

## 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）を平成29年度まで受託、実施した。また、スーパーコンピュータ共同利用事業（理論計算分子科学）に関連するものとして、文科省の「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）の構築」プロジェクトは平成27年度で終了し、平成26年度より「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発（ポスト「京」重点課題⑤）」が開始している。さらに、理論計算に関連するものとして、文科省「元素戦略プロジェクト」の「触媒・電池の元素戦略研究拠点」（分子研は分担）を受託、実施している。

(2) 『国内の研究者への共同研究・共同利用支援に関する事業』のうち、実験研究のための共同利用は機器センターが担当している。研究設備ネットワーク事業（平成19年度から「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」、平成22年度より「大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用と共同研究の促進」）を進めている。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（第3期中期計画期間）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「ナノテクノロジープラットフォーム」事業予算（外部資金）を財源とし、運営費交付金一般経費も用いて運用している。

(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、いくつかの予算枠を組み合わせる形で実施している。なお、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、イスラエルとの若手研究者を対象とした国際共同研究（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)

大学連携研究設備ネットワークは、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」事業として平成19年度よりスタートした。分子科学研究所が事務局を担当するこの事業は、平成22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と共同研究の促進」事業として経常経費化され、平成29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の促進」事業（以下「本事業」という）として発展してきた。現在、本事業には国立大学72法人ばかりでなく、利用者として公私立大学や企業も含めた約340の機関が参加しており、外部公開機器の登録台数は687台（本事業の予約・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1,982台に上り、登録ユーザー数は11,000名を超えている（数値は平成30年12月31日現在）。表1には利用実績件数を示した。発足当時から順調に学外利用数が増加し、平成30年度には2000件／年に達している。平成29年度、設備の登録範囲を化学系設備のみならず物質科学全般へ拡大したことに加え、来年度、利用者に限定していた公私立大等へも設備登録ができるよう門戸を開く事が決定し、さらなる登録設備の増加とネットワーク拡大、それに伴う利便性向上が期待されている。

昨年度より第3期中期計画の終了に合わせて5年計画で以下の事業を開始している。設備の学外利用を促進するために、全国13の地域から外部利用が期待される設備の補修やコンポーネント追加による高機能化等の提案を支援する相互利用加速事業（表2）を実施した。また、マネージャー及びコーディネーター2名を配置し、展示会や学会等での啓発活動の強化、参画機関等への訪問・要望調査や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継続して実施している。特に、外部利用促進に向け参画機関同士や外部機関との交流を促進する形式の講習会・研修会開催等を強化した（表3）。また、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、機器・分析センター協議会と協力して人材育成データベースを構築し本格運用を開始した。連携面では、平成30年度に開催した講習会・研修会・展示会の一部を除き、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ている。また、昨年まで協力関係を構築してきた国立大学法人機器・分析センター協議会とは、分子科学研究所が同協議会へ参画する事が正式承認され、人材育成や広報面での協力体制が強化された。ハード面では、平成30年5月に、予約・課金システムの大容量化対応、セキュリティ対策、利便性向上等を目的として、ユーザーの要望を反映した形でシステムの全面更新が完了し、より良い利用環境へ改善された。

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）が可能となり、本事業の安定運営に大きく寄与している。

今後は、①公私立大等の設備ネットワーク協議会への受入れによるネットワークの拡大、②予約・課金システム等運用改善、③研究設備の相互利用加速事業の実施、④講習会・研修会の開催、⑤他の設備共用事業等との連携継続、⑥広報活動、⑦設備ネットワーク事業の今後の在り方について検討等を行い更に事業を推進していく予定である。

表1 大学連携研究設備ネットワーク利用実績一覧

	H19～30 合計	H26	H27	H28	H29	H30*
学内	870,346	108,824	112,982	111,728	119,349	111,656
学部間	604,248	85,214	86,544	80,219	78,353	67,210
学外	10,376	1,176	1,312	1,544	2,000	1,843
国立大間	6,235	682	760	807	905	858
国立大以外	4,141	494	552	737	1,095	985
民間企業	1,860	240	298	226	488	465
合計	880,747	110,000	114,294	113,272	121,374	111,997

\* H30.12.31 現在

表2 平成30年度加速事業（設備整備関連）課題一覧

地域	大学	部署	代表者	職	課題名・設備名
東関東	千葉大	共用機器センター	榎 飛雄真	准教授	設備 NW システムにおける大学システムとのデータ連携
西関東・甲斐	東京学芸大	教育学部	國仙 久雄	教授	MALDI-TOF 質量分析装置の補修整備
	東京農工大	学術研究支援総合センター	野口 恵一	准教授	電界放出型走査電子顕微鏡画像のデジタル化
北陸	金沢大	理工研究域	太田 明雄	准教授	小角 X 線散乱装置のメンテナンスサイクルの安定化
西近畿	大阪大	理学研究科	今田 勝巳	教授	AVANCE700 用クライオプローブメンテナンス
	大阪大	産業科学研究所	鈴木 健之	准教授	最先端質量分析装置の補修整備による相互利用促進
中国	鳥取大	生命機能研究支援センター	森本 稔	准教授	ガスクロマトグラフ質量分析計の整備点検
	岡山大	自然生命科学研究支援センター	高橋裕一郎	教授	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	太田 弘道	助教	大学内外の共同利用に供する X 線回折装置群の性能維持
	岡山大	自然生命科学研究支援センター	太田 弘道	助教	大学内外の共同利用に供する単結晶 X 線構造解析装置の性能維持
	広島大	自然科学研究支援開発センター	齋藤 健一	教授	高性能ハイブリッド型質量分析計の点検・整備
	広島大	大学院工学研究院	定金 正洋	准教授	固体 NMR のトリプルレゾナンスの修理、復活再生
	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	超微小結晶用単結晶構造解析システム安定稼動のための修繕
	山口大	大学研究推進機構	水上 洋一	教授	フローサイトメーター自動化システム構築事業
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 線構造解析装置 Saturn 冷却装置・ターボ分子ポンプ修理
九州	長崎大	産学官連携戦略本部	真木 俊英	准教授	絶対 PL 量子収率測定装置極低温測定オプション導入事業
	長崎大	産学官連携戦略本部	真木 俊英	准教授	元素分析用電子ウルトラマイクロ天秤更新事業
	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定性分析における相互利用加速事業
その他	分子研	機器センター	横山 利彦	教授	低温磁性・構造解析機器群による物質科学共同利用

表3 講習会・研修会開催一覧

講習会・研修会名	開催日	開催地	参加数	申請者
NMR 個別研修	H30. 5.24-25	長崎大	4名	分子研
FT-ICRMS 講習会	H30. 6.13	京都大	12名	分子研
X線回折セミナー「単結晶X線構造解析の基礎と応用」	H30. 6.19	大阪大	27名	大阪大
平成30年度第1回技術英語研修	H30. 6.29	名古屋大	12名	分子研
NMR 集合研修 (大阪大学) *	H30. 8. 7- 8	大阪大	11名	分子研
平成30年度第2回技術英語研修	H30. 8.31	名古屋大	9名	分子研
5大機器分析“相互”活用セミナー——目指せ Synergy 隣は何をする人ぞ? ——*	H30. 9. 5	秋田県教育会館	64名	分子研
ナノテクノロジープラットフォーム技術者支援交流 PG *	随時・複数	複数	1名	分子研
機器解析合宿——単結晶 X 線構造解析編——	H30. 9.10-12	愛媛大	17名	愛媛大
機器解析合宿——核磁気共鳴分光編——	H30. 9.12-13	愛媛大	22名	愛媛大
平成30年度第3回技術英語研修	H30. 9.25	名古屋大	12名	分子研
社会人のための NMR 講習会	H30.10. 3- 5	広島大	16名	広島大
試料導入系を学ぶ～ LC, GC の地味にいい仕事～	H30.10. 5	大阪大	15名	分子研
分析機器技術交流会 2018 at OIST	H30.10.18	OIST	4名	分子研
集束イオンビーム加工観察装置 (FIB) を用いた試料作製セミナー	H30.10.31-11. 1	富山大	4名	分子研
ICP-AES のための測定・試料前処理技術講習会	H30.11.19-21	東北大	3名	分子研
平成30年度第4回技術英語研修	H30.11.31	名古屋大	8名	分子研
質量分析装置を用いて未知タンパク質を同定してみよう	H30.12. 4	岡山大	7名	岡山大
機器分析 共用利用促進セミナー～現場から技術継承のシステム構築を考える～	H30.12. 5	航空会館	18名	分子研
NMR 集合研修～効率的な NMR 研修プログラムについて考える～	H30.12.19	航空会館	5名	分子研
平成30年度第5回技術英語研修	H30.12.20	名古屋大	9名	分子研
表面プラズモン共鳴装置個別講習会	H31. 1.18	鹿児島大	1名	分子研
集束イオンビーム加工観察装置 (FIB) を用いた平面試料作製実践練習セミナー*	H31. 1.22	北陸先端大	3名	分子研
平成30年度第6回技術英語研修	H31. 1.24	大阪大	10名	分子研
蛍光X線分析をこの一回でマスター	H31. 1.24-25	鹿児島大	6名	分子研
実習を通して基礎から学ぶ香りの分析技術講習会	H31. 2.21-22	沖縄高専	5名	分子研
H31 X線回折 分析技術研究会	H31. 3.14-15	埼玉大	10名	分子研

\* 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

## 5-2 新分野創成センター（自然科学研究機構）

自然科学研究機構は、共同研究・共同利用の研究機関として広範な自然科学の先端的研究を推進するとともに、未解明の課題に挑戦するため、従来の研究領域の枠組みを越えて多様な研究者が協働する研究の場を創り出し、研究者コミュニティの発展に貢献することを目的としている。この従来の研究領域の枠組みを超えた「新たな研究領域の開拓」を目的として、平成21年に新分野創成センターが設立され、新しい脳科学の創成を目指すブレインサイエンス研究分野と、広範な自然現象を新たな視点から理解することを目的としたイメージングサイエンス研究分野の二つの研究分野でスタートした。平成25年には第三の研究分野として、宇宙における生命研究分野を立ち上げ、これは平成27年度からアストロバイオロジーセンターに移行した。またブレインサイエンス研究分野とイメージングサイエンス研究分野は平成30年度に機構直属の組織として新しく設立された生命創成探究センターに移行した。

これによって設立後9年を経て新分野創成センターの三つの研究分野は発展的に解消することとなった。これらに代わって今後数年間にわたって推進する新たな研究領域の設定に関して、平成27年に新分野創成センターの中に新分野探索室を設置し、機構の5機関から委員が出て議論を進めることとなった。新分野探索室での議論の結果として、平成30年度から新たな研究分野として、「先端光科学」を設定することが決定した。また、新分野探索室で設定する研究分野以外に、コンソーシアム型共同研究を推進する体制として「プラズマバイオ」を今一つの研究分野として、やはり平成30年度から設定することとなった。

ここでは、特に分子科学研究所が深く関与することが想定される、先端光科学研究分野について述べる。光学顕微鏡や分光学における先端的な技術は、これまで自然科学の各分野にブレークスルーをもたらし、20世紀にはレーザーや放射光などの新しい光源の出現によりそれらが著しく加速した。それらはさらに、観察対象の性質を調べる道具としてのみならず、光による制御の技術を生み出し、光科学の広い分野への応用を可能とした。現在においても光の新たな特性に関する発見や解明が進展を見せ、光イメージングにおいては多様な超解像の手法が創出されるなど、新たな光操作技術や光計測技術の発展とその広い自然科学分野での応用が期待されている。新分野創成センターに設置された先端光科学研究分野では、光そのものの特性に関する新原理の発見とそれに基づいた新装置の開発ではなく、「原理自体は（ほぼ）解明されているが、生命科学や物質科学、その他自然科学諸分野への新原理の技術的応用が未だなものに焦点を当て、新分野としての萌芽を探索し、展開を図る」ことを目的として、活動を行う。

この目的に沿って研究活動を推進する体制として、教授会議を組織し、各機関から1名ずつの併任教員（教授または准教授）、機構内の教授が兼任する分野長（現在分子研が担当）、新分野創成センター長、及び数名の所外からの客員教授・准教授で構成することとなった。また先端光科学研究分野で独自の研究活動を推進するために、専任の特任助教を雇用することとなった。

このような体制を構築した上で、新たな分野融合的発想に基づく光技術の適用法や新技術開発につながる先駆的・挑戦的な萌芽研究を開拓・推進する「共同研究」、およびそれらを探索する「研究会」のプロジェクト提案を広く機構内外から公募し、教授会議での審査を経て、採択課題を推進することとなった。平成30年度は、8件の共同研究を採択し（うち5件が機構外からの応募）、研究活動を支援している。また専任の特任助教は公募によって広く人材を募集し、教授会議構成員の内の5名で構成される選考委員会で選考が行われて候補者が決定し、平成30年度中に着任予定となっている。

### 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）

自然界の事象はマイ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いる。さらに全体としては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、「階層構造とシミュレーション」、「分子シミュレーションとその応用」、「プラズマと中性ガスの相互作用」、「活性分子種」、「ハビタビリティと光合成」等をテーマとした連携シンポジウムを平成31年1月10、11日に犬山国際観光センターフロイデで開催した。また、活動の一環として、理論・計算分子科学に関するセミナーを開催した。さらに、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(2012年)7月～2022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いる。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、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30年度の支援装置・プログラム一覧、表2には平成30年度の採択課題一覧、表3には平成30年度採択・実施件数日数(平成30年4月1日～平成30年12月31日実施分)を示した。

表1 平成30年度支援装置・プログラム一覧(分子科学研究所担当)

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
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]	解良 聡施設長 横山利彦教授 小坂谷貴典助教	UVSOR・光分子科学 物質分子科学 物質分子科学

<p>マイクロストラクチャー 製作・評価支援</p>	<p>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プースは、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プース、マスクアライナー (ミカサ社製 MA-10)、スピコンター (ミカサ社製 MS-A100)、小型 2 源 RF スパッタ装置 (デポダウン) (クライオバック)]</p>	<p>山本浩史室長 青山正樹技術職員 高田紀子技術職員</p>	<p>装置開発室 装置開発室 装置開発室</p>
	<p>3次元光学プロファイラーシステム (Nexview) 3次元光学プロファイラーシステム (ZYGO Nexview) は、非接触で表面の 3 次元形状測定、表面粗さ測定を行う装置。つなぎ合わせ機能により □46.5 mm 範囲の 3 次元形状測定や、Ra0.1 nm 以下の超精密研磨面の測定、透明膜の厚さ測定 (1 μ m 以上) などが可能。X-Y ステージ可動範囲 200 mm × 200 mm。Z 軸可動範囲 100 mm [精密温度調整機能付クリーンプース]</p>	<p>山本浩史室長 青山正樹技術職員 近藤聖彦技術職員 高田紀子技術職員</p>	<p>装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室</p>
<p>装置開発</p>	<p>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</p>	<p>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</p>	<p>装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室</p>
<p>電解放出形走査電子顕微鏡</p>	<p>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)]</p>	<p>横山利彦センター長 石山 修特任研究員</p>	<p>機器センター 機器センター</p>
<p>低真空分析走査電子顕微鏡</p>	<p>幅広い試料に対する、SEM 観察と EDS 元素分析の環境を提供。SEM 本体は、日立ハイテクノロジー社製 SU6600。10 ~ 300Pa の低真空観察に対応し、絶縁性試料を導電処理なしで観察可能。分解能は、高真空 1.2 nm (30 kV)、低真空 3.0 nm (30 kV)。EDS 分析装置は、BrukerAXS 社製 XFlash5060FQ 及び XFlash610。表面凹凸の影がでにくく高感度な EDS 検出器を搭載。温度を -20 ~ 50℃ 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)]</p>	<p>横山利彦センター長 石山 修特任研究員 酒井雅弘技術職員</p>	<p>機器センター 機器センター UVSOR</p>
<p>単結晶 X 線回折</p>	<p>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]</p>	<p>横山利彦センター長 藤原基靖技術職員</p>	<p>機器センター 機器センター</p>
<p>単結晶 X 線回折 (微小結晶用)</p>	<p>微小結晶 / Rigaku HyPix-AFC [Mo 線源、半導体検出器、N<sub>2</sub>/He ガス吹付温度可変装置]</p>	<p>横山利彦センター長 岡野芳則技術職員</p>	<p>機器センター 機器センター</p>

結晶スポンジ法を用いた分子構造解析	Rigaku 社製 XtaLAB P200 [Mo/Cu デュアル線源, PILATUS200K 検出器, 100 K- 室温温度可変] Rigaku 社製 SuperNova [Mo/Cu デュアル線源, Atlas S2 CCD 検出器, 100 K- 室温温度可変]	横山利彦センター長	機器センター
粉末X線回折	Rigaku 社製 RINT-UltimaIII [X線源 Cu 管球, 光学系; 集中法, 平行ビーム法, 小角散乱, 検出器:シンチレーションカウンタ, オプション:低温試料台他]	横山利彦センター長 藤原基靖技術職員	機器センター 機器センター
X線溶液散乱計測システム	X線小角散乱による溶液状試料 (タンパク質, ミセル, コロイドなど) の構造解析・生体高分子試料の状態診断支援 (回転半径, 形状, 分子質量, 距離分布関数など) ・溶液散乱データの解析・解釈支援 ・放射光施設での実験に向けた試料の前評価, 計画立案支援	横山利彦センター長 秋山修志教授 向山 厚助教	機器センター 協奏分子センター 協奏分子センター
蛍光X線分析	JEOL JSX-3400RII Na-U, RhK $\alpha$	横山利彦センター長 上田 正技術職員	機器センター 機器センター
機能性材料バンド構造顕微分析システム	静電半球型アナライザーを用いた機能性材料の価電子バンド構造測定システム。ディフレクターを使用することで2次元波数空間マッピングを行うことが可能。薄膜作製用真空チェンバー, 試料表面処理チェンバー (電子衝撃加熱, 通電加熱, Ar <sup>+</sup> 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。	解良 聡教授 田中清尚准教授 出田真一郎助教	光分子科学 UVSOR UVSOR
X線光電子分光	汎用のX線光電子分光器 (Al, Mg-K $\alpha$ 線利用) を提供。施設利用として気軽に利用いただける。 [電子分光器 Omicron 社製 EA-125 (ツインアノードX線源)]	横山利彦センター長 酒井雅弘技術職員	機器センター UVSOR
電子スピン共鳴	電子スピンの分布や相互作用, ダイナミクスの解析支援。Bruker 社製 ESR EMX (X-band), ESR E500 (X-band), ESR E680 (W-band, X-band) を提供。ESR E680 では, 通常の X-band CW-ESR 以外にも, 多周波数 (Q-, W-band), 多種測定 (パルス, 多重共鳴) が可能。 [Bruker ESR E680 (ハイブリッド磁石 (超伝導 6 T, 常伝導 3.5 T), 3.8–300 K, Q-band パルス ENDOR & ELDORR, X-band パルス ENDOR)]	横山利彦センター長 中村敏和准教授 浅田瑞枝特任助教 藤原基靖技術職員 伊木志成子技術支援員	機器センター 物質分子科学 物質分子科学 機器センター 機器センター
SQUID 型磁化測定装置	SQUID 型磁化測定装置 (Quantum Design 社製 MPMS-7, MPMS-XL7) により, 高感度磁化測定が可能。DC 測定に加え, AC 測定や光照射・圧力下の測定も可能。その他, 超低磁場や角度回転オプションも利用可能。 [QuantumDesign 社製 MPMS-7 ( $\pm 7$ T, 2–400 K, 300–800 K, DC), QuantumDesign 社製 MPMS-XL7 ( $\pm 7$ T, 2–400 K, DC&AC)]	横山利彦センター長 藤原基靖技術職員 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)	横山利彦センター長 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	横山利彦センター長 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)	Rigaku 社製 DSC8231/TG-DTA8122 [Temperature range DSC8231 : –130–500 °C, TG-DTA8122 : RT–1000 °C]	横山利彦センター長 藤原基靖技術職員	機器センター 機器センター

MALDI-TOF 質量分析	Bruker Daltonics microflex LRF [Mass range : $m/z$ 1–300,000]	横山利彦センター長 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
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 $\text{cm}^{-1}$ , 分解能 : 面内 1 $\mu\text{m}$ , 深度 2 $\mu\text{m}$ , 3.2–500 K)]	横山利彦センター長 山本浩史教授 賣市幹大技術職員	機器センター 協奏分子センター 協奏分子センター
FT 遠赤外分光	FT-IR 分光器による遠赤外スペクトル測定支援。格子フォノン、分子ねじれ振動などの集団運動や分子間水素結合、配位結合等の弱い結合による光学モードを検出。 [Bruker 社製 IFS66v/S 10–12000 $\text{cm}^{-1}$ ]	横山利彦センター長 山本浩史教授 賣市幹大技術職員	機器センター 協奏分子センター 協奏分子センター
蛍光分光	HORIBA SPEX Fluorolog 3-21 [Xe ランプ 250–1500 nm]	横山利彦センター長 上田 正技術職員	機器センター 機器センター
紫外・可視・近赤外分光光度計	Shimadzu 社製 UV-3600Plus [185–3300 nm]	横山利彦センター長 上田 正技術職員	機器センター 機器センター
円二色性分散	JASCO J-720WI [165–1100 nm]	横山利彦センター長 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]	横山利彦センター長 上田 正技術職員	機器センター 機器センター
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 $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ - $^{15}\text{N}$ 三重共鳴測定に対応。 [Bruker AVANCE 800US (溶液, クライオプローブ)]	横山利彦センター長 加藤晃一教授 矢木真穂助教 谷中冴子助教 磯野裕貴子技術支援員	機器センター 生命・錯体分子科学 生命・錯体分子科学 生命・錯体分子科学 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。 $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ - $^{15}\text{N}$ 三重共鳴実験まで対応。 [Bruker AVANCE 600 (固体)]	横山利彦センター長 西村勝之准教授	機器センター 物質分子科学
600MHz 溶液 NMR	$^1\text{H}$ 600MHz 溶液 [JEOL JNM-ECA600]	横山利彦センター長 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
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)	不斉分子触媒の配位子, 不斉有機分子触媒などの合成, 有機小分子の合成を支援。また, 有機分子の光学異性体の光学純度の測定, ならびに, キラルセミア分取カラムによる光学異性体の分離を行う。 [有機分子の設計, 合成, 解析, 光学異性体の評価, 分離精製]	榎山儀恵准教授 鈴木敏泰准教授 泉関督人助教 大塚尚哉特任研究員	生命・錯体分子科学 協奏分子センター 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 小坂谷貴典助教	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。超高压装置を利用した高温・高压下での物質合成, 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]	小林玄器准教授	物質分子科学
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
機能性分子システム創製 (機器センター長協力研究)	機器センター以外の分子研施設利用を実施する際に, 機器センター機器 (所内専用機器を含む) を補助的に利用するための区分	横山利彦センター長	機器センター

表2 2018年度(平成30年度)採択課題一覧 分子科学研究所担当分(平成30年12月31日現在)

(1) 協力研究

課題名	支援機器等	代表者
縮退π集積材料を用いた有機FET素子の開発	有機FET	東京大学大学院理学系研究科 佐藤 宗太
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
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	800溶液	名古屋市立大学大学院薬学研究科 矢木 宏和
アミロイドβペプチドと凝集阻害候補化合物とのNMR相互作用解析	800溶液	国立長寿医療研究センター 柳澤 勝彦
大腸菌由来スーパーオキシドディスムターゼの金属イオン獲得メカニズム	生体分子	慶應義塾大学理工学部 古川 良明
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	E680	北海道大学大学院理学研究院 齊尾 智英
強相関エレクトロニクスにむけた分子性電荷移動塩の電荷・格子複合現象の解明	有機FET	大阪大学大学院理学研究科 中澤 康浩
機能性天然有機化合物の構造研究	800溶液	名古屋市立大学大学院薬学研究科 石内勘一郎
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
CdSe量子ナノワイヤの自己組織化ゲル中への集積と光電変換機能評価	太陽電池	名城大学理工学部 西山 桂
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
有機導体単結晶薄膜を用いた量子凝縮相の解明と相制御	有機FET	京都大学大学院理学研究科 前里 光彦
高精度計測のための小型環境センサーの開発	装置開発	慶應義塾大学大学院理工学研究科 鹿野 豊
有機半導体のバンド構造形成過程の観測	ARUPS	千葉大学大学院工学研究科 吉田 弘幸
高親和性ドメイン抗体の設計を目指したNMRによる動的構造解析	800溶液	東京大学大学院工学系研究科 津本 浩平
αシヌクレインの分子サイズの探求	SAXS	同志社大学大学院脳科学研究科 田中 剛貴

Mechanistic Insight into the Fast SCR-NH <sub>3</sub> of NO over Anatase-TiO <sub>2</sub> (001): A DFT-D3 Study	量子計算	National Nanotechnology Center	Supawadee Namuangruk
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	装置開発	東京大学大学院工学系研究科	武田俊太郎
Paul 型イオントラップを利用した質量選別のための電気回路製作 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	装置開発 金属錯体	広島大学大学院理学研究科 茨城大学理学部	井口 佳哉 島崎 優一
希土類酸水素化物 LnHO の機能開拓	無機材料	京都大学大学院工学研究科	陰山 洋
単結晶ダイヤモンドへの静電キャリア注入を目的とした電気二重層トランジスタの作製および低温物性評価	有機 FET	慶應義塾大学理工学部	夏井 敬介
トンネル型プロトン導電体の結晶構造と電気化学特性	無機材料	大阪工業大学工学部	松田 泰明
ヒドリド導電性酸水素化物 Ln <sub>1-x</sub> Sr <sub>1+x</sub> LiH <sub>2-x</sub> O <sub>2</sub> の合成, 構造, イオン導電特性	無機材料	東京工業大学物質理工学院	松井 直喜
マイクロチャンバーを利用した細胞融合系の確立	装置開発	基礎生物学研究所	坪内 知美
固体 NMR による反芳香族化合物の結晶中磁気異性に関する研究	600 固体	大阪大学産業科学研究所	戸部 義人
極微量ドーブ有機半導体単結晶薄膜の作製と物性評価	太陽電池	東京理科大学理工学部	中山 泰生
電極/溶液界面の軟 X 線吸収・発光分光計測	装置開発	北海道大学大学院地球環境科学研究科	加藤 優
金属ヒドリド錯体とのハロゲン結合	有機合成	東京工業大学物質理工学院	大石 理貴
有機ペロブスカイト薄膜へのフラーレン形成と界面状態の解析	太陽電池	愛知工業大学工学部	森 竜雄
分子波動関数可視化のための冷却型分子線源の開発	装置開発	東京工業大学大学院	水瀬 賢太
[2+2] Cycloaddition Reaction on the Basis of Fullerenes Actuated via Nitrene	量子計算	Xi'an Jiaotong University, China	Xiang Zhao
金属有機構造体 (MOF) を利用した光触媒の開発	金属錯体	関西学院大学理工学部	田中 大輔
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
無機系キラル結晶におけるキラル誘起スピン選択性	有機 FET	大阪府立大学大学院工学研究科	戸川 欣彦
Mg 含有新規ヒドリド伝導体の探索	無機材料	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	米村 雅雄
酸化銅半導体層の電子物性と光電変換機能に関する研究	太陽電池	豊橋技術科学大学大学院機械工学系	伊崎 昌伸
ルブレ単結晶太陽電池の作製, 及び電荷輸送特性の評価	太陽電池	理化学研究所	片桐 千帆
高濃度変性剤中の蛋白質残存構造の解析	800 溶液	東京大学大学院理学系研究科	桑島 邦博
低温・非極性溶媒におけるリバースミセルの形成の検証	SAXS	アストロバイオロジーセンター	小松 勇
高効率な光電変換を実現する DA 型ペリレン誘導体の開発	太陽電池	静岡大学工学部	藤本 圭佑
有機無機ペロブスカイト太陽電池材料 CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> の結晶相転移に伴う価電子バンド構造変化の実測	ARUPS	東京理科大学理工学部	中山 泰生
CDW 転移を示す遷移金属ダイカルコゲナイド (NbSe <sub>2</sub> ) の励起エネルギー依存 ARPES および電子格子相互作用素過程の研究	ARUPS	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
III-V 族半導体基板の表面終端構造によるトポロジカル物質薄膜の改質	ARUPS	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪 嘉之

## (2) 施設利用

課 題 名	支援機器等	代 表 者	
CeF <sub>3</sub> 薄膜ショットキー型光センサ開発	SEM 低 SEM 蛍光分光 可視紫外	名古屋工業大学	小野 晋吾
多周波 EPR 法を用いた光合成反応過程の解析	ESR E680 E500 ESR EMX SQUID-MS7 SQUID-XL7	名古屋大学大学院理学研究科	三野 広幸
単一分子性伝導体 [M(dmdt) <sub>2</sub> ] (M = Ni, Pd, Pt, Au) の合成および物性研究	SQUID-MS7 SQUID-XL7	日本大学文理学部	周 彪
光センサータンパク質のクロモフォアに関する研究	iTC200	日本大学生物資源科学部	高野 英晃
新規ポリオキソメタレート錯体の電気化学的酸化還元反応メカニズムの定量的解析	ESR EMX ESR E500 600NMR 溶液	高知大学教育研究部	上田 忠治

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	CCD-1 CCD-2 微小結晶 粉末 X 線 ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	関西学院大学理工学部	三橋 了爾
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 微小結晶	豊橋技術科学大学環境・生命工学系	藤沢 郁英
122 構造を有すマンガン化合物群における新奇磁性半導体物質の開拓	SEM 低 SEM SQUID-MS7 SQUID-XL7 ラマン ピコ秒	名古屋大学大学院工学研究科	浦田 隆広
有効磁気モーメント法によるフリーラジカル数分析	ESR E680 ESR EMX ESR E500 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
強電場下における水素結合性磁性体の物性研究	CCD-1 CCD-2 微小結晶 ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	成蹊大学理工学部	藤田 渉
重元素のレーザーによる新規分離法	蛍光分光 可視紫外 ピコ秒	大阪市立大学大学院理学研究科	中島 信昭
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 微小結晶 600NMR 溶液	浜松医科大学総合人間科学講座	黒野 暢仁
Ni/Cu 多層細線, NiMnGa 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
硫化物半導体ナノ粒子の光学特性の研究	蛍光分光 可視紫外 ピコ秒 ラマン	名古屋工業大学大学院工学研究科	濱中 泰
Ir 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
金属酵素およびそのモデル錯体の電子構造の研究	ESR EMX ESR E500 600NMR 溶液	奈良女子大学大学院自然科学系	藤井 浩
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 ESR E500	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	長嶋 宏樹
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
シクロデキストリン類と薬物の包接複合体の構造解析	CCD-1 CCD-2 CCD-3 MALDI-TOF	愛知学院大学薬学部	小川 法子
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
異種金属一次元鎖錯体中の第一遷移金属の磁気物性	CCD-1 CCD-2 微小結晶 SQUID-MS7 SQUID-XL7	岐阜大学工学部	植村 一広
構造ゆらぎを抑制した抗体代替分子と標的分子の熱力学的結合解析	iTC200	東京工業大学生命理工学院	門之園哲哉
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

キノン部位を有する新規な D-A 型分子を用いた機能性物質の結晶構造解析	CCD-1 CCD-2 微小結晶	大阪府立大学大学院理学系研究科	藤原 秀紀
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
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 微小結晶 ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7 ラマン	岐阜大学教育学部	萩原 宏明
熱量測定によるプレフォルディンググループ 2 型シャペロ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
広領域光吸収有機固体の実現を目指したジチアシクロペンテンテトラマーの合成と固体状態の電子状態解明	CCD-1 CCD-2 微小結晶 ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	静岡大学工学部	植田 一正
ナノマテリアルの構造および物性評価	微小結晶 蛍光 X 線 ESCA ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7 MALDI ラマン FT 蛍光分光 可視紫外 ピコ秒	法政大学生命科学部	緒方 啓典
動的錯体分子の構造相転移解析	CCD-1 CCD-2 微小結晶 SQUID-MS7 SQUID-XL7	広島大学大学院工学研究科	姜 舜徽
3d 遷移金属添加 AlN の微視的結晶構造、光伝導とフォノンの相関の解明	SQUID-MS7 SQUID-XL7 ラマン 可視紫外	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究所	今田 早紀
Fe <sub>2</sub> VAl 合金における 3d 重い電子系の起源の解明	CCD-1 CCD-2 微小結晶 SQUID-MS7	名古屋工業大学大学院工学研究科	宮崎 秀俊
希土類イオンを微量添加したホウ酸リチウム焼結体の発光特性の研究	蛍光分光 ピコ秒 可視紫外	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
Cu-X (X = Ni, Co) 合金を用いた析出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
Cu(I) 錯体の励起状態の時間分解 ESR による解明	ESR E680	群馬大学大学院理工学府	浅野 素子
Zn-Ag-(希土類)系準結晶の形成条件と磁気特性	CCD-1 CCD-2 粉末 X 線 SQUID-MS7 SQUID-XL7	北海道大学大学院工学研究院	柏本 史郎
有機ラジカル結晶の低温構造と量子磁気状態の解明	CCD-1 CCD-2 微小結晶 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
固相相変態を用いて金属母相中に自己形成させたナノグラニュー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
金属ナノ粒子担持型グラフェンオキサライドの化学状態の研究	低 SEM ESCA	関西学院大学理工学部	橋本 秀樹

フェライト磁性薄膜および複合体のフェリ磁気特性の研究	ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	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
Nb <sub>3</sub> 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
合成後修飾法による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 微小結晶 熱解析	島根大学大学院総合理工学研究科	矢野なつみ
アミジナート架橋ルテニウム (II,III) 二核錯体の構造解析と電子状態に関する研究	CCD-1 CCD-2 微小結晶 SQUID-MS7 SQUID-XL7	島根大学大学院総合理工学研究科	片岡 祐介
共蒸発分子誘起結晶化法により作製した薄膜の構造・成分分析	SEM 低 SEM 粉末 X 線 蛍光 X 線	東京農工大学	嘉治 寿彦
高結晶性逆ペロブスカイト型窒化物磁性薄膜の磁性の評価	SQUID-MS7 SQUID-XL7	静岡大学大学院工学領域	川口 昂彦
ラマン分光法による有機結晶のドミノ転移の分子ダイナミクスの研究 新しいメソ多孔性炭素の開発	ラマン SEM	愛知教育大学教育学部 愛知教育大学教育学部	日野 和之 日野 和之
FeF <sub>3</sub> 電極材料の磁性への化学修飾効果	SQUID-MS7	京都大学先端イノベーション拠点施設	高見 剛
酸フッ化物の単結晶 X 線回折	CCD-1	京都大学先端イノベーション拠点施設	高見 剛
光応答性化合物の励起状態研究	ESR E680 蛍光分光 ピコ秒	大阪市立大学理学部	松岡 秀人
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 低 SEM	名古屋大学未来社会創造機構	宇理須恒雄
逆転写酵素のテンプレートとなる長鎖散在性反復配列 RNA の動的構造解析のためのスピンラベル測定	ESR E500	芝浦工業大学工学部	幡野 明彦
グラフェンのナノ窓における窒素と酸素の補足状態解析	ラマン	信州大学先鋭領域融合研究群	金子 克美
フラビン-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	大分大学全学研究推進機構	岡 芳美
糖鎖脂質含有二重膜表面で誘起されるアミドイド β 会合状態の固体 NMR を用いた構造解析	600 固体	名古屋市立大学大学院薬学研究科	矢木 宏和
新規ボルフィリン, コロール鉄 (III) 多核錯体の磁気的性質	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
[Pt(dmit) <sub>2</sub> ] <sub>2</sub> 塩の軌道単位逆転効果の多様性	ラマン	愛媛大学大学院理工学研究科	山本 貴
フタロシアニン類縁体への光照射によって発生した活性酸素種の特	ESR EMX ESR E500	島根大学大学院総合理工学研究科	藤城 零
拡張 π 電子系化合物の構造と物性に関する研究	CCD-1 CCD-2 微小結晶 SQUID-XL7	愛媛大学大学院理工学研究科	白旗 崇
ランタン型ルテニウム (II,III) 二核錯体の磁気特性に及ぼす軸配位子の影響	SQUID-MS7 SQUID-XL7	島根大学大学院総合理工学研究科	半田 真
配座設計に基づくタンパク質高親和性糖鎖の創出	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
超低エネルギー応答性を示す紅色光合成細菌における Ca イオンの役割	VP-DSC iTC200 ラマン 蛍光分光 可視紫外 円二色性	神戸大学大学院農学研究科	木村 行宏
c-FLIP タンパク質の新規機能獲得に関する検証 (第 2 期)	ESR E500	京都大学大学院生命科学研究科	酒巻 和弘
一酸化窒素を選択的に捕捉するコバルト (III) 錯体の反応挙動	ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	名古屋工業大学ナノ材料・機能分子創製研究所	増田 秀樹
高温 X 線回折実験による無水有機プロトン伝導体中の分子ダイナミクスの研究	CCD-1 CCD-2	東京大学物性研究所	砂入 允哉

微細藻類バイオマス含有マイクロカプセルの化学特性分析と当該藻類増殖促進物質の構造解析	VP-DSC DSC8231 他 MALDI	都城工業高等専門学校物質工学科	高橋 利幸
Magnetic Property Analysis of AgMNP-GRP	SQUID-XL7 SQUID-MS7	静岡大学グリーン科学技術研究所	朴 龍洙
アジド化合物の光照射により生成する中間体の観測 強相関分子結晶が示す特異な磁気相転移と構造に関する研究	ESR E500 微小結晶	広島大学大学院理学研究科 千葉大学グローバルプロミネント研究基幹	安倍 学 水津 理恵
光駆動 Na イオン輸送タンパク質 NaR のレチナール発色団のラマンスペクトル解析	ラマン	名古屋工業大学大学院工学研究科	富田紗穂子
石炭フライアッシュ含有成分の可視分析 強弾性を有する有機-無機複合磁性体における磁気弾性効果の研究	低 SEM ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	東北大学大学院環境科学研究科 広島大学大学院理学研究科	関 亜美 井上 克也
重質油中のポルフィリン誘導体の物性評価	ESR E500 SQUID-MS7	島根大学大学院総合理工学研究科	池上 崇久
固体酸触媒によるポリマー合成 カルコゲン型アニオン配位ヘムの磁気的特性に関する研究	MALDI ESR EMX ESR E500	山梨大学大学院総合研究部 名古屋市立大学大学院薬学研究科	森長 久豊 樋口 恒彦
タウタンパク質と予測結合物質の熱量測定	VP-DSC iTC200 紫外・可視・ 近赤外 円二色性	信州大学農学部	梅澤 公二
ESR を利用した米糠による環境計測の試み	蛍光 X 線 ESR E680 ESR EMX ESR E500	新潟大学研究推進機構	古川 貢
スピン化学種を有するフラーレン誘導体の磁気的性質の検討	ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	京都大学化学研究所	井手 雄紀
窒素中熱処理を行った多結晶ニオブの表面観察	低 SEM	高エネルギー加速器研究機構加 速器研究施設	許斐 太郎
ESR 法を用いたアンモニウム形 Y 型ゼオライトの酸素欠損評価 高分子膜中のアゾベンゼン含有錯体への偏光・光渦 UV 照射による波長選択的分子配向誘導	ESR E500 円二色性	山梨大学大学院医工農学総合教育部 東京理科大学理学部	久保田恒喜 秋津 貴城
SCO と連動した光誘起プロトン移動を示す鉄二価錯体のアニオン置換効果 一酸化窒素ラジカルを内包するフラーレンのパルス電子スピン共鳴によるスピン緩和過程の研究	微小結晶 ESR E680 ESR E500	九州大学先端物質化学研究所 京都大学国際高等教育院	中西 匠 加藤 立久
ラマン分光法を用いたヒルシュスプルング病における無神経節腸管の可視化	ラマン	大分大学医学部	小川 雄大
高移動度有機トランジスタ中のキャリアの電場誘起 ESR による研究	ESR EMX ESR E500	豊田理化学研究所	黒田 新一
有機半導体の電子スピン緩和時間計測 強磁性鉄単原子層-窒化ニッケル単原子層における界面磁気効果 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	ESR E680 XMCD マイクロスト ラクチャー	大阪市立大学理学部 東京大学物性研究所 名古屋大学未来社会創造機構	鐘本 勝一 宮町 俊生 宇理須恒雄
フラーレン誘導体 LB 薄膜の表面観察と評価	マイクロスト ラクチャー	愛知教育大学教育学部	日野 和之
誘電緩和測定用固体試料ホルダー製作	マイクロスト ラクチャー	神戸大学分子フォトサイエンス 研究センター	富永 圭介
ガラス流路の作製	マイクロスト ラクチャー	愛知教育大学教育学部	日野 和之
無機系キラル結晶微細デバイスの作製	マイクロスト ラクチャー	大阪府立大学大学院工学研究科	戸川 欣彦

### (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入れている。平成 30 年度は 3 次元 2 件、微小結晶 1 件、ESR E500 2 件、ESR EMX 3 件、iTC200 1 件、金属錯体 1 件、蛍光分光 2 件、低 SEM 2 件、マスクレス 1 件が採択された。業種別内訳は大企業 11 件・中小企業 2 件であった。

表3 2018年度（平成30年度）利用件数一覧（平成30年4月～平成30年12月）  
後期採択件数も併せて示した

	協力研究	施設利用	非公開利用
採択件数	48	92	13
実施件数	34	76	12
実施日数	1170	1130	53

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CO<sub>2</sub>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、CO<sub>2</sub>、高効率触媒

化学エネルギー創成から消費に至る過程において、メタンやCO<sub>2</sub>の分離・回収、貯蔵、触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用に関わる基盤技術を開発する。そのために、電子状態理論と分子動力学法を基盤とした統合シミュレーション技術を構築し、実用的な物質設計に向け分子レベルからの指針を供する。ハイドレートの有効利用、高効率触媒の開発、CO<sub>2</sub>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 21 名，事務局 2 名+補助者 1 名

・協力機関：77 機関，内企業 16 社

## 5-5-4 平成 30 年度について

平成 30 年度は、平成 28 年度から開始した本格実施（4 年間）の 3 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。平成 29 年度に行われた中間評価での指摘事項に対応するため、インフォマティクス活用ワーキンググループ (IA-WG) を設置し、本課題でのインフォマティクス技術の積極的活用の可能性の検討を開始した。8 月には第 1 回若手勉強会を合宿形式で開催し、研究員レベルでの研究開発の進捗や課題について情報交換・意見交換を行い、若手研究者間の連携・親睦を深めた。12 月には「第 2 回実験・産業との連携シンポジウム」を「化学エネルギーの有効利用」のテーマの下、北海道大学フロンティア化学教育研究センターレクチャーホール（鈴木章ホール）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。併せて、「第 5 回公開シンポジウム」を同ホールにて開催し、サブ課題責任者、サブ課題実施者による研究進捗及び成果報告、基盤アプリ設計開発 WG、AI-WG の進捗報告に加えて、マテリアルズ・インフォマティクス事例報告を設け、最終目標に向けた研究開発について議論した。

## 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る。また、アプリケーションの実証のため応用研究も行っている。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進めている。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る。

## 5-6 光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP (文部科学省)

量子コンピュータ・量子シミュレータ・量子センサなど、近年開発競争が激化している量子科学技術は、電子や原子の「波の性質」を活かした質的に新しいテクノロジーである。スパコンでさえ10の何百乗年もかかるような計算を1秒以内で終わらせることができ、機能性材料・薬剤・情報セキュリティ・人工知能などに革命を起し得るため、世界主要各国の科学技術政策において莫大な投資が行われている。例えば米国では、国防省や国立科学財団 (NSF) 等により毎年約200億円オーダーの投資が行われている他、エネルギー省 (DOE) においても2017年より新たな量子科学技術プロジェクトが開始された。EUでは2018年から総額約1300億円規模を投資する10年プロジェクト「Quantum Technology Flagship」が始まった。英国では2014年から5年間で約500億円を投入する「The UK National Quantum Technologies Programme」が進行中である。中国政府は、「科学技術イノベーション第13次五カ年計画 (2016年)」の重点分野として、量子通信と量子コンピュータを重大科学技術プロジェクト、量子制御と量子情報を基礎研究の強化に位置づけている他、1000億円以上を投資して量子情報科学の国立研究所を合肥に建設中である。民間企業でも、Google, IBM, Microsoft, Intel等のITジャイアントが2000年代半ば以降、量子情報技術に莫大な投資を進めている。これらの国際動向を受けて、日本でも、文部科学省の科学技術・学術審議会において、量子科学技術に関する政策課題を議論する「量子科学技術委員会」が2015年6月に発足し、ここでの議論を踏まえ2018年に新たな国家事業「光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP」(2018～2027年度；2018年度予算総額22億円)がスタートした。本事業は、経済・社会的な重要課題に対し、量子科学技術を駆使して、非連続的な解決 (Quantum leap) を目指す研究開発プログラムである (<https://www.jst.go.jp/stpp/q-leap/index.html>)。(1)「量子情報処理(主に量子シミュレータ・量子コンピュータ)」「(2)「量子計測・センシング」「(3)「次世代レーザー」の3つの技術領域から成り立っている。

分子科学研究所では、光分子科学研究領域の大森賢治教授が量子科学技術委員会の専門委員・副主査として、我が国の量子科学技術に関する政策課題・将来展望の議論を先導する立場を果たしてきた。また、大森教授が研究代表者を務める新たな研究プロジェクト「アト秒ナノメートル領域の時空間光制御に基づく冷却原子量子シミュレータの開発と量子計算への応用」がQ-LEAP「量子情報処理」領域の大規模・基礎基盤研究に採択された。共同研究機関である浜松ホトニクス中央研究所・京都大学・岡山大学・近畿大学・オックスフォード大学・ハイデルベルグ大学・ストラスブール大学・インスブルック大学らと緊密に連携して、卓越したコアコンピタンスを有し、量子力学の根源的な問題に深く鋭く切り込む全く新しい量子シミュレータの開発を目指す。

## 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)

文部科学省による元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>は平成24年度に開始され、現在、プロジェクトは第三期を迎えようとしている。元素戦略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いる。また電子論グループの活動では、分子科学研究所は連携機関として参画して研究を推進している。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を開発である。ここでは昨年度分子研レ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、本年度、第2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進めてきた自動車排ガス浄化触媒と、ナトリウムイオン電池および次世代二次電池の開発を研究課題として、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30年2月22日に第12回が東大本郷キャンパス、10月24日に第13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、継続して実施しており、10回を超えた。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20回を超えている。

電子論グループとしては、今後の研究の方向付けのために、毎年実施している「電子論検討会」を12月25、26日に合宿形式で開催した。若手の実験研究者に話題提供をしていただくとともに、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、中間評価以降の第三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、平成16年度（2004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てきた。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る。

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性化させ、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「ネットワーク型研究加速事業」

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

#### 【I. 平成 30 年度国際共同学位プログラム構築支援事業】

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。また同国の VISTEC とデュアルデGREEプログラムの覚え書きを締結した。

#### 【II. 新入生確保のための広報的事業】

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 事業を実施し、5名の大学院生と3名の若手研究者を招へいた。

### (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上げている。一方で、先方から推薦された者をそのまま受入れるのではなく、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 年度は 60 名、平成 30 年

度の実績は表にあるように65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	フィンランド	インド	タイ	マレーシア	中国	韓国	台湾	イギリス	スイス	スウェーデン	エストニア	ロシア	パキスタン	合計
国際交流提携先からの受入	6	3	1	1	17	4	0	1	2	0	0	0	0	0	0	35
その他共同研究による受入	2	3	0	4	5	0	5	4	1	1	1	1	1	1	1	30
合計	8	6	1	5	22	4	5	5	3	1	1	1	1	1	1	65

H30.1-H30.12

### 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、財務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。提携先拠点研究機関については、共同研究の有無なども考慮しながら随時入れ換えを行っていく。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、分子研にポストクとして戻ってくる学生もおり、分子研・総研大の研究力強化と国際化に寄与している。今後は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していく。

一方、国際協力研究については、海外からの直接申請ではなく、研究所内の教員による国際共同研究の提案を受け、所内委員による審査を経て①海外の教授、准教授クラスの研究者の短期招へい、②若手外国人研究者の短期招へいなどが「分子科学国際共同研究拠点の形成」の主要プログラムとして実施されていた。その実績は平成16年度7件、

平成17年度10件、平成18年度12件、平成19年度10件、平成20年度9件、平成21年度12件、平成22年度13件、平成23年度13件、平成24年度11件である。

平成25年度より様々な財源をもとに短期外国人研究者招へいプログラムを始めることで、従来の国際協力研究に加え、国際施設利用（協力研究的であり、単なる設備利用はない）にも拡大した結果、平成25年度35件、平成26年度31件、平成27年度40件、平成28年度45件、平成29年度48件と推移しており、平成29年10月から平成30年9月までの1年間は41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

41件（H29.10-H30.9実施状況）

代表者	研究課題名	相手国
飯野 亮太	生体分子の in vivo ライブイメージング	アメリカ
飯野 亮太	分子モーターの1分子イメージング	韓国
飯野 亮太	分子モーターの計算機合理設計	アメリカ
飯野 亮太	V <sub>1</sub> モーターの回転運動の理論的解析	スウェーデン
石崎 章仁	量子動力学理論と計算科学的アプローチに基づく光合成光捕集系の機能解明	タイ
魚住 泰広	遷移金属触媒化学	チェコ
江原 正博	Theoretical Studies on NH <sub>3</sub> -SCR of NO with Cu-Zeolite	タイ
岡本 裕巳	Plasmon Resonances of Metal Nanoparticles	韓国
加藤 晃一	質量分析による糖鎖の構造解析	台湾
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 政博	自由電子レーザーに関する研究	イラン
解良 聡	低次元層状化合物のエネルギー分散関係	ドイツ
解良 聡	ペロブスカイト型有機無機複合化合物の電子構造	中国
解良 聡	有機エピタクシャル超薄膜の構造物性	ドイツ
解良 聡	有機発光素子界面の電子状態	インド
解良 聡	金属上の有機配向薄膜の成長と構造	ドイツ
解良 聡	日欧における有機エレクトロニクス材料の学術展開に関して	ドイツ
小杉 信博	Abnormal Ultrastructural Features and Free Radical Levels in Human Tissues Caused by Mutations in NHLRC2 Gene	フィンランド
小杉 信博	Comprehensive Characterization of Monolithic Polymers by Scanning Transmission X-Ray Microscopy	オーストラリア
小杉 信博	Doping Effect of Lead(II) Thiocyanate (Pb(SCN) <sub>2</sub> ) for FA <sub>0.9</sub> Cs <sub>0.1</sub> PbI <sub>3</sub> Perovskite Solar Cells	台湾
小杉 信博	Novel Insights to Cloud Water Microphysics Using Synchrotron-Excited XAS on Ambient Cloud Water and Atmospheric Aqueous Organic and Inorganic Model Systems	フィンランド
小杉 信博	On the Interfacial Electronic Structure of Efficient Water Splitting in Hematite Nanorods	台湾
小杉 信博	Penetration of Macromolecular Drugs into Human Skin	ドイツ
斉藤 真司	イオン水溶液のダイナミクスおよびスペクトルの理論研究	インド
斉藤 真司	過冷却水の構造とダイナミクスの理論研究	インド
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
田中 清尚	Electronic Band and Defect Structure of Spinel Nitrides of the Group 14 Elements and Their Solid Solutions	フランス，エストニア

西村 勝之	固体 NMR を用いた生体分子の構造解析	台湾
藤 貴夫	トリウムレーザーの研究	オマーン
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
山本 浩史	キラル分子を用いたスピン偏極	イスラエル
柳井 毅	相対論電子状態計算法の開発	アメリカ
横山 利彦	光触媒のピコ秒・フェムト秒時間分解 X線吸収分光	オランダ
UVSOR 施設利用	In Depth Qualitative Structural Analysis of Nanocellulose Hybrid Materials and Cellulose Nanofibril Aerogels	フィンランド
UVSOR 施設利用	STXM in Characterizing Ultrastructural Features in the Liver of Patients with Storage Diseases	フィンランド
UVSOR 施設利用	The Effect of the Generation of Free Radicals on the Properties of GO/ZnO/Si Composites Elucidated by Scanning Transmission X-Ray Microscopy	台湾
UVSOR 施設利用	STXM Studies on Quasi-2D and Triple-Cation Mixed-Halide Perovskite Solar Cells	台湾
UVSOR 施設利用	Influence of the pH on the X-Ray Absorption Spectra of Mixed Copper-Glycine and Mixed Calcium-Glycine Aqueous Solutions, Recorded in the Vicinity of the N1s, C1s, and Ca2p Ionization Thresholds	フランス
UVSOR 施設利用	Selective Catalytic Hydrogenation of Furfural by the Bimetallic Nanocatalysts	中国
UVSOR 施設利用	Redox-Sensitive Nanocarriers for Controlled Dermal Drug Delivery	ドイツ

## 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、⑤IR（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、⑤IR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30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

H30年4月3日-4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） H30年11月8日-9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）

H30年11月12日-16日

- ・国際インターンシップ生の受入れを継続して行った（MOUに基づくものはフランス6名、ドイツ3名、フィンランド1名、インド1名、タイ17名、マレーシア4名、韓国1名、台湾2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、とくに英文の強化を行った。
- ・アジアとの連携強化のため、MOU締結大学等での視察・打合せ・研究会を行った。

H30年5月 マラヤ大学、チュラロンコン大学、VISTEC

H30年9月 VISTEC

H30年10月 国立交通大学（台湾）

また同様に下記の受入れを行った。

H30年11月 NANOTEC（視察及び研究会）

## 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、マイ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、検討を進めている。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30年3月に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開催した。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継続して行っている。

