. M. YAMAMOTO, "Organic Mott-insulators for phase-transition-transistors," FET2016, Minnesota (U.S.A.), September 2016.

H. M. YAMAMOTO, "Melting of Electronic Crystals in Organic Transistor Interface," IMPACT-2016, Corsica (France), August 2016.

H. M. YAMAMOTO, "Molecular interface as a tool to investigate unconventional superconductors," Gordon Conference, Massachusetts (U.S.A.), August 2016.

H. M. YAMAMOTO, "Mott-transition at an organic interface," ICSM2016, Guangzhou (China), June 2016.

H. M. YAMAMOTO, "Organic Field-Effect-Transistor driven by phase transition," KU-IMS joint symposium, Bangkok (Thailand), June 2016.

H. M. YAMAMOTO, "Organic Field-Effect-Transistor with Superconducting Channel for Electrical, Mechanical and Photochemical Switching," WCSM-2016, Singapore, March 2016.

H. M. YAMAMOTO, "Molecular superconductor with electric-field, strain, and light," AsiaCore2016, Beijing (China), February 2016.

H. M. YAMAMOTO, “Molecular Conductors and Its Application to Field-Effect-Transistors,” PACCON2016, Bangkok (Thailand), February 2016.

山本浩史,「分子性相転移トランジスタにおける電荷制御と歪み効果」, 物理学会（シンポジウム）, 金沢, 2016年9月.

H. M. YAMAMOTO, “Molecular conductors and its application to field-effect-transistor,” Russian Academy of Science, Moscow (Russia), September 2016.

山本浩史,「有機強相関トランジスタにおける界面相転移」, 物性研短期研究会, 柏, 2016年8月.

H. M. YAMAMOTO, “Organic field-effect devices based on strongly correlated electrons,” University of Angers, Angers (France), June 2016.

山本浩史,「有機強相関エレクトロニクス」, 第8回金属錯体の固体物性最前線, 東北大学, 仙台, 2016年2月.

M. SUDA, “Photo-gated Organic Superconducting Transistor utilizing a Photo-active electric double layer,” Nano S&T-2016, Singapore, October 2016.

M. SUDA, “Photo-controllable Organic Superconducting Transistor,” ISPAC 2016, Kuching (Malaysia), August 2016.

B-6) 受賞，表彰

H. M. YAMAMOTO, 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).

山本浩史, 科学研究費審査委員表彰 (2016).

須田理行, 分子科学討論会優秀講演賞 (2013).

須田理行, PCCP Prize (2016).

須田理行, 分子科学会奨励賞 (2016).

須田理行, 名古屋大学石田賞 (2016).

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).

学会誌編集委員

Molecular Science 編集委員 (2010–2011).

その他

理化学研究所研究員会議代表幹事 (2009–2010).

B-8) 大学での講義，客員

東京工業大学大学院物質理工学院,「半導体電子物性」, 2016年12月–2017年1月.

東京工業大学大学院物質理工学院, 特任教授, 2016年4月– .

東北大学大学院理学系研究科,「強相関電子物理学特論」, 2016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

科研費基盤研究(B),「溶液プロセスによる二次元単分子層接合デバイスの創成」, 山本浩史 (2016年–2018年).

科研費若手研究(A),「光誘起電気二重層を利用した新奇超伝導トランジスタの開発」, 須田理行 (2016年–2018年).

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).

B-11) 産学連携

サンテック（株),「 レーザー加工装置の開発 」, 山本浩史 (2016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・分子素子の開発と，関連する学術の創出を行っていく。

鈴　木　敏　泰（准教授）（1998 年 1 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：有機合成化学

A-2) 研究課題：

a) 曲面グラフェン分子の開発（芳香族ベルト・サドル）

b) 電界効果トランジスタのための有機半導体の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 最近，アームチェアー型 CNT の最も短いセクションである [*n*] シクロパラフェニレン（CPP）の研究が進展しており，複数のグループにより [5]CPP から [18]CPP までが合成されている。我々も京大化研・山子グループとの共同研究により，いくつかの興味深い CPP 類縁体（カーボンナノフープ）を合成した。次なる合成ターゲットとして，チューブ型の曲面グラフェン分子であるカーボンナノベルトが注目されている。1983 年の提案以来，多くの合成化学者が挑戦しているが，いまだに完成の報告はない。我々は DFT 計算により，比較的小さな歪みエネルギーとある程度大きな HOMO-LUMO ギャップをもった分子を設計し，初のナノベルトの完成を目指している。ナノフープはベンゼン環同士がねじれているため，固体での分子間π－π相互作用が生じにくい。一方，ナノベルトはナノフープより長く，CNT と同じく一枚の連続した表面をもつ。このため，２次元的な分子間π－π相互作用を取りやすく，有機半導体などのユニークな固体物性が期待できる。昨年度は，Scholl 反応による環状フェニレンの酸化的脱水素反応を検討したが，目的とするナノベルト分子を得ることはできなった。これは分子間の脱水素反応によりオリゴマーが生じること，反応の位置選択性を制御できないこと，および塩化鉄により塩素置換体が生成するためである。今年度は，フッ素置換した環状フェニレンの活性アルミナによる脱フッ化水素反応を検討した。まず，フッ素置換したオクタフェニレンでは，250 °C で反応が進行し，比較的歪みの大きなテトラベンゾ [8] サーキュレンを与えた。現在，さらに大きなフッ素化環状フェニレンを合成し，ナノベルト化の検討を行っている。

B-1) 学術論文

E. KAYAHARA, R. QU, M. KOJIMA, T. IWAMOTO, T. SUZUKI and S. YAMAGO, “Ligand-Controlled Synthesis of [3]- and [4]Cyclo-9,9-dimethyl-2,7-fluorenes through Triangle- and Square-Shaped Platinum Intermediates,” *Chem. –Eur. J.* **21**, 18939–18943 (2015).

Y. KURODA, Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI, E. KAYAHARA and S. YAMAGO, “Tetracyclo(2,7-carbazole)s: Diatropicity and Paratropicity of Inner Regions of Nanohoops,” *J. Org. Chem.* **81**, 3356–3363 (2016).

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，「構造物性科学」, 2016 年 12 月 6 日–9 日.

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」が2016年3月で終了した。リング構造をもつCPPは，そのベンゼン環の大きなひずみにもかかわらず，芳香族性が十分に保たれている。共同研究者として，このことを実験的に示すことができたことは，CPP構造の基本的な理解としてよかったと思う。今後は，よりカーボンナノチューブに近いナノベルトの完成と有機デバイスへの応用を目指していきたい。

7．点検評価と課題

2016年度は，法人化３期目の初年度に当たり，新たに４名の運営顧問に就任いただき今期中の研究所運営に対するアドバイスをいただく体制を整えた。運営顧問をお勤めいただく，菊池昇豊田中央研究所長，晝馬明浜松ホトニクス社長，瀧川仁東京大学物性研究所長，松本吉泰京都大学大学院理学研究科教授の４名には，12月７日に開催した運営顧問会議の際に来所いただき，研究所の全体像を紹介した。

また，個々の研究領域の研究成果及び領域の研究方針に関して，運営会議の所外委員を務める関連研究者からのアドバイスを受ける目的で，２月９日に開催した運営会議の後に４領域の現状を紹介した。評価内容については，次期の分子研リポートに掲載する予定である。

2016年３月には，Ron Naaman 教授により物質分子科学研究領域を中心にヒアリングが実施され，グループの研究内容の評価をいただいた。2016年及び2017年３月には，ライス大学の Peter J. Rossky 教授により，理論・計算分子科学研究領域を中心にヒアリングが実施され，２年にわたる当該グループの研究内容の評価をいただいた。

また，ドイツ・ユーリッヒ研究センターの管滋正客員教授によって，UVSOR 施設における光電子分光分野を中心とした施設整備状況及び研究内容について評価をいただいた。

これら，所外研究者からの評価は，個々の研究者の今後の研究方針を決める上で貴重なアドバイスであると同時に，研究所全体の運営に対する貴重な提言も含まれており，今後の研究所運営に反映させていただく所存である。

（川合眞紀）

7-1　外国人運営顧問による点検評価

7-1-1　Ron Naaman 外国人運営顧問

原文

Report

March 2016

During my visit at IMS I met with the six department members and with the president. Beyond discussing the scientific work, I also attempted to understand if they foresee any important obstacles in their scientific work that can be solved by the Institute's management. Hence the following report will have three parts. In the first I will summarize my conclusions/suggestions regarding the Institute's policy. I focus on issues that in my opinion can be solved relatively easily. In the second part I relate to the department as a whole and in the last part I review the individual research groups.

General IMS:

1. Lack of students and postdoc—This problem was raised by all scientists with whom I met and the numbers as presented are indeed grim. There is some rationale to keep the research group small, so as to encourage collaboration with other research groups in Japan. However, too-small groups result in wasted resources (expensive equipment not used to its full capacity) and lack of research requiring investment of much human-time, like synthetic work. It seems reasonable to expect to have 2–3 graduate students per research group.

   I suggest approaching the international community by offering special fellowships to exceptional students/postdoc. It should be possible to attract students not only from China and India but also from Europe and the US by advertising the excellent equipment available and the outstanding research performed at IMS.
2. Access for the international community—It should be possible to hire a few excellent young scientists from abroad as associate- and full professors. This type of hiring will significantly increase the exposure of IMS to the international community and will help to expose it also to foreign students and postdocs.
3. Promoting the scientists—The scientists in IMS are under-appreciated by the international community. They publish papers in excellent journals but do not get enough recognition in the sharing of prizes, awards *etc*. I suggest establishing an internal committee at the IMS that will collect information about possible prizes/awards and submit candidates from IMS for those awards.

The Department of Materials Molecular Science

Two facts are immediately apparent when attempting to evaluate the department.

i. The department can be divided into two groups. The first includes Profs. Toshihiko Yokoyama, Hiroshi Yamamoto, Masahiro Hiramoto, and Assoc. Prof. Genki Kobayashi. This group performs research of the highest level and indeed publishes in the best Journals. Before discussing each individual in this group, it is important to emphasize that the research performed by all members of this group is highly original and can be counted as the type of research performed by the best people in the field. I was impressed that these people are not affected by coming and going approaches, but rather find their own original way of research. The second group includes Assoc. Profs. Toshikazu Nakamura and Katsuyuki Nishimura. Both perform research that is concentrated around the use of top-of-the-line equipment ESR and NMR respectively. In a sense they serve the mission of the IMS in providing access to top equipment to groups from outside the IMS. Indeed they tend to collaborate with many groups; more details will be provided below when I discuss each researcher individually.

ii. The department is too small and several important fields in Material research are missing. Among them, one can mention bio-mimic materials, oxides research (a subject of importance both in basic and applied research), material synthesis. Of course the department does not have to include all the topics, but it is important to have variation. Most of the work in the department emphasizes physical methods and besides the work of Assoc. Prof. Genki Kobayashi, no work on material synthesis is performed. It is true that some of the missing subjects can be adapted by collaboration with other laboratories, but it is important to have 2–3 people that know the material synthesis community and can help in matching research groups from outside the IMS with the groups at the department.

In view of the central role Material science is playing in modern science, the department must be strengthened significantly and its size should be doubled. It is indeed important to keep the high standard of hiring, but it is also important to widen the research topics. If possible, it will be good to hire people that spend time in leading labs outside Japan, or even foreigners, so that the ties between the department and the International community will be tightened. In addition, one should consider hiring a theoretician working on electronic and magnetic properties of materials. Such a theoretician could collaborate with the experimental groups.

Review of the individual research groups

Prof. Toshihiko Yokoyama

The group of Prof. Yokoyama develops novel spectroscopic methods and especially methods aimed for studying magnetic materials and magnetic films. The research performed by the group is novel and of the highest level. They developed the novel concept of magnetic nanoscope using ultraviolet magnetic circular dichroism photoelectron emission microscopy, which allows to perform real-time and ultrafast magnetic imaging. In the spirit of IMS, they constructed x-ray magnetic circular dichroism (XMCD) system which is used by many researchers, both from Japan and from abroad. The research performed on monolayers of phthalocyanine, adsorbed on both magnetic and nonmagnetic substrate, is of high quality and ground breaking. The group is also involved in fuel cell research and applies the experimental methods they developed for this purpose.

In summary, the research performed by this group fulfills the two tasks each research group in IMS should strive for i) developing new techniques and make them available to the scientific community ii) conducting high-level original research.

Prof. Hiroshi Yamamoto

The group of Prof. Hiroshi Yamamoto works in a new and fast-growing field of organic electronics. They explore new ways to control electronic and superconducting devices by molecules and the role of molecules themselves as components in electronic devices. The work performed combines in a very clever way, knowledge of Physics and of Chemistry. The group already succeeded to demonstrate breakthrough research and has established itself as one of the leading groups in this field, worldwide. The group will gain greatly from collaboration with a theoretical solid state physics group.

Prof. Masahiro Hiramoto

The group is studying the electronic properties of organic molecules that may be used in photovoltaic devices. Specifically, the group aims at controlling the band gap in organic semiconductors. This is achieved by first purifying the organic semiconductors and then doping them with high precision. The research goal is clearly defined and the group established itself in the active community

of organic electronics. They already demonstrated that their approach is important and may result in new electronic properties. The group is productive and the work is published in very good journals.

Assoc. Prof. Genki Kobayashi

The research of Genki Kobayashi is centered on synthesizing and measuring the properties of ion conductive material. The research is going all the way into demonstration of the application of these materials in energy storage and conversion devices. The research is novel and provides, in my opinion, a breakthrough in material research in general and conductive materials in particular. Despite the fact that Genki Kobayashi is only at the beginning of his scientific career, he shows maturity and deep insight, typically seen only at much more experienced scientists. Clearly the work performed is ground-breaking. The work is concentrated on conduction of hydride ions (H^-) in oxyhydride. This is a new and a very promising approach. I am sure that any research institute in the world will be proud to have a person like Assoc. Prof. Genki Kobayashi as its member.

Assoc. Prof. Toshikazu Nakamura

Toshikazu Nakamura studies solid-state materials, such as organic semiconductors and conductors applying magnetic resonance methods. He is using both pulsed FT-NMR and X and W-band ESR. The equipment is of high standard and enables to perform interesting studies on organic crystals. In the spirit of the IMS, much of the work is performed in collaboration with other groups in Japan. Indeed these collaborations result in publications in excellent journals. With the aim of keeping the equipment at IMS the best possible, one should consider purchasing mm-wave EPR. However, it is important to insure that the equipment will be used efficiently and this may require hiring more people interested in this type of research.

Assoc. Prof. Katsuyuki Nishimura

Katsuyuki Nishimura research is focused on applying solid state NMR for the characterization of bio-molecules and inorganic materials. Typically, the projects performed are in collaboration with other research groups, which is in the spirit of IMS. Since the subject of research is very popular worldwide, the research would gain also from international collaboration.

訳文

評価レポート（2016 年 3 月）

分子研滞在中に私は所長および６名の物質分子科学研究領域メンバーと面会した。科学的な成果を論じることとは別に，研究所のマネジメントによって本来解決可能な困難が領域メンバーの科学的探求を妨げてないか，ということも理解しようと試みた。従って，以下のレポートは三部構成とする。最初に私は研究所の運営方針に関する結論と提言を述べる。そこでは，比較的簡単に解決が可能と思われる問題に焦点を絞りたい。第二部では，物質分子科学研究領域全体について述べ，最後にそれぞれの研究グループについて検証しよう。

分子研全体について

１．学生とポスドクの不足――この問題は私が面会した全ての研究者から提起され，実際に提示された数字は深刻なものである。グループの人数をある程度制限して，外部の研究グループとの共同研究を推奨するという考え方は確かにあるが，あまりにグループサイズが小さいと，研究資源の無駄（あまり使われてない高価な機器等）と，

合成化学のように人的資源を大量に必要とする研究の欠如，が生じることになる。私としては，例外的に優秀な学生やポスドクに対して特別の待遇を提供することによって，国際的な科学コミュニティーから人材を確保することを提言したい。分子研に備わっている立派な機器類やすばらしい研究成果を宣伝することによって，中国やインドだけでなく，ヨーロッパやアメリカ合衆国からも学生を呼び込むことが出来るであろう。

2．国際的コミュニティーとの人材交流――准教授や教授として，数名の優秀な若い科学者を海外から雇用することが可能であろう。このような雇用をすることによって，分子研が海外からよく見えるようになるであろうし，そのことが海外の学生やポスドクに対するアピールにもなる。

3．科学者のプロモーション――分子研の科学者は海外から過小評価されている。彼らはその論文を一流の雑誌で発表しているが，表彰や賞として十分に認識されているとは言えない。私は分子研の内部に委員会を設立して，表彰制度や賞に関する情報を集め，そうした賞に分子研から候補者を推薦することを提言したい。

物質分子科学研究領域

この領域を評価するにあたっては，まず以下の二点がはっきりと指摘できる。

1．領域内グループは二つのカテゴリーに分けられる。第一のカテゴリーは横山利彦教授，山本浩史教授，平本昌宏教授, そして小林玄器准教授である。このカテゴリーに属する研究グループは, 最高レベルでの研究を行っており, 実際にその成果を一流誌に発表している。個々のグループについて論じる前に，このカテゴリーに属する研究グループメンバーが行っている研究は，とても独創的で，各分野においてトップレベルと認識される内容であることを強調しておきたい。私が非常に感銘を受けたのは，これらの研究者があちこちつまみ食いをするようなアプローチではなく，彼ら自身の独創的なやり方で研究を展開していることである。

第二のカテゴリーは中村敏和准教授と西村勝之准教授である。二人はそれぞれ最先端の装置である ESR と NMR の利用に関わった研究を行っている。ある意味では，分子研外の研究グループに対して最先端の装置を提供するという分子研のミッションに貢献していると言える。実際に，彼らは多くの外部グループと共同研究しているようである。個々の研究者に関するさらなる詳細は，後述する。

2．この領域はあまりに小さくて, 物質科学の中のいくつかの重要部分が欠けている。その中には, 生体模倣材料, (基礎的にも応用的にも重要な) 酸化物の研究, 物質合成などがあるだろう。もちろんこの領域が全ての話題をカバーする必要はないが, それなりの幅を持つことは重要である。領域のほとんどの仕事は, 小林准教授のものを除けば, 物理的手法に特化しており，物質合成が行われていない。確かに，欠けているテーマの中には外部研究室との共同研究で補完できるものもあるだろうが，物質合成コミュニティーを知っている２～３人の研究者が在籍し，外部の研究者と領域の研究者を結びつけることは重要である。

現代の科学において物質科学が占めている中心的な立場を考えると，物質分子科学研究領域は大いに重点化されるべきであるし，そのサイズは現在の２倍になってしかるべきである。雇用する人材のレベルを高く保つことは重要だが，同時に研究テーマの幅を拡げることも重要である。可能であれば，海外のトップクラス研究室に滞在したことのある人材，あるいは外国人を雇用し，領域と国際コミュニティーとのつながりを強化するのが良いであろう。それに加えて，物質の伝導性や磁性に関して研究を行っている理論家を雇用することも検討するべきであろう。そのような理論家が居れば，実験グループとの共同研究を展開できる。

個々の研究グループに関する評価

横山利彦教授

横山グループは磁性材料や磁性薄膜を研究するための新しい分光手法を開発している。グループが展開している研究は新しく，最高レベルのものである。彼らは紫外領域での円二色性光電子分光を用いて，実時間かつ超高速の新規磁性イメージングをコンセプトから開発している。分子研の共同利用として，彼らはX線の磁気円二色性システムを立ち上げ，国内外の多くの研究者に提供している。磁性，あるいは非磁性の基板に吸着させた単分子層フタロシアニンの研究は，品質も高く画期的である。このグループは燃料電池の研究も行っており，その目的のために開発した実験手法も展開している。

要約すると，このグループが行っている研究は，分子研の研究グループが満たすべき①新たな手法を開発して共同利用に供する②独創的なハイレベルの研究を行う，という２点を共に満たしている。

山本浩史教授

山本グループは新しく急速に成長しつつある有機エレクトロニクスの分野で活躍している。彼らは分子そのものを構成要素とした電子デバイスにおいて，伝導性や超伝導を制御する新しい手法を開発している。その成果は非常に巧みな方法で化学と物理の知識を組み合わせて生み出されたものである。このグループは既に飛躍的な研究の進展を明示することに成功し，世界的にこの分野を牽引していくグループであると認められている。固体物理の理論グループと共同研究を行えば，さらに得るものが大きいであろう。

平本昌宏教授

平本グループは太陽電池として利用可能と思われる有機分子の電気的性質を研究している。特にこのグループは，有機半導体のバンドギャップ制御を指向している。これは，まず有機半導体を精製し，つぎに高精度のドーピングをすることによって達成される。その目標は明確に見定められており，有機エレクトロニクス分野における活動的なグループであると認められている。彼らのアプローチは重要であり，新たな電子機能に結びつくかもしれない，ということを既にグループは明らかにしてきた。この研究グループは生産的で，成果は一流雑誌に掲載されている。

小林玄器特任准教授

小林グループの研究はイオン伝導性化合物の合成と物性計測に主眼を置いている。これらの物質を用いたエネルギー貯蔵やエネルギー変換デバイスの実証へ向けて研究は進んでいる。この研究は新しく，私が思うに，物質科学全般としても伝導性物質としても画期的な成果であると言える。小林特任准教授はまだその科学者としての経歴のほんの始まりにいるに過ぎないが，それにも関わらず彼は，はるかに熟練した研究者にしか見られないような深い洞察を有しており，その円熟を感じさせる。明らかにその研究成果はこれまで無かったようなパイオニア的成果である。研究内容は，酸水素化物のヒドリド伝導に関するものである。これは新しく，非常に有望なアプローチである。世界のどのような研究所であっても，小林玄器准教授のような人物を擁することを誇りに思うであろう。

中村敏和准教授

中村准教授は，磁気共鳴を用いて有機半導体や有機伝導体などの固体を研究している。彼はパルスFT-NMRとXバンド・WバンドESRを用いている。装置は高いレベルのもので，有機結晶に関する興味深い研究を行える。分子

研の共同利用精神に基づき，多くの仕事は国内の他グループとの共同研究で行われている。実際これらの共同研究は，優良な雑誌での論文掲載に至っている。分子研の装置を最良の状態に保つためにミリ波 EPR を導入することも考慮に値する。しかしながら，装置を効率的に利用する方策を確立することは重要で，そのためにはこの種の研究に興味を持った研究者を今以上に多く雇用する必要があるかもしれない。

西村勝之准教授

西村准教授は固体 NMR を生体分子と無機材料の評価に利用することに主眼を置いている。多くの場合，研究は分子研共同利用として，外部のグループとの共同で行われている。この種の研究は世界中で広く行われているため，国際共同研究としての発展も期待される。

ロン・ナーマン

7-1-2　Peter J. Rossky 外国人運営顧問

原文

Report of External Review

Department of Theoretical and Computational Molecular Science

Institute for Molecular Science

National Institutes of Natural Sciences, Okazaki, Japan

March 26, 2017

Peter J. Rossky

Professor of Chemistry and of Chemical and Biomolecular Engineering

Harry C. and Olga K. Wiess Chair in Natural Sciences

Dean, Wiess School of Natural Sciences

Rice University, Houston, Texas USA

Overview of review and of Department

At the invitation of Professor Shinji Saito, I visited the Theoretical and Computational Molecular Science group from March 12–14, 2017 to review the research ongoing in the laboratory. I have visited the IMS on multiple occasions over an extended time, beginning in the 1980's when Keiji Morokuma was the founding Director of IMS and Iwao Ohmine was an Associate Professor. I therefore have a long perspective on the evolution of the researchers and their products in the Department, and I am proud to serve as a Foreign Councilor at IMS.

From this most recent visit, I have a few general observations to report that were very clear. First, the research now going on at the IMS is uniformly excellent and represents in every project, research that is of world class. The problems being attacked are at the frontiers of science and the approaches are cutting edge, as will be discussed further below. I would say that it is only after my most recent two visits to IMS during the past year that I can make a statement that is this sweeping. The awareness of the research

that is in competition from other labs and the self-awareness of each individual as a scientist in the broad perspective are outstanding in every case. The focus is chosen considering a global perspective. Most importantly, the individuals I met with are clearly *global* scientists, who are part of the global network of science. This represents an enormous evolution from the early years of IMS and even a measurable change from other relatively recent visits to the lab. I attribute the attainment of such a high point of success to outstanding leadership, most recently by Professor Ohmine and Professor Saito, who are themselves truly global scientists. Having met for the first time with the new Director General, Prof. Kawai, on this visit, I have no doubt that this global perspective will be reinforced under her exceptional new leadership.

Another particular example of change is the exceptional success in the hiring of Professor Ishizaki under non-traditional terms, where he could be promoted and also stay at IMS, rather than being required to move to another lab. From my personal view, this is a very positive opportunity to employ in exceptional cases, in terms of enabling the development of the strongest possible group of scientists at IMS. I have no doubt that conversations and debates will need to take place to determine the role that such appointments might make in the future, since it is a departure from a long standing policy aimed at providing a pipeline of molecular science experts for the nation.

In overview, the topics pursued by the theory group represent an excellent balance across the current frontier topics in the area. Specifically, there is a strong representation of condensed phase molecular science, including nanoscale materials and biomolecular systems, of dynamics in general, and of electronic structure theory with advanced applications aimed at developing and testing the new methods that are opening up access to complex molecular systems at an accurate *ab initio* correlated electron level. Noticeably missing are individuals who are making only incremental contributions to problem areas that are largely addressed by earlier work. This absence shows the strength of the group on an international scale. I would add, with some emphasis, that it would be very valuable to the group's national role in setting the standard for theoretical chemistry in Japan, if the group were able to identify and hire one or more female scientists in this field at the Assistant and Associate level. This would be fully in accord with the historical national leadership role of IMS.

Individual research faculty members

Professor Shinji Saito:

Having known of Professor Saito's work in molecular spectroscopy since he joined IMS, I was particularly excited to hear of his new work that supplements in a healthy way his continuing focus, and recognized leadership contributions, in the area of nonlinear spectra and underlying dynamics. Specifically, his new work on the dynamics of proteins and new formal approaches to the analysis of those dynamics represent a quite interesting and creative new branch of his portfolio and represents a growth in impact.

Assoc. Professor Katsuyuki Nobusada:

The work of Professor Nobusada was, perhaps, that which excited me most in recent visits to IMS, although we were not able to meet on this visit. This is largely because of my own research interests. It is also because I believe that his efforts to develop a complete description of nanophotonics for realistically modeled systems are very distinctive within chemical theory and computational researchers. Because I am particularly exposed to experimental research in this area at Rice University, I am also quite certain that the target area that he has chosen is a highly active one among experimentalists currently. Hence, I especially commend his work for its relevance and likely impact in areas such as catalysis, in addition to the quality of the theory.

Assoc. Professor Takeshi Yanai:

After a period of relatively low excitement in the broad community about research in computational electronic structure, recent years have seen a number of hires of faculty who are focused on developing new methods which may be able to address the correlated electron problem robustly and with high accuracy while also accessing larger systems that have been inaccessible via traditional methods such as coupled cluster. My judgment is that Dr. Yanai's work is very well placed in the development of electronic methods and that his work is competitive on a global scale.

Professor Masahiro Ehara:

Professor Ehara has been remarkably productive in applying electronic structure methods to true chemistry problems of widely accepted importance. His range of applications is quite amazing, ranging from dyes to nanocarbon materials to light-driven catalysts. His recent work on the structure of multimetallic clusters is very relevant to experimental studies on new catalysts and also electron transfer proteins. The fact that he has been able to address quite large systems, including excited states, with methods of acceptable accuracy is an impressive demonstration of the capacity of the methods when implemented by an expert. This work is clearly at the leading edge of what can be done in applications to real chemistry.

Associate Professor Hisashi Okumura:

I found the discussion of Professor Okumura's research quite exciting. While the problem of Aβ peptide aggregation seems to be on the agenda of a large number of computational chemists, I found the work of Dr. Okumura to be refreshing in at least two ways: First, he is developing novel simulation methodologies for attack on the problem and these seem to be quite effective. Second, his work is yielding answers on mechanisms, rather than simply ideas of what *might* be important. Hence, he impressed me as one of the leading computational individuals in the area of biomolecular self-assembly. He had made substantial progress on both new methods and applications in the brief year since we had spoken previously. His program is well-focused, well aimed, and diverse enough to continue growing effectively.

Professor Akihito Ishizaki:

This was my second meeting with Professor Ishizaki, although I knew of his work that preceded his joining IMS and of his strong reputation. I enjoyed the encounter: He is a very energetic and knowledgeable scientist, and he is working on problems in quantum dynamics that are at the frontiers, including issues of quantum coherence and of exciton transport and decay. His methodologies are quite current, so that he is clearly competitive with the best scientists anywhere who are addressing similar problems. His latest work attempting to fully account for the coupling of the molecular environment with excitonic dynamics is directed well in terms of the likely evolution of his research area. His most recent work on exciton dissociation in green plants is an exciting area that promises to make important contact between biological and synthetic materials systems, a relatively undeveloped aspect.

Research Assoc. Professor Yutaka Shikano:

Having worked myself in the area of coherent quantum dynamics, I am relatively familiar with the style of physics research of central interest to Professor Shikano. To analyze in detail the quantum dynamics of model Hamiltonians can produce deep insight into the basic physics. However, in my view, it is largely separate from the current focus of molecular science. Hence, his work is

very valuable in a broad scientific context, but his contributions have been less connected to those of his colleagues in the Department. This view seems to be accepted by all concerned, including Professor Shikano. I learned during the review that he will be leaving the theory group of IMS soon to join Physics at the University of Tokyo. This is an excellent and constructive move for him, and the move continues the role of IMS in successfully developing talent that impacts the nation.

I would like to specifically highlight that the following comments are on the theoretical researchers whom I met for the first time on this visit:

Research Associate Professor Takatoshi Fujita:

Prof. Fujita is clearly a very accomplished young scientist, with an outstanding command of the most modern tools for computational modeling of optoelectronic properties of molecular aggregates, including organic semiconductors. The work he is doing is of first class quality. While this work is excellent and certainly internationally competitive, the molecular problems that he is focusing on in the implementation phase of his work, largely light harvesting systems, are also those that are directly in the areas of many senior researchers. I expect that after fully establishing himself at IMS, he will turn to problems that might distinguish him more from the "crowd," such as design of synthetic molecular mimic systems. That would be a boost to his impact and reputation.

Research Associate Professor Kei-ichi Okazaki:

Prof. Okazaki is using state-of-the-art methods to tackle the mechanisms of very complex biomolecular systems. He has trained with the very best in the world, and he is focused on several cutting edge problems in biophysics. Each of these is a very worthy pursuit and each of these has ample room for entry of a new researcher. His work in the area of molecular machines is in a "hot" area, and his use of coarse-grained models is well structured. His work on understanding single molecule data is an essential element for working with the leading experimentalists in this area. I found his work on membrane remodeling by proteins to be especially well chosen and original. I believe that this area has, perhaps, the greatest opportunity for both individual growth and impact on science internationally.

Finally, I also met with two experimental groups of special personal interest for my research:

Professor Masahiro Hiramoto [Materials Molecular Science]:

I was fascinated to learn of Prof. Hiramoto's work on doping of organic semi-conducting organic materials for "plastic" solar cells. This is a phenomenon often viewed as inaccessible in organics, although it is the most essential aspect of conventional (*e.g.*, Si-based) semiconductors. His research demonstrates clearly that doping *can* be effectively carried out. The experimental work is extensive, carefully executed, and highly original. I found it both very interesting and potentially quite relevant for future practical implementations.

Professor Satoshi Kera [Photo-Molecular Science]:

Prof. Kera's work using photoelectron spectroscopy to understand organic films is at the cutting edge. The approach is now able to reveal very detailed electronic maps of molecular interfaces. I found his efforts to map out molecule-surface interactions, the

consequent impact on electronic structure, and the signatures of specific molecular structure on surfaces to be exceedingly well focused on specific questions of interest that can be answered quantitatively and definitively by PES. His work compares well with his global community and contributes important insights in the very active materials area of molecular films.

訳文

自然科学研究機構　分子科学研究所　理論・計算分子科学研究領域　外部評価レポート

Peter J. Rossky

Professor of Chemistry and of Chemical and Biomolecular Engineering

Harry C. and Olga K. Wiess Chair in Natural Sciences

Dean, Wiess School of Natural Sciences

Rice University, Houston, Texas USA

レビューと領域の概略

斉藤真司教授の招待により，2017 年 3 月 12 日から 14 日にかけて分子科学研究所の理論・計算分子科学研究領域で行われている研究をレビューするために滞在した。諸熊奎治教授が創設時からの主幹であり大峯巖教授が助教授であった 1980 年代初頭からの長きにわたり複数の機会に分子科学研究所を訪れてきた。したがって，理論・計算分子科学研究領域の研究者と成果の変遷について長期にわたる意見を持っており，また，分子科学研究所において外国人運営顧問を務められることを嬉しく思う。

最近の訪問から，幾つか報告すべき非常に明確な見解を得た。まず，分子科学研究所において現在進行中の研究はいずれも卓越しており，全てのプロジェクトが世界レベルである。以下で更に述べるが，取り組まれている問題は科学のフロンティアにあり，そのアプローチは最先端なものである。私がこのようなことを述べることができるのは，この一年間に分子科学研究所に二回訪問した後であるからであるということを申し上げたい。他の研究チームとの競合に対する意識，また広い視野に立った各個人の認識はいずれも傑出している。研究対象はグローバルな視点を考慮して選択されている。最も重要なことであるが，私が会った個々人は明らかにグローバルな科学者であり，科学研究の世界的ネットワークを持っている。このことは，分子科学研究所の創設時に比べて非常に大きな進展であるし，比較的最近の分子研訪問時に比べてさえも大きな変化である。この大きな成功は，実にグローバルな科学者である大峯教授と斉藤教授による傑出したリーダーシップによるものであると考えている。今回の訪問で新所長・川合教授に初めてお会いし，彼女の卓越したリーダーシップのもとで，このグローバルな観点が更に強固なものになると確信している。

もう一つ変化の際立った例は，これまでとは異なる条件で石崎教授を雇用することに成功し，他の研究機関への異動を課すことなく分子科学研究所内部で昇進させたことである。私個人としては，分子科学研究所において可能な限り強力な研究グループを構築することを可能にするという点で，通常とは異なるケースで雇用するのは非常に素晴らしい機会であると思う。国内において分子科学の専門家を輩出することを目的としたこれまでの方針から外れるため，このような雇用が今後どのような役割を担うかについて議論がなされる必要があると考える。

概観するに，理論グループで進められている研究課題は，この分野における現在のフロンティアを非常にバランス良く含んでいる。とくに，ナノスケール材料や生体分子系を含む凝縮相分子科学，ダイナミクス一般，そして，正確な電子相関のレベルで複雑な分子系を取り扱うことが可能な電子構造理論に強みがある。過去の研究で盛んに取り上

げられた問題に対して付加的なだけの貢献をするタイプの研究者は存在しない。このことは，理論グループの国際規模での強さを示している。加えて，もし一人もしくは複数の女性研究者を理論グループの助教または准教授レベルで雇用することができれば，日本における理論化学のスタンダードを提示するという役目の点で，非常に価値があることも強調したい。このことは，分子科学研究所のこれまでの国内におけるリーダーシップとも完全に合致するものである。

個々の研究職員

斉藤真司教授：

斉藤教授が分子研に着任した当初から彼の分子分光法に関する仕事について知っているので，彼の研究上の興味を健全な方法で満たす新しい成果と非線形分光スペクトルとそのダイナミクス研究の分野におけるリーダーシップについて聞いて非常に嬉しく思う。とくに，タンパク質ダイナミクスに関する新しい研究とタンパク質ダイナミクスを解析する新規アプローチは，斉藤教授の研究リストに新たに加わった興味深く創造性に富んだ研究テーマであり，彼の影響力を大きくするものである。

信定克幸准教授：

今回の訪問で信定准教授に直接会うことはできなかったが，彼の仕事は最近の分子研訪問で最も興奮させられたものであった。これは主に私自身の研究興味のためでもあるが，現実的にモデル化された系のナノフォトニクスを完全に記述する手法を開発する彼の努力は化学理論・計算の研究者の中で非常に独特であると考えるからである。私自身ライス大学において当該分野の実験研究に関与しているため，信定准教授の研究領域は現在の実験研究者の中でも非常に活発なものであることをよく知っている。 したがって，理論の質に加えて触媒作用などの分野での関連性と期待されるインパクトに関して彼の研究を賞賛したい。

柳井毅准教授：

電子構造計算の研究に関するコミュニティにおいて活気が比較的低い期間を経た後，近年では電子相関の問題を確実にそして高精度で取り扱うことができ，また coupled cluster のような伝統的な方法論では不可能な大きな系を扱える新しい方法論の開発に焦点を当てた教員の雇用が多く見られるようになった。私の見解では，柳井博士の研究は電子状態の方法論開発に非常に適しており，また，彼の研究にはグローバルレベルでの競争力がある。

江原正博教授：

江原教授は，重要性が広く認知された化学の問題に対して電子構造計算を適用し非常に生産的である。彼の応用範囲は，色素分子からナノカーボン材料および光触媒まで驚くべき広さである。多核金属クラスターの構造に関する最近の仕事は，新しい触媒や電子伝達タンパク質の実験研究に非常に重要である。許容可能な精度の計算手法を用いて励起状態を含む非常に大きな系を扱うことができるという事実は，エキスパートによって遂行される電子構造計算の可能性を印象的に示すものである。この仕事が，実在の化学への応用として実現可能な範囲で最先端にあることは明らかである。

奥村久士准教授：

奥村准教授の研究に関する議論は非常に刺激的であった。Aβペプチド凝集の問題は多くの計算化学者の課題であるようであるが，奥村准教授の仕事は少なくとも２つの点で斬新である。第一に，彼は問題に取り組むために新しいシミュレーション手法を開発しており，これらは非常に効率的に思われる。第二に，彼の研究は重要な可能性のあるものは何かという単なる推測的なアイデアではなく,（アミロイド形成）メカニズムに関する明快な解答を与えている。これらの事から，彼が生体分子の自己組織化の分野において優れた計算科学者の一人であると感銘を受けた。我々が以前に話して以来の短い期間に新しい方法論とその応用の両方で相当な進捗を遂げている。奥村准教授の研究計画は効率的に発展し続ける上で焦点，目的が明確であり，十分に多岐にわたっている。

石崎章仁教授：

石崎教授が分子科学研究所に着任する以前から彼の仕事や確固たる評判を聞いていたが，彼と会うのは今回が二回目である。私はこの出会いを楽しんだ。彼は非常に精力的で知識豊富な科学者であり，量子コヒーレンスや励起子移動とその減衰の問題を含む研究の最前線にある量子ダイナミクスの問題に取り組んでいる。彼の方法論は非常に受け入れられており，類似の問題に取り組む何処の最高の研究者に対しても競争力がある。分子環境と励起子ダイナミクスの結合を完全に説明しようとする最近の仕事は，彼の研究分野において考えられる進展の点で良い方向性である。緑色植物における励起子分離に関する彼の最新の仕事は，生物系と合成材料系の間の重要な接点を期待させるエキサイティングな領域であり，比較的未開発な側面である。

鹿野豊特任准教授：

私自身もコヒーレントな量子ダイナミクスの分野で研究していたので，鹿野特任准教授が主に興味を持っている物理学の研究スタイルに比較的精通している。モデル・ハミルトニアンの量子ダイナミクスを詳細に解析することにより，基礎物理学の深い洞察が得られる。しかし，私の見解では，それは分子科学の現在の中心的興味から大きく離れている。したがって，彼の仕事は広範な科学の分野において非常に価値の高いものではあるが，彼の貢献は理論・計算分子科学研究領域における他の研究者とそれほど関連していない。この意見は，鹿野特任准教授を含む関係者全員が受け入れているようである。今回のレビューにおいて，彼がまもなく分子研の理論グループを離れ，東京大学の物理に赴任することを聞かされた。このことは彼にとって大変良い発展的な異動であり，この転出は国内で影響力のある才能ある人材を輩出していくという分子研の役目でもある。

以下のコメントは今回の訪問で初めて会った理論研究者に関するものであることを強調したい。

藤田貴敏特任准教授：

藤田特任准教授は，有機半導体を含む分子集合体の光電子特性予測のための計算手法を使いこなす非常に熟練した若手研究者である。彼の行なっている研究は第一級の質の高いものである。彼の仕事は優れており国際競争力も確かに高いのではあるが，彼が取り組んでいる問題は主に光捕集系であり，多くのシニア研究者の研究分野そのものである。分子科学研究所において彼自身の研究を確立した後，合成分子系の設計などの彼自身を際立たせる問題に目を向けることを期待している。それは彼の影響力や評判の向上に繋がるであろう。

岡崎圭一特任准教授：

岡崎特任准教授は，非常に複雑な生体分子系のメカニズムに取り組むための最先端の方法論を用いている。彼は世界最高のトレーニングを受けており，生物物理学の最先端の問題に幾つか取り組んでいる。それぞれが研究する価値の高いものであり，研究者が新規に参入する余地が十分にある。分子機械の分野における仕事はホットな領域であり，彼の粗視化モデルは巧く体系化されている。一分子実験データの理解に関する仕事は，この分野を先導する実験研究者と共に研究をする上で不可欠なものである。タンパク質による膜変形に関する仕事はとくに選りすぐりのものであり独創的なものである。この分野に個人的な成長と科学への国際的なインパクトの両方にとって最高の機会があると確信している。

最後に，私の研究に関する個人的な興味で，二人の実験研究者に会った。

平本昌宏教授（物質分子科学研究領域）：

平本教授が取り組んでいるプラスティック太陽電池のための有機半導体材料のドーピングに関する仕事に興味を掻き立てられた。これは従来の（例えばシリコンベースの）半導体の最も本質的な側面であるが，有機物では得難いと考えられていた現象である。彼の研究は，ドーピングが効率よく実行できることを明確に示している。この実験研究は広範かつ慎重に遂行されており，非常に独創的である。非常に興味深く，将来の実用化に実質的な価値をもつ可能性がある。

解良聡教授（光分子科学研究領域）：

解良教授の光電子分光法を用いて有機膜を理解する研究は最先端を行くものである。このアプローチは，分子界面の非常に詳細な電子分布を明らかにすることができる。分子－表面相互作用，その結果として起こる電子構造への影響，表面上の特定の分子構造の特徴を描き出そうとする彼の取り組みは，光電子分光法によって定量的かつ決定的に解を与え得る特定の問題に非常に上手くフォーカスされている。彼の仕事はグローバルなコミュニティと比較しても遜色がなく，非常に活発な分子膜の材料分野で重要な洞察を提供している。

7-2　UVSOR 施設の点検評価

現在，UVSOR 施設では，アンジュレータビームラインを中心に光吸収分光と光電子分光を２本柱にして重点化が行われており，一線級の海外研究者の利用が増加している。海外の最先端光源ではそれぞれの分光法に対して顕微分光化が進んでいる。顕微分光では一般的には試料損傷の問題が深刻化するが，光吸収分光と光電子分光の顕微分光化にはいろんな方法があり，UVSOR 施設に適したものを選択しなければならない。すでに UVSOR 施設では，透過吸収法の光吸収分光においてμスケール（集光素子なし）とナノスケール（Fresnel Zone Plate を使って集光）の顕微分光が, 光電子分光においてμスケール（集光ミラーを使う）の顕微分光がそれぞれ実現しており, 残る課題はナノスケールの光電子顕微鏡である。現在，UVSOR に設置している種々の光電子分光装置の位置付けを見直しつつ，ナノスケールの光電子顕微鏡を含めた全体的な方向性について，外部専門家による評価を行った。以下はそのレポートである。

UVSOR 施設における光電子分光分野を中心とした評価報告書

ドイツ・ユーリッヒ研究センター
客員教授　菅　滋正

2016 年 11 月８日に UVSOR 全ビームライン見学後 , 田中清尚，解良，山根３氏より２時間半にわたり研究活動の現状についての説明を受けた。またその後，施設長の小杉氏より補足説明を受けた。

光源リングは 2004 年，さらには 2012 年の性能向上により着実に進歩して来ている。10 年前の評価で勧告した１）挿入光源の充実，２）トップアップ運転　については期待通り実施されてきており利用研究者にとっては大きなメリットになったと思われる。また，ビームラインによっては他施設の整備等による利用研究者の減少等により老朽化対策をせずシャットダウンをしているが，このことは妥当な判断と思われる。他の放射光施設で容易に出来る実験を UVSOR でもやらなければならないと言う必然性はない。ただ，中部地区の利用者にとっては時間をかけて他の地域の放射光施設に出かけて実験しなければならないという時間ロスを生じない程度の標準実験を可能にするビームラインは維持費の問題がなければ１, ２本程度残しておくことは許容範囲であろう。

一方でビームラインや実験装置の性能向上に伴い外国人研究者や優れた国内共同利用研究が増大しているビームラインや実験装置も複数あり，研究の activity は着実に向上して来ていると思われる。当面は，①最終段の実験装置をさらに如何に性能向上させるか，②如何に active な研究者を内部で育てるか，③外部から呼び込むか，が最重要な課題である。

偏向部放射光については，ビームラインは限られるが，更に広い層の利用者に使ってもらうという方向は妥当である。また radiation damage の大きな試料を偏向部放射光で測定すると言うのも妥当である。

本評価では以上の理解に立って，主にアンジュレーターを用いたビームラインの現在の研究ならびに今後の研究方向について言及したい。

小杉グループの山根氏の説明によって BL6U が気相関連と固体関連とで半々程度の利用の現状であると言う点はバランスが取れていると思われる。また共同研究を含んで所内グループが直接関与するビームタイムが約 1/2，その他の外部利用が 1/2 と言うのは妥当と考える。SPring-8 の一般ビームライン等を見ると所内グループの利用できる時間があまりに短かすぎて所内研究者の士気が低下しているが，UVSOR のこのビームラインはこの点では理想に近いと思われる。有機分子を基板上に成長させた際の基板との相互作用や表面分子間の相互作用の詳細が解明されつつあり

極めて興味深い実験が発展中と評価できる。ビームラインも 60 から 400 eV を 1 万分の一のエネルギー分解能でカバーできているようであり，今後も多様な分子系や分子と基板の相互作用など興味深い実験データーが継続的に得られると期待出来る。電子状態の波数依存性など高い分解能を要すると思われるので，radiation damage の無い範囲で，エネルギーと波数分解能についてより高精度の実現を目指すことが期待される。

解良グループの研究については多くは実験室光源で行われており，UVSOR 利用は外部利用者と対等の立場でのビームタイム配分と理解した。有機半導体等を研究対象としているために radiation damage や charge up 効果が深刻な場合があり，励起光強度を抑えて実験が要請されることもあるとのことである。一方で分子内振動等を検出するために高い分解能等も要請されるとのことであり，これらの実現のためには２次元波数空間での ARPES の必要性も高い。そのために取り込み角度の大きな slit を用いた静電半球型電子エネルギー分析器を用いることが望まれるが，これらの問題を全て解決できる手法は，現状ではドイツ Max-Planck- 微細構造物理学研究所で開発された Momentum Microscope しか無いように思われる。radiation damage を避けるために試料上の照射域を常時動かす方法は場所的な不均一性がある試料には適用することは出来ないので，ミクロ分光には不適であろう。

田中清尚氏のビームライン全体説明は全貌理解に役立った。中でも詳細に現状報告された BL5U で行われている ARPES の高度化は，試料を回転することなくレンズパラメタを電子的に振ることで，或る E_K の電子に対する $I(k_x,k_y)$ 分布を波数空間のかなり広い範囲で測定できる手法であり，ミクロナノ分光にも適用できる手法である。ただしアナライザー軸やスリットに対する試料位置に対して $I(k_x,k_y)$ 分布の homogeneity が激変するようであり，この点を大幅に改善しないと精度高い２次元 ARPES は遂行が難しいと思われる。また近い将来，Fe–O スピン検出器を用いた SP-2D-ARPES が構想されているとのことであるが，スリット方向の角度範囲のみならずレンズ電場でスキャンするスリットに垂直方向の角度範囲にも制限があること，45 度反射でスピン検出するための電子入射エネルギーは 3 eV 程度と小さくなること，さらに 45 度と直交の方向での電子のスピン検出器への入射角の変化などを考慮すると即精度高いスピン計測は難しく，事前に確かめなければならないファクターがいくつかある。この手法は SP-2D-Momentum Microscope での計測が本質的にできない試料に有望な SP-ARPES 手法である。

全体として先端研究に対応できるビームラインと実験装置は確実に整備されてきてはいるが，UVSOR-III あるいは将来の -IV で世界を先導するような研究を目指すことを考えれば，目を外国（特にドイツ）に向けて革新的な手法の導入をかんがえることが焦眉の急と思われる。このためには，内部研究者・技術者と国内外の研究者との友好協力により数年以内に世界のフロンティアに立てる実験装置の整備が行われることが望まれる。その意味で内部 staff をある程度の期間（可能であれば半年以上），海外の革新的手法を開発している現場に派遣し know how を共同研究の形で学んでくることも好ましい方策と思われる。

以上。

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。2017年4月には，分子制御レーザー開発研究センターを改組し，新たな計測手法を追求する新しい研究センターとして「メゾスコピック計測研究センター」が発足する。

（川合眞紀）

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，電子ビームエネルギーが 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 UVSOR-II となった。さらに，2012 年には，光源加速器で唯一手つかずであった偏向電磁石をビーム収束機能を有する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 27 nm-rad から 15 nm-rad 程度まで下げることに成功した。この UVSOR-III への改造に合わせて，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という最先端光源施設が完成した。

光源加速器の高度化は UVSOR-III で一段落し，現在，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している。一方，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，海外から第一線の研究者が利用に来るような競争力のあるアンジュレータビームライン６本を中心に計画的に重点整備を進めている。このうち２本の可変偏光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。

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，文部科学省の委託研究として進め，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・真空紫外光の利用実験に向けて研究を進めている。その一方で UVSOR-III の次に来るべき次期光源計画の検討を行っている。様々な可能性が考えられ，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，最適なものを選択して実現させる必要がある。その可能性のひとつである，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については，リング型光源と相補的な光源となりうること，既存加速器を運用しつつ整備を進めることができること，現在進めている光発生技術を活かせられること，などの利点がある。今後も引き続き様々な可能性を検討する。

放射光利用研究に関して，老朽化の進んでいる一部のビームラインは整理統合の可能性を排除せず，更新・高度化を段階的に実施する。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，2017 年度中にはすべての機能が完成する見込みである。また，世界的には顕微光電子分光技術に大きな進展が見られ，UVSOR の光源性能をフルに生かせる新技術の導入に向けて技術開発力に優れた人材（従来の准教授・助教に加え，新たな制度に基づく主任研究員）と予算を確保すべく種々の方策を検討している。その方向性について 2016 年 11 月８日に専門家による外部評価を実施し，妥当であるとの評価結果を得た（第７章に掲載）。また，2017 年２月 14 日開催の UVSOR 施設運営委員会でも以下のような意見が出された。

- 海外の最先端放射光施設の研究者からも利用の要望がある等，現在の UVSOR は国際的に見ても需要を増しており，存在感も高まっている。
- 2012 年稼働の UVSOR-III は，2022 年までの 10 年間，現状の方向性での運用が適当と考えられる。
- 長期計画については，2022 年から始まる第４期中期計画に向けて早めに検討を進める必要がある。
- 国内では現在，新規提案中の計画も含めて施設間の住み分けをコミュニティ全体で考えなければならないフェーズに入っている。
- 今後は施設間競争だけではなく連携も重要である。大学共同利用機関同士の連携については見える形にしていくことが必要ではないか。
- UVSOR から国内他施設への人材輩出等，研究以外でも実績のある UVSOR の存在意義は今後も大きい。

これらを参考にしながら，今後も UVSOR の光源及びビームラインの性能を世界最高水準に維持し国際的に見て先導的な研究成果を挙げていくため，より具体的に将来計画の策定と実現に取り組んでいく。

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６名（秋山教授，山本教授，古賀准教授，鈴木准教授，鹿野特任准教授，小林特任准教授），併任PIが６名（斉藤教授，青野教授，加藤教授，飯野教授，古谷准教授，正岡准教授）の計12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。

2016年度の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，ヒドリドイオン導電体の発見と電解質材料への応用に関する研究（小林グループ）が科学雑誌「*Science*」に掲載された。その他，同部門の秋山グループや機能分子システム創成研究部門の山本グループからは，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，その一部は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。この視点からは，光を用いた計測法のみならず，他の分子計測法も相補的に取り込んでいく必要も出てきうると考えられる。このような構想で予算獲得に向け組織再編を伴う概算要求の案を取りまとめて提出した結果，平成 29 年度からの予算措置が今般認められた。これにより，分子制御レーザー開発研究センターは，上述のような新たな計測手法を追求する新しいセンター（仮称：メゾスコピック計測研究センター）として再編を予定することとなった。

8-3-2　共同研究の状況

平成 28 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多結晶体の配向制御，透明化を進め，次世代高強度レーザーとして期待の高い Yb:FAP レーザーの作成を試みている。そして最近，その初めての作成とジャイアントパルス発生に成功した。現在，論文の準備中である。

2)「赤外フェムト秒パルスレーザーの開発」

2 μm を発振波長としたフェムト秒パルスレーザーを利用した中赤外およびテラヘルツ波発生の研究を，ウィーン工科大学，香川大学と共同で進めている。前年度までに，2 μm のフェムト秒パルスを増幅するシステムを開発した。今年度は，その出力を光ファイバに入射し，2–10 μm までの広帯域なスペクトルを持った中赤外光パルスを発生することに成功した。研究成果の一部は国際会議で発表し，論文を投稿中である。

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），教授（併任）１名，専任技術職員６名，事務支援員１名，技術支援員２名が配置されている。また前述の２事業として，事務支援員６名，研究員３名（マネージャ，コーディネータを含む）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，「ナノテクノロジーネットワーク事業（2011年度にて終了）」で運営されてきた920 MHz NMR（2016年度にて利用停止）および高分解能電子顕微鏡（2015年度にて利用停止），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機器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。

所外委員５名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，最近では年間200件程度の所外利用グループがあり，共同利用機関としての責務は十分に果たしている。さらに前述の２事業を推進しつつ大学利用共同機関法人としての寄与をより明確にすべきであろう。一方で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15年以上経過し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。2016年度は12年間運転してきた920

MHz NMR 装置の停止を決定した。国際的な競争力は無くなり，もはや維持費が嵩むだけの設備と判断した。これにより運営予算における経費圧迫が緩和され，能動的に更新プランを遂行することが可能となった。次年度以降，さしあたりX線回折装置の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が，2017 年度より施行される主任研究員制度の活用も検討したい。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 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 件超に及ぶ。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。2016 年度からは，開発要素の大きな依頼は「協力研究」として受入れることとした。また，対価との交換がふさわしいような事例では，MTA 契約を締結して広く所外からのニーズに応えられるように対応している。

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。今後の世代交代を見すえて，2016 年度は特任専門員を２名採用したほか，装置開発室の価値観を共有するためのミッション・ステートメントを定めた。

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，人材育成等に取り組んでいる。2016 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。

2017 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。後者においては，2015 年１月に最新の CPU に更新している。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 136,758 件のデータが収録されている。

共同利用に関しては，2016 年度は 231 研究グループにより，総数 787 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ポスト「京」開発事業（フラッグシップ 2020 プロジェクト）において，ポスト「京」を用いて重点的に取り組むべき社会的･科学的課題（重点課題）のうち，とくにナノサイエンスに関わるアプリケーション開発「（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」において重要な役割の一端を担っている。また，同重点課題である「（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」，および科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業「計算物質科学人材育成コンソーシアム」とも連携を行っており，2016 年度はこれら３つのプロジェクトに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「これまでの理論･計算科学を振り返り今後を展望する」と２つのウィンタースクール「第６回量子化学スクール～基礎理論と複雑分子系の理論～」と「第 10 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 28 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　歴代所長

初　代　赤　松　秀　雄（1975.4.22 ～ 1981.3.31）
第二代　長　倉　三　郎（1981.4.1 ～ 1987.3.31）
第三代　井　口　洋　夫（1987.4.1 ～ 1993.3.31）
第四代　伊　藤　光　男（1993.4.1 ～ 1999.3.31）
第五代　茅　　幸　二（1999.4.1 ～ 2004.3.31）
第六代　中　村　宏　樹（2004.4.1 ～ 2010.3.31）
第七代　大　峯　　巖（2010.4.1 ～ 2016.3.31）
第八代　川　合　眞　紀（2016.4.1 ～　　）

9-2　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			○

9-3　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　昇	(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												○

9-4　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	2016. 4.1 ～ 2017.3.31
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				○	○	
菊池　昇　豊田中央研究所代表取締役						○
畫間　明　浜松ホトニクス代表取締役社長						○
瀧川　仁　東京大学物性研究所長						○
松本　吉泰　京都大学教授						○

9-5　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

9-6　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 ～ '17.3.31
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							○

9-7　運営に関する委員会委員（1975 ～ 1981）

氏　名・所　属（当　時）	'75.7.15 ～ '77.3.31	'77.4.1 ～ '78.3.31	'78.4.1 ～ '79.3.31	'79.4.1 ～ '80.3.31	'80.4.1 ～ '81.3.31
浅原　照三　芝浦工大工教授	○	○			
伊藤　光男　東北大理教授	○				
井口　洋夫　分子研教授	○	○	○	○	○
大野　公男　北大理教授	○	○	○	○	○
角戸　正夫　阪大蛋白研所長	○	○	○		
神田　慶也　九大理教授	○	○（理学部長）	○（~'78.11.7）		
朽津　耕三　東大理教授	○			○	
田中　郁三　東工大理学部長	○			○（教授）	
坪村　　宏　阪大基礎工教授	○				
豊沢　　豊　東大物性研教授	○	○			
長倉　三郎　東大物性研教授	○	○	○	○	
中島　　威　東北大理教授	○	○	○		
細矢　治夫　お茶水大理助教授	○			○	○
又賀　昇　阪大基礎工教授	○				
村田　好正　学習院大理教授	○	○（東大物性研助教授）	○	○	
山寺　秀雄　名大理教授	○				
吉田　善一　京大工教授	○				
和田　昭充　東大理教授	○	○			
廣田　榮治　分子研教授		○（委員長）	○（委員長）	○（委員長）	○（委員長）
伊東　　椒　東北大理教授		○	○		
大木　道則　東大理教授		○	○		
大瀧　仁志　東工大総合工研教授		○	○		
馬場　宏明　北大応用電研教授		○	○		
福井　謙一　京大工教授		○	○	○	
齋藤　喜彦　東大理教授		○		○	○
諸熊　奎治　分子研教授		○	○	○	
吉原經太郎　分子研教授		○			
霜田　光一　東大理教授			○	○	
武内　次夫　豊橋技科大教授			○	○	
山本　常信　京大理教授			○	○	
岩村　　秀　分子研教授			○		
坂田　忠良　分子研助教授			○		
木下　　実　東大物性研助教授				○	
黒田　晴雄　東大理教授				○	○
山下　雄也　名大工教授				○	○
高谷　秀正　分子研助教授				○	
花崎　一郎　分子研教授				○	○
安積　　徹　東北大理助教授					○
志田　忠正　京大理助教授					○
鈴木　　洋　上智大理工教授					○
伊達　宗行　阪大理教授					○
田仲　二郎　名大理教授					○
千原　秀昭　阪大理教授					○
土屋　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					○

9-8　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　昌一	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		
簇野　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										○	○	○
〓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　恵子	千葉大院自然科学教授												○
岡本　裕巳	分子研教授												○人
加藤　隆子	核融合科学研教授												○

9-9　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	第 7 期 2016. 4. 1 ～ 2018. 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	◎人
小杉　信博 分子研教授	○人	○	○人	◎人･共	◎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				
斉藤　真司 分子研教授				○人	○人	○人	○共
大島　康裕 分子研教授				○	○人	○	
魚住　泰広 分子研教授				○共	○人･共	○人･共	○共
青野　重利 分子研教授(岡崎統合バイオ)				○人･共	○人･共	○共	○共
加藤　晃一 分子研教授(岡崎統合バイオ)					○	○人	○人
加藤　政博 分子研教授					○		
山本　浩史 分子研教授					○	○人	○人
秋山　修志 分子研教授						○	○人
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	第 7 期 2016. 4. 1 ～ 2018. 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	○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	○人
森　　初果 東大物性研教授						○人	○人
有賀　哲也 京大院理教授							○(副)人
米田　忠弘 東北大多元研教授							○
高原　　淳 九大先導研教授							○
西原　　寛 東大院理教授							○人
山口　茂弘 名大トランス研教授							○人
解良　　聡 分子研教授							○人

9-10　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><th 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</th><th rowspan="2">該当する職</th><th rowspan="2">分子研規則による種別</th><th rowspan="2">任　期</th><th colspan="2">任期更新に関する事項</th></tr>
<tr><th>可　否</th><th>任　期</th></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>

9-11　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。

9-12　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。

9-13　大学共同利用機関法人自然科学研究機構中期目標(第三期,平成 28 ～ 34 年度)

(前文) 研究機構の基本的な目標

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，宇宙，エネルギー，物質，生命等に関わる自然科学分野の拠点的研究機関を設置・運営することにより国際的・先導的な研究を進めるとともに，本機構が設置する各大学共同利用機関（以下「各機関」という。）の特色を活かしながら，更に各々の分野を超え，広範な自然の構造と機能の解明に取り組み，自然科学の新たな展開を目指して新しい学問分野の創出とその発展を図るとともに，若手研究者の育成に努める。また，大学共同利用機関としての特性を活かし，大学等との連携の下，我が国の大学の自然科学分野を中心とした研究力強化を図る。これらのミッションを踏まえ，特に第３期中期目標期間においては，機構長のリーダーシップの下，以下の組織改革及び研究システム改革を通じて，機能強化を強力に推進する。

組織改革については，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行う新分野創成センターの組織再編，既存機関とは独立した国際的研究拠点の創設，研究基盤戦略会議における機能強化の方針及び資源再配分等の組織改革の方針に基づく教育研究組織の再編等を行う。

研究システム改革については，本機構の行う公募型の共同利用・共同研究の申請から審査・採択，成果報告・分析までを統合的に管理するシステム（自然科学共同利用・共同研究統括システム）を整備して，それらの成果の分析評価を行うとともに，本機構と各大学との緊密な連携体制の下で,大学の各分野の機能強化に貢献する新たな仕組み（自然科学大学間連携推進機構）を構築する。また，柔軟な雇用制度（多様な年俸制，混合給与）の導入等の人事・給与システム改革を通じて若手研究者の育成，女性研究者の支援，外国人研究者の招へいに取り組む。

これら２つの改革を着実に推進するため，本機構の IR（Institutional Research）機能を整備するとともに，これら第３期中期目標期間における特色ある改革の問題点や課題を，内部的に自己点検を実施し，それを受けて改革の効果について外部評価を受ける。また，研究活動における不正行為及び研究費の不正使用等のコンプライアンスの諸課題についても機構全体で包括的かつ横断的に取り組む。

◆　中期目標の期間及び教育研究組織

１　中期目標の期間

平成 28 年４月１日から平成 34 年３月 31 日までの６年間とする。

２　大学共同利用機関

本機構に，以下の大学共同利用機関を置く。

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

Ⅰ　研究機構の教育研究等の質の向上に関する目標

１　研究に関する目標

（１）　研究水準及び研究の成果等に関する目標

本機構は，天文学，核融合科学，物質科学，生命科学等の自然科学分野の学術研究を積極的に推進するとともに，各分野間の連携を図り，優れた研究成果を上げる。

天文学分野では，太陽系からビッグバン宇宙までを研究対象として，国内外の大型研究基盤施設及び設備の建設・運用を行い，これらを大学等の研究者の共同利用に供することにより，我が国の観測天文学，シミュレーション研究，理論天文学を牽引し，人類が未だ認識していない宇宙の未知の領域を開拓する。

国内の研究拠点のほか，アメリカ合衆国に設置したハワイ観測所，チリ共和国に設置したチリ観測所においても業務運営を円滑に実施する。また，日米中印加による国際共同科学事業である 30m 光学赤外線望遠鏡（TMT）計画のメンバー機関として，アメリカ合衆国ハワイ州において建設を推進する。

核融合科学分野では，我が国における核融合科学研究の中核的研究拠点として，大学や研究機関とともに核融合科学及び関連理工学の学術的体系化と発展を図る。環境安全性に優れた制御熱核融合の実現に向けて，大型の実験装置や計算機を用いた共同研究から，国際協力による核融合燃焼実験への支援までを含む日本全体の当該研究を推進する。

基礎生物学分野では，遺伝子・細胞・組織・個体の多階層における独創的な研究や研究技術・手法の開発を推進することにより，生物現象の基本原理に関する統合的理解を深め，国内生物学コミュニティを先導し，基礎生物学分野の発展に寄与する。

生理学分野では，分子から細胞，組織，システム，個体にわたる各レベルにおいて先導的な研究をするとともに，各レベルを有機的に統合し，ヒトの機能とその仕組み，更にその病態の解明に寄与する。

分子科学分野では，物質・材料の基本となる分子及び分子集合体の構造，機能，反応に関して，原子・分子及び電子のレベルにおいて究明することにより，化学現象の一般的法則を構築し，新たな現象や機能を予測，実現する。

（２）　研究実施体制等に関する目標

国際的かつ先端的な学術研究を持続的に推進するため，十分な研究体制を確保する。

２　共同利用・共同研究に関する目標

（１）　共同利用・共同研究の内容・水準に関する目標

本機構は，各専門分野を先導する国際的学術拠点として，国内外の研究者との共同利用・共同研究を抜本的に強化し，優れた研究成果を上げる。

（２）　共同利用・共同研究の実施体制等に関する目標

共同利用・共同研究機能の強化のため，研究者コミュニティ及び各大学等の要請に対応し得る柔軟な体制を構築する。

３　教育に関する目標

（１）　大学院等への教育協力に関する目標

自然科学分野において国際的に通用する高度な研究的資質を持ち，広い視野を備えた研究者を育成するため，総合研究大学院大学（以下「総研大」という。）との一体的連係及びその他の大学との多様な連携によって，本機構の高度の人材・研究環境を活かして，特色ある大学院教育を実施する。

（２）　人材育成に関する目標

自然科学分野において優れた研究成果を生み出せる大学院生を含む若手研究者の養成を行う。特に，総研大との一体的連係及びその他の大学との多様な連携による大学院教育によって，新しい学術的分野の問題を発掘及び解決できる人材の育成を行い，社会の要請に応える。

4　社会との連携及び社会貢献に関する目標
国民の科学に対する関心を高めるとともに，最先端の研究成果を社会に還元する。

5　その他の目標
（1）　グローバル化に関する目標
我が国の代表的な自然科学分野の国際的頭脳循環のハブとして，人材交流を含む国際間の多様な研究交流を推進する。
（2）　大学共同利用機関法人間の連携に関する目標
４大学共同利用機関法人は，互いの適切な連携により，より高度な法人運営を推進する。

II　業務運営の改善及び効率化に関する目標
1　組織運営の改善に関する目標
機構長のリーダーシップの下で，機構本部及び各機関間の連携により，機構として戦略的かつ一体的な運営を推進する。

2　教育研究組織の見直しに関する目標
新たな学問分野の創出，共同利用・共同研究機能の向上の観点から，各機関等の研究組織を見直し，必要な体制整備，組織再編等を行う。

3　事務等の効率化・合理化に関する目標
機構における事務組織について，事務局機能の強化を図るとともに，事務局と各機関間の一層の連携強化により，効率的な体制を構築する。

III　財務内容の改善に関する目標
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
外部研究資金その他の自己収入の効果的な確保と増加を図るための基盤を強化する。

2　経費の抑制に関する目標
適切な財政基盤の確立の観点から，業務・管理運営等の見直しを行い，効率的かつ効果的な予算執行を行う。

3　資産の運用管理の改善に関する目標
資産の効率的かつ効果的な運用管理を行う。

IV　自己点検・評価及び当該状況に係る情報の提供に関する目標
1　評価の充実に関する目標
国際的に優れた研究成果を上げるため，研究体制，共同利用・共同研究体制や業務運営体制について，様々な機構外の者の意見を反映させ，適宜，見直し，改善・強化するために自己点検，外部評価等を充実する。

2　情報公開や情報発信等の推進に関する目標
本機構の実情や果たしている機能，運営内容や研究活動について，広く国内外に分かりやすい形で示すように適切かつ積極的に情報公開や情報発信を行う。

V　その他業務運営に関する重要目標
1　施設設備の整備・活用等に関する目標
本機構の施設設備に係る基本方針及び長期的な構想に基づき，キャンパスマスタープランの充実を図り，既存施設の有効活用や計画的な維持管理を含めた効率的かつ効果的な施設マネジメントを行う。

2　安全管理に関する目標
事故及び災害を未然に防止するため，広く安全管理・危機管理体制の強化を図り，役職員の意識向上を通じた安全文化の醸成に取り組む。また，職員の健康を増進することにより，快適な職場環境創りに積極的に取り組むとともに，情報セキュリティポリシーに基づき，適切な情報セキュリティ対策を行う。

3　法令遵守等に関する目標
研究不正の防止，研究費不正の防止に係る管理責任体制の整備を図るとともに，研究者倫理に関する研修等の充実により，法令遵守を徹底する。

9-14　大学共同利用機関法人自然科学研究機構中期計画(第三期, 平成 28 ～ 34 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】
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。【2】
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】

各分野の特記事項を以下に示す。

（国立天文台）
① すばる望遠鏡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】
② 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】
③ 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】
④ 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】
⑤ 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】
⑥ 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】

（核融合科学研究所）
① 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】
② 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】
③ 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】

（基礎生物学研究所）
① 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】
② 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】
③ 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】

（生理学研究所）
① 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】

② 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】
③ 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】

（分子科学研究所）
① 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】
② 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】
③ 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】

（2）研究実施体制等に関する目標を達成するための措置
① 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】
② 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】
③ 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。【24】

２　共同利用・共同研究に関する目標を達成するための措置
（1）共同利用・共同研究の内容・水準に関する目標を達成するための措置
① 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。【25】
② 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】
③ 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】

各分野の特記事項を以下に示す。

（国立天文台）
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】

（核融合科学研究所）
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】

（基礎生物学研究所）
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】

（生理研究所）
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】

（分子科学研究所）
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】

（分野連携型センター）
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】

（２）共同利用・共同研究の実施体制等に関する目標を達成するための措置
① 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。【34】
② 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】

３　教育に関する目標を達成するための措置
（１）大学院等への教育協力に関する目標を達成するための措置
① 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】
② 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】

（２）人材育成に関する目標を達成するための措置
① 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】
② 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】
③ 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】

４　社会との連携及び社会貢献に関する目標を達成するための措置
① 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】
② 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】
③ 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】

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
① 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】

② 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】
③ 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】
④ 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】
⑤ 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】
⑥ 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】

（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
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】

Ⅱ　業務運営の改善及び効率化に関する目標を達成するためにとるべき措置

１　組織運営の改善に関する目標を達成するための措置
① 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】
② 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】
③ 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】
④ 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】
⑤ 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】
⑥ 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】
⑦ 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】
⑧ 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】

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
① 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】
② 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】

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
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】

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
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】

２　経費の抑制に関する目標を達成するための措置
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】

３　資産の運用管理の改善に関する目標を達成するための措置
① 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】
② 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】

Ⅳ　自己点検・評価及び当該状況に係る情報の提供に関する目標を達成するためにとるべき措置

１　評価の充実に関する目標を達成するための措置

① 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】

② 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】

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

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】

Ⅴ　その他業務運営に関する重要目標を達成するためにとるべき措置

１　施設設備の整備・活用等に関する目標を達成するための措置

① 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】

② 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】

③ 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】

２　安全管理に関する目標を達成するための措置

① 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】

② 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】

③ 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】

３　法令遵守等に関する目標を達成するための措置

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毎年度実施する。【75】

② 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】

9-15　大学共同利用機関法人自然科学研究機構年度計画（平成 29 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（５年計画の５年目）。具体的には平成 27 年度に実施した中間自己評価の結果を踏まえ，４つの柱として掲げた①国際的先端研究の推進支援，②国内の共同利用・共同研究の推進支援，③国内外への情報発信・広報力強化，④若手・女性・外国人研究者の支援，及び当機構主催の「大学研究力強化ネットワーク」活動に引き続き取り組む。

【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】世界的にも第一人者である招へい外国人研究者とともに系外・系内惑星大気の観測・分析および異なる環境下での光合成反応の研究に取り組む。連携については当該外国人研究者を窓口に新たな外国人研究者との人材交流，センター若手研究者の海外研究所，観測所，国際研究会への派遣を引き続き行い，連携基盤を形成し，宇宙生命探査の国際的研究拠点への足掛かりとする。

・【2–2】系外惑星および宇宙生命のための連携拠点を大学に設け，NASA アストロバイオロジー研究所，新たにワシントン大学，アリゾナ大学とも連携した国際的研究拠点形成を引き続き進める。

【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ける探査活動を継続するとともに，萌芽的分野の認定及びその支援を行う。

・【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】機関間連携を拡充したネットワーク型研究加速事業による共同研究を推進するとともに，若手研究者による分野間連携研究プロジェクトに取り組む。

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。HSC の戦略枠プログラム等のデータ解析・配信については引き続き天文データセンターとハワイ観測所が協力して行う。また，すばる望遠鏡の特長を活かす，超広視野主焦点分光器（PFS）については，装置受け入れのための望遠鏡・ドームの改修を進め，装置部品の搬入を開始する。運用に向けて国内外の研究機関と協力してソフトウェア等の検討開発も行う。
さらに，すばる望遠鏡の国際共同運用に向けて海外機関との協議を進める。その一環として，豪州との短期的協力プログラムを先行させ，望遠鏡の性能向上に向けた技術協力と資金提供を受け，年間 10 夜のすばる望遠鏡の観測時間を提供する協定を締結する。

【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。日本の国際貢献分に応じて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，アルマのさらなる機能拡張のための基礎開発として，新規受信機の国際共同研究開発を進める。東アジアアルマ地域センターと天文データセンターの協力のもと，アルマ望遠鏡のデータ解析のための利用者への環境を維持する。

【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を 30 枚以上，製作及び研磨加工する。TMT の建設を担う TMT 国際天文台の共通経費を分担し，現地建設作業開始に向けた準備を進めるとともに，望遠鏡本体構造及び観測装置・科学研究の検討，国際協力のもとでの大学共同利用・共同研究の構築の準備を進める。

【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の初期性能をグレードアップさせる「bKAGRA」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】bKAGRA のインストール作業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完成させる。

・【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て開発した周波数分離膜を 45m 鏡へ新たに搭載し，２周波（22/43 GHz）同時観測機能を追加するための試験を実施する。

【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】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，詳細な仕様の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）の観測成立性とサイエンス検討を実施する。
・【8–3】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，他の飛翔体・地上設備との共同観測・共同研究を奨励して，太陽活動現象・周期活動に関する新たな研究成果を得る。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，国際協力体制の構築に努めながら，計画実現の多様な可能性について検討を行う。
【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】引き続き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。また，２年に一度開催予定の東アジア天文学若手の会（EAYAM）を EACOA 加盟機関と協力して石垣島天文台が主体となって開催する。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。さらに，将来を見据えて野辺山 45m 鏡の遠隔観測試験を韓国および台湾から実施する。

（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，平成 28 年度末に開始した重水素実験を着実に実施し，軽水素実験からの移行期の基礎データを取得する。特にプラズマ性能と発生中性子量，トリチウム回収率等の関係を整理して，今後の実験計画の策定に不可欠なデータベースを構築する。また，重水素実験の開始に合わせて高性能化した閉構造ダイバータの性能評価を行うとともに，重水素実験初期段階における閉じ込め特性の評価を行う。
【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，①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群や使用する物理モデル群の整備・拡張，②不純物や中性粒子を含む複数コードの結合による周辺プラズマ輸送解析の進展，③重水素実験の開始に伴い実験グループとの連携による水素同位体効果等の解析の進展，④統合輸送コード（task3D）への組込みを目指した乱流輸送モデルの拡張，を図る。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】平成 28 年度にまとめたヘリカル路の概念設計で挙げられたヘリカル炉の各開発課題の数値目標を基に，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」を用いたダイバータ用溶融塩冷却材による流路壁材への腐食評価と水素回収評価，③バナジウム合金など低放射化高性能材料の改良と加工性評価，④超高熱流機器の高性能化と寿命評価，⑤高効率粒子排気処理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引き続き促進する。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の検討を加速する。

（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・増殖機構，発生現象を司るメカニズム，新規で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，遺伝子の機能，細胞のふるまい，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，新型 DNA シーケンサーによる大規模遺伝子解析，バイオインフォマティクスなどの最先端研究手法を用いることによって，定量的かつ統合的な生命現象の解析を行う。
【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関して，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とともに，得られた知見について情報発信を開始する。
【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】研究デザインの助言から観察機器や画像取得・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，国内研究者の支援を推進するとともに，国外バイオイメージングネットワークとの連携を強化する。

（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，シナプス可塑性に関するメカニズム，脱髄の病態メカニズム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，心筋分化に関わる分子基盤，膜タンパク質による外分泌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，素材認知における多角的情報処理機構，脳内体部位局在ネットワークについて，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，走査電子顕微鏡による連続超薄切片からの３次元微細構造・回路再構築技術や，新規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。特に，7テスラ超高磁場 MRI の共同利用の促進，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引き続き進めるとともに非ヒト霊長類の撮像コイルの開発に着手する。

（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】量子力学，統計力学，電子状態計算，分子シミュレーション等の理論･計算科学的研究により，小分子系から生体分子，機能性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・反応・性質とその起源を解明する。また，生命システムの高次機能と階層構造の関係を解析し，生体分子複合体による反応系や自在にタンパク質の立体構造をデザインする技術の開発を行う。
【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，高密度・極低温原子集団における強相関多体ダイナミクスの研究を推進し，また，ナノ構造物質の特異な性質に関わる局所分光特性の研究を展開するとともに，光操作の実験研究を開始する。放射光分光による超伝導物質，有機分子積層膜，溶液，固液界面などの局所電子構造の研究を進める。また協奏分子システム研究センターおよび生命・錯体分子科学研究領域と連携し，先端的分光学手法とシミュレーションを駆使して，生体関連物質や超分子構造体の高次構造・動態および金属錯体の配位構造解析を実践することで，分子複合体の機能発現学理を探究する。
【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，さらには機能解析のための新規分光学的手法開発を行う。また生命・錯体分子科学研究領域が中心となり，金属錯体・有機触媒および生体分子複合体の高次構造・動態・機能の統合的基礎研究を行う。特に，これらの分子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機能発現の基礎学理探求と，新しい駆動原理に基づく分子機能創出を推進する。

（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】各機関において機関内の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研究経費助成などを行う。
機構本部では若手研究者による機関間連携事業を継続するとともに新たに分野融合型共同研究を開始し，個人の自由な発想に基づく学術研究等を進展させ，併せて外部の競争的資金獲得に向けた情報収集等の支援を行う。
【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】各機関の進めるプロジェクトの特性に応じ，研究者コミュニティの意見を反映させつつ，プロジェクトの改廃や研究推進体制の見直しを行い，柔軟な組織運営を推進する。天文台では新旧プロジェクトの見直しを行い，アストロバイオロジーセンターへの移管を終了した系外惑星プロジェクトを廃止し，岡山天体物理観測所の機能縮小を検討する。核融合科学研究所では LHD における重水素実験開始に伴って新設した「国際プログラム委員会」の活動を活性化させる。
・【23–2】プロジェクトの達成に関し，該当機関の運営会議等において進捗報告を行い，研究者コミュニティの意見も踏まえつつ，その推進につ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】これまで行ってきた市民との懇談会など地元住民等との情報共有を引き続き行い，培ってきた信頼関係を維持するとともに，適切なリスクコミュニケーションを図る。特に核融合科学研究所では LHD における重水素実験が開始されたことから，安全管理状況や実験情報の報告等を行うことで地元住民等と情報を密に共有しリスクコミュニケーションに努める。
【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に惑星大気とバイオマーカー専門家の外国人教員をクロスアポイントメントを含む混合給与で雇用し，併せて光合成専門家の室長（特任准教授）を配置し生命科学（基礎生物学研究所）との研究連携を保ちつつ宇宙生命探査に向けた研究基盤を形成する。さらに新たに特任教員，研究者を採用し，組織の拡充を図る。系外惑星探査プロジェクト室では，すばる望遠鏡等を用いた太陽近傍の地球型惑星探査を継続する。地球サイズよりも大きな惑星を探査する。
・【24–2】アストロバイオロジー装置開発の外国人教員をクロスアポイントメントを含む混合給与により引き続き雇用し，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継続する。新装置の最終概念設計を行う。
・【24–3】新分野創成センター新分野探査室において，探査対象別のワーキンググループを設けてより具体的な探査を行うとともに，機構本部に次世代生命科学センター（仮称）設置準備室を設置する。

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とともに，機構本部において新たに分野融合型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）のプログラム開発の第一期開発を行い，当該システムを用いた平成 30 年度分野融合型共同研究公募を試行的に実施する。
【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】平成 28 年度に立ち上げた自然科学大学間連携推進機構（NICA）協議会の場を活用し，参画大学の意見を踏まえつつ分野別研究ネットワークの拡充等を通じた大学間連携による各大学の研究力強化方策の検討を開始する。
【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】各機関やセンターにおいてクロスアポイント制度を利用した優れた研究者の招聘や，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・支援する制度を拡充するとともに，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り，大学および機構の研究力強化に資する。

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への窓口として，専門委員会及びユーザーズ・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，開所から半世紀以上を経て老朽化が進む岡山天体物理観測所の機能縮小へ向けた検討を行う。また，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】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，新たな観測装置（ALMA・「あらせ」）との共同観測を含めた太陽研究を支援する。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，重水素実験開始後も引き続き共同研究を促進するために，コミュニティの意見を幅広く取り入れた体制の構築を図る。また，国際共同研究を本格化させ，拡大していくために，実験情報に関するホームページの英語化を進め，海外からの新たな共同研究参加を促す。さらに，週間実験計画等の英語版を作成し，海外の共同研究者に定期的に配信するなど，きめ細かな情報発信に努める。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 の共同利用率を引き続き 100% に維持する。
・【29–2】数値実験炉研究プロジェクトでは，①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進める。また，次期プラズマシミュレータの調達に向け，調査研究に着手する。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引き続き 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と新しいアイディアを取り入れた工学基盤の拡充のため，大型試験設備を活用し，特に超高熱流材料に関する国内外の大学等及び民間等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）を引き続き推進する。
・【29–4】２国間・多国間協定等に基づく連携事業を推進する。特に，ドイツのマックスプランクプラズマ物理研究所との連携については，世界最大級のヘリカル装置である LHD と同研究所の W7-X における比較研究を実施する。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引き続き推進する。

（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。とくに生物の適応戦略の解明に向けた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，バックアップ保存の側面から研究を支援する。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，関連研究者のネットワークを更に強化し，拡大する。

・【30–2】IBBP（大学連携バイオバックアッププロジェクト）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 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 10 件程度採択し，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】多様な顕微鏡，画像解析技術を用い，基本的な画像取得・解析と高度でより先端的な画像取得・解析からなる多層の支援体制を整備し，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さらに推進し，引き続き共同利用率 60% をめざしつつ，フランス原子力・代替エネルギー庁（CEA）に所属する政府機関であり，最先端の MRI を開発している NeuroSpin から Denis Le Bihan 所長を客員教授に迎え，国際共同研究を推進する。

・【31–3】全国の大学等研究機関との連携ネットワークの強化を進める。

・【31–4】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，NBR 事業第４期の開始にあたり，さらなる効率的な運営に向けた，前年度の見直しに基づき，代表機関の変更（生理学研究所から，京都大学霊長類研究所へ変更）と繁殖施設の集約化を進める。繁殖からリタイアしたサルの飼養について具体的な方策の実施を開始する。

・【31–5】特定神経経路における遺伝子導入効率や特異性をより高くするため，血清型を置換したアデノ随伴ウィルスベクターや糖タンパク質を変換したレンチウィルスベクターを新たに開発する。また，共同研究者に迅速に提供できる体制を，引き続き維持する。

・【31–6】三次元走査型電子顕微鏡（3D-SEM）を用いて，超薄切法による解像度のより高いコネクトミクス技術の検討を行う。また，共同利用への展開に向け，走査電子顕微鏡による連続超薄切片からの３次元微細構造・回路再構築技術の開発を進める。

・【31–7】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，構造および機能的磁気共鳴画像技術支援等）形成などを通じて構築した，生命科学を包括した支援体制をさらに充実するとともに，ヒト脳画像とコホート研究に関する国際シンポジウムを開催する。また，脳科学研究分野の基盤となる取組「次世代脳プロジェクト」を推進し，若手育成を重視した学術集会を運営する。

（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% 以上に引き続き維持するため，光源装置のメンテナンスを計画的に行うとともに調整運転の効率化を行う。さらに，軟Ｘ線顕微鏡や光電子顕微鏡を含む先端装置群の共同利用・共同研究を国際的に環境・エネルギー問題にも展開する。国際的研究動向を把握し，今後，２～３年の間に優先的に整備すべき先端装置の選定と仕様検討を進める。

・【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」，計算物質科学人材育成コンソーシアム，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。さらに，これまで２つに分けて更新してきたスーパーコンピュータを一括して更新することにより，調達および運用コストの削減を図る。

（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）平成30年度に創設する次世代生命科学センター（仮称）を見据え，オリオンプロジェクトでは平成28年度に開始した公募研究を推進し，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さらに推進し，ネットワーク形成を促進する。

（２）共同利用・共同研究の実施体制等に関する目標を達成するための措置
【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】各機関の持つ特性を統括した自然科学研究機構の大学の機能強化への貢献度を見える化するため，研究力強化推進本部研究連携室において本部及び各機関のIR担当者が共同で取り組む体制を構築し，評価指標の検討を行う。この結果を踏まえてNOUSで収集するデータの範疇や様式を定め，NOUSの第２期開発に反映させる。
・【34-2】各機関の研究力強化戦略室等において，共同利用・共同研究等を通した当該研究分野の特徴を踏まえ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。特に機構職員が執筆者に含まれない共同利用論文の把握に努める。
・【34-3】各機関が運営している共同利用・共同研究申請システム（申請，審査，採択，成果報告）の一連のプロセスをNOUSに移行する上での課題を整理し，第２期開発以降でのNOUS移行計画を立てる。
【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）協議会の場を活用し，現状を踏まえた大学の研究力強化への更なる貢献の仕方を議論し分野別の予算確保や人的・物的資源の有効活用等に関する検討を行う仕組みを整備する。
・【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，参画機関の実態調査を行うなど，更なる連携強化の方向性を探り，NICA協議会での議論に附する。

３　教育に関する目標を達成するための措置
（１）大学院への教育協力に関する目標を達成するための措置
【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学生を指導し，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】総研大と連携した「夏の体験入学」や「アジア冬の学校」などの体験学習の実施，適用率90%以上のリサーチアシスタント制度や奨学金制度による経済的支援等，学習環境を充実させることで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・研究機関との協定等を活用し，国際インターンシップ等を通じた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維持する。
・【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等の活用により研究生活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，各機関の特質に応じた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】各機関においてそれぞれが持つ専門知識を活かし，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】各機関においてそれぞれが持つ専門知識を活かし，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，機関の持つ最先端の研究成果や活用可能なコンテンツについて展示会への出展等様々な場で広報し，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】機構長のリーダーシップの下，引き続きプリンストン大学（米国）等との国際共同研究を推進するため，プリンストンに滞在するポスドクを１名雇用するとともに，マックスプランク研究所等の欧州地域の拠点的研究機関との研究交流を加速させるためのスキームを検討する。
【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，共同研究を進めて連携を強化するとともに，国際シンポジウム及び国際研究集会等の主催を通じて国際的な研究を主導する。具体的には，東アジア中核天文台連合（EACOA）で国際公募によるフェロー受入や独・マックスプランク研究所との核融合研究交流等による連携強化を図るとともに，基礎生物学研究所コンファレンスや生理研国際シンポジウム等の国際会議を主催する。
【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，各機関の立地条件も配慮しつつ，外国人研究者の滞在中の要望（宿泊，各種手続き，通訳等）に応えられるサービス体制を引き続き改善・整備する。

（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に設置した委員会等において各種検討を進める。機構法人の運営の効率化を図りつつその基盤を強化するため，事務連携委員会において，連携による効果が期待できる業務の検討を行い，優先度をつけて具体化を進める。
・【50–2】新たな学術の芽を育てるため，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。また，４機構による異分野融合・新分野創出支援事業を開始する。
・【50–3】大学共同利用機関法人による共同利用・共同研究の成果や大学の機能強化等への貢献について，その可視化方法等の検討を評価検討委員会において進め，国公私立大学等への広報活動を強化する。また，４機構合同で作成するパンフレット等をとおして，共同利用・共同研究の意義を広く国民や社会に発信する。

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評価を実施する。そこにおける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。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】公募型共同研究の窓口を一本化するという機構長の方針に対応して，機構事務局における共同利用・共同研究支援体制を強化するとともに，各機関との連携体制を強化する。

【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設ける。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，情報共有を図るための会合を定期的に開催する。

【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，技術交流を更に発展させる。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】平成 28 年度より始めた新たな男女共同参画推進アクションプランの実行を通して，男女共同参画の環境を整備・強化する。平成 29 年度においては，男女共同参画に関するパンフレットを改定し，内容の充実を図るとともに，男女共同参画の理解を深めることを目的とした講演会を開催する。女性研究者の割合を増加すべく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。特に平成 29 年度は次世代生命科学センター（仮）の創設準備の推進を図る。

【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，各機関においても運営会議での議論等を踏まえ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 32 年３月までは継続運用することとし，引き続き運用の促進を図る。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，運用の促進を図りつつ，今後の運営方法の在り方等について検討を開始する。

Ⅳ　自己点検・評価及び当該状況に係る情報の提供に関する目標を達成するためにとるべき措置

１　評価の充実に関する目標を達成するための措置

【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】研究連携室において，平成 28 年度に導入した外部の評価分析ツールを活用し，各機関，各研究組織，機関横断的研究組織等の評価単位毎に現況分析を実施する。

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。機構シンポジウムを春と秋の２回実施する。

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。各機関の安全管理状況を確かめるための相互視察を実施する。

【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】平成 28 年度に定めた情報セキュリティ対策基本計画に従い，情報セキュリティ監査及び自己点検結果等に基づく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，情報セキュリティ研修やインシデント対応訓練等を通して，情報セキュリティポリシーの周知徹底及び情報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。平成 29 年度は CSIRT の導入に関して検討を行う。

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。特に研究データの保存・開示の体制整備に取り組む。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。