

「分子研リポート 2017」 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	37
3-3-1 共同利用研究の概要.....	37
3-3-2 2017 年度の実施状況.....	37
3-3-3 共同利用研究実施件数一覧.....	55
3-4 国際交流と国際共同研究.....	57
3-4-1 外国人客員部門等及び国際交流.....	57
3-4-2 岡崎コンファレンス.....	60
3-4-3 日韓共同研究.....	61

3-5	大学院教育.....	63
3-5-1	特別共同利用研究員.....	63
3-5-2	総合研究大学院大学二専攻.....	64
3-5-3	オープンキャンパス・分子研シンポジウム.....	68
3-5-4	夏の体験入学.....	69
3-5-5	総研大アジア冬の学校.....	70
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.....	70
3-5-7	統合生命科学教育プログラム.....	72
4.	研究支援等.....	73
4-1	技術課.....	74
4-1-1	技術研究会.....	74
4-1-2	技術研修.....	77
4-1-3	人 事.....	78
4-1-4	受 賞.....	79
4-2	安全衛生管理室.....	80
4-3	社会との交流.....	81
4-3-1	自然科学研究機構シンポジウム.....	81
4-3-2	大学共同利用機関シンポジウム.....	82
4-3-3	分子科学フォーラム.....	83
4-3-4	分子研コロキウム.....	83
4-3-5	岡崎市民大学講座.....	85
4-3-6	その他.....	85
4-4	理科教育への協力.....	86
4-4-1	スーパーサイエンスハイスクール.....	86
4-4-2	あいち科学技術教育推進協議会.....	86
4-4-3	国研セミナー.....	87
4-4-4	小中学校での出前授業.....	88
4-4-5	職場体験学習.....	90
4-4-6	その他.....	91
4-5	一般公開.....	92
4-6	見学者受け入れ.....	93
4-7	プレスリリース.....	95
5.	各種事業.....	99
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の促進事業（文部科学省）.....	101
5-2	イメージング・サイエンス（自然科学研究機構）.....	105
5-2-1	経緯と現状.....	105
5-2-2	実施された主な行事.....	106
5-3	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）.....	107
5-4	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）.....	108

5-5 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)	120
5-5-1 はじめに	120
5-5-2 重点課題⑤研究課題について	120
5-5-3 重点課題⑤実施体制について	121
5-5-4 平成 29 年度について	122
5-5-5 今後の課題と取組みについて	122
5-6 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)	123
5-7 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)	126
5-8 分子科学国際共同研究拠点の形成	127
5-8-1 国際共同研究事業の財源	127
5-8-2 分子研国際インターンシッププログラム (IMS-IIP)	128
5-8-3 分子研アジア国際インターンシッププログラム (IMS-IIPA)	129
5-8-4 短期外国人研究者招へいプログラム	129
5-9 研究大学強化促進事業 (文部科学省)	132
5-10 ネットワーク型研究加速事業 (自然科学研究機構)	133
 6. 研究領域の現状	 135
6-1 論文発表状況	135
6-2 理論・計算分子科学研究領域	136
理論分子科学第一研究部門	136
理論分子科学第二研究部門	147
計算分子科学研究部門	151
理論・計算分子科学研究部門	162
6-3 光分子科学研究領域	166
光分子科学第二研究部門	166
光分子科学第三研究部門	171
光源加速器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)	181
光物性測定器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)	185
光化学測定器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)	188
6-4 物質分子科学研究領域	191
電子構造研究部門	191
電子物性研究部門	196
分子機能研究部門	199
6-5 生命・錯体分子科学研究領域	206
生体分子機能研究部門	206
生体分子情報研究部門	225
錯体触媒研究部門	229
錯体物性研究部門	237
6-6 協奏分子システム研究センター	243
階層分子システム解析研究部門	243
機能分子システム創成研究部門	256
6-7 メゾスコピック計測研究センター	262
繊維計測研究部門	262
広帯域相関計測解析研究部門	279

7. 点検評価と課題.....	283
7-1 研究顧問による点検評価.....	284
7-1-1 中嶋 敦 研究顧問.....	284
7-1-2 Hrvoje Petek 研究顧問.....	290
7-2 外国人運営顧問による点検評価.....	292
7-2-1 Benjamin List 外国人運営顧問.....	292
7-2-2 Eberhard Umbach 外国人運営顧問.....	296
7-3 運営会議委員による点検評価.....	299
7-3-1 高原 淳 運営会議委員.....	299
7-3-2 米田忠弘 運営会議委員.....	299
7-3-3 大西 洋 運営会議委員.....	302
7-3-4 田原太平 運営会議委員.....	303
7-3-5 西原 寛 運営会議委員.....	304
7-3-6 山口茂弘 運営会議委員.....	305
8. 研究施設の現状と将来計画.....	307
8-1 極端紫外光研究施設 (UVSOR).....	309
8-2 協奏分子システム研究センター.....	310
8-3 メゾスコピック計測研究センター.....	311
8-4 機器センター.....	313
8-5 装置開発室.....	315
8-6 計算科学研究センター.....	316
8-7 岡崎統合バイオサイエンスセンター.....	319
9. 資 料.....	321
9-1 歴代所長.....	321
9-2 評議員 (1976 ~ 1981).....	322
9-3 評議員 (1981 ~ 2004).....	323
9-4 運営顧問 (2004 ~).....	327
9-5 外国人評議員 (1976 ~ 2004).....	328
9-6 外国人運営顧問 (2004 ~).....	329
9-7 運営に関する委員会委員 (1975 ~ 1981).....	330
9-8 運営協議員 (1981 ~ 2004).....	331
9-9 運営会議委員 (2004 ~).....	335
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.....	337
9-11 自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則.....	338
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.....	341
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).....	342
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).....	344
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 30 年度).....	349

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つの研究領域とそれらを繋ぐ協奏分子システム研究センターに、新たにメゾスコピック計測研究センター（2017年4月発足）を加えて研究基盤を構築しています。その上極端紫外光研究施設（UVSOR）を始めとする研究施設を擁し、分子の構造と反応と機能についての先鋭的な基礎研究を進め分子の新たな可能性を探っています。

このレポートには、2017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」、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）分子研アジア国際インターンシッププログラム（IMS-IIPA）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、21世紀東アジア青少年大交流計画（JENESYS Program）の後継事業として、アジア諸国（特にタイ、マレーシア、シンガポール）の若手研究者を1～6ヶ月招聘し、研究室での研究体験と成果発表による人材育成を行なっています。

分子研の人の流れは常に活発であり、2017年度には多くの助教の若いメンバーが着任され、分子研の新たな飛躍への期待が高まりました。一方で大変残念なことに、理論分子科学研究領域の信定克幸博士が、本年1月に逝去されました。信定博士は物性理論、特にナノ構造体の光応答理論で世界を牽引する研究者でした。1995年に助手として分子研に着任され、4年後に北大に転出されましたが、2004年には助教授として再び着任され、本年まで研究室を主宰されてきました。計算機科学の分野でも卓越した業績を残され、2017年にはHPCI利用研究課題優秀成果賞を受賞されました。信定博士のこれまでの業績に敬意を表すると共に、ご冥福をお祈り申し上げます。

2017年度は新たに中嶋 敦慶應義塾大学教授と Hrvoje Petek ピッツバーグ大学教授に研究顧問に就任いただきました。4月4日～5日に岡崎にて全ての研究室主宰者から2017年度の研究計画を提示し、その活動についての提言をいただくと共に、12月26日～27日には分子研の研究領域及び研究センター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。2017年11月上旬には、ドイツマックスプランク研究所の Benjamin List 教授によって生命・錯体分子科学研究領域を中心にヒアリングをしていただきました。2018年2月下旬には、ドイツヴュルツブルク大学の Eberhard Umbach 教授によって光分子科学研究領域およびメゾスコピック計測研究センターを中心にヒアリングをしていただき、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頂きました。

2018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わたる分子科学の研究を推進するための中核として、広く研究者の共同利用に供することを目的として設立された大学共同利用機関である。物質観・自然観の基礎を培う研究機関として、広く物質科学の諸分野に共通の知識と方法論を提供することを意図している。

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

2-2 沿革

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

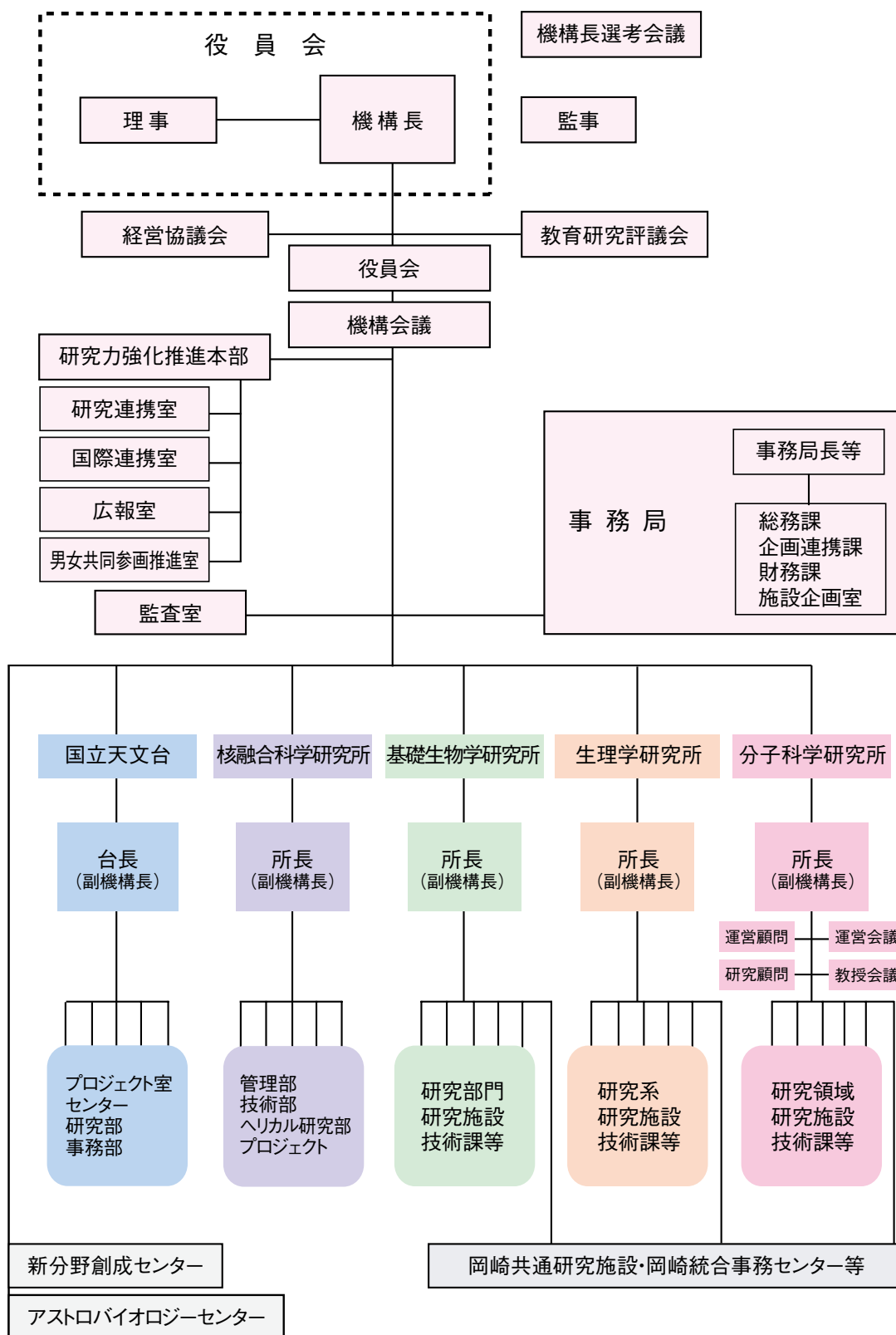
- 1965. 12.13 日本学術会議は、「分子科学研究所」（仮称）の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
- 1973. 10.31 学術審議会は、「分子科学研究所」（仮称）を緊急に設立することが適当である旨、文部大臣に報告した。
- 1974. 4.11 文部大臣裁定により、東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室（室長：井口洋夫前東京大学物性研究所教授、定員3名）及び分子科学研究所創設準備会議（座長：山下次郎前東京大学物性研究所長、学識経験者35人により構成）が設置された。
- 1974. 7. 6 分子科学研究所創設準備会議において、研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
- 1975. 4.22 国立学校設置法の一部を改正する法律（昭50年法律第27号）により「分子科学研究所」が創設され、初代所長に赤松秀雄前横浜国立大学工学部長が任命された。同時に、分子構造研究系（分子構造学第一研究部門、同第二研究部門）、電子構造研究系（基礎電子化学研究部門）、分子集団研究系（物性化学研究部門、分子集団研究部門）、機器センター、装置開発室、管理部（庶務課、会計課、施設課、技術課）が設置された。
- 1975. 12.22 外国人評議員の設置が制度化された。
- 1976. 5.10 理論研究系（分子基礎理論第一研究部門、同第二研究部門）、関連領域研究系（関連分子科学研究部門）、化学試料室が設置された。
- 1976. 11.30 実験棟第1期工事（5,115 m²）が竣工した。
- 1977. 4.18 関連領域研究系関連分子科学研究部門が廃止され、関連領域研究系（関連分子科学第一研究部門、同第二研究部門）、電子計算機センター、極低温センターが設置された。
- 1977. 4. 大学院特別研究学生の受入れが始まる。
- 1977. 5. 2 国立学校設置法の一部を改正する法律により生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所、生理学研究所）が設置されたことに伴い、管理部を改組して分子科学研究所管理局とし、生物科学総合研究機構の事務を併せ処理することとなった。管理局に庶務課、人事課、主計課、経理課、建築課、設備課、技術課が置かれた。
- 1978. 3. 7 分子科学研究所研究棟（2,752 m²）が竣工した。
- 1978. 3.11 装置開発棟（1,260 m²）、機器センター棟（1,053 m²）、化学試料棟（1,063 m²）が竣工した。
- 1978. 4. 1 電子構造研究系に電子状態動力学研究部門、電子構造研究部門が、分子集団研究系に基礎光化学研究部門が設置された。
- 1979. 3. 1 電子計算機センター棟（1,429 m²）が竣工した。
- 1979. 3.24 実験棟第2期工事（3,742 m²）、極低温センター棟（1,444 m²）が竣工した。

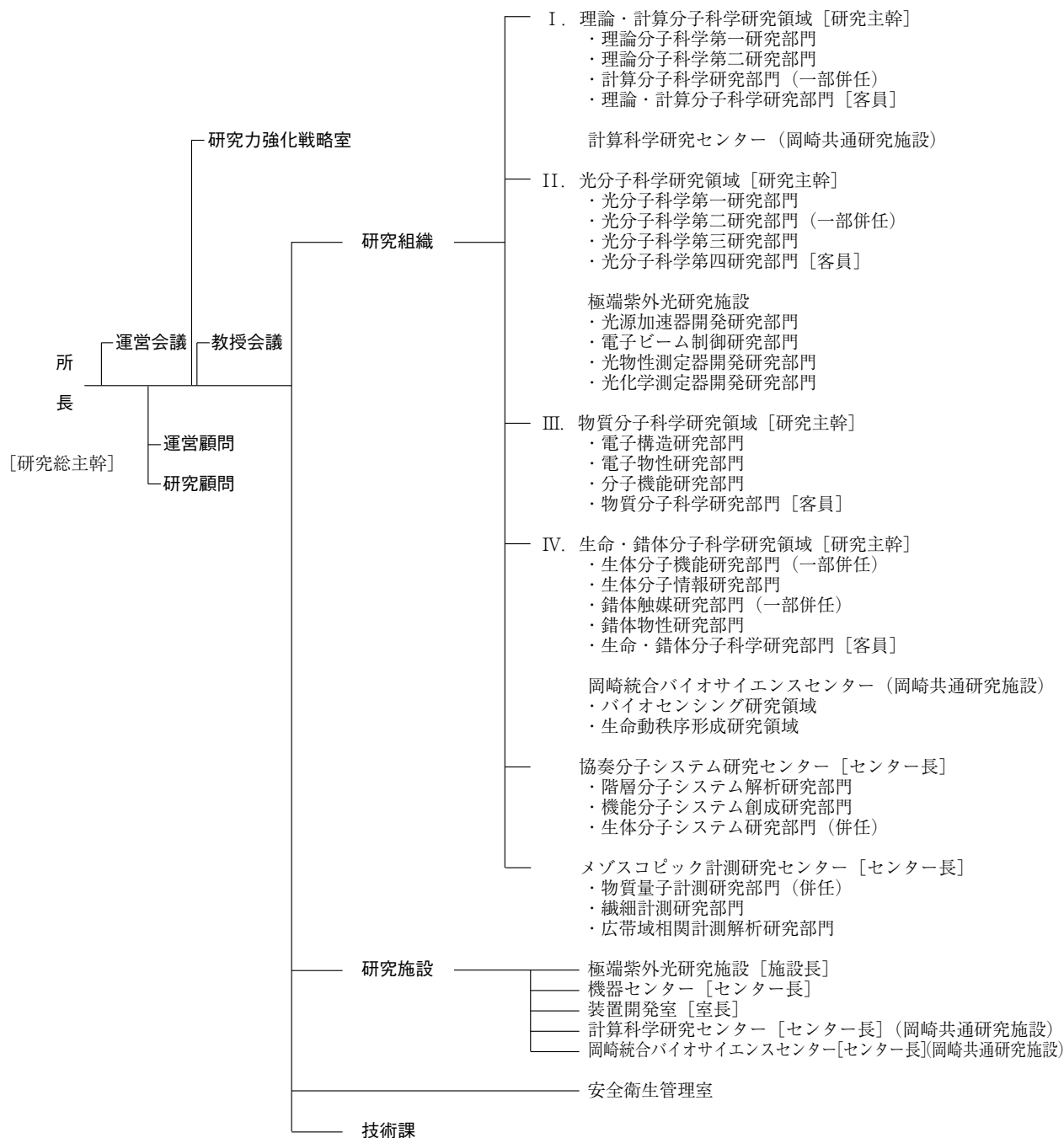
1979. 4. 1 分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され、管理局が総務部（庶務課、人事課、国際研究協力課）、経理部（主計課、経理課、建築課、設備課）、技術課に改組された。
1979. 11. 8 分子科学研究所創設披露式が挙行された。
1981. 4. 1 第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4.14 国立学校設置法の一部を改正する法律により、分子科学研究所と生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所、生理学研究所）は総合化され、岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され、管理局が岡崎国立共同研究機構管理局となり、技術課が研究所所属となった。
1982. 4. 1 研究施設として極端紫外光実験施設（UVSOR）が設置された。
1982. 6.30 極端紫外光実験棟第1期工事（1,281 m²）が竣工した。
1983. 3.30 極端紫外光実験棟第2期工事（1,463 m²）が竣工した。
1983. 4. 1 電子構造研究系に分子エネルギー変換研究部門が、分子集団研究系に分子集団動力学研究部門、極端紫外光研究部門が設置された。
1983. 11.10 極端紫外光実験施設ストレージリング装置に電子貯蔵が成功した。
1984. 2.28 極端紫外光実験施設の披露が行われた。
1984. 4.11 研究施設として、錯体化学実験施設（錯体合成研究部門、錯体触媒研究部門）が設置された。流動研究部門制度が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 m²）が竣工した。
1989. 5.28 分子集団研究系に界面分子科学研究部門が、関連領域研究系に有機構造活性研究部門（共に流動研究部門）が設置された。
1991. 3.27 極端紫外光実験棟（増築）（283 m²）が竣工した。
1991. 4.11 極端紫外光科学研究系（反応動力学研究部門）が設置された。基礎光科学、界面分子科学、極端紫外光の各研究部門は分子集団研究系から極端紫外光科学研究系へ振替された。
1993. 4. 1 第四代研究所長に伊藤光男前東北大学教授が任命された。
1993. 12. 3 極端紫外光実験施設創設10周年記念式典が挙行された。
1994. 1.31 電子計算機センター棟（増築）（951 m²）が竣工した。
1995. 3.31 関連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 関連領域研究系に分子クラスター研究部門（流動）が設置された。
1997. 4. 1 機器センター、極低温センター、化学試料室が廃止され、分子制御レーザー開発研究センター、分子物質開発研究センターが設置された。
1999. 4. 1 第五代研究所長に茅幸二慶應義塾大学教授が任命された。
2000. 4. 1 電子計算機センター、錯体化学実験施設錯体合成研究部門が廃止され、電子計算機室が設置された。共通研究施設として、統合バイオサイエンスセンター、計算科学研究センター、動物実験センター、アイソトープ実験センターが設置された。
2002. 2.28 山手2号館（統合バイオサイエンスセンター、計算科学研究センター）（5,149 m²）が竣工した。
2002. 3.11 山手1号館A（動物実験センター、アイソトープ実験センター）（4,674 m²）が竣工した。
2002. 4. 1 関連領域研究系分子クラスター研究部門（流動）、極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門（流動）、分子物質開発研究センターが廃止され、分子スケールナノサイエンスセンター（分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門、ナノ触媒・生命分子素子研究部門、ナノ光計測研究部門、界面分子科学研究部門（流動）、分子クラスター研究部門（流動））が設置された。
2003. 8.20 山手4号館（分子科学研究所分子スケールナノサイエンスセンター）（3,813 m²）が竣工した。
2003. 12. 2 極端紫外光実験施設創設20周年記念式典が挙行された。

2004. 3. 1 山手5号館（NMR）（664 m²）が竣工した。
2004. 3. 8 山手3号館（統合バイオサイエンスセンターなど）（10,757 m²）が竣工した。
2004. 4. 1 国立大学法人法により、国立天文台、核融合科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所、分子科学研究所が統合再編され、大学共同利用機関法人自然科学研究機構が創設された。岡崎国立共同研究機構管理局が、大学共同利用機関法人自然科学研究機構岡崎統合事務センターとなり、総務部（総務課、国際研究協力課）、財務部（財務課、調達課、施設課）に改組された。
2004. 4. 1 理論研究系が理論分子科学研究系に改組された。計算分子科学研究系（計算分子科学第一研究部門、計算分子科学第二研究部門、計算分子科学第三研究部門）が設置された。分子スケールナノサイエンスセンターに、先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。
2017. 4. 1 分子制御レーザー開発研究センターが廃止され、メゾスコピック計測研究センター（物質量子計測研究部門、繊細計測研究部門、広帯域相関計測解析研究部門）が設置された。

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、法律上は自然科学研究機構に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（機構に属する分子科学研究所には置かれない）。また、新たな組織として機構の経営に関する経営協議会（機構外委員、機構内委員、約半数ずつ）も機構に置かれるようになった。その影響で、法人化前に法律上、各研究所に置かれていた評議員会（所外委員のみから構成）や運営協議員会（所外委員、所内委員、約半数ずつ）は消滅した。各研究所では内部組織について法律上の規定はなく、独自の判断での設置が可能であるが、それらの内部組織はすべて所長の諮問組織となる。法人化前、研究所に置かれていた評議員会の主な機能は、①所長選考、②事業計画その他の管理運営に関する重要事項の検討、であったが、法人化後、これらは基本的には法人全体の問題として、機構長・役員会が教育研究評議会・経営協議会に諮る事項になった。

自然科学研究機構では創設準備の段階から各研究所の自律性を保つことを基本原則として、機構憲章を作成した。その精神に基づき、上記①、②の機能は法律上の組織だけに任せるのではなく、各研究所別に適切な内部組織を置くことになった。ただし、機能①については、所長の諮問組織で審議するのは不適當なため、形式的には機構長の諮問組織的な位置付けで、その都度、各研究所別に大学共同利用機関長選考委員会を設置することにした。その委員は教育研究評議会と経営協議会の機構外委員も候補に加えて、機構外から機構長によって選ばれる。一方、機能②については必要に応じて各研究所で適当な内部組織（所長の諮問組織）を構成することになった。その結果、分子科学研究所では運営顧問制度（外国人評議員に代わる外国人運営顧問も含む）を発足させた。第一期中期計画期間（2004年度～2009年度）の6年間の運営顧問は国内4名、海外2名で運用してきたが、第二期中期計画期間（2010年度～2015年度）の最初の3年間は、国際的な研究機関としての運営面を中心に諮問するため、海外2名で運用した。4年目となり、国内3名を新たに追加した。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、国内4名と海外2名で運用している。

運営顧問（2017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（2017年度）

LIST, Benjamin	ドイツマックスプランク石炭研究所所長
UMBACH, Eberhard	ドイツ工学アカデミー会員、カールスルーエ工科大学元学長

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入り、国内外各1名で運用を開始した。

研究顧問（2017年度）

中 嶋 敦
PETEK, Hrvoje

慶應義塾大学理工学部教授
米国ピッツバーグ大学教授

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	九州大学先端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	メゾスコピック計測研究センター教授
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、助教および主任研究員）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、特任准教授（若手独立フェロー）に加えて平成29年度より導入された特別研究部門の卓越教授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、人事選考部会が必要に応じて所内外から専門委員を加えることができる。また、助教候補者及び特任准教授（若手独立フェロー）の選考、岡崎統合バイオサイエンスセンター（分子研兼務）教授・准教授候補者の選考に関しては、それぞれ専門委員を含む小委員会、専門委員会を人事選考部会の下に置いている。人事選考部会の審議結果は部会長より所長に答申され、所長は教授会議（後述）でその結果を報告し、可否の投票等によって了解を得たうえで、最終決定する。

専任の教授、准教授を任用する場合には、まず教授会議メンバーによる懇談会において当該研究分野及び募集方針の検討を行い、それに基づいて作成された公募文案を人事選考部会、教授会議で審議した後、公募に付する。助教から准教授、准教授から教授への内部昇任は原則として認められていない。助教は6年を目途に転出することを推奨されているが、法制化された任期があるわけではない。なお、平成11年1月から法人化直前の平成16年3月までに採用された助教（平成15年4月以前は研究系の助教だけ）には6年の任期（法制化された任期）と3年ごとの再任が規定されたが、法人化による見直しによって、6年の任期を越えて勤務を継続する場合は再任手続きを経たのち、任期のない助教に移行した。

人事選考部会委員（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（2017年度）

【所外委員】

（日本化学会推薦）

北川 進（京大院教授）

黒田 一幸（早大教授）

八島 栄治（名大院教授）

（日本物理学会推薦）

東 正樹（東工大院教授）

陰 山 洋（京大院教授）

（日本放射光学会推薦）

雨宮 健太（高エネ機構教授）

（錯体化学会推薦）

棚瀬 知明（奈良女子大教授）

（分子科学会推薦）

岩田 耕一（学習院大教授）

大内 幸雄（東工大院教授）

高橋 聡（東北大多元研教授）

菱川 明栄（名大物質科学セ教授）

藤井 朱鳥（東北大院准教授）

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】

飯野 亮太（分子研教授）

岡本 裕巳（分子研教授）

解良 聡（分子研教授）

楳山 儀恵（分子研准教授）

柳井 毅（分子研准教授）

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（分子科学研究所特別研究員）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教育職員, 技術課長, 他	点検評価規則	—
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	2017.6.26 (メール審議)
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	2017.8.16, 2018.2.20
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	2018.3.7
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	2017.11.22
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	2017.6.2, 9.1, 12.8, 2018.2.20 (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	2017.4.7, 6.6, 8.7, 10.6, 12.1
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		2017.4.7, 6.9, 7.7, 10.11, 11.7, 2018.1.5, 3.2
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	2017.4.18, 5.22, 6.20, 7.18, 9.18, 10.17, 11.21, 12.19, 2018.1.16, 2.20, 3.27
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	2017.6.2
岡崎情報セキュリティ管理運営委員会	岡崎 3 機関における情報セキュリティの確保及び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	2018.3.14
岡崎情報セキュリティ管理運営専門委員会	岡崎 3 機関における情報セキュリティと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セキュリティ及び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	2017.5.23, 7.18, 9.29, 2018.1.18 その他メール審議
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	2017.7.24, 2018.1.19
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	—
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	メール審議
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	2017.4.18, 5.16, 6.20, 7.18, 8.15, 9.19, 10.17, 11.21, 12.19, 2018.1.16, 2.20, 3.20
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、防火防災管理者(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	2017.10.16, 12.25

自然科学研究機構岡崎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	2017.4.26, 7.10, 9.12, 12.11
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1	委員会規則	—
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	2017.8.8, 2018.3.15
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	2017.7.12
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	2017.6.27
ハラスメント防止委員会	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	2017.6.2, 10.18 (メー ル審議)
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	2017.5.17, 7.12, 9.13, 11.22, 2018.1.10, 3.14
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	2017.9.4
岡崎情報公開委員会	「独立行政法人等の保有する情報の公 開に関する法律」を円滑に実施するた め。	所長又は研究総主幹 教授1	委員会規則	—
生命倫理審査委員会	機構におけるヒトゲノム・遺伝子解析 研究を, 倫理的配慮のもとに適正に推 進するため。	教授又は准教授2	委員会規則	2017.11.22
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	2017.5.25, 12.18

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)
伊 藤 光 男	特別顧問, 名誉教授
大 峯 巖	特別顧問, 名誉教授
長 倉 三 郎	特別顧問, 名誉教授
中 村 宏 樹	特別顧問, 名誉教授
岩 田 末 廣	名誉教授
岩 村 秀	名誉教授
宇理須 恆 雄	名誉教授
北 川 禎 三	名誉教授
木 村 克 美	名誉教授
桑 島 邦 博	名誉教授
小 林 速 男	名誉教授
齋 藤 修 二	名誉教授
田 中 晃 二	名誉教授
永 瀬 茂	名誉教授
西 信 之	名誉教授
平 田 文 男	名誉教授
廣 田 榮 治	名誉教授
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
茅 幸 二
花 崎 一 郎
丸 山 有 成
諸 熊 奎 治

理論・計算分子科学研究領域 研究主幹(併) 齊 藤 真 司

理論分子科学第一研究部門

齊 藤 真 司	教 授
CHANDRA, Amalendu	外国人研究職員 (Indian Institute of Technology) '17.5.1 ~ '18.3.31
森 俊 文	助 教
甲 田 信 一	助 教
松 村 祥 宏	研究員
信 定 克 幸	准教授
飯 田 健 二	助 教
野 田 真 史	特任研究員
小 泉 健 一	特任研究員
竹 内 嵩	特任研究員

柳 井 毅	准教授
齋 藤 雅 明	特任助教(分子科学研究所特別研究員)
XIONG, Xiao-Gen	研究員
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
NGUYEN, Thanh Phuc	助 教
藤 橋 裕 太	研究員
加 藤 彰 人	研究員
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)
伊 藤 聡 一	助 教
ZHAO, Xiang	学振外国人招へい研究者(西安交通大学)
	'17.7.5 ~ '17.9.2
ZHAO, Ruisheng	研究員
ZHENG, Hong	研究員
奥 村 久 士	准教授(兼)(計算科学研究センター)
伊 藤 暁	助 教
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)
ALAM, MD. Khorshed	研究員
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(併)
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
田 中 陽	特任助教(分子科学研究所特別研究員)
ZHANG, Yichi	研究員(IMS フェロー)
MENG, Zengming	研究員(IMS フェロー)
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
湯 澤 勇 人	研究員
解 良 聡	教 授
上 羽 貴 大	助 教
MEISSNER, Matthias	研究員(IMS フェロー)

片 柳 英 樹 助 教

光分子科学第四研究部門（客員研究部門）

金 井 要 教 授（東京理科大学）
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
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

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

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）
田 嶋 尚 也 教 授（東邦大理）
吉 川 浩 史 准教授（関西学院大理）

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 助 教
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）
安 藤 潤 助 教
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
KOTORA, Martin	外国人研究職員 (Charles University)
	'17.6.20 ~ '17.8.2
大 迫 隆 男	助 教
浜 坂 剛	助 教
平 田 修 一	研究員
PUTRA, Anggi Eka	研究員
PAN, Shiguang	研究員
KIM, Kiseong	研究員
間 瀬 俊 明	特別訪問教授 (特別訪問研究員)
永 長 誠	特別協力研究員
檜 山 儀 恵	准教授
泉 関 督 人	助 教
藤 波 武	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)
莊 司 長 三	准教授 (名大院理)
當 舍 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
GUO, Lei	研究員 (IMS フェロー)

電子ビーム制御研究部門

大 東 琢 治	助 教
金 子 房 恵	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

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
OUYANG, Dongyan	研究員

古 賀 信 康	准教授
小 杉 貴 洋	助 教
南 慎太郎	学振特別研究員
古賀（巽）理恵	特任研究員
小 林 直 也	特任研究員
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
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）

メゾスコピック計測研究センター センター長（併） 岡 本 裕 巳

物質量子計測研究部門

大 森 賢 治	教 授（併）
信 定 克 幸	准教授（併）

織細計測研究部門

岡 本 裕 巳	教 授
成 島 哲 也	助 教
吉 澤 大 智	助 教
LE, Quang Khai	研究員
橋谷田 俊	研究員
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
川 崎 泰 介	特任研究員

広帯域相関計測解析研究部門

飯 野 亮 太	教 授（併）
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）

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
東 陽 介	特任研究員
富 宅 喜代一	受託研究員
遠 山 遊	特任専門員
船 木 弓 子	特任専門員
松 尾 友紀子	特任専門員
岩 野 由季絵	特任専門員

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

福 井 豊	特任専門員
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
後 藤 麻 子	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)
谷 中 冴 子	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
安 藤 潤	助 教(兼)
河 合 文 啓	研究員
栗 原 顕 輔	特任准教授
倉 橋 拓 也	助 教(兼)

計算科学研究センター センター長(併) 齊 藤 真 司

齊 藤 真 司	教 授(兼)
江 原 正 博	教 授
伊 藤 聡 一	助 教(兼)
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 繁 政 英 治

機器開発技術班 班長 青 山 正 樹

機器開発技術一係

水 谷 伸 雄	係 長
---------	-----

機器開発技術二係

近 藤 聖 彦	係 長
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
---------	-------

電子機器開発技術班 班長

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
牧 田 誠 二	主 任

極端紫外光技術二係

蓮 本 正 美	係 長
近 藤 直 範	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

酒 井 雅 弘	係 長
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

藤原 基靖 主任

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

原田 美幸 係長

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2018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、助教は分子科学コミュニティと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（例外は創立以来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）であったが、平成29年度に見直しが行われ、国内外を問わず博士号取得3年以内を対象とすることとなった。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したほか、特別研究部門を設けて、世界トップレベルの研究者を招へいすることとした。

(2) 創立以来の人事異動状況（2018年1月1日現在）

① 専任研究部門等（分子研のみ 岡崎共通研究施設は含まず 休職・休業含む）

区分 \ 職名	所長	教授	准教授	助教	技術職員	若手独立フェロー / 特任准教授	分子科学研究所特別研究員 / 特任助教	IMS フェロー
就任者数	8	49	79	281	156	5	24	231
転出者数	7	37	67	243	125	2	19	227
現員	1	12(2)	12	38	31	3	5	4

() は委嘱で外数。

② 客員研究部門

区分 \ 職名	教授	准教授
就任者数	153	166
現員	5	7

③ 外国人客員研究部門

区分 \ 職名	分子エネルギー変換研究部門*		極端紫外光研究部門*		外国人客員**
	教授	助教授	教授	助教授	教授
就任者数	34	29	34	22	17

*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

2018.1.1

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)	7	11(6)		11(6)
光分子科学研究領域		3(3)	0(3)	4	7(6)		7(6)
物質分子科学研究領域		2(3)	2(1)	2(1)	6(5)		6(5)
生命・錯体分子科学研究領域		1(5)	3(2)	11(3)	15(10)		15(10)
研究施設		4(5)	5(3)	14	23(8)		23(8)
技術課						31	31
小計	1	12(19)	12(12)	38(4)	63(35)	31	94(35)
岡崎統合バイオサイエンスセンター		3	0	1(6)	4(6)		4(6)
計算科学研究センター		1(1)	1	(3)	2(4)		2(4)
合計	1	16(20)	13(12)	39(13)	69(45)	31	100(45)

() 内は客員、兼任（本務を本機構外に置く者で、分子研において職を委嘱する者）又は併任（本務を本機構内に置く者のうち当該研究領域等を兼務する者）の数で外数である。

2-6-2 財 政

(単位：千円)

科目等 \ 年度	2013 年度	2014 年度	2015 年度	2016 年度	2017 年度
人件費	1,068,438	1,118,692	1,174,409	1,173,853	1,221,654
運営費、設備費	2,766,023	2,287,785	2,197,850	2,136,073	2,282,332
施設費	322,686	22,820	21,492	31,528	80,000
合計	4,157,147	3,429,297	3,393,751	3,341,454	3,583,986

寄付金

区 分	2013 年度	2014 年度	2015 年度	2016 年度	2017 年度
件数（件）	10	23	18	12	15
金額（千円）	7,125	21,648	18,140	15,920	25,021

共通研究施設を除く

科学研究費補助金

区 分	2013 年度	2014 年度	2015 年度	2016 年度	2017 年度
件数（件）	60	68	56	65	63
金額（千円）	222,310	265,990	239,580	487,690	475,020

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

2017 年度科学研究費助成事業

2018 年 1 月 19 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	11	8	19
新学術領域研究	課題	0	0	0
特定領域研究		0	0	0
挑戦の萌芽研究		2	0	2
挑戦的研究	（開拓）	0	0	0
挑戦的研究	（萌芽）	2	1	3
若手研究	（S）	0	0	0
若手研究	（A）	6	1	7
若手研究	（B）	10	1	11
基盤研究	（S）	1	0	1
基盤研究	（A）	7	0	7
基盤研究	（B）	9	3	12
基盤研究	（C）	9	0	9
特別研究員奨励費		1	1	2
特別研究員奨励費	外国人	0	0	0
研究活動スタート支援		4	0	4
奨励研究		0	0	0
合計		63	15	78

* 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		113,300	0	113,300
新学術領域研究	領域	71,500	61,300	132,800
新学術領域研究	課題	0	0	0
特定領域研究		0	0	0
挑戦の萌芽研究		1,100	0	1,100
挑戦的研究	(開拓)	0	0	0
挑戦的研究	(萌芽)	6,300	2,500	8,800
若手研究	(S)	0	0	0
若手研究	(A)	17,400	15,500	32,900
若手研究	(B)	12,400	1,700	14,100
基盤研究	(S)	31,700	0	31,700
基盤研究	(A)	51,500	0	51,500
基盤研究	(B)	42,700	12,500	55,200
基盤研究	(C)	12,000	0	12,000
特別研究員奨励費		1,100	500	1,600
特別研究員奨励費	外国人	0	0	0
研究活動スタート支援		4,400	0	4,400
奨励研究		0	0	0
合計		365,400	94,000	459,400

* 間接経費を除く

* 分担金を除く

* 補助金課題は交付決定額で集計

* 基金及び一部基金化課題は、当該年度の支払請求額を計上

共同研究

区 分	2013 年度	2014 年度	2015 年度	2016 年度	2017 年度
件数 (件)	8	5	4	9	6
金額 (千円)	133,667	31,328	61,750	46,443	60,939

2017 年 12 月 31 日現在

受託研究

区 分	2013 年度	2014 年度	2015 年度	2016 年度	2017 年度
国	1	2	2	2	2
独立行政法人等	16	20	17	17	18
大学等	6	3	3	4	4
民間企業他	2	1	2	1	1
合計件数 (件)	25	26	24	24	25
合計金額 (千円)	884,761	932,110	998,355	949,377	1,034,866

(岡崎共通研究施設を含む)

2017 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（2017.12）岡崎情報図書館は雑誌 1,516 種（和 292, 洋 1,224）、単行本 96,559 冊（和 13,243, 洋 83,316）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、国内外の学会会議はもとより研究教育活動にかかる各種行事に利用できる岡崎3機関の共通施設として平成9年2月に竣工した。センターは共同利用研究者の宿泊施設である三島ロッジに隣接して建てられている。

岡崎3機関内の公募によって「岡崎コンファレンスセンター」と命名された建物は、延べ床面積 2,863 m²、鉄筋コンクリート造2階建てで、大型スクリーン及びAV機器等を備えた200余名が参加可能な大会議室、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、レーザー装置、有機化合物の製造方法など多岐にわたっている。特許取得を基にした企業との共同研究も盛んであり、基礎科学の成果が企業を通して社会に還元される道を作っている。平成28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13件、平成29年度は、個人有0件、機構有6件であった（平成29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の開発と光・電子融合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 主として量子科学技術・統計物理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
2, 量子光学的知見に基づく分子分光理論

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, 大規模系のための励起状態計算手法の開発
2, 有機／有機界面の電荷移動状態の解析
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で、反応や物性を光で制御すること、及びそれに必要となる高度な光源開発を目的として研究を行う

光分子科学第一研究部門

- 研究目的 主としてレーザー光源を用いた先端的分光法、顕微鏡法等を用いて、分子とその集合体の高精度・高精細な構造を明らかにすると同時に、新たな光機能の開拓や物質特性の光制御を目指した研究を行う
- 研究課題 1, 極めて高い空間分解能を持つ先端的分光法による、分子集団の励起ダイナミクス、微粒子系における励起状態と増強電場の研究
2, 高強度かつ高コヒーレント光による分子運動の量子状態操作法の開拓、並びに、分子構造や反応ダイナミクス研究への適用

光分子科学第二研究部門

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

光分子科学第三研究部門

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

光分子科学第四研究部門（客員）

- 研究目的 原子や比較的簡単な分子から、それらの集合体、固体表面に吸着した原子・分子やナノ構造体、さらに生体分子までを広く対象とし、高度な周波数・時間・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等によりそれらの性質を明らかにする
- 研究課題 1, 強相関・極低温リユ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, 光電子分光法によるトポロジカル物性の研究
3, 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の高性能化のための電子ビーム・光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, 光ビーム計測・制御技術に関する開発研究

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

物質分子科学研究領域

研究目的 分子及びその集合体を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, 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じ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キシ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, 量子トンネル現象の原理的理解に関する研究
- 4, 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
- 5, 酸水素化物を基本とした新規機能性材料の探索
- 6, 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
- 7, 生体分子系における反応および階層的構造変化の解明
- 8, 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

メゾスコピック計測研究センター

- 研究目的 分子が集まって機能するシステムにおいて特性発現に役割を担う、ミクロとマクロを繋ぐ階層間の情報・物質のやりとりの現場を、できる限りありのままの姿で捉え、新しい分子の能力を引き出すための極限的計測法の開発とその利用研究を行う

物質量子計測研究部門

- 研究目的 精密な光観測・制御法を先鋭化し、新しい量子相を作り出して制御し、量子情報処理など新規な分子の能力を引き出す
- 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
2, ナノ構造体の光応答理論開発と多階層系の特性解析、光・電子機能物質の理論設計

組織計測研究部門

- 研究目的 低摂動で組織な分子計測法等、分子のありのままの姿を非破壊的に観測する計測手法を開発し、分子物質の機能を解明
- 研究課題 1, 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
2, 極限的計測法のための新レーザー光源、高機能非線形波長変換など、マイクロ固体フォトリクスの研究

広帯域相関計測解析研究部門

- 研究目的 多変数計測解析手法、高分解能広帯域計測法とその解析法を開発し、分子の能力とそれを司る物理過程の解析を展開
- 研究課題 1, 生体分子モーターのエネルギー変換機構解明のための新計測法開発
2, サブサイクル超短光パルス発生装置、光パルス評価法、超高速分光装置の開発

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。

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ほか、デジタルエンジニアリングの導入を進める。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、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」、同萌芽的課題アプリケーション開発（萌芽的課題 基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求）、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4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。平成30年度より、本センターを発展的に改組し、生命創成探究センターとなることが決定している。

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 2017 年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名	提案代表者	
高分子材料を構成するトリチウムのヘリウム3への壊変に伴う構造変化の分子シミュレーション	京都工芸繊維大学材料化学系	藤原 進

(2) 協力研究

課 題 名 (通年)	代 表 者	
液体中の光励起分子についての軟X線分光の試み	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	足立 純一
IV 族二次元材料と半導体がつくる界面の電子状態測定	北陸先端科学技術大学院大学マテリアルサイエンス系	高村由起子
革新的な水分解触媒の開発に向けた軟X線オパランド観測	慶應義塾大学理工学部	吉田 真明
有機薄膜太陽電池界面の界面準位計測	筑波大学数理物質系	櫻井 岳暁
タンパク質の熱安定性をターゲットとした神経変性疾患の治療薬探索とその熱力学的評価	慶應義塾大学理工学部	古川 良明
アキラルシッフ塩基複核錯体-PVA 複合材料への光渦 UV 光照射による分子配向	東京理科大学理学部	秋津 貴城
UVSOR における進行方向ビーム不安定性の研究と高調波加速空洞の開発研究	名古屋大学大学院工学研究科	持箸 晃
高解像度・三次元同位体イメージングに向けた UVSOR 大強度ガンマ線源の強度増強	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	渡邊 浩
放射光ベクトルビームの実験研究	広島大学放射光科学研究センター	川瀬 啓悟
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	名城大学理工学部	西山 桂

メタノールデヒドロゲナーゼのガスセンサータンパク質による発現制御	東京工業大学生命理工学院	蒲池	利章
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
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構成要素の新規デザインによる自己組織化ナノ構造複合体の創出及び結晶性多孔質ソフトナノマテリアル開発	信州大学繊維学部	新井	亮一
磁気ドメイン制御型の Q スwitch の薄膜化	豊橋技術科学大学電気・電子情報工学系	後藤	太一
2 μ m 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
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
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
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とスピン分解光電子分光技術の確立	東京大学大学院理学系研究科	岡林	潤

課 題 名 (前期)	代 表 者		
ダイヤモンドスピンセンサーと近接場光ファイバースプロブの結合	北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	安	東秀
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
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
ヘテロ芳香族化合物とアルコールを用いたヘテロ環骨格の触媒的合成法の開発	山形大学工学部	皆川	真規
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
解離イオンとオーグメント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
Rydberg 電子波束の時間発展の観測と制御	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
新規多座ホスフィン誘導体を表面修飾剤とする遷移金属ナノ粒子の調製とその触媒機能の探索	愛媛大学大学院理工学研究科	太田	英俊
透明電極表面へのフラーレン形成と界面状態の解明	愛知工業大学工学部	森	竜雄
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析	東京理科大学総合研究院	川崎	平康
ロクショウグサレキ由来の天然色素ザイリンドンの光反応性と酸化還元特性の解明	慶應義塾大学薬学部	東林	修平
糖鎖分解酵素の高速 AFM / 蛍光顕微鏡による一分子動態解析	名古屋大学大学院理学研究科	内橋	貴之
スピン偏極電子源の応答性の測定	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設	金	秀光
レーザーアブレーション技術の有機化学反応への応用	大阪大学大学院工学研究科	櫻井	英博
溶連菌由来ヘムセンサータンパク質による遺伝子発現制御機構の解明	兵庫県立大学大学院生命科学研究科	澤井	仁美

課 題 名 (後期)	代 表 者		
有機色素 J 会合体を含有する微小共振器の高密度光励起下での発光特性	島根大学大学院総合理工学研究科	水野	肅
Rydberg 電子波束の時間発展の観測と制御	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
超薄膜液体の電気・光物性測定	兵庫県立大学大学院物質科学研究科	田島	裕之
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 (II)	東京理科大学理工学部	中山	泰生
ダイヤモンドスピンセンサーと近接場光ファイバースプロブの結合	北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	安	東秀
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
CD イメージングを利用したキラル配位高分子の絶対構造の同定と応用展開	九州大学大学院工学研究院	山田	鉄兵
マイクロチップレーザーによる多時刻ブレイクダウンを用いたレーザー点火に関する研究	大阪大学工学部	赤松	史光
常温接合を用いた赤外波長変換デバイスの開発	中央大学理工学部	庄司	一郎
レーザーアブレーション技術の有機化学反応への応用	大阪大学大学院工学研究科	櫻井	英博
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
HIV TAT タンパク質とアミロイドペプチドの結合についての分子動力学シミュレーション	国立国際医療研究センター医療社会学研究室	尾又	一実
スピン偏極電子源の応答性の測定	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設	金	秀光
新規多座ホスフィン誘導体を表面修飾剤とする遷移金属ナノ粒子の調製とその触媒機能の探索	愛媛大学大学院理工学研究科	太田	英俊
ヘテロ芳香族化合物とアルコールを用いたヘテロ環骨格の触媒的合成法の開発	山形大学工学部	皆川	真規
糖鎖分解酵素の高速 AFM / 蛍光顕微鏡による一分子動態解析	名古屋大学大学院理学研究科	内橋	貴之
有機イオン周辺の水和水の水素結合ネットワーク構造とそのダイナミクス	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永	圭介

(3) 研究会

① 【分子研研究会】

水の局所構造・物性解析の最先端

2017 年 6 月 12 日（月） 分子科学研究所研究棟 201 号室

12:50 – 13:00	「はじめに」 高原 淳（九大）、小杉信博（分子研）
13:00 – 13:35	大内幸雄（東工大） 「和周波振動分光によるイオン液体／電解質水溶液界面の微視・巨視評価」
13:35 – 14:10	井上賢一（理研） 「ヘテロダイン検出振動和周波発生分光法を用いた界面水の超高速ダイナミクス」
14:10 – 14:45	川口大輔（九大） 「中性子反射率法による高分子／水界面の凝集構造解析」
15:15 – 15:50	大西 洋（神戸大） 「ピコニュートン力学計測でさぐる界面水構造」
15:50 – 16:25	小杉信博（分子研） 「軟 X 線透過吸収顕微分光法による水溶液の局所構造解析」
16:25 – 17:00	西川恵子（千葉大） 「硬 X 線を使った解析」
17:00 – 17:35	藤井秀司（大阪工大） 「空気－水界面への固体微粒子の吸着現象が拓く材料化学」
17:35 – 18:05	総括討論
18:30 – 20:30	意見交換会

② 【学協会連携分子研研究会】

触媒反応であるタンパク質反応を分子科学的観点から捉える

2017 年 6 月 14 日（水） 分子科学研究所研究棟 201 号室

午前の部	司会 寺嶋正秀
10:00 – 10:15	趣旨説明 今野美智子（お茶の水女子大学名誉教授）
10:15 – 10:50	中村彰彦（岡崎統合バイオ） 「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」
10:50 – 11:25	平田文男（豊田理化学研究所） 「蛋白質の構造揺らぎと『水』」
11:25 – 12:00	山縣ゆり子（熊本大学大学院生命科学研究部） 「ヒト MTH1 の幅広い基質特異性の構造的基盤」
午後の部	司会 今野美智子
13:15 – 13:50	寺嶋正秀（京都大学大学院理学研究科） 「いかにして刺激受容後にタンパク質分子全体の構造変化過程や標的分子との分子間反応過程を時間分解で捉えるか」
13:50 – 14:25	樋口芳樹（兵庫県立大学大学院生命理学研究科） 「[NiFe] ヒドロゲナーゼの水素分子の触媒反応機構の解明」
14:25 – 15:00	近藤美欧（分子科学研究所） 「生体機能模倣による鉄 5 核錯体による酸素発生触媒機構」
15:00 – 15:35	相田美砂子（広島大学大学院理学研究科） 「生理活性分子の特異的水和について」
	司会 正岡重行
15:45 – 16:20	菅 倫寛（岡山大学異分野基礎科学研究所） 「X 線自由電子レーザーにより明らかにされた光化学系 II の反応中間体の構造と水分解・酸素発生の反応機構」
16:20 – 16:55	長岡正隆（名古屋大学大学院情報学研究科） 「タンパク質反応の大規模分子動力学計算—ヘモグロビンサブユニットへの酸素分子侵入経路の統計的解析—」
16:55 – 17:30	岩田 想（京都大学大学院 医学研究科，理化学研究所 放射光科学総合研究センター） 「自由電子レーザーによるバクテリオロドプシンの構造変化の動き—光によって水素イオンを輸送する仕組みの解明」
17:30	閉会の辞

③ 【アジア連携分子研研究会】

Japan-China Joint Interdisciplinary Symposium on Coordination-Based Hybrid Materials

(日中合同若手学際シンポジウム～配位化学を基盤とした次世代複合材料)

2017年6月23日(金)～25日(日) 岡崎コンファレンスセンター

June 23 (Friday)

Registration and Welcome banquet at Okazaki New Grand Hotel

June 24 (Saturday)

Scientific program at Okazaki Conference Center

8:50- 9:00 Opening remarks (Takane Imaoka)

Session 1 (Chairperson: Shigeyuki Masaoka)

9:00- 9:25 Takashi Uemura (Kyoto University)

9:25- 9:50 Xun Wang (Tsinghua University)

9:50-10:15 Ryota Sakamoto (The University of Tokyo)

Session 2 (Chairperson: Xun Wang)

10:30-10:55 Shigeyuki Masaoka (Institute for Molecular Science)

10:55-11:20 Jie-Peng Zhang (Sun Yat-sen University)

11:20-11:45 Yuki Kurashige (Kyoto University)

11:45-12:10 Kensuke Kurihara (Institute for Molecular Science)

Session 3 (Chairperson: Jie-Peng Zhang)

13:40-14:05 Takane Imaoka (Tokyo Institute of Technology)

14:05-14:30 Guang-Shan Zhu (Northeast Normal University)

14:30-14:55 Teppei Yamada (Kyushu University)

14:55-15:20 Jun-Hua Luo (Fujian Institute of Research on the Structure of Matter)

15:20-15:50 Photo and Coffee Break

Session 4 (Chairperson: Teppei Yamada)

15:50-16:15 Koji Harano (The University of Tokyo)

16:15-16:40 Xin-Yi Wang (Nanjing University)

16:40-17:05 Shohei Tashiro (The University of Tokyo)

18:30- Dinner at Okazaki New Grand Hotel

June 25 (Sunday)

Scientific program at Okazaki Conference Center

Session 5 (Chairperson: Guang-Shan Zhu)

9:00- 9:25 Norie Momiyama (Institute for Molecular Science)

9:25- 9:50 Bin Zhao (Nankai University)

9:50-10:15 Akira Onoda (Osaka University)

Session 6 (Chairperson: Akira Onoda)

10:30-10:55 Nobuhiro Yanai (Kyushu University)

10:55-11:20 Shang-Da Jiang (Peking University)

11:20-11:45 Yoji Kobayashi (Kyoto University)

11:45-12:10 Masayuki Nihei (University of Tsukuba)

Session 7 (Chairperson: Koji Harano)

13:40-14:05 Takuya Nakashima (Nara Institute of Science and Technology)

14:05-14:30 Tao Liu (Dalian University of Technology)

14:30-14:55 Keiichi Inoue (Nagoya Institute of Technology)

Session 8 (Chairperson: Ryota Sakamoto)

15:15-15:40 Kazunori Sugiyasu (National Institute for Materials Science)

15:40-16:05 Bin Zhang (Tianjin University)

16:05-16:30 Satoshi Muratsugu (Nagoya University)

16:30-16:45 Closing remarks (Takane Imaoka & Xin-Yi Wang)
18:00- Dinner

④ 【分子研研究会】

不均一なゆらぎとその周辺の科学：Nishikawa Line から第二臨界点まで
2017年7月18日（火）～19日（水） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

7月18日（火）

12:55～13:00 「はじめに」 阿部洋（防衛大）

座長 浜谷 望（お茶大）

13:00～13:50 「ゆらぎをプローブとした超臨界流体の構造と物性」 西川恵子（千葉大）

13:50～14:30 「ヨウ化錫の液－液転移シナリオ」 淵崎員弘（愛媛大）

14:30～15:00 「水和イオン液体の水和状態の解析とタンパク質の構造に及ぼす影響」 藤田恭子（東京薬大）

15:00～15:20 休憩&写真撮影

座長 森下徹也（産総研）

15:20～16:00 「水のギブスエネルギーと液液臨界点仮説」 三島 修（物質・材料研究機構）

16:00～16:30 「水素結合性の超臨界流体の溶質・溶媒相互作用とプロトン移動反応」 木村佳文（同志社大）

16:30～17:00 「過冷却水の秩序」 松本正和（岡山大）

17:00～17:30 「低濃度ポリオール水溶液ガラスのポリアモルフィズム」 鈴木芳治（物質・材料研究機構）

特別セッション

座長 高橋憲司（金沢大）

17:35～17:55 「TBA」 HyungKim（カーネギーメロン大学）

18:00～20:00 懇親会&ポスターセッション

7月19日（水）

座長 一川尚広（農工大）

9:00～9:30 「金属錯体からなるイオン液体の多彩な機能性」 持田智行（神戸大）

9:30～10:00 「イオン液体の触媒作用を用いたセルロースのエステル交換反応」 高橋憲司（金沢大）

10:00～10:30 「イオン液体と zwitterion の微生物への相互作用」 黒田浩介（金沢大）

座長 服部高典（J-PARC センター）

10:45～11:15 「単純分子ガラスの短・中距離構造とガラス転移」 山室 修（東大）

11:15～11:45 「イオン液体に水を添加した系における分子動力学シミュレーション」 古石貴裕（福井大）

11:45～12:15 「中性子散乱で観るイオン液体と分子液体のダイナミクス」 古府麻衣子（J-PARC センター）

座長 阿部 洋（防衛大）

13:30～14:00 「紫外光電子分光法を用いたイオン液体のマーデルングポテンシャル計測」 大内幸雄（東工大）

14:00～14:30 「電極近傍のイオンの分布と配向」 都築誠二（産総研）

14:30～15:00 「イオン液体／Pt 電極界面におけるイオン吸着脱離挙動の電位応答ヒステリシス」 岩橋 崇（東工大）

座長 鈴木芳治（物質・材料研究機構）

15:15～15:45 「イミダゾリウム系イオン液体の Low-Q ピークの圧力応答」 浜谷 望（お茶大）

15:45～16:15 「芳香族系及び脂環式系イオン液体の相挙動とダイナミクス」 藤井幸造（千葉大）

16:15～16:20 「終わりに」 解良 聡（分子研）

ポスターセッション

P01 「J-PARC における高圧中性子実験の現状」 服部高典（J-PARC センター）

P02 「ジャイロイド構造を利用した三次元空間の設計と機能展開」 一川尚広（東農大）

P03 「ヨウ素添加イミダゾリウム系イオン液体の光電気伝導特性」 青野祐美（防衛大）

P04 「イオン液体－ポリヨウ素系の複雑な相挙動」 阿部 洋（防衛大）

P05 「サンドイッチ型ルテニウム錯体からなるイオン液体の物性および反応性」 富永拓海（神戸大）

P06 「フェロセン系イオン性プラスチック結晶の構造および相転移」 木股覚統（神戸大）

- P07 「還元性イオン液体中での金属ナノ粒子の生成」岡副慎也（同志社大）
 P08 「プロトン性イオン液体中でのプロトン移動ダイナミクス」藤井香里（同志社大）
 P09 「TG法でみたイオン液体中での光応答タンパク質のダイナミクス」小野寺香葉（同志社大）
 P10 「イミダゾリウム系イオン液体 [Csmim][BF₄] の高圧下での小角X線散乱実験」菊地なつみ（お茶大）
 P11 「脂環式イオン液体 [Pyr1,4]PF₆, [Pip1,4]PF₆ の THF 溶媒中における回転ダイナミクス」小口 聡（千葉大）
 P12 「動的共有結合により構造変換可能なイオン液体の合成」島田悠実子（金沢大）
 P13 「リグニン誘導体を相溶化剤とした炭素繊維強化樹脂の機械特性の評価」酒井啓基（金沢大）
 P14 「亜リン酸系イオン液体を用いた難燃性セルロースプラスチックの開発」西田龍ノ介（金沢大）
 P15 「イオン液体設計による重合性両親媒性分子の自己組織化制御」武内弘明（農工大）
 P16 「アミノ酸イオン液体を溶媒とした脂質キュービックマトリックスの構築」藤原沙希（農工大）

⑤ 【分子研研究会】

共鳴条件下における光と分子の力学的相互作用——分子操作への展開——
 2017年8月18日（金）～19日（土） 岡崎コンファレンスセンター

8月18日（金）

- 12:30-13:00 受付
 13:00-13:10 開会の挨拶
 13:10-14:50 ◆チュートリアル講演
 石原 一（大阪府立大学大学院工学研究科 大阪大学大学院基礎工学研究科）
 「光と物質の相互作用に現れる微視的な自己無撞着性」
 15:10-15:30 養輪 陽介（大阪大学大学院基礎工学研究科）
 「極限環境における半導体微粒子の共鳴的光操作」
 15:30-15:50 田中 嘉人（東京大学生産技術研究所, JST さきがけ）
 「局在プラズモン共鳴にあるナノ構造と光の新奇力学的相互作用」
 15:50-16:10 北野 健太（青山学院大学理工学部）
 「高強度テラヘルツパルスを用いた共鳴励起による分子回転操作」
 16:10-18:00 ポスターセッション
 18:45-20:45 <場所移動>懇親会

8月19日（土）

- 9:00-10:00 ◆チュートリアル講演
 岡本 裕巳（分子科学研究所メゾスコピック計測研究センター）
 「非線形分極について～初歩と光圧への効果～」
 10:00-10:20 庄司 暁（電気通信大学大学院情報理工学研究科）
 「光圧によるナノ粒子の駆動と分離」
 10:20-10:40 瀬戸浦 健仁（大阪大学大学院基礎工学研究科）
 「プラズモニックナノ粒子の光熱効果に誘起される物質輸送」
 11:00-11:20 鈴木 康孝（山口大学大学院創成科学研究科）
 「集光したレーザー光を用いたナノシートの光マニピレーション」
 11:20-11:40 亀山 達矢（名古屋大学大学院工学研究科）
 「近赤外光応答する新規半導体量子ドットの開発」
 11:40-12:00 増井 恭子（産業技術総合研究所 大阪大学先端フォトニクスバイオセンシング OIL）
 「金属ナノ粒子／ポリマーコンポジットの作製法」
 12:00-12:20 上野 貢生（北海道大学電子科学研究所）
 「プラズモン放射圧による高分子ゲルの体積相転移」
 12:20-12:30 閉会の挨拶

⑥ 【分子研研究会】

生体金属動態
 2017年8月26日（土）～27日（日） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

8月26日（土）

- 13:00-13:10 はじめに
 13:10-13:40 城 宜嗣（兵庫県立大理）
 生体内鉄関連タンパク質の構造ダイナミクス
 13:40-14:10 小椋康光（千葉大薬）
 セレン代謝物の同定とその生物学的意義の解明

14:10-14:40	朴 三用（横浜市大生命医科） 細胞生物学ツールによる新たな試み
15:00-15:30	田村朋則（京大工） Conditional プロテオミクスによる亜鉛関連タンパク質群の同定
15:30-16:00	古川良明（慶大理工） 生体内の銅イオン動態と神経変性疾患
16:00-16:30	神戸大朋（京大生命科学） 分泌型亜鉛要求性酵素のメタレーションに関わる亜鉛トランスポーター
16:30-17:00	明石知子（横浜市大生命医科） ネイティブ質量分析による構造解析
17:20-18:05	末松 誠（AMED） ガス分子による代謝制御機構と医学への展開：CO 受容体の探索と機能解明
18:30-	懇親会

8 月 27 日（日）

9:00- 9:30	宮嶋裕明（浜松医大内科） 鉄の蓄積からくる神経変性症，無セルロプラスミン血症を中心に
9:30-10:00	石森浩一郎（北大理） 細胞内鉄代謝制御機構におけるシグナル伝達分子としてのヘムの機能
10:00-10:30	藤代 瞳（徳島文理大薬） 腎臓近位尿管における有害金属および薬物の毒性と動態の解析
10:50-11:35	魚住信之（東北大工） 生体金属の吸収・排出・循環を司る微生物と植物の膜タンパク質
13:00-13:30	武田志乃（放医研） ケミカル・バイオイメージング：ウラン生体濃集と化学形変化
13:30-14:00	鈴木道生（東大農） 真珠貝微細構造内の有機基質の構造・機能解析によるバイオミネラリゼーション研究
14:00-14:30	青野重利（岡崎統合バイオ） 遷移金属の細胞内動態とその恒常性維持機構の解明
14:50-15:10	高野順平（大阪府大生命環境） 植物におけるミネラルトランスポーターによるミネラルセンシング
15:10-15:40	伊藤 隆（首都大学東京理工） NMR による生細胞内蛋白質の立体構造・ダイナミクスの解析
15:40-16:10	津本浩平（東大医科研） 生体金属動態の制御と蛋白質相互作用解析
16:10-	最後に

⑦ 【分子研研究会】

Cutting-Edge Researches in Coordination Chemistry and Photochemistry
2017 年 11 月 4 日（土） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

9:30- 9:35	Opening Remarks Shigeyuki Masaoka (Institute for Molecular Science)
<Session 1>	
9:35-10:05	Dr. Takashi Nakazono (Rikkyo University) Mechanism of Water Oxidation Catalyzed by Cobalt Porphyrins
10:05-10:35	Dr. Yutaka Saga (Tokyo University of Science) Ternary Hybrid Catalysis Enabling Room-Temperature Hydrogen Gas Release from Organic Molecules
<Session 2>	
10:50-11:20	Dr. Shun Hashiyada (Institute for Molecular Science) Visualization of Chiral Light Confined in Nano Space
11:20-11:50	Dr. Ryo Ohtani (Kumamoto University) Synthetic Raft Domains of Coordination Polymers on Giant Unilamellar Vesicles
11:50-12:00	Photo Session
<Session 3>	
13:10-13:30	Mr. Yoshiyuki Takemoto (Nagoya Institute of Technology) Catalytic Ammonia Formation via Silylation of Dinitrogen by Using T-Shaped Cobalt Complex Bearing Iminophosphorane Ligand
13:30-14:00	Dr. Masaya Okamura (Institute for Molecular Science) Water Oxidation Reaction Catalyzed by a Pentanuclear Iron Complex

14:00-14:30	Dr. Yoko Sakata (Kanazawa University) Kinetically Controlled On-Demand Acceleration of Guest Exchange by Using Anion-Capped Metallohost
14:30-15:00	Dr. Yumi Yakiyama (Osaka University) Stimuli-Responsive Coordination Networks Composed of Multi-Interactive Molecules
<Session 4>	
15:15-15:35	Mr. Lee Sze Koon (Institute for Molecular Science) Phosphine-Substituted Ru(II) Polypyridyl Complex for Catalytic CO ₂ Reduction
15:35-16:05	Dr. Satoshi Muratsugu (Nagoya University) Regulated Metal Coordination Structures on Surface for Selective Catalysis
16:05-16:35	Dr. Katsuhiko Kanaizuka (Yamagata University) Construction of Enhanced Photocurrent Systems by Nanocomposite Layers of Silver Nanoparticles and Dyes
16:45-17:55	<Special Session> Prof. Leif Hammarström (Uppsala University, Sweden) Molecular and Biomimetic Approaches to Artificial Photosynthesis
17:55-18:00	Closing Remarks Shigeyuki Masaoka (Institute for Molecular Science)

- ⑧ 【学協会連携分子研研究会】
量子ビームの物質生命科学への応用の新展開
2017年11月16日（木）～18日（土） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

11月16日（木）

12:50-13:00 開会あいさつ（分子研・加藤 政博）

【一般セッション1（座長：分子研・加藤 政博）】

13:00 - 13:30 （KEK・宮島 司）低エネルギー領域における定在波型加速空洞内電子の軌道解析

13:30 - 14:00 （KEK・島田 美帆）CW超電導線形加速器によるマルチビーム運転の検討

14:00 - 14:30 （KEK・山本 尚人）マクロ粒子法と準解析的手法を用いた電子バンチ群とダブルRFシステムの相互作用の数値解析

14:30 - 15:00 （広大・栗木 雅夫）エミッタンス交換によるビーム形状の最適化

【特別セッション1（座長：兵庫県立大・宮本 修治）】

15:15 - 16:00 招待講演（KEK・三宅 康博）ミュオン科学の新展開

16:00 - 16:30 （分子研・大東 琢治）UVSORにおけるSTXMの近況

【特別セッション2（座長：名大・高嶋 圭史）】

16:45 - 17:30 招待講演（KEK・兵頭 俊夫）KEK物構研低速陽電子実験施設における低速陽電子生成と利用実験

17:30 - 18:15 招待講演（名大・西谷 智博）GaN半導体による電子ビームイノベーションで実現する1ショット撮像クライオ電子顕微鏡

11月17日（金）

【特別セッション3（座長：東北大・柏木 茂）】

09:00 - 09:30 （名大・保坂 将人）放射光による光渦の発生

09:30 - 10:15 招待講演（名大・齋藤 晃）軌道角運動量を運ぶ電子ビームの新展開

【特別セッション4（座長：KEK・宮島 司）】

10:30 - 11:00 （理研・池田 時浩）ガラスキャピラリーを使ったイオンマイクロビーム小型生成装置による細胞内小器官ピンポイント損傷法

11:00 - 11:30 （阪大・入澤 明典）赤外自由電子レーザーによる物質科学の新展開

11:30 - 12:00 （京大・全 炳俊）準単色ガンマ線の核共鳴蛍光吸収測定による同位体CTイメージングの実証

【一般セッション2（座長：広大・栗木 雅夫）】

13:00 - 13:30 （J-PARC・原田 寛之）次世代大強度陽子加速器に向けたレーザー荷電変換入射

13:30 - 14:00 （核融合研・木崎 雅志）核融合研におけるプラズマ加熱用中性粒子ビーム源の開発

14:00 - 14:30 （KEK・大谷 将士）遂に実現したミュオン高周波線型加速

14:30 - 15:00 （QST・榊 泰直）レーザー駆動イオン加速

【一般セッション3（座長：名大・保坂 将人）】

15:15 - 15:45 （KEK・Aryshev Alexander）LUCX Pre-Bunched e-Beam Generation and Its Application to THz Experimental Studies

15:45 - 16:15 (QST・羽島 良一) FEL 共振器における CEP 安定化した数サイクル光パルスの生成
 16:15 - 16:45 (広大・川瀬 啓悟) 小型放射光リングと HiSOR 次期光源
 16:45 - 17:30 招待講演 (立命館・山田 廣成) 新設された卓上放射光センターの紹介と活性水素水の研究について

11 月 18 日 (土)

【若手セッション 1 (座長: UVSOR・藤本 将輝)】

09:00 - 09:15 (広大・正木 一成) NEA-GaAs カソードの高耐久化研究
 09:15 - 09:30 (広大・名越 久泰) 電子ビーム駆動方式 ILC 陽電子源の設計研究
 09:30 - 09:45 (東邦大・佐藤 謙太) ガラスキャピラリーによる細胞照射のためのフレネル型ピンポイントレーザー照準法の開発
 09:45 - 10:00 (東邦大・廣瀬 寛士) ガラスキャピラリー光学系によるレーザーマイクロビームピンポイント照射法開発: ビームパワー密度分布測定
 10:00 - 10:15 (早稲田大・蓼沼 優一) コヒーレントチェレンコフ放射による THz 光生成ターゲットの研究
 10:15 - 10:30 (東北大・齊藤 悠樹) 低屈折率シリカエアロゲル薄膜からのチェレンコフ光を用いたサブピコ秒バンチ長計測

【若手セッション 2 (座長: 京大・全 炳俊)】

10:45 - 11:00 (早稲田大・内田 朋哉) 短パルス電子ビームを用いたパルスラジオリシス法における PαMS の照射効果の評価
 11:00 - 11:15 (早稲田大・森田 遼介) クラッシュ衝突レーザーコンプトン散乱のためのレーザーシステム開発
 11:15 - 11:30 (兵庫県立大・森本 悠介) LCS ガンマ線による光核反応中性子の計測
 11:30 - 11:45 (兵庫県立大・杉田 健人) レーザーコンプトン散乱ガンマ線の生成と対生成陽電子を用いた材料研究
 11:45 - 12:00 (名大・長谷川 純) UVSOR における高調波空洞によるビーム運動学の実験研究
 12:00 - 12:15 (九大・宮原 巧) 輝天性蛍光体検出器によるレーザー駆動イオンビーム診断系の開発——機械学習法でのイオン推定を目指して

【若手セッション 3 (座長: 広大・松葉 俊哉)】

13:00 - 13:15 (室蘭工大・富田 大介) 粒子加速器バンチコンプレッサーにおいて航跡場がビーム動力学に及ぼす影響の評価
 13:15 - 13:30 (総研大・布袋 貴大) シミュレーション用 cERL 入射器空洞 3 次元電磁場のモデル化
 13:30 - 13:45 (J-PARC・守屋 克洋) 次世代大強度ビームの縦方向測定に向けた非破壊型ビームモニタに関する研究
 13:45 - 14:00 (J-PARC・小林 愛音) J-PARC MR のビームの閉軌道歪み (COD) の強度依存性の調査
 14:00 - 14:15 (核融合研・藤原 大) レーザーアブレーション法を用いた原子内包フラーレン高効率生成法の研究 (仮)
 14:15 - 14:30 (分子研・郭 磊) CsK₂Sb カソードの安定した高 QE の実現
 14:30 - 14:45 (分子研・藤本 将輝) 円偏光アンジュレタから生じる光渦波面の観測
 14:45 - 15:00 (東北大・齊藤 寛峻) 交叉型アンジュレタを用いた偏光可変コヒーレント THz 放射生成の研究

⑨ 【学協会連携分子研研究会】

電池の分子科学: 理論と実験のインタープレイ最前線

2018 年 1 月 26 日 (金) ~ 27 日 (土) 岡崎コンファレンスセンター小会議室

1 月 26 日 (金)

13:00 - 13:05 開会 山下 晃一

電池基礎・二次電池 (司会 山下 晃一)

13:05 - 13:45 山本陽介 (広島大学)
「安定な超原子価硫黄ラジカルの合成と電池への応用」
 13:45 - 14:15 竹中規雄 (名古屋大学)
「二次電池高性能化に向けた電極界面被膜形成機構の理論的解析」
 14:15 - 14:45 山田裕貴 (東京大学)
「溶媒和・イオン会合状態と SEI 形成反応の関係」
 14:45 - 15:15 喜多條鮎子 (九州大学)
「コンバージョン反応を利用した Li イオン二次電池の構築」

電池一般

15:35 - 16:05 宮崎晃平 (京都大学)
「金属-空気二次電池のための高活性電極触媒」
 16:05 - 16:35 Maxim Shishkin (京都大学)
「NaMnO₂ Cathode Material: Analysis of Voltage Profile Using DFT+U/Linear Response Technique」
 16:35 - 16:55 城野亮太 (東京大学)
「非水系酸化還元反応の第一原理分子動力学計算」
 16:55 - 17:35 金村聖志 (首都大学東京)
「革新電池におけるバルク反応・界面反応の解析と電池性能向上」
 18:00 - 懇親会

1月27日(土)

電池一般・二次電池 (司会 江原 正博)

- 09:30 - 10:10 安部武志 (京都大学)
「高エネルギー密度電池の電極／電解質界面」
- 10:10 - 10:40 石塚良介 (大阪大学)
「オーダー N 法を用いた MD/DFT 自己無撞着法の開発」
- 11:00 - 11:30 松本一彦 (京都大学)
「二次電池の中温域作動を目指したイオン液体電解質の開発」
- 11:30 - 12:00 大越昌樹 (早稲田大学)
「Na イオン二次電池用高濃度電解液におけるイオン拡散に関する理論的研究」

NMR

- 13:15 - 13:45 山下晃一 (東京大学)
「リン負極における Na 拡散過程と NMR スペクトル」
- 13:45 - 14:05 森田凌平 (岡山大学)
「 ^{23}Na および ^{31}P NMR を用いたナトリウムイオン二次電池リン負極の状態分析」
- 14:05 - 14:25 渡部絵里子 (東京大学)
「NMR 法を用いたナトリウムイオン電池正極材料における局所構造解析」
- 14:25 - 14:55 久保田圭 (東京理科大学)
「ナトリウムおよびカリウムイオン電池の電極材料開発」
- 14:55 - 15:00 閉会 江原 正博 (分子科学研究所)

⑩ 【分子研研究会】

刺激と応答——金属錯体は何を結ぶか

2018 年 3 月 4 日 (日) ～ 5 日 (月) 岡崎コンファレンスセンター小会議室

3月4日(日)

- 13:00-13:10 趣旨説明 柘植 清志 (富山大学)
- 13:10-13:45 秋根茂久 (金沢大学)
開閉できる含金属ホスト分子の開発と機能
- 13:45-14:20 佐藤弘志 (東京大学)
刺激によって様相を大きく変える多孔性錯体結晶
- 14:20-14:55 河野正規 (東京工業大学)
刺激応答システムの設計と構造－物性の相関の解明
- 15:10-15:45 須藤雄気 (岡山大学)
光刺激と生物応答から学ぶ生体光操作ツールの開発
- 15:45-16:20 中島 洋 (大阪市立大学)
生体内での利用を志向した近赤外光応答型一酸化炭素放出物質の開発
- 16:20-16:55 古川修平 (京都大学)
磁場に応答して神経伝達物質を放出する金属錯体材料
- 16:55-17:30 芳賀正明 (中央大学)
表面錯体膜の電子・プロトン・光に対する多重応答性とデバイス機能
- 18:30-21:00 懇親会

3月5日(月)

- 8:45- 9:20 大津英揮 (富山大学)
金属錯体の光刺激による小分子活性化
- 9:20- 9:55 小澤芳樹 (兵庫県立大学)
ギガパスカル圧力下での金属錯体のフォトルミネッセンス・ピエゾクロミズム
- 10:05-10:40 小林厚志 (北海道大学)
高効率光電荷分離を目指した光増感ナノ界面の創出
- 10:40-11:15 吉成信人 (大阪大学)
ジホスフィン配位子をもつ遷移金属錯体の熱誘起構造変換
- 11:15-11:50 大月 穰 (日本大学)
超分子金属錯体の光・電子機能
- 11:50-11:55 閉会挨拶

(4) 若手研究会等

課 題 名	提案代表者
第 15 回 ESR 夏の学校：多周波およびパルス ESR 法の基礎と展望	神戸大学大学院理学研究科 江間 文俊
第 57 回分子科学若手の会 夏の学校 講義内容検討会および開催支援	学習院大学大学院自然科学研究科 沖野隼之介

(5) 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
希土類置換型ランガサイト結晶の赤外分光	山形大学理学部	北浦 守
生体系物質のテラヘルツ分光	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
窒素マルテンサイト鋼の焼戻しにおける添加合金元素の化学状態測定	東北大学金属材料研究所	佐藤 充孝
MTB 高活性な Mo 過炭化活性種の L 殻 XANES による構造評価	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
軟 X 線吸収分光法による絶縁体／金属界面反応の研究	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
太陽軟 X 線 2 次元撮像分光ロケット実験に用いるフライト品の評価	国立天文台 SOLAR-C 準備室	成影 典之
Al 添加したハイドロキシアパタイトの構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
高配向有機 EL 分子膜の分子軌道評価	筑波大学数理物質系	山田 洋一
角度分解光電子分光法を用いた P3HT/PCBM 薄膜の電子構造と分子配向評価	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
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
電子機能性有機分子薄膜の界面電子構造と内蔵電位勾配の精密評価	東京理科大学理工学部	中山 泰生
複合イオン化合物の真空紫外励起によるオキソアニオン由来の多重自己束縛励起子の生成と量子切断	秋田大学大学院理工学研究科	小玉 展宏
パイロクロア型発光体のバンド構造の変化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
深紫外発光アルミニウム酸亜鉛蛍光体の光学的基礎物性評価	静岡大学大学院工学領域	小南 裕子
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・構造および温度に伴う変化の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野 正人
NaCl:I- 単結晶中におけるキャリア拡散によるエネルギー移動の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
磁気ボトル型電子エネルギー分析器による多電子同時計測	富山大学大学院医学薬学研究部	彦坂 泰正
光学系調整などのビームライン整備	分子科学研究所	岩山 洋士
窒素ドーブ半導体光触媒の化学状態解析	大阪市立大学複合先端研究機構	吉田 朋子
遷移金属ダイカルコゲナイド原子層膜の電子構造解明と新奇物性開拓	東北大学大学院理学研究科	佐藤 宇史
ARPES による銅酸化物高温超伝導体の電子ネマティック相の観測	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 GeTe 薄膜の電子・スピン状態測定	東京工業大学理学院物理学系	平原 徹
軟 X 線光電子分光による Fe ₂ P(10-10) の表面電子状態の解明	立教大学理学部	枝元 一之
分子軌道計測技術の展開 III：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・スピンストライブ秩序相を有する高温超伝導体の電子構造	分子科学研究所	田中 清尚
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規トポロジカル多層膜の電子状態解析	名古屋工業大学大学院工学研究科	宮崎 秀俊
角度分解光電子分光による NdFeP _{1-x} As _x (O,F) 単結晶の超伝導ギャップ対称性の組成変化の観測	大阪大学大学院理学研究科	宮坂 茂樹
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
2 元系アモルファス膜における光誘起内殻吸収スペクトル変化の観察	岐阜大学工学部	林 浩司
ハフニウムシンチレータの発光機構の解明と新規材料の開拓	東北大学未来科学技術共同研究センター	黒澤 俊介
シリコン中の新種不純物中心の基底状態の研究	東北学院大学工学部	原 明人
希土類置換型ランガサイト結晶の赤外分光	山形大学理学部	北浦 守
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
顕微赤外分光法によるマイクロ回路上の溶液反応の観察	分子科学研究所	長坂 将成
老化による疾病の早期発見のための 3 次元赤外顕微キラリメージングの開発	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
UVSOR 赤外光を用いた固体の低温および顕微分光研究	大阪大学産業科学研究科	入澤 明典
低エネルギー高分解能 ARPES によるトポロジカル半金属の研究	東北大学大学院理学研究科	佐藤 宇史
直接バンド観察で開拓する強相関トポロジカル量子相：ARPES 研究	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

1111 型鉄系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 III	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ホールキャリア依存性	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-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
高温超伝導体における超伝導状態の自己エネルギー解析	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 $\text{Sr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Fe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$, $\text{EuFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ 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電子構造 II	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
放射光を用いた角度分解光電子分光による希土類化合物 YbInCu_4 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
Electronic Structure Studies of TaAs_2 and NbAs_2 by ARPES	Fudan University	FENG, Donglai
ARPES Studies on the “Turn-On Temperature” Behavior in WTe_2	Seoul National University	KIM, Changyoung
高速シンチレータ材料におけるエネルギー移動と内励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
パイロクロア型イリジウム酸化物における真空紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	藤岡 淳
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 SOLAR-C 準備室	成影 典之
ボロンドープダイヤモンドのグリーン発光測定	福井大学学術研究院工学系部門	福井 一俊
VUV エリプソメトリーの整備	福井大学学術研究院工学系部門	福井 一俊
生体物質と強相関電子系の真空紫外分光と真空紫外分光計の評価	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
真空紫外検出機器用シンチレーターの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
最小電離損失粒子に対する原子核乾板の感度評価	名古屋大学未来材料・システム研究所	中村 光廣
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
Study of Optical Absorption of Parasitic Transition Metal Ions (Fe^{3+} , Cr^{3+}) at 15K Temperature in Nonlinear Crystal $\text{YAl}_3(\text{BO}_3)_4$ (YAB) in the 150–380 nm Range	分子科学研究所	石月 秀貴
3d 遷移金属添加 AlN の光電子収量分光測定による電子バンドポテンシャルの解明	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田 早紀
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
$\text{Sr}_2\text{MoFeO}_6$ への元素添加に対する Mo の電子状態変化の評価	早稲田大学理工学術院	山本 知之
希土類フリー酸化物蛍光体における Mn の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
希ガス蛍光のゼーマン量子ビート	九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫
平成 29 年度東海・北陸地区技術職員合同研修（物理・化学コース）	分子科学研究所	中村 永研
平成 29 年度東海・北陸地区技術職員合同研修（物理・化学コース）	分子科学研究所	中村 永研
真空紫外吸収分光法による酸化マグネシウムの欠陥の研究	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
アモルファス半導体薄膜の吸収スペクトル測定	岐阜大学工学部	林 浩司
Band Structure of Organometal Halide Perovskite (MAPbI_3 and MAPbBr_3) in Single Crystal	奈良先端科学技術大学院大学	鄭 敏喆
(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
希土類置換型ランガサイト結晶の赤外分光	山形大学理学部	北浦 守
生体系物質のテラヘルツ分光	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
MTB 高活性な Mo 過炭化活性種の L 殻 XANES による構造評価	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
太陽軟 X 線 2 次元撮像分光ロケット実験に用いるフライト品の評価	国立天文台 SOLAR-C 準備室	成影 典之
Al 添加したハイドロキシアパタイトの構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
高配向有機 EL 分子膜の分子軌道評価	筑波大学数理物質系	山田 洋一
角度分解光電子分光法を用いた P3HT/PCBM 薄膜の電子構造と分子配向評価	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
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
電子機能性有機分子薄膜の界面電子構造と内蔵電位勾配の精密評価	東京理科大学理工学部	中山 泰生
複合イオン化合物の真空紫外励起によるオキソアニオン由来の多重自己束縛励起子の生成と量子切断	秋田大学大学院理工学研究科	小玉 展宏
パイロクロア型蛍光体のバンド構造の変化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
深紫外発光アルミン酸亜鉛蛍光体の光学的基礎物性評価	静岡大学学術院工学領域	小南 裕子

NaCl:I- 単結晶中におけるキャリア拡散によるエネルギー移動の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
磁気ボトル型電子エネルギー分析器による多電子同時計測	富山大学大学院医学薬学研究部	彦坂 泰正
光学系調整などのビームライン整備	分子科学研究所	岩山 洋士
窒素ドーブ半導体光触媒の化学状態解析	大阪市立大学複合先端研究機構	吉田 朋子
2 元系アモルファス膜における光誘起内殻吸収スペクトル変化の観察	岐阜大学工学部	林 浩司
ハフニウムシンチレータの発光機構の解明と新規材料の開拓	東北大学未来科学技術共同研究センター	黒澤 俊介
シリコン中の新種不純物中心の基底状態の研究	東北学院大学工学部	原 明人
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
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
老化による疾病の早期発見のための3次元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 赤外光を用いた固体の低温および顕微分光研究	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 SOLAR-C 準備室	成影 典之
ボロンドープダイヤモンドのグリーン発光測定	福井大学学術研究院工学系部門	福井 一俊
VUV エリプソメトリーの整備	福井大学学術研究院工学系部門	福井 一俊
真空紫外検出機器用シンチレータの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
最小電離損失粒子に対する原子核乾板の感度評価	名古屋大学未来材料・システム研究所	中村 光廣
希土類添加 BaBiO ₃ の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
再水和置換で合成した新規置換型 NiAl 系 LDH 材料の Al 局所構造解明	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
高速重イオン照射した Gd ₃ Ga ₅ O ₁₂ 中 Ga 及び Gd の局所構造	九州大学大学院工学研究院	吉岡 聰
有機半導体薄膜の電子構造に対して水蒸気が及ぼす効果の検証	東京理科大学理工学部	中山 泰生
構造不均一化が生じる有機ヘテロ接合の光電子分光	東京理科大学理工学部	赤池 幸紀
軟X線吸収分光法による微小濃度の金属錯体溶液の局所構造解析	分子科学研究所	長坂 将成
マイクロ流路を用いた溶液反応の軟X線吸収分光測定	分子科学研究所	長坂 将成
ビームライン整備	分子科学研究所	長坂 将成
透過型X線吸収分光による液晶相の分子配向の研究	分子科学研究所	岩山 洋士
軟X線吸収分光法による濃 KSCN 水溶液の局所構造の温度依存性の検討	分子科学研究所	湯沢 勇人
軟X線吸収分光法によるクラウンエーテル包接錯体の局所構造解析	分子科学研究所	湯沢 勇人
輝尽発光分光によるシンチレータ結晶における真空紫外領域の電子正孔対生成効率の決定	山形大学理学部	北浦 守
有機物を含んだ隕石の紫外反射スペクトル測定	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉川 一朗
ScO の誘電関数およびハロゲン化物混晶の局在準位の決定	福井大学学術研究院工学系部門	牧野 哲征
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および水素添加に伴う変化の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野 正人
VUV スペクトロスコピーによる消光メカニズムの解明	京都大学大学院人間・環境学研究科	上田 純平
軟X線分光による窒化処理した銅中の窒素の化学状態評価	東北大学金属材料研究所	佐藤 充孝
Sr ₂ FeMoO ₆ 中の Fe の電子状態評価	早稲田大学理工学術院	山本 知之
解離イオンとオーグメント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
高分解能 ARPES による遷移金属ダイカルコゲナイド原子層薄膜の研究	東北大学大学院理学研究科	佐藤 宇史
ARPES による銅酸化物高温超伝導体 Bi2212 における電荷秩序状態の研究	東京大学大学院理学系研究科	藤森 淳
スピ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
Ag(100) 上に作成した V ₂ O ₃ (0001) 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 IV : 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 ARPES による FeTe _{1-x} Se _x (x = 0, 0.25, 0.65) の電子構造研究	分子科学研究所	出田真一郎
偏光依存3次元角度分解光電子分光による遷移金属シリサイド TSi ₂ (T = Ta, Nb, V) の電子状態の系統研究	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤 孝寛
in-situ ARPES によるサマリウム酸化物超薄膜の電子状態解析	名古屋工業大学大学院工学研究科	宮崎 秀俊
異方的金属絶縁体物質の偏光角度分解光電子分光	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法による NiTe ₂ のタイプ II ディラックコーンの観測	大阪大学大学院理学研究科	宮坂 茂樹
特異な1次元電子構造を示す半導体表面 Bi 薄膜における格子変調 I	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪 嘉之
Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy Study of FeSe _{1-x} S _x	Fudan University	FENG, Donglai
Experimental Observation of Hidden Orbital Angular Momentum (OAM) in Diamond and Silicon	Seoul National University	KIM, Changyoung
鉄系高温超伝導体薄膜の低エネルギー高分解能 ARPES	東北大学大学院理学研究科	佐藤 宇史
有機無機ペロブスカイト太陽電池材料 CH ₃ NH ₃ PbI ₃ 単結晶清浄表面の価電子バンド構造の精密分析	東京理科大学理工学部	中山 泰生
ARPES による2次元系遷移金属カルコゲナイド強磁性体・超伝導体の研究	東京大学大学院理学系研究科	藤森 淳

高分解能角度分解光電子分光による磁性絶縁体／トポロジカル絶縁体ヘテロ接合・超格子の電子状態研究	東京工業大学理学院物理学系	平原 徹
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 IV	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 ARPES による鉄系超伝導体 $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ の電子構造の研究	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 1 次元 - 2 次元金属相転移に伴う電子状態変化の系統研究	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤 孝寛
擬一次元系 $\text{Ca}_{1-x}\text{Y}_x\text{V}_2\text{O}_4$ の角度分解光電子分光	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法による $\text{Sr}_{0.92}\text{Ca}_{0.08}\text{Fe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ の超伝導ギャップノードの P 濃度依存性	大阪大学大学院理学研究科	田島 節子
スクッテルナイト中間層を持つ鉄系超伝導体の角度分解光電子分光	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
特異な 1 次元電子構造を示す半導体表面 Bi 薄膜における格子変調 II	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪 嘉之
ARPES Study on the Origin of the Magnetoresistance Suppression in Mo Doped WTe_2	Seoul National University	KIM, Changyoung
シンチレーション光の特性制御に関する研究	山形大学理学部	大西 彰正
$\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{F}_2$ 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
Study of Band Structure of Organometal Halide Perovskite Single Crystal	奈良先端科学技術大学院大学	鄭 敏喆
軟 X 線吸収分光による高分子系樹脂材料の表面・バルク化学状態の同時測定	理化学研究所放射光科学総合研究センター	山根 宏之
希ガス蛍光のゼーマン量子ビート	九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫

(6) 施設利用

① 装置開発室

(通年)

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

分子内および分子間電子移動と化学反応機構の研究	神奈川大学理学部	田仲 二郎
第一原理計算を用いた分極率計算法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	北海道大学触媒科学研究所	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, 溶媒と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
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による機能性分子の理論的研究	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
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
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
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
特定混合比で発現する特異物性を利用した新材料創成のための第一原理分子シミュレーションと機械学習の連携	お茶の水女子大学基幹研究院	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
理論電子および振動スペクトルによるヒドロキシベンゼン類溶媒和クラスターの励起状態プロトン／水素移動反応サイズ依存性に関する研究	東京工業大学科学技術創成研究院	宮崎 充彦
低分子非晶質有機半導体の分子間相互作用と二量体構造の計算	山形大学大学院有機材料システム研究科	横山 大輔
量子化学計算による生体高分子と活性酸素種との反応解析	近畿大学理工学部	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
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
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
立体選択的反応における溶媒効果と反応機構に関する理論研究	高知大学大学院総合人間自然科学研究科	金野 大助

自由エネルギー計算によるペプチド-脂質膜の相互作用解析	理化学研究所生命システム研究センター	齋藤 大明
セルロース結晶および関連タンパク質の溶媒和ダイナミクス挙動	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
高温電解質水溶液中の水和のダイナミクス解析	徳島大学大学院理工学研究部	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
ミオシン VI の機能メカニズムにおけるブラウン運動の役割と構造不均一性の研究	名古屋大学大学院工学研究科	寺田 智樹
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
タンパク質と分子集合体の分子機能の理論計算	京都大学大学院理学研究科	林 重彦
水、氷、クラスレート・ハイドレートの構造相転移の理論研究	岡山大学異分野基礎科学研究所	田中 秀樹
量子分子科学計算ソフトウェア NTChem によるナノサイズ分子の分子機能の解明・設計	理化学研究所計算科学研究機構	中嶋 隆人
生体分子のマルチコピー・マルチスケールシミュレーション	横浜国立大学大学院生命医科学研究科	森次 圭
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
免疫系における抗体-糖鎖リガンド間相互作用の理論的研究	北里大学一般教育部	江川 徹
担持 Au ナノ粒子触媒の CO 酸化反応およびシンナムアルデヒド水素化反応活性に関する理論研究	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
XFEL による内殻イオン化と超高速電子・エネルギー移動の動力学理論	東北大学大学院理学研究科	河野 裕彦
分子軌道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
分子動力学計算による水溶液中タンパク質の構造／揺らぎの研究	東京大学先端科学技術研究センター	山下 雄史
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
遷移金属化合物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 2	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部	中井 浩巳
液晶分子の熱伝導率の分子動力学シミュレーションによる予測	東京工業大学物質理工学院	川内 進
タンパク質間相互作用の粗視化モデルのための分子動力学シミュレーション	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
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
重原子を含む化合物の基底・励起電子状態と分子物性に関する量子化学計算	首都大学東京大学院理工学研究科	波田 雅彦
生体超分子の立体構造変化と機能	東京大学分子細胞生物学研究所	北尾 彰朗
第一原理計算手法に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、反応性および衝突断面積の計算	東北大学大学院理学研究科	天下慶次郎
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	リントウオト 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	京都大学大学院理学研究科	中野 義明
高濃度コロイド系の降伏・ジャミング現象	大阪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
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
刺激応答性高分子 PNIPAM と共溶媒効果の解明	岡山大学異分野基礎科学研究所	望月 建爾
電位依存型プロトン透過性膜タンパク質 VSOP の機能解明	近畿大学先端技術総合研究所	米澤 康滋
軌道相互作用に基づいたゼオライトにおける Si-(OH)-Al 基の局所構造が脱プロトン化エネルギーへ及ぼす影響の解明	東京工業大学物質理工学院	馬場 俊秀
固体における 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	筑波大学計算科学研究センター	重田 育照
両親媒性分子集合体の相互作用に関する分子動力学計算による研究	名古屋大学大学院工学研究科	吉井 範行
固体高分子中の水構造、ダイナミクスの理論研究	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	苮口 友隆
振電相互作用に関する理論的研究	京都大学大学院工学研究科	佐藤 徹
金属電極から有機分子半導体中への金属原子の拡散侵入過程の研究	千葉大学大学院理学研究科	中山 隆史
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・グラフェンナノリボン類の構造・機能解明研究	名古屋大学大学院理学研究科	伊藤 英人
Physical and Chemical Properties of TiO_2 Nanoparticles	東京工業大学理学院	Juhasz Gergely
機能性有機金属分子素子の開発と電子構造解明	東京工業大学科学技術創成研究院	田中 裕也

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
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
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
タンパク質の動きが周辺分子の物性に与える影響に関する理論的研究	筑波大学大学院数理物質系	松井 亨
CRISPR システムのシミュレーション	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高分子の分子動力学シミュレーション	名古屋大学大学院理学研究科	永井 哲郎
新規 π 電子系の合成を基軸とした超分子集合体の創製	立命館大学生命科学部	前田 大光
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
多座配位子で構造規制された遷移金属クラスターの電子状態	奈良女子大学研究院自然科学系	浦 康之
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	長浜バイオ大学バイオサイエンス学部	中村 卓
量子化学計算による光合成水分解反応の分子機構解析	名古屋大学大学院理学研究科	野口 巧
凝縮系における化学反応および物性の分子論的機構解明	琉球大学理学部	東 雅大
複雑で多様な分子構造と電子状態および化学反応に関する研究	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	福田 良一
近赤外光を吸収するフタロシアニン類縁体の合成と光物性	東京大学生産技術研究所	村田 慧
第一原理計算を利用した新規薬物の合理的設計開発	立教大学理学部	常盤 広明
分子性液体中に溶存する球状分子の Stokes-Einstein の関係とその境界条件	新潟大学理学部	大鳥 範和
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
クロコン酸結晶における巨視的光誘起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
場の量子論に基づく局所物理量による量子物性の研究	京都大学大学院工学研究科	瀬波 大土
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
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
新規イメージング法を用いた分子間相互作用ダイナミクスの研究	東京工業大学理学院	水瀬 賢太
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
超球面探索法を用いた分子構造，結晶構造の探索	和歌山大学システム工学部	山門 英雄
化学反応および分子特性に関する理論研究	神奈川大学理学部	松原 世明
量子化学と統計力学に基づく複雑化学系の理論的研究	京都大学大学院工学研究科	佐藤 啓文
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
シッフ塩基金属錯体の構造最適化と双極子モーメントの算出	東京理科大学理学部	秋津 貴城
OZ 理論から求まる二原子分子の溶媒和自由エネルギーの補正に関する研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮田 竜彦
三次元環状構造に埋め込まれた π 共役系の物性評価	北里大学理学部	長谷川真士
燃料電池界面の分子シミュレーション	産業技術総合研究所	崔 隆基
シアノスチルベン誘導体の凝集誘起発光についての理論的研究	千葉工業大学工学部	山本 典史
溶媒環境が DNA 内の相互作用や構造の安定性に与える影響	甲南大学先端生命工学研究所	杉本 直己
水溶液中で生成する π スタッキング自己組織化会合体の構造ゆらぎ制御	北海道大学大学院工学研究科	佐藤信一郎
化学反応の <i>ab initio</i> 計算による研究	愛媛大学大学院理工学研究科	長岡 伸一
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
金属クラスター複合体上での化学反応の解明	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	名古屋文理大学情報メディア学部	本多 一彦
液体・生体分子および関連分子系の構造・ダイナミクス・分子間相互作用と振動スペクトル	静岡大学教育学部	鳥居 肇
アルブミンによる不斉ニトロアルドール反応	明星大学理工学部	松本 一嗣
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
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
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
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	量子科学技術研究開発機構	黒崎 譲
生体分子および溶媒の構造機能相関の解明	立命館大学生命科学部	高橋 卓也
理論計算による触媒機能の解明	星薬科大学薬学部	坂田 健
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	瀬上壮太郎
4 族金属錯体を用いたエチレン-プロピレン共重合における触媒構造とモノマー選択性との関係の解明	広島大学大学院工学研究科	田中 亮
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
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

修飾核酸の分子動力学計算のための基盤構築	東京大学大学院新領域創成科学研究科	桜庭 俊
蛍光タンパク質 eYFP の構造－機能相関	東邦大学理学部	細井 晴子
ナノ秒時間分解近赤外共鳴ラマン分光と時間依存密度汎関数法によるフラーレン C ₆₀ とその類似分子の励起状態の構造の決定	青山学院大学理工学部	坂本 章
一級ベンジリックアミン配位子を有するイリジウム水素移動還元触媒による芳香族フッ素化合物の水素化脱フッ素化反応	東京工業大学物質理工学院	松並明日香
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
化学結合の開裂エネルギーに着目したタンデム質量分析系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
アト秒分子内電荷マイグレーション過程の解明へ向けた高励起電子状態計算	理化学研究所光量子工学研究領域	沖野 友哉
計算科学による新規ヘム結合蛋白質の de novo 設計	東京大学大学院農学生命科学研究科	森脇 由隆
ピリジニルケトン配位子を有する鉄錯体の酸化還元特性	北里大学理学部	神谷 昌宏
ピロリ菌の [NiFe] 型ヒドロゲナーゼの分子動力学計算	岡山大学大学院環境生命科学研究科	田村 隆
セルロース結晶 (I,II) 構造相転移についての大規模量子化学計算による検討: 6 位ヒドロキシメチル基コンフォメーションと水素結合ネットワークの影響	北海道大学大学院工学研究院	恵良田知樹
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
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光電子過程と触媒反応に関する研究	分子科学研究所	江原 正博
アミロイド線維の分子シミュレーションと新しい拡張アンサンブル分子動力学法の開発	分子科学研究所	奥村 久士
ピンサー型錯体を用いた触媒反応の反応機構解析	分子科学研究所	浜坂 剛
分子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
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
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
カリウムチャネルにおけるイオン透過と選択性発現機構の関係の解明	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明	生理学研究所	福永 雅喜
機能性パイ電子系物質の電子物性	京都大学大学院工学研究科	関 修平
高反応性含 13 族元素化合物の性質の解明	名古屋大学大学院工学研究科	山下 誠
心臓生理機能の多階層的な統合的理解のための分子シミュレーション	東邦大学医学部	村上 慎吾
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科学研究科	太田 雄大
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状態評価	関西学院大学理工学部	田中 大輔
錯体構造の理解を通じた抗金属錯体抗体の分子認識メカニズムの解明	医薬基盤・健康・栄養研究所創薬デザイン研究センター	秋葉 宏樹
非平面型バ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
分光法と分子動力学計算／量子化学計算を用いた生体関連分子の動的構造解析	佐賀大学大学院工学系研究科	海野 雅司
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
DNA と金属錯体との相互作用	中央大学理工学部	千喜良 誠
キラルな八面体型金属錯体の VCD 解析	北里大学理学部	吉田 純
理論化学的手法の天文、素粒子物理および応用物理分野における原子・分子反応素過程への応用	東洋大学理工学部	田代 基慶
プロペラ型有機色素のらせん型自己集合によるキラル発光特性発現の理論的検討	立教大学理学部	三井 正明
非対称ゲルメンによる小分子活性化	学習院大学理学部	猪股 航也
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
タンパク質の協同的な折れたたみとループのつながり方の関係	三重大学総合情報処理センター	白井 伸宙
カリックス [4] アレーンの金属イオン錯体の配座異性体と異性化反応経路の探索	広島大学大学院理学研究科	井口 佳哉
振動スペクトルを用いたタンパク質の新規構造解析法の開発	東北大学大学院薬学研究科	中林 孝和
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
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
アラインなどの歪み分子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
原子核自身の量子揺らぎを考慮した多成分系理論の開発と化学反応解析への応用	岐阜大学工学部	宇田川太郎
海洋天然物アブリシアトキシン単純化アナログの配座解析	香川大学農学部	柳田 亮
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	久新莊一郎
単一分子有機化学の研究	大阪大学大学院理学研究科	小川 琢治
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
NMR 計測と分子動力学計算を活用した特殊構造を持つ糖鎖の動的構造解析	分子科学研究所	谷中 冴子

不斉遷移金属触媒反応の反応機構解析	分子科学研究所	大迫 隆男
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
逆交換交差過程における有機分子の立体構造と励起エネルギーの関係	産業技術総合研究所	細貝 拓也
振動円二色性分光法の超分子キラリティへの応用	愛媛大学大学院理工学研究科	佐藤 久子
分子間水素結合相互作用を用いた遷移金属錯体の配位構造制御	関西学院大学理工学部	三橋 了爾
Optimizing Proton Exchange Membrane Fuel Cells by Providing Insights into the Materials of its Membrane Electrode Assembly	九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所	Kulbir Kaur Ghuman
生体系における動的分子過程の分子動力学シミュレーション解析	量子科学技術研究開発機構	米谷 佳晃
低原子価ホウ素配位子を有する錯体を用いた小分子活性化	東北大学大学院理学研究科	渡邊 孝仁
湾曲複素環分子の理論研究	慶應義塾大学薬学部	東林 修平
量子化学計算による有機半導体の分子軌道計算とその合理的合成法の探索	相模中央化学研究所	已上幸一郎
4d または 5d 金属を含む多核金属錯体の電子状態	岐阜大学工学部	海老原昌弘
高反応活性遷移金属錯体の構造と反応に関する理論計算	東京工業大学理学院	石田 豊
発光性金 (I) 錯体の励起状態の研究	日本工業大学工学部	大澤 正久
生体内アミノ酸残基のラセミ化反応における隣接残基の影響に関する計算科学的研究	金沢大学医薬保健研究域	福吉 修一
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
擬一次元有機分子の協同的な電荷移動に関する理論的研究	山形大学理学部	安東 秀峰
CNT 合成に用いられる 2 元遷移金属触媒クラスターの反応性解析	東京大学大学院工学系研究科	丸山 茂夫
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
気相クラスターにおける微視的水和構造の異性化経路の探索	北里大学理学部	石川 春樹
シリコン基板上の有機分子吸着構造と電子状態の解析	横浜国立大学理工学部	大野 真也
量子化学計算を用いた高分子電解質でのイオンと高分子の電子状態に関する研究	近畿大学理工学部	森澤 勇介
生体分子の原子核の量子揺らぎを考慮した分子シミュレーション	理化学研究所計算科学研究機構	川島 雪生
機能性材料における物質輸送及びイオン伝導性の考察	東邦大学医学部	岡 真悠子
地球外における生物物質の化学進化	アストロバイオロジーセンター	小松 勇
量子ダイナミクスによる動的物性量の理論的研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	中野 雅由
π 共役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
有機半導体蒸着膜の自発的配向分極現象の解明	明治大学理工学部	野口 裕
有機分子の光励起状態における構造変化の研究	北海道大学大学院理学研究院	小門 憲太
自動反応経路探索を用いる化学反応の機構解明	奈良先端科学技術大学院大学研究推進機構	畑中 美穂
ペプチドナノリングにおける重金属イオン捕捉能の第一原理電子論	早稲田大学先進理工学部	武田京三郎
食品の化学反応の解析	戸板女子短期大学	大塚 譲
密度汎関数理論を用いた酸化チタン表面の欠陥に関する研究	慶應義塾大学理工学部	泰岡 顕治
シミュレーションによるガラスの熱物性とガラス転移の性質に関する研究	東京大学大学院総合文化研究科	池田 昌司
核融合炉ブランケットシステムに向けた新型溶融塩開発のための分子動力学シミュレーションによる熱物性評価	東北大学大学院工学研究科	宍戸 博紀
HIV TAT タンパク質とアミロイドペプチドの結合についての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
歪んだ多環芳香族化合物の構造と性質	東邦大学理学部	渡邊総一郎
計算化学を利用した有機化学反応機構の解析	乙卯研究所	黒内 寛明
高分子鎖の機械的伸長と破断の研究	北海道大学大学院生命科学院	松田 昂大
機能性分子の電子状態計算	室蘭工業大学工学研究科	飯森 俊文
高配位有機典型元素化合物の構造と性質の解明	東京大学大学院理学系研究科	狩野 直和
可逆な反応による分子複合体形成に基づく新規材料開発	東京工業高等専門学校	井手 智仁
新規機能性 π 共役分子の合成と物性に関する研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	清水 章弘
(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	岡山大学異分野基礎科学研究所	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
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
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
ナノ・バイオ分子の光化学反応イメージング理論	東北大学金属材料研究所	山崎 馨
常温溶融塩およびその混合液体における潤滑・導電特性向上に向けた計算材料科学的研究	東北大学金属材料研究所	芝 隼人

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 ~ '10		'11		'12		'13		'14		'15		'16		'17		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	1	13	1	21	2	27	1	11	2	32	2	30	1	8	人数： 登録人数
協力研究	4,066	6,174	108	292	123	329	64	183	64	206	62	205	82	246	73	229	〃
招へい 協力研究	195	197	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	〃
所長 招へい	4,450	4,450	78	78	93	93	156	156	103	103	128	128	80	80	83	83	人数： 旅費支給者
研究会	335	5,681	4	105	10	207	10	254	6	162	11	195	7	151	9	167	〃
若手研究会 等	3	36	1	11	1	19	1	21	2	38	1	16	1	14	2	41	〃
岡崎コンファ レンス	—	—	—	—	1	29	1	18	1	34	1	21	3	115	0	0	〃
施設利用 I	2,053	4,695	98	266	60	254	41	105	44	191	20	52	2	6	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)	5,077	17,131	190	668	190	813	204	786	199	751	235	844	221	813	221	827	〃
協力研究 (ナノプラット)	500	1,094	25	64	15	51	52	123	63	147	64	174	75	144	63	153	〃
施設利用 (ナノプラット)	276	711	20	35	52	150	132	378	174	453	197	618	196	493	191	585	〃
合計	17,063	41,076	525	1,532	546	1,966	663	2,051	657	2,096	721	2,285	669	2,092	645	2,099	

*施設利用IIは'00より電子計算機施設利用

('17年度の数値は、2017.12.31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 ~ '10		'11		'12		'13		'14		'15		'16		'17		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	4	4	6	6	1	1	1	1	1	1	3	3	2	2	人数： 旅費支給者
研究会	44	758	2	68	4	63	1	37	1	37	1	30	1	41	1	43	〃
施設利用	3,118	15,136	139	682	136	706	142	732	125	649	119	732	142	762	158	855	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	3,599	17,513	145	754	146	775	144	770	127	687	121	763	146	806	161	900	

('17 年度の数値は, 2017.12.31 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
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
16	0	2	7	50	112	171
合計	26	36	264	226	1,264	1,816

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
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
16	14	2	27	20	16	15	1	76	171
合計	175	49	146	177	278	351	14	626	1,816

表3 海外からの研究者（2017年度）

1. 外国人運営顧問			
LIST, Benjamin	ドイツ	マックスプランク石炭研究所所長	
UMBACH, Eberhard	ドイツ	工学アカデミー会員, カールスルーエ工科大学元学長	
2. 外国人研究職員			
CHANDRA, Amalendu	インド	Indian Institute of Technology 教授	'17. 5. 1-'18. 3.31
KOTORA, Martin	チェコ	Charles University 教授	'17. 6.20-'17. 8. 2
3. 日本学術振興会招へい外国人研究者等			
ZHAO, Xiang	中国	西安交通大学教授	'17. 7. 5-'17. 9. 2
4. 国際共同研究			
CARRIER, Andy	ベルギー	University of Namur 大学院生	'17. 1.27-'17. 5. 5
THATHONG, Yuranan	タイ	Suranaree University 大学院生	'17. 2. 3-'17. 9.30
KERDPOL, Khanittha	タイ	Chiang Mai University 大学院生	'17. 3. 1-'17. 8.31
HARADA, Nao	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'17. 3.27-'17. 8.25
BOUVIER, Mathilde	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'17. 3.27-'17. 8.28
GAYREL, Floriane	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'17. 3.27-'17. 8.29
LAFITTE-HOUSSAT, Eloise	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'17. 3.27-'17. 8.29
RUPIN, Matthieu	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'17. 3.27-'17. 8.29
MOGHADDAM, Nicolas	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'17. 3.27-'17. 8.29
XIONG, Wangyao	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'17. 3.27-'17. 8.29
TANYALAX, Thitiwat	タイ	マヒドン大学大学院生	'17. 4. 1-'17. 6.30
REINHARD, Kaiser	チェコ	Charles University 大学院生	'17. 4. 1-'17. 6.23
SHEERSH, Boorla	インド	Indian Institute of Technology Kharagpur 学生	'17. 5. 8-'17. 7.17
RAI, Nitish	インド	Indian Institute of Technology Banaras Hindu University 大学院生	'17. 5.10-'17. 7.31
WEN, Chenhaoping	中国	Fudan University 大学院生	'17. 6. 4-'17. 6.17
			'17.11.27-'17.12. 9
YAO, Qi	中国	Fudan University 大学院生	'17. 6. 4-'17. 6.17
WANG, Yu-Fu	台湾	Tamkang University 研究員	'17. 6.11-'17. 6.17
HSU, Wei-Hao	台湾	Academia Sinica 大学院生	'17. 6.12-'17. 6.17
HAN, Sehee	韓国	Pohang University of Science and Technology 大学院生	'17. 6.23-'17. 7. 8
JUNG, Jiwon	韓国	Pohang University of Science and Technology 大学院生	'17. 6.23-'17. 7. 8
FUKUTANI, Keisuke	韓国	Institute for Basic Science 研究員	'17. 6.23-'17. 7. 8
STANIA, Roland	韓国	Institute for Basic Science 研究員	'17. 6.26-'17. 7. 8
BARDIN, Andrey	ロシア	Russian Academy of Sciences, Chernogolovka	'17. 6.30
PATANEN, Minna	フィンランド	University of Oulu 研究員	'17. 7.10-'17. 7.16
DE JONG, Michiel	オランダ	University of Twente 准教授	'17. 7.19-'17. 7.29
OCHAPSKI, Michal Witold	オランダ	University of Twente 研究員	'17. 7.19-'17. 7.28
JU, Huanxin	中国	University of Science and Technology of China 准教授	'17. 7.27-'17. 8.23
WHITE, James Lawrence	アメリカ	Sandia National Laboratories, California 研究員	'17. 7.31-'17. 8. 6
HAQ, Nawaz	パキスタン	National Center for Physics Pakistan	'17. 8. 5-'17. 9.30
CEOLIN, Denis	フランス	Synchrotron SOLEIL 研究員	'17. 8. 7-'17. 8.12
NICOLAS, Christophe	フランス	Synchrotron SOLEIL 研究員	'17. 8. 7-'17. 8.12
LAI, Yu Ling	台湾	NSRRC 研究員	'17. 8.29-'17. 9. 2
			'17.12. 5-'17.12.10
SHIU, Hung Wei	台湾	NSRRC 研究員	'17. 8.29-'17. 9. 2
			'17.12. 5-'17.12.10
YU, Li Chung	台湾	NSRRC 研究員	'17. 8.29-'17. 9. 2
			'17.12. 5-'17.12.10
SALEHI, Elham	イラン	Institute for Research in Fundamental Sciences 研究員	'17. 9. 4-'17.11. 5
RUEHL, Eckart	ドイツ	ベルリン自由大学教授	'17. 9.10-'17. 9.16
YAMAMOTO, Kenji	ドイツ	ベルリン自由大学大学院生	'17. 9.10-'17. 9.17
FLESCH, Roman	ドイツ	ベルリン自由大学助教	'17. 9.10-'17. 9.16
KLOSSEK, Andre	ドイツ	ベルリン自由大学研究員	'17. 9.10-'17. 9.16

RANCAN, Fiorenza	ドイツ	ベルリン自由大学研究員	'17. 9.10-'17. 9.16
KAMMARABUTR, Jirayu	タイ	チュラロンコン大学大学院生	'17. 9.11-'18. 2.28
PAISUWAN, Waroton	タイ	チュラロンコン大学大学院生	'17. 9.19-'18. 1. 6
TEANWARAWAT, Jitpinan	タイ	Kasetsart University	'17. 9.26-'18. 1.31
IMMONEN, Esa-Ville	フィンランド	University of Oulu 大学院生	'17.10. 7-'17.10.14
HUTTULA, Marko	フィンランド	University of Oulu 教授	'17.10. 8-'17.10.14
ZWICK, Christian	ドイツ	University Jena 大学院生	'17.10. 9-'17.11.12
NIRUN, Ruankaew	タイ	Kasetsart University	'17.10.16-'18. 1.16
ODELIUS, Michael	スウェーデン	ストックホルム大学教授	'17.10.19-'17.10.27
SUBRAMANIAM, Jeevithra	マレーシア	マラヤ大学大学院生	'17.10.21-'18. 3.31
MAKMUANG, Sureerat	タイ	チュラロンコン大学大学院生	'17.11. 1-'18. 4.30
VU, Anna	ドイツ	ベルリン自由大学大学院生	'17.11. 2-'18. 9.30
YU, Tianlun	中国	Fudan University 大学院生	'17.11.27-'17.12. 9
FANG, Yifei	中国	Fudan University 研究員	'17.11.27-'17.12. 9
LOU, Xia	中国	Fudan University 大学院生	'17.11.27-'17.12. 9
UNRUANGSRI, Junjuda	タイ	チュラロンコン大学講師	'17.12. 3-'18. 1.12
5. 所長招へい協力研究員			
RUBEN, Mario	ドイツ	Karlsruher Institute of Technology 教授	'17. 6.12-'17. 6.12
ANDRIENKO, Denis	ドイツ	Max Planck Institute プロジェクトリーダー	'17. 6.29-'17. 6.30
齋藤雅明	ドイツ	マックスプランク化学エネルギー変換研究所研究員	'17. 7. 5-'17. 7.05
井上 宏	アメリカ	Harvard University 研究員	'17. 9.11-'17. 9.12
HEBERLE, Joachim	ドイツ	Freie Universitat Berlin 名誉教授	'18. 1.22-'18. 1.23
6. 招へい研究員			
VISOOTSAT, Akasit	タイ	Kasetsart University 大学院生	'17. 4. 1-'17. 6.23
CHIRAWAT, Chitpakdee	タイ	National Nanotechnology Center 研究員	'17. 5. 9-'17. 7.31
JUNKAWE, Anchalee	タイ	National Nanotechnology Center 博士研究員	'17. 5. 9-'17. 7.31
HORINEK, Dominik	ドイツ	University of Regensburg 教授	'17. 6.15-'17. 6.16
TITUAN, Jaunet	フランス	CEISAM, University of Nantes 博士研究員	'17. 7.12-'17. 7.12
HSIEH, Yu-Hsin	台湾	National Taiwan University 大学院生	'17. 7.27-'17. 9. 7
OLAYA-CASTRO, Alexandra	イギリス	University College London 准教授	'17. 8. 1-'17. 8. 2
TIRUMALASETTY, Mahesh	インド	IISER Kolkata 大学院生	'17. 8.13-'17. 8.26
ADEL EZAT, Ahmed	エジプト	Cairo University 大学院生	'17. 8.17-'17. 8.24
FEJER, Martin	アメリカ	Stanford University 教授	'17. 8.16-'17. 8.19
HSIEH, Chia-Lung	台湾	Academia Sinica, Principal Investigator	'17. 9.19-'17. 9.23
平田 聡	アメリカ	University of Illinois 教授	'17. 9.18-'17.10.27
CHENG, Yuan-Chung	台湾	National Taiwan University 准教授	'17. 9.28-'17. 9.30
SUN, Zhengyi	中国	Nanjing Tech University 准教授	'17. 8.28-'17. 8.30
AHN, Tae Kyu	韓国	Sungkyunkwan University 准教授	'17. 9.27-'17. 9.30
近藤 徹	アメリカ	Massachusetts Institute of Technology 博士研究員	'17. 9.26-'17. 9.27
ZHAO, Pei	中国	Xi'an Jiaotong University 博士研究員	'17. 9.19-'17.12.31
MARGUET, Bastien	フランス	Ecole Normale Supérieure 大学院生	'17.10.11-'17.10.31
AKA, Gerard	フランス	フランス国立パリ高等科学学校教授	'17.10.11-'17.10.12
遠藤 晋平	オーストラリア	Monash University Research Fellow	'17.10.10-'17.10.10
BO, Stefano	スウェーデン	Stockholm University 博士研究員	'17.11.27-'17.11.29
LI, Chun-Biu	スウェーデン	Stockholm University 准教授	'17.11.27-'17.11.30
POKLUKAR, Petra	スウェーデン	Stockholm University 大学院生	'17.11.27-'17.11.29
PATNAIK, Archita	インド	Indian Institute of Technology 教授	'17.11.29-'17.11.30

表4 国際交流協定締結一覧

相手方機関名	国名	協定書等名	主な内容	締結年月日	有効期限	相手方署名者	機 構 署名者
中国科学院 化学研究所	中国	分子科学における日・中共同 研究プロジェクト覚書	共同研究（物質分子科学，光 分子科学，理論計算分子科学）	2013. 9. 6	2018. 9. 5	化学研究所長	所長
中央研究院 原子・分子科学 研究所	台湾	分子科学研究所と中央研究 院原子・分子科学研究所との 間の分子科学における協 力に関する覚書	共同研究（物質関連分子科 学，原子，分子との光科学， 理論と計算の分子科学）	2017. 1.12	2020. 1.11	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
タイ国立ナノテ クノロジー研究 センター	タイ	自然科学研究機構分子科学 研究所とタイ国立科学技術 開発庁ナノテクノロジー研 究センターとの分子科学分 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	2017.10.30	2022.10.29	所長	所長

(2017.12.31 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 29 年度は岡崎コンファレンスは開催されなかった。

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。第 11 回シンポジウム「分子科学の最前線」（分子科学研究所、2005 年 3 月）は、文部科学省の「日韓友情年 2005（進もう未来へ、一緒に世界へ）」記念事業としても認定された。その後、第 12 回シンポジウム「光分子科学の最前線」（済州島、2007 年 7 月）、第 13 回シンポジウム「物質分子科学・生命分子科学における化学ダイナミクス」（淡路島、2009 年 7 月）、第 14 回シンポジウム“New Visions for Spectroscopy & Computation: Temporal and Spatial Adventures of Molecular Science”（釜山、2011 年 7 月）、第 15 回シンポジウム“Hierarchical Structure from Quantum to Functions of Biological Systems”（神戸、2013 年 7 月）を開催してきた。第 16 回シンポジウムは、当初 2015 年 7 月に釜山にて開催予定であったが、時に流行した MERS（中東呼吸器症候群）の懸念により開催が直前に断念され、運営スタッフの交代とともに開催延期となり 2017 年 7 月に釜山にて第 16 回シンポジウム“Frontiers in Molecular Science: Structure, Dynamics, and Function of Molecules and Complexes”が開催された。以下に詳細を記す。

世話人として、日本側は解良教授と斉藤教授、韓国側は Taiha JOO（POSTECH）、Sunmin RYU（POSTECH）両教授をホストとしての開催となった。シンポジウム内容としては、ナノイメージング、ナノ電荷輸送をホットトピックスとして掲げ、広く物理化学領域をカバーしつつ理論系・実験系が概ね半々でプログラムが組まれ相互学術交流が持たれた。日本側は主催機関である分子科学研究所メンバー（8 名）に加え、北海道大学、早稲田大、大阪大、東京大

から本領域の気鋭の理論・実験研究者に依頼した。韓国側の講演者は、Chosun Univ., Houston Univ., Hanyang Univ., Jeonju Univ., Kyonggi Univ., Kyunghee Univ., National Univ., Pukyong Korea Univ., Pusan National Univ., Sookmyung Women's Univ., Seoul National Univ., Sungkyunkwan Univ., Sogang Univ., Yonsei Univ., KAIST, DGIST, UNIST, POSTECH, GIST, KRICT, KRISS と多機関（14 大学，6 研究機関）から参加があった。また韓国開催の折には Summer Symposium of KCS-Physical Chemistry Division としての共催となることが常であるが、今回は通例と趣を異にして非常に多くの韓国人学生が参加し、多くのポスター発表（129 件）が盛大に行われた。また IBS（Institute for Basic Science）特別セッションが組まれるなど、会議中の講演数も大きく増加し並行セッションの形式がとられた。そのため講演を拝聴する機会が限定されてしまったが、連日にわたる懇親会等の手厚いもてなしにより、人的交流の機会は十分であった。次回第 17 回は 2019 年日本にて開催予定で、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 ～2007	08	09	10	11	12	13	14	15	16	17
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	33	4	3	3	1	1					1
東京工業大学	42						1	1	3	2	1
お茶の水女子大学	6										
横浜国立大学	1				1	1					
金沢大学	11										
新潟大学	6										
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	87	6	6	4	11	12	11	9	12	12	9
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	44	1	2			1	1				
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	26	1				2	2	1	1		1
神戸大学	6										
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	26	4	4	4	2	3	2	2	1	2	2
大阪市立大学	4										
大阪府立大学	2										
姫路工業大学	1										
学習院大学	1										
北里大学	2										
慶應義塾大学	9										
上智大学	1										
立教大学						1	1				
中央大学				1							
東海大学	3										
東京理科大学	9										
東邦大学	3										
星薬科大学	1										
早稲田大学	13										
明治大学	1										
名城大学	4										
岡山理科大学	1										
*その他	3		1	1	3	6	6	8	4	1	2
計	650	17	17	17	27	30	24	27	26	17	16

*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（2017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	18
機能分子科学専攻	10	6	20
計	17	13	38

在籍学生数（2017年12月現在） 単位：人

（年度別）

入学年度専攻		2013	2014	2015	2016	2017	計	定 員
構造分子科学専攻	5年一貫	1	2	2	5	4	14	2
	博士後期	0	2	4	1	1	8	3
機能分子科学専攻	5年一貫	0	0	2	5	5	12	2
	博士後期	0	0	1	3	3	7	3

学位取得状況 単位：人

（年度別）

専 攻	1991～2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	100(12)	7	5	2	2	6	4	2	4	1	3	136(12)
機能分子科学専攻	80(14)	4	3	5	1	3	6	1(3)	3	6	1	113(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	1989～2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017
構造分子科学専攻	139(2)	5(1)	5(3)	5(1)	1(1)	6(2)	5(4)	11(4)	7(3)	6(5)	5(4)
機能分子科学専攻	117(1)	5(2)	7(2)	4(2)	6(2)	8(2)	4	2(1)	4(3)	8(5)	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		
	1989-2015 年度	2016 年度	2017 年度	1989-2015 年度	2016 年度	2017 年度
中 国	32			11	1	
フランス				1		
ロシア				1		
バングラデッ 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	2		1	4	2	1
マレーシア	1					
パキスタン			1			
エジプト						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～'15 年度	'16 年度	'17 年度	'89～'15 年度	'16 年度	'17 年度	
北海道大学	2		1(1)	2			5(1)
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	6(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	3(3)			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(1)	2(1)
長岡技術科学大学	1		1(1)				2(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)	2(2)	7	2(2)		17(7)
名古屋工業大学	1				1(1)	1(1)	3(2)
豊橋技術科学大学	5			3(1)			8(1)
三重大学	1						1
京都大学	15(1)	1(1)		17			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		1	6(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)	2(2)
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		1(1)	5(1)
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	4(1)			2(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		1(1)	5(1)
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	47(3)		1	30(3)	4(1)	2	84(7)

*外国の大学等

() は5年一貫で内数

修士生の現職身分別進路（2017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	39	36	75
民間企業	27	17	44
その他	26	22	48
計	140	112	252

3-5-3 オープンキャンパス・分子研シンポジウム

2017年6月2日（金）に、岡崎コンファレンスセンターにおいて分子研シンポジウム2017を開催し、引き続き3日（土）に分子研オープンキャンパス2017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11回目になる。分子研関係者、総研大卒業生を中心に5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66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19名、大学教員及び関連機関4名、中学教諭（民間）1名であった。また所内からも多数参加頂いた。

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	1	0	0	0	0	1
東 北	0	1	1	1	0	3
関 東	21	6	0	2	0	29
甲信越	1	0	0	0	0	1
北 陸	0	0	0	0	0	0
東 海	6	2	0	0	0	8
近 畿	9	6	3	1	1	20
中国・四国	1	0	0	0	0	1
九州・沖縄	3	0	0	0	0	3
合 計	42	15	4	4	1	66

3-5-4 夏の体験入学

2017年8月7日（月）から10日（木）までの4日間、分子科学研究所において、第14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（46名）を受け、選考の結果、24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7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8日（火），9日（水）：配属研究室にて研究体験

8月10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	慶應義塾大学	学部3年	金属錯体で学ぶ人工光合成	正岡 准教授
2	東京工業大学大学院	修士1年		
3	東京工業大学	学部3年	計算化学のハッキング体験学習	柳井 准教授
4	東北大学	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
5	日本女子大学	学部3年		
6	名古屋市立大学	学部3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
7	信州大学大学院	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
8	名古屋大学	学部4年		
9	慶應義塾大学	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
10	名城大学	学部4年	有機トランジスタ	山本 教授
11	早稲田大学	学部2年	キラル分子を合成し，その機能を探索する	榎山 准教授
12	名古屋大学	学部3年		
13	京都大学大学院	修士1年	NMRを用いてタンパク質のかたちと動きを実感する	加藤（晃）教授
14	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
15	名城大学	学部2年		
16	福井工業高等専門学校	学部2年	有機EL素子の作製と発光測定	平本 教授

17	電気通信大学	学部4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
18	富山大学	学部3年		
19	近畿大学	学部3年		
20	学習院大学	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	早稲田大学	学部3年	タンパク質で生物時計を作ってみよう	秋山 教授
22	国際基督教大学	学部3年		
23	東京大学	学部3年	フロンティア軌道理論と量子化学計算	江原 教授
24	大阪市立大学大学院	修士1年	遷移金属ナノ触媒を作る！	魚住 教授

3-5-5 総研大アジア冬の学校

2017年12月15日（金）分子科学研究所明大寺地区研究棟において、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14回目である。インターンシップ生（IIPA：分子研アジア国際インターンシッププログラム）を中心に、国内他大学への留学生1名を加え、8名を受け入れた。また、所内からは10名のポスター発表への参加があった。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。当日は、フラッシュトークおよびポスター発表において、所内の総研大生、教員との交流が持たれ盛況であった。講演者は下記のとおりである。

TANAKA, Kiyohisa (IMS, SOKENDAI)

“ARPES Studies on High- T_c Superconductors in UVSOR”

KOBAYASHI, Genki (IMS, SOKENDAI)

“Study on H⁻ Conductive Oxyhydrides for Next-Generation Battery Systems”

AKIYAMA, Shuji (IMS, SOKENDAI)

“The Frontier in Cyanobacterial Circadian Clock System”

HAYASHI, Shigehiko (Kyoto Univ.)

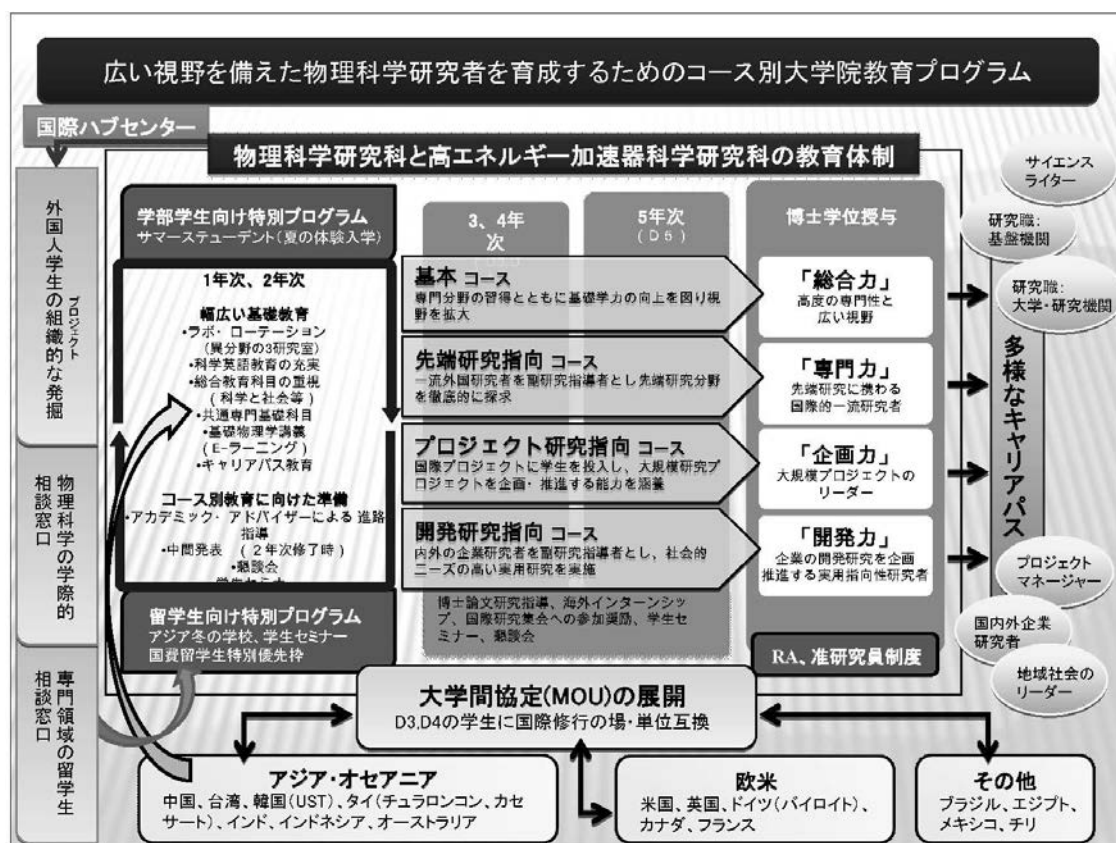
“Theoretical Understanding and Design of Molecular Functions of Proteins”

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.nips.ac.jp/index.html>)。

2017年度の本プログラムの活動を以下に要約する。

(1) 講義

講義は原則英語で行われ、遠隔地講義配信システムを利用して現地、遠隔地専攻に差がなく受講できるようにしている。本年度は、10科目（①統合生命科学入門、②統合生命科学シリーズ、③統合生命科学実践コース、④分子細胞生物学 II、⑤バイオインフォマティクス演習、⑥発生生物学 III、⑦生体分子シミュレーション入門、⑧基礎生体分子科学、⑨構造生体分子科学、⑩統合進化学）が実施された。2015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、生理科学専攻の西田基宏教授がオーガナイザーで「生命システムの時空間設計～生命をみる、よむ、創る～」というタイトルで8月に開催された。今年度は新センターが目指すテーマ「生命をみる、よむ、つくる」を見据えた講義を企画した。本スクールには、日本、マレーシア、中国、タイ、バングラディッシュ、フランス、ベトナム、アメリカ、リトアニア、トルコ、ウズベキスタン、エジプト、インドと様々な国籍の学生および若手教員（討論参加者として参加）が参加し、総勢97名（うち外国籍30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日目の午後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。特に法人となつてからは、全国の分子科学コミュニティの連帯を強めるために研究支援部門を強化してきた。法人化後に新設された部門には、「安全衛生管理室」、「広報室」、「史料編纂室」があり、引き続き活発な活動を行っている。また、平成 25 年度から自然科学研究機構は「研究大学強化促進事業」の支援対象機関となり、分子研もこの事業の一環で「研究力強化戦略室」が設置され、広報室と史料編纂室は研究力強化戦略室に発展的に含まれることになった。さらに今後、技術課はこの戦略室と連携して研究支援業務を進める事になる。

技術課は、研究支援組織の中核になる大きな集団を構成している。分子科学研究所は、法人化後、技術課に所属する技術職員を公募で選考採用したり、研究室配属の技術職員を研究施設に配置転換したりすることによって、大型の研究施設を維持管理する部門や共同利用を直接支援する部門を増強した。平成 19 年度に組織編成を大きく見直したが、新しい研究センターの設置や研究所の構想により即した体制を整えるため、平成 25 年 7 月に 7 技術班を 6 技術班に再編し一部の人員配置換えも行った。（「2-5 構成員」を参照）。

安全衛生管理室は、法人化に伴い、研究所の総括的な安全衛生が労働安全衛生法という強制力を持つ法律によって規制されるようになったため、その法律の意図するところを積極的かつ効率的に推進するために設置された。それまでは、設備・節約・安全委員会という意思決定のための委員会が存在していたが、安全衛生の実際の執行は技術課が一部を担当したものの、専門に執行する組織はなかった。現在、安全衛生管理室には、専任の助教と事務支援員、十名弱の兼任の職員を配置し、執行組織として多くの施策を実行している。部分的に、平成 14 年 3 月に廃止した研究施設の「化学試料室」の機能も有している。担当職員は安全衛生を維持するのに必要な資格を全て取得し任務にあたっている。

広報室は、法人化と共に設置した部門であり、研究活動報告や要覧誌の発行などに留まらず、国民により積極的に研究所で行っている研究内容を分かりやすく紹介することに重点を置き様々な活動を行ってきた。例えば分子研における研究トピックスの発信やプレスリリース、分子研ウェブサイトの整備、事業内容を紹介する動画の制作や展示室を見学者に公開するなど、研究所のアウトリーチ活動全般を担っている。これらの活動を研究力強化の立場から見直すことも含めて、今後は研究力強化戦略室として一体的に活動することになった。

史料編纂室は、法人化後に設置された支援組織としては一番新しい。法人化後まもなく迎えた創立 30 周年記念行事の中で分子研設立の経緯を残すことの重要性が認識された。このため、総研大葉山高等研究センターを中心に発足した「大学共同利用機関の歴史」研究プロジェクトに参加する形で史料編纂室を発足させた。分子研設立の経緯と共に、過去に所員が行ってきた研究、分子科学コミュニティの形成過程などの歴史を整理・記録してきた。今後は広報資料や研究活動等評価資料（IR 資料）という観点で、研究力強化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2017年4月1日現在で32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压ガスの知識、放射線管理、その他技術的な側面から毎週職場巡視を行い、分子研の安全衛生管理に寄与している。

技術職員が組織化されたのは、1975年に創設された分子科学研究所技術課が日本で最初である。技術職員が組織化したことで直接待遇改善につながったが、組織化の効果はそれだけでなく、施設や研究室の狭い枠に留まっていた支援を広く分子科学分野全体の研究に対して行うことができるようになり、強力な研究支援体制ができあがった。支援体制の横のつながりを利用し、岡崎3機関の岡崎統合事務センターと技術課が協力して最良の研究環境を研究者に提供することを目標に業務を推進している。しかし、事務組織とは違って分子研の技術職員は流動性に乏しいので、組織と個人の活性化を図るために積極的に次のような事項を推進している。

4-1-1 技術研究会

施設系技術職員が他の大学、研究所の技術職員と技術的交流を行うことにより、技術職員相互の技術向上に繋がることを期待し、1975年度、分子研技術課が他の大学、研究所の技術職員を招き、第1回技術研究会を開催した。内容は日常業務の中で生じたいろいろな技術的問題や失敗、仕事の成果を発表し、互いに意見交換を行うものである。その後、毎年分子研でこの研究会を開催してきたが、参加機関が全国的規模に広がり、参加人員も300人を超えるようになった。そこで、1982年度より同じ大学共同利用機関の高エネルギー物理学研究所（現、高エネルギー加速器研究機構）、名古屋大学プラズマ研究所（現、核融合科学研究所）で持ち回り開催を始めた。その後さらに全国の大学及び研究機関に所属する技官（現、技術職員）に呼びかけ新たな技術分野として機器分析技術研究会も発足させた。現在ではさらに多くの分科会で構成された総合技術研究会が大学で開催され、さらなる発展を遂げつつある。表1に今までの技術研究会開催場所及び経緯を示す。

表1 技術研究会開催機関

年度	開催機関	開催日	分科会	備考
昭和50	分子科学研究所	昭和50年2月26日	機械	名大(理)(工)のみ
昭和51	分子科学研究所	昭和50年7月20日	機械	学習院大など参加
		昭和51年2月	機械、(回路)	名大(工)回路技術
昭和52	分子科学研究所	昭和52年7月	機械	都城工専など参加
		昭和53年2月	機械、(回路)	名大プラ研回路技術
昭和53	分子科学研究所	昭和53年6月2日	機械、回路	技術研究会について討論会 分科会形式始める
	高エネルギー物理学研究所	昭和53年10月27日	機械技術	

昭和 54	分子科学研究所	昭和 54 年 7 月	機械, 回路, 電子計算機	電子計算機関連の分科会を創設
	高エネルギー物理学研究所	昭和 54 年 10 月 19 日	機械	
	分子科学研究所	昭和 55 年 2 月	機械, 回路, 電子計算機	
昭和 55	高エネルギー物理学研究所	昭和 55 年 10 月 24 日	機械	
	分子科学研究所	昭和 56 年 1 月 30 日	機械, 回路, 電子計算機, 低温	低温分科会を創設 技術課長 内田 章
昭和 56	分子科学研究所	昭和 56 年 7 月	機械, 回路, 電子計算機, 低温	
	高エネルギー物理学研究所	昭和 56 年 1 月 30 日	機械	
昭和 57	高エネルギー物理学研究所	昭和 58 年 3 月 17-18 日	機械, 回路, 電子計算機, 低温	技術部長 馬場 斉 3 研究機関持ち回り開催が始まる
昭和 58	分子科学研究所	昭和 59 年 3 月 2-3 日	機械, 回路, 電子計算機, 低温	
昭和 59	名古屋大学プラズマ研究所	昭和 59 年 11 月 15-16 日	機械, ガラス, セラミック, 低温回路, 電子計算機, 装置技術	実行委員長 藤若 節也
昭和 60	高エネルギー物理学研究所	昭和 61 年 3 月 19-20 日	機械, 計測制御, 低温, 電子計算機, 装置技術	技術部長 山口 博司
昭和 61	分子科学研究所	昭和 62 年 3 月 19-20 日	機械, 回路, 電子計算機, 低温	
昭和 62	名古屋大学プラズマ研究所	昭和 63 年 3 月 29-30 日	機械, 回路, 低温, 電子計算機, 装置技術	
昭和 63	高エネルギー物理学研究所	平成元年 3 月 23-24 日	機械, 計測制御, 低温, 電子計算機, 装置技術	技術部長 阿部 實
平成元	分子科学研究所	平成 2 年 3 月 19-20 日	機械, 回路, 低温, 電子計算機, 総合技術	2 ヶ所で懇談会
平成 2	核融合科学研究所	平成 3 年 3 月 19-20 日	機械, 低温, 計測制御, 電子計算機, 装置技術	
平成 3	高エネルギー物理学研究所	平成 4 年 2 月 6-7 日	機械, 低温, 計測制御, 電子計算機, 装置技術	
平成 4	分子科学研究所	平成 5 年 3 月 11-12 日	装置 I, 装置 II, 低温, 電子計算機	実行委員長 酒井 楠雄 3 研究機関代表者会議
平成 5	核融合科学研究所	平成 6 年 3 月 23-24 日	機械, 低温, 計測制御, 電子計算機, 装置技術	技術部長 村井 勝治 研究所間討論会
平成 6	高エネルギー物理学研究所	平成 7 年 2 月 16-17 日	機械, 低温, 計測制御, 電子計算機, 装置技術	技術部長 三国 晃 研究所間討論会
平成 7	分子科学研究所	平成 8 年 3 月 18-19 日	機械, 回路, 計測制御, 電子計算機, 化学分析	技術課長 酒井 楠雄 研究所間懇談会 化学分析を創設
平成 8	国立天文台・電気通信大学共催	平成 8 年 9 月 19-20 日	計測・制御, 装置・回路計算機・データ処理	初めての分散開催
	大阪大学産業科学研究所	平成 8 年 11 月 14-15 日	機器分析	
	名古屋大学理学部	平成 9 年 2 月 6-7 日	装置開発 A,B, ガラス工作	
	北海道大学理学部	平成 9 年 2 月 27-28 日	低温	
平成 9	核融合科学研究所	平成 9 年 9 月 11-12 日	機械, 回路, 低温, 電子計算機, 装置技術	
	静岡大学	平成 9 年 11 月 27-28 日	機器分析	工学部, 情報学部, 電子工学研究所 各技術部の共催
平成 10	名古屋工業大学	平成 10 年 11 月 26-27 日	機器・分析	
	高エネルギー加速器研究機構	平成 11 年 3 月 4-5 日	工作, 低温, 回路・制御, 装置, 計算機	インターネット討論会
平成 11	東北大学	平成 11 年 11 月 11 日	機器・分析	
	分子科学研究所	平成 12 年 3 月 2-3 日	装置, 回路, 極低温, 電子計算機, ガラス工作	インターネット技術討論会
平成 12	福井大学	平成 12 年 9 月 28-29 日	機器・分析	
	東北大学	平成 13 年 3 月 1-2 日	工作, 装置, 回路, 極低温, 情報・ネットワーク, 材料・物性開発, 地球物理観測	
平成 13	大阪大学	平成 13 年 11 月 15-16 日	機器・分析	
	核融合科学研究所	平成 14 年 3 月 14-15 日	工作, 装置, 計測・制御, 低温, 計算機・データ処理	技術部長 大竹 勲
平成 14	東京大学	平成 15 年 3 月 6-7 日	工作, 装置, 回路, 極低温, 情報・ネットワーク, 生物科学, 機器・分析, 地球物理観測, 文化財保存, 教育実験・実習	
平成 15	三重大学	平成 15 年 11 月 20-21 日	機器・分析	
	高エネルギー加速器研究機構	平成 16 年 2 月 26-27 日	工作, 低温, 回路・制御, 装置, 計算機	技術部長 三国 晃

平成 16	佐賀大学	平成 16 年 9 月 16-17 日	機器分析を主とし全分野	
	大阪大学	平成 17 年 3 月 3-4 日	工作, 装置, 回路・計測制御, 低温, 情報ネットワーク, 生物科学, 教育実験・演習・実習	
平成 17	岩手大学	平成 17 年 9 月 15-16 日	機器・分析	
	分子科学研究所	平成 18 年 3 月 2-3 日	機械・ガラス工作, 回路, 低温, 計算機, 装置	技術課長 加藤 清則
平成 18	広島大学	平成 18 年 9 月 14-15 日	安全衛生, 計測制御, 機器・分析など全分野	
	名古屋大学	平成 19 年 3 月 1-2 日	機械・ガラス工作, 装置技術, 回路・計測・制御, 低温, 情報ネットワーク, 生物, 分析・環境, 実験・実習	
平成 19	富山大学	平成 19 年 8 月 23-24 日	機器・分析	
	核融合科学研究所	平成 20 年 3 月 10-11 日	工作・低温, 装置, 計測・制御, 計算機・データ処理	技術部長 山内 健治
平成 20	愛媛大学	平成 20 年 9 月 25-26 日	機器・分析	
	京都大学	平成 21 年 3 月 9-10 日	機械・ガラス工作, 装置, 回路・計測・制御, 低温, 情報ネットワーク, 生態・農林水産, 医学・実験動物, 分析・物性, 実験・実習・地域貢献, 建築・土木, 環境・安全	
平成 21	琉球大学	平成 22 年 3 月 4-5 日	機器分析, 実験・実習, 地域貢献, 安全衛生	
	高エネルギー加速器研究機構	平成 22 年 3 月 18-19 日	機械, 低温, 計測・制御・回路, 装置, 情報・ネットワーク	
平成 22	東京工業大学	平成 22 年 9 月 2-3 日	機器分析, 実験・実習, 地域貢献, 安全衛生	
	熊本大学	平成 23 年 3 月 17-18 日	機械・ガラス工作, 装置, 回路・計測・制御, 低温, 情報ネットワーク, 生態・農林水産, 医学・実験動物, 分析・物性, 実験・実習・地域貢献, 建築・土木, 環境・安全	
平成 23	信州大学	平成 23 年 9 月 8-9 日	機器分析, 東日本震災関連	
	分子科学研究所	平成 24 年 3 月 8-9 日	機械・ガラス工作, 回路技術, 極低温技術, 情報／ネットワーク, 装置運用	
	神戸大学	平成 24 年 3 月 15-16 日	実験・実習, 地域貢献, 安全衛生	
平成 24	大分大学	平成 24 年 9 月 6-9 日	機器・分析	
	愛媛大学	平成 25 年 3 月 7-8 日	機械・材料, 電気・電子・通信, 情報, 建築・土木・資源, 化学・物性評価, 特殊・大型実験・自然観測, 極低温, 生物・農林水産, 生命科学, 実験・実習, 地域貢献・技術者養成, 施設管理, 安全衛生管理	
平成 25	鳥取大学	平成 25 年 9 月 12-13 日	機器・分析, 安全衛生	
	核融合科学研究所	平成 26 年 3 月 13-14 日	工作技術, 装置技術, 計測・制御技術 低温技術, 情報処理技術	
平成 26	北海道大学	平成 26 年 9 月 4-5 日	機械・材料・製作, 特殊・大型・自然観測, 電気・電子・通信, 極低温, 情報, 生物・農林水産, 生命科学, 機器・分析, 実験・実習, 建築・土木・資源, 施設管理・安全衛生管理, 地域貢献・技術者養成活動	
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	
平成 29	長岡科学技術大学	平成 29 年 8 月 29-30 日	機器・分析	
	分子科学研究所	平成 29 年 2 月 8-9 日	電子回路, リソグラフィ, 機械工作	
	核融合科学研究所	平成 30 年 3 月 1-2 日	工作技術, 装置技術, 計測・制御技術, 極低温技術, 情報・ネットワーク技術	

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。一方で、大学連携研究設備ネットワーク事業を通じて、技術職員向けの各種研修会を開催している。詳しくは各種事業報告（第5章）をご参照いただきたい。

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
平成28年度	7

表3 平成29年度技術研修受入状況（2017.4.1～2018.3.31）

氏 名	所 属	受入期間	備 考
千葉 寿	岩手大学技術部	H29.9.13～9.16	防災システムの試作機開発と共同開発打ち合わせ並びに ARM マイコン導入研修
藤崎 聡美	岩手大学技術部	H29.9.13～9.16	防災システムの試作機開発と共同開発打ち合わせ並びに ARM マイコン導入研修
古舘 守通	岩手大学技術部	H29.9.13～9.16	防災システムの試作機開発と共同開発打ち合わせ並びに ARM マイコン導入研修
修行 美恵	九州工業大学飯塚キャンパス技術部	H29.9.13～9.16	防災システムの試作機開発と共同開発打ち合わせ並びに ARM マイコン導入研修
伊藤 功	東京大学物性研究所	H29.10.31～11.2	HDLを用いた実践的な FPGA 開発の構築手法の習得
鈴木 光一	国立天文台	H29.11.2	技術職員の人事評価制度の確立に向けて
鈴木 光一	国立天文台	H29.11.14	技術職員の人事評価方法の取り組みについて
西村 良太	名古屋大学全学技術センター	H29.11.27～12.1	3D プリンタによる分子模型製作に関する研修
鈴木 光一	国立天文台	H29.12.28	技術職員の新規採用に関する情報交換
伊藤 功	東京大学物性研究所	H30.2.8～2.9	第19回分子科学研究所技術研究会
小野 雅章	筑波大学	H30.2.8～2.9	第19回分子科学研究所技術研究会
笠 晴也	北海道大学	H30.2.8～2.9	第19回分子科学研究所技術研究会
竹内 晃久	SPRING-8	H30.2.8～2.9	第19回分子科学研究所技術研究会
松谷 晃宏	東京工業大学	H30.2.8～2.9	第19回分子科学研究所技術研究会
谷田貝悦男	東京大学生産技術研究所	H30.2.8～2.9	第19回分子科学研究所技術研究会
岡田 則夫	JAXA／国立天文台	H30.2.8～2.9	第19回分子科学研究所技術研究会
大淵 喜之	国立天文台	H30.2.8～2.9	第19回分子科学研究所技術研究会
小林 和宏	名古屋大学	H30.2.8～2.9	第19回分子科学研究所技術研究会
武田 洋一	岩手大学	H30.2.8～2.9	第19回分子科学研究所技術研究会
涌井 勇輔	東京大学生産技術研究所	H30.2.8～2.9	第19回分子科学研究所技術研究会

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） 低温工学協会功劳賞（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）
鈴木光一	日本化学会化学技術有功賞（2007）
吉田久史	日本化学会化学技術有功賞（2008）
水谷文保	日本化学会化学技術有功賞（2009）
青山正樹	日本化学会化学技術有功賞（2012）

4-2 安全衛生管理室

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

また安全衛生管理室では、分子科学研究所全職員に対する安全衛生教育も行っており、そのための資料作成、各種資格取得の促進、専門家の養成などを行っている。雇入れ時の安全衛生教育は年度初旬に定例として行うほか、講習テキストと講習会DVDを用意し、年度途中の採用者に対しても、随時安全衛生教育が可能となるよう配慮している。

また長期滞在する外国人研究者に対しては、英文の安全衛生講習会テキストならびに英語版講習会DVDを作成し、これらの教材を用いた安全衛生教育を行っている。安全衛生に必要な情報は、安全衛生管理室のWEBページ（<http://info.ims.ac.jp/safety/>）にまとめて掲載しており、必要な規則や書式に即座にアクセス可能である。また、安全衛生管理室員全員のメールアドレスが登録されたメーリングリスト（safety@ims.ac.jp）も設定しており、各種の質問などに機動的に対応できる体制になっている。年に数回、分子研安全衛生委員会（岡崎3機関の「安全衛生委員会」に相当）と合同で連絡会議を開催し、所内の安全衛生状況に関する情報交換、連絡の徹底等が円滑に行なわれる体制を採っている。

平成28年度において整備を開始した「安全ガイド2017-2018」の編集を完了し平成29年9月に上梓した。本安全ガイドは所内のみならず全国共同利用にあたっての来所者全員が閲覧・遵守するよう電子版も合わせて提供されている。今後、英語対応などについても順次取り組んでいく予定である。

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「分子研レポート2006」を参照）。第7回では、加藤晃一教授が自らの体験に基づいて「研究の醍醐味とは何か」を伝える講演を行った。第11回では、大峯巖所長が「水の揺らめきの世界；揺らぎと反応と生命」というタイトルで講演を行った。第14回は、再び講演会全体の企画を分子科学研究所が中心となって行った（詳細は「分子研レターズ68号」を参照）。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—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—宇宙に仲間はいろのか—	学術総合センター—橋記念講堂
11	2011. 6.12	宇宙と生命—宇宙に仲間はいろのか II—	ナディアパーク
12	2012. 3.20	知的生命の可能性 —宇宙に仲間はいろのか 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―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―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―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―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～地球から系外惑星へ～	学術総合センター―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
24	2017. 9.18	極限環境における生命 ～生命創成の探究に向けて～	東京国際交流館
25	2018. 3.11	プラズマが拓く無限の可能性 ～エネルギー、医療、産業、そして宇宙～	名古屋大学坂田・平田ホール

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法人を構成する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8回）、および各種の大型分子模型（第4回～第8回）、研究者トーク（第6回～第8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
8	2017.10. 8	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
113	2017. 8. 2	渋滞のサイエンス	西成 活裕 (東京大学教授)
114	2017.10.17	世界に広がるファインバブルサイエンス	寺坂 宏一 (慶應義塾大学教授)
115	2017.12.22	深海に学ぶ未来技術	出口 茂 (JAMSTEC 海洋生命理工学研究開発センター長)
116	2018. 3. 9	光で有機分子の電子の特徴を調べる	解良 聡 (分子科学研究所教授)
		究極の光を作る	藤 貴夫 (分子科学研究所准教授)

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インストーミングの様な場を提供できることを目指している。

以下は2017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
903	2017. 4.14	Rydberg Enabled Quantum Technologies	Prof. Dieter Jaksch (University of Oxford)
904	2017. 6. 2	Mapping Chemical Interactions and Dynamics with Femtosecond X-Ray Pulses	Dr. Philippe Wernet (Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH)
905	2017. 6.12	Molecular Quantum Materials and Devices	Prof. Dr. Mario Ruben (Karlsruhe Institute of Technology (KIT), University of Strasbourg)
906	2017. 6.26	超分子集合体・液晶・高分子の設計・構造制御と機能化 Design, Structural Control, and Functionalization of Supramolecular Assemblies, Liquid Crystals, and Macromolecules	加藤 隆史 (東京大学大学院工学系研究科教授)
907	2017. 6.29	Molecular Understanding of Organic–Organic Interfaces and Mixtures	Prof. Denis Andrienko (Max Planck Institute for Polymer Research)
908	2017. 9.22	Ultrafast Coherent Electronic and Nuclear Dynamics Induced by Attopulses	Prof. Francoise Remacle (University of Liège)
909*	2017.10.12	Small and Fast: Coherent Å-fs Chemistry	Prof. Wilson Ho (University of California, Irvine)
910	2017.10.19	アト秒レーザー科学研究施設の構想 The Planning of Attosecond Laser Facility	山内 薫 (東京大学大学院理学系研究科教授)
911	2017.11.24	半導体量子ドットとその光素子への展開 Semiconductor Quantum Dots for Advanced Photonic Devices	荒川 泰彦 (東京大学生産技術研究所教授)
912**	2017.12.15	Theoretical Understanding and Design of Molecular Functions of Proteins	林 重彦 (京都大学大学院理学研究科教授)
914	2018. 1. 9	非弾性電子トンネル分光で探る表面界面の低エネルギー励起—理論的観点から Observation of Low Energy Excitation at Surfaces and Interfaces by Using Inelastic Electron Tunneling Spectroscopy—From Theoretical Point of View	南谷 英美 (東京大学大学院工学系研究科講師)
913	2018. 1.23	The Grateful Infrared —Novel IR Techniques to Probe the Functional Changes of Membrane Proteins	Prof. Dr. Joachim Heberle (Freie Universität Berlin)
915	2018. 2.13	量子アニーリングの基礎と展開	西森 秀稔 (東京工業大学理学院教授)
916	2018. 2.20	Coordination Self-Assembly: From the Origins to the Latest Advances	藤田 誠 (東京大学大学院工学系研究科教授)
917	2018. 3. 2	Detailed Insight in the Interfaces of Organic–Inorganic Hetero-Junctions	Prof. Eberhard Umbach (Universität Würzburg, KIT, Member of the Board of acatech (National Academy of Science and Engineering, Muenchen))

* 森野レクチャーとの共同開催

** 総研大アジア冬の学校との共同開催

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	物の性質は何でできるか
1987 年度	齋藤 一夫	生活を変える新材料
1988 年度	井口 洋夫	分子の世界
1991 年度	吉原経太郎	光とくらし
1994 年度	伊藤 光男	分子の動き
1997 年度	齋藤 修二	分子で宇宙を見る
2000 年度	茅 幸二	原子・分子から生命体までの科学
2003 年度	北川 禎三	からだで活躍する金属イオン
2006 年度	中村 宏樹	分子の科学，独創性，そして東洋哲学
2009 年度	平田 文男	生命活動における『水』の働き
2013 年度	大峯 巖	水，水，水

4-3-6 その他

(1) 岡崎商工会議所（岡崎ものづくり推進協議会）との連携

岡崎商工会議所は、産学官連携活動を通じて地元製造業の活性化と競争力向上を目的に「岡崎ものづくり推進協議会」を設立し、多くの事業を行っている。この協議会と自然科学研究機構岡崎 3 研究所との連携事業の一環で、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、山本グループによる「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。尚、山本グループは海陽中等教育学校の生徒さんの実験指導・支援も行った（見事、金メダルを受賞された）。

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）、第9回（2017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	吉原経太郎 教 授
12	1987. 9.26	コンピュータで探る分子の世界	柏木 浩 助教授
15	1988. 7. 2	目で見える低温実験・発光現象と光酸化現象	木村 克美 教 授
18	1988.10.29	人工光合成とは何か	坂田 忠良 助教授
21	1989. 6.24	星間分子と水——生命を育む分子環境——	西 信之 助教授
24	1989.10.21	常温での超伝導は実現できるか	那須奎一郎 助教授
27	1990. 6.23	目で見える結晶の生成と溶解 ——計算機による実験（ビデオ）——	大瀧 仁志 教 授
30	1990.10.20	電気と化学	井口 洋夫 所 長
33	1991. 6.22	自己秩序形成の分子科学 ——分子はどのようにしてリズムやパターンを作り出すか——	花崎 一郎 教 授
37	1991.12.14	からだと酸素、そしてエネルギー：その分子科学	北川 禎三 教 授
39	1992. 7. 7	サッカーボール分子の世界	加藤 立久 助教授
42	1992.11.13	炭酸ガスの化学的な利用法	田中 晃二 教 授
45	1993. 6.22	化学反応はどのように進むか？	正 畠 宏祐 助教授
48	1993.10. 1	宇宙にひろがる分子の世界	齋藤 修二 教 授
51	1994. 6.21	分子の動き	伊藤 光男 所 長
54	1995. 6.20	生体内で活躍する鉄イオン——国境なき科学の世界——	渡辺 芳人 教 授
57	1996. 6.28	分子を積み上げて超伝導体を作る話	小林 速男 教 授
60	1997. 6.13	生体系と水の分子科学	平田 文男 教 授
63	1998. 6.12	電子シンクロト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）	宇理須恒雄 教 授
66	1999. 6. 8	レーザー光で、何が見える？ 何ができる？	猿倉 信彦 助教授
69	2000. 6. 6	マイクロチップレーザーの可能性	平等 拓範 助教授
72	2001. 6. 5	ナノメートルの世界を創る・視る	寿田 博一 助教授
75	2002. 6. 4	クラスターの科学——原子・分子集団が織りなす機能——	佃 達哉 助教授
78	2003. 6.24	科学のフロンティア——ナノサイエンスで何ができるか？	小川 琢治 教 授
81	2004. 6.22	生命をささえる分子の世界——金属酵素のしくみを探る	藤井 浩 助教授
84	2005. 6.28	環境に優しい理想の化学合成	魚住 泰広 教 授
87	2006. 6.20	電気を流す分子性結晶の話	小林 速男 教 授
90	2007. 6.15	光で探る生体分子の形と機能	小澤 岳昌 准教授

93	2008. 6.17	宇宙の光を地上で作る——シンクロトン光源——	加藤 政博 教 授
96	2009. 6. 9	化学結合をいかに教えるか	平本 昌宏 教 授
101	2010.11. 9	生命の営みと「水」 ——化学・物理の理論とコンピュータで探る分子スケールの生命現象——	平田 文男 教 授
104	2011.11. 1	原子のさざ波と不思議な量子の世界	大森 賢治 教 授
105	2012. 6. 5	電気はどうして流れるのか	中村 敏和 准教授
109	2013.11.26	身近になってきた有機エレクトロニクス	山本 浩史 教 授
112	2014.11.28	生物の時間をはかるタンパク質時計	秋山 修志 教 授
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
121	2017.11.21	金属と生物：金属が生体内で示す様々な機能	青野 重利 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秘密	小川 琢治 教 授
美川中	2007. 2.26	生物から学ぶ光と色	小澤 岳昌 助 教 授
矢作西小	2007.12. 4	原子の世界	櫻井 英博 准 教 授
六ツ美北部小	2008.10.10	ミクロの世界の不思議	平本 昌宏 教 授
矢作中	2009.12. 4	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
岩津中	2010.10. 6	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
東海中	2010.11.30	電気を流す物ってどんな物？	中村 敏和 准 教 授
岩津中	2011. 7.11	電気を流す物の性質、磁界のはたらき	中村 敏和 准 教 授
河合中	2011.10.17	計算機シミュレーションで見る原子・分子の世界	伊藤 暁 助 教
常磐中	2011.10.19	光の不思議	寺内かえで 技術職員
六ツ美中	2012. 1.17	魔法の物質「触媒」ってなんだろう？	唯 美津木 准 教 授
竜南中	2012. 1.27	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
矢作北中	2012. 2.14	目で見えないものを見る光	岡本 裕巳 教 授
額田中	2012. 6.21	植物から学ぶ人工光合成	正岡 重行 准 教 授
岩津中	2012. 6.29	魔法の物質「触媒」ってなんだろう？	唯 美津木 准 教 授
甲山中	2012. 7.11	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授

竜南中	2012.10.19	計算機シミュレーションで見る原子・分子の世界	伊藤 暁 助 教
矢作中	2012.11. 8	光と分子	長坂 将成 助 教
城北中	2013. 2.12	小さすぎる世界を覗いてみよう	鹿野 豊 特任准教授
南中	2013.10. 9	計算機シミュレーションで見る原子・分子の世界	伊藤 暁 助 教
常磐中	2013.11.20	バイオフィルムって何？	吉岡 資郎 助 教
竜海中	2013.11.27	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
矢作北中	2013.12. 6	「電気はどうして流れるの!？」 電磁誘導・超伝導を体験しよう	中村 敏和 准 教 授
葵中	2014. 1.16	光で探る分子のダイナミックな姿	大島 康裕 教 授
竜南中	2014. 3.14	Chemistry meets computing	倉重 佑輝 助 教
六ツ美北中	2014. 7.14	光エネルギーとタンパク質	古谷 祐詞 准 教 授
城北中	2014. 9.26	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
河合中	2014.10.20	結晶学入門 ～分子のかたち、私たちがのかたち～	村木 則文 特任助教
新香山中	2014.10.30	時間の顕微鏡——目では見えない高速な出来事を観察する光の技	岡本 裕巳 教 授
北中	2015. 1.29	水中での有機分子変換反応 ～水と油の関係改善でグリーン反応～	大迫 隆男 助 教
竜南中	2015. 3. 6	計算化学～実験でも暗記でもない化学	福田 良一 助 教
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～	楳山 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
東海中	2017.10.17	おもしろい形の分子を作る	鈴木 敏泰 准 教 授
岩津中	2017.10.18	温度と分子の状態変化	中村 彰彦 助 教
河合中	2017.11.22	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
美川中	2017.11.30	液体窒素で探る、物質の性質 ——理科の楽しみ方と使い方——	片柳 英樹 助 教

岡崎市立小豆坂小学校（親子おもしろ科学教室）

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

スーパーサイエンススクール推進事業

対象校	開催日	テーマ	講 師
岩津中	2014. 2. 7	光で探るダイナミックな分子の姿	大島 康裕 教 授
新香山中	2014.12.16	電磁誘導・超伝導を体験しよう	中村 敏和 准 教 授

4-4-5 職場体験学習

岡崎市内及び近隣の中学校及び高等学校の要請により、職職場体験学習として中・高生の受け入れに協力している。

年度	受入件数	参加者数	体験受入機関名
2007	5	10	岡崎市立甲山中学校、愛知県立豊田西高等学校、岡崎市立竜海中学校、豊橋市立中部中学校、岡崎市立竜南中学校
2008	4	12	岡崎市立甲山中学校、豊川市立音羽中学校、岡崎市立六ツ美中学校、岡崎市立竜南中学校
2009	4	8	岡崎市立甲山中学校、豊川市立音羽中学校、岡崎市立東海中学校、岡崎市立竜南中学校
2010	4	9	岡崎市立甲山中学校、岡崎市立竜海中学校、岡崎市立竜南中学校、豊田市立高岡中学校
2011	6	7	豊田市立猿投台中学校、岡崎市立竜海中学校、岡崎市立常盤中学校、岡崎市立額田中学校、岡崎市立竜南中学校、豊田市立藤岡中学校
2012	4	12	岡崎市立竜海中学校、岡崎市立岩津中学校、岡崎市立美川中学校、岡崎市立額田中学校
2013	5	10	豊田市立上郷中学校、岡崎市立常盤中学校、岡崎市立北中学校、岡崎市立河合中学校、岡崎市立竜海中学校
2014	5	7	豊田市立上郷中学校、岡崎市立竜海中学校、岡崎市立東海中学校、岡崎市立福岡中学校、岡崎市立美川中学校
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
2017	4	7	岡崎市立北中学校、岡崎市立甲山中学校、岡崎市立竜海中学校、豊田市立上郷中学校

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。2017年度は、8月に同校の式方式により表彰を行った。

4-5 一般公開

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

回 数	実施月日	備 考
第1回	1979.11. 9 (Fri)	創設記念一般公開
第2回	1980.11.15 (Sat)	
第3回	1981.11.14 (Sat)	3研究所同時公開
第4回	1985. 5.11 (Sat)	10周年記念一般公開
第5回	1988.11. 5 (Sat)	入場者 1700 人
第6回	1991.10.26 (Sat)	入場者 1974 人
第7回	1994.11.12 (Sat)	入場者 2700 人
第8回	1997.11.15 (Sat)	入場者 2400 人
第9回	2000.10.21 (Sat)	入場者 1183 人
第10回	2003.10.25 (Sat)	入場者 1600 人
第11回	2006.10.21 (Sat)	入場者 2058 人
第12回	2009.10.17 (Sat)	入場者 1346 人
第13回	2012.10.20 (Sat)	入場者 1126 人
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 東国大学付属女子高等学校（韓国） ほか
2017	14	306	自動車技術会中部支部，愛知教育大学（生物コース），愛知教育大学（化学コース），愛知県立豊川高等学校，山梨県立日川高等学校，東海大学附属高輪台高等学校，浜松南高等学校，愛知県立岡崎高等学校，岡崎商工会議所青年部，静岡県立榛原高等学校，宇宙航空研究開発機構（JAXA），岡崎市火曜会，星城高等学校，愛知県立高蔵寺高等学校

（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
2017	8	25

4-7 プレスリリース

研究成果プレスリリース（共同発表を含む）

（2017 年）

発表日	タイトル	担当研究部門
2017. 2.10	末梢神経系の髄鞘が形成されるメカニズムの解明 —指定難病のシャルコー・マリー・トゥース病の発症メカニズム解明に期待—	岡崎統合バイオサイエンスセンター
2017. 2.27	渦巻く光が自然界にも存在	極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門
2017. 3.13	有機分子のなかの「粒子」と「波動」の中間的な電荷状態の解明～有機半導体ペンタセン単結晶の価電子バンドの実測に成功～	極端紫外光研究施設 光物性測定器開発研究部門
2017. 4. 7	原子層超伝導の磁性分子による精密制御に成功 ～分子内の「隠れた自由度」が鍵～	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門
2017. 4.11	Notch シグナルと血管形成に関与する糖修飾 O- 結合型 N- アセチルグルコサミンの発見 —アダムズ・オリバー症候群など先天性疾患の発症メカニズムの解明、腫瘍疾患の治療法開発に期待—	岡崎統合バイオサイエンスセンター
2017. 4.21	有機単結晶エレクトロニクスの扉を開く —ドーピング有機単結晶のホール効果測定に世界で初めて成功—	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門
2017. 5.23	味を感知する受容体のセンサー領域の立体構造を初めて解明	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
2017. 6. 2	トポロジカル絶縁体を強磁性にする新たな方法を発見 —量子異常ホール効果を利用したデバイス開発へ進展—	極端紫外光研究施設 光物性測定器開発研究部門、 物質分子科学研究領域 電子構造研究部門
2017. 6.21	動物プランクトンの脳ではたらく、紫外線センサータンパク質	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門
2017. 6.28	完全大気圧下での光電子分光測定に世界で初めて成功	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門
2017. 7.11	ガンマ線の光渦を発生させる手法を発見 —新しい同位体分析や非破壊検査技術への応用が期待される—	極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門
2017. 7.21	高エネルギー電子による光渦放射の精密観測に成功	極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門
2017. 8. 7	SPring-8 を用いた精密構造解析による分子軌道分布の可視化法を開発、電子状態の直接観測に成功 —電荷分布観測による新たな分子設計への提案—	物質分子科学研究領域 電子物性研究部門
2017. 8. 9	有機結晶中の伝導電荷が振動の十二単をまとう：分子・結晶設計に振動効果の重要性を示す	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門
2017. 8.21	2次元 sp ² 炭素高分子材料の開拓に成功	物質分子科学研究領域 電子物性研究部門
2017. 8.22	1兆分の1秒の間の電場印加で絶縁体を金属に高速スイッチング ～消費電力の小さな新たな光デバイスに向けた新手法～	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門

(2017 年)

報道日	記事内容	新聞名	該当研究部門
2017. 1. 7	はっくつ 新・三河遺産 「ユーブイソール -III」	中日新聞	極端紫外光研究施設
2017. 1.20	第 13 回 日本学術振興会賞に 25 氏	科学新聞	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門, 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
2017. 3.10	自然界でらせん状の光 分子研が理論 新物質合成に期待	日経産業新聞	極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門
2017. 3.10	分子研が発見 自然界にも「渦巻く光」	科学新聞	極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門
2017. 3.17	女子学生 6 人を表彰 国際ソロプチミスト岡崎	東海愛知新聞	極端紫外光研究施設 光化学測定器開発研究部門
2017. 4.21	平成 29 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰	科学新聞	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門
2017. 5. 7	グローバル愛 s	中日新聞	生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門
2017. 5.13	化学会 初の女性会長就任へ	読売新聞	所長
2017. 5.19	女性初の化学会会長 来年 5 月から川合眞紀氏	科学新聞	所長
2017. 5.19	ドーピングした有機単結晶 ホール効果を観測	科学新聞	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門
2017. 6. 4	先端人 水から酸素 効率良く	朝日新聞	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門
2017. 7. 7	「世界初」大気圧下での電極触媒挙動観測法 分子研 NEDO 事業で開発 燃料電池の高機能化期待	科学新聞	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門
2017. 7.17	高出力レーザー 小型化 分子研 手のひらサイズに	日本経済新聞	メゾスコピック計測研究センター 繊細計測研究部門
2017. 7.14	ゴカイ幼生脳内で機能 光センサータンパク質 紫外線を感じ 分子研が解明	科学新聞	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門
2017. 7.28	先端技術 テクノトレンド 高出力レーザー超 小型化 日本勢 巻き返せるか	日経産業新聞	メゾスコピック計測研究センター 繊細計測研究部門
2017. 8. 9	高エネ電子の放射「光渦」 精密観測に成功 分子研	日刊工業新聞	極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門
2017. 8.20	「量子シミュレーター」研究盛ん ミクロの世界 再現し解析	中國新聞	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2017. 8.25	高エネルギー電子による光渦放射 分子研など 精密観測成功	科学新聞	極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門
2017. 8.28	ミクロの「非常識」探る 「量子シミュレーター」 で原子を再現, 分析 愛知の科学チームが研究	大分合同新聞	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2017. 8.30	「ミクロの非常識」探ろう 原子や分子 量子 シミュレーター使い研究	山形新聞	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門

2017. 9. 1	科学スコープ 「ミクロの非常識」 解明へ	四國新聞	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2017. 9. 6	ミクロの世界 解明へ新技術	神戸新聞	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2017. 9. 7	ミクロの世界 解き明かせ 「量子シミュレーター」 岡崎で研究	岐阜新聞	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2017. 9. 8	有機結晶中の伝導電荷 多彩な振動を「重ね着」	科学新聞	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門
2017.10.18	先端技術 ノーベル賞に体内時計の謎 たんぱく質 周期刻むカギ	日経産業新聞	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
2017.10.18	科学スコープ 力及ぼし合う粒子を見る	京都新聞	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2017.11. 2	紫綬 表面科学研究功績 分子科学研究所所長 川合真紀さん	中日新聞	所長
2017.11. 2	紫綬褒賞の受章者	中日新聞	所長
2017.11. 2	秋の褒章 775 人	毎日新聞	所長
2017.11. 2	紫綬褒章受章者	朝日新聞	所長
2017.11. 2	秋の褒章 44 人・団体	朝日新聞	所長
2017.11. 2	秋の褒章受章者 紫綬褒章	日本経済新聞	所長
2017.11. 2	秋の褒章 42 人と 2 団体	読売新聞	所長
2017.11. 2	秋の褒章 775 人 22 団体	読売新聞	所長
2017.11. 2	西三河は 11 人 秋の褒章	東海愛知新聞	所長

5. 各種事業

大学共同利用機関である分子科学研究所は、国際的な分子科学研究の中核拠点として所内外の研究者を中心とした共同研究と設備を中心とした共同利用を積極的に推進し、大学等との人事流動や国際交流を活性化しながら、周辺分野を含めた広い意味の分子科学の発展に貢献する使命を持っている。

分子科学研究所が行う事業には、『先端的な研究を推進する拠点事業』、『国内の研究者への共同研究・共同利用支援に関する事業』、『研究者の国際ネットワーク構築に関する事業』、『研究力強化推進事業』がある。予算的には運営費交付金の一般経費・特別経費、文部科学省の委託事業、日本学術振興会等の競争的資金で実施している。運営費交付金の一般経費以外はいずれも期間が定められており、運営費交付金一般経費も毎年削減を受けている。第1期中期計画期間に特別経費であった3事業（UVSOR 共同利用事業、エクストリームフォトンクス連携事業（理化学研究所との連携）、研究設備ネットワーク事業）は平成22年度からの第2期中期計画の開始において相当予算削減された上一般経費化された。その際、エクストリームフォトンクス連携事業はUVSOR 共同利用事業を広く光科学共同利用事業ととらえ、光科学関連の理化学研究所との連携はすべてその中に含まれることになった。なお、スーパーコンピュータ共同利用事業の特別経費については第1期中期計画期間の段階からすでに一般経費化されている。

（1）『先端的な研究を推進する拠点事業』のUVSOR 共同利用事業（放射光分子科学）、エクストリームフォトンクス連携事業（レーザー分子科学）に関連するものとして、光創成ネットワーク研究拠点プログラム（分子科学研究所は分担）を受託、実施している。平成29年度までの事業である。また、スーパーコンピュータ共同利用事業（理論計算分子科学）に関連するものとして、文科省の「革新的ハイパフォーマン・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5-9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の促進事業 (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」事業として経常経費化され、さらに、本年度から「大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用の促進」事業（以下「本事業」という）として継続的に引き継がれ、化学系の装置のみならず物質科学全般の装置に範囲を拡大しつつある。分子科学研究所機器センターが事務局として運営を担っている。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200の機関が参加しており、外部公開機器の登録台数は585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1,984台に上り（数値は平成29年12月31日現在）、登録ユーザー数は11,000名を超えている。表1には利用実績件数を示した。平成19年度の始動以降、学内の共同利用（学部間利用）から発展し、学外利用も順調に増加傾向にある。

本年度より第3期中期計画に合わせて5年計画で以下の事業を開始した。装置の学外利用を促進するために、全国13の地域から提案され採択された相互利用加速事業（表2、表3）などを実施した。また、新たにマネージャー及びコーディネーター2名を配置し、ネットワーク事務局として、講習会・研修会開催等を強化した（表4）。通常の研修会企画に加え、ネットワーク事務局において、技術習得希望者からの要望と研究設備の運用に熟練した高度能力人材の情報の照合を迅速に行い、最適な講習会を機動的に実施できるよう、人材育成データベースの試作を進め、一部試行的に講習会を実施した。これと並行して、展示会や学会等での啓発活動の強化、参画機関への訪問・要望調査等を実施した。また、始動期より使われてきた予約・課金システムの利便性向上、大容量化対応、セキュリティ対策機能等を目的として、次年度からの利用に向けて全面更新を行っているところである。さらには、他設備共用事業との連携による相互利用・共同利用の推進活動も実施した。平成29年度にネットワーク事務局主導で開催した講習会・研修会等（表4）は一部を除き、文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム事業との共催で実施した。また、展示会出展等も、すべて文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム事業との共同出展であり、JASIS2017は文部科学省科学技術・学術政策局のとりまとめによる共用プラットフォーム形成支援プログラム、新たな共用システム導入支援プログラム及び設備サポートセンター整備事業との共同出展を行った。また、平成29年度国立大学法人機器・分析センター協議会会議で前述の人材育成データベースに関する発表を行い、協力して推進することを確認した。

本事業は、平成28年度より、機構本部の自然科学大学間連携推進（NICA）事業においても予算が措置されることとなっている（平成28年度は名称が大学連携自然科学拠点形成事業）。従来、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等（マネージャー人件費や予約課金システム更新費、講習会強化費用等）が可能となった。

今後は、①新予約・課金システムの安定運用、②研究設備の相互利用加速事業の継続実施③講習会・研修会の強化、④広報活動の継続、⑤地域協調的な研究設備整備・共用の在り方検討、⑥他設備共用事業等（設備サポートセンター整備事業、国立大学法人・分析センター協議会、その他）との連携強化（展示会等の共同企画や人材育成データベース作成の協力）等推進する予定である。

表1 大学連携研究設備ネットワーク利用実績一覧

	H19～29 合計	H25	H26	H27	H28	H29*
学内	744,632	88,453	108,824	112,982	111,728	91,779
学部間	528,558	64,711	85,214	86,544	80,219	61,321
学外	8,265	887	1,176	1,312	1,544	1,463
国立大間	5,263	576	682	760	807	693
国立大以外	3,002	311	494	552	737	770
民間企業	1,273	162	240	298	226	316
合計	752,897	89,340	110,000	114,294	113,272	93,242

* H29.12.31 現在

表2 平成29年度加速事業B（装置整備関連）課題一覧

地域	大学	部署	代表者	職	課題名・設備名
北海道	北海道大	大学院工学研究院	大熊 毅	教授	FT-NMR 装置相互利用促進事業
東関東	千葉大	共用機器センター	榊飛 雄真	准教授	赤外分光光度計の顕微ユニット拡張
	千葉大	共用機器センター	榊飛 雄真	准教授	質量分析装置の総合メンテナンス
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	大学間相互利用と講習会の実施に必要な設備の点検・修理
	山梨大	機器分析センター	柴田 正実	センター長	インレンズ型 FE-SEM(S-5200) のドライポンプ等整備と周辺環境整備
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	単結晶 X 線構造解析装置の制御 PC の更新および真空部の整備
北陸	金沢大	理工研究域	大橋 政司	准教授	極低温粉末 X 線回折装置で使用するヘリウムガスの回収設備の整備
西近畿	大阪大	産業科学研究所	鈴木 健之	准教授	Maldi-Tof- 質量分析装置の補修整備による相互利用促進
中国	広島大	自然科学研究支援開発センター	齋藤 健一	教授	高性能ガスクロマトグラフ飛行時間質量分析計の点検・調整
	岡山大	自然生命科学研究支援センター	高橋裕一郎	教授・部門長	産学官対象のプロテオーム受託解析の受入体制の整備と強化
	岡山大	自然生命科学研究支援センター	田村 隆	教授・部門長	岡山理科大学等との地域共同利用ネットワーク形成に向けた受入体制整備
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	AV500 用コンプレッサーメンテナンス
	愛媛大	学術支援センター 物質科学部門	内藤 俊雄	教授	JNM-EX400 型 NMR プローブ修理
九州	長崎大	産学官連携戦略本部	真木 俊英	准教授	質量分析システム整備事業
	鹿児島大	研究支援機構・ 研究支援センター	澤田 剛	准教授	電子線マイクロアナライザーの復活再生に伴う相互利用加速事業
	鹿児島大	研究支援機構・ 研究支援センター	澤田 剛	准教授	液体クロマトグラフ質量分析計の復活再生に伴う相互利用加速事業

表3 平成29年度加速事業A（講習会等）採択課題一覧

地域	大学	部署	代表者	職	講習会名
北関東	宇都宮大	地域共生研究開発センター	鈴木 昇	センター長・教授	実践的要素分析のための機器横断型分析講習会の実施
東関東	千葉大	共用機器センター	榊飛雄真	准教授	NMR スキルアップトレーニング
	千葉大	共用機器センター	榊飛雄真	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継続的实施
	電気通信大	大学院情報理工学研究科	平野 誉	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継続的实施
	山梨大	機器分析センター	柴田正実	センター長	設備 NW へのインレンズ型 FE-SEM 追加登録へ向けた人材育成
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
	静岡大	技術部	竹本裕之	技術専門職員	微量揮発物質に特化した質量分析ワークフローの活用促進
	豊橋技術科学大	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
	名古屋工業大	大型設備基盤センター	江 龍修	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	学術研究院工学系部門	岡田敬志	講師	オージェ電子分光分析装置を用いた各種材料の評価
	富山大	研究推進機構研究推進総合支援センター	松田健二	センター長・教授	超伝導核磁気共鳴装置にかかる技術習得による設備相互利用促進
中国	鳥取大	生命機能研究支援センター	森本 稔	准教授	蛍光 X 線講習会
	広島大	自然科学研究支援開発センター	齋藤健一	教授	質量分析によるプロテオーム解析の講習会
	広島大	大学院工学研究院	定金正洋	准教授	固体核磁気共鳴装置の相互利用促進を目的とする技術講習会の開催
	広島大	自然科学研究支援開発センター	田中伸和	センター長・教授	透過型電子顕微鏡による生物試料観察を目的とする技術講習会の開催
	広島大	自然科学研究支援開発センター	河田尚美	契約専門職員	極微小結晶用単結晶構造解析システムの講習会
	山口大	大学研究推進機構	水上洋一	教授	タンパク質解析システムの相互利用加速に向けた技術講習会開催
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・核磁気共鳴装置の分析・解析合宿
九州	佐賀大	総合分析実験センター	寺東宏明	准教授	技術職員の設備サポート技能向上事業
	長崎大	産学官連携戦略本部	真木俊英	准教授	電子顕微鏡指導員養成事業

表4 分子研主催講習会・研修会開催一覧

講習会・研修会名*	開催日	開催場所	参加者数
すぐには役に立たない？ 研究講座セミナー	H29.6.2	科学技術振興機構	62 名
平成 29 年度技術職員・技術者研修会 in 長岡	H29.8.28	アオーレ長岡	90 名
NMR 解析ソフトウェアにおけるデータ処理および高分子サンプルにおける測定手法の最適化に関する講習	H29.9.8	愛媛大学	5 名
ソフトでウェットな素材をやさしく観る	H29.10.6	東京国際交流館	44 名
平成 29 年度技術職員・技術者研修会 in 室蘭工大	H29.10.19	室蘭工業大学	20 名
固体 NMR および特殊試料の溶液 NMR に関する講習	H29.10.26~27	広島大学	3 名
XPS スペクトルデータをどう理解するか？ セミナー	H29.10.27.	東京大学	92 名
有機微量分析測定に関する初級講習	H29.11.21~22	宇都宮大学	1 名
FE-SEM 講習会	H29.11.22	千歳科学技術大学	5 名
質量分析における効果的な装置選択ならびに分析条件設定等に関する講習	H29.11.27~12.1	北海道大学	1 名
産学連携・共用利用促進のためのプロジェクトマネジメント講習	H29.12.1	JAIST 金沢オフィス	20 名
KFM 講習会	H29.12.19	大阪大学	19 名
英語研修会 **	全 9 回	分子研など	のべ 83 名
第二回有機元素分析研究会	H30.1.11	岡山大学	19 名
XPS 講習会	H30.1.22	北陸先端科学技術大学院大学	1 名
X線回折定量分析研修会 **	H30.3.14~15	熊本大学	10 名

* 平成 29 年度技術職員・技術者研修会 in 室蘭工大, XPS 講習会, X線回折定量分析研修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

** 開催予定の講習会等の参加人数等は見込み数

5-2 イメージング・サイエンス（自然科学研究機構）

5-2-1 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。なお、本プロジェクトは、平成30年度の生命創成探究センター設置に伴い、同センターに組み入れられ、プロジェクトは終了することとなった。

平成16年度に機構が発足した後、研究連携室で議論がなされ、機構内連携の一つのテーマとして「イメージング・サイエンス」を立ち上げることが決定された。連携室員の中から数名の他に、各研究所からイメージングに関連する研究を行っている教授・准教授1～2名が招集され、「イメージング・サイエンス」小委員会として、公開シンポジウムその他プロジェクトの推進を担当することとなった。

平成17年8月の公開シンポジウム（後述）の後、小委員会において、本プロジェクトの具体的な推進について議論を行った。この機会に、各研究所が持つ独自のバックグラウンドを元に、それらを結集して、広い分野にわたる波及効果をもたらすような、新しいイメージング計測・解析法の萌芽を見いだすことが理想、という議論がなされた。

それに向けた方策として、機構内の複数の研究所にまたがる、イメージングに関連する具体的な連携研究テーマをいくつか立てる案を連携室に提案したが、予算の問題等もあってこれは実現しなかった。

その後、機構の特別教育研究経費「分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成」の新分野創成型連携プロジェクトの項目として、イメージングに関連した研究所をまたがる提案が数件採択・実施された（「イメージング・サイエンス—超高圧位相差電子顕微鏡をベースとした光顕・電顕関連3次元イメージング—」など）。これが上述の提案に代わるものとして、「イメージング・サイエンス」に係る具体的な機構内連携研究を推進した。平成20年度には、岡崎統合バイオサイエンスセンター（生理研）の永山教授（当時）を中心に再編された小委員会が招集され、国立天文台に設置された一般市民向け立体視動画シアター「4D2U」（4-dimensional to you）を利用した、広報コンテンツ作成に関する検討が開始された。5研究所がもつイメージングデータを元に、機構の研究成果を一般市民向けに解説する立体動画集の制作を目論んだ（現在提供されているコンテンツは宇宙関係のもののみ）。同時に、イメージングを中心とした機構内連携の新たな展開について議論を行っている。平成21年度に機構本部の下に、5研究所が連携して自然科学の新しい分野や問題を発掘することを目指して、新分野創成センターが設置され、その中にブレインサイエンス研究分野及びイメージングサイエンス研究分野がおかれた。イメージングサイエンス研究分野は5研究所から1名ずつの併任教授が就任した（平成24年度から各研究所2名ずつに増員された）。また外部からの任期付き客員教授1名及び実動部隊としての博士研究員若干名を公募し、上述のようなイメージングコンテンツの新たな表示法や、イメージからの特徴抽出の手法等の開発を推進することとなった。客員教授及び特任助教、博士研究員が、実際の活動を行ってきたが、客員教授は平成25年度で任期を終了し、現在特任助教2名が活動を継続している。平成22年度には、イメージングサイエンス研究分野所属の研究者と、関連する分野の大学の研究者が集まり、新たな「画像科学」を展開する研究領域を立ち上げて、その活動の模索を開始した。また、機構内でイメージングサイエンスに関わる研究プロジェクトを公募し、平成24年度は9件のプロジェクト研究と3件の研究会、平成25年度は5件のプロジェクト研究と3件の研究会が採択された。平成26年度からは研究プロジェクトの公募形態が大幅に変更され、所外の大学等に属する研究者が研究代表者として応募可能となり、また研究会はプロジェクト研究と同じ枠で公募・採択することとなった。平成26年度は7件のプロジェクト（内1件はトレーニングコース開催）が、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。平成 29 年度も 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。

5-2-2 実施された主な行事

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

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

平成 18 年 12 月 5 日－8 日には、第 16 回国際土岐コンファレンス（核融合科学を中心とする国際研究集会）が核融合研究所主催で土岐市において開催された。この会議ではサブテーマが“Advanced Imaging and Plasma Diagnostics”とされ、プラズマ科学に限らず、天文学、生物学、原子・分子科学を含む広い分野におけるイメージング一般に関するシンポジウムとポスターセッションが企画された。分子科学研究所からも、数名が参加し、講演及びポスター発表を行った。また平成 19 年 8 月 23 日－24 日には、「画像計測研究会 2007」が核融合科学研究所一般共同研究の一環として、核融合科学研究所において開催された。平成 20 年 11 月 10 日－13 日には、第 39 回生理研国際シンポジウムとして、“Frontiers of Biological Imaging—Synergy of the Advanced Techniques”が開催され、機構内のイメージングに関わる研究者も数名（分子研 1 名）が講演を行った。平成 22 年 3 月 21 日には、再び立花隆氏のコーディネートによる自然科学研究機構シンポジウム（東京で開催）において、イメージングサイエンスを取り上げた。平成 22 年 12 月 28 日には、核融合科学研究所において、イメージングサイエンス研究分野所属の研究教育職員と様々な関連分野の全国から研究者が集まり、「画像科学シンポジウム」が開催された。平成 24 年 3 月 5、6 日には、岡崎コンファレンスセンターにおいて、基生研バイオイメージングフォーラムと合同で「画像科学シンポジウム」が開催された。平成 25 年 4 月 10 日には、2 名の特任助教による公開セミナーも実施され、画像処理ソフトウェアの開発にまつわる現状と課題が紹介された。平成 26 年には 2 名の特任助教がオーガナイザーとなり、第 47 回日本発生物学会テクニカルワークショップ「Fundamentals of quantitative image analysis」（5 月 27 日）及び「バイオイメージ・インフォマティクスワークショップ 2014」（6 月 9 日－10 日）が開催された。平成 27－29 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、平成 29 年 11 月 20 日－22 日）が開催された。

5-3 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、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」、超新星残骸や核融合周辺プラズマ、プラズマ医療応用などで見られる「プラズマと中性ガス、液体、固体との相互作用」、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」、物理学や生物学における「階層性」等をテーマとした連携シンポジウムを2月19、20日に名古屋で開催した。また、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するとともに、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。

5-4 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7月～平成34年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と呼び、全国から多くの先端研究者が自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29年度の支援装置・プログラム一覧、表2には平成29年度の採択課題一覧、表3には平成29年度採択・実施件数日数(平成29年4月1日～平成30年3月31日実施分)を示した。

表1 平成29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 上村洋平助教	UVSOR・光分子科学 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。 小型 2 源 RF スパッタ装置は、スパッタ電源 RF300W、ターゲットサイズは ϕ3 インチが 2 基設置可能で、Au、Nb、Ti などを成膜することが可能。 [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)、スピコーター (ミカサ社製 MS-A100)、小型 2 源 RF スパッタ装置 (デボダウン) (クライオバック)]	山本浩史室長 青山正樹技術職員 中野路子技術職員 高田紀子技術職員	装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室
	3 次元光学プロファイラーシステム (Nexview) 3 次元光学プロファイラーシステム (ZYGO Nexview) は、非接触で表面の 3 次元形状測定、表面粗さ測定を行う装置。つなぎ合わせ機能により $\square$ 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 青山正樹技術職員 近藤聖彦技術職員 中野路子技術職員 高田紀子技術職員	装置開発室 装置開発室 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 青山正樹技術職員 近藤聖彦技術職員 豊田朋範技術職員	装置開発室 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 (1) (試料 2 インチまで)]	解良 聡センター長 中尾 聡研究員 松尾友紀子特任専門員	機器センター 物質分子科学 機器センター
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 松尾友紀子特任専門員	機器センター 物質分子科学 機器センター
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 [Mo 線源, CCD 検出器, N ₂ /He ガス吹付温度可変装置]	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, RhK α	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 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 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-K α 線利用）を提供。施設利用として気軽に利用いただける。 [電子分光器 Omicron 社製 EA-125（ツインアノードX線源）]	解良 聡センター長 小杉信博教授 酒井雅弘技術職員 稲垣裕一特任専門員	機器センター UVSOR・光分子科学 UVSOR 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。 [Quantum Design 社製 MPMS-7（ ± 7 T, 2–400 K, 300–800 K, DC）, Quantum Design 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 水川哲徳技術職員 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 水川哲徳技術職員 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 [$\geq 300,000$ Da]	解良 聡センター長 水川哲徳技術職員 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

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 μm, 深度 2 μm, 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 水川哲徳技術職員 藤川清江技術支援員	機器センター 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
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 長尾春代技術支援員	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]	榎山儀恵准教授 泉関督人助教	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 (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 伊藤聡一助教	理論・計算分子科学 理論・計算分子科学
機能性分子システム創製 (磁性薄膜作製評価)	超高真空中で磁性薄膜等を作成し、in situ 磁気光学 Kerr 効果による評価、ならびに、紫外レーザー磁気円二色性光電子顕微鏡 (UV MCD PEEM) によるナノ磁気構造評価を行う。 [超高真空下での磁性薄膜作成・磁気光学 Kerr 効果によるその場観察評価。紫外レーザー磁気円二色性光電子顕微鏡も利用可]	横山利彦教授 上村洋平助教	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
機能性分子システム創製 (生体分子システム)	タンパク質分子をはじめとする生体分子システムの調製や、それらの構造・動態評価を支援。X線溶液散乱計測システムを含む包括的な支援が可能。 [生体分子システムの調製、構造・動態評価]	秋山修志教授 向山 厚助教 古池美彦助教	協奏分子センター 協奏分子センター 協奏分子センター

表2 2017年度(平成29年度)採択課題一覧 分子科学研究所担当分(平成29年12月31日現在)

(1) 協力研究

課 題 名	支援機器等	代 表 者
構造ゆらぎを抑制した標的結合ペプチドと標的分子の結合解析	800NMR	東京工業大学生命理工学院 門之園哲哉
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
ディラック電子系分子性導体をチャネル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
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
希釈冷凍装置を用いた機能性分子化合物の物性研究	有機 FET	大阪大学大学院理学研究科 中澤 康浩
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	800NMR	名古屋市立大学大学院薬学研究科 矢木 宏和
1 次元的電子原子構造を持つ Bi 薄膜の膜厚依存性	ARUPS	大阪大学大学院生命機能研究科 大坪 嘉之
銅イオン輸送に関わるタンパク質のコンフォメーション解析	SAXS	慶應義塾大学理工学部 古川 良明
高い ON/OFF 比で流量と電気抵抗を制御する高集積マイクロ流路バルブの開発	装置開発	名古屋大学未来社会創造機構 宇理須恒雄
原子価互変異性錯体単分子メモリ素子の STM による評価	金属錯体	関西学院大学理工学部 田中 大輔
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基盤の解明	800NMR	国立長寿医療センター研究所 柳澤 勝彦 知症先進医療開発センター

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
リソグラフィーを用いた有機導体単結晶薄膜のホールバー作製と磁場誘起相転移の解明	有機 FET	京都大学大学院理学研究科	前里 光彦
有機電荷移動錯体の圧力下・フィリング制御下での電子相転移の探索と機構解明	有機 FET	名古屋大学大学院工学研究科	伊東 裕
超高速分子ダイナミクス研究のための新規光電子画像観測装置の開発	装置開発	東京工業大学理学院	水瀬 賢太
シングルドメイン抗体設計のための NMR 解析による動的情報の研究	800NMR	東京大学大学院工学系研究科	津本 浩平
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
分子クラウディング環境下における生体分子の機能的構造揺らぎの解析	ESR E680	慶應義塾大学理工学部	苮口 友隆
シャペロニンの構造揺らぎと相互作用の熱力学的研究	800NMR	東京大学大学院理学系研究科	桑島 邦博
遷移金属酸水素化物の電子状態評価	無機材料	東京工業大学大学院物質理工学院	松井 直喜
Catalytic Oxidation of CO by N ₂ O over Nitrogen Coordinated Silicon-Doped Graphene	量子計算	National Nanotechnology Center	Supawadee Namuangruk
HDO Reaction for Biomass Conversion on CoMoS ₂ Monolayer Catalyst	量子計算	National Nanotechnology Center	Supawadee Namuangruk
キラル磁性体 CrNb ₃ S ₆ の ESR による研究	ESR E680	大阪大学大学院理学研究科附属先端強磁場科学研究センター	萩原 政幸
96well マグネットデバイスの開発	装置開発	岡崎統合バイオサイエンスセンター	宮成 悠介
ATR-FTIR 測定用溶液交換フローセルの製作	装置開発	理化学研究所放射光科学総合研究センター	當舎 武彦
ミニ企画展「イデシって、なあに? ～進化の秘密から光るワンピースまで～」	装置開発	蒲郡市教育委員会生涯学習課	白瀧千夏子
α シヌクレインの分子サイズの探索	SAXS	同志社大学脳科学研究科	田中 剛貴
ジラジカル特性を有する縮合多環共役炭化水素の磁化測定	有機 FET	滋賀県立大学工学部	加藤真一郎
空気酸化による金属-フェノキシラジカル錯体の生成とその性質・反応性	金属錯体	茨城大学理学部	島崎 優一
急冷を用いた準安定超伝導状態の生成	金属錯体	理化学研究所	大池 広志
機能性分子薄膜における光強電場効果の研究	有機 FET	東北大学大学院理学研究科	岩井伸一郎
ヒドリド導電性酸水素化物 Ln ₂ LiHO ₃ の合成、構造、イオン導電特性	無機材料	東京工業大学大学院物質理工学院	松井 直喜
高磁場パルス ESR を用いた DNP-NMR (動的核分極-核磁気共鳴分光法) 用分極剤の電子スピンの性質に関する研究	ESR E680	大阪大学大学院理学研究科	神田 泰治
一次元反強磁性体 Cu(C ₄ H ₄ N ₂)(NO ₃) ₂ の高周波 ESR の研究	ESR E680	福井大学学術研究院	浅野 貴行
トンネル構造をもつ新規プロトン導電体の合成	無機材料	大阪工業大学工学部応用化学科	松田 泰明
Quantum Chemical Study of Fluorene-Phenylethylene Cyanoacrylate Fluorescent Molecule for Detection of Heavy Metal	量子計算	King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang	Darinee Phromyothin
Formation Mechanisms and Photovoltaic Characteristics of Fullerenes and Their Derivatives	量子計算	Xi'an Jiaotong University, China	Xiang ZHAO
Paul 型四重極イオントラップによる質量選別のための電気回路シミュレーション	装置開発	広島大学大学院理学研究科	井口 佳哉
立体 π 共役分子の合成と物性開拓	有機合成	名古屋大学	阿波賀邦夫
極低温光学系の開発	装置開発	宇宙科学研究所	和田 武彦
	SAXS	岡山大学	上原 孝
	SAXS	生理学研究所	西田 基宏
	800NMR	北陸先端科学技術大学院大学	山口 拓実
	SAXS	豊田理化学研究所	野上 正行
	ARUPS	東京理科大学理工学部	中山 泰生

(2) 施設利用

課 題 名	支援機器等	代 表 者
新規ポリオキシメタレート錯体の電気化学的酸化還元反応メカニズムの解析	ESR EMX ESR E500 600NMR 溶液	高知大学教育研究部総合科学系 上田 忠治
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
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
メタルフリー・ハロゲンフリーイモータル重合	TGA2950 他 MALDI-TOF	山梨大学大学院総合研究部 森長 久豊

非芳香族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	TGA2950 他	千葉大学大学院融合科学研究科	城田 秀明
金属水酸化物を舞台とする新規量子スピン系の構築	CCD-1 CCD-2 CCD-3 粉末X線 ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7 ラマン FT 可視紫外	成蹊大学理工学部	藤田 渉
Ru 触媒を用いた単層カーボンナノチューブの作製	SEM FIB 低 SEM ESCA ラマン	名城大学理工学部	丸山 隆浩
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 ピコ秒	名古屋大学未来社会創造機構	宇理須恒雄
希土類金属ドーブ型マンガン酸化物ナノ粒子の磁性に関する研究	SQUID-XL7	山形大学大学院理工学研究科	有馬ボシール アハンマド
硫化物半導体ナノ粒子の光物性の解明	蛍光分光 可視紫外 ピコ秒	名古屋工業大学大学院物質工学専攻	濱中 泰
常磁性異種金属一次元鎖錯体の磁気物性評価	CCD-1 CCD-2 CCD-3 SQUID-MS7 SQUID-XL7 ラマン	岐阜大学工学部	植村 一広
ラマン分光法による骨粗鬆症・変形性関節症の分子組成の解析	CCD-1 CCD-2 CCD-3 粉末X線 ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7 ラマン	愛媛大学大学院医学系研究科 岐阜大学教育学部	大嶋 佑介 萩原 宏明
1,2,3- トリアゾール含有シッフ塩基配位子を用いた金属錯体の結晶構造と磁気的性質の解明	CCD-1 CCD-2 CCD-3 粉末X線 ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7 ラマン	静岡大学工学部	植田 一正
分子構造と分子配列の制御による近赤外光の吸収可能な有機半導体の開発とその電子状態の解明	CCD-1 CCD-2 CCD-3 ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	大阪府立大学大学院理学系研究科	細越 裕子
有機ラジカルが形成する量子磁性体の低温磁気構造の解明	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
液相法で作製した磁性薄膜および複合体の磁気的性質の研究	SEM 低 SEM 蛍光X線	東京農工大学大学院工学研究院	嘉治 寿彦
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	CCD-1 CCD-2 CCD-3	愛知学院大学薬学部	小川 法子
シクロデキストリン類と薬物の包接複合体の構造解析	ピコ秒	城西大学理学部	見附孝一郎
過渡吸収法と過渡発光法による有機太陽電池の初期過程に関する速度論的研究	ESR EMX ESR E500 ESR E680 SQUID-MS7 SQUID-XL7	産業技術総合研究所物質計測標準研究部門	松本 信洋
SQUID による粉末試料の磁気モーメント測定法の検討および ESR 測定			

新規機能性ナノマテリアルの構造および物性評価	CCD-3 蛍光X線 ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7 TGA2950 他 MALDI-TOF ラマン FT 蛍光分光 可視紫外	法政大学生命科学部	緒方 啓典
金属ナノ粒子担持型グラフェンオキシドの化学状態分析	低 SEM ESCA	関西学院大学理工学部	橋本 秀樹
導電性有機材料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
Nb ₃ Sn 超伝導線材の高磁場特性改善に向けた添加元素効果	SQUID-MS7 SQUID-XL7	核融合科学研究所	菱沼 良光
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
種々の還元性酸化物の合成とその物性評価	SEM 低 SEM ラマン	名城大学理工学部	才田 隆広
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
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
多周波 EPR 法を用いた光合成反応過程の解析	ESR E680 ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	名古屋大学理学研究科	三野 広幸
FeNi/Cu 多層細線、NiPt ナノ粒子の磁気的性質の解明	SQUID-MS7 SQUID-XL7	岐阜大学工学部	嶋 睦宏
フッ化物電池材料の磁性	SQUID-MS7	京都大学先端イノベーション拠点施設	高見 剛
磁場アセンブリ法による自己組織的ナノ配列構造形成技術の開発	SEM FIB SQUID-MS7 SQUID-XL7	神戸大学先端融合研究環	青木 画奈
非共有結合性相互作用を用いた金属錯体の配位構造制御と磁気的性質	SQUID-MS7 SQUID-XL7 ESR EMX ESR E500 蛍光分光	関西学院大学理工学部	三橋 了爾
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
CD スペクトルを利用した鉄硫黄クラスター生合成酵素群の立体構造変化の解析	円二色性	埼玉大学大学院理工学研究科	藤城 貴史
コラヌレン分子の超音速ジェットレーザー分光	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
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
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
固相相変態を用いて自己形成させたナノグラニュラー磁性体の組織及び磁気特性の検討	SQUID-MS7 SQUID-XL7	横浜国立大学大学院工学研究院	竹田真帆人
CeF ₃ 薄膜を用いた紫外線センサにおけるフッ素欠陥の影響	SEM 低 SEM 蛍光分光 可視紫外	名古屋工業大学	小野 晋吾
オンラインブレンドで射出成形した炭素繊維製品の物性評価	ESCA SEM ラマン 低 SEM	(株) 鈴木化学工業所	井下 邦之
固体高分子型燃料電池の膜電極接合体のX線イメージングと SEM 観察	SEM FIB 低 SEM	名古屋大学物質科学国際研究センター	前島 尚行

ポリフィリン鉄(IV) π ラジカルカチオン錯体の磁気物性	ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	島根大学大学院総合理工学研究科	池上 崇久
様々な軸配位子を有する鉄(III) コロール二量体の構造および磁気的性質	CCD-1 CCD-2 CCD-3 SQUID-MS7 SQUID-XL7	島根大学大学院総合理工学研究科	井手 雄紀
チオフェン-チアゾロチアゾールポリマー薄膜に生成した光電荷分離状態のパルス EPR による構造解析	ESR E680	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	長嶋 宏樹
南極宇宙塵の FE-SEM-EDS による表面組織観察と組成分析	低 SEM	高輝度光科学研究センター利用研究促進部門	上相 真之
芳香族モット絶縁体の磁気特性	ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7 MALDI-TOF ラマン FT	東北大学大学院理学研究科	平郡 諭
酵母トア複合体 1 の活性制御機構の解析	iTC200	基礎生物学研究所	鎌田 芳彰
テトラアニオン性配位子を有する鉄錯体の高酸化状態における電子構造解明	ESR EMX	筑波大学数理学部	小谷 弘明
新しいマルチフェロイクスの磁性	ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	広島大学大学院理学研究科	井上 克也
重元素のレーザーによる新規分離法	蛍光分光 可視紫外 ナノ秒エキシマ	大阪市立大学大学院理学研究科	中島 信昭
双安定性を示す分子性伝導体の極低温構造解析	CCD-3 SQUID-XL7	神戸大学大学院理学研究科	高橋 一志
多環芳香族炭化水素分子のレーザー分光	ナノ秒エキシマ ナノ秒 YAG	福岡大学理学部	御園 雅俊
光誘起プロトン移動を示すスピン転移錯体の開発	CCD-3	九州大学先端物質化学研究所	中西 匠
放射線劣化吸着材の薄片切出し	FIB	日本原子力研究開発機構高速炉サイクル研究開発センター	宮崎 康典
Yb ₂ 分子のレーザー分光	ナノ秒エキシマ ナノ秒 YAG	富山大学理学部	榎本 勝成
多環芳香族炭化水素分子とその重水素置換体のレーザー分光	ナノ秒エキシマ ナノ秒 YAG	広島大学大学院工学研究科	石元 孝佳
芳香族配位子を有する塩素架橋四核ロジウム錯体およびそれらを前駆体とした多核錯体の単結晶 X 線構造解析	CCD-1 CCD-2 CCD-3	島根大学総合理工学研究科	片岡 祐介
複素環を有する新規な TTF 誘導体を用いた磁性伝導体の結晶構造解析	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
純有機磁性伝導体 κ - β'' -(BEDT-TTF) ₂ (PO-CONHC ₂ H ₄ SO ₃) の低温 X 線構造解析	CCD-3	大阪大学大学院理学研究科	坪 広樹
高分子保護金属クラスターの電子状態に関する測定	ESCA	大阪大学大学院工学研究科	櫻井 英博
常温常圧での人工窒素固定を目指した新規窒素錯体の合成と電子的性質	SQUID-MS7 SQUID-XL7 600NMR 溶液	愛知工業大学工学部	梶田 裕二
パルス EPR 法による一重項開裂に伴う三重項励起子間相互作用の解明	ESR E680	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	長嶋 宏樹
微細藻類増殖促進因子の化学特性と分子構造解析	VP-DSC MALDI-TOF	都城工業高等専門学校物質工学科	高橋 利幸
有機配位子の単核および複核金属錯体の磁気的性質	SQUID-MS7 SQUID-XL7	関西学院大学理工学部	御厨 正博
3d 遷移金属添加 AlN の光吸収・光伝導とフォノンの相関の解明	ラマン SQUID-MS7 SQUID-XL7	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田 早紀
フラビノートリプトファン連結分子を用いた光誘起ラジカルペア・システムの構築	ESR E680 蛍光分光 可視紫外	大分大学全学研究推進機構	岡 芳美

空間反転対称性の破れた磁性体の合成とその物性測定	ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	広島大学大学院理学研究科	井上 克也
析出現象を用いたナノグラニューラー磁性体における組織と磁気物性の調査	SQUID-MS7 SQUID-XL7	横浜国立大学大学院工学府	坂倉 響
全 TTF 型電荷秩序絶縁体の構造および分光学的性質	CCD-3 ラマン	京都大学環境安全保健機構	石川 学
有機2次元ラジカル結晶の相転移	CCD-3	名古屋大学	阿波賀邦夫
金属酵素モデル錯体の電子構造の研究	CCD-2 ESR EMX ESR E500 600NMR 溶液	奈良女子大学大学院自然科学系	藤井 浩
Magnetic Plasmonic Graphene for Fluoroassay	SQUID-XL7 SQUID-MS7	静岡大学グリーン科学技術研究所	朴 龍洙
シッフ塩基金属錯体と高分子膜との複合系における光誘起分子配向	円二色性	東京理科大学理学部	秋津 貴城
(C ₆ H ₅ -N=N-C ₆ H ₄) ₂ -C ₆ H ₂ -(C ₆ H ₅ -N=CH-C ₆ H ₄) ₂ の単結晶 X 線構造解析	CCD-1 CCD-3	北陸先端科学技術大学院大学	江 東林
酸素酸化反応による合成手法の開発および DNA 付加体の合成研究	CCD-1 CCD-2 CCD-3 600NMR 溶液	浜松医科大学	黒野 暢仁
小惑星イトカワの微粒子表面の衝突痕の化学組成分析	低 SEM	宇宙科学研究所	松本 徹
熱量測定によるプレフォルディン-2 型シャペロニンシステムのシャペロン機構の解明	iTC200	東京農工大学大学院工学府	養王田正文
硫化物・酸化物電池材料の磁性	SQUID-MS7	京都大学先端イノベーション拠点施設	高見 剛
ESR を利用した米糠による環境計測の試み	ESR E680 ESR EMX ESR E500	新潟大学研究推進機構	古川 貢
30m 望遠鏡 TMT の第 1 期観測装置 IRIS のための駆動機械系の耐久試験後の成分分析	低 SEM	国立天文台	早野 裕
新規シクロメタレート型イリジウム錯体の構造解析	CCD-1 CCD-2 CCD-3	島根大学大学院総合理工学研究科	矢野 なつみ
非平面多環芳香族炭化水素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
Eu ³⁺ イオンを微量添加したホウ酸リチウムの発光特性の研究	蛍光分光	大阪府立大学理学系研究科	河相 武利
カウンターイオンを有するベンズアミジナート架橋ルテニウム二核錯体の単結晶 X 線構造解析と磁化率測定	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
新規配位子型人工 DNA 中に配列した金属イオンのスピン測定	ESR E680 ESR E500 ESR EMX	京都大学国際高等教育院	加藤 立久
ランタン型二核とシアニド金属塩からなる集積型錯体の磁気特性	SQUID-MS7 SQUID-XL7	島根大学大学院総合理工学研究科	半田 真
ノルコロール金属錯体の磁気的性質	ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	島根大学大学院総合理工学研究科	池上 崇久
外場誘起プロトン移動を示す新規スピン転移錯体の開発	CCD-3	九州大学先端物質化学研究所	中西 匠
糖鎖-蛋白質相互作用を利用した薬物送達技術の開発	iTC200	岐阜大学研究推進・社会連携機構	安藤 弘宗
合成学的アプローチによる複合糖質の動的相互作用解析	iTC200	北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	山口 拓実
シリコン化合物の分子量測定	MALDI-TOF	名古屋大学未来材料システム研究所	原田 勝可
固体 NMR による系統的構造解析のための高効率参照試料の調製法確立	600NMR 溶液	国立感染症研究所	谷生 道一
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	600NMR 溶液	名古屋市立大学大学院薬学研究科	矢木 宏和
	ESR EMX	大阪市立大学	吉野 治一
	ESR EMX	東京理科大学	寶 彩香
	ESR E500	慶應義塾大学	立野 翔真
	SQUID-MS7	名古屋大学	澤 博

地球外有機物のナノ分子構造と軽元素同位体分布との相関性の研究	UVSOR(STXM)	海洋研究開発機構高知コア研究所	伊藤 元雄
隕石中の炭素質クラストに含まれる有機物の局所分析	UVSOR(STXM)	横浜国立大学大学院工学研究院	癸生川陽子
STXMを用いた微生物－鉱物界面の直接分析に基づく微生物による海洋地殻風化機構の解明	UVSOR(STXM)	愛媛大学農学部	光延 聖
3次元化学状態観察法の開発	UVSOR(STXM)	東海大学工学部	伊藤 敦
ユレーライト隕石中の炭素質の分子構造と、衝撃変成度との関連の研究と、それによる始原天体の進化過程の解明	UVSOR(STXM)	高輝度光科学研究センター	上相 真之
走査型透過軟X線顕微鏡による <i>Pseudanabaena foetida</i> 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
火星隕石中の変質脈から迫る変質環境の復元～硫黄・マンガン・塩素・シリカの化学種分析の試み～	UVSOR(STXM)	広島大学大学院理学研究科	宮原 正明
STXMによる細胞内分子マッピングにおける定量性の向上と分子識別の高精度化	UVSOR(STXM)	東海大学工学部	伊藤 敦
Gas State of Nanobubbles at the Solid-Liquid and Solid-Gas Interface of Graphene	UVSOR(STXM)	Tamkang University, Taiwan	Way-Faung Pong
STXM Studies on the Particulate Matter Generated by Vehicles in Asia	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
Penetration of Macromolecular Drugs into Human Skin	UVSOR(STXM)	Freie University Berlin	Eckart Rühl
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
単原子層窒化鉄膜の電子・磁気状態の下地基板結晶面方位依存性	UVSOR(XMCD)	東京大学物性研究所	宮町 俊生
蛍光収法を用いた XMCD 法の立ち上げと分子磁性体の磁気状態観測	UVSOR(XMCD)	東京大学大学院理学系研究科	岡林 潤
強磁性薄膜上イオン液体の磁気特性	UVSOR(XMCD)	名古屋大学大学院理学研究科	江口敬太郎
Chemical Mapping of Norway Spruce Lignans in Knotwood Cells	UVSOR(STXM)	University of Oulu (UOULU)	Marko Huttula
MA 回収用吸着材の放射線劣化評価	UVSOR(STXM)	日本原子力研究開発機構高速炉サイクル研究開発センター	宮崎 康典
アポトーシス過程におけるクロマチン凝集に伴うリン酸化過程の可視化	UVSOR(STXM)	東北大学多元物質科学研究所	江島 丈雄
海洋付着生物接着部位における接着タンパク質不均質構造の可視化	UVSOR(STXM)	九州大学先端物質科学研究所	檜垣 勇次
STXM Observation of Dissolution Distribution of Ferrous or Ferric Ion in Magnetite	UVSOR(STXM)	筑波大学生命環境系	興野 純
高分子材料精密分析のための STXM 用試料冷却装置の開発	UVSOR(STXM)	住友ゴム工業(株)	金子 房江
Comprehensive Characterization of Monolithic Polymers by Scanning Transmission X-Ray Microscopy (STXM)	UVSOR(STXM)	University of South Australia	Dario Arrua
Chemical and Structural Characterization of Model Primary Marine Particles and Ambient Urban Samples	UVSOR(STXM)	University of Oulu, Finland	Nønne Prisle
磁性トポロジカル絶縁体ヘテロ接合の XMCD 測定	UVSOR(XMCD)	東京工業大学理学院	平原 徹
酸素吸着単層鉄の高保持力の解明	UVSOR(XMCD)	九州大学大学院総合理工学府	中川 剛志
新規イメージング XAFS 計測のためのマイクログリッド製作	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
希釈冷凍機と小型圧力セルを接続するアダプターの製作	マイクロストラクチャー	東邦大学理学部	田嶋 尚也
4well ガラスベースディッシュへの微小構造体の作製	マイクロストラクチャー	基礎生物学研究所	真流 玄武
ループ型光量子プロセッサのためのプログラマブルタイミング制御器の開発	マイクロストラクチャー	東京大学大学院工学系研究科	武田俊太郎
線虫 <i>C. elegans</i> の行動解析のための PDMS チャンバーのモールド作製	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	小田 茂和

(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29年度はUVSOR(STXM) 8件、低SEM 3件、CCD-3 1件、蛍光分光1件、FT 1件、SEM・FIB・低SEM・ESCA・ラマン1件、VP-DSC・iTC200 1件、ESR EMX・ESR E500・600NMR 固体1件、ESCA・低SEM・ラマン1件、SQUID-MS7・SQUID-XL7 1件、ESR EMX・ESR E500 1件、マイクロストラクチャー2件、が採択された。業種別内訳は大企業21件・中小企業1件であった。

表3 2017年度（平成29年度）利用件数一覧（平成29年4月～平成30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	47	128	22
実施件数	38	110	22
実施日数	964	1309	117

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。

5-5 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)

5-5-1 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。

5-5-2 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CO₂の分離・回収，貯蔵，触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用など，太陽光エネルギー，電気エネルギーや化学エネルギーにおいて中心的な役割を担う複雑で複合的な分子・物質過程に対する電子・分子レベルでの全系シミュレーションを行い，実験研究者，産業界と連携して，高効率，低コスト，また環境に優しく持続可能なエネルギー新規基盤技術を確立する。

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

(1) サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保——太陽電池，人工光合成

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

(2) サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵——燃料電池，二次電池

第一原理電子状態理論に基づく電極反応の計算と分子動力学法に基づく電解質，セパレータの計算を統合させ，個々の部材の性能に加えて，システムとしての二次電池の充放電曲線や燃料電池の電流電圧曲線を予測し，信頼性の向上に貢献できる手法を確立する。この中で，諮問委員や実験研究者からの指摘に基づき実施計画を検討した結果，実験では観察することが難しい電極界面近傍でのマイクロ機構の解明に特に注力することとした。これを用いて次世代・次々

世代電池技術の重要問題に挑戦し、蓄電・水素エネルギー社会の実現に貢献する。

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

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

(4) 基盤アプリ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。

5-5-3 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 24 名、事務局 2 名＋補助者 1 名

・協力機関：65 機関、内企業 19 社

実施体制を図1に示す。

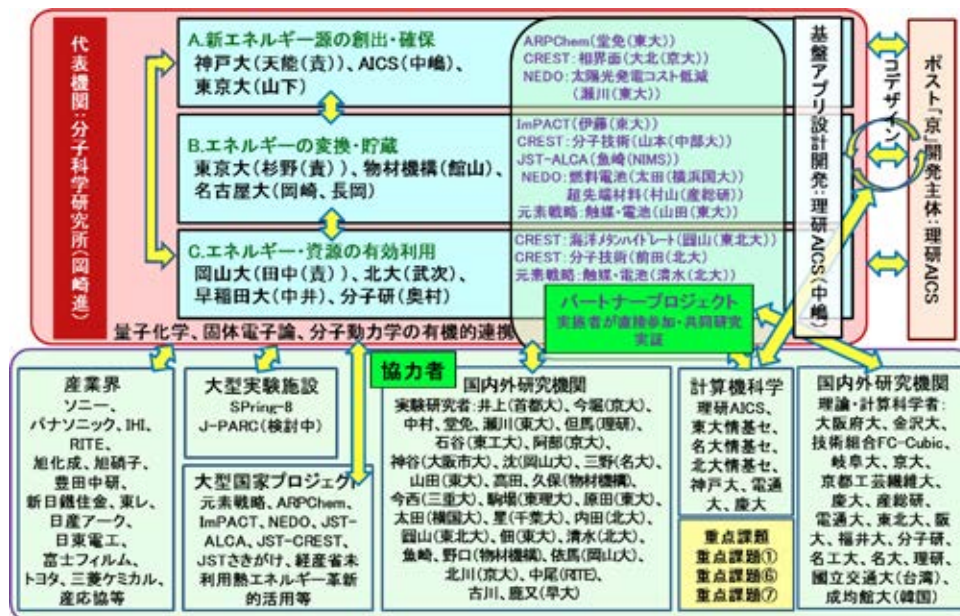


図1 実施体制

5-5-4 平成 29 年度について

平成 29 年度は、平成 28 年度から開始した本格実施（4 年間）の 2 年目である。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。8 月末には、中間評価があり、執筆の時点ではまだ最終評価としては確定していないものの、重点課題全体の中で上位と思われる評価を得た。また、12 月、「光エネルギー変換」をテーマに「第 1 回実験・産業との連携シンポジウム」を神戸大学・先端融合研究環統合研究拠点コンベンションホールにて開催し、4 名の実験・企業研究者を招聘し他プロジェクトや産業界との連携について討議した。連続して、「第 4 回公開シンポジウム」を同ホールにて、若手研究者を中心に開催し研究進捗などについて議論を行った。

5-5-5 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。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申し上げます。

5-6 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)を進めてきた (<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きた。

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 10 年目の最終年度を迎えたが、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だ。

平成 29 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、多体相互作用そのものを詳細に観察し制御する研究を推進し、強相関原子集団の多体相関を直接観測するための実験装置を完成させた。具体的には、光ピンセットを用いて空間的に配列させた高密度・極低温ルビジウム原子集団の 5s 電子をリユードベリ状態に励起することによって、強相関多体双極子系を作り出すことに成功した。ここでの超高速電子ダイナミクスを観察・制御する全く新しい超高速量子シミュレーターを開発することに成功した。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、本拠点事業終了後の平成 30 年以降の研究体制を確認した。

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、これまでの研究の集大成として、これまで開発を進めてきたサブサイクル中赤外光パルスを高次高調波発生に用いて、紫外から赤外まで位相が揃っているコヒーレントな光を発生させることを試みた。ファイバーレーザーの開発では、平成 29 年度は最終年度として、これまで開発してきたレーザーを他分野に応用することを試みた。具体的には、平成 28 年度に開発した 1.8 μm の増幅器を多光子顕微鏡に応用することを試みた。また、ファイバーラボ社と協力し、フェムト秒パルスの増幅に最適な特殊ファイバーの提供を受け、共同研究を進めた。そのファイバーによって、前年度よりも 2 倍程度の出力を得ることができた。多光子顕微鏡については、生理学研究所の村越准教授と意見を交換し、共同で研究を進めた。

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、IR (中赤外) -OPCPA に最適化した大口径 PPMgLN の集大成化として、外部と連携しながら世界最高出力の発生を狙い、ETH の U. Keller グループとの共同研究において、ノンコリニアな QPM として大口径 PPMgLN を用いることで、中心波長 2.2 μm において 2 サイクル以下の超短パルスである 15 fs に相当する広帯域光を平均出力 9.1 W 以上と世界最高出力記録を達成した。また、マイクロチップレーザー・アンプと PPMgLN-OPG の小型構成でも、エネルギーで mJ 級、尖頭出力でメガワット級の出

力特性が得られることを実証した。

時空間分解顕微分光技術の開発では、局所的なキラル光学場の検出法の開発を進め、近接場で純度の高い直線偏光を試料に照射して、散乱される光（一般的に楕円偏光）の偏光状態（楕円率と偏光回転角）を計測して近接場イメージを計測する手法の開発に成功した。開発された測定手法を用いて貴金属ナノ構造試料のキラル光学場解析を進めた。また、円偏光二色性（CD）の測定精度を高めるための新たな偏光変調法を、遠方場及び近接場光学顕微鏡に実装した装置（遠方場 CD 顕微鏡及び近接場 CD 顕微鏡）を構成した。遠方場の CD 顕微鏡は液晶物質やナノ微粒子等のマイクロドメインあるいはナノ領域でのキラリティの研究に適用できるものとし、共同利用が可能な形に整備した。

(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 Innsbruck 大学・量子光学・量子情報研究所（IQOQI；オーストリア）、Institute d'Optique（フランス）、MIT-Harvard 大学・極低温原子センター（CUA；アメリカ合衆国）、Max-Planck 光科学研究所（ドイツ）、オックスフォード大学・物理学科（イギリス）、Max-Planck 量子光学研究所（ドイツ）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。さらに、École Normale Supérieure（フランス）・IISER Kolkata（インド）からの留学生、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。また、各々の PI が総合研究大学院大学の大学院生の教育や研究指導、総合研究大学院大学における講義や特別セミナーでの講演などを行った。岡本教授は関西学院大学で光科学（ナノ光学イメージングとプラズモンに関する基礎とトピックス）に関する講義を行った。国立パリ高等化学学校（フランス）からのインターンシップ学生を分子科学研究所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。総合研究大学院大学の大学院生に対する特別セミナーでの講演（先端計測制御概論のシリーズ講義のうちの、ナノ光計測に関する基礎とトピックス）を担当した。藤准教授は、物性若手夏の学校において、講師を務め、超短光パルス計測法についての集中ゼミを行った。また、平成 30 年 3 月にウィーン工科大学において、光科学に関するセミナーを行った。更に、香川大学から修士課程の学生 1 名を 2 か月 2 回受け入れ、教育や研究指導を行った。平等准教授は、国立パリ高等化学学校（フランス）からのインターンシップ学生を分子科学研究所に受け入れることによって、日本の光科学のレベルを海外の若手に周知し、光科学を支える国際的な人材育成に貢献した。また、豊橋技術科学大学の客員教授として同大学の助教、博士後期学生の指導に当たった。その他、光産業創成大学院大学、公益財団法人浜松地域イノベーション推進機構フォトンバレーセンター委託事業での平成 29 年度第 1 回光を利用したものづくりに関するセミナーにおいて講演を担当した。

施設共用では、超高精度光干渉計を奈良先端科学技術大学院大学・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）・オックスフォード大学（イギリス）・インスブルック大学（オーストリア）・浜松ホトニクス株式会社・ベルリン自由大学（ドイツ）・山西大学（中国）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（イギリス）、大阪大学、大阪府立大学、九州大学、北陸先端大学院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。ナノ秒コヒーレント光源（東京工業大学設置）については、京都大学大学院理学研究科ならびに群馬大学理学部への研究資源提供に関する打ち合わせを行った。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のための大口径擬似位相整合素子 PPMgLN をチューリッヒ工科大学

(スイス)の U. Keller グループなどに協力研究の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、武井宣幸助教および大森賢治教授が理研の二本柳聡史博士および緑川克美博士らと協力して、第14回エクストリームフォトニクス研究会を平成30年2月6-7日に開催し、東西拠点の連携に貢献した。平等准教授は「マイクロ固体フォトニクス」(レーザー学会)専門委員会を平成29年6月15日、9月29日、平成30年2月22日と開催し、東西拠点の連携、さらには学術成果の民間企業への展開に貢献した。また平等准教授は分子研も共催のOSAのトピカルミーティング Advanced Solid-State Laser 2017 を統括議長として名古屋国際会議場に誘致し、固体レーザーや非線形光学波長変換に関する最先端の議論を行った。スタンフォード大学の R. L. Byer 教授(2017年のノーベル賞案件である LIGO における固体レーザーに関する話題)、理化学研究所の緑川克美博士(アト秒レーザーに関する話題)からの基調講演など、東西拠点の連携、さらには国際的な連携に貢献した。

5-7 実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点 Elements Strategy Initiative for Catalysis and Battery (ESICB) (文部科学省)

平成 24 年度に開始した「元素戦略プロジェクト＜研究拠点形成型＞」は、今年度で 6 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越えている。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、3 年前に 1 回目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、リチウムイオン電池を代替する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 29 年 2 月 27 日に第 10 回が東大本郷キャンパス、10 月 4 日に第 11 回が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若手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、昨年 10 月で 9 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。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た講演会も随時開催しており、現在で 19 回目を迎えている。

電子論グループとしては、来年度に予定されている 2 回目の中間評価を見据えて、今後の研究の方向付けのために、昨年 11 月に「電子論 second kick-off 会議」を開催した。これまで理論計算研究が触媒・電池の元素戦略研究にどのように貢献できたかを議論し、中間評価以降の第 3 期での研究の方向性、具体的な研究課題、今後どのように元素戦略研究に貢献できるかについて議論を重ねた。

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が、現状で十分とは考えていない。理論計算科学が触媒・電池材料開発を先導する、というプロジェクト本来の役割を今後、より一層意識して研究を進めることが期待されており、この分野における理論計算の役割の重要性がさらに高まってくるものと考えている。

5-8 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、多くの国際共同事業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従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）。

5-8-1 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（5-10参照）。

【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、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、「修士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。

【I. 教育研究連携（海外教員派遣）事業】

平成 29 年度内に海外の研究機関や大学を訪問する、教育の連携強化につながる調査研究・共同研究の活動。

分子科学研究所として「分子科学二専攻合同・複数学位制度の推進」が採択。

タイのチュラロンコン大学との複数学位制度に関する調査・周知・打合せのため、教員を派遣して具体的な課程や条件を先方の教員と協議した。

【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、海外で活躍する修士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（H29）」（海外学生・研究者招聘事業）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に基づく IMS-IIPA 事業という位置付けになっている。

(4) 分子科学研究所経常経費

以上の (1)～(3) 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。

5-8-2 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、国内での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。一方で、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年度は53名、平成29年度の実績は表にあるように60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	フィンランド	ベルギー	チェコ	ロシア	エジプト	イラン	パキスタン	合計
国際交流提携先からの受入	7	3	13	1	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	26
その他共同研究による受入	1	2	3	4	0	6	5	4	3	1	1	1	1	1	1	34
合計	8	5	16	5	1	6	5	5	3	1	1	1	1	1	1	60

2017.1-2017.12

5-8-3 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・IACS、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あり、分子研・総研大の研究力強化と国際化に寄与している。今後はダブ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。

5-8-4 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なっている。

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（協力的研究であり、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、平成28年度45件と推移しており、平成28年10月から平成29年9月までの1年間は48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

48件（2016.10-2017.9 実施状況）

代表者	研 究 課 題 名	相手国
魚住 泰広	高分子担持触媒開発研究	アメリカ
魚住 泰広	遷移金属触媒化学	チェコ
大森 賢治	超高速量子シミュレーターの開発	中国
岡崎 圭一	Solvation and Stability of Peptides and Proteins in Solutions of Urea and TMAO	ドイツ
加藤 政博	円偏光深紫外光照射によるキラリティの発現	中国
加藤 政博	自由電子レーザーに関する研究	イラン
古賀 信康	Mg ²⁺ Channel MgtE の合理安定化	中国
柳井 毅	相対論電子状態計算法の開発	アメリカ
奥村 久士	TDP43 のアミロイド線維形成のシミュレーション	台湾
岡本 裕巳	Chirality and Nonlinear Chiroptical Effects in Plasmonic Nanostructures（研究打合せ）	イギリス
岡本 裕巳	Near-Field Optical Characteristics of Chiral Plasmonic Nanostructures	イギリス
岡本 裕巳	Plasmon Resonances of Metal Nanoparticles	韓国
加藤 晃一	マルチドメインタンパク質の構造ダイナミクスの理論研究	韓国
加藤 晃一	レーザー誘起によるアミロイドβペプチドの構造制御に関する研究	台湾
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	有機無機ペロブスカイト化合物の電子状態	中国
解良 聡	有機配向薄膜からの光電子放出強度分布	ドイツ
解良 聡	有機薄膜における二量体化とバンド形成	中国
解良 聡	有機薄膜における二量体化とバンド形成	ドイツ
古谷 祐詞	P2X 受容体の赤外分光測定	中国
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
江原 正博	Photoassisted Nitrous Oxide Decomposition over Water Interfaced Oxotitanium Porphyrin: Theoretical Study	中国

江原 正博	Role of Noble Gas in Binding Ability of Metal Cyanides, Halides and Oxides (Metal = Cu, Ag, Au): A Computational Investigation	インド
江原 正博	Theoretical Studies on the Reaction Mechanism of Fullerenes and Metallofullerenes	中国
江原 正博	Theoretical Study on Hydrodeoxygenation of Dimethyl Sulfoxide on Pt ₅ /MoO ₃ (010) Catalyst	タイ
小杉 信博	ARPES Study of 4d Semiconductors and Their Oxidation	韓国
小杉 信博	Chemical Mapping of Norway Spruce Lignans in Knotwood Cells	フィンランド
小杉 信博	Chemical Stability of Lead(II) Thiocyanate (Pb(SCN) ₂)-Doped FA _{0.9} Cs _{0.1} PbI ₃ for Solution-Processed Perovskite Solar Cells	台湾
小杉 信博	Doping Effect of Lead(II) Thiocyanate (Pb(SCN) ₂) for FA _{0.9} Cs _{0.1} PbI ₃ Perovskite Solar Cells	台湾
小杉 信博	Drug Release from Novel Nanocarriers in Skin	ドイツ
小杉 信博	Electronic Structure of 2D Silicon Layer on h-BN/ZrB ₂ (0001)	オランダ
小杉 信博	Gas State of Nanobubbles at the Solid–liquid and Solid–Gas Interface of Graphene	台湾
小杉 信博	High-Pressure Soft X-Ray Spectro-Microscopy of CO ₂ Fluids	アメリカ
小杉 信博	In Situ STXM Study of Charge–Discharge Mechanism of Nanoflaky MnO ₄ /Functionalized Carbon Nanotube for a Supercapacitor	台湾
小杉 信博	Penetration of Macromolecular Drugs into Human Skin	ドイツ
小杉 信博	Soft X-Ray Absorption Spectroscopy Applied to Ion Pairs in Aqueous Solutions	フランス
小杉 信博	Structural Identification of Cellulose Nanocrystal/Nanofibril Hybrids and Composites	フィンランド
小杉 信博	Water Hydrogen Bond Network around Hydrogenated Nanodiamonds	ドイツ
小杉 信博	軟X線透過吸収分光法におけるその場観測手法の研究	中国
齊藤 真司	Molecular Insight into Nucleation Behavior of Supercooled Water on Surfaces	インド
田中 清尚	Doping-Dependent Superconducting-Gap Measurements of Electron Doped Cuprates	韓国
飯野 亮太	金ナノプローブ1分子イメージングの打合せ	台湾
平等 拓範	マイクロチップレーザーの開発に関する研究打合せ	ドイツ
平等 拓範	固体レーザーの開発（セミナー，研究打合せ）	アメリカ
平等 拓範	固体レーザーの開発（セミナー，研究打合せ）	アメリカ
平等 拓範	固体レーザーの開発（セミナー，研究打合せ）	ドイツ
平等 拓範	固体レーザーの開発（セミナー，研究打合せ）	ドイツ
平等 拓範	固体レーザーの開発（研究打合せ）	フランス

5-9 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、各機関の長 5 名、各機関の副所長或いは相当職 5 名、及び推進本部特任教授がメンバー）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相当職（分子研の場合は研究総主幹）を機構長が指名し、各機関の以下に述べる項目に関する研究マネジメント体制を考えることになった。

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 本柱を立てて本事業を開始した。また現在では、これらに加えて、⑤ IR（Institutional Research）の機能を事業に含めて運営することとなっている。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、⑤ IR 機能、及び評価・企画を含めて統合的に運用することにした。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 29 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。

研究顧問

2017 年 4 月 4 日 -5 日、12 月 26 日 -27 日

中嶋 敦（慶應義塾大学理工学部 教授）

Hrvoje Petek（米国ピッツバーグ大学 教授）

外国人運営顧問

Benjamin List（ドイツマックスプランク石炭研究所 所長） 2017 年 11 月 13 日 -14 日

Eberhard Umbach（ドイツ工学アカデミー会員、カールスルーエ工科大学 元学長）

2018 年 2 月 27 日 -3 月 1 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 7 名、ドイツ 2 名、タイ 6 名）。
- ・ 研究所ホームページ及び分子研パンフレットの見直しを行った。
- ・ アジアとの連携強化のため、MOU 締結大学等での視察を行った。

2017 年 5 月 マラヤ大学

2017 年 6 月 チュラロンコン大学

2017 年 10 月 NANOTEC, チュラロンコン大学

5-10 ネットワーク型研究加速事業（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平成28年度に「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」（平成29年度からは「ネットワーク型研究加速事業」に名称変更して継承）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計測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年度から、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、平成29年度は生理学研究所と協力して海外の講演者を含む研究会を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
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
2016.9. ～ 2017.8.	2017	160	31

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

齊 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) 酵素反応の反応機構に関する理論研究
- b) ポリセオナミド B の膜への挿入およびイオン透過に関する理論研究
- c) 時計タンパク質 KaiC の概日リズムに関する理論研究
- 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) 遷移状態理論では，反応座標に沿った運動が最も遅く，他のモードは反応座標よりも圧倒的に速く緩和し常に熱平衡にあると仮定する。果たしてそのような描像に基づいて凝縮系の反応が進行しているのだろうか。我々は，cis-trans 異性化の酵素反応を例に，遷移状態と始状態と終状態の両方の状態を繋ぐ反応性軌道を多数発生させ，反応ダイナミクスの解析を進めている。その結果，異性化自体は数ピコ秒で終了し，決して反応座標上の緩慢な酔歩運動ではないことを示すと同時に，始状態の平衡分布ではほとんど見出されない構造励起状態を経て反応が進むことを見出した。さらに，古くから提唱されている酵素による遷移状態の安定化に加え，構造励起状態の形成により単純な確率論的熱励起で反応が進行しないことや遷移状態での反応軌跡の再交差の抑制などが明らかになってきた。
- b) 一分子速度論に基づく化学反応の研究として，ポリセオナミド B (pTB) のイオン透過機構の解析を展開している。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。また，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解明されている。一分子反応論に基づく 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，水や膜内の pTB の構造およびその揺らぎ等の解析を行った。現在は，膜侵入の自由エネルギーおよびその動的過程の解析を進めている。
- c) 生体分子系の機能の発現機構に関する研究も進めている。その一例として，シアノバクテリアの概日リズムを担う Kai タンパク質系の概日リズムを解析している。この系の概日リズムは KaiA, KaiB, KaiC の 3 つのタンパク質により制御され，とくに KaiC が重要であることが知られている。最近，秋山らは，KaiC の構造を解明するとともに，概日リズムの周期と ATP 加水分解能との相関などを解明した。我々は，原子レベルでの ATP 加水分解反応機構の解析から，素反応およびタンパク質の構造変化を考慮した数理モデルによる概日リズムの解析まで，生体分子系の機能としての KaiC の概日周期の発現に至る幅広い時間・空間スケールの解析を進めている。
- d) 生体分子系の機能の発現機構の解析として，エネルギー移動の解析も行っている。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解明のままである。Fenna-Matthews-Olson (FMO) タンパク質を例に

励起エネルギー移動の解析を行い、各色素のエネルギー準位およびその揺らぎの解析手法の開発を進めている。最近、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、各色素の構造や色素周辺的环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) 揺らぎが如何に反応や機能に関わっているかに関する上記の研究に加え、水を例に揺らぎの熱力学的性質への影響について解析を行っている。水は常温付近で様々な熱力学異常性を示し、融点以下でその異常性はさらに増す。そのため、水の異常性の起源は過冷却状態にあると考えられているが、結晶化が容易に進行するため実験的検証は非常に困難である。我々は、室温から極度の過冷却状態にいたる非常に幅広い温度領域の構造・ダイナミクス of 系統的な解析により、ある温度以下では室温状態で主要な局所的高密度状態が不安定化しスピノダル分解的な挙動を示すことを解明した。さらに、水のガラス転移温度が低い物理的起源に対する提案を行った。

B-1) 学術論文

M. OKUDA, M. HIGASHI, K. OHTA, S. SAITO and K. TOMINAGA, “Vibrational Frequency Fluctuations of Ionic Vibrational Probe in Water: Theoretical Study with Molecular Dynamics Simulation,” *Chem. Phys. Lett.* **683**, 547–552 (2017).

B-3) 総説, 著書

森 俊文, 斉藤真司, 「超長時間シミュレーションで見るタンパク質のフォールディング過程」, *生物物理* **57**, 030–032 (2017).

B-4) 招待講演

甲田信一, 「素過程に立脚した時計タンパク質概日リズムの反応モデル: 反応から機能へ」, 研究会「凝縮系の理論化学」, 那覇, April 2017.

T. MORI, “Molecular study of the interplay between chemical reactions and protein conformational changes in biomolecular systems,” KAKENHI International Symposium on “Studying the Function of Soft Molecular Systems,” Sapporo, June 2017.

S. SAITO, “Supercooled water: Fluctuation, glass transition, and quantum effects,” Korea-Japan Molecular Symposium 2017, Pusan (Korea), July 2017.

S. KODA and S. SAITO, “Reaction model for circadian rhythm of Kai system considering elementary processes,” ANSCSE21, Pathum Thani (Thailand), August 2017.

森 俊文, 「Transition path sampling 法による酵素反応の遷移ダイナミクス解析」, 「レアイベントの計算科学」研究会, 熱海, August 2017.

甲田信一, 「時計タンパク質概日リズムの理論研究: ピコ秒から 24 時の時間階層」, 新学術領域「柔らかな分子系」第 24 回ワークショップ「若手研究者が描く分子理論の未来」, 仙台, September 2017.

森 俊文, “Deciphering the heterogeneous dynamics of proteins from the analysis of millisecond-long molecular dynamics simulations,” 第 55 回日本生物物理学会年会 “Softness and functions of biological molecules under various environments” シンポジウム, Kumamoto, September 2017.

S. SAITO, “Supercooled water: Fluctuation, glass transition, and vibrational entropy,” Max-Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter, Hamburg (Germany), September 2017.

S. KODA and S. SAITO, “Reaction model for circadian rhythm of Kai system by considering reactions and conformational changes,” APCTCC8, IIT Bombay, Mumbai (India), December 2017.

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).

Pacificchem2020国内実行委員 (Computational and Theoretical 分野) (2017–2020).

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 (2015–2017).

European Research Council (ERC) 審査員 (2016–2017).

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

神戸大学大学院理学研究科, 「量子化学特論」, 2017年6月22日-23日.
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」, 2017年12月12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), 「生体分子の構造履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クス理論の構築」, 斉藤真司 (2006年度-2009年度).

C) 研究活動の課題と展望

我々は、ダイナミクスに非常に敏感な多時間相関関数を利用し、液体の高速な揺らぎ・緩和、過冷却液体の動的不均一性、生体分子の幅広い時間スケールを持つ運動の動的結合の様相などの解析を行ってきた。これらの揺らぎや緩和過程の理論研究を踏まえ、幅広い時空間スケールをもつ複雑な揺らぎの中から、化学反応や機能および熱力学的性質が如何に生み出されるかについて理論・計算科学研究を進めている。具体的には、生体分子系における化学反応の描像の獲得と従来の理論における反応の描像の検討に加え、イオンチャネルを例に拡散・反応過程およびMichaelis-Menten理論を検討し、一分子反応論の観点から凝縮系反応理論の成立の基盤の解明を目指している。また、生体分子の機能に関する解析として、原子・分子レベルからタンパク質系レベルにいたる時計タンパク質KaiCの概日リズムの発現機構、FMOタンパク質における励起エネルギー移動機構の解析を進めている。これらの研究に加え、水の特異的物性発現の起源の研究をさらに進める。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運動が如何に変化するか等に関する理論研究を推進する。

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・電子融合デバイスの理論設計
- 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
- e) 光励起電子ダイナミクス第一原理計算プログラム SALMON の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 最近では，数～十数 nm 程度の極めて精密な高次ナノ構造体を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領域での近接場光励起ダイナミクスが起り，そのダイナミクスに起因する新たな光・電子融合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と，その理論に基づく光励起電子ダイナミクス第一原理計算プログラムを開発してきた。当初は，このプログラムは GCEED と名付けていたが，孤立系，ナノ構造体，周期系バルク，表面・界面等，様々な系の光応答を取り扱うために，GCEED を大幅に改変し，SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) として開発を進めた。SALMON を用いて金属有機構造体 (MOF) 中のアセチレンを二倍波励起できることを実証した。また，シリコン薄膜を対象として，始状態と終状態が異なる波数を持つバンド間の波数励起ができることを実証した。いずれの光励起も近接場光励起に起因するものである。
- 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 SALMON 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ている。本年度は，MoS₂-Graphene の光励起過程の詳細を明らかにした。
- c) プラチナ，ロジウム，パラジウムを用いた三元触媒は，自動車排ガス浄化触媒として使われているが，いずれの金属も高価であり，これらの金属を豊富に存在する安価な物質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) 分子動力学計算法を用いて，CeO₂ 表面に Cr と Cu がドーピングされている系の 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。本年度も，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研究を進めた。

- e) 孤立系, ナノ構造体, 周期系バルク, 表面・界面等様々な系を対象として, その光励起電子ダイナミクスの計算を行う第一原理超並列計算プログラム SALMON の開発を行った。ソースコードまで含めて公開した。<http://salmon-tddft.jp>

B-1) 学術論文

T. YATSUI, H. SAITO and K. NOBUSADA, "Angstrom-Scale Flatness Using Selective Nano-Scale Etching," *Beilstein J. Nanotechnol.* **8**, 2181–2185 (2017).

T. YATSUI, M. YAMAGUCHI and K. NOBUSADA, "Nano-Scale Chemical Reactions Based on Non-Uniform Optical Near-Fields and Their Applications," *Prog. Quantum Electron.* **55**, 166–194 (2017).

K. KOIZUMI, M. HATAKEYAMA, M. BOERO, K. NOBUSADA, H. HORI, T. MISONOU and S. NAKAMURA, "How Seaweeds Release the Excess Energy from Sunlight to Surrounding Sea Water," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 15745–15753 (2017).

M. NODA, M. YAMAGUCHI and K. NOBUSADA, "Second Harmonic Excitation of Acetylene by the Optical Near Field Generated in a Porous Material," *J. Phys. Chem. C* **121**, 11687–11692 (2017).

K. IIDA, M. NODA and K. NOBUSADA, "Development of Theoretical Approach for Describing Electronic Properties of Hetero-Interface Systems under Applied Bias Voltage," *J. Chem. Phys.* **146**, 084706 (10 pages) (2017).

K. IIDA and K. NOBUSADA, "Atomically Modified Thin Interface in Metal-Dielectric Hetero-Integrated Systems: Control of Electronic Properties," *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 145503 (8 pages) (2017).

K. KOIZUMI, K. NOBUSADA and M. BOERO, "An Atomic-Level Insight into the Basic Mechanism Responsible for the Enhancement of the Catalytic Oxidation of Carbon Monoxide on a Cu/CeO₂ Surface," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 3498–3505 (2017).

K. KOIZUMI, K. NOBUSADA and M. BOERO, "Simple but Efficient Method for Inhibiting Sintering and Aggregation of Catalytic Pt Nanoclusters on Metal-Oxide Supports," *Chem. –Eur. J.* **23**, 1531–1538 (2017).

B-3) 総説, 著書

T. YATSUI and K. NOBUSADA, "Near-Field Assisted Chemical Reactions and Its Applications," *Progress in Nanophotonics* **4**, 57–86 (2017).

B-4) 招待講演

信定克幸, 「近接場光励起により発現する新奇光機能場の計算科学的設計」, 第4回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会, コクヨホール, 東京品川, 2017年11月.

B-5) 特許出願

特願 2017-159786, 「可視光プラズモニック合金ナノ粒子, その製造方法, 及びその用途」, 佐藤良太, 寺西利治, 川脇徳久, 信定克幸, 飯田健二, 2017年.

B-6) 受賞, 表彰

信定克幸, 平成 28 年度実施課題における HPCI 利用研究課題優秀成果賞 (2017).

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–).

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).

理論化学討論会世話人幹事 (2017–).

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).

筑波大学計算科学研究センター共同研究委員会委員 (2015–).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2016–).

その他

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).

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, 2006 年 6 月–.

京都大学実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点ユニット, 拠点准教授, 2012 年 9 月–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「ナノメートルサイズの分子における多電子ダイナミクスの理論的研究」, 信定克幸 (2005 年–2007 年).

科研費特定領域研究(計画研究), 「エネルギー散逸を伴う電子ダイナミクスの理論と材料物性」, 信定克幸 (2006 年–2010 年).

科研費基盤研究(B), 「近接場光励起による金属表面の局所電子ダイナミクスの理論」, 信定克幸 (2009 年–2012 年).

科研費基盤研究(B),「光エネルギー変換のナノ光学理論と広帯域可視光応答ナノ構造体設計への展開」, 信定克幸 (2013年–2016年).

科研費基盤研究(B),「近接場光励起を用いた光高機能ナノ物質の計算科学的設計」, 信定克幸 (2017年–2020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。また、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。我々は、既にその様な第一原理計算プログラム SALMON を世界にさきがけて開発済みである。今後は、ナノ光応答理論と計算科学的手法 SALMON 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。

*) 2018 年 1 月 15 日逝去

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) 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。
- 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，関連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

- T. YANAI, Y. KURASHIGE, M. SAITOW, J. CHALUPSKÝ, R. LINDH and P.-A. MALMQVIST**, “Influence of the Choice of Projection Manifolds in the CASPT2 Implementation,” *Mol. Phys.* **115**, 2077–2085 (2017).
- R. SATO, H. KIOTH-NISHIOKA, T. YANAI and Y. SHIGETA**, “Theoretical Analyses on Triplet–Triplet Annihilation Process of 9,10-Diphenylanthracene in Solution,” *Chem. Lett.* **46**, 873–875 (2017).
- Y. KOBAYASHI, H. OKAJIMA, H. SOTOME, T. YANAI, K. MUTOH, Y. YONEDA, Y. SHIGETA, A. SAKAMOTO, H. MIYASAKA and J. ABE**, “Direct Observation of the Ultrafast Dynamic Evolution of Open-Shell Biradical Contributions in Photochromic Radical Dimer,” *J. Am. Chem. Soc.* **139**, 6382–6389 (2017).
- K. MIYATA, Y. KURASHIGE, K. WATANABE, T. SUGIMOTO, S. TAKAHASHI, S. TANAKA1, J. TAKEYA, T. YANAI and Y. MATSUMOTO**, “Coherent Singlet Fission Activated by Symmetry Breaking,” *Nat. Chem.* **9**, 983–989 (2017).
- X.-G. XIONG and T. YANAI**, “Projector Augmented Wave Method Incorporated into Gauss-Type Atomic Orbital Based Density Functional Theory,” *J. Chem. Theory Comput.* **13**, 3236–3249 (2017).
- T. YANAI, M. SAITOW, X.-G. XIONG, Y. KURASHIGE, J. CHALUPSKÝ, S. GUO and S. SHARMA**, “Multistate Complete-Active-Space Second-Order Perturbation Theory Based on Density Matrix Renormalization Group Reference States,” *J. Chem. Theory Comput.* **13**, 4829–4840 (2017).

B-4) 招待講演

- T. YANAI**, “Quantum chemistry with correlated many-electron theory,” OKAZAKI - STRASBOURG Symposium, Institute of Physics and Chemistry of Materials, Strasbourg (France), May 2017.
- T. YANAI**, “Projector Augmented Wave Method Incorporated into Gauss-type Atomic Orbital Based Density Functional Theory,” New Frontiers in Electron Correlation, Telluride, CO (U.S.A.), June 2017.
- T. YANAI**, “Quantum chemistry with highly entangled many-electron theory,” 2017 Summer Symposium of KCS-Physical Chemistry Division and 2017 Korea-Japan Molecular Science Symposium, Busan (Korea), July 2017.
- T. YANAI**, “Projector Augmented Wave Method Incorporated into Gauss-Type Atomic Orbital Based Density Functional Theory,” The 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, Munich (Germany), August–September 2017.
- T. YANAI**, “Advanced Multireference Electronic Structure Theory with ab initio Density Matrix Renormalization Group,” The 8th Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry, Mumbai (India), December 2017.

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).
- T. YANAI**, The 2017 Pople Medal of Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (2017).

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).

日本学術振興会外国人招へい研究者(長期)受入: Dr. X.-G. Xiong (中国科学院上海応用物理研究所) 期間1年, 柳井 毅 (2016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), 公募班代表「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フォトクロミック分子への応用」,柳井 毅 (2017年度–2018年度).

科学技術振興機構さきがけ研究(マテリアルズインフォ),「人工ニューラルネットワーク理論に基づく第一原理量子多体シミュレータの開発」,柳井 毅 (2017年度–2020年度).

C) 研究活動の課題と展望

当該研究活動で当面課題とする問題は、多参照な電子状態(電子が強く相関する状態)であり、理論的な取り扱いにはチャレンジングな問題(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) AMO 物理学に基づく分子系の観測と制御の理論研究
- b) 量子散逸系のダイナミクス理論に基づく凝縮相分子系における反応過程の理論研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 近年、冷却原子系の分野を中心に Floquet Engineering と呼ばれる考え方が注目を集めている。Floquet Engineering では、注目する系を外部から周期的に駆動することで制御し、望みのハミルトニアンや量子状態を実現し、未開の物理を探索するための舞台を与えている。本研究課題では、Floquet Engineering の枠組を凝縮相分子系におけるエネルギー移動や電荷移動など散逸系の量子ダイナミクス現象に適用し、Floquet Engineering を用いて分子間のエネルギー移動や電荷移動を操作し得ることを見出した。理論解析と数値解析により、凝縮相のような散逸や揺らぎに曝された量子系においても Floquet Engineering は頑健に機能することを明らかにした。
- b) 近年の分光実験により、緑色植物等の光化学系 II (PSII) 反応中心における初期電荷分離は数百フェムト秒の時間スケールで起こることが示唆されているが、これは比較的良好に理解されている紅色細菌の反応中心に比べて約 10 倍も速い。本研究課題では、タンパク質の構造・色素の配置に関する小さな差異と光化学系 II の超高速電荷分離反応の実現の関係性について研究を進めている。最近の二次元電子分光データは色素の分子内振動が PSII の電荷分離を促進する可能性を示唆しているが、電荷分離状態は光学禁制であるため詳細な情報を分光学的に得ることは容易ではない。我々は分子シミュレーションの助けを借りながら、分子内振動モードによる PSII 電荷分離への影響を量子ダイナミクス計算と分光スペクトルのモデリングに基づいて解析を進めている。

また、有機薄膜太陽電池はフレキシブルかつ低コストのエネルギー源として期待されている一方で、そのエネルギー変換効率は 10% 程度にとどまり実用化には更なる改善が必要である。有機物質では、その低誘電率のため室温の熱エネルギーよりも遥かに大きな電子・正孔の強束縛状態からの電荷分離過程が含まれており、その詳しい機構は未だ明らかではない。本研究課題では、有機物質における電子フォノン相互作用によるポーラロン形成および量子コヒーレンスとそのデコヒーレンスとの競合に着目し、ポーラロンの形成過程を正しく記述する量子ダイナミクス計算を行った。その結果、ポーラロン形成がコヒーレントな超高速電荷分離過程からインコヒーレントな電荷再結合過程への遷移を引き起こし、これにより電荷再結合を遅らせることで電荷分離状態が長時間維持され得ることを明らかにした。

B-1) 学術論文

Y. FUJIIHASHI, L. CHEN, A. ISHIZAKI, J. WANG and Y. ZHAO, “Effect of High-Frequency Modes on Singlet Fission Dynamics,” *J. Chem. Phys.* **146**, 044101 (11 pages) (2017).

B-3) 総説, 著書

G. D. SCHOLES, G. R. FLEMING, L. X. CHEN, A. ASPURU-GUZI, A. BUCHLEITNER, D. F. COKER, G. S. ENGEL, R. VAN GRONDELLE, A. ISHIZAKI, D. M. JONAS, J. S. LUNDEEN, J. K. MCCUSKER, S. MUKAMEL, J. P. OGILVIE, A. OLAYA-CASTRO, M. A. RATNER, F. C. SPANO, K. B. WHALEY and X. Y. ZHU, "Using Coherence to Enhance Function in Chemical and Biophysical Systems," *Nature* **543**, 647–656 (2017).

B-4) 招待講演

石崎章仁,「HFSP 2017 年若手研究 Grant」, 2017 年度生命科学系学会合同年次大会 AMED フォーラム～HFSP 国際 Grant トへの招待～, 神戸ポートピアホテル, 兵庫県神戸市, 2017 年 12 月.

石崎章仁,「量子散逸系として見る光合成光捕集系」, 2017 年度生命科学系学会合同年次大会, 神戸ポートピアホテル, 兵庫県神戸市, 2017 年 12 月.

A. ISHIZAKI, "Quantum dynamical aspects in biophysical and material systems," 1st QST International Symposium "Quantum Life Science," Tokyo Bay Makuhari Hall, Makuhari (Japan), July 2017.

A. ISHIZAKI, "Theory of real-time quantum dissipative dynamics and its application to photosynthetic light harvesting systems," University of Leeds, Leeds (U.K.), July 2017.

A. ISHIZAKI, "Theory of real-time quantum dissipative dynamics and its application to photosynthetic light harvesting systems," University of Manchester, Manchester (U.K.), July 2017.

A. ISHIZAKI, "Theory of real-time quantum dissipative dynamics and its application to photosynthetic light harvesting systems," University College London, London (U.K.), July 2017.

A. ISHIZAKI, "Theory of real-time quantum dissipative dynamics and its application to photosynthetic light harvesting systems," University of Oxford, Oxford (U.K.), July 2017.

A. ISHIZAKI, "Theory of real-time quantum dissipative dynamics and its application to photosynthetic light harvesting systems," Max Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart (Germany), July 2017.

石崎章仁,「多光子分光法の可能性——量子もつれ分光法は可能か——」, 第 14 回 AMO 討論会, 東京電気通信大学, 東京都府中市, 2017 年 6 月.

石崎章仁,「光合成初期過程は量子力学を巧みに利用している? ～理論家の隙間産業研究～」, すぐには役に立たない!? 研究講座～自然の力でものづくり～, 科学技術振興機構東京本部別館, 東京都千代田区, 2017 年 6 月.

石崎章仁,「量子散逸系の動力学理論とその化学・生物物理ダイナミクスへの展開」, 第 271 回分子工学コロキウム, 京都大学, 京都府京都市, 2017 年 5 月.

石崎章仁,「量子散逸系のダイナミクス理論とその光合成初期過程への展開」, 理化学研究所「物質階層原理研究」第 1 回春期研究会, 御殿場高原ホテル, 静岡県御殿場市, 2017 年 5 月.

石崎章仁,「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」, 近畿化学協会コンピュータ化学部会公開講演会(第 98 回例会), 大阪科学技術センター, 大阪府大阪市, 2017 年 2 月.

石崎章仁,「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」, 東京大学, 東京都文京区, 2017 年 1 月.

B-6) 受賞, 表彰

石崎章仁, 平成 29 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞 (2017).

G. SCHLAU-COHEN, A. ISHIZAKI and M. JOHNSON, Young Investigator Grant 2017 from Human Frontier Science Program (2017).

石崎章仁, 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).

石崎章仁, 第 10 回凝縮系科学賞 (2015).

石崎章仁, 日本物理学会第 10 回若手奨励賞 (2015).

A. ISHIZAKI, Short-term Fellowship at Wissenschaftskolleg zu Berlin (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 12 領域運営委員 (2017).

日本化学会東海支部常任幹事 (2017).

学会の組織委員等

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 回化学ソルベール会議, scientific secretary (2010).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

文部科学省科学技術・学術政策研究所科学技術動向研究センター専門調査員 (2015–).

その他

The Netherlands Foundation for Fundamental Research on Matter, external reviewer (2013, 2015).

Research Grant Council of Hong Kong, external reviewer (2012).

B-8) 大学での講義, 客員

理化学研究所環境資源科学研究センター生体機能触媒研究チーム, 客員研究員, 2016 年 5 月–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「光合成初期過程の効率性と恒常性を制御する電荷分離・再結合反応の理論研究」, 石崎章仁 (2017 年–2021 年).

Human Frontier Science Program, Young Investigator Grant 2017 “Regulation of photosynthetic light harvesting: how does protein conformation control photophysics?” G. Schlau-Cohen, A. Ishizaki and M. Johnson (2017 年–2020 年).

科研費若手研究(A), 「光合成光捕獲系における電子エネルギー移動ダイナミクスとその環境適応性の分子理論」, 石崎章仁 (2013 年–2017 年).

科研費研究活動スタート支援,「光合成エネルギー移動ダイナミクスを制御するタンパク質構造の揺らぎと変化について」,石崎章仁(2012年–2013年).

日本学術振興会海外特別研究員事業,「光合成複合体における超高速エネルギー移動の量子力学的機構の解明」,石崎章仁(2008年–2010年).

科研費特別研究員奨励費,「超高速非線形分光による凝縮相中分子および分子集合体の量子動力学の理論的解析」,石崎章仁(2006年–2008年).

C) 研究活動の課題と展望

近年,生体系や有機物質系における電荷及びエネルギー移動において,その量子性が移動効率の最適化に関して重要であることが理論的及び実験的に指摘されてきている。これらの動力的過程の性質を十分に明らかにすることは自然に対する理解を深めるだけでなく,微小系の作成及び制御技術の飛躍的進歩と相まり,最適な人工デバイス設計に対する指針を与えるうえでも重要である。従って,分子系の量子性と環境の熱揺らぎを適切に取り扱うことは必要不可欠であるが,これらの領域はまた様々な非自明かつ魅力的な物理現象が生じる舞台となることも明らかになってきている。我々は,これらの非自明的な物理現象が,着目している分子系での電荷,エネルギー,及び熱移動のような動力的過程において本質的役割を果たす可能性を考慮しつつ,様々な素過程の役割を明らかにし,物理現象に対する明瞭かつ本質的理解を深めることを目指したい。

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) 共鳴状態は緩和経路が存在する準安定状態であり，電子状態では，準安定アニオン，多価イオン，内殻ホール状態などがある。これらの電子共鳴状態は，理論的には散乱理論， L^2 理論，外挿法で研究されるが，複素吸収ポテンシャル法（CAP, Complex Absorbing Potential）は L^2 理論に分類され，一般の電子相関理論を利用できるという長所がある。CAP 法ではハミルトニアンに複素吸収ポテンシャルを加え，外部に散乱する波動関数を吸収して束縛状態の問題に帰着し，共鳴位置と共鳴幅を計算する。また外挿法の一つに解析接続結合定数法（ACCC, Analytic Continuation of the Coupling Constant）がある。我々は，電子共鳴状態を計算する方法として射影型 CAP/SAC-CI 法や ACCC SAC-CI 法を開発し，様々な形状をもつ分子に適用できる CAP としてポロノイ・ポテンシャルを開発した。本年度は，CAP/SAC-CI 法をニトリル基またはイソニトリル基を含む分子の電子共鳴状態に適用し，共鳴状態の through-bond 相互作用に注目して，電子透過スペクトルに新しい帰属を与えた。また，ACCC SAC-CI 法における解析接続の方法を検討し，いくつかの分子系でベンチマーク計算を実施し，新しい安定な解析接続の方法を提案した。
- b) 分子は超高压下において新奇な物性や反応を示す。これまで高压下における固体の相転移や凝縮系における物性について固体電子論や第一原理動力学法を用いて理論研究がなされてきたが，分子系の高压下の物性や反応については有用な方法が少なく，理論研究は多くない。我々は独自の PCM XP（extreme pressure）法を開発し，SAC-CI 法に導入することにより，分子の励起状態における圧力（GPa オーダー）の効果について研究を行った。本年度は，PCM XP 法を用いて，高压下におけるフラレーンとブタジエンの Diels-Alder 反応を研究した。本反応ではフラレーンの骨格構造に起因する [6,6] と [5,6] の配位位置における異なる生成物の可能性があり，通常 [6,6] 位置の反応が進行する。本研究によって，超高压下では本反応のエネルギーバリアが低くなり，[6,6] の反応では約 2 GPa，[5,6] の反応では約 10 GPa でバリアが消失することが見出された。またバリアが低くなる要因として，電子的効果とキャビテーション効果が同程度にあることが理論解析から示された。とくに通常は起きない [5,6] タイプの反応が高压下で進行することは興味深く，高压を利用した反応制御が期待できる。
- c) 担持合金微粒子触媒では，微粒子の合金効果および微粒子-担体相互作用が触媒活性の鍵となる。我々はこれまで合金効果および担体効果について凝縮相微粒子触媒（Au-Pd:PVP）や担持微粒子触媒（Ag/Al₂O₃）などの触媒活性について系統的に理論研究を実施してきた。本年度は，Cu-M 合金微粒子の構造と電子状態について，Cu_{38-n}M_n（M = Ru, Rh, Pd, Ag, Os, Ir, Pt, Au; $n = 1, 2, 6$ ）を理論モデルとして DFT 計算によって系統的に研究した。Cu₃₇M₁ の結果から偏析エネルギー（segregation energy）が金属 M の d 軌道占有数の変化と関連することを見出した。Cu₃₇M₂ および Cu₃₇M₆ の結果から d 軌道に非占軌道がある 8 族・9 族の原子（M = Ru, Rh, Os, Ir）では M 原子をコアとするコア・シェル構造が安定であり，d 軌道がほぼ占有される 10 族・11 族の原子（M = Pd, Ag, Pt, Au）では固溶体構造が安定

である結果を得た。ここで得られた規則は一般的に適用が可能であり、合金微粒子の構造安定性を予測する上で重要な知見である。また、凝縮コロイド相金クラスターによる一級アミンのヒドロアミノ化反応の触媒サイクルの反応機構を明らかにした。

- d) 金属酸化物表面に高分散された金属は、担体表面にドーピングされ単核金属の反応場を形成する。アルミナ表面では Al が他の金属に置換されることによって、金属周辺で表面酸素が活性化され、高い反応性を示す。最近、アルミナ表面に Pd 単原子をドーピングした Pd₁/γ-Al₂O₃ が CO 酸化に高い触媒活性を示すことが見出された。ここで Pd を汎用元素に代替することができれば、完全に希少元素フリーの触媒を開発することができる。本研究では、M₁/γ-Al₂O₃ (M = Pd, Fe, Co, Ni) における CO 酸化の触媒活性について周期境界 DFT を用いて研究を実施した。その結果、表面にドーピングされた金属が II 価をとる M = Ni が律速段階において最も低いエネルギーバリアを持つ結果が得られ、高い活性をもつ可能性が理論計算から示唆された。一方、III 価をとる金属 M = Fe, Co ではエネルギーバリアは高くなる。本反応では中間体における金属と表面酸素の距離や、吸着 CO への表面からの電子移動および電荷分極が重要な因子であることが分かった。この理論計算の結果を受けて、ESICB の実験グループによって実験が行われ、アルミナに Ni を高分散した系において触媒活性が高いことが見出された。本結果は、表面における単核金属サイトの活性化および表面構造の乱れの点で重要な知見であり、理論と実験の協働による重要な研究成果である。また、アルミナ表面における Co クラスターの安定性および凝集抑制効果に関して研究を実施した。

B-1) 学術論文

K. TAKAGI, K. ITO, Y. YAMADA, T. NAKASHIMA, R. FUKUDA, M. EHARA and H. MASU, “Synthesis and Optical Properties of Excited-State Intramolecular Proton Transfer Active π -Conjugated Benzimidazole Compounds: Influence of Structural Rigidification by Ring Fusion,” *J. Org. Chem.* **82**, 12173–12180 (2017).

R. ZHAO, K. YUAN, S. ZHAO, X. ZHAO and M. EHARA, “Quantum Chemical Insight into La₂C₉₆: Metal Carbide Fullerene La₂C₂@C₉₄ versus Dimetallofullerene La₂@C₉₆,” *Inorg. Chem.* **56**, 11883–11890 (2017).

R. ZHAO, K. YUAN, S. ZHAO, M. EHARA, S. NAGASE, J. M. POBLET and X. ZHAO, “Deciphering the Role of Long-Range Interaction in Endohedral Metallofullerenes: A Revisit to Sc₂C₇₀,” *J. Phys. Chem. C* **121**, 20481–20488 (2017).

P. ZHAO, X. ZHAO and M. EHARA, “Theoretical Insight into Sc₂C₇₆: Carbide Clusterfullerene Sc₂C₂@C₇₄ versus Dimetallofullerene Sc₂@C₇₆,” *Inorg. Chem.* **56**, 10195–10203 (2017).

K. BOBUATONG, H. SAKURAI and M. EHARA, “Intramolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study,” *ChemCatChem* **9**, 4490–4500 (2017). (Front Cover, Cover Profile)

K. TAKAGI, K. ITO, Y. YAMADA, T. NAKASHIMA, R. FUKUDA, M. EHARA and D. TAKEUCHI, “Synthesis and Optical Properties of Fused π -Conjugated Imidazole Compounds,” *Chem. Lett.* **46**, 1372–1375 (2017).

T. YANG, R. FUKUDA, R. CAMMI and M. EHARA, “Diels–Alder Cycloaddition of Cyclopentadiene and C₆₀ at the Extreme High Pressure,” *J. Phys. Chem. A* **121**, 4363–4371 (2017).

N. TAKAGI, K. ISHIMURA, M. MATSUI, R. FUKUDA, M. EHARA and S. SAKAKI, “Core-Shell Versus Other Structures in Binary Cu_{38–n}M_n Nanoclusters (M = Ru, Rh, Pd, Ag, Os, Ir, Pt, and Au; n = 1, 2, and 6): Theoretical Insight into Determining Factors,” *J. Phys. Chem. C* **121**, 10514–10528 (2017).

- T. SOMMERFELD, J. B. MELUGIN, P. HAMAL and M. EHARA**, “Resonance Energies and Lifetimes from the Analytic Continuation of the Coupling Constant Method: Robust Algorithms and a Critical Analysis,” *J. Chem. Theory Comput.* **13**, 2550–2560 (2017).
- T. YANG, R. FUKUDA, S. HOSOKAWA, T. TANAKA, S. SAKAKI and M. EHARA**, “A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts $M_1/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ ($M = \text{Pd, Fe, Co, and Ni}$),” *ChemCatChem* **9**, 1222–1229 (2017).
- M. SAVARESE, U. RAUCCI, R. FUKUDA, C. ADAMO, M. EHARA, N. REGA and I. CIOFINI**, “Comparing the Performance of TD-DFT and SAC-CI Methods in the Description of Excited States Potential Energy Surfaces: An Excited State Proton Transfer Reaction as Case Study,” *J. Comput. Chem.* **38**, 1084–1092 (2017).
- T. YANG and M. EHARA**, “Computational Studies on Reaction Mechanism and Origins of Selectivities in Nickel-Catalyzed (2+2+2) Cycloadditions and Alkenylative Cyclizations of 1,6-Ene-Allenenes and Alkenes,” *J. Org. Chem.* **82**, 2150–2159 (2017).
- Y. MORISAWA, S. TACHIBANA, A. IKEHATA, T. YANG, M. EHARA and Y. OZAKI**, “Changes in the Electronic States of Low-Temperature Solid *n*-Tetradecane: Decrease in the HOMO–LUMO Gap,” *ACS Omega* **2**, 618–625 (2017).
- R. FUKUDA, N. TAKAGI, S. SAKAKI and M. EHARA**, “Structures of Bimetallic Copper–Ruthenium Nanoparticles: Incoherent Interface and Surface Active Sites for Catalytic Nitric Oxide Dissociation,” *J. Phys. Chem. C* **121**, 300–307 (2017).
- T. YANG and M. EHARA**, “Probing the Electronic Structures of Co_n ($n = 1\text{--}5$) Clusters on $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ Surfaces Using First-Principles Calculations,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 3679–3687 (2017).
- M. EHARA, Y. KANAZAWA and T. SOMMERFELD**, “Low-Lying π^* Resonances Associated with Cyano Groups: A CAP/SAC-CI Study,” *Chem. Phys.* **482**, 169–177 (2017). (special issue for 70th birthday of L. S. Cederbaum)

B-3) 総説, 著書

- 江原正博, 櫻井英博, 「複雑系の理論計算化学: Au/Pd 合金クラスター触媒」, 「触媒研究における計算科学の利用」, *触媒* **59**(4), pp. 181–186 (2017).
- 江原正博, 「計算化学」, 「触媒化学 基礎から応用まで」, 田中庸裕, 山下弘巳編, 講談社; 東京, 第 11.4 章, pp. 250–258 (2017).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

- M. EHARA**, “Electronic Resonance States Studied by CAP/SAC-CI and ACCC SAC-CI,” The 8th Asian Pacific Conference of Theoretical & Computational Chemistry (APCTCC), Mumbai (India), December 2017.
- M. EHARA**, “Theoretical Molecular Spectroscopy using SAC-CI,” The 2nd International Symposium on Quantum Chemistry at Kwansei Gakuin University, Nishinomiya, Hyogo (Japan), November 2017.
- M. EHARA**, “Interface in Supported Nanocluster Catalysts,” First Joint Symposium of IMS-NANOTEC, Bangkok (Thailand), October 2017.
- M. EHARA**, “Structure and Catalytic Activity of Nanocluster Catalysts,” The 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE21), Bangkok (Thailand), August 2017.*
- M. EHARA**, “Theoretical Chemistry for Complex Systems: Nanocluster and Heterogeneous Catalysts,” Forum for Molecular Science, Xi’an Jiaotong University, Xi’an (China), June 2017.
- M. EHARA**, “Theoretical Chemistry for Complex Systems: Approach from Accurate Electronic Structure Theory,” Fudan University, Shanghai (China), April 2017.

M. EHARA, “Element Strategy for Catalysts and Batteries,” Shanghai University, Shanghai (China), April 2017.

M. EHARA, “Relevance of Interface Region in Supported Nanocluster Catalysts,” The 5th Modeling of Chemical and Biological Reactivity (MCBR-5), Chennai (India), February 2017.

M. EHARA and T. SOMMERFELD, “Electronic Resonance States Studied by CAP/SAC-CI and ACCC SAC-CI,” Recent Advances in Many-Electron Theory (RAMET) 2017, Goa (India), February 2017.

江原正博, 「電子共鳴状態の理論研究」, 分子科学討論会, 東北大学, 仙台, 2017年9月.

江原正博, 「紫外・遠紫外領域に観測される電子状態と分子間相互作用の理論的解析」, 日本分光学会遠紫外分光部会第2回講演会「拓かれる紫外・遠紫外分光法の研究領域」, 東京, 2017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).

日本化学会東海支部会計幹事 (2016).

日本化学会学術賞・進歩賞選考委員会分野別選考委員(複合領域) (2017).

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).

Pacificchem 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).

The VIIth Japan-Czech-Slovakia (JCS) Symposium on Theoretical Chemistry, Prague, Czech, Organization Committee (2017–2018).

The 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering, International Advisory Board (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).
日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2016–2017).
日本学術振興会国際事業委員会書面審査員・書面評価員 (2016).
日本学術振興会卓越研究員候補者選考委員会書面審査員 (2016–2017).
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).
The Chemical Record, Special Issue of “Li and Na Rechargeable Batteries,” Guest Editor (2017–2018).

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 (2016–2017).
量子化学ウィンタースクール世話人 (2011–2017).
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 (2015–2017).
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).
物質機能の解明・開拓先端研究統合教育プログラムWG 委員 (2016–2017).
総合研究大学院大学物理科学コース別教育プログラム運営委員 (2016–2017).

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」, 2017年4月20日–21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).

B-11) 産学連携

自動車用内燃機関技術研究組合,「計算化学による次世代ゼオライトの構造提案」, 江原正博 (2017年–2018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、光機能性分子の電子過程や金属微粒子・バルク触媒を主たる対象とした理論研究を実施し、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、さらに開発を進める必要がある。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する。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、金属微粒子触媒、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) 分子動力学シミュレーションによるアミロイド β 全長の二量体形成
- b) 密度汎関数強束縛法を用いた金属イオンによるアミロイド β ペプチドの凝集
- c) 定温定圧レプリカ置換法による高圧下でのシニョリンの特異な振る舞いの解明
- d) 理論的研究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 ($A\beta$) 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。アミロイド線維を形成した $A\beta$ ペプチドの構造は NMR 実験などでわかっているが、その前段階であるオリゴマーの構造はまだ明らかになっていない。オリゴマー形成の初期段階である二量体形成の機構を明らかにするために、水中の $A\beta_{42}$ 二分子および $A\beta_{40}$ 二分子についてハミルトニアンレプリカ置換分子動力学シミュレーションを行った。その結果、 $A\beta_{42}$ および $A\beta_{40}$ のどちらでも分子間 β シート構造を形成している二量体を再現することができた。分子間 β シート構造を持つ $A\beta$ 二量体を計算で再現したのは初めてである。また $A\beta_{42}$ の方が $A\beta_{40}$ よりも分子内で β -ヘアピン構造を形成しやすいことを示した。これまでの我々の計算により β -ヘアピン構造を形成すると分子間 β シート構造を形成しやすいことが分かっており、そのため $A\beta_{42}$ の方が $A\beta_{40}$ よりも凝集が速いと説明できる。この結果は実験結果と一致しており、この現象を理論的に解明したのは本研究が初めてである。
- b) $A\beta$ ペプチドは Cu^{2+} や Zn^{2+} などの金属イオンの存在で、その凝集が促進されることが実験により知られている。計算を用いた検討もいくつかなされているが、あらかじめ実験結果を再現することが分かっているパラメータを用いた検証しか行われていない。また、多くの計算は $A\beta$ ペプチド 1 本と金属イオンとの相互作用についての計算しか行われておらず、複数の $A\beta$ ペプチドの凝集促進に関しては研究されていない。そこで古典分子動力学計算と量子化学計算を用いた、より一般的なモデルを用いて金属イオン存在下での $A\beta$ ペプチドの凝集促進について調べている。昨年度はそのための量子・古典混合分子動力学シミュレーションを高速化する手法を開発し、実際にこの系の計算を 167 倍高速化することに成功した。この手法を用いた結果、金属イオンと結合するアミノ酸残基を特定することができた。今後詳細な解析を行い、金属イオンによる $A\beta$ ペプチドの凝集促進機構を解明する。
- c) レプリカ交換法を発展させてより効率的なシミュレーション手法であるレプリカ置換法をこれまでに開発してきた。しかしこれまでのレプリカ置換法では体積が変化せず、圧力を制御することができなかった。そこで、我々は昨年度定温定圧アンサンブルにおけるレプリカ置換分子動力学法を開発した。この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。シニョリンは 10 残基からなるペプチドであり、フォールド状態とミスフォールド状態を持つ。解析の結果、フォールド状態は高圧環境下で構造が壊れるがミスフォールド状態はより安定化することを発見した。ペプチドの 2 次構造は通常加圧とともに壊れるので、この現象は通常とは異なる特異なものである。さらにこの現象が起きる分子論的機構も解明した。

- d) 大規模分子動力学シミュレーションを長時間実行するため、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。これまで MPI および OpenMP によるハイブリッド並列化に取り組み、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。今年度はタンパク質など全ての原子についても並列化を行った。今後さらに効率化を進め、大規模・長時間分子動力学シミュレーションに実用する。

B-1) 学術論文

M. YAMAUCHI and H. OKUMURA, “Development of Isothermal-Isobaric Replica-Permutation Method for Molecular Dynamics and Monte Carlo Simulations and Its Application to Reveal Temperature and Pressure Dependence of Folded, Misfolded, and Unfolded States of Chignolin,” *J. Chem. Phys.* **147**, 184107 (15 pages) (2017).

B-4) 招待講演

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の形と動き」, 日本物理学会 2017 年度公開講座「物理で探る生物の謎」, 東京, 2017 年 11 月.

奥村久士, 「コンピューターシミュレーションで見るタンパク質」, 自然科学カフェの集い (第 27 回), 東京, 2017 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線維の形成過程と破壊過程」, 近畿化学協会コンピュータ化学部会例会, 大阪, 2017 年 10 月.

奥村久士, 「各種統計アンサンブルの生成法」, 第 11 回分子シミュレーションスクール——基礎から応用まで——, 岡崎, 2017 年 9 月.

奥村久士, 「アミロイド線維の分子動力学シミュレーション」, 慶應義塾大学理工学部物理学科談話会, 横浜, 2017 年 6 月.

奥村久士, 「アミロイド線維のシミュレーション——構造サンプリングと非平衡分子動力学——」, 第 11 回革新的量子化学シンポジウム～量子的自然の叡智と美～, 京都, 2017 年 5 月.

奥村久士, 「分子動力学シミュレーションで調べたアミロイド線維の揺らぎと破壊」, 第 2 回計算分子科学の若手研究会, 金沢, 2017 年 3 月.

奥村久士, 「レプリカ置換法の開発とアミロイド線維への応用」, 分子シミュレーションセミナー「pH 一定の分子シミュレーション技術などの発展とその応用」, 横浜, 2017 年 1 月.

伊藤 暁, 「レプリカ置換法とその応用」, ワークショップ「レア・イベントの計算科学」, 熱海, 2017 年 8 月.

伊藤 暁, “Replica-permutation method: efficient sampling for biomolecules,” 分子集合系化学工学セミナー, 豊中, 2017 年 7 月.

伊藤 暁, 「レプリカ置換法とそのアミロイド β ペプチドへの応用」, 研究会「凝集系の理論化学」, 那覇, 2017 年 4 月.

伊藤 暁, 「pH レプリカ交換法とその生体分子への応用」, 分子シミュレーションセミナー「pH 一定の分子シミュレーション技術などの発展とその応用」, 横浜, 2017 年 1 月.

H. OKUMURA, “Amyloid fibril formation by molecular dynamics simulations,” 2017 NCTS December Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Hsinchu (Taiwan), December 2017.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations for aggregation and disaggregation of amyloid- β peptides,” EMN Meeting on Computation and Theory 2017, Dubai (U.A.E.), November 2017.

H. OKUMURA, “Simulational studies of A β amyloid fibrils by equilibrium and nonequilibrium molecular dynamics method,” 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering, Pathum Thani (Thailand), August 2017.

H. OKUMURA, “Replica-permutation simulation of biomolecules: Application of the Suwa-Todo Monte Carlo algorithm,” Seminar in Bioinformatics Program and Biochemistry Department, Chulalongkorn University, Bangkok (Thailand), August 2017.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations of A β amyloid fibrils in equilibrium and nonequilibrium systems,” 3rd Japan-Thai workshop on Theoretical and Computational Chemistry 2017, Yokohama (Japan), July 2017.

H. OKUMURA, “All-atom molecular dynamics simulations of A β amyloid fibrils,” 2017 NCTS Seminars on Critical Phenomena and Complex Systems, Hsinchu (Taiwan), June 2017.

H. OKUMURA, “All-atom molecular dynamics simulations to reveal dynamical ordering of amyloid fibril,” International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2017, Thessaloniki (Greece), April 2017.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations for fluctuation and disruption of amyloid fibril,” 2017 NCTS March Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Hsinchu (Taiwan), March 2017.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations for creation and disruption of amyloid fibrils,” International Symposium on Molecular Science—Physical Chemistry/Theoretical Chemistry, Chemoinformatics, Computational Chemistry, Yokohama (Japan), March 2017.

H. OKUMURA, “All-atom molecular dynamics simulations of A β amyloid fibrils,” Institute for Protein Research (IPR) Seminar, Osaka (Japan), January 2017.

H. OKUMURA, “Equilibrium and nonequilibrium molecular dynamics simulations of A β amyloid fibrils,” 10th International Conference on Computational Physics, Macau (China), January 2017.

S. G. ITOH, “Replica-permutation method to obtain efficient sampling for biomolecules,” The 2017 EMN Meeting on Computation and Theory, Dubai (U.A.E.), November 2017.

S. G. ITOH, “Oligomerization Pathway of Amyloid- β Fragments Studied by the Hamiltonian Replica-Permutation Method,” The 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering, Pathum Thani (Thailand), August 2017.

S. G. ITOH, “Oligomerization of A β (29-42) using Hamiltonian Replica-Permutation MD simulations,” 2017 NCTS March Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Hsinchu (Taiwan), March 2017.

K. ISHIMURA, “Development of Massively Parallel Quantum Chemistry Calculation Program,” 2017 NCTS March Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Hsinchu (Taiwan), March 2017.

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).

山内仁喬, 第 44 回生体分子科学討論会優秀ポスター賞 (2017).

山内仁喬, 第 11 回分子科学討論会優秀ポスター賞 (2017).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会名古屋支部役員 (2017-).

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), オブザーバー (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

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」運営委員 (2016-).

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」, 2017 年 12 月 14 日.

慶應義塾大学理工学部, 「理工学概論」, 2017 年 6 月 14 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) これまでにA β ペプチド2本の分子動力学シミュレーションを行い、その二量体構造を調べてきた。今後、より多く(5本程度)のA β を含むシミュレーションを行い、オリゴマー構造とその形成過程を調べる。特に二量体形成の際に見られた β ヘアピン構造形成が分子間 β シート構造形成を促進させるという現象が三量体、四量体、五量体形成においても観察されるか、あるいは別の機構でオリゴマーが形成されるのか解明する。二量体形成の際にはまず β ヘアピン構造を形成することでA β の一部分を伸びた構造に安定させることができるが、三量体形成の際にはすでに分子間 β シート構造が形成されているので必ずしも β ヘアピン構造を形成する必要はないようにも思われる。シミュレーションを行うことで二量体形成と三量体以上のオリゴマー形成のメカニズムの類似点、相違点を明らかにする。この研究により、アルツハイマー病の原因と考えられているA β のオリゴマー構造とその形成過程を解明する。
- b) A β 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A β 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っている。これまでに高速な量子・古典混合分子動力学法を開発し、金属イオンと結合するアミノ酸残基を特定した。今後さらに詳細な解析を行い、金属イオンによるA β ペプチドの凝集加速機構を解明する。
- c) A β ペプチド以外のタンパク質のアミロイド線維形成過程についても今後調べていく。 α シヌクレインのアミロイド線維はパーキンソン病の原因として知られている。 α シヌクレインのうちアミロイド線維を形成する核となる部分が最近特定されたので、その部分のアミロイド線維形成過程を分子動力学シミュレーションで解明し、A β ペプチドのアミロイド線維の場合と比較検討を行う。

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) 大規模系のための励起状態計算手法の開発
- b) 有機／有機界面の電荷移動状態の解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機フレキシブルデバイスの光電子物性予測を目的として，大規模分子集合体の励起状態計算手法の開発を行った。有機フレキシブルデバイスは，有機半導体分子からなる乱れた分子集合体である。分子間の軌道間相互作用・状態間相互作用により，電子励起状態が複数の分子に非局在化する場合があるため，一般的な非局所励起を計算できる手法が必要である。我々はフラグメント分子軌道（FMO）法に基づいて，非局所励起状態を計算できる励起状態法を開発した。手法の骨子は，励起状態や電荷がフラグメント毎に局在化した configuration state function（CSF）から全系の励起状態を近似することにある。励起状態ハミルトニアン of 行列要素をフラグメント CSF で計算し対角化することにより，全系の励起状態の近似解が得られる。 π 共役分子の 2 量体や分子結晶でベンチマーク計算を行ったところ，フラグメント分割なしの通常の計算の結果を，数十 meV 以下の精度で再現できることがわかった。さらに，励起子モデルをシームレスに導出できることが特徴であるため，量子ダイナミクス法との接合が容易である。
- b) 有機太陽電池系のペンタセン／C₆₀ の有機／有機界面の電荷移動状態の解析を行った。有機／有機界面で形成される電荷移動状態は，電子アクセプター相の電子波動関数と電子ドナー相の正孔波動関数からなる状態である。電荷移動状態は電荷分離・電荷再結合の中間状態に関与することから，有機光デバイス系のエネルギー変換過程において重要な役割を担う。その重要性にも関わらず，実験で電荷移動状態のエネルギーを決める困難さから，電荷移動状態の本質は解明されていない。本研究では FMO 法と Quantum mechanics/molecular mechanics（QM/MM）法を組み合わせて，界面付近のおよそ 50 分子を量子的に扱い，周囲の分子は外部電荷として取り扱った電子状態系計算を行った。FMO 法に基づいた励起状態法を適用したところ，最低準位の電荷移動状態のエネルギーは実験値とよく一致していることが分かった。さらに電子－正孔距離，電子・正孔波動関数の inverse participation ratio，電子－正孔距離の分散，振動子強度といった物理量を導入することにより，電荷移動状態の解析を行った。ペンタセンの局所励起状態と電荷移動状態との混合が，電子－正孔距離の分散・振動子強度を増大させることがわかり，非局在化した電荷移動状態が光吸収により直接励起されることがわかった。

B-1) 学術論文

T. FUJITA, Y. HAKETA, H. MAEDA and T. YAMAMOTO, “Relating Stacking Structures and Charge Transport in Crystal Polymorphs of the Pyrrole-Based π -Conjugated Molecule,” *Org. Electron.* **49**, 53–63 (2017).

T. FUJITA and T. YAMAMOTO, “Assessing the Accuracy of Integral Equation Theories for Nano-Sized Hydrophobic Solutes in Water,” *J. Chem. Phys.* **147**, 014110 (12 pages) (2017).

S. MOSTAME, J. HUH, C. KREISBECK, A. J. KERMAN, T. FUJITA, A. EISFELD and A. ASPURU-GUZIŁ, “Analog Quantum Simulators May Outperform Classical Algorithms: Emulation of Complex Open Quantum Systems Using Superconducting Qubits,” *Quantum Inf. Process.* **16**, 44 (16 pages) (2017).

B-4) 招待講演

藤田貴敏,「有機分子集合体の光物性と励起ダイナミクス」, 第1回量子生命科学研究会, 東京大学, 東京(日本), 2017年4月.

藤田貴敏,「有機分子集合体の励起子ダイナミクス」, 神戸大学先端融合科学シンポジウム「非共有結合系の分子科学: 構造と機能」, 神戸大学, 神戸(日本), 2017年7月.

T. FUJITA, “Development of Fragment Molecular Orbital Method for Organic Optoelectronic Materials,” Workshop Development of next-generation quantum materials research platform, University of Tokyo, Tokyo (Japan), December 2017.

C) 研究活動の課題と展望

A-2)(b)の研究課題では, 電荷移動状態のエネルギーは再現できたものの, 電荷分離状態のエネルギーは上手く再現できなかった。実験値を再現できなかった原因は, 電荷分離に伴い周囲の有機分子に引き起こされる電子分極の効果が計算に考慮されていないからである。電子分極の効果を考慮するためには, 誘電関数を第一原理的に計算しつつ軌道エネルギーや電子-正孔クーロン力を算出できる手法が必要である。そこで今後はフラグメント分割法に基づいたGW/Bethe-Salpeter 方程式法の開発・実装を計画している。局所励起状態・電荷移動状態・電荷分離状態間のエネルギー差を正確に算出できる手法を確立して, 電荷分離や電荷再結合の量子ダイナミクスへと展開していきたい。

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) レア・イベントの新規サンプリング手法の開発と生体分子マシンへの応用
- 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) 生体分子マシンが機能する際の典型的な時間スケールはミリ秒以上で、タンパク質等大規模複合体からなる生体分子マシンのそのような（分子スケールで）レアな構造ダイナミクスを従来の手法でシミュレーションするのは現在の計算機性能では困難である。そこで、レア・イベントの遷移ダイナミクスを集中的にサンプリングする手法である **Transition path sampling** を大規模系でも使えるように効率化したアルゴリズムを開発した。それをトランスポーター系に応用して、その動作メカニズムを解明している。
- 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

H. JUNG, K. OKAZAKI and G. HUMMER, “Transition Path Sampling of Rare Events by Shooting from the Top,” *J. Chem. Phys.* **147**, 152716 (10 pages) (2017).

B-4) 招待講演

岡崎圭一, 「生体分子モーター F_1 -ATPase における機能ダイナミクスのシミュレーション」, スーパーコンピュータワークショップ 2016, 岡崎市, 2017年2月.

K. OKAZAKI, “Molecular simulation and modeling of functional dynamics in F_0F_1 -ATP synthase,” *Frontiers in Computational Biophysics and Biochemistry*, RIKEN AICS, Kobe (Japan), February 2017.

岡崎圭一, 「生体分子モーターにおける機能ダイナミクスのシミュレーション」, 化学反応のポテンシャル曲面とダイナミクス, 那覇市, 2017年4月.

K. OKAZAKI, “Molecular simulation and modeling of functional dynamics in biomolecular motor ATP synthase,” 2017 Summer Symposium of KCS-Physical Chemistry Division and 2017 Korea-Japan Molecular Science Symposium, Busan (Korea), July 2017.

岡崎圭一, 「F 型 ATP 合成酵素における機能ダイナミクスのモデリングとシミュレーション」, 神戸大学先端融合科学シンポジウム「非共有結合系の分子科学: 構造と機能」, 神戸市, 2017 年 7 月.

岡崎圭一, “Molecular simulation and modeling of functional dynamics in biomolecular motor,” 東京大学物性研究所理論セミナー, 柏市, 2017 年 8 月.

岡崎圭一, 「Transition path sampling における新しい遷移パス生成法による効率化」, レア・イベントの計算科学, 伊豆市, 2017 年 8 月.

岡崎圭一, “Transport mechanism of Na^+/H^+ antiporter from transition-path simulations,” 第 55 回日本生物物理学会年会シンポジウム「いろいろなスケールで働く膜タンパク質の作動原理」, 熊本市, 2017 年 9 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

学会の組織委員等

分子シミュレーションスクール世話人 (2016–2017).

日本生物物理学会分野別専門委員 (アロステリズム) (2017).

日本生物物理学会運営委員 (2010–2011).

その他

Netherlands Organisation for Scientific Research (NWO), Innovational Research Incentives Scheme, external reviewer (2017).

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, 「バ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索する研究を進めている。単一の生体分子モーターやトランスポ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を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・極低温リユ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) パ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-3) 総説, 著書

大森賢治, 「ようこそ量子」, INTERVIEW #015; #017, 国立情報学研究所量子情報国際研究センター, 2017年3月24日 (2017).
N. TAKEI, C. SOMMER, C. GENES. G. PUPILLO, H. GOTO, K. KOYASU, H. CHIBA, M. WEIDEMÜLLER and K. OHMORI, “Ultrafast Quantum Simulator,” 2Physics (invited article), <http://www.2physics.com/2017/03/ultrafast-quantum-simulator.html>, March 2017 (2017).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

大森賢治, 「量子科学技術の拓く未来社会とは」, JXTG エネルギー株式会社中央技術研究所, 横浜 (日本), 2017年7月.

大森賢治, 「量子科学技術の国際動向と日本の展望」, 林芳正文部科学大臣主催会合, 京都 (日本), 2017年10月.

K. OHMORI, “Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly Correlated Ultracold Rydberg Gas,” Atomic and Laser Physics Seminar, University of Oxford, Oxford (U.K.), November 2017.*

K. OHMORI, “Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly Correlated Ultracold Rydberg Gas,” Max Planck Institute for the Science of Light, Erlangen (Germany), October 2017.

K. OHMORI, “Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly Correlated Ultracold Rydberg Gas,” CUA Seminar Series, MIT-Harvard Center for Ultracold Atoms, Cambridge (U.S.A.), September 2017.*

K. OHMORI, “Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly Correlated Ultracold Rydberg Gas,” Gordon Research Conference on “Quantum Control of Light and Matter,” Mount Holyoke College, South Hadley (U.S.A.), August 2017.*

K. OHMORI, “Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly Correlated Ultracold Rydberg Gas,” Institut d’Optique, Palaiseau (France), May 2017.

K. OHMORI, “Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly Correlated Ultracold Rydberg Gas,” Les Houches/Telluride Workshop on “Quantum Dynamics and Spectroscopy of Functional Molecular Materials and Biological Photosystems,” Les Houches (France), May 2017.*

K. OHMORI, “Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly Correlated Ultracold Rydberg Gas,” IQOQI, University of Innsbruck (Austria), May 2017.

大森賢治, 「量子科学技術の拓く未来社会とは」, JXTG エネルギー株式会社・中央技術研究所, 横浜 (日本), 2017年7月.

武井宣幸, 「強相関リユードベリ原子を用いた超高速量子シミュレーター」, 第14回原子・分子・光科学 (AMO) 討論会, 電気通信大学, 調布 (日本), 2017年6月.

N. TAKEI, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly-correlated ultracold Rydberg gas,” BIT’s 1st Annual Conference of Quantum World-2017, Changsha (China), October 2017.

B-6) 受賞, 表彰

大森賢治, 松尾財団宅間宏記念学術賞 (2017).

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

14th 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).

Gordon Research Conference on Quantum Control of Light and Matter 2019 副議長, 2021 議長 (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・学術審議会量子科学技術委員会専門委員(主査代理)(2015–).

文部科学省科学技術・学術審議会量子科学技術委員会・量子情報処理(主に量子シミュレーション)に係るロードマップ検討グループメンバー(2017–).

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.

QuantERA (<https://www.quantera.eu>), Invited Remote Reviewer (2017–).

EU Future and Emerging Technologies, HORIZON 2020, European Commission, Scientific and Industrial Advisory Board (SIAB) (2017–).

学会誌編集委員

Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, IOP, International Advisory Board (2015–2017).

その他

文部科学省からの依頼で, 林芳正文部科学大臣と欧州連合(EU)Carlos Moedas 欧州委員(研究・科学・イノベーション担当)との間の「量子技術分野の今後の協力に関する合意」(2018年1月8日, ブリュッセル)に貢献.

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(フンボルト賞受賞者), 2012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).

B-11) 産学連携

浜松ホトニクス(株), 共同研究(科研費・特別推進研究を共同推進), 大森賢治(2017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局所分子間相互作用の研究：本グループでは内殻励起・光電子スペクトルのエネルギーシフト（化学シフト）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変化を明らかにできることを示してきた。特に最近は， μ スケールの空間分解能を有するその場観測用軟X線吸収試料セルを開発することによって，研究対象を拡大している。また，集光素子を使ったナノスケール化学状態マッピングの開拓的研究にも取り組んでいる。具体的には，濃度や温度に依存した溶液（二成分液体）の溶質の周りの局所的な配位構造の相転移的現象など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

H. YAMANE and N. KOSUGI, “High Hole-Mobility Molecular Layer Made from Strong Electron Acceptor Molecules with Metal Adatoms,” *J. Phys. Chem. Lett.* **8**, 5366–5371 (2017).

M. NAGASAKA, H. YUZAWA and N. KOSUGI, “Interaction between Water and Alkali Metal Ions and Its Temperature Dependence Revealed by Oxygen K-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. B* **121**, 10957–10964 (2017).

T. GEJO, M. OURA, T. TOKUSHIMA, Y. HORIKAWA, H. ARAI, S. SHIN, V. KIMBERG and N. KOSUGI, “Resonant Inelastic X-Ray Scattering and Photoemission Measurement of O₂: Direct Evidence for Dependence of Rydberg-Valence Mixing on Vibrational States in O 1s→Rydberg States,” *J. Chem. Phys.* **147**, 044310 (7 pages) (2017).

T. PETIT, L. PUSKAR, T. DOLENKO, S. CHOUDHURY, E. RITTER, S. BURIKOV, K. LAPINSKIY, Q. BRUSTOWSKI, U. SCHADE, H. YUZAWA, M. NAGASAKA, N. KOSUGI, M. KURZYP, A. VENEROSY, H. GIRARD, J.-C. ARNAULT, E. OSAWA, N. NUNN, O. SHENDEROVA and E. F. AZIZ, “Unusual Water Hydrogen Bond Network around Hydrogenated Nanodiamonds,” *J. Phys. Chem. C* **121**, 5185–5194 (2017).

M. YOSHIDA, S. ONISHI, Y. MITSUTOMI, F. YAMAMOTO, M. NAGASAKA, H. YUZAWA, N. KOSUGI and H. KONDOH, “Integration of Active Nickel Oxide Clusters by Amino Acids for Water Oxidation,” *J. Phys. Chem. C* **121**, 255–260 (2017).

T. OHIGASHI, M. NAGASAKA, T. HORIGOME, N. KOSUGI, S. M. ROSENDAHL and A. P. HITCHCOCK, “Development of In-Situ Sample Cells for Scanning Transmission X-Ray Microscopy,” *AIP Conf. Proc.* **1741**, 050002 (4 pages) (2016).

B-3) 総説, 著書

M. NAGASAKA, T. OHIGASHI and N. KOSUGI, “Development of In-Situ/Operando Sample Cells for Soft X-Ray Transmission Spectromicroscopy at UVSOR-III Synchrotron,” *Synchrotron Rad. News* **30**, 3–7 (2017).

長坂将成, 「軟X線吸収分光法による液体の局所構造解析」, *化学と工業* **70(9)**, 828–829 (2017).

B-4) 招待講演

N. KOSUGI, “Liquid and liquid–liquid interface studied by soft X-ray absorption in transmission mode,” International Workshop on Liquid X-Ray Spectroscopy, LiXS2017, SOLEIL, Saint-Aubin (France), January 2017.

N. KOSUGI, “Molecular inner-shell spectroscopy from isolated to interacting systems and its application to *in situ/operando*,” Nano and Molecular Systems (NANOMO) Research Seminar, Oulu (Finland), August 2017.

長坂将成, 「軟X線吸収分光法による液体と液液界面の局所電子状態の解明」, 日本化学会第97春季年会(2017)「若い世代の特別講演会」, 慶應義塾大学日吉キャンパス, 横浜, 2017年3月.

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).

長坂将成, 分子科学会奨励賞 (2017).

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

日本放射光学会会長 (2017–2019), 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 2005–2007, 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 (2016–2017).

学会の組織委員等

SRI シンクロトン放射装置技術国際会議国際諮問委員 (1994–2009, 2014–).

VUV 真空紫外光物理国際会議国際諮問委員 (2004–2008).

X線物理及び内殻過程の国際会議国際諮問委員 (2006–2008).

VUVX 真空紫外光物理及びX線物理国際会議国際諮問委員 (2008–2013).

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のビームダイナミクス国際ワークショップ組織委員 (2002).

日仏自由電子レーザーワークショップ副議長 (2002).

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 (2016–2018).

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, 2017), 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会委員 (2001–2003), 物質構造科学研究所運営協議会委員 (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 (2015–2018).

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 AOFSTR 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tron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tron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).

科研費基盤研究(B), 「軟X線内殻励起の化学シフトの顕微観測と化学的環境解析」, 小杉信博 (2017年–2019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).

科研費基盤研究(C), 「弱い相互作用空間における分子性薄膜の構造–電子状態相関の系統的解明」, 山根宏之 (2017年–2019年).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型)「 π 造形科学:電子と構造のダイナミズム制御による新機能創出」(公募研究), 「有機界面設計に基づく新奇 π 機能の創成と制御」, 山根宏之 (2017年–2018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

本研究グループでは、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。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，ルブレ単結晶に対して電子フォノン相互作用の検出に世界で初めて成功した。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，バンドギャップに生じる 10ppm レベルの状態密度検出に成功した。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捉えた。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。新たに放射光を利用した波数分解光電子放射顕微測定を実施するとともに，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

- F. BUSSOLOTTI, J. YANG, T. YAMAGUCHI, Y. NAKAYAMA, M. MATSUNAMI, H. ISHII, N. UENO and S. KERA**, “Hole-Phonon Coupling Effect on the Electronic Band Dispersion of Organic Molecular Semiconductor,” *Nat. Commun.* **8**, 173 (7 pages) (2017).
- A. F.-CANELLAS, Q. WANG, K. BROCH, D. A. DUNCAN, P. KUMAR THAKUR, L. LIU, S. KERA, A. GERLACH, S. DUHM and F. SCHREIBER**, “Metal–Organic Interface Functionalization via Acceptor End Groups: PTCDI on Coinage Metals,” *Phys. Rev. Mater. (Rapid)* **1**, 013001 (6 pages) (2017).
- Q. WANG, Q. XIN, R.-B. WANG, M. OEHZELT, N. UENO, S. KERA and S. DUHM**, “Picene Thin Films on Metal Surfaces: Impact of Molecular Shape on Interfacial Coupling,” *Phys. Status Solidi RRL* **11**(5), 1700012 (5 pages) (2017).
- J. P. YANG, L.-T. SHANG, F. BUSSOLOTTI, L.-W. CHENG, W.-Q. WANG, X.-H. ZENG, S. KERA, Y.-Q. LI, J.-X. TANG and N. UENO**, “Fermi-Level Pinning Appears upon Weak Electrode–Organic Contact without Gap States: A Universal Phenomenon,” *Org. Electron.* **48**, 172–178 (2017).
- T. HOSOKAI, K. YONEZAWA, J. P. YANG, K. R. KOSWATTAGE and S. KERA**, “Significant Reduction in the Hole-Injection Barrier by the Charge-Transfer State Formation: Diindenoperylene Contacted with Silver and Copper Electrodes,” *Org. Electron.* **49**, 39–44 (2017).
- B. REISZ, S. WEIMER, R. BANERJEE, C. ZEISER, C. LORCH, G. DUVA, J. DIETERLE, K. YONEZAWA, J. P. YANG, S. KERA, N. UENO, A. HINDERHOFER, A. GERLACH and F. SCHREIBER**, “Structural, Optical, and Electronic Characterization of Perfluorinated Sexithiophene Films and Mixed Films with Sexithiophene,” *J. Mater. Res.* **32**, 1908–1920 (2017).
- A. YANG, A. CANELLAS, M. SATO, B. WANG, R.-B. WANG, H. KOIKE, I. SALZMANN, P. K. THAKUR, T.-L. LEE, L.-J. LIU, S. KERA, A. GERLACH, K. KANAI, J. FAN, F. SCHREIBER and S. DUHM**, “Nitrogen Substitution Impacts Organic–Metal Interface Energetics,” *Phys. Rev. B* **94**, 155426 (9 pages) (2016).

B-3) 総説, 著書

- J. P. YANG, F. BUSSOLOTTI, S. KERA and N. UENO**, “Origin and Role of Gap States in Organic Semiconductor: As the Nature of Organic Molecular Crystals,” *J. Phys. D: Appl. Phys. (Topical Review)* **50**, 423002 (45 pages) (2017).

B-4) 招待講演

S. KERA, “Tracking a transport charge in organic semiconductor material,” The 9th International Conference of Electronic Structure and Processes at Molecular-Based Interfaces (ESPMI-9), NUS, Singapore, November 2017.

S. KERA, “Tracking charge transport of organic semiconductor material by electronic structure measurement,” International Conference of Nano and Giga Challenges in Electronics, Photonics and Renewable Energy, Tomsk (Russia), September 2017.

S. KERA, “Spectroscopic evidence on quasiparticle state of organic semiconductor materials,” 2017 Korea-Japan Molecular Science Symposium—Frontiers in Molecular Science: Structure, Dynamics, and Function of Molecules and Complexes—, Busan (Korea) July 2017.

S. KERA, “Tracking charge transport in rubrene single crystal,” Workshop on Organic Semiconductors: Charge transport, Doping and Electronic states, Chiba (Japan), January 2017.

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

The 9th International Conference of Electronic Structure and Processes at Molecular-Based Interfaces, Advisory Panel (Singapore 2017).

The 16th Japan-Korea Molecular Science Symposium, Co-Chair (Busan, Korea 2017).

第 31 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 (2017).

第 78 回応用物理学会秋季学術講演会プログラム編成委員 (2017).

第 64 回応用物理学会春季学術講演会プログラム編成委員 (2017).

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

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

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

C) 研究活動の課題と展望

これまで積み重ねてきた大型の機能性分子の高配向薄膜試料を作製するノウハウを活用し、その電子状態を高分解能(高感度)光電子分光法により測定することで、分子材料中の「電子の真の姿を見出すこと」を主眼として進めている。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を用いた実験を開始している。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。同時にUVSOR 放射光施設のピームタイムの申請に努め、一個人ユーザーとして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実施すると共に、国内の当該コミュニティの基盤強化を推進するためのユーザー支援に注力している。XSW 法、飛行時間型角度分解光電子分光、高運動量分解・エネルギー分解光電子顕微鏡(k -PEEM)など、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、欧米からの遅れを取り戻すべく、 k -PEEM 法をベースとし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。関連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ことが不可欠である。

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：ビーム物理学，加速器科学，放射光科学

A-2) 研究課題：

- a) シンクロトロン光源の研究
- b) 自由電子レーザーの研究
- c) 相対論的電子ビームからの電磁放射の研究
- 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。電子ビーム光学系の最適化による電子ビーム輝度の大幅な向上，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。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・真空紫外領域での物質系と光渦の相互作用に関する基礎研究を進めている。
- 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継続している。パルス幅数ピコ秒以下の超短ガンマ線パルスの生成，エネルギー可変性の実証に成功した。光陰極を用いた電子源の開発を進めている。また，これら偏極量子ビームの応用研究の開拓を進めている。

B-1) 学術論文

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, M. FUJIMOTO, T. KONOMI, M. KATOH, H. IWAYAMA and E. SHIGEMASA,
“Limitations in Photoionization of Helium by an Extreme Ultraviolet Optical Vortex,” *Phys. Rev. A* **95**, 023413 (7 pages)
(2017).

M. KATOH, M. FUJIMOTO, H. KAWAGUCHI, K. TSUCHIYA, K. OHMI, T. KANEYASU, Y. TAIRA, M. HOSAKA, A. MOCHIIHASHI and Y. TAKASHIMA, “Angular Momentum of Twisted Radiation from an Electron in Spiral Motion,” *Phys. Rev. Lett.* **118**, 094801 (5 pages) (2017).

Y. TAIRA, T. HAYAKAWA and M. KATOH, “Gamma-Ray Vortices from Nonlinear Inverse Thomson Scattering of Circularly Polarized Light,” *Sci. Rep.* **7**, 5018 (9 pages) (2017).

M. KATOH, M. FUJIMOTO, N. S. MIRIAN, T. KONOMI, Y. TAIRA, T. KANEYASU, M. HOSAKA, N. YAMAMOTO, A. MOCHIIHASHI, Y. TAKASHIMA, K. KURODA, A. MIYAMOTO, K. MIYAMOTO and S. SASAKI, “Helical Phase Structure of Radiation from an Electron in Circular Motion,” *Sci. Rep.* **7**, 6130 (8 pages) (2017).

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA, M. HOSAKA, E. SHIGEMASA and M. KATOH, “Observation of an Optical Vortex Beam from a Helical Undulator in the XUV Region,” *J. Synchrotron Radiat.* **24**, 934–938 (2017).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

N. YAMAMOTO, T. MIYAUCHI, A. MANO, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA and M. KATOH, “Electron Beam Generation From InGaN/GaN Superlattice Photocathode,” *Proc. 8th Internat. Particle Accel. Conf.*, 522–524 (2017).

A. MOCHIIHASHI, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, A. MANO, T. ISHIDA, H. OHKUMA, S. SASAKI, Y. HORI, S. KODA and M. KATOH, “Present Status of Accelerators in Aichi Synchrotron Radiation Center,” *Proc. 8th Internat. Particle Accel. Conf.*, 2691–2693 (2017).

B-3) 総説, 著書

全 炳俊, 清 紀弘, 入澤明典, 加藤政博, 「電子加速器によるテラヘルツ波の発生」, *化学工業* **68(3)**, 12–17 (2017).

加藤政博, 「自由電子からの渦電磁波の放射」, *加速器* **14(3)**, 104–112 (2017).

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, 2014–2017).

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).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2015–2016).

日本学術振興会審査・評価部会委員 (2017).

高エネルギー加速器研究機構 ERL 計画推進委員会委員 (2009–).

高エネルギー加速器研究機構 ERL 計画評価専門委員会委員長 (2017).

高エネルギー加速器研究機構 Photon Factory Machine Advisory Committee 委員 (2017).

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 (2001–2002).

B-8) 大学での講義, 客員

奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科, 「物質科学特論 III」, 2017 年 10 月 25 日.

名古屋大学シンクロtron光研究センター, 客員教授, 2017 年 4 月–.

高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設, 客員教授, 2017 年 4 月–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「レーザーと電子ビームを用いたテラヘルツコヒーレント放射光の生成」, 加藤政博 (2005 年–2007 年).

科研費基盤研究(B), 「電子ビームのレーザー微細加工によるコヒーレント光発生」, 加藤政博 (2008 年–2010 年).

文部科学省光・量子科学研究拠点形成に向けた基盤技術開発プロジェクト 量子ビーム基盤技術開発プログラム, 高度化ビーム技術開発課題, 「リング型光源とレーザーを用いた光発生とその応用」, 加藤政博 (2008 年–2012 年).

科研費基盤研究(B), 「超狭帯域真空紫外コヒーレント放射光源の開発」, 加藤政博 (2011 年–2013 年).

科研費基盤研究(B), 「シンクロtron放射による真空紫外コヒーレント光渦ビームの発生」, 加藤政博 (2014 年–2016 年).

科研費基盤研究(A), 「渦放射光発生技術の高度化と利用への展開」, 加藤政博 (2017 年–).

C) 研究活動の課題と展望

UVSOR は2000年以降の高度化により、既に低エネルギーのシンクロtron光源としては世界的にも最高レベルの性能に到達した。この光源性能を 100% 引き出すための安定性の向上を目指し、パルス六極磁石による高度な入射方式の開発やビーム不安定性抑制法の開発を名古屋大学と協力し進めている。

自由電子レーザー及び外部レーザーを用いたコンプトン散乱ガンマ線の発生とその利用法の開拓に、名古屋大学、京都大学、量子技術研究開発機構、山形大学などと協力し取り組んでいる。特に来年度は自由電子レーザー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、核共鳴蛍光イメージング法の開発、光子光子相互作用に関する基礎物理学実験、陽電子消滅法による材料評価技術開発に注力する。

放射光による光渦の生成については、広島大学、名古屋大学などと協力し、その光学的特性の詳細評価、さらに放射光光渦同士との合成によるベクトルビーム発生の研究を世界に先駆けて進める。また、深紫外・真空紫外域の光渦ビームを用いた光渦と物質系の相互作用に関する実験研究を九州シンクロtron光センター、富山大学などと協力し進める。

スピン偏極電子源の開発に、名古屋大学、広島大学、高エネルギー加速器研究機構などと協力し、継続して取り組み、生体物質への照射効果の研究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 $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+\delta}$ (Bi2223) の電子状態を，UVSOR BL7U において角度分解光電子分光測定を行うことで明らかにした。装置の改良により角度分解能を向上させたことで，これまで報告されていなかった新しいエネルギーバンドが存在することを世界に先駆けて観測した。これは単位胞中に3つある CuO_2 面間の電子のホッピング移動による **triple-layer splitting** と考えられる。また観測される3つのエネルギーバンドが，それぞれ異なる超伝導ギャップの大きさを示していることも明らかになり，外側の2枚の CuO_2 面が超伝導転移温度に重要であることが示唆される結果となった。また UVSOR BL5U において，一軸圧を印可した状態での鉄系高温超伝導体 $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ の角度分解光電子分光測定を行い，近年新しく報告され注目を集めている C_4 相の温度領域においてのみ，電子状態が4回対称性を示すことを直接観測することに成功した。
- b) 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た BL5U 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。新しい機能として，これまでにないイメージスピン検出器を開発中である。昨年までにスピン分解検出をする二つのターゲット位置まで電子を導くことに成功していたが，電子軌道が対称的でないことが判明し，新しい電子レンズの開発とパラメーター調整を行っている。同時にターゲット材質の開発も行っており，高効率スピン分解角度分解光電子分光測定の実現を目指している。
- 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，これまで試料部において 4.6 K，参照用金部で 4 K という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の低温を実現していたが，さらに冷却部の材質の見直しや液体ヘリウムの排気系を見直すことで，試料部において 3.8 K，参照用金部で 3.2 K を達成した。また現在 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。そこで今回 BL5U で得たノウハウを応用し，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。2018年度初めにビームラインへ導入することを計画している。

B-1) 学術論文

M. MATSUNAMI, M. OURA, K. TAMASAKU, T. ISHUKAWA, S. IDETA, K. TANAKA, T. TAKEUCHI, T. YAMADA, A. P. TSAI, K. IMURA, K. DEGUCHI, N. K. SATO and T. ISHIMASA, “Direct Observation of Heterogeneous Valence State in Yb-Based Quasicrystalline Approximants,” *Phys. Rev. B* **96**, 241102(R) (4 pages) (2017).

- T. ITO, D. PINEK, T. FUJITA, M. NAKATAKE, S. IDETA, K. TANAKA and T. OIUSSE**, “Electronic Structure of Cr_2AlC as Observed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy,” *Phys. Rev. B* **96**, 195168 (9 pages) (2017).
- J. KISHI, Y. OHTSUBO, T. NAKAMURA, K. YAJI, A. HARASAWA, F. KOMORI, S. SHIN, JE. RAULT, P. LE. FEVRE, F. BERTRAN, A. TALEB-IBRAHIM, M. NURMAMAT, H. YAMANE, S. IDETA, K. TANAKA and S. KIMURA**, “Spin-Polarized Quasi-One-Dimensional State with Finite Band Gap on the Bi/InSb (001) Surface,” *Phys. Rev. Mater.* **1**, 064602 (5 pages) (2017).
- T. HIRAHARA, S. V. EREMEEV, T. SHIRASAWA, Y. OKUYAMA, T. KUBO, R. NAKANISHI, R. AKIYAMA, A. TAKAYAMA, T. HAJIRI, S. IDETA, M. MATSUNAMI, K. SUMIDA, K. MIYAMOTO, Y. TAKAGI, K. TANAKA, T. OKUDA, T. YOKOYAMA, S. KIMURA, S. HASEGAWA and E. V. CHULKOV**, “A Large-Gap Magnetic Topological Heterostructure Formed by Subsurface Incorporation of a Ferromagnetic Layer,” *Nano Lett.* **17**, 3493–3500 (2017).
- J. MIAO, X. H. NIU, D. F. XU, Q. YAO, Q. Y. CHEN, T. P. YING, S. Y. LI, Y. F. FANG, J. C. ZHANG, S. IDETA, K. TANAKA, B. P. XIE, D. L. FENG and F. CHEN**, “Electronic Structure of FeS ,” *Phys. Rev. B* **95**, 205127 (6 pages) (2017).
- Y. OKUYAMA, Y. SUGIYAMA, S. IDETA, K. TANAKA and T. HIRAHARA**, “Growth and Atomic Structure of Tellurium Thin Films Grown on Bi_2Te_3 ,” *Appl. Surf. Sci.* **398**, 125–129 (2017).
- L. LIU, K. OKAZAKI, T. YOSHIDA, H. SIZUKI, M. HORIO, L. C. C. AMBOLODE II, J. XU, S. IDETA, M. HASHIMOTO, D. H. LU, Z.-X. SHEN, Y. OTA, S. SHIN, M. NAKAJIMA, S. ISHIDA, K. KIHOU, C. H. LEE, A. IYO, H. EISAKI, T. MIKAMI, T. KAKESHITA, Y. YAMAKAWA, H. KOMTANI, S. UCHIDA and A. FUJIMORI**, “Unusual Nodal Behaviors of the Superconducting Gap in the Iron-Based Superconductor $\text{Ba}(\text{Fe}_{0.65}\text{Ru}_{0.35})_2\text{As}_2$: Effects of Spin–Orbit Coupling,” *Phys. Rev. B* **95**, 104504 (5 pages) (2017).
- Y. NAKAYAMA, Y. MIZUNO, M. HIKASA, M. YAMAMOTO, M. MATSUNAMI, S. IDETA, K. TANAKA, H. ISHII and N. UENO**, “Single-Crystal Pentacene Valence-Band Dispersion and Its Temperature Dependence,” *J. Phys. Chem. Lett.* **8**, 1259–1264 (2017).
- F. BUSSOLOTTI, J. YANG, T. YAMAGUCHI, K. YONEZAWA, K. SATO, M. MATSUNAMI, K. TANAKA, Y. NAKAYAMA, H. ISHII, N. UENO and S. KERA**, “Hole–Phonon Coupling Effect on the Band Dispersion of Organic Molecular Semiconductors,” *Nat. Commun.* **8**, 173 (7 pages) (2017).

B-4) 招待講演

田中清尚, 「UVSOR BL5UにおけるARPESと今後の展望」, PF研究会「次世代光源で拓かれる光電子分光研究の将来展望」, KEK つくばキャンパス, つくば, 2017年10月.

K. TANAKA, “Observation of triple-layer splitting in high- T_c cuprate $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+\delta}$ observed by ARPES at UVSOR,” Incheon national university, Incheon (Korea), November 2017.

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ユーザー利用を開始した。現在, 高分解能を利用した角度分解光電子分光実験を行っており, 成果が出始めている。今後は新しい高効率スピ分解測定手法の開発も同時に進めていきたい。

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～2017 年 9 月 30 日）*¹⁾

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、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。真空紫外領域に於いて、二台のアンジュレータから放射された光ビーム同士の干渉を観測する実験を行い、理論計算とよく一致する結果が得られた。引き続き、光渦と原子の相互作用を直接観測する手法の開発を進めている。
- 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。一昨年度から運用を開始した SACLA の BL1 において、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。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。メチル基を含む小さな分子に関して、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状態が、高効率な結合組み換え反応を引き起こし、 H_3^+ イオンをサイト選択的に生成することが明らかになった。

B-1) 学術論文

J. R. HARRIES, C. OHAE, S. KUMA, K. NAKAJIMA, T. TOGASHI, Y. MIYAMOTO, N. SASAO, H. IWAYAMA, M. NAGASONO, M. YABASHI and E. SHIGEMASA, “Single-Atom Response of Helium Atoms to Pulses from an EUV Free Electron Laser: Implications for the Subsequent Development of Superfluorescence,” *Phys. Rev. A* **94**, 063416 (9 pages) (2016).

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, M. FUJIMOTO, T. KONOMI, M. KATOH, H. IWAYAMA and E. SHIGEMASA, “Limitations in Photoionization of Helium by an Extreme Ultraviolet Optical Vortex,” *Phys. Rev. A* **95**, 023413 (7 pages) (2017).

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA, M. HOSAKA, E. SHIGEMASA and M. KATOH, “Observation of an Optical Vortex Beam from a Helical Undulator in the XUV Region,” *J. Synchrotron Radiat.* **24**, 934–938 (2017).

H. IWAYAMA, C. LÉONARD, F. LE QUÉRÉ, S. CARNIATO, R. GUILLEMIN, M. SIMON, M. N. PIANCASTELLI and E. SHIGEMASA, “Different Time Scales in the Dissociation Dynamics of Core-Excited CF₄ by Two Internal Clocks,” *Phys. Rev. Lett.* **119**, 203203 (5 pages) (2017).

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, 2015–2017).

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–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).

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).

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 (2001–2017).

日本放射光学会学会誌編集委員 (2005–2006).

日本放射光学会学会誌編集委員 (2010–2012). (岩山洋士)

B-8) 大学での講義, 客員

名古屋大学小型シンクロトン光研究センター, 客員准教授, 2007年9月–2017年3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

繁政の退職に伴い, 専用ビームライン BL6U での原子分子関係の協力研究や国際共同研究は実施が不可能となった。グループが所有する実験装置については, 引き続き利用可能なので, 共同研究者の方々には, 軟X線が供給可能な施設ビームラインにおいて実験研究を継続していただければ幸いである。アンジュレータやFELを利用することが前提となる難易度の高い実験研究については, 他施設を利用しながら継続することになろう。

*) 2017年9月30日退職

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等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。2017年は、特に、世界初の完全大気圧（1気圧）下での光電子分光測定に成功した。
- b) シンクロトロン放射光とX線自由電子レーザーを用い、光触媒材料の光励起過程での電子状態・幾何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、サブナノ～サブピコ秒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、磁性合金等の硬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

L. YU, Y. TAKAGI, T. NAKAMURA, O. SEKIZAWA, T. SAKATA, T. URUGA, M. TADA, Y. IWASAWA, G. SAMJESKÉ and T. YOKOYAMA, “Non-Contact Electric Potential Measurements of Electrode Components in Operating Polymer Electrolyte Fuel Cell by Near Ambient Pressure XPS,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 30798–30803 (2017). DOI: 10.1039/c7cp05436j

A. KOIDE and T. YOKOYAMA, “Effects of the Spin–Orbit Interaction in Chromium on the Oxygen K-Edge X-Ray Magnetic Circular Dichroism Spectra in CrO₂,” *Phys. Rev. B* **96**, 144419 (9 pages) (2017). DOI: 10.1103/PhysRevB.96.144419

Y. TAKAHASHI, T. MIYAMACHI, S. NAKASHIMA, N. KAWAMURA, Y. TAKAGI, M. UOZUMI, V. ANTONOV, T. YOKOYAMA, A. ERNST and F. KOMORI, “Thickness-Dependent Electronic and Magnetic Properties of γ -Fe₄N Atomic Layers on Cu(001),” *Phys. Rev. B* **95**, 224417 (8 pages) (2017). DOI: 10.1103/PhysRevB.95.224417

Y. UEMURA, D. KIDO, A. KOIDE, Y. WAKISAKA, Y. NIWA, S. NOZAWA, K. ICHIYANAGI, R. FUKAYA, S. ADACHI, T. KATAYAMA, T. TOGASHI, S. OWADA, M. YABASHI, K. HATADA, A. IWASE, A. KUDO, S. TAKAKUSAGI, T. YOKOYAMA and K. ASAKURA, “Capturing Local Structure Modulations of Photoexcited BiVO₄ by Ultrafast Transient XAFS,” *Chem. Commun.* **53**, 7314–7317 (2017). DOI: 10.1039/c7cc02201h

Y. TAKAGI, T. NAKAMURA, L. YU, S. CHAVEANGHONG, O. SEKIZAWA, T. SAKATA, T. URUGA, M. TADA, Y. IWASAWA and T. YOKOYAMA, “X-Ray Photoelectron Spectroscopy under Real Ambient Pressure Conditions,” *Appl. Phys. Express* **10**, 076603 (4 pages) (2017). DOI: 10.7567/APEX.10.076603

T. HIRAHARA, S. V. EREMEEV, T. SHIRASAWA, Y. OKUYAMA, T. KUBO, R. NAKANISHI, R. AKIYAMA, A. TAKAYAMA, T. HAJIRI, S. IDETA, M. MATSUNAMI, K. SUMIDA, K. MIYAMOTO, Y. TAKAGI, K. TANAKA, T. OKUDA, T. YOKOYAMA, S. KIMURA, S. HASEGAWA and E. V. CHULKOV, “A Large-Gap Magnetic Topological Heterostructure Formed by Subsurface Incorporation of a Ferromagnetic Layer,” *Nano Lett.* **17**, 3493–3500 (2017). DOI: 10.1021/acs.nanolett.7b00560

S. YOSHIKAWA, E. MINAMITANI, S. VIJAYARAGHAVAN, P. MISHRA, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA, H. OBA, J. NITTA, K. SAKAMOTO, S. WATANABE, T. NAKAYAMA and T. UCHIHASHI, “Controlled Modification of Superconductivity in Epitaxial Atomic Layer-Organic Molecule,” *Nano Lett.* **17**, 2287–2293 (2017). DOI: 10.1021/acs.nanolett.6b05010

Y. TAKAGI, H. WANG, Y. UEMURA, T. NAKAMURA, L. -W. YU, O. SEKIZAWA, T. URUGA, M. TADA, G. SAMJESKÉ, Y. IWASAWA and T. YOKOYAMA, “In Situ Study of Oxidation States of Platinum Nanoparticles on a Polymer Electrolyte Fuel Cell Electrode by Near Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 6013–6021 (2017). DOI: 10.1039/c6cp06634h

Q. YUAN, S. TAKAKUSAGI, Y. WAKISAKA, Y. UEMURA, T. WADA, H. ARIGA and K. ASAKURA, “Polarization-Dependent Total Reflection Fluorescence X-Ray Absorption Fine Structure (PTRF-XAFS) Studies on the Structure of a Pt Monolayer on Au (111) Prepared by the Surface-Limited Redox Replacement Reaction,” *Chem. Lett.* **46**, 1250–1253 (2017). DOI: 10.1246/cl.170423

B-3) 総説、著書

横山利彦, 「XAFS の理論」, 「XAFS の基礎と応用」, 日本XAFS 研究会 (太田俊明・朝倉清高・阿部 仁・稲田康宏・横山利彦) 編, 講談社, 2 章 1,4,5 節, pp. 9–22, 56–69 (2017).

B-4) 招待講演

横山利彦, 「XAFS の発展と将来展望」, 日本XAFS 研究会夏の学校, 高島, 滋賀, 2017 年 8 月.

横山利彦, 「磁気円二色性の 30 年」, 日本物理学会 2017 年秋季大会企画シンポジウム, 盛岡, 2017 年 9 月.

横山利彦, 「X線分光の現況と展望」, 日本金属学会東北支部第 16 回研究発表大会, 仙台, 2017 年 11 月.

高木康多, 「雰囲気制御型硬X線光電子分光による固体高分子形燃料電池電極触媒の in situ 測定」, 第1回表界面計測技術研究会——電子と光子をプローブとした表界面計測——, 葉山, 神奈川, 2017 年 2 月.

高木康多, 「大気圧下で動作する光電子分光測定装置の開発」, PF 研究会「次世代光源で拓かれる光電子分光研究の将来展望」, つくば, 茨城, 2017 年 10 月.

Y. TAKAGI, “In-Situ Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopic Study of Electrodes of Polymer Electrolyte Fuel Cells,” International Symposium on Novel Energy Nanomaterials, Catalysts and Surfaces for Future Earth, The University of Electro-Communications, Tokyo (Japan), October 2017.

Y. UEMURA, “Structural dynamics of photocatalysts observed by ultrafast time resolved XAFS,” EMN Meeting On Ultrafast, Radisson Resort Orlando-Celebration, Orlando (U.S.A.), October 2017.

上村洋平, 「超高速時間分解 XAFS による不均一触媒のメカニズム」, 第9回日本放射光学会若手研究会, 東京, 2017年9月.

Y. UEMURA, “Femtoseconds transient XAFS,” XTRAM2017, the Ettore Majorana Foundation, Erice (Italy), July 2017.

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).

上村洋平, 第21回日本放射光学会奨励賞 (2017).

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, 2018–2019).

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).

日本 XAFS 研究会庶務幹事 (2018–). (上村洋平)

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 (1998–2017).

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

文部科学省科学技術・学術審議会基礎基盤研究部会研究基盤整備・高度化委員 (2017–).

文部科学省元素戦略と大型研究施設の連携に関するシンポジウム企画委員 (2017–).

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, 2015–2016).

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–).

名古屋工業大学人事部会外部委員 (2015).

広島大学放射光科学研究センター外部評価委員 (2017).

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 (2012–2021).

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実施機関」実施責任者 (2012–2021).

文部科学省ナノテクノロジー・ネットワーク「中部地区ナノテク総合支援」拠点長 (2007–2011).

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

名古屋大学大学院理学研究科, 客員教授, 2012年–.

名古屋工業大学, 博士論文審査委員, 2017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げられている。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改良により大気圧 100,000 Pa での光電子分光観測に世界で初めて成功した。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、これらの観測でも成果が挙げられた。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。2017年は可視光応答触媒BiVO₄のBi周辺励起電子状態・幾何構造解析に成果があった。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。Photon Factory Advanced Ringのシングルバンチ運転と高繰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できた。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。

2017年11月に高木康多助教が転出し、現在新たな助教を公募中であり、次年度以降の新たな研究課題を視野に入れている。

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

M. ASADA and T. NAKAMURA, “Magnetic Resonance Investigation for Possible Antiferromagnetic Subphase in (TMTTF)₂Br,” *Phys. Rev. B* **96**, 125120 (6 pages) (2017).

E. JIN, M. ASADA, Q. XU, S. DALAPATI, M. A. ADDICOAT, M. A. BRADY, H. XU, T. NAKAMURA, T. HEINE, Q. CHEN and D. JIANG, “Two-Dimensional sp² Carbon-Conjugated Covalent Organic Frameworks,” *Science* **357**, 673–676 (2017).

S. KITOU, T. FUJII, T. KAWAMOTO, N. KATAYAMA, S. MAKI, E. NISHIBORI, K. SUGIMOTO, M. TAKATA, T. NAKAMURA and H. SAWA, “Successive Dimensional Transition in (TMTTF)₂PF₆ Revealed by Synchrotron X-Ray Diffraction,” *Phys. Rev. Lett.* **119**, 065701 (5 pages) (2017).

B-4) 招待講演

T. NAKAMURA, “Investigation of Paramagnetic Condensed Materials and Functional Biological System,” The 5th Awaji International Workshop on Electron Spin Science & Technology: Biological and Materials Science Oriented Applications (AWEST2017), Awaji Yumebutai International Conference Center, Awaji (Japan), June 2017.

B-6) 受賞, 表彰

中村敏和, 日本物理学会第 22 回論文賞 (2017).

中村敏和, 科研費審査委員の表彰 (2015).

古川 貢, 電子スピンスイエンズ学会奨励賞 (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).

電子スピンスイエンズ学会担当理事 (2004–2005).

電子スピンスイエンズ学会運営理事 (2006–2011).

電子スピンスイエンズ学会副会長 (2014–2015).

電子スピンスイエンズ学会会長 (2016–2017).

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 回電子スピンスイエンズ学会年会 (名古屋), プログラム委員 (2010).

Asia Pacific EPR/ESR Symposium 2012, Oct. 11th–15th, 2012, Beijing, China, International Organizing Committee, 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 (2014).

The 22nd Meeting of the International Society of Magnetic Resonance (ISMAR 2021), Osaka, Japan, Executive Committee, 実行委員 (2017–).

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

電子スピンスサイエンス学会編集委員 (2003).

電子スピンスサイエンス学会編集委員長 (2004–2005).

電子スピンスサイエンス学会編集アドバイザー (2006–2013).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「機能物性科学」, 2017年 5月 9日–6月 20日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「先端磁気共鳴計測による電子対相関の解明」, 中村敏和 (2013年–2015年).

科研費挑戦的萌芽研究,「パルスESRによる距離計測技術を用いたプリオン凝集体構造の解明」, 中村敏和 (2012年–2013年).

科研費基盤研究(B),「低次元系の特異な電子相を利用したデバイス創製ならびにスピンドYNAMIX研究」, 中村敏和 (2008年–2011年).

科研費特定領域研究「100 テスラ領域の強磁場スピン科学」(公募研究),「シアノバクテリア由来光化学II 複合体の高磁場ESRによる研究」, 中村敏和 (2008年–2009年).

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) ショックレー・クエーサー限界に達する開放端電圧を示す有機太陽電池
- b) 有機太陽電池のキャリア飛程のインピーダンス分光による決定

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 超高速キャリア移動度有機半導体による有機太陽電池が，太陽電池の理論限界値（ショックレー・クエーサー（SQ）限界）に達する開放端電圧を示すことを見出した。これまでの有機太陽電池の開放端電圧は，すべて SQ 限界より 0.5 V 以上小さく，これは分子振動にエネルギーが散逸する無輻射再結合によるロスである。今回の有機半導体は長鎖アルキルを有し，ファスナー効果によって分子振動が抑制されて高速移動度を示す。そのため，分子振動による無輻射再結合も抑制されていると考えている。これは，有機太陽電池の開放端電圧を増大させる指針となる成果である。
- b) 有機太陽電池の光キャリア発生層である，フラレーン（C₆₀）とフタロシアニン（H₂Pc）の共蒸着膜のキャリア移動度，寿命，飛程を，ホールオンリー，電子オンリーデバイスを用いてインピーダンス分光で評価した。飛程は両者の混合比に対して一定で，キャリアがトラップへの捕獲と脱出を繰り返しながら移動する Multiple Trapping Model で説明できた。また，ホールと電子の飛程は，0.34，9.4 μm で，典型的な有機太陽電池の膜厚約 0.1 μm よりもはるかに長く，再結合が無い条件下では各電極まで十分にキャリアを取り出せることが分かった。逆に言えば，有機太陽電池の性能向上にはキャリア再結合の抑止が不可欠である。

B-1) 学術論文

M. KIKUCHI, K. TAKAGI, H. NAITO and M. HIRAMOTO, “Single Crystal Organic Photovoltaic Cells Using Lateral Electron Transport,” *Org. Electron.* **41**, 118–121 (2017).

C. OHASHI, S. IZAWA, Y. SHINMURA, M. KIKUCHI, S. WATASE, M. IZAKI, H. NAITO and M. HIRAMOTO, “Hall Effect in Bulk-Doped Organic Single Crystal,” *Adv. Mater.* **29**, 1605619 (6 pages) (2017).

N. SHINTAKU, S. IZAWA, K. TAKAGI, H. NAITO and M. HIRAMOTO, “Hole- and Electron-Only Transport in Ratio-Controlled Organic Co-Deposited Films Observed by Impedance Spectroscopy,” *Org. Electron.* **50**, 515–520 (2017).

B-3) 総説，著書

M. HIRAMOTO, “Organic Solar Cells,” in *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials (2nd Edition)*, S. Kasap, P. Capper, Eds., Springer International Publishing AG; Switzerland, Part E Novel Materials and Selected Applications, Chapter E. 54, pp. 1239–1338 (2017).

M. HIRAMOTO, “Effects of Impurity Doping at ppm Level in Photovoltaic Organic Semiconductors,” in *Organic Solar Cells: Advances in Research and Applications*, M. Voronov, Ed., NOVA Science Publishers, Inc.; New York, Chap. 1, pp. 1–50 (2017).

M. HIRAMOTO, “Energetic and Nanostructural Design of Small-Molecular-Type Organic Solar Cells,” in *Advances in Chemical Physics*, S. A. Rice, A. R. Dinner, Eds., John Wiley & Sons. Inc., Vol. 162, pp. 137–204 (2017).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

M. HIRAMOTO, “Band Gap Science for Organic Solar Cells,” 16th World Nano Conference, Milan (Italy), June 2017.*
(Keynote Speaker)

M. HIRAMOTO, “Effects of Impurity Doping at ppm Level in Photovoltaic Organic Semiconductors,” EMN Bali Meeting 2017, Energy Materials Nanotechnology, Bali (Indonesia), June 2017.

M. HIRAMOTO, “pn-Control of Organic Semiconductors and Application to Organic Solar Cells,” BIT’s 7th Annual World Congress of Nano Science & Technology-2017 “Welcome to a New Era of Nano-Level,” Session 402: Metals, Semiconductors, and Junction Device, Fukuoka (Japan), October 2017.

M. HIRAMOTO, “Hall effect in Bulk-Doped Organic Single Crystals,” 9th Electronic Structure and Processes at Molecular-Based Interfaces (ESPMI 2017), National University of Singapore, Singapore, November 2017.

M. HIRAMOTO, “Effects of Impurity Doping at ppm Level in Photovoltaic Organic Semiconductors,” The 27th International Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC-27), Area 4, 4ThO3.1, Organic and Dye-sensitized Solar Cells, Otsu (Japan), November 2017.

平本昌宏, 「有機半導体のpn制御と太陽電池への応用」, 電子情報通信学会 OME 報告会有機エレクトロニクス, 日間賀島アイランドホテル, 南知多, 2017年1月.

平本昌宏, 「有機半導体におけるドーピングによるpn制御と太陽電池応用」, 日本学術振興会情報科学用有機材料第142委員会C部会(有機光エレクトロニクス)第74回合同研究会, 東京理科大, 東京, 2017年3月.

伊澤誠一郎, 「有機半導体薄膜中のナノ構造制御と有機太陽電池への応用」, SPring-8次世代先端デバイス研究会, 東京, 2017年3月.

B-6) 受賞, 表彰

平本昌宏, 応用物理学会第11回フェロー表彰(2017).

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) “Organic Semiconductor Materials and Devices,” 31 May–4 June 2010, Takamatsu Kagawa, Japan, Programm Committee Member of the Session (2010).

The 40th International Symposium on Compound Semiconductors (ISCS 2013), “Organic Semiconductors and Flexible Materials,” Kobe Convention Center, Kobe, Japan, May 19–23, Program Committee Member (2013).

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

27th International Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC-27), Shiga, Japan, 12–17 Nov., Area: Organic and Dye-sensitized Solar Cells, Area Chair (2017).

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 (2017–2018). (伊澤誠一郎)

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術交流財団(財)「有機半導体の基礎科学と有機太陽電池への応用に関する研究会」座長 (2009–2011).

京都大学化学研究所全国共同利用・共同研究拠点連携基盤専門小委員会委員 (2011–2012).

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).

NEDO (新エネルギー・産業技術総合開発機構)「高性能・高信頼性太陽光発電の発電コスト低減技術開発」中間評価分科会分科会長代理 (2017.8–).

学会誌編集委員

Japanese Journal of Applied Physics (JJAP) 誌編集委員 (2001–2002, 2004–2007).

Japanese Journal of Applied Physics (JJAP) 誌ゲストエディター (2005).

競争的資金等の領域長等

東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究「有機半導体デバイスの基礎と応用」研究代表者 (2003–2005).

さががけ「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

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(平成 28 年度), 大阪大学中之島センター, 「有機太陽電池(I)(II)」, 2017 年 1 月 10 日.

名古屋大学大学院理学研究科, グリーン自然科学国際教育研究プログラム(リーディングプログラム)集中講義「自然科学連携講義1」, 「太陽電池, 有機半導体, 有機エレクトロニクス」, 2017 年 12 月 5 日, 12 日.

B-9) 学位授与

大橋知佳, 「Effects of Impurity Doping at ppm Level in Organic Semiconductors」, 2017 年 3 月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C)(2), 「高効率有機3層接合型固体太陽電池の開発」, 平本昌宏(2006 年–2007 年).

科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).

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–2009 年).

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–2009 年).

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).

科研費基盤研究(B) (一般), 「有機単結晶エレクトロニクス」, 平本昌宏(2017 年–2020 年).

科研費挑戦的研究(萌芽), 「超バルクヘテロ接合有機太陽電池の開発」, 平本昌宏(2017 年–2019 年).

科研費研究活動スタート支援, 「混合膜中の界面構造制御による有機薄膜太陽電池の高効率化」, 伊澤誠一郎(2016 年–2017 年).

C) 研究活動の課題と展望

科研費「有機単結晶エレクトロニクス」(代表: 平本)の遂行のために, 研究員1名(菊地)を雇用している。昨年度開発した有機単結晶ドーピング技術を突破口として, 有機単結晶エレクトロニクス分野を開拓する。昨年度着任した伊澤助教は, 有機太陽電池の開放端電圧の決定要因に関する研究を強力に推進し, 成果をあげつつある。2週に1度, 1日かけて研究報告とディスカッションを強力に行っている。

また, 博士課程学生2名(大橋(D3)2017.3卒業, 新宅(D3), および, 国際インターンシップ生, インドバナラシヒンドゥ大 Nitish Rai (M1, 2017.5–2017.8), タイ国チュラロンコン大 Sureerat Makmuang (M2, 2017.11–2018.4) が在籍している。海外の学生の確保が軌道に乗りつつある。

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) 固体 NMR による糖鎖脂質含有二重膜上で誘起されるアミロイド β 会合状態の構造解析
- b) 固体 NMR による人工らせん高分子-らせんペプチド複合体の構造解析
- c) 生体分子構造解析のための新規固体 NMR 分極移動法の開発

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 ($A\beta$) 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。近年，この線維化が神経細胞膜上で促進されると考えられている。本研究では，モデル膜として糖鎖 GM1 を含有した脂質二重膜存在下で形成される $A\beta$ 会合中間体の構造解析により，脂質膜上で誘起されるアミロイド線維形成機構を解明することを目的として，加藤（晃）教授グループと共同で研究を行っている。既報（*PLoS One* 2016）の中性脂質二重膜試料と比べ，GM1 は極性頭部の体積が大きいため GM1 含有脂質二重膜試料では有効 $A\beta$ 濃度が低下する。さらに脂質膜が不均一な為試料調製も難しく，固体 NMR 測定感度は大幅に低下した。本年は試料調製法，および測定法の大幅な改良を行い，GM1 含有脂質二重膜試料で中性脂質二重膜試料に近いスペクトル感度の達成に成功した。数々の実験検討の結果，観測信号の帰属に成功した。暫定的な二次構造解析から，中性脂質膜試料に比べ，C 末端側で少し長いシート構造を取り会合状態を形成していることが判明しつあり，他実験により検証中である。
- b) 立体構造が制御された合成高分子であるシンジオタクチックポリメタクリル酸メチル (st-PMMA) は，トルエン溶液を高温加熱後に室温へ冷却することにより，らせん構造を形成し，溶媒分子を取り込みゲル化する。名古屋大学の八島教授のグループでは，同スキームにおいて C_{60} を共溶解することにより， C_{60} を包摂したらせん構造を有する st-PMMA の調製に成功している。我々は，約3年間同グループと共同研究を行っており，本研究では， C_{60} をキャリアーとして用い，st-PMMA のらせん内部空孔へのらせんペプチド鎖の包摂を試みた。異なる条件で調製された複数試料について 1H - ^{13}C 異種核 2D 相関固体 NMR 測定法などを用いた解析により，らせん複合体形成の正否について検証を行ってきた。その結果，完成されたスキームにより調製された試料で，st-PMMA のメチレン，メトキシ基由来の 1H 信号と C_{60} 由来の ^{13}C 信号の間で 4 Å を上限とする分子間相関信号の観測に成功した。st-PMMA らせん構造では，メチル基は外側に存在するのに対し，メチレン，メトキシ基は内側に存在する。以上のことから，固体 NMR の解析により C_{60} ペプチド誘導体が st-PMMA らせん構造内部に包摂された分子複合体を形成の検証に成功した。これ以外に，所外の3研究グループと，合成高分子や生体関連分子などの構造解析に関して共同研究を継続中である。
- c) タンパク質などの生体分子の固体 NMR を用いた構造解析で主鎖信号の帰属に用いる ^{13}C - ^{15}N 異種核相関 NMR では，double cross polarization (DCP) と呼ばれる磁気双極子相互作用に基づく分極移動法，およびその派生法が広く用いられているが，各手法には一長一短がある。本研究では，既存の DCP 法の改良から開始し，実験変数に対する十分なエラー補償能を有し，比較的簡便なセットアップで実施可能な新規測定法の開発を試みた。複数の実験条件に対する既存測定法の解析から，実験に大きな影響を与える因子を同定し，現在測定法の改良途中である。

B-1) 学術論文

N. OUSAKA, F. MAMIYA, Y. IWATA, K. NISHIMURA and E. YASHIMA, ““Helix-in-Helix” Superstructure Formation through Encapsulation of Fullerene-Bound Helical Peptides within a Helical Poly (methyl methacrylate) Cavity,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **56**, 791–795 (2017).

B-3) 総説, 著書

K. NISHIMURA, M. TANIO and S. TUZI, “Structure and Dynamics of Membrane-Bound Proteins,” in *Modern Magnetic Resonance*, Springer International Publishing AG (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

日本生物物理学学会欧文誌 *Biophysics*, Advisory board (2005–2009).

Global Journal of Biochemistry, Editorial Board (2010–2013).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学統合生命科学教育プログラム, 「機能生体分子科学」, 2017 年 1 月 10 日, 17 日.

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面タンパク質脂質結合機構の解明」, 西村勝之 (2010 年–2012 年).

科研費萌芽研究, 「試料状態変調型固体 NMR プローブ開発とその適用」, 西村勝之 (2008 年–2009 年).

C) 研究活動の課題と展望

現在一人で研究を行っている。生体分子を対象とした固体NMRの構造解析では、その完結に年単位の時間が必要になる。このため、研究のスループットを向上させるためには、複数の試料を平行して測定、解析する必要がある。現在解析している生体分子試料は、所内外の共同研究者に調製を依頼しているが、このアプローチには限界があり、試料調製スタッフの確保が急務であると感じている。また、分子材料の解析、測定法開発などの研究の割合を上げ、研究の速度を改善するため、以前のような3人体制を再構築したいと考えている。

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) コリネバクテリア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
- b) 細胞内の遷移金属イオン濃度恒常性維持に関与するタンパク質の構造機能相関解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 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。HtaA はリンカーでつながれた N 末端ドメイン (HtaA-N) と C 末端ドメイン (HtaA-C) から、HtaB は 1 つのドメインから構成されている。HtaA-N, HtaA-C, HtaB は、いずれもホロ型 (ヘム結合型) として単離精製された。本年度の研究で決定した HtaA-C および HtaB の全体構造は、以前に構造決定した HtaA-N と高い相同性を示した。いずれの構造においても、Tyr が第 5 配位子としてヘム鉄に配位しており、Tyr は近傍の His と水素結合を形成していた。また、HtaA-N で観測されていた、ヘムプロピオン酸と Ser 間での水素結合、Phe とヘムピロール環の間の π - π スタッキングも、HtaA-N, HtaA-C, HtaB すべてで保存されており、これらの相互作用が、ヘム認識に重要な役割を果たしていることを示唆している。HtaA-N, HtaA-C, HtaB の全体構造が高い相同性を示す一方、結合するヘムの配向やヘム結合部位周辺のループの長さには、違いが見られた。黄色ブドウ球菌のヘム取り込み系では、ヘム結合部位周辺のループがヘム結合タンパク質間の特異的な認識に寄与することが報告されており、HtaA/HtaB においてもループの長さの違いがヘムの輸送に関わっている可能性が考えられる。ヘム獲得・輸送反応において、ヘム軸配位子である Tyr と近傍の His 間での水素結合が果たす役割を明らかにするため、His を Ala に置換した HtaA-N, HtaA-C, HtaB の変異型タンパク質を調製した。いずれの変異体も、アポ型として単離精製されたことから、これら変異体ではヘムへの結合親和性が低下していることが分かった。これら変異体の結晶化条件のスクリーニングを行った結果、HtaA-C の H434A 変異体の結晶が得られ、その結晶構造を決定した。HtaA-C の H434A 変異体の結晶構造では、非対称単位中の 2 分子が N 末端の β -strand のドメインスワップによって二量体を形成していた。この二量体構造では、ヘムの軸配位子となる Tyr が隣り合う分子のヘム結合領域に入り込んでいることが分かった。現在、HtaA/HtaB 間でのヘム輸送反応において、タンパク質がダイナミックに構造変化 (ドメインスワッピングが起こる) することにより、ホロ型 HtaA とアポ型 HtaB 間で同様な二量体構造を過渡的に形成し、ヘム輸送反応が進行するという作業仮説を立て、検証を進めている。
- b) 新生児の細菌性髄膜炎や敗血症の原因菌である連鎖球菌 *Streptococcus agalactiae* は、ヘム生合成のための酵素系を有しておらず、宿主から獲得したヘムを利用して生育する。宿主から獲得したヘムは、ヘムトランスポーターにより細胞内に取り込まれるが、フリーなヘム分子による細胞毒性を回避するために、細胞内ヘム濃度は厳密に制御される必要がある。*S. agalactiae* は、細胞内の過剰なヘム分子を感知し、それらを細胞外へ排出するヘムエクスポーター

を発現することにより、ヘムの細胞毒性を回避している。本研究では、このヘム分子感知に関与しているセンサータンパク質 PefR の構造機能相関解明を目的とした。本年度は、PefR の発現・精製系を構築し、PefR の結晶構造解明を試みた。その結果、X線結晶構造解析に適したアポ型 PefR の結晶を得ることができ、2.6Å 分解能で構造解析に成功した。PefR は、MarR ファミリーに属する転写調節因子と相同なホモ二量対構造を有しており、それぞれのサブユニットの N 末は、winged HTH (helix-turn-helix) を DNA 結合モチーフとする DNA 結合ドメインを構成していた。in vitro DNA 結合アッセイの結果、アポ型 PefR が標的 DNA に対する結合能を有しているのに対して、ヘムを結合したホロ型 PefR では、DNA 結合能が失われていることが分かった。これらの結果より、アポ型 PefR は、ヘムエクスポーター遺伝子上流に結合することにより、ヘムエクスポーターの発現を抑制していると考えられる。また、細胞内のフリーなヘム分子が PefR に結合することによりホロ型 PefR が生成すると、標的 DNA から PefR が解離することにより、ヘムエクスポーターの発現が誘導され、その結果、過剰なヘムが細胞内から細胞外へと輸送されることで、細胞内ヘム濃度を制御していると考えられる。

B-1) 学術論文

A. PAVLOU, A. LOULLIS, H. YOSHIMURA, S. AONO and E. PINAKOULAKI, “Probing the Role of the Heme Distal and Proximal Environment in Ligand Dynamics in the Signal Transducer Protein HemAT by Time-Resolved Step-Scan FTIR and Resonance Raman Spectroscopy,” *Biochemistry* **56**, 5309–5317 (2017).

B-3) 総説、著書

青野重利,「フロンティア生物無機化学」, 錯体化学会フロンティア選書, 三共出版, 430–456 (2016).

B-4) 招待講演

S. AONO, “Structural characterization of heme uptake system in Corynebacteria,” 231st The Electrochemical Society Meeting, New Orleans (U.S.A.), May 2017.

青野重利,「遷移金属が関与するシグナルセンシングとシグナル伝達」, 第 44 回生体分子科学討論会, 秋田, 2017 年 6 月.

青野重利,「Structural basis for the heme-dependent transcriptional regulation」, 第 55 回日本生物物理学会年会, 熊本, 2017 年 9 月.

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 (2016–2017).

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).

大阪大学蛋白質研究所専門委員会委員長 (2017).

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–).

その他

総合研究大学院大学物理科学研究科構造分子科学専攻長 (2016–).

B-10) 競争的資金

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).

科研費若手研究(B), 「ビタミン B12 を感光色素とする新規光センサーの構造機能研究」, 村木則文 (2014年–2016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).

科研費若手研究(B), 「過渡的複合体に着目したヘムリレー輸送の分子機構の解明」, 村木則文 (2017年–2018年).

科研費基盤研究(B), 「新規な遷移金属含有型センサータンパク質の構造機能相関解明」, 青野重利 (2017年–2020年).

C) 研究活動の課題と展望

生物は、様々な外部環境の変化に応答・対応しながら、生体内の恒常性を維持している。我々の研究グループでは、生物にとって最も重要な遷移金属イオンである鉄イオンの細胞内恒常性維持に興味をもち、細胞内の鉄イオンの恒常性維持機構解明を目的とした研究に取り組んでいる。なかでも、鉄イオンを含む化合物であるヘム分子に着目し、細胞内ヘム濃度の恒常性維持に関与している転写調節因子やヘム分子取込み・排出に関与する一連のタンパク質の構造機能相関解明に関する研究に重点を置き、研究を進めている。本研究は、細胞中における遷移金属イオン濃度の恒常性維持機構の解明という、大きな研究目標への出発点ともいえる研究である。今後は、構造生物学的、ならびに生化学・分子生物学的な実験手法を活用し、ヘムを含む遷移金属イオンの細胞内濃度恒常性維持に関与するタンパク質群の構造機能相関解明を進めて行きたいと考えている。

加 藤 晃 一（教授）（2008 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：構造生物学，タンパク質科学，糖鎖生物学，NMR 分光学

A-2) 研究課題：

- a) NMR 分光法をはじめとする物理化学的手法による複合糖質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生命分子の構造機能解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 私たちは、糖鎖がタンパク質の細胞内における運命を決定する標識として機能していることを見出してきた。小胞体では、タンパク質に結合した *N* 型糖鎖の末端に付加されるわずかな 1 残基のグルコース残基の有無を目印として、タンパク質の品質（フォールディング状態）が見分けられている。2017 年度は、この品質管理システムにおいて、フォールディングセンサーとしての機能を果たしている酵素に着目して構造研究を行った。X 線結晶構造解析、X 線小角散乱法およびクライオ電子顕微鏡解析を組み合わせた構造解析により、本酵素は柔軟なモジュール構造をもつマルチドメインタンパク質であることが判った。さらに高速 AFM 解析により、センサー領域と触媒ドメインが柔軟なリンカーによって繋がれたダイナミックな分子構造動態を可視化することに成功した。以上の結果から、本酵素は可動性のマルチドメインを介して、多種多様な構造をもつ変性糖タンパク質を認識していることが推測された。一方、糖タンパク質である免疫グロブリン G（IgG）を対象とした構造解析にも取り組んだ。レプリカ交換分子動力学計算により抗体上の糖鎖の 3 次元構造ダイナミクスを解析し、糖鎖が抗体の機能部位の高次構造に及ぼす影響を定量的に評価した。また、中性子小角散乱法を用いて、受容体が結合した際の IgG の Fc 領域の構造変化を捉えることに成功した。さらに、血清中における IgG の NMR 解析を実施し、血清成分との相互作用を明らかにした。これにより、抗体が実際に機能する多成分系における NMR 解析の道筋をつけることができた。
- b) 細胞膜上の糖鎖は、均一に分散するのではなくクラスターを形成して集積化し、動的な分子認識場として機能している。こうした糖鎖の機能メカニズムの解明やその制御を行うためには、生体膜上に集積する糖鎖クラスターを模倣した化合物を合成することが不可欠である。私たちは、人工設計に基づく超分子と生命分子を融合した、サイボーグ分子の創生に取り組んでおり、今年度は、神経細胞の分化に関わる糖鎖をハイブリッドしたサイボーグ超分子を合成し、これを用いて細胞膜上糖鎖クラスターの高次機能発現メカニズムの構造基盤を解明した。NMR 分光法および動的光散乱法によって本超分子の溶液内挙動を観測したところ、この超分子はカルシウムイオン依存的な糖鎖間相互作用によって、水中でより大きな自己組織化クラスターを形成することが判明した。

B-1) 学術論文

T. SUZUKI, M. KAJINO, S. YANAKA, T. ZHU, H. YAGI, T. SATOH, T. YAMAGUCHI and K. KATO, “Conformational Analysis of a High-Mannose-Type Oligosaccharide Displaying Glucosyl Determinant Recognised by Molecular Chaperones Using NMR-Validated Molecular Dynamics Simulation,” *ChemBioChem* **18**, 396–410 (2017).

T. YOSHIMURA, A. HAYASHI, M. HANDA-NARUMI, H. YAGI, N. OHNO, T. KOIKE, Y. YAMAGUCHI, K. UCHIMURA, K. KADOMATSU, J. SEDZIK, K. KITAMURA, K. KATO, B. D. TRAPP, H. BABA and K. IKENAKA, “GlcNAc6ST-1 Regulates Sulfation of *N*-Glycans and Myelination in the Peripheral Nervous System,” *Sci. Rep.* **7**, 42257 (10 pages) (2017).

M. NAGAE, S. K. MISHRA, M. NEYAZAKI, R. OI, A. IKEDA, N. MATSUGAKI, S. AKASHI, H. MANYA, M. MIZUNO, H. YAGI, K. KATO, T. SENDA, T. ENDO, T. NOGI and Y. YAMAGUCHI, “3D Structural Analysis of Protein *O*-Mannosyl Kinase, POMK, a Causative Gene Product of Dystroglycanopathy,” *Genes Cells* **22**, 348–359 (2017).

S. SAWAGUCHI, S. VERSHNEY, M. OGAWA, Y. SAKAIDANI, H. YAGI, K. TAKESHITA, T. MUROHARA, K. KATO, S. SUNDARAM, P. STANLEY and T. OKAJIMA, “*O*-GlcNAc on NOTCH1 EGF Repeats Regulates Ligand-Induced Notch Signaling and Vascular Development in Mammals,” *eLife* **6**, e24419 (2017).

E. KURIMORO, T. SATOH, Y. ITO, E. ISHIHARA, K. OKAMOTO, M. YAGI-UTSUMI, K. TANAKA and K. KATO, “Crystal Structure of Human Proteasome Assembly Chaperone PAC4 Involved in Proteasome Formation,” *Protein Sci.* **26**, 1080–1085 (2017).

T. KATO, N. KAKO, K. KIKUTA, T. MIYAZAKI, S. KONDO, H. YAGI, K. KATO and E. Y. PARK, “*N*-Glycan Modification of a Recombinant Protein via Coexpression of Human Glycosyltransferases in Silkworm Pupae,” *Sci. Rep.* **7**, 1409 (10 pges) (2017).

G. YAN, T. YAMAGUCHI, T. SUZUKI, S. YANAKA, S. SATO, M. FUJITA and K. KATO, “Hyper-Assembly of Self-Assembled Glycoclusters Mediated by Specific Carbohydrate–Carbohydrate Interactions,” *Chem. –Asian J.* **12**, 968–972 (2017).

T. KATO, K. KIKUTA, A. KANEMATSU, S. KONDO, H. YAGI, K. KATO and E. Y. PARK, “Alteration of a Recombinant Protein *N*-Glycan Structure in Silkworms by Partial Suppression of *N*-Acetylglucosaminidase Gene Expression,” *Biotechnol. Lett.* **39**, 1299–1308 (2017).

H. YAGI, H. TATENO, K. HAYASHI, T. HAYASHI, K. TAKAHASHI, J. HIRABAYASHI, K. KATO and M. TSUBOI, “Lectin Microarray Analysis of Isolated Polysaccharides from *Sasa veitchii*,” *Biosci., Biotechnol., Biochem.* **81**, 1687–1689 (2017).

R. YOGO, S. YANAKA, H. YAGI, A. MARTEL, L. PORCAR, Y. UEKI, R. INOUE, N. SATO, M. SUGIYAMA and K. KATO, “Characterization of Conformational Deformation-Coupled Interaction between Immunoglobulin G1 Fc Glycoprotein and a Low-Affinity Fcγ Receptor by Deuteration-Assisted Small-Angle Neutron Scattering,” *Biochem. Biophys. Rep.* **12**, 1–4 (2017).

T. SATOH, C. SONG, T. ZHU, T. TOSHIMORI, K. MURATA, Y. HAYASHI, H. KAMIKUBO, T. UCHIHASHI and K. KATO, “Visualisation of a Flexible Modular Structure of the ER Folding-Sensor Enzyme UGGT,” *Sci. Rep.* **7**, 12142 (10 pages) (2017).

S. KITAZAWA, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and R. KITAHARA, “Interactions Controlling the Slow Dynamic Conformational Motions of Ubiquitin,” *Molecules* **22**, 1414 (12 pages) (2017).

S. YANAKA, T. YAMAZAKI, R. YOGO, M. NODA, S. UCHIYAMA, H. YAGI and K. KATO, “NMR Detection of Semi-Specific Antibody Interactions in Serum Environments,” *Molecules* **22**, 1619 (8 pages) (2017).

Y. SAKAE, T. SATOH, H. YAGI, S. YANAKA, T. YAMAGUCHI, Y. ISODA, S. IIDA, Y. OKAMOTO and K. KATO, “Conformational Effects of *N*-Glycan Core Fucosylation of Immunoglobulin G Fc Region on Its Interaction with Fcγ Receptor IIIa,” *Sci. Rep.* **7**, 13780 (10 pages) (2017).

T. TAKENAKA, T. NAKAMURA, S. YANAKA, M. YAGI-UTSUMI, M.S. CHANDAK, K. TAKAHASHI, S. PAUL, K. MAKABE, M. ARAI, K. KATO and K. KUWAJIMA, “Formation of the Chaperonin Complex Studied by 2D NMR Spectroscopy,” *PLoS One* **12**, e0187022 (15 pages) (2017).

T. KOZAI, T. SEKIGUCHI, T. SATOH, H. YAGI, K. KATO and T. UCHIHASHI, “Two-Step Process for Disassembly Mechanism of Proteasome $\alpha 7$ Homo-Tetradecamer by $\alpha 6$ Revealed by High-Speed Atomic Force Microscopy,” *Sci. Rep.* **7**, 15373 (9 pages) (2017).

B-3) 総説, 著書

Y. YAMAGUCHI, H. YAGI and K. KATO, “Stable Isotope Labeling of Glycoproteins for NMR Study,” in *NMR in Glycoscience and Glycotechnology*, K. Kato and T. Peters, Eds., RSC Publishing; Cambridge, 194–207 (2017).

M. YAGI-UTSUMI, T. YAMAGUCHI, Y. UEKUSA and K. KATO, “NMR Characterization of the Conformations, Dynamics, and Interactions of Glycosphingolipids,” in *NMR in Glycoscience and Glycotechnology*, K. Kato and T. Peters, Eds., RSC Publishing; Cambridge, 161–178 (2017).

H. YAGI and K. KATO, “Functional Roles of Glycoconjugates in the Maintenance of Stemness and Differentiation Process of Neural Stem Cells,” *Glycoconjugate J.* **34**, 757–763 (2017).

B-4) 招待講演

K. KATO, M. YAGI-UTSUMI, S. YANAKA, T. SUZUKI, H. YAGI, T. SATOH and T. YAMAGUCHI, “NMR views of functional roles of glycoconjugates of biological and pharmaceutical interest,” 7th Asia Pacific NMR Symposium & 23rd Annual Meeting of NMRS-India, Bangalore (India), February 2017.

K. KATO, “Structural glycobiology by stable isotope-assisted NMR spectroscopy,” Advances Isotopic Labeling Meeting for Integrated Structural Biology 2017, Grenoble (France), March 2017.

加藤晃一, 「タンパク質の運命決定と機能発現の分子構造ダイナミクス研究」, 細胞・システム作動機構の理解に向けた, 生体タンパク質分子の構造と機能のダイナミクス研究の拠点形成平成 28 年度末シンポジウム, 岡崎, 2017 年 3 月.

加藤晃一, 谷中冴子, 矢木宏和, 「バイオ医薬品への構造生物学的アプローチ」, 日本薬学会第 137 年会, 仙台, 2017 年 3 月.

K. KATO, “Structural insights into dynamic orchestration of biomolecular systems,” Frontier Bioorganization Forum 2017: Dynamical ordering and integrated functions of biomolecular systems, Taipei (Taiwan), April 2017.

M. YAGI-UTSUMI, A. SIKDAR, T. SATOH and K. KATO, “Versatile structural architectures of archaeal homolog of proteasome assembly chaperone,” Frontier Bioorganization Forum 2017: Dynamical ordering and integrated functions of biomolecular systems, Taipei (Taiwan), April 2017.

矢木-内海真穂, 「タンパク質の動的構造と分子集合メカニズムの理解を目指して」, 第 169 回薬学談話会, 名古屋, 2017 年 5 月.

加藤晃一, 「生体分子の集合離散が織りなす細胞機能研究の最前線」, 第 69 回日本細胞生物学会大会, 仙台, 2017 年 6 月.

加藤晃一, 「抗体と糖鎖の NMR」, NMR 共用プラットフォームシンポジウム——高磁場 NMR を核としたプラットフォームの新たな展開——, 横浜, 2017 年 8 月.

加藤晃一, 「プロテアソーム分子集合の構造生物学」, 大阪大学蛋白質研究所セミナー・SPRING-8 先端利用技術ワークショップ「SPRING-8 における蛋白質構造生物学研究の現状と将来」, 吹田, 2017 年 8 月.

K. KATO, “Structural basis of quality control and trafficking of glycoproteins,” 24th International Symposium on Glycoconjugates (GLYCO24), Jeju (Korea), August 2017.

加藤晃一, 「糖鎖の生命分子科学の探究」, 第 11 回分子科学討論会, 仙台, 2017 年 9 月.

加藤晃一, 「抗体を源流とする生命分子構造学の展開」, 静岡県立大学薬学部第 264 回月例薬学セミナー, 静岡, 2017 年 9 月.

S. YANAKA, “Integrative approach for exploration and creation of dynamical ordering of biomolecular systems,” 14th HORIZONS in Molecular Biology, Göttingen (Germany), September 2017.

K. KATO, “Structural views of fate determination of glycoproteins in cells,” Seminar at Max Planck Institute for Biophysical Chemistry, Göttingen (Germany), September 2017.

S. YANAKA, “Stable isotope labeling for NMR observation of antibody glycoproteins in serum environments,” Seminar at Max Planck Institute for Biophysical Chemistry, Göttingen (Germany), September 2017.

K. KATO, M. YAGI-UTSUMI, S. YANAKA, T. SUZUKI, H. YAGI, T. SATOH and T. YAMAGUCHI, “Structural mechanisms of carbohydrate functions,” 2017 Taiwan-Japan Biomedical Symposium on Magnetic Resonance, Tainan (Taiwan), October 2017.

K. KATO, “Dynamic ordering of biomolecular systems coupled with creation of integrated functions,” The NANOTEC-IMS Joint Research Meeting, Pathum (Thailand), October 2017.

K. KATO, “Dynamic ordering of biomolecular systems coupled with creation of integrated functions,” CU-IMS collaborative seminar, Bangkok (Thailand), October 2017.

K. KATO, “Isotope Labeling Approaches for Carbohydrates and Glycoproteins,” 第56回NMR討論会, 八王子, 2017年11月.

K. KATO, “Structural aspects of glycosylation as potential drug target,” The 19th Symposium on Advanced Concepts in New Drug Development :1st Ewha-NCU Joint Symposium, Seoul (Korea), November 2017.

加藤晃一, 「抗体への挑戦から始まった生命分子構造学の新展開」, 鹿児島大学理学部先端科学講演会平成 29 年度第3回生命化学セミナー, 鹿児島, 2017 年 12 月.

矢木真穂, 「糖脂質膜上におけるタンパク質のアミロイド線維形成」, 第2回秩序化分子ワークショップ, 奈良, 2017 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「若手のカフォーラム」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).

谷中冴子, The 5th International Symposium of “Dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions” Poster Presentation Award (2017).

柚木康弘, 第 81 回日本生化学会中部支部会奨励賞 (2017).

與語理那, 第 81 回日本生化学会中部支部会奨励賞 (2017).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本バイオイメーシング学会評議員 (1995–), 理事 (2012–2016).

日本生化学会評議員 (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 (2016–2017).

NPO バイオものづくり中部理事 (2008–2017).

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 回バイオイメーシング学会組織委員・大会長 (2016).

第 81 回日本生化学会中部支部例会・シンポジウム世話人代表 (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 (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 (2015–2016).
 公益財団法人水谷糖質科学振興財団選考委員 (2016–).
 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).
 公益財団法人薬学研究奨励財団選考委員 (2016–), 選考委員会幹事 (2017).
 公益財団法人農林水産・食品産業技術振興協会一次書面審査専門評価委員 (2016–).
 日本学術会議連携会員 (2017–).

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 (2014–2017).
Scientific Reports, Editorial board member (2015–).
International Journal of Molecular Sciences, Editorial board member (2017–).

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)
 広報誌 OKAZAKI 第 53 号「出前授業: 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, 2017 年 3 月.

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」, 2017 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」, 2017 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」, 2017年.

静岡県立大学薬学研究院, 非常勤講師, 第264回特別講義月例薬学セミナー, 2017年9月22日.

鹿児島大学大学院理工学研究科, 「大学院先端科学特別講義」, 2017年12月19日.

B-9) 学位授与

Arunima Sikdar, “Multiple structural architectures of archaeal homolog of proteasome-assembly chaperone,” 2017年3月, 博士(理学).

Gengwei Yan, “Characterization of the dynamic structures and interactions of Lewis X-carrying oligosaccharides and their cluster,” 2017年9月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

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関連の探査」, 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–2011年).

科研費研究活動スタート支援, 「アミロイド線維末端の特異構造の解明に基づく線維伸長メカニズムの理解」, 矢木真穂 (2011年–2013年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「分子シャペロン機能を有するシャトル型プロテアソーム活性化因子の同定と構造機能解析」, 加藤晃一 (2012年–2014年).

科研費基盤研究(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–2016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–2016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).

科研費若手研究(B),「アミロイド線維の伸長末端の3次元構造情報に基づく重合機構の理解および創薬展開」, 矢木真穂 (2017年-).

科研費新学術領域研究「動的構造生命科学を拓く新発想測定技術——タンパク質が動作する姿を活写する——」(公募研究),「抗体の分子認識を契機とする補体系の活性化を活写する」, 谷中冴子 (2017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 (2017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 (2017年).

太陽日酸(株),「タンパク質の安定同位体標識技術の開発」, 加藤晃一 (2017年).

C) 研究活動の課題と展望

2018年は、これまでに取り組んできた生命分子システムの動秩序形成の研究成果に基づき、その特質を持った分子システムを創成することを目指した研究を展開する。既に超分子化学者との共同研究を通じて、生命分子と人工超分子のハイブリッド化を通じた機能性サイボーグ超分子の設計・創生に取り組んでいるが、これをさらに発展して超分子化学と生命分子科学の融合研究と国際共同研究を推進していく。さらに、複雑な生命分子システムの中における各構成要素のダイナミックな振る舞いを探索するアプローチ法を開拓するとともに、多角的な機能解析を併せて実施し、外部環境の変動の中で秩序創発していくロバストな生命の本質を統合的に理解することを目指していきたい。

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
- c) 先端的生体 1 分子計測法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) キチナーゼは結晶性キチンを加水分解しながら直進運動するリニア分子モーターである。金ナノ粒子の修飾方法の改善と酵素への結合箇所の検討により一方向性の長い運動を観測する事に成功した。運動速度は蛍光標識したキチナーゼとほぼ同等であり，運動への金ナノプローブの影響はないと結論した。二次元ガウス関数フィットで求めた座標の軌跡をメディアンフィルター処理してノイズを除去し，運動ステップの検出を行った。これにより 1.1 nm の前進ステップ運動と 1.2 nm の後退ステップ運動を検出する事に成功した。1.1 nm の前進ステップ運動について，ステップ前の停止時間の分布を解析すると 2 つの時定数が得られた。重水環境中で同様の解析を行った結果，遅い反応の時定数は変化しなかったのに対し速い反応のそれは 3.8 倍遅くなり，大きな同位体効果が観測された。ステップ運動の間には加水分解と生成物解離，およびキチン分子鎖の 90° ツイストと結晶表面からの脱結晶化という 2 つの共同的な反応素過程が起これと考えられる。これらの素過程のうち，加水分解では水素，酸素原子間の結合の組み換えが起これるため，同位体効果が大きく出ると考えられる。よって，反応の律速段階はキチン分子鎖の 90° ツイストと結晶表面からの脱結晶化であると結論づけられた。また，後退ステップ運動と後退から復帰する前進ステップ運動の時定数はほぼ同じであった。即ち，2 つの状態の自由エネルギーはほぼ等しいと推測された。ドッキングモデルにより活性中心の結合エネルギーを推定すると，ステップ運動後のミカエリスコンプレックスの結合エネルギーが非常に高く，これにより脱結晶化した後のキチン分子鎖を安定化していると考えられた。
- b) 腸内連鎖球菌由来 V₁-ATPase (EhV₁) の回転運動を詳細に解析した結果，3 つの触媒部位に由来する 120° のステップが 40° と 80° のサブステップから構成されている事が明らかとなった。サブステップ前の持続時間の ATP と ADP への濃度依存性を調べた所，40° ステップは ATP 結合で起こることが明らかとなった。また，加水分解が遅くなる ATP γ S を基質に用い，加水分解は 40° ステップ前に起こることが明らかとなった。さらに，ATP γ S に ADP を混合すると，80° のバックステップをする事が明らかとなった。同様に，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た変異体を用いて ATP と ADP を混合して観測すると，80° のバックステップが観測された。80° バックステップ前の停止の持続時間は ADP 濃度に依存する事から，80° ステップは ADP の解離により起こると結論した。以上の解析により，EhV₁ の化学力学共役機構をほぼ完全に明らかにした。
- c) 金ナノ粒子をプローブに用いた生体 1 分子計測の位置決定精度，および時間分解能の改善に取り組んだ。金ナノ粒子の粒径，照明用レーザーの強度，画像のピクセルサイズ，輪帯照明光学系の導入により，100 μ s の時間分解能で 3 Å の位置決定精度を達成した。また，金ナノ粒子と銀ナノ粒子の単粒子散乱スペクトルの取得，および金・銀ナノ粒子をプローブに用いた二色同時観察を達成した。

B-1) 学術論文

M. TACHIOKA, A. NAKAMURA, T. ISHIDA, K. IGARASHI and M. SAMEJIMA, “Crystal Structure of Family 6 Cellobiohydrolase from the Basidiomycete *Phanerochaete chrysosporium*,” *Acta Crystallogr., Sect. F: Struct. Biol. Cryst. Commun.* **73**, 398–403 (2017).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. FUJIMOTO, Y. MORITA, R. IINO, M. TOMISHIGE, H. SHINTAKU, H. KOTERA and R. YOKOKAWA, “Linear zero mode waveguides for the study of chemo-mechanical coupling mechanism of kinesin,” *2017 IEEE 30th International Conference on Micro Electro Mechanical Systems (MEMS)*, 64–67 (2017).

J. ANDO, T. SEKIYA, DEN KA, H. YAMAKOSHI, K. DODO, M. SODEOKA, S. KAWATA and K. FUJITA, “Surface-enhanced Raman scattering (SERS) imaging of alkyne-tagged small molecule drug in live cells with endocytosed gold nanoparticles,” *SPIE BiOS 2017 Proceedings*, 1004606-1 (2017).

B-3) 総説, 著書

飯野亮太, 「分子モーターの1分子イメージング」, 生体の科学「特集: 細胞多様性解明に資する光技術一見で, 動かす」, **68**, 388–389 (2017).

立岡美夏子, 中村彰彦, 石田卓也, 高橋幸子, 巖 斌, 田仲広明, 古林直樹, 伊中浩治, 五十嵐圭日子, 鮫島正浩, 「水素原子の可視化を目指したセルラーゼの大型結晶作製」, 宇宙における高品質タンパク質結晶化技術の伝承と可能性, **34(1)**, 340108 (6 pages) (2017).

安藤 潤, 藤田克昌, 「ラマン分光顕微鏡とライフサイエンス応用」, 光アライアンス, **28(6)**, 52–57 (2017).

飯野亮太, 安藤 潤, 中村彰彦, 「金ナノプローブでタンパク質分子モーターのダイナミックな動きを観る」, *JSMI Report* **11(1)**, 11–16 (2017).

B-4) 招待講演

R. IINO, “High-speed single-molecule imaging analysis of protein molecular motors probed by gold nanoparticles and nanorods,” DAC seminar on dynamical ordering and integrated functions of biomolecular systems, Department of Applied Chemistry, National Chiao Tung University, Hsinchu (Taiwan), November 2017.

R. IINO, “Chitinase A is 1-nm stepping Brownian motor decomposing crystalline polysaccharide,” NANOTEC-IMS joint research meeting, Pathum Thani (Thailand), October 2017.

R. IINO and A. NAKAMURA, “Stepping motion and chemo-mechanical coupling of chitinase resolved by single-molecule analysis,” IUPAB2017 “Molecular Machinery,” Edinburgh (U.K.), July 2017.

R. IINO, “High-speed single-molecule measurement of molecular motors with metallic nanopores,” KAKENHI International symposium on “Studying the function of soft molecular systems,” Sapporo (Japan), June 2017.

R. IINO, “Chemo-mechanical coupling mechanisms of linear and rotary molecular motors revealed by high-speed single-molecule imaging analysis,” Frontier bioorganization forum 2017: Dynamical ordering and integrated functions of biomolecular systems, Taipei (Taiwan), April 2017.

R. IINO, “Single-molecule dynamics of natural and engineered molecular motors,” The 5th international symposium on “Dynamical ordering & integrated functions,” Komaba, Tokyo (Japan), January 2017.

飯野亮太, 「高速1分子イメージング解析で明らかとなったタンパク質分子モーターの化学力学共役機構」, 高分子討論会シンポジウム「「柔らかな」生体および合成高分子系の解明と構築」, 愛媛大学, 松山, 2017年9月.

飯野亮太, “Chemo-mechanical coupling mechanisms of linear and rotary molecular motors revealed by high-speed single-molecule imaging analysis,” 第55回生物物理学会年会シンポジウム「Softness and functions of biological molecules under various environments」, 熊本大学, 熊本, 2017年9月.

飯野亮太, 「機動分子科学: 生体分子, 人工分子を超えて」, 第17回蛋白質科学学会年会ワークショップ「機動分子科学」, 仙台国際センター, 仙台, 2017年6月.

飯野亮太, 「金ナノプローブで生体分子モーターのダイナミックな動きを観る」, 分子イメージング学会学術集会シンポジウム「生命の神秘に迫る分子イメージング」, 横浜港大さん橋ホール, 横浜, 2017年5月.

飯野亮太, 「生体分子機械を観る, 操る, 壊す, 創る」, 海洋研究開発機構第13回新機能研究開拓研究グループセミナー, 海洋研究開発機構, 横須賀, 2017年5月.

飯野亮太, 「金ナノプローブでタンパク質1分子の動きはどこまで見えるか」, 研究会「分子観察による生命の階層横断的な理解」, 分子科学研究所, 岡崎, 2017年3月.

中村彰彦, 五十嵐圭日子, 「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」, 分子研研究会「触媒反応であるタンパク質反応を分子科学的観点から捉える」, 分子科学研究所, 岡崎, 2017年6月.

中村彰彦, 「1分子解析によりセルラーゼ／キチナーゼの何が見えるのか」, セルラーゼ研究会, 佐久平プラザ 21, 佐久, 2017年7月.

A. NAKAMURA and R. IINO, “Direct Observation of 1 nm Steps of Chitinase A Molecules with Gold Nano Probes,” Selected short talk in Gordon Research Conference Cellulases & Other Carbohydrate-Active Enzymes, Proctor Academy, Andover (U.S.A.), July 2017.

J. ANDO, M. SODEOKA and K. FUJITA, “Alkyne-tag Raman imaging and screening of small molecules in biological systems,” Biomedical Molecular Imaging 2017, Taipei (Taiwan), November 2017.

安藤 潤, 藤田克昌, 袖岡幹子, “Raman scattering microscopy and alkyne-tag for imaging and screening of bio-active small molecules,” 第55回生物物理学会年会シンポジウム「Softness and functions of biological molecules under various environments」, 熊本大学, 熊本, 2017年9月.

B-5) 特許出願

Application number: US15/351,522, “Kit for sealing beads and detecting target molecule,” H. NOJI, R. IINO and S. ARAKI (JST), Publication date: Apr 27, 2017, Filing date: Nov 15, 2016.

B-6) 受賞, 表彰

石渡大貴, 日本化学会東海支部長賞 (2017).

安藤 潤, 日本分光学会平成 29 年度年次講演会若手講演賞 (2017).

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).

日本分光学会中部支部幹事 (2017.10–). (安藤 潤)

学会の組織委員等

第 25 回日本バイオイメーシング学会学術集会副大会長 (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–).

出前授業「温度と分子の状態」, 岩津中学校 (2017). (中村彰彦)

B-8) 大学での講義, 客員

京都大学大学院農学研究科, 非常勤講師, 「応用生命科学特論 IV」, 2017 年 7 月 6 日–7 日.

名古屋大学大学院理学研究科, 非常勤講師, 「物性生物物理学総合講義」, 2017 年 11 月 6 日.

B-10) 競争的資金

科研費挑戦的研究 (萌芽), 「結晶性多糖表面を動きながら連続的に分解する酸化還元型酵素を創る」, 飯野亮太 (2017 年–2018 年).

自然科学研究機構新分野創成センターイメーシングサイエンス研究分野プロジェクト, 「プラズモニクナノ粒子による生体分子のマルチカラー 1 分子イメーシング法の開発」, 安藤 潤 (2017 年).

自然科学研究機構新分野創成センターイメーシ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).

科研費若手研究 (B), 「高速高精度一分子観察による結晶性糖質分解機構の解明」, 中村彰彦 (2016 年–2017 年).

科研費新学術領域研究「動的構造生命」 (公募研究), 「高時空間分解能一分子観察と理論解析を組み合わせた分子モーター運動解析法の開発」, 中村彰彦 (2016 年–2017 年).

自然科学研究機構新分野創成センターイメーシ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シングによる生体分子モーターの複合 1 分子計測」, 飯野亮太 (2015 年).

科研費基盤研究 (B), 「ナトリウムイオン輸送性 V-ATPase のエネルギー変換機構の解明」, 飯野亮太 (2015 年–2017 年).

科研費研究活動スタート支援,「セルロース分解酵素のモーター運動に寄与する構造要素の解明」,中村彰彦(2015年–2016年).
科研費新学術領域研究「動的秩序と機能」(公募研究),「ATP 駆動サイボーグ回転分子モーターの創生」,飯野亮太(2014年–2015年).

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

科研費特別研究員奨励費,「ダブルドメインセルラーゼの吸着バランス制御による結晶性多糖構造分解反応の促進」,中村彰彦(2013年–2014年).

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

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

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

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

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

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

科研費若手研究(B),「プロトン駆動力で回転する生体分子モーター ATP 合成酵素の1分子計測」,飯野亮太(2006年–2008年).
日本学術振興会二国間交流事業共同研究,「生細胞内で働くATP 合成酵素の回転速度を1分子技術で計測する」,飯野亮太(2010年–2011年).

大阪大学産業科学研究所リーダーシップ支援経費,「1細菌培養・観察・回収用マイクロドロ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

セルラーゼ, キチナーゼは, 運動方向が逆の分子を同時に作用させると結晶性多糖の分解活性が大きく上昇する「シナジー効果」が報告されている。*TrCel6A* と *TrCel7A*, および *SmChiA* と *SmChiB* の混合によるシナジー効果の機構を明らかにする。セルラーゼについてはさらに, 各ドメインの役割が分かっている *TrCel6A* と *CfCel6B* をベースに用いてドメイン交換したキメラ酵素の作製を行う。キチナーゼについては *SmChiA* と運動方向が逆である *SmChiB* の運動機構の解明, および運動に必要な構造要素の解明を行う。解明した運動機構を基に *SmChiA* と *SmChiB* を組み合わせたハイブリッド酵素の作製を行う。回転分子モーター V-ATPase は, V_1 のサブステップのトルクの測定, および V_0V_1 複合体の1分子計測を行う。また, 分子科学研究所古賀グループとの共同研究により, V_1 の A サブユニットにATP 結合能を付加した非天然型モーターの創成を行っている。1分子計測で回転速度, ATP, ADP の親和性, およびサブステップの角度等を野生型と比較する。先端的生体1分子計測法の開発については, 位置決定精度と時間分解能の更なる改善, 合金ナノ粒子を用いたマルチカラーイメージング, プラズモンカップリングを用いたプラズモンルーラーの開発に取り組む。

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

A-1) 専門領域：界面化学, 超分子化学

A-2) 研究課題：

- a) 増殖に最適な組成選択を行うベシクル系の構築
- b) 粒子を内包したベシクルにおける混みあいと自発的偏在

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 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。現在, 高分子重合のための単量体のうち一種について, 設計・合成を完了しつつある。
- b) 細胞の内部の生体高分子は, 自由に動ける領域を増大するよう自身や周囲の構造を変化させ, このエントロピックな作用は「排除体積効果」と呼ばれる。我々は, 排除体積効果を示すモデルとして, 大小二種のポリスチレンビーズを稠密に封入したベシクルを調製した。大粒子を高密度に内包したベシクルを作成し, その挙動を粒子集団の自由エネルギー変化に基づき解析した。

B-1) 学術論文

Y. NATSUME, H. WEN, T. ZHU, K. ITOH, L. SHENG and K. KURIHARA, “Water-in-Oil Emulsion Centrifugation Method to Prepare Giant Vesicles Encapsulating Micrometer-Sized Particles,” *J. Vis. Exp.* **119**, e55282 (2017).

B-3) 総説, 著書

K. KURIHARA, M. MATSUO, T. YAMAGUCHI and S. SATO, “Synthetic Approach to Biomolecular Science by Cyborg Supramolecular Chemistry,” *Biochim. Biophys. Acta, Gen. Subj.* **1862**, 358–364 (2017).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

栗原顕輔, 「化学的人工細胞が提案する生命起源への戦略」, ABC ミニワークショップ「低温度周りの光合成」, 東京, 2017年3月.

K. KURIHARA, “Basic Research on Primitive Cell Model Based on Lipid World Hypothesis,” The 4th Astrobiology Workshop, Tokyo (Japan), March 2017.

K. KURIHARA, “Strategy for Origin of Life Proposed by Chemical Artificial Cell,” ELSI International Workshop “Reconstructing the Phenomenon of Life—To Retrace the Emergence of Life—,” Tokyo (Japan), May 2017.

栗原顕輔, 「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」, 花王・芸術科学財団助成研究発表会, 東京, 2017年6月.

K. KURIHARA, “Chemical Cell Models Based on Self-Reproducing Vesicles,” Japan-China Joint Interdisciplinary Symposium on Coordination-Based Hybrid Materials, Okazaki (Japan), June 2017.

栗原顕輔,「化学的人工細胞モデルで探る生命起源」, 第19回進化学会年次大会, 京都, 2017年8月.

K. KURIHARA, “Development of the Vesicle-type Artificial Cell,” 6th International Conference on Biology, Chemistry and Agronomy, Guadalajara (Mexico), September 2017.*

栗原顕輔,「油滴-ベシクル変換システムを基盤とする人工細胞の創成」, 第2回秩序化分子システムワークショップ, 奈良, 2017年12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」, 2017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).

科研費若手研究(A),「表現型と遺伝子型が連携する人工細胞モデルの創成」, 栗原顕輔 (2017年-2021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-2017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-2017年).

自然科学研究機構アストロバイオロジーセンタープロジェクト研究,「原始的なタンパク質を内包する原始細胞モデルの創成とその挙動解析」, 栗原顕輔 (2017年-2018年).

C) 研究活動の課題と展望

本研究では生物再構成の考えから, 既知の分子で生命らしい機能や挙動を示すシステムを創成することを目標とする。課題 a) では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, 人工細胞の境界膜であるベシクルを形成する概念を提案した。現在は, システインを基本骨格とした自発的ペプチド形成を軸にしているが, 他のアミノ酸や高分子でも検討している。課題 b) では細胞内のこみあい状態を表現したモデルを作成したが, サンプル調製や各ベシクルについての解析に時間がかかっている。今後はより作成しやすい液滴などベシクル以外のソフトマテリアルにも挑戦したいと考えている。また剛体球内包型のベシクルモデルだけでなく, 内部に封入する物質も柔らかい高分子などについても取り組みたいと考えている。

生体分子情報研究部門

古 谷 祐 詞（准教授）（2009 年 3 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：生物物理学, 生体分子科学

A-2) 研究課題：

- a) 哺乳動物カリウムイオンチャネルの環境依存的構造変化の解析
- b) 環形動物の脳内光受容機能を担うタンパク質の解析
- c) アゲハチョウ尾端光受容機能を担うタンパク質の探索
- d) 回転セルを用いた光受容タンパク質の赤外分光解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 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。一方で TWIK-1 というカリウムチャネルは、細胞外環境に応じて適度にナトリウムイオンを透過し、細胞の静止膜電位の調節に関係している。昨年までに、TWIK-1 タンパク質を脂質小胞に再構成した試料を用いて、アミド I 領域のスペクトル変化が、イオン選択性を生み出す選択フィルタ部位周辺の構造的特徴を反映していることを見出した。今年度は、名古屋大学の内橋貴之教授との共同研究として高速原子間力顕微鏡を用いた構造動態解析を行った。さらに琉球大学の東雅大助教との共同研究として基準振動計算も行った。得られた結果から、アミド I 領域のスペクトル変化が、TWIK-1 の選択フィルタ部位に由来することを、より明確にすることができた。
- b) 多くの動物は、視覚以外にも概日時計の調節などの用途に光情報を用いており、種々の動物で、脳が直接外界の光環境を感知することが知られている。とりわけ、環形動物ゴカイの脳ではたらく光受容タンパク質 Opn3 が、紫外光を感知することを見出し、また紫外光受容をもたらしアミノ酸残基も特定した (*J. Biol. Chem.* 誌に発表)。ゴカイの幼生は動物プランクトンとして活動し、太陽からの紫外光ダメージを避けるために日中は深部に移動することが知られている。すなわち Opn3 による紫外光感知は、プランクトンの生態を理解するためにも重要だと思われる。塚本助教は、このような知見を基に JST さきがけ研究として、脳機能を光でコントロールするツールとして Opn3 を利用する研究プロジェクトを開始した。
- c) 昆虫のアゲハチョウは尾端（お尻の先）に光受容細胞を持ち、それが交尾や産卵などの生殖行動に関与していることを、総合研究大学院大学の蟻川謙太郎教授らが報告している。学融合推進センターの公募型研究事業として、この尾端光受容機能を担う光受容タンパク質の同定をめざしている。蟻川教授と東京農工大学の内山博允博士と共同でアゲハチョウ尾端組織について RNA-seq 解析を行い、その組織で多く発現している光受容タンパク質候補を見出した。さらに、その候補タンパク質を培養細胞で発現し、このタンパク質が尾端受容器と同様に、紫外光を主に吸収することを見出した。
- d) 光受容タンパク質は光反応後に構造変化を経て機能発現を行うが、その後、失活したり、初期状態に戻るまで長時間を要するものがある。これまで装置開発室と共同して、光受容タンパク質試料を連続的に計測点に送り出す回転セルの開発を進めている。自然科学研究機構の若手分野間連携プロジェクトとして、基礎生物学研究所の得津隆太郎助教および河合寿子博士ならびに岡山大学の梅名泰史准教授に光化学系 II の試料を提供いただき、その光反応を赤外分光計測により解析している。

B-1) 学術論文

G. KASUYA, Y. FUJIWARA, H. TSUKAMOTO, S. MORINAGA, S. RYU, K. TOUHARA, R. ISHITANI, Y. FURUTANI, M. HATTORI and O. NUREKI, “Structural Insights into the Nucleotide Base Specificity of P2X Receptors,” *Sci. Rep.* **7**, 45208 (10 pages) (2017).

H. TSUKAMOTO, I-S. CHEN, Y. KUBO and Y. FURUTANI, “A Ciliary Opsin in the Brain of a Marine Annelid Zooplankton is Ultraviolet-Sensitive, and the Sensitivity is Tuned by a Single Amino Acid Residue,” *J. Biol. Chem.* **292**, 12971–12980 (2017).

S. HAESUWANNAKIJ, T. KIMURA, Y. FURUTANI, K. OKUMURA, K. KOKUBO, T. SAKATA, H. YASUDA, Y. YAKIYAMA and H. SAKURAI, “The Impact of the Polymer Chain Length on the Catalytic Activity of Poly(*N*-vinyl-2-pyrrolidone)-Supported Gold Nanoclusters,” *Sci. Rep.* **7**, 9579 (8 pages) (2017).

B-4) 招待講演

古谷祐詞, 「赤外分光法によるイオンチャネルタンパク質の分子機構解析」, 平成 28 年度末シンポジウム (主催: 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生理学研究所プロジェクト「細胞・システム作動機構の理解に向けた, 生体タンパク質分子の構造と機能のダイナミクス研究の拠点形成」, 生理学研究所, 岡崎, 2017 年 3 月.

古谷祐詞, 「イオンチャネルへの赤外差分分光計測の適用」, 研究会「分子観察による生命の階層横断的な理解」 (主催: 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「分子観察による物質・生命の階層横断的な理解」, 分子科学研究所, 岡崎, 2017 年 3 月.

Y. FURUTANI, “Time-Resolved FTIR Spectroscopy on Microbial Rhodopsins and Other Membrane Proteins,” International Symposium on Biophysics of Rhodopsins, Kyoto University, Kyoto (Japan), May 2017.

Y. FURUTANI, “Application of Infrared Spectroscopy to Study the Ion Selectivity of Potassium Ion Channels,” The 6th Asian Spectroscopy Conference (ASC6), Tsing Hua University, Hsinchu (Taiwan), September 2017.

H. TSUKAMOTO, “Molecular Mechanisms Regulating Functional Properties of Non-Visual Opsins in Animals,” International Symposium on Biophysics of Rhodopsins, Kyoto University, Kyoto (Japan), May 2017.

塚本寿夫, I-Shan Chen, 久保義弘, 古谷祐詞, 「動物プランクトンの脳ではたらく紫外光受容体の分光・電気生理解析」, 第2回イオンチャネル研究会, 東北大学, 仙台, 2017 年 8 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

日本生物物理学会理事 (2015–2016).

日本生物物理学会代議員 (2015–2016, 2017–2018), 委員 (2010–2011, 2012–2013).

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 (2012–2017).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2012). (塚本寿夫)

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).

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).

日本生物物理学会「生物物理」誌編集委員 (2017–2019). (塚本寿夫)

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」, 2017年11月15日.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「構造生体分子科学」, 2017年12月7日, 8日.

B-10) 競争的資金

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).

科研費若手研究(B),「哺乳類カリウムチャネルの環境依存的イオン透過制御メカニズムの解明」, 塚本寿夫 (2017年–2018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「萌芽的共同研究」,「アゲハチョウの眼外紫外光受容タンパク質と生殖行動との連関」, 塚本寿夫 (2017年).

科学技術振興機構さきがけ研究,「内在受容体を利用した生命機能の新規光操作手法の開発」, 塚本寿夫 (2017年–2020年).

C) 研究活動の課題と展望

これまで膜タンパク質の分子機構について、赤外分光計測を主要な手法として研究を行ってきた。哺乳動物細胞を用いた試料調製系を用いることで、カリウムチャネル TWIK-1, 紫外光センサーである Opn3 など、タンパク質研究でよく用いられている大腸菌では試料調製が困難な膜タンパク質の解析に成功している。また、装置開発室との共同で、回転セルを用いた時間分解赤外分光計測系の開発にも取り組んでいる。塚本助教はこれまでの研究成果を基に JST のさきがけ研究を開始している。また、藤 貴夫准教授を代表とする JST の CREST 研究も開始され、古谷は主たる共同研究者として、新規赤外分光計測の生体試料への応用を担当している。今後は、得られている成果を着実に論文にまとめ、新たな実験手法を構築するなどし、膜タンパク質の分子機構研究をさらに発展させていきたい。

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, H. YOSHIDA, A. OHNO, T. SATO, T. MASE and Y. UOZUMI, “Huisgen Cycloaddition with Acetylene Gas by Using an Amphiphilic Self-Assembled Polymeric Copper Catalyst,” *Heterocycles* **95**, 715–721 (2017).

Y. UOZUMI, Y. MATSUURA, T. SUZUKI, T. ARAKAWA and Y. M. A. YAMADA, “Palladium-Catalyzed Asymmetric Suzuki–Miyaura Cross Coupling with Homochiral Phosphine Ligands Having Tetrahydro-1*H*-imidazo[1,5-*a*]indole Backbone,” *Synthesis* **49**, 59–68 (2017).

G. HAMASAKA, T. MUTO, Y. ANDOH, K. FUJIMOTO, K. KATO, M. TAKATA, S. OKAZAKI and Y. UOZUMI, “Detailed Structural Analysis of a Self-Assembled Vesicular Amphiphilic NCN-Pincer Palladium Complex by Wide-Angle X-Ray Scattering and Molecular Dynamics Calculations,” *Chem. –Eur. J.* **23**, 1291–1298 (2017).

A. SAKON, R. II, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI, T. SHINAGAWA, O. SHIMOMURA, R. NOMURA and A. OHTAKA, “Detailed Mechanism for Hiyama Coupling Reaction in Water Catalyzed by Linear Polystyrene-Stabilized PdO Nanoparticles,” *Organometallics* **36**, 1618–1622 (2017).

F. K.-C. LEUNG, F. ISHIWARI, Y. SHOJI, T. NISHIKAWA, R. TAKEDA, Y. NAGATA, M. SUGINOME, Y. UOZUMI, Y. M. A. YAMADA and T. FUKUSHIMA, “Synthesis and Catalytic Applications of a Triptycene-Based Monophosphine Ligand for Palladium-Mediated Organic Transformations,” *ACS Omega* **2**, 1930–1937 (2017).

T. S. SYMEONIDIS, A. ATHANASOULIS, R. ISHII, Y. UOZUMI, Y. M. A. YAMADA and I. N. LYKAKIS, “Photocatalytic Aerobic Oxidation of Alkenes into Epoxides or Chlorohydrins Promoted by a Polymer-Supported Decatungstate Catalys,” *ChemPhotoChem* **1**, 479–484 (2017).

T. OSAKO, K. TORII, S. HIRATA and Y. UOZUMI, “Chemoselective Continuous-Flow Hydrogenation of Aldehydes Catalyzed by Platinum Nanoparticles Dispersed in an Amphiphilic Resin,” *ACS Catal.* **7**, 7371–7377 (2017).

S. PAN, S. YAN, T. OSAKO and Y. UOZUMI, “Batch and Continuous-Flow Huisgen 1,3-Dipolar Cycloadditions with An Amphiphilic Resin-Supported Triazine-Based Polyethyleneamine Dendrimer Copper Catalyst,” *ACS Sustainable Chem. Eng.* **5**, 10722–10734 (2017).

B-4) 招待講演

Y. UOZUMI, “Development of Novel Heterogeneous Catalytic Systems,” IMS-IPCMS Joint Symposium, Strasubourg (France), May 2017.

Y. UOZUMI, 「未来の化学合成を支える超活生グリーン触媒を目指して」, 第6回JACI/GSC シンポジウム, 東京(日本), 2017年7月.

Y. UOZUMI, 「連続フロー触媒反応システムの開発: エステル化および Huisgen 環化反応」, 新学術領域第4回公開成果報告会, 京都(日本), 2017年7月.

Y. UOZUMI, “Molecular architecture-based administration of catalysis in water via self-assembly of amphiphilic palladium pincer complexes,” 6th Gratama Workshop, Groningen (Netherlands), October 2017.

Y. UOZUMI, “A Showcase of Novel Immobilized Catalysis for Organic Transformations,” Department Seminar, Three Gorges University, Yichang (China), November 2017.

B-6) 受賞, 表彰

魚住泰広, 有機合成化学協会研究企画賞 (1992).

魚住泰広, 日本薬学会奨励賞 (1997).

山田陽一, 日本薬学会奨励賞 (2005).

魚住泰広, 第6回グリーン・サステナブル・ケミストリー賞, 文部科学大臣賞 (2007).

魚住泰広, 平成 18 年度日本化学会学術賞 (2007).

山田陽一, 文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2008).

山田陽一, Thieme Chemistry Journal Award (2008).

魚住泰広, 井上学術賞 (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).

大迫隆男, Thieme Chemistry Journal Award (2017).

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(2002–2017).

SYNFACTS 誌編集委員(2005–).

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

The Chemical Record 編集委員(2010–).

その他

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

理化学研究所研究チームリーダー(2007–).

経済産業省グリーン・サステナブルケミカルプロセス基盤技術開発プロジェクト 研究チームリーダー(2008–2012).

科学技術振興機構CREST 研究「反応媒体駆動原理の確立と革新的触媒プロセスの開発」研究副リーダー(2011–2016).

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

B-8) 大学での講義, 客員

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。理想の有機分子変換を標榜した当研究室の歩みの中で多くの水中機能性固定化錯体触媒, 水中機能性固定化ナノ金属触媒を開発し, その幾つかは汎用性ある触媒として市販されるに至っている。これらの研究は科学研究費補助金(基盤研究, 新学術研究など)にくわえ, 多くの競争的外部研究費を得て推進してきた。即ちこれまでに水中機能性固定化触媒に関する「グリーンナノ触媒」CREST 研究(2002年10月–2008年3月), 続いてその成果を実践的に発展させるMETI-NEDO プロジェクト(2008年9月–2012年2月), 稀少元素の元素循環・元素減量・元素代替に焦点を当てた「元素戦略」CREST 研究(2011年10月–2017年3月)を展開してきた。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, 現在同研究所・環境資源科学研究センターにて展開中である。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も大いに注力しており, 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。なかでも最近では未開拓元素群の触媒反応性(とくにCu, Fe, Ag)の探索と確立, さらに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。加えて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り, 学術的にも大きなチャレンジである。

楳 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) ヨウ化ペルフルオロアリアルを母骨格とするハロゲン結合供与体触媒の設計・開発
- d) ハロゲン結合を活用する分子インプリント高分子触媒反応場の開発
- e) エチルビスピリジンを配位子とするヨードニウム錯体触媒の開発
- f) 触媒材料および炭素材料の開発に向けたペルフルオロペリレン化合物の合成研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) カンファスルホン酸触媒存在下、窒素上に 2,2-置換ペンテニル基を有するアルジミンの形式的 1,3-転位反応に成功した。光学的に純粋な反応基質を用いた場合に極めて高い不斉転写率で転位反応が進行することを見出した。また、HPC SYSTEMS, 鈴木グループとの共同研究により、本反応の反応機構を明らかにした。
- b) 異なる 2 つの酸性官能基を有するキラルプレンステッド酸触媒として、ホスフィン酸-リン酸を設計・合成した。合成した触媒が、アルデヒド水和物とジエン類とのヘテロ Diels-Alder 反応において、良好なエナンチオ選択性を与えることを見出した。
- 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、クロチル化反応、プレニル化反応の触媒として機能することを見出した。また、江原グループとの共同研究により、本反応の触媒作用機構を明らかにした。
- d) ハロゲン結合供与部位を有する高分子担体を用いて、DMAP を鋳型とする鋳型重合により、DMAP インプリント高分子を合成した。合成した DMAP インプリント高分子が、アシル基転移反応の疎水性触媒反応場として有効であることを見出した。
- e) エチルビスピリジンを配位子とするヨードニウム錯体触媒の合成に成功した。また、本錯体触媒が、ピコリンとケテンシリルアセタールとの向山アルドール反応において、高い触媒活性を示すことを見出した。
- f) 触媒材料および炭素材料の開発を目的として、ペルフルオロペリレン化合物の合成研究を開始した。本研究課題は、鈴木グループとの共同研究として進めている。構成素子となるテトラフルオロナフタレンやヘキサフルオロナフタレンの合成を行い、合成経路の確立に向けて有益な知見を得た。

B-4) 招待講演

楳山儀恵, 「ハロゲン結合とペルフルオロアリアルで拓く合成化学」, 統合物質創製化学推進機構第3回国内シンポジウム, 京都大学化学研究所, 京都, 宇治, 2017 年 10 月.

N. MOMIYAMA, "Anion-Binding Catalysis via Hydrogen and/or Halogen Bonding," The 8th International Meeting on Halogen Chemistry, Inuyama, Aichi, September 2017.

N. MOMIYAMA, “Catalysis via Hydrogen and/or Halogen Bonding,” Japan-China Joint Interdisciplinary Symposium on Coordination-Based Hybrid Materials, Okazaki, Aichi, June 2017.

N. MOMIYAMA, “Anion Transport Catalysis via Halogen Bond Interaction,” International Symposium on Pure and Applied Chemistry 2017, Ho Chi Minh City (Vietnam), June 2017.

榎山儀恵, 「ペルフルオロアリールの分子修飾と有機分子変換への活用 水素結合からハロゲン結合への新展開」, セントラル硝子株式会社化学研究所, 埼玉, 川越, 2017年5月.

榎山儀恵, 「分子建築の匠をめざして」, 市民公開講座第111回分子科学フォーラム・特別編, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2017年2月.

B-5) 特許出願

特願 2016-253620, 「環上に置換基を有する含窒素環状化合物の製造方法」, 榎山儀恵, 泉閔督人(自然科学研究機構), 2016年.

B-6) 受賞, 表彰

榎山儀恵, 大学女性協会第17回守田科学研究奨励賞 (2015).

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

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

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

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

榎山儀恵, The Elizabeth R. Norton Prize for Excellence in Research in Chemistry (2003).

B-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).

分子研シンポジウム主催 (2017).

学会誌編集委員

日本化学会化学と工業編集委員 (2017).

その他

出前授業愛知県立岡崎北高等学校 (2016, 2017).

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 (2015).

B-10) 競争的資金

平成 29年度研究助成金・アステラス病態代謝研究会, 「非金属錯体触媒による医薬品構成素子合成法の開発」, 榎山儀恵 (2017年–2018年).

平成 29年度調査研究助成・鈴木謙三記念医科学応用研究財団, 「ヨードニウム錯体触媒による抗悪性腫瘍薬スピロ環状ラクトンの環境調和合成法の開発」, 榎山儀恵 (2017年–2018年).

科研費基盤研究(C) (一般),「ホスフィン酸を活性中心とする新規キラルプレンステッド酸触媒の開発」, 榎山儀恵 (2017年–2019年).

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」, 榎山儀恵 (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」, 榎山儀恵 (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」, 榎山儀恵 (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」, 榎山儀恵 (2016年–2017年).

2015年度内藤記念科学奨励金・研究助成,「ペルフルオロピ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」, 榎山儀恵 (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」, 榎山儀恵 (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」, 榎山儀恵 (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」, 榎山儀恵 (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」, 榎山儀恵 (2011年–2013年).

科研費若手研究(B),「ペルフルオロフェニル基の特性を利用した不斉有機酸触媒の開発とアリル化反応への応用」, 榎山儀恵 (2009年–2010年).

科研費特定領域研究「協奏機能触媒」,「 π -アリル・O価鉄複合体—キラルプレンステッド酸触媒による新規アリル化反応の開発」, 榎山儀恵 (2008年–2009年).

科研費若手研究(スタートアップ),「酵素模倣型キラル求核触媒の設計および不斉反応の探索」, 榎山儀恵 (2007年–2008年).

公益信託林女性自然科学者研究助成基金,「アゾール／グアニジン 2成分系キラル求核触媒の設計開発および不斉反応の探索」, 榎山儀恵 (2007年–2008年).

住友財団基礎化学研究助成,「アザ-コープ転位を基盤とする触媒的不斉炭素-炭素結合形成反応の開発」, 榎山儀恵 (2007年).

東北大学理学研究科若手奨励研究基金,「アザ-コープ転位を基盤とする触媒的不斉アリル化反応の開発」, 榎山儀恵 (2007年).

分子系高次構造体化学国際教育研究拠点若手奨励費研究,「高次構造アルカロイドの合成を指向した鍵中間体ピロリジンの触媒的不斉合成反応の開発」, 榎山儀恵 (2007年).

C) 研究活動の課題と展望

地球上に生存する生命を特徴付ける性質のひとつがキラリティーである。ほとんど全ての生体系は、本来的にキラルでありエナンチオマー的に純粋である。このことは、物質のキラリティーが至るところで私たちの日常に浸透している所以である。私たちの社会に欠かすことのできない物質・材料にキラリティーを組み入れること、それを可能にする一連の方法論を開発することは、次世代の純粋化学と応用化学の両面、そして材料科学において、極めて大きな意味をもつ。

当グループでは、キラル分子を供給する方法論の開拓とその確立を目指し、不斉分子触媒の設計・合成と触媒的不斉合成反応の開発を進めている。これまでに、不斉空間の構築ならびに不斉反応において「金属-配位子錯結合」よりも弱い相互作用である「水素結合」や「ハロゲン結合」の潜在的有用性を明らかにしつつある。2017年度は、従来困難であったいくつかの有機分子変換に成功し、国際学会での招待講演で発表した。また、学術誌への投稿に向けて、準備を整えることができた。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) 金属錯体の規則配列によるフレームワーク触媒の開発
- c) 金属錯体触媒と有機触媒との複合によるハイブリッド触媒系の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 鉄やルテニウムなどの 8 族金属イオンを有する金属錯体を対象に、多電子酸化還元反応に対する触媒の開発に取り組んだ。その結果、同一の分子骨格を有する一連の 8 族金属錯体群が創製され、金属イオンの性質が酸素発生触媒能に与える影響に関する知見が得られた。また、分子中に広い π 共役性の置換基を導入した錯体触媒についても研究を展開した。得られた触媒分子においては、導入した置換基が基質の認識として機能し、置換基を有しない触媒分子と比較し、二酸化炭素還元能が向上することが見出された。
- b) 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とを併せ持つパドルホイール型二核錯体に対し、分子間相互作用サイトを導入した触媒モジュールを開発し、モジュールの自己集合により反応場を有するフレームワークの構築に成功した。このフレームワークの触媒能について評価を行ったところ、高い耐久性を有し、簡便な分離操作により再利用可能な光水素発生触媒として機能することが判明した。更に、触媒モジュールならびにフレームワーク触媒の物性測定からその触媒反応機構に関しても明らかにした。
- c) 金属錯体・有機触媒・光触媒を組み合わせたハイブリッド触媒系を開発し、室温・可視光の温和な条件下で有機分子の Catalytic acceptorless dehydrogenation (CAD) に成功した。またそれぞれの触媒分子単独ならびに各種触媒及び基質の共存条件において光化学・電気化学測定を行い、触媒反応機構に関する知見を得ることに成功した。

B-1) 学術論文

S. KATO, Y. SAGA, M. KOJIMA, H. FUSE, S. MATSUNAGA, A. FUKATSU, M. KONDO, S. MASAOKA and M. KANAI, “Hybrid Catalysis Enabling Room-Temperature Hydrogen Gas Release from *N*-Heterocycles and Tetrahydronaphthalenes,” *J. Am. Chem. Soc.* **139**, 2204–2207 (2017).

Y. OKABE, S. K. LEE, M. KONDO and S. MASAOKA, “Syntheses and CO₂ Reduction Activities of π -Expanded/Extended Iron Porphyrin Complexes,” *J. Biol. Inorg. Chem.* **22**, 713–725 (2017).

M. WANG, V. ARTERO, L. HAMMARSTRÖM, J. MARTINEZ, J. KARLSSON, D. GUST, P. SUMMERS, C. MACHAN, P. BRUEGGELLER, C. D. WINDLE, Y. KAGESHIMA, R. COGDELL, K. R. TOLOD, A. KIBLER, D. H. APAYDIN, E. FUJITA, J. EHRMAIER, S. SHIMA, E. GIBSON, F. KARADAS, A. HARRIMAN, H. INOUE, A. KUDO, T. TAKAYAMA, M. WASIELEWSKI, F. CASSIOLA, M. YAGI, H. ISHIDA, F. FRANCO, S. O. KANG, D. NOCERA, C. LI, F. D. FONZO, H. PARK, L. SUN, T. SETOYAMA, Y. S. KANG, O. ISHITANI, J.-R. SHEN, H.-J. SON and S. MASAOKA, “Molecular Catalysts for Artificial Photosynthesis: General Discussion,” *Faraday Discuss.* **198**, 353–395 (2017).

M. YOSHIDA, M. KONDO, M. OKAMURA, M. KANAIKE, S. HAESUWANNAKIJ, H. SAKURAI and S. MASAOKA,
“Fe, Ru, and Os Complexes with the Same Molecular Framework: Comparison of Structures, Properties and Catalytic Activities,”
Faraday Discuss. **198**, 181–196 (2017).

B-3) 総説, 著書

岡村将也, 正岡重行, 「酸素発生触媒の開発——金属錯体によるアプローチ——」, *月刊機能材料* **37(4)**, 51–59 (2017).

近藤美欧, 正岡重行, 「錯体化学的アプローチ2——酸素発生反応」, 「光触媒／光半導体を利用した人工光合成——最先端科学から実装技術への発展を目指して——」, エヌ・ティー・エス, pp. 99–106 (2017). (ISBN: 978-4-86043-477-9)

近藤美欧, 「Bio-relevant な金属錯体を用いた酸素発生触媒の開発」, *化学と工業* **70(10)**, 888–889 (2017).

B-4) 招待講演

S. MASAOKA, “Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation,” 4th Japan-Taiwan-Singapore-Hong Kong Quadrilateral Symposium on Coordination Chemistry, Hong Kong (China), December 2017.

正岡重行, 「太陽系外惑星において起こり得る光合成反応の分子科学的考察」, 2017年度生命科学系学会合同年次大会 (ConBio2017) ワークショップ「アストロバイオロジー：地球と宇宙での生命探査」, 神戸ポートピアホテル, 神戸, 2017年12月.

S. MASAOKA, “Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation,” the 4th Japan-Canada Joint Symposium on Coordination Chemistry, Fukuoka and Miyazaki (Japan), November 2017.

S. MASAOKA, “Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation,” American Chemical Society (ACS) Asia-Pacific International Chapters Conference, Jeju (Korea), November 2017.

S. MASAOKA, “Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation,” The NANOTEC-IMS Joint Research Meeting, NANOTEC, Klong Nueng (Thailand), October 2017.

S. MASAOKA, “Pentanuclear iron catalysts for water oxidation,” 11th Japan-China Joint Symposium on Metal Cluster Compounds, Nagoya University, Nagoya (Japan), October 2017.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする酸素発生反応」, 第10回ChemBio ハイブリッドレクチャー, 東京大学浅野キャンパス, 東京, 2017年9月.

S. MASAOKA, “Pentanuclear iron catalysts for water oxidation,” The 2nd Japan-US Bilateral Meeting on Coordination Chemistry, Hokkaido University, Sapporo (Japan), September 2017.

S. MASAOKA, “Pentanuclear iron catalysts for water oxidation,” The 6th Asian Conference on Coordination Chemistry (ACCC6), Melbourne (Australia), July 2017.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする酸素発生反応」, 奈良女子大学講演会, 奈良女子大学, 奈良, 2017年7月.

S. MASAOKA, “Pentanuclear iron catalysts for water oxidation,” Molecular Technology: “Energy and electron transfers in molecular engineered materials,” Strasbourg (France), June 2017.

S. MASAOKA, “Molecular catalysts for water oxidation,” Japan-China Joint Interdisciplinary Symposium on Coordination-Based Hybrid Materials, Okazaki Conference Center, Okazaki (Japan), June 2017.

S. MASAOKA, “Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation,” International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2017, Ho Chi Minh City (Vietnam), June 2017.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする酸素発生反応」, 先端科学・材料技術部会高選択性反応分科会講演会, 新化学技術推進協会 (JACI) 会議室, 東京, 2017年6月.

正岡重行,「水分子の特異な触媒的変換反応の開発」,日本化学会第 97 春季年会特別企画「精密設計反応場を利用した高難度変換反応の開発」,慶応義塾大学日吉キャンパス,横浜,2017 年 3 月.

正岡重行,「金属錯体の機能連動による触媒創出」,分子研研究会「金属錯体の情報制御と機能連動」,分子科学研究所,2017 年 3 月.

S. MASAOKA, “A Penta-iron Water Oxidation Catalyst,” 2017 International Conference on Artificial Photosynthesis, Ritsumeikan University, Kyoto (Japan), March 2017.

S. MASAOKA, “Fe, Ru, and Os Complexes with the Same Molecular Framework: Comparison of Structures, Properties and Catalytic Activities,” Faraday Discussion: Artificial Photosynthesis, Ritsumeikan University, Kyoto (Japan), March 2017.

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5回公開シンポジウム,東工大蔵前会館,東京,2017 年 1 月.

S. MASAOKA, “Water Oxidation Catalyzed by Transition Metal Complexes,” 第7回「フォーラム：人工光合成」,東工大蔵前会館,東京,2017 年 1 月.

正岡重行,「人工光合成への挑戦～金属錯体を用いた酸素発生触媒の開発～」,教育研究評議会(第 50 回),自然科学研究機構,2017 年 1 月.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation—Challenges to Artificial Photosynthesis—,” Welcome Visit of Dalian University of Technology to IMS & SOKENDAI, Institute for Molecular Science, Okazaki (Japan), January 2017.

近藤美欧,「鉄 5 核錯体による高活性酸素発生触媒の創製」,平成 29 年度膜タンパク質研究会,淡路夢舞台国際会議場,兵庫県淡路市,2017 年 10 月.

M. KONDO, “Asymmetric assembly of metal ions in multinuclear complexes,” 錯体化学会第 67 回討論会,北海道大学,北海道札幌市,2017 年 9 月.

近藤美欧,「分子モジュールの自己集合による超分子フレームワークの創製」,第 11 回超分子若手懇談会,箱根路開雲,神奈川県足柄下郡箱根町,2017 年 9 月.

M. KONDO, “Molecular modules for framework catalysts,” Thirteenth International Workshop on Supramolecular Nanoscience of Chemically Programmed Pigments (SNCPPI17), Ritsumeikan University, Kusatsu, Shiga, June 2017.

近藤美欧,「生体機能模倣による高活性な酸素発生触媒の開発」,分子研研究会「触媒反応であるタンパク質反応を分子科学的観点から捉える」,分子科学研究所,愛知県岡崎市,2017 年 6 月.

B-6) 受賞, 表彰

S. K. LEE, 4th Japan-Taiwan-Singapore-Hong Kong Quadrilateral Symposium on Coordination Chemistry, Chemistry Letters Young Award (2017).

伊豆 仁, 第 50 回酸化反応討論会ポスター賞 (2017).

Pondchanok Chinapang, 錯体化学会第 67 回討論会ポスター賞 (2017).

榎本孝文, 錯体化学若手研究会「錯体化学若手の会夏の学校 2017」優秀ポスター賞 (2017).

近藤美欧, 第 19 回守田科学研究奨励賞 (2017).

Pondchanok Chinapang, Energy & Environmental Science Outstanding Student Presentation Award (2017).

Pondchanok Chinapang, International Conference on Artificial Photosynthesis (ICARP2017), Excellent Poster Award (2017).

伊豆 仁, International Conference on Artificial Photosynthesis (ICARP2017), Excellent Poster Award (2017).
正岡重行, 平成 28 年度日本学術振興会賞 (2016).
岡村将也, 正岡重行, 近藤美欧, 第5回ネイチャー・インダストリー・アワード特別賞 (2016).
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

分子研研究会「Cutting-Edge Researches in Coordination Chemistry and Photochemistry」主催 (2017).

アジア連携分子研研究会「日中合同若手学際シンポジウム～配位化学を基盤とした次世代複合材料」主催 (2017).

分子研研究会「触媒反応であるタンパク質反応を分子科学的観点から捉える」所内対応 (2017).

分子研研究会「金属錯体の情報制御と機能連動」主催 (2017).

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」所内対応 (2016).

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」, 2017 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

伊東貴弘, 「Design, Construction and Reactivity of Porous Frameworks with Substitution—Labile Sites」, 2017 年 3 月, 博士(理学).

岡部佑紀, 「Synthesis, Properties and Catalytic Activities for CO₂ Reduction of Porphyrins and Porphyrin Complexes Bearing π -Conjugated Substituents」, 2017 年 3 月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

科研費新学術領域研究(計画研究), 「光化学的刺激／電気化学的刺激による金属錯体触媒のオンデマンド活性化」, 正岡重行 (2017 年–2021 年).

科研費新学術領域研究(公募研究), 「アシンメトリック金属イオン集積に立脚した新奇機能性分子群の創製」, 近藤美欧 (2017 年–2018 年).

科研費挑戦的研究(萌芽), 「結晶性ホストへの戦略的機能統合による革新的触媒システムの構築」, 近藤美欧 (2017 年–2019 年).
徳山科学技術振興財団研究助成, 「多核異種金属錯体のオンデマンド合成による高効率な二酸化炭素還元触媒系の創出」, 近藤美欧 (2016 年–2017 年).

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).

科研費新学術領域研究(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).

科研費新学術領域研究(公募研究),「水の酸化の超高効率化を目指した超分子錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2013年–2014年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト,「酸素発生型光合成への挑戦: 機構理解と新機能創出」, 正岡重行 (2013年).

科学技術振興機構先導的物質変換領域,「超分子クラスター触媒による水を電子源としたCO₂還元反応系の構築」, 近藤美欧 (2012年–2017年).

科研費挑戦的萌芽研究,「二次元反応場への金属錯体集積と水を基質とする革新的多電子物質変換」, 正岡重行 (2012年–2013年).

科研費若手研究(B),「高効率触媒界面の構築を目指した錯体プラットフォームの開発」, 近藤美欧 (2012年–2013年).

第5回資生堂女性研究者サイエンスグラント,「界面電子移動プログラミングによる水の完全光分解系の構築」, 近藤美欧 (2012年–2013年).

学融合推進センター公募研究事業事業枠③女性研究者支援,「界面電子移動反応を利用した水の完全光分解システムの創成」, 近藤美欧 (2012年).

科学技術振興機構さきがけ研究「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).

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。2017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) 金属錯体の規則配列によるフレームワーク触媒の開発、c) 金属錯体触媒と有機触媒との複合によるハイブリッド触媒系の開発、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、8族金属イオンを有する錯体のみならず、他の金属イオンを有する金属錯体触媒の開発に着手し、水の四電子酸化反応、還元、N₂還元等の多岐にわたる多電子酸化還元反応に対する高活性な触媒の創出に取り組みたい。b) については、様々な構造・反応性を有する分子モジュールを用いて種々のフレームワークを開発し、特異な反応場が触媒機能に与える影響について追究したい。c) では、2017年までに構築したハイブリッド触媒系ならびに反応機構解析により得られた知見を礎に、新たな反応性を有するハイブリッド触媒系の創出に向けた研究を展開する。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。

KaiC の自律的な動的構造変化，そして他の Kai タンパク質（KaiA, KaiB）との相互作用に伴う構造変化をモニターするため，蛍光標識された KaiC を複数調製した。様々な条件下で蛍光強度の変化を調べたところ，ATP 加水分解反応と共役して KaiC の構造が変化し，これに伴って KaiC と他の Kai タンパク質の親和性や相互作用するタイミングが制御されていることを解明した。

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. AKIYAMA, A. MUKAIYAMA, J. ABE and Y. FURUIKE, “Cyanobacterial Circadian Clock System: How and Why Can It Be So Slow and Stable?” *Biological Clocks: with reference to suprachiasmatic nucleus*, 73–77 (2017).

N. NUERMET, N. YASUI, Y. KUSAKABE, Y. NOMURA, N. ATSUMI, S. AKIYAMA, E. NANGO, Y. KATO, M. K. KANEKO, J. TAKAGI, M. HOSOTANI and A. YAMASHITA, “Structural Basis for Perception of Diverse Chemical Substances by T1r Taste Receptors,” *Nat. Commun.* **8**, 15530 (10 pages) (2017).

I. ANZAI, E. TOKUDA, A. MUKAIYAMA, S. AKIYAMA, F. ENDO, K. YAMANAKA, H. MISAWA and Y. FURUKAWA, “A Misfolded Dimer of Cu/Zn-Superoxide Dismutase Leading to Pathological Oligomerization in Amyotrophic Lateral Sclerosis,” *Protein Sci.* **26**, 484–496 (2017).

B-4) 招待講演

S. AKIYAMA, “Cyanobacterial circadian clock system: How and why can it be so slow and stable?” Sokendai Asian Winter School, 分子科学研究所, 岡崎, December 2017.

S. AKIYAMA, “Frequency characteristics as a basis for meta-tuning of the Cyanobacterial Circadian Clock,” ConBio2017, 神戸ポートアイランド, 神戸, December 2017.

S. AKIYAMA, “The frontier in cyanobacterial circadian clock system,” OIIB Summer School 2017, Okazaki (Japan), August 2017.

S. AKIYAMA, “Biological X-Ray Solution Scattering Activities at the Institute for Molecular Science,” Okazaki Conference 2017 on Grand Challenges in Small-Angle Scattering, Okazaki (Japan), March 2017.

S. AKIYAMA, “Atomic-scale origins of slowness and temperature compensation in KaiC,” Circadian Clock of Cyanobacteria during 1991-2017, Nagoya (Japan), March 2017.

秋山修志, “Frequency Characteristics and Temperature Compensation in the Cyanobacterial Circadian Clock,” 第24回日本時間生物学会学術大会, 京都大学, 京都, October 2017.

秋山修志, “Lessons from Cyanobacterial Circadian Clock System,” 第55回日本生物物理学会年会, 熊本大学, 熊本, September 2017.

秋山修志, 「生命の時間」, 第4回大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム, 秋葉原UDX, 東京, September 2017.

秋山修志, 「藍藻生物時計システムにおける概日周期の根源と貫階層性」, 第69回日本細胞生物学会大会, 仙台国際センター, 仙台, June 2017.

秋山修志, 「生物の不思議～体内時計～」, 日本放射光学会市民公開講座, 神戸芸術センター, 神戸, January 2017.

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).

秋山修志, 日本学術振興会賞 (2016).

秋山修志, 向山 厚, 文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム平成28年度利用6大成果賞 (2017).

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, 2017).

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線溶液散乱講習会主催 (2015–).

Okazaki Conference 2017 on Grand Challenges in Small-angle Scattering, Organizer (2017).

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–).

日本生物物理学会「生物物理」会誌副編集委員長 (2016–2017).

日本放射光学会「放射光」会誌編集委員 (2013–2015).

日本結晶学会「日本結晶学会」会誌編集委員 (2010–2012).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究, 「時間と共に離合集散を繰り返す分子機械の X 線小角散乱・動的構造解析」, 秋山修志 (2005 年–2009 年).

科研費若手研究(B), 「異常分散・X 線小角散乱を利用した無配向生体高分子の 2 原子間距離計測」, 秋山修志 (2007 年–2010 年).

科研費若手研究(A), 「時を生み出すタンパク質 KaiC における ATPase 自己抑制・温度補償機構」, 秋山修志 (2010 年–2013 年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「多チャンネル・セルを用いたハイスループット X 線小角散乱」, 秋山修志 (2012 年–2014 年).

科研費若手研究(B), 「溶液中における時計タンパク質 KaiC の動態解析」, 向山 厚 (2013 年–2014 年).

科研費基盤研究(B), 「時計タンパク質の固有周波数の分子科学的解明」, 秋山修志 (2013 年–2015 年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「時限機能付き薬剤輸送システムの開発」, 秋山修志 (2014 年–2016 年).

科研費新学術領域研究 (研究領域提案型), 「X 線小角散乱と液中高速 AFM の相補利用による分子時計の離合集散計測」, 秋山修志 (2014 年–2016 年).

科研費基盤研究(A), 「生物時計システムの周期と温度補償制御ロジックの構造化学的解明」, 秋山修志 (2017 年–2019 年).

科研費基盤研究(S), 「統合的多階層アプローチによるシアノバクテリア生物時計システムの新展開」, 秋山修志 (2017 年–2021 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 年からは基盤研究(S) 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) $\alpha\beta$ 型タンパク質構造のゼロからのデザイン；これまでに 2 次構造パターンやループの長さといった局所主鎖構造が 3 次構造トポロジーの決定に重要であることを発見し，それらの関係性を 3 つのルールとして体系化している。これまでに，これらのルールを用いることで 100 残基以下の様々なトポロジーと形状の $\alpha\beta$ 型タンパク質構造のデザインに成功してきた。今年度は，これらのルールがより大きなサイズのタンパク質をデザインする際においても有効であるかどうか検証するため，100 残基以上の大きさのタンパク質構造のデザインに取り組んだ。その結果，これら 3 つのルールのみでは不十分であり，ルールを用いて描いた主鎖構造設計図と，実際に主鎖構造を組み立てたときの 3 次構造の整合性を考慮する必要があることが明らかになった。これらを考慮して計算機でデザインしたタンパク質を大腸菌に組み込み発現・精製し，生化学実験によって折り畳み能を調べたところ，デザインしたタンパク質は安定な構造を形成していた。さらに，NMR により構造を決定したところ，計算機上で構築したデザインモデルと一致していた。
- b) 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， α ヘリカル構造は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。これまでに，一つの形状の α ヘリカル構造について，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。現在はこのデザインの X 線および NMR による構造解析，さらには他の形状を持つ α ヘリカル構造のデザインを行なっている。
- c) 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は，これら 20 種類のアミノ酸全てが必要な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すものである。現在は，NMR によりこの変異体の構造決定を行っている。
- d) 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。続いて、生化学実験によりデザインタンパク質の ATP 結合親和性の測定を行ったが、ATP に対して高い結合親和性を示さなかった。現在は、高い ATP 結合親和性を示すタンパク質のデザインに向けて、様々な方面から研究を行っている。

- e) 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、計算機デザインを行い、生化学実験によりデザインタンパク質のヘム結合能を調べたところ、ヘムに結合していることが明らかになった。
- f) 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. M. 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,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **114**, 10648–10653 (2017).

Y.-R. LIN, N. KOGA, S. M. VOROBIEV and D. BAKER, “Cyclic Oligomer Design with De Novo $\alpha\beta$ -Proteins,” *Protein Sci.* **26**, 2187–2194 (2017).

P. NORDENFELT, T. MOORE, S. MEHTA, J. KALAPPURAKKAL, V. S. SWAMINATHAN, N. KOGA, T. LAMBERT, D. BAKER, J. WATERS, R. OLDENBOURG, T. TANI, S. MAYOR, C. M. WATERMAN and T. SPRINGER, “Direction of Actin Flow Dictates Integrin LFA-1 Orientation during Leukocyte Migration,” *Nat. Commun.* **8**, 2047 (16 pages) (2017).

B-4) 招待講演

古賀信康, 「分子をデザインする」, 市民公開講座第 111 回分子科学フォーラム・特別編, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2017 年 2 月.

古賀信康, 「Rational design of protein molecules from structure to function」, 第 17 回日本蛋白質科学会ワークショップ「細胞内外で機能する人工蛋白質のボトムアップデザイン」, 仙台国際センター, 仙台, 2017 年 6 月.

古賀信康, 「タンパク質分子の構造から機能の合理設計」, 神戸大学先端融合科学シンポジウム「非共有結合系の分子科学：構造と機能」, 神戸大学理学部, 神戸, 2017 年 7 月.

古賀信康, 「ゼロからのタンパク質分子構造デザイン」, 第 7 回合成生物学シンポジウム, 神戸大学百年記念館六甲ホール, 神戸, 2017 年 8 月.

古賀信康, 「主鎖から合理設計するタンパク質分子」, 東京大学大学院工学系研究科化学生命工学専攻, 第 10 回 ChemBio ハイブリッドレクチャー, 東京大学武田ホール, 東京, 2017 年 9 月.

古賀信康, 「ゼロからのタンパク質分子構造デザイン」, 「細胞を創る研究会」I0.0 シンポジウムセッション (はま) ゼロから創る人工細胞, 京都教育文化センター, 京都, 2017 年 10 月.

古賀信康,「タンパク質分子の合理デザイン」,JST-CRDS ライフサイエンス・臨床医学分野生命工学区分俯瞰ワークショップ: 多階層研究の統合が拓くデザインバイオ〜予測に基づく生命分子・システムの設計に向けて〜, 市ヶ谷カンファレンスセンター, 東京・2017年10月.

小杉貴洋,“Design of ATP Binding Site from Scratch and in V1-ATPase,” 第17回日本蛋白質科学会年会, 仙台国際センター, 仙台, 2017年6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 27-29 年度分野別専門委員: タンパク質設計・ドラッグデザイン (2015-2017).

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 (2016.9.4).

創価大学大学院工学研究科勉強会 (創価大学大学院 (東京八王子市)) 講師 (2017.6.30).

B-10) 競争的資金

自然科学研究機構アストロバイオロジーセンタープロジェクト研究,「地球上に存在しないトポロジーを持つタンパク質分子の合理設計」, 古賀信康 (2017 年-2018 年).

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,「創って理解するモータータンパク質の動作原理」, 古賀信康 (2016 年-2019 年).

内閣府革新的研究開発推進プログラム (ImPACT),「タンパク質構造の合理的安定化手法の開発: β グルコシダーゼの耐熱化」, 古賀信康 (2017 年-2019 年).

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).

C) 研究活動の課題と展望

今年度は総勢 10 名で活動を行なった。それぞれのメンバーが計算および実験手法に習熟してきており, 研究結果を出すことに集中出来ている。研究は, タンパク質デザインと自然界のタンパク質構造の改造の 2 本柱で展開しており, それぞれ順調に結果が出始めている。今後の課題は, タンパク質デザイン手法を洗練させることで計算機デザインをより高速化する必要がある。

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) 光の状態の可視化
- c) スクイズド光生成
- d) 振動状態分光技術を応用した天文学機器の開発

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、定性的な範囲内で反転分布のないレーザー発振メカニズムに成功し、その量子凝縮体としての性質を明らかにすることに成功した。また、固体中のディラック電子を用いた量子制御に関する理論も提案し、トポロジカル絶縁体上で実現する方法を考案した。
- b) 分子をありのままに計測する手法の一つとして、分子の状態を光の状態に転写し、光を計測することが考えられる。そのため、光自身の持つ状態を光の空間自由度に転写することにより、可視化することが可能になる。これらの転写方法に対しての提案を行っている。エンタングルメント偏光状態に対して、可視化の技術だけでエンタングルメント判定が出来る条件を見つけ、光の伝搬位相であるゲイ位相も可視化することが出来ることを発見した。
- c) スクイズド光は位相計測において感度が高くなる手法として広く用いられているが、スクイズド光自体を発生するメカニズムを理論的に研究している。量子測定理論を応用し、疑似スクイズド光を発生させるメカニズムを提案することに成功した。また、この光を応用することで小さい領域での位相計測の感度を従来のものより良くすることが出来ることを見いだした。
- d) 振動状態分光を応用した天文学機器の開発を行っている。中赤外線領域における地上での天文学は、OH 夜光と呼ばれる昼間に蒸発した水蒸気の振動状態から得られる発光により、高視野の撮像が困難とされている。そのため、水の精密振動状態分光データを用いて、高視野を維持したまま OH 夜光のスペクトルを除去するためのフィルター設計を行っている。また、重力波天文学に関して、高精度の観測のために日本のKAGRAと呼ばれる光干渉計型重力波望遠鏡では懸架鏡の熱雑音を除去するために低温懸架技術開発を行っている。そのプロトタイプ機の作成に協力した。

B-1) 学術論文

- Y. SHIKANO**, “How to Realize One-Dimensional Discrete-Time Quantum Walk by Dirac Particle,” *Interdiscip. Inform. Sci.* **23**, 33–37 (2017).
- M. TUKIAINEN, H. KOBAYASHI and Y. SHIKANO**, “Quantification of Concurrence via Weak Measurement,” *Phys. Rev. A* **95**, 052301 (6 pages) (2017).

F. MATSUOKA, A. TOMITA and Y. SHIKANO, “Generation of Phase-Squeezed Optical Pulses with Large Coherent Amplitudes by Post-Selection of Single Photons and Weak Cross-Kerr Nonlinearity,” *Quant. Stud.: Math. Found.* **4**, 159–169 (2017).

T. HORIKIRI, T. BYRNES, K. KUSUDO, N. ISHIDA, Y. MATSUO, Y. SHIKANO, A. LOFFLER, S. HOFLING, A. FORCHEL and Y. YAMAMOTO, “Highly Excited Exciton-Polariton Condensates,” *Phys. Rev. B* **95**, 245122 (5 pages) (2017).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. SHIKANO, “Toward tangible quantum nature,” *AIP Conf. Proc.* **1871**, 020001 (7 pages) (2017).

B-3) 総説, 著書

鹿野 豊, 野尻美保子, 高安美佐子, 田中忠芳, 「物理と社会シンポジウム「ダイバーシティの中での物理教育」報告」, 大学の物理教育 **23**, 48–52 (2017).

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)」, 物性研究 **6**, 064210 (10 pages) (2017).

B-4) 招待講演

Y. SHIKANO, “Introduction to discrete-time quantum walk,” 8th Jagna International Workshop: Structure, Function, and Dynamics: from nm to Gm, Research Center for Theoretical Physics (RCTP), Jagna, Bohol (Philippines), January 2017.

鹿野 豊, 「弱測定を用いた量子状態推定」, 東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究「量子測定の物理と情報通信」, 東北大学電気通信研究所, 仙台, 2017 年 3 月.

鹿野 豊, 「自己双対性のあるコインを用いた離散時間量子ウォーク」, 第 72 回日本物理学会年次大会「量子ウォークの深化とその周辺」(領域 11, 領域 1), 大阪大学豊中キャンパス, 大阪, 2017 年 3 月.

Y. SHIKANO, “Discrete-Time Quantum Walk in Solid-State System,” 5th Awaji International Workshop on “Electron Spin Science and Technology: Biological and Materials Science Oriented Applications,” Awaji Yumebutai International Conference Center, Awaji (Japan), June 2017.

鹿野 豊, 「量子ウォークの実現方法」, ドレスト光子・光合成・量子ウォーク, ドレスト光子研究起点, 横浜, 2017 年 7 月.

Y. SHIKANO, “Quantum Dynamical Simulation by Quantum Walk,” 6th International Conference on New Frontiers in Physics (ICNFP 2017), Kolymbari, Crete (Greece), August 2017.

Y. SHIKANO, “Visualizing Quantum States,” Quantum Information and Quantum Simulation Day (QIQSD), Universite Pierre et Marie Curie, Paris (France), September 2017.

Y. SHIKANO, “Gender role in Japan from Gender Summit 10,” 19th SPVM National Physics Conference, University of San Carlos, Cebu (Philippines), October 2017.

Y. SHIKANO, “Patter Formation in Reaction-Diffusive Vicsek Model,” 5th International Complex Systems Meeting in 19th SPVM National Physics Conference, University of San Carlos, Cebu (Philippines), October 2017.

鹿野 豊, 「Visualizing Optical States」, IMI Colloquium, 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所, 福岡, 2017 年 11 月.

Y. SHIKANO, “Nonlinear Quantum Walk,” NITheP Research Workshop: Open Quantum Walks, Salt Rock Hotel, Salt Rock, KZN (South Africa), November 2017.

Y. SHIKANO, “Quantum Phase through Quantum Tunneling,” 3rd International Conference on Quantum Foundations, Panache Hotel, Patna (India), December 2017.

Y. SHIKANO, “Quasi-Squeezed Coherent State,” International Workshop on Quantum Information, Quantum Computing and Quantum Control 2017, Shanghai University, Shanghai (China), December 2017.

B-6) 受賞, 表彰

鹿野 豊, 平成25年度公益財団法人光科学技術研究振興財団研究表彰 (2014).

Y. SHIKANO, 2013 Quantum Information Processing Top Reviewers 受賞 (2014).

Y. SHIKANO, FQXi Essay Contest “It from Bit or Bit from It” Fourth Prize (2013).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

電子情報通信学会量子情報技術特別研究専門委員会委員 (2017–).

科学技術振興機構主催 Gender Summit 10 組織・運営委員会部会委員 (2016–2017).

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 (2014–2017).

日本物理学会男女共同参画推進委員会委員 (2014–2017).

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 (2015–2016).

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

Atom, Editorial Board Member (2017–).

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

東京工業大学博士後期課程全学説明会 (2017).

鎌倉学園高校アカデミックキャンプ (2017).

Fusion フェスタ in Tokyo 2017,「重力波で観る天体観測の夜明け」(2017).

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

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(C),「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

2017年3月で若手独立フェローの5年の任期を終えました(実際には1ヶ月強の延長申請があるが)。着任当初から比べると実験と理論との協奏による光物性理論および量子光学分野における研究活動が出来た一方で, 研究成果を深化させるフェーズを迎えることはこの5年の任期中にはなかった。独立した研究室を主宰するということで, 海外からのインターンシップ学生を積極的に迎え入れ, これまでの専門分野に立脚した研究テーマを広げることが出来た一方, これまで培ってきた技法を基に始めた新しい研究の方向性に関しては, 研究テーマの方向性, 魅力に気づいたタイミングで研究室をたたまなくてはならなくなってしまった。今後, これまで得た知見を現在の職位と職務内容の中で, どれくらいのスピード感をもって, また, どのような形で研究成果に結びつけることが出来るのかということが課題である。更には, 分子研在職中に培った多くの知見・人脈を基にし, 独自のサイエンス像を描いていくことが今後の個人的な課題である。

*) 2017年4月1日東京大学先端科学技術研究センター特任准教授

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⁻ 導電性酸水素化物のイオン導電機構解析
- c) 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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) H⁻ 導電体の物質探索が進展し，新たに $\text{Ba}_2\text{LiH}_{3-2x}\text{O}_{1+x}$ と Ba_2MHO_3 ($M = \text{Sc}, \text{Y}$) の合成に成功した。 $\text{Ba}_2\text{LiH}_{3-2x}\text{O}_{1+x}$ は，300 °C で $10^{-2} \text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$ を越える極めて高い H⁻ 導電特性を示した。一方， Ba_2MHO_3 ($M = \text{Sc}, \text{Y}$) 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) $\text{La}_{2-x-y}\text{Sr}_{x+y}\text{LiH}_{1+x+y}\text{O}_{3-y}$ 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， $\text{H}_2 + 2\text{e}^- \rightleftharpoons 2\text{H}^-$ の反応が Pd 電極で可逆的に進行することを確認した。
- c) H⁻ 導電体を電解質に用いた固体デバイスを作製し，アノード電極での水素化・脱水素化反応を検討し，高速で水素化反応が進行することを見出した。

B-1) 学術論文

K. SOMA, S. KONINGS, R. ASO, N. KAMIUCHI, G. KOBAYASHI, H. YOSHIDA and S. TAKEDA*, “Detecting Dynamics Responses of Materials and Devices under an Alternating Electric Potential by Phase-Locked Transmission Electron Microscopy,” *Ultramicroscopy* **181**, 27–41 (2017).

A. WATANABE, G. KOBAYASHI*, N. MATSUI, M. YONEMURA, A. KUBOTA, K. SUZUKI, M. HIRAYAMA and R. KANNO, “Ambient Pressure Synthesis and H⁻ Conductivity of $\text{LaSrLiH}_2\text{O}_2$,” *Electrochemistry* **85**, 88–92 (2017).

B-3) 総説，著書

小林玄器，「ヒドリドイオン導電体の開発と新型電池への応用可能性」，*応用物理* **86(12)**, 1084–1087 (2017).

小林玄器，「ヒドリドイオン導電性酸水素化物」，*セラミックス* **52(12)**, 829–832 (2017).

B-4) 招待講演（* 基調講演）

G. KOBAYASHI, “Hydride Ion Conduction in Oxyhydrides,” 3rd Solid-State Chemistry & Ionics (SCI) workshop: Bulk diffusion and surface of oxides, Kyusyu University, Fukuoka (Japan), November 2017.*

小林玄器，菅野了次，「ヒドリドイオン導電性酸水素化物の開発」，平成 29 年度物質科学研究会，フクラシア八重洲会議室 K，東京，2017 年 10 月.*

小林玄器，「ヒドリドイオン導電体の開発と蓄電・発電デバイスへの応用可能性」，第 7 回 CSJ 化学フェスタ 2017，タワーホール船堀，東京，2017 年 10 月.

小林玄器,「H⁻ 導電性酸水素化物の開発と電気化学デバイスへの応用可能性」, 第13回固体イオニクスセミナー, 宮崎フェニックスシーガイアリゾート, 宮崎, 2017年9月.*

G. KOBAYASHI, “Synthesis and H⁻ Conductivity of Ba-Li oxyhydride,” IUMRS-ICAM 2017 15th International Conference of Advanced Materials, Kyoto (Japan), August 2017.

G. KOBAYASHI, “Study on Hydride Ion Conductive Oxyhydrides,” 2017 Hydrogen Metal Systems Gordon Research Conference, Making the Hydrogen Economy Work—New Developments and Recent Applications, Easton, MA (U.S.A.), July 2017.*

G. KOBAYASHI, “Relationship between anion arrangement and H⁻ conductivity in La-Sr-Li oxyhydride system,” 21st International Conference on Solid State Ionics, Padua (Italy), June 2017.

G. KOBAYASHI, “Study on H⁻ Conductive Oxyhydrides for Next-Generation Battery Systems,” 21st International Conference on Solid State Ionics, Padua (Italy), June 2017. (Final selection for The ISSI Young Scientist Award)

小林玄器,「ヒドリドイオン導電性酸水素化物の開発」, 第2回固体化学フォーラム, 東北大学金属材料研究所, 仙台, 2017年6月.

G. KOBAYASHI, “Hydride Ion Conduction Oxyhydrides,” 8th International Conference on Electroceramics, Nagoya (Japan), May 2017.

菅野了次, 小林玄器,「ヒドリドイオンが固体中を動く——新物質創成と電気化学デバイスへの期待」, 日本化学会第97春季年会, 慶應義塾大学, 横浜, 2017年3月.

小林玄器,「ヒドリドイオン導電性酸水素化物の物質開発」, 第163回アドバンスト・バッテリー技術研究会「ポスト電池討論会」, 大阪科学技術センター, 大阪, 2017年3月.*

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体の開発」, 2016年度量子ビームサイエンスフェスタ, つくば国際会議場, つくば, 2017年3月.

小林玄器,「ヒドリドイオン導電性酸水素化物の物質開発」, Workshop on Materials Science under Ultra-High Pressure 2017, 愛媛大学, 松山, 2017年3月.

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」, 日本技術士会化学部会講演会, 日本技術士会館, 東京, 2017年1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 (2013).

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).

第 58 回高压討論会実行委員 (2017).

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」, 2017 年 10 月 14 日.

B-10) 競争的資金

科研費新学術領域「複合アニオン化合物の創製と新機能」(公募研究), 「ヒドリド超イオン導電体の物質探索」, 小林玄器 (2017 年–2018 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).

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(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).

C) 研究活動の課題と展望

H⁻ 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

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, Ba₂LiH_{3-2x}O_{1+x} の合成に成功したことで大きく進展した。Ba₂LiH_{3-2x}O_{1+x} が 300–400 °C で示す H⁻ 導電特性 ($\sigma \geq 10^{-2} \text{ Scm}^{-1}$) 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 °C) で優れた導電特性が得られない。これに対し, H⁻ はバルク内で欠陥を介して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と考えられる。今後は, 今中性子準弾性散乱, 固体 NMR, 高温中性子回折などを組み合わせ, H⁻ のイオン導電機構を明らかにしたい。

H⁻ のイオン導電現象の電池反応への応用に関しては, 合成した酸水素化物を固体電解質に用いた電気化学デバイスを作製し, 水素化・脱水素化反応への応用を検討した。H⁺ を用いた従来技術と比較して高効率に反応が進行することが明らかとなり, 水素化・脱水素化反応における H⁻ 利用の優位性が認められた。今後は, 反応の原理検証, デバイス構成の最適化, H⁻ が関与する素反応の開拓を目指す。

機能分子システム創成研究部門

山 本 浩 史（教授）（2012 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：分子物性科学

A-2) 研究課題：

- a) 有機モットFET（FET＝電界効果トランジスタ）
- b) 有機超伝導FET
- c) 超分子ナノワイヤー

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機モット絶縁体 κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]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。本年は単分子膜への化学ドーピングによって単分子膜モットFETの作製に成功し、両極性動作や電界効果ドーピングによるバンドギャップの異常を見いだした。また、 κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂などの類縁物質についてもFET作製を行い、その動作を計測した。
- b) 上記モット絶縁体のモットハバードギャップを、歪みや静電キャリアドーピングで小さくしていくと、低温において超伝導状態が実現することが予想されている。そこで基板からの歪みを制御することによって極限まで電荷ギャップを小さくしたFETを作製し、これにゲート電圧を印加することによって、電界誘起超伝導を実現した。これまで開発してきたプラスチック基板の曲げによるバンド幅制御と、イオン液体ゲートトランジスタによるフィリング制御とを組み合わせることによって、モット絶縁体近傍の超伝導相がどのように分布しているかを検証した。その結果、pドープ領域とnドープ領域で、大きな非対称性が確認された。これは以前、Al₂O₃/SrTiO₃基板を用いた際に見られた非対称性と基本的に合致しているだけでなく、これをさらにバンド幅制御して三次元相図の完成に近づけるものである。
- 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

E. TISSEROND, J. N. FUCHS, M. O. GOERBIG, P. AUBAN-SENZIER, C. MEZIERE, P. BATAIL, Y. KAWASUGI, M. SUDA, H. M. YAMAMOTO, R. KATO, N. TAJIMA and M. MONTEVERDE, “Aperiodic Quantum Oscillations of Particle-Hole Asymmetric Dirac Cones,” *Europhys. Lett.* **119**, 67001 (2017).

F. YANG, M. SUDA and H. M. YAMAMOTO, “Fabrication and Operation of Monolayer Mott FET at Room Temperature,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **90**, 1259–1266 (2017). (Selected for BCSJ Award Article)

H. YAMAKAWA, T. MIYAMOTO, T. MORIMOTO, T. TERASHIGE, H. YADA, N. KIDA, M. SUDA, H. M. YAMAMOTO, R. KATO, K. MIYAGAWA, K. KANODA and H. OKAMOTO, “Mott Transition by an Impulsive Dielectric Breakdown,” *Nat. Mater.* **16**, 1100–1105 (2017).

M. SUDA, N. TAKASHINA, S. NAMUANGRUUK, N. KUNGWAN, H. SAKURAI and H. M. YAMAMOTO, “N-Type Superconductivity in an Organic Mott Insulator Induced by Light-Driven Electron-Doping,” *Adv. Mater.* **29**, 1606833 (5 pages) (2017).

Y. SATO, Y. KAWASUGI, M. SUDA, H. M. YAMAMOTO and R. KATO, “Critical Behavior in Doping-Driven Metal–Insulator Transition on Single-Crystalline Organic Mott-FET,” *Nano Lett.* **17**, 708–714 (2017).

B-4) 招待講演

H. M. YAMAMOTO, “Strongly Correlated Electrons in Organic Field-Effect- Transistors,” IGER symposium, Nagoya (Japan), December 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Organic superconducting FET as an ideal transistor,” RIES-Hokudai symposium, Sapporo (Japan), November 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Field-Effect-Transistor with Electric-Field-Induced Phase Transitions,” RSC Materials Horizons Symposium, Kyoto (Japan), November 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Field-Effect-Transistor Driven by Electronic Phase Transition,” NIP-RIKEN Joint Workshop, Manila (Philippine), November 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Phase Transitions at an Organic Field-Effect-Transistor Interface,” MRS-Thailand, Chiang Mai (Thailand), November 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Phase Transitions at an Organic Field-Effect-Transistor Interface,” NANOTEC-IMS Joint Workshop, Bangkok (Thailand), October 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Strongly-correlated electrons in 2D molecular interface,” CEMS Topical Meeting, Wako (Japan), July 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Novel organic field-effect-transistor with superconducting channel,” 2017 Korea-Japan Molecular Science Symposium, Busan (Korea), July 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Field-Effect-Transistor Driven by Electronic Phase Transition,” M&BE9, Kanazawa (Japan), June 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Field-Effect-Transistor with Superconducting Channel,” Okazaki-Strasbourg Symposium, Strasbourg (France), May 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Superconducting transition at an organic field-effect-transistor interface,” WCSM-2017, Bangkok (Thailand), March 2017.

山本浩史, 「分子性固体中の強相関電子を用いた電界効果トランジスタ」, 分子アーキテクニクス研究会, 松山, December 2017.

山本浩史,「電界誘起超伝導－絶縁体転移現象と理想FET」, 電子情報通信学会(チュートリアルセッション), 名古屋, March 2017.

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).

須田理行, 日本化学会進歩賞 (2017).

須田理行, 自然科学研究機構若手研究者賞 (2017).

須田理行, 分子科学研究奨励森野基金 (2017).

須田理行, 凝縮系科学賞 (2017).

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副代表 (2017-).

日本化学会東海支部常任幹事 (2015-2016).

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-).

学会の組織委員等

The 12th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets (ISCOM2017) 事務局長 (2017).

アジア科学セミナー組織委員 (2014-2015).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会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 (2014-2017).

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」, 2017年 12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」, 2017年 8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かけ研究,「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 (2017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。さらに今後は分子を用いたスピントロニクスデバイスについても開発を進める。

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) リレン化合物のフッ素化とオプトエレクトロニクスへの応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 芳香族化合物の完全フッ素化は、水素をフッ素に変換するシンプルな手法で、p 型半導体を n 型半導体に変換できる。これにより、分子量は大きく増加するが、融点、昇華温度、安定性などはあまり変化しない。また、ペンタセン ($C_{22}H_{14}$) とフッ素化ペンタセン ($C_{22}F_{14}$) のように、分子のサイズや対称性もよく似ている。このため、比較研究が容易で、高精度な光電子分光などを通じて、固体物性の深い理解に寄与している。本研究では、新たなターゲットとして、リレン化合物の完全フッ素化を目指している。リレン化合物は、ナフタレン ($C_{10}H_8$) をモノマーとし、1,8 位と 4,5 位をつないでできたオリゴマーである。2 量体のペリレン ($C_{20}H_{12}$)、3 量体のターリレン ($C_{30}H_{16}$)、4 量体のクォーターリレン ($C_{40}H_{20}$) が知られている。5 量体 (ペンタリレン) 以上は、難溶性のため、可溶化のアルキル基が必要となる。8 量体 (オクタリレン) まだが、誘導体として報告されている。最近、有機結晶中でのシングレットフィッション (SF, 一重項分裂) の有望な構造として、ターリレン、クォーターリレン、およびペンタリレンが理論研究者によって提案されている。SF は二つの分子間で、一つのシングレット (一重項) と一つの基底状態が、二つのトリプレット (三重項) に変換する過程である。トリプレットのエネルギーが、シングレットのエネルギーの半分以下であることが望ましい。このような条件を満たす分子は少なく、200% 近いトリプレット量子収率を示すものは、テトラセン、ジフェニルイソベンゾフラン、カロテノイドなどに限られていた。2006 年に、次世代の太陽電池として、この SF を利用すると効率が飛躍的に向上するという提案がなされた。これは、一つの光子から二つのキャリアが生まれるため、光電流が 2 倍になるという原理である。これ以降、SF のメカニズム解明と、トリプレット量子収率の高い色素の探求が始まった。前者は、特に、溶液中での分子内 SF の研究が盛んである。最近では、テトラセンやペンタセンなどのアセン化合物の 2 量体、ペリレンやターリレンなどのリレン化合物の 2 量体が次々に合成され、200% 近いトリプレット量子収率が報告されている。一つのシングレットから二つのトリプレットへ移行するときに、電荷移動状態 (CT) を経るルートと、直接のルートが理論的に提案されているが、両方の実験結果が出ており、議論が続いている。固体中での分子間 SF としては、最近、ターリレン誘導体の微結晶薄膜で 200% 近いトリプレット量子収率が報告されている。クォーターリレンに関しては、まだ SF の報告はない。本研究では、リレン化合物 (nR : $n = 2, 3, 4, \dots$) を完全にフッ素化した PF_nR ($n = 2, 3, 4, \dots$) を合成し、SF の研究に供したい。DFT 計算によると、平面の nR と異なり、 PF_nR はナフタレン環が 25 度ねじれている。このため、 PF_nR の溶解性は向上するものと考えられ、難溶性の nR より取り扱いやすいことが期待される。フッ素化ターリレン (PF_3R , $C_{30}F_{16}$) の LUMO の値は、 C_{60} のそれとほぼ同じであり、十分に電子注入が可能である。これらを n 型半導体として、有機太陽電池の検討を行う。今年度は、ナフタレンモノマーを合成し、ペリレンの完全フッ素化に取り組んでいる。

B-1) 学術論文

Y. SAKAMOTO and T. SUZUKI, “Perfluorinated and Half-Fluorinated Rubrenes: Synthesis and Crystal Packing Arrangements,” *J. Org. Chem.* **82**, 8111–8116 (2017).

B-7) 学会および社会的活動

その他

出前授業「おもしろい形の分子を作る」岡崎市立東海中学校 (2017).

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

多大な貢献をしてくれた阪元助教が3月に退職し、グループの再立ち上げが急務となった。幸いなことに、榎山准教授がフッ素化リレン化合物の合成に興味をもってくれ、共同研究を行うこととなった。インターンシップの学生が積極的に取り組んでくれたおかげで、モノマー合成に関する多くの知見が得られた。榎山准教授と科研費や研究費公募に、代表者あるいは分担者として申請している。また、榎山グループが発見した特異な転位反応のメカニズムを、HPC システムズの本田氏と協力して、DFT 計算によって解明することができた。今後とも、榎山グループおよび所外の研究者との共同研究を通じて、グループの再構築に努めていきたいと思う。

6-7 メゾスコピック計測研究センター

繊細計測研究部門

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プラズモン物質の特性に関する研究への展開
- b) ナノ構造物質におけるキラリティと局所的な光学活性
- c) 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。各種形状貴金属ナノ構造体の分光及びダイナミクスの近接場分光イメージング計測を行い、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。その展開の一つとして近接場円二色性イメージング装置を開発し、金属ナノ構造の局所光学活性の研究を行っている。
- b) キラルな構造を持つ金ナノ構造体（主に 2 次元構造）を電子線描画法で作製し、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すこと、また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、国内外の幾つかの研究グループ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。
- c) 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る。また光と物質のキラリティもその挙動に影響を及ぼすことが予想される。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

M. K. HOSSAIN, M. KITAJIMA, K. IMURA and H. OKAMOTO, “Interstitial-Dependent Enhanced Photoluminescence: A Near-Field Microscopy on Single Spheroid to Dimer, Tetramer, and Few Particles Gold Nanoassembly,” *J. Phys. Chem. C* **121**, 2344–2354 (2017).

H. MIZOBATA, K. UENO, H. MISAWA, H. OKAMOTO and K. IMURA, “Near-Field Spectroscopic Properties of Complementary Gold Nanostructures: Applicability of Babinet’s Principle in the Optical Region,” *Opt. Express* **25**, 5279–5289 (2017).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, “Generation of chiral optical near-fields with non-chiral metallic nanostructures and linearly polarized light,” *Proc. SPIE* **10252**, 1025214 (3 pages) (2017).

B-4) 招待講演

H. OKAMOTO, “Time- and Space-Domain Structures of Optical Fields on Metal Nanostructures,” JSPS-EPSRC Symposium on Materials Science Pioneered by Structured Light, London (U.K.), Januray 2017.

成島哲也, 「近接場 CD ナノイメージングによる局所キラリティー観察」, 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, 神戸芸術センター, 神戸, 2017 年 1 月.

T. NARUSHIMA, “Circular Dichroism Imaging with Far- and Near-Field Detection,” Hiroshima International Workshop on Circular Dichroism Spectroscopy 2017, Hiroshima (Japan), February 2017.

岡本裕巳, 「金属ナノ構造における局所的な光のキラリティーのイメージングと操作」, 第 64 回応用物理学会春季学術講演会, 横浜, 2017 年 3 月.

H. OKAMOTO, “Recent Developments in Plasmonics: Introduction,” 8th CSJ-RSC Joint Symposium, 97th Annual Meeting of The Chemical Society of Japan, Yokohama (Japan), March 2017.

H. OKAMOTO, “Local optical activity of nanomaterials (ナノ物質の局所的光学活性),” 日本化学会第 97 春季年会特別企画「配位アシンメトリー：非対称な構造と空間の科学」, 横浜, 2017 年 3 月.

岡本裕巳, 「プラズモンの近接場光学イメージング：光場構造, 波束伝搬ダイナミクス, キラリティーの実空間観察」, 新世代研究所界面ナノ科学研究会, 東京, 2017 年 3 月.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA and Y. NISHIYAMA, “Local Optical Activity Imaging of Metal Nanostructures and Structured Chirality,” 2017 Korea-Japan Molecular Science Symposium “Frontiers in Molecular Science: Structure, Dynamics, and Function of Molecules and Complexes,” Busan (Korea), July 2017.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA and Y. NISHIYAMA, “Imaging of Local Chirality with Near-Field Microscopy,” The 11th Asia-Pacific Conference on Near-field Optics (APNFO11), Tainan (Taiwan), July 2017.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA and Y. NISHIYAMA, “Near-Field Imaging of Chiral Optical Fields on Plasmonic Materials,” The 8th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META’17), Incheon (Korea), July 2017.

成島哲也, 「ナノ構造物質の局所キラリティーとその光学的・化学的応用展望」, 2017 年真空・表面科学合同講演会, 葉山, 2017 年 8 月.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA, Y. NISHIYAMA and T. NARUSHIMA, “Imaging Chiral Plasmons,” JSAP-OSA Joint Symposia, The 78th JSAP Autumn Meeting 2017, Fukuoka (Japan), September 2017.

T. NARUSHIMA, “Microscopic Study on Optical Activity Localized in Materials to Explore Hierarchical Chirality in Various Scales,” The 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8), Tsukuba (Japan), October 2017.

S. HASHIYADA, “Visualization of Chiral Light Confined in Nano Space,” IMS Symposium “Cutting-Edge Researches in Coordination Chemistry and Photochemistry,” Okazaki (Japan), November 2017.

B-5) 特許出願

特願 2016-226414, 「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), 2016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, ナノオブティクス賞 (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, ナノオブティクス賞 (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).

4th Optical Manipulation Conference, Optics & Photonics International Congress 2017, Program 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 (2013–2017).

日本学術会議連携会員 (2017–).

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

関西学院大学大学院理工学研究科,「化学特殊講義XI」, 2017年9月11日-12日.

B-10) 競争的資金

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次元高精度歪み検出系開発」, 成島哲也 (2007年).

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

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).

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).

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-2017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-2017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-2017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-).

科研費基盤研究(B),「階層を越えた物質のキラリティの3次元分析:汎用偏光二色性分光分析イメージング」, 成島哲也 (2017年-).

科研費研究活動スタート支援,「対称金属ナノ構造体と直線偏光を用いた不斉分子の高感度検出」, 橋谷田俊 (2017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、分子研着任当初の数年間では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いた。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、多くの追従研究を生んだと考えている。その後研究を次のフェーズに進め、時間分解近接場分光では、10fs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。その更なる展開のアイデアもあるが、非常に高度な技術を要する実験であり、困難が大きい。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、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。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。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、国内外との共同研究も開始している。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を持たれ、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。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。昨年度に関連する新学術領域研究が発足したことを契機に、光圧(勾配力、散乱力)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。

平等拓範（准教授）（1998年2月1日着任）

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

A-2) 研究課題：

- a) マイクロドメイン構造制御に関する研究
- b) マイクロドメイン光制御に関する研究
- c) マイクロ固体フォトリニクス展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

分子科学に関連して重要な波長域にレーザーの高輝度光を展開する為の固体レーザー，非線形波長変換法につき包括的な研究を進めている。特に近年のマイクロ固体フォトリニクス [マイクロチップ Nd:YVO₄ レーザー（1990年），Yb:YAG レーザー（1993年），セラミックレーザー（1997年），バルク擬位相整合（QPM）素子：大口径周期分極反転 MgO:LiNbO₃（PPMgLN）（3mm 厚 2003年，5mm 厚 2005年，10mm 厚 2012年）] を先導すると共に，共同研究を通し赤外域分子分光などにその展開を図っている。国際誌の雑誌編集，特集号企画から国際シンポジウム・会議の企画提案，開催に積極的に参加する事でその成果を内外に発信している。

- a) マイクロドメイン構造，界面（粒界面，結晶界面，さらには自発分極界面）を微細に制御する固相反応制御法の研究として，レーザーセラミックス，レーザー素子，分極反転素子の作製プロセスの高度化を図っている。特に，固体レーザーの発光中心である希土類イオンの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，新たなフォトリ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，YVO₄ の高熱伝導率特性の発見，実証に繋がったばかりでなく，マイクロ共振器の高輝度効果，レーザー利得と非線形光学過程の量子相関などの興味深い展開も見せている。特にレーザー科学発展の中で生じたパルスギャップ領域であるサブナノ秒からピコ秒の便利な光源開拓に関する貢献，パルスギャップレーザーによる新現象の解明などが期待できる。
- c) 開発した光素子を用いた新規レーザー，波長変換システムの開発と展開を図っている。これまでに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 μ m），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 μ m 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リニクスで実証した。アト秒発生に重要な中赤外 OPCPA では，LA-PPMgLN を用い波長 2.1 μ m にてパルス幅 15 fs を平均出力 10 W と，この領域で世界最大出力を達成した。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ある。また、LA-PPMgLNを用いてピコ秒領域で400 μJ に至る狭線幅THz波発生も可能となった。マンレー・ローによる量子限界を超える効率である。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

- R. DIAO, Z. LIU, F. NIU, A. WANG, T. TAIRA and Z. ZHANG**, “Compressed 6ps Pulse in Nonlinear Amplification of a Q-Switched Microchip Laser,” *Laser Phys.* **27**, 025102 (4 pages) (2016).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Model for the Polarization Dependence of the Saturable Absorption in Cr^{4+} :YAG,” *Opt. Mater. Express* **7**, 577–586 (2017).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Quasi Phase-Matched Quartz for Intense-Laser Pumped Wavelength Conversion,” *Opt. Express* **25**, 2369–2376 (2017).
- H. H. LIM and T. TAIRA**, “Sub-Nanosecond Laser Induced Air-Breakdown with Giant-Pulse Duration Tuned Nd:YAG Ceramic Micro-Laser by Cavity-Length Control,” *Opt. Express* **25**, 6302–6310 (2017).
- A. KAUSAS, P. LOISEAU, G. AKA, Y. ZHENG, L. ZHENG and T. TAIRA**, “Temperature Table Operation of YCOB Crystal for Giant-Pulse Green Microlaser,” *Opt. Express* **25**, 6431–6439 (2017).
- F. AHR, S. W. JOLLY, N. H. MATLIS, S. CARBAJO, T. KROH, K. RAVI, D. N. SCHIMRF, J. SCHULTE, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, A. R. MAIER and F. X. KARTNER**, “Narrowband Terahertz Generation with Chirped-and-Delayed Laser Pulses in Periodically Poled Lithium Niobate,” *Opt. Lett.* **42**, 2118–2121 (2017).
- L. ZHENG, A. KAUSAS and T. TAIRA**, “Drastic Thermal Effects Reduction Through Distributed Face Cooling in a High Power Giant-Pulse Tiny Laser,” *Opt. Mater. Express* **7**, 3214–3221 (2017).
- C. CANALIAS, S. MIROV, T. TAIRA and B. BOULANGER**, “Feature Issue Introduction: Shaping and Patterning Crystals for Optics,” *Opt. Mater. Express* **7**, 3466–3470 (2017).
- Y. SATO, J. AKIYAMA and T. TAIRA**, “Process Design of Microdomains with Quantum Mechanics for Giant Pulse Lasers,” *Sci. Rep.* **7**, 10732 (11 pages) (2017).
- K. NAWATA, S. HAYASHI, H. ISHIZUKI, K. MURATE, K. IMAYAMA, Y. TAKIDA, V. YAHIA, T. TAIRA, K. KAWASE and H. MINAMIDE**, “Effective Terahertz Wave Parametric Generation Depending on the Pump Pulse Width Using a LiNbO_3 Crystal,” *IEEE Trans. Terahertz Sci. Tech.* **7**, 617–620 (2017).
- R. MORIMOTO, T. GOTO, T. TAIRA, J. PRITCHARD, M. MINA, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, P. B. LIM, H. UCHIDA and M. INOUE**, “Randomly Polarised Beam Produced by Magnetooptically Q-Switched Laser,” *Sci. Rep.* **7**, 15398 (6 pages) (2017).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- A. KAUSAS, L. ZHENG, V. YAHIA and T. TAIRA**, “Structured Laser Gain-Medium by New Bonding for Power Micro-Laser,” *LASE, SPIE Photonics West 2017*, 10082-34 (2017).
- V. YAHIA and T. TAIRA**, “Compact Microchip-Seeded Multistage MOPA System for Laser Induced Breakdown Applications,” *Laser Display and Lighting Conference (LDC'17), OPIC'17*, LDC7-4 (2017).

- Y. SATO and T. TAIRA**, “Model for the Polarization Dependence of Saturable Absorption in Single-Crystalline Cr^{4+} :YAG,” *Laser Display and Lighting Conference (LDC'17), OPIC'17, ALPSp14-12* (2017).
- N. BIGLER, C. R. PHILLIPS, J. PUPEIKIS, L. GALLMANN, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and U. KELLER**, “High-Power Optical Parametric Chirped-Pulse Amplifier Operating at 2.2 μm ,” *CLEO 2017*, SM3I.2 (2017).
- T. IKEO, K. HAGITA, Y. ISHIKAWA, Y. HIGASHI, N. JIKUTANI, T. TAIRA and T. SUZUDO**, “Improvement the Optical-to-Optical Conversion Efficiency of Passively Q-Switched Micro-Laser Pumped by VCSEL Module,” *The 5th Laser Ignition Conference (LIC'17)*, LWA2.2 (2017).
- V. YAHIA and T. TAIRA**, “Multistage Amplification of Microchip Laser for Air Breakdown Experiments,” *The 5th Laser Ignition Conference (LIC'17)*, LWA2.3 (2017).
- H. LIM and T. TAIRA**, “Pulse-Width Scaling Law of Air-Breakdown for Laser Ignition Application,” *The 5th Laser Ignition Conference (LIC'17)*, LWA3.2 (2017).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Model for the Polarization Dependence of Saturable Absorption Characteristics in Cr^{4+} :YAG,” *The 5th Laser Ignition Conference (LIC'17)*, LWA3.3 (2017).
- R. MORIMOTO, T. GOTO, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, P. B. LIM, T. TAIRA, H. UCHIDA and M. INOUE**, “Epitaxially Grown Magnetic Garnet Film on Nd:YAG Substrate for Microchip Lasers,” *The 5th Laser Ignition Conference (LIC'17)*, LWA5.6 (2017).
- N. BIGLER, C. R. PHILLIPS, J. PUPEIKIS, L. GALLMANN, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and U. KELLER**, “Ultra-Broadband Optical Parametric Chirped-Pulse Amplifier Generating 9.1 W at 2.2 μm ,” *CLEO/Europe-EQEC 2017*, CF-4.2 (2017).
- H. LIM and T. TAIRA**, “Pulse-Width and Pulse-Energy Dependence of Sub-Nanosecond Laser Induced Air-Breakdown,” *CLEO/Europe-EQEC 2017*, CM-P.22 (2017).
- R. BHANDARI, N. ISHIGAKI, S. UNO, T. HIROKI, J. SAIKAWA, K. TOJO and T. TAIRA**, “Novel End-Pumping Method for Stable and Compact Microchip Laser,” *CLEO/Europe-EQEC 2017*, CA-P.34 (2017).
- A. KAUSAS, E. LAFITTE-HOUSSAT, P. LOISEAU, G. AKA, Y. ZHENG, L. ZHENG, V. YAHIA and T. TAIRA**, “Study of Giant-Pulse Microlaser Based on Type I SHG in YCOB Crystal,” *The 24th Congress of the International Commission for Optics (ICO-24)*, M1E-02 (2017).
- L. ZHENG and T. TAIRA**, “kHz Repetition Rate Giant-Pulse Green Laser from DFC-Microlaser,” *The 24th Congress of the International Commission for Optics (ICO-24)*, M1E-04 (2017).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Damage Threshold Evaluation by Bulk-Shaped Nonlinear and Laser Materials,” *The 24th Congress of the International Commission for Optics (ICO-24)*, Tu1D-06 (2017).
- R. MORIMOTO, T. GOTO, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, H. UCHIDA, T. TAIRA and M. INOUE**, “Epitaxial Growth of Ce Substituted Yttrium iron Garnet Film on Nd:YAG Substrate,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, JM5A.8 (2017).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Study of Saturable Absorption in Cr^{4+} :YAG Ceramics for the Efficient Q-Switched Laser Action,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, JTu2A.19 (2017).
- H. LIM and T. TAIRA**, “Giant-Pulse Width Tunable Nd:YAG Ceramic Microchip Laser and Smplifier for Dmart Ignition,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, JTu2A.42 (2017).

V. YAHIA, L. ZHENG and T. TAIRA, “>200 mJ High-Brightness Dub-ns Micro-Laser-Based Vcompact MOPA,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATTh1A.5 (2017).

L. ZHENG and T. TAIRA, “High Damage-Resistant Coating Solution for High-Field Ceramics Laser,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, JTh2A.3 (2017).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Laser Damage Threshold Evaluation of Nonlinear Crystal Quartz for Sub-Nanosecond Pulse Irradiation,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, JTh2A.12 (2017).

A. KAUSAS, L. ZHENG and T. TAIRA, “CW Operation of Distributed Face Cooling Chip for Tiny Integrated Lasers,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, JTh2A.17 (2017).

B-3) 総説, 著書

L. ZHENG and T. TAIRA, “Over 0.5 MW Green Laser from Sub-Nanosecond Giant Pulsed Microchip Laser,” *Proc. of SPIE* **9730**, 97301A (4 pages) (2016).

Y. SATO and T. TAIRA, “Numerical Model for Thermal Parameters in Optical Materials,” *Proc. of SPIE* **9893**, 98930F (6 pages) (2016).

Y. JEONG, C. KRANKEL, A. GALVANAUSKAS, K. SCHEPLER, T. TAIRA and S. JIANG, “Focus Issue Introduction: Advanced Solid-State Lasers (ASSL) 2016,” *Opt. Express* **25**, 8604–8610 (2017). (Opening Article)

A. KAUSAS, L. ZHENG and T. TAIRA, “Structured Laser Gain-Medium by New Bonding for Power Micro-Laser,” *Proc. of SPIE* **10082**, 100820Z (4 pages) (2017).

平等拓範, 「革新的レーザー点火システムの開発」, *日本燃焼学会誌* **59**, 157–163 (2017).

軸谷直人, 泉谷一磨, 沼田雅之, 大倉佑介, 原田慎一, 新井伸幸, 池田圭介, 佐々木譲, 萩田健太郎, 池應敏行, 常包正樹, 平等拓範, 鈴木 剛, 「レーザー点火向け高出力 VCSEL モジュール」, *日本燃焼学会誌* **59**, 164–171 (2017).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

平等拓範, 「ジャイアント・マイクロフォトンクスによる超小型パルスレーザーの開発」, レーザー学会学術講演会第37回年次大会, 徳島, 2017年1月.

平等拓範, 「超小型高輝度レーザーの最新動向」, 日亜化学工業(株), 徳島, 2017年1月.

平等拓範, 「国際会議報告 Photonics West 2017 報告」, 光産業技術振興協会, 第4回光材料・応用技術研究会, 東京, 2017年3月.

後藤太一, 森本凌平, プリチャード ジョン, 高木宏幸, 中村雄一, リム パンボイ, 田裕久, ミナ マニ, 平等拓範, 井上光輝, 「磁気ドメインを利用した薄膜Qスイッチレーザーの開発」, 第64回応用物理学会春季学術講演会(講演奨励賞受賞記念講演), 横浜, 2017年3月.

平等拓範, 「ジャイアントマイクロフォトンクスによるユビキタス・パワーレーザー」, 第64回応用物理学会春季学術講演会, 横浜, 2017年3月.

平等拓範, 「ジャイアントパルスレーザーの可能性」, 科学技術交流財団第8回「レーザー利用革新的材料開発研究会」, 名古屋市, 2017年3月.

平等拓範, 「LD 励起パワーレーザー」, 光・量子ビーム科学合同シンポジウム2017, 大阪, 2017年5月.

T. TAIRA and H. ISHIZUKI, “Large Aperture Quasi-Phase Matched Nonlinear Material for Functional Power Lasers,” *CLEO 2017*, San Jose (U.S.A.), May 2017.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics for Ubiquitous Power Lasers,” The 18th International Symposium on Laser Precision Microfabrication (LPM), Toyama (Japan), June 2017.* (Plenary Talk)

T. TAIRA, “Ubiquitous Power Lasers from Giant Micro-Photonics,” Sigma-Tech Days 2017, Limoges (France), June 2017.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics Toward Innovative Ignition,” The 5th Laser Ignition Conference (LIC’17), Bucharest (Romania), June 2017.

平等拓範, 「1.5 μ 帯アイセーフジャイアントパルスマイクロチップレーザー」, 月刊オプトロニクス特集連動セミナー, 東京, 2017年7月.

F. X. KAERTNER, K. RAVI, S. W. JOLLY, F. AHR, D. ZHANG, X. WU, M. FAKHARI, H. CANKAYA, A.-L. CALENDRON C. ZHOU, F. LEMERY, W. QIAO, R. W. HUANG, S. CARBAJO, D. N. SCHIMPF, A. R. MAIER, M. HEMMER, L. ZAPATA, O. D. MUECKE, G. CIRMI, A. FALLAHI, N. H. MATLIS, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Terahertz Accelerator Technology,” Nonlinear Optics (NLO), Hawaii (U.S.A.), July 2017.

平等拓範, 「マイクロチップレーザーの開発」, ImPACT プログラム「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」第3回シンポジウム, 東京, 2017年7月.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics for Integrated Power Laser,” 5th IAPLE Annual Conference (IAPLE 2017), Kos (Greece), July–August 2017.* (*Plenary Keynote*)

平等拓範, 「マイクロチップレーザーの特徴と応用」, 公益財団法人浜松地域イノベーション推進機構フォトンバレーセンター, 光産業創成大学院大学, 公益財団法人浜松地域イノベーション推進機構フォトンバレーセンター委託事業平成29年度第1回光を利用したものづくりに関するセミナー, 浜松, 2017年8月.

平等拓範, 「国際会議CLEO2017報告」, 光産業技術振興協会第2回光材料・応用技術研究会, 東京, 2017年9月.

T. TAIRA, “Ubiquitous Power Lasers from Giant Micro-Photonics,” International Conference on Laser Ablation (COLA 2017), Marseille (France), September 2017.

平等拓範, 「マイクロドメイン制御によるジャイアントパルス小型レーザー」, 第30回日本セラミックス協会秋季シンポジウム, 神戸, 2017年9月.

平等拓範, 「マイクロチップレーザー」, 第88回レーザ加工学会講演会, 大阪大学, 大阪, 2017年10月.

Y. SATO and T. TAIRA, “Design of Quantum States in Micro domains for Giant Pulse Lasers,” The 7th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (CGCT-7), Changchun (China), October 2017.

平等拓範, 「Advanced Solid State Lasers 2017国際会議報告」, 光産業技術振興協会, 第3回光材料・応用技術研究会, 宝塚ホテル, 宝塚, 2017年11月.

平等拓範, 「カーフォニクス未来～エンジン点火, LIDAR からレーザー加工まで」, 光とレーザーの科学技術フェア2017「レーザー科学技術フェア」, (株)オプトロニクス社, 科学技術館, 東京, 2017年11月.

B-5) 特許出願

特願 2017-085731, 「レーザ点火装置」, 平等拓範, 林 桓弘(自然科学研究機構), 2017年.

特願 2017-186416, 「接合装置および接合方法」, 平等拓範, 近藤聖彦(自然科学研究機構), 2017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).

平等拓範, (公財) レーザー技術総合研究所泰山賞レーザー進歩賞 (2017).

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).

レーザー学会諮問員 (2012–2015).

レーザー学会レーザー照明・ディスプレイ専門委員会委員 (2012–2015).

CLEO 2013: Science & Innovations 02: Solid-State, Liquid, Gas, and High-Intensity Lasers 国際会議諮問委員 (2012–2013).

レーザー学会レーザー衝撃科学の基礎と応用専門委員会委員 (2012–2015).

Optics & Photonics International Congress 2013 (OPIC2013) 国際会議組織委員会委員 (2012–2013).

International Workshop on Holography and related technologies 2012 (IWH 2012) 国際会議プログラム委員会委員 (2012).

8th Laser Ceramics Symposium (LCS): International Symposium on Transparent Ceramics for Photonic Applications 国際会議プログラム委員会委員 (2012).

SPIE/SIOM Pacific Rim Laser Damage 2013 国際会議国際委員会委員 (2012–2013).

CLEO-PR 2013 国際会議プログラム委員会委員 (2012–2013).

Materials Committee, Advanced Solid State Lasers (ASSL) 2013 国際会議プログラム委員会委員 (2012–2013).

International Workshop on Holography and Related Technologies 2013 (IWH 2013) 国際会議プログラム委員会委員 (2013).

Optics & Photonics International Congress 2014 (OPIC2014) 国際会議組織委員会委員 (2013–2014).

9th Laser Ceramics Symposium (LCS): International Symposium on Transparent Ceramics for Photonic Applications 国際会議諮問委員 (2013).

SPIE Photonics Europe 2014 —Laser Sources and Applications (EPE111) 国際会議委員会共同議長 (2013–2014).

応用物理学学会学術講演会プログラム編集委員会委員 (2013–2014).

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

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

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

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

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

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).

日本学術振興会接合界面創成技術第 191 委員会委員 (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).

2016 Advanced Solid State Lasers (ASSL), Joint Feature Issue in *Opt. Express* and *Opt. Mater. Express*, ゲスト編集委員 (2017).

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

豊橋技術科学大学, 客員教授, 2016年–.

B-10) 競争的資金

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ー (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).

科学技術振興機構CREST 研究, 「ホログラム光刺激による神経回路再編の人為的創出」, 再委託(研究代表神戸大学和氣弘明), 平等拓範 (2017年–2022年).

科学技術振興機構未来社会創造事業(大規模プロジェクト型) 「レーザー駆動による量子ビーム加速器の開発と実証」, 再委託(研究代表公益財団法人高輝度光科学研究センター熊谷教孝), 平等拓範 (2017年–2026年).

B-11) 産学連携

(株)コンボン研究所, 「マイクロ固体フォトニクスの基礎研究」, 平等拓範 (2017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 (2017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。

広帯域相関計測解析研究部門

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
- 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，多くの分子振動単位と共鳴しており，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用いた超高速ポンプ・プローブ分光が挙げられる。800 nm のフェムト秒パルスで半導体を励起し，生成したキャリアのダイナミクスを，広帯域な赤外スペクトル計測を行うことで，観測した。台湾のグループとの共同研究によって，詳細な解析を進め，100 ps 程度の高速な緩和は，オージェ再結合であることと，その後に，ナノ秒のタイムスケールで拡散による緩和が起こることがわかった。
- 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使って，電場波形に敏感な高次高調波発生の研究を進めた。Si 薄膜にサブサイクル中赤外光パルスを集光すると，300 nm 以下の紫外領域まで広がった高次高調波が発生した。サブサイクル中赤外光パルスの位相を操作することで，高調波スペクトルが大きく変化した。この変化は，光学ブロッホ方程式でおおむね説明できることがわかった。
- c) 前年度にはチャープパルス増幅を基本としたツリウム添加 ZBLAN ファイバー増幅器によって，2 μm の波長で出力が 4 W 程度，時間幅が 150 フェムト秒のパルスが得られた。このパルス幅をさらに短くするために，ファイバー内の非線形効果を利用する増幅を試みた。すなわち，チャープパルス増幅法で用いるパルス伸長器を取り除き，パルス幅を伸ばしていない状態で増幅を行った。その結果，ファイバー内での光強度の尖頭値が格段に高くなり，非線形効果によってスペクトル幅が大幅に広がった。この時に得られたパルスは，圧縮器を通していても関わらず時間幅は 48 フェムト秒となっており，前年度の 1/3 にまで短縮することに成功した。出力は 2.4 W となっており，チャープパルス増幅の場合と比べて，遜色のないものとなっている。

B-1) 学術論文

T.-T. YEH, H. SHIRAI, C.-M. TU, T. FUJI, T. KOBAYASHI, and C.-W. LUO, “Ultrafast Carrier Dynamics in Ge by Ultra-Broadband Mid-Infrared Probe Spectroscopy,” *Sci. Rep.* **7**, 40492 (10 pages) (2017).

Y. NOMURA and T. FUJI, “Efficient Chirped-Pulse Amplification Based on Thulium-Doped ZBLAN Fibers,” *Appl. Phys. Express* **10**, 012703 (4 pages) (2017).

Y. NOMURA and T. FUJI, “Generation of Watt-Class, Sub-50 fs Pulses through Nonlinear Spectral Broadening within a Thulium-Doped Fiber Amplifier,” *Opt. Express* **25**, 13691–13696 (2017).

H. SHIRAI, Y. NOMURA and T. FUJI, “Self-Referenced Measurement of Light Waves,” *Laser Photon. Rev.* **11**, 1600244 (6 pages) (2017).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. NOMURA and T. FUJI, “Ultrafast thulium-doped amplifier generating watt-level 50 femtosecond pulses,” *The 6th Advanced Lasers and Photon Sources*, ALPS7-2 (2017).

Y. NOMURA and T. FUJI, “Watt-level 50 fs pulse generation from thulium-doped ZBLAN fiber amplifier system,” *CLEO/Europe-EQEC 2017*, CF-3.4 (2017).

H. SHIRAI, Y. FURUTANI and T. FUJI, “Ultra-broadband mid-infrared spectroscopy for real-time observation of chemical reaction dynamics,” *ICO24*, M1B-05 (2017).

T. FUJI, M. SUZUKI, P. MALEVICH, Y. NOMURA, N. TSURUMACHI and A. BALTUSKA, “Generation of mid-infrared supercontinuum in cascaded fluoride and chalcogenide glass fibers pumped with Thulium based master oscillator power amplifier,” *ICO24*, M1G-04 (2017).

H. SHIRAI, F. KUMAKI, Y. NOMURA and T. FUJI, “High-harmonic generation driven by single-cycle mid-infrared pulses in solids,” *Ultrafast Optics XI*, Mo1.4 (2017).

T. FUJI, M. SUZUKI, P. MALEVICH, Y. NOMURA, N. TSURUMACHI and A. BALTUSKA, “Generation of mid-infrared supercontinuum in cascaded fluoride and chalcogenide glass fibers pumped with Tm-based femtosecond amplifier,” *Ultrafast Optics XI*, Tu6.3 (2017).

Y. NOMURA and T. FUJI, “Ultrafast thulium-doped ZBLAN fiber amplifier utilizing nonlinear spectral broadening,” *Advanced Solid State Lasers*, JTh2A.47 (2017).

B-3) 総説, 著書

H. SHIRAI, Y. NOMURA and T. FUJI, “Development and Application of Sub-Cycle Mid-Infrared Source Based on Laser Filamentation,” *Appl. Sci.* **7**, 857 (5 pages) (2017).

B-4) 招待講演

藤 貴夫, 「新規フェムト秒赤外パルスレーザーを光源とした計測装置」, 分子観察による生命の階層横断的な理解, 分子科学研究所, 岡崎, 2017年3月.

野村雄高, 藤 貴夫, 「トリウム添加ZBLANファイバーによる2 μm帯超短パルスレーザーシステム」, 超高速光エレクトロニクス研究会, 電子情報通信学会超高速光エレクトロニクス時限研究専門委員会, 名古屋大学, 名古屋, 2017年6月.

藤 貴夫, 「超短光パルスの測定法——基礎から最先端の研究まで——」, 第62回物性若手夏の学校, 長良川温泉ホテルパーク, 岐阜, 2017年7月.

T. FUJI, H. SHIRAI and Y. NOMURA, “Self-referenced light wave measurement of few-cycle mid-infrared pulses,” *CLEO Pacific Rim Conference*, Singapore, August 2017.

T. FUJI, H. SHIRAI and Y. NOMURA, “Self-referenced waveform measurement of ultrashort mid-infrared pulses,” *ALT'17*, Busan (Korea), September 2017.

藤 貴夫,「チャープパルス上方変換による高速な中赤外スペクトル計測」, テラヘルツ波科学技術と産業開拓第 182 委員会第 33 回研究会, 浜松ホトニクス, 浜松, 2017 年 10 月.

野村雄高,「新奇な長波長レーザーによる超深部顕微分光システム」, 光電相互変換第 25 委員会第 239 回研究会, 明治大学, 東京, 2017 年 12 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

学協会役員等

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)

電子情報通信学会超高速光エレクトロニクス時限研究専門委員会第 4 部会副査 (2017-).

電子情報通信学会超高速光エレクトロニクス時限研究専門委員会第 2 部会副査 (2017-). (野村雄高)

学会の組織委員等

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

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 (2012).

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 (2013).

HILAS 国際会議プログラム委員 (2014).

CLEO/USA2014 国際会議プログラム委員 (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 (2014-2015).

レーザー学会学術講演会第 38 回年次大会プログラム委員 (2017). (野村雄高)

ICO24 国際会議プログラム委員, 座長 (2017).

CLEO Pacific Rim 2017 座長 (2017).

Ultrafast Optics 2017 国際会議プログラム委員, 座長 (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・学術審議会量子科学技術委員会・超短パルスレーザーに係るロードマップ検討グループ専門有識者 (2017-).

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、学融合レクチャー「先端レーザー基礎演習」, 2017年9月19日-9月21日, 2017年10月24日-10月26日.

B-10) 競争的資金

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極端紫外光源の開発およびその応用」, 野村雄高 (2010年).
豊秋奨学会海外渡航旅費助成,「153 nmにおけるコヒーレントな高繰り返し準連続光源」, 野村雄高 (2011年).
光科学技術研究振興財団研究助成,「トリウム添加ファイバーによるフェムト秒レーザーの開発」, 野村雄高 (2012年-2013年).
科研費若手研究(B),「中赤外領域における高繰り返しフェムト秒パルス光源の開発」, 野村雄高 (2013年-2014年).
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2 μ m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).
科研費基盤研究(B),「光電場波形計測法の開発と新しい非線形光学の開拓」, 藤 貴夫 (2017年-2020年).
科学技術振興機構CREST研究,「超短赤外パルス光源を用いた顕微イメージング装置の開発と生命科学への応用」, 藤 貴夫 (2017年-2023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る。この光源を使った新規分光法が評価され、CRESTのプロジェクトに採択された。この手法をさらに発展させて、分子科学のみならず、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有効に用いて、高次の非線形過程の光電場位相による制御が可能であることを示した。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。ファイバーレーザーの開発では、非線形ファイバー増幅器の開発に成功した。この増幅器から発生するスペクトルは2000 nm から1800 nm 以下まで広がっており、3光子顕微鏡において、最適な波長であると考えられる。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。

7. 点検評価と課題

2017年度は Hrvoje Petek 教授（ピッツバーグ大学）と中嶋 敦教授（慶應義塾大学）を研究顧問としてお招きし、所全体の研究評価、研究体制についての提言をいただいた。

2017年11月にはマックスプランク研究所（石炭科学研究所）の Benjamin List 教授より生命・錯体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。2018年2月にはヴェルツブルク大学の Eberhard Umbach 名誉教授により、光分子科学研究領域、UVSOR 施設、および本年度設置されたメゾスコピック計測研究センターを中心にヒアリングが実施され、それぞれの研究内容の評価および活動の評価をいただいた。

昨年度2月に開催された運営会議の際に、4つの研究領域の研究内容および研究方針について所外委員を務める関係研究者からのアドバイスを仰いだ。そのレポートについてもここに掲載させていただいた。

（川合眞紀）

7-1 研究顧問による点検評価

7-1-1 中嶋 敦 研究顧問

評価レポート（2018年1月29日）

私は2017年12月26, 27日に分子研で行われている研究の評価をおこないました。所長および、4つの領域と2つのセンターの主幹を含む10名を越える教授陣と会い、9つの全体総括の発表を聴きました。また、9つの研究室と3つの主な施設（計算科学研究センター、UVSOR放射光施設、装置開発室）を訪問し、12月26日夕刻には、分子研助教や博士研究員による研究ポスター発表に臨みました。去る2017年4月4, 5日の32件の口頭発表の内容とともに、今回の全体の発表や研究室訪問を通じて、分子研の各領域や各センターにおける現在の研究活動を理解するように努めました。以下はその評価報告で3つの部分から構成しました。1つ目の(I)では、近い将来に解決が望まれる分子研の活動状況に対する提言を行ない、2つ目の(II)では、各領域・センターと各研究者の研究活動についてそれぞれ検証しました。

(I) 分子研の領域・センターへの提言

1. 現在の研究活動へのコメント

詳細な提言とは別にいくつかの重要な点をまず述べたいと思います。第一に、分子科学研究所の研究活動はたいへん充実しており、川合眞紀所長の優れた指導力のもとに十分な支援と組織化が図られています。設定されている研究テーマはいずれも最先端の科学であり、その先見性は分野を先導しています。第二に協奏分子システム研究センター(CIMoS)やメゾスコピック科学の新たなセンターを構築している運営方針は、これからの分子研の研究業績を高め、国際競争力をもちうる戦略であると考えられます。それを裏打ちするように創造性溢れる共同研究が始まり、新たな最前線の研究を拓くことが期待されます。最後に、研究所も各研究者も分子研の研究人材をグローバルな視点で活性化されており、研究会合を通じて十分な意思疎通が図られています。この研究所のあり方は、国際性豊かな若手研究者を育む上でも十分に機能しています。

2. 一層優れた研究所に向けた提言

分子研における研究活動を一層優れたものにするために2つの提言を以下に示します。

1) 最先端機器の先鋭化と高度化

分子研の重要な役割の一つには、分子科学分野の研究を一層力強く進めるために分子研を訪れる研究者に最高レベルの研究機器を提供することがあります。分子研ですべての最先端機器を整備することは困難ではありますが、「分子研には最先端機器としてこれが備わっている」、という状況は期待したいと思います。具体的には、微細構造X線解析、高分解能質量分析、微小領域電子分光、高分解能プローブ顕微鏡など、どれかの手法で先端研究を牽引することが期待され、その手法の先鋭化と高度化を通じて分子研の研究者が一層の研究の高みを目指して頂きたいと思います。

2) 広い視野をもった若手人材の育成プログラムと戦略

これまでの分子科学研究所の努力の結果として、国内外の学部生や前期博士課程（修士）大学院生のインターンシップを通じて、若手研究者の育成につながる質の高いきっかけや動機付けが行われていることは高く評価できます。その結果、総研大への進学プログラムを利用した大学院生の獲得に結びつくことは、優れた結果であるばかりでなく、各研究グループの研究活動の充実にもつながる展望が開けていることは、特筆すべきことです。この取り組みが分子

研のすべての研究室に広がるのが望ましいですが、海外からの大学院生の場合には、博士取得後に母国に戻った際に研究活動基盤が確保できるかを意識するものであり、研究分野の必要性や成熟度に応じて、国ごとに志向する研究課題に偏りを生じることは避けられません。近年、増加している東南アジア諸国からは、材料系実験や理論系の比重が高いので、今後、欧米の諸国から先端計測系の研究分野にも人材育成が波及することが望まれます。人事交流では、長年の信頼関係が重要であることから、機関ごとの協定による交流の前に、個人ベースの研究交流が先行する必要があります。その実行の際は、所外プログラムを利用することはもちろん、所内での手当を惜しまない支援体制の構築と精神が醸成されると良いと思います。

また、併せて大事なことは、所内の他の研究室との研究交流を、大学院生はもとより、ポスドクにも推奨し、学術の多様化と柔軟性の確保に留意することは有効な施策であると考えられます。合同発表会に全員が顔を揃えることを最低条件にしつつ、座長などの役回りに大学院生の貢献を求めるなど、質の高い時間を共有する仕組みを運用するとよいかもしれません。研究の視点に複眼的な要素が加わることに加えて、仲間作りにつながる研究交流は、研究機関への心地よい所属意識につながる可能性も高まり、「分子研ファン」の増加につながることを期待します。

(II-1) 分子研の領域とセンターの構成について

A. 協奏分子システム研究センター

分子科学における分子と分子集合との階層間のロジックを解析し、新たな分子システムを創成することを目的としているグループで、研究課題の先端性と国際性は高く、また構成員の研究活動は極めて活発である。研究グループ間の交流を通じて、センターとして特に力を入れる課題を打ち出せるとセンターの意義は一層高まると期待される。

B. 物質分子科学研究領域

新たな機能分子とその集合体の創製を念頭に、これらの物理的、化学的特性の解明を先端計測手法の開発をしながら進める研究グループで、研究活動は活発で多くの共同研究から多岐にわたる研究成果を挙げている。新たに2名の准教授の公募を進めており、先端計測手法の観点から人選が進めば、さらに強力な研究領域になることが期待される。

C. 生命・錯体分子科学研究領域

分子科学の視点からタンパク質の構造と機能を研究するとともに、生体分子の機能に学びつつ無駄のない化学反応を実現することを目指している。各研究室の研究課題は先端的で国際レベルであり、研究活動は共同研究を含めてとても活発で、優れた准教授が多くいる。分子科学的な方法論の駆使という観点から、適切な高精度分光法などを用いた共同研究が進むと、分子科学研究所の特徴がさらに高まるものと期待される。

D. 理論・計算分子科学研究領域

本研究領域では、量子力学や統計力学に基づいて理論・概念を構築し、さらに、大規模コンピュータによる計算を行うことにより、分子ならびに分子集合体の様々な現象を分子レベルで解明し、新規な物性機能の予測を行っている。計算手法の開拓研究、実験グループとの共同研究の両面にわたって、国際的にも高いレベルの研究が進められている。最近数年間で人材の若返りが起こった中で、的確な人材登用が進められた結果が感じられ、センターとしての機能を充分果たしている。それぞれの成長によって学術の発展が楽しみではあるが、大学などへの人材流出へ対応などは、国家プロジェクトのAI指向への取り組みと併せて注意深い対応が必要であろう。

E. 装置開発室

装置開発室は、機器開発、電子機器開発、リソグラフィー微細加工、デジタルエンジニアリングの4つの部門からなり、それぞれ分子研内外のユーザーの最先端研究の要望に的確に応えている。今後の取り組みとして、ものを作らずに設計指針をシミュレーションする **Computer Aided Engineering (CAE)** への技術対応、電子描画によるリソグラフィー微細加工、従来のプラスチック材料に加えて金属材料の3次元プリンター、という3つを挙げている。これらのマイクロファブリケーションの拡充などの方策は、いずれも今後の研究発展に資する技術であり、工作機器類の高度化に伴ってスタッフの機器操作への習熟が重要である。また、的確な人材の登用と育成が、この新しい装置開発室の活動の充実の鍵であると考えられる。

F. 光分子科学研究領域

本分野では、X線からテラヘルツ波までの光発生のための大型放射光施設 **UVSOR** とともに、固体フォトンクス制御に立脚したマイクロチップレーザーなど、高性能な光源の開発を進め、その光源の利用によって分子及び分子集合体の物性・機能・反応の研究を展開している。計測手法の高度化とともに、反応の精密制御などの研究は先端的で、共同研究を含めて十分な活力を示している。

G. UVSOR 放射光施設

維持管理と装置の高度化について、研究者の目が行き届いている様子が感じられたが、決して余裕のある状況ではなく、予期しない装置トラブルの発生への対処や高度化へのスピード感の加速には、人的手当が必要であるように感じられた。

H. メゾスコピック計測研究センター

本センターは、新たな分子能力の創発を念頭に、ミクロとマクロの機能が相乗的に作用するメゾスコピック領域における分子の機能や反応過程を明らかにする研究を精力的に展開している。新たな物性機能の舞台の化学合成に加えて、物質スケールに適合化させた革新的な計測解析手法の開拓の先鋭化が生命線であり、国際競争に負けない研究体制作りが重要である。

(II-2) 個別研究者

1. 秋山修志教授 協奏分子システム研究センターセンター長

秋山教授のグループは、生物時計タンパク質の24時間の起源を反応素過程から解き明かす取り組みで大変ユニークな研究を分子科学の視点から展開しており、研究の意義は高く先駆的である。タンパク質時計の生化学的な活性測定、X線結晶構造解析や動的構造解析、分子動態計測、などの実験研究を軸に、研究所内の優れた理論化学の研究者と組むアプローチは合理的である。研究グループは小さいものの研究成果は活発に出されている。

2. 小林玄器特任准教授 協奏分子システム研究センター

小林特任准教授のグループは、二次電池などの電気化学デバイスを念頭に新規なイオン導電体の合成と物性計測の研究を展開している。とりわけ、水素原子アニオンであるヒドリドを導電の担い手とする固体電解質の物質を新たに合成することに成功しており、その高速イオン導電に着目して、さらに優れた特性をもつ物質合成が精力的に進めら

れている点は、特筆すべき点である。イオン導電のみならず物質変換に関しても研究アイデアが豊富であり、研究グループの拡充によって更なる発展が見込まれる国際トップレベルの研究者の一人である。

3. 古賀信康准教授 協奏分子システム研究センター

古賀准教授のグループは、タンパク質分子の立体構造形成と機能発現の原理を解明することを目的として、そのためのタンパク質分子を新たに計算機上でデザインして生化学実験によって検証する研究を展開している。研究者一人一人が、計算と実験の両方を手掛けることによって、スピーディーな研究展開を重視している姿勢は、限られた研究資源の制約を克服しようとする戦略に基づいており、研究推進の力強さを感じた。タンパク質分子の構造変化に協同した機能発現を解明しようとする課題への取り組みは国際的にも優れていると考えられ、また、千葉大学や東京大学とも興味深い共同研究が進められている。

4. 横山利彦教授 物質分子科学研究領域研究主幹

横山教授のグループは、放射光を用いた優れた研究実績を基礎に、機能物質の素性やさまざまな測定環境に合わせて、動作下の燃料電池触媒や大気圧下の金属酸化状態を研究するための新しい分光手法を開発している。電気化学の反応下の白金触媒に対する硬X線光電子分光（HAXPES）や、新たに立ち上げたX線磁気円二色性分光などの手法開拓は、共同利用機関として極めて先端的な手法提供であり、実用技術の基礎としても重要な視点を見据えている。また、得られている学術的成果は優れており、播磨 SACLA などの外部機関との連携にも積極的で、重層的な研究活動を展開している。

5. 平本昌宏教授 物質分子科学研究領域

平本教授のグループは、有機太陽電池に関する研究を有機半導体材料の超高純度化を基礎として、高精度なドーピングとナノ構造デザインを駆使して、高い素子性能の実現を達成し、さらに発展させている。有機半導体のバンドギャップの制御に着目しつつ、基礎物性から素子性能までを見通した研究の視点は明快で、太陽電池をはじめとするさまざまな有機エレクトロニクス素子の実現に貢献しうる実用上の価値も高い、独創的な研究と判断される。

6. 魚住泰広教授 生命・錯体分子科学研究領域研究主幹

魚住教授のグループは、水溶液中で作用する精密な分子設計に基づく触媒（水中不均一系有機分子変換）や極めて高活性な金属錯体触媒を中心に極めて精力的に研究を展開している。これらの研究課題はこれまでの優れた研究実績を背景とした独創性の高いもので、グリーンケミストリーの視点を十分に実現した有機合成の研究において、その精密さが格段に高まり、優れた実用性の実証がなされている点は高く評価できる。

7. 飯野亮太教授 岡崎統合バイオサイエンスセンター

飯野教授のグループは、タンパク質でできた生体分子機械の作動原理と設計原理の解明を目的として、金属ナノ粒子を用いて生体分子機械の動きを単分子検出で可視化する研究を展開している。ユニークな金属ナノ粒子の活用を提案しており、観測と解析は容易ではないかもしれないが、非天然の生体分子機械の創製につながる生体分子機械の動作原理を詳細に明らかにできる期待がもてる。

8. 正岡重行准教授 生命・錯体分子科学研究領域

正岡准教授のグループは、人工光合成システムの構築を目指して新しい金属錯体の合成研究を精力的に展開している。酸素発生の触媒として鉄5量体の発見を基礎として、水分子をはじめとして、窒素分子、二酸化炭素など、活性化の難しい小分子の利用を可能とする金属錯体を精密合成する研究が精力的に進められ、海外留学生を含めて研究室にも活気が溢れている。生体酵素のクラスター骨格の例から考えて、標的としている合成対象は合理的であり、新たな金属クラスター骨格の触媒が見出される期待が高い。

9. 榎山儀恵准教授 生命・錯体分子科学研究領域

榎山准教授のグループでは、金属フリーの新たな有機触媒の設計とその触媒による合成研究が展開されている。これまでの豊かな研究実績を基礎に、新たに独自の世界を構築する途上にあり、研究成果の論文発表はこれからではあるものの、その研究成果は着実に生まれている。反応機構の解析を所内の理論グループとも精力的に進めており、新たな知見は分子分光学の上からも興味の対象となると期待される。研究成果について話を聞くのは今回が2回目であるが、研究の進展とともに話し方に自信がみなぎってきたことはたいへん頼もしい。

10. 斉藤真司教授 理論・計算分子科学研究領域研究主幹

斉藤教授のグループは、液体や生体分子系などの多体分子系の理論研究から、系の揺らぎ、揺らぎによる物性や機能などの研究を展開している。解析が十分になされていない多体問題に対する理論的な機構解明を進める課題では、課題設定にセンスの良さが感じられ、生体分子機能、水の異常熱力学特性などの研究はいずれも迫力ある本質的成果につながっている。実験研究の連携にも意欲的であり、理論化学を国際的に先導する中心的役割を果たしている。

11. 江原正博教授 計算科学研究センター

江原教授のグループは、極限環境下や溶媒中の化学反応を取り扱うための電子状態理論の開発とともに、電子状態理論を様々な化学現象に適用しながら、新しい化学概念の構築に取り組んでいる。電子状態理論計算の適用範囲は、光機能分子の励起状態ダイナミクス、不均一系の合金ナノクラスターの触媒作用、生体分子の電子励起状態解析、など非常に幅広く、実験研究との連携はきわめて真摯であり、それぞれの課題で優れた研究成果を挙げている。とりわけ、理論化学の活用による現象解明に大いに貢献していることは、理論計算の重要性の実証はもとより、化学現象の本質を理論的に見極める眼力が優れていることの証左である。

12. 石崎章仁教授 理論・計算分子科学研究領域

石崎教授のグループは、凝縮相における化学動力学の理論研究を独自のアイディアに基づいて推進している。光合成光捕獲系の動作機構に関する生物物理を、量子動力学理論によって解明する研究において、実験研究者とも連携して優れた実績を挙げており、その成果を基礎とする今後の発展は大いに期待される。国際学術研究からの手厚い支援を受けながら、光合成光捕獲系の構造ダイナミクス、エネルギー散逸、消光といった過程を、単分子分光の実験研究者との連携しつつ、理論を構築する研究を進めることは、今後も学術的に優れた成果を生み出すものと大いに期待される。

13. 奥村久士准教授 計算科学研究センター

奥村准教授のグループは、新しい分子動力学シミュレーションの手法開発を基礎に、タンパク質の構造と物性を明らかにする研究を展開している。タンパク質のヘリックスのミスフォールディングに起因する病気の機構解明を視野に、分子動力学シミュレーションを用いてアミロイド線維の動的挙動を解き明かすために、Replica Exchange 法や Replica Permutation 法などの新たな MD 法の開発を含めた理論研究を展開しており、研究の位置づけと方針は独創的で明確である。比較すべき定量的な実験の困難さに加えて、自ら行う計算の長時間化によって、現象論的な議論が中心になりがちであるにもかかわらず、アミロイド線維の形成に関する本質が解き明かされつつあることはたいへん頼もしい。

14. 柳井 毅准教授 理論・計算分子科学研究領域

柳井准教授のグループは、多電子波動関数理論とその光化学への応用に関する研究を、密度行列繰り込み群 (DMRG) 法を基礎として様々な化学現象の理解につなげる独創的な研究を展開している。計算の方法論の開拓、構築とその進展に合わせて、実験科学との連携にも積極的に取り組んでおり、これらの研究活動を通じて、多電子理論に基づく国際的に注目される成果を挙げている。

15. 大森賢治教授 光分子科学研究領域研究主幹

大森教授のグループは、量子コンピューティングや化学反応制御、さらには量子論の実験的検証までを念頭に、物質の波動関数の干渉を光で制御する先端的研究を展開している。高精度なアト秒レーザー光の発生手法と極低温のアルカリ金属集合体の生成手法とを組み合わせ量子波束エンジニアリングを実現し、高速量子シミュレーターを構築する研究は、独創性が高く、分子科学研究所の誇るべき優れた研究の1つである。また、国際的な研究連携の研究レベルも高く、この学術領域を牽引している。

16. 解良 聡教授 光分子科学研究領域

解良教授のグループは、弱い分子間力で集合した有機分子固体や有機薄膜の電子物性を精密に評価する研究を展開している。丹念な試料作りと精緻な分光手段との組み合わせによる高い実績を踏まえて、UVSOR 光を基礎とする各種光電子分光装置を利用して、有機分子と固体表面の界面における相互作用とその電子状態を高精度に評価することに成功している。また、表面化学関連分野の周辺技術を取り入れることにも積極的で、厚みのある優れた成果を挙げていくことが期待される。共同利用施設として運営でもその信頼は厚く、共同研究においても優れた成果を挙げている。

17. 岡本裕巳教授 メゾスコピック計測研究センターセンター長

岡本教授のグループは、ナノ物質と光の相互作用を巧みに用いてナノ物質のカイラリティーとそれに付随する磁気的性質を明らかにする先駆的研究を展開している。プラズモン共鳴励起に伴う光電場を近接場円二色性によって可視化することに成功するなど、研究手法や考え方は独創的で、研究グループのサイズは小さいが、研究活動は活発で優れた成果を挙げている。

18. 平等拓範准教授 メゾスコピック計測研究センター

平等准教授のグループは、光学材料の性質をミクロンオーダーで精密制御することによって、レーザー光を発生で

きる「マイクロ固体フォトンクス」の研究を展開している。この手法は高輝度レーザーや極端パルスの開発につながるなど、その技術レベルは世界的に注目されている。目的とするフォトンクス材料の創製のためにマイクロ固体として、精密なマイクロ周期構造の構築と希土類イオンのドーピング構造体の構築を進めている。国際学術論文の公刊にも注力しており、研究活動は十分なされている。実験室の案内は大変丁寧で、この技術開発の重要性を相手が理解できるように説明する姿勢がとても好印象だった。

7-1-2 Hrvoje Petek 研究顧問

The Advisory Committee thanks the IMS Director, Faculty, and Staff for a productive review.

The presentations were organized according to different Centers and Departments, with the head of each unit providing an overview of the ongoing research, and the purpose for existence and function of the unit. What was missing universally how each unit is contributing to the advances in molecular science, though the purpose of some units is to support other research groups inside and outside of IMS, rather than to perform research at the forefront of molecular science.

The structure of various centers at IMS has evolved over a long time with the Center for Mesoscopic Sciences being established most recently. From the themes of the Centers it is clear that someone envisioned a long time ago how IMS could continue to be a significant player in the field of molecular science if the goals of the center were actually pursued. Based on the themes, I think if the envisioned research were really pursued, IMS would be making significant contributions. However, what we experienced are different commitments by the center leaders and members to the function of each center. For the most part, the group members are pursuing their own research interests, regardless of the center theme. In part, this is driven by the funding. If a group leader obtains significant outside funding to perform such a research topic that is not directly related to the center theme, it is appropriate to carry out such research. Another model would be for group leaders to join together and use the strength of the center to seek outside funding on a topic related to the center theme. In fact, the purpose of the center should be to facilitate such interactions and to enhance the possibility of obtaining such funding.

What I found is that there is little ongoing research that is focused on the current popular topics in molecular science. Personally, one topic that I find very exciting is the research on quantum materials where the molecular structures of a solid-state material impart special electronic properties that are generally unavailable and rare in most materials. For example, two-dimensional materials such as graphene and chalcogenide semiconductors have special electronic properties related to electron spin and charge that exist only when a material is a single molecular sheet. This is clearly not a strong theme at IMS, but I find the center goals to be more ambitious and longer term; they may not be fashionable now, but progress at IMS could make them one of the growing fields in molecular science and thereby make IMS a center of excellence for such research. For that to happen Centers and Center leaders should advance the center goals, rather than to promote unrelated strengths. For the center theme research to thrive, the research funding could be allocated to topics, which are proposed by several center principle investigators, and contribute to the center theme.

What I found disappointing, was when center leaders could not communicate the research and role of each principle investigator to the center theme. This made it clear that the center leader does not himself believe in the center theme. If that is the case, the center

leader should strive to change the center theme, so that it suits better the center member's strengths or interests. A center is failing, however, if the center leader is mainly interested in pursuing his/her own research, rather than leading the center. Perhaps, in that case it is best for the center leader to step down and a new one to be appointed. This is also a good time to reevaluate the center themes and goals, and how they are being achieved.

It is important to reevaluate the center themes after some time. After some time, the center theme may be successfully accomplished or prove to be too difficult. Other themes where IMS has strength may emerge and provide new targets for new centers. It is important to have a continuous turn over in research themes as faculty leave for other positions, retire, and new faculty are hired. The hiring of new faculty is particularly important, because they bring in new ideas and topics, which should be made to flourish. Hiring should be made with a clear strategy of how a person can contribute to IMS by bringing in new ideas and expertise. When someone is hired, they should be provided the resources to establish their research quickly so that the ideas that they bring in can be put into action and not be realized elsewhere.

It is important for IMS to be a dynamical research institution, which can respond to developments and lead research in molecular science. I believe, that when IMS was established the policy of no internal promotion was instituted to make it a more dynamical and rapidly evolving research institution. This has made it an attractive institution in Japan for persons at the Associate professor level to establish their research careers and move on to other leadership positions in Japan. Associate Professors can make IMS and incubator for new ideas and research directions in Japan. One would hope that Professors would also have similarly impactful roles, but in addition, they should also nurture and guide the advance of young scientists in their department.

When I first decided to go to IMS as a postdoctoral fellow 32 years ago, IMS was a leading international institution in Molecular Science. Although I heard about very successful internship opportunities at IMS, I did not see much evidence that IMS attracts the top researchers or faculty, who come to advance their careers by a longer stay at IMS. There should be ample internal resources to support international collaborations, as well as stronger effort to use the existing government resources to attract visitors. One way to easily judge the IMS perception in the field of molecular science is by how many top international scientists can be attracted to spend some time in Okazaki, and how many IMS scientists have international research experience and collaborations.

Another tradition at IMS that should be renewed and strengthened are the Okazaki conferences. They are an excellent venue to open up IMS to the Japanese and international research community, to show the strength of IMS research, and to build new avenues for international collaborations. The lack of new initiatives and paucity of seminars and colloquia is not encouraging. IMS faculty need to be more active in communicating their results and exchanging ideas with research leaders in their field.

IMS has always provided unprecedented opportunities for leaders in molecular science to pursue and develop their research interests. This can best be accomplished by engaging their center leaders and director in communication. IMS researchers should use the available and substantial resources to advance their fields and the resources should be provided based on evidence of contributions to molecular science within IMS and in the broader community.

7-2 外国人運営顧問による点検評価

7-2-1 Benjamin List 外国人運営顧問

Dear Professor Kawai,

Thank you very much for giving me the opportunity to serve on the Scientific Advisory Board of the Institute for Molecular Science, of which you are the Director General, and which belongs to the National Institutes of Natural Sciences. It has been an honor to meet you and to have an on site visit from November 13th to November 14th at your institute. You have kindly presented to me the history, funding, structure, and science conducted at your impressive institute. I have also had the pleasure to be personally introduced to your individual departments by their department heads, including the Department of Materials Molecular Science, headed by Professor Toshihiko Yokoyama, the Department of Theoretical and Computational Molecular Science, headed by Professor Shinji Saito, the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science, headed by Professor Yasuhiro Uozumi, and the Department of Photo-Molecular Science, headed by Professor Kenji Ohmori. Furthermore, I have been given the opportunity to visit the IMS research facilities, including the UVSOR Facility, and the Research Center for Computational Science. Finally, as part of my duties, I had the pleasure to hold individual interviews with the members of the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science (Professor Koichi Kato, Assoc. Professor Norie Momiyama, Assoc. Professor Shigeyuki Masaoka, Professor Ryota Iino, Professor Shigetoshi Aono, Professor Yasuhiro Uozumi, Assoc. Professor Yuji Furutani, and Res. Assoc. Professor Kensuke Kurihara).

My overall impression of both, the institute in general and the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science in particular, has been excellent.

Before discussing specific aspects of the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science, I would like to take this opportunity, to make a few general remarks concerning your institute.

First of all, I noticed that there are several similarities to my own institution, the Max-Planck Institut für Kohlenforschung, and to the Max-Planck-Society in general. But there are also differences. For example, both of our institutes have five departments. While our institute has about 350 employees, including scientist as well as administrative and service members, and has a budget of around €27 million, the IMS has fewer employees (277) but a slightly higher budget (4 Billion Yen, ca. €29 million). Accordingly, one coworker on average costs around €105,000 per year at the IMS, whereas at my institute, on average, one person costs €77,000 per year. I am not sure, how to explain this difference. Perhaps income and cost of living are generally higher in Japan. I was also considering the possibility that the large infrastructural costs of your synchrotron beam line is responsible for this difference. However, from what I learned, it costs only 6% of your annual budget.

A significant difference can be seen both in the number of groups in each department and also in the individual group sizes. While your departments on average have eight groups, at our institute there are merely three. I would assume that spreading your resources among so many groups is expected to increase the chances of a scientific “hit.” On the other hand, some of your groups are clearly subcritical and even non-competitive regarding manpower. In the Max Planck Society we have a different philosophy

and give each department's director the complete freedom as to how he or she uses the resources allocated to the department. This typically leads to much larger groups of the director, which can be a quite powerful scenario. Sometimes, a diminished scientific diversity may result in such departments, but overall such a funding situation is possibly more attractive for the top scientists we aim to recruit. Possibly, reducing the number of groups in each department or giving each director the freedom to decide how many groups he deems suitable for his department is something for you to consider. This may also be discussed at the National Institutes of Natural Sciences.

Another aspect concerns the quest for recruiting outstanding scientists. In my opinion, to meet these challenges, a very high level of flexibility is required. In the Max Planck Society, we have similar rules like you, according to which assistant professor or associate professor level scientists cannot be promoted to director, which is our full professor level. However, we keep the flexibility to promote junior level group leaders, in very few exceptional cases (probably less than 1%), to the position of a director. Why would we voluntarily ask our most outstanding scientists to leave the society? My advice would be to seriously consider this model also for the IMS. I have seen amazing younger talents at your institute, some of which clearly have the caliber for top positions, be it at the MPG or at your institute or anywhere else in the world.

A minor recommendation concerns the names of your departments. I personally favor short names. For example, you may consider "Theory," "Light," "Materials," and "Life and Synthesis." Obviously, this is a matter of taste and I realize that this may well not meet yours or that of Japanese scientists in general. Also, a clear mission of the institute that can be expressed in one sentence may be helpful.

With regards to the group leaders of the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science, I would like to say the following: The order of individual group leaders follows the order of my interaction with them. (First Day: 1. Koichi Kato, 2. Norie Momiyama, 3. Shigeyuki Masaoka, 4. Ryota Iino, 5. Shigetoshi Aono. Second day: 6. Yasuhiro Uozumi, 7. Yuji Furutani, 8. Kensuke Kurihara)

1. Professor Koichi Kato: Professor Kato heads the Division of Biomolecular Function. In a nutshell, the highly ambitious aims of this group are to understand how life self-assembles from molecules, and ultimately to create life. I would say that this group works on one of the grand challenges of not only chemistry and biology but also of mankind. This question is perhaps paralleled by the quest of physicists to find the Grand Unified Theory, or to understand dark matter. Obviously, such a big problem cannot be solved by one group only and requires the collaborative effort of diverse scientists. These include synthetic chemists as well as experts from spectroscopy (NMR, IR, *etc.*), cryo-EM, Mass Spectrometry, and computation. It is highly impressive how Professor Kato oversees all these activities and how he collaborates with various scientists all over the planet that are engaged in the few missing areas that he is not covering himself. He has a keen and authentic interest in a real "synthetic biology" and also has been highly successful in establishing major consortia towards such a science. Examples of his particular activities include the investigation of how protein glycosidation patterns govern their biological fate and also how the proteosome assembles, which is probably one of the most complex supramolecular events in life. His interdisciplinarity, ambition, and scientific excellency is internationally well-recognized. His research is outstanding and I am confident that this world class group is among those at the institute that have the potential to publish

major papers in the very top journals such as *Nature* and *Science*.

2. Assoc. Professor Norie Momiyama: I can probably judge her work best, since my research interests overlap significantly with hers. She studies asymmetric organocatalysis and has, in a relatively short time at the institute, already made significant, original, and highly noticeable contributions. Specifically, she is engaged in three complementary projects: 1. she has discovered a fascinating and rather unexpected rearrangement reaction of butenyl amines with aldehydes. The mechanism of this reaction is being elucidated very carefully in her lab and in collaboration with Professor Suzuki, also at the IMS. This group also designs and develops new catalysts for asymmetric Brønsted acid catalysis. Finally, the Momiyama group develops new concepts within the area of halogen bonding. For example, they discovered a halogen bonding mediated allylation of heteroaromatics. Even more impressively, they immobilize organocatalysts onto polymers that possess halogen bonding sites. The resulting heterogeneous catalysts are very active and can be used in a synthesis of amino acids. Taken together, Professor Momiyama is clearly a very good scientist and leads a group that does promising and highly original research in the area of organocatalysis. She has a very keen interest in mechanistic questions and has clearly the potential to become an excellent professor in the near future.

3. Assoc. Professor Shigeyuki Masaoka: This group is engaged in extremely relevant problems such as the water oxidation, the CO₂ to CO reduction, and the N₂ to NH₃ conversion. All of these processes have the potential to make a massive impact for human life on earth. The group has recently had a major breakthrough with the discovery of a well-designed water oxidation catalyst based on a pentanuclear iron cluster (*Nature* **2016**, 530, 465). By solving the overpotential problem, their spectacular system catalyzes the water oxidation with rates higher than its natural counterpart. In addition, they are extremely meticulous in elucidating the mechanism of their reaction. In fact, each intermediate has been carefully characterized by cyclic voltammetry, DFT studies, Mössbauer spectroscopy, and the synthesis of individual intermediate states. They also have made impressive progress in the other areas of their interest, including fuel production from CO₂, photo-induced electron transfer, and active site assembly. Congratulations to Professor Masaoka for these amazing results and to the institute for hiring such an outstanding scientist.

4. Professor Ryota Iino: Professor Iino is interested in molecular machines. It is rather fascinating to note that while in biology essentially all of the key systems, including ATPase and many others, involve spectacular molecular motors, chemists are still far away from being able to produce even simplistic synthetic analogs. This is where the group makes its impact. Professor Iino and his team want to build molecular motors using computational design and directed evolution but they also intend to build hybrid or chimera that combine synthetic structures with biological entities. Towards these goals, in addition to computational work and saturation mutagenesis studies, they use a plethora of techniques such as optical MS, AS-AFM, x-ray and neutron diffraction, CryoEM. They also intensely collaborate with many other groups both at the IMS (with physicists at the photo department and with theory department) but also with other institutions in Japan and around the globe. They have published their excellent results in high ranking journals, including in the *Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS)*, in *Angewandte Chemie* and in *Nature Chemical Biology*.

5. Professor Shigetoshi Aono: Professor Aono's research interests are in the general area of bioinorganic chemistry. For his research he relies on protein crystallography and on biochemical methods. Key findings of this very good group include the study of sophisticated

iron uptake mechanisms that bacteria have developed, which rely on the chemical recycling of heme molecules of their hosts. His group also studies how heme regulates gene-expression and how vitamin B12 can function as an unexpected photosensing unit.

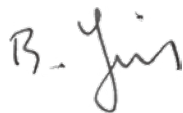
6. Professor Yasuhiro Uozumi: Professor Uozumi is a world-wide leader in the area of catalysis design and engineering. He continues to be an inspiration to many in advancing spectacular catalyst systems with properties that approach perfection. For example, they have developed hyperactive catalysts with ppb level activity. The group has also pioneered flow chemistry. The main inspiration of Professor Uozumi comes from enzyme catalysis but not in the sense that they try to make synthetic analogs but more in terms of learning from the key reactivity driving forces, which include a hydrophobic pocket, water-based conditions, and the utilization of transition metal complexes. On the basis of these considerations, they have developed amphiphilic resins that have led to extremely active and recyclable catalysts for applications in water. Examples include sub-ppm catalysis of the Suzuki reaction, and Heck reaction catalysts that approach one billion turnovers! He has also developed fascinating polymeric Brønsted acid catalysts that can be used to make biofuel. A particularly interesting topic is the immobilization of Pd-catalysts onto silicon wafers. The resulting catalysts can be recycled >100 times. The group publishes their excellent results in many papers in different journals.

7. Assoc. Professor Yuji Furutani: Since many years, Professor Furutani is interested in using infrared spectroscopy to study protein function. Considering that he has a very small group (two additional members), his group has made very good progress, even though he works in an extremely competitive research field. They collaborate with the group of Professor T. Fuji at the photo department of the IMS. The group is specifically interested in studying potassium channels and they have published very well in this area. FTIR is established by Professor Furutani and his team as an ideal tool to investigate membrane proteins, which are notoriously difficult to study using crystallography. This is where the group can make a strong impact in the future.

8. Research Assoc. Professor Kensuke Kurihara: This team aims at the formidable challenge of creating artificial cells. They use the more difficult bottom-up approach in contrast to the top down approach used by other groups around the world. They have elegantly studied oil droplet protocells that self-reproduce. They also study interesting approaches of using in situ generated amphiphilic catalysts from an oily amine and an aldehyde catalyst. It will be interesting to follow the development of this laboratory in the future.

Thank you very much again for giving me the opportunity to visit and learn about IMS. It has been both a pleasure and an inspiration to serve your excellent institute.

Best regards,



Professor Benjamin List,

Professor of Chemistry at the University of Cologne and Director at the Max-Planck-Institut für Kohlenforschung

7-2-2 Eberhard Umbach 外国人運営顧問

Report on the visit to the Institute for Molecular Science (IMS), Okazaki

27 February – 2 March, 2018

This was the first visit with the mission to become acquainted with the entire institute and to focus on the Department of Photo-Molecular Science and the Research Facilities, UVSOR Synchrotron Facility and Center for Mesoscopic Sciences.

General impression:

The overall impression of the IMS was excellent: a research institute of high scientific quality on international scales, with an on average relatively young team of principal investigators (PI, *i.e.* professors and associate professors), well equipped with mostly state-of-the-art instrumentation, highly visible in the international community and well connected and cooperating with leading research groups world-wide. Consequently, the scientific results are well received, highly appreciated, and hence frequently cited by the international community in the research fields covered by IMS.

A closer look into the list of publications reveals that the overall quality is very high, as judged by some recent examples (checked by the reviewer), proven by the percentage of highly ranked publications within the last two years (about one quarter), and corroborated by the top results of national and international citation indices (resulting from past performances). However, the number of peer-reviewed (ISI) publications per year and division (or per PI) is relatively low (5-6/a) compared to similar research institutions world-wide. This is mostly due to the fact that the research groups at IMS are relatively small on average, in particular because some of them do not have graduate students. Thus, the absolute number of graduate students at IMS is relatively small, not even as large as the number of professors (PIs). Of course, this is due to the specific situation of a non-university research institute and probably difficult to change, but efforts and incentives to increase this number could help to support the missions, such as educating young scientists, making more use of the very good infrastructure, and increasing the output.

IMS is one of the five national institutes of natural sciences with the mission of doing fundamental research of high quality in the field of molecular science. This is perfectly fulfilled by the activities of the present research groups. The selected fields covered by the PIs are topical research areas on international scales, some even at the forefront. The frame conditions of a non-university research institute, namely to allow “large-scale research” (involving long time scales, big or complex experiments, high quality technical infrastructure and personnel, *etc.*), are well used by most of the PIs thus perfectly fulfilling the mission of a national research institute. In this context it is highly appreciated that some groups work on topics that require many new developments, high precision and skills, and hence a large amount of endurance, although they may not result in many short-term publications and hence immediate success.

In spite of the mission of IMS to perform fundamental research it is evidently of considerable advantage if some research activities lead to patents, applications, or to successful cooperation with industry. This is not only for giving tax payers and politicians arguments why basic research is useful for society apart from the generation of basic knowledge and education. It also helps to provide motivation and the “arc of suspense” between fundamental questions and “real life” applications. The number of existing good such examples at IMS could be extended, perhaps by suitable incentives.

In addition to these more general remarks, some specific comments are added concerning the above mentioned department and research facilities.

Department of Photo-Molecular Science:

Although the name of this department sounds a bit strange at first glance it makes sense to bundle all fundamental research on molecules interacting with photons in one department because the related topics have several basic aspects in common. Nevertheless the department spans a wide range of interactions of photons with matter including a wide range of wave lengths (infrared to x-rays), time scales (attoseconds to continuous), length scales (single atoms to solid state), and of course research questions. The diversity of the selected topics is high in order to cover a significant range of different issues. It ranges from Laser research (fundamental quantum physics, ultrafast lasers, development of high-power micro-lasers) over nano-optical research for instance in chiral nano-systems over all-parameter band structure investigations on highly correlated materials to investigations on inner- and intermolecular interaction in various liquids and functional organic layers and interfaces. Although the various fields appear significantly different from each other, in at least one case coherence is achieved by adjacent, complementary research fields in order to make best use of the large infrastructure UVSOR. Altogether, the past strategy to set up a department around photon-matter interaction was apparently very successful. Nevertheless, for future hiring processes and infrastructure decisions a careful further development of the strategy appears adequate.

The quality of the research groups as judged from the written reports, from the publications and from the presentations given during the visit can be stated as very high comparing the research groups of this department with similar groups around the world. The attempt to achieve the deepest possible understanding and the very careful investigation of all details and parameters is a common “trade-mark” of this department which is highly appreciated. Several high quality publications and the received international recognition underline this statement. Nevertheless, the output, especially the number of ISI publications per research group (PI) and year, is quite different: it ranges from one to about 10 publications. Although, quality is much more important than quantity, and although the research fields are very different, an enhancement of output in terms of publications in peer-reviewed journals is recommended in some cases.

Professor Ohmori Group:

The visit of the Laser laboratory of K. Ohmori and his team was also very impressive. There are just a few laboratories around the world that have instrumentation of this quality and the scientific potential for studies of quantum states of matter using trapped ultracold atoms and molecules. It is a good choice and nevertheless a great challenge to study the long-range interaction between Rydberg atoms in lattices of three dimensions with attosecond time resolution. There are several fundamental questions that can be answered by such experiments, and once studies of three-dimensional lattices of Rydberg atoms become routine, several new findings for instance concerning collective excitations, surface phenomena, and topological effects in such very weakly interacting “solids” are expected to be accessible.

UVSOR Synchrotron Facility:

UVSOR is a 750 MeV synchrotron radiation (SR) facility of second generation which has very successfully been upgraded in two stages to a competitive, quasi third generation SR source with high brilliance due to a rather low emittance (15 nm-rad). Because

of its low primary energy it is dedicated to the UV- and soft x-ray range and because of its low emittance and its 6 undulators it is competitive to all other synchrotron sources in this energy range world-wide. Of course, higher energy synchrotron sources (3 GeV and more) can also cover the low photon energy range, and longer undulators and lower emittance at higher electron energy can provide much higher photon flux densities, but many experiments do not need such high flux densities or the hence possible energy or time resolution. In such cases the availability of a source like UVSOR has several advantages, not least much lower overall costs per experiment. Nevertheless, a careful consideration of the pros and cons as well as a convincing future scientific concept as well as a sufficiently large and effective user community appear necessary if further upgrades and major investments are taken into consideration.

In the past and present N. Kosugi (chair and experiments) and M. Katoh (machine) and their teams have done a marvelous job. With limited resources (as compared to other SR facilities) they have done much refurbishment and many improvements, have achieved an optimum of resulting SR power and research results per time and money within the given boundary conditions; nevertheless still many old components can cause and have caused troubles and need to be replaced. Performance of machine and instruments as well as the obtained scientific results deserve admiration and have significantly contributed to the international visibility of IMS.

Center for Mesoscopic Sciences:

The newly founded Center for Mesoscopic Sciences addresses a field of increasing importance: the mesoscopic “world” covers the range between the fundamental “bricks” atoms and molecules and the macroscopic ensembles like solids and liquids. On mesoscopic scales the size of the systems often plays a decisive role, and properties largely depend on length scales and the number of microscopic elements. Mesoscopic systems are hence scientifically interesting, may require new approaches and may lead to new applications.

Several activities of existing research groups of IMS can be considered to belong to mesoscopic science; others may also contribute to this Center by slight changes of their research program. At present, however only a few research groups are integrated in this Center.

The tour through H. Okamoto’s laboratory for nano-optical investigations was also impressive and yielded a convincing idea of what mesoscopic research for instance could mean at IMS. The further development of this Center, the participation of other research groups with mesoscopic topics, and perhaps some structural clarification could stimulate the success and visibility of this new center.

Conclusion: IMS is a leading research institute with convincing national mission and high international visibility, which has a very good infrastructure and a high research performance. The visit was very interesting and enjoyable, also due to the high professionalism and great hospitality of IMS members.

Eberhard Umbach

Former President, Karlsruhe Institute of Technology, Germany,

Professor Emeritus in Physics, University of Wuerzburg

Theilheim, March 11th, 2018

7-3 運営会議委員による点検評価

7-3-1 高原 淳 運営会議委員

若手独立フェロー

昨年から文部科学省が実施している卓越研究員のモデルとなるような素晴らしい制度である。プレゼンテーションされた2名のフェローは理論・計算系でいずれも優れた業績をあげておられ、若手研究者の発掘が十分行われている。議論でも指摘があったように実験系の場合は5年の期間では厳しく、7年程度の期間、さらにはPDなどの共同研究者のサポートが必要不可欠である。

理論・計算分子科学研究領域

優れた研究成果が発信されている。グループによって発表論文数が大きく異なるが、そのグループの構成メンバーの数とも関連している可能性もある。実験系の研究者も分子設計・物性予測に関して理論・計算科学に期待するところは非常に大きいので、実験系と連携し良い研究対象を見いだし積極的な連携をすることによってこの研究領域の活性化を行って欲しい。研究活動分野は比較的構造の明確な系が多く、ソフトマターのような時空間的に複雑な階層構造をもつダイナミックな系への理論・計算が展開出来る研究者（グループ）も今後必要ではないかと考えられる。

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

研究対象はかなり広範囲で、電子物性、エネルギー材料系を中心に優れた研究成果が発信されている。分野的には若干、電子物性系に偏りがあるように感じられる。実験手法としては電子物性評価、ESR、NMR、UVSORなどを駆使した先端測定、特にUVSORに関してはオペランド計測により最先端の研究が推進されている。分子集合体に関しては有機材料系や有機無機ハイブリッドにも多くの研究対象があるので、その分野の研究領域も充実させることによってさらに研究領域の充実が期待できる。

7-3-2 米田忠弘 運営会議委員

物質分子科学研究領域および協奏分子システム研究センター（物質関連）評価

物質分子科学研究領域および協奏分子システム研究センター（物質関連）の研究内容、領域のあり方や分野のバランスに関して意見を述べる。

1) 研究内容

横山グループ

SPRING-8のBL36XUでの雰囲気制御型硬X線光電子分光装置を開発し、固体高分子形燃料電池をターゲットとして完全大気圧（1気圧）下での光電子分光測定。また他の新規測定手法としては、時間分解X線吸収微細構造（XAFS）分光を開発し、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明らかにしている。これらは装置開発に力点がおかれており、対象物質もより社会からのニーズの高い燃料電池や触媒への応用を目指している。他方、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）の装置開発を行っている。表面界面での分子研究、とくにスピンに関する研究に欠くことのできない存在となってきたXMCD手法であるが、最大限の威力を発揮するためには低温や強磁場が要求され、世界最先端にすることは容易ではない。また対象は基礎的学理の興味であることが多い。このような状況ながら、共同利用公開を行って分子磁性の新しい評価

装置としての重要性が国内外で認識されつつ有ることは特筆すべきである。グループ内部で基礎化学および装置開発から、応用を目指した物質探索やデバイス動作下でのキャラクタリゼーションまでバランス良くテーマが配置されておりよくマネジメントされている。反面、限られたスタッフで研究レベルを維持することは、かなりの困難を生じていることは予想される。

代表的論文として[“Hierarchy of Bond Stiffnesses within Icosahedral-Based Gold Clusters Protected by Thiolates,” *Nat. Commun.* **7**, 10414 (2016)] が挙げられるが、開放型共同研究拠点としての良い例である。また海外との共同研究の件数も特筆すべきである。

中村グループ

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）により明らかにしようとし、同時に高周波 ESR を用いたスピン科学研究を進めている。対象物質は有機導体・低次元スピン系である。

特徴は、他に類を見ない磁気共鳴分光測定手法を用いた、最先端の ESR 測定研究の展開や、高圧下・極低温下といった極端条件での測定である。分子科学における磁気共鳴研究のあらたな展開を目論んでいる。代表論文として[*Organometallics* **35**, 3281–3287 (2016)] などが挙げられているが、他のグループに比較して少ないといえる。NIMS から分子提供を受けた共同研究での新規な導電性有機物質の電子／スピン状態の解明を行うなど共同研究は順調に進行していると考えられる。

平本グループ

有機単結晶エレクトロニクス分野を開拓するに必要な基礎的研究を行っている。最近の研究では、電界効果トランジスタ（FET）移動度測定を用い、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を明らかにした。また、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、交互積層超格子キャリア横取り出し型超格子単結晶セルを作製し、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として提案している。業績としては、代表的論文として示されている[*J. Mol. Liq.* **217**, 51–56 (2016)] や[*Langmuir* **32**, 4352–4360 (2016)] に発表された内容よりも、NEDO プロジェクト（2015.3–2016.2, 超高性能単結晶有機太陽電池の原理と動作検証）CREST プロジェクト（有機 PN 制御技術）など大型プロジェクトに直結した社会ニーズの高い物質に特化しようとしている。

西村グループ

固体 NMR を用いた有機・無機分子材料の解析とくに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 を用いた構造解析を行っている。有機溶剤に不溶な非晶性の有機分子材料の状態解析は一般に困難であるが、固体 NMR は非破壊でその分子情報を得ることの出来る手法である。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や、高分子の分子状態の解析を行っている。代表的論文として[“Multiple-Component Covalent Organic Frameworks,” *Nat. Commun.* **7**, 12325 (2016)] が挙げられており、特に生体分子での構造解析に注目が集まっている。所外からの構造解析の依頼、及びこれらを対象とした測定法の開発研究も進めており、NMR 分光器の更新も行っているが、研究の対象は新規測定手法と呼ぶよりも、従来の NMR の新規物質への展開と考えられる。国際的な共同研究の例が少ないのが気になる。

小林グループ

H⁻ 導電性酸水素化物の物質探索や 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、および電極／電解質界面制御によるリチウム二次電池の高性能化を行っている。特に H⁻ 導電体 $\text{La}_{2-x-y}\text{Sr}_{x+y}\text{LiH}_{1+x+y}\text{O}_{3-y}$ の研究から得られた知見を基に物質探索を進めた酸水素化物の物質設計に資する固体化学的手法は大変注目を集めている。電池応用のイオン伝導物質の探索が精力的に行われている。 $\text{La}_{2-x-y}\text{Sr}_{x+y}\text{LiH}_{1+x+y}\text{O}_{3-y}$ が全固体電池の固体電解質として働くこと、あるいはリチウム二次電池の高容量正極材料として期待されている $\text{Li}_{1.2}\text{MO}_2$ (M = Ni, Co, Mn) の研究が行われている。大変タイムリーな電池関係物質の探索が注目される。

山本グループ

有機モット FET (FET = 電界効果トランジスタ)、有機超伝導 FET および超分子ナノワイヤーの研究が精力的に行われている。有機モット絶縁体 $\kappa\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{X}$ (X = Cl, Br) の薄膜単結晶を用いた FET を作製。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という原理を用いたスイッチングを実現している。

また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。

代表的論文として [Nat. Commun. **7**, 12356 (2016)], [Appl. Phys. Lett. **109**, 233301 (2016)] が示されているが、理研・加藤礼三グループから提供される物資群を FET という場でエネルギーを調整することで新規な物性を創出している。グループメンバーである須田らを含めて活発な研究活動が行われている。

鈴木グループ

曲面グラフェン分子の開発（芳香族ベルト・サドル）など新規な炭素系物質の合成からその物性測定を行っている。また電界効果トランジスタのための有機半導体の開発の研究を手がけている。

具体的にはシクロパラフェニレン (CPP) を京大化研・山子グループとの共同研究により合成を進め、いくつかの興味深い CPP 類縁体（カーボンナノフープ）の作成に成功している。目標として初のナノベルトの完成を目指している。これら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 $\pi\text{-}\pi$ 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 $\pi\text{-}\pi$ 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としている。

カーボン系物質の合成から半導体応用を目指している。最近の代表論文として [Chem. –Eur. J. **21**, 18939–18943 (2015)] あるいは [J. Org. Chem. **81**, 3356–3363 (2016)] が示されているが、競争の厳しい領域であるので世界的にリーダーとなる研究分野の探索は容易ではないと考えられる。

2) 領域の構成や分野バランス

物質分子科学研究領域および協奏分子システム研究センター（物質関連）は基礎的な物理化学とマテリアルサイエンス領域の両方をカバーするものと考えられる。

一般的に、基礎的な物理化学の研究を通して、物質の新規物性の発見と、新しい測定手法が生まれると考えられて

いる。またマテリアルサイエンスはデバイス応用や社会的研究需要と大きく結びついている。従って、当該分野は幅広いスペクトルの研究領域をカバーすることになり、また研究室の性格も幅広いスタイルが予想される。

そこで解析手法・手段と、開発・研究対象としている物質の種類から研究室のスタイルを、私見によって2次元に図示したものを下記に示す。横軸に解析手法や装置について、新しい原理に基づいた装置開発を行っている場合に右に、従来手法を組み合わせた手法を駆使している場合を左に取った。縦軸には、研究対象の物質・分子がより社会需要の強い場合を上、学理的性質の強い場合を下にとってみた。その分布を見ると左上にグループが集合していることが伺える。既存の手法を駆使して需要の高い物質研究にシフトしている傾向が見える。

分子研が日本を代表するリーディング研究組織で有るためには、個々の研究者のレベルがトップクラスであるとともに、共同研究や装置開放により分野の発展の核となることの両方が要求される。個々のグループの業績は素晴らしいと考えるが、後者の日本の分子科学研究の核となるためには新奇測定手法／装置開発の比重を高めることも重要であると考ええる。

測定手法も幅広い対象があるが、分子を対象とした顕微鏡技術の開発はその必要なものの1つと考えられる。無機物質よりも電子線ダメージに弱く、既存の透過型電子顕微鏡を越えた装置を開発することが必要かと考える。分子への損失が少ない走査型トンネル顕微鏡・原子間力顕微鏡も候補であると考えられる。また生体分子の観察のための新規手法も要求される。このような分野を将来的に充実させることは全体のバランスを考えた場合、必要かと考える。

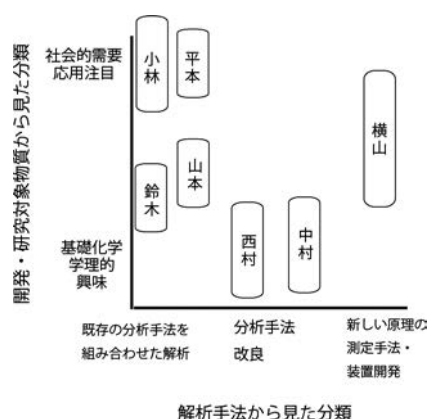


図 物質分子科学研究領域および協奏分子システム研究センター（物質関連）領域を、横軸に解析手法、縦軸に物質をとったときのグループ分布

7-3-3 大西 洋 運営会議委員

光分子科学研究領域について：3研究部門と1センター・1施設からなる本領域は cutting-edge study とよぶにふさわしい先端的な研究成果を多くあげており、国内においても海外においても存在感を示していることを高く評価できる。第一研究部門は紫外－可視波長域の空間分解分光，第二研究部門は同じく時間分解分光，第三研究部門では軟エックス線分光を極めようとする役割分担は、限られた人員によってできるだけ広い分野をカバーする方策として合理的である。分子制御レーザー開発研究センターならびに極端紫外光研究施設における光源開発と施設提供は分子科学コミュニティに対する非常に重要な貢献であり、今後も高いアクティビティを維持発展することが望ましい。

中長期的な視点では、光分子科学の発展方向を予感させるような先導的（先端的であると同時に先導的）な研究のたねをまくことの重要性をあえて指摘したい。源義経の鴨越や織田信長の桶狭間のように、少人数チームによる局地

戦であっても長く語り継がれるような研究をめざしてほしい。そのような方向性が、ネットワーク型共同研究の拡充をもたらし、分子科学研究所のビジビリティをさらに向上させることを所外評価委員として期待する。

7-3-4 田原太平 運営会議委員

光分子科学研究領域に対する評価レポート

分子科学研究所の光分子科学研究領域の研究者は、各々ユニークでレベルの高い研究を行っている。ナノ構造物質におけるプラズモニクス、特にそのキラリティに関する研究や、量子コンピュータを視野に入れた気相分子の超高速分光はこの領域の中心的な研究であり、オリジナルな研究を展開している。発表論文数は必ずしも多くはないが、分子研はプロフェッショナルな研究者の集団であり、研究の質が最も重要であるのでそれは問題ではないだろう。

極端紫外光研究施設は高度化に成功し、軟X線領域の研究に最適化した放射光施設として、より高エネルギーで大型な他の施設との差別化がうまく図られて世界的に見ても優位性を確保している。放射光光源としての性能向上を背景に、所内の研究者は液体研究や有機薄膜研究などの新しい問題へとその研究を展開し成功を収めている。また、世界中から研究者がUVSORを使用するために集まってきており、この分野での研究と運営が大変うまくいっていることを端的に表している。

レーザー開発研究においても、産業利用を視野に入れた研究およびパルス光発生 of 極限を追求する研究の両方において優れた研究を推進している。開発した技術を共同研究などを通して外部へ提供することで、分子研を中心とするネットワークを構築することができる。分子研是最先端の研究を追求する研究所であり、産業応用を必ずしも視野に入れる必要は無いが、あえて否定する必要もなく、これらレーザー開発の自然な発展としてそれがかなうのならばそれは素晴らしいことであろう。

以上のように光分子科学研究領域の研究者は大変優れており、その多くが世界レベルの研究活動を行っている。しかし以下の点で、活動度をさらに上げる余地が残されていると考える。

まず、光分子科学研究領域の研究者がどのような分野をカバーしているかを鳥瞰すると、明らかに凝縮相の先端的分光計測分野が弱いことに気づく。この研究分野は世界的に見ると分子科学研究の中心の一つであり、周辺分野への波及効果も大きい分野である。歴史的に見てもかつて分子研はきわめて高いレベルの研究を推進し、世界的にその存在感を示していた。また現在、分子研の理論分野には凝縮相ダイナミクスの研究で世界的に良く知られた優れた研究者が複数おり、所内での連携や共同研究という側面から考えても、凝縮相の先端的分光分野の実験家が分子研にいないのは残念である。今後の人事において補強が望まれる。

次に、分子研の“分子科学分野の中心”としての役割の再確認の重要性を指摘したい。すでに述べたように個々の研究者の研究レベルは高いが、それが国内さらには国際的な中心になっているかという観点に立つと改善の余地があると思われる。テーマの設定がややニッチ、あるいは特殊ではないかと感じる研究もある。ただし新奇さとニッチさは表裏の関係にあるので、このこと自体は一概に問題であるとは言えないが、ニッチさはやがて深さや広がりを持った大木になり得て本当の意味があるので、そこに留まることを良しとするべきではないだろう。共同利用機関として、

分子研には国内外の分子科学分野の研究者たちが集い議論を交わす場となることが期待されているし、また実際に長らくその機能を果たして来た。その実現と維持には研究者個々の利益を超えた、学問分野に対する奉仕という側面があり、分子研の研究者（特に教授レベル）に労力を要求するものであるが、これは決して雑用ではないだろう。所長のイニシアティブと求心力のもと、分子研の研究者が協力して（雑用をできるだけ押さえつつ）分子研が外部の研究者の集う場所であり続けるための戦略的努力を、光分子科学研究領域が中心となっていくことを期待したい。極端紫外光研究施設には施設の性格上そういう側面がもともと色濃くあるが、他の分野においても研究者個々の高い研究アクティビティと人的魅力によって外部の研究者を分子研にさらに引き寄せるようになることを期待したい。

7-3-5 西原 寛 運営会議委員

「生命・錯体分子科学研究領域」について

平成 29 年 2 月 9 日に分子科学研究所にて開催された分子研運営会議において、理論・計算分子科学研究領域、光分子科学研究領域、物質分子科学研究領域、および生命・錯体分子科学研究領域について、各領域の研究主幹が研究組織と活動について報告されました。生命・錯体分子科学研究領域については魚住泰広教授から、最近の研究成果や研究連携を含めてご説明をいただきました。本稿では、外部運営委員として、この領域について意見を述べさせていただきます。

生命・錯体分子科学研究領域は、現在、生体分子機能研究部門（教授 3 名、准教授 1 名）、生体分子情報研究部門（教授 1 名、准教授 1 名）、錯体触媒研究部門（教授 1 名、准教授 1 名）、錯体物性研究部門（准教授 1 名）で構成されている。各研究グループのテーマは、「新規な機能を有する金属タンパク質の構造と機能」、「生命分子システムの動的秩序形成と高次機能発現の仕組みの探求」、「生体分子機械の作動原理の解明、設計、創製」、「柔らかい分子集合体で創る人工細胞」、「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を解き明かす」、「赤外差スペクトル法による膜タンパク質の機能発現機構の研究」、「有機分子変換を駆動・制御する新しい反応システムの構築」、「有機化学的手法によるキラル分子の設計・合成・機能創出」、「人工光合成システムの構築を志向した金属錯体化学」である。他の 3 研究領域とのバランスにおいては、本研究領域が金属錯体から、高分子、生体系までの広がりを持つ分子や物質の合成、構造、性質、反応、機能を対象にしており、物理から生物までの幅広い領域を包含する分子科学の発展に重要な役割を担っていると判断できる。各研究グループでは、継続して *Nature* やそのシステマージャーナルをはじめとする高レベルの国際誌に研究成果を発表しており（例、M. Okamura, M. Kondo, R. Kuga, Y. Kurashige, T. Yanai, S. Hayami, V. K. K. Praneeth, M. Yoshida, K. Yoneda, S. Kawata, S. Masaoka, “A Pentanuclear Iron Catalyst Designed for Water Oxidation,” *Nature* **530**, 465 (2016)), 国際的に非常に高いアクティビティを示していると評価される。

分子科学研究所における本領域の立ち位置について敢えて意見を申し上げると、領域内の研究者のアクティビティ並びに研究内容の充実の向上に関して、さらに改善できる余地があると思われる。まず、本領域の両看板である生命と錯体のバランスに関して、生命の方は研究グループが充実しているが、錯体の方は教授、准教授が少ない。分子科学研究所においては、昭和 59（1984）年 4 月に「錯体化学実験施設」が研究所内に発足してから、教授 2 名の体制で日本および世界の錯体化学の拠点として、同分野を先導してきた（北川 進, 分子研レターズ, **74**, 51–53 (2016)）。この歴史を踏まえると、現在の教授 1 名の体制は錯体化学の分野を国際的に先導するためには十分とはいえない。特に、分子科学研究所はこれまで、現在世界で活躍している金属錯体固体物性の研究者を数多く輩出してきたが（例、大塩寛紀教授（筑波大学）、山下正廣教授（東北大学）、北川 宏教授（京都大学）、加藤昌子教授（北海道大学）、藤田

誠教授（東京大学）、塩谷光彦教授（東京大学））、現在の錯体の研究グループの研究の殆どは溶液系に関するものであり、錯体の固体物性化学の研究は皆無であると言える。もし、ユニークな物性を示す金属錯体の合成や物性を研究しているアクティブな研究者が加われば、生命・錯体分子科学研究領域の研究のバランスがより適切になるだけでなく、分子科学研究所の誇りである他に追従を許さない集中した物性科学者や理論化学者との連携や最先端機器や理論を用いる研究が可能になる。したがって、単純な研究人員の増加だけでなく、相乗的な研究による分子科学の領域の創成や革新が期待できる。この観点から、分子科学研究所における次の人事選考において、生命・錯体分子科学研究領域のさらなる充実が分子科学研究所の価値を高め、世界を先導する研究所としての分子科学研究所の地位を確固たるものにし、分子科学を基盤とする自然科学の発展を通して、人類にとって豊かな社会を導くと判断する。

7-3-6 山口茂弘 運営会議委員

生命・錯体分子科学研究領域に関する評価・意見

生命・錯体分子科学研究領域に関し、2月9日に開催されました研究報告会を拝聴し感じた意見を以下にまとめました。

研究内容・分野バランス：生命分野と錯体分野からなる。錯体分野には、魚住グループ、椋山グループ、正岡グループが含まれる。その分野は、担持触媒、有機触媒、錯体触媒と「触媒」の観点からはバランスよく広がっているといえる。そのアクティビティも、魚住らのACCELプロジェクトの推進や、正岡らの*Nature*誌への論文発表など、極めてビジブルで高く評価できる。

特に正岡らの触媒開発は、分子研の看板の一つとなる研究であり、かつ計算科学、測定の観点も含めて包括的に進めることにより、分子研ならではの研究になると期待できる。戦略的な取り組み・支援ができるとよいと思われる。

また、正岡氏自身も、当該分野の若手注目株となっており、無機化学分野で人事が走る際には常に強力な候補になると思われる。最高の転出になるような某かの支援があるとよいと思われる。

椋山氏に関しては、個人的に存じ上げず、その状況はわからないが、分子触媒分野のホープであることには間違いなく、自立性を尊重しつつも、丁寧に育てていただきたい。制度としてだけでなく、必要としている研究者にとって実質的にワークする女性支援プログラムの整備が肝要であろう。

生命科学分野は、生物無機化学分野の青野グループ、構造生物学の加藤グループ、生物物理の飯野グループ、時間生物学の秋山グループに加え、界面化学・超分子化学の栗原グループ、生体分子科学の古谷グループ、タンパク質分子デザインの古賀グループが存在する。詳細は専門外のためわからないが、このように挙げてみると、バランスよく幅広い分野がカバーされているように思われる。新学術領域なども走っており、アクティビティも高いといえる。

領域のあり方・補強プラン：錯体分野と生命科学分野の連携という観点では、必ずしもその意識が高いとは説明からは思えなかったが、潜在的には、栗原グループなど、化学的視点で研究をされているグループが生命分野にも含まれることから、十分に可能であろう。個々のグループが尖った研究をすればよいというものもちろん正しいであろうが、一方で、

一つのグループ内だけでできることも限られつつあるのが現状である。個々のグループが少しずつ幅を広げ、グループ間の重なりをもたせることが研究所の特徴をより顕著にするには重要であり、その意識の共有化が望まれる。また、それを円滑に後押しする仕掛けになるような人事も必要であろう。この観点では、生命・錯体分子科学研究領域に関していえば、錯体触媒分野と生命科学とをつなぐケミカルバイオロジー的な分野が加わればより強くなるように思われる。

生命・錯体分子科学研究領域からは外れるが、合成化学という視点から見れば、分子物性分野に優れた研究者が集まるのが分子研の特徴であるので、その陣容とうまくシナジーを生み出すような機能分子合成の強いグループもやはり一つはあるべきかと思われる。光・電子機能分子材料の合成グループは既にあるものの、マンパワーが確保できておらず、アクティビティが高いとは言い難い。学生をうまく全国から集められるようなカリスマ性をもった人材の登用が鍵であろう。

全体の問題点：全体の研究成果を聞いての驚きは、これだけのビジブルな研究者が集まり、尖った研究により秀逸な成果を多く挙げながらも、各々のグループはかなり小グループで運営されている点である。特に合成系の研究室ではマンパワーの確保が死活問題であり、魚住グループや正岡グループのようにこの点でうまくいっている研究室は成果につながっていることからこの重要性は明白である。昨今、他大学から大学院生を集めるのは益々難しくなっており、小職が属する研究科においても苦戦しているのでその難しさは痛切に感じている。一方、分子研はこれまで、大学院説明会などで工夫を凝らした活動をされ、またアジア等でのリクルート活動においても極めて活発に取り組まれているのもよく知られた事実である。しかし、この観点での継続的かつ変化のある取り組みが必須であろう。周りの大学との研究・教育連携の強化や、地域の高校へのアウトリーチ活動等への「戦略的」な取り組みが益々重要になるように思われる。

以上、散文で申し訳ありません。今後の貴研究所の運営にお役に立てば幸いです。

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配置した。高度な研究を進めるためには研究開発が不可欠であり、研究職員との密な連携が必須である。

流動性の高い分子科学研究所の場合、着任後の研究立ち上げスピードの速さが重要である。また、各研究グループサイズが小さいことも補う必要がある。このような観点でも施設を充実させることが重要である。それによって、転出後もこれらの施設の共同利用によって研究のアクティビティを維持することが可能である。研究者が開発した優れた装置が転出後、共同利用設備として施設の管理となって、さらに広く共同利用されるケースもある。このように、研究所として見た場合、施設の充実が研究職員が流動していくシステムそのものを支援することになる。従って、施設の継続的な運営が重要である。施設の技術職員の技術の向上に努め、絶えず技術レベルの高い人材を確保するように留意している。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も重要である。長期戦略が必要な施設には教授を置くことで、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。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、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。協奏分子システム研究センター（2013年4月発足。分子スケールナノサイエンスセンターを改組）では、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研究を展開している。2017年4月に発足したメゾスコピック計測研究センターでは、広い時空間領域で階層間のエネルギー・情報の変換を可視化する新しい計測手法の開発を目指す。分子機能の開発と機能を計測する研究を組み合わせることで、分子科学研究所の特徴を活かしつつ、新しい分子科学研究領域の開拓を目指す。

岡崎統合バイオサイエンスセンターは、岡崎3機関の共通研究施設として2000年に設置され、岡崎3研究所（基礎生物学研究所、生理学研究所そして分子科学研究所）の研究力を統合した成果をあげてきたが、本年度をもってその使命を全うする。2018年4月からは、新たに自然科学研究機構直属の組織として、「生命創生探究センター」が発足する。

分子研では、共同利用をより活性化し、大学の研究活動に貢献する施策として、新しい人事交流制度を開始する。これは、かつて法人化前に運用されていた「流動研究部門」制度を元に、現在の人事制度と我が国が置かれている状

況とに対応した新たな取り組みである。具体的には、以下の2つの制度を試行し、分子科学分野のトップレベル研究と、研究者層の厚みを増強するための支援を行う。(1)特別研究部門では、分子科学分野において最先端の科学を切り拓く世界的研究者を招聘し、研究に専念できる環境を提供する。(2)流動研究部門では、分子科学分野において独創的な研究を行なっている大学教員をクロスアポイントメントで招聘し、分子研の先端設備を使った研究に集中的に取り組む時間を提供する。次年度からの研究室設置に向けて、本年度は特別研究部門の制度を整えると同時に、運営会議の人事選考部会において、教授採用にかかる人事選考を行なった。

(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，世界最高輝度を狙って，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高輝度光源施設が完成した。UVSOR 施設における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。なお，世界的競争力のある国内の最先端高輝度光源として，SPring-8 は X 線領域を，UVSOR-III は真空紫外～軟 X 線領域をカバーしているが，UVSOR-III の軟 X 線は低エネルギー部分だけで十分ではない。そのため，現在，広く軟 X 線をカバーする最先端高輝度光源の建設予算を量子科学技術研究開発機構が中心になって要求中である。実現が現実になった際には，利用分野として互いに相補的になるような調整を行う予定である。

ビームラインについては，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 本を中心にエンドステーションの重点整備を進めている。UVSOR の現在の光源特性では軟 X 線発光分光はもはや競争力がなくなったが，各種真空紫外分光，電子分光，軟 X 線吸収分光はまだ世界的競争力がある。このように今後，電子光学と X 線光学を中心としたエンドステーションの重点整備は UVSOR 施設の最重要な中長期戦略となるため，世界的な研究動向を把握しつつ，世界を先導するような高度な装置（導入後も開発要素が高く，共同利用するにも高度な技術支援が不可欠な装置）で成果を上げていく体制が不可欠である。そのため，研究職員として電子光学，X 線光学を専門にする主任研究員を制度化し，まず，電子光学分野の主任研究員が平成 30 年度から着任することになった。光源の高輝度化に従い，世界的には顕微光電子分光技術に大きな進展が見られるため，技術開発力に優れた主任研究員をコアにして UVSOR の光源性能をフルに生かせる新技術の開発・導入を検討する予定である。

現在，アンジュレータビームライン 6 本の内，1 本は次世代光源技術の開発として，渦光など電子ビームを用いた回折限界のコヒーレンス光発生とその利用法に関する多様な研究を進めている。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，エンドステーションとして固体の角度分解光電子分光装置（スピン分解，ミクロンスケールの空間分解なども可能）が威力を発揮している。また，3 本の軟 X 線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（溶液系や反応系のその場・オペランド観測，ミクロンスケール及びナノスケールの顕微分光なども可能）に利用されている。これらすべてにおいて海外の一線級の研究者による利用が進んでおり，国際化に成功している。

なお，エンドステーションとして国際競争力のある先端装置を整備しても先端である期間は 10 年程度であるため，最長でも 20 年を越えないうちに世界動向に沿ってビームライン全体の整理統合を進め，順次，世界最高輝度（1 GeV 以下の低エネルギーリングとして）の UVSOR-III 光源の特性を活かせるものに置き換えるなど，計画的に更新・高度化を実施していくことが肝要である。

8-2 協奏分子システム研究センター

8-2-1 経緯と現状、将来構想

協奏分子システム研究センターは2013年4月に発足し、分子科学研究所がこれまでに培ってきたナノサイエンスに関する研究資産を基盤に、新しい分子科学の開拓に取り組んでいる。センターのミッションは、「分子それぞれの性質が階層構造を持つ分子システムの卓越した機能発現にどう結びつくのか」という分野横断的な重要課題を解決することである。そのためには、システムの構成要素である分子自身について理解を深めるのに加え、それぞれの分子がどのようなネットワークや制御を介して混然一体となり、複雑かつ高度な機能の発現へと繋がっていくのかを理解しなければならない。

このような目的の達成に向けて、微細なナノスケールの分子科学からタンパク質や細胞のようなマクロで不均一な分子科学まで研究者を幅広く募り、「階層分子システム解析研究部門」、「機能分子システム創成研究部門」、「生体分子システム研究部門」の3部門体制で研究活動を展開している。現在、専任PIが5名（秋山教授、山本教授、古賀准教授、鈴木准教授、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11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。

2017年度の特筆すべき研究成果として、機能分子システム創成研究部門では、光駆動型のデバイス開発に関する研究（山本グループ）が科学雑誌「*Advanced Materials*」や「*Nature Materials*」に掲載された。その他、階層分子システム解析研究部門の秋山グループや小林グループからは、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出すことが求められる。既に一部のグループ間で共同研究が進行中であるが、より多くのセンター構成員で共有できる新しい研究プロジェクトを練り上げていく必要がある。専門から少し離れた分野でのプロジェクト立案には人的交流が何よりも重要であるため、研究グループの居室を南実験棟の3階の1フロアに集中させ、一部をオープンスペースとして運用しつつ、科学的な議論や交流を活発に進めている。

その他、CIMoS セミナー、CIMoS ランチ、ワークショップなどを企画・実施し、それらを通じてセンターの活動や成果を国内外のコミュニティに向けて発信している。

8-3 メゾスコピック計測研究センター

メゾスコピック計測研究センター（以後「本センター」）は、旧分子制御レーザー開発研究センター（平成9年4月設立）からの改組により、平成29年4月に設立された。分子科学研究所の研究対象は、広い意味での分子物質であることは設立当初から変わらないが、当初は一つ一つの分子の挙動に重点をおいて注目されていたのが、最近では様々な分子やナノ構造体などがシステムを作って発現する機能・特性の解明と制御、及び新しい機能を持つシステムの構築に重点がシフトしてきている。それによって、分子の物質・エネルギー・情報変換能力を精緻に引き出すことが初めて可能になると考えられる。そのような新しい研究の方向性に対応する一つの方策として、分子科学研究所では平成25年4月に協奏分子システム研究センターが設立されたところである。

分子計測の先端的手法では、時間、空間、波長、パワーなどにおいて極限に向かう方向が精力的に推し進められ、大きな成果を上げてきた。そうした手法では、理想化された極限条件下で系に大きなエネルギーの擾乱を与えて素過程の挙動を解析する方法が一般的であった。現在もその方式の重要性に変わりはないが、このような従来型計測法の可能性と限界も少しずつ明らかになってきている。本センターでは、従来の手法とは一線を画した、繊細・広帯域・多次元の計測解析手法で分子システムの挙動・機能のありのままの姿に迫り、また低摂動・超精密制御で新たな量子機能を創出する、革新的実験法の開発が必要という立場をとる。新たな分子能力の創発の現場を、マクロ階層の強靱でロバスタな性質と、ミクロ階層の機能に富む特性が絡んだメゾスコピック領域に求め、分子の機能や反応の契機となる過程を明らかにするために、広い時空間領域で階層間のエネルギー・情報の変換を可視化する新発想の計測開発手法を開発する。（ここでいうマクロ、ミクロ、メゾスコピックは、相対的な階層であり、扱う系によって実際のスケールは異なる。また空間だけではなく、時間領域についてもメゾスコピック領域が考えられる。）これらを通じて、分子の素過程が系全体の大域的な機能を生む機構を解明する研究などに主眼を置いて推進する。この目的のために、旧分子制御レーザー開発研究センターの研究業績・資産を引き継ぎながらも、分子科学研究所の基盤となる四つの領域から関連する研究を遂行する研究者の参画を得て、それらをまたぐ領域横断的なセンターとして設置することとした。これにより、同様な組織構成を取った協奏分子システム研究センターとともに、分子物質のシステムとしての挙動・機能を研究する両輪として研究活動を展開することが可能となった。

このような新しい分子計測制御法を開発・利用していくためのセンターとして、以下の3部門と担当教員を置くこととした。

- (1) 物質量子計測研究部門：大森賢治（教授、光分子科学研究領域からの兼任）、信定克幸（准教授、理論・計算分子科学研究領域からの兼任）
- (2) 繊細計測研究部門：岡本裕巳（教授・センター長、専任）、平等拓範（准教授、専任）
- (3) 広帯域相関計測解析研究部門：飯野亮太（教授、生命・錯体分子科学研究領域からの兼任）、藤 貴夫（准教授、専任）

専任研究グループに所属する助教等のスタッフも本センターの各研究部門に所属する。また、旧分子制御レーザー開発研究センターに所属した技術職員も、引き続き本センターに所属させる。今後分子科学研究所に採用される教授・准教授も、状況に応じて上記のいずれかの部門の専任または兼任ポストを占めることが想定されている。それぞれの部門の任務は、(1) 蓄積のある光観測・制御法を先鋭化し、更に量子系の構造変形を操作することによって、新しい量子相を作り出して制御し、量子情報処理など新規な分子の能力を引き出す；(2) 時空間を分解した計測法、増強光場を利用した超高感度・並列計測等による低摂動で繊細な分子計測法等を開発し、分子のありのままの姿を非破壊的に観測する；(3) 多変数スペクトロスコーピー・多次元解析手法、高分解能広帯域計測法とその解析法を開発して分子

の能力とそれを司る物理過程を明らかにし、従来とは質の異なる情報を獲得する革新的手法を開拓する；等を目指している。

以上のような方針で分子システムの計測解析に関する研究を遂行すること、及びそれを通じて我が国の関連研究コミュニティにおける人材育成に寄与することが本センターの主なミッションであるが、同時にここで開発された新しいメゾスコピック計測手法を共同研究に供することも重要な機能の一つである。各研究グループの協力研究やその他のチャネルの共同研究を通じてそれを実施するほか、適宜醸成された計測手法・技術に関するセミナー等を開催することを計画している。また、さらに新たな革新的計測手法の開拓を念頭に置いた、萌芽的研究テーマとアイデアの発掘、可能性及び将来構想を議論する研究会等の開催も視野に入れている。旧分子制御レーザー開発研究センターでは、分子科学研究所と理化学研究所の連携融合事業「エクストリーム・フォトニクス」を推進する母体となり、その主な研究活動終了後も、合同シンポジウム等の活動を自主的に継続してきたが、本センターはこの活動の継続のための推進母体ともなることが想定されている。なお、旧分子制御レーザー開発研究センターは、発足当初、種々の共用機器を保有して施設利用に供していたが、現在ではそれらの機器とその利用は全て機器センターに移っており、それを受けて本センターでは施設利用は想定していない。

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5名、事務支援員1名、技術支援員4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5名、研究員4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。利用状況として、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、高額な修理を頻繁に実施せざるを得ない状況になっている。全てを同時に更新することは予算的な制約からほぼ不可能であり、緊急性・使用頻度を考慮して順次更新を進めるプランを策定して、分子研全体の設備マスタープランへ組み込む必要がある。その中で、2016年度、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、もはや維持費が高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。所内で機器導入検討委員会を立ち上げ、所内外の要望と需要を検討し、重点化の方向性と導入優先順位を議論した。2017年度は、低温微結晶X線回折装置の検出器と駆動部更新、MALDI 質量分析器の更新を行った。

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。次年度よりセンター長の交代と共に、運営体制の見直しも検討されている。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に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。分子科学研究所の特色として「低温磁性」「構造解析」を柱とした分野強化を進める。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り、主任研究員制度の適用を検討する必要があるだろう。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、UVSORをはじめとする所内センター等と共同して取り組むことも効果的と考えられる。所内技術職員の連携協力が技術を支えるのに不可欠であるが、コミュニティ全体から提案を求める体制づくりも必要となろう。また、各種プロジェクトに適当な装置の時間貸しをすることによって維持費の一部を捻出するなどの工夫も必要であろう。
- 3) 国際的な水準での先端的機器。分子科学の発展・深化を強力に推進する研究拠点としての分子研の役割を体現する施設として、UVSORや計算科学研究センターと同様に、機器センターも機能する必要がある。高磁場NMR装置やESR装置は、国際的な競争力を有する先端的機器群であり、研究所全体として明確に位置付けを行い、利用・運営体制を整備することによって、このミッションに対応すべきである。国外からの利用にも対応するため、技術職員には国際性が求められる。2)と同様に、所外コミュニティからの要請・提案と、所内研究者の積極的な関与が不可欠である。特に、新規ユーザーの開拓は、分子科学の新領域形成へと繋がると期待されるものであり、これまで分子研との繋がりがあまり深くはなかった研究者層・学協会との積極的な連携を模索することにも取り組む。先端的機器は不断の性能更新が宿命であるが、全ての面でトップたることは不可能であるので、意識して差別化を行い、分子研ならではの機器集合体を構成することに留意する。

8-5 装置開発室

装置開発室は、分子科学分野の研究者と協力し最先端の研究に必要となる装置や技術を開発することと、日常の実験研究において必要となる装置や部品類の設計・製作に迅速に対応する、という二つの役割を担っている。製作依頼件数は年間 300 件超に及ぶ。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。

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。これに加えて、3D プリンタやシミュレーションなどのデジタルエンジニアリングの導入を進めている。

装置開発室の設備については、創設から 40 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。また、2017 年度にはワイヤー放電加工機の更新を行った。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、2017 年度は技術職員を 2 名採用決定した。

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。2017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。

2018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」の2システムから構成されていたが、2017年10月に更新した計算機システムでは、「高性能分子シミュレータ」の1システムに統合化した。本シミュレータは、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、研究室で所有する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。

高性能分子シミュレータは、主として日本電気製のLXシリーズで構成される1069ノードの共有メモリ型スカラ計算機クラスタであり、全サーバは同一体系のCPU（Intel Xeon）およびOS（Linux3.10）をもとに、バイナリ互換性を保ち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4.096 PFLOPSで総メモリ容量219 TByte超である。LXシリーズのクラスタは以下の運用形態を念頭に置いて2タイプから構成されている。1つはTypeNと呼ぶノード単位の利用形態向けクラスタで、2.4 GHzのクロック周波数を持つ40 CPUコア、192 GBメモリ構成のノード794台と、メモリ構成を768 GBに強化した20台からなるPCクラスタである。もう1つはTypeCと呼ぶコア単位の利用形態向けクラスタで、3.0 GHzのクロック周波数を持つ36 CPUコア、192 GBメモリ構成のノード159台と、24 CPUコアにGPGPUを2基搭載した演算性能を強化したノード96台からなるPCクラスタである。インターコネクトは、Omni-Pathアーキテクチャを採用し、全台数を100 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。これらPCクラスタは9.4 PBの容量を持つ外部磁気ディスクを共有し、Lustreファイルシステムを構成している。これらとは別に前システムから継続運用しているPRIMEHPC FX10は、16 CPU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。

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。

共同利用に関しては、2017年度は233研究グループにより、総数904名にもおよぶ利用者がこれらのシステムを日常的に利用している。近年、共同利用における利用者数が増加傾向にあり、このことは計算科学研究センターが分子科学分野や物性科学分野において極めて重要な役割を担っており、特色のある計算機資源とソフトウェアを提供していることを示している。

計算科学研究センターは、国家基幹技術の一つとして位置づけられているポスト「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「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」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（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」、ポスト「京」萌芽的課題アプリケーション開発「萌芽的課題 基礎科学の

挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」，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」，元素戦略プロジェクト＜研究拠点形成型＞とも連携を行っている。これら5つの大規模並列計算を志向したプロジェクトを支援し，各分野コミュニティにおける並列計算の高度化へさらなる取り組みを促すことを目的として東北大学金属材料研究所，東京大学物性研究所，自然科学研究機構分子科学研究所が共同で「計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業（SCCMS）」を運営しており，2017年度はこれら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「機能性材料設計への最新の計算科学アプローチ」と2つのウィンタースクール「第7回量子化学スクール～基礎理論と高精度理論の発展～」と「第11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29年度 システム構成（平成29年10月1日以降）

超高速分子シミュレータシステム 4.096 PFLOPS

クラスタ演算サーバ TypeN	
	型番：日本電気 LX 2U-Twin2 サーバ 406Rh-2
	OS：Linux
	CPUCore 数：31,760 CPUCore（40 CPUCore × 794 ノード）2.4 GHz
	総理論性能：2,439 TFLOPS（3,072 Gflops × 794 ノード）
	総メモリ容量：152 TB（192 GB × 794 ノード）
クラスタ演算サーバ TypeNF（メモリ強化）	
	型番：日本電気 LX 1U サーバ 110Rh-1
	OS：Linux
	CPUCore 数：800 CPUCore（40 CPUCore × 20 ノード）2.4 GHz
	総理論性能：61 TFLOPS（3,072 GFLOPS × 20 ノード）
	総メモリ容量：15 TB（768 GB × 20 ノード）
クラスタ演算サーバ TypeC	
	型番：日本電気 LX 1U サーバ 110Rh-1
	OS：Linux
	CPUCore 数：5,724 CPUCore（36 CPUCore × 159 ノード）3.0 GHz
	総理論性能：549 TFLOPS（3,456 GFLOPS × 159 ノード）
	総メモリ容量：30 TB（192 GB × 159 ノード）
クラスタ演算サーバ TypeCA（演算性能強化）	
	型番：日本電気 LX 4U-GPU サーバ 108Th-4G
	OS：Linux
	CPUCore 数：2,304 CPUCore（24 CPUCore × 96 ノード）3.0 GHz
	総理論性能：221 TFLOPS（2,304 GFlops × 96 ノード）+ 806 TFLOPS（NVIDIA Tesla P100 × 192）
	総メモリ容量：18 TB（192 GB × 96 ノード）

「京」用開発サーバ	
	型番：富士通 PRIMEHPC FX10
	OS：Linux
	CPUCore 数：1,536 CPUCore（16 CPUCore × 96 ノード）
	総理論性能：20 TFLOPS（211.2 GFLOPS × 96 ノード）
	総メモリ容量：3 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：DDN SFA14KX
	総ディスク容量：9.4 PB
高速ネットワーク装置	
	型番：Intel Omni-Path Architecture 100Gbps
フロントエンドサーバ	
	型番：日本電気 LX 2U-Twin2 サーバ 406Rh-2
	OS：Linux
	総メモリ容量：1,536 GB（192 GB × 8 ノード）
運用管理クラス	
	型番：日本電気 Express5800/R120g-1M
	OS：Linux
	総メモリ容量：1,024 GB（64 GB × 16 ノード）

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。

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										
柚 米一郎	豊橋技科大学長	○	○ ~'84.3.31										
島村 修	相模中央研最高顧問 理事	○	○										
田島弥太郎	遺伝研所長	○											
馬場 宏明	北大応電研所長	○	○	○	○								
福井 謙一	京大工教授, 京都工織大学長, 基礎化学研究所長	○	○	○	○	○	○						
藤巻 正生	お茶女大家政教授, お茶女大学長	○	○	○									
向坊 隆	東大名誉教授	○											
森 大吉郎	宇宙研所長	○	○ '83.11.25 死亡										
亀谷 哲治	星薬科大学長		○	○									
角戸 正夫	姫路工大学長		○	○									
本多 波雄	豊橋技科大学長		○ '84.4.16~	○	○	○							

氏名	所属	第1期 '81.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31	第9期 '97.6.1～ '99.5.31	第10期 '99.6.1～ '01.5.31	第11期 '01.6.1～ '03.5.31	第12期 '03.6.1～ '04.3.31
田中 郁三	東工大理教授理学部長， 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	○	○	○	○								
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				○	○	○	○					
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 莊次	早稲田大理工学総合研 究センター客員教授							○	○	○	○		
又賀 昌	(財)レーザー技術総合 研第5研究部長							○	○	○			
丸山 和博	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 ～ 2018.3.31
加藤 伸一	豊田中央研究所代表取締役		○	○	○			
小間 篤	高エネルギー加速器研究機構理事 物質構造科学研究所長		○					
土屋 莊次	(台湾)国立交通大学講座教授 東京大学名誉教授		○	○	○			
益田 隆司	電気通信大学長		○					
江崎 信芳	京都大学化学研究所長			○				
野口 宏	中日新聞編集局文化部長			○	○ (~2008.7.31)			
時任 宣博	京都大学化学研究所長				○			
田中 宏明	中日新聞編集局文化部長				○ (2008.8.1~)			
齊藤 軍治	名城大学教授					○	○	
廣田 襄	京都大学名誉教授					○	○	
増原 宏	(台湾)国立交通大学講座教授					○	○	
菊池 昇	豊田中央研究所代表取締役							○
晝間 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	'17. 4. 1 ~
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. 米国ノースウェスタン大学 教授						○		
NAAMAN, Ron イスラエル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							○	
UMBACH, Eberhard ドイツミュンヘン国立科学アカデミー 理事, カールスルーエ工科大学教授								○
LIST, Benjamin ドイツマックス・プランク 石炭研究所所長								○

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 莊次 東大教養助教授					○
永沢 満 名大工教授					○
務台 潔 東大教養助教授					○
藤田純之佑 名大理教授					○
塚田 捷 分子研助教授					○

9-8 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 莊次	東大養学教授	○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			◎				
田中 郁三	分子研教授(客員) (東大理教授)	○			○人	○人							
笹野 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 二郎	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		○										
黒田 晴雄	東大理教授		○										
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~)	○	○	○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) (東工大名譽教授)		○	○	○	○							
茅 幸二	慶應大理工教授			○共	○共	○共							
菅野 暁	東大物性研教授			○	○								
坪村 宏	阪大基礎工教授			○人	○人								
細矢 治夫	お茶女子理教授			○人	○人								
又賀 昌	阪大基礎工教授			○共	○~'88.3.31								
松永 義夫	北大理教授			○人	○人	○人・共	○	○人	○人	○	○'00.4.1~	◎	
北川 禎三	分子研教授			○共	○人・共								
齋藤 一夫	分子研教授			○	○	○							
青野 茂行	金沢大院自然科学研 究科長				○								
安積 徹	東北大理教授				○人	○人							
原田 義也	東大養学教授				○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				○	○	○(副)	○人 (~'94.3.31)	○人	○人	○~'00.3.31		
岩田 未廣	分子研教授					○人	○人						
志田 忠正	京大理教授					○人	○人						
田隅 三生	東大理教授					○人	○						
仁科雄一郎	東北大金材研教授					○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					
小川植一郎	九大総合理工教授						○人	○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	○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 久清	福井高専校長								○	○			
小谷 正博	学習院大理教授								○人	○人	○人	○共	○共
西 信之	分子研教授								○人	○人			
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	○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 関一彦	姫路工業大理教授 名大物質科学国際研 究七教授									○共 ○人	○共 ○人		
田中武彦	九大院理教授									○人	○人		
篠野嘉彦	九大院総合理工教授									○(副)	○(副)		
小林速男	分子研教授									○人	○人	○共	○共
阿知波洋次	東京都立大院理教授										○	○人共 (人'02.4.1～)	○人
北原和夫	国際基督教大教養教授										○	○	○
江口宏夫	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											○	
榎茂好	九大有機化学基礎七 教授											○人	○人
菅原正	東大院総合文化教授											○共	○共
魚住泰広	分子研教授											○'02.4.1～	○
西川恵子	千葉大院自然科学教授												○
岡本裕巳	分子研教授												○人
加藤隆子	核融合科学研教授												○

9-9 運営会議委員（2004～）

◎ 議長
(副) 副議長

人－人事選考部会に属する委員
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	○	○	○
薬師 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			
富宅喜代一 神戸大院理名誉教授			○(副)人	○(副)人			
山下 正廣 東北大院理教授			○人	○人			
渡辺 芳人 名大副総長，教授			○	○			
山縣ゆり子 熊本大院薬教授				○	○		
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	○	
寺寄 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）

法第 4 条第 1 項第 1 号に掲げる 教育研究組織に該当する組織	該当する職	分子研規則 による種別	任 期	任期更新に関する事項	
				可 否	任 期
分子科学研究所に置かれる研究 領域及び研究施設	助教	5 年に満たない 任期を残す者	分子研規則に よる残任期間	可	任期を 定めず に採用
		5 年を越える 任期を残す者	5 年		

9-11 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関係及び協力に関すること。
- 八 施設設備等研究環境及び安全に関すること。
- 九 国際共同研究に関すること。
- 十 社会との連携に関すること。
- 十一 学術団体との連携に関すること。
- 十二 管理運営に関すること。
- 十三 学術情報体制に関すること。
- 十四 研究成果等の公開に関すること。
- 十五 財政に関すること。
- 十六 点検評価体制に関すること。
- 十七 その他委員会が必要と認める事項

2 前項各号に掲げる事項に係る具体的な点検評価項目は、委員会が別に定める。

(専門委員会)

第7条 委員会に、専門的事項について調査審議するため、専門委員会を置くことができる。

2 専門委員会に関し必要な事項は、委員会が別に定める。

(点検評価の実施)

第8条 自己点検・評価又は外部評価は、毎年度実施する。

(点検評価結果の公表)

第9条 研究所長は、委員会が取りまとめた点検評価の結果を、原則として公表する。ただし、個人情報に係る事項、その他委員会において公表することが適当でないと認めた事項については、この限りではない。

(点検評価結果への対応)

第10条 研究所長は、委員会が行った点検評価の結果に基づき、改善が必要と認められるものについては、その改善に努めるものとする。

(庶務)

第11条 委員会の庶務は、岡崎統合事務センター総務部総務課において処理する。

(雑則)

第12条 この規則に定めるもののほか、委員会の運営に関し必要な事項は、委員会の議を経て研究所長が定める。

附則

- 1 この規則は、平成16年4月1日から施行する。
- 2 この規則施行後、第2条第2項第7号により選出された最初の委員の任期は、同条第3項の規定にかかわらず、平成18年3月31日までとする。

9-12 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解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。)との一体的関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、総研大との一体的関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索することにより、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、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索を行う。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、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、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、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、タンク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、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元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、新規な電氣的・磁氣的・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、系外惑星探索、宇宙生命探索、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】

(生理学研究所)

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。)との連携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ーボードへの参加等を通じて緊密に連携し、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(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 総研大との密接な関係・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 本機構のグローバル化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 30 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、平成 29 年度に掲げた研究大学強化促進事業における後期 5 年の将来構想に基づき、国際的先端研究の推進支援、国内の共同利用・共同研究の推進支援、国内外への情報発信・広報力強化、若手・女性・外国人研究者の支援、IR による戦略立案及び「研究大学コンソーシアム」の活動の推進に取り組み、機構及び大学における研究力強化に寄与する。
- 【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を増員するとともに、当該外国人研究者等を窓口とした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、連携基盤の更なる形成を進め、宇宙生命探査に係る国際的研究拠点の形成を推進する。その上で、系外惑星の探査とその大気の観測・分析及び異なる環境下での光合成反応等の研究に取り組む。
- ・【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、ワシントン大学、アリゾナ大学のほか、新たにマックスプランク研究所とも連携した国際的研究拠点を引き続き進める。
- 【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に先端光科学研究分野及びプラズマバイオ研究分野を新たに立ち上げ、両分野における研究を推進するとともに、新分野探査室において新分野探査活動を継続する。
- ・【3-2】新分野創成センターでこれまで推進してきたブレインサイエンス研究分野、イメージングサイエンス研究分野と岡崎統合バイオサイエンスセンターを融合し、更に発展させた生命創成探究センターを発足させ、生命科学の幅広い分野にまたがる融合研究を開始する。
- ・【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索することにより、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、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、装置受入れのための望遠鏡・ドームの改修、装置部品の搬入を引き続き進める。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、締結した協定に基づき、豪州との短期的協力プログラムを推進し、望遠鏡の性能向上に向けた技術協力を受け、年間 10 夜のすばる望遠鏡の観測時間を提供する。
- 【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、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・保守の国際的責務を果たし、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引き続き観測時間を確保し、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維持・強化し、高い研究成果を上げる。また、アルマの更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継続する。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下、アルマ望遠鏡のデータ利用者のための解析環境を維持する。
- 【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】30m 光学赤外線望遠鏡（TMT）計画で日本が分担している主鏡分割鏡材を 60 枚以上製作し、10 枚以上研磨加工するとともに、望遠鏡本体構造の製作のため、図面作成をはじめとする製造工程に移行する。TMT の建設を担う TMT 国際天文台の共通経費を分担し、現地建設作業を開始するとともに、観測装置・科学研究の検討、国際協力の下での大学共同利用・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をグレードアップさせた「bKAGRA フェーズ 2」の本格稼働に向け、防振系、補助光学系をはじめとした様々な装置の開発を進める。
- ・【7-2】bKAGRA フェーズ 1 の運転及び bKAGRA フェーズ 2 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等の各機関と協力して進める。

- ・【7-3】野辺山宇宙電波観測所においては、大阪府立大学等と連携して開発し、45m 鏡へ搭載した周波数分離膜を用いて、2 周波 (22/43 GHz) 同時観測機能を追加するための試験を継続する。
- 【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】位置天文観測衛星計画では、超小型衛星の「Nano-JASMINE」に関して、近い将来の打ち上げに備えて、データ解析等の準備を継続する。また、より大きなサイズの衛星計画である「小型 JASMINE」に関しては、更に詳細な仕様の検討と技術実証実験を行い、概念設計を進める。
- ・【8-2】小惑星探査機「はやぶさ 2」について、平成 30 年度に予定をされている小惑星リュウグウ到着に伴い、レーザー高度計 (LIDAR) の運用、データ取得、データ解析を行う。木星系探査機「JUICE」搭載レーザー高度計 (GALA) と火星サンプルリターン計画 (MMX) の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 (JAXA) 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・尖鋭化を踏まえ、国際協力体制の構築に努めながら、JAXA 公募型小型衛星ミッションによる実現を目指す。
- ・【8-4】世界と伍していくため、天文学専用のスーパーコンピュータを平成 30 年度にリプレイスする。これを中心とする共同利用計算機システムを安定に運用し、日本全国の研究者の共同利用に供する。同時に大規模シミュレーション用ハードウェア・ソフトウェアの開発・運用を通じ、シミュレーション天文学拠点として優れた成果を上げる。計算基礎科学連携拠点や HPCI コンソーシアムでの活動を通じ、日本の数値天文学業界の意見集約窓口としての役目を果たす。また、4 次元デジタル宇宙 (4D2U) プロジェクトの活動を継続し、天文学研究の推進に供する。
- 【9】東アジア地域の大学・天文学研究機関との連携を強化するため、東アジア天文台の運用 (望遠鏡の共同運用) や若手研究者の育成 (研究員の受入れ等) を共同で行う。
- ・【9-1】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とともに、すばる望遠鏡の国際共同運用について協議を進める。若手研究者の育成を目的とした東アジア中核天文台連合博士研究員給費制度 (EACOA Fellowship) に加え、新たに東アジア天文台博士研究員給費制度 (EAO Fellowship) を実施し、EACOA 加盟天文台・研究所のみならず、ハワイでの研究活動をも支援することにより、若手にとってより魅力のある制度にする。

(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) で達成したイオン温度 1 億 2,000 万度のプラズマの輸送特性を調べるため、統合輸送解析コードの機能拡張を行い、水素同位体効果の解明に向けたデータベースの拡充を図る。解析に必要となる電子温度分布、電子密度分布、中性子束分布の測定精度を向上させるため、計測器の性能向上を図る。また、今後予定されている加熱電力の増強と長パルス化に向けて、真空容器の耐熱化を進めるとともに、プラズマ対向機器の性能評価を開始する。
- 【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の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高エネルギー粒子・MHD 連結シミュレーション解析の高度化、③複数輸送コードの結合による周辺プラズマ輸送解析の進展、④重水素実験との連携による水素同位体効果等の解析の進展、⑤統合輸送コードへ組み込む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】核融合炉の早期実現を目指し、ヘリカル炉の基本設計の改良を段階的に推進する。特に、炉の小型化・低コスト化を図る。連動して、①大口径強磁場導体試験装置を用いた超伝導マグネットの実規模導体開発、②「熱・物質流動ループ」を用いた液体ブランケットの総合試験と水素回収、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、光操作技術、大規模遺伝子解析、バイオインフォマティクス、画像解析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、データベースを充実させ、得られた知見について情報発信を進める。
- 【15】バイオイメージング関連施設の国内ネットワークの構築、欧米を含む国際ネットワークへの参加を第3期中期目標期間終了時まで実現する。
- ・【15-1】研究デザインに関する助言から観察機器や画像取得・解析手法の提供までを含めた、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、画像解析に関するトレーニングコースを国際バイオイメージングネットワーク（GBI）と共同で開催する。

（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、イオンチャネルの機能調節の分子基盤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、血管新生に関わる分子メカニズムやミラーイメージペインの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、素材の視知覚に基づく行動発現に関する研究などに取り組む。
- ・【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、特に、3D-SEMにおいて、新型検出器を使用してデータ収集の効率化を図る。また、新規高効率逆行性遺伝子導入ウィルスベクターの開発と供給を行う。
- 【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の高い空間解像度と信号雑音比を元に、個人レベルでの手指の一次体性感覚野の機能解剖マップを取得する。

（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、機能性ナノ物質、タンパク質などの高次複雑分子系の様々な分子システムの構造・反応・物性とその起源を解明する。また、生命システムにおける機能と階層構造の因果関係を解析し、より複雑で多機能な分子システムを設計するための技術開発を行う。
- 【20】光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】光子科学研究領域が中心となって、メゾスコピック計測研究センターと連携し、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、光格子中の極低温原子結晶における強相関多体ダイナミクスの研究を推進する。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。特徴ある先端的なレーザー光源を開発し、それらを用いて分子レベルでの生命現象の解明を目指した新たな分光システムや多光子顕微鏡の開発を進める。ナノ構造物質のキラル光学特性の研究を展開するとともに、光操作の実験研究を継続する。また協奏分子システム研究センター及び生命・錯体分子科学研究領域と連携し、先端的分光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・動態及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・機能性有機無機化合物・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・蓄電池・センサーなどの新規機能物性探索と特性向上、さらには機能解析のための新規物性計測手法開発を行う。また生命・錯体分子科学研究領域が中心となり、金属錯体・有機触媒及び生体分子複合体の高次構造・動態・機能の基礎及び展開研究を行う。特に、機能活性中心分子とこれら分子が機能発現する反応場との統合的基礎学理探求を基礎として、新しい物質輸送、エネルギー変換、物質変換などを司る機能性分子システムの設計・創製を推進する。

（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、若手研究者による分野間連携研究プロジェクト、分野融合型共同研究事業を継続し、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じ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。国立天文台では、外部委員を含めた科学戦略委員会を発足させ、プロジェクト間の連携も含め、研究体制を適宜見直す。核融合科学研究所では、平成28年度に発足した「LHD国際プログラム委員会」の意見を反映し、LHDの実験テーマグループを、国際共同実験まで見据えた新たな実験テーマグループに再編する。
- ・【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。
- ・【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、国立天文台では、アドバイザー委員会として設置してきた、すばる小委員会、アルマ小委員会などを改組し、新たに5つの科学諮問委員会として発足させ、定期的に開催し、そこでの議論も反映させながら事業を推進する。核融合科学研究所では、LHDにおける重水素実験の遂行にあたり、引き続き、実験内容や安全管理状況に関する情報を地元住民等と密に共有し、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】系外惑星探査プロジェクト室に地球型系外惑星探査の専門家である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、併せて各種の系外惑星探査を推進できる室長(特任准教授)を配置し、宇宙生命探査プロジェクト室、アストロバイオロジー装置開発室と連携し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。
- ・【24-2】アストロバイオロジー装置開発及び宇宙生命探査に係る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、系外惑星大気の研究を継続する。また、新装置の詳細設計を開始する。
- ・【24-3】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ージングサイエンス研究分野に、岡崎統合バイオサイエンスセンターを融合し、更に発展させた生命創成探究センターを発足させ、生命科学の幅広い分野にまたがる融合研究を開始する。また、新分野創成センター新分野探査室におけるこれまでの検討等に基づき、先端光科学研究分野及びプラズマバイオ研究分野を新たに立ち上げ、両分野における融合研究を推進する。併せて、新分野探査室において、新分野の探査を継続する。

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、機構本部において分野融合型共同研究を推進する。
- ・【25-2】平成29年度に第1期開発を終えて一部の共同研究公募事業で運用を開始した自然科学共同利用・共同研究統括システム(NOUS)について、第2期開発を行い、当該システムを用いた機構内各機関の共同利用・共同研究公募の更なる適用拡大を図る。
- ・【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た分野別研究ネットワークの充実及び大学間連携による各大学の研究力の強化に向けた具体的な活動について検討を行う。
- ・【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メント制度等による優れた研究者の招へい・研究の活性化や、サバティカル制度を活用した積極的な人材育成を図る。萌芽の分野を育成するために、若手研究者を大学等から採用するとともに、育成した人材を大学に輩出することで新たな分野の拡大を図り、大学及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実現を目指しつつ、研究者コミュニティへの窓口として、科学戦略委員会及びユース・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、大学と共に国内観測拠点の運用に資する。特に、旧岡山天体物理観測所に隣接して設置された京都大学の3.8m望遠鏡については、京都大学の協力の下、国立天文台が主体となって、全国共同利用に向けた準備を行う。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」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、将来の飛翔体及び大型地上望遠鏡を用いた太陽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、コミュニティの意見を幅広く取り入れる仕組みを有する3つの共同研究制度を、国内共同研究の基盤として引き続き活用する。国外については、LHDにおける重水素実験開始に伴って組織した「LHD国際プログラム委員会」を国際共同研究の基盤と位置付ける。両者を車の両輪として活用することにより、LHDの核融合分野の国際的学術拠点としての機能を強化する。特に海外の共同研究者への情報発信と利便性の向上に努め、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継続的な整備、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、③プログラム開発・最適化支援等を通じたシミュレーションコードの高度化を通じて理論・シミュレーションによる共同研究を積極的に推進する。共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため、プラズマシミュレータの共同利用率を100%に維持する。また、プラズマシミュレータの更新に向けた調査研究を行う。
 - ・【29-3】核融合工学研究プロジェクトでは、ヘリカル炉設計の更なる精密化を行い、特に、炉の小型化・低コスト化を図る。工学基盤の一層の拡充のため、大型試験設備の新しいアイデアを取り入れた活用を促進し、特に、高温超伝導マグネット開発、液体ブランケット開発、超高熱流材料開発、低放射化材料開発に関する国内外の大学や民間等との共同研究の展開を進める。また、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とともに、次期計画を具体化する。
 - ・【29-4】引き続き、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、更なる国際共同研究活動の活性化のため、アメリカのウィスコンシン大学との研究機器の共同開発や、中国の西南交通大学との中国における新装置建設に向けた共同研究を進める。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。特に生物の環境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。国際カ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（NICA）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イ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において、引き続き共同利用率60%を目指す。また、共同利用研究の充実を目指して、サル撮像を可能とする専用コイルを付加することにより、国内連携ネットワークの強化を進める。さらに、最先端のMRIを開発しているNeuroSpinから招いた客員教授を中心に、拡散強調画像を用いたヒト脳の機能構造解析に関する国際共同研究を展開する。
 - ・【31-3】岡崎共通研究施設動物実験センターの改修に着手し、実験モデル動物の表現型解析等を高めるための先端技術の開発と共同利用・共同研究を推進するための研究環境基盤の構築を進める。

- ・【31-4】ナショナルバイオリソースプロジェクト（NBRP）事業第4期2年目を迎えるにあたり、京都大学霊長類研究所へ、代表機関機能のスムーズな移行を続けるとともに、更なる効率的な運営及びより微生物学的に安全な動物の共有に向け、繁殖施設の集約化を進める。また、繁殖からリタイアしたニホンザルの各個体の身体情報を収集・分析し、飼養や取り扱いに関する方策について検討する。
- ・【31-5】特定神経経路における遺伝子導入効率や特異性がより高くなるよう新しく開発された血清型のアデノ随伴ウイルスベクターや糖タンパク質を変換したレンチウイルスベクターの提供に対応するとともに、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）のデータ取得速度が飛躍的に向上する新型検出器を使用してデータ収集の効率化を図るとともに、解像度のより高いコネクストミクス技術の検討を行う。
- ・【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更に充実するとともに、人材育成や成果発表を目的とするシンポジウムを開催する。また、10を越える脳科学研究分野の新学術領域を束ね、連携の基盤となる取組「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や老朽化対策を計画的に行うとともに調整運転の効率化を行う。軟X線ナノ顕微鏡や高分解光電子分光装置群の国際的な共同利用・共同研究を強化する。研究動向を踏まえ、優先的に整備することを決めた光電子ナノ顕微鏡の開発研究を国際連携によって開始する。
- ・【32-2】協奏分子システム研究センターにおいては、複雑で多機能な分子システムの解析や創成に取り組むとともに、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の計算資源を100%共同利用に提供し、触媒反応、タンパク質の反応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。スーパーコンピュータの運用においては、可用性の向上及び省電力の検討を引き続き行い、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めざ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）新分野創成センターにおいては、新分野探査室における探査活動を継続するとともに、萌芽的分野の推進・支援を行う。
- ・【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】（生命創成探究センター）平成30年度に創設する生命創成探究センターにおいて、機構外の研究者がセンター内の教員と行う共同研究として、生命創成公募研究（仮称）を開始する。さらに、機構外の大学・研究機関に所属する研究者を代表とする生命創成探究連携班（仮称）をセンター内に新たに設置し、国内外の研究者との共同研究に向けた準備を行う。また、岡崎統合バイオサイエンスセンターから継承するオリオンプロジェクトにおける公募研究及びバイオネクスプロジェクトにおける共同利用研究を、更に推進し、成果の取りまとめを行う。

（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】研究力強化推進本部の研究連携室を共同利用・共同研究室として改組し、同室内に、機構全体としての共同利用・共同研究の推進を担う運用班、NOUSの技術対応を担う技術班、各機関と連携した機構全体のIRを担うIR班を置くことにより、共同利用・共同研究における支援体制の充実を図るとともに、機構のIR機能の更なる発展に向けた体制整備を進める。
- ・【34-2】各機関の研究力強化戦略室等において、共同利用・共同研究等を通じ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。
- ・【34-3】各機関がそれぞれ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）の一連のプロセスについて、平成29年度に構築したNOUS移行計画に基づき、NOUSの第2期開発のための準備及び体制構築を進める。
- ・【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、相手機関の実態調査を行うなど、更なる連携強化を図る。また、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。

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。）との連携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ーボードへの参加等を通じて緊密に連絡し、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等を通じ、引き続き、機構本部と総研大葉山本部の緊密な連絡体制を維持する。
- ・【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絡・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】総研大と連携した体験学習、大学院説明会の実施、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できるようにするため、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は、リサーチアシスタント制度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「スプリングスクール（春の体験入学）」、「夏の体験入学」、「アジア冬の学校」をはじめとした研修会、教育プログラム等を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任期付の研究員を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。さらに、戦略的に国際共同研究を推進するための実質的な体制の整備に向けた検討を行う。

- 【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）及び東アジア天文台（EAO）での国際公募によるフェロー受入れや独・マックスプランクプラズマ物理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、生理学研究所、分子科学研究所でも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するなど、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等により、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】本機構のグローバル化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】グローバル化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、広報、情報セキュリティ及び職員研修を中心に具体化を進め、I-URIC連携企画として実施する。
- ・【50-2】異分野融合・新分野創成委員会において、新たな学術の芽を育てるため、4機構による異分野融合・新分野創出支援事業を継続して推進するとともに、4機構連携による研究セミナー等を実施し、その成果を検証する。
- ・【50-3】評価検討委員会において、国公私立大学等への広報活動を強化するため、大学共同利用機関による共同利用・共同研究の成果や大学の機能強化等への貢献を可視化する4機構共通の評価指標の確立に向けた検討を引き続き進める。また、4機構合同で作成する研究活動等に関するパンフレット等を通して、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。
- 【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】機構一体としての共同利用・共同研究支援体制を整備し、各機関との連携体制を強化する。さらに、国際的な共同研究等についても戦略的な体制について検討を行う。
- 【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とともに、法人のガバナンス体制等における監査の一環として、監事が役員会等の重要な会議に陪席する。また、監事と内部監査組織が連携して機構全体の監査を行うとともに、情報共有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】教育研究の活性化を図るため、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などの高度専門人材について、多様な人材の確保とそのキャリアパスの更なる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等を行い、技術交流を更に発展させるなど、能力向上と自己啓発の促進を推進する。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。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及び生命創成探究センターの運営の評価を行う。また、新分野創成センターに先端光科学研究分野及びプラズマバイオ研究分野を新たに立ち上げ、融合研究を推進する。
 - 【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等で議論し、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、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、事務等の共同実施の検討を進めるとともに、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、機構内の各種会議において、更なるペーパーレス化を推進する。
- Ⅲ 財務内容の改善に関する目標を達成するためにとるべき措置
- 1 外部研究資金、寄附金その他の自己収入の増加に関する目標を達成するための措置
 - 【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、募集等の情報の周知を徹底するための説明会の実施や、Webページの充実等を進める。
 - 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を行い、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】野辺山研修所については、機構全体の研修等施設として引き続き運用し、その促進を図る。また、乗鞍観測所については、引き続き運用しつつ、廃止に向けた検討を進める。さらに、伊根実験室については、共同利用施設としての運用を停止し、廃止に向けた手続きを進める。
- 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】機構として、外部の評価分析ツール等を活用した各機関、各研究組織、機関横断的組織等の現況分析を実施するとともに、機構全体の自己点検・外部評価等を実施し、その結果を広く公開する。
 - 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】機構の広報室と各機関の広報担当が連携し、機構の活動や財務内容、共同利用・共同研究の状況等を、シンポジウムや一般公開、Webページ、報道発表など多様な伝達手段により、一般社会等へ積極的に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。また、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。また、各機関の安全管理状況を確認するための相互視察を引き続き実施する。
- 【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、平成29年度に設置したCSIRT（Computer Security Incident Response Team）の技術向上等に努め、情報セキュリティ対策を一層推進する。

3 法令遵守に関する目標を達成するための措置

- 【75】職員就業規則などの内部規則の遵守を徹底するため、幹部職員を含む全職員を対象とした服務規律やハラスメント等に関する研修を毎年度実施する。
- ・【75-1】職員就業規則などの内部規則の遵守を徹底するため、幹部職員を含む全職員を対象とした服務規律やハラスメント等に関する研修を実施し、周知徹底を図る。
- 【76】研究活動における不正行為及び研究費の不正使用を防止するため、組織の管理責任体制を明確化し、eラーニングによる研究倫理教育、各種啓発活動の実施、競争的資金等の不正使用防止に係るコンプライアンス教育等を毎年度実施するとともに、その効果を定期的に検証し、実効性を高める。
- ・【76-1】研究活動における不正行為及び研究費の不正使用を防止するため、各機関の管理責任者による不正行為防止計画及び不正使用防止計画の実施状況の検証を行う。また、eラーニングによる研究倫理教育を実施するとともに、各種啓発活動の実施、競争的資金等の不正使用防止に係るコンプライアンス教育等を実施する。