「分子研リポート 2018」目次

１．序　　言 1

２．分子科学研究所の概要 3
2-1　研究所の目的 3
2-2　沿　　革 3
2-3　組　　織 6
2-4　運　　営 8
2-4-1　運営顧問 8
2-4-2　研究顧問 8
2-4-3　運営会議 9
2-4-4　運営会議人事選考部会 9
2-4-5　運営会議共同研究専門委員会 10
2-4-6　学会等連絡会議 10
2-4-7　教授会議 11
2-4-8　主幹・施設長会議 11
2-4-9　各種委員会等 11
2-5　構成員 15
2-5-1　構成員 15
2-5-2　人事異動状況 23
2-6　財　　政 24
2-6-1　現　員 24
2-6-2　財　政 24
2-7　岡崎共通施設 27
2-7-1　岡崎情報図書館 27
2-7-2　岡崎コンファレンスセンター 27
2-7-3　岡崎共同利用研究者宿泊施設 27
2-7-4　職員会館 27
2-8　その他 28
2-8-1　知的財産 28

３．共同研究と大学院教育 29
3-1　研究領域 30
3-2　研究施設 36
3-3　共同利用研究 38
3-3-1　共同利用研究の概要 38
3-3-2　2018 年度の実施状況 38
3-3-3　共同利用研究実施件数一覧 58
3-4　国際交流と国際共同研究 59
3-4-1　外国人客員部門等及び国際交流 59
3-4-2　岡崎コンファレンス 63
3-4-3　日韓共同研究 66

3-5　大学院教育 68
3-5-1　特別共同利用研究員 68
3-5-2　総合研究大学院大学二専攻 69
3-5-3　オープンキャンパス・分子研シンポジウム 73
3-5-4　夏の体験入学 73
3-5-5　総研大アジア冬の学校 75
3-5-6　広い視野を備えた物理科学研究者を育成するためのコース別教育プログラム 75
3-5-7　統合生命科学教育プログラム 76

4．研究支援等 77
4-1　技術課 78
4-1-1　技術研究会 78
4-1-2　技術研修 81
4-1-3　人　事 82
4-1-4　受　賞 82
4-2　安全衛生管理室 84
4-3　社会との交流 85
4-3-1　自然科学研究機構シンポジウム 85
4-3-2　大学共同利用機関シンポジウム 86
4-3-3　分子科学フォーラム 87
4-3-4　分子研コロキウム 87
4-3-5　岡崎市民大学講座 88
4-3-6　その他 89
4-4　理科教育への協力 90
4-4-1　スーパーサイエンスハイスクール 90
4-4-2　コスモサイエンスコース 90
4-4-3　あいち科学技術教育推進協議会 90
4-4-4　国研セミナー 91
4-4-5　小中学校での出前授業 92
4-4-6　職場体験学習 94
4-4-7　その他 95
4-5　一般公開 97
4-6　見学者受け入れ 98
4-7　プレスリリース 100

5．各種事業 103
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） 105
5-2　新分野創成センター（自然科学研究機構） 108
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） 109
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） 110
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） 121
5-5-1　はじめに 121
5-5-2　重点課題⑤研究課題について 121

5-5-3　重点課題⑤実施体制について……122
5-5-4　平成 30 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　光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP（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）……124
5-8　分子科学国際共同研究拠点の形成……125
5-8-1　国際共同研究事業の財源……125
5-8-2　分子研国際インターンシッププログラム（IMS-IIP）……126
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）……127
5-8-4　短期外国人研究者招へいプログラム……127
5-9　研究大学強化促進事業（文部科学省）……130
5-10 ネットワーク型研究加速事業（自然科学研究機構）……131

6．研究活動の現状……133
6-1　論文発表状況……133
6-2　理論・計算分子科学研究領域……134
理論分子科学第一研究部門……134
理論分子科学第二研究部門……143
計算分子科学研究部門……147
理論・計算分子科学研究部門……159
6-3　光分子科学研究領域……163
光分子科学第二研究部門……163
光分子科学第三研究部門……169
光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）……178
電子ビーム制御研究部門（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）……186
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……198
分子機能研究部門……201
6-5　生命・錯体分子科学研究領域……211
生体分子機能研究部門……211
生体分子情報研究部門……232
錯体触媒研究部門……236
錯体物性研究部門……244
6-6　協奏分子システム研究センター……250
階層分子システム解析研究部門……250
機能分子システム創成研究部門……257
6-7　メゾスコピック計測研究センター……262
繊細計測研究部門……262
広帯域相関計測解析研究部門……279
6-8　特別研究部門……283
6-9　安全衛生管理室……287

７．点検評価と課題.....291
7-1　外国人運営顧問による点検評価.....292
7-1-1　Eberhard Umbach 外国人運営顧問.....292

８．研究施設等の現状と将来計画.....297
8-1　極端紫外光研究施設（UVSOR）.....299
8-2　協奏分子システム研究センター.....305
8-3　メゾスコピック計測研究センター.....306
8-4　機器センター.....308
8-5　装置開発室.....311
8-6　計算科学研究センター.....312
8-7　生命創成探究センター.....314

９．資　　料.....315
9-1　歴代所長.....315
9-2　評議員（1976 ～ 1981）.....316
9-3　評議員（1981 ～ 2004）.....317
9-4　運営顧問（2004 ～）.....321
9-5　外国人評議員（1976 ～ 2004）.....322
9-6　外国人運営顧問（2004 ～）.....323
9-7　運営に関する委員会委員（1975 ～ 1981）.....324
9-8　運営協議員（1981 ～ 2004）.....325
9-9　運営会議委員（2004 ～）.....329
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.....331
9-11 自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則.....332
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.....335
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）.....336
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）.....338
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 31 年度）.....343

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および，メゾスコピック計測研究センターで研究基盤を構築しています。さらに，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。2018年度から，新たな試みとして分子科学分野を世界的に牽引することが期待される卓越教授，および，施設の高度化などを担う人材として主任研究員の２つの新しい人事システムが始まりました。これまでの人事制度と併せて，分子研を支える重要な人材を所に迎えることで，研究所のさらなる活性化が期待されます。

このリポートには，2018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）「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」，（2）「ナノテクノロジープラットフォーム」，（3）「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」，（4）「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」等の特別プロジェクトが進行中です。（5）「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」は2018年３月をもって，10年間のプロジェクトを終了しました。

また，国際的事業として（1）分子研国際インターンシッププログラム（IMS-IIP）と（2）分子研アジア国際インターンシッププログラム（IMS-IIPA）などの特徴ある国際共同を推進しています。後者は，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）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，2018年度には多くの人事異動がありました。４月１日付で小林玄器准教授（元分子研若手独立フェロー），松井文彦主任研究員（元奈良先端科学技術大学院大学准教授）とともに，藤田 誠卓越教授（東京大学大学院工学系研究科教授）が，さらに５月１日付で杉本俊樹准教授（元京都大学大学院理学研究科助教），１月１日付で草本哲郎准教授（元東京大学大学院理学系研究科助教）が着任され，分子研に新たな分野を拓かれることになりました。一方，昨年度３月31日付で長年分子研の運営にも貢献いただいた小杉信博教授が転出され，高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所長に着任されました。同じく３月31日付で柳井 毅准教授も転出され，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に着任されました。さらに，９月30日付で，平等拓範准教授と古谷祐詞准教授が転出され，それぞれ理化学研究所放射光科学研究センター先端光源開発研究部門グループディレクターおよび，名古屋工業大学大学院工学研究科准教授に着任されました。長年に渡り，分子研の科学と技術を支えてこられた先生方に感謝するとともに，新たな職場での活躍を期待し，分子研にも所外から御貢献いただけるようお願い申し上げます。

研究顧問をお勤めいただいている，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は，４月３日－４日に岡崎にて全ての研究室主宰者から提示される 2018 年度の研究計画について，その活動への提言をいただきました。個々の研究者への提言と合わせて，研究領域および研究センターの活動と今後の研究所運営に対する助言をいただきました。2019 年３月 28 日と 29 日には，2019 年度の研究計画についてのヒアリングを行う予定です。2018 年 11 月８日－９日には，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の最近の成果および，関連するアクティビティーとして，生命創成探究センターと特別研究部門の藤田 誠卓越教授の研究などについてヒアリングをしていただきました。11 月 12 日－ 16 日には，ドイツヴュルツブルク大学の Eberhard Umbach 教授によって，昨年度に続き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の活動を評価いただくとともに，物質分子科学研究領域，理論・計算分子科学研究領域，生命・錯体分子科学研究領域および，2018 年度に開設された生命創成探究センターの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。

2019 年３月
自然科学研究機構
分子科学研究所　所長
川合　眞紀

2．分子科学研究所の概要

2-1　研究所の目的

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

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

2-2　沿　　革

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

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

1979. 4. 1　分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され，管理局が総務部（庶務課，人事課，国際研究協力課），経理部（主計課，経理課，建築課，設備課），技術課に改組された。
1979. 11. 8　分子科学研究所創設披露式が挙行された。
1981. 4. 1　第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4.14　国立学校設置法の一部を改正する法律により，分子科学研究所と生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所, 生理学研究所）は総合化され, 岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され，管理局が岡崎国立共同研究機構管理局となり，技術課が研究所所属となった。
1982. 4. 1　研究施設として極端紫外光実験施設（UVSOR）が設置された。
1982. 6.30　極端紫外光実験棟第１期工事（1,281 m^2）が竣工した。
1983. 3.30　極端紫外光実験棟第２期工事（1,463 m^2）が竣工した。
1983. 4. 1　電子構造研究系に分子エネルギー変換研究部門が，分子集団研究系に分子集団動力学研究部門，極端紫外光研究部門が設置された。
1983. 11.10　極端紫外光実験施設ストレージリング装置に電子貯蔵が成功した。
1984. 2.28　極端紫外光実験施設の披露が行われた。
1984. 4.11　研究施設として，錯体化学実験施設（錯体合成研究部門，錯体触媒研究部門）が設置された。 流動研究部門制度が発足し錯体化学実験施設に錯体合成研究部門が設置された。
1985. 5.10　分子科学研究所創設 10 周年記念式典が挙行された。
1987. 4. 1　第三代研究所長に井口洋夫分子科学研究所教授が任命された。
1989. 2.28　分子科学研究所南実験棟（3,935 m^2）が竣工した。
1989. 5.28　分子集団研究系に界面分子科学研究部門が，相関領域研究系に有機構造活性研究部門（共に流動研究部門）が設置された。
1991. 3.27　極端紫外光実験棟（増築）（283 m^2）が竣工した。
1991. 4.11　極端紫外光科学研究系（反応動力学研究部門）が設置された。 基礎光科学，界面分子科学，極端紫外光の各研究部門は分子集団研究系から極端紫外光科学研究系へ振替された。
1993. 4. 1　第四代研究所長に伊藤光男前東北大学教授が任命された。
1993. 12. 3　極端紫外光実験施設創設 10 周年記念式典が挙行された。
1994. 1.31　電子計算機センター棟（増築）（951 m^2）が竣工した。
1995. 3.31　相関領域研究系有機構造活性研究部門（流動）が廃止された。
1995. 4. 1　理論研究系に分子基礎理論第四研究部門が設置された。
1995. 5.12　分子科学研究所創設 20 周年記念式典が挙行された。
1996. 5.11　相関領域研究系に分子クラスター研究部門（流動）が設置された。
1997. 4. 1　機器センター，極低温センター，化学試料室が廃止され，分子制御レーザー開発研究センター，分子物質開発研究センターが設置された。
1999. 4. 1　第五代研究所長に茅幸二慶應義塾大学教授が任命された。
2000. 4. 1　電子計算機センター，錯体化学実験施設錯体合成研究部門が廃止され，電子計算機室が設置された。共通研究施設として，統合バイオサイエンスセンター，計算科学研究センター，動物実験センター，アイソトープ実験センターが設置された。
2002. 2.28　山手２号館（統合バイオサイエンスセンター，計算科学研究センター）（5,149 m^2）が竣工した。
2002. 3.11　山手１号館Ａ（動物実験センター，アイソトープ実験センター）（4,674 m^2）が竣工した。
2002. 4. 1　相関領域研究系分子クラスター研究部門（流動），極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門（流動），分子物質開発研究センターが廃止され，分子スケールナノサイエンスセンター（分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門，ナノ触媒・生命分子素子研究部門，ナノ光計測研究部門，界面分子科学研究部門（流動），分子クラスター研究部門（流動））が設置された。
2003. 8.20　山手４号館（分子科学研究所分子スケールナノサイエンスセンター）（3,813 m^2）が竣工した。
2003. 12. 2　極端紫外光実験施設創設 20 周年記念式典が挙行された。

2004. 3. 1　山手５号館（NMR）（664 m^2）が竣工した。

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

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

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

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

2005. 5.20　分子科学研究所創設 30 周年記念式典が挙行された。

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

2010. 3.30　実験棟改修第１期工事（耐震及び全面改修）が竣工した。

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

2011. 3.30　実験棟改修第２期工事（耐震及び全面改修）が竣工した。

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

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

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

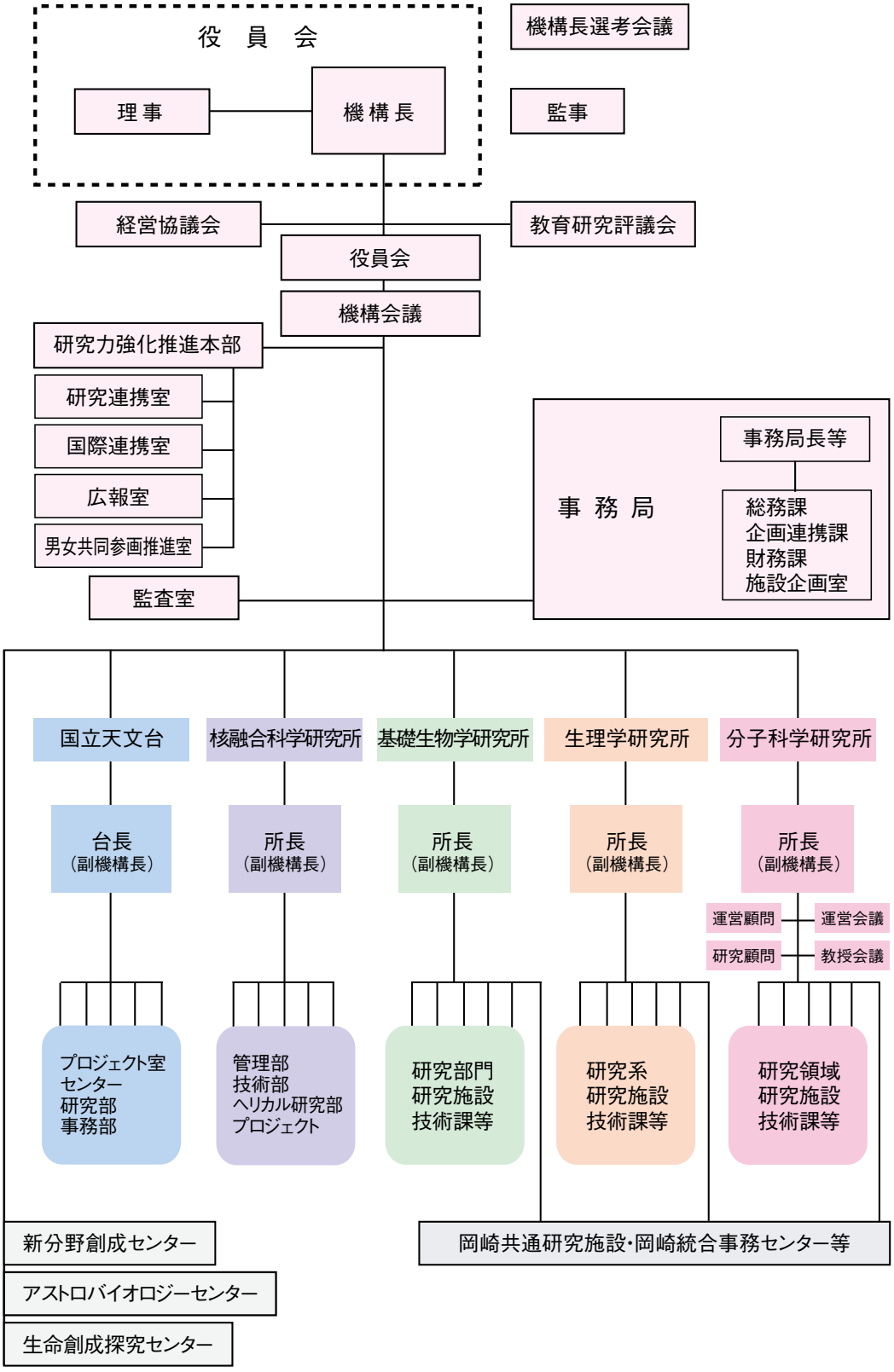
2016. 4. 1　第八代研究所長に川合眞紀東京大学大学院新領域創成科学研究科教授，理化学研究所理事長特別補佐が任命された。

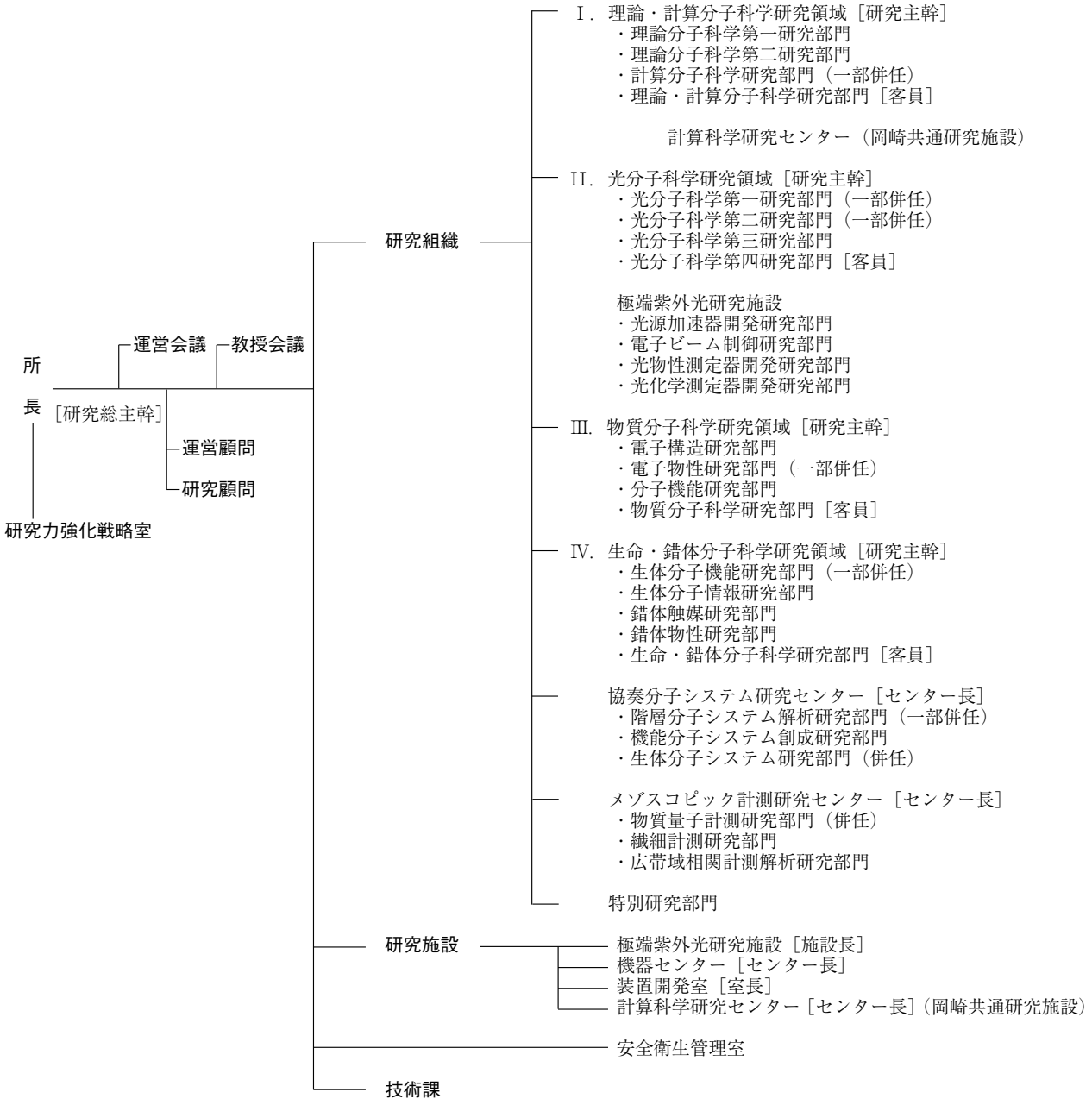
2017. 4. 1　分子制御レーザー開発研究センターが廃止され，メゾスコピック計測研究センター（物質量子計測研究部門，繊細計測研究部門，広帯域相関計測解析研究部門）が設置された。

2018. 4. 1　岡崎統合バイオサイエンスセンターが廃止され，生命創成探究センターが設置された。特別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当なため，形式的には機構長の諮問組織的な位置付けで，その都度，各研究所別に大学共同利用機関長選考委員会を設置することにした。その委員は教育研究評議会と経営協議会の機構外委員も候補に加えて，機構外から機構長によって選ばれる。一方，機能②については必要に応じて各研究所で適当な内部組織（所長の諮問組織）を構成することになった。その結果，分子科学研究所では運営顧問制度（外国人評議員に代わる外国人運営顧問も含む）を発足させた。第一期中期計画期間（2004 年度～ 2009 年度）の６年間の運営顧問は国内４名，海外２名で運用してきたが，第二期中期計画期間（2010 年度～ 2015 年度）の最初の３年間は，国際的な研究機関としての運営面を中心に諮問するため，海外２名で運用した。４年目となり，国内３名を新たに追加した。第三期中期計画期間（2016 年度～ 2021 年度）に入り，体制を見直すこととなり，国内４名と海外２名で運用している。

運営顧問（2018 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教授
松　本　吉　泰	公益財団法人豊田理化学研究所常勤フェロー

外国人運営顧問（2018 年度）

LIST, Benjamin	ドイツマックスプランク石炭研究所所長
UMBACH, Eberhard	ドイツヴュルツブルク大学名誉教授

2-4-2 研究顧問

分子科学研究所では，法人化の前から所長が研究面を諮問するために研究顧問制度を導入している。第一期中期計画期間では国内３名の研究顧問が，所内の各研究グループによる予算申請ヒアリングに参加し，それぞれについて採点し，所長はその採点結果を参照しつつ各研究グループに配分する研究費を決定してきた。第二期中期計画期間は国

際的な研究機関としての研究面を中心に諮問することとし，国外委員も追加することとした。第三期中期計画期間に入り，国内外各１名で運用を開始した。

研究顧問（2018年度）

中　嶋　　敦	慶應義塾大学理工学部教授
PETEK, Hrvoje	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 2018.4-2020.3）（◎：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
鹿野田　一　司	東京大学大学院工学系研究科教授
○米　田　忠　弘	東北大学多元物質科学研究所教授
袖　岡　幹　子	理化学研究所袖岡有機合成化学研究室主任研究員
高　原　　淳	九州大学先導物質化学研究所教授
谷　村　吉　隆	京都大学大学院理学研究科教授
中　井　浩　巳	早稲田大学理工学術院教授
西　原　　寛	東京大学大学院理学系研究科教授
藤　井　正　明	東京工業大学科学技術創成研究院教授
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	生命・錯体分子科学研究領域教授
秋　山　修　志	協奏分子システム研究センター教授
江　原　正　博	理論・計算分子科学研究領域教授
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	生命・錯体分子科学研究領域教授
解　良　　聡	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，人事選考部会は必要に応じて所内外から専門委員を加えることができる。また，助教候補者及び特任准教授（若手独立フェロー）の選考，生命創成探究センター（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，選考委員会を人事選考部会の下に置いている。人事選考部会の審議結果は部会長より所長に答申され，所長は教授会議（後述）でその結果を報告し，可否の投票等によって了解を得たうえで，最終決定する。

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

人事選考部会委員（2018，2019年度）（○：部会長）

有　賀　哲　也	（京大院副学長）	青　野　重　利	（分子研教授）
鹿野田　一　司	（東大院教授）	○秋　山　修　志	（分子研教授）
中　井　浩　巳	（早稲田大院教授）	江　原　正　博	（分子研教授）
西　原　　寛	（東大院教授）	解　良　　聡	（分子研教授）
山　口　茂　弘	（名大 ITbM 教授）	横　山　利　彦	（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（2018，2019年度）（○：委員長）

石　森　浩一郎	（北大院教授）	斉　藤　真　司	（分子研教授）
唯　　美津木	（名大院教授）	山　本　浩　史	（分子研教授）
中　澤　康　浩	（阪大院教授）	田　中　清　尚	（分子研准教授）
藤　井　正　明	（東工大院教授）	西　村　勝　之	（分子研准教授）
○青　野　重　利	（分子研教授）	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（2018年度）

【所外委員】

（日本化学会推薦）

北　川　　進　（京大特別教授）　　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　（東北大教授）　　菱　川　明　栄　（名大教授）

藤　井　朱　鳥　（東北大院准教授）　　吉　澤　一　成　（九大教授）

（日本生物物理学会推薦）

杉　田　有　治　（理研主任研究員）

【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）　　椴　山　儀　恵　（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所所属の研究教育職員，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	2018.3.6 （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，准教授及び主任研究員 教授又は准教授４ 職員以外の研究者７	委員会規則	2018.8.7, 2019.2.19
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	2019.2.26
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	2018.12.20
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	2018.6.15, 12.18
図書委員会	購入図書の選定。他			−
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	2018.4.6, 6.1, 8.23, 10.5, 12.7
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） 大学院委員長，正副専攻長及び正副研究科長を含む		2018.4.6, 6.1, 7.6, 10.5, 11.2, 2019.1.4, 3.1

特別共同利用研究員受入審査委員会	特別共同利用研究員の受入れ等について審査を行なう。	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	2018.4.17, 5.15, 6.19, 9.18, 10.16, 11.20, 12.18 2019.1.15, 2.19, 3.19
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	2018.6.21
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	2019.2.26
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	2018.6.20, 9.3, 11.20, 2019.1.31 その他メール審議
岡崎共同利用研究支援施設運営委員会	岡崎コンファレンスセンター及び宿泊施設（ロッジ）の管理運営に関し必要な事項。	担当責任所長 教授１	委員会規則	2018.7.31
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	2018.4.17, 5.15, 6.19, 7.17, 8.21, 9.18, 10.16, 11.20, 12.18, 2019.1.15, 2.19, 3.19
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	2018.5.18（書面審議），8.17（メール審議），10.26,12.26
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	2018.4.12, 7.24, 12.3
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	2018.8.24, 2019.3.6
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	2018.6.27

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	2018.5.22
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	2018.7.11
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	2018.4.18 （メール審議）
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	2018.4.18 （メール審議）
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	2018.5.9, 7.18, 9.12, 11.14, 2019.1.9, 3.13
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	2018.9.10
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	−
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	2018.6.25, 7.17（メール審議）， 12.19

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）　斉　藤　真　司

理論分子科学第一研究部門

斉　藤　真　司	教　授
森　　俊　文	助　教
甲　田　信　一	助　教
松　村　祥　宏	研究員
飯　田　健　二	助　教
加　藤　隆　士	特任専門員

理論分子科学第二研究部門

石　﨑　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）
ZHENG, Hong	研究員
ZHAO, Pei	研究員
VELLOTH, Archana	研究員
小　泉　健　一	特任研究員
奥　村　久　士	准教授（兼）（計算科学研究センター）（生命創成探究センター）
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）

中　野　雅　由	客員教授（阪大院基礎工）
中　山　　哲	客員准教授（北大学触媒科学研）
金　　鋼	客員准教授（阪大院基礎工）
藤　田　貴　敏	特任准教授（若手独立フェロー）
岡　崎　圭　一	特任准教授（若手独立フェロー）
MAHMOOD, Md Iqbql	研究員

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）

光分子科学第二研究部門

大　森　賢　治	教　授
素　川　靖　司	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）
BHARTI, Vineet	研究員

光分子科学第三研究部門

解　良　　聡	教　授
FRITZ, Torsten	学振外国人招へい研究者（Friedrich Schiller University Jena） '18.9.2 ～ '18.9.29
SCHAAL, Maximilian	学振外国人特別研究員（JSPS サマープログラム）（Friedrich Schiller University Jena） '18.6.12 ～ '18.8.22
METZGER, Christian	学振外国人特別研究員（JSPS サマープログラム）（University of Würzburg） '18.6.12 ～ '18.8.22
MEISSNER, Matthias	特任研究員
片　㟢　英　樹	助　教
長　坂　将　成	助　教

光分子科学第四研究部門（客員研究部門）

金　井　　要	客員教授（東京理科大理工）
金　安　達　夫	客員准教授（九州シンクロトロン）

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
小板谷　貴　典	助　教
CHAVEANGHONG, Suwilai	研究員
中　村　高　大	特任研究員
杉　本　敏　樹	准教授
相　賀　則　宏	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
小　林　玄　器	准教授
竹　入　史　隆	助　教

物質分子科学研究部門（客員研究部門）

中　村　雅　一	客員教授（奈良先端大物質創成）
田　嶋　尚　也	客員教授（東邦大理）

生命・錯体分子科学研究領域　研究主幹(併)　飯　野　亮　太

生体分子機能研究部門

青　野　重　利	教　授(兼)（生命創成探究センター）
村　木　則　文	助　教(兼)（生命創成探究センター）
加　藤　晃　一	教　授(兼)（生命創成探究センター）
矢　木　真　穂	助　教(兼)（生命創成探究センター）
谷　中　冴　子	助　教
白　瀧　千夏子	特任助教(兼)（生命創成探究センター）
渡　辺　大　輝	特任助教(兼)（生命創成探究センター）
飯　野　亮　太	教　授
中　村　彰　彦	助　教
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(委嘱)（名工大院工）
塚　本　寿　夫	助　教

錯体触媒研究部門

魚　住　泰　広	教　授
大　迫　隆　男	助　教
浜　坂　　剛	助　教
平　田　修　一	研究員
PUTRA, Anggi Eka	研究員
KIM, Kiseong	研究員
杉　山　祐　也	研究員
間　瀬　俊　明	特別訪問教授（特別訪問研究員）
椴　山　儀　恵	准教授
泉　関　督　人	助　教
藤　波　　武	研究員
大　塚　尚　哉	特任研究員

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	研究員
CHINAPANG, Pondchanok	研究員
草　本　哲　郎	准教授

生命・錯体分子科学研究部門（客員研究部門）

櫻　井　英　博	客員教授（阪大院工）
内　橋　貴　之	客員教授（名大院理）
山　田　鉄　兵	客員准教授（九大院工）

極端紫外光研究施設　施設長（併）　解　良　　聡

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

松　井　文　彦	主任研究員
大　東　琢　治	助　教

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(兼)(生命創成探究センター)
小　杉　貴　洋　　助　教
斉　藤　真　司　　教　授(併)
小　林　玄　器　　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
廣　部　大　地　　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)(生命創成探究センター)
加　藤　晃　一　　教　授(兼)(生命創成探究センター)
飯　野　亮　太　　教　授(併)

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)
杉　本　敏　樹　　准教授(併)

繊細計測研究部門
岡　本　裕　巳　　教　授
成　島　哲　也　　助　教
吉　澤　大　智　　助　教
橋谷田　　俊　　研究員
平　等　拓　範　　教　授(委嘱)(理研放射光)
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
加　藤　　覚　　共同研究員

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
REZVANI, Seyedali　　研究員

特別研究部門
藤　田　　誠　　卓越教授（東大院工学系）

機器センター　センター長(併)　横　山　利　彦

大　原　三　佳	特任研究員
東　　陽　介	特任研究員
石　山　　修	特任研究員
遠　山　　遊	特任専門員
船　木　弓　子	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
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）

計算科学研究センター　センター長(併)　斉　藤　真　司

斉　藤　真　司	教　授(兼)
江　原　正　博	教　授
奥　村　久　士	准教授(兼)
伊　藤　　暁	助　教(兼)
石　田　干　城	助　教(兼)
大　野　人　侍	助　教

生命創成探究センター（分子科学研究所関連）　センター長(併)　加　藤　晃　一

白　瀧　千夏子	特任助教

創成研究領域

加　藤　晃　一	教　授
矢　木　真　穂	助　教
谷　中　冴　子	助　教(兼)
渡　辺　大　輝	特任助教
石　井　健太郎	研究員
鈴　木　達　哉	特任研究員
青　野　重　利	教　授
村　木　則　文	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

古　賀　信　康　　准教授
小　杉　貴　洋　　助　教(兼)
南　　慎太朗　　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
栗　原　顕　輔　　特任准教授

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　　主　任
木　村　幸　代　　係　員

（機器開発技術班）
菊　地　拓　郎　　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
木　村　和　典　　係　員

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
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　髙　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	主　任

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	係　長
澤　　昌　孝	主　任

学術支援班　班長

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）

湯　澤　勇　人	特任専門員
堀　米　利　夫	特任専門員

（計算科学研究センター）

神　谷　基　司	特任専門員

＊　整理日付は2019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（2019 年１月１日現在）

①　専任研究部門等（分子研のみ　岡崎共通研究施設は含まず　休職・休業含む）

職名 / 区分	所　長	教　授	准教授	助　教	技術職員	若手独立フェロー / 特任准教授	分子科学研究所特別研究員 / 特任助教	IMS フェロー
就任者数	8	50	82	286	158	5	24	232
転出者数	7	38	72	250	128	3	21	229
現　　員	1	12(3)	10	36	30	2	3	3

（　）は委嘱で外数。

②　客員研究部門

職　名 / 区　分	教　授	准教授
就任者数	156	170
現　　員	6	4

③　外国人客員研究部門

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

2019.1.1

区分	所　長	教　授	准教授	主任研究員	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)	0(3)		6	8(6)		8(6)
光分子科学研究領域		2(2)	0(2)		3	5(4)		5(4)
物質分子科学研究領域		2(3)	4		3(1)	9(4)		9(4)
生命・錯体分子科学研究領域		2(5)	3(2)		9(4)	14(11)		14(11)
研究施設		4(7)	3(4)	1	15	23(11)		23(11)
特別研究部門		(1)				(1)		(1)
技術課							30	30
小計	1	12(21)	10(11)	1	36(5)	60(37)	30	90(37)
生命創成探究センター		2	2		2(3)	6(3)		6(3)
計算科学研究センター		1(1)	0(1)		(1)	1(3)		1(3)
合計	1	15(22)	12(12)	1	38(9)	67(43)	30	97(43)

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

2-6-2 財　政

（単位：千円）

科目等＼年度	2014 年度	2015 年度	2016 年度	2017 年度	2018 年度
人件費	1,118,692	1,174,409	1,173,853	1,221,654	1,159,087
運営費，設備費	2,287,785	2,197,850	2,136,073	2,282,332	2,719,960
施設費	22,820	21,492	31,528	80,000	0
合計	3,429,297	3,393,751	3,341,454	3,583,986	3,879,047

寄付金

区　分	2014 年度	2015 年度	2016 年度	2017 年度	2018 年度
件数（件）	23	18	12	15	17
金額（千円）	21,648	18,140	15,920	25,021	25,483

共通研究施設を除く

科学研究費助成事業

区　分	2014 年度	2015 年度	2016 年度	2017 年度	2018 年度
件数（件）	68	56	65	63	58
金額（千円）	265,990	239,580	487,690	475,020	428,220

生命創成探究センター及び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

2018 年度科学研究費助成事業

受入件数一覧　　2018 年 11 月 28 日現在

研究種目		分子科学研究所	生命創成探究センター・岡崎共通研究施設	合計
特別推進研究		1	0	1
新学術領域研究	領域	11	3	14
挑戦的萌芽研究		1	0	1
挑戦的研究	（開拓）	0	0	0
挑戦的研究	（萌芽）	3	0	3
若手研究	（A）	3	2	5
若手研究	（B）	8	2	10
若手研究		5	2	7
基盤研究	（S）	1	0	1
基盤研究	（A）	4	0	4
基盤研究	（B）	10	2	12
基盤研究	（C）	9	0	9
特別研究員奨励費		0	2	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		2	0	2
奨励研究		0	0	0
合計		58	13	71

＊分担金受入件数を除く

受入額一覧　　2018 年 12 月 6 日現在

（単位：千円）

研究種目		分子科学研究所	生命創成探究センター・岡崎共通研究施設	合計
特別推進研究		76,900	0	76,900
新学術領域研究	領域	92,800	5,900	98,700
挑戦的萌芽研究		1,100	0	1,100
挑戦的研究	（開拓）	0	0	0
挑戦的研究	（萌芽）	5,100	0	5,100
若手研究	（A）	7,100	6,000	13,100
若手研究	（B）	8,100	2,800	14,900
若手研究		7,600	3,000	10,600
基盤研究	（S）	38,700	0	38,700
基盤研究	（A）	35,600	0	35,600
基盤研究	（B）	45,100	6,600	51,700
基盤研究	（C）	9,100	0	9,100
特別研究員奨励費		0	1,500	1,500
特別研究員奨励費	外国人	0	0	0
研究活動スタート支援		2,200	0	2,200
奨励研究		0	0	0
合計		329,400	25,800	355,200

＊間接経費を除く
＊分担金を除く
＊補助金課題は交付決定額で集計
＊基金及び一部基金化課題は，当該年度の支払請求額を計上

共同研究

区　分	2014 年度	2015 年度	2016 年度	2017 年度	2018 年度
件数（件）	5	4	9	7	5
金額（千円）	31,328	61,750	46,443	64,825	31,433

2018 年 12 月 31 日現在

受託研究

区　分	2014 年度	2015 年度	2016 年度	2017 年度	2018 年度
国	2	2	2	2	2
独立行政法人等	20	17	17	20	19
大学等	3	3	4	4	5
民間企業他	1	2	1	1	0
合計件数（件）	26	24	24	27	26
合計金額（千円）	932,110	998,355	949,377	1,050,602	1,207,434

（岡崎共通研究施設を含む）
2018 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（2018.12）岡崎情報図書館は雑誌 1,516 種（和 292，洋 1,224），単行本 96,646 冊（和 13,270，洋 83,376）を所蔵している。

また，学術雑誌の電子ジャーナル化の趨勢にいち早く対応するよう努めており，現在，機構（岡崎３機関）として約 9,000 誌の電子ジャーナルが機構内部からアクセスできるようになっている。

岡崎情報図書館では専用電子計算機を利用して，図書の貸出しや返却の処理，単行本並びに雑誌の検索等のサービスを行っている。このほか SciFinder，Reaxys 等のデータベース検索や学術文献検索システムによるオンライン情報検索のサービスも行っている。また，ライブラリーカードを兼ね備えた職員証・入構証を使用することによって，岡崎情報図書館は 24 時間利用できる体制になっている。

2-7-2　岡崎コンファレンスセンター

岡崎コンファレンスセンターは，国内外の学術会議はもとより研究教育活動にかかる各種行事に利用できる岡崎３機関の共通施設として平成９年２月に竣工した。センターは共同利用研究者の宿泊施設である三島ロッジに隣接して建てられている。

岡崎３機関内の公募によって「岡崎コンファレンスセンター」と命名された建物は，延べ床面積 2,863 m^2，鉄筋コンクリート造２階建てで，大型スクリーン及びＡＶ機器等を備えた 200 余名が参加可能な大隅ホール，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，既存する警報装置と連動して動く拡張防災システム，βグルコシダーゼ 1A を熱安定化する変異体，両親媒性ポリマー担持銀ナノ触媒の開発およびその水素化反応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 29 年度の発明件数は，個人有としたもの０件，機構有としたもの９件，平成 30 年度は，個人有０件，機構有８件であった（平成 30 年 12 月 31 日現在）。

３．共同研究と大学院教育

大学共同利用機関としての分子科学研究所は，所外の分子科学及び関連分野の研究者との共同研究を積極的に推進しており，全国の研究者からの共同研究の提案を運営会議で審議し，採択された共同研究に対しては旅費及び研究費の一部を支給している。また，海外の研究者との共同研究に対しては，研究者の派遣及び相手国研究者招へいのために国際共同研究事業を行っている。特に，東アジア地域での分子科学の急速な発展に対応して，平成 18 年度から 22 年度において，日本学術振興会の支援により分子科学研究所が中心となり，アジアでの分子科学の協力研究体制の拠点ネットワークを作る目的で日本，韓国，中国，台湾の研究者が一堂に会するアジア研究教育拠点事業（Asian CORE プログラム）を行い，新領域創出による共同研究の萌芽を見いだす機会を設けた。平成 23 年度からは，このような取組をアジア地区に限定することなく，より国際的に発展・拡充するため，分子科学国際共同研究拠点形成事業を開始した。また，分子科学研究所は 21 世紀東アジア青少年大交流計画（JENESYS; Japan-East Asia Network of Exchange for Students and Youths）に積極的に参画し，毎年，ASEAN 諸国の拠点大学及び公募で選考された若手研究者と大学院学生を招へいし，人材の育成に努めてきた。また，平成 23 年度からは，post-JENESYS プログラムとして EXODASS（EXchange prOgram for the Development of Asian Scientific Society）プログラムを立ち上げ，アジア地区の若手研究者に，分子科学研究所に２週間～３ヶ月間滞在し，研究を行う機会を提供することにより，アジア地区における基礎研究の発展と研究ネットワーク構築に寄与した。平成 26 年度からは, 分子研全体の国際インターンシッププログラム（IMS-IIP）に組み込む形でアジア版 IMS-IIPA と名前を変え，事業を継続している。EXODASS から IMS-IIP に変わるにあたり，滞在期間を３ヶ月以内から６ヶ月以内に延長する（若手教員は１～２ヶ月），募集を原則として MOU 提携校に限る（MOU 提携校以外からも受入れは可能であるが，わざわざ宣伝はしていない）など，分子研独自のインターンシップ制度として，より戦略的な運用を図っている。

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

3-1　研究領域

理論・計算分子科学研究領域

研究目的　　量子力学，統計力学などに基づく分子及びその集合体，生体分子やナノ物質などの多体化学系の構造，反応，物性，機能に関する理論・計算分子科学研究による解明

理論分子科学第一研究部門

研究目的　　多体分子系の反応ダイナミクス，物性，機能の解明のための方法論の開発とそれに基づく理論・計算科学的研究

研究課題　1，凝縮系における反応，物性，機能発現の解明
2，ナノ構造体の光応答理論開発と光・電子機能物質の理論設計

理論分子科学第二研究部門

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

研究課題　1，凝縮相化学過程の量子ダイナミクス理論

計算分子科学研究部門

研究目的　　機能性分子や不均一系触媒，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・不均一系触媒への応用
2，分子動力学シミュレーションにおける新しい手法の開発と生体系への応用

理論・計算分子科学研究部門（若手独立フェロー）

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

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

理論・計算分子科学研究部門（客員）

研究目的　1，開殻性を持つ分子および分子集合系の光物性の理論的解明と物質設計
2，不均一系触媒に関する理論・計算科学的研究
3，分子集合系の遅いダイナミクスに関する理論・計算科学研究

研究課題　1，新奇な縮環炭化水素の開殻性と三次非線形光学物性の理論解析と物質設計
2，量子マスター方程式法による分子集合系のシングレットフィッションの機構解明と物質設計
3，固体酸化物／液相界面における不均一系触媒反応の理論解析
4，粘性，拡散，エネルギー輸送を支配する構造変化メカニズムの解析

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。様々な物質の構造や性質を光で調べること，物性や反応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

光分子科学第二研究部門

研究目的　物質の量子論的な性質を，デザインされた光電場で詳細に観察し制御するための新しい方法論と，それを支える高度な光源の開発を目指した研究を行う

研究課題　1，高度にデザインされたレーザー場を用いて，原子・分子及びその集合体の量子ダイナミクスを精密に観測・制御するための研究

光分子科学第三研究部門

研究目的　真空紫外光や軟Ｘ線を用いた新奇な励起分子ダイナミクスの開拓と，それに関る動的プロセスの解明及び制御を目指した研究を行う

研究課題　1，真空紫外光・軟Ｘ線分光による分子及び分子集合体の物性研究

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，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

2，空間構造を持つ放射光の発生と利用法の開拓

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

電子構造研究部門

研究目的　　分子・物質材料の物理的・化学的新機能と機構解明

研究課題　1, 物質科学・表面科学のための新しい分光学的計測手法の開発

2, 固体表面上の分子集合体の特異的な構造物性・化学機能・量子ダイナミクスの探求

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

3, 次世代電気化学デバイスの創出に向けた新物質探索

物質分子科学研究部門（客員）

研究目的　　物質分子科学のコミュニティ交流を通した新しい先端的研究分野の開拓

研究課題　1, 有機系熱電材料とフレシキブル熱電変換デバイス

2, ディラック電子系有機導体をチャネルとしたFET製作と量子輸送

生命・錯体分子科学研究領域

研究目的　　生体系が示す多種多彩な機能の発現が，どのような機構で行われているか分子レベルで解明するための研究を行う。また，生体分子を利用した新たな分子デバイスの開発も行う。中心金属と配位子の組み合わせで金属錯体は多彩な機能を発現する。新しい錯体合成法を開発することで新たな結合構造を持つ金属錯体を創製し，その機能を開拓する。また，金属錯体の特性を生かしてエネルギー・環境問題軽減のための高効率有機化合物変換反応，水中での有機化合物の分子変換，無機小分子の変換と機構解明を行う。さらに，人工細胞を創成して生物の挙動を再現することを目指した研究を展開する。

生体分子機能研究部門

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

研究課題　1, 新規な機能を有する金属タンパク質の構造機能相関解明

2, 複合糖質およびタンパク質の構造・ダイナミクス・相互作用に関する研究

3, 生体分子モーターのエネルギー変換機構の解明，新規設計と実証

4, 合成両親媒性分子を用いたベシクル型人工細胞の構築と解析

生体分子情報研究部門

研究目的　　先端計測技術により，細胞内情報伝達を担う生体分子の分子機構を解明する

研究課題　1, 溶液散乱と結晶構造解析を相補的に駆使した動的構造解析

2, 各種分光法と表面増強効果あるいは顕微計測技術を組み合わせた新規計測法の開発

3, 赤外差分光計測による膜タンパク質の構造機能相関解明

4, イオンチャネル及びGタンパク質共役型受容体の機能的発現と分子機構解析

錯体触媒研究部門

研究目的　　分子間の共同作用的相互作用に立脚した化学反応の駆動，化学反応システムの構築

研究課題　1, 水素結合・疎水性相互作用・静電的相互作用といった非共有結合性相互作用による有機分子変換触媒システム構築

2, 分子集合挙動に基づく超分子触媒，高次構造触媒の設計と創製

錯体物性研究部門

研究目的　　機能性金属錯体の設計と合成，金属錯体を反応場とする有機分子や無機分子の高効率変換

研究課題　1，機能性金属錯体の合成と構造解明

2，金属錯体を用いた小分子の高効率変換反応の開発

3，エネルギーの高効率利用を指向した金属触媒反応の開発

生命・錯体分子科学研究部門（客員）

研究目的　1，バッキーボウル，フラーレン，金属ナノクラスター触媒の化学の確立

2，自己組織化に基づく“分子システム化学”の創成

3，高速原子間顕微鏡の開発と生体超分子複合体１分子計測への適用

研究課題　1，新規バッキーボウルの合成と物性評価，フラーレンの電子受容能を用いた新規反応の開発

2，配位高分子を用いたイオン伝導体，プロトン伝導体の創成

3，タンパク質分子モーター，タンパク質分子マシンの構造ダイナミクスの解明

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，生体分子系における反応および階層的構造変化の解明

4，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

4，酸水素化物を基本とした新規機能性材料の探索

5，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

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・エネルギー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
3, 固体表面における分子集合体の特異的量子ダイナミクスの探究

繊細計測研究部門

研究目的　低摂動で繊細な分子計測法等，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ニクスの研究

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

特別研究部門

研究目的　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「卓越教授」として招聘し，研究に専念できる環境を提供する。分子科学分野のトップレベル研究を支援する。

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幹事機関を担い，さらには，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・実施機関として共同利用・民間利用拠点を務めている。

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した極限の探求），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）の５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。

生命創成探究センター（自然科学研究機構）

目　的　　生命創成探究センター（Exploratory Research Center on Life and Living Systems = ExCELLS）は，自然科学研究機構の更なる機能強化を目指すために，岡崎統合バイオサイエンスセンターを中核として機構の組織を再編・統合して設置された。本センターでは，「生きているとは何か？」という人類の根源的な問いの解明に向けて，生命の仕組みを観察する新たな技術を開発するとともに，蓄積されていく多様な情報の中に隠されている意味を読み解き，さらに合成・構成的アプローチを通じて生命の基本情報の重要性を検証する活動を行っている。こうした「みる・よむ・つくる」のアプローチを基軸に，生命の始原形態や環境適応戦略を理解するために，極限環境生命の研究者とも協力しながら異分野融合型の研究を進め，生命の設計原理を探究する。この目的のもとに，国内外の大学・研究機関の連携によりコミュニティ横断型の共同利用・共同研究を推進する。

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)　若手研究活動支援：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　2018 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
脂質膜上での人工ドメイン形成技術開発と生体高分子集積への展開	熊本大学大学院先端科学研究部　大谷　亮

(2)　協力研究

課　題　名（通年）	代　表　者
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
磁性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
有機半導体界面のエネルギー準位接続解析～構造物性との相関～	筑波大学数理物質系　櫻井　岳暁
有機分子の電子状態の次元依存性	千葉大学大学院工学研究院　山田　豊和
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（III）	東京理科大学理工学部　中山　泰生
レーザーコンプトンガンマ線を利用した陽電子消滅寿命解析による結晶中カチオン単原子空孔の可視化	山形大学理学部　北浦　守
ベクトルビームアンジュレータ放射光の詳細研究	量子科学技術研究開発機構量子ビーム科学研究部門　川瀬　啓悟
相対論的電子ビームからの短波長コヒーレント光渦の発生	名古屋大学シンクロトロン光研究センター　保坂　将人
極低温分光実験と反応経路探索計算による桂皮酸誘導体の光誘起異性化の研究	広島大学大学院理学研究科　江幡　孝之
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
EDEM タンパク質による糖鎖トリミングと小胞体関連分解に関する研究	京都大学ウイルス・再生医科学研究所　細川　暢子

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
受動 Q スイッチレーザーを用いたガスブレイクダウン機構に関する研究	大阪大学工学部	赤松　史光

課　題　名（前期）	代　表　者	
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	東京理科大学理学部	秋津　貴城
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
磁気ドメイン制御型 Q スイッチのメカニズム解明	豊橋技術科学大学電気・電子情報工学系	後藤　太一
ダイヤモンドスピンセンサーと近接場光ファイバープローブの結合	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
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
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
2 μm 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
中赤外線レーザーが神経変性疾患原因凝集体を解離する過程の分子科学シュミレーション	群馬大学大学院保健学研究科	中村　和裕
水中での金属ナノ粒子を触媒とする新規 C–C カップリング反応	大阪工業大学工学部	大高　敦

課　題　名（後期）	代　表　者	
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	大愛媛大学大学院理工学研究科	太田　英俊
半導体ナノワイヤのソフトマテリアル中への固定化に基づく光電変換機能発現	名城大学理工学部	西山　桂
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
光電気化学反応場のオペランド分光計測	北九州市立大学国際環境工学部	天野　史章
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
ダイヤモンドスピンセンサーと近接場光ファイバープローブの結合	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の結合系の開拓	大阪府立大学大学院工学研究科	戸川　欣彦
分子性触媒を基盤とした高効率な光エネルギー変換系の構築	立教大学理学部	中薗　孝志
高出力赤外光パラメトリック増幅器のための配向パターン化 GaAs 結晶デバイスの開発	中央大学理工学部	庄司　一郎
アルカリ金属ドーピングされた芳香族分子結晶中の電子の非局在性	筑波大学数理物質系	山田　洋一

(3)　研究会

① 【分子研研究会】
化学と情報科学との融合による新化学創成
2018 年 5 月 29 日（火）～ 30 日（水）　岡崎コンファレンスセンター小会議室

5 月 29 日（火）

13:30-13:40　挨拶　研究会開催趣旨説明
阿尻雅文　教授（東北大）

1) ビッグデータ薬剤，医療ビックデータ解析

13:40-14:05　「創薬研究の最前線」
上村みどり　上席研究員（帝人ファーマ株式会社）

2) つくる反応ルートを探る

14:05-14:30　「機械学習による触媒反応収率予測」
佐藤一彦　センター長（産業技術総合研究所）

14:30-14:55　「データ駆動的アプローチによる化学分野への展開」
永田賢二　主任研究員（産業技術総合研究所）

14:55-15:20　「Chematica のもたらすもの」
松原誠二郎　教授（京都大学）

3) 構造解析・分析における AI の活用

15:35-16:00　「材料設計・プロセス設計のためのデータ駆動型化学～材料設計・プロセス設計・品質管理と制御の連動～」
船津公人　教授（東京大学）

4) 化学プロセスにおける AI

16:00-16:25　「AI と化学産業」
山下善之　教授　（東京農工大学）

5) 教育

16:25-16:50　「情報系ではない理工系学科になぜディープラーニングの教育が必要か
――プチ・マス時代のディープラーニング活用――」
阿久津典子　教授　（大阪電通大学）

17:20-19:00　意見交換会（会費：5,000 円程度 (予定)）

5 月 30 日（水）

9:00- 9:25　「知識，モデル，データから新たな知識の創造」
長谷部伸二　教授（京都大学）

総合討論　阿尻司会

9:25-11:00　パネラー　参加予定者（敬称略）
上村みどり，佐藤一彦，永田賢二，松原誠二郎，船津公人，阿久津典子，山下善之，長谷部伸二，阿尻雅文

② 【分子研研究会】

新たな元素戦略を切り拓く物質科学研究会
2018 年 6 月 1 日（金）～ 2 日（土）　分子科学研究所研究棟 201 号室

6 月 1 日（金）

16:00 ~ 17:00　「様々な電気化学反応に適用できる新しい触媒材料の開発」
山田幾也（大阪府大 工学研究科）

17:00 ~ 18:00　「金属－有機構造体を用いたイオン輸送制御」
堀毛悟史（京大 iCeMS）

18:00 ~ 19:00　自由討論

19:30 ~ 22:00　懇親会・ランプセッション（研究棟ラウンジ）

6 月 2 日（土）

9:00 ~ 10:00　「最小エネルギー円錐交差（MECI）で内部変換を視る：光機能分子の設計」
小西玄一（東工大 物質理工）

10:00 ~ 11:00　「固体物理と電気化学の交差点 : 固体電解質－電極界面研究から見た課題と展望」
一杉太郎（東工大 物質理工）

11:00 ~ 12:00　「強力磁場を自在にあやつる多結晶超伝導永久磁石」
山本明保（東京農工大）

12:00 ~ 13:00　自由討論・昼食

③ 【分子研研究会】

光とナノ物質の相互作用――分子科学の未来にむけて
2018 年 6 月 10 日（日）　岡崎コンファレンスセンター大隅ホール

司会　斉藤真司（分子科学研究所）

13:30 – 13:40　川合眞紀（分子科学研究所）
はじめに・趣旨説明

13:40 – 14:10　矢花一浩（筑波大学）
「電子ダイナミクスの第一原理計算を巡って」

14:10 – 14:40　根岸雄一（東京理科大学）
「精密金属クラスターの構造解析」

14:40 – 15:10　八井 崇（東京大学）
「非一様光場（近接場光）に基づくデバイス・加工技術の新機軸」

15:10 – 15:40　安池智一（放送大学）
「表面光化学過程と電子ダイナミクスの諸相」

16:10 – 16:20　福山秀敏（東京理科大）
「信定さんからのメッセージ」

司会　谷村吉隆（京都大学）

16:20 – 16:30　岩佐 豪（北海道大学）
「双極子近似を超えた光と分子の相互作用：未知の光学現象と光反応と科学の未来」

16:30 – 16:40　飯田健二（分子科学研究所）
「ボスと一緒に研究したナノ物質の光誘起電子ダイナミクス」

16:40 – 16:50　岸根順一郎（放送大学）
「Chiral 磁気プラズモニクスへ向けて」

16:50 – 17:00	秋山 良（九州大学） 「信定克幸：『紀の国』から来た男」
17:00 – 17:10	宮崎州正（名古屋大学） 「1998 年～ 2018 年の液体・ガラスの非平衡物理学」
17:10 – 17:20	井上克也（広島大学） 「信定さんと『キラル磁性×光学物性研究会』」
17:20 – 17:30	加藤 毅（東京大学） 「分子科学の方向性と展望」
17:30	閉会の辞

④ 【分子研研究会】
有機デバイスを用いた量子状態制御の新展開
2018 年 6 月 29 日（金）～ 30 日（土） 分子科学研究所研究棟 201 号室

Jun 29 (Fri)

Session 1:

13:00 – 13:30		Registration	
13:30 – 14:00	oral 1	はじめに	山本　浩史
14:00 – 14:20	oral 2	OLED から有機半導体レーザーへの新展開	安達　千波矢
14:20 – 14:40	oral 3	有機半導体を利用したポラリトン状態の量子コヒーレント制御を目指して	香月　浩之
14:40 – 15:00	oral 4	テラヘルツ・赤外強電場による有機分子性結晶の電子相制御	岡本　博
15:00 – 15:20	oral 5	有機電荷移動錯体におけるシフト電流光電変換	中村　優男

Session 2:

15:35 – 15:55	oral 6	非熱平衡過程を用いた量子状態制御	賀川　史敬
15:55 – 16:15	oral 7	有機材料の表面構造解析	若林　裕助
16:15 – 16:35	oral 8	スピン流研究の広がり：量子スピン液体や核スピンを用いたスピン流生成	塩見　雄毅
16:35 – 16:55	oral 9	螺旋状の原子鎖における電流誘起スピン偏極	明楽　浩史
16:55 – 17:15	oral 10	プローブ顕微鏡による局所物性評価	長谷川　幸雄
17:15 – 18:15		free discussion	
18:30		移動 + 意見交換会（19：00 ～）	

Jun 30 (Fri)

Session 3:

9:00 – 9:20	oral 11	有機ラジカルの分子設計と量子磁気状態	細越　裕子
9:20 – 9:40	oral 12	第一原理による高精度励起スペクトル計算の紹介	野口　良史
9:40 – 10:00	oral 13	有機ディラック電子系における量子現象	田嶋　尚也
10:00 – 10:20	oral 14	有機トランジスタにおけるレーザー発振	下谷　秀和
10:20 – 10:40	oral 15	分極スイッチ機能開拓に向けた分子システムの開発	堀内　佐智雄

10:55 – 12:00 free discussion + Closing

⑤ 【アジア連携分子研研究会】
Frontier Bioorganization Forum 2018
（日韓台生命分子科学セミナー 2018）
2018 年 7 月 8 日（日）～ 11 日（水） 分子科学研究所山手３号館大会議室

July 8 (Sun)

11:00 – 13:00 Registration

Session 1 *Chair: Shinji Takada*

13:00 – 13:10	Opening Remarks Koichi Kato (Director, ExCELLS)		
13:10 – 13:30	O-1	Koichi Kato	ExCELLS, IMS
13:30 – 14:00	O-2	Jooyoung Lee	KIAS
14:00 – 14:30	O-3	Hirofumi Sato	Kyoto University
14:30 – 15:00	O-4	Chin-Lin Guo	Academia Sinica

Session 2	*Chair: Makoto Tominaga*		
15:30 – 16:00	O-5	Takayuki Uchihashi	Nagoya University
16:00 – 16:30	O-6	Kay-Hooi Khoo	Academia Sinica
16:30 – 17:00	O-7	Shuji Akiyama	IMS
17:00 – 17:30	O-8	Kyoung-Seok Ryu	Korea Basic Science Institute

July 9 (Mon)

Session 3	*Chair: Motohiro Nishida*		
9:00 – 9:30	O-9	Ming-Daw Tsai	Academia Sinica
9:30 – 10:00	O-10	Hisashi Okumura	ExCELLS, IMS
10:00 – 10:30	O-11	Sun Choi	Ewha Womans University

Session 4	*Chair: Chien-Chih Yang*		
11:00 – 11:30	O-12	Nobuyasu Koga	ExCELLS, IMS
11:30 – 12:00	O-13	Hyungsik Won	Konkuk University
12:00 – 12:30	O-14	Shigenori Nonaka	ExCELLS, NIBB
12:30 – 14:00	Lunch (Council Meeting)		

Session 5	*Chair: Jooyoung Lee*		
14:00 – 14:30	O-15	Motohiro Nishida	ExCELLS, NIPS
14:30 – 15:00	O-16	Rita Pei-Yeh Chen	Academia Sinica
15:00 – 15:30	O-17	Shigetoshi Aono	ExCELLS, IMS
15:30 – 16:00	Coffee Break (Group Photo)		

Session 6	*Chair: Ming-Daw Tsai*		
16:00 – 16:30	O-18	Juyong Lee	Kangwon National Univ.
16:30 – 17:00	O-19	Kung-Ta Lee	National Taiwan University
17:00 – 17:30	O-20	Kazuhiro Aoki	ExCELLS. NIBB
18:00 – 20:00	Banquet		

July 10 (Tue)

Session 7	*Chair: Shigetoshi Aono*		
9:00 – 9:30	O-21	Shin-ichi Higashijima	ExCELLS, NIBB
9:30 – 10:00	O-22	Joon-Hwa Lee	Gyeongsang National Univ.
10:00 – 10:30	O-23	Meng-Chiao Ho	Academia Sinica

Session 8	*Chair: Sun Choi*		
11:00 – 11:30	O-24	Naoyuki Inagaki	NAIST
11:30 – 12:00	O-25	Nobuyuki Shiina	ExCELLS, NIBB
12:00 – 12:30	O-26	Weontae Lee	Yonsei Univ.

Session 9	*Chair: Rita Pei-Yeh Chen*		
14:00 – 14:30	O-27	Susumu Uchiyama	ExCELLS, Osaka Univ.
14:30 – 15:00	O-28	Hsiao-Ching Lin	Academia Sinica
15:00 – 15:30	O-29	Art E. Cho	Korea University

ExCELLS Young Scientists Forum 2018

Chair: Rina Yogo

16:00 – 16:18	Y-1	Maho Yagi-Utsumi	ExCELLS, IMS
16:18 – 16:36	Y-2	Tomohiro Tanaka	ExCELLS, NIPS
16:36 – 16:54	Y-3	Yohei Kondo	ExCELLS, NIBB

Chair: Saeko Yanaka

17:00 – 17:30	Panel discussion
17:30 – 19:00	Poster session

July 11 (Wed)

Session 10 *Chair: Weontae Lee*

9:00 – 9:30	O-30	Makoto Tominaga	ExCELLS, NIPS
9:30 – 10:00	O-31	Jeong-Yong Suh	Seoul National University
10:00 – 10:30	O-32	Chien-Chih Yang	National Taiwan University

Session 11 *Chair: Kazuhiro Aoki*

11:00 – 11:30	O-33	Shinji Takada	ExCELLS, NIBB
11:30 – 12:00	O-34	Euiyoung Bae	Seoul National University
12:00 – 12:30	O-35	Chia-Cheng Chou	National Center for High-performance Computing
12:30 – 12:40	Closing Remarks		

14:00 – 16:00 Lab tour

⑥ 【学協会連携分子研研究会】
第 1 回ヒドリドイオニクス研究会
～新たな研究領域と産学連携分野の創出に向けて～
2018 年 10 月 28 日（日） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

10:00 – 10:30	受付
10:30 – 10:35	川合 眞紀（分子科学研究所 所長） 開会挨拶
10:35 – 11:00	小林 玄器（分子科学研究所） ヒドリドイオニクス研究会概要説明
11:00 – 12:00	細野 秀雄（東京工業大学） 機能材料中の水素の役割と活用：ヒドリドにフォーカスして
13:00 – 14:00	菅野 了次（東京工業大学） 超イオン導電体の物質探索　銅からリチウム，ヒドリドまで
14:00 – 15:00	陰山 洋（京都大学） ヒドリドの特徴を活かした物質開発・制御
15:10 – 16:10	常行 真司（東京大学） 物質中の水素は計算機でどう“見える”か？
16:10 – 17:10	銭谷 勇磁（パナソニック株式会社） ペロブスカイト型酸化物 $Ba_{1-x}Zr_{1-y}Y_yO_{3-\delta}$ における特異な伝導物性
17:10 – 17:15	総評
17:15 – 17:20	閉会挨拶
17:30 – 19:30	情報交換会 （岡崎コンファレンスセンター中会議室）

⑦ 【ミニ国際シンポジウム分子研研究会】
The International Symposium on Bioinorganic Chemistry 2018
2018 年 11 月 30 日（金）～ 12 月 1 日（土） 岡崎コンファレンスセンター

November 30th (Fri)

9:30 – 9:40 *Opening Remarks* Osami SHOJI (Nagoya University)

Chaired by Takashi MATSUO

Invited talks

9:40 – 10:00	Satoshi ABE (Tokyo Institute of Technology) “In cell protein crystals containing organometallic Pd complexes”
10:00 – 10:20	Norifumi KAWAKAMI (Keio University) “Enzyme immobilization in protein aggregates composed of a protein nanoparticle, TIP60”
10:20 – 10:40	Shigeyuki MASAOKA (Institute for Molecular Science) “Pentanuclear iron catalysts for water oxidation”

Chaired by Toshitaka MATSUI

Keynote Lecture

11:00 – 11:40 Thomas M. Makris (University of South Carolina)
"To be announced"

Invited talks

11:40 – 12:00 Yoshihito SHIOTA (Kyushu University)
"C–H bond activation by dicopper-oxo species"

12:00 – 12:20 Hiroaki KOTANI (University of Tsukuba)
"Redox Noninnocent Behavior of Tris(2-pyridylmethyl)amine Bound to Lewis Acidic Metal Ions Induced by C–H Deprotonation"

Chaired by Norifumi KAWAKAMI

Invited talks

13:30 – 13:50 Tasuku HIRAYAMA (Gifu Pharmaceutical University)
"Development of fluorescent probes for the detection of Fe(II) ion in living cells"

13:50 – 14:10 Taiho KAMBE (Kyoto University)
"Physiology and biochemistry of zinc-requiring ectoenzymes"

14:10 – 14:30 Masayasu TAKI (Nagoya University)
"Design of new fluorophores for optical imaging"

Chaired by Yutaka HITOMI

Keynote Lecture

14:50 – 15:30 Christoph J. Fahrni (Georgia Institute of Technology)
"Illuminating biological trace metals with high- and low-energy photons"

Chaired by Yasuhiro FUNAHASHI

Invited talks

15:50 – 16:10 Yoshiaki FURUKAWA (Keio University)
"Copper in ALS: A neurodegeneration caused by metal deficiency in SOD1"

16:10 – 16:30 Minoru KUBO (University of Hyogo)
"Time-resolved IR analysis of the catalytic reaction pathway of NO reductase"

16:30 – 16:50 Takashi FUJISHIRO (Saitama University)
"X-ray crystallographic snapshots of sulfur mobilization to iron-sulfur cluster biosynthesis"

Chaired by Shinobu ITOH

Special lecture

17:10 – 18:10 Yoshihito WATANABE (Nagoya University)

18:30 – 20:30 Banquet

December 1st (Sat)

Chaired by Yuichiro AIBA

Invited talks

9:30 – 9:50 Nobutaka FUJIEDA (Osaka Prefecture University)
"Cupin proteins as multipotent macromolecular ligands"

9:50 – 10:10 Koji OOHORA (Osaka University)
"Hemoprotein engineered with artificial heme analogues showing unique catalysis via the detectable active species"

10:10 – 10:30 Takehiko TOSHA (RIKEN SPring-8 Center)
"Regulation of nitric oxide dynamics in microbial denitrification"

10:30 – 10:50 Toshikazu ONO (Kyushu University)
"Learning from vitamin B_{12}-mediated reactions: Cobalt(III)–carbon bond assisted catalytic C–H fluoroalkylation of arenes and heteroarenes"

Chaired by Takehiko TOSHA

Keynote Lecture

11:10 – 11:50 Lionel Cheruzel (San Jose State University)
"To be announced"

Chaired by Shinya ARIYASU

Invited talks

13:00 – 13:20 Hitoshi UBE (The University of Tokyo)
"Metal-mediated Molecular Gearing Systems based on Triptycene"

13:20 – 13:40 Shin-ichiro KAWANO (Nagoya University)
"Nanoporous Liquid Crystals and Double-Decker Cages Utilizing Shape-Persistent Metallomacrocycle"

13:40 – 14:00 Yuma MORIMOTO (Osaka University)
"Detailed Characterization and Reactivity Studies of a Bis(μ-oxido)dinickel(III) Complex"

Chaired by Takeshi UCHIDA

Invited talks

14:20 – 14:40 Tomohiko INOMATA (Nagoya Institute of Technology)
"Immobilization of microbes on artificial siderophore complexes-modified substrates"

14:40 – 15:00 Norifumi MURAKI (Institute for Molecular Science)
"The structure basis of the novel heme-iron uptake system in Corynebacteria"

15:00 – 15:20 Satoshi NAGAO (Nara Institute of Science and Technology)
"NMR study on structures and dynamic properties of cytochrome *c* bound to lipid bicelles"

15:20 – 15:30 *Closing Remarks* Shigetoshi AONO (Institute for Molecular Science)

⑧ 【ミニ国際シンポジウム分子研研究会】
Water at interfaces 2018
2019 年 1 月 15 日（火）～ 17 日（木） 岡崎コンファレンスセンター

January 15th (Tue) @Okazaki Conference Center

8:50- 9:20 Registration

9:20- 9:30 Opening remark (Toshiki Sugimoto, IMS)

9:30- 9:55 1_Shinji Saito (IMS) <invited>
: Supercooled water: Structure, dynamics, thermodynamics, and glass transition

9:55-10:20 2_Tetsuya Hama (Hokkaido U) <invited>
: Liquid-like behavior of interstellar water ice at low temperatures

10:20-10:45 3_Shinichi Enami (NIES) <invited>
: Microheterogeneous Water Surfaces

11:20-12:00 4_Patrick Ayotte (U de Sherbrooke) <invited>
: Preparation, Characterization and Storage of Water Vapours Highly Enriched in its Ortho-H_2O Nuclear Spin Isomer

12:00-12:40 5_Heon Kang (Seoul U) <invited>
: Proton Transport in Ice Interior and Its Surface

12:40-14:00 Taking group photograph & Lunch Time (box lunch)

14:00-14:40 6_Mischa Bonn (MPIP) <invited>
: Hydrogen Bonding at Water and Ice Interfaces

14:40-15:05 7_Shoichi Yamaguchi (Saitama U) <invited>
: Surface Structure of Ice Ih Revealed by HD-SFG Spectroscopy and Theoretical Modeling

15:05-15:30 8_Toshiki Sugimoto (IMS)
: Proton ordering in heteroepitaxial ice films

16:00-16:40 9_Chuanshan Tian (Fudan U) <invited>
: Mechanism of Electric Power Generation from Ionic Droplet Motion on Polymer Supported Graphene

16:40-17:05 10_Tomoko Shimizu (Keio U) <invited>
: Scanning Probe Microscopy Studies of Water/Solid Interfaces

17:05-17:45 11_Ying Jiang (Peking U) <invited>
: Peering into interfacial water by scanning probe microscopy: from single molecules to two-dimensional ices

18:00-20:30 150 min poster session & free discussion with food and drinks
(Welcome remarks by Maki Kawai, IMS; Hiroshi Onishi, Kobe U; Yuki Nagata, MPIP)

January 16th (Wed) @Okazaki Conference Center

9:00- 9:25 12_Satoshi Nihonyanagi (RIKEN) <invited>
: Role of Hydrogen Bonding in Ultrafast Spectral Diffusion Dynamics of Water at Charged Lipid Interfaces

9:25-10:05 13_Thomas D Kühne (U of Paderborn) <invited>
: The name is bond—Hydrogen bond

10:05-10:45 14_Nico van der Vegt (Darmstadt U) <invited>
: Non-additive ion effects at polymer–water interfaces

11:15-11:40 15_Akihiro Morita (Tohoku U) <invited>
: Mechanism of Ion Transport through Water–Oil Interface

11:40-12:20　16_Adam Foster (Aalto U) <invited>
: Probing molecular processes at solid–liquid interfaces

13:40-14:00　17_Ken-ichiro Murata (Hokkaido U) <oral>
: In situ observation of ice crystal growth inside quasi-liquid layers

14:00-14:40　18_Chang Qing SUN (Nanyang Tec) <invited>
: O:H–O bond transition by aqueous charge injection

14:40-15:05　19_Yoshihisa Harada (Tokyo U) <invited>
: RIXS for hydrogen bond of liquid water at interfaces

15:45-16:10　20_Yasuyuki Yokota (Riken) <invited>
: Developments of In Situ and Ex Situ Techniques for Microscopic Studies of Electrochemical Reactions at Aqueous Solution/Electro Interfaces

16:10-16:30　21_Yuki Uematsu (Kyushu U) <oral>
: Jones-Ray effect can be explained by charged impurities

16:30-16:50　22_Andrea Grisafi (EPFL) <oral>
: A machine learning framework for second harmonic scattering

16:50-17:00　Closing remark (Toshiki Sugimoto, IMS)

January 17th (Thu) –optional <IMS Lab tour>– @IMS Research Building

10:00-12:30　IMS Lab tour 1: UVSOR (The Meeting Room is IMS Research Building 301)

13:30-15:00　IMS Lab tour 2: Sugimoto G (The Meeting Room is IMS Research Building 301)

⑨ 【分子研研究会】
錯体化学を基盤とした階層構造制御と機能発現
2019 年 3 月 3 日（日）～ 4 日（月） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

3 月 3 日（日）

13:00-13:05　開会あいさつ・趣旨説明　植村　卓史（東京大学）

座長：植村　卓史

13:05-13:35　異方性コロイドが水中に形成する巨大格子の科学
石田　康博（理研）

13:35-14:05　動的金属ナノ粒子のサイエンス
今岡　享稔（東工大）

14:05-14:35　非共有結合型相互作用に基づいたアキラルらせん高分子への高効率不斉誘起
長田　裕也（京大）

14:35-15:05　発光性をもつ金イソシアニド錯体の機械的応答特性
伊藤　肇（北大）

座長：正岡　重行

15:30-16:00　フッ化炭素溶媒中における遷移金属錯体の触媒機能発現
森本　祐麻（阪大）

16:00-16:30　酸化酵素の誤作動を誘起する擬似基質を用いる物質変換
荘司　長三（名大）

16:30-17:00　配位結合とペプチド配座を利用した新奇ナノ構造の創出
澤田　知久（東大）

17:00-17:30　階層的超分子重合によって実現する未知のトポロジー
矢貝　史樹（千葉大）

18:30-　懇親会

3 月 4 日（月）

座長：山田　鉄兵

9:30-10:00　構造制御されたπ電子系材料の非接触電気伝導度評価
櫻井　庸明（京大）

10:00-10:30　錯体ナノ空間を舞台とした共役高分子の超階層構造の構築
北尾　岳史（東大）

10:30-11:00　機械学習による結晶形成機構解明を基盤とした新規ナノクラスター MOF の開発
田中　大輔（関学）

11:15-11:45　錯体とカーボンの融合
西原　洋知（東北大）
11:45-12:15　合金クラスターの精密合成と一次元構造体の創成
根岸　雄一（東京理科大）

⑩ 【分子研研究会】
New Frontier in Protein Design & Engineering
2019 年 3 月 15 日（金）～ 16 日（土） 分子科学研究所研究棟 201 号室

March 15, 2019 (Fri)

13:30-13:50　Opening Remarks and Introduction
Ryoichi Arai (Shinshu Univ.) & Nobuyasu Koga (IMS, ExCELLS)
13:50-14:25　Osami Shoji (Nagoya Univ.)
“Hydroxylation of Nonnative Substrates Catalyzed by Cytochrome P450BM3 Facilitated by Decoy Molecules”
14:25-14:50　Daisuike Matsui (Toyama Prefectural Univ.)
“Rational identification of aggregation hotspots based on secondary structure and amino acid hydrophobicity”
14:50-15:15　Naoya Kobayashi (ExCELLS)
“Cumulative thermostabilization of beta-glucosidase with structure-based sequence profile information”

Special Lecture

15:35-16:20　Michael Hecht (Princeton Univ.)
“Sustaining Life with Genes and Proteins Designed ‘From Scratch’ ”

16:35-17:00　Shintaro Minami (ExCELLS)
“Design of new fold proteins yet-unexplored in nature”
17:00-17:35　Tomoaki Matsuura (Osaka Univ.)
“Engineering and characterizing membrane proteins using artificial cells”
17:35-18:00　Naohiro Terasaka (Univ. of Tokyo)
“Directed evolution of bacterial protein cages to package their own mRNA”

March 16, 2019 (Sat)

9:30- 9:55　Daisuke Kuroda (Univ. of Tokyo)
“Exploring antibody designability through physicochemical analyses, mutagenesis and computations”
9:55-10:20　Takao Arimori (Osaka Univ.)
“Development of an artificially designed antibody fragment “Fv-clasp”
10:20-10:55　Munehito Arai (Univ. of Tokyo)
“Experimental and theoretical design of enzymes and binding proteins”

11:15-11:40　Yuta Shinohara (RIKEN)
“Design principles of temperature-compensated phosphorylation in the circadian clock”
11:40-12:15　Satoshi Akanuma (Waseda Univ.)
“Protein engineering experiments to explore the evolution of early life”

13:15-13:50　Koki Makabe (Yamagata Univ.)
“Folding and Design of the Peptide Self-Assembly Mimics, PSAMs”
13:50-14:25　Paola Laurino (OIST)
“A journey from an ancient finger print of Rossmann fold enzymes to cofactor engineering”
14:25-15:00　Mitsuo Umetsu (Tohoku Univ.)
“Can proteins be engineered to generate a desired function from slim library ?”

(4) 若手研究活動支援

課　題　名	提案代表者	
第 58 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	京都大学大学院理学研究科	加藤　史明

(5) 岡崎コンファレンス

課　題　名	提案代表者	
合成，生体，ハイブリッド発動分子に関する国際シンポジウム	東京工業大学生命理工学院	金原　　数

(6) UVSOR 施設利用

（前期）

オーダー・ディスオーダー型圧電結晶の赤外反射分光	山形大学理学部	北浦　守
生態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
有限層数の有機半導体薄膜における分裂した電子準位の波数分解測定	千葉大学大学院工学研究院	吉田　弘幸
角度分解紫外光電子分光法による金属酸化物上の有機分子薄膜の電子構造と分子配向評価	千葉大学大学院工学研究院	奥平　幸司
有機ヘテロ界面の構造無秩序化を誘起する要因の解明	東京理科大学理工学部	赤池　幸紀
結晶性有機半導体材料の価電子バンド構造に対する水蒸気曝露の効果	東京理科大学理工学部	中山　泰生
オペランド軟Ｘ線吸収分光測定による炭酸コバルト水分解触媒の機能解明	山口大学大学院創成科学研究科	吉田　真明
脂質二重膜を構成するリン脂質分子の電子状態計測	豊橋技術科学大学環境・生命工学系	手老　龍吾
液晶素子の軟Ｘ線吸収スペクトルの偏光ベクトル依存性の研究	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
パラジウム NNC- ピンサー型錯体を触媒として用いた有機ケイ素化合物と有機ハロゲン化物との反応の機構解析	分子科学研究所	浜坂　剛
軟Ｘ線吸収分光法で探るグリシンベタインの塩添加による脱水和	広島大学大学院理学研究科	岡田　和正
火星隕石中の窒素化学種および同位体比分析で解明する火星大気進化	海洋研究開発機構高知コア研究所	中田　亮一
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	Synchrotron SOLEIL	CEOLIN, Denis
Selective Catalytic Hydrogenation of Furfural by the Bimetallic Nanocatalysts	University of Science and Technology of China	JU, Huanxin
層状複合イオン結晶の低次元性による自己束縛励起子の形成とダウンコンバージョン蛍光	秋田大学大学院理工学研究科	小玉　展宏
シンチレーション光の特性改善に関する研究	山形大学理学部	大西　彰正
パイロクロア型新規シンチレータ材料のバンド構造の解明	東北大学未来科学技術共同研究センター	黒澤　俊介
隕石と有機物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
真空紫外励起による無機蛍光体の発光特性と発光機構の解明	学習院大学理学部	稲熊　宜之
深紫外発光アルミン酸亜鉛蛍光体の配向性成長薄膜形成過程の解明	静岡大学学術院工学領域	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および欠陥形成に伴う変化の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野　正人
Yb_2O_3 および Ga_2O_3 の誘電関数の決定	福井大学学術研究院工学系部門	牧野　哲征
NaCl:I- 単結晶中における光励起による Ag^+ から Ag^- イオンへの変換過程の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相　武利
Electronic Band and Defect Structure of Spinel Nitrides of the Group 14 Elements and Their Solid Solutions	C.N.R.S, France	KANAEV, Andrei
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解明	東北大学多元物質科学研究所	江島　丈雄
STXM Observation of Dissolution Distribution of Ferrous or Ferric Ion in Magnetite	筑波大学生命環境系	興野　純
STXM による Li イオン電池正極材料の Li 拡散および酸化還元反応の空間分布の観測	産業技術総合研究所省エネルギー研究部門	朝倉　大輔
STXM を用いた帯電性ナノバブル周囲の水の電子状態観測	東京大学物性研究所	原田　慈久
室内実験および宇宙環境曝露実験に基づく炭素質星間塵の物質理解	東京大学大学院理学系研究科	左近　樹
生体試料の定量的分子マッピングへの STXM の展開：モデル分子混合物による検証と培養細胞への応用	東海大学工学部	伊藤　敦
走査型透過Ｘ線顕微鏡を用いたポリマー中の化学状態解析	分子科学研究所	大東　琢治
ビームラインおよび STXM の整備	分子科学研究所	大東　琢治
硫黄架橋ゴムの二相不均一網目構造の特性化	京都工芸繊維大学分子化学系	池田　裕子
その場観察・分析技術を用いた地球外物質に含まれる有機物の分子構造の分析による進化過程の解明と，「はやぶさ２」試料の機関横断型連携分析システムの構築	高輝度光科学研究センター	上椙　真之
火星起源隕石から探る火星表層環境の変遷～リン・塩素・炭素の化学種分析からのアプローチ～	広島大学大学院理学研究科	宮原　正明
硫黄の化学種別サブミクロンイメージング法による地球外有機物の形成環境の解明	海洋研究開発機構高知コア研究所	伊藤　元雄
STXM Studies on Quasi-2D and Triple-Cation Mixed-Halide Perovskite Solar Cells	National Synchrotron Radiation Research Center	HSU, Yao-jane
The Effect of the Generation of Free Radicals on the Properties of GO/ZnO/Si Composites Elucidated by Scanning Transmission X-Ray Microscopy	Tamkang University	PONG, Way-faung
Redox-Sensitive Nanocarriers for Controlled Dermal Drug Delivery	Freie University Berlin	RUEHL, Eckart

STXM in Characterizing Ultrastructural Features in the Liver of Patients with Storage Diseases	University of Oulu	IMMONEN, Esa-ville
High-Pressure Soft X-Ray Spectro-Microscopy of CO_2 Fluids	Lawrence Berkeley National Laboratory	GUO, Jinghua
In Depth Qualitative Structural Analysis of Nanocellulose Hybrid Materials and Cellulose Nanofibril Aerogels	University of Oulu	LIIMATAINEN, Henrikki
軟X線分光による窒化処理した鋼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
$Y_3Fe_5O_{12}$ ガーネットの電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本　知之
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
BL4B 光学系の調整および整備	分子科学研究所	岩山　洋士
アモルファス半導体薄膜の光照射による内殻吸収の経時変化観察	岐阜大学工学部	林　　浩司
窒素及びフッ素ドープされた TiO_2 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
軟X線吸収分光を用いた高分子系接着材料表面の化学状態と光損傷閾値の評価	理化学研究所放射光科学総合研究センター	山根　宏之
高分解能 ARPES による鉄系高温超伝導体薄膜の異方的電子構造の直接観測	東北大学大学院理学研究科	佐藤　宇史
Rashba 型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
リン偏析による Fe_2P の表面電子状態の制御	立教大学理学部	枝元　一之
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
スクッテルダ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
Measuring the Berry Curvature of Dresselhaus Semiconductor by Circular Dichroism ARPES	Seoul National University	KIM, Changyoung
アモルファス半導体光誘起構造変化に対する熱処理効果に関する研究	岐阜大学工学部	林　　浩司
オーダー・ディスオーダー型圧電結晶の赤外反射分光	山形大学理学部	北浦　　守
ゲルマニウム結晶中の格子欠陥に起因する電子準位の分光学的研究	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
異方的金属絶縁体物質の偏光テラヘルツ顕微分光	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
高強度 THz 波による物質制御と赤外分光による物性評価	大阪大学産業科学研究所	入澤　明典
低エネルギー高分解能 ARPES による新奇ノーダルフェルミオン物質の研究	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 $CH_3NH_3PbI_3$ の結晶相転移に伴う価電子バンド構造変化の実測	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の電子状態の研究	東京大学大学院理学系研究科	藤森　　淳
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 V	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 $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ の超伝導ギャップ	分子科学研究所	出田真一郎
層状 MAX 相化合物 V_2AlC の高分解能３次元角度分解光電子分光	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤　孝寛
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
擬１次元 Bi 原子鎖による異方的巨大 Rashba 効果	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪　嘉之
CDW 転移を示す遷移金属ダイカルコゲナイド（$NbSe_2$）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	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
二段に原子価転移する希土類化合物 EuPtP のフェルミ面形状の特定	大阪府立大学大学院工学研究科	安齋　太陽
Band Structure Modification of 2D TMDCs Using Molecular Dopant	Humboldt-Universität zu Berlin	KOCH, Nobert
Momentum and Doping Dependent Superconducting Gap Measurements on n-Type Cuprate Superconductors	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	国立天文台ひので科学プロジェクト	石川　遼子
ボロンドープダイヤモンドの複素屈折率測定	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
3d 遷移金属添加 AlN の発光／励起スペクトル測定によるバンド構造の解明	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田　早紀
複合ガラスシンチレーターの真空紫外での応用	大阪大学レーザー科学研究所	清水　俊彦
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
MFI ゼオライト上の Mo 複合炭化物活性種の L 殻 XANES による構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷　博文
軟X線吸収分光法による P3HT/PCBM の分子回転角までふくめた分子配向評価	千葉大学大学院工学研究院	奥平　幸司
湿式合成したリン酸カルシウム系バイオセラミクス中に含まれる微量元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本　知之

太陽軟X線撮像分光ロケット実験に用いるフライト品と将来の衛星計画に向けたCMOSセンサーの評価	国立天文台SOLAR-C準備室	成影　典之
リン酸三カルシウム（TCP）を用いた新規機能性水酸アパタイト材料の合成と評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平　　敦
複合型酸化ガリウム光触媒の構造解析	大阪市立大学複合先端研究機構	吉田　朋子
高速重イオン照射した$LiNbO_3$のXAFS構造解析	九州大学大学院工学研究院	吉岡　　聰
3d遷移金属添加AlN薄膜のバンド構造の解明と可視光光電変換材料としての最適化研究	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田　早紀
原子核乾板の最小電離粒子に対する応答評価	名古屋大学大学院理学研究科／未来材料・システム研究所	中村　光廣
微惑星における有機物進化に対する鉱物の役割の解明	横浜国立大学大学院工学研究院	癸生川陽子
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
拡散反射法による軟X線吸収スペクトル測定の試み	大阪府立大学大学院工学研究科	村田　秀信
Li内包C_{60}の電子状態解析	筑波大学数理物質系	山田　洋一

（後期）

オーダー・ディスオーダー型圧電結晶の赤外反射分光	山形大学理学部	北浦　　守
生態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
有限層数の有機半導体薄膜における分裂した電子準位の波数分解測定	千葉大学大学院工学研究院	吉田　弘幸
角度分解紫外光電子分光法による金属酸化物上の有機分子薄膜の電子構造と分子配向評価	千葉大学大学院工学研究院	奥平　幸司
結晶性有機半導体材料の価電子バンド構造に対する水蒸気曝露の効果	東京理科大学理工学部	中山　泰生
層状複合イオン結晶の低次元性による自己束縛励起子の形成とダウンコンバージョン蛍光	秋田大学大学院理工学研究科	小玉　展宏
シンチレーション光の特性改善に関する研究	山形大学理学部	大西　彰正
パイロクロア型新規シンチレータ材料のバンド構造の解明	東北大学未来科学技術共同研究センター	黒澤　俊介
深紫外発光アルミン酸亜鉛蛍光体の配向性成長薄膜形成過程の解明	静岡大学学術院工学領域	小南　裕子
NaCl:I- 単結晶中における光励起によるAg^+からAg^-イオンへの変換過程の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相　武利
Electronic Band and Defect Structure of Spinel Nitrides of the Group 14 Elements and Their Solid Solutions	C.N.R.S, France	KANAEV, Andrei
$Y_3Fe_5O_{12}$ガーネットの電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本　知之
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
BL4B光学系の調整および整備	分子科学研究所	岩山　洋士
アモルファス半導体薄膜の光照射による内殻吸収の経時変化観察	岐阜大学工学部	林　　浩司
窒素及びフッ素ドープされたTiO_2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
軟X線吸収分光を用いた高分子系接着材料表面の化学状態と光損傷閾値の評価	理化学研究所放射光科学総合研究センター	山根　宏之
アモルファス半導体光誘起構造変化に対する熱処理効果に関する研究	岐阜大学工学部	林　　浩司
オーダー・ディスオーダー型圧電結晶の赤外反射分光	山形大学理学部	北浦　　守
ゲルマニウム結晶中の格子欠陥に起因する電子準位の分光学的研究	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
異方的金属絶縁体物質の偏光テラヘルツ顕微分光	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
高強度THz波による物質制御と赤外分光による物性評価	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
ボロンドープダイヤモンドの複素屈折率測定	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
3d遷移金属添加AlNの発光／励起スペクトル測定によるバンド構造の解明	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田　早紀
複合ガラスシンチレーターの真空紫外での応用	大阪大学レーザー科学研究所	清水　俊彦
MFIゼオライト上のMo複合炭化物活性種のL殻XANESによる構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷　博文
軟X線吸収分光法によるP3HT/PCBMの分子回転角までふくめた分子配向評価	千葉大学大学院工学研究院	奥平　幸司
湿式合成したリン酸カルシウム系バイオセラミクス中に含まれる微量元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本　知之
太陽軟X線撮像分光ロケット実験に用いるフライト品と将来の衛星計画に向けたCMOSセンサーの評価	国立天文台SOLAR-C準備室	成影　典之
複合型酸化ガリウム光触媒の構造解析	大阪市立大学複合先端研究機構	吉田　朋子
LCSガンマ線によるQED非線形効果	量子科学技術研究開発機構高崎量子応用研究所	早川　岳人
高分子膜中のアゾベンゼン含有錯体への光渦UV照射による波長選択的分子配向誘導	東京理科大学理学部	秋津　貴城
円偏光アンジュレータ光照射による生体有機分子薄膜への光学活性発現	横浜国立大学大学院工学研究院	高橋　淳一

UVSOR-BL1U からの LCS ガンマ線を用いた NRF 同位体 3D イメージング法に関する研究	京都大学エネルギー理工学研究所	大垣　英明
ゲルマニウム結晶中の格子欠陥に起因する電子準位の分光学的研究	東北学院大学工学部	原　明人
シンチレータの発光過程の解明を目指した軟Ｘ線励起時の発光の観察	東北大学未来科学技術共同研究センター	黒澤　俊介
軟 XAFS 分析による（水）酸化マグネシウムを用いた各種有害元素除去機構解明	早稲田大学創造理工学部	加藤　達也
チタネートナノチューブ中にイオン交換した多価カチオンの局所構造分析	大阪府立大学大学院工学研究科	村田　秀信
高速重イオン照射した $Y_3Al_5O_{12}$ 中 Al 及び Y の局所構造	九州大学大学院工学研究院	吉岡　聰
単結晶性有機薄膜への金属ドーピング	筑波大学数理物質系	山田　洋一
脂質二重膜を構成するリン脂質分子の電子状態計測	豊橋技術科学大学環境・生命工学系	手老　龍吾
偏光方向依存性による液晶相における分子配向度の計測	分子科学研究所	岩山　洋士
軟Ｘ線吸収分光法による電極反応の機構解明	分子科学研究所	長坂　将成
軟Ｘ線吸収分光法による液相の光化学反応の機構解明	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
パラジウム NNC- ピンサー型錯体を触媒として用いたクロスカップリング反応の触媒活性種解析	分子科学研究所	浜坂　剛
軟Ｘ線溶液 XAFS による鉄触媒クロスカップリング反応中間体の電子構造解析	京都大学化学研究所	高谷　光
水・アセトン２成分溶液系における水の電子構造変化と部分モル体積	広島大学大学院理学研究科	岡田　和正
Electronic Structure of Carbon Dots Aqueous Dispersion Probed by In-Situ X-Ray Absorption Spectroscopy	Helmholtz-Zentrum Berlin	PETIT, Tristan
隕石と有機物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
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構造および欠陥形成に伴う変化の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野　正人
酸化物・フッ化物ホストにおける Eu^{3+} 電荷移動遷移エネルギーの決定	京都大学大学院人間・環境学研究科	上田　純平
アポトーシス過程におけるクロマチン凝集のリン酸化過程の可視化	東北大学多元物質科学研究所	江島　丈雄
土壌微小領域の炭素・窒素の不均一性とその形態	筑波大学生命環境系	浅野　眞希
隕石から探る木星大移動説	横浜国立大学大学院工学研究院	癸生川陽子
生体分子分布識別のための精密 NEXAFS 測定とその培養細胞内分布への適用	東海大学工学部	伊藤　敦
走査型透過軟Ｘ線顕微鏡を用いた最古堆積岩中の有機物分析	海洋研究開発機構	伊規須素子
STXM を用いた NEXAFS-CT による細胞のアポトーシスの３次元分析	分子科学研究所	大東　琢治
走査型透過Ｘ線顕微鏡を用いたタイヤゴムの化学状態解析	分子科学研究所	大東　琢治
ビームラインおよび STXM の整備	分子科学研究所	大東　琢治
硫黄架橋ゴムの二相不均一網目構造の特性化 (2)	京都工芸繊維大学分子化学系	池田　裕子
軟Ｘ線イメージングによるシアノバクテリア細胞中のたんぱく質の可視化	大阪大学大学院工学研究科	寺本　高啓
火星起源隕石に取り込まれた火星土壌の化学種分析	広島大学大学院理学研究科	宮原　正明
地球外物質に含まれる有機物の分子構造の不均質性に基づいた地球外有機物の進化過程解明と，「はやぶさ２」試料の機関横断型連携分析システムの構築	高輝度光科学研究センター	上椙　真之
STXM による微生物－鉱物界面のその場観察に基づく微生物による海洋地殻風化メカニズムの解明	愛媛大学大学院農学研究科	光延　聖
硫黄の化学種別サブミクロンイメージング法による地球外有機物の形成環境の解明	海洋研究開発機構高知コア研究所	伊藤　元雄
天然ゴムエマルション粒子の加硫過程における硫黄局在化と脂質膜融合プロセスの可視化	大分大学理工学部	檜垣　勇次
Redox-Sensitive Nanocarriers for Controlled Dermal Drug Delivery	Freie University Berlin	RUEHL, Eckart
Chemical and Structural Characterization of Ambient Rural Background Aerosol and Complex Laboratory Generated Secondary Organic Aerosol Samples	University of Oulu	PRISLE, Nonne
Chemical and Spatial Identification for Gas-Dependent Nanobubbles Sandwiched in Graphene Liquid Cells	Tamkang University	PONG, Way-faung
High-Pressure Soft X-Ray Microscopy of CO_2 Fluids	Lawrence Berkeley National Laboratory	GUO, Jinghua
相界面析出により生成した窒化物の局所構造評価	東北大学金属材料研究所	佐藤　充孝
低エネルギー領域の軟Ｘ線吸収分光法のための検出器の開発	分子科学研究所	長坂　将成
Ti 添加 AlN のバンドギャップ狭小機構の解明と光電変換材料としての組成最適化研究	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田　早紀
高分解能 ARPES による新奇ワイル半金属の開拓	東北大学大学院理学研究科	佐藤　宇史
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
Ag(100) 上に作成した V_2O_3(0001) 薄膜の MIT の探査	立教大学理学部	枝元　一之
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

ファンデルワールス半導体 1T-TiS_2 の表面電子状態の研究	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤　孝寛
フォトカソード材料の NEA 表面の電子構造と活性化の相関	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
角度分解光電子分光による $NdFeAs_{1-x}P_xO_{0.9}F_{0.1}$ 単結晶の超伝導ギャップの P 濃度依存性	大阪大学大学院理学研究科	宮坂　茂樹
Study on Interaction between Charge Density Wave Collective Modes and Electrons	Korea Advanced Institute of Science and Technology	KIM, Yeong Kwan
Investigating Electronic Structures of the Strained Transition Metal	Seoul National University	KIM, Changyoung
将来惑星探査に向けた水素吸収セルイメージャーの性能評価	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所	桑原　正輝
$X[Pt(dmit)_2]_2$ 塩の e-mv モードの観測と軌道準位の評価	愛媛大学大学院理工学研究科	山本　　貴
低エネルギー高分解能 ARPES による反強磁性トポロジカル物質の研究	東北大学大学院理学研究科	佐藤　宇史
チエノチオフェン構造を有する高移動度有機半導体分子単結晶の価電子バンド分散の実証	東京理科大学理工学部	中山　泰生
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２	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 VI	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 による一軸圧印可された鉄系超伝導体 $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ の超伝導ギャップ	分子科学研究所	出田真一郎
層状 MAX 相化合物 V_2AlC における表面バンド形成メカニズムの解明	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤　孝寛
異方的金属絶縁体物質の偏光角度分解光電子分光 II	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
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	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪　嘉之
$NbSe_2$ における電子格子相互作用素過程の研究（II）	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
Study on Tinteraction between Charge Density Wave Collective Modes and Electrons	Korea Advanced Institute of Science and Technology	KIM, Yeong Kwan
パイロクロア型ルテニウム酸化物の真空紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	金澤　直也
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	石川　遼子
フッ化カルシウムと金属接合面の真空紫外光を用いた特性評価	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野　晋吾
真空紫外領域分光による鉄系超伝導体の電子状態の研究	大阪大学大学院理学研究科	中島　正道
原子核乾板の最小電離粒子に対する応答評価	名古屋大学大学院理学研究科／未来材料・システム研究所	中村　光廣
Chemical and Structural Characterization of Ambient Rural Background Aerosol and Complex Laboratory Generated Secondary Organic Aerosol Samples	University of Oulu	PRISLE, Nonne
原生代後期エディアカラ紀のエディアカラ動物群の炭質物構造解析：最古節足動物の探索	東京大学大学院総合文化研究科	小宮　　剛
新規アクチュエーター開発を目指した一硫化サマリウム固溶系の反射分光測定による電子状態の研究	名古屋大学大学院工学研究科	横山　泰範
UVSOR Experiments for the Induction of Molecular Chirality	Sichuan university	YAO, Jiabin
STXM を用いたナノバブル周囲の水の電子状態観測	東京大学物性研究所	原田　慈久
ナノ集光Ｘ線ビームによる試料損傷メカニズムの解明	理化学研究所放射光科学研究センター	山根　宏之

(7)　施設利用

①　装置開発室

（前期）

神経細胞ネットワーク診断プラットフォームの開発	名古屋大学未来社会創造機構	宇理須恒雄

（後期）

神経細胞ネットワーク診断プラットフォームの開発	名古屋大学未来社会創造機構	宇理須恒雄
差動排気超音速ジェット装置の製作	京都大学大学院理学研究科	馬場　正昭

②　計算機利用

分子動力学シミュレーションによる多次元振動分光のスペクトル計算	京都大学大学院理学研究科	谷村　吉隆
生体分子の機能発現反応に関する理論的研究	千葉大学大学院薬学研究院	星野　忠次
触媒分子系および生体分子系の量子化学と反応動力学	北海道大学触媒化学研究所	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，溶媒和構造に関する理論的研究	京都大学福井謙一記念研究センター	榊　　茂好
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を用いた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	鈴木　聡
無秩序系および複雑分子系におけるテラヘルツスペクトル	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永　圭介
密度汎関数法計算の新たな展開とナノ界面成長機構の解明・予測	名古屋大学未来材料・システム研究所	押山　淳
ハロ酸脱ハロゲン化酵素とシステイン合成酵素の反応機構解析とそれに基づいた高機能酵素のデザイン	長浜バイオ大学	中村　卓
革新的量子科学と大規模シミュレーション科学の創造	量子化学研究協会研究所	中辻　博
色素増感剤を用いた諸課題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 族金属によるオレフィン重合触媒の設計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
芳香族溶媒和クラスターの光誘起溶媒再配向ダイナミクスに関わる溶媒和構造探索および振動スペクトルの量子化学計算	東京工業大学科学技術創成研究院	宮崎　充彦
分子間相互作用理論とその分子クラスター研究への応用	分子科学研究所	岩田　末廣
第一原理反応ダイナミクスと先進的電子状態理論の多角的展開	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
脂質膜へのタンパク質埋め込みのための分子シミュレーション技術の開発	理化学研究所	齋藤　大明
セルロース材料および関連タンパク質の分子シミュレーション研究	宮崎大学工学教育研究部	湯井　敏文
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
OZ 理論から求まる異核 LJ 二原子分子の溶媒和自由エネルギー補正に関する研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮田　竜彦
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
非平面型パイ共役分子の構造と物性	大阪府立大学大学院理学系研究科	津留崎陽大
金属分子クラスターとアミノ酸の反応経路に関する量子化学的研究	電気通信大学大学院情報理工学研究科	山北　佳宏
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
ミオシン VI の歩行メカニズムの動的ランドスケープ計算による解明	名古屋大学大学院工学研究科	寺田　智樹
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
蛋白質による DNA 加水分解における溶媒の役割	九州工業大学大学院情報工学研究院	入佐　正幸
水，氷，クラスレートハイドレートの構造相転移の理論研究	岡山大学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	中嶋　隆人
生体分子のマルチコピーマルチスケールシミュレーション	横浜市立大学大学院生命医科学研究科	森次　圭
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
生体内水分子の効果を考慮したモデルを適用した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	能登　香
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
ナノ・バイオ分子の光化学反応における非断熱励起状態ダイナミクス	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
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
分子動力学計算によるポリマーの構造変化ダイナミクスの研究	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３	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	早稲田大学理工学術院	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開発と応用	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解離分光のための赤外スペクトルの予測	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	東京工業大学生命理工学院	北尾　彰朗
第一原理計算手法にもとづく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	大下慶次郎
蛋白質の機能発現と構造に関する理論的研究	京都府立大学大学院生命環境科学研究科	リントゥルオト正美
動的分子間相互作用に注目した液晶の機能開発	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
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
有機分子の化学反応における分子間相互作用の役割	弘前大学大学院理工学研究科	山崎　祥平
不凍糖タンパク質と氷の相互作用の分子機構	信州大学国際ファイバー工学研究所	望月　建爾
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
分子動力学計算・量子化学計算によるタンパク質複合体の理論解析	筑波大学大学院数理物質科学研究科	重田　育照
ソフトマテリアルの物質輸送と構造揺らぎの相関	名古屋大学大学院工学研究科	吉井　範行
水／高分子界面での水構造と振動スペクトルの分子動力学シミュレーション研究	富山大学理工学研究部	石山　達也
水素結合の方向性が蛋白質２次構造形成に与える影響	慶應義塾大学理工学部	苣口　友隆
有機デバイスの構造解析と機能探索を目指した理論研究	日本女子大学理学部	村岡　梓
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 II	千葉大学大学院理学研究院	中山　隆史
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
縮環 π 拡張反応の機構とナノグラフェン・グラフェンナノリボンの構造・光物性解明研究	名古屋大学大学院理学研究科	伊藤　英人
メゾスケールサイズを有する有機金属分子素子の開発	東京工業大学化学生命科学研究所	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
溶媒和モデルを取り入れた水素結合エネルギーの定量的評価に関する理論的研究	筑波大学大学院数理物質系	松井　亨
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
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
分子動力学計算を用いた核融合炉ブランケット用四元系溶融塩の熱物性評価	東北大学大学院工学研究科	宍戸　博紀
金属イオン包接に誘起されたクラウンエーテルの分子内エキシマー形成の研究	広島大学大学院理学研究科	井口　佳哉
凝縮相中の化学反応および物性に関する理論的研究	琉球大学理学部	東　雅大
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
光線力学的療法への応用を志向した赤色光駆動型ホルムアルデヒド生成反応の開発	東京大学生産技術研究所	村田　慧
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
Solving Materials Dilemma of Membrane Electrode Assembly for Optimizing Proton Exchange Membrane Fuel Cells	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
量子化学計算を利用した有機化学反応機構解析	乙卯研究所	黒内　寛明
分子結合変化を伴う材料系の動的反応力場 MD 計算	京都工芸繊維大学材料化学系	藤原　進
原子・分子系における相対論的多体理論の応用	東京工業大学大学院理工学研究科	Bhanu Pratap Das
量子化学計算を用いた化学反応経路の探索と発光性材料の物性解析	北海道大学大学院工学研究院	伊藤　肇
反応経路自動探索法の開発と応用	北海道大学大学院理学研究院	前田　理
MD シミュレーションを用いた多剤排出トランスポーター複合体の基質排出メカニズムの解明	東京大学先端科学技術研究センター	篠田　恵子
分子シミュレーションを用いて，次世代の抗がん剤の“種”を探索する	産業技術総合研究所	伊藤　祐子
分子シミュレーションと物理化学測定による抗体－抗原複合体の相互作用解析と合理的な改変指針の提案	東京大学大学院工学系研究科	黒田　大祐
遷移金属錯体による小分子活性化の触媒反応メカニズムの解明	九州大学カーボンニュートラル・エネルギー 国際研究所	伊勢川美穂
Clarify Oxygen Reduction Mechanism on Lanthanides in Complex Oxides for Application in Solid Oxide Fuel Cells	九州大学カーボンニュートラル・エネルギー 国際研究所	Wu Ji

曲げ変形に関する液晶安定性の分子動力学による研究	東京農工大学大学院工学研究院	坂本　道昭
亜硝酸還元酵素の反応機構に影響を及ぼす弱い相互作用の構造と機能	茨城大学大学院理工学研究科	Taborosi Attila
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
分子内および分子間電子移動の分子軌道法による研究	神奈川大学理学部	田仲　二朗
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
クロコン酸結晶における赤外スペクトルの計算	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
高反応性典型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
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
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
新規振動回転イメージング分光法による分子クラスターの構造とダイナミクスの研究	東京工業大学理学院	水瀬　賢太
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
超臨界条件下の疎水性有機分子の水和と反応	徳島大学大学院社会産業理工学研究部	吉田　　健
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
含アゾキラルサレン金属錯体の分光と配向の DFT による解釈	東京理科大学理学部	秋津　貴城
非平面構造に組み込まれた酸化還元系の電子状態の探求	北里大学理学部	長谷川真士
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
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
クラウディング分子ネットワークによる非標準構造核酸の安定性への影響	甲南大学先端生命工学研究所	杉本　直己
星型ポリマーおよびブロックコポリマーのガラス転移温度の MD シミュレーション	北海道大学大学院工学研究院	佐藤信一郎
化学反応の ab initio 計算による研究	愛媛大学大学院理工学研究科	長岡　伸一
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への分子の吸着と反応	豊田工業大学クラスター研究室	市橋　正彦
分子シミュレーションによる分子集合体の研究	名古屋文理大学	本多　一彦
液体・生体分子および関連分子系の構造・ダイナミクス・分子間相互作用と振動スペクトル	静岡大学工学部	鳥居　　肇
アルブミンを用いる化学反応	明星大学理工学部	松本　一嗣
ホウ素錯体を電子アクセプタとする高性能 n 型半導体の開発	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野　克彦
第一原理及び古典分子動力学計算による２次元ナノ物質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
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
拡張アンサンブル法による生体分子のシミュレーション	名古屋大学大学院理学研究科	永井　哲郎
多座リン配位子とその金属錯体の新規機能開発	広島大学大学院理学研究科	水田　　勉
XNN ピンサー配位子（X = Si, P）を有する遷移金属錯体に関する理論的研究	北里大学理学部	神谷　昌宏
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	惠良田知樹
多原子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	沖野　友哉
抗金属錯体抗体の分子認識における構造基盤	医薬基盤・健康・栄養研究所	秋葉　宏樹
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
遅延蛍光材料の励起状態の研究	日本工業大学工学部	大澤　正久
有機半導体蒸着膜における自発的配向分極形成機構の解明	明治大学理工学部	野口　　裕
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
高配位有機典型元素化合物の構造と性質の解明	学習院大学理学部	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
四重鎖 DNA とヘムの相互作用の解析	筑波大学数理物質系	山本　泰彦
分子結晶の高温高圧処理による新規固体合成・物性の計算科学による研究	北海道大学大学院工学研究院	島田　敏宏
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
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	分子科学研究所	奥村　久士
ピンサー型錯体における配位子交換反応工程に関する研究	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
電波観測に向けた核酸塩基生成経路の理論的解明	アストロバイオロジーセンター	小松　　勇
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
プロピレングリコール中での高効率檜山カップリング反応の反応機構解析	総合研究大学院大学物理科学研究科	市位　　駿
カリウムチャネルにおける選択性発現機構の分子論的解明	福井大学医学部	老木　成稔
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	中央大学理工学部	村上　慎吾
４次元 MRI による脳の機能及び構造解析	生理学研究所	福永　雅喜
ナノ構造体の光・電子物性の第一原理計算	分子科学研究所	飯田　健二
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
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
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
次世代熱電変換材料のための熱伝導率制御に関する研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	宮崎　秀俊
ペプチド金属錯体結晶の構造変換特性・物性の計算科学的評価	お茶の水女子大学基幹研究院	三宅　亮介
フッ素化芳香族化合物の分子設計	分子科学研究所	鈴木　敏泰
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
未踏重合化学・物質科学の理論的探索	相模中央化学研究所	巳上幸一郎
低分子非晶質有機半導体薄膜の分子間相互作用と凝集状態構造の計算	山形大学大学院有機材料システム研究科	横山　大輔
QTAIM 二元関数解析法による結晶および不安定物質中における弱い相互作用の解析	和歌山大学システム工学部	林　　聡子
ペプチドナノリングによる重金属イオンの捕捉機構に関する理論的研究	高千穂大学人間科学部	竹内　　淨
原子核の量子効果を考慮した多成分系理論による化学反応解析法の開発と応用計算	岐阜大学工学部	宇田川太郎
光・磁気・電気的特性を複合的に示す新規分子性物質の開発	大阪府立大学大学院理学系研究科	酒巻　大輔
貨幣金属クラスター－色素複合系の幾何構造と電子状態の理論的解明	立教大学理学部	三井　正明
DNA と金属錯体の相互作用	中央大学理工学部	千喜良　誠
ヘキサアザトリフェニレン誘導体の対称性が物性に与える影響	関西学院大学理工学部	田中　大輔
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
アミロイドβペプチドの分子動力学シミュレーション	香川大学農学部	柳田　　亮
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
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
生体分子および溶媒の構造機能相関の解明	立命館大学生命科学部	髙橋　卓也
金属錯体の電子構造ならびに反応性の解明	分子科学研究所	正岡　重行
実験と計算による有機反応機構解析	東京大学大学院薬学系研究科	滝田　　良
青色光受容体タンパク質の理論的研究	理化学研究所	佐藤　竜馬
有機ケイ素化合物の構造と性質	群馬大学大学院理工学府	久新荘一郎
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
修飾核酸の分子動力学計算のための基盤構築	量子科学技術研究開発機構	桜庭　　俊
多座配位子で構造規制された遷移金属クラスターの構造，電子状態および反応性	奈良女子大学研究院自然科学系	浦　　康之
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
Si–H 基を含む二水素結合の微視的性質の解明	北里大学理学部	石川　春樹
d–π 拡張系として機能するルテニウム－トロポロン錯体	北里大学理学部	吉田　　純
タンパク質のループの繋がり方とフォールディングの熱力学	三重大学総合情報処理センター	白井　伸宙
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
新規π共役系の物性化学研究	京都大学大学院工学研究科	関　　修平
新規π共役化合物の構造－物性相関の解明に関する理論研究	大阪大学大学院理学研究科	山下　健一
赤外吸収分光法と理論計算によるポリプロリンの主鎖構造解析	東北大学大学院薬学研究科	宮田　大輔
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
複合ナノクラスターの構造・電子状態に関する研究	慶應義塾大学理工学部	角山　寛規
分子シミュレーションと核磁気共鳴法を組み合わせた抗体の動的構造解析	分子科学研究所	谷中　冴子
シミュレーションを用いたガラス・コロイドゲルの研究	東京大学大学院総合文化研究科	池田　昌司
新規多孔性分子結晶中における分子の動的挙動の解明	筑波大学数理物質系	山岸　　洋
牛白血病ウイルス感染牛および白血病発症牛に特異的に発現している遺伝子群の特定	東京農業大学農学部	小林　朋子
分子モーター設計の計算科学的検討	分子科学研究所	飯野　亮太

高周期 14 族元素を含む化合物の構造物性理論計算	首都大学東京大学院都市環境科学研究科	瀬高　渉
π共役拡張型有機材料の探索に関する理論計算	東京都立産業技術研究センター	小汲　佳祐
量子化学計算による金属蛋白質活性中心の分子構造解析	兵庫県立大学大学院生命理学研究科	太田　雄大
CNT 合成に用いられる酸化遷移金属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
Multi-Scale Modeling of Interstellar Radical Species on Water Ice	北海道大学低温科学研究所	W. M. C. Sameera
イオン液体のダイナミクスと輸送物性の研究	名古屋大学大学院工学研究科	山口　毅
発光性金属クラスターの電子状態の解明	立教大学理学部	新堀　佳紀
クラスレートハイドレートのケージ構造における各種ゲストとホストとの相互作用の評価	産業技術総合研究所	神　裕介
分子の非断熱電子動力学とその応用	京都大学福井謙一記念研究センター	山本憲太郎
時間依存断熱法を用いた強レーザー場中の H_2O の第一原理分子動力学計算	東京大学大学院理学系研究科	高　翔
鎖状分子からなる溶媒中の球状分子および球状分子からなる溶媒中の鎖状分子の拡散挙動	新潟大学理学部	大鳥　範和
結晶および溶融 CaO-SiO_2 における $(SiO_4)^{2-}$ 錯体の局所構造と安定性	大阪大学大学院工学研究科	鈴木　賢紀
高濃度電解液におけるイオン輸送特性の理論的解析	東京大学大学院工学系研究科	渡部絵里子
カチオン性ゲルミリン錯体と不飽和有機化合物との反応の機構研究	東北大学大学院理学研究科	渡邉　孝仁
計算化学的手法を用いた有機合成反応の機構解明	慶應義塾大学薬学部	東林　修平
新しい不斉触媒創成研究	名古屋工業大学工学部	中村　修一
機械学習を用いた脳機能画像解析	生理学研究所	近添　淳一
分子分光と CFD を融合した革新解析技術開発	徳島大学大学院社会産業理工学研究部	出口　祥啓
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
Localization of Electrons in TiO_2 Electrodes	東京工業大学理学院	Juhasz Gergely
チモールブルーの構造解析	弘前大学教育学部	島田　透
量子・古典的手法を駆使した大規模複雑系への挑戦	東京大学大学院総合文化研究科	横川　大輔
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
Flood-Filling Networks（FFNs）を使った電顕データセットの自動全構造３次元再構築	生理学研究所	窪田　芳之
π電子系化合物の立体配座および分子内相互作用におけるエネルギーの解析	杏林大学保健学部	田中　薫
エポキシポリマー中の非共有相互作用の計算的研究	産業技術総合研究所	Pradeep Varadwaj
超多色バイオイメージングのためのラマンタグ設計	東京大学大学院理学系研究科	平松光太郎
分子動力学計算による高接着蛋白質の水中接着メカニズムの解明	名古屋大学大学院工学研究科	鈴木　淳巨
配位子構造の最適化による高活性遷移金属触媒の合成	相模中央化学研究所	長岡　正宏

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 ～ '11		'12		'13		'14		'15		'16		'17		'18		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	109	920	1	21	2	27	1	11	2	32	2	30	1	8	2	20	人数：登録人数
協力研究	4,174	6,466	123	329	64	183	64	206	62	205	82	246	73	229	45	151	〃
所長招へい	4,528	4,528	93	93	156	156	103	103	128	128	80	80	100	100	83	83	人数：旅費支給者
研究会	339	5,786	10	207	10	254	6	162	11	195	7	151	10	201	10	136	〃
若手研究活動支援（若手研究会等）	4	47	1	19	1	21	2	38	1	16	1	14	2	41	1	21	〃
岡崎コンファレンス	−	−	1	29	1	18	1	34	1	21	3	115	0	0	1	34	〃
施設利用 I	2,151	4,961	60	254	41	105	44	191	20	52	2	6	2	6	3	9	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)	5,267	17,799	190	813	204	786	199	751	235	844	221	813	236	914	247	969	〃
協力研究 (ナノプラット)	525	1,158	15	51	52	123	63	147	64	174	75	144	69	154	45	108	人数：登録人数
施設利用 (ナノプラット)	296	746	52	150	132	378	174	453	197	618	196	493	185	554	255	402	件数：許可件数 人数：許可人数
合計	17,588	41,608	546	1,966	663	2,051	657	2,096	721	2,285	669	2,092	678	2,217	692	1,933	

＊施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用　　（'18 年度の数値は，2019.1.15 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。
＊合計には招へい協力研究を含む。

分子科学研究所UVSOR共同利用研究実施一覧

年度 / 項目	'85 ～ '11		'12		'13		'14		'15		'16		'17		'18		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	
施設長招へい	19	19	6	6	1	1	1	1	1	1	3	3	4	4	1	1	人数：旅費支給者
研究会	46	826	4	63	1	37	1	37	1	30	1	41	1	43	1	30	〃
施設利用	3,257	15,818	136	706	142	732	125	649	119	732	142	762	160	867	211	1,047	件数：許可件数 人数：許可人数
合計	3,744	18,267	146	775	144	770	127	687	121	763	146	806	165	914	213	1,078	

＊合計には課題研究，協力研究，招へい協力研究を含む。　　（'18 年度の数値は，2018.12.31 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
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
17	2	1	8	9	109	129
合計	24	31	245	228	1,242	1,770

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
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
17	8	1	14	13	7	20	2	64	129
合計	156	41	148	174	260	333	11	647	1,770

表３　海外からの研究者（2018 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．日本学術振興会招へい外国人研究者等			
FRITZ, Torsten	ドイツ	Friedrich Schiller University Jena 教授	'18. 9. 2–'18. 9.29
SCHAAL, Maximilian	ドイツ	Friedrich Schiller University Jena 大学院生	'18. 6.12–'18. 8.22
METZGER, Christian	ドイツ	University of Würzburg 大学院生	'18. 6.12–'18. 8.22
３．国際共同研究			
MARGUET, Bastien	フランス	高等師範学校　パリサクレー校大学院生	'17. 9.27–'18. 8.15
VU, Anna	ドイツ	ベルリン自由大学大学院生	'17.11. 3–'18. 9.30
JUNKAEW, Anchalee	タイ	National Nanotechnology Center 博士研究員	'18. 4. 1–'18. 6.30
NAMUANGRUK, Supawadee	タイ	National Nanotechnology Center, Senior Researcher	'18. 4. 1–'18. 5. 2
PERROT, Armand	フランス	国立パリ高等化学学校学生	'18. 4. 2–'18. 8.30
PI, Jaseela	インド	Government Arts and Science College for Women 学生	'18. 4. 2–'18. 5. 2
CASSOURET, Florent	フランス	国立パリ高等化学学校大学院生	'18. 4. 2–'18. 8.30
VIGNON, Paul	フランス	国立パリ高等化学学校大学院生	'18. 4. 3–'18. 8.30
DAUGAS, Louise	フランス	国立パリ高等化学学校大学院生	'18. 4. 4–'18. 8.30
TONIOLO, Paul	フランス	国立パリ高等化学学校大学院生	'18. 4. 4–'18. 8.30
DE MONTGOLFIER, Jean-Vincent	フランス	国立パリ高等化学学校大学院生	'18. 4. 4–'18. 8.30
NAM, Yeonsig	韓国	成均館大学大学院生	'18. 4. 9–'18. 7. 5
MANDAL, Niladri Shekhar	インド	Indian Institute of Science Educationand Research, Kolkata 学生	'18. 5. 6–'18. 7. 1
BOORLA, Veda Sheersh	インド	Indian Institute of Technology Kharagpur 学生	'18. 5. 7–'18. 7.15
DAS, Soumik	インド	Indian Institute of Science Educationand Research, Kolkata 学生	'18. 5.10–'18. 8.12
AMSALEM, Patrick	ドイツ	Humboldt Universittat zu Berlin 研究員	'18. 5.25–'18. 6. 1
PARK, Soohyung	ドイツ	Humboldt Universittat zu Berlin 研究員	'18. 5.25–'18. 6. 1
SCHULTZ, Thorsten	ドイツ	Humboldt Universittat zu Berlin 研究員	'18. 5.29–'18. 6. 1
ISMAIL, Mostafa	フィンランド	オウル大学研究員	'18. 6. 4–'18. 6.10
PATANEN, Minna	フィンランド	オウル大学研究員	'18. 6. 4–'18. 6.10 '18. 8.21–'18. 8.26
WIYADA, Saennawa	タイ	Suranaree University of Technology 学生	'18. 6.14–'19. 6.30
JUNG, Woobeen	韓国	Seoul National University 大学院生	'18. 6.25–'18. 7. 7
KIM, Younsik	韓国	Seoul National University 大学院生	'18. 6.25–'18. 7.14
FELDBACH, Eduard	エストニア	University of Tartu, Senior Reserch Fellow	'18. 6.30–'18. 7.16
MA, Jun	中国	中国科学技術大学大学院生	'18. 7. 8–'18. 7.14
CHO, Soohyun	韓国	Yonsei University 大学院生	'18. 7. 9–'18. 7.14
CHUANG, Cheng-Hao	台湾	Academia Sinica 助教	'18. 7. 9–'18. 7.14
HSU, Wei-Hao	台湾	Academia Sinica 研究員	'18. 7. 9–'18. 7.14
HWANG, Ing-Shouh	台湾	Academia Sinica 主任研究員	'18. 7.11–'18. 7.14
CEOLIN, Denis	フランス	Synchrotron SOLEIL 研究員	'18. 8. 6–'18. 8.11
KLAIPHET, Kanchanasuda	タイ	Suranaree University of Technology 大学院生	'18. 8. 6–'18. 8.11
SAISOPA, Thanit	タイ	Suranaree University of Technology 大学院生	'18. 8. 6–'18. 8.11
LAI, Yu Ling	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 研究員	'18. 8. 7–'18. 8.12
SHIU, Hung Wei	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 研究員	'18. 8. 7–'18. 8.12
YU, Li Chung	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 研究員	'18. 8. 7–'18. 8.12
FLESCH, Roman	ドイツ	ベルリン自由大学研究員	'18. 9. 9–'18. 9.14
RUEHL, Eckart	ドイツ	ベルリン自由大学教授	'18. 9. 9–'18. 9.14
SRISA, Jakkrit	タイ	チュラロンコン大学大学院生	'18. 9.17–'19. 1.31
AWAG, Tadsanee	タイ	カセサート大学大学院生	'18. 9.17–'19. 3.17
CHAIBUTH, Pawittra	タイ	チュラロンコン大学大学院生	'18. 9.18–'19. 3.17
RUNGNIM, Chompoonut	タイ	National Nanotechnology Center 研究員	'18. 9.18–'18.12.14
KONGSEMA, Mesayamas	タイ	カセサート大学講師	'18. 9.21–'19. 3.20
THAVORNSIN, Nopparat	タイ	チュラロンコン大学博士研究員	'18.10. 6–'18.11.20
REN, Jian	ドイツ	Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie 研究員	'18.10. 6–'18.10.14

KERDPOL, Khanittha	タイ	Chiang Mai University 大学院生	'18.10.22–'18.11.26
MOHAMAD ZAKARIA, Siti Mastura Binti	マレーシア	マラヤ大学大学院生	'18.11. 1–'19. 4.29
LEE, Kee Pui	マレーシア	マラヤ大学大学院生	'18.11. 1–'19. 4.29
LEELADEE, Pannee	タイ	チュラロンコン大学講師	'18.12. 5–'18.12.28
YAO, Jiabin	中国	四川大学大学院生	'18.12. 6–'18.12.14
STEFFEN, Duhm	中国	Soochow University 教授	'18.12. 9–'18.12.16
ZHAI, Tianshu	中国	Soochow University 大学院生	'18.12. 9–'18.12.16
YANG, Jiacheng	中国	Soochow University 大学院生	'18.12. 9–'18.12.16
4．所長招へい協力研究員			
MIKHAILOV, Alexander	ドイツ	Fritz Haber Institute of the Max Planck Society 教授	'18. 5.17–'18. 5.19
TAO, Franklin	アメリカ	University of Kansas 教授	'18. 7.17–'18. 7.17
GRYN'OVA, Ganna	スイス	Lab. for Computational Molecular Design 博士研究員	'18.10. 6–'18.10.10
ASPURU-GUZIK, Alan	カナダ	University of Toronto 教授	'18.11.28–'18.11.28
CRUDDEN, Cathleen	カナダ	Queen's University Department of Chemistry 教授	'19. 1.18–'19. 1.19
NAGAOKA, Yasutaka	アメリカ	Broun University Chemistry Department 博士研究員	'19. 1.22–'19. 1.27
5．招へい研究員			
TIRUMALASETTY, Mahesh	インド	IISER Kolkata 大学院生	'18. 4. 1–'18. 4. 8
SUBRAMANIAM, Jeevithra	マレーシア	マラヤ大学大学院生	'18. 4. 1–'18. 4.30
MAKMUANG, Sureerat	タイ	チュラロンコン大学大学院生	'18. 4. 1–'18. 4.30
KIM, Kyoung-Hoon	韓国	Korea University 大学院生	'18. 4. 2–'18. 4. 6
森本高裕	アメリカ	University of California 博士研究員	'18. 6.17–'18. 6.18
ABEDIN, Kazi	オマーン	Sultan Qaboos University 准教授	'18. 7.21–'18. 9. 1
DE LESELEUC, Sylvain	フランス	Institut d' optique Graduate School 大学院生	'18. 7.26–'18. 7.27
BHARTI, Vineet	インド	Indian Institute of Science 研究員	'18. 7.28–'18. 8. 6
LORENZ FONFRIA, Victor	スペイン	University of Valencia, Senior Researcher	'18. 7.30–'18. 8. 3
ZHAO, Xiang	中国（香港含む）	Xi'an Jiaotong University 教授	'18. 8. 1–'18. 9. 1
NAAMAN, Ron	イスラエル	Weizmann Institute of Science 教授	'18. 8. 2–'18. 8. 5
HAGAN, David	アメリカ	University of Central Florida 教授	'18. 8. 6–'18. 8. 7
本谷友作	オランダ	Vrije Universiteit Amsterdam 研究員	'18. 9. 5–'18. 9. 6
SIMON, Damien	フランス	国立パリ高等化学学校大学院生	'18.10. 1–'18.11.30
LEE, Sze Koon	マレーシア	マラヤ大学大学院生	'18.10. 1–'18.10.31
AVARVARI, Naricis	フランス	CNRS-University of Angers, Director of research	'18.10.28–'18.10.30
KHEK-CHIAN, Tham	シンガポール	Institute of Medical Biology 博士研究員	'18.11.18–'18.11.20
CHINSIRIKUL, Wannee	タイ	National Nanotechnology Center, Executive Director	'18.11.21–'18.11.23
RUKTANONCHAI, Uracha	タイ	National Nanotechnology Center, Deputy Executive Director	'18.11.21–'18.11.23
SUWAN, Benyapa	タイ	National Nanotechnology Center, Manager	'18.11.21–'18.11.23
TAPANEEYAKORN, Satita	タイ	National Nanotechnology Center, Researcher	'18.11.21–'18.11.23
SAPCHAROENKUN, Chaweewan	タイ	National Nanotechnology Center, Researcher	'18.11.21–'18.11.23
IEMPRIDEE, Tawin	タイ	National Nanotechnology Center, Researcher	'18.11.21–'18.11.23
SENNAROGLU, Alphan	トルコ	Koc University 教授	'18.11.25–'18.12. 1
小出明広	フランス	Universite de Rennes 博士研究員	'18.12.03–'18.12.03
AHN, Hyo Yong	韓国	Seoul National University 大学院生	'19. 1.13–'19. 1.31

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 原子與分子科学研究所	台湾	分子科学研究所と中央研究院原子與分子科学研究所との間の分子科学における協力に関する覚書	共同研究（物質関連分子科学，原子，分子との光科学，理論と計算の分子科学）	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	2018.10.22	2022.10.21	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
成均館大学	韓国	自然科学研究機構分子科学研究所と成均館大学化学科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	2018. 4. 1	2022. 3.31	化学科長	所長
オウル大学	フィンランド	自然科学研究機構分子科学研究所とオウル大学との学術連携に関する覚書	放射光施設における分子科学分野の学術推進と共同研究の実施	2018. 5.14	2021. 5.13	学長	所長
国立交通大学	台湾	自然科学研究機構分子科学研究所と国立交通大学理学部との学術連携に関する覚書	学術交流及び共同研究等の実施	2018. 6. 1	2023. 5.31	理学部長	所長
ペーター・グリュンベルグ研究所	ドイツ	ユーリヒ総合研究機構ペーター・グリュンベルグ研究所と自然科学研究機構分子科学研究所との間の分子・材料科学における共同研究プロジェクトに関する覚書	放射光施設における分子科学分野の学術推進と共同研究の実施	2018.10. 1	2023. 9.30	所長	所長

（2018.12.31 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 30 年度は下記の岡崎コンファレンスを開催した。

会 議 名：第 79 回岡崎コンファレンス
“Synthetic, Biological, and Hybrid Molecular Engines”
期　　間：2018 年８月 31 日（金）～９月２日（日）
場　　所：岡崎コンファレンスセンター
組織委員：金原　数（東京工業大学），飯野亮太（分子科学研究所）
内　　容：

外部エネルギーを受け取ることで機械的な構造変化を起こし，これを利用して別の形のエネルギーへと変換する分子機械を「発動分子（Molecular Engines）」と名付け，発動分子を構築するための基礎学理を確立することを目標としている新学術研究領域「発動分子科学」が 2018 年度に採択された。本コンファレンスでは，これまで異分野として

発動分子の研究に従事してきた合成化学，分子生物学，生物物理学，ソフトマター物理学，計測科学等の国内外のエキスパートが一堂に会し，「人工分子と生体分子に共通する作動原理は何か」「人工分子と生体分子のサイズの違いはその特性にどのような制限を与えるか」「両者の利点を生かした人工･生体ハイブリッド分子をいかに構築するか」等，熱のこもった議論が展開された。

基調講演者として海外から７名，国内から２名，また招待講演者として国内から 22 名が参加し口頭発表を行った。さらにポスター発表は 51 件，聴講者も含む参加者は総勢で 107 名（うち所内 16 名）と，規模の大きなコンファレンスとなった。

以下に招待講演者を挙げる。

Keynote Speakers（海外）

Zev BRYANT (Stanford University)

Oscar CES (Imperial College London)

Jong Hyun CHOI (Purdue University)

Yifei ZHANG (Columbia University)

Ivan HUC (Ludwig-Maximilians-University)

Gwénaël RAPENNE (Nara Institute of Science and Technology/Universite Paul Sabatier, Toulouse)

Possu HUANG (Stanford University)

Keynote Speakers（国内）

Akira HARADA (Osaka University)

Toshikazu TAKATA (Tokyo Institute of Technology)

Invited Speakers

Jun ANDO (Institute for Molecular Science)

Holger FLECHSIG (Kanazawa University)

Ken’ya FURUTA (National Institute of Information and Communications Technology)

Mitsunori IKEGUCHI (Yokohama City University)

Keiichi INOUE (University of Tokyo)

Yoshiyuki KAGEYAMA (Hokkaido University)

Akira KAKUGO (Hokkaido University)

Kazushi KINBARA (Tokyo Institute of Technology)

Takahiro KOSUGI (Institute for Molecular Science)

Tomomi KOSHIYAMA (Ritsumeikan University)

Yusuke MAEDA (Kyushu University)

Takeshi MURATA (Chiba Univeristy)

Akihiko NAKAMURA (Institute for Molecular Science)

Waka NAKANISHI (National Institute for Materials Science)

Atsushi SHISHIDO (Tokyo Institute of Technology)

Kazunori SUGIYASU (National Institute for Materials Science)

Tsuyoshi TERAKAWA (Kyoto University)

Takayuki UCHIHASHI (Nagoya University)

Takafumi UENO (Tokyo Institute of Technology)

Rikiya WATANABE (University of Tokyo)

Shin-ichiro M. NOMURA (Tohoku University)

以下にプログラムを示す。

August 31st, 2018 (Friday)

8:30	Registration desk open	
9:20	Opening remark	**Maki KAWAI** (Director General, Institute for Molecular Science)
9:30	Introductory talk	**Ryota IINO** (Institute for Molecular Science) Molecular engines: An introduction
9:40	**Keynote talk 1**	**Gwénaël RAPENNE** (Nara Institute of Science and Technology/Universite Paul Sabatier, Toulouse) Technomimetic nanomachines : Molecular wheels, vehicles, rotors and motors
10:20	Invited talk 1	**Waka NAKANISHI** (National Institute for Materials Science) Control of flexible molecular machines at interfaces
10:40	Invited talk 2	**Yoshiyuki KAGEYAMA** (Hokkaido University) Light-powered self-sustained mechanical motion of azobenzene crystal as the resultant of a couple of photoreaction and phase transition
11:00	Invited talk 3	**Kazunori SUGIYASU** (National Institute for Materials Science) Molecular self-assembly under kinetic control
11:20	**Keynote talk 2**	**Akira HARADA** (Osaka University) Cyclodexrin-based supramolecular machines and their integration to macro-scale devices
12:00	Lunch and Poster Session (Odd number)	
14:00	**Keynote talk 3**	**Yifei ZHANG** (Columbia University) Engineering with biomolecular motors and enzyme cascades
14:40	Invited talk 4	**Akira KAKUGO** (Hokkaido University) Molecular swarm robot driven by biomolecular motors
15:00	Invited talk 5	**Takayuki UCHIHASHI** (Nagoya University) High-speed atomic force microscopy for direct visualization of biological macromolecules at work
15:20	Invited talk 6	**Holger FLECHSIG** (Kanazawa University) Towards synthetic molecular machines—computational model studies of mechanical networks
16:20	**Keynote talk 4**	**Oscar CES** (Imperial College London) New approaches to artificial cell science
17:00	Invited talk 7	**Keiichi INOUE** (University of Tokyo) How the light-driven ion pump rhodopsins decide what ion species they transport?
17:20	Invited talk 8	**Takeshi MURATA** (Chiba University) Further thermostabilization of microbial rhodopsins
17:40	Invited talk 9	**Mitsunori IKEGUCHI** (Yokohama City University) Molecular dynamics simulations of multidrug transporter acrB
18:00	Free discussion	
18:30	Speakers dinner @ Uokatsu	

September 1st, 2018 (Saturday)

9:00	Registration desk open	
9:20	**Keynote talk 5**	**Possu HUANG** (Stanford University) Generative modeling for protein structures
10:00	Invited talk 10	**Jun ANDO** (Institute for Molecular Science) High-speed, high-precision single-molecule imaging of dynein with plasmonic nanoprobes
10:20	Invited talk 11	**Ken'ya FURUTA** (National Institute of Information and Communications Technology) Re-design of biomolecular motors

11:00	Invited talk 13	**Takahiro KOSUGI** (Institute for Molecular Science) Rational design of ATP binding site to understand rotary molecular motor
11:20	**Keynote talk 6**	**Zev BRYANT** (Stanford University) Optical control of fast and processive engineered myosins in vitro and in living cells
12:00	Lunch and Poster Session (Even number)	
14:00	**Keynote talk 7**	**Ivan HUC** (Ludwig-Maximilians-Universität) Controlling the dynamics of synthetic folded nanoarchitectures
14:40	Invited talk 14	**Tomomi KOSHIYAMA** (Ritsumeikan University) Control of chemical reactions in liposome environment
15:00	Invited talk 15	**Kazushi KINBARA** (Tokyo Institute of Technology) Synthetic mimics of transmembrane proteins
15:20	Invited talk 16	**Yusuke MAEDA** (Kyushu University) Geometric principle in active matters: From bacteria to active cytoskeletons and beyond
16:20	**Keynote talk 8**	**Jong Hyun CHOI** (Purdue University) Synthetic molecular motors from DNA
17:00	Invited talk 17	**Akihiko NAKAMURA** (Institute for Molecular Science) Direct observation of 1 nm steps of a “burnt-bridge” Brownian ratchet *Sm*ChiA on crystalline chitin with gold nanoprobe
17:20	Invited talk 18	**Tsuyoshi TERAKAWA** (Kyoto University) The condensin complex is a new type of DNA molecular motor
17:40	Invited talk 19	**Rikiya WATANABE** (University of Tokyo) Artificial cell-membrane microsystems for single molecule analysis of membrane proteins
18:00	Free discussion	
18:30	Banquet @ OCC second meeting room	

September 2nd, 2018 (Sunday)

9:00	Registration desk open	
9:20	**Keynote talk 9**	**Toshikazu TAKATA** (Tokyo Institute of Technology) Toward linear molecular motor energized by chemical reaction via pseudopolyrotaxane intermediate
10:00	Invited talk 20	**Atsushi SHISHIDO** (Tokyo Institute of Technology) Molecular alignment control of liquid crystals by scanning wave photopolymerization
10:20	Invited talk 21	**Takafumi UENO** (Tokyo Institute of Technology) Dynamic process of proteins observed in crystalline cages
10:40	Invited talk 22	**Daisuke SUZUKI** (Shinshu University) Soft hydrogel microspheres toward autonomic materials
11:00	Invited talk 23	**Shinichiro M. NOMURA** (Tohoku University) An amoeba-type molecular robot and the beyond
11:20	Closing Remark	**Kazushi KINBARA** (Tokyo Institute of Technology)
11:30	Lunch (Optional)	
12:30	Lab Tour (Optional)	

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。これまでの開催履歴は一覧表のとおりである。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。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 IBS（Institute for Basic Science）特別セッションなどを含めた通例より大規模な会議が開催された。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。

開催一覧

回	開催年月	主テーマ	開催場所
1	1984 年 5 月	理論化学	分子科学研究所
2	1986 年 5 月	NA	ソウル（韓国）
3	1988 年 6 月	化学反応	分子科学研究所
4	1991 年 3 月	凝縮系の分子科学	ソウル（韓国）
5	1993 年 1 月	分子及び分子集合体の動的過程	分子科学研究所
6	1995 年 2 月	Molecular Science on Solid and Solid Surface	テジョン（韓国）
7	1997 年 1 月	Molecular Spectroscopy of Clusters and Related Compounds	分子科学研究所
8	1999 年 1 月	Molecular Spectroscopy and Theoretical Chemistry	テジョン（韓国）
9	2001 年 1 月	気相，凝縮相および生体系の光化学過程：実験と理論の協力的展開	分子科学研究所
10	2003 年 1 月	理論化学と計算化学：分子の構造，性質，設計	浦項工科大学（韓国）
11	2005 年 3 月	分子科学の最前線	分子科学研究所
12	2007 年 7 月	光分子科学の最前線	済州島（韓国）
13	2009 年 7 月	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
14	2011 年 7 月	New Visions for Spectroscopy & Computation: Temporal and Spatial Adventures of Molecular Science	釜山（韓国）
15	2013 年 7 月	Herarchical Structure from Quantum to Functions of Biological System	神戸
16	2017 年 7 月	Frontiers in Molecular Science: Structure, Dynamics, and Function of Molecules and Complexes	釜山（韓国）

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 ～ 2008	09	10	11	12	13	14	15	16	17	18
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	37	3	3	1	1					1	3
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								1
岐阜大学	2										
静岡大学			2	2							
名古屋大学	93	6	4	11	12	11	9	12	12	9	11
愛知教育大学	1										
名古屋工業大学	17			2	1		3	1			1
豊橋技術科学大学	40										
三重大学	7										
京都大学	45	2			1	1					3
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	27				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										
香川大学											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							
奈良先端科学技術大学院大学											1
首都大学東京	20										
名古屋市立大学	30	4	4	2	3	2	2	1	2	2	4
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	2
計	667	17	17	27	30	24	27	26	17	16	27

＊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（2018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	6	18
機能分子科学専攻	9	5	21
計	16	11	39

在籍学生数（2018年12月現在） 単位：人　　（年度別）

入学年度専攻		2014	2015	2016	2017	2018	計	定　員
構造分子科学専攻	５年一貫	2	1	3	4	9	19	2
	博士後期	1	1	1	1	1	5	3
機能分子科学専攻	５年一貫	0	2	2	5	4	13	2
	博士後期	0	0	3	2	2	7	3

学位取得状況　単位：人　　（年度別）

専　攻	1991 ～ 2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	107(12)	5	2	2	6	4	2	4	4	6	2	144(12)
機能分子科学専攻	84(14)	3	5	1	3	6	1(3)	3	4	2	0	112(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 ～ 2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018
構造分子科学専攻	144(3)	5(3)	5(1)	1(1)	6(2)	5(4)	11(4)	7(3)	6(5)	5(4)	10(9)
機能分子科学専攻	112(3)	7(2)	4(2)	6(2)	8(2)	4	2(1)	4(3)	8(5)	8(5)	6(4)

（　）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		
	1989-2016年度	2017年度	2018年度	1989-2016年度	2017年度	2018年度
中　国	32			12		
フランス				1		
ロシア				1		

バングラディッシュ	6			2		
インド	1			3		1
チェコ				1		
韓国	2					1
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		6	1	
マレーシア	1					
パキスタン		1				
エジプト					1	
カナダ			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 ～ '16 年度	'17 年度	'18 年度	'89 ～ '16 年度	'17 年度	'18 年度	
北海道大学	2	1(1)	1(1)	2			6(2)
室蘭工業大学	1			1			2
東北大学	1		1	2(1)			4(1)
山形大学				3			3
筑波大学	1			1			2
群馬大学				1			1
千葉大学	7(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(1)	2(1)
静岡大学	2			1			3
名古屋大学	6(3)	2(2)	2(2)	9(2)			19(9)
愛知教育大学			1(1)				1(1)
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	16(2)			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		1	7
広島大学	1			3			4

山口大学	1			1			2
徳島大学						1(1)	1(1)
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)	1(1)	6(2)
大阪市立大学	2						2
大阪府立大学	2			2			4
兵庫県立大学	3(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
城西大学			1(1)				1(1)
青山学院大学				1			1
学習院大学	4			2			6
北里大学	1		1(1)				2(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)		1(1)	2			4(2)
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		1(1)				4(1)
立命館大学	1			3	1(1)		5(1)
龍谷大学	1						1
関西大学	1					1(1)	2(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	1(1)	34(4)	2	1	86(8)

＊外国の大学等
（　）は５年一貫で内数

修了生の現職身分別進路（2018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	42	36	78
民間企業	27	18	45
その他	28	22	50
計	145	113	258

3-5-3　オープンキャンパス・分子研シンポジウム

2018年6月15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2018を開催し，引き続き16日（土）に分子研オープンキャンパス2018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12回目になる。分子研関係者，総研大卒業生を中心に4名の先生方に講演をお願いした。参加登録者数は，所外からは52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41名，大学院生6名，大学教員及び関連機関2名，民間3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	0	0	0	0	0	0
東　北	0	0	0	0	0	0
関　東	21	3	0	1	2	27
甲信越	0	0	0	0	0	0
北　陸	0	0	0	0	0	0
東　海	8	0	0	0	0	8
近　畿	11	2	1	1	1	16
中国・四国	0	0	0	0	0	0
九州・沖縄	1	0	0	0	0	1
合　計	41	5	1	2	3	52

3-5-4　夏の体験入学

2018年8月7日（火）から10日（金）までの4日間，分子科学研究所において，第15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（25名）を受け，選考の結果，21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（火）：オリエンテーション，UVSORと計算科学研究センターの見学
交流会
８月８日（水），９日（木）：配属研究室にて研究体験
８月10日（金）：体験内容報告会

参加者の内訳，体験内容，受入研究室は以下の通りである。

	所属	学年	体験内容	対応教員
1	名古屋工業大学	学部３年	金属タンパク質を対象とした研究を体験してみよう	青野　教授
2	大阪市立大学	学部４年		
3	慶應義塾大学	学部２年	タンパク質で生物時計を作ってみよう	秋山　教授
4	東京女子医科大学	学部３年		
5	大阪市立大学	修士１年	タンパク質１分子の動きを観察してみよう	飯野　教授
6	東京工業大学	修士２年		
7	東京大学	学部３年		
8	東京工業大学	学部４年	量子散逸系のダイナミクス理論	石崎　教授
9	愛知工業大学	学部３年		
10	愛知工業大学	学部３年	遷移金属ナノ触媒を作る！	魚住　教授
11	山梨英和大学	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
12	名城大学	学部２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
13	埼玉大学	学部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	北海道情報大学	学部４年	有機EL素子の作製と発光測定	平本　教授
15	上智大学	学部２年	金属錯体で学ぶ人工光合成	正岡　准教授
16	城西大学	学部３年		
17	名古屋大学	学部４年		
18	名古屋大学	学部４年	キラル分子を合成し，その機能を探索する	椴山　准教授
19	早稲田大学	学部３年		
20	中部大学	学部２年		
21	東京理科大学	修士２年	有機トランジスタ	山本　教授

3-5-5　総研大アジア冬の学校

2018年12月19日（水）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，海外の大学からの参加者２名を加え，９名を受け入れた。また，所内からは８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。

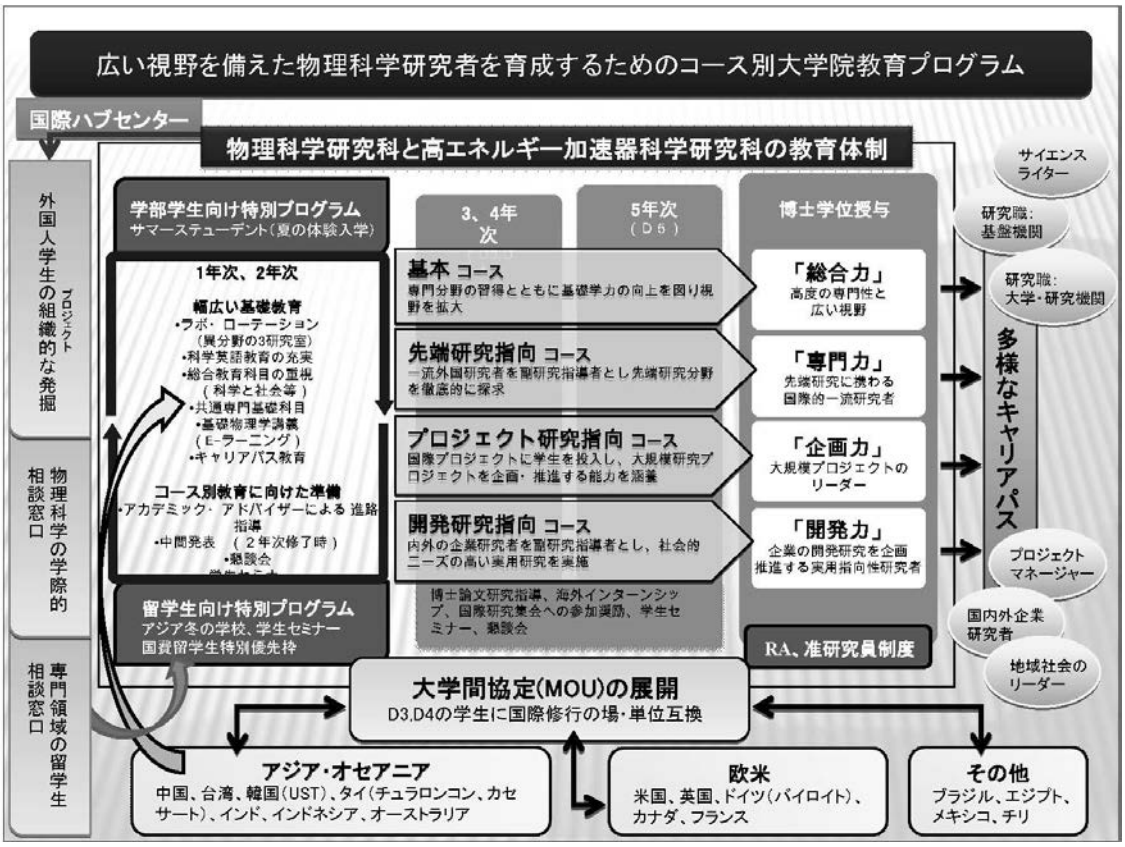
MOMIYAMA, Norie (IMS, SOKENDAI)
“Chiral Organic Molecules—From Basic to Advanced—”
IINO, Ryota (IMS, SOKENDAI)
“Single-Molecule Imaging Analysis of Protein Molecular Motors”
EHARA, Masahiro (IMS, SOKENDAI)
“Element Strategy for Catalysts and Batteries”

3-5-6　広い視野を備えた物理科学研究者を育成するためのコース別教育プログラム

2009～2011年度に文部科学省事業の「組織的な大学院教育改革推進プログラム」として総合研究大学院大学物理科学研究科の大学院教育改革推進プログラム「研究力と適性を磨くコース別教育プログラム」が実施され，分子科学研究所が直接関わる構造分子科学専攻，機能分子科学専攻を含む物理科学研究科では，物理科学の学問分野において高度の専門的資質とともに幅広い視野と国際的通用性を備え，社会のニーズに答えることのできる研究者の育成を目指した大学院教育が行われた。当該プログラムでは，本研究科のこのような教育の課程をさらに実質化し，学生の研究力と適性を磨き，研究者として必要とされる総合力，専門力，企画力，開発力，国際性などを身に付けさせることを目的とした。これを継続する位置づけのものとして2012～2015年度において，特別経費（概算要求）事業「広い視野を備えた物理科学研究者を育成するためのコース別大学院教育プログラム」が実施されている。これにはこれまでの物理科学研究科に加えて高エネルギー加速器科学研究科３専攻が参加している。

上記の目的のため，博士課程前期における大学院基礎教育の充実とともに，博士課程後期におけるコース別教育プログラムを実施している。物理科学研究科及び高エネルギー加速器科学研究科の大学院教育が行われている各基盤機関では，国際的に最先端の研究プロジェクト，大規模研究プロジェクト，企業との開発研究プロジェクトなどが数多く推進されており，本プログラムは，このような優れた研究的環境を最大限に生かした教育の実質化を目指している。最も重要な取り組みは，３カ月程度の国外の最先端研究室等へのインターンシップを体系化し，広い視野と国際性を涵養する取組であり，毎年数名の短期留学を実施している。両研究科所属の各専攻を擁する基盤機関は国内外に分散しており，それゆえに他専攻の授業を受講することは従来困難であった。本プログラムでは両研究科所属の大学院生が幅広い物理科学の素養を得られるべく，複数の研究室を短期間体験するラボ・ローテーションを実施し，また共通専門基礎科目のe-ラーニング化とその積極的活用により専攻間の縦横な授業履修を可能としている。すでに2011年度から分子研所属の構造分子科学専攻，機能分子科学専攻のe-ラーニング授業が配信されている。また学生が主体で企画運営する物理科学学生セミナーなど，積極的な取り組みが行われている。これら以外にも，国内民間企業へのインターンシップ，海外国際会議派遣，英語教育，アジア冬の学校，夏の体験入学，専攻内FD等を本プログラムで実施している。

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



3-5-7　統合生命科学教育プログラム

総研大では文部科学省・特別経費の支援によって，2011 年より４年間の予定で分野・専攻横断型の「統合生命科学教育プログラム」を開始し，講義を 2011 年 10 月から行っている。2015 年度以降は，総研大からの支援を受け，プログラムを継続実施している（http://ibep.nips.ac.jp/index.html）。

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，９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イメージング科学，⑤発生生物学 IV，⑥進化ゲノム生物学，⑦生体分子シミュレーション入門，⑧機能生体分子科学，⑨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）の実地演習時，イメージング科学の講義・演習時では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。

４．研究支援等

ここに記載しているのは，直接研究活動を行わないが研究を遂行する上でなくてはならない研究支援業務であり，主に技術課が担当・支援しているものである。特に法人となってからは，全国の分子科学コミュニティの連帯を強めるために研究支援部門を強化してきた。法人化後に新設された部門には，「安全衛生管理室」，「 広報室 」，「史料編纂室」があり，引き続き活発な活動を行っている。また，平成 25 年度から自然科学研究機構は「研究大学強化促進事業」の支援対象機関となり，分子研もこの事業の一環で「研究力強化戦略室」が設置され，広報室と史料編纂室は研究力強化戦略室に発展的に含まれることになった。さらに今後，技術課はこの戦略室と連携して研究支援業務を進める事になる。

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

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

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

史料編纂室は，法人化後に設置された支援組織としては一番新しい。法人化後まもなく迎えた創立 30 周年記念行事の中で分子研設立の経緯を残すことの重要性が認識された。このため，総研大葉山高等研究センターを中心に発足した「大学共同利用機関の歴史」研究プロジェクトに参加する形で史料編纂室を発足させた。分子研設立の経緯と共に，過去に所員が行ってきた研究，分子科学コミュニティの形成過程などの歴史を整理・記録してきた。今後は広報資料や研究活動等評価資料（ IR 資料）という観点で，研究力強化戦略室の中に位置付けることとなる。

4-1　技術課

技術課は，所長に直属した技術職員の組織で，技術課長以下に６技術班 14 技術係を配置し，構成員は 2018 年４月１日現在で 29 名である。技術職員は，主に研究施設に配属され，それぞれの持つ高い専門技術で研究教育職員と協力し，先端的かつ独創的な研究を技術面から支え，大学共同利用機関の使命を果たすために努力している。各施設に配属された技術職員の対応する技術分野は広範囲に渡っている。機械，電気，電子，光学，情報，といった工学知識や各要素技術の技能を基に支援業務として実験機器の開発，システム開発等を行い，物理・化学・生命科学を基に物質の構造解析や化学分析等を支援している。この様に技術職員の持っているスキルを活用し，UVSOR やスパコン，レーザーシステム，Ｘ線回折装置，電子顕微鏡，ESR，SQUID，NMR など大型設備から汎用機器の維持管理，施設の管理・運用も技術職員の役割としている。さらに，科学の知識を基に研究所のアウトリーチ活動も職務として担い，広報に関する業務，出版物の作成も行っている。所内の共通業務としてネットワークの管理・運用，安全衛生管理も技術課の業務として行っている。安全衛生管理では，研究所の性質から毒物・劇物・危険物など薬品知識や低温寒剤等高圧ガスの知識，放射線管理，その他技術的な側面から毎週職場巡視を行い，分子研の安全衛生管理に寄与している。

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

4-1-1　技術研究会

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

表１　技術研究会開催機関

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

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

平成 17	岩手大学	平成 17 年 9 月 15-16 日	機器・分析	
	分子科学研究所	平成 18 年 3 月 2-3 日	機械・ガラス工作，回路，低温，計算機，装置	技術課長　加藤　清則
平成 18	広島大学	平成 18 年 9 月 14-15 日	安全衛生，計測制御，機器・分析など全分野	
	名古屋大学	平成 19 年 3 月 1-2 日	機械・ガラス工作，装置技術，回路・計測・制御，低温，情報ネットワーク，生物，分析・環境，実験・実習	
平成 19	富山大学	平成 19 年 8 月 23-24 日	機器・分析	
	核融合科学研究所	平成 20 年 3 月 10-11 日	工作・低温，装置，計測・制御，計算機・データ処理	技術部長　山内　健治
平成 20	愛媛大学	平成 20 年 9 月 25-26 日	機器・分析	
	京都大学	平成 21 年 3 月 9-10 日	機械・ガラス工作，装置，回路・計測・制御，低温，情報ネットワーク，生態・農林水産，医学・実験動物，分析・物性，実験・実習・地域貢献，建築・土木，環境・安全	
平成 21	琉球大学	平成 22 年 3 月 4-5 日	機器分析，実験・実習，地域貢献，安全衛生	
	高エネルギー加速器研究機構	平成 22 年 3 月 18-19 日	機械，低温，計測・制御・回路，装置，情報・ネットワーク	
平成 22	東京工業大学	平成 22 年 9 月 2-3 日	機器分析，実験・実習，地域貢献，安全衛生	
	熊本大学	平成 23 年 3 月 17-18 日	機械・ガラス工作，装置，回路・計測・制御，低温，情報ネットワーク，生態・農林水産，医学・実験動物，分析・物性，実験・実習・地域貢献，建築・土木，環境・安全	
平成 23	信州大学	平成 23 年 9 月 8-9 日	機器分析，東日本震災関連	
	分子科学研究所	平成 24 年 3 月 8-9 日	機械・ガラス工作，回路技術，極低温技術，情報／ネットワーク，装置運用	
	神戸大学	平成 24 年 3 月 15-16 日	実験・実習，地域貢献，安全衛生	
平成 24	大分大学	平成 24 年 9 月 6-9 日	機器・分析	
	愛媛大学	平成 25 年 3 月 7-8 日	機械・材料，電気・電子・通信，情報，建築・土木・資源，化学・物性評価，特殊・大型実験・自然観測，極低温，生物・農林水産，生命科学，実験・実習，地域貢献・技術者養成，施設管理，安全衛生管理	
平成 25	鳥取大学	平成 25 年 9 月 12-13 日	機器・分析，安全衛生	
	核融合科学研究所	平成 26 年 3 月 13-14 日	工作技術，装置技術，計測・制御技術 低温技術，情報処理技術	
平成 26	北海道大学	平成 26 年 9 月 4-5 日	機械・材料・製作，特殊・大型・自然観測，電気・電子・通信，極低温，情報，生物・農林水産，生命科学，機器・分析，実験・実習，建築・土木・資源，施設管理・安全衛生管理，地域貢献・技術者養成活動	
平成 27	山形大学	平成 27 年 9 月 10-11 日	機器・分析	
	山口大学	平成 28 年 3 月 3-4 日	実験・実習，地域貢献，安全衛生	
	高エネルギー加速器研究機構	平成 28 年 3 月 17-18 日	機械工作，実験装置，計測制御，真空・低温，情報処理	
平成 28	名古屋大学	平成 28 年 9 月 8-9 日	機器・分析	
	東京大学	平成 29 年 3 月 9-10 日	機械加工・ガラス，実験装置・大型実験，回路・計測制御，低温，情報・ネットワーク，フィールド・農林水産海洋，生命科学，分析，実験実習・社会貢献，建築・土木・資源開発，施設管理・環境安全衛生，文化財保存	
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，リソグラフィー，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	
平成 30	秋田大学	平成 30 年 9 月 6-7 日	機器・分析	
	分子科学研究所	平成 31 年 2 月 7-8 日	エレクトロニクス技術，機械工作	
	九州大学	平成 31 年 3 月 6-8 日	機械・材料，製作技術，特殊・大型実験，電気・電子・通信，極低温，情報，生物・農林水産，生命科学，分析・評価，実験・実習，建設・土木・資源，施設管理・安全衛生管理，地域貢献・技術者養成	

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
平成 29 年度	20

表３　平成 30 年度技術研修受入状況（2018.4.1 ～ 2019.3.31）

氏　　名	所　　属	受入期間	備　　考
岡田　則夫	国立天文台	H30.5.10 ～ 5.11	他機関との人事交流および人材確保に関する意見交換
鈴井　光一	国立天文台	H30.5.10 ～ 5.11	他機関との人事交流および人材確保に関する意見交換
鈴井　光一	国立天文台	H30.5.24 ～ 5.25	チタン銅製造圧力セルの製作研修
鈴井　光一	国立天文台	H30.5.24 ～ 5.25	チタン銅製造圧力セルの製作研修
松本　　香	神戸大学大学院工学研究科技術室	H30.9.3 ～ 9.7	C 言語と ARM マイコンを用いた FM ラジオ受信機の開発（演習）
鈴井　光一	国立天文台	H30.8.13	チタン銅製造圧力セルの製作研修
宇野　宗則	北陸先端科学技術大学院大学	H30.11.10 ～ 11.16	24bitAD コンバータを用いた熱電対測定回路と基板の設計・製作
千葉　　寿	岩手大学理工学部	H31.2.7 ～ 2.8	第 20 回分子科学研究所技術研究会
松本　　香	神戸大学大学院工学研究科技術室	H31.2.7 ～ 2.8	第 20 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	H31.2.7 ～ 2.8	第 20 回分子科学研究所技術研究会
武井　将志	北海道大学電子科学研究所	H31.2.7 ～ 2.8	第 20 回分子科学研究所技術研究会
立花　健二	名古屋大学全学技術センター	H31.2.7 ～ 2.8	第 20 回分子科学研究所技術研究会
保住　弥紹	高エネルギー加速器研究機構機械工学センター	H31.2.7 ～ 2.8	第 20 回分子科学研究所技術研究会
宇野　宗則	北陸先端科学技術大学院大学	H31.2.7 ～ 2.8	第 20 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　日本化学会化学研究技術有功賞（1986）
　　低温工学協会功労賞（1991）
酒井楠雄　日本化学会化学技術有功賞（1995）
加藤清則　日本化学会化学技術有功賞（1997）
西本史雄　日本化学会化学技術有功賞（1999）
山中孝弥　日本化学会化学技術有功賞（2004）
石村和也　WATOC2005 Best Poster Diamond Certificate（2005）
堀米利夫　日本化学会化学技術有功賞（2005）
鈴井光一　日本化学会化学技術有功賞（2007）

吉田久史	日本化学会化学技術有功賞（2008）
水谷文保	日本化学会化学技術有功賞（2009）
青山正樹	日本化学会化学技術有功賞（2012）
髙山敬史	日本化学会化学技術有功賞（2019）
水谷伸雄	日本化学会化学技術有功賞（2019）

4-2　安全衛生管理室

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

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

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

平成 29 年に上梓した「安全ガイド 2017-2018」については次年度版からの日英バイリンガル版への改訂を前提に作業を始めつつある。また平成 30 年度には，同ガイドに記載された本研究所の安全指針・規定・指導の内容は外部機関等からの共同利用者にも理解と遵守が徹底されるように共同利用の電子申請とのリンクが整備された。

4-3　社会との交流

一般市民の方々に科学の面白さ・意義を伝えるとともに，科学コミュニティの健全な発展を促すような相互交流を醸成するための取り組みは，ますます重要性を増している。分子科学研究所では，このようなアウトリーチ活動の一環として，他機関との連携・共同により国内の広い範囲をカバーする事業，および，岡崎の地域性を重視した事業という２つのタイプを実施している。前者としては，自然科学研究機構シンポジウムならびに大学共同利用機関シンポジウムがあり，後者は分子科学フォーラム・岡崎市民大学講座等である。

4-3-1　自然科学研究機構シンポジウム

当シンポジウムは2006年より年２回のペースで実施され，下記のようにこれまでに計23回開催されている。

本シンポジウムに対する分子科学研究所の関与は次の通りである。第１回において，「21世紀はイメージング・サイエンスの時代」と銘打ったパネルディスカッション中で，岡本裕巳教授が「ナノの世界まで光で見えてしまう近接場光学」というタイトルで講演を行った。第２回目は，講演会全体の企画を分子科学研究所が中心となって行った（詳細は「分子研リポート2006」を参照)。第７回では，加藤晃一教授が自らの体験に基づいて「研究の醍醐味とは何か」を伝える講演を行った。第11回では，大峯巖所長が「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きている。常設展示室に設置されている可搬式のグラフィックパネルや模型を適宜利用するなど，展示内容のさらなる充実に努めている。合わせて，十分な説明要員を確保するために研究者の積極的な参加も促している。

実施状況は以下の通り。

回	開催日	テーマ	会場
1	2006. 3.21	見えてきた！　宇宙の謎。生命の謎。脳の謎。科学者が語る科学最前線	サンケイプラザ
2	2006. 9.24	爆発する光科学の世界—量子から生命体まで—	東京国際フォーラム
3	2007. 3.21	宇宙の核融合・地上の核融合	東京国際フォーラム
4	2007. 9.23	生命の生存戦略　われわれ地球生命ファミリーはいかにして ここに かくあるのか	東京国際フォーラム
5	2008. 3.20	解き明かされる脳の不思議	東京国際フォーラム
6	2008. 9.23	宇宙究極の謎	東京国際フォーラム
7	2009. 3.20	科学的発見とは何か 「泥沼」から突然「見晴らし台へ」	東京国際フォーラム
8	2009. 9.23	脳が諸学を生み，諸学が脳を統合する	学術総合センター一橋記念講堂
9	2010. 3.21	ビックリ　４Ｄで見るサイエンスの革新	東京国際フォーラム
10	2010.10.10	多彩な地球の生命—宇宙に仲間はいるのか—	学術総合センター一橋記念講堂
11	2011. 6.12	宇宙と生命—宇宙に仲間はいるのか II—	ナディアパーク
12	2012. 3.20	知的生命の可能性 —宇宙に仲間はいるのか III—	東京国際フォーラム
13	2012. 9.29	日本のエネルギーは大丈夫か？　～ $E = mc^2$ は人類を滅ぼすのか，救うのか……～	吹上げホール

14	2013. 3.20	分子が拓くグリーン未来	一橋大学一橋講堂
15	2013.10.14	アストロバイオロジー	一橋大学一橋講堂
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―	一橋大学一橋講堂
18	2015. 3.22	生き物たちの驚きの能力に迫る	一橋大学一橋講堂
19	2015. 9.15	宇宙から脳まで　自然科学研究の“ビッグバン” ―コンピューターが切り開く自然科学の未来―	名古屋大学豊田講堂
20	2016. 3.13	生命の起源と進化～地球から系外水惑星へ～	一橋大学一橋講堂
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
26	2018.12. 8	“超越”への“挑戦”	東京国際交流館
27	2019. 3. 3	生物の環境適応戦略	一橋大学一橋講堂

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９回），および各種の大型分子模型（第４回～第９回），研究者トーク（第６回～第９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
9	2018.10.14	最先端研究大集合	名古屋市科学館

4-3-3　分子科学フォーラム

当フォーラムは「分子科学の内容を他の分野の方々や一般市民にも知らせ，また，幅広い科学の話を分子研の研究者が聞き自身の研究の展開に資するように」との趣旨のもとに，1996年より実施されている。豊田理化学研究所と共催となっており，年度毎に年間計画を豊田理化学研究所の理事会に提出している。2008年度よりは，一般市民の方々に科学の面白さ・楽しさを伝える「市民一般公開講座」として新たに位置づけられ，2009年度には，一元的で効率的な活動の展開を目指して，広報室を中心とした実施体制の整備を進めた。この際，講演回数をこれまでの年６回から４回に変更し，密度の高い講座を開講することで，より魅力的な『分子科学フォーラム』の実現を図った。以来，幅広い分野で先導的な立場におられる研究者や技術者を講師としてお招きし，多様なテーマで講演を実施している。2013年度は，第１回目にサイエンス･ジャーナリストのお二人による座談会形式で実施するなど，新たな試みを行った。どの回も，100名を超える多数の参加者があり，特に，通算第100回記念となった2014年１月31日は，追加の椅子を多数準備する必要があったほどの盛会であった。2013年度より，隣接する岡崎高校のスーパーサイエンス事業のご協力を頂き，多数の高校生の皆さんにも参加して頂いている。さらに，小学生以下の小さなお子さんの参加も見うけられるようになった。若い参加層の皆さんから活発な質問をお寄せ頂き，講演を盛り上げて頂いている。地域に根差した公開講座会として，広く認知されてきたものと評価される。

本年度の実施状況は以下の通り。

回	開催日	テーマ	講演者
117	2018. 7. 6	ロボットと人口知能で拓く　サイエンスの未来	夏目　　徹 （産業技術総合研究所創薬分子プロファイリング研究センター長）
118	2018.10.20	海を耕す！　近大マグロの完全養殖と最新の育種研究・ゲノム編集	家戸敬太郎 （近畿大学教授）
119	2019. 1.11	水素のマイナスイオン“ヒドリド”を伝導するセラミックス	小林　玄器 （分子科学研究所准教授）
		水分子の向きが揃った特殊な結晶氷の生成	杉本　敏樹 （分子科学研究所准教授）
120	2019. 2. 8	宇宙線ミューオンイメージングによるクフ王ピラミッドの新空間の発見	森島　邦博 （名古屋大学高等研究院特任助教）

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，毎月一回程度の頻度でコロキウムを行うことを原則とした。講演者の先生には通常の研究発表よりも研究の背景や今後の展開等の大局的な内容を多めに話して頂き，講演者・参加者の皆で深く自由に議論できるある種のブレーンストーミングの様な場を提供できることを目指している。

以下は2018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
918	2018. 4.17	ディラック単原子層の発見と先端軟X線分光による機能解明 Discovery of Dirac Monolayers and Elucidation of Functionalities by Advanced Soft X-Ray Spectroscopy	松田　巌 （東京大学物性研究所准教授）
919	2018. 5.18	Theoretical Investigations of Biological Nano-Machines	Prof. Alexander S. Mikhailov （Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft）
920	2018. 6.13	Colloquium on Lattice Gauge Annealing	Ass.-Prof. Dr. Wolfgang Lechner （University of Innsbruck）
921	2018. 7. 6	Possible Manifestations of Quantum Disordered Dynamics in the Arrested Relaxation of a Molecular Ultracold Plasma	Prof. Edward Grant （University of British Columbia）
922	2018. 7.17	Atomic-Scale Observations of Catalyst Structures with STM under Reaction Conditions and during Catalysis	Prof. Franklin (Feng) Tao （University of Kansas）
923	2018. 9.27	Doping of Molecular Monolayers: The Impact of Potassium Atoms	Prof. Torsten Fritz （Friedrich-Schiller-Universität Jena）
924	2018.10.19	究極のらせん高分子の創成をめざして Toward the Development of Ultimate Helical Polymers	八島　栄次 （名古屋大学大学院工学研究科教授）
925	2018.11. 8	Very Strong and Confined Acids Enable a General Approach to Asymmetric Lewis Acid Catalysis	Prof. Benjamin List （Max-Planck-Institut für Kohlenforschung）
926	2018.11.15	The German Energy Transition in the European Context—Can the Ambitious Goals Be Reached?	Prof. Eberhard Umbach （Universität Würzburg, Karlsruher Institut für Technologie, and Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft）
927	2018.11.28	The Materials of Tomorrow, Today	Prof. Alán Aspuru-Guzik （University of Toronto）
928	2019. 1.18	Catalysis in the Production of Molecules and Materials	Prof. Cathleen Crudden （Queen’s University, 名古屋大学 WPI-ITbM）
929	2019. 2.22	Hybrid Classical-Quantum Simulations in the Innsbruck Quantum Cloud	Prof. Peter Zoller （University of Innsbruck）
930*	2019. 3.26	In Situ Metalation of Porphyrins on Metal and Oxide Surfaces	Prof. Hans-Peter Steinrück （Friedrich-Alexander Universität）

＊森野レクチャーとの共同開催

4-3-5　岡崎市民大学講座

岡崎市教育委員会が，生涯学習の一環として岡崎市民（定員 1,500 人）を対象として開講するもので，岡崎３機関の研究所が持ち回りで講師を担当している。

分子科学研究所が担当して行ったものは以下のとおりである。

開催年度	講　師	テーマ
1975 年度	赤松　秀雄	化学と文明
1976 年度	井口　洋夫	分子の科学
1980 年度	廣田　榮治	分子・その形とふるまい
1981 年度	諸熊　奎治	くらしの中のコンピュータ
1982 年度	長倉　三郎	分子の世界
1983 年度	岩村　　秀	物の性質は何できまるか
1987 年度	齋藤　一夫	生活を変える新材料
1988 年度	井口　洋夫	分子の世界
1991 年度	吉原經太郎	光とくらし
1994 年度	伊藤　光男	分子の動き
1997 年度	齋藤　修二	分子で宇宙を見る
2000 年度	茅　　幸二	原子・分子から生命体までの科学
2003 年度	北川　禎三	からだで活躍する金属イオン
2006 年度	中村　宏樹	分子の科学，独創性，そして東洋哲学
2009 年度	平田　文男	生命活動における『水』の働き
2013 年度	大峯　　巖	水，水，水

4-3-6　その他

(1)　岡崎商工会議所（岡崎ものづくり推進協議会）との連携

岡崎商工会議所は，産学官連携活動を通じて地元製造業の活性化と競争力向上を目的に「岡崎ものづくり推進協議会」を設立し，多くの事業を行っている。この協議会と自然科学研究機構岡崎３研究所との連携事業の一環で，協議会の会員である市内の中小企業との交流会を平成 19 年度に開催し，この交流会によって出来あがった協力体制は現在も継続している。また岡崎商工会議所主催で隔年開催される「岡崎ものづくりフェア」へ大学・研究機関として展示ブースを設けて参加している。これらは主に技術課の機器開発班と電子機器開発班が中心となり，地域の民間企業からの施設利用やナノプラットフォーム事業の利用促進の広報として貢献している。

(2)　コミュニティサテライトオフィス講演会

岡崎大学懇話会（市内４大学で構成）・岡崎商工会議所が運営するコミュニティサテライトオフィスにおいて，地域社会や地域産業の活性化に還元する主旨で一般市民及び企業関係者を対象として実施している。

開催日	テーマ	講　師
2009. 1.15	分子を活用する近未来技術～分子科学研究所が関与するエネルギー問題や環境問題等への取組み～	西　　信之　教　授
2010. 1.19	次世代の太陽電池について	平本　昌宏　教　授

4-4　理科教育への協力

分子科学研究所は，愛知県や岡崎市という地域性を重視して，小学校から高等学校までの様々なレベルで理科教育への協力を行ってきている。岡崎市内の高等学校には，文部科学省に応募して採択されたスーパーサイエンスハイスクール（以下 SSH と略す）研究指定校，愛知県教育委員会より指定を受けた愛知スーパーハイスクール研究校，さらに，科学技術振興機構（JST）のサイエンスパートナーシッププロジェクト（SPP）に応募して採択された SPP 実施校など，理科教育の充実を目指して独自の取り組みを行っているところも多い。分子研は，岡崎の３研究所で連携しつつ，もしくは単独で，これらの高校の活動に協力している。一方，小中学校を対象とした事業としては，出前授業・岡崎市のスーパーサイエンススクール推進事業（SSS）・職場体験などが挙げられる。また，教員対象の支援も行っている。各事業について，本年度に実施されたものを中心として，以下に記載する。

4-4-1　スーパーサイエンスハイスクール

愛知県立岡崎高等学校が 2002 ～ 2005 年度に SSH 指定校となったことを契機として，分子科学研究所は同校の SSH 事業に協力してきた。2007 年度には，再度，指定を受け，５年間にわたる第二次 SSH 事業がスタートしている。これまでは，スーパーサイエンス部の支援が主な活動であったが，2011 年度に同校が「コア SSH」としての指定を受けたのに際して，他校も含む理科教員の研修をお願いしたいとの依頼が分子研に寄せられた。これに対応して，2012 年２月４日には NMR の原理と応用に関する研修会を実施し，県内から８名の高校教員が参加して午前・午後を費やして講義ならびに実習を受講した。2013 年３月９日には，「分子を探る，放射光の科学」として UVSOR において研修会を実施した（５校７名が参加）。2014 年２月 10 日には SSH 進路オリエンテーション（２年生理系対象の講演会）の講師対応も行った。また，魚住グループ，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　コスモサイエンスコース

分子科学研究所では，2008 年度に愛知県立岡崎北高等学校が国際的に活躍できる科学技術者の育成を目的に新たに設置した，コスモサイエンスコースへの協力を，岡崎市にある基礎生物学研究所，生理学研究所とともに開始した。一時期中断したが，2015 年より総合的学習の時間（研究者の講話）に講師を派遣している。

開催日	講　師
2015. 7.10	藤　　貴夫　准教授
2016. 7. 8	椴山　儀恵　准教授
2017. 7. 7	椴山　儀恵　准教授
2018. 7. 6	椴山　儀恵　准教授

4-4-3　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，第 10 回（2018 年 12 月 26 日）は，名古屋大学にて開催された。分子研では，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。

4-4-4　国研セミナー

このセミナーは，岡崎３機関と岡崎南ロータリークラブとの交流事業の一つとして行われているもので，岡崎市内の小・中学校の理科教員を対象として，岡崎３機関の研究教育職員が講師となって 1985（昭和 60）年 12 月から始まり，毎年行われている。

分子科学研究所が担当したものは以下のとおりである。

回	開催日	テーマ	講　師
2	1986. 1.18	分子研の紹介	諸熊　奎治　教　授
3	1986. 6. 7	シンクロトロン放射とは （加速器・分光器・測定器の見学）	渡邊　　誠　助教授 春日　俊夫　助教授
6	1986.10. 4	人類は元素をいかに利用してきたか	齋藤　一夫　教　授
9	1987. 6.13	レーザーの応用について	吉原經太郎　教　授
12	1987. 9.26	コンピュータで探る分子の世界	柏木　　浩　助教授
15	1988. 7. 2	目で見る低温実験・発光現象と光酸化現象	木村　克美　教　授
18	1988.10.29	人工光合成とは何か	坂田　忠良　助教授
21	1989. 6.24	星間分子と水――生命を育む分子環境――	西　　信之　助教授
24	1989.10.21	常温での超伝導は実現できるか	那須奎一郎　助教授
27	1990. 6.23	目で見る結晶の生成と溶解 ――計算機による実験（ビデオ）――	大瀧　仁志　教　授
30	1990.10.20	電気と化学	井口　洋夫　所　長
33	1991. 6.22	自己秩序形成の分子科学 ――分子はどのようにしてリズムやパターンを作り出すか――	花崎　一郎　教　授
37	1991.12.14	からだと酸素，そしてエネルギー：その分子科学	北川　禎三　教　授
39	1992. 7. 7	サッカーボール分子の世界	加藤　立久　助教授
42	1992.11.13	炭酸ガスの化学的な利用法	田中　晃二　教　授
45	1993. 6.22	化学反応はどのように進むか？	正畠　宏祐　助教授
48	1993.10. 1	宇宙にひろがる分子の世界	齋藤　修二　教　授
51	1994. 6.21	分子の動き	伊藤　光男　所　長
54	1995. 6.20	生体内で活躍する鉄イオン――国境なき科学の世界――	渡辺　芳人　教　授
57	1996. 6.28	分子を積み上げて超伝導体を作る話	小林　速男　教　授

60	1997. 6.13	生体系と水の分子科学	平田　文男　教　授
63	1998. 6.12	電子シンクロトロン放射光による半導体の超微細加工 ——ナノプロセスとナノ化学——（UVSOR 見学）	宇理須恆雄　教　授
66	1999. 6. 8	レーザー光で，何が見える？　何ができる？	猿倉　信彦　助教授
69	2000. 6. 6	マイクロチップレーザーの可能性	平等　拓範　助教授
72	2001. 6. 5	ナノメートルの世界を創る・視る	夛田　博一　助教授
75	2002. 6. 4	クラスターの科学——原子・分子集団が織りなす機能——	佃　　達哉　助教授
78	2003. 6.24	科学のフロンティア——ナノサイエンスで何ができるか？	小川　琢治　教　授
81	2004. 6.22	生命をささえる分子の世界——金属酵素のしくみを探る	藤井　　浩　助教授
84	2005. 6.28	環境に優しい理想の化学合成	魚住　泰広　教　授
87	2006. 6.20	電気を流す分子性結晶の話	小林　速男　教　授
90	2007. 6.15	光で探る生体分子の形と機能	小澤　岳昌　准教授
93	2008. 6.17	宇宙の光を地上で作る——シンクロトロン光源——	加藤　政博　教　授
96	2009. 6. 9	化学結合をいかに教えるか	平本　昌宏　教　授
101	2010.11. 9	生命の営みと「水」 ——化学･物理の理論とコンピュータで探る分子スケールの生命現象——	平田　文男　教　授
104	2011.11. 1	原子のさざ波と不思議な量子の世界	大森　賢治　教　授
105	2012. 6. 5	電気はどうして流れるのか	中村　敏和　准教授
109	2013.11.26	身近になってきた有機エレクトロニクス	山本　浩史　教　授
112	2014.11.28	生物の時間をはかるタンパク質時計	秋山　修志　教　授
115	2015.11.10	タンパク質で出来たナノサイズの機械が動く仕組みを探る	飯野　亮太　教　授
118	2016.11. 1	人工光合成への挑戦～植物に学ぶ分子デザイン～	正岡　重行　准教授
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
125	2019. 2. 1	光で有機分子の電子の特徴を調べる	解良　　聡　教　授

4-4-5　小中学校での出前授業

岡崎市内の小中学校を対象に，物理・化学・生物・地学に関わる科学実験や観察を通して，科学への興味・関心を高めることを目的に，岡崎市教育委員会や各小中学校が企画する理科教育に協力している。

分子科学研究所が担当したものは以下のとおりである。

岡崎市教育委員会（出前授業）

対象校	開催日	テーマ	講　師
六ツ美北中東海中	2002. 1.25	光学異性体とその活用	魚住　泰広　教　授
東海中	2003. 2.18	計算機を使って分子を見る	谷村　吉隆　助教授
常磐南小	2005. 2. 7	光の不思議	岡本　裕巳　教　授
東海中	2006. 2. 8	モルフォ蝶とナノ化粧品の秘密	小川　琢治　教　授
美川中	2007. 2.26	生物から学ぶ光と色	小澤　岳昌　助教授
矢作西小	2007.12. 4	原子の世界	櫻井　英博　准教授
六ツ美北部小	2008.10.10	ミクロの世界の不思議	平本　昌宏　教　授
矢作中	2009.12. 4	分子と光の秘密	平本　昌宏　教　授

岩津中	2010.10. 6	分子と光の秘密	平本　昌宏　教　　授
東海中	2010.11.30	電気を流す物ってどんな物？	中村　敏和　准 教 授
岩津中	2011. 7.11	電気を流す物の性質，磁界のはたらき	中村　敏和　准 教 授
河合中	2011.10.17	計算機シュミレーションで見る原子・分子の世界	伊藤　　暁　助　　教
常磐中	2011.10.19	光の不思議	寺内かえで　技術職員
六ツ美中	2012. 1.17	魔法の物質「触媒」ってなんだろう？	唯　美津木　准 教 授
竜南中	2012. 1.27	分子と光の秘密	平本　昌宏　教　　授
矢作北中	2012. 2.14	目で見えないものを見る光	岡本　裕巳　教　　授
額田中	2012. 6.21	植物から学ぶ人工光合成	正岡　重行　准 教 授
岩津中	2012. 6.29	魔法の物質「触媒」ってなんだろう？	唯　美津木　准 教 授
甲山中	2012. 7.11	分子と光の秘密	平本　昌宏　教　　授
竜南中	2012.10.19	計算機シミュレーションで見る原子・分子の世界	伊藤　　暁　助　　教
矢作中	2012.11. 8	光と分子	長坂　将成　助　　教
城北中	2013. 2.12	小さすぎる世界を覗いてみよう	鹿野　　豊　特任准教授
南中	2013.10. 9	計算機シミュレーションで見る原子・分子の世界	伊藤　　暁　助　　教
常磐中	2013.11.20	バイオフィルムって何？	吉岡　資郎　助　　教
竜海中	2013.11.27	分子と光の秘密	平本　昌宏　教　　授
矢作北中	2013.12. 6	「電気はどうして流れるの!?」 電磁誘導・超伝導を体験しよう	中村　敏和　准 教 授
葵中	2014. 1.16	光で探る分子のダイナミックな姿	大島　康裕　教　　授
竜南中	2014. 3.14	Chemistry meets computing	倉重　佑輝　助　　教
六ツ美北中	2014. 7.14	光エネルギーとタンパク質	古谷　祐詞　准 教 授
城北中	2014. 9.26	分子と光の秘密	平本　昌宏　教　　授
河合中	2014.10.20	結晶学入門 ～分子のかたち，私たちのかたち～	村木　則文　特任助教
新香山中	2014.10.30	時間の顕微鏡――目では見えない高速な出来事を観察する光の技	岡本　裕巳　教　　授
北中	2015. 1.29	水中での有機分子変換反応 ～水と油の関係改善でグリーン反応～	大迫　隆男　助　　教
竜南中	2015. 3. 6	計算化学～実験でも暗記でもない化学	福田　良一　助　　教
岩津中	2015. 7.16	生き物の「分子」と「進化」	塚本　寿夫　助　　教
新香山中	2015.10.28	分子に光があたると何がおこるのか？	飯田　健二　助　　教
翔南中	2015.11.11	キラル分子と私たち～キラル分子の建築家を目指して～	椴山　儀恵　准 教 授
福岡中	2015.11.12	分子の光と秘密	平本　昌宏　教　　授
甲山中	2015.11.30	シミュレーションで見る生物とタンパク質	森　　俊文　助　　教
矢作北中	2015.12. 4	タンパク質～生命の営みを支える分子～	向山　　厚　助　　教

城北中	2016. 2.12	タンパク質の奏でる生体リズム～生物はどのようにして時間をはかるのか？～	秋山　修志　教　　授
美川中	2016. 7.13	原子，分子って何？	斉藤　真司　教　　授
翔南中	2016.11. 8	光る分子とエネルギーの話	山本　浩史　教　　授
矢作北中	2016.12. 2	身近な化学反応から学ぼう！ タンパク質のかたちとはたらき	矢木　真穂　助　　教
福岡中	2016.12. 6	電気はどうして流れるの !? 電磁誘導・超伝導を体験しよう！	中村　敏和　准 教 授
城北中	2017. 2.14	宇宙の光で見えない原子・分子を探る	繁政　英治　准 教 授
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
福岡中	2018. 7. 3	化学で生命を創る !?	栗原　顕輔　特任准教授
常磐中	2018.10.17	原子や分子の世界	斉藤　真司　教　　授
岩津中	2018.10.29	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
南中	2018.11. 9	「光る分子」と「未来のエレクトロニクス」	須田　理行　助　　教
額田中	2018.12. 5	分子と光の秘密	平本　昌宏　教　　授
東海中	2018.12.18	レーザー研究の最先端と可能性	平等　拓範　教　　授

岡崎市立小豆坂小学校（親子おもしろ科学教室）

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

スーパーサイエンススクール推進事業

対象校	開催日	テーマ	講　師
岩津中	2014. 2. 7	光で探るダイナミックな分子の姿	大島　康裕　教　　授
新香山中	2014.12.16	電磁誘導・超伝導を体験しよう	中村　敏和　准 教 授
竜海中	2018.10.16	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

4-4-6　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。なお，2018 年度より，研究グループによる受け入れを開始した。

年度	受入件数	参加者数	体験受入機関名
2007	5	10	岡崎市立甲山中学校，愛知県立豊田西高等学校，岡崎市立竜海中学校，豊橋市立中部中学校，岡崎市立竜南中学校
2008	4	12	岡崎市立甲山中学校，豊川市立音羽中学校，岡崎市立六ツ美中学校，岡崎市立竜南中学校
2009	4	8	岡崎市立甲山中学校，豊川市立音羽中学校，岡崎市立東海中学校，岡崎市立竜南中学校
2010	4	9	岡崎市立甲山中学校，岡崎市立竜海中学校，岡崎市立竜南中学校，豊田市立高岡中学校
2011	6	7	豊田市立猿投台中学校，岡崎市立竜海中学校，岡崎市立常盤中学校，岡崎市立額田中学校，岡崎市立竜南中学校，豊田市立藤岡中学校
2012	4	12	岡崎市立竜海中学校，岡崎市立岩津中学校，岡崎市立美川中学校，岡崎市立額田中学校
2013	5	10	豊田市立上郷中学校，岡崎市立常磐中学校，岡崎市立北中学校，岡崎市立河合中学校，岡崎市立竜海中学校
2014	5	7	豊田市立上郷中学校，岡崎市立竜海中学校，岡崎市立東海中学校，岡崎市立福岡中学校，岡崎市立美川中学校
2015	4	8	岡崎市立翔南中学校，岡崎市立竜海中学校，岡崎市立東海中学校，岡崎市立竜南中学校
2016	6	8	岡崎市立北中学校，岡崎市立翔南中学校，岡崎市立城北中学校，高浜市立高浜中学校，豊田市立上郷中学校，豊田市立益富中学校
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
2018	8	13	豊田市立若園中学校，豊田市立上郷中学校，岡崎市立南中学校，岡崎市立竜海中学校，岡崎市立城北中学校，岡崎市立矢作北中学校 、岡崎市立美川中学校，岡崎市立額田中学校

4-4-7　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，2018 年には，水分子のシミュレーションに関する展示を行った。３次元映像を通して計算機中の水分子と対話できる本展示は老若男女を問わず大変好評であり，分子科学研究所の研究活動や後日開催の一般公開の宣伝として大変役立った。

(2) 未来の科学者賞

岡崎３機関では，2009年度より理科教育並びに科学の将来の発展に資することを目的とし，豊かな発想や地道な努力の積重ねなど特色のある自由研究を行った児童又は生徒を褒賞するため，岡崎市小中学校理科作品展に出展された自由研究課題の中から，岡崎３機関の各研究所の研究者により構成される選考委員会により優秀者を選出し，未来の科学者賞を授与している。賞の運営は一般公開を行う研究所が持ち回りで行っており，分子科学研究所においては，2012年10月20日の一般公開日に，選考委員会により選出された小学生８名，中学生２名の計10名，2015年10月17日の一般公開日に，選考委員会により選出された小学生７名，中学生４名の計11名，2018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６名，中学生４名の計10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。2018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

３年に一度の大イベント，分子科学研究所一般公開を 2018 年 10 月 20 日（土）に開催した。今回は「分子の謎解き大迷宮～君は分子研を脱出できるか ?! ～」をテーマとし，分子研の各施設や研究室の公開，研究紹介，実験体験，クイズ大会（分子研王選手権），市民公開講座等を行った。事前の積極的な広報活動が功を奏し（チラシが非常に有効だった），今回はこれまでにない多数の皆様（市民公開講座のみの参加者を除き 3,878 名）にご参加頂いた。

今回の一般公開では，これまでにない初めての試みをいくつか行った。まず，以前は各研究グループ単位で行っていた研究紹介，実験体験のブースを研究領域ごとに整理し，「理論計算の部屋」，「光の部屋」，「物質・エネルギーの部屋」，「生命の部屋」の４つとした。また，岡崎高校スーパーサイエンス部の生徒の皆さんが取り組んでいる研究の成果を発表して頂いた。岡崎高校の皆さんには，今回初めて開催したクイズ大会の当日運営にも協力して頂いた。さらに岡崎市役所の協力のもと，岡崎グッズ売り場の出店，およびペーパークラフトの提供を行って頂いた。前回に続き，オカザえもんも駆けつけて盛り上げてくれた。市民公開講座では，家戸敬太郎先生（近畿大学水産研究所教授）をお招きしご講演頂いた。「海を耕す！　近大マグロの完全養殖と最新の育種研究・ゲノム編集」というタイトルで，クロマグロの完全養殖に至るまでの研究の歴史等について，大変わかりやすく解説して頂いた。

回　数	実施月日	備　　考
第１回	1979.11. 9 (Fri)	創設記念一般公開
第２回	1980.11.15 (Sat)	
第３回	1981.11.14 (Sat)	３研究所同時公開
第４回	1985. 5.11 (Sat)	10 周年記念一般公開
第５回	1988.11. 5 (Sat)	入場者　1700 人
第６回	1991.10.26 (Sat)	入場者　1974 人
第７回	1994.11.12 (Sat)	入場者　2700 人
第８回	1997.11.15 (Sat)	入場者　2400 人
第９回	2000.10.21 (Sat)	入場者　1183 人
第 10 回	2003.10.25 (Sat)	入場者　1600 人
第 11 回	2006.10.21 (Sat)	入場者　2058 人
第 12 回	2009.10.17 (Sat)	入場者　1346 人
第 13 回	2012.10.20 (Sat)	入場者　1126 人
第 14 回	2015.10.17 (Sat)	入場者　2600 人
第 15 回	2018.10.20 (Sat)	入場者　3878 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） 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	静岡県立榛原高等学校 宇宙航空研究開発機構（JAXA）　ほか
2018	11	361	愛知県弁護士会,星城高等学校,愛知教育大学（化学コース）， 東国大学附属女子高等学校（韓国），日本工学アカデミー， 東海大付属高輪台高校，GENY 財団科学キャンプ（韓国）， 浜松南高等高校，自動車技術会，三島小学校，中部大学

（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
2018	3	29

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）

（2018 年）

ホームページ公開日	タイトル	担当研究部門
2018. 5.24	上下の環境が異なる特定元素のみをマッピングする基礎技術を実証　X 線自由電子レーザーによる高調波発生を利用	極端紫外光研究施設／技術課
2018. 6. 1	凝縮したタンパク質を再生する分子機械 ClpB の動的な構造変化の可視化に成功	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門
2018. 6.26	有機超伝導体における光の増幅現象を発見　レーザーの原理で超伝導の機構を解明する	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
2018. 7. 3	有機半導体の伝導機構の解明へ前進 分子ナノ構造を制御して HOMO と LUMO の軌道分裂の直接観測に成功―有機 EL 素子や有機太陽電池など，n 型有機半導体の性能向上へ―	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門
2018. 7.17	世界初！　ベクトル放射光ビームの生成に成功！ ～物質・生命科学研究の新たな展開に期待～	極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門
2018. 8.22	X 線の 2 光子吸収分光法を実現―高温超伝導体をはじめとする遷移金属化合物の d 軌道の理解に貢献―	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門
2018. 9.14	ハチミツを加熱加工すると，免疫賦活作用が出現する ～加熱加工ハチミツ摂取で細菌感染が予防できる可能性～	生命創成探究センター 生命分子動秩序創発研究グループ
2018. 9.19	キチン加水分解酵素は熱ゆらぎを利用して一方向に動きながら結晶性バイオマスを分解する分子モノレールカーである	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門
2018. 9.28	13 個の金属原子を三次元型にサンドイッチした有機金属ナノクラスターの開発に成功	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
2018.11.28	光学顕微鏡で原子レベルの位置決定精度を達成	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門
2018.12. 3	モータータンパク質と ATP の結合を 1 分子で可視化することに成功―ナノ構造に閉じ込めた光でモータータンパク質の仕組みに迫る―	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門
2018.12.26	アミロイドβペプチドはなぜ細胞膜表面で凝集しやすいのか？ ～アルツハイマー病の原因物質が形成される仕組みを解明～	生命創成探究センター 生命分子動秩序創発研究グループ

新聞報道

（2018 年）

報道日	記事内容	新聞名	該当研究部門
2018. 1.29	宇宙で挑む　金井さんの滞在報告	産業経済新聞	生命創成探究センター 生命分子動秩序創発研究グループ
2018. 3.23	平成 30 年度　学会各賞・助成	科学新聞	生命創成探究センター 生命分子動秩序創発研究グループ
2018. 4.20	科学技術分野の文部科学大臣表彰（研究部門）	科学新聞	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2018. 4.20	科学技術分野の文部科学大臣表彰（若手研究者賞）	科学新聞	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

2018. 5.15	高強度レーザーの研究成果など講演	東海愛知新聞	メゾスコピック計測研究センター 繊細計測研究部門
2018. 5.24	化学会　初の女性会長	読売新聞	所長
2018. 5.24	超分子化学　日本の研究に注目	朝日新聞	特別研究部門
2018. 5.24	化学会会長に川合氏　女性初	日刊工業新聞	所長
2018. 5.25	化学会会長に川合氏　創立 140 年で初の女性	日経産業新聞	所長
2018. 6. 1	東大・藤田教授にウルフ賞　化学部門　ノーベル賞の前哨戦	中日新聞	特別研究部門
2018. 6. 1	日本化学会会長に川合眞紀氏	科学新聞	所長
2018. 6. 2	東大・藤田教授　ウルフ賞授賞式　化学部門，イスラエルで	日本経済新聞	特別研究部門
2018. 6. 6	女性初の日本化学会長	中日新聞	所長
2018. 6. 8	凝集タンパク質を再生するリング状 ClpB の構造変化	科学新聞	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門
2018. 7.18	レーザー活用で説明会　浜松工業技術支援センター	静岡新聞	研究所
2018.10. 5	キチン加水分解酵素を可視化　運動の 1 分子観測成功　位置決定精度と時間分解能両立	科学新聞	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門
2018.10.13	身近な科学感じて　20 日岡崎　分子研が一般公開	東海愛知新聞	研究所
2018.10.18	研究を身近に感じて　岡崎の分子研が 20 日に施設公開	中日新聞	研究所
2018.10.19	最新スパコンなど間近に　分子科学研を一般公開　岡崎で 20 日	朝日新聞	研究所
2018.10.21	最先端研究に圧倒　分子研で一般公開イベント	東海愛知新聞	研究所
2018.10.23	先端科学を体験　分子研一般公開	読売新聞	研究所
2018.11. 4	量子力学テーマ　技術の進歩学ぶ　浜松コンファレンス	中日新聞	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2018.11. 4	量子力学の謎　解説　浜松コンファレンス　大森教授が講演	静岡新聞	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2018.12.14	原子レベルの位置決定精度　光学顕微鏡で達成　分子研と生理研	科学新聞	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門
2018.12.21	モータータンパク質と ATP の結合　1 分子で観察　京大，分子研など手法開発	科学新聞	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門

その他

（2018 年）

発行日	記事内容	掲載誌等名	該当研究部門
2018. 7.20	量子科学技術（光・量子技術）分野における研究開発の推進	2018 年版ものづくり白書	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2018.10.15	次世代市場トレンド：最新量子技術シリーズ（4）量子シミュレーション	月刊誌「Yano E plus」	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門

5．各種事業

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

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

（1）『先端的な研究を推進する拠点事業』の UVSOR 共同利用事業（放射光分子科学），エクストリームフォトニクス連携事業（レーザー分子科学）に関連するものとして，光創成ネットワーク研究拠点プログラム（分子科学研究所は分担）を平成 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	桝　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 のトリプルレゾンナスの修理，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ミクロ天秤更新事業
	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～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（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到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），機構内の教授が併任する分野長（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を呼び，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
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 小板谷貴典助教	UVSOR·光分子科学 物質分子科学 物質分子科学

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），スピンコーター（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）］	山本浩史室長 青山正樹技術職員 高田紀子技術職員	装置開発室 装置開発室 装置開発室
	３次元光学プロファイラーシステム（Nexview） ３次元光学プロファイラーシステム（ZYGO Nexview）は，非接触で表面の３次元形状測定，表面粗さ測定を行う装置。つなぎ合わせ機能により□ 46.5 mm 範囲の３次元形状測定や，Ra0.1 nm 以下の超精密研磨面の測定, 透明膜の厚さ測定（1 μ m 以上）などが可能。X-Y ステージ可動範囲 200 mm × 200 mm。Z 軸可動範囲 100 mm ［精密温度調整機能付クリーンブース］	山本浩史室長 青山正樹技術職員 近藤聖彦技術職員 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	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）］	横山利彦センター長 石山　修特任研究員	機器センター 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）］	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	機器センター 機器センター UVSOR
単結晶Ｘ線回折	Rigaku 社製 MERCURY CCD-1・R-AXIS IV，MERCURY CCD-2 ［Ｘ線源 Mo, 50 kV・100 mA (5 kW)，検出器 MERCURY CCD, 温度可変 100–400 K］	横山利彦センター長 藤原基靖技術職員	機器センター 機器センター
単結晶Ｘ線回折（微小結晶用）	微小結晶／ Rigaku HyPix-AFC ［Mo 線源，半導体検出器，N_2/He ガス吹付温度可変装置］	横山利彦センター長 岡野芳則技術職員	機器センター 機器センター

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, RhKα	横山利彦センター長 上田　正技術職員	機器センター 機器センター
機能性材料バンド構造顕微分析システム	静電半球型アナライザーを用いた機能性材料の価電子バンド構造測定システム。ディフレクターを使用することで２次元波数空間マッピングを行うことが可能。薄膜作製用真空チェンバー，試料表面処理チェンバー（電子衝撃加熱，通電加熱，Ar^+ スパッタが可能），電子線回折装置，劈開機構を利用することができるため，様々な機能性材料の測定に対応。	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-Kα 線利用）を提供。施設利用として気軽に利用いただける。 ［電子分光器 Omicron 社製 EA-125（ツインアノードＸ線源）］	横山利彦センター長 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（± 7 T，2–400 K，300–800 K，DC），QuantumuDesign 社製 MPMS-XL7（± 7 T，2–400 K，DC&AC）］	横山利彦センター長 藤原基靖技術職員 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 cm^{-1}，分解能：面内 1 μ m，深度 2 μ m，3.2–500 K）］	横山利彦センター長 山本浩史教授 賣市幹大技術職員	機器センター 協奏分子センター 協奏分子センター
FT 遠赤外分光	FT-IR 分光器による遠赤外スペクトル測定支援。格子フォノン，分子ねじれ振動などの集団運動や分子間水素結合，配位結合等の弱い結合による光学モードを検出。 ［Bruker 社製 IFS66v/S 10–12000 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}H-^{13}C-^{15}N 三重共鳴測定に対応。 ［Bruker AVANCE 800US（溶液，クライオプローブ）］	横山利彦センター長 加藤晃一教授 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}H-^{13}C-^{15}N 三重共鳴実験まで対応。 ［Bruker AVANCE 600（固体）］	横山利彦センター長 西村勝之准教授	機器センター 物質分子科学
600MHz 溶液 NMR	^{1}H 600MHz 溶液 ［JEOL JNM-ECA600］	横山利彦センター長 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］	椴山儀恵准教授 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 小板谷貴典助教	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　斉尾　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	慶応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_3 of NO over Anatase-TiO_2 (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	装置開発	広島大学大学院理学研究科	井口　佳哉
空気酸化による金属－フェノキシル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
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 $Ln_{1-x}Sr_{1+x}LiH_{2-x}O_2$ 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方性に関する研究	600 固体	大阪大学産業科学研究所	戸部　義人
極微量ドープ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院	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	東京工業大学理学院	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
ルブレン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 $CH_3NH_3PbI_3$ 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（$NbSe_2$）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_3 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)$_2$] (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	髙野　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	奈良女子大学研究院自然科学系	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
希土類金属ドープ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－グループ 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
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　舜徹
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科	今田　早紀
Fe_2VAl 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_3Sn 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	静岡大学学術院工学領域	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	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
FeF_3 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
新規ポルフィリン，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
$[Pt(dmit)_2]_2$ 塩の軌道準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定	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	ESR E500	広島大学大学院理学研究科	安倍　学
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	微小結晶	千葉大学グローバルプロミネント研究基幹	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	低 SEM	東北大学大学院環境科学研究科	関　亜美
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	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	MALDI	山梨大学大学院総合研究部	森長　久豊
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	ESR EMX ESR E500	名古屋市立大学大学院薬学研究科	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	ESR E500	山梨大学大学院医工農学総合教育部	久保田恒喜
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	円二色性	東京理科大学理学部	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	微小結晶	九州大学先導物質化学研究所	中西　匠
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	ESR E680 ESR E500	京都大学国際高等教育院	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	ESR E680	大阪市立大学理学部	鐘本　勝一
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	XMCD	東京大学物性研究所	宮町　俊生
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	マイクロストラクチャー	名古屋大学未来社会創造機構	宇理須恒雄
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_2の分離・回収，貯蔵，触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用など，太陽光エネルギー，電気エネルギーや化学エネルギーにおいて中心的な役割を担う複雑で複合的な分子･物質過程に対する電子・分子レベルでの全系シミュレーションを行い，実験研究者，産業界と連携して，高効率，低コスト，また環境に優しく持続可能なエネルギー新規基盤技術を確立する。

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

(1)　サブ課題Ａ　新エネルギー源の創出・確保――太陽電池，人工光合成

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

(2)　サブ課題Ｂ　エネルギーの変換・貯蔵――燃料電池，二次電池

第一原理電子状態理論に基づく電極反応の計算と分子動力学法に基づく電解質，セパレータの計算を統合させ，個々の部材の性能に加えて，システムとしての二次電池の充放電曲線や燃料電池の電流電圧曲線を予測し，信頼性の向上に貢献できる手法を確立する。この中で，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ミ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_2，高効率触媒

化学エネルギー創成から消費に至る過程において，メタンや CO_2 の分離･回収，貯蔵，触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用に関わる基盤技術を開発する。そのために，電子状態理論と分子動力学法を基盤とした統合シミュレーション技術を構築し，実用的な物質設計に向け分子レベルからの指針を供する。ハイドレートの有効利用，高効率触媒の開発，CO_2 の回収・分離に貢献することにより，エネルギー多消費型工業プロセスを革新する。

(4) 基盤アプリケーションの設計開発

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

5-5-3 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･情報セキュリティー･人工知能などに革命を起こし得るため，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，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も進めてきた自動車排ガス浄化触媒と，ナトリウムイオン電池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し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随ばかりでなく活性化しており，分子科学研究所においても，21 世紀にふさわしい新たな国際共同研究拠点を構築していくことが必要となっている。このような状況の中，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「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 とデュアルデグリー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した。

(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拡げている。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	ｽｳｪｰﾃﾞﾝ	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。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，分子研にポスドクとして戻ってくる学生もおり，分子研・総研大の研究力強化と国際化に寄与している。今後は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る。

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

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

平成 25 年度より様々な財源をもとに短期外国人研究者招へいプログラムを始めることで，従来の国際協力研究に加え，国際施設利用（協力研究的であり，単なる設備利用はない）にも拡大した結果，平成 25 年度 35 件，平成 26 年度 31 件，平成 27 年度 40 件，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_1 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_3-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 ($Pb(SCN)_2$) for $FA_{0.9}Cs_{0.1}PbI_3$ 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	ツ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，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 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，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。

6．研究活動の現状

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
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
2017.9. ～ 2018.8.	2018	178	52

6-2　理論・計算分子科学研究領域

理論分子科学第一研究部門

斉　藤　真　司（教授）（2005 年 10 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：物理化学，理論化学

A-2) 研究課題：

a) 凝縮系反応に関する理論研究：酵素反応における構造励起状態と非平衡的高速遷移

b) 凝縮系反応に関する理論研究：不均一・動的に揺らぐ構造変化・反応の一分子解析

c) 生体分子系の機能発現に関する理論研究：時計タンパク質 KaiC における概日リズム

d) 生体分子系の機能発現に関する理論研究：FMO タンパク質における励起エネルギー移動

e) 熱的物性発現・ガラス転移に関する理論研究：水のガラス転移温度，Kauzmann 温度

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 酵素反応は高い触媒活性と選択性を示す。酵素反応を凝縮系反応の一例として考え，cis-trans 異性化を例に如何に動力学が酵素反応に関わっているかについて解析を行っている。我々は，遷移状態と始状態と終状態を繋ぐ反応性軌道により反応動力学を解析し，始状態の平衡分布では見出すことのできない構造励起状態を経て非熱平衡かつ高速に反応が進行することを明らかにした。本解析で明らかになった動的特徴は，過冷却液体など稀に起こる変化に見られる構造変化を想起させるものであり，解析を行ったタンパク質に限定されるものではなく，酵素反応の一般的特徴と考えられる。

b) 化学反応に関する研究として，一分子速度論の観点から凝縮系の構造変化や化学反応における不均一かつ動的な揺らぎについても解析を進めている。とくに，確率過程論に基づき系の動的情報の解析手法を開発するとともに，その手法および超長時間の分子動力学計算のデータに基づき水溶液中の BPTI タンパク質の構造変化動力学の解析を行っている。また，この研究に関連し，ポリセオナミド B（pTB）におけるイオン透過機構の解明に向け，pTB のポテンシャルパラメータを決定し，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，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。近年，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や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などを進めている。

d) 生体分子系の機能発現の解析として，励起エネルギー移動（EET）の解析も行っている。光合成系では，吸収された光エネルギーが EET により効率よく活性中心へと伝達される。様々な実験にも関わらず，単純なタンパク質系においてもその高効率 EET の分子機構は明らかになっていない。我々は，高効率かつ高精度で基底・励起状態の動力学計算手法を開発し，Fenna-Matthews-Olson（FMO）タンパク質を例に EET の解析を行った。その結果，複数の緩和経路上のいくつかの色素分子が異なる物理起源により大きく揺らぐことにより，頑強かつ高速な EET が実現していることが明らかになってきた。

e) 水を例に熱力学的性質の動的起源について解析を進めている。常温付近で見られる様々な熱力学異常性は融点以下でより顕著となり，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。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・動力学の系統的な解析を行い，室温状態で支配的な局所的高密度状態が 190 K 以下で不安定化しスピノダル分解的挙動により，構造・動的転移が起こることを解明した。さらに，低温においても構造変化を引き起こす特定の水素結合欠陥および水の低いガラス転移温度の物理的起源も明らかにした。

B-1) 学術論文

K. SHIRAGA, K. TANAKA, T. ARIKAWA, S. SAITO and Y. OGAWA, "Reconsideration of the Relaxational and Vibrational Line Shapes of Liquid Water Based on Ultrabroadband Dielectric Spectroscopy," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 26200–2609 (2018). (Selected as 2018 PCCP HOT Articles)

S. SAITO, B. BAGCHI and I. OHMINE, "Crucial Role of Fragmented and Isolated Defects in Persistent Relaxation of Deeply Supercooled Water," *J. Chem. Phys.* **149**, 124504 (8 pages) (2018).

M. OKUDA, M. HIGASHI, K. OHTA, S. SAITO and K. TOMINAGA, "Theoretical Investigation on Vibrational Frequency Fluctuations of SCN-Derivatized Vibrational Probe Molecule in Water," *Chem. Phys.* **512**, 82–87 (2018).

M. KALATHINGAL, T. SUMIKAMA, T. MORI, S. OIKI and S. SAITO, "Structure and Dynamics of Solvent Molecules inside Polytheonamide B Channel in Different Environments: A Molecular Dynamics Study," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 3334–3348 (2018).

P. PONGPRAYOON and T. MORI, "Critical Role of Dimer Formation in Monosaccharide Binding to Human Serum Albumin," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 3249–3257 (2018).

B-4) 招待講演

S. SAITO, "Supercooled water: Structure, dynamics, thermodynamics, and glass transition," Symposium on Spectroscopic and computational studies of complex chemical systems at different time and length scales, Indian Institute of Technology Kanpur, Kanpur (India), December 2018.

S. SAITO, "Supercooled water: Structure, dynamics, thermodynamics, and glass transition," Conference on Local Structure and Dynamics of Hydrogen Bonds in Water: Supercooled Water and Binary Mixture, Indian Institute of Science, Bangalore (India), December 2018.

T. MORI, "Hierarchy and heterogeneity in protein folding and enzyme catalysis," 2nd workshop on Advances in Theory and Computation of Complex Systems—Biological Systems, Nanjing (China), December 2018.

S. SAITO, "Excitation energy transfer in photosynthetic protein FMO," Japan-Indo Seminar on Frontiers in Molecular Spectroscopy: From Fundamentals to Applications in Chemistry and Biology, Kobe University, Kobe (Japan), October–November 2018.

S. SAITO, "Supercooled water: Structure, dynamics, and glass transition," Energy Landscape 2018, Kalamata (Greece), September 2018.

S. SAITO, "Supercooled water: Structure and dynamics," 1st UJN-SKKU-IMS Symposium on Chemistry and Materials, University of Jinan, Jinan (China), August 2018.

S. SAITO, “Supercooled water: Structure, dynamics, and Kauzmann temperature,” 7th JCS Symposium, Czech Academy of Sciences, Prague (Czech), May 2018.

S. KODA and S. SAITO, “Circadian rhythm of Kai system: A reaction model considering reactions and conformational changes,” BK21plus Symposium, Chungbuk National University, Cheongju (Korea), May 2018.

甲田信一，斉藤真司,「時計タンパク質KaiABCに関する反応モデル構築および素過程の協奏関係の理論的推定」, 第77回尾張コンプレックスセミナー , 名古屋, 2018年2月.

B-6) 受賞，表彰

森　俊文, 分子科学会奨励賞 (2018).

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–).

分子科学会幹事 (2018–).

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).

4th China-Japan-Korea Tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry, Organizing Committee (2019).

Pacifichem2020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).

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).

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–).

東京大学物性研究所計算物質科学研究センター運営委員会委員 (2016–).

その他

National Research Foundation of Korea 審査員 (2015–2017).

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

National Academy of Sciences in India 評価員 (2018).

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

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

計算科学研究機構人材育成タスクフォースWG 委員 (2015–).

計算基礎科学ネットワーク拠点分子科学分野委員 (2012–).

計算物質科学スパコン共用事業運営委員会委員 (2015–).

総合研究大学院大学教育研究委員会委員 (2015–).

総合研究大学院大学インターンシップ制度検討分科会委員 (2015–).

B-8) 大学での講義，客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「生体分子シミュレーション入門」, 2018年12月11日–12日.

B-10) 競争的資金

二国間交流事業日印共同研究,「水の局所構造と水素結合ダイナミクス：過冷却水と二成分液体」, 斉藤真司 (2018年度–2019年度).

科研費若手研究(B),「時計タンパク質における時空間階層運動の協奏が創る機能発現機構の理論的解明」, 甲田信一 (2018年度–2020年度).

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

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

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

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

科研費基盤研究(B),「生体分子の構造遍歴ダイナミクスと機能発現の分子機構の理論的解明」, 斉藤真司 (2013年度–2015年度).

科研費挑戦的萌芽研究,「生体分子の構造変化に伴う状態遷移ダイナミックスの解析手法の開発とその応用」, 斉藤真司 (2011年度).

二国間交流事業日印共同研究,「水および水溶液の構造とダイナミクス：理論と実験」, 斉藤真司 (2010年度–2011年度).

科研費基盤研究(B),「線形・非線形分光シミュレーションによる緩和および反応ダイナミクスの解明」, 斉藤真司 (2010年度–2012年度).

科研費特定領域研究(計画研究),「空間・時間不均一ダイナミックス理論の構築」, 斉藤真司 (2006年度–2009年度).

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。揺らぎや緩和過程に関するこれらの理論研究を踏まえ，幅広い時空間スケールをもつ凝縮系の複雑な揺らぎの中から，如何に生体分子系や(過冷却)液体等における化学反応や機能・熱力学的性質が生み出されるかについて研究を進めている。今後も，分子シミュレーションや確率過程論を利用し，生体分子系における化学反応の描像の獲得，生体分子系の構造変化やイオンチャネルを例に一分子反応論の観点から凝縮系における反応の理解に向けた研究を推進する。また，生体分子の機能に関する解析として，時計タンパク質KaiCの概日リズムの発現に関する原子・分子の微視的レベルから数理モデルを用いた巨視的レベルでの研究を継続して進める。さらに，我々が独自に開発してきた方法論により生体分子系の励起エネルギーおよびその揺らぎの解析が可能となり，FMOタンパク質における高効率な励起エネルギー移動の機構が解明されつつある。今後，この研究を完成させるとともに，より複雑な系における励起エネルギー移動への展開を図る。以上の研究に加え，水の特異的物性発現の起源やガラス転移に関する研究も進めている。最近我々が開発した量子力学に基づく比熱やエントロピーの複素感受率の理論解析手法により，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が明らかになってきた。この研究を完成させるとともに，さらに最近我々が報告した結果の展開として，欠陥の運動の観点から，過冷却液体やアモルファスの構造変化動力学の理論的解明を進める。

柳　井　　毅（准教授）（2007 年 1 月 1 日～ 2018 年 3 月 31 日）*)

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，相関した有効ハミルトニアンを部分空間の状態基底で表す。その有効ハミルトニアンを対角化することで状態間の摂動的電子相関を有効に記述することができる。本理論は，高性能な並列計算プログラムとして実装されており，大規模系への高い適用性を有する。

B-1) 学術論文

J. WEN, T. UTO, J. CHALUPSKÝ, D. L. CASHER, G. RAABE, J. FLEISCHHAUER, T. YANAI, H. TSUJI, K. KOMATSU and J. MICHL, "Magnetic Circular Dichroism of an Unaromatic Planar [8]Annulene," *J. Phys. Org. Chem.* **31(8)**, e3854 (16 pages) (2018). DOI: 10.1002/poc.3854

R. D. REYNOLDS, T. YANAI and T. SHIOZAKI, "Large-Scale Relativistic Complete Active Space Self-Consistent Field with Robust Convergence," *J. Chem. Phys.* **149**, 014106 (8 pages) (2018).

R. Y. SHIMIZU, T. YANAI, Y. KURASHIGE and D. YOKOGAWA, "Electronically Excited Solute Described by RISM Approach Coupled with Multireference Perturbation Theory: Vertical Excitation Energies of Bioimaging Probes," *J. Chem. Theory Comput.* **14**, 5673–5679 (2018).

B-4) 招待講演

T. YANAI, "DMRG-Based Multistate Multireference Perturbation Theory," ICQC 2018 Satellite Meeting "Theoretical Studies of Magnetic Systems: Methodological Developments and Applications," Toulouse (France), June 2018.

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).

柳井　毅, 第15回日本学術振興会賞 (2018).

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。

＊）2018 年 4 月 1 日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

飯　田　健　二（助教）（2013 年 12 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：量子力学，電気化学，統計力学

A-2) 研究課題：

a) ヘテロ界面電子系で発現する光電子機能の理論

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 異種物質が接する事で構成されるヘテロ界面系は，トランジスタやダイオード等の開発に関連してこれまで広く研究が行われてきた。近年では，遷移金属ダイカルコゲナイド等の二次元層状物質を用いて光電子デバイスの開発が盛んに進められており，その機能を設計・制御するために原子レベルの知見が求められている。そこで我々は，第一原理計算プログラム SALMON を用いて，MoS_2-Graphene ヘテロ構造の光誘起電子ダイナミクスを計算した。それにより，光励起に伴い Graphene から MoS_2 へ電子が移動するという実験事実と対応する結果が得られた。そこでこの電子移動の機構を解析したところ，原子レベルの厚みを持つ界面系に特有のものであることが明らかになった。

B-1) 学術論文

M. NODA, S. A. SATO, Y. HIROKAWA, M. UEMOTO, T. TAKEUCHI, S. YAMADA, A. YAMADA, Y. SHINOHARA, M. YAMAGUCHI, K. IIDA, I. FLOSS, T. OTOBE, K.-M. LEE, K. ISHIMURA, T. BOKU, G. F. BERTSCH, K. NOBUSADA and K. YABANA, "SALMON: Scalable Ab-initio Light–Matter simulator for Optics and Nanoscience," *Comput. Phys. Commun.* **235**, 356–365 (2018).

K. IIDA, M. NODA and K. NOBUSADA, "Photoinduced Electron Transfer at the Interface between Heterogeneous Two-Dimensional Layered Materials," *J. Phys. Chem. C* **122**, 21651–22658 (2018).

B-4) 招待講演

K. IIDA, "Control of Photoinduced Electron Transfer in MoS_2-Graphene Heterostructure by Applied Bias Voltage," International Workshop on Nanoscale electron–phonon interactions via energy dissipation and fluctuation, Tokyo (Japan), July 2018.

K. IIDA, "Photoinduced Electron Dynamics of Heterointerface Systems Simulated by Massively Parallel Calculations," International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations, Tsukuba (Japan), November 2018.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「可視プラズモニクスの新展開：第2世代材料の学理構築」, 飯田健二（研究分担者）(2018年–2021年).

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) 量子散逸系の動力学理論に基づく凝縮相分子系における動的過程の理論研究

b) 光・量子科学技術に基づく複雑分子系の観測と制御の理論研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) ヘリカル構造を持つ分子系はスピン状態に依存した電荷輸送を示すことが報告されており，カイラル誘起スピン選択（CISS）効果として注目を集めている。しかし，スピン選択性の起源および詳細なスピン輸送機構に関して理解が不十分なままである。特に，分子系に付随するどのような要素がスピン選択性に影響を与えるかを明らかにすることは，今後の分子スピントロニクスの発展のために不可欠である。本研究課題では，量子コヒーレント伝導および分子性環境由来の古典ホッピング伝導の両過程の統一的取扱いを行うことで，CISS 効果の機構の理解を目的とした理論研究を推し進めている。特に実験で観測されているスピン分極の分子長及び温度依存性と整合性を持つよう理論解析を進めている。

緑色植物の光化学系 II（PSII）反応中心は紅色細菌の反応中心と類似の色素配置を持つが，PSII 反応中心の初期電荷分離過程は比較的よく理解されている紅色細菌のそれとは大きく異なることがこの 20 年で明らかになってきた。本研究課題では，初期電荷分離過程における色素分子の分子内振動とタンパク質環境の影響およびそれらの競合に着目し，PSII の電荷分離の様態とそれに関与する色素分子の構造の関係性について量子動力学理論と量子化学計算を組み合わせることにより解析した。重要な成果の一つして，全ての振動モードの寄与を考慮した場合には PSII の電荷分離速度に対するエネルギーギャップ依存性や温度依存性が見られなくなることを明らかにした。これは，PSII の電荷分離過程がタンパク質環境や外界変動に対して持つ頑健性を示唆している。

b) 天然光合成では太陽光フォトンを吸収することで種々の動的過程が引き起こされるが，光子統計など太陽光の性質は実験で用いられるレーザー光のそれとは大きく異なる。本研究課題では，太陽光を模倣する疑サーマル光源として「時間－周波数量子もつれ光子対」を用いた新規分光計測法について研究を進めている。時間－周波数量子もつれ光子対は自発的パラメトリック下方変換（SPDC）で生成されるが，光子対の一方を観測しない場合，他方の光子状態は熱放射と類似の量子状態・光子統計を示す。現在，光合成色素タンパク質複合体が吸収する可視光の周波数領域で，SPDC による周波数量子もつれ光子対が太陽光すなわち温度 6000 K の黒体輻射の性質，また，物質との相互作用をどの程度まで模倣できるのかを量子光学および量子動力学の理論に基づいて解析を進めている。

冷却原子系の分野を中心に注目を集める Floquet Engineering 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未開の物理を探索するための舞台を与える。本年度は，複数サイトから成る分子ネットワークにおける量子ダイナミクスではサイト間相互作用に伴う位相つまり Peierls 位相が重要な制御パラメータとなり得ることに着目し，Floquet Engineering を用いて Peierls 位相を制御し得ることを示した。さらに，分子ループ構造における電荷輸送を取り上げ，ループが持つべき Chiral 対称性が自発的に破られること，その帰結として外部電圧なしで流れる電流の誘起され得ることを示した。

B-1) 学術論文

Y. FUJIHASHI, M. HIGASHI and A. ISHIZAKI, “Intramolecular Vibrations Complement the Robustness of Primary Charge Separation in a Dimer Model of the Photosystem II Reaction Center,” *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 4921–4929 (2018).

A. KATO and A. ISHIZAKI, “Non-Markovian Quantum-Classical Ratchet for Ultrafast Long-Range Electron–Hole Separation in Condensed Phases,” *Phys. Rev. Lett.* **121**, 026001 (5 pages) (2018).

N. T. PHUC and A. ISHIZAKI, “Control of Excitation Energy Transfer in Condensed Phase Molecular Systems by Floquet Engineering,” *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 1243–1248 (2018).

B-4) 招待講演

A. ISHIZAKI, “Photophysical quantum dynamics of light harvesting processes in photosynthetic and photovoltaic systems,” 10th Asian Photochemistry Conference, Howard Civil Service International House, Taipei (Taiwan), December 2018.

石﨑章仁,「量子散逸系として見る光合成光捕集におけるダイナミクス」, 応用物理学会量子エレクトロニクス研究会, 上智大学軽井沢セミナーハウス, 長野県北佐久郡, 2018年12月.

石﨑章仁,「HFSP2017若手研究者グラント」, HFSP 説明会, 熊本大学, 熊本県熊本市, 2018年 10月.

石﨑章仁,「Intramolecular vibrations complement robustness of the primary charge separation in Photosystem II reaction center」, 第 56回日本生物物理学学会年会, 岡山大学, 岡山県岡山市, 2018年 9月.

石﨑章仁,「量子散逸系としてみる光捕集系：PSII 反応中心における初期電荷分離, 有機太陽電池における電荷再結合」, 2018年光化学討論会, 関西学院大学, 兵庫県西宮市, 2018年 9月.

A. ISHIZAKI, “Molecular encryption and processing of information,” 第 14回日独先端科学シンポジウム, 京都ブライトンホテル, 京都府京都市, 2018年 9月.

石﨑章仁,「量子散逸系としてみる光捕集系におけるエネルギー移動・電荷分離反応」, 第 58回生物物理若手の会夏の学校, 岐阜県岐阜市, 2018年 8月.

A. ISHIZAKI, “Effects of dephasing upon quantum dynamical phenomena in condensed phase molecular processes,” Workshop on quantum effects in biological systems, Vilnius (Lithuania), July 2018.

石﨑章仁,「量子開放系として見る光合成光捕集系：ダイナミクスと光学応答」, 量子科学技術研究開発機構高崎量子応用研究所セミナー , 高崎量子応用研究所, 茨城県那珂郡東海村, 2018年 3月.

石﨑章仁,「量子開放系として見る光合成光捕集系：ダイナミクスと光学応答」, 一般社団法人レーザー学会学術講演会第 38回年次大会, 京都市勧業館みやこメッセ, 京都府左京区, 2018年 1月.

石﨑章仁,「量子散逸系としてみる光捕集系におけるエネルギー移動・電荷分離」,「革新的光物質変換」第 1回公開シンポジウム, 東京工業大学, 東京都目黒区, 2018年 1月.

B-6) 受賞, 表彰

石﨑章仁, 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).

石﨑章仁, 第 18回サー・マーティン・ウッド賞 (2016).

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

石﨑章仁, 第 10回凝縮系科学賞 (2015).

石﨑章仁, 日本物理学会第 10回若手奨励賞 (2015).

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 (2017–2018).

日本化学会東海支部常任幹事 (2017–2018).

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

東京理科大学理学部第二部,「生命を支える光—光合成の物理と化学—」, 2018年 9月 29日.

総合研究大学院大学物理科学研究科,「理論化学（後半，統計力学）」, 2018年 7月 5日–6日.

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」, 石﨑章仁 (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, M. Johnson and A. Ishizaki (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」, 石﨑章仁 (2013年–2017年).

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

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

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

C)　研究活動の課題と展望

生体及び有機物質系における励起子及び電荷移動などの動力学過程は，周囲の溶媒，タンパク質，分子の核運動等の影響を受けることによって多様かつ頑健な機能を生み出しており，その全容を明晰に理解することは物理学の最も魅力的な問題の一つである。このような複雑な相互作用により生ずる非自明な機能を理解するためには，各動力学過程における様々な要素の適切な理論的取り扱いが必要である。我々は，量子散逸系のダイナミクス理論を用い，または新たに発展させ，複雑な分子系における物理現象の本質的かつ簡明な理解を得ることを目指している。また同時に，最新の量子科学技術を適用することで，従来技術と比較してより詳細な分子系の情報を得ることが可能な手法の開発に向けて研究を続けている。

計算分子科学研究部門

江　原　正　博（教授）（2008 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：量子化学，理論化学，理論触媒化学，光物性科学

A-2) 研究課題：

a) 多発色団系・集積系の励起子分解解析法の開発と応用

b) 励起子相互作用に基づく近赤外光バイオプローブの理論解析

c) 電子共鳴状態の理論開発と凝縮系への展開

d) 不均一系触媒の理論解析：高効率アミド化反応の解明

e) 多孔性結晶の空間特性を利用した光反応の変換機構の理論解明

f) ４成分連結反応とクロスカップリング反応が競合する複雑系錯体触媒の理論解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 非対称分子系・集合系に特徴的な光学物性に円二色性（CD）や円偏光発光（CPL）がある。CD は蛋白質や生体分子等の立体構造の決定に利用され，CPL は生体プローブや次世代光学デバイスでの応用が期待される。多発色団系分子やその集積体は，高い発光量子収率を期待でき，有望な候補群である。しかし，CD や CPL の発現機構を解明することは容易ではなく，有用な解析法・設計法が期待される。本年度，励起子相互作用に基づいて CD と CPL の構造および物理的起源を分解・解析する方法を開発した。本方法は，多数の色素群から構成される分子系・集積系の CD および CPL の分割解析が可能であり，分子設計に有用な手法である。この方法を最近合成されたスルースペース共役オリゴマーに適用した。隣接する色素間の電気遷移双極子能率の相互作用が支配的であるが，電気・磁気遷移双極子能率の相互作用も無視できないことを明らかにした。さらに分子集合系の空間制御によって強い CPL を実現するための設計指針を提示した。

b) 核酸の蛍光イメージングは，細胞の機能解析などに広く活用されている。最近，近赤外領域で発光し，細胞内の複数の RNA を同時計測可能な ECHO プローブが開発された。ECHO プローブは，励起子相互作用に起因する発光制御の原理に基づいて設計され，標的 DNA および RNA への配位により強い発光を示す。この機能は蛍光色素二量体が形成する H 会合体に起因することが示唆されたが，その機構や定量性は明確でなかった。本研究では，ECHO プローブの蛍光色素の基礎的光物性を理論計算を用いて調査した。複数の H 会合体の局所安定構造を求めて光吸収・発光を検討し，強い蛍光発光は単量体に起因し，発光の抑制が H 会合体形成に基づくという機構を明確に示した。蛍光色素間のストークスシフトは理論計算で定量的に解析することに成功し，H 会合体形成によるダビドフ分裂は若干過大評価された。

c) 共鳴状態は準安定状態であり，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することができる。CAP 法では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エネルギーと寿命を求める。我々は，電子共鳴状態の計算法として独自の射影型 CAP/SAC-CI 法や ACCC SAC-CI 法を開発し，様々な形状の分子に適用できるボロノイ・ポテンシャルを開発した。本年度は，分子クラスターの共鳴状態における分子間相互作用の効果を検討した。とくにメタン，エタン，水分子とエチレンの共鳴状態との相互作用について詳細に検討した。ここで得られた知見に基づいて，

本理論の分子集合系や凝縮系への展開を開始した。

d) アミド化合物は医農薬品に広く利用されており，その効率的合成法の開発は極めて重要な課題である。カルボン酸やエステルとアミンからアミド縮合を行う触媒反応は，原子効率の高いアミド（環状イミド）合成法であるが，幅広い基質に対して有効かつ剛健な固体触媒は極めて少ない。最近，ニオビア表面（Nb_2O_5）が本反応に高い活性を示し，反応基質について高い一般性を持つことが実験的に見出された。本研究では，カルボン酸とアミンからアミド化合物を合成する反応について，周期的 DFT 法を用いてアルミナ・チタニア・ニオビア表面における触媒活性を解析した。その結果，触媒活性は伝導バンドの d- バンド中心や基質と活性点の軌道混成と相関しており，これらの要因によって，ニオビア表面が特に触媒活性が高いことを見出した。さらにニオビア表面が水やアミンに対して強い耐性を持つことを理論的に明らかにした。

e) これまで多孔性結晶の空間特性を用いて反応を制御した例は極めて少ない。最近，細孔表面に十種類の認識サイトを有する多孔性結晶 Metal-Macrocycle Framework（MMF）が開発され，この MMF 中で光照射によって反応基質の [2+2] 環化付加反応は起きず，空間特異的にオレフィン移動反応が進行することが見出された。本研究では，実験計測法とともに，この選択的光反応のメカニズムを理論計算によって検討した。光照射による Pd 活性種の生成機構および反応機構・反応経路について，実験結果と Pd-MMF モデル系の理論計算に基づいて解明した。また MMF 中で反応基質が適切に Pd 活性種に配位することを QM/QM（ONIOM）計算によって実証し，MMF の空間制御と光遮蔽効果によって [2+2] 環化付加が阻害されることを示した。

f) 安価な炭素資源を複数連結して付加価値の高い有機分子を効率よく作る方法は，現代社会を支える技術である。ニッケルやパラジウムを触媒に用いたブタジエンの二量化反応は C8 化合物の工業的生産手法として重要であるが，これまでの触媒では導入できる官能基に制限があった。本研究では，ブタジエン二量体に様々な炭素骨格を導入する手法を開発し，その触媒作用の詳細，特に強固な炭素－フッ素結合の切断過程を理論的に解明した。本課題で研究した触媒系は目的の４成分連結反応とクロスカップリング型の反応が競合し，選択性が微細なエネルギーで制御される。理論計算により競合する４成分連結反応およびクロスカップリング反応の複雑な触媒反応のメカニズムの全容を明らかにした。特に本触媒系は，柔軟な構造を持ち，多数の局所安定構造が存在するため高度な理論解析が必要となる。反応サイクルのみならず，置換基効果や速度論に関する実験結果を極めて良く説明することに成功した。また溶媒の配位が反応障壁を安定化し，従来切断が困難と考えられてきた強固な炭素－フッ素結合切断反応の鍵となることを明確に示した。イオン同士の位置が定まらないため，モデル構築が困難であったアニオンとカチオンが協働的に作用する反応系を適切に表現する理論計算モデルを提案した。

B-1) 学術論文

H. YONEZAWA, S. TASHIRO, T. SHIRAOGAWA, M. EHARA, R. SHIMADA, T. OZAWA and M. SHIONOYA, "Preferential Photoreaction in a Porous Crystal, Metal–Macrocycle Framework (MMF): Pd^{II}-Mediated Olefin Migration over [2+2] Cycloaddition," *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 16610–16614 (2018).

Y. MAEDA, Y. KONNO, M. YAMADA, P. ZHAO, X. ZHAO, M. EHARA and S. NAGASE, "Control of Near Infrared Photoluminescence Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes by Functionalization with Dendrons," *Nanoscale* **20**, 23012–23017 (2018).

P. HIRUNSIT, T. TOYAO, S. M. A. H. SIDDIKI, K. SHIMIZU and M. EHARA, "Origin of Nb_2O_5 Lewis Acid Catalysis for Activation of Carboxylic Acids in the Presence of Hard Base," *ChemPhysChem* **19**, 2848–2857 (2018). (Front Cover, p. 2804, Cover Profile p. 2809)

R. FUKUDA, S. SAKAI, N. TAKAGI, M. MATSUI, M. EHARA, S. SAKAKI, S. HOSOKAWA and T. TANAKA, "Mechanisms of NO–CO Reaction over Highly Dispersed Cuprous Oxide on γ-Alumina Catalyst Using Metal-Support Interfacial Site in the Presence of Oxygen: Similarity to and Difference from Biological Systems," *Catal. Sci. Technol.* **8**, 3833–3845 (2018).

T. IWASAKI, X. MIN, A. FUKUOKA, L. ZHU, R. QIU, T. YANG, M. EHARA, A. SUDALAI and N. KAMBE, "Ni-Catalyzed Dimerization and Hydroperfluoroarylation of 1,3-Dienes," *J. Org. Chem.* **83**, 9267–9277 (2018). [Highlighted in *Synfacts* **14(9)**, 968 (2018)]

A. JUNKAEW, S. NAMUANGRUK, P. MAITARAD and M. EHARA, "Silicon-Coordinated Nitrogen-Doped Graphene as a Promising Metal-Free Catalyst for N_2O Reduction by CO: A Theoretical Study," *RSC Adv.* **8**, 22322–22330 (2018).

S. KINOSHITA, Y. MIYAZAKI, M. SHIMADA, Y. ONITSUKA, H. KOHGUCHI, Y. INOKUCHI, N. AKAI, T. SHIRAOGAWA, M. EHARA, K. YAMAZAKI, Y. HARABUCHI, S. MAEDA, T. TAKETSUGU and T. EBATA, "Different Photoisomerization Routes Found in the Structural Isomers of Hydroxy Methylcinnamate," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 17583–17598 (2018).

K. TAKAGI, Y. YAMADA, R. FUKUDA, M. EHARA and D. TAKEUCHI, "ESIPT Emission Behavior of Methoxy-Substituted 2-Hydroxyphenylbenzimidazole Isomers," *New J. Chem.* **42**, 5923–5928 (2018).

T. SOMMERFELD, J. B. MELUGIN and M. EHARA, "Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water," *J. Phys. Chem. A* **122**, 2580–2586 (2018).

P. ZHAO, X. ZHAO and M. EHARA, "Theoretical Insights into Monometallofullerene Th@C_{76}: Strong Covalent Interaction between Thorium and Carbon Cage," *Inorg. Chem.* **57**, 2961–2964 (2018).

T. SHIRAOGAWA, M. EHARA, S. JURINOVICH, L. CUPELLINI and B. MENNUCCI, "Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems," *J. Comput. Chem.* **39**, 931–935 (2018).

T. IWASAKI, A. FUKUOKA, W. YOKOYAMA, X. MIN, I. HISAKI, T. YANG, M. EHARA, H. KUNIYASU and N. KAMBE, "Nickel-Catalyzed Coupling Reaction of Alkyl Halides with Aryl Grignard Reagents in the Presence of 1,3-Butadiene: Mechanistic Studies of Four-Component Coupling and Competing Cross-Coupling Reactions," *Chem. Sci.* **9**, 2195–2211 (2018). [Highlighted in *Synfacts* **14(3)**, 303 (2018)]

B-3) 総説，著書

江原正博,「クラスター触媒の理論研究：合金効果と担体効果」,「ナノ粒子・クラスター触媒の最前線」, *触媒（Catalysts and Catalysis）* **60(3)**, pp. 158–164 (2018).

B-4) 招待講演（* 基調講演）

M. EHARA, "Element Strategy for Catalysts and Batteries," SOKENDAI Asian Winter School, "Challenges for New Frontiers in Molecular Science: From Basics to Advanced Researches," Okazaki (Japan), December 2018.

M. EHARA, "Theoretical Approaches to Asymmetry: Photoreaction in MMF and Spectroscopy," The 2nd International Symposium on Coordination Asymmetry, Tokyo (Japan), November 2018.

M. EHARA, "Photophysical Properties of Functional Molecules Studied by Correlated Wavefunction Theory," Japan-India Mini Workshop, Kobe (Japan), November 2018.

M. EHARA, “Theoretical Chemistry for Complex Systems: Nanocluster and Heterogeneous Catalysts,” Pre-Conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis, Sapporo (Japan), August 2018.*

M. EHARA, “Theoretical Molecular Spectroscopy using SAC-CI: Collaboration with ATR-FUV Spectroscopy,” International Conference on Advanced Molecular Spectroscopy, Nishinomiya, Hyogo (Japan), July 2018.*

江原正博,「光機能分子の励起状態に関する理論的研究」, 第 3回キラルルミネッセンスセミナー , 北海道, 札幌, 2018年 8月.

江原正博,「担持クラスター触媒の理論・計算化学」, 第 56回触媒研究懇談会, 和歌山, 2018年 7月.

江原正博,「複雑系の理論・計算化学 : 光機能分子への応用」, 近畿大学第 14回光化学セミナー , 大阪, 2018年 7月.

江原正博,「金属微粒子触媒の理論化学」, 第 41回グリーンセミナー , 京都, 2018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).

江原正博, 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表彰 (2018).

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) (2017–2018).

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–).

触媒学会コンピュータの利用研究会世話人会委員 (2018–).

理論化学研究会世話人会委員 (2018–).

学会の組織委員等

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

VIIth Congress of International Society for Theoretical Chemical Physics, Organization Committee (2008).

第3回分子科学討論会実行委員 (2009).

The Vth Japan-Czech-Slovakia (JCS) Symposium on Theoretical Chemistry, Nara, Japan, Vice President, Organization Committee (2012–2013).

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

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

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

第 33回化学反応討論会 2017実行委員 (2016–2017).

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).

第 21回理論化学討論会実行委員 (2018).

第 13回分子科学討論会実行委員 (2018–2019).

Pacifichem 2020: Triangle of Heterogeneous Catalysis, Surface Science, and Theory, Corresponding Symposium Organizer (2018–2020).

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 (2016–2017).

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).

日本学術振興会外国人特別研究員（一般）書面審査員 (2017–2018).

科学技術振興機構（JST）専門評価委員 (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 “Next Generation Li and Na Rechargeable Batteries,” Guest Editor (2017–2018).

Journal of Computational Chemistry Japan, Special Issue of “Element Strategy for Catalysts and Batteries: Approach from Theoretical and Computational Chemistry,” Guest Editor (2018–2019).

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 (2012–2021).

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 (2016–2018).

量子化学ウィンタースクール世話人 (2011–2018).

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 (2015–2018).

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).

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 (2016–2018).

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 (2016–2018).

B-8) 大学での講義，客員

総合研究院大学院大学物理科学研究科,「理論化学」, 2018年7月3日–6日.

大阪大学大学院工学研究科, 非常勤講師, 2008年–2018年, 集中講義「計算機化学」, 2018年4月25日–26日.

京都大学大学院工学研究科,「量子化学II」, 2018年4月–7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, 拠点教授, 2012年9月– .

北海道大学触媒研究所, 招へい教員, 2018年4月− 2019年3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).

科学技術振興機構先導的物質変換領域（ACT-C),「多核金属の協働作用で生み出すクラスター触媒の新反応」, 江原正博（共同研究者）(2012年–2017年).

科研費特別推進研究,「d- 電子複合系の理論化学：新しい高精度大規模計算法による微視的理解と予測」, 江原正博（研究分担者）(2010年–2014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（AICE),「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。分子系・分子集合系の非対称性に関わる励起子相互作用や非対称因子，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。触媒・電池元素戦略プロジェクトにおいて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) 親水性／疎水性界面におけるアミロイドβフラグメントの凝集シミュレーション
b) 親水性／疎水性界面における全長アミロイドβのβヘアピン構造の形成過程の解明
c) 抗原依存蛍光反応の分子動力学シミュレーション
d) レプリカ部分置換法の開発
e) 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) アルツハイマー病はアミロイドβ（Aβ）ペプチドが球状に凝集してできたオリゴマーあるいは線維状に凝集してできたアミロイド線維が原因で引き起こされると言われている。Aβペプチドは細胞膜表面のように親水性／疎水性界面で凝集が促進される。そこで Aβペプチドの一部分である Aβ(16-22) を親水性／疎水性界面で凝集させる分子動力学シミュレーションを行った。その結果，分子間βシート構造の比較的少ないオリゴマーは界面に沿って存在するのに対し，多くの分子間βシート構造を持つオリゴマーは界面から水中に突き出るように存在していることが分かった。これは分子間βシート構造を多くとると親水性残基が縁を覆うためであることを解明した。この現象はアミロイド線維の形成初期過程において親水性／疎水性界面からオリゴマーが芽のように伸びてくる現象（budding）に似ており，分子間βシート構造形成による親水性残基の配置により解釈できることを発見した。
b) 親水性／疎水性界面に全長の Aβペプチドを配置した分子動力学シミュレーションも行った。昨年度までに親水性 / 疎水性界面ではβ1 領域とβ2 領域に相当する部分でβヘアピン構造を形成することが多く，これが Aβの凝集を促進させていることを明らかにしてきた。今年度は引き続き解析を行い，このβヘアピン構造が形成される過程を明らかにした。まずβ1 およびβ2 領域でヘリックス構造が形成され，これらのヘリックス構造が界面上を移動して接近した。その後β1 領域のヘリックス構造が破壊され，伸長したβ1 領域とβ2 領域の間にβブリッジが形成された。さらに各アミノ酸残基の界面からの距離およびαヘリックス形成率が NMR 実験の結果と一致することも見出した。
c) N 末端領域に蛍光標識された抗体は抗原に依存した蛍光を発することが報告されている。非天然アミノ酸導入技術を用いて N 末端領域に蛍光標識アミノ酸を導入した抗体 scFv は，抗原が存在しない場合には弱い蛍光を示し，抗原が結合すると蛍光を増大させる。この現象の機構はこれまで次のように説明されていた。抗原が存在しない場合には V_H ドメインと V_L ドメインの界面で部分的に露出した Trp 残基が蛍光基に結合し消光する。一方，抗原が存在すると Trp 残基が V_H ドメインと V_L ドメインの界面に埋まり，消光が解除される。この機構を検証するためにメタダイナミクス分子動力学シミュレーションを行った。まず，抗体が存在する時だけ V_H ドメインと V_L ドメインが互いに結合することを示した。さらにこの蛍光基は Trp 残基と最も安定に結合することも明らかにした。これらのシミュレーション結果はこれまでに提案されてきた抗体依存蛍光反応の機構を支持するものであることが分かった。
d) これまでに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開発してきた。これまでのレプリカ置換法では，パラメータの遷移確率を計算する際にレプリカ数の階乗個の置換候補を考える必要があり，使用するレプリカの数が多くなると置換のための計算コストが高くなっていた。そこでサブグループを導

入して一度に置換するレプリカの数を制限することで計算コストを削減していたが，サブグループの導入はパラメータの遷移確率を低下させるなどの問題点が残っていた。そこで今年度は，隣の温度への遷移だけを許す新たなレプリカ置換法を考案し，レプリカ部分置換法と名付けた。本手法を用いることで，遷移確率を犠牲にすることなく置換の際に考えるべき候補の数を大幅に減少させることができた。また，サブグループを導入しないので多くのレプリカを含むシミュレーションの場合でも，パラメータの遷移確率の低下を招くことなく効率の良いシミュレーションを実現できた。

e) 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，昨年度までに水分子の計算についてはハイブリッド並列化が完成していた。今年度はタンパク質など全ての原子についてもハイブリッド並列化を行い，並列化率 99.91% という非常に高い並列化計算性能を達成した。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

Y. TACHI, Y. OKAMOTO and H. OKUMURA, "Conformational Properties of an Artificial GM1 Glycan Cluster Based on a Metal-Ligand Complex," *J. Chem. Phys.* **149**, 135101 (8 pages) (2018).

Y. MORI, H. OKUMURA T. WATANABE and T. HOHSAKA, "Antigen-Dependent Fluorescence Response of Anti-c-Myc Quenchbody Studied by Molecular Dynamics Simulations," *Chem. Phys. Lett.* **698**, 223–226 (2018).

H. NISHIZAWA and H. OKUMURA, "Classical Molecular Dynamics Simulation to Understand Role of a Zinc Ion for Aggregation of Amyloid-β Peptides," *J. Comput. Chem., Jpn.* **17**, 76–79 (2018).

J. LU, K. ISHIMURA and S. SAKAKI, "Theoretical Insight into Core-Shell Preference for Bimetallic Pt-M (M = Ru, Rh, Os, and Ir) Cluster and Its Electronic Structure," *J. Phys. Chem. C* **122**, 9081–9090 (2018).

S. FURUKAWA, M. FUJITA, Y. KANATOMI, M. MINOURA, M. HATANAKA, K. MOROKUMA, K. ISHIMURA and M. SAITO, "Double Aromaticity Arising from σ- and π-Rings," *Commun. Chem.* **1**, 60 (7 pages) (2018).

M. NODA, S. A. SATO, Y. HIROKAWA, M. UEMOTO, T. TAKEUCHI, S. YAMADA, A. YAMADA, Y. SHINOHARA, M. YAMAGUCHI, K. IIDA, I. FLOSS, T. OTOBE, K.-M. LEE, K. ISHIMURA, T. BOKU, G. F. BERTSCH, K. NOBUSADA and K. YABANA, "SALMON: Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience," *Comput. Phys. Commun.* **235**, 356–365 (2018).

B-3) 総説，著書

H. OKUMURA, M. HIGASHI, Y. YOSHIDA, H. SATO and R. AKIYAMA, "Theoretical Approaches for Dynamical Ordering of Biomolecular Systems," *Biochim. Biophys. Acta, Gen. Subj.* **1862**, 212–228 (2018).

B-4) 招待講演

奥村久士,「レプリカ置換分子動力学法の開発とアミロイドβペプチドへの応用」, 学習院大学計算機センター特別研究プロジェクト「結晶成長の数理」第 13回研究会「結晶成長とモンテカルロシミュレーション」, 東京, 2018年 12月.

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凝集体の構造変化」, 第 1回ExCELLS シンポジウム, 愛知, 岡崎, 2018年 10月.

奥村久士,「アミロイド線維を形成するタンパク質の分子動力学シミュレーション」, 化学研究会セミナー , 福井, 2018年 9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, 2018年 9月.

奥村久士,「生体分子動力学シミュレーションの基礎」, 第 58回生物物理若手の会夏の学校, 岐阜, 2018年 8月.

奥村久士,「アミロイドベータペプチドの凝集の分子動力学シミュレーション」, 東京大学物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会, 千葉, 2018年 4月.

奥村久士,「アミロイド線維の生体分子動力学シミュレーション」, 企業研究会第 31期CAMM フォーラム本例会, 東京, 2018年 1月.

伊藤　暁,「Aβ 全長の分子動力学シミュレーション」, 研究会「凝集系の理論化学」, 那覇, 2018年 3月.

伊藤　暁,「アミロイドβ ペプチドの全原子分子動力学シミュレーション」, 第 1回松山道後・分子論セミナー , 松山, 2018年 12月.

H. OKUMURA, "Molecular dynamics simulations of aggregates of amyloid-β peptides," Institute of Biological Chemistry Seminar, Taipei (Taiwan), November 2018.

H. OKUMURA, "Molecular dynamics study of amyloid-β aggregates," Seminar at Department of Chemistry, Tamkang University, New Taipei City (Taiwan), November 2018.

H. OKUMURA, "Molecular dynamics study of amyloid-β aggregates," 14th Rencontres du Vietnam Computational Biophysics at the Molecular and Meso Scales, Quy Nhon (Vietnam), October 2018.

H. OKUMURA, "Simulational studies of Aβ amyloid fibrils by molecular dynamics method," 22nd International Annual Symposium on Computational Science and Engineering, Bangkok (Thailand), August 2018.

H. OKUMURA, "Aggregation and disaggregation of amyloid-β peptides studied by molecular dynamics simulations," Frontier Bioorganization Forum 2018, Okazaki (Japan), July 2018.

H. OKUMURA, "Molecular dynamics simulations to study aggregated amyloid β peptides," Statphys-Taiwan-2018: Workshop on Developments in Statistical, Nonlinear, and Biological Physics, Taipei (Taiwan), June 2018.

H. OKUMURA, "Molecular dynamics simulations of Aβ amyloid fibrils," 7th Japan-Czech- Slovakia Symposium on Theoretical Chemistry, Prague (Czech), May 2018.

S. G. ITOH, "Molecular dynamics simulations of a full-length amyloid-β peptide at a hydrophobic/hydrophilic interface," The 22nd International Annual Symposium on Computational Science and Engineering, Bangkok (Thailand), August 2018.

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, 2018–), オブザーバー (2014–2018).

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 (2010–2016), 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」, 2018 年 12 月 13 日.

福井大学大学院工学研究科,「分子科学特別講義」, 2018 年 9 月 19 日–21 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).

C)　研究活動の課題と展望

a) これまでに全長のAβペプチドの二量体の構造をシミュレーションで解明した。今後はより大きなオリゴマーの構造を調べる。単量体状態の全長のAβを30本程度水溶液中に配置して分子動力学シミュレーションを行い，その凝集過程を観察する。このシミュレーションでは500万原子程度の巨大系の計算を行い，単量体→二量体→三量体→四量体と凝集していく過程での構造変化を調べる。特にどのアミノ酸残基が凝集に重要な役割を果たしているのか見つけ出す。

b) Aβ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調べる。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NAC領域にあることが最近特定された。この部分の凝集過程の分子動力学シミュレーションを現在行っている。これまでのところ分子間反平行βシート構造が最も安定に存在することを明らかにした。今後より詳細な解析を行い，αシヌクレインNAC領域の凝集過程のメカニズムを解明する。

c) クマムシは乾燥状態に置かれると乾眠状態に至る。乾眠状態では呼吸をせず生命活動も行わない。しかし，水が供給されると再び活動しだす。乾眠状態でクマムシが生命活動を行っていないにもかかわらず死なない理由はsecretory abundant heat-soluble（SAHS）という特定のタンパク質が細胞を維持しているからではないかと考えられている。水のない環境下でのSAHSがなぜ細胞を維持できるのかという疑問を解決するために分子動力学シミュレーションによる理論的研究を行う。

石　田　干　城（助教）（2004 年 11 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：理論化学，計算化学

A-2) 研究課題：

a) 溶液内化学反応およびエネルギー移動過程に関する理論的研究

b) 分子動力学法によるイオン液体中の液体構造と動的挙動に関する理論的研究

c) 量子化学計算と分子動力学法を用いたイオン液体による高分子セルロースの溶解・分解過程に関する理論的研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) これまで提案・改良してきた時間依存形式による溶質分子の電子状態の時間依存変化を記述する理論的方法を色素分子中の光励起による電子移動反応プロセスの研究に応用した。この研究により，励起状態での超高速電子移動反応プロセスと溶媒和過程を光励起後フェムト秒オーダーで解析することを可能にした。現在はこの方法論を光励起によって引き起こされる生体分子や遷移金属錯体内でのエネルギー移動の問題へと適用し，計算段階へと取りかかっているところである。

b) イオン液体中の構造解析をもとにして，イオン液体の特有の挙動の一つである構造の不均一性や室温付近でのガラス性挙動に注目して研究を進めている。分子動力学法を用いて数万原子オーダーでの大きな系の長時間シミュレーションを実行した。結果からイオン液体は，陽・陰イオンの構造の違いによって各イオン種が非一様な分布をしていることが示され，このことが構造の不均一性の原因となっていることが明らかになってきた。さらに，通常液体では過冷却状態において現れる動的不均一性と類似の挙動を，室温において示すことが示された。現在，イオン液体中の構造不均一性とイオン分子の動きとの関係や，動的不均一性の分子論的起源について研究を進めている。

c) 生体内における細胞壁の基本骨格部分である高分子セルロースを炭水化物に分解する際にイオン液体が有効であることに注目した研究を計画，実行した。まず量子化学計算による結果から，高分子セルロース間に働くセルロース間水素結合強度は水中に較べてイオン液体中では弱められる結果が得られた。このことはイオン液体中でセルロースの分解が促進されやすい原因の１つであることがわかった。また，分子動力学シミュレーションの結果より，高分子セルロース内の疎水性領域と親水性領域ではセルロース鎖間相互作用エネルギーの弱められ方に大きな違いがあって，セルロースの溶解過程に大きく影響を及ぼしていることも明らかになった。このような溶解過程にはイオン液体の陰イオンによるセルロース間水素結合の分断力と陰イオンの動きが水中と比べて大きな役割を果たしていることが示された。

B-10) 競争的資金

科研費特定領域研究（公募研究),「溶液内光励起反応プロセスと溶媒和ダイナミックス」, 石田干城 (2008 年–2009 年).

科研費特定領域研究（公募研究),「分子動力学法によるイオン液体の理論的研究」, 石田干城 (2008 年–2009 年).

科研費基盤研究(C),「分子内及び分子間エネルギー移動を起源とする光機能発現の理論的解明」, 石田干城 (2011 年–2013 年).

理論・計算分子科学研究部門

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

A-1) 専門領域：理論化学，計算物質科学

A-2) 研究課題：

a) 有機分子集合体のための高精度電子状態理論の開発

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) 大規模分子集合体に対する高精度電子状態理論の確立を目指して，フラグメント分子軌道法と GW/Bethe-Salpeter 方程式（GW/BSE）法を組み合わせた計算手法の開発を行った。GW/BSE 法は誘電関数を第一原理的に考慮しつつ，軌道エネルギーや励起エネルギーを計算できる手法であり，比較的低計算コストで信頼性の高い結果が得られる。本研究では，FMO 法の枠組みで分子集合体の誘電関数を効率良く計算する手法を提案し，Coulomb hole plus screened exchange（COHSEX）法に基づいた FMO-COHSEX 法の開発を行った。開発した手法をペンタセン薄膜へと応用して，薄膜中のペンタセン分子の軌道エネルギーの解析を行った。従来の FMO 法である electrostatic embedding の枠組みでの Hartree-Fock 法や密度汎関数法では，HOMO-LUMO gap が固体中で減少する gap renormalization の効果を正しく記述できないということがわかった。一方，新しく開発した FMO-COHSEX 法では，分子環境に応じて HOMO-LUMO gap が変化する効果を正しく記述することができた。本計算手法は，不均一環境にある分子集合体の取り扱いに適しているため，有機トランジスタや有機／有機界面などの有機デバイス系の電子状態計算に有用である。

b) 有機太陽電池系のペンタセン／C_{60} 界面の電荷移動励起状態の解析を行った。界面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。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。また，電子－正孔距離や励起子の非局在化の度合いなどの量を導入して励起状態のダイアグラムを解析した。低エネルギー領域の局在電荷移動状態と，高エネルギー側の電子・正孔波動関数が拡がった非局在電荷移動状態が混在することがわかった。さらに，ペンタセン吸収領域（1.5–2.0 eV）では，ペンタセンの励起状態と電荷移動状態の混成が起き，電子波動関数がペンタセン・C_{60} 両方に拡がった電荷移動状態を形成することがわかった。電子ドナー／電子アクセプター両方に拡がった電子波動関数は長距離電荷移動を引き起こすことが考えられる。

B-1) 学術論文

T. FUJITA and Y. NOGUCHI, “Development of the Fragment-Based COHSEX Method for Large and Complex Molecular Systems,” *Phys. Rev. B* **98**, 205140 (10 pages) (2018).

T. FUJITA, MD. K. ALAM and T. HOSHI, "Thousand-Atom Ab Initio Calculations of Excited States at Organic/Organic Interfaces: Toward First-Principles Investigations of Charge Photogeneration," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 26443–26452 (2018).

T. FUJITA and Y. MOCHIZUKI, "Development of the Fragment Molecular Orbital Method for Calculating Nonlocal Excitations in Large Molecular Systems," *J. Phys. Chem. A* **122**, 3886–3898 (2018).

B-4) 招待講演

T. FUJITA, "Developments and Applications of Fragment Molecular Orbital Method for Organic Optoelectronic Materials," The 8th NTChemWorkshop, FUKURACIA Tokyo station, Tokyo (Japan), March 2018.

T. FUJITA, "Exciton Dynamics in Organic Optoelectronic Materials," International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC) 2018, Sokhalay Angkor Resort & Spa, Siem Reap (Cambodia), March 2018.

T. FUJITA, "An Ab Initio Investigation of Charge-Transfer Excited States at Pentacene/C_{60} Interface," 1st UJN-IMS-SKKU Symposium on Chemistry and Materials, Jinan University, Jinan (China), August 2018.

藤田貴敏,「第一原理計算による高移動度有機半導体の励起状態の解析」, 名古屋国際会議場, 名古屋(日本), 2018年9月.

C) 研究活動の課題と展望

今後はFMO-GW/BSE 法の開発を進めて，有機材料系の光電子物性についての信頼性の高い計算手法の確立を目指す。現状の実装はCOHSEX 近似に基づいているため，動的遮蔽の取り込みは必須である。さらに，電子励起状態を計算するためには，BSE 法と組み合わせる必要がある。計算手法の開発を進めて有機光デバイス系へ応用することにより，励起状態を形成する電子・正孔波動関数の拡がり・分極エネルギー・励起子束縛エネルギー・吸収スペクトルなどに関して解析を行う。さらに，波束ダイナミクス法と組み合わせることにより，エネルギー変換過程の実時間量子ダイナミクスへと展開していく。

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) 糖鎖分解型モーター・キチナーゼの1方向性運動メカニズムの解明

b) トランスポーター Na^+/H^+ antiporter のイオン輸送メカニズムの解明

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) キチナーゼは甲殻類などの外骨格の主成分であるキチン鎖を分解しながら1方向に進むリニア分子モーターである。その動作メカニズムに実験家（飯野グループ）と共同で取り組んだ。1分子実験によるステップの検出とその速度論的解析により Burnt-bridge メカニズムによって1方向性の運動が実現されていることが分かった。さらに，全原子分子動力学シミュレーションによりステップ運動に対応する原子レベルのメカニズムが分かってきた。特に，触媒サイトにあるグルタミン酸のプロトネーション状態がキチン鎖を引き込むのに重要であることが分かった。

b) ナトリウムイオンとプロトンを細胞の内外で交換するトランスポーター Na^+/H^+ antiporter は，細胞内のイオン濃度調節などにかかわっており，創薬ターゲットにもなっている。そのイオン輸送メカニズムに迫るために，まずイオン結合サイトの交互アクセスを可能にするタンパク質の構造変化を，低解像度電顕データを用いた構造モデリングなどにより明らかにした。さらに，内向き・外向き開状態間の構造遷移ダイナミクスを遷移パスサンプリング手法により明らかにした。その結果，疎水性ゲートの存在が明らかになり，イオンの漏れを防ぐのに役立っていることがわかった。この疎水性ゲートの残基を実験的に変異させることで, 元の野生型より早くイオンを輸送する変異体が得られた。

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。現在, F-BAR タンパク質･生体膜系の全原子･粗視化シミュレーションを行っていて，膜上でのタンパク質の会合や膜の曲率センシングの様子が分かってきた。

B-1) 学術論文

A. NAKAMURA, K. OKAZAKI, T. FURUTA, M. SAKURAI and R. IINO, “Processive Chitinase is Brownian Monorail Operated by Fast Catalysis after Peeling Rail from Crystalline Chitin,” *Nat. Commun.* **9**, 3814 (12 pages) (2018). doi:10.1038/s41467-018-06362-3

B-4) 招待講演

K. OKAZAKI, “Simulations of functional dynamics in biomolecular machines: motor, transporter and sensor,” 理論生物物理研究会～理論生物物理のこれからを考える～, 京都大学大学院理学研究科生物物理学教室, 京都, 2018年6月.

岡崎圭一,「生体分子マシンにおける機能ダイナミクスの解明」, 生物物理若手の会第58回夏の学校, ぎふ長良川温泉ホテルパーク, 岐阜県岐阜市, 2018年8月.

K. OKAZAKI, “Mechanism of Na^+/H^+ antiporter from transition-path simulations: Making faster transporter based on mechanism,” Workshop: Trends in Computational Molecular Biophysics, Kanazawa, November 2018.

K. OKAZAKI, “Estimating dynamic energy landscape of biomolecular motors from single-molecule trajectories: Application to a linear motor chitinase,” An Update on Molecular Motors: Open Challenges and New Perspectives, Sendai, November 2018.

K. OKAZAKI, “Transport mechanism of sodium/proton antiporter from transition-path simulations,” The 2nd workshop on Advances in Theory and Computation of Complex Systems—Biological Systems, Nanjing (China), December 2018.

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 (2016–2018).

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-8) 大学での講義，客員

京都大学薬学研究科, 非常勤講師,「基礎物理化学特論」, 2018年6月15日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「トランスポーターの基質輸送速度を変える変異の理論的予測」, 岡崎圭一 (2018年–2020年).

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

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

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

C) 研究活動の課題と展望

本グループでは，生体分子マシンの機能ダイナミクスを理論的な手法で解明して，そのデザイン原理を探求する研究を進めている。今年度は, キチナーゼの1方向性運動に関する研究が論文として出版された。他のテーマに関しても, シミュレーションを進めていて結果が得られてきている。このようなシミュレーションによるメカニズム解明と並行して，デザイン原理に関する研究も進めていて，トランスポーターにおいて野生型よりも早い変異型を得ることに成功したり，バイオセンサー開発にも取り組んでいるところである。

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

g) ほぼ絶対零度まで冷やした極低温のルビジウム原子集団に APM を適用することによって，60 万個の粒子の量子多体問題を近似無しに 1 ナノ秒（ナノ $=10^{-9}$）以内でシミュレートできる世界最速の「超高速量子シミュレータ」を開発することに成功した。それぞれ異なる研究分野で発展してきた「超高速化学」と「極低温物理」の手法を融合させた世界初の試みであり，材料科学・固体物理・溶液化学など広範囲の領域に波及効果を及ぼす新しい方法論として期待されている。

B-1) 学術論文

L. CHUNMEI, J. MANZ, K. OHMORI, C. SOMMER, N. TAKEI, J. C. TREMBLAY and Y. ZHANG, "Attosecond Control of Restoration of Electronic Structure Symmetry," *Phys. Rev. Lett.* **121**, 173201 (6 pages) (2018).

B-3) 総説，著書

H. KATSUKI, N. TAKEI, C. SOMMER and K. OHMORI, "Ultrafast Coherent Control of Condensed Matter with Attosecond Precision," *Acc. Chem. Res.* **51**, 1174–1184 (2018). (*Invited Paper*)

B-4) 招待講演（* 基調講演）

大森賢治,「量子力学に残された 100 年の謎に迫る」, 浜松コンファレンス, 浜松（日本）, 2018 年 11 月.*

大森賢治,「量子力学に残された 100 年の謎に迫る」, 大阪大学博士課程教育リーディングプログラム「インタラクティブ物質科学・カデットプログラム」第6回インタラクティブ交流会, 関西セミナーハウス, 京都（日本）, 2018 年 8 月.*

K. OHMORI, "Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas," CQOM Colloquium, Aarhus University, Aarhus (Denmark), May 2018.

K. OHMORI, "Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas," Max-Planck-Institut für Quantenoptik, Garching (Germany), March 2018.

K. OHMORI, "Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas," JQI Special Seminar, Joint Quantum Institute, College Park (U.S.A.), March 2018.

大森賢治,「原子レベルで動作する世界最速の量子シミュレーター」, 量子物理学・ナノサイエンス第 216 回セミナー , 東京工業大学, 東京（日本）, 2018 年 2 月.

N. TAKEI, "Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas," The 13th Japan-US Joint Seminar on Quantum Electronics and Laser Spectroscopy, APA Hotel Kanazawa ekimae, Kanazawa (Japan), September 2018.

武井宣幸,「強相関リュードベリ原子を用いた超高速量子シミュレーター」, 第 14 回エクストリームフォトニクス研究会「アト秒から秒にいたるダイナミクス研究の最前線」, 理化学研究所和光キャンパス, 和光（日本）, 2018 年 2 月.

N. TAKEI, "Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas," Conference on Laser and Synchrotron Radiation Combination Experiment (LSC) 2018, Pacifico Yokohama, Yokohama (Japan), April 2018.

S. SUGAWA, "Experimental extraction of Chern numbers from quantum-simulated monopoles," Workshop on Recent Developments in Chiral Matter and Topology, Taipei (Taiwan), December 2018.

素川靖司,「冷却原子を用いたトポロジカル不変量の測定」, 応用物理学会 量子エレクトロニクス研究会「量子エレクトロニクスによる未来型情報処理」, 軽井沢(日本), 2018年12月.

B-5) 特許出願

特願 2017-077478, 特開 2018-180179,「量子シミュレータおよび量子シミュレーション方法」, 酒井寛人, 大森賢治, 安藤太郎, 武井宣幸, 豊田晴義, 大竹良幸, 兵土知子, 瀧口　優(浜松ホトニクス(株), 自然科学研究機構), 2017年.

Application number: US15/945,016, Publication number: US 2018/0292786 A1, "Quantum simulator and quantum simulation method," H. SAKAI(Hamamatsu Photonics K.K.), K. OHMORI(NINS), T. ANDO(Hamamatsu Photonics K.K.), N. TAKEI(NINS), H. TOYODA, Y. OHTAKE, T. HYODO and Y. TAKIGUCHI(Hamamatsu Photonics K.K.), Filing date: Apr. 4, 2018, Publication date: Oct. 11, 2018.

B-6) 受賞, 表彰

大森賢治, 文部科学大臣表彰 科学技術賞 (2018).

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 (1998–2006).

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–).

2nd International Symposium on Advanced Photonics “Attosecond Science” 組織委員 (2018).

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–).

European Science Foundation (ESF), ESF College of Expert Reviewers (2018–).

学会誌編集委員

Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, IOP, Editorial Board (2018–).

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．

文部科学省からの依頼で，日米間の「量子技術分野の今後の協力」のための米国国立科学財団（NSF）および米国エネルギー省（DOE）との日米政府間会議（2018年3月9日，ワシントンDC）に出席し，林芳正文部科学大臣とNSFのFrance Córdova 長官との会談（2018年5月1日，ワシントンDC）における量子技術分野での日米協力に関する意見交換の実現に大きく貢献した．

EU のQuantum Technology Flagship の一環として開催されたEuropean Quantum Technologies Community Meeting（2018年 4月 19日，ZEISS Forum, Oberkochen, Germany）に日本の量子科学技術コミュニティの代表として招かれ，日本・EU・米国の各代表・政府関係者とのパネルディスカッションにおいて，量子科学技術分野における日・米・EU 間の協力について議論．

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

総合研究大学院大学物理科学研究科，集中講義「量子動力学」, 2018年 12月 17日–27日.

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

文部科学省「光・量子飛躍フラッグシッププログラム（Q-LEAP）」量子情報処理・大規模基礎基盤研究，「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」, 大森賢治 (2018年–2028年).

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).

科学技術振興機構さきがけ研究（受託研究），「極低温ドレスト原子集団の超精密制御による非可換トポロジカル量子現象の探索」, 素川靖司 (2016年–2020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），「超高速量子シミュレータの開発」, 大森賢治 (2016年–).

（株）日立製作所，「超高速量子シミュレータの開発」, 大森賢治 (2018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，量子多体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～ 2018 年 3 月 31 日）*)

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，その場観測・オペランド観測用軟Ｘ線吸収試料セルを開発することによって，マイクロスケール及びナノスケールでの溶液，化学反応，薬剤伝達等の化学状態マッピングを可能にした。

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 や強化版 GSCF4 は世界の放射光施設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きた。

B-1) 学術論文

M. NAGASAKA, H. YUZAWA, T. HORIGOME and N. KOSUGI, “Reliable Absorbance Measurement of Liquid Samples in Soft X-Ray Absorption Spectroscopy in Transmission Mode,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **224**, 93–99 (2018).

M. NAGASAKA, H. YUZAWA and N. KOSUGI, “Intermolecular Interactions of Pyridine in Liquid Phase and Aqueous Solution Studied by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” *Z. Phys. Chem.* **232**, 705–722 (2018).

M. NAGASAKA, H. YUZAWA, K. MOCHIZUKI, E. RÜHL and N. KOSUGI, “Temperature-Dependent Structural Changes in Liquid Benzene,” *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 5827–5832 (2018).

H. YAMANE and N. KOSUGI, “Photoelectron Angular Distribution Induced by Weak Intermolecular Interaction in Highly Ordered Aromatic Molecules,” *J. Phys. Chem. C* **122**, 26472–26479 (2018).

M.-H. LI, H.-H. YEH, Y.-H. CHIANG, U-S. JENG, C.-J. SU, H.-W. SHIU, Y.-J. HSU, N. KOSUGI, T. OHIGASHI, Y.-A. CHEN, P.-S. SHEN, P. CHEN and T.-F. GUO, “Highly Efficient 2D/3D Hybrid Perovskite Solar Cells via Low-Pressure Vapor-Assisted Solution Process,” *Adv. Mater.* **30**, 1801401 (13 pages) (2018).

Y. F. WANG, Y. C. SHAO, S. H. HSIEH, Y. K. CHANG, P. H. YEH, H. C. HSUEH, J. W. CHIOU, H. T. WANG, S. C. RAY, H. M. TSAI, C. W. PAO, C. H. CHEN, H. J. LIN, J. F. LEE, C. T. WU, J. J. WU, Y. M. CHANG, K. ASOKAN, K. H. CHAE, T. OHIGASHI, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA, N. KOSUGI and W. F. PONG, “Origin of Magnetic Properties in Carbon Implanted ZnO Nanowires,” *Sci. Rep.* **8**, 7758 (13 pages) (2018).

A. KHODABANDEH, R. D. ARRUA, B. R. COAD, T. RODEMANN, T. OHIGASHI, N. KOSUGI, S. C. THICKETT and E. F. HILDER, "Morphology Control in Polymerised High Internal Phase Emulsion Templated via Macro-RAFT Agent Composition: Visualizing Surface Chemistry," *Polym. Chem.* **9**, 213–220 (2018).

B-3) 総説，著書

長坂将成，小杉信博,「軟X線吸収分光法による水溶液の局所構造解析」, *分光研究* **67(1)**, 2–12 (2018).

長坂将成,「軟X線吸収分光法による液体と液液界面のオペランド観測」, *Mol. Sci.* **12(1)**, A0096 (12 pages) (2018).

B-4) 招待講演

N. KOSUGI, "Chemical Shifts and Intermolecular Interactions in Liquid X-Ray Spectroscopy," Workshop on Theoretical X-ray Spectroscopy (CoTXS), Stockholm (Sweden), May 2018.

M. NAGASAKA, "Interactions of Organic Molecules with Water in Aqueous Solutions Studied by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy," Freigeist Workshop 2018 "Carbon Nanomaterials in Aqueous Environment: From Characterization to Applications," Berlin (Germany), February 2018.

M. NAGASAKA, "Molecular Interaction in Liquid Phase Studied by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy," The 14th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure (ICESS-14), Shanghai (China), October 2018.

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).

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

VUV 真空紫外光物理国際会議国際諮問委員 (2004–2008).

Ｘ線物理及び内殻過程の国際会議国際諮問委員 (2006–2008).

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

ICESS 電子分光及び電子構造国際会議国際諮問会議委員 (2006–), 副議長 (2015–2018), 議長 (2018–2021).

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).

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).

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

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

文部科学省科学技術・学術審議会専門委員(研究計画・評価分科会) (2005–2007).

文部科学省科学技術・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 (2016–2019).

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), 国際事業委員会書面審査員 (2009–2010, 2014–2015), 国際科学研究費審査委員 (2018), 科学研究費委員会専門委員 (2007–2008, 2012, 2016, 2017, 2018), 特別研究員等審査会専門委員・審査員 (2009–2010, 2014–2015).

科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業(さきがけ)領域アドバイザー (2008–2014).

大学共同利用機関法人自然科学研究機構教育研究評議員 (2004–2006, 2010–2016).

高エネルギー加速器研究機構運営協議員会委員 (2001–2003), 物質構造科学研究所運営協議員会委員 (2001–2003), 加速器・共通研究施設協議会委員 (2001–2003), 物質構造科学研究所運営会議委員 (2015–2018).

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, 2014–2018).

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・オセアニア放射光フォーラム AOFSRR 国際諮問委員及びプログラム委員 (2007, 2009), 日本代表 (2018–2019).

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

SPring-8 評価委員会委員 (2002, 2003, 2004), 登録機関利用活動評価委員会委員 (2008), 専用施設審査委員会委員 (2007–2010), パートナーユーザー審査委員会 (2013–2014).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光共同利用実験審査委員 (1997–2001), 放射光研究施設評価分科会委員 (2001–2002), 放射光戦略ワーキンググループ会議委員 (2007–2009), 放射光科学国際諮問委員会電子物性分科会委員 (2008), ERL 総括委員会委員長 (2016).

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

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

九州シンクロトロン光研究センタービームライン評価委員会委員 (2016).

台湾放射光科学国際諮問委員会委員 (2008–2011).

台湾国立シンクロトロン放射研究センター人事委員 (2015–2016).

台湾中央研究院研究計画審査委員 (2010–2012).

フィンランドOulu 大学物理学科教授選考外部専門委員 (2010).

フランスCNRS ANR 基盤研究審査員 (2010–2012).

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

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「軟X線内殻分光による分子間相互作用系の局所電子構造研究」, 小杉信博 (2008年–2010年).

科研費基盤研究(A),「軟X線分光による液体・溶液の局所電子構造解析法の確立」, 小杉信博 (2011年–2013年).

科研費基盤研究(A),「軟X線内殻励起によるその場観測顕微分光法の確立と応用」, 小杉信博 (2014年–2016年).

科研費基盤研究(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),「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

リーダーの転出により，本グループは分子科学研究所では解散したが，本グループの予算を投入して開発してきたビームラインはUVSOR 施設が維持管理することになった。今後はUVSOR 施設主導で，引き続き国際的な視野に立った特徴ある共同研究を国際連携しながら進めていく予定になっている。

*）2018 年 4 月 1 日高エネルギー加速研究機構物質構造科学研究所所長

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，ルブレン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とらえた。ドナー・アクセプター半導体分子間の弱い vdW 結合から，分子と金属原子の局所的な強い化学結合によるギャップ準位形成までを統括検討し，エネルギー準位接合機構の解明を目指している。
d) 高配向有機薄膜からの光電子放出強度の角度依存性について，多重散乱理論による強度解析を行い，分子薄膜構造の定量的解析を行うための方法論を検討している。多様な有機薄膜の分子配向に依存した電子波のポテンシャル散乱と干渉問題を評価してきた。また理論計算から，二次元角度分解測定により分子軌道の可視化が行え，配向分子系（固体）における分子計測の新たなツールとなりうることを提案した。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）と成長を観察している。

B-1) 学術論文

J.-P. YANG, M. MEISSNER, T. YAMAGUCHI, X.-Y. ZHANG, T. UEBA, L.-W. CHENG, S. IDETA, K. TANAKA, X.-H. ZENG, N. UENO and S. KERA, "Band Dispersion and Hole Effective Mass of Methylammonium Lead Iodide Perovskite Single Crystals," *Sol. RRL* **2**, 1800132 (6 pages) (2018).

Y. NAKAYAMA, H. MASATAKA, N. MORIYA, M. MEISSNER, T. YAMAGUCHI, K. YOSHIDA, M. MURATA, K. MASE, T. UEBA and S. KERA, "Anisotropic Valence Band Dispersion of Single Crystal Pentacene as Measured by Angle-Resolved Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy," *J. Mater. Res.* **33**, 3362–3370 (2018).

C. YOU, F. XIA, Y. ZHAO, Y. ZHANG, Y. SHENG, Y. WU, X.-C. HANG, F. CHEN, H. MA, K. SHEN, Z. SUN, T. UEBA, S. KERA, C. ZHANG, H. ZHANG, Z.-K. CHEN and W. HUANG, "Probing Triplet Excited States and Managing Blue Light Emission of Neutral Tetradentate Platinum (II) Complexes," *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 2285–2292 (2018).

Y. KASHIMOTO, K. YONEZAWA, M. MEISSNER, M. GRUENEWALD, T. UEBA, S. KERA, R. FORKER, T. FRITZ and H. YOSHIDA, "The Evolution of Intermolecular Energy Bands of Occupied and Unoccupied Molecular States in Organic Thin Films," *J. Phys. Chem. C* **122**, 12090–12097 (2018).

C. GAUL, M. SCHWARZE, S. SCHELLHAMMER, F. BUSSOLOTTI, S. KERA, Z. BAO, G. CUNIBERTI, K. LEO and F. ORTMANN, "Efficient Organic Semiconductor Doping: Guidance from n-Doped C_{60}," *Nat. Mater.* **17**, 439–444 (2018).

C. GUO, S. SARKAR, S. REFAELY-ABRAMSON, D. A. EGGER, T. BENDIKOV, K. YONEZAWA, Y. SUDA, T. YAMAGUCHI, I. PECHT, S. KERA, N. UENO, M. SHEVES, L. KRONIK and D. CAHEN, "Electronic Structure of Dipeptides in the Gas-Phase and as an Adsorbed Monolayer," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 6860–6867 (2018).

M. SCHWARZE, B. D. NAAB, M. L. TIETZE, R. SCHOLZ, P. PAHNER, F. BUSSOLOTTI, S. KERA, D. KASEMANN, Z. BAO and K. LEO, "Analyzing the n-Doping Mechanism of an Air-Stable Small-Molecule Precursor," *ACS. Appl. Mater. Interfaces* **10**, 1340–1346 (2017).

B-3) 総説，著書

S. KERA, T. HOSOKAI and S. DUHM, "Characteristics of Organic–Metal Interaction: A Perspective from Bonding Distance to Orbital Delocalization," *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 061008 (7 pages) (2018).

B-4) 招待講演

S. KERA, “Evolution of electron localization upon assembling the molecules on the surface,” 9th Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (ASOMEA-IX), Schluchsee (Germany), October 2018.

S. KERA, “Charge delocalization upon molecular assembly,” 9th International Workshop on Low Enerfgy Electron Diffraction and Related Techniques,” Remagen (Germany), October 2018.

S. KERA, “Exploring function and property of organic materials by photoelectron spectroscopy,” Recent Progress of Organic Electronics in Japan and Korea, Nagoya (Japan), September 2018.

S. KERA, “Evolution of Electron Localization upon Molecular Assembling,” International Symposium on Spectroscopy and Dynamics at Surface and Interface, Kyoto (Japan), May 2018.

C. NUMATA, K. YONEZAWA, T. UEBA, M. MEISSNER, R. SHIRAISHI, T. YAMAGUCHI, T. TAGO, Y. SUDA, H. YOSHIDA, H. YAMANE, N. KOSUGI, C. ZWICK, R. FORKER, T. FRITZ and S. KERA, “Impacts of charge relaxation on the energy-level alignment: Tin(IV)phthalocyanine dichloride monolayer on graphite,” The 9th International Conference on Thechnological Advances of Thin Films and Surface Coatings, Shenzhen (China), July 2018.

解良　聡,「分子性結晶の電子状態の特徴：局在性の変遷」, 第 79回応用物理学会秋季学術講演会（シンポジウム), 名古屋, 2018年 9月.

解良　聡,「紫外光電子分光法による有機半導体の物性･機能評価」, 日本物理学会 2018年秋季年会(シンポジウム), 京田辺, 2018年 9月.

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–).

SRI（International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation）シンクロトロン放射装置技術国際会議国際諮問委員 (2018).

学会の組織委員等

The 9th Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications, International Program Committee (Germany 2018).

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 28, 29, 30, 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 (2014, 2015, 2016, 2017).

第 75, 76, 77, 78回応用物理学会秋季学術講演会プログラム編成委員 (2014, 2015, 2016, 2017).

第 61, 62, 63, 64回応用物理学会春季学術講演会プログラム編成委員 (2014, 2015, 2016, 2017).

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).

JSPS-NSFC Joint 2nd Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Co-chair (Soochow Univ., China 2014).

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

科研費挑戦的萌芽研究,「有機デバイス材料の個性を知る：移動度の直接評価」, 解良　聡 (2008年–2009年).

科研費若手研究(A),「分子性固体における電荷輸送とその動的現象の解明」, 解良　聡 (2008年–2010年).

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

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

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

科研費基盤研究(A),「分子集合体における電子局在性とその電子−フォノン相互作用の影響」, 解良 聡 (2018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進めている。マンパワーが極端に減少し，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時間分解光電子分光システムが残された。次年度はスタッフ雇用による新体制構築が必須で，遅滞なく研究を継続する方策を練ることが必要である。一方，UVSOR 放射光施設のビ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，施設長として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する。UVSOR 施設は放射光を利用した分子科学研究分野で国際的な競争力があり，欧米の先端放射光施設と相補的な国際共同研究拠点として貢献している。放射光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，運動量分解光電子顕微鏡（*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準備を進めている。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も不可欠である。

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

Y. TAIRA and M. KATOH, “Generation of Optical Vortices by Nonlinear Inverse Thomson Scattering at Arbitrary Angle Interactions,” *Astrophys. J.* **860**, 45 (11 pages) (2018).

S. MATSUBA, K. KAWASE, A. MIYAMOTO, S. SASAKI, M. FUJIMOTO, T. KONOMI, N. YAMAMOTO, M. HOSAKA and M. KATOH, “Generation of Vector Beam with Tandem Helical Undulators,” *Appl. Phys. Lett.* **113**, 021106 (4 pages) (2018).

H. ZEN, T. HAYAKAWA, E. SALEHI, M. FUJIMOTO, T. SHIZUMA, J. K. KOGA, T. KII, M. KATOH and H. OHGAKI, "Generation of 1-MeV Quasi-Monochromatic Gamma-Ray for Precise Measurement of Delbrück Scattering by Laser Compton Scattering," *J. Phys.: Conf. Ser.* **1067**, 092003 (5 pages) (2018).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

A. MOCHIHASHI, J. HASEGAWA, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, M. FUJIMOTO, K. HAYASHI and M. KATOH, "Suppression of Longitudinal Coupled Bunch Instability by Harmonic Cavity in UVSOR Electron Storage Ring," *Proc. 9th Internat. Particle Accel. Conf. (Vancouver, 2018)*, 3280–3282 (2018).

A. MOCHIHASHI, K. YAMAMURA, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, H. OHKUMA, M. FUJIMOTO and M. KATOH, "Perturbation to Stored Beam by Pulse Sextupole Magnet and Disturbance of the Sextupole Magnetic Field in Aichi Synchrotron Radiation Center," *Proc. 9th Internat. Particle Accel. Conf. (Vancouver, 2018)*, 4232–4234 (2018).

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, 2016–2018).

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).

高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設運営委員 (2018–).

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

名古屋大学シンクロトロン光研究センター , 客員教授 , 2018 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 , 2018 年 4 月– .

B-10) 競争的資金

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

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

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

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

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トロン光源としては世界的にも最高レベルの性能に到達した。この光源性能を 100% 引き出すための安定性の向上を目指し，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継続している。

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。発生法の開発から，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など，応用技術へ重心を移す。

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の合成によるベクトルビーム発生など，UVSOR の研究環境を活用して世界に先駆けた研究を継続して進める。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トロン光センター，富山大学などと協力し継続して進める。

電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）

松　井　文　彦（主任研究員）（2018 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：表面物性物理学，放射光科学，電子分光計測技術

A-2) 研究課題：

a) 電子分光装置の新規開発とビームラインの高度化

b) 光電子回折・分光に関する現象の解明と測定手法開発

c) 表面電子物性・化学特性にかかわる新奇現象の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) ① UVSOR 型 Momentum Microscope（MM）導入計画推進を主務としている。MM を開発した Forschungszentrum Jülich（FZJ）の電子物性部門（PGI-6）と学術協定を結び，表面電子物性の共同研究を進めている。MM は空間・波数空間・エネルギーの幅広い範囲での高分解能測定を可能にするユニークな分析器である。電子物性研究に有力な VUV/EUV 領域での高強度・可偏光などといった UVSOR の光源特性を活かした測定機能を実現する MM をデザインし，今年度は FZJ や装置メーカーと打ち合わせを重ね導入計画を開始した。②他方，設置予定の BL6U には従来型の静電半球分析器に機械式電子軌道ディフレクタを組み合わせた広角取込み角度分解光電子分光システムが立ち上げ中であったが，着任後これを引き継ぎユーザー利用供与の開始にこぎつけた。③並行して収差補正メッシュレンズとコリメータプレートを特徴とする新規表示型分析器の開発を進めている。①は high-end 型，②は汎用型の波数分解光電子分光装置，③は光電子ホログラフィー用の角度分解光電子分光装置という位置づけである。

b) 連続的なエネルギー可変性が放射光の最大の特徴である。BL6U は軟X線領域（45–700 eV）をカバーする直線偏光ビームラインである。① UVSOR の測定系チームとともに光学系のオゾン洗浄を行い，分子科学で重要となる C 吸収端の光を供給できるようにした。元素選択的な共鳴励起によって価電子帯の原子軌道構成を解明できる共鳴光電子分光の実験を成功させた。吸収端にてグラファイトの π バンドが選択的に励起される様子を波数空間上で可視化したが, 炭素吸収端で実現が確認できたのは分子吸着系に適応範囲を拡大していく上で重要である。②光エネルギー可変性を活かし k_z 分散を測定すると例えば層状物質の原子軌道の層間の相互作用についてユニークな情報が得られる。これまでこの光電子構造因子解析の手法を開発してきたが BL6U にて $MoSe_2$ の原子軌道解析を進め国際会議にて成果発表することができた。

c) 光電子回折・分光を用いて Fe 系超伝導体やグラファイト層間化合物など層状物質超伝導体の原子構造と電子状態を研究している。層状物質は容易に劈開でき，その表面の電子状態の研究が盛んであるが，劈開容易面とバルクの平均構造は全く別物であることをいくつかの系について明らかにしてきた。分子研に着任し引き続き，試料作製・物性評価グループとの共同研究を行っている。アルカリ金属ドープ系など嫌気性の試料を取り扱い，上述のビームラインで測定できる装置を構築している。

B-1) 学術論文

D. MORI, Y. FUJITA, T. HIROSE, K. MURATA, H. TSUCHIDA and F. MATSUI, "Atomic Characterization of Nano-Facet Nitridation at SiC ($1\bar{1}00$) Surface," *Appl. Phys. Lett.* **112**, 131603 (4 pages) (2018).

D. Y. USACHOV, A. V. TARASOV, K. A. BOKAI, V. O. SHEVELEV, O. Y. VILKOV, A. E. PETUKHOV, A. G. RYBKIN, I. I. OGORODNIKOV, M. V. KUZNETSOV, M. MUNTWILER, F. MATSUI, L. V. YASHINA, C. LAUBSCHAT and D. V. VYALIKH, "Site- and Spin-Dependent Coupling at the Highly Ordered *h*-BN/Co(0001) Interface," *Phys. Rev. B* **98**, 195438 (10 pages) (2018).

T. MATSUSHITA, T. MURO, F. MATSUI, N. HAPPO, S. HOSOKAWA, K. OHOYAMA, A. SATO-TOMITA, Y. C. SASAKI and K. HAYASHI, "Principle and Reconstruction Algorithm for Atomic-Resolution Holography," *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 061002 (11 pages) (2018).

H. OTA, M. SHIMOMURA and F. MATSUI, "Separation of Surface- and Bulk-Specific Ti *L*-Edge XANES Spectra of Rutile (110) Surface," *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 013601 (5 pages) (2018).

F. MATSUI, T. MATSUSHITA and H. DAIMON, "Holographic Reconstruction of Photoelectron Diffraction and Its Circular Dichroism for Local Structure Probing," *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 061004 (11 pages) (2018).

M. V. KUZNETSOV, I. I. OGORODNIKOV, D. Y. USACHOV, C. LAUBSCHAT, D. V. VYALIKH, F. MATSUI and L. V. YASHINA, "Photoelectron Diffraction and Holography Studies of 2D Materials and Interfaces," *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 061005 (12 pages) (2018).

F. MATSUI, H. OTA, K. SUGITA, M. MUNTWILER, R. STANIA and T. GREBER, "Parallel and Antiparallel Angular Momentum Transfer of Circularly Polarized Light to Photoelectrons and Auger Electrons at the Ni L_3 Absorption Threshold," *Phys. Rev. B* **97**, 035424 (6 pages) (2018).

F. MATSUI, H. NISHIKAWA, H. DAIMON, M. MUNTWILER, M. TAKIZAWA, H. NAMBA and T. GREBER, "The 4π k_z Periodicity in Photoemission from Graphite," *Phys. Rev. B* **97**, 045430 (6 pages) (2018).

B-3) 総説，著書

F. MATSUI, "Auger Electron Spectroscopy," in *Compedium of Surface and Interface Analysis*, Springer, Chapter 7, pp. 39–44 (2018).

F. MATSUI, "Photoelectron Diffraction," in *Compedium of Surface and Interface Analysis*, Springer, Chapter 73, pp. 445–450 (2018).

F. MATSUI, "Photoelectron Holography," in *Compedium of Surface and Interface Analysis*, Springer, Chapter 74, pp. 451–455 (2018).

松井文彦,「3.4光電子回折・光電子ホログラフィー法」,「5.2磁性薄膜材料への応用」,「X線光電子分光法」, 高桑雄二編, 講談社サイエンティフィク (2018).

B-4) 招待講演

松井文彦,「光電子ホログラフィー」, 3D活性サイト科学春の学校, 奈良先端科学技術大学院大学, 生駒, 2018年6月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

表面構造に関する国際学会 ICSOS 国際アドバイザー委員 (2017–).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会マイクロビームアナリシス第 141 委員会企画幹事 (2014–).

学会誌編集委員

日本表面真空学会出版委員 (2013–).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究 (B),「軌道磁気量子数計測法の確立と低次元電子物性研究への応用」, 松井文彦 (2017 年 –2020 年).

科研費新学術領域研究（研究領域提案型),「３D活性サイト科学のプラットフォーム構築による総括と研究支援」（代表；大門寛), 松井文彦（研究分担者）(2014 年 –2019 年).

科研費新学術領域研究（研究領域提案型),「３D活性サイト科学の海外拠点・国際ネットワーク構築」（代表；大門寛), 松井文彦（研究分担者）(2015 年 –2019 年).

科研費新学術領域研究（研究領域提案型),「顕微光電子ホログラフィーによる活性サイトの時間分解３D原子イメージング」（代表；木下豊彦), 松井文彦（研究分担者）(2014 年 –2019 年).

大　東　琢　治（助教）（2011 年 8 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：X線光学

A-2) 研究課題：

a) 走査型透過軟X線顕微鏡ビームラインの発展

b) 走査型透過軟X線顕微鏡を用いた応用手法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 2017年度にビームラインで 50 eV までのX線の出力を達成したが，主に高次光の強い影響によって，リチウムそのものの吸収スペクトルを得ることができなかった。今年度，高次光の成分を突き止め，シリコンカーバイド膜を用いてフィルタリングすることにより，初となる塩化リチウムと炭酸リチウム混合物の顕微吸収スペクトルを得ることができた。

b) STXM に Computer Tomography を用いて HeLa S3 細胞単離核の観察を行い，これを酸素 K 吸収端近傍における３次元スペクトロスコピー法へと発展させ，細胞単離核内の吸収スペクトルの３次元分布を測定することに成功した。またゴム材料の劣化プロセスの過程を，クライオ冷却システムを用いて分析を行なってきた。

B-1) 学術論文

M.-H. LI, H.-H. YEH, Y.-H. CHIANG, U-S. JENG, C.-J. SU, H.-W. SHIU, Y.-J. HSU, N. KOSUGI, T. OHIGASHI, Y.-A. CHEN, P.-S. SHEN, P. CHEN and T.-F. GUO, "Highly Efficient 2D/3D Hybrid Perovskite Solar Cells via Low-Pressure Vapor-Assisted Solution Process," *Adv. Mater.* **30**, 1801401 (13 pages) (2018).

Y. F. WANG, Y. C. SHAO, S. H. HSIEH, Y. K. CHANG, P. H. YEH, H. C. HSUEH, J. W. CHIOU, H. T. WANG, S. C. RAY, H. M. TSAI, C. W. PAO, C. H. CHEN, H. J. LIN, J. F. LEE, C. T. WU, J. J. WU, Y. M. CHANG, K. ASOKAN, K. H. CHAE, T. OHIGASHI, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA, N. KOSUGI and W. F. PONG, "Origin of Magnetic Properties in Carbon Implanted ZnO Nanowires," *Sci. Rep.* **8**, 7758 (13 pages) (2018).

K. SHINOHARA, T. OHIGASHI, S. TONE, M. KADO and A. ITO, "Quantitative Analysis of Mammalian Chromosome by Scanning Transmission Soft X-Ray Microscopy," *Ultramicroscopy* **194**, 1–6 (2018).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. OHIGASHI, A. ITO, K. SHINOHARA, S. TONE, Y. INAGAKI, H. YUZAWA and N. KOSUGI, "3-Dimensional Chemical Structures of an Isolated Cell Nucleus by a Scanning Transmission X-Ray Microscope," *Microsc. Microanal.* **24**, 400–401 (2018).

M. M. SHIROLKAR, Y. F. WANG, Y. C. SHAO, K. H. CHEN, H. T. WANG, X. S. QUI, J. S. YANG, J. J. WU, J. W. CHIOU, T. OHIGASHI, N. KOSUGI and W. F. PONG, "Probing the Electronic Structure of $BiVO_4$ Coated ZnO Nanodendrite Core-Shell Nanocomposite Using X-Ray Spectroscopic and Spatially Resolved Scanning Transmission X-Ray Microscopy Studies," *Microsc. Microanal.* **24**, 468–469 (2018).

M. HUTTULA, M. PATANEN, R. PIISPANEN, T. OHIGASHI, N. KOSUGI, S. SWARAJ, R. BELKHOU, A. PRANOVICH, T. JYSKE, P. KILPELAINEN, A. KARKONEN, R. KORPINEN, T. LAAKSO, S. VALKONEN and P. SARANPAA, "STXM Chemical Mapping of Norway Spruce Knotwood Lignans," *Microsc. Microanal.* **24**, 482–483 (2018).

B-4) 招待講演

T. OHIGASHI, “BL4U Spectromicroscopy Beamline—From Skin to Steel,” Special Seminar, Freie Universität Berlin, Berlin (Germany), June 2018.

T. OHIGASHI, “BL4U spectromicroscopy beamline and its application from skin to steel,” I4FUTURE, University of Oulu, Oulu (Finland), June 2018.

大東琢治,「はやぶさ2が教えてくれる宇宙のふしぎ」, 第一回KIT サイエンスカフェ , 神戸常磐大学子育て支援施設KIT, 兵庫県神戸市, November 2018.

大東琢治,「UVSOR における走査型透過X線顕微鏡の現状と将来展望」, 短期研究会「軟X線放射光科学のアップシフト」, 東京大学物性研究所, 千葉県柏市, December 2018.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

SpectroNanoscopy Workshop, Organizing Committee (2014–).

X線結像光学研究会幹事 (2015–).

第 32回日本放射光学会年会シンポジウム組織委員会 (2018).

International Conference on X-ray Optics and Applications 2017 プログラム委員 (2016–2017).

第 26回バイオイメージング学会学術集会プログラム委員 (2017).

第 13回X線結像光学研究会組織委員会 (2015).

第 27回日本放射光学会年会シンポジウム組織委員会 (2013).

分子研研究会(学協会連携)・放射光学会第 8回若手研究会「軟X線イメージングの描く未来」, 主催 (2015).

学会誌編集委員

Synchrotron Radiation News, Editor (2017–).

日本放射光学会誌編集委員 (2012–2014).

その他

第一回KIT サイエンスカフェ講師 (2018).

B-8) 大学での講義, 客員

立命館大学 SR センター , 特別研究員, 2018年.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C) (一般),「走査型透過軟X線顕微鏡による超軽元素2次元化学状態分析法の開発」, 大東琢治 (2016年–2018年).

B-11) 産学連携

共同研究, (株)住友ゴム工業,「走査型透過X線顕微鏡を用いたポリマー中の薬品・添加剤の分散及び化学状態解析」, 大東琢治 (2017年–2019年).

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) 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 $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ 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 相の組成・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。また BL7U において超伝導ギャップを観測することで，C_4 相の組成においてのみ，超伝導ギャップのエネルギーに異常が観測された。具体的には Γ 点近傍のホール面を形成するバンドの一つが抑制されていること，さらに電子面を形成しているバンドに顕著な運動量空間依存性を観測した。この結果により観測されたフェルミ面間のネスティングを考慮することで，中性子散乱で観測されている異常な振る舞いを説明することができることがわかった。

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。2018 年度に試料直前に最終集光ミラーを配置することでビームを 400 (H) × 120 (V) μm から 23 (H) × 40 (V) μm に集光することに成功し，微小な試料や不均一な試料の測定が可能となった。また高効率スピン分解角度分解光電子分光測定の計画も進めている。

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 3.8 K，参照用金部で 3.2 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る。現在 UVSOR で最も高分解能な測定が可能である BL7U では，試料を 12 K までしか冷却することができないため，その性能を十分生かすことができていない。そこで今回 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，試料部において 4.5 K，参照用金部で 4.2 K を達成した。2018 年度初めにビームラインへ導入した。

B-1) 学術論文

S. CHO, B. S. KIM, B. KIM, W. KYUNG, J. SEO, M. PARK, J. W. JEON, K. TANAKA, J. D. DENLINGER, C. KIM, D. ODKHUU, B. H. KIM and S. R. PARK, "Electronic-Dimensionality Reduction of Bulk MoS_2 by Hydrogen Treatment," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 23007–23012 (2018).

T. NAKAMURA, Y. OHTSUBO, Y. YAMASHITA, S. IDETA, K. TANAKA, K. YAJI, A. HARASAWA, S. SHIN, F. KOMORI, R. YUKAWA, K. HORIBA, H. KUMIGASHIRA and S. KIMURA, "Giant Rashba Splitting of Quasi-One-Dimensional Surface States on Bi/InAs(110)-(2 × 1)," *Phys. Rev. B* **98**, 075431 (7 pages) (2018).

N. MURAI, K. SUZUKI, S. IDETA, M. NAKAJIMA, K. TANAKA, H. IKEDA and R. KAJIMOTO, "Effect of Electron Correlations on Spin Excitation Bandwidth in $Ba_{0.75}K_{0.25}Fe_2As_2$ as Seen via Time-of-Flight Inelastic Neutron Scattering," *Phys. Rev. B* **97**, 241112(R) (6 pages) (2018).

Y. SUGIYAMA, C. BERNARD, Y. OKUYAMA, S. IDETA, K. TANAKA, T. GREBER and T. HIRAHARA, "Flattening and Manipulation of the Electronic Structure of h-BN/Rh(111) Nanomesh upon Sn Intercalation," *Surf. Sci.* **672-673**, 33–38 (2018).

T. ITO, D. PINEK, T. FUJITA, M. NAKATAKE, S. IDETA, K. TANAKA and T. OUISSE, "Electronic Structure of Cr_2AlC as Observed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy," *Phys. Rev. B* **96**, 195168 (9 pages) (2018).

B-4) 招待講演

K. TANAKA, "Suppression of superconducting gap on $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ ($x \sim 0.25$) observed by angle-resolved photoemission spectroscopy," International Workshop on Recent Progress in Superconductivity, Pyeongchang (Korea), July 2018.

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。今年度は試料直前に最終集光ミラーを配置することでビームを 400 (H) × 120 (V) μm から 23 (H) × 40 (V) μm に集光することに成功し, 微小な試料や不均一な試料の測定が可能となった。新しい高効率スピン分解測定手法の開発も進めている。

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（技術課長）（2017 年 10 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：原子分子分光，光化学反応動力学

B-1) 学術論文

SH. YAMAMOTO, T. OMI, H. AKAI. Y. KUBOTA, Y. TAKAHASHI, Y. SUZUKI, Y. HIRATA, K. YAMAMOTO, R. YUKAWA, K. HORIBA, H. YUMOTO, T. KOYAMA, H. OHASHI, S. OWADA, K. TONO, M. YABASHI, E. SHIGEMASA, S. YAMAMOTO, M. KOTSUGI, H. WADATI, H. KUMIGASHIRA, T. ARIMA, S. SHIN and I. MATSUDA, "Element Selectivity in Second-Harmonic Generation of $GaFeO_3$ by a Soft-X-Ray Free-Electron Laser," *Phys. Rev. Lett.* **120**, 223902 (5 pages) (2018).

K. TAMASAKU, E. SHIGEMASA, Y. INUBUSHI, I. INOUE, T. OSAKA, T. KATAYAMA, M. YABASHI, A. KOIDE, T. YOKOYAMA and T. ISHIKAWA, "Nonlinear Spectroscopy with X-Ray Two-Photon Absorption in Metallic Copper," *Phys. Rev. Lett.* **121**, 083901 (5 pages) (2018).

J. PALAUDOUX, T. KANEYASU, L. ANDRIC, S. CARNIATO, G. GAMBLIN, F. PENENT, Y. HIKOSAKA, E. SHIGEMASA, K. ITO, S. FRITZSCHE, R. KUKK, S. SHEINERMAN, R. F. FINK, P. LABLANQUIE and R. PÜTTNER, "Selectivity of the Br $3d^{-1}$ Auger Decays in HBr," *Phys. Rev. A* **98**, 043406 (15 pages) (2018).

B-8) 大学での講義，客員

新潟大学大学院自然環境科学科，自然環境科学集中講義「原子分子物理学 II」，2018 年 11 月 15 日–16 日，12 月 6 日–7 日．

岩　山　洋　士（助教）（2010 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：軟Ｘ線分子分光，光化学反応動力学

A-2) 研究課題：

a) 透過型Ｘ線吸収分光法による液晶相の局所構造解析

b) 内殻励起およびイオン化された原子・分子・クラスターの緩和ダイナミクスの研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 透過型Ｘ線吸収法を用いて液晶物質についての研究を進めている。液晶分子は分子が凝集し集団となることで複屈折などの機能を有する材料であり，分子１個の性質を調べただけではその機能・物性解明には不十分である。応用上重要な液晶分子のネマティック相は長距離秩序がないが，分子集団の配向性が揃うことで，複屈折率などの重要な機能が発現する。そのため，分子内の主要な部分がどのような配向を取りながら配列しているかなどの構造情報が重要であり，Ｘ線吸収分光法（XAS）のような局所構造解析手法が有益だと考えられる。液晶相は液体相同様に蒸気圧の観点から真空槽に導入することができず，従来計測が不可能であった。一般には蒸着による固相を液晶モデルとした研究のみである。そこで試料厚を 10 nm から数 100 nm に調整できる液体セルを用いて，in situ 液晶相での液晶分子を対象に透過型 XAS 計測を行った。実験で用いた試料は，代表的な液晶分子であり棒状形状を有する 4-Cyano-4'-pentylbiphenyl を用い，また固相・液晶相また液晶相・液体相の相転移温度がそれぞれ 22 ℃，35 ℃ と常温付近であるため，試料温度を制御することで３つの相での XAS 測定を行った。その結果，XAS スペクトル形状は各相でほぼ同じであったが，内殻共鳴のピークエネルギーがわずかに変化する様子が観測された。これは，固相・液晶層・液体相で局所的な構造の変化を反映していると考えられる。このように，液晶材の局所構造に依存した電子状態研究に関して透過 XAS 法が有益な手段となり得ることを示した。

b) 内殻励起した窒素分子クラスターを用いて２つの窒素分子間の分子間クーロン緩和（ICD）過程について研究した。ICD 過程の特徴として，２価イオン化の閾値を下げる効果が挙げられる。これは，１つの分子を２価イオン化するよりも，２つの分子をそれぞれ１価イオン化したほうが分子間のクーロンエネルギーを考慮しても，エネルギーが低くなるためである。そこで，孤立窒素分子と窒素分子クラスターの２価イオン化閾値をオージェ電子・イオン同期法により計測し，窒素分子クラスターの２価イオン化閾値が孤立窒素分子に比べて低下していることを観測した。

B-4) 招待講演

H. IWAYAMA, “Interaction of rare gas clusters with intense EUV-FEL pulses,” Marc Simon work shop on atomic and molecular photoionization dynamics, Tokyo (Japan), August 2018.

B-6) 受賞，表彰

岩山洋士, 原子衝突若手奨励賞 (2018).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

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 (2014).

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プログラム委員 (2015).

日本物理学会領域1運営委員（原子・分子分科）(2018–).

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 (2010–2012, 2018–).

B-10) 競争的資金

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–2014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).

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

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) 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 BL36XU で我々が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。2018 年は，PEFC 電極の硫黄被毒の影響などについて取り組み，光電子分光法により様々な硫黄化学種の電位を計測することで，硫黄化学種が電極・電解質のいずれに存在するかを確定する新しい方法論を開発するなどの成果が上がった。

b) 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。2018 年は，強磁性遷移金属窒化物超薄膜の構造・磁性の関する共同研究等を行った。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研究を継続的に進めている。

B-1) 学術論文

K. TAMASAKU, E. SHIGEMASA, Y. INUBUSHI, I. INOUE, T. OSAKA, T. KATAYAMA, M. YABASHI, A. KOIDE, T. YOKOYAMA and T. ISHIKAWA, “Nonlinear Spectroscopy with X-Ray Two-Photon Absorption in Metallic Copper,” *Phys. Rev. Lett.* **121**, 083901 (5 pages) (2018).

Y. WAKISAKA, D. KIDO, H. UEHARA, Q. YUAN, S. TAKAKUSAGI, Y. UEMURA, T. YOKOYAMA, T. WADA, M. UO, T. SAKATA, O. SEKIZAWA, T. URUGA, Y. IWASAWA and K. ASAKURA, “A Demonstration of Pt L_3-Edge EXAFS Free from Au L_3 Edge Using Log-Spiral Bent Crystal Laue Analyzers,” *Catalysts* **8**, 204 (6 pages) (2018).

T. YOKOYAMA, A. KOIDE and Y. UEMURA, “Local Thermal Expansions and Lattice Strains in Elinvar and Stainless Steel Alloys,” *Phys. Rev. Mater.* **2**, 023601 (7 pages) (2018).

S. YAMAMOTO, K. TAKEUCHI, Y. HAMAMOTO, R. Y. LIU, Y. SHIOZAWA, T. KOITAYA, T. SOMEYA, K. TASHIMA, H. FUKIDOME, K. MUKAI, S. YOSHIMOTO, M. SUEMITSU, Y. MORIKAWA, J. YOSHINOBU and I. MATSUDA, “Enhancement of CO_2 Adsorption on Oxygen-Functionalized Epitaxial Graphene Surface under Near-Ambient Conditions,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 19532–19538 (2018).

B-3) 総説，著書

横山利彦,「燃料電池における反応を解明する」,「放射光利用の手引」, アグネ技術センター (2018).

横山利彦,「大気圧環境下の試料を光電子分光法で評価する」,「放射光利用の手引」, アグネ技術センター (2018).

Y. TAKAGI, T. URUGA, M. TADA, Y. IWASAWA and T. YOKOYAMA, "Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy for Functional Material Systems as Fuel Cells under Working Conditions," *Acc. Chem. Res.* **51**, 719–727 (2018).

横山利彦,「新しい材料の探索・創成・開発～分子・物質合成プラットフォームの紹介～」,「特集にあたって（巻頭言）」, *金属* **88**, 3–4 (2018),「放射光軟X線磁気円二色性を用いた薄膜磁性解析」, *金属* **88**, 103–111 (2018).

B-4) 招待講演

横山利彦,「X線分光の現況と展望」, 日本物理学会北陸支部セミナー , 富山, 2018年4月.

小板谷貴典,「オペランド分光法による反応中の触媒表面の直接観測」, 第122回触媒討論会, 函館, 2018年9月.

B-6) 受賞，表彰

中川剛志, 日本物理学会第4回若手奨励賞 (2010).

高木康多, 日本物理学会第2回若手奨励賞 (2008).

中川剛志, 日本表面科学会第3回若手研究者部門講演奨励賞 (2006).

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).

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 (1998–2018).

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, 2019).

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 (2012–2018).

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).

広島大学放射光科学研究センター運営委員 (2018–).

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集幹事（編集委員長）(2005–2006).

日本放射光学会誌編集委員 (2004–2006).

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」業務主任者（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」業務主任者（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」業務主任者（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).

公益信託分子科学研究奨励森野基金推薦委員 (2018–).

B-8) 大学での講義, 客員

名古屋工業大学大学院工学研究科,「物理工学特別講義1」, 2018年8月3日, 6日.

総合研究大学院大学物理科学研究科,「基礎物性科学」, 2018年11月6日, 13日, 27日.

総合研究大学院大学物理科学研究科,「物性科学概論」, e-learning, 2018年.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究「革新的触媒の科学と創製」領域,「オペランド観測に基づくメタン転換触媒および反応場の設計」, 小板谷貴典 (2017年–2020年).

科研費若手研究(B),「モデル合金触媒における動的表面構造変化と反応性に関する研究」, 小板谷貴典 (2017年–2018年).

受託研究, 科学技術振興機構ACCEL研究「自己組織化技術に立脚した革新的分子構造解析」,「ナノテクノロジープラットフォーム・結晶スポンジ法による分子構造解析」, 横山利彦 (2017年–2018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 (2015年–2017年), MEA性能創出技術開発 (2018年–2019年), 横山利彦.

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).

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).

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, 高磁場極低温X線磁気円二色性(UVSOR)や紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の発明, 広域X線吸収微細構造(EXAFS)法と経路積分法によるインバー等磁性合金の熱膨張等などで成果を上げてきた。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線光電子分光の開発を行い, 昨年度は完全大気圧での光電子分光観測に世界で初めて成功した。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有効手法であることを示し, 今後もこれを中心課題に据えた研究を推進する。さらに, 2013年度からは放射光やX線自由電子レーザーを用いた(超)高速時間分解X線吸収法の開発的研究を進め, 光触媒等の電子・幾何構造の変化を追跡する研究を行ってきた。2017年11月に高木康多助教が転出, 2018年4月に上村洋平助教が転出したが, 2018年6月に小板谷貴典助教が着任し, 雰囲気制御光電子分光等を用いた表面化学反応機構解明を目標とした研究への展開を始めた。現在新たな助教を公募中であり, 次年度以降はさらに新たな研究課題を視野に入れる計画である。

杉　本　敏　樹（准教授）（2018 年 5 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：物理化学，機能物性化学，表面界面物性

A-2) 研究課題：

a) 金属表面における氷薄膜のプロトン秩序

b) 氷表面の構造緩和

c) 水分解光触媒のキャリアダイナミクスを支配する水分子の水素結合

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 身の回りに存在する結晶氷 Ih は，水素結合ネットワーク中の水分子の配向が無秩序な常誘電状態にある。自発的対称性の破れに起因した氷の配向秩序相（強誘電氷 XI 相）は，72 K 以下の温度領域でしか存在できない（T_c = 72 K）と考えられてきた。そこで，ヘテロダイン検出法を組み合わせた“配向敏感かつ高感度な赤外－可視和周波発生（SFG）振動分光法”を用いて，異種界面の異方場を利用して氷の強誘電的な配向秩序（空間反転対称性の破れ）を創出可能か否かを検証した。超高真空中で 140 K の Pt(111) 基板にヘテロエピタキシャル成長させた氷薄膜に対して水分子の配向を調べた結果，表面直上の第一層の水分子が Pt 原子との相互作用で H を Pt（下地）に向けて配列した H-down 配向をとることが明らかになった。その上の氷薄膜中の水分子にもアイスルールの制約下で H-down 配向秩序が伝搬し，強誘電状態が氷膜全体に発現することが判明した。さらに，熱的安定性を調べたところ，この強誘電氷薄膜の T_c がバルク強誘電氷 XI の T_c よりも２倍以上も高いことが世界初で明らかになった。また，同位体効果を検証した結果，水素結合における核の量子効果の影響で，H_2O 氷薄膜に比べて D_2O 氷薄膜の T_c が約 4 K 高温にシフトすることも突き止めた。「ヘテロ界面における異方的な相互作用を用いて，バルクとは異なる配向構造（誘電物性）や熱的安定性を有した極性分子薄膜を創成可能である」というアイデアは，新しい強誘電デバイス材料開発のブレイクスルーにつながるものと考えている。

b) 偶数次の非線形分光である SFG 分光は，空間反転対称性を有する常誘電氷 Ih に対しては表面敏感な分光手法となる。そこで，氷 Ih(0001) 表面に対してヘテロダイン検出 SFG 振動分光を行ったところ，氷表面の第一層（B1）から第二層（B2）において，O_{B1}–H···O_{B2} 水素結合の方が O_{B1}···H–O_{B2} 水素結合よりも平均的に数 % 距離が長いことが判明した。このように，氷 Ih という我々にもっとも身近な固体の表面において，水分子の up/down の向きが層間水素結合の強弱（動的揺らぎと平均的な構造）に本質的な影響を及ぼすことが世界初で明らかになった。

c) 水分解光触媒は光誘起電荷による水の還元反応で水素を生成する事ができ，エネルギーや環境問題の解決に貢献する“化学技術”として期待されている。しかし，今後の高活性触媒開発のキーとなる“触媒表面における反応活性サイト”に関する分子レベルの知見は極めて限定的である。そこで，室温の水蒸気雰囲気下で光触媒表面のみを水液膜で覆い，粒子形状の異なる種々の TiO_2 ナノ粒子光触媒に対する赤外振動分光・光誘起電荷の過渡吸収測定，及び顕微過渡吸収を行った。その結果，「光触媒微粒子の凝集度が高いほど，界面が効率的な電荷捕捉サイトとなり反応活性が増大する」，「球状の粒子には，OH 伸縮振動が大きく低波数シフトした表面第一層吸着水が特異的に存在し，その吸着水による効率的な光誘起電荷捕捉効果により平坦な粒子よりも反応活性が高くなる」こと等が世界初で明らかになった。

B-1) 学術論文

N. AIGA, T. SUGIMOTO, Y. OTSUKI, K. WATANABE and Y. MATSUMOTO, "Origins of Emergent High-T_c Ferroelectric Ordering in Heteroepitaxial Ice Film: Sum-Frequency Generation Spectroscopy of H_2O and D_2O Ice Films on Pt(111)," *Phys. Rev. B* **97**, 075410 (21 pages) (2018).

K. SHIRAI, G. FAZIO, T. SUGIMOTO, D. SELLI, L. FERRARO, K. WATANABE, M. HARUTA, B. OHTANI, H. KURATA, C. DI VALENTIN and Y. MATSUMOTO, "Water-Assisted Hole Trapping at Highly Curved Surface of Nano-TiO_2 Photocatalyst," *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 1415–1422 (2018).

B-3) 総説，著書

T. SUGIMOTO, "Sum-Frequency Generation Spectroscopy of Heteroepitaxial Ice Films: Unveiling Orientation of Water Molecules, and Structural and Physical Properties of Ice," *J. Spectrosc. Soc. Jpn.* **67(5)**, 189–196 (2018). (in Japanese)

B-4) 招待講演

T. SUGIMOTO, "Unveiling emergent property and reaction activity of water molecules at heterointerface by infrared and sum-frequency generation spectroscopy," 2018 Annual Meeting of Spectroscopical Society of Japan, Keio University Hiyoshi Campus, Yokohama, Kanagawa (Japan), May 2018.

T. SUGIMOTO, "Orientational ordering and charge-transfer dynamics of water molecular aggregates induced by symmetry breaking at solid surfaces," 2018 Autumn Meeting The Physical Society of Japan, Doshisya University, Kyotanabe, Kyoto (Japan), September 2018.

T. SUGIMOTO, "Water-Assisted Hole Trapping at the Highly Curved Surface of Nano-Photocatalyst," FHI-JST Joint Symposium, Fritz-Haber-Institute, Berlin (Germany), October 2018.

T. SUGIMOTO, "Toward understanding reactive surface species in photocatalytic water splitting," The 2nd IMS-NANOTEC Joint Research Meeting, IMS, Okazaki (Japan), November 2018.

T. SUGIMOTO, "Effects of Interface on Orientational Ordering of Heteroepitaxially Grown Ice Film," PacSurf2018, Waikoloa Beach Marriott Resort & Spa, Waikoloa Village, Hawaii (U.S.A.), December 2018.

B-6) 受賞，表彰

T. SUGIMOTO, PCCP Prize 2018 (2018).

杉本敏樹, 日本化学会第 98回春季年会優秀講演賞（学術）(2018).

杉本敏樹, 日本分光学会奨励賞 (2018)

杉本敏樹, 分子科学研究奨励森野基金 (2018).

杉本敏樹, 第 33回表面科学学術講演会講演奨励賞（若手研究者部門）(2014).

杉本敏樹, 日本真空学会第 39回熊谷記念真空科学論文賞 (2014).

杉本敏樹, 表面・界面スペクトロスコピー 2010学生奨励賞 (2010).

T. SUGIMOTO, IIS PhD Student Live 2010, Best Presentation Award (2010).

杉本敏樹, 第 49回真空に関する連合講演会優秀ポスター賞 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面科学会関西支部幹事 (2013–2018).

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・学術研究所科学技術動向研究センター専門調査員 (2014–2016).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究,「オペランド分光計測に基づくメタンの部分酸化還元光触媒反応場の創製と学理構築」, 杉本敏樹 (2016年–2019年).

科研費若手研究(A),「光触媒／水界面における完全水分解反応の活性増大メカニズムの解明」, 杉本敏樹 (2016年–2018年).

科研費新学術領域研究（公募研究),「星間ダスト表面におけるアモルファス氷の強誘電性と触媒機能」, 杉本敏樹 (2016年–2017年).

科研費新学術領域研究（公募研究),「星間ダスト表面におけるアモルファス氷の強誘電性と触媒機能」, 杉本敏樹 (2014年–2015年).

科研費若手研究(B),「構造を規定した酸化物−擬似液体水界面における光触媒メカニズムの解明」, 杉本敏樹 (2014年–2015年).

科研費研究活動スタート支援,「水分子雰囲気下における，よく規定された酸化物表面の光触媒メカニズムの解明」, 杉本敏樹 (2012年).

C) 研究活動の課題と展望

ヘテロダイン検出法和周波発生（SFG）振動分光法や時間分解赤外吸収分光等による，金属や酸化物表面における水分子凝集系の研究により,「終端（表面･界面）が存在する不均一な水分子凝集系においては，たった一分子層の水分子の配向（水素の配置）が周辺の水素結合の構造や誘電物性等に大きな影響を及ぼす」ことが分かってきた。しかし，これらの知見に関して更に根源的なレベルでの疑問点「そもそも固体表面のどのようなファクターによって第一層水分子吸着系に配向秩序が創発されるのか？　その際に，全体としてH-up 状態が優勢になるのかH-down 状態が優勢になるのかを決める要因は何なのか?」などに関しては，現時点ではほとんど何も分かっていない。これらの根本的なメカニズムを解明するためには，原子レベルで構造を規定・制御した種々の固体表面上の水分子凝集系に対して系統的なSFG 測定を展開していく必要がある。それと同時に，水素感度と極微空間分解能を有する新しい非線形顕微分光法を開発し，より本質的な微視的知見に迫る高度な分光研究を展開していく必要がある。今後のこのような研究展開により，水分子凝集系の特異的な構造や物性，化学的機能を自在にデザイン・制御するための表面科学を開拓し，基礎学理構築を目指す。

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

T. NAKAMURA, M. ASADA, M. YOSHIDA, M. KONDO and S. MASAOKA, “Possibility of Dielectric Material: Magnetic Resonance Study of Oxo-Bridged Dinuclear Ruthenium Mixed-Valence Complex,” *ChemistrySelect* **3**, 10526–10531 (2018).

T. NAKAMURA, T. IKOMA and K. YAMADA, “Recent Developments in Electron Spin Science and Technology in Japan,” *Appl. Magn. Reson.* **49**, 755–756 (2018).

T. ENOMOTO, M. KONDO, M. ASADA, T. NAKAMURA and S. MASAOKA, “Near-IR Light-Induced Electron Transfer via Dynamic Quenching,” *J. Phys. Chem. C* **122**, 11282–11287 (2018).

B-4) 招待講演

T. NAKAMURA, “Electronic Structure Investigation of Self-Doped Type Organic Conductors by High-Field ESR Spectroscopy,” The University of Queensland’s St. Lucia campus, Queensland (Australia), September 2018.

B-6) 受賞，表彰

中村敏和, 日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員の表彰 (2018).

中村敏和, 日本物理学会第 22回論文賞 (2017).

中村敏和, 日本学術振興会科研費審査委員の表彰 (2015).

古川　貢, 電子スピンサイエンス学会奨励賞 (2012).

杉浦晃一, 日本化学会東海支部長賞 (2010).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会領域7世話人 (2000–2001).

日本物理学会代議員 (2001–2003).

日本物理学会名古屋支部委員 (2001–2007, 2013–).

日本化学会実験化学講座編集委員会委員 (2002).

電子スピンサイエンス学会担当理事 (2004–2005).

電子スピンサイエンス学会運営理事 (2006–2011).

電子スピンサイエンス学会副会長 (2014–2015).

電子スピンサイエンス学会会長 (2016–2018).

電子スピンサイエンス学会代議員 (2018–).

アジア環太平洋EPR/ESR 学会（Asia-Pacific EPR/ESR Society）秘書／財務 (2004–2008), 日本代表 (2010–2014).

日本化学会化学便覧基礎編改訂6版編集委員会委員 (2015–2018).

学会の組織委員等

Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006, Novosibirsk, Russia, International Organizing Committee, 組織委員 (2006).

分子構造総合討論会 2006（静岡), プログラム委員 (2006).

A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology (ISESS-SEST2007) Shizuoka, Japan Organizing Committee, 組織委員 (2007).

Asia Pacific EPR Society—EPR Symposium 2008, Cairns, Queensland, Australia, International Advisory Committee, 組織委員 (2008).

第3回分子科学討論会 2009（名古屋), プログラム委員 (2009).

第 49回電子スピンサイエンス学会年会（名古屋), プログラム委員 (2010).

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

Joint Conference of APES2014, IES and SEST2014 (APES-IES-SEST2014), Nov. 12th–16th, 2014, Nara, Japan, プログラム委員長 (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).

日本学術振興会特別研究員等審査委員会専門委員，卓越研究員候補者選考委員会書面審査委員及び国際事業委員会書面審査委員・書面評価員 (2016–2018).

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用・共同研究運営協議会委員 (2017–).

大阪市立大学共用化事業ESR 委員会委員 (2018–).

学会誌編集委員

電子スピンサイエンス学会編集委員 (2003).

電子スピンサイエンス学会編集委員長 (2004–2005).

電子スピンサイエンス学会編集アドバイザー (2006–2013).

B-10) 競争的資金

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

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

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

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

C) 研究活動の課題と展望

本グループでは, 分子性固体の電子状態(磁性, 導電性)を主に微視的な手法(ESR, NMR)により明らかにしている。有機導体など強相関低次元電子系の未解決な問題の解明を行うとともに, 生体関連試料を含む分子性物質の機能性に関する研究を行っている。多周波ESR (X-, Q-, W-bands)・パルス二重共鳴法(ELDOR, ENDOR)を用いた他に類を見ない磁気共鳴分光測定を中心に多数の協力研究・共同研究を受け入れ, 最先端のESR 測定研究の展開を全世界に発信している。今後は高圧下・極低温下といった極端条件での測定システム構築を行うとともに, 分子科学における磁気共鳴研究のあらたな展開を行っていく。

分子機能研究部門

平　本　昌　宏（教授）（2008 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：有機半導体，有機太陽電池，有機エレクトロニクスデバイス

A-2) 研究課題：

a) 有機太陽電池の開放端電圧の決定機構の解明とドーピングによる制御

b) 有機単結晶ドーピング機構の解明とドーピング有機単結晶太陽電池の作製

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) フタロシアニン（H_2Pc）／フラーレン（C_{60}）からなる２層型セルについて，開放端電圧（V_{oc}）の温度依存性，光強度依存性などを評価し，C_{60}/H_2Pc 界面のキャリア再結合が V_{oc} 減少の主要原因であり，直接再結合機構によって 0.55 V，トラップを介した再結合機構によって 0.32 V の開放端電圧減少を生じることを定量的に示した。V_{oc} 増大には，C_{60}/H_2Pc 界面を結晶化して浅いトラップの濃度を減少させる方法が有効と考えている。

さらに，同じ C_{60}/H_2Pc セルについて，ドーピング効果を検証した。界面近傍の H_2Pc 側への n 型ドーピングによって，界面のエネルギー接続を操作し，意図的に V_{oc} 増大できることを証明した。

b) 表面ドーピングしたルブレン単結晶において，Hall 効果測定によるキャリア濃度の温度依存性から，ドーピングキャリア生成の活性化エネルギー 5.7 meV を観測し，室温でほぼ 100% の効率でキャリア生成できることを示した。これは，シリコン並みのドーピング効率実現の可能性を示唆している。

ドーピングしたルブレン単結晶太陽電池を試作した。p 型ドーピングしたルブレン層を通して，2 mm × 1 mm の巨視的面積の pn ホモ接合で光生成したキャリアを，ほぼ 100% の効率で収集できた。ルブレン単結晶は 2.7 μm の非常に長い励起子拡散距離を持つため，46% の効率で励起子を pn ホモ接合に収集できた。この結果は，バルクヘテロ接合の不必要な新構造有機太陽電池が実現できることを示唆している。

B-1) 学術論文

N. SHINTAKU, M. HIRAMOTO and S. IZAWA, “Effect of Trap-Assisted Recombination on Open-Circuit Voltage Loss in Phthalocyanine/Fullerene Solar Cells,” *Org. Electron.* **55**, 69–74 (2018).

N. SHINTAKU, M. HIRAMOTO and S. IZAWA, “Controlling Open-Circuit Voltage in Organic Solar Cells by Impurity Doping,” *J. Phys. Chem. C* **122**, 5248–5253 (2018).

S. IZAWA, N. SHINTAKU and M. HIRAMOTO, “Effect of Band Bending and Energy Level Alignment at the Donor/Acceptor Interface on Open-Circuit Voltage in Organic Solar Cells,” *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 2914–2918 (2018).

M. HIRAMOTO, M. KIKUCHI and S. IZAWA, “Parts-per-Million-Level Doping Effects in Organic Semiconductor Films and Organic Single Crystals,” *Adv. Mater.* **30**, 1801236 (15 pages) (2018). (***Invited Progress Report***)

B-3) 総説，著書

M. HIRAMOTO, “Dawn of Organic Single Crystal Electronics—Hall Effect in Doped Organic Single Crystals,” *Eng. Technol. Open Acc.* **1(2)**, 555558 (2018). published March, ETOAJ.MS.ID.555558 (Invited Mini Review)

M. HIRAMOTO and M. KIKUCHI, "Single Crystal Organic Photovoltaic Cells," *Adv. Civil. Eng. Tech.* **1(2)**, ACET.000507 (2018). (Invited Mini Review)

B-4) 招待講演（* 基調講演）

M. HIRAMOTO, "Hall Effect in Bulk-doped Oganic Single Crystals," 24th World Nano Conference, Rome (Italy), May 2018.* (Keynote Speaker)

M. HIRAMOTO, "Hall Effect in Bulk-doped Organic Single Crystals," Innovative Material Science & Nanotechnology Conference, Valencia (Spain), July 2018.

M. HIRAMOTO, "Hall Effect in Bulk-Doped Organic Single Crystals," Thin Films 2018, The 9th International Conference on Technological Advances of Thin Films & Surface Coatings, Shenzhen (China), July 2018.

平本昌宏,「量子解放電子―有機単結晶におけるキャリア生成と再結合」, 第 79回応用物理学会秋季学術講演会, シンポジウム「深化する有機半導体結晶：量子解放の分子科学に向けて」, 20a-231C-1, 名古屋国際会議場, 名古屋, 2018年 9月.

伊澤誠一郎, 新宅直人, 菊地　満, 平本昌宏,「バンド伝導材料による有機太陽電池の開放端電圧ロスの抑制」, 第 79回応用物理学会秋季学術講演会, シンポジウム「深化する有機半導体結晶：量子解放の分子科学に向けて」, 20a-231C-1, 名古屋国際会議場, 名古屋, 2018年 9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).

第 79回応用物理学会秋季学術講演会（名古屋国際会議場，名古屋，9/20）「深化する有機半導体結晶：量子解放の分子科学に向けて」シンポジウムオーガナイザー (2018).

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）

応用物理学会若手チャプター幹事 (2018年).（伊澤誠一郎）

第 79回応用物理学会秋季学術講演会（名古屋国際会議場，名古屋，9/20）「深化する有機半導体結晶：量子解放の分子科学に向けて」シンポジウム世話人 (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 (2017.8–2018.3).

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).

Japanese Journal of Applied Physics (JJAP) 誌PVSEC27特集号（**vol. 57**）ゲストエディター (2018).

競争的資金等の領域長等

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

さきがけ「太陽光と光電変換」研究領域　領域アドバイザー (2009–2017).

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 (2012–2018).

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３０年度），大阪大学中之島センター，「有機太陽電池(I)(II)」，2018年1月16日.

B-9) 学位授与

新宅直人，「Effects of Charge Carrier Behavior on Device Performance of Organic Solar Cells」，2018年3月，博士（理学）.

B-10) 競争的資金

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).

科研費若手研究，「超高移動度分子を用いた有機太陽電池」，伊澤誠一郎 (2018年–2021年).

マツダ財団研究助成，「理論限界に迫る有機太陽電池の実現」，伊澤誠一郎 (2018年–2020年).

中部科学技術センター学術・みらい助成，「有機太陽電池の理論限界効率への挑戦」，伊澤誠一郎 (2018年–2019年).

C) 研究活動の課題と展望

平本は，研究員1名（菊地）を雇用し，今年度，有機単結晶太陽電池の試作に成功し，科研費「有機単結晶エレクトロニクス」を推進している。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，常に学生1名を指導し，着任後2年半ですでに3報の論文が掲載され，さらに2報投稿中で，研究室の柱になっている。なお，*Advanced Materials* のInvited Progress Reportに，有機半導体ppmドーピングに関する総説が，平本・菊地・伊澤の連名で掲載された。

また，博士課程学生２名（新宅（D3）（2018.3卒），イジヒョン（D1）（2018.10入学）），国際インターンシップ生，Chimie ParisTech大Armand Perrot（M1，2017.4–2017.8），タイ国チュラロンコン大Sureerat Makmuang（M2，2017.11–2018.4）が在籍した。これら2名の研究成果は，半年の滞在であったにもかかわらず，国際誌に1報が掲載され，1報が投稿中である。なお，1ヶ月間滞在したインド人学生 Jaseela P.I.（B3，2018.4）が，総研大受験予定。学生は海外主体となり，来年度は，研究員を２名雇用してマンパワーを強化し，研究室のアクティビティーをさらに向上させる。

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) ^{13}C 安定同位体全標識試料における ^{13}C 同種核相関固体 NMR の解析に基づく定量的原子間距離情報の同時取得

c) 固体 NMR による新規含フッ素透明性樹脂の状態解析

d) 固体 NMR による新規有機分子材料の状態解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) アミロイドβペプチド（Aβ）はアルツハイマー病の原因分子と考えられ，凝集して不溶性のアミロイド線維を形成する。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，モデル膜として糖脂質 GM1 を含有した脂質二重膜存在下で形成される Aβ 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。本年度は，これまで行った測定に基づく信号帰属の妥当性を検証するため，特に信号が密集して不確定性の高い部位を ^{13}C 安定同位体で部位特異的同位体標識した試料を複数調製し，^{13}C 二次元相関 NMR 測定を行った。これにより確度の高い信号帰属を検証中である。さらに，複数の混合時間での磁気双極子相互作用に基づく ^{13}C 二次元相関 NMR スペクトルの解析に基づき，分子間相対配座の検討を行っている。

b) 固体 NMR では，生体分子の系統的構造解析で一般的に用いられる安定同位体全標識試料のような多スピン系での磁気双極子相互作用に基づく磁化の時間発展を精密に解析するのは困難であり，溶液 NMR の NOESY のような確立された手法は存在しない。本研究は，東京農工大の朝倉哲朗教授のグループと行った共同研究である。^{13}C 安定同位体全標識した生体分子において，磁気双極子相互作用に基づく２次元同種核相関 NMR 法の一つ，dipolar assisted rotational resonance（DARR）から得られる同種核相関スペクトルに，proton driven spin diffusion（PDSD）で用いられている解析手法を適用し，同時に複数の精密原子間距離情報が取得可能か否か検討を行った。X 線結晶構造解析により，逆平行βシート構造が報告されているトリアラニンペプチドの ^{13}C 安定同位体全標識をモデル試料とした。複数の混合時間に対して測定した各スペクトルでの対角ピークで規格化した交差ピーク強度を混合時間に対してプロットし，最適曲線をフィッティングして，実験的に求めたゼロ量子曲線形状関数を考慮した場合とそうで無い場合の双方に関して原子間距離を求めた。得られた原子間距離は，ゼロ量子曲線形状関数を考慮しなくても X 線結晶解析の結果と 1–6 Å の範囲で良く一致することが判明した。本研究成果は学術論文として発表された（*J. Phys. Chem. B* **122**, 2715–2724 (2018)）。

c) 本研究は，茨城大学の福元博基准教授のグループとの共同研究であり，同グループで開発された環状フルオロアルキル骨格を有する新規含フッ素高透明性樹脂の化学組成の同定と分子構造，および状態解析を目的に固体 NMR による解析を行った。^{19}F 核のデカップリングをしながら ^{13}C 核を観測するには，特殊な ^{1}H–^{19}F–^{13}C 三重共鳴プローブが必要であるが，保有していないため，本測定は既設の ^{1}H–^{13}C–^{15}N 三重共鳴プローブを ^{1}H–^{13}C 二重共鳴モードで，^{19}F 核 –^{13}C 核間の強い異種核間磁気双極子相互作用により ^{13}C 核信号が広幅化するのを可能な限り抑制するため高速 MAS 条件下で行なった。同試料，およびその原料となる３種の試料各々に関して各種スペクトル編集測定を行い，

ほぼ全ての ^{13}C 信号の帰属を達成した。^{19}F 核と直接化学結合している ^{13}C 核周辺は ^{1}H 核が存在しないため，CPMAS による分極移動が生じ難くい。さらに，プローブの仕様上 ^{19}F 核のデカップリングができないため，^{19}F と直接化学結合している ^{13}C 核は広幅化して信号が消失していることが判明した。これらの一連の固体 NMR の解析から，目的とした含フッ素樹脂の合成に成功していることが判明した。本研究成果は学術論文として発表された（*J. Fluorine Chem.*, in press (2018)）。

d) 現在，新規有機分子材料に関して，他大学，および企業と各１件の共同研究を行っている。１件目は，新規芳香族分子材料に関する固体 NMR による精密構造，および状態解析を行っており，良好な結果が得られている。２件目は，産学連携の有機分子材料に関する状態解析であり，現在進行中である。

B-1) 学術論文

A. NAITO, K. OKUSHITA, K. NISHIMURA, G. S. BOUTIS, A. AOKI and T. ASAKURA, "Quantitative Analysis of Solid-State Homonuclear Correlation Spectra of Antiparallel β-Sheet Alanine Tetramers," *J. Phys. Chem. B* **122**, 2715–2724 (2018).

B-6) 受賞，表彰

西村勝之, 日本核磁気共鳴学会優秀若手ポスター賞 (2002).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本核磁気共鳴学会評議員 (2009–2010, 2013–2014).

日本核磁気共鳴学会選挙管理委員 (2005).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2004–2009).

学会の組織委員等

第 27回生体系磁気共鳴国際会議（ICMRBS）実行委員，プログラム委員 (2013–2016).

第 51回NMR 討論会プログラム委員 (2012).

学会誌編集委員

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

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

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C),「脂質膜を介した生体超分子構造形成機構の解析に資する固体NMR 測定法開発と適用」, 西村勝之 (2016年–2018年).

科研費基盤研究(C),「非標識固体試料解析のための固体NMR 新規測定法開発」, 西村勝之 (2013年–2015年).

科研費基盤研究(C),「固体NMR による新規室温磁場配向膜を用いた膜表在性タンパク質脂質結合機構の解明」, 西村勝之 (2010年–2012年).

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

B-11) 産学連携

共同研究, (株)日鉄ケミカル&マテリアル,「ナノ材料の固体NMR 研究」, 西村勝之 (2018).

C) 研究活動の課題と展望

2018年度は，これまで行ってきた脂質膜上で形成されるアミロイドβペプチドの会合中間体の構造解析完結まで後少しのところまで到達した。相当な時間を費やしたが，極めて重要な結論が出つつあると考えている。今後は，本研究で蓄積した解析手法を他のアミロイドの解析に適用して行きたいと考えている。また，大学や企業の複数の研究グループと有機分子材料の固体NMR による解析に関する共同研究を行っている。これらの共同研究も各々順調に進んでおり，今後，更に研究の枠を広げていきたいと考えている。本年度は主要な研究装置である 600MHz NMR 分光器の温度調節器が計画停電と共に故障し，長期間装置が使用できない状態が続いた。同分光器は古く，サポート期間が満了している為，一部補修部品が存在しない。今後，故障の部位によっては修理ができない可能性がある。分光器の更新は予算的に困難と考えられ，装置存続のために，独自の代替モジュールの開発等の対応が必要と思われる。

小　林　玄　器（准教授）（2018 年 4 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 AE_2LiH_3O (AE = Sr, Ba) を常圧下の簡便な固相反応によって合成する方法を確立した。常圧合成で得られた試料が Sr/Ba と H^- が欠損した組成 $AE_{2-x}LiH_{3-2x}O$ となり，AE 位置と H 位置に導入された欠損が規則配列した超格子構造をとることを結晶構造解析から明らかにした。また，Sr 系では 375 °C，Ba 系では 300 °C で欠損が不規則配列化する相転移が生じることを確認し，この相転移によって H^- 導電特性が大幅に向上することを見出した。

b) K_2NiF_4 型構造の新規酸水素化物 Ba_2ScHO_3 を合成した。結晶構造解析の結果，これまで開発してきた B サイト（八面体中心）を Li^+ が占有する物質系では，H^- が八面体の面内を優先的に占有するのに対し，Sc^{3+} 系では，H^- が八面体の頂点位置を選択的に占有することが明らかになった。この酸水素化物における H と O のアニオン配列は，ポーリング第２法則で説明することができ，O^{2-} より形式電荷の低い H^- は，より価数の低いカチオンの近傍を好んで占有する傾向をもつことが明らかになった。

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反応を検討し，窒素の水素化反応が高効率に進行することを見出した。

B-1) 学術論文

Y. IWASAKI, N. MATSUI, K. SUZUKI, Y. HINUMA, M. YONEMURA, G. KOBAYASHI, M. HIRAYAMA, I. TANAKA and R. KANNO*, “Synthesis, Crystal Structure, and Ionic Conductivity of Hydride Ion-Conducting Ln_2LiHO_3 (Ln = La, Pr, Nd),” *J. Mater. Chem. A* **6**, 23457–23463 (2018).

H. YAMASHITA, T. BROUX, Y. KOBAYASHI, F. TAKEIRI, H. UBUKATA, T. ZHU, M. A. HAYWARD, K. FUJII, M. YASHIMA, K. SHITARA, A. KUWABARA, T. MURAKAMI and H. KAGEYAMA*, “Chemical Pressure-Induced Anion Order-Disorder Transition in LnHO Enabled by Hydride Size Flexibility,” *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 11170–11173 (2018).

F. TAKEIRI, T. YAMAMOTO, N. HAYASHI, S. HOSOKAWA, K. ARAI, J. KIKKAWA, K. IKEDA, T. HONDA, T. OTOMO, C. TASSEL, K. KIMOTO and H. KAGEYAMA*, “$AgFeOF_2$: A Fluorine-Rich Perovskite Oxyfluoride,” *Inorg. Chem.* **57**, 6686–6691 (2018).

C. ZHONG, D. KATO, F. TAKEIRI, K. FUJII, M. YASHIMA, Y. FUJII, E. NISHIWAKI, A. KOREEDA, C. TASSEL, R. ABE and H. KAGEYAMA*, “Single Crystal Growth of Sillén–Aurivillius Perovskite Oxyhalides Bi_4NbO_8X (X = Cl, Br),” *Inorganics* **6**, 41 (8 pages) (2018).

R. HORIKOSHI*, F. TAKEIRI, Y. KOBAYASHI and H. KAGEYAMA, “A Gas-Reaction Apparatus Fabricated Using Readily Available Components for Demonstrating the Basic Function of Automotive Catalyst,” *Chem. Educ.* **23**, 31–34 (2018).

B-3) 総説，著書

R. KANNO, G. KOBAYASHI, K. SUZUKI, M. HIRAYAMA, D. MORI and K. TAMURA, "Synthesis and Structures of Novel Solid-State Electrolyte," *Nanoinformatics* pp. 279–298 (2018).

小林玄器,「ヒドリド導電性酸水素化物の開発」, *ペトロテック（PETROTECH）* **41(2)**, 132–137 (2018).

竹入史隆，陰山　洋,「複合アニオン化合物の研究の魅力」, *結晶学会誌* **60(5,6)**, 240–245 (2018).

B-4) 招待講演（* 基調講演）

小林玄器,「アニオン欠陥の無秩序化に伴うSr_2LiH_3OのH^-超イオン導電性」, 第28回日本MRS年次大会, 北九州国際会議場, 福岡, 2018年12月.

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体の基礎とエネルギーデバイスへの応用展開」, 有機固体若手の会2018秋の学校, 白浜荘, 滋賀, 高島, 2018年11月.

小林玄器,「ヒドリドイオン導電材料の開発と将来展望」, 第4回桜花城北セミナー , 大阪工業大学, 大阪, 2018年10月.

G. KOBAYASHI, "High H^- Conductivity in Novel Oxyhydrides $Ba_{2-x}Na_xScH_{1+x}O_{3-x}$," The 8th TOYOTA RIKEN International Workshop on Organic Semiconductors, Conductors, and Electronics, Nagoya (Japan), October 2018.

小林玄器,「層状ペロブスカイト型酸水素化物におけるアニオン配列とヒドリドイオン導電特性」, 日本金属学会2018年秋季講演大会, 東北大学, 仙台, 2018年9月.*

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体の物質開発――現状と今後の展望――」, 固体化学の新しい指針を探る研究会」第85回定例研究会, 東京大学, 東京, 2018年6月

G. KOBAYASHI, "Study on H^- Conductive Oxyhydrides," The 1st DGIST Workshop on Energy Materials, Daegu (Korea), February 2018.

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体の物質設計」, 第3回元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>／大型研究施設連携シンポジウム, 東京大学, 東京, 2018年2月.

B-6) 受賞，表彰

小林玄器, 第7回石田賞 (2018).

小林玄器, 第39回本多記念研究奨励賞 (2018).

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).

小林玄器, 手島精一記念研究賞（博士論文賞）(2011).

G. KOBAYASHI, The American Ceramics Society Spriggs Phase Equilibria Award (2010).

G. KOBAYASHI, International Conference on Materials for Advanced Technologies 2009, Best Poster Award (2009).

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回高圧討論会実行委員 (2017).

第 1回ヒドリドイオニクス研究会（第 72回固体イオニクス研究会）世話人 (2018).

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」, 2018 年 12 月 8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，$Ba_2LiH_{3-2x}O_{1+x}$ の合成に成功したことで大きく進展した。$Ba_2LiH_{3-2x}O_{1+x}$ が 300–400 ℃ で示すH^- 導電特性（$\sigma \geq 10^{-2}$ S·cm^{-1}）は，プロトン（H^+）による従来の水素のイオン輸送では達成できなかった特性である。プロトン（H^+）による水素のイオン伝導では，水または酸化物イオンとの結合を介してH^+ が伝導するため，水を固体内に結晶水として留めることができない，または H–O 結合の束縛が強いなどの理由から，中温域（200–400 ℃）で優れた導電特性が得られない。これに対し，H^- は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，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。また，新たにSc 系の酸水素化物の合成し，構成するカチオンの組み合わせを調整することで，酸水素化物中のH^- の配列を制御することに成功し，今後の新物質開発に向けた有益な知見を得ることができた

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。

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) ヒドロゲナーゼ生合成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) ヒドロゲナーゼは，多くの原核生物や一部の真核生物に含まれる金属酵素であり，水素代謝反応の中心的な役割を担っている。ヒドロゲナーゼは，その活性中心を構成する金属種の違いにより，[FeFe] 型ヒドロゲナーゼ，[NiFe] 型ヒドロゲナーゼ，[Fe] 型ヒドロゲナーゼの３種に大別される。これらのうち，[NiFe] 型ヒドロゲナーゼ中には，２分子の CN^- と１分子の CO が配位した Fe と，２つの Cys 残基が配位した Ni が，２つの Cys 残基により架橋された NiFe 二核クラスターが存在しており，この二核クラスターが [NiFe] 型ヒドロゲナーゼの活性中心として機能している。活性中心である Ni-Fe 二核金属錯体の形成を始めとし，Fe に配位した CN^- や CO の生合成にも一連のアクセサリータンパク質が関与しているが，それらの詳細な反応機構については，不明な点が多く残されている。[NiFe] 型ヒドロゲナーゼの活性中心として機能する Ni-Fe 二核金属錯体の骨格構造の一部である $Fe(CO)(CN)_2$ ユニットは，まず足場タンパク質（scaffold protein）として機能する HypCD 複合体中で組み立てられ，ヒドロゲナーゼの large subunit へと輸送されると推定されている。本年度の研究では，$Fe(CO)(CN)_2$ ユニットの構成要素である CO の生合成に関与すると推定されるアクセサリータンパク質 HypX の結晶構造解析に成功し，得られた構造情報を基に，CO 生合成反応の分子機構を明らかにした。HypX は，10-formyltetrahydrofolate dehydarogenase と相同性を示す N 末ドメインと，enoyl-CoA hydratase/isomerase と相同性を示す C 末ドメインから構成されていることがわかった。N 末ドメインは，リンカーで連結された２つのサブドメイン（サブドメイン A：残基 1 ～ 151，サブドメイン B：残基 182 ～ 270）から構成されていた。サブドメイン A は，６本の β ストランドと５本の α ヘリックスから構成されており，６本の β ストランドからなる mixed parallel β-sheet とそれを両側から挟む２本の α ヘリックス２組が，Rossmann fold を形成していた。19 残基からなるループで連結された N 末ドメインと C 末ドメイン間には，極性アミノ酸同士による 15 個の水素結合と，水分子を介した 17 個の水素結合が存在していた。HypX 内部には，N 末ドメインから C 末ドメインまで連続したキャビティーが存在しており，分子表面に開いた２つの開口部がキャビティーへの入口となっていた。本キャビティーの C 末ドメイン領域には，CoA 分子が結合していることがわかった。野生型 HypX の結晶をテトラヒドロ葉酸（THF）にソーキングすることにより，N 末ドメイン中のキャビティーに THF が結合した THF-CoA 結合型 HypX を調製し，その結晶構造の決定にも成功した。HypX の N 末ドメインの構造は，N^{10}-formyl-THF を基質とするホルミル基転移酵素と高い構造相同性を示すことから，HypX による CO 生成反応においても N^{10}-formyl-THF が基質となっているものと考えられる。HypX とホルミル基転移酵素との構造比較の結果，N^{10}-formyl-THF を基質とする HypX の酵素反応においては，His74，Asp80，Asp109 の３残基が触媒残基として機能していると考えられる。HypX 変異体の構造解析，および MD シミュレーションの結果，HypX 中に結合している CoA は，二つの異なるコンフォメー

ション（open 型および closed 型）を取り得ることがわかった。HypX による CO 生成反応では，まず open 型コンフォメーションをとった CoA と N 末ドメインに結合した N^{10}-formyl-THF との間でホルミル基転位反応が進行する。その結果生成した foryml-CoA が open 型から closed 型へとコンフォメーション変化し，C 末ドメイン中で CO 生成反応が進行するものと考えられる。

B-1) 学術論文

A. PAVLOU, H. YOSHIMURA, S. AONO and E. PINAKOULAKI, "Protein Dynamics of the Sensor Protein HemAT as Probed by Time-Resolved Step-Scan FTIR Spectroscopy," *Biophys. J.* **114**, 584–591 (2018).

B-3) 総説，著書

青野重利,「遷移金属含有型ガス分子センサータンパク質によるシグナルセンシング」, *生化学* **90**, 290–296 (2018).

S. AONO, "Overview of Gas-sensing Systems," in *Gas Sensing in Cells*, S. Aono, Ed., RSC Publishing; Cambridge, Chapter 1, pp. 1–14 (2018).

S. AONO, "Haem-Based Sensors of Carbon Monoxide," in *Gas Sensing in Cells*, S. Aono, Ed., RSC Publishing; Cambridge, Chapter 4, pp. 84–135 (2018).

B-4) 招待講演

S. AONO, "Structural Basis for Transcriptional Regulation of Heme Homeostasis in *Lactococcus lactis*," 2018 Korea-Taiwan-Japan Bioinorganic Chemistry Symposium, Daejeon (Korea), May 2018.

S. AONO, "Structural analyses of the heme uptake machinery in *Corynebacterium glutamicum*," 10th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-10), Munich (Germany), July 2018.

S. AONO, "Structure and function of transcriptional regulator adopting heme as a signaling molecule," 9th Asian Biological Inorganic Chemistry Conference (AsBIC-9), Singapore, December 2018.

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 (2010–2018).

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，様々な外部環境変化にさらされながら生育するため，外部環境変化に応答して細胞内の恒常性を維持する精緻なシステムを有している。このような外部環境変化に応答した恒常性維持システムには，外部環境の変化を感知するためのセンサータンパク質が必要不可欠である。我々の研究グループでは，遷移金属が関与するセンサータンパク質の構造機能相関解明，および遷移金属の細胞内恒常性維持機構の解明を目指して研究を進めている。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，これらの研究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) 統合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) 抗体は免疫システムにおける主要な糖タンパク質で，バイオ医薬品の中核を占めている。代表的な抗体である免疫グロブリン G（IgG）の機能は，Fab 領域における抗原認識と Fc 領域を介して行われる様々なエフェクター分子との相互作用がカップルして発揮される。したがって，IgG の動的立体構造ダイナミクスおよび各種エフェクター分子との相互作用様式を解明することは，抗体の機能を理解する上で重要な課題である。我々は，ナチュラルキラー細胞に発現する Fcγ 受容体（FcγR）に結合することで発揮される IgG の機能に着目した研究を行っている。これまで，X 線結晶構造解析，中性子小角散乱解析，およびレプリカ交換分子動力学計算解析を行い，IgG の Fc 領域と FcγR との相互作用様式を明らかにしてきた。2018 年度は，安定同位体標識 NMR 法を用いて抗体と FcγR との相互作用解析に取り組んだ。はじめに，IgG の Fc 領域ならびに細胞外領域のみからなる可溶型 FcγIIIb 受容体（sFcγRIIIb）の NMR スペクトルの完全帰属を達成した。さらに，部分的に重水素標識を施したアミノ酸を用いて調製した IgG 糖タンパク質のメチル TROSY 計測を実施した。その結果，緩和によるピーク強度減弱を大幅に軽減することができ，通常の NMR 計測では観測困難な分子量 150 kDa という巨大な IgG 全長のロイシン残基のメチル基に由来するシグナルを全て観測することに成功した。これらの計測基盤を駆使することにより，血清中という混み合った不均一環境に置かれた IgG の動的高次構造と相互作用の観測を行った。血清存在下では IgG 由来の多くのシグナルが減弱を示し，特に Fab 領域由来のシグナルにおいてこの傾向は顕著であった。このことは，IgG が血清中の成分と何らかの相互作用をしていることを意味する。より詳細な検討を行ったところ，IgG は血清中のポリクローナル IgG の Fab 領域と相互作用していることが明らかとなった。このことは，特定の抗原によって感作されていない血液環境においても，そこに内在するポリクローナル IgG が外来 IgG の主に Fab 領域を異物として認識し得ることを示唆している。一方，質量分析法を用いて血清から得られた sFcγRIIIb の部位特異的な N 型糖鎖の糖鎖プロファイリングを実施し，Fc との相互作用に関わる Asn162 における N 型糖鎖は専ら複合型糖鎖であることを明らかとした。本研究で開発した計測手法は，バイオ医薬品の評価や血中環境での分子認識メカニズムの解明など様々な応用展開が期待される。

b) 真核生物ではプロテアソームの構造形成に集合シャペロンの介助を必要とする。一方，古細菌のプロテアソームは集合シャペロンの介助なしに自律的に形成される。それにもかかわらず，古細菌には PbaA，PbaB とよばれる２種類の集合シャペロンのホモログが存在しており，これらのタンパク質はいずれも C 末端部位にプロテアソームと結合するモチーフを有している。PbaB はホモ 4 量体を形成してプロテアソームを活性化する機能を持つことが先行研究で示されたが，ホモ 5 量体を形成する PbaA はプロテアソームに対する結合能を持たず，その構造機能は不明であった。我々は様々な計測手法を駆使して PbaA の構造特性をキャラクタライズした。X 線結晶構造解析により，PbaA は C 末端ヘリックスが 5 量体のコア部分の疎水性表面を覆うように折りたたまれた閉構造と，それらがコアから突き出した開構造の２通りの構造をとることが見出されたが，溶液散乱と原子間力顕微鏡（AFM）観測により，溶液中では

PbaA は主に閉構造を形成していることが示された。これにより PbaA がプロテアソームに結合能を示さない理由が明らかとなった。そこで，C 末端の開構造がプロテアソーム活性化に関わるのではないかとの着想を得て，構造情報に基づいた分子の設計・改変を通じて，PbaA にプロテアソーム結合能を賦与することを試みた。その結果，PbaA の C 末端の変性領域を PbaB の対応する部分と入れかえることにより作製したキメラタンパク質では開構造の割合が増大しており，プロテアソームに対する結合能を獲得していることが，溶液散乱と高速 AFM 観測により明らかとなった。また実際に，生化学実験により，作出したキメラタンパク質がプロテアソーム活性化能を有していることを示した。さらに，そのような開構造の誘起には，disordered 領域に導入した２つのグルタミン酸残基の静電反発が重要であることが示された。以上のように，ホモ 5 量体タンパク質 PbaA の立体構造情報に基づき，C 末端領域のコンフォメーションを制御することによりプロテアソーム活性化能を賦与することに成功した。

B-1) 学術論文

H. YAGI, G. YAN, T. SUZUKI, S. TSUGE, T. YAMAGUCHI and K. KATO, “Lewis X-Carrying Neoglycolipids Evoke Selective Apoptosis in Neural Stem Cells,” *Neurochem. Res.* **43**, 212–218 (2018).

M. YAGI-UTSUMI, A. SIKDAR, T. KOZAI, R. INOUE, M. SUGIYAMA, T. UCHIHASHI, H. YAGI, T. SATOH and K. KATO, “Conversion of Functionally Undefined Homopentameric Protein PbaA into a Proteasome Activator by Mutational Modification of Its C-Terminal Segment Conformation,” *Protein Eng., Des. Sel.* **31**, 29–36 (2018).

J. KICUNTOD, K. SANGPHEAK, M. MUELLER, P. WOLSCHANN, H. VIERNSTEIN, S. YANAKA, K. KATO, W. CHAVASIRI, P. PONGSAWASDI, N. KUNGWAN and T. RUNGROTMONGKOL, “Theoretical and Experimental Studies on Inclusion Complexes of Pinostrobin and β-Cyclodextrins,” *Sci. Pharm.* **86**, 5 (15 pages) (2018).

H. YAGI, D. TAKAKURA, L. T. ROUMENINA, W. H. FRIDMAN, C. SAUTÈS-FRIDMAN, N. KAWASAKI and K. KATO, “Site-Specific *N*-Glycosylation Analysis of Soluble Fcγ Receptor IIIb in Human Serum,” *Sci. Rep.* **8**, 2719 (7 pages) (2018).

K. KATO, T. FURUHASHI, K. KATO, A. ODA and E. KURIMOTO, “The Assembly Mechanism of Coiled-Coil Domains of the Yeast Cargo Receptors Emp46p/47p and the Mutational Alteration of pH-Dependency of Complex Formation,” *J. Biochem.* **163**, 441–446 (2018).

R. YOGO, S. YANAKA and K. KATO, “Backbone ^{1}H, ^{13}C, and ^{15}N Assignments of the Extracellular Region of Human Fcγ Receptor IIIb,” *Biomol. NMR Assignments* **12**, 201–204 (2018).

K. MUKAIGASA, T. TSUJITA, V. T. NGUYEN, L. LI, H. YAGI, Y. FUSE, Y. NAKAJIMA-TAKAGI, K. KATO, M. YAMAMOTO and M. KOBAYASHI, “Nrf2 Activation Attenuates Genetic Endoplasmic Reticulum Stress Induced by a Mutation in the Phosphomannomutase 2 Gene in Zebrafish,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **115**, 2758–2763 (2018).

N. SRIWILAIJAROEN, S. NAKAKITA, S. KONDO, H. YAGI, K. KATO, T. MURATA, H. HIRAMATSU, T. KAWAHARA, Y. WATANABE, Y. KANAI, T. ONO, J. HIRABAYASHI, K. MATSUMOTO and Y. SUZUKI, “*N*-Glycan Structures of Human Alveoli Provide Insight into Influenza A Virus Infection and Pathogenesis,” *FEBS J.* **285**, 1611–1634 (2018).

S. YANAKA, H. YAGI, R. YOGO, M. YAGI-UTSUMI and K. KATO, “Stable Isotope Labeling Approaches for NMR Characterization of Glycoproteins Using Eukaryotic Expression Systems,” *J. Biomol. NMR* **71**, 193–202 (2018).

K. MORITA, Y. Y. YAMAMOTO, A. HORI, T. OBATA, Y. UNO, K. SHINOHARA, K. NOGUCHI, K. NOI, T. OGURA, K. ISHII, K. KATO, M. KIKUMOTO, R. ARRANZ, J. M. VALPUESTA and M. YOHDA, "Expression, Functional Characterization, and Preliminary Crystallization of the Cochaperone Prefoldin from the Thermophilic Fungus Chaetomium thermophilum," *Int. J. Mol. Sci.* **19**, 2452 (13 pages) (2018).

Y. HISAMATSU, N. UMEZAWA, H. YAGI, K. KATO and T. HIGUCHI, "Design and Synthesis of a 4-Aminoquinoline-Based Molecular Tweezer that Recognizes Protoporphyrin IX and Iron(III) Protoporphyrin IX and Its Application as a Supramolecular Photosensitizer," *Chem. Sci.* **9**, 7455–7467 (2018).

Y. SAKATA, K. YABUNAKA, Y. KOBAYASHI, H. OMIYA, N. UMEZAWA, H.-S. KIM, Y. WATAYA, Y. TOMITA, Y. HISAMATSU, N. KATO, H. YAGI, T. SATOH, K. KATO, H. ISHIKAWA and T. HIGUCHI, "Potent Antimalarial Activity of Two Arenes Linked with Triamine, Designed to Have Multiple Interactions with Heme," *ACS Med. Chem. Lett.* **9**, 980–985 (2018).

B-3) 総説，著書

T. IKEYA, D. BAN, D. LEE, Y. ITO, K. KATO and C. GRIESINGER, "Solution NMR Views of Dynamical Ordering of Biomacromolecules," *Biochim. Biophys. Acta, Gen. Subj.* **1862**, 287–306 (2018).

K. MATSUZAKI, K. KATO and K. YANAGISAWA, "Ganglioside-Mediated Assembly of Amyloid β-Protein: Roles in Alzheimer's Disease," *Prog. Mol. Biol. Transl. Sci.* **156**, 413–434 (2018).

K. KATO, S. YANAKA and H. YAGI, "Technical Basis for Nuclear Magnetic Resonance Approach for Glycoproteins," in *Experimental Approaches of NMR Spectroscopy*, The Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan, Ed., Springer Nature; Singapore, pp. 415–438 (2018).

K. KATO and T. SATOH, "Structural Insights on the Dynamics of Proteasome Formation," *Biophys. Rev.* **10**, 597–604 (2018).

山口拓実，渡邉東紀男，矢木宏和，加藤晃一,「分子動力学計算とNMR 計測を用いた糖鎖の配座空間探査」, *J. Comput. Chem. Jpn.* **17**, 1–7 (2018).

矢木宏和，加藤晃一,「常磁性NMR 法と計算科学を組み合わせた糖鎖の動的コンホメーション解析」, *生化学* **90**, 198–202 (2018).

加藤晃一,「糖鎖のコンフォメーション解析(1)」, 未来を創るグライコサイエンス――我が国のロードマップ――, 日本糖鎖科学コンソーシアム（JCGG）編, pp. 172–174 (2018).

T. YAMAGUCHI and K. KATO, "Molecular Dynamics of Gangliosides," in *Gangliosides*, S. Sonnino and A. Prinetti, Eds., Methods in Molecular Biology, Humana Press; New York, **1804**, pp. 411–417 (2018).

K. KATO, H. YAGI and T. YAMAGUCHI, "NMR Characterization of the Dynamic Conformations of Oligosaccharides," in *Modern Magnetic Resonance, 2nd Edition*, G. A. WEBB, Ed., Springer International Publishing, pp. 737–754 (2018).

加藤晃一，谷中冴子,「抗体のNMR 研究の趨向と展望」, *SAR News* **35**, 1–7 (2018).

H. YAGI, S. YANAKA and K. KATO, "Structure and Dynamics of Immunoglobulin G Glycoproteins," in *Advances in experimental medicine and biology*, **1104**, 219–235 (2018).

T. SATOH and K. KATO, "Structural Aspects of ER Glycoprotein Quality-Control System Mediated by Glucose Tagging," in *Advances in experimental medicine and biology*, **1104**, 149–169 (2018).

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」, *薬学雑誌* **138**, 1495–1502 (2018).

B-4) 招待講演

K. KATO, “Dynamical ordering in proteasome formation for creation of integrated functions,” The 6th International Symposium on Dynamical Ordering of Biomolecular Systems for Creation of Integrated Functions, 浜松, 2018年1月.

矢木真穂,「NMR 分光法を基軸としたタンパク質の構造ダイナミクスと分子集合メカニズムの解明」, 日本薬学会第 138年会, 金沢, 2018年 3月.

谷中冴子, **與語理那**, **矢木宏和**, **加藤晃一**,「抗体医薬の作動メカニズムの構造基盤」, 日本薬学会第 138年会, 金沢, 2018年 3月.

谷中冴子, **與語理那**, **矢木宏和**, **加藤晃一**,「血清環境下における抗体の相互作用解析」, 第 18回日本蛋白質科学会年会, 新潟, 2018年 6月.

K. KATO, “What is life? What is ExCELLS?” Frontier Bioorganization Forum 2018, 岡崎, 2018年7月.

K. KATO and T. YAMAGUCHI, “Application of coordination chemistry approach to structural analysis of carbohydrate chains of biological interest,” 43rd International Conference on Coordination Chemistry, 仙台, 2018年8月.

谷中冴子,「部位選択的重水素化を活用した抗体の血清中での相互作用解析」, 第 19回若手NMR 研究会, 呉, 2018年 8月.

加藤晃一, **深瀬浩一**, **秋吉一成**, **千葉靖典**, **門松健治**,「シンポジウム：糖鎖関連大型研究の現状と将来展望」, 第 37回日本糖質学会年会, 仙台, 2018年 8月.

加藤晃一,「糖タンパク質の構造計測」, バイオ計測サイエンス研究部会第 1回シンポジウム, 大阪, 2018年 9月.

S. YANAKA, H. WATANABE, R. YOGO, H. YAGI, T. UCHIHASHI and K. KATO, “Structural characterization of antibody interactions in situ,” 第56回日本生物物理学会年会, 岡山, 2018年9月.

谷中冴子,「抗体研究から学ぶこと」, 第 91回日本生化学会大会生化学若い研究者の会創立 60周年記念シンポジウム「生命科学の来し方行く末」, 京都, 2018年 9月.

加藤晃一,「生命分子の動秩序形成と機能創発」, 第 1回ExCELLS シンポジウム, 岡崎, 2018年 10月.

加藤晃一,「アルツハイマー病発症メカニズムを知る鍵,「アミロイド線維」を宇宙実験でつくる」, 未来へのバイオ技術勉強会「宇宙と健康医療研究～抗加齢を中心に」, 東京, 2018年 11月.

加藤晃一,「ExCELLS」, 教育研究評議会（第 58回）における研究発表, 東京, 2018年 11月.

K. KATO, “An integrative structural study of antibody,” The 6th International Symposium on Drug Discovery and Design by NMR, 横浜, 2018年11月.

K. KATO, “In situ structural characterization of antibody interactions,” The 18th KIAS Conference on Protein Structure and Function, Seoul (Korea), November 2018.

M. YAGI-UTSUMI, “NMR structural analyses of molecular assembly of amyloid-β,” The 2nd IMS-NANOTEC Joint Research Meeting, 岡崎, 2018年11月.

B-6) 受賞, 表彰

加藤晃一, 日本薬学会奨励賞 (2000).

神谷由紀子, 特定領域研究「タンパク質の社会」全体班会議ポスター優秀賞 (2008).

西尾美穂, 第 73回日本生化学会中部支部例会奨励賞 (2009).

神谷由紀子, 糖鎖科学名古屋拠点若手研究者奨励賞 (2009).

矢木真穂, 第 74回日本生化学会中部支部例会奨励賞 (2010).

西尾美穂, 糖鎖科学名古屋拠点第8回「若手の力フォーラム」奨励賞 (2010).

加藤晃一, 日本薬学会学術振興賞 (2011).

矢木真穂, 第 11回蛋白質科学会年会若手奨励賞 (2011).

山本さよこ, The International Symposium on Nuclear Magnetic Resonance 2011 (ISNMR 2011) 若手ポスター賞 (2011).

加藤晃一, 第 48回ベルツ賞1等賞 (2011).

山口拓実, 日本化学会第 92春季年会優秀講演賞（学術） (2012).

Ying 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).

Ying 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).

Tong 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).

Arunima SIKDAR, The Winter School of Sokendai/ Asian CORE Program, Poster Presentation Award (2015).

Tong 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).

Tong 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).

與語理那, The 6th International Symposium of “Dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions” Poster Presentation Award (2018).

矢木真穂, 平成 30年度日本薬学会奨励賞 (2018).

齋藤泰輝, ExCELLS Young Scientists Forum 2018, Poster Presentation Award (2018).

本田怜奈, 平成 30年度糖鎖科学中部拠点奨励賞 (2018).

小藤加奈, 日本病院薬剤師会東海ブロック・日本薬学会東海支部合同学術大会 2018 ベストプレゼン賞 (2018).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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

日本生化学学会評議員 (2002–), 代議員 (2005–).

日本糖質学会評議員 (2003–), 理事 (2013–).

日本核磁気共鳴学会評議員 (2006–2012, 2016–), 理事 (2008–2012, 2014–), 副会長 (2016–2017), 会長 (2018–).

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 (2016–2018).

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 (2014–2016), 副支部長 (2015–2016).

学会の組織委員等

The 71st Okazaki Conference “New perspectives on molecular science of glycoconjugates” 組織委員 (2011).

第 51回NMR 討論会運営委員 (2012).

第 27回生体系磁気共鳴国際会議（ICMRBS）実行委員 (2013–2016).

第 13回糖鎖科学コンソーシアムシンポジウム世話人代表 (2015).

第 25回バイオイメージング学会組織委員・大会長 (2016).

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).

国際磁気共鳴学会 2021（ISMAR2021）実行委員 (2018–).

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 (2013–2017).

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 (2016–2018), 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 (2016–2017).

日本学術会議連携会員 (2017–).

先端科学（FoS）シンポジウム事業委員会委員 (2018–).

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 (2013–2017).

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.

一般財団法人バイオインダストリー協会「未来へのバイオ技術」講演 (2018).

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」「物理系実習Ⅱ」「創薬科学・知的財産活用論」「特色科目2 創薬と生命」, 2018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」, 2018年.

理化学研究所, 客員研究員, 2009年4月–2018年3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– .

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連関の探査」, 加藤晃一 (2008年–2013年).

科研費基盤研究(B),「ポスト小胞体品質管理における細胞内レクチンの分子認識と超分子形成の構造基盤の解明」, 加藤晃一 (2009年–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–2018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–2017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–2018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–2018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–2018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–2018年).

科研費若手研究,「抗体とFc 受容体の新規相互作用様式の解明と抗体工学への展開」, 谷中冴子 (2018年–).

B-11) 産学連携

産業技術総合研究所,「酵母発現系での糖タンパク質の生産法」, 加藤晃一 (2018年).

大陽日酸（株),「タンパク質の安定同位体標識技術の開発」, 加藤晃一 (2018年).

C) 研究活動の課題と展望

今後は，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査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す。生命体を構成する多様な分子素子がダイナミックに秩序形成する仕組みを真に理解するためには，生体分子を取り巻く不均一かつ複雑な環境因子の影響を考慮することが必要不可欠である。現在，JAXAとの共同研究を通じて，国際宇宙ステーション「きぼう」を利用して微小重力環境下においてアミロイド線維を形成し，それを用いた構造解析を実施している。さらに，極限環境において生命活動を司る分子集団の構造・動態・機能の解析を通じて生命の環境適応の機構を理解することを目指すとともに，動物細胞における分泌タンパク質の細胞内輸送と糖鎖修飾の連関の仕組みを探究する。

飯　野　亮　太（教授）（2014 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：生物物理学，分子モーター，分子機械，１分子計測，構造解析，合理設計，網羅的変異導入，自動化

A-2) 研究課題：

a) リニア分子モーターキチナーゼのエネルギー変換機構の解明

b) １分子オングストローム計測法の開発とリニア分子モーターキネシンへの適用

c) マルチカラー高速１分子計測法の開発

d) 高速原子間力顕微鏡による脱凝集シャペロン ClpB の構造ダイナミクスの解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) プロセッシブキチナーゼ *Sm*ChiA 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。*Sm*ChiA を金ナノ粒子で標識し，全反射暗視野顕微鏡を用いて高い位置決定精度と時間分解能で１分子観測することで，キチン分解反応に伴う 1 nm 間隔のステップ運動を直接可視化することに初めて成功した。速度論的同位体効果を利用してキチンの分解に対応する時定数を決定し，運動中の反応素過程としては速く，律速段階ではないことを明らかにした。また，X線結晶構造解析により運動中間体のキチン結合状態を明らかにし，さらに分子動力学シミュレーションを用いて *Sm*ChiA が直進運動する様子を解析した結果，キチンの脱結晶化が運動の律速段階であることを解明した。さらに，前進・後退の 1 nm ステップの割合と，反応時定数から計算される分解が起こる確率が同じであることから，*Sm*ChiA はレールであるキチンを切断し後退ステップのエネルギー障壁を上げることでブラウン運動（熱ゆらぎ）を前進に偏らせると結論づけた。言い換えると，*Sm*ChiA は Burnt-bridge 機構により一方向に運動するブラウニアンラチェットモーターであることを導き出した。

b) 金ナノ粒子は，生体分子モーターが働く様子を，光学顕微鏡で１分子計測するためのプローブとして用いられている。光学顕微鏡による金ナノ粒子の観察における位置決定精度の原理的な限界を解明し，原子レベルの位置決定精度を達成することに成功した。また，金ナノ粒子からの信号光強度を高める輪帯照明型の全反射暗視野顕微鏡を構築し，マイクロ秒オーダーの時間分解能と原子レベルの位置決定精度を両立した。さらに開発した装置を用いて，生体内の長距離物質輸送を担うモータータンパク質キネシンの挙動を観察し，キネシンの足の動きを 10 マイクロ秒の時間分解能で詳細に追跡することに成功した。

c) 金ナノ粒子，銀ナノ粒子，および金と銀の合金ナノ粒子をプローブとし，複数のレーザーと分光器を用いた多色同時散乱イメージング光学系を構築した。これにより，複数種の分子間の相互作用や分子内の構造変化を高速かつ高精度にイメージングできる１分子計測法を開発した。

d) 高速原子間力顕微鏡（高速 AFM）を用い，凝集したタンパク質を再生する ClpB リングの構造変化を直接観察することに初めて成功した。ClpB リングの構造変化は，ネイティブ質量分析法，電子顕微鏡単粒子解析法，超遠心分析沈降速度法からも支持された。これらの結果より，ClpB のリングは ATP の結合・加水分解に応じて，円型・らせん型・ねじれた半らせん型と大きく構造変化することが明らかになった。また，変異型 ClpB を用いた解析により，これらの構造変化が脱凝集を引き起こす原動力となっていること，および ClpB が持つ２つの ATP 結合部位がそれぞれ固有の役割を担っていることを明らかにした。

B-1) 学術論文

J. ANDO, A. NAKAMURA, A. VISOOTSAT, M. YAMAMOTO, C. SONG, K. MURATA and R. IINO, "Single-Nanoparticle Tracking with Angstrom Localization Precision and Microsecond Time Resolution," *Biophys. J.* **115**, 2413–2427 (2018). Doi: 10.1016/J.Bpj.2018.11.016

K. FUJIMOTO, Y. MORITA, R. IINO, M. TOMISHIGE, H. SHINTAKU, H. KOTERA and R. YOKOKAWA, "Simultaneous Observation of Kinesin-Driven Microtubule Motility and Binding of Adenosine Triphosphate Using Linear Zero-Mode Waveguides," *ACS Nano* **12**, 11975–11985 (2018). Doi: 10.1021/Acsnano.8b03803

J. TSUNODA, C. SONG, F. LICA IMAI, J. TAKAGI, H. UENO, T. MURATA, R. IINO and K. MURATA, "Off-Axis Rotor in Enterococcus Hirae V-Atpase Visualized by Zernike Phase Plate Single-Particle Cryo-Electron Microscopy," *Sci. Rep.* **8**, 15632 (10 pages) (2018). Doi: 10.1038/S41598-018-33977-9

A. NAKAMURA, K. OKAZAKI, T. FURUTA, M. SAKURAI and R. IINO, "Processive Chitinase is Brownian Monorail Operated by Fast Catalysis after Peeling Rail From Crystalline Chitin," *Nat. Commun.* **9**, 3814 (12 pages) (2018). Doi: 10.1038/S41467-018-06362-3

F. KAWAI, A. NAKAMURA, A. VISOOTSAT and R. IINO, "Plasmid-Based One-Pot Saturation Mutagenesis and Robot-Based Automated Screening for Protein Engineering," *ACS Omega* **3**, 7715–7726 (2018). Doi: 10.1021/Acsomega.8b00663

T. UCHIHASHI, Y. H. WATANABE, Y. NAKAZAKI, Y. YAMASAKI, T. WATANABE, T. MARUO, S. UCHIYAMA, S. SONG, K. MURATA, R. IINO and T. ANDO, "Dynamic Structural States of ClpB Involved in Its Disaggregation Function," *Nat. Commun.* **9**, 2147 (12 pages) (2018). Doi: 10.1038/S41467-018-04587-W

A. NAKAMURA, T. TASAKI, Y. OKUNI, C. SONG, K. MURATA, T. KOZAI, M. HARA, H. SUGIMOTO, K. SUZUKI, T. WATANABE, T. UCHIHASHI, H. NOJI and R. IINO, "Rate Constants, Processivity, and Productive Binding Ratio of Chitinase A Revealed by Single-Molecule Analysis," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 3010–3018 (2018). DOI: 10.1039/C7CP04606E

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. FUJIMOTO, R. IINO, M. TOMISHIGE, H. SHINTAKU, H. KOTERA and R. YOKOKAWA, "Fluorescent Observation of ATP Binding in Kinesin Driven Microtubule Gliding Using Nano-Slits," *2018 IEEE Micro Electro Mechanical Systems (MEMS)*, 432–435 (2018).

B-3) 総説，著書

A. NAKAMURA and R. IINO, "Visualization of Functional Structure And Kinetic Dynamics of Cellulases," *Adv. Exp. Med. Biol.* **1104**, 201–217 (2018).

R. IINO, S. SAKAKIHARA, Y. MATSUMOTO and K. NISHINO, "Large-Scale Femtoliter Droplet Array for Single Cell Efflux Assay of Bacteria," *Methods in Molecular Biology*, Springer, **1700**, 331–341 (2018).

R. IINO, T. IIDA, A. NAKAMURA, E. SAITA, H. YOU and Y. SAKO, "Single-Molecule Imaging and Manipulation of Biomolecular Machines and Systems," *Biochim. Biophys. Acta, Gen. Subj.* **1862**, 241–252 (2018).

飯野亮太,「基礎講座：光学系構築・実践編 全反射蛍光顕微鏡（TIRFM）による1分子イメージング」, *応用物理* **87(7)**, 531–535 (2018).

飯野亮太,「基礎講座：光学系構築・実践編 全反射蛍光顕微鏡（TIRFM）を作ってみよう」, *応用物理* **87(6)**, 442–446 (2018).

B-4) 招待講演

R. IINO, "Operation and Design Principles of Protein Molecular Motors," The 2nd IMS-Nanotec Joint Research Meeting, Okazaki (Japan), November 2018.

R. IINO, "Commonalities and Disparities in Mechanisms of Protein Molecular Motors Revealed by Single-Molecule Imaging Analyses with Plasmonic Nanoprobes," 1st SNU Evolutionary Materials Workshop, Seoul (Korea), October 2018.

R. IINO, "Single-Molecular Videography of Protein Molecular Motors," Telluride Workshop on "Molecular Videography," Telluride, Co (U.S.A.), September 2018.

R. IINO, "Molecular Engines: An Introduction," The 79th Okazaki Conference: Synthetic, Biological, and Hybrid Molecular Engines, Okazaki (Japan), August 2018.

R. IINO, "Processive Chitihase is a Brownian Monorail Operated by Fast Catalysis after Peeling a Rail From Chitin Crystal," Workshop on Molecules, Materials, Devices and Systems, Columbia University, New York (U.S.A.), May 2018.

R. IINO, "High-Speed Single-Molecule Imaging Analysis of Protein Molecular Motors with Plasmonic Nanoprobes," Seminar in IBS Center for Molecular Spectroscopy and Dynamics, Korea University, Seoul (Korea), April 2018.

J. ANDO, "High-speed, high-precision, multi-color imaging of single biomolecules with plasmonic nanoprobes," APC 2018, 10th Asian Photochemistry Conference, The 4th International Symposium on Frontiers in Bioimaging, Taipei (Taiwan), December 2018.

J. ANDO, "High-speed, high-precision, multi-color imaging of single biomolecules with plasmonic nanoprobes," SENDAI 2018, An update on molecular motors: Open challenges and new perspectives, Sendai (Japan), November 2018.

J. ANDO, "High-speed, high-precision single-molecule imaging of dynein with plasmonic nanoprobes," The 79th Okazaki Conference: Synthetic, Biological, and Hybrid Molecular Engines, Okazaki (Japan), September 2018.

A. NAKAMURA, "Processive chitinase is Brownian ratchet moving unidirectionally by fast catalysis," SENDAI 2018, An update on molecular motors: Open challenges and new perspectives, Sendai (Japan), November 2018.

A. NAKAMURA, "Direct observation of 1 nm steps of a "burnt-bridge" Brownian ratchet SmChiA on crystalline chitin with gold nanoprobe," The 79th Okazaki Conference: Synthetic, Biological, and Hybrid Molecular Engines, Okazaki (Japan), August 2018.

A. NAKAMURA, "Resolving 1 nm steps of a Brownian-ratchet chitinase with gold nano particle," International Symposium on Molecular Science—Physical Chemistry/Theoretical Chemistry, Chemoinformatics, Computational Chemistry—Cosponsored by Japan Society for Molecular Science, Funabashi (Japan), March 2018.

飯野亮太,「タンパク質分子モーターにとって協調性とは？」, 第7回発動分子科学セミナー, 東京工業大学, 横浜, 2018年11月.

飯野亮太,「バイオマス多糖を効率的に分解する生体分子モーターの作動原理」, 高分子討論会, 北海道大学, 札幌, 2018年9月.

飯野亮太,「プラズモニックナノプローブを用いた生体分子の時分割1分子イメージング」, 物理学会秋季大会, 同志社大, 京田辺, 2018年9月.

飯野亮太,「生体・人工分子マシンの共通原理の理解を目指して」, AMO 討論会, 東北大学, 仙台, 2018年6月.

飯野亮太,「タンパク質分子モーターの協調性とは？」, 情報通信研究機構未来ICT研究所, 未来ICT研究所, 神戸, 2018年4月.

飯野亮太,「タンパク質分子モーターの作動原理と設計原理の理解に向けて」, 第 4回生体分子科学シンポジウム, 京都大学, 京都, 2018年 2月.

中村彰彦,「キチン加水分解酵素はATP を使わずに運動するブラウニアンラチェットである」, 分子モーター討論会, 東京大学, 東京, 2018年 11月.

中村彰彦,「キチン加水分解酵素は速い加水分解でブラウン運動を制御する」, 多糖の未来フォーラム, 京都大学, 京都, 2018年 11月.

B-6) 受賞, 表彰

中村彰彦, 第 32回セルラーゼ研究会ポスター賞 (2018).

飯田龍也, 日本生物物理学会中部支部講演会最優秀発表賞 (2018).

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)

日本生物物理学会分野別専門委員(E-04. タンパク質工学) (2018).

学会の組織委員等

第 25回日本バイオイメージ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

名古屋大学大学院理学研究科, 客員教授, 2018年– .

B-10) 競争的資金

科研費新学術領域研究「発動分子科学」(計画研究),「生体・人工発動分子によるエネルギー変換過程の1分子計測法の開発」, 飯野亮太 (2018年–2022年).

科研費基盤研究(B),「生体1分子オングストローム計測法の開発」, 飯野亮太(2018年–2020年).

科研費新学術領域研究「レゾナンスバイオ」(公募研究),「プラズモニックナノ粒子を用いたマルチカラー1分子観察法の開発」, 飯野亮太 (2018年).

科研費基盤研究(B),「金属ナノ粒子によるタンパク質ドメインの高速高精度イメージング技術の開発」, 安藤潤 (2018年–2020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,「独立に進化した動物・植物・微生物の糖質消化システムを分子機能構造から読み解く」, 中村彰彦 (2018年).

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ジングサイエンス研究分野プロジェクト,「プラズモニックナノ粒子による生体分子のマルチカラー1分子イメージング法の開発」, 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ジングサイエンス研究分野プロジェクト,「金ナノプローブ表面の電場増強を利用した生体分子モーターの動きと化学反応の複合1分子計測法の開発」, 飯野亮太 (2016年).

科研費新学術領域研究「動的秩序と機能」(公募研究),「糖質加水分解サイボーグリニア分子モーターの創生」, 飯野亮太 (2016年–2017年).

科研費新学術領域研究「柔らかな分子系」(公募研究),「金属ナノプローブを用いた分子モーターの運動と構造変化の高速1分子計測」, 飯野亮太 (2016年–2017年).

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ジングサイエンス研究分野プロジェクト,「金ナノロッドの高速高精度光学イメージングによる生体分子モーターの複合1分子計測」, 飯野亮太 (2015年).

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

科研費研究活動スタート支援,「セルロース分解酵素のモーター運動に寄与する構造要素の解明」, 中村彰彦 (2015年–2016年).

科研費新学術領域研究「動的秩序と機能」(公募研究),「ATP駆動サイボーグ回転分子モーターの創生」, 飯野亮太 (2014年–2015年).

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

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

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

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

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

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

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

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

科研費若手研究(B),「プロトン駆動力で回転する生体分子モーター ATP 合成酵素の1分子計測」, 飯野亮太 (2006年–2008年).

日本学術振興会二国間交流事業共同研究,「生細胞内で働くATP 合成酵素の回転速度を1分子技術で計測する」, 飯野亮太 (2010年–2011年).

大阪大学産業科学研究所リーダーシップ支援経費,「1細菌培養・観察・回収用マイクロドロップレットアレイの開発」, 飯野亮太 (2009年).

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。*Tr*Cel6A と*Tr*Cel7A, および*Sm*ChiA と*Sm*ChiB の混合によるシナジー効果の機構を明らかにする。キチナーゼについては*Sm*ChiA と運動方向が逆である*Sm*ChiB 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*Sm*ChiA と*Sm*ChiB 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_oV_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。また，先端的生体1分子計測法の開発として，金・銀ナノ粒子を用いた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の位置決定精度と時間分解能の改善, 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。さらに, ロボットを用い，タンパク質分子モーター変異体の網羅的機能スクリーニングの自動化を行う。

栗　原　顕　輔（特任准教授）（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) アミノ酸重合と液－液相分離型液滴の自発的形成の協奏

b) 粒子内包型ベシクルにみる偏在現象と自己再生産モデルの構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 前生物的環境において原始細胞の境界が，情報分子である核酸やペプチドといった重合体と，どのように協奏し進化してきたかについては未解明である。我々はこのようなモデル原始細胞の構築を目的とし，還元的雰囲気の水中で自発的にペプチドを重合しうる，ジスルフィドとチオエステル部位を有したモノマー前駆体を設計合成した。ペプチドが水中で自発的に形成されるとともに，反応進行にともない細胞サイズの液滴の形成が見出された。水中で自発的に重合したペプチドが，その反応過程で脱離した疎水性分子と水との界面を安定化させることで分子集合体を形成したと考えられる。

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る。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，コロイド粒子を稠密に内包するベシクルを調製した。粒子がベシクル内膜でサイズの違いに応じて偏在する現象を，枯渇効果および浸透圧平衡に基づくモデルを構築して議論した。さらに発展系として，このコロイド粒子内包ベシクルを用いた自己再生産ベシクルの構築に成功した。

B-1) 学術論文

Y. NATSUME, K. KOMORI, K. ITOH and K. KURIHARA, “Spontaneous Localization of Two Kinds of Hard Spheres in Giant Vesicles,” *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.* **43[6]**, 333–338 (2018).

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 (2018).

B-4) 招待講演

栗原顕輔,「原始的なタンパク質を内包する原始細胞モデルの創成」, アストロバイオロジーセンター若手ワークショップ, 東京, 2018 年 2 月.

栗原顕輔,「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」, 第 6 回宇宙における生命ワークショップ, 東京, 2018 年 2 月.

栗原顕輔,「構成生物学的アプローチで迫る人工細胞の創成」, 野口遵研究助成金講演会, 東京, 2018 年 3 月.

栗原顕輔,「構成生物学的アプローチで迫る人工細胞構築」, 大阪大学蛋白質研究所セミナー：再構成アプローチが開拓する生体膜・膜タンパク質研究の最前線, 大阪, 2018 年 3 月.

栗原顕輔,「柔らかい分子集合体からなる原始細胞モデルの研究」, 公益財団法人クリタ水・環境科学振興財団研究優秀賞式典, 東京, 2018年8月.

B-6) 受賞, 表彰

栗原顕輔, クリタ水・環境科学研究優秀賞 (2018).

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).

職場体験学習受入岡崎市立竜海中学校 (2018).

出前授業「中学生のためのサイエンスセミナー　化学で生命を創る!?」岡崎市立福岡中学校 (2018).

自然科学研究機構広報誌OKAZAKI 第57号取材 (2018).

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」, 2018年10月–11月.

B-10) 競争的資金

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).

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).

クリタ水環境科学振興財団水を究める研究助成,「分子システムから迫る細胞内の水の意義」, 栗原顕輔 (2018年–2019年).

油脂工業会館研究助成,「ペプチド合成系を内包する自己再生産ベシクルの構築」, 栗原顕輔 (2018年–2019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).

中部科学技術センター学術奨励研究助成,「ドラッグデリバリーシステムを指向したオリゴペプチド内包リポソームの開発」, 栗原顕輔 (2016年–2017年).

クリタ水環境科学振興財団萌芽研究助成,「原始海洋に誕生した細胞モデルの研究」, 栗原顕輔 (2016年–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,「リピッドワールド仮説に基づく原始細胞モデルの基礎研究」, 栗原顕輔 (2016年–2017年)

クリタ水環境科学振興財団萌芽研究助成,「生命誕生における水の汚れの重要性」, 栗原顕輔 (2015年–2016年).

自然科学研究機構新分野創成センター宇宙における生命研究分野プロジェクト,「 生命材料物質の組み立て場としてみた原始細胞膜の基礎的研究 」, 栗原顕輔 (2015年–2016年).

日本科学協会笹川科学研究助成,「自己増殖するベシクル型人工細胞を用いた生命起源解明への挑戦」, 栗原顕輔 (2015年–2016年).
豊秋奨学会海外渡航費助成,「内部で触媒システムを生成する人工細胞の構築」, 栗原顕輔 (2015年).
野口研究所野口遵研究助成,「ドラッグデリバリーシステムを志向した自律構築型リポソームの開発」, 栗原顕輔 (2014年–2016年).

C) 研究活動の課題と展望

課題a) について我々はすでに，反応溶液に対する剪断処理と膜分子前駆体添加を繰り返すことで，液−液相分離した液滴が自己再生産ダイナミクスを示すことを明らかにしている。この自己再生産液滴は，2本鎖DNAを濃縮する特性があることも共焦点レーザー走査型蛍光顕微鏡で観測した。今後は，生命起源において，自発的な重合反応と液滴形成の協奏が核酸やペプチドを濃縮し，反応場として機能し得たことについてさらに検討・発展させたい。一方で課題b) の人工細胞モデルが増殖するためには，栄養を取り込んで自己再生産することが必要である。我々は，内部にポリスチレンビーズを含むリン脂質ベシクルに脂肪酸を添加することで，ベシクル膜内における膜分子数が増大して分裂するという単純なモデルを構築することに成功した。またビーズ内包率に応じて分裂挙動が変わることも見いだした。現在，ベシクル膜面積増加と内部粒子の特定の体積分率という，二つの条件が揃ったときの分裂について議論している。今後は，内部粒子の変換や分裂挙動のシミュレーションモデルの構築などを行う予定である。

倉　橋　拓　也（助教）（2002 年 6 月 15 日着任）

A-1) 専門領域：錯体化学，触媒化学

A-2) 研究課題：

a) 酸素酸化反応の開発を目的とする酸素分子活性化の錯体化学研究

b) 超微細気泡を反応場とするメタン光酸化触媒の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 大気中の酸素分子は最も理想的な酸化剤であり，物質合成に加えて汚染物質の酸化分解等への応用が期待される。しかしながら酸素分子を酸化剤とする強力な酸化反応の例は極めて限られている。アルカリ水溶液との反応をトリガーとして酸素分子を活性化する新規手法の開発を目的として，水酸化物イオンと金属錯体触媒の反応を検討してきた。これまでの研究で水酸化物イオンの結合した金属イオンは酸化還元電位が大きく低下して，酸化されやすくなっていることを見出した。本年度は，金属イオンの周りの有機配位子に光触媒機能を導入して，金属イオンを逐次一電子酸化して酸化触媒活性につなげることを検討した。

b) 基礎的な錯体化学研究で得られた知見を基盤にして，酸素分子のみを反応試薬とする光酸化触媒を開発して，コスト競争力が要求されるメタンの化学変換に応用する。ガス状基質に適した反応場の開発も本研究の主要課題の一つに位置づけており，この目的のため水溶液中で発生させたメタン－酸素混合ガスの超微細気泡の活用を検討する。本年度は，加圧条件で超微細気泡を発生させるための装置設計と製作を行って，条件検討を進めた。

B-1) 学術論文

T. KURAHASHI, “Drastic Redox Shift and Electronic Structural Changes of Manganese(III)-Salen Oxidation Catalyst upon Reaction with Hydroxide and Cyanide Ion,” *Inorg. Chem.* **57**, 1066–1078 (2018).

B-6) 受賞，表彰

T. KURAHASHI and H. FUJII, BCSJ Award Article (2012).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

日本化学会第 93 春季年会総務小委員会委員 (2014).

B-8) 大学での講義，客員

長崎県立大学看護栄養学部, クロスアポイントメント, 2018 年.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究 (C),「高原子価マンガンオキソ錯体の精密反応制御」, 倉橋拓也 (2011 年 –2015 年).

内藤記念科学奨励金・研究助成,「コバルト錯体を助触媒とする酸素酸化反応の開発」, 倉橋拓也 (2015 年 –2017 年).

科研費基盤研究 (C),「低原子価金属オキソ錯体を鍵活性種とする酸素分子の活性化」, 倉橋拓也 (2015 年 –2018 年).

科学技術振興機構さきがけ研究,「超微細気泡を反応場とするメタン光酸化触媒の開発」, 倉橋拓也 (2017 年 –2021 年).

生体分子情報研究部門

古　谷　祐　詞（准教授）（2009 年 3 月 1 日～ 2018 年 9 月 30 日）*)

A-1) 専門領域：生物物理学 , 生体分子科学

A-2) 研究課題：

a) 哺乳動物カリウムイオンチャネルのイオン透過性制御機構

b) G タンパク質共役受容体のリガンド結合に伴う構造変化の赤外分光解析

c) 動物のオプシンが示す多様なシグナル伝達特性

d) マグネシウムチャネルの Mg^{2+} イオン選択の分子機構

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 細胞内外には，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）のはたらきで電位差（静止膜電位）が生じている。TWIK-1 というカリウムチャネルは，「適度」にナトリウムイオンも透過することで，静止膜電位を微調節している。これまでに TWIK-1 のカリウム選択性が「緩い」原因を解明するために，生化学的に TWIK-1 のイオン透過性を解析し，イオン交換に伴う赤外吸収スペクトルの変化から，カリウムチャネルのイオン選択性を生み出す領域でのカリウムイオンへの親和性が低くなっていることを見出していた。さらに得られた赤外分光データを，琉球大学の東雅大助教との共同研究による基準振動計算の結果と合わせて解釈することにより，TWIK-1 の動的構造変化とイオン選択性が連関しているようすを明確に示した。これら得られた結果をまとめて，*J. Biol. Chem.* 誌に発表した。

b) G タンパク質共役受容体（GPCR）は，細胞外のシグナルを，三量体 G タンパク質を介して伝達するはたらきを持ち，感覚・神経伝達・ホルモン受容など重要な生命機能を担うとともに，主要な創薬ターゲットにもなっている。現在，X 線結晶構造解析やクライオ電顕解析などにより，GPCR の静的構造は非常に数多く解明されているが，機能発現に伴うタンパク質ダイナミクスについての理解は乏しい。そこで，静的構造情報が最も豊富な GPCR の一つ A2A アデノシン受容体について，生理的リガンドであるアデノシンの結合に伴う赤外吸収スペクトルの変化を解析することに取り組んだ。その結果，アデノシン結合に伴うスペクトル変化を精度よく計測することに成功した。このスペクトル変化には受容体タンパク質の構造変化由来の成分だけでなく結合したリガンドに由来するものも含まれている。そこで，同位体標識したアデノシンが結合した際のスペクトル変化も計測して，結果を比較することで，両成分を分離することができた。

c) ヒトを含めた動物は，外界の光情報を視覚や生体リズムの調節などに利用している。これらの光受容機能の多くにおいて，オプシンと呼ばれる GPCR が最初に光シグナルをキャッチする役割を担っている。これまでに，様々な動物の特に眼以外の組織ではたらくオプシン類の分光学的・生化学的・電気生理学的特性を解析してきた。その結果，オプシンの種類によっては，複数の種類の G タンパク質を活性化するものがあり，その相対的な活性が動物種ごとに大きく異なることや，G タンパク質を介したシグナル伝達には α サブユニットと βγ サブユニット由来の２つの経路があるが，βγ サブユニット経路を選択的に駆動するものがあることを見出した。

d) マグネシウムイオンを選択的に透過するマグネシウムチャネル MgtE の全反射赤外分光と量子化学計算（琉球大学東雅大助教）を組み合わせることで，Mg^{2+} と Ca^{2+} とのマグネシウム透過孔での水和状態の違いについて解析した。

その結果，Mg^{2+} は水和された状態で安定に存在する一方，Ca^{2+} は容易に水和構造が崩れ，イオン透過孔のイオン選択フィルターと考えられている Asp432 と結合することが明らかとなった。Asp432 を Glu に変異するだけで，水和された Mg^{2+} の結合が阻害されるなど，イオン透過孔が Mg^{2+} を選択する精妙な分子機構を明らかにした。これらの結果をまとめて，*J. Phys. Chem. B* 誌に発表した。

B-1) 学術論文

K. KATAYAMA, Y. FURUTANI, M. IWAKI, T. FUKUDA, H. IMAI and H. KANDORI, ""*In situ*" Observation of Role of Chloride Ion Binding to Monkey Green Sensitive Visual Pigment by ATR-FTIR Spectroscopy," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 3381–3387 (2018).

A. SUEA-NGAM, M. SRISA-ART and Y. FURUTANI, "PDMS-Based Microfluidic Device for Infrared-Transmission Spectro-Electrochemistry," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **91**, 728–734 (2018).

H. TSUKAMOTO, M. HIGASHI, H. MOTOKI, H. WATANABE, C. GANSER, K. NAKAJO, Y. KUBO, T. UCHIHASHI and Y. FURUTANI, "Structural Properties Determining Low K^+ Affinity of the Selectivity Filter in the TWIK1 K^+ Channel," *J. Biol. Chem.* **293**, 6969–6984 (2018).

T. KIMURA, V. A. LORENZ-FONFRIA, S. DOUKI, H. MOTOKI, R. ISHITANI, O. NUREKI, M. HIGASHI and Y. FURUTANI, "Vibrational and Molecular Properties of Mg^{2+} Binding and Ion Selectivity in the Magnesium Channel MgtE," *J. Phys. Chem. B* **122**, 9681–9696 (2018).

B-3) 総説，著書

Y. FURUTANI, "Ion–protein Interactions of a Potassium Ion Channel Studied by Attenuated Total Reflection Fourier Transform Infrared Spectroscopy," *Biophys. Rev.* **10**, 235–239 (2018).

B-4) 招待講演

Y. FURUTANI, "Interactions of potassium ion channels with alkali metal cations and their relevance to the K^+ selectivity studied by infrared spectroscopy," Mini international workshop "Interhierarchical understanding of materials and life through molecular observation," Institute for Molecular Science, Okazaki (Japan), March 2018.

古谷祐詞,「赤外分光法によるイオン−タンパク質間相互作用の解析」, 大阪大学蛋白質研究所セミナー「構造情報に基づいた膜イオン輸送タンパク質の生理機能の解明に向けて」, 大阪大学蛋白質研究所, 吹田, 2018年9月.

Y. FURUTANI and H. TSUKAMOTO, "Light-induced difference infrared spectroscopy on the photochromic reaction of a ciliary opsin by irradiation of ultraviolet and visible light," 18th International Conference on Retinal Proteins, Hockley Valley Resort, Ontario (Canada), September 2018.

Y. FURUTANI, "Infrared spectroscopy for analyzing ion-protein interactions of ion channels," The 49th National Institute for Physiological Sciences (NIPS) international symposium "Ion channels: looking back, seeing ahead," Okazaki Conference Center, Okazaki (Japan), December 2018.

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1 2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-10) 競争的資金

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

カリウムイオンチャネルTWIK1のイオン選択フィルターの分子振動解析を全反射赤外分光計測および量子化学計算(琉球大学 東雅大助教)により明らかにし，1680 cm^{-1} にフィルターの“分子指紋”となる特徴的な分子振動を同定した。また，マグネシウムチャネルMgtEについても，全反射赤外分光計測と量子化学計算との組み合わせにより，Mg^{2+} が水和された状態でイオン透過孔に存在することなどを明らかにした。名古屋工業大学に転出後はこれらの成果をもとに様々な膜タンパク質に赤外分光計測を適用することで，膜タンパク質の多様な機能発現の分子機構を明らかにしていきたい。塚本寿夫助教も昨年度に採択されたさきがけ研究のテーマを着実に進めながら，さらなる飛躍を目指しているところである。

*）2018年10月1日名古屋工業大学工学部准教授

錯体触媒研究部門

魚　住　泰　広（教授）（2000 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：有機合成化学，有機金属化学

A-2) 研究課題：

a) 不均一反応メディア中での触媒反応システムの構築

b) 自己集積型金属錯体触媒の設計・開発

c) 新しい遷移金属錯体触媒・ナノ構造触媒の創製

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) パラジウム，ロジウム，銅錯体触媒などを両親媒性高分子に固定化するとともに機能修飾することで，これら遷移金属錯体触媒有機変換工程の多くを完全水系メディア中で実施することに成功した。水中不均一での高立体選択的触媒反応の開発を世界にさきがけて成功した。

b) 金属架橋高分子の自己集積触媒（架橋構造と触媒機能のハイブリッド）を開発し，さらにマイクロ流路内の層流界面での自己集積錯体触媒膜の創製に成功した。前項で開発した高分子触媒をカラムカートリッジ化することで実用性に富む連続フロー反応システムを構築した。

c) 新しいピンサー錯体の合成方法論を確立し，それらピンサー錯体分子が自発的に集積することで形成する分子集合体の三次元高次構造に立脚した新しい触媒機能システムの開拓に注力しつつある。

d) 水中での反応加速，連続フローシステムに依る効率化，ピンサー錯体触媒化学における新しい反応形式などに立脚して各種反応の ppm-ppb 触媒化を進めつつある。

B-1) 学術論文

Y. HIRAI and Y. UOZUMI, “Preparation of Aryl(dicyclohexyl)phosphines by C–P Bond-Forming Cross-Coupling in Water Catalyzed by an Amphiphilic-Resin-Supported Palladium Complex,” *Synlett* **28**, 2966–2970 (2017).

A. OHTAKA, A. SAKON, A. YASUI, T. KAWAGUCHI, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI, T. SHINAGAWA, O. SHIMOMURA and R. NOMURA, “Catalytic Specificity of Linear Polystyrene-Stabilized Pd Nanoparticles during Ullmann Coupling Reaction in Water and the Associated Mechanism,” *J. Organomet. Chem.* **854**, 87–93 (2018).

R. HUDSON, H. R. ZHANG, A. LOTEMPLIO, G. BENEDETTO, G. HAMASAKA, Y. M. A. YAMADA, J. L. KATZ and Y. UOZUMI, “Poly(meta-phenylene oxides) for the Design of a Tunable, Efficient, and Reusable Catalytic Platform,” *Chem. Commun.* **54**, 2878–2881 (2018).

D. PI, H. ZHOU, Y. ZHOU, Q. LIU, R. HE, G. SHEN and Y. UOZUMI, “Cu-Catalyzed Reduction of Azaarenes and Nitroaromatics with Diboronic Acid as Reductant,” *Tetrahedron* **74**, 2121–2129 (2018).

G. HAMASAKA, S. ICHII and Y, UOZUMI, “A Palladium NNC-Pincer Complex as an Extremely Efficient Catalyst Precursor for the Mizoroki–Heck Reaction,” *Adv. Synth. Catal.* **360**, 1833–1840 (2018).

S. PAN, Y. SHUO, T. OSAKO and Y. UOZUMI, “Controlled Aerobic Oxidation of Primary Benzylic Alcohols to Aldehydes Catalyzed by Polymer-Supported Triazine-Based Dendrimer–Copper Composites,” *Synlett* **29**, 1152–1156 (2018).

G. SHEN, T. OSAKO, M. NAGAOSA and Y. UOZUMI, "Aqueous Asymmetric 1,4-Addition of Arylboronic Acids to Enones Catalyzed by an Amphiphilic Resin-Supported Chiral Diene Rhodium Complex Under Batch and Continuous-Flow Conditions," *J. Org. Chem.* **83**, 7380–7387 (2018).

D. CHEN, Y. ZHOU, H. ZHOU, S. LIU, Q. LIU, K. ZHANG and Y. UOZUMI, "Metal-Free Reduction of Nitro Aromatics to Amines with $B_2(OH)_4/H_2O$," *Synlett* **29**, 1765–1768 (2018).

A. OHTAKA, M. KAWASE, S. AIHARA, Y. MIYAMOTO, A. TERADA, K. NAKAMURA, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI and O. SHINAGAWA, "Poly(tetrafluoroethylene)-Stabilized Metal Nanoparticles: Preparation and Evaluation of Catalytic Activity for Suzuki, Heck, and Arene Hydrogenation in Water," *ACS Omega* **3**, 10066–10073 (2018).

A. OHTAKA, S. FUKUI, A. SAKON, G. HAMASAKA, Y.UOZUMI, T. SHINAGAWA, O. SHIMOMURA and R. NOMURA, "Linear Polystyrene-Stabilized Rh(III) Nanoparticles for Oxidative Coupling of Arylboronic Acids with Alkenes in Water," *J. Organomet. Chem.* **873**, 1–7 (2018).

T. OSAKO, M. NAGAOSA, G. HAMASAKA and Y. UOZUMI, "Asymmetric Copper-Catalyzed C(sp)–H Bond Insertion of Carbenoids Derived from N-Tosylhydrazones," *Synlett* **29**, 2251–2256 (2018).

M. MINAKAWA, K. WATANABE, S. TOYODA and Y. UOZUMI, "Iridium-Catalyzed Direct Cyclization of Aromatic Amines with Diols," *Synlett* **29**, 2385–2389 (2018).

B-3) 総説，著書

Y. UOZUMI and G. HAMASAKA, "Ligand-Introduction Synthesis of NCN Pincer Complexes and their Chemical Properties," in *Pincer Compounds. Chemistry and Applications*, 634–672 (2018).

D. ROY and Y. UOZUMI, "Recent Advances in Palladium-Catalyzed Cross-Coupling Reactions at ppm to ppb Molar Catalyst Loadings," *Adv. Synth. Catal.* **360**, 602–625 (2018).

B-4) 招待講演

Y. UOZUMI, 「「雨宿り効果」に立脚した超機能性固定化触媒の創成」, 日本プロセス化学会 2018 サマーシンポジウム, 東京(日本), 2018年7月.

Y. UOZUMI, "Green Organic Transformations in Water with Heterogeneous Catalysts," The 8th IUPAC International Conference on Green Chemistry, Bangkok (Thailand), September 2018.

B-6) 受賞，表彰

魚住泰広, 有機合成化学協会研究企画賞 (1992).

魚住泰広, 日本薬学会奨励賞 (1997).

山田陽一, 日本薬学会奨励賞 (2005).

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

魚住泰広, 平成18年度日本化学会学術賞 (2007).

山田陽一, 文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2008).

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

魚住泰広, 井上学術賞 (2010).

浜坂　剛, 第1回名古屋大学石田賞 (2012).

大迫隆男, 有機合成化学協会研究企画賞 (2013).

魚住泰広, 文部科学大臣表彰科学技術賞 (2014).

大迫隆男, 第4回自然科学研究機構若手研究者賞 (2015).

大迫隆男, 第 30回若い世代の特別講演会特別講演証 (2016).

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

浜坂　剛, 有機合成化学協会三菱ガス科学研究企画賞 (2017).

浜坂　剛, 第 32回若い世代の特別講演会特別講演証 (2018).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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–).

有機金属討論会組織委員 (2012–).

4th International Symposium on C–H Activation, International Committee (2018).

14th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry, Organizing Committee (2018).

43rd International Conference on Coordination Chemistry, National Organizing Committee (2018).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会第 116委員会委員 (1998–).

科学技術振興機構CREST 研究「革新的触媒」領域アドバイザー (2015–).

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 (2007–2017).

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

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

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

理化学研究所JST-ACCEL 研究ディレクター (2018–2019).

総合研究大学院大学物理科学研究科長 (2018–2020).

B-8) 大学での講義，客員

Three Gorges University（三峡大学・中国), 疎天学者講座教授, 2013年–2018年.

B-10) 競争的資金

科研費特定領域研究（計画研究：研究項目番号A03),「理想化学変換プロセスを実現する新しい水中機能性個体触媒の開発」, 魚住泰広 (2006年–2009年).

経済産業省・戦略的技術開発グリーンサスティナブルケミカルプロセス基盤技術開発,「高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発」, 魚住泰広 (2009年–2012年).

科研費若手研究(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–).

科学費若手研究(B),「高活性NNC-ピンサー型錯体を活用した痕跡触媒量での有機分子変換工程開発」, 浜坂剛 (2017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，さらには分子の自己集積化に立脚した触媒機能の自発的獲得など目指した研究開発を推進しつつある。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。

椴　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) プロトンあるいはヨードニウムを触媒とする不斉骨格転位反応の開発

b) キラルブレンステッド酸触媒ならびにキラル有機ルイス酸触媒の開発

c) ヨウ化ペルフルオロアリールを母骨格とするハロゲン結合供与体触媒の開発

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) 三中心四電子ハロゲン結合を活用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全フッ素化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) ブレンステッド酸触媒存在下，エン - 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 ならびに鈴木グループとの共同研究，ナノプラット結晶スポンジ法の利用により，本反応の反応機構を明らかにした。

b) プロトンあるいはヨードニウムを活性中心とするキラルブレンステッド酸触媒あるいはキラル有機ルイス酸触媒の合成に成功した。さらに，ビナフタレン骨格を有するキラルブレンステッド酸触媒をエン - アルジミンの形式的 1,3- 転位反応の触媒として用いたところ，中程度のエナンチオ選択性を与えた。開発した触媒の有用性を明らかにした。

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，岡山大自然生命科学研究支援センターでの HOESY 測定により，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) エチニルビスピリジンを配位子とするヨードニウム錯体やジアリールヨードニウムトリヨージドの合成と単結晶 X 線回折に成功した。また，合成した錯体が，向山アルドール反応や細見－櫻井反応において，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。構成素子となる部分フッ素化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が得られた。

B-4) 招待講演

椴山儀恵,「非金属錯体触媒による医薬品構成素子合成法の開発」, アステラス病態代謝研究会第 49回報告会, 日本工業倶楽部, 東京, 2018年 10月.

椴山儀恵,「ハロゲン結合を活用する有機分子変換システム創成への挑戦」, 触媒化学融合研究センター第 63回講演会, 産業技術総合研究所, つくば, 2018年 12月.

B-5) 特許出願

特願 2018-087046 (2018/04/27),「ピリジン誘導体担持高分子及びこれを用いた転移反応」, 椴山儀恵, 山西克典, 渡辺　拓(自然科学研究機構), 2018年.

B-6) 受賞，表彰

椴山儀恵, 大学女性協会第17回守田科学研究奨励賞 (2015).

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

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

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

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

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

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本化学会東海支部代議員 (2015, 2016).

学会の組織委員等

総研大アジア冬の学校主催 (2015, 2016).

分子研シンポジウム主催 (2017).

分子研オープンキャンパス主催 (2018).

学会誌編集委員

日本化学会化学と工業編集委員 (2017, 2018).

その他

進路講演会愛知県立岡崎北高等学校 (2018).

出前授業愛知県立岡崎北高等学校 (2016, 2017, 2018).

職場体験学習受入岡崎市立南中学校 (2018).

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-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,「錯体触媒化学」, 2018年1月.

B-10) 競争的資金

科研費新学術領域研究(研究領域提案型),「ハロゲン結合を基盤とする有機分子触媒の高分子固定化とキラル反応場の創成」, 椴山儀恵 (2018年–2019年).

公益財団法人旭硝子財団 2018年度採択研究助成プログラム「第1分野」,「ハロゲン結合を活用する有機分子触媒高分子反応場の創成」, 椴山儀恵 (2018年–2019年).

公益財団法人永井科学技術財団平成 29年度研究奨励金,「鋳型重合による有機分子触媒反応場の創成」, 椴山儀恵 (2018年–2019年).

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

鈴木謙三記念医科学応用研究財団平成 29年度調査研究助成,「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」, 椴山儀恵 (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ブレンステッド酸触媒の開発」, 椴山儀恵 (2017年–2019年).

住友電工グループ社会貢献基金 2016年度学術・研究助成,「多点間水素結合相互作用を活用する高活性キラル分子性触媒の創製」, 椴山儀恵 (2016年–2017年).

住友財団 2016年度基礎科学研究助成,「異種酸性官能基複合型キラル分子性触媒による触媒的不斉連続反応の開発」, 椴山儀恵 (2016年–2017年).

公益財団法人豊秋奨学会平成 28年度研究助成,「異なる酸性官能基の隣接位導入による超高活性キラル分子性触媒の開発」, 椴山儀恵 (2016年–2017年).

大幸財団平成 28年度（第 26回）自然科学系学術研究助成,「異種酸性官能基複合型キラル分子性触媒の創製と精密合成反応の開発」, 椴山儀恵 (2016年–2017年).

2015年度内藤記念科学奨励金・研究助成,「ペルフルオロビナフチル誘導体の分子修飾に基づくキラルハロゲン結合供与体触媒の設計・開発」, 椴山儀恵 (2016年–2017年).

ノバルティス科学振興財団第 28回研究奨励金,「不斉1, 3－アルキル移動反応の開発を基軸とする医薬品候補化合物の合成」, 椴山儀恵 (2015年–2016年).

平成 27年度徳山科学技術振興財団研究助成,「ハロゲン化ペルフルオロアリールの創製と触媒機能創出」, 椴山儀恵 (2015年–2016年).

2015年度ヨウ素研究助成金,「キラルヨウ素結合供与体触媒の設計・開発を基盤とする不斉合成」, 椴山儀恵 (2015年–2016年).

科研費基盤研究(C),「有機分子アリル化剤の開発を基軸とする革新的不斉有機分子触媒反応の開拓」, 椴山儀恵 (2011年–2013年).

科研費若手研究(B),「ペルフルオロフェニル基の特性を利用した不斉有機酸触媒の開発とアリル化反応への応用」, 椴山儀恵 (2009年–2010年).

科研費特定領域研究「協奏機能触媒」,「π - アリル・0価鉄複合体—キラルブレンステッド酸触媒による新規アリル化反応の開発」, 椴山儀恵 (2008年–2009年).

科研費若手研究（スタートアップ),「酵素模倣型キラル求核触媒の設計および不斉反応の探索」, 椴山儀恵 (2007年–2008年).

公益信託林女性自然科学者研究助成基金,「アゾール／グアニジン2成分系キラル求核触媒の設計開発および不斉反応の探索」, 椴山儀恵 (2007年–2008年).

住友財団基礎化学研究助成,「アザ - コープ転位を基盤とする触媒的不斉炭素－炭素結合形成反応の開発」, 椴山儀恵 (2007年).

東北大学理学研究科若手奨励研究基金,「アザ - コープ転位を基盤とする触媒的不斉アリル化反応の開発」, 椴山儀恵 (2007年).

分子系高次構造体化学国際教育研究拠点若手奨励費研究,「高次構造アルカロイドの合成を指向した鍵中間体ピロリジンの触媒的不斉合成反応の開発」, 椴山儀恵 (2007年).

C)　研究活動の課題と展望

地球上に生存する生命を特徴付ける性質のひとつがキラリティーである。ほとんど全ての生体系は，本来的にキラルでありエナンチオマー的に純粋である。このことは，物質のキラリティーが至るところで私たちの日常に浸透している所以である。私たちの社会に欠かすことのできない物質・材料にキラリティーを組み入れること，それを可能にする一連の方法論を開発することは，次世代の純粋化学と応用化学の両面，そして材料科学において，極めて大きな意味をもつ。

当グループでは，キラル分子を供給する方法論の開拓とその確立を目指し，不斉分子触媒の設計・合成と触媒的不斉合成反応の開発を進めている。これまでに，不斉空間の構築ならびに不斉反応において「金属−配位子錯結合」よりも弱い相互作用である「水素結合」や「ハロゲン結合」の潜在的有用性を明らかにしつつある。2018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，数報の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) ルテニウム単核錯体を利用した電気化学・光化学的 CO_2 還元触媒の開発

b) 分子性触媒モジュールの自己集合によるフレームワーク触媒の開発

c) 近赤外光を駆動力とする光誘起電子移動反応系の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) ルテニウムイオンを有する金属錯体を対象とし，二酸化炭素（CO_2）還元触媒の開発に取り組んだ。具体的には，ルテニウムポリピリジル単核錯体に対しホスフィン配位子を導入した錯体（**RuP**）を用いた触媒開発を行った。導入したリン原子の *trans* 影響により，金属－基質間の電子的相互作用に大きな変化が得られた。この *trans* 影響により，**RuP** はホスフィン配位子を持たない錯体と比較して小さな過電圧で電気化学的 CO_2 還元反応を触媒することが可能であった。また，**RuP** は可視域に metal-to-ligand charge transfer（MLCT）に由来する強い吸収帯を有していた。そこで可視光を駆動力とする光化学的 CO_2 還元反応についても検討を行ったところ，**RuP** が光増感剤・触媒能を併せ持つ機能統合型触媒として機能することが明らかとなった。またその触媒回転頻度・触媒回転数・生成物選択性は既存の機能統合型 CO_2 還元触媒と比較して十分に高いものであった。

b) 触媒活性点と分子間相互作用サイトを有する分子性触媒モジュールを非共有結合性相互作用により自己集積させることでフレームワーク触媒の構築を行った。水素発生触媒能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としてナフタルイミド部位を導入した分子性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材料の構築に成功した。更に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。また，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) 近赤外域に強い吸収帯を有する歪んだフタロシアニン誘導体を用い，近赤外光を駆動力とする電子移動反応の開発に取り組んだ。まず，フタロシアニン骨格中に電子吸引性のクロロ基を導入することで HOMO のエネルギー準位が低下し，光安定性の高い色素となることが明らかとなった。このクロロ基導入型フタロシアニンに対し犠牲還元剤の存在下，近赤外光を照射したところ，光誘起電子移動（Photoinduced electron transfer, PET）反応が進行し一電子還元体であるラジカルアニオンが生成することが判明した。また，得られたラジカルアニオンは高い安定性を有していた。本研究で得られた反応系は，近赤外光を駆動力とする dynamic quenching 機構による PET 反応の初めての例である。

B-1) 学術論文

S. K. LEE, M. KONDO, M. OKAMURA, T. ENOMOTO, G. NAKAMURA and S. MASAOKA, "Function-Integrated Ru Catalyst for Photochemical CO_2 Reduction," *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 16899–16903 (2018).

R.-Z. LIAO, S. MASAOKA and P. E. M. SIEGBAHN, "Metal Oxidation States for the O–O Bond Formation in the Water Oxidation Catalyzed by a Pentanuclear Iron Complex," *ACS Catal.* **8**, 11671–11678 (2018).

T. NAKAMURA, M. ASADA, M. YOSHIDA, M. KONDO and S. MASAOKA, "Possibility of Dielectric Material: Magnetic Resonance Study of Oxo-Bridged Dinuclear Ruthenium Mixed-Valence Complex," *ChemistrySelect* **3**, 10526–10531 (2018).

S. K. LEE, M. KONDO, G. NAKAMURA, M. OKAMURA and S. MASAOKA, "Low-Overpotential CO_2 Reduction by Phosphine-Substituted Ru(II) Polypyridyl Complex," *Chem. Commun.* **54**, 6915–6918 (2018).

T. ENOMOTO, M. KONDO, M. ASADA, T. NAKAMURA and S. MASAOKA, "Near-IR Light-Induced Electron Transfer via Dynamic Quenching," *J. Phys. Chem. C* **122**, 11282–11287 (2018).

T. WAKAKI, K. SAKAI, T. ENOMOTO, M. KONDO, S. MASAOKA, K. OISAKI and M. KANAI, "C(sp^3)-H Cyanation Promoted by Visible-Light Photoredox/Phosphate Hybrid Catalysis," *Chem. –Eur. J.* **24**, 8051–8055 (2018).

P. CHINAPANG, M. OKAMURA, T. ITOH, M. KONDO and S. MASAOKA, "Development of a Framework Catalyst for Photocatalytic Hydrogen Evolution," *Chem. Commun.* **54**, 1174–1177 (2018). (Selected as a Back Cover Picture)

B-3) 総説，著書

A. FUKATSU, M. KONDO and S. MASAOKA, "Electrochemical Measurements of Molecular Compounds in Homogeneous Solution under Photoirradiation," *Coord. Chem. Rev.* **374**, 416–429 (2018). (Special Issue of 43rd International Conference on Coordination Chemistry)

B-4) 招待講演（* 基調講演）

S. MASAOKA, "Development of Molecular Modules for Artificial Photosynthesis," 10th Asia Photochemistry Conference (APC 2018), Taipei (Taiwan), December 2018.

S. MASAOKA, "Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation," 9th Asian Biological Inorganic Chemistry Conference, UTown, Stephen Riady Centre, Singapore, December 2018.

S. MASAOKA, "Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation," The International Symposium on Bioinorganic Chemistry 2018, Okazaki Conference Center, Okazaki, November 2018.

S. MASAOKA, "Development of Molecular Modules for Artificial Photosynthesis," 2018 Nankai International Conference on Advanced Materials, Nankai University, Tianjin (China), November 2018.* (Keynote)

正岡重行,「人工光合成への挑戦～同志社大学で育んだ化学と絆～」, 同志社大学理工学部機能分子・生命化学科 10周年記念講演会, 同志社大学今出川キャンパス寒梅館, 京都, 2018年 10月.

正岡重行,「金属錯体の電子移動制御に立脚した小分子変換」, 金井研究室コロキウム, 東京大学薬学部, 東京, 2018年 9月.

正岡重行,「金属錯体の内側に閉じ込められた水素イオン」, 第4回機能化学研究会, かんぽの宿有馬, 神戸, 2018年 8月.

S. MASAOKA, "Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation," The 43rd International Conference on Coordination Chemistry (ICCC2018), Sendai (Japan), August 2018.* (Keynote)

正岡重行,「合成がつなぐ人類の未来～次世代エネルギー開発と地球外生命探査～」, 湘南国際村アカデミア連続講演会「カフェ・インテグラル」, 神奈川韓国会館 7階, 横浜, 2018年 6月.

S. MASAOKA, "Water Oxidation: High Five Iron," 大阪大学CSC特別講義, 大阪大学吹田キャンパス, 吹田, 2018年6月.

正岡重行,「5つの金属イオンが織り成す触媒機能」, 平成 30年度触媒学会ファインケミカルズ合成触媒セミナー , 首都大学東京秋葉原サテライトキャンパス, 東京, 2018年 5月.

S. MASAOKA, "Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation," The 3rd Japan-UK Joint Symposium on Coordination Chemistry, University of St Andrews, St Andrews (U.K.), April 2018.

正岡重行,「金属錯体による電気／光化学的小分子変換反応」, 日本化学会第 98春季年会 ATP「人工光合成分野における触媒化学的アプローチ」, 日本大学理工学部船橋キャンパス, 船橋, 2018年 3月.

正岡重行,「5つの金属イオンが織り成す革新機能」, 高分子学会九州支部フォーラム, 崇城大学, 熊本, 2018年 2月.

正岡重行,「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」, 新学術領域「ハイブリッド触媒」第 1回公開シンポジウム, 名古屋大学 ES 総合館 ES ホール, 名古屋, 2018年 1月.

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」, ABC 若手ワークショップ, 国立天文台, 三鷹, 2018年 1月.

B-5) 特許出願

特願 2018-157577,「有機化合物の酸化物の製造方法」, 相田冬樹, 正岡重行, 岡村将也(JXTG エネルギー（株), 自然科学研究機構), 2018年.

B-6) 受賞, 表彰

Sze Koon LEE, 第 1回 SOKENDAI 賞 (2018).

Pondchanok CHINAPANG, 物理科学研究科学科長賞 (2018).

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 2018」優秀ポスター賞 (2018).

近藤美欧, 第 7回自然科学研究機構若手研究者賞 (2018).

Pondchanok CHINAPANG, 日本化学会第 98春季年会（2018）学生講演賞 (2018).

近藤美欧, 日本化学会第 6回女性化学者奨励賞 (2018).

Sze Koon 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).

Sze Koon 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特別講演証 (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

日本化学会東海支部役員候補者選考委員会委員 (2018–).

日本化学会東海支部代議員 (2017–).

錯体化学会副事務局長 (2015–).

錯体化学会理事 (2015–2017).

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「刺激と応答――金属錯体は何を結ぶか」所内対応 (2018).

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CSJ 化学フェスタ実行委員 (2013–2016).

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 (2013–2017).

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」, 2018年度後期.

大阪大学大学院応用化学専攻, 集中講義「CSC 特別講義」, 2018年 6月.

B-9) 学位授与

Sze Koon LEE,「Development of Metal-Complex Based Catalysts for Electro- and Photo- Chemical CO_2 Reduction」, 2018年 9月, 博士(理学).

Pondchanok CHINAPANG,「Design and Construction of Framework Catalysts for Hydrogen Evolution」, 2018年3月, 博士(理学).

深津亜里紗,「Studies on Electrochemical Responses of Molecular Compounds in Homogeneous Solution under Photoirradiation」, 2018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CO_2還元反応系の構築」, 近藤美欧 (2012年–2017年).

科研費挑戦的萌芽研究,「二次元反応場への金属錯体集積と水を基質とする革新的多電子物質変換」, 正岡重行 (2012年–2013年).

科研費若手研究(B),「高効率触媒界面の構築を目指した錯体プラットフォームの開発」, 近藤美欧 (2012年–2013年).

第５回資生堂女性研究者サイエンスグラント,「界面電子移動プログラミングによる水の完全光分解系の構築」, 近藤美欧 (2012年–2013年).

学融合推進センター公募研究事業事業枠③女性研究者支援,「界面電子移動反応を利用した水の完全光分解システムの創成」, 近藤美欧 (2012年).

科学技術振興機構さきがけ研究「光エネルギーと物質変換」領域,「水の可視光完全分解を可能にする高活性酸素発生触媒の創製」, 正岡重行 (2009年–2012年).

科研費若手研究(B),「水の分解反応に対する非貴金属系高活性金属錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2009年–2010年).

科学技術振興機構重点地域研究開発推進プログラム「シーズ発掘試験Ａ（発掘型）」,「有機－無機複合型超高活性酸素発生錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2009年).

九州大学教育研究プログラム・研究拠点形成プロジェクト,「混合原子価２核錯体を用いた量子セルオートマトン材料の開発」, 正岡重行 (2009年).

（財）鉄鋼業環境保全技術開発基金第２９回環境助成研究,「鉄－硫黄系金属錯体を用いた安価高活性水素発生触媒の創成」, 正岡重行 (2008年–2009年).

B-11) 産学連携

JXTG エネルギー（株),「五核鉄錯体を利用した酸素酸化反応」, 正岡重行 (2018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，主に金属錯体を対象とした基礎研究を進めている。２０１８年は，a) ルテニウム単核錯体を利用した電気化学・光化学的CO_2還元触媒の開発，b) 分子性触媒モジュールの自己集合によるフレームワーク触媒の開発，c) 近赤外光を駆動力とする光誘起電子移動反応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，CO_2還元反応のみならず，安定小分子の効率的変換を可能と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，近赤外光を駆動力とする新たな反応の開発に向けて研究を展開し，近赤外光を利用した物質変換系の構築を目指す予定である。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の確立へと繋げていく所存である。

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) KaiC はシアノバクテリア概日時計システムの中核をなす時計タンパク質である。これまでの研究（*Science* 2015, *BIOPHYSICS* 2015, *Biophyis. Physicobiol.* 2016）を通して，

① KaiC の ATP 加水分解活性（ATPase）がシステムの発振周期（約 24 時間）を規定する重要な因子であること，

② KaiC の ATPase が３種類の抑制的制御を受けて著しく低活性化（12 ATP d^{-1}）されていること，

③ ATPase の遅い時間スケールをシステム全体に波及させることで 24 時間周期を実現していること，

等を明らかにしてきた。しかしながら，KaiC 内部で生み出された遅い時間スケールの運動が，分子間相互作用の階層を介してどのようにシステム全体へと伝搬されるのかは不明であった。そこで 2018 年度は，KaiC が KaiB と相互作用して KaiBC 複合体を形成する過程の速度論的な解析を行った。

蛍光標識した KaiC を用いて KaiBC 複合体の蓄積を実時間解析したところ，Conformational Selection と呼ばれる分子認識機構（CS 機構）に従うことが明らかとなった。これは KaiC の構造変化が KaiB 結合に先行する反応モデルであり，KaiB の立場に立てば，相互作用に適した状態の KaiC だけを探し出して選択的に結合していることになる。詳細は省略するが，KaiB が加水分解産物である ADP を結合したリン酸化型 KaiC を選択して結合することにより，KaiBC 複合体の形成が KaiC の遅い ATPase によりゲーティング（律速）される。KaiC には反応を積極的に遅くするための制御だけでなく，その時刻情報を損なうことなく他の分子種に伝搬し，最終的にシステム全体へ波及させていく仕組みが備わっている（*Sci. Rep.* 2018, *Biol. Clock* 2018, *時間生物学* 2018）。

b) 生体分子システム（時計タンパク質，抗酸化酵素，受容体など）のX線溶液散乱を記録し，散乱データと結晶構造の比較や低分解能モデルの構築を通して，分子システムの動的構造解析を行った。

B-1) 学術論文

A. MUKAIYAMA, Y. FURUIKE, J. ABE, E. YAMASHITA, T. KONDO and S. AKIYAMA, “Conformational Rearrangements of the C1 Ring in KaiC Measure the Timing of Assembly with KaiB,” *Sci. Rep.* **8**, 8803 (10 pages) (2018). doi:10.1038/s41598-018-27131-8

Y. FURUKAWA, C. LIM, T. TOSHA, K. YOSHIDA, T. HAGAI, S. AKIYAMA, S. WATANABE, K. NAKAGOME and Y. SHIRO, “Identification of a Novel Zinc-Binding Protein, C1orf123, as an Interactor with a Heavy Metal-Associated Domain,” *PLoS One* **13**, e0204355 (2018). doi: 10.1371/journal.pone.0204355

B-3) 総説，著書

秋山修志，古池美彦，向山厚,「変化し続ける概日時計研究のかたち」, *時間生物学* **24**, 92–99 (2018).

秋山修志,「芸は身を助く？」, *生物物理* **58**, 181 (2018).

B-4) 招待講演

S. AKIYAMA, "*trans*-Hierarchical Nature of Cyanobacterial Circadian Clock System," SSBR 2018, Sapporo (Japan), July 2018.

S. AKIYAMA, "*trans*-Hierarchical Nature of Cyanobacterial Circadian Clock System," Frontier Bioorganization Forum 2018, Okazaki (Japan), July 2018.

S. AKIYAMA, "Slow and Temperature-Compensated ATP Hydrolysis Reaction Catalyzed by Circadian Clock Protein KaiC," The 3rd Solar Fuel Material Workshop, Osaka (Japan), March 2018.

S. AKIYAMA, "Slowness and temperature compensation both transferred from intra- to inter-molecular scales in cyanobacterial circadian clock," The 91st Annual Meeting of the Japanese Biochemical Society, Kyoto (Japan), Sepember 2018.

秋山修志,「なぜ？　どうして？　いまだ説明できない生物時計の残された謎」, 第58回生物物理若手の会夏の学校, ホテルパーク, 岐阜, August 2018.

秋山修志,「藍藻における概日周期と温度補償性の分子科学」, 蛋白研セミナー／ SPring-8先端利用技術ワークショップ, 大阪大学, August 2018.

秋山修志,「分子科学研究所・協奏分子システム研究センターにおける概日時計研究と支援体制の構築」, CyanoClock 1.0, 名古屋大学, 名古屋, June 2018.

秋山修志,「地球の自転周期がエンコードされたタンパク質，KaiC」, 講演会, 京都大学, 京都, February 2018.

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).

日本生物物理学会代議員 (2017–2018).

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

概日時計システムの第1の性質にあたる遅さの起源については研究の見通しが立った。第2の性質に相当する温度補償性は概日時計に共通して観察される特徴であり，概日リズムが一般的な化学振動子と区別して扱われる理由の一つでもある。化学の世界では，「遅さ」と「温度補償性」は通常相容れない現象であるが，KaiC のATP 加水分解反応は極端に遅く（12 d^{-1}）かつ温度補償制御されている（Q_{10} = 1.0）。基盤研究(S) の計画に沿って温度依存変異体の網羅的スクリーニングや構造ベースでの設計を行い，原子スケールの情報をもとに第1と第2の性質を互いに矛盾なく説明できるモデルを構築したい。

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完全にゼロからデザインすること，更には自然界のタンパク質分子を改造することで，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う。

a) αβ 型タンパク質構造のデザイン；これまでに２次構造パターンと３次構造モチーフの整合性に関するルールを発見し，これらのルールを用いることで 100 残基以下の様々な形状の αβ 型タンパク質構造のデザインに成功してきた。これらのルールがより大きなサイズのタンパク質デザインにも適用可能かどうか検証するため，100 残基以上のサイズのタンパク質構造のデザインに取り組んだ。その結果，これらルールに加えて，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全体構造との整合性，すなわち，２次構造パターン－３次構造モチーフ－全体構造の間の整合性が重要であることを明らかにした。これらを考慮して５本ストランドの αβ 型タンパク質を新たにデザインし，大腸菌に組み込み発現・精製し，生化学実験により折り畳み能を調べたところ，デザインは安定な構造を形成し，NMR により決定された構造は，計算機モデルとよく一致していた。現在は，６本ストランドの αβ 型タンパク質をデザインすることで，発見したデザイン原理の有効性を検証中である。

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，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。まず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，計算機上で多様な形状の α ヘリカル構造の構築に成功した。計算機でデザインした３つの異なる形状の α ヘリカルタンパク質について，折り畳み能を生化学実験により調べたところ，これら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 構造解析を行ったところ，計算機モデルは NMR 構造とよく一致していた。今後は，多様な α ヘリカル構造を用いることで，機能性タンパク質のデザインを行う。

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のかどうか明らかにすることを目的として，タンパク質の疎水性コアパッキングに重要とされる ILE および LEU を全く含まない，疎水性コア残基が VAL のみからなる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，NMR により立体構造を解析したところ，デザインは変性温度が 100 °C 以上の安定な立体構造を形成していた。本研究成果は，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ないことを示すものである。

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，b) でデザインしたαヘリカル構造を用いるなど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計算機デザインで改造し，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。その結果，デザインはヘムに結合していることが明らかになった。現在は，結合の親和性を向上させるべく再設計を行っている。

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，回転モータータンパク質である F-ATPase および V-ATPase を改造することで，そのメカニズムに迫った。分子動力学シミュレーション，１分子観測，結晶構造解析等あらゆる手法を駆使して，構造変化のメカニズムに迫ったところ，F-ATPase の構造変化に重要な部位を特定し，V-ATPase の動的機能発現における非触媒部位のアロステリックな役割を明らかにした。

g) 自然界に存在しないトポロジーのデザイン；簡単な理論計算では考えることができるが，自然界には現存しないトポロジーが多数あることが示唆されている。本研究では，自然界に現存しない新規トポロジーを持つタンパク質分子を創ることで，新規トポロジーは物理化学的に立体構造形成することが困難なために存在していないのか，それとも偶然生物が見つけ出していないだけなのか，これらの謎に迫る。これまでに，網羅的なタンパク質立体構造データベース検索を行い，いくつかの新規トポロジーの同定に成功した。現在は，これら新規トポロジーの計算機デザイン及び生化学実験による折りたたみ能の検証を行っている。

h) タンパク質構造の合理安定化法の開発；タンパク質の耐熱性を向上させることは，タンパク質を産業利用する上で重要である。タンパク質をゼロからデザインする技術を応用して，自然界のタンパク質を合理的に安定化する手法の開発を行った。開発した手法を用いて，バイオマス糖化に重要なβグルコシダーゼおよび創薬ターゲットの一つである GPCR の耐熱化を行っている。

B-4) 招待講演

古賀信康,「De novo protein design & Application to design thermostable proteins, International Symposium on “Artificial Cell Reactor Science & Technology”」, 東京大学伊藤謝恩ホール, 東京, 2018年 4月.

古賀信康,「生命現象を生み出す分子「タンパク質」をゼロから創る」, 生命創成探究センター開所記念講演会, 岡崎, 2018年 5月.

古賀信康,「整合性原理のまわりをぐるぐると，理論生物物理研究会～理論生物物理の今後を考える～」, 京都大学大学院理学研究科, 京都, 2018年 6月.

古賀信康,「設計図通りに折りたたまないデザインタンパク質」, 第 18回蛋白質科学会年会ワークショップ「拡大する蛋白質の世界：Anfinsen のドグマを超えて」, 新潟朱鷺メッセ, 新潟, 2018年 6月.

古賀信康,「Toward generation of de novo designed protein structure library」, 生命創成探究センター Frontier Bio-Organization Forum, 岡崎, 2018年7月.

古賀信康,「Explore vast sequence space by de novo design」, ImPACT 野地プログラムセミナー , 東京大学工学部, 東京, 2018年9月.

古賀信康,「タンパク質の合理設計：ゼロからの創成と天然物の改造」, 生命創成探究センター第1回シンポジウム, 岡崎, 2018年10月.

古賀信康,「合理デザインで拓く新規タンパク質配列空間」, 169委員会第57研究会, 東京大学大学院農学生命科学研究科フードサイエンス棟中島薫一郎記念ホール, 東京, 2018年10月.

古賀信康,「DBTL in protein design, Trends in Computational Molecular Biology」, 石川四高記念文化交流館, 金沢, 2018年11月.

古賀信康,「超安定な理想タンパク質の合理設計と天然タンパク質の累積的耐熱化」, Biothermology Workshop, 岡崎コンファレンスセンター , 岡崎, 2018年12月.

T. KOSUGI, "Rational Design of ATP Binding Site to Understand Rotary Molecular Motor," Okazaki Conference, Okazaki (Japan), 2018年9月.

T. KOSUGI, "Rational Design of ATP Binding Site; An Attempt to Understand Molecular Motor," 第56回日本生物物理学会「創って知る生物物理：生命現象の再構成と理解」, 岡山, 2018年9月.

小杉貴洋,「V_1-ATPase の非触媒界面にATP 結合部位を作ることでその役割を明らかにする」, 第8回分子モーター討論会, 東京, 2018年11月.

B-5) 特許出願

特願 2018-172810 (2018/10/18),「耐熱性βグルコシダーゼ」, 古賀信康（自然科学研究機構), 2018年.

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).

古賀信康, 分子科学研究奨励森野基金 (2018).

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 (2015–2018).

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).

第111回分子科学フォーラム特別編「分子をデザインする」講師 (2017.2.3).

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-8) 大学での講義，客員

京都大学理学部,「化学特別講義2」, 2018年12月10日–12日.

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–2019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 (2018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).

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,「世界最小蛍光タンパク質の創生——計算機科学と生体イメージングを繋ぐ——」, 小杉貴洋 (2018年–2019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。いくつかのテーマについては，成果をまとめる時期に来ている。課題は前年度と同様，①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こと，②デザインしたタンパク質の折りたたみ能および機能発現能を，大量かつ高速に検証する生化学実験手法を構築すること，である。

機能分子システム創成研究部門

山　本　浩　史（教授）（2012 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：分子物性科学

A-2) 研究課題：

a) 有機モットFET（FET＝電界効果トランジスタ）

b) 有機超伝導FET

c) カイラル伝導体によるスピン偏極デバイス

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 有機モット絶縁体 κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu[N(CN)$_2$]X (X = Cl, Br) の薄膜単結晶を用いたFETを作製し，その電気的特性を測定した。モット絶縁体中では電子間に働くクーロン反発と格子整合のために本来金属的であるべきキャリアの伝導性が極端に低い状態が実現しているが，トランジスタのゲート電界により静電キャリアドーピングが行われると実効的なクーロン反発が遮蔽されて金属的な伝導性が復活する。こうした原理による伝導性スイッチングはこれまでの半導体デバイスではほとんど使われてこなかったが，我々のグループが世界に先駆けて原理検証したものである。本年はモットFETの室温動作を目的として液晶性ドナー分子による単分子膜デバイスを作製し，さらにそのドーピング条件探索を行った。その結果，膜質の改良や安定化を実現し，今後の性能向上に向けた知見を得た。

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これまでの研究で明らかとなっている。基板からの歪みや冷却速度を制御することによって電荷ギャップを小さくしたFETあるいは電気二重層トランジスタを作製し，これにゲート電圧を印加することによって，電界誘起超伝導相とその周辺相に関する計測を行った。その結果，バンド幅とバンドフィリングをパラメーターとした時の基底状態相図において，バンドフィリングがちょうど 0.5 の時だけに現れる超伝導相など，これまで予想されていたものとは異なる点が多数見出された。また超伝導相近傍の異常金属相についても様々な知見を得ることができた。

c) 有機モット絶縁体の中には，分子構造あるいは結晶構造に起因するカイラルな伝導体が存在する。また分子モーターは芳香族系の伝導性分子であるが，モーターの回転に伴って分子のカイラリティが交互に反転することが知られている。これらの伝導性とカイラリティが共存する系においては，伝導電子の運動方向に依存したスピン選択性（Chirality-Induced Spin Selectivity）が表れることが期待されるため，磁性電極を用いたスピン流検出に取り組んだ。その結果，分子モーターにおいてヘリシティが M から P に反転すると，流れる電流のスピン偏極が反転することが明らかとなった。この分子モーターは光照射によって駆動されているため，この成果は光によるスピン偏極の反転に成功したことを意味している。

B-1) 学術論文

H. OIKE, M. SUDA, M. KAMITANI, A. UEDA, H. MORI, Y. TOKURA, H. M. YAMAMOTO and F. KAGAWA, "Size Effects on Supercooling Phenomena in Strongly Correlated Electron Systems: $IrTe_2$ and θ-(BEDT–TTF)$_2$RbZn(SCN)$_4$," *Phys. Rev. B* **97**, 085102 (7 pages) (2018).

Y. KAWAKAMI, T. AMANO, Y. YONEYAMA, Y. AKAMINE, H. ITOH, G. KAWAGUCHI, H. M. YAMAMOTO, H. KISHIDA, K. ITOH, T. SASAKI, S. ISHIHARA, Y. TANAKA, K. YONEMITSU and S. IWAI, "Non-Linear Charge Oscillation Driven by Single-Cycle Light-Field in an Organic Superconductor," *Nat. Photonics* **12**, 474–478 (2018).

B-3) 総説，著書

H. M. YAMAMOTO, M. SUDA and Y. KAWASUGI, "Organic Phase-Transition Transistor with Strongly Correlated Electrons," *Jpn. J. Appl. Phys.* **57**, 03EA02 (7 pages) (2018).

M. SUDA and H. M. YAMAMOTO, "Field-, Strain- and Light-Induced Superconductivity in Organic Strongly Correlated Electron Systems," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 1321–1331 (2018).

M. SUDA, "A New Photo-Control Method for Organic–Inorganic Interface Dipoles and Its Application to Photo-Controllable Molecular Devices," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **91**, 19–28 (2018). (Award Accounts)

M. SUDA, "Development of Novel Phase Transition Devices Utilizing Strongly Correlated Molecular Conductors," *Molecular Science*, **11(1)**, A0092 (8 pages) (2017). (Award Accounts)

山本浩史，**須田理行**,「光で制御する超伝導～光応答性電気二重層トランジスタ～」, *物理学会誌* **73(3)**, 143–147 (2018).

B-4) 招待講演（* 基調講演）

H. M. YAMAMOTO, "Organic Field-Effect-Transistor with Strongly Correlated Electrons," NanoThailand2018, Bangkok (Thailand), December 2018.

H. M. YAMAMOTO, "Organic Field-Effect-Transistors based on Charge-Transfer Salts," Organic Semiconductors, Conductors, and Electronics, Nagakute, Aichi (Japan), October 2018.

H. M. YAMAMOTO, "Electronic Phase Transition at an Organic Field-Effect-Transistor Interface," 2018 Int'l Roundtable of NanoScience and NanoTechnology Symposium, Shanghai (China), September 2018.*

H. M. YAMAMOTO, "Molecular conductors for electronics," ICCC2018, Sendai (Japan), August 2018.

H. M. YAMAMOTO, "Field-effect-transistors with phase-transitions," PACCON2018, Hat Yai (Thailand), February 2018.

M. SUDA, "Field-, strain- and light-induced superconductivity in quasi-two-dimensional molecular conductors," Keio International Symposium on 2D Materials 2018, Yokohama (Japan), February 2018.

M. SUDA, "Superconducting FETs based on organic strongly correlated materials," Gordon Research Conference—Conductivity and Magnetism in Molecular Materials—, Smithfield, RI (U.S.A.), August 2018.

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).

須田理行, 文部科学大臣表彰 若手科学者賞 (2018).

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 (2018–).

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 (2014–2017).

分子科学会企画委員 (2012–2016), 運営委員 (2018–).

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).

第13回分子科学討論会組織委員(渉外) (2018–).

MRM2019組織委員 (2018–).

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

総合研究大学院大学物理科学研究科構造分子科学専攻副専攻長 (2017).

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, 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」, 2018年7月.

東北大学大学院理学系研究科, 委嘱教授, 2015年4月– .

B-9) 学位授与

Tianchai Chooppawa, 「Development of n-type organic semiconductors toward Mott-type Field-effect-transistor investigation」, 2018年9月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

研究活動スタート支援,「カイラル化合物による電流－スピン流相互変換」, 廣部大地 (2018年–2020年).

科研費基盤研究(B),「溶液プロセスによる二次元単分子層接合デバイスの創成」, 山本浩史 (2016年–2018年).

科研費若手研究(A),「光誘起電気二重層を利用した新奇超伝導トランジスタの開発」, 須田理行 (2016年–2018年).

科研費新学術領域研究(公募研究),「π電子系強相関物質を用いた歪み制御型相転移デバイスの開発」, 須田理行 (2015年–2017年).

科研費若手研究(B),「有機単分子膜モットFETの開発」, 須田理行 (2013年–2015年).

科学技術振興機構さきがけ研究,「電子相関を利用した新原理有機デバイスの開発」, 山本浩史 (2009年–2013年).

科研費若手研究(A),「超分子ナノワイヤーの冗長性拡張による金属化」, 山本浩史 (2008年–2011年).

科研費特定領域研究(公募研究),「電極との直接反応によるDCNQIナノ単結晶作成とその機能探索」, 山本浩史 (2006年–2008年).

C) 研究活動の課題と展望

有機モットFETの室温における動作効率を向上させるためには，構造が規則的かつ安定な単分子膜を作製し，これにドーピングを行う必要がある。これまでの検討で用いている液晶性分子は，高温でのアニーリングに対して不安定であるため，共有結合などを用いて膜構造を固定していく必要があると考えられる。そのため単分子膜の分子配列を周期的に保ったまま固定する手法について，現在検討中である。一方，基底状態の相図に関する研究では，超伝導相に近づくほどバルク伝導と界面伝導の切り分けが困難になってくることが課題となっている。バルク結晶が超伝導相に入らないよう,バルク部分のフィリング制御をすることも含めた系の設計をすることによって，今後はさらに詳細な基底状態相図が得られると考えられる。またカイラリティによるスピン流生成は，これまで薄膜でしか観測されていない現象であるため，これがバルクになった場合にも観測可能な現象なのかどうか，といった点を検証する必要がある。同時に，なぜ軽元素のみの化合物で巨大なスピン軌道相互作用が生じるのか，その詳細なメカニズムの解明にも，理論・計算化学との共同研究によって取り組みたい。

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

b) DFT 計算による反応メカニズムの解明

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。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。また，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。最近では，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。本研究では, リレン化合物（*n*R: *n* = 2, 3, 4…）を完全にフッ素化した PF*n*R（*n* = 2, 3, 4…）を合成し，SF の研究に供したい。DFT 計算によると，平面の *n*R と異なり，PF*n*R はナフタレン環が 25 度ねじれている。このため，PF*n*R の溶解性は向上するものと考えられ，難溶性の *n*R 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（PF3R，$C_{30}F_{16}$）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，椴山グループとの共同研究で，ナフタレンモノマーの選択的フッ素化に成功した。現在，これらを原料にペリレンや DIP の完全フッ素化に取り組んでいる。

b) 最近，椴山グループはアルジミンの特異な [1,3]- 転位反応を発見し，これが極めて高い不斉転写で進行することを見出した。この前例のない転位反応メカニズムを解明するために，SMD/M06-2X-D3/6-311+G(d,p) レベルでの DFT 計算を行った。本来，[1,3]- 転位反応は禁制であるので，二つの多段階ルートを提案した。求電子置換反応のルートは，最もシンプルな転位メカニズムであるが, 立体選択性はほぼないことがわかった。一方, 協奏的な [3,3] シグマトロピー転位を経るルートでは，不斉転写や反応性をよく説明できることが分かった（論文投稿中）。

B-8) 大学での講義，客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「構造物性科学」, 2018 年 12 月 4 日–7 日.

C) 研究活動の課題と展望

椴山准教授とのフッ素化リレン化合物の共同研究が順調に進んでいる。椴山グループのメンバーが積極的に取り組んでくれたおかげで，大変困難なナフタレンの選択的フッ素化に関する多くの知見が得られた。来年度の機器センターへの異動後は，これらの有機 n 型半導体を分子・物質合成プラットホームを通じて，大学や企業の研究者に提供していきたい。また，椴山グループが発見した特異な転位反応のメカニズムを，DFT 計算によって解明することができ，論文投稿まで漕ぎ着けた。今後も，これまでの有機化学の知識と経験を生かして，所内外の分子科学研究者をサポートしていきたい。

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超高速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ング，プラズモン波束の運動の可視化等が可能であることを示した。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。また近接場光学活性イメージング法を開発し，金属ナノ構造の局所光学活性，キラルな光場の空間構造の研究に適用した。

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，開発した近接場光学活性イメージング装置を用い，局所的な光学活性を測定した。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，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，局所的な誘起双極子が局所的な円偏光場の起源になること等，幾つかの基礎的に重要な結果が得られている。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。通常の遠方場の顕微鏡においても光学活性によるイメージングは未開拓であるが，我々は高い精度・確度で顕微光学活性イメージングを可能とする装置を開発し，微結晶試料，液晶，生体組織等へのその応用を，共同研究を通じて開始している。

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. HOSHINA, N. YOKOSHI, H. OKAMOTO and H. ISHIHARA, "Super-Resolution Trapping: A Nanoparticle Manipulation Using Nonlinear Optical Response," *ACS Photonics* **5**, 318–323 (2018).

S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, "Imaging Chirality of Optical Fields near Achiral Metal Nanostructures Excited with Linearly Polarized Light," *ACS Photonics* **5**, 1486–1492 (2018).

K. MASUDA, R. SHINOZAKI, Y. KINEZUKA, J. LEE, S. OHNO, S. HASHIYADA, H. OKAMOTO, D. SAKAI, K. HARADA, K. MIYAMOTO and T. OMATSU, "Nanoscale Chiral Surface Relief of Azo-Polymers with Nearfield OAM Light," *Opt. Express* **26**, 22197–22207 (2018).

K. Q. LE, S. HASHIYADA, M. KONDO and H. OKAMOTO, "Circularly Polarized Photoluminescence from Achiral Dye Molecules Induced by Plasmonic Two-Dimensional Chiral Nanostructures," *J. Phys. Chem. C* **122**, 24924–24932 (2018).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. Q. LE and H. OKAMOTO, "Circular Polarization Dissymmetry of Two Photon-Induced Photoluminescence from Chiral Plasmonic Nanostructured Metasurfaces," *Proc. SPIE* **10712**, 1071214 (3 pages) (2018).

S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, "Active Polarization Control of Optical Fields Localized on Gold Nano-Rectangles," *Proc. SPIE* **10712**, 107121S (2 pages) (2018).

B-3) 総説，著書

岡本裕巳,「ナノ空間領域の構造と近接場光のキラリティ」, *レーザー研究* **46**, 187–191 (2018).

岡本裕巳,「NEWS ― ノーベル物理学賞：アーサー・アシュキン博士の業績」, *パリティ* **33(12)**, 40–42 (2018).

B-4) 招待講演

H. OKAMOTO, "Imaging and control of chiral plasmons," The Second Symposium of Chiral Molecular Science and Technology 'Advanced Materials Science, Biology & Nanophotonics,' Chiba (Japan), January 2018.

岡本裕巳,「物質の共鳴・非線形・偏光応答を活用した操作手法の拡張と高度化」, レーザー学会学術講演会第 38回年次大会シンポジウムS04「光圧による物質操作の新展開」, 京都, 2018年 1月.

H. OKAMOTO, "Imaging and control of chiral plasmons," International Symposium on Plasmonics and Nanophotonics (iSPN 2018), Hangzhou (China), May 2018.

H. OKAMOTO, "Nanoscale Imaging and Control of Chiral Plasmons," The 7th Hsinchu Summer Course and Workshop, Emergent Functional Matter Science, Hsinchu (Taiwan), June 2018.

H. OKAMOTO, "Imaging and Control of Chiral Plasmons," 11th International Conference on Nanophotonics (ICNP 2018), Wroclaw (Poland), July 2018.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA, K. Q. LE and T. NARUSHIMA, "Detection and control of chiral optical near-field interaction," The 12th International Conference on Excitonic and Photonic Processes in Condensed Matter and Nano Materials (EXCON 2018), Nara (Japan), July 2018.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA and T. NARUSHIMA, "Nanoscale imaging and control of chiral plasmons," International Symposium on Chiral Magnetism (χ-mag2018), Nara (Japan), July 2018.

S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA, H. OKAMOTO, K. ENDO and Y. TOGAWA, "Spectral properties of chiral optical fields localized on chiral metal nanostructures," International Symposium on Chiral Magnetism (χ-mag2018), Nara (Japan), July 2018.

S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, "Mapping Polarization States of Plasmonic Fields," 26th International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS 2018), Jeju (Korea), August 2018.

H. OKAMOTO, Y. NISHIYAMA, K. IMAEDA and K. IMURA, "Plasmon Wave Dynamics Visualized by Femtosecond Near-Field Optical Microscopy," TSRC Workshop on Molecular Videography, Telluride (U.S.A.), September 2018.

H. OKAMOTO, "Local optical activity of nanomaterials with nano-optics and chirality," Department Colloquium, Department of Materials Science and Engineering, Seoul National University, Seoul (Korea), December 2018.

岡本裕巳,「ナノ物質の局所光学活性とキラリティ」, 第 29回光物性研究会, 京都, 2018年 12月.

H. OKAMOTO, "Nanoscale imaging and control of chiral optical fields," Smart NanoMaterials 2018: Advances, Innovation and Applications (SNAIA2018), Paris (France), December 2018.

B-6) 受賞, 表彰

岡本裕巳, 光科学技術研究振興財団研究者表彰 (1994).

岡本裕巳, 分子科学研究奨励森野基金 (1999).

井村考平, 応用物理学会講演奨励賞 (2004).

井村考平, ナノオプティクス賞 (2005).

井村考平, 分子構造総合討論会奨励賞 (2005).

井村考平, 光科学技術研究振興財団研究者表彰 (2007).

井村考平, 日本化学会進歩賞 (2007).

井村考平, 日本分光学会賞（奨励賞） (2007).

原田洋介, ナノオプティクス賞 (2010).

岡本裕巳, 日本化学会学術賞 (2012).

成島哲也, Yamada Conference LXVI Best poster award (Young Scientist) (2012).

橋谷田俊, 日本光学会OPJ ベストプレゼンテーション賞 (2013).

西山嘉男, 日本分光学会年次講演会一般講演賞 (2014).

橋谷田俊, 日本化学会第 95春季年会学生講演賞 (2015).

橋谷田俊, 第9回分子科学討論会分子科学会優秀ポスター賞 (2015).

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

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

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

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等員

日本化学会トピックス小委員会委員 (1993–1996).

日本分光学会編集委員 (1993–2001).

日本分光学会東海支部幹事 (2001–2012).

日本化学会東海支部常任幹事 (2003–2005).

分子科学研究会事務局 (2004–2006).

分子科学会運営委員 (2006–2008).

学会の組織委員等

The International Symposium on New Developments in Ultrafast Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (Tokyo), Organizing Committee (1995).

The Tenth International Conference on Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (Okazaki), Local Executive Committee (2001).

The Twentieth International Conference on Raman Spectroscopy (Yokohama), Local Organizing Committee (2006).

International Workshop on Soft X-ray Raman Spectroscopy and Related Phenomena (Okazaki), Local Organizing Committee (2006).

The 12th Korea-Japan Joint Symposium on Frontiers of Molecular Science (Jeju), Co-chair (2007).

Japan-Korea Joint Symposium on Molecular Science 2009 “Chemical Dynamics in Materials and Biological Molecular Sciences” (Awaji), Co-chair, Secretary general (2009).

The 7th Asia-Pacific Conference on Near-Field Optics (Jeju), Technical Program Committee (2009).

Yamada Conference LXVI: International Conference on the Nanostructure-Enhanced Photo-Energy Conversion, Programming Committee (2012).

1st Optical Manipulation Conference, Optics & Photonics International Congress 2014, Program Committee (2014).

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

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

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

4th Optical Manipulation Conference, Optics & Photonics International Congress 2017, Program Committee (2017).

The 24th Congress of the International Commission for Optics (ICO-24), Program Committee Subcommittee (2017).

The 12th International Conference on Excitonic and Photonic Processes in Condensed Matter and Nano Materials (EXCON 2018), Program Advisory Board (2018).

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 (2012–2018).

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 (2014–2018).

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

総合研究大学院大学物理科学研究科,「構造光科学」, 2018年7月18日, 19日, 23日, 25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).

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–2018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，多くの追随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。これらの研究から得られたプラズモンのキラリティに関する性質を基礎として，キラルプラズモンが分子の特性に及ぼす効果に関する研究にも展開しつつあり，一部で成果が出始めた。通常の回折光学系による顕微鏡で精度の高い円二色性イメージングを可能とする装置開発も行い，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が持たれ，ナノ光学の観点からこの方向への研究展開についても検討を開始し，一部実際の共同研究も始めた。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。2016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～ 2018 年 9 月 30 日）*)

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

A-2) 研究課題：

a) マイクロドメイン構造制御に関する研究

b) マイクロドメイン光制御に関する研究

c) マイクロ固体フォトニクスの展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

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

a) マイクロドメイン構造，界面（粒界面，結晶界面，さらには自発分極界面）を微細に制御する固相反応制御法の研究として，レーザーセラミックス，レーザー素子，分極反転素子の作製プロセスの高度化を図っている。特に，固体レーザーの発光中心である希土類イオンの軌道角運動量を利用したマイクロドメインの配向制御は，これまで不可能だった異方性セラミックスによるレーザー発振を成功させただけでなく原理的にはイオンレベルでの複合構造を可能とする。さらに最近，表面活性接合による異種材料接合に成功し，Distributed Face Cooling（DFC）構造による Tiny Integrated Laser（TILA）なる次世代の高性能な高集積小型レーザーに関するコンセプトが検証された。これより，新たなフォトニクスを創出できるものと期待している。

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

c) 開発した光素子を用いた新規レーザー，波長変換システムの開発と展開を図っている。これまでにもエッジ励起セラミック Yb:YAG マイクロチップレーザーによる高平均出力動作，手のひらサイズジャイアントパルスマイクロチップレーザーからの高輝度温度光発生，マイクロチップレーザーからの UV 光（波長:266 nm）からテラヘルツ波（波長:100 ~ 300 μm），さらには高効率・高出力のナノ秒光パラメトリック発生（出力エネルギー約 1 J，効率約 80%），波長 5~12 μm に至る広帯域波長可変中赤外光発生，1.5 サイクル中赤外光からのコヒーレント軟X線（波長：~5 nm）・アト秒（200 ~ 300 as）発生などをマイクロ固体フォトニクスで実証した。アト秒発生に重要な中赤外 OPCPA では，LA-PPMgLN を用い波長 2.1 μm 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（THz）波発生にも有利である。また，LA-PPMgLN を用いてピコ秒領域で mJ 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から，THz 波による電子加速までと幅広い展開が期待される。

B-1) 学術論文

V. YAHIA and T. TAIRA, "High Brightness Energetic Pulses Delivered by Compact Microchip-MOPA System," *Opt. Express* **26**, 8609–8618 (2018).

S. JOLY, M.-A. LEMESRE, B. LEVRIER, C. LYSZYK, B. PLANO, A. COURJAUD, T. TAIRA and L. BECHOUAE, "A Quantitative Thermal and Thermomechanical Analysis for Design Optimization and Robustness Assessment of Microassembled High Power Yb:CaF_2 Thin-Disk Laser," *Opt. Laser Tech.* **105**, 229–241 (2018).

H. ISHIZUKI, V. YAHIA and T. TAIRA, "Characteristics of Crystal Quartz for High-Intensity, Sub-Nanosecond Wavelength Conversion," *Opt. Mater. Express* **8**, 1259–1264 (2018).

N. H. MATLIS, F. AHR, A.-L. CALENDRON, H. CANKAYA, G. CIRMI, T. EICHNER, A. FALLAHI, M. FAKHARI, A. HARTIN, M. HEMMER, W. R. HUANG, H. ISHIZUKI, S. W. JOLLY, V. LEROUX, A. R. MAIER, J. MEIER, W. QIAO, K. RAVI, D. N. SCHIMPF, T. TAIRA, X. WU, L. ZAPATA, C. ZAPATA, D. ZHANG, C. ZHOU and F. X. KÄRTNER, "Acceleration of Electrons in THz Driven Structures for AXSIS," *Nuclear Instum. Methods Phys. Res., Sect. A* **909**, 27–32 (2018).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. TAIRA, "Distributed Face Cooling Modules for Tiny Integrated Lasers," *LASE, SPIE Photonics West 2018*, 10513-38 (2018).

S. W. JOLLY, F. AHR, N. MATLIS, V. LEROUX, T. EICHNER, K. RAVI, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, F. X. KAERTNER and A. MAIER, "Towards Millijoule Narrowband Terahertz Generation Using Chirp-and-Delay in Periodically Poled Lithium Niobate," *Mid-Infrared Coherent Sources (MICS), OSA High-brightness Sources and Light-driven Interactions Congress 2018*, ET1B.4 (2018).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, "Efficient Optical Parametric Generation Pumped by a Sub-Nanosecond MOPA Source," *Mid-Infrared Coherent Sources (MICS), OSA High-brightness Sources and Light-driven Interactions Congress 2018*, MW1C.1 (2018).

Y. SATO, J. AKIYAMA and T. TAIRA, "Design of Magnetic Anisotropy in Micro Domains for Yb:Fluoroapatite Laser Ceramics," *The 7th Advanced Lasers and Photon Sources (ALPS'18), OPIC'18*, ALPS3-A-3 (2018).

K. TAMURA, H. OHBA, M. SAEKI, T. TAGUCHI, H. H. LIM, T. TAIRA and I. WAKAIDA, "Effects of High Irradiation Dose on a Nd:YAG/Cr:YAG Microchip Composite for Remote Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS)," *The 6th Laser Ignition Conference (LIC'18), OPIC'18*, LIC4-3 (2018).

J. MORIMOTO, T. GOTO, J. PRITCHARD, M. MINA, T. TAIRA, Y. NAKAMURA, P. B. LIM, H. UCHIDA and M. INOUE, "Magnetooptical Q-Switch Laser Using Neodymium Yttrium Aluminum Garnets," *The 6th Laser Ignition Conference (LIC'18), OPIC'18*, LIC5-3 (2018).

R. BHANDARI, N. ISHIGAKI, J. SAIKAWA, K. TOJO, Y. ITO, T. ONO and T. TAIRA, "LIBS System for Trace Impurity Detection in Semiconductor Manufacturing Process," *The 6th Laser Ignition Conference (LIC'18), OPIC'18*, LIC7-3 (2018).

V. YAHIA and T. TAIRA, "Development of High-Brightness High-Energy Micro-MOPA," *The 6th Laser Ignition Conference (LIC'18), OPIC'18*, LICp6-2 (2018).

Y. SATO, J. AKIYAMA and T. TAIRA, "Q-Switched Laser Oscillation in Polycrystalline Yb:FAP Anisotropic Laser Ceramics," *The 6th Laser Ignition Conference (LIC'18), OPIC'18*, LICp6-7 (2018).

H. H. LIM and T. TAIRA, "Theoretical Study on the Mechanism of Sub-Ns Giant-Pulse Laser Induced Air-Breakdown Due to Cascade Ionization," *The 6th Laser Ignition Conference (LIC'18), OPIC'18*, LICp6-8 (2018).

A. KAUSAS, L. ZHENG and T. TAIRA, "Optimization of CW Operation in Distributed Face Cooling," *The 6th Laser Ignition Conference (LIC'18), OPIC'18*, LICp6-9 (2018).

T. KAWASAKI, V. YAHIA and T. TAIRA, "Analysis of the Amplifier for PW/sr/cm^2 Class Micro-MOPA," *The 6th Laser Ignition Conference (LIC'18), OPIC'18*, LICp6-12 (2018).

Y. SATO, J. AKIYAMA and T. TAIRA, "Q-Switched Laser Oscillation in Micro-Domain Controlled Yb:FAP Anisotropic Laser Ceramics," *CLEO 2018*, SM4N.6 (2018).

S. W. JOLLY, F. AHR, N. H. MATLIS, V. LEROUX, T. EICHNER, K. RAVI, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, F. X. KAERTNER and A. R. MAIER, "Towards Millijoule Narrowband Terahertz Pulses Using the Chirp-and-Delay Technique," *CLEO 2018*, FF1E.3 (2018).

V. YAHIA and T. TAIRA, "Gain Aperture for High-Brightness Micro-MOPA," *8th EPS-QEOD Europhoton Conference*, MoA2.7 (2018).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, "266 nm Generation Using Quasi Phase-Matched Quartz Pumped by a Microchip Laser," *8th EPS-QEOD Europhoton Conference*, TuP.36 (2018).

B-3) 総説，著書

S. SAITO and T. KITAGAWA, "Professors of Department of Molecular Structure," *Ann. Rev.* 39–52 (2018).

平等拓範,「光技術で"くるま"は変わる：総論」, *オプトロニクス* **36**, 58–61 (2017).

平等拓範，**L. ZHENG**，**石月秀貴**,「1.5 ミクロン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」, *オプトロニクス* **36**, 67–70 (2017).

平等拓範,「100MW に迫る手のひらサイズマイクロチップレーザーの開発」, *オプトロニクス* **37**, 156–161 (2018).

佐藤庸一，**平等拓範**,「異方性レーザーセラミックスと配向制御」, *フォトニクスニュース* **4**, 2–6 (2018).

平等拓範,「いつでも・どこでも・だれでも使えるパワーレーザを目指して――高出力ジャイアントパルスDFC 小型集積レーザ――」, *レーザ加工学会誌* **25**, 1–5 (2018).

B. BOULANGER, S. JIANG, S. MIROV, J. NILSSON, A. PETERSEN, F. ROTERMUND, S. TACCHEO and T. TAIRA, "Feature Issue Introduction: Advanced Solid-State Lasers 2017," *Opt. Express* **26**, pp. 11018–11024 (2018). (Opening Article)

B. BOULANGER, S. JIANG, S. MIROV, J. NILSSON, A. PETERSEN, F. ROTERMUND, S. TACCHEO and T. TAIRA, "Feature Issue Introduction: Advanced Solid- State Lasers 2017," *Opt. Mater. Express* **8**, pp. 1246–1252 (2018). (Opening Article)

Y. SATO and T. TAIRA, "Report on OPIC the 6th Laser Ignition Conference 2018 (LIC'18)," *The Review of Laser Engineering* **46**, 537–538 (2018). (Special Issue on Biological and Chemical Sensing Applications Based on Nano-Micro Optics)

B-4) 招待講演（* 基調講演）

平等拓範,「レーザーエンジン点火からのユビキタス・パワーレーザー」, 光科学フォーラムサミット「光科学による新たな産業応用」, 大阪大学光科学センター , 科学技術館, 東京, 2017年 11月.

平等拓範,「マイクロ固体フォトニクスによるジャイアントパルスレーザー：マイクロドメインの量子状態制御による新しい方式の提案」, 日本学術振興会第 154回先進セラミックス第 124委員会, 東京工業大学田町キャンパス, 東京, 2017年 11月.

T. TAIRA and H. ISHIZUKI, "Quantum Design of Micro-Domains for Giant Pulse Lasers," 13th Laser Ceramics Symposium (LCS2017), Fryazino (Russia), December 2017.

平等拓範,「国際会議報告　Photonics West 報告」, 光産業技術振興協会第 4回光材料・応用技術研究会, 中央大学後楽園キャンパス, 東京, 2018年 3月.

平等拓範,「自動車へのレーザー応用最前線――エンジン点火からLiDAR, ヘッドライトまで――」, レーザー学会学術講演会第 38回年次大会, 京都市勧業館みやこめっせ, 京都, 2018年 1月.

平等拓範,「次世代ハイパワーレーザー開発2――ジャイアントマイクロフォトニクスによるユビキタス・パワーレーザー――」,「レーザーエンジン点火向けマイクロチップレーザー励起用高出力VCSELモジュール」, レーザー学会学術講演会第 38回年次大会, 京都市勧業館みやこめっせ, 京都, 2018年 1月.

M. HEMMER, G. CIRMI, K. RAVI, F. AHR, L. ZAPATA, A.-L. CALENDRON, H. CANKAYA, S. W. JOLLY, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, N. MATLIS, A. R. MAIER and F. X. KAERTNER, "Frequency-Shifted Sources for Terahertz-Driven Linear Electron Acceleration," LASE, SPIE Photonics West 2018, San Francisco, California (U.S.A.), January 2018.

T. TAIRA, "Opening Remarks," Joint Session LIC+PLD+SLPC, The 6th Laser Ignition Conference (LIC'18), OPIC'18, Yokohama (Japan), May 2018.

T. TAIRA, "Opening Remark," The 6th Laser Ignition Conference (LIC'18), OPIC'18, Yokohama (Japan), May 2018.

Y. SAKURAI, Y. HOTTA, R. OTOWA, M. NISHITATENO, L. ZHENG, H. YAMAMOTO and T. TAIRA, "One-Shot 3D Giant-Pulse Micro-Laser Processing by LCOS Direct Control," Joint Session LIC+PLD+SLPC, The 6th Laser Ignition Conference (LIC'18), OPIC'18, Yokohama (Japan), May 2018.

平等拓範,「手のひらに乗る高強度レーザが世界を変える技術イノベーション――光が拓く新しいエネルギーから生体応用まで――」, 第16回幸田プレステージレクチャーズ, 幸田プレステージレクチャーズ運営事務局, 幸田町民会館つばきホール, 愛知, 幸田, 2018年 6月.

Y. SATO and T. TAIRA, "Microchip Lasers," Photonics North 2018, Montreal, Quebec (Canada), June 2018.

T. TAIRA, "Giant Micro-Phoyonics Toward Ubiquitous Power Lasers," 7th International Conference on Laser Peening and related Phenomena (LSP2018), Singapore, June 2018.* (Keynote Lecture)

T. TAIRA, "Giant Micro-Photonics for Tiny Integrated Power Laser," 6th IAPLE Annual Conference (IAPLE 2018), Cape Town (South Africa), July 2018.* (Plenary Keynote)

T. TAIRA, "Micro Domain and Boundary Control for Ubiquitous Power Laser," Ceramic and Crystal Materials for Optics and Photonics, Materials Science & Technology 2018 (MS&T18), Columbus, Ohio (U.S.A.), October 2018.

平等拓範,「レーザーの自動車・移動体応用～ユビキタス・パワーレーザーからの提案～」, 日本光学会第 23回レーザーディスプレイ技術研究会, 東京大学生産技術研究所, 東京, 2018年 7月.

平等拓範,「100MW に迫る手の平サイズのサブナノ秒マイクロチップレーザー」, ImPACT シンポジウム「ImPACT が拓く未来の光科学」, JST 東京本部別館, 東京, 2018年 8月.

平等拓範,「産業用レーザーの高出力化(CLEO 情報含む)」, 光産業技術振興協会第 2回光材料・応用技術研究会, (株)日本レーザー本社, 東京, 2018年 8月.

吉田光宏, 周　翔羽, 張　叡, 本田洋介, 平等拓範, 石月秀貴,「高強度レーザーによる高電界加速器の開発」, 第 79回応用物理学会秋季学術講演会, 名古屋国際会議場, 愛知, 名古屋, 2018年 9月.

永田　毅, 緒方大志, 岡田敏幸, 平等拓範,「幅広い加工用途への応用を目指したマイクロチップレーザ」, 第 79回応用物理学会秋季学術講演会, 名古屋国際会議場, 愛知, 名古屋, 2018年 9月.

若井田育夫, 大場弘則, 池田裕二, 作花哲夫, 平等拓範,「福島第一原子力発電所廃止措置のためのレーザー分析技術」, 第 79回応用物理学会秋季学術講演会, 名古屋国際会議場, 愛知, 名古屋, 2018年 9月.

H. H. LIM and T. TAIRA, "Mechanism of Pulse Width Scaling Law of Laser Induced Breakdown Threshold in Air," Symposium on Applications of Advanced Measurement Technologies SAAMT2018 & Post-ASLIBS2017 International Symposium, Tokushima (Japan), September 2018.* (Keynote Speech)

K. TAMURA, H. OHBA, M. SAEKI, T. TAGUCHI, H. H. LIM, T. TAIRA and I. WAKAIDA, "Study of Microchip Laser Properties for The Remote Inspection Using Laser-Induced Breakdown Spectroscopy," Symposium on Applications of Advanced Measurement Technologies SAAMT2018 & Post-ASLIBS2017 International Symposium, Tokushima (Japan), September 2018.* (Keynote Speech)

H. OHBA, K. TAMURA, M. SAEKI, T. TAGUCHI, H. H. LIM, T. TAIRA and I. WAKAIDA, "Fiver Optic LIBS Measurement Using Nd:YAG Ceramic Micro-Laser," Symposium on Applications of Advanced Measurement Technologies SAAMT2018 & Post-ASLIBS2017 International Symposium, Tokushima (Japan), September 2018.* (Keynote Speech)

B-5) 特許出願

特願 2018-006680,「Qスイッチレーザー装置」, 平等拓範, バンダリ　ラケシュ (自然科学研究機構), 2018年.

特願 2018-010560,「光学素子の製造方法及び光学素子」, 平等拓範, カウシャス　アルヴィダス(自然科学研究機構), 2018年.

特願 2018-092757,「レーザー装置」, 安原　亮, 平等拓範(自然科学研究機構), 2018年.

特願 2018-095608,「物質生成方法」, 平等拓範, カウシャス　アルヴィダス(自然科学研究機構), 2018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, 浅野秀文, 岩井一彦, 浅井滋生, 日本金属学会第 56回論文賞 (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).

Y. SATO, The 6th Laser Ignition Conference 2018 (LIC'18), The Best Poster Presentation (2018).

V. YAHIA, The 6th Laser Ignition Conference 2018 (LIC'18), The Best Poster Presentation (2018).

T. TAIRA, The International Academy of Photonics & Laser Engineering (IAPLE) フェロー (2018).

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 (2011–2020), 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 (2009-2018).

科学技術交流財団「ジャイアントマイクロフォトニクス」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).

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).

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).

5th Laser Ignition Conference (LIC'17) 国際会議プログラム委員会議長(2016–2017).

Pacific Rim Laser Damage 2018 (PLD2018) 国際会議国際委員会委員 (2016–2017).

Optics & Photonics International Congress 2018 (OPIC2018), Advanced Laser & Photon Source (ALPS2018), 国際会議プログラム委員会委員 (2017–2018).

Optics & Photonics International Congress 2018 (OPIC2018) 国際会議組織委員会委員 (2017–2018).

The 13th Pacific Rim Conference on Ceramic and Glass Technology (PACRIM 13) 組織委員会委員 (2017–2019).

（社）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（主査）(2017–2018).

First Internationafl Conference on Optics, Photonics and Lasers (OPAL'2018) 国際会議プログラム委員会委員 (2017–2018).

Mid-Infrared Coherent Sources 2018 (MICS 2018) テクニカル・プログラム委員会委員 (2017–2018).

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, 2015–2018).

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).

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).

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-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　（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).
文部科学省平成 30年度科学技術試験研究委託事業(Q-LEAP)「先端レーザーイノベーション拠点「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」部門」,「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」(②a.10KHz 赤外OPCPA 光源の開発), 再委託(東京大学), 平等拓範 (2018年–2019年).

B-11) 産学連携

(株)コンポン研究所,「マイクロ固体フォトニクスの基礎研究」, 平等拓範 (2018年).
(株)村田製作所,「水晶波長変換デバイスの研究」, 平等拓範 (2018年).
(株)豊田中央研究所,「マイクロチップレーザを活用した材料加工技術の開発」, 平等拓範 (2018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。一方, 極限的な粒子加速が期待されるレーザー加速では, 物質の性質を原子・分子レベルで解明し, さらに化学反応などの超高速の動きを捉えることができ, 広範な分野の最先端研究に利用される加速器, 特にX線自由電子レーザーSACLA をトレーラーサイズにまで小型化する事が期待されている。しかし, その加速のための高強度レーザーが非常に大型化するため深刻な問題となっている。このようなことからマイクロ固体フォトニクスへの期待が高まっている。今後, レーザー加速への寄与が望める先端レーザー科学を, 別途, 社会連携研究により製造, 医療, 環境・エネルギー問題などに展開し, 基礎研究の推進が社会貢献に繋がることを検証して行きたい。

＊）2018 年 10 月 1 日理化学研究所放射光科学研究センターグループディレクター

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，多くの分子振動準位と共鳴しており，非破壊で分子のダイナミクスを研究するのに適している。今年度の成果としては，この手法を赤外イメージングに応用することを行った。

b) 前年度は，Si 薄膜にサブサイクル中赤外光パルスを集光して，高次高調波が発生することを示したが，本年度は，Si 薄膜を非線形媒質として，サブサイクル中赤外光パルスの評価が行えることを示した。800 nm の参照光（ω_1）とサブサイクル中赤外光パルス（ω_0）を Si 薄膜上で重ね合わせると，400–500 nm 付近に信号（ω_2）が得られ，それが四光波混合の信号（$\omega_1 + \omega_1 - \omega_0 \rightarrow \omega_2$）に対応していることを示した。この信号をもとに，サブサイクル中赤外光パルスのパルス幅を求めることができる。

c) 以前，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 fs のパルスが得られていたが，それをさらに増幅する再生増幅器の開発を行った。最終的には 1.4 mJ のパルスエネルギーをもった 360 fs のパルスを発生させることができた。このレーザーはさらに長い赤外パルスを発生させる光源として有用と考えられる。また，前年度に開発した 50 fs のパルスを発生するファイバー増幅器の出力を光源として，3 光子顕微鏡の開発を行った。1800 nm の励起光パルスを光源とした顕微鏡を構築し，試料に照射したところ，650 nm 程度の蛍光が得られ，3 光子励起による蛍光の信号が得られた。

B-1) 学術論文

H. SHIRAI, F. KUMAKI, Y. NOMURA and T. FUJI, “High-Harmonic Generation in Solids Driven by Sub-Cycle Mid-Infrared Pulses from Two-Color Filamentation,” *Opt. Lett.* **43**, 2094–2097 (2018).

S. A. REZVANI, M. SUZUKI, P. MALEVICH, C. LIVACHE, J. V. DE MONGOLFIER, Y. NOMURA, N. TSURUMACHI, A. BALTUŠKA and T. FUJI, “Millijoule Femtosecond Pulses at 1937 nm from a Diode-Pumped Ring Cavity Tm:YAP Regenerative Amplifier,” *Opt. Express* **26**, 29460–29470 (2018).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. NOMURA and T. FUJI, “Ultrafast Thulium-Doped Fiber Amplifier for Multiphoton Microscopy,” *The 7th Advanced Lasers and Photon Sources*, ALPS13-D2-3 (2018).

S. A. REZVANI, M. SUZUKI, P. MALEVICH, C. LIVACHE, J.-V. DE MONTGOLFIER, Y. NOMURA, N. TSURUMACHI, A. BALTUSKA and T. FUJI, "2 Gigawatt Peak Power Source Centered at 1940 nm from a Diode-Pumped Ring Cavity Tm:YAP Regenerative Amplifier," *JSAP-OSA Joint Symposia 2018*, 21a-221B-5 (2018).

S. A. REZVANI, M. SUZUKI, P. MALEVICH, C. LIVACHE, J.-V. DE MONTGOLFIER, Y. NOMURA, N. TSURUMACHI, A. BALTUSKA and T. FUJI, "Gigawatt Peak Power Centered at 1940 nm from a Diode-Pumped Ring Cavity Tm:YAP Regenerative Amplifier," *Advanced Solid State Lasers*, AM5A.5 (2018).

H. SHIRAI, F. KUMAKI, Y. NOMURA and T. FUJI, "High-Harmonic Generation in Solids Driven by Sub-Cycle Mid-Infrared Pulses from Laser Filamentation," *XXI International Conference on Ultrafast Phenomena*, THU.PO.33 (2018).

H. SHIRAI, F. KUMAKI, Y. NOMURA and T. FUJI, "High-Harmonic Generation from Crystalline Silicon Driven by Sub-Cycle Mid-Infrared Pulses," *CLEO:QELS Fundamental Science*, FF2P.2 (2018).

B-4) 招待講演

Y. NOMURA, "Development of an ultrafast 2 μm laser system for multiphoton microscopy," Interhierarchical understanding of materials and life through molecular observation, Okazaki (Japan), March 2018.

Y. NOMURA and T. FUJI, "Femtosecond light source at 2 μm based on thulium-doped ZBLAN fiber," 11th Asia Pacific Laser Symposium, Sheraton Xi'an North City Hotel, Xi'an (China), May 2018.

T. FUJI, "Complete waveform characterization of mid-infrared ultrashort pulses," 2nd URSI Atlantic Radio Science Meeting (AT-RASC), Gran Canaria (Spain), May 2018.

T. FUJI, "High harmonic generation in Si driven by sub-cycle mid-infrared source based on twocolor laser filamentation," COFIL2018, Geneva (Switzerland), June 2018.

藤　貴夫,「究極の光を作る」, 市民公開講座第 116回分子科学フォーラム, 岡崎コンファレンスセンター , 岡崎, 2018年 3月.

T. FUJI, "Development and application of sub-cycle mid-infrared source based on two-color filamentation," JSAP-OSA Joint Symposia 2018, Nagoya (Japan), September 2018.

野村雄高, 藤　貴夫,「ツリウム添加ZBLAN ファイバーによる 2 μm 帯フェムト秒レーザーシステム」, レーザー学会第 525回研究会「ファイバレーザー技術」, 名古屋大学, 名古屋, 2018年 11月.

B-6) 受賞，表彰

藤　貴夫, 日本光学会奨励賞 (1999).

藤　貴夫, 大阪大学近藤賞 (2008).

藤　貴夫, 野村雄高, 白井英登, レーザー学会業績賞（進歩賞）(2015).

野村雄高, 自然科学研究機構若手研究者賞 (2016).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

レーザー学会「ファイバーレーザー技術」専門委員会委員 (2015–2017).（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）

レーザー学会「ファイバーレーザー技術」専門委員会幹事 (2018–).

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 (2017–2018).（野村雄高）

ICO24国際会議プログラム委員 (2017).

Ultrafast Optics 2017国際会議プログラム委員 (2017).

CLEO/USA2018座長 (2018).

Advanced Solid State Lasers: Sources プログラム委員 (2018–).（野村雄高）

レーザー学会学術講演会第 39回年次大会プログラム委員 (2018–).

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 (2017–2018).

B-8) 大学での講義，客員

Vienna University of Technology (Vienna), “Development and application of sub-cycle MIR source generated through filamentation,” March 6th, 2018.

総合研究大学院大学物理科学研究科,「光物理」, 2018年 7月 1日–9月 30日.

総合研究大学院大学物理科学研究科, テーマ型レクチャー「先端レーザー基礎演習」, 2018年 9月 11日–13日.

National Chiao Tung University (Hsingchu), “Sub-cycle mid-infrared source based on laser filamentation,” October 4th, 2018.

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の極端紫外光源の開発およびその応用」, 野村雄高 (2010年).

豊秋奨学会海外渡航旅費助成,「153 nm におけるコヒーレントな高繰り返し準連続光源」, 野村雄高 (2011年).

光科学技術研究振興財団研究助成,「ツリウム添加ファイバーによるフェムト秒レーザーの開発」, 野村雄高 (2012年–2013年).

科研費若手研究(B),「中赤外領域における高繰り返しフェムト秒パルス光源の開発」, 野村雄高 (2013年–2014年).

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

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

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

天田財団一般研究開発助成,「高出力 2μm 超短パルスレーザー光源の開発」, 野村雄高 (2015年–2017年).

科学技術振興機構さきがけ研究「生命機能メカニズム解明のための光操作技術」領域,「長波長レーザーによる超深部顕微分光システムの開発」, 野村雄高 (2016年–2019年).

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, 固体結晶を用いて可能であることを示した。このことより, 比較的, 強度の低いパルスについても, パルス評価が行えることを示した。ファイバーレーザーの開発では, 本研究室で開発された光源を実際に３光子顕微鏡に応用できることを示した。また, ファイバーレーザー出力を, 固体レーザーを基本とした増幅システムで増幅し, 高強度パルスを得ることができた。今後, 高強度赤外光パルス発生や, 多光子顕微鏡など, 様々な分野へ応用することを考えている。

6-8　特別研究部門

藤　田　　誠（卓越教授）（2018 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：錯体化学，有機化学

A-2) 研究課題：

a) 遷移金属を活用した巨大中空構造の自己集合構築

b) 自己集合ナノ空間における新機能創出

c) 細孔性高分子錯体の自己集合構築と空間機能創出

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) M_nL_{2n} 型拡張 Goldberg 多面体が $Q = h^2 + k^2$（h，k は負でない整数）を満たす系列で存在することを明らかにし，Q = 5（$M_{30}L_{60}$），Q = 8（$M_{48}L_{96}$）を理論予測に基づき自己集合構築した。

b) 自己集合構築した巨大中空ケージ内にタンパクを包接した。包接されたタンパクは高い安定性を示し，高温条件や有機溶媒中でもフォールディングが崩れなかった。また，一度有機溶媒中でフォールディングが崩れたタンパクも，水性条件に戻すことでリーフォールディングが観測された（シャペロニン効果）。

c) 結晶スポンジ法により，約 30 件の天然化合物について，絶対配置を含む構造決定に成功した。また，天然物の抽出混合物から，結晶スポンジ法を用いて親和性スクリーニングを行う手法を確立し，超速の天然物ライブラリ構築を可能にした。

B-1) 学術論文

T. MURASE, C. MATSUDA, K. ADACHI, T. SAWADA and M. FUJITA, “Triple Photochemical Domino Reaction of a Tetrafluorostilbene Terminating in Double Fluorine Atom Transfer,” *Commun. Chem.* **1**, 97 (6 pages) (2018). doi:10.1038/s42004-018-0099-7

T. MITSUHASHI, T. KIKUCHI, S. HOSHINO, M. OZEKI, T. AWAKAWA, S.-P. SHI, M. FUJITA and I. ABE, “Crystalline Sponge Method Enabled the Investigation of a Prenyltransferase-terpene Synthase Chimeric Enzyme, Whose Product Exhibits Broadened NMR Signals,” *Org. Lett.* **20**, 5606–5609 (2018). doi:10.1021/acs.orglett.8b02284

M. IWANE, T. TADA, T. OSUGA, T. MURASE, M. FUJITA, T. NISHINO, M. KIGUCHI and S. FUJII, “Controlling Stacking Order and Charge Transport in Π-Stacks of Aromatic Molecules Based on Surface Assembl,” *Chem. Commun.* **54**, 12443–12446 (2018). doi:10.1039/C8CC06430J

M. YAMAGAMI, T. SAWADA and M. FUJITA, “Synthetic β-Barrel by Metal-Induced Folding and Assembly,” *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 8644–8647 (2018). doi:10.1021/jacs.8b04284

S. S. GOH, S. GUDUGUNTLA, T. KIKUCHI, M. LUTZ, E. OTTEN, M. FUJITA and B. FERINGA, “Desymmetrization of *meso*-Dibromocycloalkenes through Copper(I)- Catalyzed Asymmetric Allylic Substitution with Organolithium Reagents,” *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 7052–7055 (2018). doi:10.1021/jacs.8b02992

K. KAI, M. SOGAME, F. SAKURAI, N. NASU and M. FUJITA, "Collimonins A–D, Unstable Polyynes with Antifungal or Pigmentation Activities from the Fungus-Feeding Bacterium *Collimonas fungivorans* Ter331," *Org. Lett.* **20**, 3536–3540 (2018). doi:10.1021/acs.orglett.8b01311

S. S. GOH, P. A. CHAMPAGNE, S. GUDUGUNTLA, T. KIKUCHI, M. FUJITA, K. N. HOUK and B. L. FERINGA, "Stereospecific Ring Contraction of Bromocycloheptenes through Dyotropic Rearrangements via Nonclassical Carbocation–Anion Pairs," *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 4986–4990 (2018). doi:10.1021/jacs.8b00821

M. UESAKA, Y. SAITO, S. YOSHIOKA, Y. DOMOTO, M. FUJITA and Y. INOKUMA, "Oligoacetylacetones as Shapable Carbon Chains and Their Transformation to Oligoimines for Construction of Metal–Organic Architectures," *Commun. Chem.* **1**, 23 (7 pages) (2018). doi:10.1038/s42004-018-0021-3

Y. TAMURA, H. TAKEZAWA, Y. DOMOTO and M. FUJITA, "Microgram-Scale X-Ray Structure Analysis of Small Molecules via High-throughput Co-Crystallization," *Chem. Lett*. **47**, 617–619 (2018). doi:10.1246/cl.180082

N. WADA, R. KERSTEN, T. IWAI, S. LEE, F. SAKURAI, T. KIKUCHI, D. FUJITA, M. FUJITA and J.-K. WENG, "Crystalline Sponge-Based Structural Analysis of Crude Natural Product," *Angew. Chem., Int. Ed.* **57**, 3671–3675 (2018). doi:10.1002/anie.201713219

B-4) 招待講演

藤田　誠,「結晶スポンジ法：有機合成，天然物化学，創薬研究への応用」, 第 53回天然物化学談話会, 伏尾温泉不死王閣, 池田, 2018年 7月.

藤田　誠,「結晶スポンジ法：有機合成，天然物化学，創薬・食品研究への応用」, 日本プロセス化学会 2018 サマーシンポジウム, 東京, 2018年 7月.

藤田　誠,「化学と幾何学――多面体の定理を活用したものづくり――」, 2018年度大学学部研究会, TKP ガーデンシティ品川, 東京, 2018年 8月.

藤田　誠,「結晶スポンジ法による結晶構造解析の最新動向」, 興和株式会社東京創薬研究所, 東村山, 2018年 9月.

藤田　誠,「結晶スポンジ法とその創薬研究への応用」, 創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業平成 30年度 BINDS 公開シンポジウム, よみうり大手町ホール, 東京, 2018年 9月.

M. FUJTIA,"Self-assemlby of Archimedean/Non-Archimedean Solids under Mathematical," 第 18回日韓有機金属・錯体化学シンポジウム, 四日市商工会議所ホール, 四日市, 2018年 11月.

藤田　誠,「結晶スポンジ法：天然物化学，創薬研究への応用」, 平成 30年度後期（秋季）有機合成化学講習会, 日本薬学会長井記念館長井記念ホール, 東京, 2018年 11月.

藤田　誠,「結晶スポンジ法:天然物化学，創薬研究への応用」, 第 402回 CBI 学会講演会, 東京工業大学キャンパスイノベーションセンター（CIC 田町）1階国際会議室, 東京, 2019年 1月.

藤田　誠,「結晶スポンジ法：天然物化学，創薬研究への応用」, 日本薬学会第 139年会, 幕張メッセ, ホテルニューオータニ幕張, 千葉, 2019年 3月.

M. FUJITA, "The crystalline sponge method: Absolute structure determination and application to asymmetric and natural product studies," Univerisity of Edinburgh, Edinburgh (U.K.), April 2018.

M. FUJITA, "Self-assembly goes far beyond," The Grand Challenges in the Chemical Sciences, Jerusalem (Israel), June 2018.

M. FUJITA, “Addressing the Absolute Determination of Enantiopurity Using the Crystalline Sponge Method,” Chirality 2018, New Jersey (U.S.A.), June 2018.

M. FUJITA, “Coordination Self-Assembly: From the Origins to the Latest Advances,” ISNSC2018, Dresden (Germany), July 2018.

M. FUJITA, “Molecular Confinement Effects in Self-Assembled Cages for Catalyst Design,” ISHC XXI, Amsterdam (Nederland), July 2018.

M. FUJITA, “Crystalline Sponge Method for Synthetic and Natural Product Studies,” Curious 2018 Future Insight, Darmstadt (Germany), July 2018.

M. FUJITA, “Coordination Self-Assembly: From the Origins to the Latest Advances,” ACIN2018, Namur (Belgium), July 2018.

M. FUJITA, “Coordination self-assembly: From origins to the latest advances,” Crystalline sponge method: Applications to synthetic and natural product studies, Sovay (France), July 2018.

M. FUJITA, “Crystalline Sponge Method for Natural Product Studies,” GRC, Newry (U.S.A.), August 2018.

M. FUJITA, “Coordination Self-Assembly: From the Origins to the Latest Advances,” ISAMS2018, Shanghai (China), October 2018.

B-6) 受賞，表彰

藤田　誠, ウルフ賞化学部門 (2018).

藤田　誠, 千葉大学特別栄誉教授 (2018).

藤田　誠, 廈門大学Lujiaxi レクチャーシップ (2018).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本化学会論説委員 (2019–).

錯体化学会国際交流委員 (2013–).

錯体化学会理事 (2015–), 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), 事務局 (2006).

学会の組織委員等

第 43回錯体化学国際会議組織委員会（会期：2018年 7月 29日–8月 4日）副委員長 (2018).

学会誌編集委員

Chemical Science 誌, Editorial Board (2018–).

Acc. Chem. Soc. 誌, Editorial Board (2018–).

Bull. Chem. Soc. Jpn. 誌, Honorary Editorial Board (2018).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構 ACCEL 研究,「自己組織化技術に立脚した革新分子構造解析」, 藤田　誠 (2014年–2019年).

日本医療研究開発機構創薬基盤推進研究事業,「結晶スポンジ法を活用する超速天然物ライブラリ構築と活性スクリーニング」, 藤田　誠 (2018年–2023年).

C)　研究活動の課題と展望

新しい空間には新しい化学が宿る。我々のグループでは,この信念に基づき,従来の化学において「到達不可能であった空間」や「概念的に考えられていなかった空間」を構築し，その未踏の世界での新しい化学を探求する。具体的には，①配位結合駆動の自己集合により，前例のない>100成分，>100Å 径の巨大中空錯体を合成し，その空間での化学を開拓する。対象となる物質として，中空錯体に包接したタンパク分子を扱う。タンパク包接を基軸に，タンパクの安定化，機能の向上，改変,さらにはタンパク種類によらない結晶化手法の開発など，化学のみならず生化学から構造生物学にまで波及する研究を行う。②結晶内空間での溶液化学という視点の研究から生まれた「結晶化を必要としないX線結晶構造解析手法（結晶スポンジ法,以下CS 法）」を用いて，実現不可能であった化学を実現し新分野を創出する。とりわけ，ゲノム情報マイニング技術とスポンジ法を組み合わせ，合成生物学研究を大幅に加速し，合成化学と合成生物学を融合させた新しい合成のパラダイムを構築する。

6-9　安全衛生管理室

戸　村　正　章（助教）（2004 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：有機化学，構造有機化学，有機固体化学

A-2) 研究課題：

a) 弱い分子間相互作用による分子配列制御と機能性分子集合体の構築

b) 新しい機能性電子ドナーおよびアクセプター分子の開発

c) 分子研化学物質管理システムの構築とその運用管理

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 我々は，以前より，1,2,5- チアジアゾール環を含む化合物の結晶構造において，van der Waals 半径の和より短い分子間 S···N 相互作用による二量体や分子テープなど興味ある分子集合体構造を見出してきた。そこで今回，周辺部に硫黄および窒素原子を持ち水素原子を含まないという興味深い分子構造である [1,3] ジチオロ [4,5-c][1,2,5] チアジアゾール -5- チオンを合成し，その分子・結晶構造をＸ線結晶構造解析により決定した。その結果，分子はほぼ平面で，結晶構造中に数多くの短い分子間 S···S，S···N 相互作用を見出した。

b) 我々は先に，オキサジアゾール環を構成要素とする大環状四量体が超分子ナノチューブを形成することを *Nano Letters* 誌に報告した。ここ数年，この化合物における置換基効果を種々検討し続けており，分子集合体配列が置換基に大きく依存することをＸ線結晶構造解析により明らかにした。

c) 高等研究機関における総合的かつ安全適正な化学物質管理の必要性は増大している。分子研における化学物質の電子的一元管理を目的として，2014 年に化学物質管理システムが導入され，一貫してその運用に携わってきた。また，管理システムのデータを利用して有害物質等の使用・保管状況を迅速かつ効率的に把握，管理する手法も開発した。今年度からは基生研でも運用が開始され，適宜アドバイスを行っている。

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本化学会コンピューター統括委員会CSJ-Web 統括的管理運営委員会委員 (2001–2002).

日本化学会広報委員会ホームページ管理委員会委員 (2003–2012).

田　中　彰　治（助教）（1989 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：非ベンゼン系芳香族化学，分子スケールエレクトロニクス

A-2) 研究課題：

a) 量子効果素子回路の単一分子内集積化法の開拓

b) 単一分子架橋系の電荷輸送特性の解明と制御法の開拓

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 本課題の標的は，**SoM**（**System-on-a-Molecule**），即ち「強固な共有結合による，量子効果素子回路の単一分子骨格内への集積化」である。その実現を目指し，当研究室では電子活性なヘテロ５員環を主骨格材として「単電荷素子の基本エレメント群を単一分子内に集積化するプロセス」を種々確立してきた。しかし得られた多端子型分子の基板表面上での構造を STM 法により解析した結果（横浜市大・横山 G），五員環ベースの系では直鎖構造が剛性不足なため，機能発現のための最適構造を自律的には取れないという弱点が判明した。この問題を解決するため，**剛直な外骨格分子**を構築し，そこに５員環ベースの多端子型分子群を組み込むことで，その形状最適化と相対位置の精密制御を行う戦術を立案した。昨年度，剛直性外骨格の構築用として，嵩高いブロック型置換基（分子鎖間会合を阻害し，可溶性を強化）を導入したオリゴフェニレンエチニレン系コア分子ユニット（0.3–1nm 長）を新規開発した。今年度は，この分子シリーズのサイズ拡張を試みたが，分子鎖長が増大するに従い，接合反応の副生物（末端アルキン二量体）の分離が困難となる問題に直面した。対策を検討した結果，各種シリル系保護基を活用したクロマト - フェーズラベリング法が副生物の効率的分離に有効であることを見いだし，1–10nm 長級の剛直性分子ブロック群の逐次精密合成を可能とした。今後，これらを原料とし 100nm 長クラスの巨大分子ブロック群の合成を行う。

b) 本課題では，**巨大分子系における電荷輸送特性の解明と制御法の確立**を目指す。大型分子鎖の立体配座と単一分子伝導度との相関を明らかにするため，阪大産研・家 G で開発された「**共平面型**／被覆オリゴチオフェン」と，当研究室の「**非共平面型**／被覆オリゴチオフェン」の単一分子伝導度を同一条件で比較検討した（阪大･孚田 G，家 G）。結果，トンネル伝導が主となる短鎖長領域（1–5 nm）では**非共平面型**が，ホッピング伝導が主となる長鎖長領域（5–10 nm）では**共平面型**がより高い伝導性を示すことが分った。即ち，低分子系（1 nm 以下）において「共平面性が良好なパイ共役鎖ほど高い単一分子伝導度を示す」ことは実験的に確認されているが，この指針だけでは，1–10nm 長クラスの大型パイ共役鎖の伝導特性を予想できないことになる。現在，この現象の要因を検討中であり，論文誌のレビューアーとも意見を戦わしているところである。

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

分子物質開発研究センター特別シンポジウム「分子スケールエレクトロニクスにおける新規分子物質開発」主催 (1998).

応用物理学会・日本化学会合同シンポジウム「21 世紀の分子エレクトロニクス研究の展望と課題――分子設計・合成・デバイスからコンピュータへ――」日本化学会側準備・運営担当 (2000).

第 12 回日本 MRS 学術シンポジウム：セッション H「単一電子デバイス・マテリアルの開発最前線～分子系・ナノ固体系の単一電子デバイス～」共同チェア (2000).

First International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics 組織委員 (2001).

第 9回分子アーキテクトニクス研究会プログラム委員 (2018).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究 (C),「単一分子内多重トンネル接合系の精密構築法の開拓」, 田中彰治 (2007年–2008年).

科研費基盤研究 (B),「単電子／正孔トンネルデバイス回路の単一分子内集積化のための分子開発」, 田中彰治 (2010年–2012年).

科研費新学術領域,「分子アーキテクトニクス：単一分子の組織化と新機能創成」（代表：夛田博一), 田中彰治（研究分担者）(2013年–2017年).

科研費基盤研究 (C),「量子構造を持つ分子ワイヤの単一分子伝導計測」, 田中彰治（研究分担者）(2017年–2019年).

7．点検評価と課題

2017年度より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。

2018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11月にはヴュルツブルク大学のEberhard Umbach名誉教授により，光分子科学研究領域，UVSOR施設，および昨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。

（川合眞紀）

7-1　外国人運営顧問による点検評価

7-1-1　Eberhard Umbach 外国人運営顧問

Report on the second visit to the Institute for Molecular Science (IMS), Okazaki

10 November – 16 November, 2018

The second visit was dedicated to get further insight into the IMS and its research fields, to review in more detail the Departments of Materials Molecular Science and of Theoretical and Computational Molecular Science, and to give advice on the strategical development, in particular the development of large facilities, research directions, co-operations, internal cross-linkings, *etc*.

General impression:

The overall impression of the IMS was again excellent. The remarks of the previous (first) report are of course still valid, especially those about the highly motivated and successful principal investigators, which are relatively young on average, the very interesting and versatile mix of topical research fields, the relatively low number, but high quality of publications, and the relatively small number of graduate students. The present report will focus on strategical aspects.

Large facilities (especially UVSOR Synchrotron Facility):

The justification for the existence of a national institute as compared to research institutes at universities is usually either a research field of national importance (like energy or cancer research) or large-scale science. “Large-scale” means: Large research instruments (like observatories or synchrotron sources), research on long time scales, and research requiring extensive infrastructure, for instance very well equipped laboratories and specialized technical personnel; this all requires relatively large budgets. The mentioned aspects can make national institutes unique and should position them outside direct competition with university groups. For IMS the major justification could be large-scales, apart from the necessity to do internationally highly visible and qualitatively outstanding research in various fields (of molecular science).

Against this background it is strategically important to have, *e.g.*, a Center for Mesoscopic Sciences, a Research Center of Integrative Molecular Systems, or the newly established Exploratory Research Center on Life and Living Systems, ExCELLS. The strategic advantage of such structures is the bundling and focusing of research efforts on selected fields of topical interest by close co-operation across departments within IMS and with best fitting partners outside the institute. In this way, a critical mass can much faster be achieved, research funding can easier be acquired, recruiting of top personnel is facilitated, and national or international visibility are much better obtainable (provided some corporate identity rules are followed).

Strategically even more important is the existence of one or a few large research machine like UVSOR, which not only serves as specialized experimental source for several research groups within IMS but also provides unique research opportunities for users from outside, especially from universities. The challenge, however, is to cope with relatively high costs, for investments as well as for operation. The challenge becomes the larger the older the facility. In such a situation is UVSOR at present, although it is all together in a very good shape and highly successful in operation. A discussion and decision about the different options for the future appears nevertheless appropriate.

There are essentially three main options: a) keep it running with some improvements until its time is up and the repair times and costs make a further operation uneconomic. This could continue for 10–15, perhaps even for 15–20 years ("keep-going" option). b) Plan to shut it down after a fixed period (*e.g.* 10 years) and invest only the absolute necessary repairs and replacements ("phase-out" option). c) Consider a major upgrade for the future which could mean a new, dedicated building, a new storage ring, with new injection system suited for top-up mode, new insertion devices and refurbished end-stations. This would require a lot of money and some time ("boost" option).

Some comparing remarks:

Option b) allows planning of new activities, to set up a new strategic development, to introduce major changes to IMS, and to strengthen selected fashionable fields. However, the existing research with focus on synchrotron radiation (SR)-based methods would then be discouraged; several of the respective group leaders are relatively young and would lose their main methods and hence their motivation. Moreover, such a decision would contradict some recent new employments of group leaders; it should in any case be made before a successor of Prof. Katoh is going to be searched.

Option c) is a difficult decision that cannot be made immediately because it requires some "homework" to be done before. First, a new SR source needs a "scientific case," *i.e.* a clear concept which science should be made possible, which scientific user communities can be addressed, where it would positioned within the Japanese (and worldwide) SR landscape, which parameters are hence required, and which financial and other resources might be needed. This first exploratory phase would probably last more than a year. The most important point would be a strongly committed, clearly defined user community inside and particularly outside IMS. Secondly, additional money would be needed. For this, the new concept has to be discussed with the decisive authorities, and these must be convinced that this option deserves the extra-money needed. This option would also require a different hiring strategy and long term planning of IMS.

Option a) is the least risky, "continue as is" strategy which does not require major activities now and can be adjusted according to the general development, the upcoming wishes and needs, and the amount of available money.

Further comparisons: Option a) leaves sufficient room for future major strategic changes, while option c) might result in a (major) strategic decision for a new SR source (which leaves nearly no room for other (large) decisions) and option b) would most likely require a new strategic development of IMS. Since an institute like IMS should have some large-scale projects that should not be done by universities it is recommended in case of option b) (and perhaps a) to think about such projects (*e.g.* electron microscopy center with highest resolution and/or cryo-options and/or high throughput; or NMR center for different applications with highest resolution (very high field); or Free Electron Laser; *etc.*). It is further recommended, to base the decision also on the needs of the various other communities within IMS (*e.g.* biology, complex chemistry, material science) and on the wishes of the surrounding universities, institutes, and perhaps even industrial labs. Moreover, if option b) is chosen it should be kept in mind that a severe switch of strategy changes the national and international standing and reputation of IMS with the risk that the existing reputation in the field of SR research gets lost much faster than the international reputation in a new field can be established. In any case, the decision is not easy because it strongly determines the future of IMS and puts much tension on people and resources.

Department of Materials Molecular Science:

Prof. Yokoyama briefly introduced his colleagues in this department and their work (one slide each). Then, he himself as well as Profs. Hiramoto and Kobayashi gave more detailed insight in their research fields and recent results.

The groups of this department cover a wide field of molecular materials research, ranging from the synthesis of molecules with tailored properties (Suzuki), over the tuning of organic semiconductors by targeted and well-controlled doping (Hiramoto) to the development of novel electrochemical devices with solid, H-conducting electrolytes (Kobayashi). Much work is dedicated to the characterization of molecular materials and interfaces under operational conditions, *e.g.* with ambient pressure x-ray photoelectron spectroscopy (Yokoyama) or with sum-frequency generation spectroscopy (Sugimoto), the study of functional molecular materials with various magnetic resonance techniques (Nakamura), the structural and functional characterization of complex molecular assemblies by solid-state NMR (Nishimura), and the detailed, *e.g.* band-structure, study of unconventional properties (superconductivity, Mott-insulator) of organic electronic materials (Yamamoto). The more detailed presentations by Profs. Yokoyama, Hiramoto, and Kobayashi were impressive, because they demonstrated sophisticated approaches under extreme conditions (high pressure, very low doping levels) or with careful analysis of structural information in combination with transport measurements (Kobayashi).

The performance (results, publications) of some of the group leaders appeared to be very good, but there seemed to be nearly no overlap and co-operation between the various groups within the department and with groups in other departments.

Department of Theoretical and Computational Molecular Science:

Prof. Saito carefully introduced this department, his colleagues and their work with about three slides from each group. Then Profs. Ehara, Fujita, and Ishizaki presented their research and discussed recent results in more detail.

These presentations gave the impression of a young, dynamic, and coherent department, working at the forefront of research in well-defined fields. The grouping in three subfields is convincing, at least the distinction between electronic structure and dynamics is obvious and very meaningful (the distinction between quantum and molecular dynamics became less clear).

The investigations of the *electronic structure* cover a variety of important and topical fields, for instance catalysis with very interesting alloy effects in bimetallic nanoclusters and the influence of site effects on selected chemical reactions, or the work on the influences of solvent effects or high pressure on optically excited molecular states, or the quantitative description of chiro-optical spectroscopy by a detailed analysis of the various contributions (Ehara group), or for example the study of exciton quantum dynamics in organic thin films or the calculations of excited states at organic/organic interfaces with long range effects (Fujita).

The investigations of *dynamical properties* in complex systems elucidate the interrelation of structure, dynamics, and function, an important field in particular for biological systems and life science. Topical questions like the heterogeneous dynamics in enzymatic reactions, reactions and fluctuations at single-molecular level and their influence on macroscopic properties, the rhythm mechanism of a clock protein, or the anomalous properties of water are addressed by the Saito group. The Okazaki group concentrates on the question how biomolecular machines work using computational methods; such questions comprise the operation principles of motor

and transport proteins. The Okumura group investigates, for example, the mechanism of the formation of amyloid fibrils by molecular dynamics simulations which may be important to understand the origin of some diseases. And finally the Ishizaki group addresses the fundamental question how to describe best by theoretical methods the chemical dynamics of condensed phases in order to understand, for instance, the energy and charge transport in biological or materials systems, the dynamic fluctuations induced by protein dynamics, the rate of photosynthetic energy transfer including the primary charge separation process, the influence and description of the numerous vibrational modes in complex systems, and the important role of dephasing. Of course, such descriptions can also be used to analyze the charge separation (and recombination) processes in organic photovoltaics.

This department appears rather homogeneous, and there is apparently very good co-operation with other groups, especially with groups in the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science and with groups in Japan and other countries. It remained unclear whether there is any co-operation with groups in the other (experimental) departments of IMS although there seems to be some overlap (*e.g.* excitons or transport). Moreover, many of the other experimental groups could much profit from in-house theory which complements (some of) their research fields such that more fruitful collaboration within IMS would be possible. Future recruitment could take care of this aspect.

Other Departments and Activities:

This visit concentrated on the two above-discussed departments. However, two overview presentations on the Department of Photo-Molecular Science and on the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science completed the overview of IMS. Especially the introduction by Prof. Iino gave a very clear and comprehensive insight into the activities of the latter department because he presented not only his work in some detail but also high-lighted the work of his colleagues such that a very interesting and coherent picture of this department emerged.

In addition, Prof. Ohmori gave new information about recent results from the groups of the Department of Photo-Molecular Science, especially exiting news from his own research. Prof. Kera discussed his thoughts about the future development of UVSOR, and Dr. Matsui gave an impressive overview on his former achievements which are planned to result in the development of a next generation momentum microscope for UVSOR. This could nicely complement the instrumentation at this synchrotron source utilizing the specific properties of UVSOR and making it more competitive on international scales.

Right at the beginning of the visit, the new activity ExCELLS which was already mentioned above was introduced by Prof. Kato. He could impressively demonstrate which fields will be addressed by this new center and how cross-institutional co-operation will be utilized to tackle topical questions in life science. This center addresses the central question of what is the basis of life, for example how structure, dynamics, and function interdepend, how molecular self-assembly and dynamic processes create function, and how selected (bio)molecular systems actually operate. The foundation of ExCELLS and the integration of various research groups from different institutes will certainly enhance interdisciplinary and inter-institutional co-operation, may result in better access to new research projects including additional research money, could enable experiments under extreme conditions (deep water, outer space), and should considerably increase the national and international visibility.

Co-operation:

The internal co-operation is partly excellent, partly fine and partly lacking. Excellent is, for example, the cooperation between many groups of the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science and the Department of Theoretical and Computational Molecular Science, as mentioned above. On the other side of the spectrum is the (non-existing) cooperation between some groups within the Departments of Photo-Molecular Science and Materials Molecular Science and between these and other groups of IMS. Of course, in an institute of the versatility of IMS many groups do not have sufficient overlap with each other and hence have no common denominator for co-operation. However, some more collaborative activities in particular between the non-bio groups could create added value and more visibility from outside.

Co-operation of IMS groups with groups outside IMS is partly very good and partly hardly existing. Some groups have intensive contacts with other groups in Japan, they also preferentially cite groups in Japan, and they orient themselves along the developments within Japan. Although this is very well understandable because Japan is the most important "market" for them, more contacts on international scales would be highly desirable because the international science scene finally sets the milestones and success measures. And of course a national institute like IMS should be highly visible on international scales. It is clear that this impression is not valid for all groups, because some have excellent international relations and co-operations and hence contribute to the mentioned, very good international standing of IMS. But for other groups there is considerable room for improvement.

Some further structural aspects:

The (honorable) departure of two group leaders from the Center for Mesoscopic Sciences as well as the two vacancies within the Department of Theoretical and Computational Molecular Science allow some re-structuring. While the latter vacancies could be used to enable more co-operation between theory and experiment in other fields than those which already co-operate (see above), the former could be taken as chance to develop a new concept for Laser research. Perhaps this chance could also be used to restructure the rather heterogeneous Department of Photo-Molecular Science and the Center for Mesoscopic Sciences. Of course, depending on the decision on the future of UVSOR (see above) more overlap between synchrotron research and other fields of research within IMS could be generated by proper selection of new research groups. Also a strengthening of the (presently reduced) Laser activities perhaps in connection with mesoscopic or nanoscopic science would make sense. Moreover, for new recruitments two more aspects should be seriously considered: To increase the number of female principal investigators and to hire persons from other countries to make IMS more international.

Conclusion:

IMS is an excellent research institute with a convincing national mission and very good international visibility in several fields; it has a valuable infrastructure and a high research performance. Also the second visit was very interesting and enjoyable, due to the high professionality and great hospitality of IMS members.

Eberhard Umbach

Former President, Karlsruhe Institute of Technology, Germany,

Professor Emeritus in Physics, University of Wuerzburg

Theilheim, December 14th, 2018

8．研究施設等の現状と将来計画

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，施設の充実は研究職員が流動していくシステムそのものを支援することになる。従って，施設の継続的な運営が重要である。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。メゾスコピック計測研究センター（2017年4月発足。分子制御レーザー開発研究センターを改組）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。

自然科学研究機構直属の組織「生命創成探究センター」は，2018年4月に発足した。岡崎3機関の共通研究施設として2000年に設置された岡崎統合バイオサイエンスセンターの成果をさらに発展させるべく，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活動を展開している。

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。本年度は特別研究部門に藤田 誠卓越教授（東大工教授）を迎え，錯体化学のフロンティア研究を推進いただいた。また，産学連携の強化がさけばれる中，分子科学研究所に社会連携研究部門を設置し，産官学の連携を活性化する試みを開始する。本年度は社会連携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担当教員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）

8-1-1　はじめに

UVSOR 施設は 1983 年 11 月 10 日に「初点」を発してから 35 年が経過した。その間，2003 年度の第一期高度化（低エミッタンス化，直線部増強 4 → 8 か所），2012 年度の第二期高度化（TOPUP 運転，挿入光源追加，エミッタンス 27 → 17 nm rad）を実施した。2 度の光源加速器高度化に成功したことにより，1 GeV 以下の低エネルギー放射光施設としては，世界最高性能を達成し（電子ビーム低エミッタンス），真空紫外光から軟Ｘ線領域をカバーする国際競争力をもつ放射光施設として運用している。世界的に見て技術革新の折に新施設が建設されていくことが常であるが，当時のいわゆる第二世代の面影を残している施設は唯一無二と言える。現在，ビームラインは 14 本が稼働しており，海外からの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ービームライン 6 本を中心に実験設備の重点整備を進めている。特に真空紫外分光，光電子分光，軟Ｘ線吸収分光は世界的競争力がある。今後は国際利用率の増加が求められる（昨年度実績：年間 220 件申請，のべ 1,300 名弱来所のうち，国際利用約 9% @ 先端アンジュレータライン，60 名強）。

国内に第三世代放射光施設が SPring-8 のみであり，分子研ではその一旦を担う可能性を長期にわたり検討してきた。当時の計画（分子研リポート 2006 ～ 2012）として挙がっていたものは，① 1.5–2.5GeV 級新第三世代リング，② 1GeV 級超高輝度リング，③ライナックによる軟Ｘ線自由電子レーザー，④小型エネルギー回収型ライナック，であった。2012 年度の高度化以降，これら大型計画は日の目を見ず，2018 年度になり，国内の第三世代施設計画（3 GeV 東北計画）が具現化し，分子研における既存施設の更なる高度化や新施設の建設案は非現実的となった。約 20 年後の分野展望を想像するのは難しいが，その時の UVSOR 施設の姿と国内（＋アジア）における位置づけを真摯にかつ可及的速やかに議論していく必要がある。

本報告書は，UVSOR 施設運営委員会（2018 年 7 月，2019 年 2 月），UVSOR 将来検討ワーキング（2018 年 10 月以降逐次），UVSOR 利用者懇談会（2018 年 11 月）における意見交換を元に改訂してきたものである。また外国人運営顧問により意見聴取も行われている（分子研リポート 2016，2017，2018 参照）。本施設における中長期計画の概要を以下にまとめる。

【現状】

・真空紫外光から軟Ｘ線領域をカバーする世界的競争力をもつ放射光施設として運用（先端アンジュレータラインと汎用偏向電磁石ラインの共存による大学共同利用機関としての共同研究推進）

【課題】

・世界的競争力維持のための先端実験機器の開発と利用者分野の拡張
・光源加速器の老朽化により現状性能の維持と安定供給に懸念
・技術職員の世代交代ができず中期的 10 年後の施設運営に懸念

【計画】

・主任研究員を軸として「運動量分解光電子顕微鏡」を導入し 5 年を目処に開発し，国際的に先端性のある共同利用展開
・加速器オーバーホールとシステム自動化による機能強化
・新光源機能の探査とそれを利用した評価法開発による機能強化

・ケミカルマシンとしての利用拡大のため炭素汚染対策による機能強化

・主任研究員，技術職員等の雇用と育成（人材交流，待遇改善）による機能強化

8-1-2　施設の現状と今後の計画

(1)　光源加速器

２度の高度化に成功し世界トップクラスの高い輝度（17 nm rad, 真空紫外領域まで回折限界光源）と完全トップアップ運転（60 時間／週。ただし, 木曜夜間の 12 時間中にトラブルがあっても補償しない）で安定した運転を行っている。しかし光源加速器関連は基本となる設備構成が古く，多くが老朽化した状態である。2017 年から偏向電磁石の冷却水系統の漏水問題が発生しはじめている。同様な経年劣化による各機器の故障に随時対応している状況であるが，先端実験機器に安定した光源を供給し，国際的な共同利用環境を維持するためには，こうした光源加速器の老朽化設備全体の更新，抜本的なオーバーホールも検討すべき段階に来ていると言える。老朽化した既存の電磁石設備を更新するためには約１～２億円の費用が掛かる。現状の運転状況に合致した効果的な改修方法を検討している。また線形加速器の更新によっては，光源性能のパラメータ調整範囲に自由度が生まれ「多彩な光源（輝度，パルス形状，ビーム形状，その自在化・安定化）」を一層発展させる余地が生まれるが，更新には約 10 億円の費用が掛かるため昨今の経済状況と国策方針では現実的ではない。国内やアジア隣国の次世代コヒーレント放射光施設の動向に大きく左右されるだろうが，高強度パルスレーザーを用いた新型加速器などの次世代技術の開発動向に留意したい。基本的に UVSOR-III 加速器は技術的な成熟期を迎えつつあるため，逐次，トラブルや老朽化対応をしつつ，システムの自動化等による加速器の安定運転技術の確立も検討する。

国内やアジア隣国の他施設の動向や次世代光源の台頭（第 3.5 世代，自由電子レーザー光源，卓上レーザー光源）により, 連携, 共生, 競合といったベクトルが散逸し, 施設の将来計画には大きな検討課題が立ちはだかる。多くのユーザーにとっては次期東北計画にあるような空間コヒーレンスや超高輝度（超低エミッタンス）に特化した施設による“美しい先端光源”が必ずしもベストとは限らない。第三世代施設の創始期がそうであったように，分野によっては高輝度特性が仇となり，使い熟すまでに長い年月を要した事実もある。一方，卓上レーザー光源の汎用化による研究舞台の台頭が急速で，放射光施設の在り方を問う意見もあるが，まだ VUV 帯でさえ波長可変性は乏しく，光源として放射光を置き換えるものでは無いだろう。一部の計測・評価分野においてユーザーの移動は想定されるが，本計画期間に技術革新があったとしても，共存時代がしばらく続いたうえで，棲み分けが進むであろう。それでも本施設のような低エネルギー加速器施設は紫外光領域でレーザー光源との協奏実験が発展していくことも予想できる。光源を相補的・融合的に使い熟す時代を想定した研究開発を継続することが望まれる。

トップダウン型で科学技術イノベーションを志向する SPring-8II や東北放射光施設，あるいは自由電子レーザー光源やアト秒レーザー光源などの次世代光源施設だけで，全ての学術研究のニーズを網羅することはできない。今，光源加速器性能として完成域にある UVSOR が目指すところは，放射光施設の成熟した姿としての「安定した使い易い環境」の提供であり,「ケミカルマシン」としての利用展開を意識した，新たな分野開拓に繋がる研究支援であるといえる。分子研を基軸とした UVSOR 施設の特徴であるケミカルマシンへの適合性を見定めた光源特性（輝度制御・時間ドメイン自由度の開発）などの R&D と若手人材の育成は継続していく必要がある。

一方で UVSOR の回折限界光源性能を有効に活用した新奇な光機能の開発は極めて独創的である。より大型の放射光施設では機動性に乏しくこのような光源研究推進は容易ではないだろう。BL1U を活用した光渦やベクトルビームなど新光源探査やその応用技術開発は UVSOR 施設のユニークな特徴（小型・高性能）を効果的に活用した研究と捉えている。

(2) ビームライン設備：分光器

光輸送系（分光器）の陳腐化と経年劣化による性能低下も先端研究環境を維持する上での重要な検討因子である。特に UVSOR は「ケミカルマシン」として顕著な業績を上げてきたが，軽元素化合物，特に有機材料等の詳細な知見を得るためには，分光器の炭素汚染は極めて深刻な問題である。依然として多くの放射光施設は化学系視点の研究が少なく，ともすると炭素汚染は先送りの問題となりがちであるが，UVSOR では BL3U の汚染対策実績があり，積極的な対応ができている。予算の重点化により，他５つのアンジュレータラインにおいても同様の汚染対策を施した光学素子に置換していく計画が望ましい。一方で，硬Ｘ線領域では，構造生物学など顕著なコミュニティの広がりは見せているものの，特に物性や機能を議論するために極めて有効な波長帯（VUV ～ SX）をもつ UVSOR において，潜在的なユーザーを広範に上手く取り込めているとはいえない。本質的に汎用化が難しい波長帯であるという問題は残るが，中長期的にユーザーコミュニティのすそ野を拡張し，新たな学術分野を切り開いていくためにも，多種多様なユーザー（研究課題）に対応できる環境を実験設備と合わせて維持していくことが重要である。現在，分子研のネットワークを活用して未開拓である化学系のユーザーを招聘し，新たな利用展開が始まっている。今後，他施設の展開に留意しつつ，人事政策を含めて UVSOR の独自性とその方向性を見定めていく必要がある。

今後 10 年は，先端アンジュレータラインの重点化により，国際的な厳しい競争下にある先端実験ラインを提供し，大学共同利用機関として世界トップレベルの研究を支援する。同時に，汎用性の高い実験は偏向電磁石ラインで安定した実験環境を提供し，地方大学等の学生教育にも貢献するなどして，共同利用機関としてバランスのとれた支援を継続する。

更にその先 10 年後は，後述のスタッフ育成問題とも密接であるが，国内他施設やアジア諸国の動向によっては取捨選択による重点化も検討しておくべきであろう。例えばアンジュレータの更新による波長帯の拡張やスイッチング偏向操作が検討できる。また国策転換による基礎学術分野の充実支援により大型予算が措置されるようになれば，汎用ラインを縮小し，先端アンジュレータ６本をタンデム運用することを検討する。これは大規模改造になるが国際的には放射光施設の標準的機能である。現在 12 時間の運転から 24 時間運転へ移行し，昼夜で実験装置を切り替え，２交代制で先端実験環境を提供することも可能であろう。この場合，運転時間の倍増によるシステムトラブル増が懸念されるため，加速器のオーバーホールが必須の前提条件である。さらに現在の運転スタッフ人員では全く労力不足であるので，組織体制の抜本的な改革による対応が必要となる。一方で，後述の新規分野開拓の是非によっては，ポスト UVSOR 施設の存在意義が問われるであろう。11 施設を抱えることになる日本放射光学会にて国内放射光施設のグランドデザインを検討する議論が開始されたが，同時に所内においても今後 20 ～ 50 年後の施設の在り方の議論を開始した。

(3) ビームライン設備：実験機器とユーザー利用

2018 年度は６本のアンジュレータ（U）ビームラインにより，世界最高レベルの極端紫外光を提供している。この他，偏向電磁石（B）ビームラインからの放射光を用いた汎用の分光研究が定常的に実施されている。近年 UVSOR では U ラインの高度化を進めており，申請週数はのべ約 370 週である（H29 年度採択率：B ライン 97%，U ライン 71%）。また国際的な発信力の強化のために海外ユーザーの取り込みを推進している（H29 年度海外利用率：U ライン 9%）。またいくつかの偏向電磁石のビームラインもユーザーからの要望を受け各装置の高度化を順次計画・実行中である。

幸いにして中期レベルで施設運営費予算を運用することで，自助努力による設備投資が可能で，定期的にエンドス

テーション（実験設備）について，先端技術の開発動向に留意し，重点的に整備していくことが中期戦略となる。世界的な研究動向を把握しつつ，世界を先導する高度な装置で成果を上げていく体制を強化することが不可欠である。そのため研究職員として新たに主任研究員を制度化し，2018年度に1名（電子光学分野）を採用した。最近の動向として，光源の高輝度化に伴い世界的には顕微イメージング技術に注目が集まっており，2016年度からUVSORでは「運動量分解光電子顕微鏡：momentum microscope」を導入する計画を進めている。基本ユニットは2019年度冬頃に導入され，BL6Uにて調整を経たのちに協力研究によるR&Dを推進する（2019～2023年）。また国際的な先駆性を勝ち取るために新規技術の開発を進め，直入射偏向可変光電子イメージング実験によるR&Dを検討する（光源としては卓上レーザー光あるいはBL7Uのブランチ化を想定する。早ければ2020年度に20%程度のBL7U専有を想定）。本設備は二段階計画であり，分光器最適化の後，最終形態は運動量分解光電子顕微鏡に2次元スピン分解機能を付加した装置として，唯一無二の先端実験装置にする計画である（後期計画は最短で2023年以降に開始）。電子状態測定の代表機器である光電子分光装置は約20年毎に大きな技術革新が起こっているが，今まさに情報の次元アップという劇的な変革期を迎えている。実験情報の多次元化により，研究者の脳は全く異なる視点で刺激され，実験方法論そのもののパラダイムシフトが起こるであろう。こうした装置の存在により，海外からも一線級の研究者が来所し高インパクト成果を発信するようになれば，国内ユーザーの意識改革にもつながるであろう。

こうした実験設備が先端である期間は10年程度であるため，課題としては，予算確保により順次，計画的にエンドステーションをUVSORの光源特性を活かせるものに更新していくことが不可欠である。本R&D以後の次計画はユーザーの動向に留意し，小規模施設の機敏さを有効に活用し，その都度，スピーディな決断と共に逐次対応すべきである。先に述べたようにUVSORは独特な「ケミカルマシン」として顕著な業績を上げてきたが，それでも現時点で化学系・生物系のユーザー数は極めて少なく，放射光を利用したまだ未開拓の実験対象が数多く残されているといえる。光源加速器性能が成熟期にあるUVSORでは，こうした新規ユーザーの開拓により，分野の裾野を拡張していく使命があると考える。そのためには発信力の高い研究グループによる「有効性」のデモンストレーション実験が求められるが，現在その模索段階である。また新規ユーザーの利用障壁となる「使い易さ」の改善も最重要検討課題であると考える。現設備ではBL3Uにおける液体試料の軟X線吸収分光は，化学系ユーザーへの親和性が高い。原子構造の議論で終息している多彩な未評価物質群について，電子構造の視点でケミストリー研究を展開することが可能と考える。標的テーマによっては分光器設備を含めた更新（輝度制御，時間ドメイン自由度，安定化）が必須である。またBL4Uにおける軟X線透過顕微鏡による3次元物性情報は，材料系ユーザーからの利用要望が高く，世界的にもユニークな存在として良く知られたビームラインとなった。これらのビームラインの最適化を「ケミカルマシン」のミッションに従い最優先に検討する。以下に各Uラインの現状を記す。

・タンデムAPPLE-IIアンジュレータ高次高調波コヒーレント光源開発用ビームライン（BL1U）

加藤らが外部資金（文部科学省量子ビーム基盤技術開発プログラム）を得て建設した。FEL，光渦やベクトルビームなど新光源開発とその利用の開拓を目的とし，これまで協力研究の形で外部の利用も受け入れてきたが，光源技術が確立されつつある紫外・真空紫外線，ガンマ線の照射実験については，2018年度後期から施設利用で受け入れることとなった。なお，その他の利用については従来通り協力研究で受け入れる。

・真空封止アンジュレータ軟X線ビームライン（BL3U）

液体試料の軟X線吸収分光（XAS）測定を可能にしていて，実環境下の液体試料のその場･オペランド観測が行える。

2017年度後期から施設利用に移行した。現在，液体試料だけでなく，電気化学セル，マイクロ流路セル，レーザー照射による光化学反応セルの開発を行うことで，液相の様々な化学・生命現象に，XAS測定の適用範囲が広がっている。そのため，触媒分野，生命分野などの多方面からのユーザー利用があり，その利用者数は増加している。また，海外の第三世代先端光源施設（BESSY-II，ALS，MAX-IVなど）では不可能な実験を可能にしていることにより，ドイツBESSY-II（協定あり），ベルリン自由大学（協定あり），フィンランド・オウル大学（協定あり），米国ALS，フランスSOLEIL，中国合肥HESYRLなどの，海外の研究者による施設利用も実施している。

・真空封止アンジュレータ軟X線顕微分光ビームライン（BL4U）

易損傷試料に適応可能な軟X線透過顕微鏡（STXM）として世界的にユニークな実験を実施できる。フォトンフラックスおよび空間分解能向上を目的として，低分解能回折格子を導入した。また最高分解能を実現する最外輪帯幅18 nmのFresnel Zone Plateのキャリブレーションを行なった。今後，Li端など低元素測定への対応を目指し，高次光除去に向けてフィルターセクションを出射スリット下流に設置し最適化調整を進めている。

・APPLE-IIアンジュレータ高輝度固体光電子分光ビームライン（BL5U）

固体の２次元スピン分解角度分解高分解能ARPES装置。2018年度前期にマイクロフォーカス用ミラーの設置を行い23×40 μmにビームスポットを絞ることに成功した。後期にアナライザーをメーカーに送り，deflectorの最適化を行うことで微小試料の測定ができるようにする。またスピン分解光電子分光に向けてターゲットチャンバーの準備中である。後期にターゲットからの反射を得ることができるように調整を行う。

・真空封止アンジュレータ軟X線ビームライン（BL6U）：協力研究用ライン

固体・表面角度分解光電子分光装置では，２次元原子・分子薄膜の電子状態に関する研究について，所内および国内外研究者を招聘しての共同利用研究を進めている。2017年度パーマロイ製の測定槽を新たに導入し，真空度と作業効率を大幅に向上させた。また，国際競争力の面で，海外ユーザーから強い改善要望が出ていたため，広い波数空間でのマッピングができるよう電子エネルギー分析器を更新し，現在性能評価中である。将来構想として前述の運動量分解光電子顕微鏡の導入を計画している。軟X線励起の価電子帯光電子分光・エネルギー掃引光電子回折と極紫外光励起の（直入射）偏向可変価電子帯光電子分光・分子軌道トモグラフィーという独自の実験ステーションとなる予定である。

・APPLE-IIアンジュレータ真空紫外超高分解能角度分解光電子ビームライン（BL7U）

固体の低エネルギー角度分解高分解能ARPES装置。より広範な物性探査への拡張を目的として，高精度の低温・高分解能での測定を目指し，リニアスケールを設けたXYZステージと極低温マニピュレータを新規に導入した（所内設計）。十数μmの精度で試料位置の微調が可能になった。また試料位置で5 Kまで冷却が可能となり，エネルギー分解能が実測可能な範囲で5 meVを達成した。施設で高い申請競争率をもつラインである。

(4) 施設スタッフと運営体制

施設を維持していく上で，スタッフ体制について「人員の増補」と「世代交代への対策」が急務である。2017年度は転出10人，施設（准教授１，技術職員１，技術支援員３）施設外（教授１，助教４）に対して，2018年度に２

名補填で現員，施設21（教授１，准教授１，主任研究員１，助教４，技術職員11，技術支援員と事務支援員３），施設外関連教員４（施設長１，教授１，助教２）である。

これは歴代最少人数体制で，同規模の他施設と比しても不十分な人数体制といえ，ユーザーコミュニティから将来について不安視する声もあがっている。少なくとも先端アンジュレータ挿入光源ラインには専属研究者が配置されているべきであるが，現在は各研究者が複数を兼務して賄っている。有能な技術職員の採用を実現するためには，待遇改善が一つの解決策であるが制度改革には多くの障壁が想定される。更に深刻な問題として，約10年後には２名を除き技術職員は定年を迎える。引継の教育時間を考えると，残された時間は少ない。人口減もさることながら，法人試験での希望者も少なく，魅力のある職種として技術職員を如何にしてスカウトできるか，放射光コミュニティ全体の大きな問題である。また今後増加していくと考えられる国際的な対応を視野に入れると，外国人スタッフ雇用の検討も必要である。

一方で業務内容を整理し，主任研究員を増補することで人材を確保することも視野に入る。運転にかかる簡易業務は外部委託あるいは技術支援員の雇用で対応することもできるだろう。主任研究員を補填すべき専門分野としては，光電子（済），加速器光源，Ｘ線光学，VUV 光学，スピン物性，制御システム，情報処理等があげられる。特に少人数で運営するうえで，制御システム機能の重点化は有効であろう。また情報処理は，セキュリティ対策が叫ばれる中，施設としての自己防衛機能としても重要であるが，学術的にも実験スタイルとして大規模データを取り扱う時代にあり，共同利用機関としてユーザーへの専門的な対応や支援が求められる。５年程度のプロジェクトで先端設備の R&D を実施するうえで，人員不足は大きな問題である。事業の効果的推進のために主任研究員を技術的に補助するために，特任研究員の雇用によるプロジェクト運用を開始する。

現在，UVSOR を利用する所内ユーザー数（研究系 PI）も歴代最小規模である。所内ユーザーの活性化により，積極的な外部発信が求められる。軽元素 XAFS，偏光・蛍光スペクトル，時間分解分光，放射線損傷，軟Ｘ線イメージング（吸収，発光，光電子），VUV 共焦点イメージング，テラヘルツ分光などの実験手法の発展を牽引できるスタッフが必要である。水を含んだ試料系など，分子生物学，生化学の分光学やイメージング研究を如何に切り開くか，分子科学に律した優れた研究テーマの創成を狙う。これにより分子研内にとどまらず，まずは近隣の生理研，基生研，生命創成探究センターを活性化する。硬Ｘ線による「構造」評価は放射光を使い熟したことにより成熟した。次は UVSOR が得意とする領域での量子デバイス，薄膜界面制御，界面電気化学，ナノ触媒，自己組織化，分子認識，生体模倣などの種々の応用展開を見据えた「機能・物性」評価へ向けた研究展開が待たれる。

UVSOR 利用者懇談会では，次世代を担う優れた人材を育成する機会が欠乏している点が指摘され，本施設での対応を要望する意見があった。多様な視点で学部生・大学院生を広く教育しなければ，科学技術イノベーションを推進できる人材を確保することは難しい時代である。分子研の客員教員部門に加え，新規事業である流動研究部門（クロスアポイント制度）による人材交流制度の有効利用を検討したい。

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３名（秋山教授，山本教授，鈴木准教授），併任PIが７名（斉藤教授，青野教授，加藤教授，飯野教授，古賀准教授，小林准教授，正岡准教授）の計10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。

2018年度の特筆すべき研究成果として，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「*Nature Photonics*」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，「*Scientific Reports*」誌等に国内外の大学や研究機関との共同研究成果が発表され，その学術的な新規性・重要性が高く評価されている。

専任PIはセンターが掲げる目標に向かって，これまでの研究とは違う新しい一歩を踏みだすことが求められる。既に一部のグループ間で共同研究が進行中であるが，より多くのセンター構成員で共有できる新しい研究プロジェクトを練り上げていく必要がある。専門から少し離れた分野でのプロジェクト立案には人的交流が何よりも重要であるため，研究グループの居室を南実験棟の３階の１フロアに集中させ，一部をオープンスペースとして運用しつつ，科学的な議論や交流を活発に進めている。

その他，CIMoSセミナー，CIMoSランチ，ワークショップなどを企画・実施し，それらを通じてセンターの活動や成果を国内外のコミュニティに向けて発信している。

8-3　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，マクロ階層の強靭でロバストな性質と，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，平成29年４月の発足時に以下の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併任），信定克幸（准教授，理論・計算分子科学研究領域からの併任）
(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併任），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併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。なお，信定准教授は平成30年1月に残念ながら逝去された。平等准教授は平成30年10月に理化学研究所（放射光科学研究センター）に転出した。これらの研究領域の扱いについては今後の検討となる。一方，平成30年5月には杉本敏樹准教授が物質分子科学研究領域からの併任として就任した。

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，所員ならびに所外の協力研究・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。一方，大学連携研究設備ネットワークの幹事機関として，機器センター所有の多くの機器を設備ネットワークに登録・公開し，この事業の運営を主導し事務局を担当している。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。2018年度は，センター長（併任），専任技術職員５名，技術支援員３名，事務支援員１名が配置され，これに加えて，前述２事業において，特任研究員４名（マネージャー・コーディネータを含む，うち１名は年度途中退職），技術系特任専門員１名（年度途中退職），事務系特任専門員３名（うち１名は育児休暇中，１名は年度途中退職），事務支援員１名，事務系派遣職員２名（うち１名は年度途中退職）を配置している。

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）および高分解能透過電子顕微鏡（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10機関）の代表機関として中核を担い，実施機関としても参画している。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。2017年度には，他では利用しにくく外部利用頻度の高い極低温・微結晶単結晶X線回折の検出器の更新，マトリックス支援レーザー脱離イオン化（MALDI-TOF）質量分析計の新規導入，示差走査熱量計（DSC），熱重量計（TGA）の新規導入などを行い，2018年度は，光励起状態の時間分解高磁場パルス電子スピン共鳴測定を可能にするための大強度ナノ秒レーザー・OPOシステムを新規導入した。また，オペランド多目的粉末・薄膜多目的X線回折装置および高速原子間力顕微鏡装置の次年度納入を確定し作業を進めている。

2018年度は，特別研究部門に着任した藤田 誠卓越教授の主導のもと，結晶スポンジ法による分子構造解析を始動させた。この方法は藤田卓越教授が発明したもので，結晶化できない分子をホストフレーム（スポンジ）形成分子がこれを取り込む形で結晶化させ，単結晶X線構造解析を行うという画期的な手法である。自然界や医薬用分子の多くは結晶化が困難で詳細分子構造が未知のものが多く，既に極めて多くの実施可能性問い合わせが届いている。次年度より本格的な公開を予定している。

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共同利用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，920 MHz NMR装置などの一部装置の停止を決定した。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できるようになり，2017，2018年度は上述の新規導入が可能となった。

中長期的にどのような機器ラインアップを維持するかの検討については，次の３つのタイプに階層化することを想定する。

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。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る。分子科学研究所の特色として「低温」「オペランド」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も視野に含める。所外の研究者の要請・提案を取り込みつつ連携して進めるとともに，所内研究者の積極的な関与も求める。当センター内のみならず，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である。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。

3) 国際的な水準での先端的機器。分子科学の発展・深化を強力に推進する研究拠点としての分子研の役割を体現する施設として，UVSORや計算科学研究センターと同様に，機器センターも機能する必要がある。高磁場NMR装置やESR装置は，国際的な競争力を有する先端的機器群であり，研究所全体として明確に位置付けを行い，利用・運営体制を整備することによって，このミッションに対応すべきである。国外からの利用にも対応するため，技術職員には国際性が求められる。2) と同様に，所外コミュニティからの要請・提案と，所内研究者の積極的関与が不可欠である。特に，新規ユーザーの開拓は，分子科学の新領域形成へと繋がると期待されるものであり，これまで分子研との繋がりがあまり深くはなかった研究者層・学協会との積極的な連携を模索することにも取り組む。先端的機器は不断の性能更新が宿命であるが，全ての面でトップたることは不可能であるので，意識して差別化を行い，分子研ならではの機器集合体を構成することに留意する。

これらを機能的に運営するため，次年度から組織改編を行うことが所長主導で決定された。機器センターに，機器センター長のもと，分析チーム，合成チーム，共同利用チームの３つのチームを据え，分析チームのチームリーダーに中村敏和現准教授，合成チームのチームリーダーに鈴木敏泰現准教授が配置換される。この２名のチームリーダーが協力研究を中心とした質の高い研究に取り組み，また，各チームの統括や新規導入機器策定等を行う。共同利用チームは，２名のチームリーダーと３名の特任研究員（マネージャー・コーディネータ）が大学連携研究設備ネットワークとナノテクノロジープラットフォームの運営を担う。次年度の体制は，センター長，チームリーダー２名，専任技術職員８名（分析チーム５名，合成チーム３名），特任研究員３名（共同利用チーム），技術系特任専門員１名，事務系特任専門員３名，技術支援員２名，事務支援員１名，技術系派遣職員１名，事務系派遣職員１名（いずれも特任と派遣職員は大学連携研究設備ネットワークとナノテクノロジープラットフォームでの雇用）を計画している。

また，次年度は，明大寺キャンパスの装置開発棟・極低温棟・レーザー棟の建物改修が行われる予定であり，これまで点在していた機器センター機器室を極低温棟と実験棟一部に集約し，新規機器導入とともに飛躍的な機能向上を図る計画である。

8-5　装置開発室

装置開発室は，分子科学分野の研究者と協力し最先端の研究に必要となる装置や技術を開発することと，日常の実験研究において必要となる装置や部品類の設計・製作に迅速に対応する，という二つの役割を担っている。製作依頼件数は年間 300 件近くに及ぶ。新しい装置の開発では技術職員が研究者と密接に連携し，また，日常の実験研究で必要となる工作依頼などについては，機械加工技能を持つ技術支援員が中心となり，対応している。

分子研外部からの製作・開発依頼受付を 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，CAM 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，2018 年度は技術職員を３名採用した。

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。2018 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 12 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，旧来「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きたが，2017 年 10 月の更新以降「高性能分子シミュレータ」の１システムに統合した。本シミュレータでは，いずれも量子化学，分子シミュレーション，固体電子論などの共同利用の多様な計算要求に応えうるための汎用性があるばかりでなく，ユーザーサイドの PC クラスタでは不可能な大規模計算を実行できる性能を有する。

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 1075 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（Linux 3.10）をもとに，バイナリ互換性を保ち一体的に運用される。システム全体として総演算性能 4.096 PFlops で総メモリ容量 221 TByte 超である。LX シリーズのクラスタは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 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 26 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 コア, 192 GB メモリ構成のノード 159 台と, 24 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。

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 など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 1/3 強を占めている。

共同利用に関しては，2018 年度は 248 研究グループにより，総数 923 名（2019 年２月現在）におよぶ利用者がこれらのシステムを日常的に利用している。近年，共同利用における利用者数が増加傾向にあり，このことは計算科学研究センターが分子科学分野や物性科学分野において極めて重要な役割を担っており，特色のある計算機資源とソフトウエアを提供していることを示している。

計算科学研究センターは，国家基幹技術の一つとして位置づけられているポスト「京」開発事業（フラッグシップ 2020 プロジェクト）において, ポスト「京」を用いて重点的に取り組むべき社会的･科学的課題（重点課題）のうち，とくにナノサイエンスに関わるアプリケーション開発「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した極限の探求」，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，2018 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「理論・計算科学の挑戦：量子化学とシミュレーションからの展望」と２つのウィンタースクール「第８回量子化学スクール」と「第 12 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 30 年度　システム構成

高性能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
	コア数：31,760 コア（40 コア× 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
	コア数：1,040 コア（40 コア× 26 ノード）2.4 GHz
	総理論性能：79 TFlops（3,072 GFlops × 26 ノード）
	総メモリ容量：19 TB（768 GB × 26 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
	コア数：5,724 コア（36 コア× 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
	コア数：2,304 コア（24 コア× 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）
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）
運用管理クラスタ	
	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　生命創成探究センター

生命創成探究センター（Exploratory Research Center on Life and Living Systems = ExCELLS）は，自然科学研究機構の更なる機能強化を目指すために，岡崎統合バイオサイエンスセンターを中核として機構の組織を再編・統合して2018年4月に設置された機構直轄の組織である。本センターでは，「生きているとは何か？」という人類の根源的な問いの解明に向けて，生命の仕組みを観察する新たな技術を開発するとともに，蓄積されていく多様な情報の中に隠されている意味を読み解き，さらに合成・構成的アプローチを通じて生命の基本情報の重要性を検証する活動を行っている。こうした「みる・よむ・つくる」のアプローチを基軸に，極限環境生命の研究者とも協力しながら異分野融合型の研究を進め，生命の設計原理を探究する。この目的のもとに，国内外の大学･研究機関の連携によりコミュニティ横断型の共同利用・共同研究を推進する。

生命創成探究センターは，センター長の統括のもとに，創成研究領域と極限環境生命探査室から構成されている。創成研究領域は「みる・よむ・つくる」の３つのアプローチ法を開拓するとともに，それらを１つの流れとして捉え，生命のダイナミズムの本質に迫る研究を展開する。

「みる」アプローチでは，革新的な計測手法を開発し，複雑な生命システム全体の中における各構成要素のダイナミックな振る舞いをありのままに観測する。さらに，その背景にある物理化学的諸量の変化の可視化を行う。

「よむ」アプローチでは，計測・観測を通じて蓄積されていく多様な生命情報の中に隠されている意味を解読し，理論体系化し，予測するための情報科学・理論科学・計算科学的アプローチを発展させる。

「つくる」アプローチでは，生命システムを実験的に構成すること，あるいは計算機上で構築することを通じて，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す。

すなわち，「みる」ことで学ぶ生物研究から「よむ」さらには「つくる」ことで学ぶ生命科学への流れを実現し，上記の３つのアプローチを一体として研究を進めていくことで，ダイナミックな生命の設計原理の解明を目指す。こうした研究の発展に資するため，多様な共同利用・共同研究を実施する。例えば，本センター以外の研究機関に所属する複数の研究者が研究グループを構成したうえで，新規な研究手法・測定手法の開発等を通じて分野横断的な研究を推進する連携研究グループが活動を開始している。

一方，極限環境生命探査室では深海，地下，極地，大気圏外などにおける生命体の活動を探査・解析することを目指して生命の始原形態と環境適応戦略を理解する研究を実施する。既に海洋研究開発機構と連携した研究グループが活動を開始している。

分子科学研究所を兼務している教員のうち，加藤晃一教授がセンター長をつとめるとともに生命分子動秩序創発研究グループと極限環境生命分子研究グループを主宰し，青野重利教授が金属生命科学研究グループ，奥村久士准教授が生命分子動態シミュレーション研究グループ，古賀信康准教授が生命分子創成研究グループをそれぞれ主宰している。

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			○	○	○					
榊　米一郎	豊橋技科大学長	○	○ ~'84.3.31										
島村　　修	相模中央研最高顧問 理事	○	○										
田島弥太郎	遺伝研所長	○											
馬場　宏明	北大応電研所長	○	○	○	○								
福井　謙一	京大工教授, 京都工繊大学長, 基礎化学研究所長	○	○	○	○	○	○						
藤巻　正生	お茶女大家政教授, お茶女大学長	○	○	○									
向坊　　隆	東大名誉教授	○											
森　大吉郎	宇宙研所長	○	○ '83.11.25 死亡										
亀谷　哲治	星薬科大学長		○	○									
角戸　正夫	姫路工大学長		○	○									
本多　波雄	豊橋技科大学長		○ '84.4.16~	○	○	○							

氏　名	所　属	第1期 '81.6.1～'83.5.31	第2期 '83.6.1～'85.5.31	第3期 '85.6.1～'87.5.31	第4期 '87.6.1～'89.5.31	第5期 '89.6.1～'91.5.31	第6期 '91.6.1～'93.5.31	第7期 '93.6.1～'95.5.31	第8期 '95.6.1～'97.5.31	第9期 '97.6.1～'99.5.31	第10期 '99.6.1～'01.5.31	第11期 '01.6.1～'03.5.31	第12期 '03.6.1～'04.3.31
田中　郁三	東工大理教授,理学部長,学長，学位授与機構長		○	○	○	○	○						
中嶋　貞雄	東大物性研所長		○										
小田　稔	宇宙研所長		○'84.2.16~	○	○								
斎藤　喜彦	慶應大理工教授			○	○								
森田　正俊	豊田中研代表取締役			○	○	○							
伊東　椒	東北大理教授,徳島文理大薬教授			○	○	○							
鈴木　進	東北大金材研所長			○									
豊沢　豊	東大物性研所長,中央大理工教授			○	○	○	○						
平野　龍一	東大名誉教授			○	○								
藤田　栄一	大阪薬科大学長,京大名誉教授				○	○	○						
西原　春夫	早稲田大学総長				○	○							
倉田　道夫	三菱瓦斯化学(株)顧問				○	○							
朽津　耕三	長岡技科大教授,城西大理教授				○	○	○	○					
田丸　謙二	東京理科大理教授				○	○	○						
早川　幸男	名大学長				○'87.7.22~	○	○'92.2.5死亡						
千原　秀昭	阪大理教授，(社)化学情報協会専務理事				○	○	○	○					
米澤貞次郎	近畿大理工学総合研教授，近畿大理工教授				○	○	○	○					
赤池　弘次	統計数理研究所長					○	○	○					
三ヶ月　章	日本学術振興会学術相談役，東大名誉教授					○	○						
伊藤　昌壽	東レ(株)相談役最高顧問						○	○	○				
佐々木慎一	サイエンスクリエイト(株)常任顧問						○	○	○				
佐野　博敏	東京都立大学長						○						
櫻井　英樹	東北大理学部長,東北大理教授						○	○					
松永　義夫	神奈川大理教授						○	○	○				
秋本　俊一	学士院会員							○	○				

氏　名	所　属	第1期 '81.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31	第9期 '97.6.1～ '99.5.31	第10期 '99.6.1～ '01.5.31	第11期 '01.6.1～ '03.5.31	第12期 '03.6.1～ '04.3.31
岩村　秀	九大有機化学基礎研究センター教授							○	○				
加藤　延夫	名大総長							○	○	○			
黒田　晴雄	東京理科大総合研教授							○	○	○			
塩野　宏	成蹊大法教授							○	○	○			
田中　久	前京都薬科大学長							○	○				
堀　幸夫	金沢工業大副学長							○	○				
森本　英武	(株)豊田中央研顧問							○	○				
守谷　亨	東京理科大理工教授							○	○				
大瀧　仁志	立命館大理工教授								○	○			
清水　良一	統数研所長								○	○	○		
田隅　三生	埼玉大理教授, 理学部長								○	○			
土屋　荘次	早稲田大理工学総合研究センター客員教授								○	○	○	○	○
又賀　昇	(財)レーザー技術総合研第5研究部長								○	○			
丸山　和博	京都工繊大学長								○	○			
大塚　榮子	(独)産業技術総合研フェロー									○	○	○	○
京極　好正	(独)産業技術総合研生物情報解析研究センター長									○	○	○	
後藤　圭司	豊橋技科大学長									○	○	○	○
高橋　理一	(株)豊田中央研代表取締役所長									○	○	○	○
中西　敦男	学術著作権協会 常務理事									○	○		
細矢　治夫	お茶水女子大理教授									○	○	○	○

氏　名	所　属	第1期 '81.6.1～'83.5.31	第2期 '83.6.1～'85.5.31	第3期 '85.6.1～'87.5.31	第4期 '87.6.1～'89.5.31	第5期 '89.6.1～'91.5.31	第6期 '91.6.1～'93.5.31	第7期 '93.6.1～'95.5.31	第8期 '95.6.1～'97.5.31	第9期 '97.6.1～'99.5.31	第10期 '99.6.1～'01.5.31	第11期 '01.6.1～'03.5.31	第12期 '03.6.1～'04.3.31
本多　健一	東京工芸大学長									○	○		
安岡　弘志	東大物性研所長									○			
山崎　敏光	理化学研RIビーム科学研究室研究協力員									○	○	○	○
荻野　博	放送大学宮城学習センター所長										○	○	○
木原　元央	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設長										○		
近藤　保	豊田工業大客員教授										○	○	○
佐原　眞	国立歴史民俗博物館長										○	○	
廣田　襄	京大名誉教授										○	○	○
福山　秀敏	東大物性研所長										○	○	○
松尾　稔	名大総長										○		
山村　庄亮	慶應大名誉教授										○	○	○
蟻川　芳子	日本女子大理教授											○	○
飯吉　厚夫	中部大学長											○	○
石谷　炯	(財)神奈川科学技術アカデミー専務理事											○	○
海部　宣男	国立天文台長											○	○
木村　嘉孝	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所長											○	
北川源四郎	統計数理研究所長												○
木下　實	東大名誉教授												○
小間　篤	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所長												○

9-4　運営顧問（2004 ～）

氏名・所属（当時）	'04. 5.19 ～ '06.3.31	'06. 4.1 ～ '08.3.31	'08. 4.1 ～ '10.3.31	'13. 4.1 ～ '15.3.31	'15. 4.1 ～ '16.3.31	'16. 4.1 ～ '18.3.31	'18. 4.1 ～ '20.3.31
加藤　伸一 豊田中央研究所代表取締役	○	○	○				
小間　篤 高エネルギー加速器研究機構理事 物質構造科学研究所長	○						
土屋　荘次 （台湾）国立交通大学講座教授 東京大学名誉教授	○	○	○				
益田　隆司 電気通信大学長	○						
江崎　信芳 京都大学化学研究所長		○					
野口　宏 中日新聞編集局文化部長		○	○ （~'08.7.31）				
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			○ （'08.8.1~）				
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所長						○	○
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所長（~'18.3.31） 東京大学物性研究所教授						○	○
松本　吉泰 京都大学教授（~'18.3.31） 豊田理化学研究所常勤フェロー						○	○

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　　昭　阪大基礎工教授	○				
村田　好正　学習院大理教授	○	○（東大物性研助教授）	○	○	
山寺　秀雄　名大理教授	○				
吉田　善一　京大工教授	○				
和田　昭充　東大理教授	○	○			
廣田　榮治　分子研教授		○（委員長）	○（委員長）	○（委員長）	○（委員長）
伊東　　椒　東北大理教授		○	○		
大木　道則　東大理教授		○	○		
大瀧　仁志　東工大総合工研教授		○	○		
馬場　宏明　北大応用電研教授		○	○		
福井　謙一　京大工教授		○	○	○	
齋藤　喜彦　東大理教授		○		○	○
諸熊　奎治　分子研教授		○	○	○	
吉原經太郎　分子研教授		○			
霜田　光一　東大理教授			○	○	
武内　次夫　豊橋技科大教授			○	○	
山本　常信　京大理教授			○	○	
岩村　　秀　分子研教授			○		
坂田　忠良　分子研助教授			○		
木下　　実　東大物性研助教授				○	
黒田　晴雄　東大理教授				○	○
山下　雄也　名大工教授				○	○
高谷　秀正　分子研助教授				○	
花崎　一郎　分子研教授				○	○
安積　　徹　東北大理助教授					○
志田　忠正　京大理助教授					○
鈴木　　洋　上智大理工教授					○
伊達　宗行　阪大理教授					○
田仲　二郎　名大理教授					○
千原　秀昭　阪大理教授					○
土屋　荘次　東大教養助教授					○
永沢　　満　名大工教授					○
務台　　潔　東大教養助教授					○
藤田純之佑　名大理教授					○
塚田　　捷　分子研助教授					○

9-8　運営協議員（1981 ～ 2004）

◎　会長（議長）　　人－人事選考部会に属する運営協議員
（副）　副会長（副議長）　共－共同研究専門委員会

氏　名	所　属	第1期 '81.5.1 ～ '83.4.30	第2期 '83.5.1 ～ '85.4.30	第3期 '85.5.1 ～ '87.4.30	第4期 '87.5.1 ～ '89.4.30	第5期 '89.5.1 ～ '91.4.30	第6期 '91.5.1 ～ '93.4.30	第7期 '93.5.1 ～ '95.4.30	第8期 '95.5.1 ～ '97.4.30	第9期 '97.5.1 ～ '99.4.30	第10期 '99.5.1 ～ '01.4.30	第11期 '01.5.1 ～ '03.4.30	第12期 '03.5.1 ～ '04.3.31
伊藤　憲昭	名大工教授	○共											
大野　公男	北大理教授	○人	○										
角戸　正夫	阪大蛋白研所長	○（副）											
朽津　耕三	東大理教授	○人	○人										
鈴木　洋	上智大理工教授	○											
千原　秀昭	阪大理教授	○人	○										
土屋　荘次	東大教養学教授	○共（共~'82.4.30）		○									
豊沢　豊	東大物性研教授	○人											
廣田　襄	京大理教授	○人（人~'82.3.31）		○人	○（副）・人								
米澤貞次郎	京大工教授	○共（共'82.5.1~）											
井口　洋夫	分子研教授	◎人	◎人	◎									
岩村　秀	分子研教授	○人・共	○人	○人	○ ~'87.5.31								
木村　克美	分子研教授	○共	○共	○人・共	○人・共	○（◎'90.1.29~）	○（◎~'92.3.31）						
花崎　一郎	分子研教授	○	○	○	○	○共	○人・共	○人・共	○				
廣田　榮治	分子研教授	○人	○人	○人	○	○（◎~'90.1.16）							
藤山　常毅	分子研教授	○（'82.4.30死亡）											
諸熊　奎治	分子研教授	○人・共（共~'82.4.30）	○人	○人	○共	○人	○人（◎~'92.2.14）						
吉原經太郎	分子研教授	○人・共	○人・共	○人・共	○人	○人		○人	◎				
田中　郁三	分子研教授（客員）（東工大理教授）	○											
笛野　高之	分子研教授（客員）（阪大基礎工教授）	○	○人										

氏　名	所　属	第1期 '81.5.1～'83.4.30	第2期 '83.5.1～'85.4.30	第3期 '85.5.1～'87.4.30	第4期 '87.5.1～'89.4.30	第5期 '89.5.1～'91.4.30	第6期 '91.5.1～'93.4.30	第7期 '93.5.1～'95.4.30	第8期 '95.5.1～'97.4.30	第9期 '97.5.1～'99.4.30	第10期 '99.5.1～'01.4.30	第11期 '01.5.1～'03.4.30	第12期 '03.5.1～'04.3.31
山寺　秀雄	分子研教授(客員)(名大理教授)	○											
田仲　二朗	名大理教授	○	○人										
伊藤　光男	東北大理教授		○	○(副)人									
木村　雅男	北大理教授		○○共										
黒田　晴雄	東大理教授		○共										
高柳　和夫	宇宙研教授		○	○									
中島　　威	東北大理教授		○人										
中村　宏樹	分子研教授	○(共'82.5.1~)	○共	○	○人	○人	○共	○人	○	○	◎共	○人	○人
丸山　有成	分子研教授(客員)(お茶女大理教授)		○	○	○	○人	○人	◎					
山本　明夫	分子研教授(客員)(東工大名誉教授)		○		○	○							
茅　　幸二	慶應大理工教授			○共	○共	○共							
菅野　　暁	東大物性研教授			○	○								
坪村　　宏	阪大基礎工教授			○人									
細矢　治夫	お茶女子理教授			○人	○人								
又賀　昌一	阪大基礎工教授			○共	○~'88.3.31								
松永　義夫	北大理教授			○人	○人								
北川　禎三	分子研教授			○共	○人・共	○人・共	○	○人	○人	○	○ '00.4.1~	◎	◎
齋藤　一夫	分子研教授			○									
青野　茂行	金沢大院自然科学研究科長				○	○							
安積　　徹	東北大理教授				○人	○人							
原田　義也	東大教養学教授				○人	○(副)人							
松尾　　拓	九大工教授				○共								
丸山　和博	分子研教授(客員)(京大理教授)			○	○ '88.6.1~								
大瀧　仁志	分子研教授				○ '88.4.1~	○	○共						
薬師　久彌	分子研教授				○ '88.9.1~	○共	○人	○人	○共	○共	○共	○人	○人

氏　名	所　属	第1期 '81.5.1～ '83.4.30	第2期 '83.5.1～ '85.4.30	第3期 '85.5.1～ '87.4.30	第4期 '87.5.1～ '89.4.30	第5期 '89.5.1～ '91.4.30	第6期 '91.5.1～ '93.4.30	第7期 '93.5.1～ '95.4.30	第8期 '95.5.1～ '97.4.30	第9期 '97.5.1～ '99.4.30	第10期 '99.5.1～ '01.4.30	第11期 '01.5.1～ '03.4.30	第12期 '03.5.1～ '04.3.31
木田　茂夫	分子研教授				○~'88.3.31								
岩田　末廣	分子研教授					○人	○人	○ '94.4.1~	○人	○人	○~'00.3.31		
志田　忠正	京大理教授					○人	○人						
田隅　三生	東大理教授					○人	○						
仁科雄一郎	東北大金材研教授					○共	○						
村田　好正	東大物性研教授					○	○(副)						
中筋　一弘	分子研教授					○	○人	○人 (~'94.3.31)					
飯島　孝夫	学習院大理教授						○人	○(副)					
伊藤　公一	大阪市立大理教授						○人	○人					
小川禎一郎	九大総合理工教授						○共	○共					
小尾　欣一	東工大理教授						○共	○					
京極　好正	阪大蛋白研教授						○人	○人					
田中　晃二	分子研教授						○	○共	○人	○人	○共	○共	○共
齋藤　修二	分子研教授						○ ~'92.4.1	○共	○共	◎共			
川崎　昌博	北大電子科学研教授							○人	○人				
近藤　保	東大理教授							○人	○(副)人				
斎藤　軍治	京大理教授							○	○				
塚田　捷	東大理教授							○共	○共				
山口　兆	阪大理教授							○人	○人				
宇理須恆雄	分子研教授							○共 ('94.5.1~)	○共	○共	○	○共	○共
中村　晃	分子研教授							○					
小杉　信博	分子研教授								○人	○人	○共	○人	○人
渡辺　芳人	分子研教授								○共	○共	○人	○~'02.3.31	
大澤　映二	豊橋技科大工教授								○	○共			
生越　久靖	福井高専校長								○	○			
小谷　正博	学習院大理教授								○人	○人			
西　信之	分子研教授								○人	○人	○人	○共	○共
三上　直彦	東北大院理教授								○共	○人			
岡田　正	阪大院基礎工教授									○	○共		
加藤　重樹	京大院理教授									○人	○人		

氏　名	所　属	第1期 '81.5.1～'83.4.30	第2期 '83.5.1～'85.4.30	第3期 '85.5.1～'87.4.30	第4期 '87.5.1～'89.4.30	第5期 '89.5.1～'91.4.30	第6期 '91.5.1～'93.4.30	第7期 '93.5.1～'95.4.30	第8期 '95.5.1～'97.4.30	第9期 '97.5.1～'99.4.30	第10期 '99.5.1～'01.4.30	第11期 '01.5.1～'03.4.30	第12期 '03.5.1～'04.3.31
小谷野猪之助	姫路工業大理教授									○共	○共		
関　一彦	名大物質科学国際研究セ教授									○人	○人		
田中　武彦	九大院理教授									○人	○人		
簇野　嘉彦	九大院総合理工教授									○(副)	○(副)		
小林　速男	分子研教授									○人	○人	○共	○共
阿知波洋次	東京都立大院理教授										○	○人共(人'02.4.1~)	○人
北原　和夫	国際基督教大教養教授										○	○	○
〓口　宏夫	東大院理教授										○人	○人	○人
松本　和子	早稲田大理工教授										○人	○人(~'02.3.31)	
平田　文男	分子研教授										○人	○人	○人
藤井　正明	分子研教授										○人	○人	
阿久津秀雄	阪大蛋白研教授											○	○
宇田川康夫	東北大多元研教授											○(副)人	○(副)人
太田　信廣	北大電子科学研教授											○人	○人
川合　眞紀	理化学研主任研究員											○	
榊　茂好	九大有機化学基礎セ教授											○人	○人
菅原　正	東大院総合文化教授											○共	○共
魚住　泰広	分子研教授											○ '02.4.1~	○
西川　恵子	千葉大院自然科学教授												○
岡本　裕巳	分子研教授												○人
加藤　隆子	核融合科学研教授												○

9-9　運営会議委員（2004 ～）

◎　議長　　人－人事選考部会に属する委員
（副）　副議長　　共－共同研究専門委員会に属する委員

氏名・所属（当時）	第 1 期 '04. 4. 1 ～ '06. 3.31	第 2 期 '06. 4. 1 ～ '08. 3.31	第 3 期 '08. 4. 1 ～ '10. 3.31	第 4 期 '10. 4. 1 ～ '12. 3.31	第 5 期 '12. 4. 1 ～ '14. 3.31	第 6 期 '14. 4. 1 ～ '16. 3.31	第 7 期 '16. 4. 1 ～ '18. 3.31	第 8 期 '18. 4. 1 ～ '20. 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	○	○	○	○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	◎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	○共
青野　重利 分子研教授				○人･共	○人･共	○共	○共	○人･共
加藤　晃一 分子研教授					○	○人	○人	○
加藤　政博 分子研教授					○			
山本　浩史 分子研教授					○	○人	○人	○共
秋山　修志 分子研教授						○	○人	○人
榎　　敏明 東工大院理工教授		○人	○人					
加藤　昌子 北大院理教授		○共	○					
関谷　　博 九大院理教授		○	○共					
中嶋　　敦 慶應大理工教授		○	○					
山下　晃一 東大院工教授		○人	○人					
江幡　孝之 広大院理教授			○人	○人				

氏名・所属（当時）	第1期 '04. 4. 1 ～ '06. 3.31	第2期 '06. 4. 1 ～ '08. 3.31	第3期 '08. 4. 1 ～ '10. 3.31	第4期 '10. 4. 1 ～ '12. 3.31	第5期 '12. 4. 1 ～ '14. 3.31	第6期 '14. 4. 1 ～ '16. 3.31	第7期 '16. 4. 1 ～ '18. 3.31	第8期 '18. 4. 1 ～ '20. 3.31
篠原　久典 名大院理教授			○	○共				
冨宅喜代一 神戸大院理名誉教授			○(副)人	○(副)人				
山下　正廣 東北大院理教授			○人	○人				
渡辺　芳人 名大副総長，教授			○	○				
山縣ゆり子 熊本大院薬教授				○	○			
上村　大輔 神奈川大理教授				○	○			
山内　　薫 東大院理教授				○	○			
森　　健彦 東工大院理工教授				○人	○人			
佃　　達哉 東大院理教授				○人	○人			
朝倉　清高 北大触媒セ教授				○	○	○		
神取　秀樹 名工大院工教授				○	○(副)人	○(副)人		
河野　裕彦 東北大院理教授				○	○共	○		
寺嵜　　亨 九大院理教授				○人	○人	○人		
水谷　泰久 阪大院理教授				○人	○人	○人		
大西　　洋 神戸大院理教授						○共	○共	
鈴木　啓介 東工大院理工教授						○	○	
高田　彰二 京大院理教授						○	○	
田原　太平 理研主任研究員						○人	○人	
森　　初果 東大物性研教授						○人	○人	
有賀　哲也 京大院理教授							○(副)人	○人
米田　忠弘 東北大多元研教授							○	○(副)
高原　　淳 九大先導研教授							○	○
西原　　寛 東大院理教授							○人	○人
山口　茂弘 名大トランス研教授							○人	○人
解良　　聡 分子研教授							○人	○人
鹿野田一司 東大院工教授								○人
袖岡　幹子 理研主任研究員								○
谷村　吉隆 京大院理教授								○
中井　浩巳 早稲田大理工教授								○人
藤井　正明 東工大科技創成院教授								○共
江原　正博 分子研教授								○人

9-10　自然科学研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則

平成16年4月1日

分研規則第20号

自然科学研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則

（趣旨）

第１条　この規則は，大学の教員等の任期に関する法律（平成９年法律第82号。以下「法」という。）第５条第２項の規定に基づき，自然科学研究機構分子科学研究所の研究教育職員の任期に関し，必要な事項を定める。

（教育研究組織，職及び任期）

第２条　任期を定めて任用する研究教育職員の教育研究組織，職，任期として定める期間及び任期更新に関する事項は，別表に定めるとおりとする。

（同意）

第３条　任期を定めて研究教育職員を採用する場合には，文書により，採用される者の同意を得なければならない。

（周知）

第４条　この規則を定め，又は改正したときは，速やかに周知を図るものとする。

附則

この規則は，平成16年４月１日から施行し，岡崎国立共同研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則（平成10年岡機構規程第８号。以下「分子研規則」という。）により任期を付されて採用された者について適用する。

附則

この規則は，平成19年４月１日から施行し，改正前の別表の規定により任期を定めて雇用されていた者について適用する。

別表（第２条関係）

<table>
<tr><th rowspan="2">法第４条第１項第１号に掲げる教育研究組織に該当する組織</th><th rowspan="2">該当する職</th><th rowspan="2">分子研規則による種別</th><th rowspan="2">任　期</th><th colspan="2">任期更新に関する事項</th></tr>
<tr><th>可　否</th><th>任　期</th></tr>
<tr><td rowspan="2">分子科学研究所に置かれる研究領域及び研究施設</td><td rowspan="2">助教</td><td>５年に満たない任期を残す者</td><td>分子研規則による残任期間</td><td rowspan="2">可</td><td rowspan="2">任期を定めずに採用</td></tr>
<tr><td>５年を越える任期を残す者</td><td>５年</td></tr>
</table>

9-11　自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

平成16年4月1日
分研規則第4号

自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

（目的）

第1条　この規則は，自然科学研究機構分子科学研究所（以下「研究所」という。）の設置目的及び社会的使命を達成するため，研究活動等の状況について自己点検・評価，及び外部の者による評価（以下「外部評価」という。）を行い，もって研究所の活性化を図ることを目的とする。

（点検評価委員会）

第2条　研究所に，前条の目的を達成するため分子科学研究所点検評価委員会（以下「委員会」という。）を置く。

2　委員会は，次に掲げる者をもって組織する。

一　研究所長

二　研究総主幹

三　研究主幹

四　研究施設の長

五　本部研究連携室の研究所所属の研究教育職員

六　技術課長

七　その他研究所長が必要と認めた者

3　前項第7号の委員の任期は，2年とし，再任を妨げない。

（委員長）

第3条　委員会に委員長を置き，研究所長をもって充てる。

2　委員長に事故があるときは，研究総主幹がその職務を代行する。

（招集）

第4条　委員会は，委員長が招集し，その議長となる。

（点検評価委員会の任務）

第5条　委員会は，次に掲げる事項について企画，検討及び実施する。

一　自己点検・評価及び外部評価の基本方針に関すること。

二　自己点検・評価及び外部評価の実施に関すること。

三　自己点検・評価報告書及び外部評価報告書の作成及び公表に関すること。

四　独立行政法人大学評価・学位授与機構が行う評価に係る諸事業への対応に関すること。

五　その他自己点検・評価及び外部評価に関すること。

（点検評価事項）

第６条　委員会は，次の各号に掲げる事項について点検評価を行うものとする。

一　研究所の在り方，目標及び将来計画に関すること。

二　研究目標及び研究活動に関すること。

三　大学等との共同研究体制及びその活動に関すること。

四　大学院教育協力及び研究者の養成に関すること。

五　研究教育職員組織に関すること。

六　研究支援及び事務処理に関すること。

七　国立大学法人総合研究大学院大学との連係及び協力に関すること。

八　施設設備等研究環境及び安全に関すること。

九　国際共同研究に関すること。

十　社会との連携に関すること。

十一　学術団体との連携に関すること。

十二　管理運営に関すること。

十三　学術情報体制に関すること。

十四　研究成果等の公開に関すること。

十五　財政に関すること。

十六　点検評価体制に関すること。

十七　その他委員会が必要と認める事項

２　前項各号に掲げる事項に係る具体的な点検評価項目は，委員会が別に定める。

（専門委員会）

第７条　委員会に，専門的事項について調査審議するため，専門委員会を置くことができる。

２　専門委員会に関し必要な事項は，委員会が別に定める。

（点検評価の実施）

第８条　自己点検・評価又は外部評価は，毎年度実施する。

（点検評価結果の公表）

第９条　研究所長は，委員会が取りまとめた点検評価の結果を，原則として公表する。ただし，個人情報に係る事項，その他委員会において公表することが適当でないと認めた事項については，この限りではない。

（点検評価結果への対応）

第10条　研究所長は，委員会が行った点検評価の結果に基づき，改善が必要と認められるものについては，その改善に努めるものとする。

（庶務）

第11条　委員会の庶務は，岡崎統合事務センター総務部総務課において処理する。

（雑則）

第12条　この規則に定めるもののほか，委員会の運営に関し必要な事項は，委員会の議を経て研究所長が定める。

附則

1　この規則は，平成16年4月1日から施行する。

2　この規則施行後，第2条第2項第7号により選出された最初の委員の任期は，同条第3項の規定にかかわらず，平成18年3月31日までとする。

9-12　自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則

平成16年4月1日
分研規則第5号

自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則

（設置）

第1条　自然科学研究機構分子科学研究所（以下「研究所」という。）に，研究所の将来計画について検討するため，将来計画委員会（以下「委員会」という。）を置く。

（組織）

第2条　委員会は，次の各号に掲げる委員をもって組織する。

一　研究所長

二　研究総主幹

三　研究所の教授数名

四　研究所の准教授数名

五　その他分子科学研究所長（以下「研究所長」という。）が必要と認めた者

2　前項第3号，第4号及び第5号の委員の任期は，1年とし，再任を妨げない。ただし，補欠の委員の任期は，前任者の残任期間とする。

3　前項の委員は，研究所長が委嘱する。

（委員長）

第3条　委員会は，研究所長が招集し，その委員長となる。

（専門委員会）

第4条　委員会に，専門的な事項等を調査検討させるため，専門委員会を置くことができる。

（委員以外の者の出席）

第5条　委員長は，必要に応じて，委員以外の者を委員会に出席させ，意見を聴取することができる。

（庶務）

第6条　委員会の庶務は，岡崎統合事務センター総務部総務課において処理する。

附則

1　この規則は，平成16年4月1日から施行する。

2　この規則施行の後最初の任命に係る委員の任期は,第2条第2項の規定にかかわらず,平成17年3月31日までとする。

附則

この規則は，平成19年4月1日から施行する。

9-13　大学共同利用機関法人自然科学研究機構中期目標(第三期,平成 28 ～ 34 年度)

(前文) 研究機構の基本的な目標

大学共同利用機関法人自然科学研究機構（以下「本機構」という。）は，宇宙，エネルギー，物質，生命等に関わる自然科学分野の拠点的研究機関を設置・運営することにより国際的・先導的な研究を進めるとともに，本機構が設置する各大学共同利用機関（以下「各機関」という。）の特色を活かしながら，更に各々の分野を超え，広範な自然の構造と機能の解明に取り組み，自然科学の新たな展開を目指して新しい学問分野の創出とその発展を図るとともに，若手研究者の育成に努める。また，大学共同利用機関としての特性を活かし，大学等との連携の下，我が国の大学の自然科学分野を中心とした研究力強化を図る。これらのミッションを踏まえ，特に第３期中期目標期間においては，機構長のリーダーシップの下，以下の組織改革及び研究システム改革を通じて，機能強化を強力に推進する。

組織改革については，機関の枠を超え，異分野連携による新分野の創成を恒常的に行う新分野創成センターの組織再編，既存機関とは独立した国際的研究拠点の創設，研究基盤戦略会議における機能強化の方針及び資源再配分等の組織改革の方針に基づく教育研究組織の再編等を行う。

研究システム改革については，本機構の行う公募型の共同利用・共同研究の申請から審査・採択，成果報告・分析までを統合的に管理するシステム（自然科学共同利用・共同研究統括システム）を整備して，それらの成果の分析評価を行うとともに，本機構と各大学との緊密な連携体制の下で,大学の各分野の機能強化に貢献する新たな仕組み（自然科学大学間連携推進機構）を構築する。また，柔軟な雇用制度（多様な年俸制，混合給与）の導入等の人事・給与システム改革を通じて若手研究者の育成，女性研究者の支援，外国人研究者の招へいに取り組む。

これら２つの改革を着実に推進するため，本機構の IR（Institutional Research）機能を整備するとともに，これら第３期中期目標期間における特色ある改革の問題点や課題を，内部的に自己点検を実施し，それを受けて改革の効果について外部評価を受ける。また，研究活動における不正行為及び研究費の不正使用等のコンプライアンスの諸課題についても機構全体で包括的かつ横断的に取り組む。

◆　中期目標の期間及び教育研究組織

１　中期目標の期間

平成 28 年４月１日から平成 34 年３月 31 日までの６年間とする。

２　大学共同利用機関

本機構に，以下の大学共同利用機関を置く。

国立天文台
核融合科学研究所
基礎生物学研究所
生理学研究所
分子科学研究所

Ⅰ　研究機構の教育研究等の質の向上に関する目標

１　研究に関する目標

（１）　研究水準及び研究の成果等に関する目標

本機構は，天文学，核融合科学，物質科学，生命科学等の自然科学分野の学術研究を積極的に推進するとともに，各分野間の連携を図り，優れた研究成果を上げる。

天文学分野では，太陽系からビッグバン宇宙までを研究対象として，国内外の大型研究基盤施設及び設備の建設・運用を行い，これらを大学等の研究者の共同利用に供することにより，我が国の観測天文学，シミュレーション研究，理論天文学を牽引し，人類が未だ認識していない宇宙の未知の領域を開拓する。

国内の研究拠点のほか，アメリカ合衆国に設置したハワイ観測所，チリ共和国に設置したチリ観測所においても業務運営を円滑に実施する。また，日米中印加による国際共同科学事業である 30m 光学赤外線望遠鏡（TMT）計画のメンバー機関として，アメリカ合衆国ハワイ州において建設を推進する。

核融合科学分野では，我が国における核融合科学研究の中核的研究拠点として，大学や研究機関とともに核融合科学及び関連理工学の学術的体系化と発展を図る。環境安全性に優れた制御熱核融合の実現に向けて，大型の実験装置や計算機を用いた共同研究から，国際協力による核融合燃焼実験への支援までを含む日本全体の当該研究を推進する。

基礎生物学分野では，遺伝子・細胞・組織・個体の多階層における独創的な研究や研究技術・手法の開発を推進することにより，生物現象の基本原理に関する統合的理解を深め，国内生物学コミュニティを先導し，基礎生物学分野の発展に寄与する。

生理学分野では，分子から細胞，組織，システム，個体にわたる各レベルにおいて先導的な研究をするとともに，各レベルを有機的に統合し，ヒトの機能とその仕組み，更にその病態の解明に寄与する。

分子科学分野では，物質・材料の基本となる分子及び分子集合体の構造，機能，反応に関して，原子・分子及び電子のレベルにおいて究明することにより，化学現象の一般的法則を構築し，新たな現象や機能を予測，実現する。

（２）　研究実施体制等に関する目標

国際的かつ先端的な学術研究を持続的に推進するため，十分な研究体制を確保する。

２　共同利用・共同研究に関する目標

（１）　共同利用・共同研究の内容・水準に関する目標

本機構は，各専門分野を先導する国際的学術拠点として，国内外の研究者との共同利用・共同研究を抜本的に強化し，優れた研究成果を上げる。

（２）　共同利用・共同研究の実施体制等に関する目標

共同利用・共同研究機能の強化のため，研究者コミュニティ及び各大学等の要請に対応し得る柔軟な体制を構築する。

３　教育に関する目標

（１）　大学院等への教育協力に関する目標

自然科学分野において国際的に通用する高度な研究的資質を持ち，広い視野を備えた研究者を育成するため，総合研究大学院大学（以下「総研大」という。）との一体的連係及びその他の大学との多様な連携によって，本機構の高度の人材・研究環境を活かして，特色ある大学院教育を実施する。

（２）　人材育成に関する目標

自然科学分野において優れた研究成果を生み出せる大学院生を含む若手研究者の養成を行う。特に，総研大との一体的連係及びその他の大学との多様な連携による大学院教育によって，新しい学術的分野の問題を発掘及び解決できる人材の育成を行い，社会の要請に応える。

4　社会との連携及び社会貢献に関する目標
国民の科学に対する関心を高めるとともに，最先端の研究成果を社会に還元する。

5　その他の目標
（1）　グローバル化に関する目標
我が国の代表的な自然科学分野の国際的頭脳循環のハブとして，人材交流を含む国際間の多様な研究交流を推進する。
（2）　大学共同利用機関法人間の連携に関する目標
４大学共同利用機関法人は，互いの適切な連携により，より高度な法人運営を推進する。

II　業務運営の改善及び効率化に関する目標
1　組織運営の改善に関する目標
機構長のリーダーシップの下で，機構本部及び各機関間の連携により，機構として戦略的かつ一体的な運営を推進する。

2　教育研究組織の見直しに関する目標
新たな学問分野の創出，共同利用・共同研究機能の向上の観点から，各機関等の研究組織を見直し，必要な体制整備，組織再編等を行う。

3　事務等の効率化・合理化に関する目標
機構における事務組織について，事務局機能の強化を図るとともに，事務局と各機関間の一層の連携強化により，効率的な体制を構築する。

III　財務内容の改善に関する目標
1　外部研究資金，寄附金その他の自己収入の増加に関する目標
外部研究資金その他の自己収入の効果的な確保と増加を図るための基盤を強化する。

2　経費の抑制に関する目標
適切な財政基盤の確立の観点から，業務・管理運営等の見直しを行い，効率的かつ効果的な予算執行を行う。

3　資産の運用管理の改善に関する目標
資産の効率的かつ効果的な運用管理を行う。

IV　自己点検・評価及び当該状況に係る情報の提供に関する目標
1　評価の充実に関する目標
国際的に優れた研究成果を上げるため，研究体制，共同利用・共同研究体制や業務運営体制について，様々な機構外の者の意見を反映させ，適宜，見直し，改善・強化するために自己点検，外部評価等を充実する。

2　情報公開や情報発信等の推進に関する目標
本機構の実情や果たしている機能，運営内容や研究活動について，広く国内外に分かりやすい形で示すように適切かつ積極的に情報公開や情報発信を行う。

V　その他業務運営に関する重要目標
1　施設設備の整備・活用等に関する目標
本機構の施設設備に係る基本方針及び長期的な構想に基づき，キャンパスマスタープランの充実を図り，既存施設の有効活用や計画的な維持管理を含めた効率的かつ効果的な施設マネジメントを行う。

2　安全管理に関する目標
事故及び災害を未然に防止するため，広く安全管理・危機管理体制の強化を図り，役職員の意識向上を通じた安全文化の醸成に取り組む。また，職員の健康を増進することにより，快適な職場環境創りに積極的に取り組むとともに，情報セキュリティポリシーに基づき，適切な情報セキュリティ対策を行う。

3　法令遵守等に関する目標
研究不正の防止，研究費不正の防止に係る管理責任体制の整備を図るとともに，研究者倫理に関する研修等の充実により，法令遵守を徹底する。

9-14　大学共同利用機関法人自然科学研究機構中期計画(第三期, 平成 28 ～ 34 年度)
(VI 以降を省略)

Ⅰ　研究機構の教育研究等の質の向上に関する目標を達成するためにとるべき措置
1　研究に関する目標を達成するための措置
（1）研究水準及び研究の成果等に関する目標を達成するための措置
① 大学共同利用機関法人自然科学研究機構（以下「本機構」という。）は，天文学，核融合科学，分子科学，基礎生物学，生理学の各分野（以下「各分野」という。）における拠点的研究機関（以下「機関」という。）の役割と機能を更に充実させ，国際的に高い水準の研究成果を上げる。【1】
② アストロバイオロジーセンターにおいて，第一線の外国人研究者の招へい，若手研究者の海外派遣に取り組むとともに，大学等と連携して国際的かつ先端的な共同利用・共同研究を推進し，当該分野の国際的研究拠点を形成する。【2】
③ 機関の枠を超え，異分野連携による新分野の創成を恒常的に担う新分野創成センターにおいて，新分野の萌芽促進及び分野間連携研究プロジェクト等を通じた次世代の学問分野の育成を行う。また，既存のブレインサイエンス研究分野及びイメージングサイエンス研究分野を融合発展させた次世代生命科学センター（仮称）を平成 30 年度に創設する。併せて，機構の５機関による機関間連携ネットワークによる共同利用・共同研究事業を推進し，新分野の萌芽を見出だす基盤を整備するとともに，新たな研究者コミュニティの形成を促す。【3】

各分野の特記事項を以下に示す。

（国立天文台）
① すばる望遠鏡及び超広視野主焦点カメラ（HSC）を用いて，従来の約 10 倍の天域にわたって遠方宇宙を探査することにより，天体の形成過程や宇宙の大規模構造の起源についての研究を推進する。また，太陽系及び太陽系外の惑星形成領域を観測するための装置（分光器，撮像器等）を開発し，惑星の形成過程や，太陽系外惑星の性質についての研究を推進する。第３期中期目標期間終了時までに，次世代観測装置として超広視野主焦点分光器を東京大学等と共同で開発し，初期宇宙，銀河の進化，暗黒物質，暗黒エネルギー等の研究を推進する。【4】
② アジア，北米，欧州の国際共同科学事業であるアタカマ大型ミリ波サブミリ波干渉計（アルマ望遠鏡）を用いて，太陽系外の惑星形成や銀河形成の解明に取り組むとともに，生命の起源に関する様々な物質の探査を行う。アルマ望遠鏡の運用継続のため国際分担責任を果たすとともに，第３期中期目標期間終了時までに，次世代のバンド１受信機 66 台の組立てを完了する。【5】
③ 日米中印加の国際共同事業である 30m 光学赤外線望遠鏡（TMT）の建設を推進し，日本の役割として望遠鏡本体構造の製作，主鏡分割鏡の製造及び一部研磨加工，第一期観測装置の製作を行う。【6】
④ 大型望遠鏡，次世代観測装置，超高速計算機等の開発研究，整備及び運用を行い，科学技術の発展向上に寄与する。このため全国の大学等と先端的開発研究を進める。【7】
⑤ 地上からの天文学（地上に設置した望遠鏡やスーパーコンピュータを用いた研究）の推進を軸として，将来の観測装置開発のための基礎的技術研究を推進し，新たな科学技術の基盤の創成に寄与する。【8】
⑥ 東アジア地域の大学・天文学研究機関との連携を強化するため，東アジア天文台の運用（望遠鏡の共同運用）や若手研究者の育成（研究員の受入れ等）を共同で行う。【9】

（核融合科学研究所）
① ヘリカル方式の物理及び工学の体系化と環状プラズマの総合的理解に向けて，大型ヘリカル装置（LHD）の更なる性能向上を目指し，プラズマ制御，加熱及び計測機器，並びに安全管理設備の整備を進めて，重水素実験を実施する。これにより，第３期中期目標期間終了時までに，イオン温度１億 2,000 万度を達成し，核融合炉に外挿可能な超高性能プラズマを実現する。また，重水素放電におけるイオンの内部輸送障壁形成や粒子リサイクリング特性等に関する水素同位体効果を，共同研究を基盤とする学術研究により検証する。【10】
② プラズマシミュレータ（スーパーコンピュータシステム）を有効活用して，数値実験炉の構築に向けたコアプラズマから周辺プラズマ・プラズマ対向壁までを含むシミュレーションコードの整備・拡張・高精度化及び統合化のための研究を進めるとともに，平成 31 年度中において，プラズマシミュレータの性能を現行機種と比べて４倍以上に向上させ，それに対応した各種３次元コードの最適化を行う。また，平成 31 年度までに，コアプラズマにおける乱流輸送のモデル化と統合輸送コードへの組み込み，第３期中期目標期間終了時までに，各種輸送コードに複数イオン種効果を取り込む。さらに，第３期中期目標期間終了時までに，タングステンを中心とするプラズマ対向材の物性値評価に必要であるプログラミングの改善や新たなモデルの構築により分子動力学的シミュレーション技法を開発する。並行して，上記目標を達成するための支援研究として，LHD プラズマを始めとする磁場閉じ込めプラズマの３次元平衡，輸送，不安定性，非線形発展についての実験結果との照合によりコードの完成度を高めるとともに，関連する基礎物理等に関するシミュレーション研究を行う。【11】
③ 核融合炉の早期実現を目指し，平成 28 年度でヘリカル炉の概念設計をまとめ，各開発課題の数値目標を具体化する。炉設計の精密化の推進，それと連動した基幹機器の高性能化と高信頼性，規格基準の確立に向けた開発研究を推進することにより，第３期中期目標期間終了時までに，大型高磁場超伝導マグネットと先進ブランケットシステムの実規模試作の工学設計をまとめるとともに，ヘリカル炉に向けた学術研究ロードマップを報告書にまとめる。並行して，第２期で立ち上げた大型設備である「熱・物質流動ループ」や「大口径強磁場導体試験装置」等の拡充と拠点化による国内外との共同研究の機能強化，及び規格・基準構築に向けての知見の集積化による核融合工学の体系化と学際研究への寄与を図るとともに，関連技術の産業界への展開・促進を図る。【12】

（基礎生物学研究所）
① 多様な生物現象の基本原理を解明するために，最先端解析技術を用いて，細胞の構造・機能，発生・分化，神経系の働きや行動の制御，共生，進化，外部環境に対する応答等の機構を研究する。遺伝子やタンパク質解析技術や多様な先端顕微鏡によるバイオイメージング技術の高度化を進め，分子から個体レベルで統合的に解明することによって，世界を先導する独創的な生物学研究を推進する。【13】
② 社会性や共生といった高次な生物現象を研究するために適した数種の新規生物種の繁殖及び遺伝子改変技術を確立し，生物資源を充実させる。【14】
③ バイオイメージング関連施設の国内ネットワークの構築，欧米を含む国際ネットワークへの参加を第３期中期目標期間終了時までに実現する。【15】

（生理学研究所）
① 生体の働きを担う機能分子の構造と動作･制御メカニズム及び細胞機能への統合，代謝調節･循環調節等の動的適応性の遺伝子･分子・細胞的基盤，循環や脳神経情報処理機構の構造的及び分子・細胞的基盤等の解明を目的とする研究を行うとともに，これらの病態への関わりを研究する。【16】

② 認知・行動・感覚などの高次脳機能の脳内メカニズム，心理現象のメカニズムや社会的行動等の神経科学的基盤の解明に迫る。そのための革新的脳情報抽出手法及び神経活動やネットワーク機能の操作手法の導入・改良を行う。【17】
③ 脳－人体の働きとそのしくみについて，分子から個体を統合する空間的・時間的関連，及び多臓器連関の統合的理解のため，7テスラ超高磁場 MRI によるイメージング等の生体情報計測技術の高度化を行う。また，新規パラメータの取得法や，大規模データ解析法の開発を行う。【18】

（分子科学研究所）
① 量子力学，統計力学，分子シミュレーション等の理論的・計算化学的方法により，小分子系から生体分子，ナノ物質などの高次複雑分子系に至る様々な分子システムの構造･性質とその起源を解明するとともに，新たな機能開拓に向けた研究を行う。【19】
② 光分子科学の新たな展開を可能とする様々な波長域や高強度の光・電磁波を得るための高度な光源の開発及び先端的な分光法の開発を行うとともに，分子システムに内在する相互作用と高次機能発現機構の解明や高次機能と動的挙動の光制御に関する研究を行う。【20】
③ 多様な分子計測法を駆使して金属錯体，ナノ物質，生体分子とそのモデル系が示す高次機能や協同現象に対する分子レベルの機構解明に関する研究を行うとともに，新規な電気的・磁気的・光学的特性や高効率な物質変換・エネルギー変換を目的とした新たな分子物質や化学反応系の設計・開発を行う。【21】

（2）研究実施体制等に関する目標を達成するための措置
① 学術研究推進の基本である各研究者の自由な発想による挑戦的な研究活動を促進するため，新たな方向性を探る研究や学際的研究を推進する研究グループの形成支援，若手研究者の支援，競争的資金の獲得支援，国際的環境の整備等を強化する。【22】
② 該当する各機関が行う大型プロジェクトに関しては，プロジェクトを適切に推進するための体制構築及びその不断の点検を実施するとともに，リーダーやプロジェクトマネージャーなど推進体制を見直す。また，プロジェクトの達成目標に関し，研究者コミュニティの意見を踏まえ，各機関の運営会議等において迅速且つ適切な意思決定を行う。また，プロジェクトの推進に当たっては，立地する地元自治体や地元住民の理解を得て進めることが必要不可欠であることから，市民との懇談会や地元自治体との密な協議を通したリスクコミュニケーションを着実に実施する。【23】
③ アストロバイオロジーセンターにおいては，系外惑星探査，宇宙生命探査，装置開発の各プロジェクト推進のために，海外機関から最先端の研究者を招へいするなど，国内外の第一線の研究者の配置及び研究支援体制の構築により，国際的かつ先端的な研究を推進できる体制を整備する。当該研究拠点の外国人研究者の割合を，第３期中期目標期間終了時までに 20％以上とする。
新分野創成センターにおいては，恒常的な新分野の萌芽促進及び育成の仕組みを整備する。また，既存の研究分野について，新たな学問動向を踏まえて融合発展を図る等の見直しを行うことができる体制を整備する。【24】

２　共同利用・共同研究に関する目標を達成するための措置
（1）共同利用・共同研究の内容・水準に関する目標を達成するための措置
① 各機関の我が国における各研究分野のナショナルセンターとしての役割を踏まえ，国際的かつ先端的な共同利用・共同研究を推進し，一層の機能強化につなげる。公募型の共同利用・共同研究については，申請から審査，採択，成果報告・公表，分析に至るまでを統合的に管理する自然科学共同利用・共同研究統括システム（NINS Open Use System：NOUS）（仮称）の基盤を平成 31 年度までに整備し，第３期中期目標期間終了時までに共同利用・共同研究の成果内容・水準を把握するとともに，大学の機能強化への貢献度を明らかにする。【25】
② 自然科学大学間連携推進機構（NINS Interuniversity Cooperative Association：NICA）（仮称）を構築し，各機関における個別の大学間連携を集約し，より広くかつ柔軟に大学の研究力強化を推進する。【26】
③ 頭脳循環拠点の機能を強化し，優秀な若手研究者の育成と活発な人材交流を通して新たな分野を大学で展開させるなど，大学の機能強化に貢献する。【27】

各分野の特記事項を以下に示す。

（国立天文台）
天文学分野において，研究者コミュニティの意見をとりまとめ，その総意に基づいて，大型研究基盤施設及び設備の建設・開発・運用を行うとともに，国内観測拠点の整理・統合を進める。アルマ望遠鏡の使用に関する東アジア地域の窓口機関として，日本を含む東アジア地域の研究者に対し，観測提案の準備，観測データ解析，論文化等の支援を行う。自然科学大学間連携推進機構（仮称）の一環として，光学赤外線分野及び電波 VLBI 分野等における大学間連携を促進し，全国の大学等及び海外の研究機関等が保有する観測装置を連携させた共同利用･共同研究システムを構築するなど，大学等における天文学･宇宙物理学の発展に貢献する。さらに，共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため，すばる望遠鏡の共同利用率を 90％に，天文シミュレーションシステムの共同利用率を 100％に維持する。【28】

（核融合科学研究所）
LHD による重水素プラズマ実験，プラズマシミュレータによる大規模シミュレーション及び大型試験設備を活用した炉工学研究を高度な共同利用・共同研究として国内外に展開する。国内においては，その質を上げること，国外については，その機会を増やすことを目標とする。自然科学大学間連携推進機構（仮称）の一環としての双方向型共同研究を始めとする大学間ネットワークを整備・活用した共同研究を先導することにより，大学からの研究成果創出に資する。２国間・多国間協定に基づく連携事業については限られた予算の中で研究計画を重点化し，より高い成果を目指す。国際熱核融合実験炉（ITER）等の国際事業に対しても，卓越した研究拠点として連携協定の下，大学とともに核融合科学研究所が知見を持つ分野で更なる連携協力を図る。また，共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため，大型ヘリカル装置及びプラズマシミュレータの共同利用率を 100％に維持する。【29】

（基礎生物学研究所）
生物機能解析センターの機能を更に高度化し，遺伝子発現や代謝産物の定量的解析，分子や細胞，組織，個体レベルでの時空間動態観察など，統合的な解析を可能にするために，次世代シーケンサーや先端顕微鏡などの設備の高度化，技術支援員などの充実を図る。また，共同利用・共同研究の一部を国際的にも開かれたものとし，第３期中期目標期間中に 20 件程度の国際共同利用・共同研究を実施する。
自然科学大学間連携推進機構（仮称）の一環として，大学サテライト７拠点との連携により，生物遺伝資源のバックアップ保管数を毎年度対前年度比で約 10％程度増加させる。また新規生物遺伝資源保存技術開発共同利用研究を年間 10 件程度採択するとともに，凍結保存カンファレンスを定期開催（第３期中期目標期間中に６回）し，生物学・材料科学・有機合成化学の異分野間連携を推進する。さらに得られた成果を中心に保存技術講習会を大学サテライト拠点と共同で開催する。大学間連携による昆虫，海生生物など新規モデル生物開発拠点を形成し，特徴ある生物機能をもつ生物をモデル化することにより，新たな生物機能の解明を目指す研究を推進する。さらに，共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため，大型スペクトログラフの共同利用率を 90％に維持する。また，先端バイオイメージング支援プラットフォーム（光学顕微鏡技術支援，画像解析技術支援等）の形成などを通じて，生命科学を包括した支援体制を構築し，我が国の当該分野の高度化及び国際ネットワーク形成を推進する。【30】

（生理学研究所）
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）
先端的な放射光光源やレーザーを用いた光科学実験装置，分子計算に最適化された大型計算機，種々の先端的分子計測装置を整備・強化し，それらを用いた分子システムの構造・機能・物性等の研究に対する高度な共同利用・共同研究を国際的に推進する。総合的及び融合的な新分野として，協奏分子システム研究センターにおいて新たな機能を持つ分子システムを創成するとともに，その機能解析のための新たな分子科学計測手法を開拓する共同研究拠点を形成する。また，共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため，極端紫外光研究施設（UVSOR）の共同利用率を 85％に，分子シミュレータの共同利用率を 100％に維持する。【32】

（分野連携型センター）
機構における新たな学問分野の創出を目指し，新分野の探査・萌芽促進・育成を担う新分野創成センター並びに国際的共同研究拠点を目指すアストロバイオロジーセンター及び次世代生命科学センター（仮称）等を設置し，共同利用・共同研究，各種研究プロジェクトの実施等に取り組む。また，岡崎３機関が共同運営する岡崎統合バイオサイエンスセンターについては，バイオネクストプロジェクト及びオリオンプロジェクトを推進してその機能を強化した上で，岡崎３機関の関連部門も含めた必要な組織改革を行い，平成 30 年度に創設する次世代生命科学センター（仮称）の中核組織として再編・統合する。【33】

（２）共同利用・共同研究の実施体制等に関する目標を達成するための措置
① 自然科学共同利用・共同研究統括システム：NOUS（仮称）を構築し，大学の機能の強化への貢献度を把握するため，各機関の IR 機能の連携による機構全体の IR 機能体制の整備を行う。【34】
② 自然科学大学間連携推進機構：NICA（仮称）を通じ，大学との緊密な連携の下に，天文学，核融合科学，分子科学，基礎生物学，生理学の各分野における大学の研究力強化に貢献するため，平成 30 年度までに，資源配分や支援内容の総合的な意見集約のシステムを構築する。【35】

３　教育に関する目標を達成するための措置
（１）大学院等への教育協力に関する目標を達成するための措置
① 総合研究大学院大学（以下「総研大」という。）との連係協力に関する協定に基づき，また，機構長の経営協議会への参加，教育担当理事のアドバイザリーボードへの参加等を通じて緊密に連係し，大学共同利用機関としての最先端の研究設備，各分野の基礎研究を支える基盤的設備等の研究環境を活かし，世界の一線で活躍できる若手研究者を育成すると同時に，学術の広範な知識を備え将来様々な分野で活躍するための総合的な能力及び高い研究倫理を大学院生に涵養する。そのため，下記の基盤機関において，それぞれ特色ある大学院教育を実施する。
◆国立天文台（天文科学専攻）
◆核融合科学研究所（核融合科学専攻）
◆基礎生物学研究所（基礎生物学専攻）
◆生理学研究所（生理科学専攻）
◆分子科学研究所（構造分子科学専攻・機能分子科学専攻）【36】
② 全国の国公私立大学の大学院教育に寄与するため，特別共同利用研究員，連携大学院などの制度を通じて大学院教育を実施する。【37】

（２）人材育成に関する目標を達成するための措置
① 総研大との密接な連係・協力によって，国内外より優秀な大学院生の受け入れを促進するとともに，国費の支援を受けた学生以外の学生に対するリサーチアシスタント制度の適用率を 90％以上に維持する。
海外の大学・研究機関と協定し，国際インターンシップなどにより，第３期中期目標期間において第２期を上回る学生，若手研究者を受け入れる。また，総研大の学生及びこれに準じた体系的な教育プログラムを履修する学生は，学位取得までの間に１回以上，海外での国際会議への参加又は研修を受けることとする。さらに，外国人留学生や若手研究者の就学，研究のサポート体制を充実するため，英語による就学・研究活動に関する各種情報提供及び外部資金獲得に関する支援を行う。【38】
② 海外の学生，若手研究者に教育・研究の場を提供するため，サマー・ウィンタースクールなどの研修会・教育プログラム等を毎年度５回以上実施する。また，中高生などの次世代の科学への関心を高めるため，毎年度５名程度，選考によって選んだ若手研究者による公開講演会を行う。【39】
③ 世界トップレベルの研究機関への若手研究者の派遣や，30 歳前後の若手研究者に独立した研究室を与える「若手独立フェロー制度」や研究費助成を通じた若手研究者支援により，人材育成の取組を一層強化する。【40】

４　社会との連携及び社会貢献に関する目標を達成するための措置
① 機構及び各機関がそれぞれの地域などと協力して，出前授業，各種の理科・科学教室への講師派遣を行うなど，理科教育を通して，国民へ科学の普及活動を強化するとともに，地域が求める教育研究活動に貢献する。【41】
② 社会人学び直しなどの生涯教育を通じた社会貢献を目的として，専門的技術獲得のためのトレーニングコースや，小中学校の理科教員を対象とした最新の研究状況を講演するセミナーを実施する。【42】
③ 民間等との共同研究や受託研究等を受け入れるとともに，最先端の研究成果や活用可能なコンテンツについて，産業界等との連携を図り技術移転に努めるとともに，第３期中期目標期間終了時において，基礎的な自然科学が産業界のイノベーションに如何に貢献したかに関する実績を取りまとめ，社会へ発信する。【43】

５　その他の目標を達成するための措置
（１）グローバル化に関する目標を達成するための措置
① 機構長のリーダーシップの下，機構が締結した国際交流協定等に基づき，グローバル化の進展に対応した国際的拠点形成のための研究者交流事業や国際共同事業を推進する。【44】

② 各機関においては，各機関が締結した国際交流協定などに基づき，海外の主要研究拠点との研究者交流，共同研究，国際シンポジウム及び国際研究集会等をそれぞれ毎年度１回以上開催し，連携を強化する。【45】
③ 国内外の優秀な研究者を集め，国際的な研究機関として広い視点を取り込むため，外国人研究者の採用を促進し，外国人研究者の割合を第３期中期目標期間終了時までに 8% に引き上げる。【46】
④ 国際間の研究交流を促進するため，及び第一線の国際的研究者の能力を活用するため，外国人研究者の招へいを６年間で約 20% 増加させる。【47】
⑤ 機構の研究活動の国際的評価や国際共同事業等の推進のため，ネット会議等の利用を含めた国際的な会議・打合せの回数を６年間で約 20% 増加させる。【48】
⑥ 本機構のグローバリゼーションを推進するための基盤を整備するため，来訪外国人の要望にきめ細かく対応した外国人研究者の宿泊施設の確保やサポートスタッフの拡充などを行う。【49】

（２）大学共同利用機関法人間の連携に関する目標を達成するための措置
４大学共同利用機関法人間の連携を強化するため，大学共同利用機関法人機構長会議の下で，計画・評価，異分野融合・新分野創成，事務連携などに関する検討を進める。特に，４機構連携による研究セミナー等の開催を通じて異分野融合を促進し，異分野融合・新分野創成委員会において，その成果を検証して次世代の新分野について構想する。また，大学共同利用機関法人による共同利用・共同研究の意義や得られた成果を４機構が連携して広く国民や社会に発信する。【50】

Ⅱ　業務運営の改善及び効率化に関する目標を達成するためにとるべき措置

１　組織運営の改善に関する目標を達成するための措置
① 社会のニーズを的確に反映し，幅広い視点での自立的な運営改善に資するため，経営協議会及び教育研究評議会からの指摘事項等への対応を１年以内に行うとともに，フォローアップを毎年度実施する。【51】
② 専門分野ごと又は境界領域・学際領域ごとに，外部評価における提言や外部の学識経験者からの指導・助言に基づき，指摘から１年以内に，研究活動計画，共同利用・共同研究等における重要事項の改善を行う。【52】
③ 機構長のリーダーシップの下で機構の強みや特色を生かし，教育，研究，社会貢献の機能を最大化できるよう，権限と責任が一致した意思決定システムの確立や，法人運営組織の役割分担を明確化するとともに，新たに対応が求められる事案については，担当理事を明確化する。また機構長を補佐する体制の強化を図る。【53】
④ 監事機能の強化を図るとともに，サポート体制を強化するため，監事が機構長選考方法や法人内部の意思決定システムをはじめとした法人のガバナンス体制等についても監査するとともに，内部監査組織と連携する。【54】
⑤ 優秀な若手・外国人の増員や研究者の流動性向上などにより教育研究の活性化を図るため，クロスアポイントメントを含む混合給与及び研究教育職員における年俸制の活用による人事・給与システムの弾力化に取り組む。特に，年俸制については，業績評価体制を明確化し，退職手当に係る運営費交付金の積算対象となる研究教育職員について年俸制導入等に関する計画に基づき促進し，年俸制職員の割合を第３期中期目標期間終了時までに全研究教育職員の 25% 以上に引き上げる。また，若手研究者の割合は，第３期中期目標期間中において全研究教育職員の 35% 程度を維持する。【55】
⑥ 職員の研究に対するインセンティブを高めるため，職員の適切な人事評価を毎年度行い，問題点の把握や評価結果に応じた処遇を行う。また，URA（University Research Administrator）などの高度な専門性を有する者等，多様な人材の確保と，そのキャリアパスの確立を図るため，URA と研究教育職員等との相互異動など多様な雇用形態のロールモデルを構築する。【56】
⑦ 技術職員，事務職員の資質と専門的能力の向上を図るため，職能開発，研修内容を充実するとともに，自己啓発の促進並びに研究発表会，研修等への積極的な参加を促す。事務職員については，機構全体を対象として，各役職・業務に応じた研修を毎年度５回以上実施する。【57】
⑧ 女性研究者を積極的に採用し，女性研究者の割合を第３期中期目標期間終了時までに 13% に引き上げる。また，新たな男女共同参画推進アクションプログラムを設定・実行することにより，男女共同参画の環境を整備・強化する。さらに，出産，育児，介護支援など様々なライフステージにおいて柔軟な就労制度を構築する。【58】

２　教育研究組織の見直しに関する目標を達成するための措置
① 各分野の研究動向の詳細な把握の上で，機構長のリーダーシップの下，機構長を議長とした研究基盤戦略会議において，機能強化及び資源の再配分の方針の策定を行うとともに，新たな組織の運営の評価を行い，機能強化を強力に推進する。【59】
② 研究基盤戦略会議における機能強化の方針，資源の再配分を始めとした組織改革の方針に基づき，各機関等において，教育研究組織の再編・改革等を行う。【60】

３　事務等の効率化・合理化に関する目標を達成するための措置
事務局と各機関及び他機構の事務部門との連携を強化し，事務の共同実施等による事務処理の効率化を進める。また，テレビ会議システムによる会議開催を促進し，機構内会議に占めるテレビ会議の比率を，前年度比１以上とする。さらに，経費の節減と事務等の合理化を図るため，第３期中期目標期間終了時までに，すべての機構内会議においてペーパーレス化を導入する。【61】

Ⅲ　財務内容の改善に関する目標を達成するためにとるべき措置

１　外部研究資金，寄附金その他の自己収入の増加に関する目標を達成するための措置
外部研究資金の募集等の情報を広く収集し，周知を徹底することにより，応募，申請を促し，受託研究等収入，共同研究等収入，寄附金収入，科学研究費助成事業収入など多様な収入源を確保する。【62】

２　経費の抑制に関する目標を達成するための措置
人件費以外の経費について，増減要因の分析を踏まえ，毎年度，経費の節約方策を定める。また，不使用時の消灯やペーパーレスなど経費の節減に関する教職員の意識改革を行う。さらに，各機関や他大学等の節約方法に関する情報の共有化を通じ，経費の削減につなげる。【63】

３　資産の運用管理の改善に関する目標を達成するための措置
① 固定資産について，各機関の使用責任者による実地検査を行い，６年間ですべての資産の実地検査を行う。また，資産管理部署においても使用状況を定期的に検証し，利用率の低い資産や所期の目的を達した資産については，機構全体的な観点から活用方策を検討するなど，資産の不断の見直しを行う。【64】
② 機構直轄管理の施設の運用促進に取り組むとともに，これまでの運用状況を踏まえ，将来に向けた運用計画を検討し，平成 30 年度までに，運用継続の可否を含めた結論を得る。【65】

Ⅳ　自己点検・評価及び当該状況に係る情報の提供に関する目標を達成するためにとるべき措置

１　評価の充実に関する目標を達成するための措置

① 国際的見地から研究体制及び共同利用・共同研究体制について，様々な機構外の者の意見を反映させ，定期的に自己点検及び外部評価等を実施し，その結果を広く公開するとともに，当該意見に応じて見直しを行う。【66】

② 本機構の業務運営を改善するため，各機関の IR 機能の連携により機構全体の IR 機能を強化するとともに，平成 30 年度に機構全体の自己点検及び外部評価等を実施し，その結果を広く公開する。【67】

２　情報公開や情報発信等の推進に関する目標を達成するための措置

機構シンポジウムを毎年度２回実施するとともに，ホームページ，プレスリリース，定期刊行物などの充実や，一般公開の実施を通して，本機構の研究を含む諸活動の状況を，積極的に社会に発信する。特に，国際化の観点から，英文のホームページを更に充実させ，そのアクセス数を増やすとともに，海外へのプレスリリース件数を６年間で 20% 増加するなど，多様な伝達手段を活用し，海外への情報発信をより積極的に行う。【68】

Ⅴ　その他業務運営に関する重要目標を達成するためにとるべき措置

１　施設設備の整備・活用等に関する目標を達成するための措置

① グローバル化の推進やイノベーションの創出など教育研究の質の向上の観点から，国の財政措置の状況を踏まえ，キャンパスマスタープランの年次計画に沿った研究施設・設備等の充実を図る。【69】

② 施設マネジメントポリシーの点検・評価に基づき，重点的かつ計画的な整備を進め，施設整備の見直しを毎年度実施し，施設の効率的かつ効果的な活用を図る。【70】

③ 施設・設備の安全性・信頼性を確保し，所要の機能を長期間安定して発揮するため，計画的な維持・保全を行う。【71】

２　安全管理に関する目標を達成するための措置

① 施設・設備及び機器の安全管理，教育研究及び職場環境の保全並びに毒物劇物，放射性同位元素，実験動物，遺伝子組み換え生物等の適正な管理を行うため，既存の安全管理・危機管理体制を検証し，体制の見直しを行う。また，関係行政機関との防災に係る相互協力体制を確立させ，毎年度，連携した訓練を行う。【72】

② 職員の過重労働及びそれに起因する労働災害を防止するため，労働災害の要因調査・分析を行うとともに，メンタルヘルスケアのためのストレスチェック及び講習会を毎年度実施する。【73】

③ 情報システムや重要な情報資産への不正アクセスなどに対する十分なセキュリティ対策を行うとともに，セキュリティに関する啓発を行う。また，本機構のセキュリティポリシーや規則などを毎年度見直し，それらを確実に実行する。【74】

３　法令遵守等に関する目標を達成するための措置

① 職員就業規則などの内部規則の遵守を徹底するため，幹部職員を含む全職員を対象とした服務規律やハラスメント等に関する研修を毎年度実施する。【75】

② 研究活動における不正行為及び研究費の不正使用を防止するため，組織の管理責任体制を明確化し，e ラーニングによる研究倫理教育，各種啓発活動の実施，競争的資金等の不正使用防止に係るコンプライアンス教育等を毎年度実施するとともに，その効果を定期的に検証し，実効性を高める。【76】

9-15　大学共同利用機関法人自然科学研究機構年度計画（平成 31 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 年度に掲げた研究力強化の将来構想に沿った活動を引き続き推進する。具体的には，将来構想において４つの柱として掲げた①国際的先端研究の推進支援，②国内の共同利用・共同研究の推進支援，③国内外への情報発信・広報力強化，④若手・女性・外国人研究者の支援に加え，IR による戦略立案，「研究大学コンソーシアム」の活動の充実を進め，機構及び大学の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】太陽系外惑星の探査，大気の観測・分析，生命探査装置の開発のために，世界的にも第一人者である招へい外国人研究者を継続雇用する。また，当該外国人研究者等を窓口とした新たな外国人研究者及び海外アストロバイオロジー研究機関との交流，センター若手研究者の海外研究所，観測所，国際研究会への派遣を引き続き行い，連携基盤を形成し，宇宙生命探査の国際的研究拠点形成を推進する。

・【2–2】系外惑星及び宇宙生命のための連携拠点を国内の大学に設けるとともに，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，マックスプランク研究所のほか，新たにカリフォルニア工科大学等とも連携した国際的研究拠点形成を引き続き進める。

【3】機関の枠を超え，異分野連携による新分野の創成を恒常的に担う新分野創成センターにおいて，新分野の萌芽促進及び分野間連携研究プロジェクト等を通じた次世代の学問分野の育成を行う。また，既存のブレインサイエンス研究分野及びイメージングサイエンス研究分野を融合発展させた次世代生命科学センター（仮称）を平成 30 年度に創設する。併せて，機構の５機関による機関間連携ネットワークによる共同利用・共同研究事業を推進し，新分野の萌芽を見出だす基盤を整備するとともに，新たな研究者コミュニティの形成を促す。

・【3–1】新分野創成センターに平成 30 年度に設置した「先端光科学研究分野」及び「プラズマバイオ研究分野」において，異分野融合研究を推進するとともに，新分野探査室において，新分野の創成に向けた検討を継続して実施する。

・【3–2】平成 30 年度に創設した「生命創成探究センター」において，研究体制の強化を図りつつ，生命科学の幅広い分野にまたがる融合研究を展開し，その活動を発展させる。

・【3–3】機構の各機関によるネットワーク型研究加速事業において，機関間連携による共同研究を推進するとともに，人材育成に関するプログラムや研修会の実施等に取り組む。

各分野の特記事項を以下に示す。

（国立天文台）

【4】すばる望遠鏡及び超広視野主焦点カメラ（HSC）を用いて，従来の約 10 倍の天域にわたって遠方宇宙を探査することにより，天体の形成過程や宇宙の大規模構造の起源についての研究を推進する。また，太陽系及び太陽系外の惑星形成領域を観測するための装置（分光器，撮像器等）を開発し，惑星の形成過程や，太陽系外惑星の性質についての研究を推進する。第３期中期目標期間終了時までに，次世代観測装置として超広視野主焦点分光器を東京大学等と共同で開発し，初期宇宙，銀河の進化，暗黒物質，暗黒エネルギー等の研究を推進する。

・【4–1】すばる望遠鏡及びその主力観測装置である超広視野主焦点カメラ（HSC）を安定して運用し，戦略枠プログラムをはじめとした共同利用観測を推進する。HSC の戦略枠プログラム等のデータ解析・配信については引き続き天文データセンターとハワイ観測所が協力して行う。また，すばる望遠鏡の特長を活かす，超広視野主焦点分光器（PFS）については，装置受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。PFS の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，国際共同運用の骨子作りを行う。

【5】アジア，北米，欧州の国際共同科学事業であるアタカマ大型ミリ波サブミリ波干渉計（アルマ望遠鏡）を用いて，太陽系外の惑星形成や銀河形成の解明に取り組むとともに，生命の起源に関する様々な物質の探査を行う。アルマ望遠鏡の運用継続のため国際分担責任を果たすとともに，第３期中期目標期間終了時までに，次世代のバンド１受信機 66 台の組立てを完了する。

・【5–1】アルマ望遠鏡の運用・保守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。７月２日の南米での皆既日食に伴い各国からチリに来る市民を対象に，施設見学会を行う。

【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望遠鏡本体構造の製造図面作成を継続し，材料調達に着手する。また，主鏡分割鏡材を 18 枚以上製作するとともに，研磨加工，外形加工，支持機構への搭載を実施する。第一期観測装置 IRIS 撮像系の詳細設計・関連する開発を推進する。TMT の建設を担う TMT 国際天文台の共通経費を分担し，現地建設作業を推進するとともに，国際協力で科学研究や観測装置計画の検討を進める。運用期に向けた大学共同利用・共同研究の準備として，すばる望遠鏡との一体運用に向けた検討も進める。

【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，KAGRA に必要な機器のインストール完了及び，KAGRA の観測運転開始に貢献する。また，観測運転後のアップグレードにむけ，防振系，補助光学系をはじめとした様々な装置の開発・検討を進める。

・【7–2】平成 31 年度中に重力波の国際共同観測へ参加することを目指して，KAGRA の運転性能の検証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】天文シミュレーション用の演算加速器として汎用グラフィックプロセッシングユニット（GPU）を用いた並列計算機システム開発の検討を始める。併せて，GPU に最適化したシミュレーションコードの開発に着手する。

【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，打ち上げに備えた準備を継続する。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，JAXA 宇宙科学研究所のミッション定義フェーズにあるが，そのフェーズで必要な仕様の検討と技術実証実験等を行い，JAXA 公募型小型計画・宇宙科学ミッションとしての実現に向けて準備を進める。

・【8–2】小惑星探査機「はやぶさ２」について，平成 31 年度の小惑星リュウグウ近傍観測においてレーザー高度計（LIDAR）の運用，データ取得，データ解析を行い，衝突実験と２回目以降のタッチダウンによる試料採取，後期運用を支援する。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）のサイエンスについて検討する。

・【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。次期太陽観測衛星計画（SOLAR-C_EUVST）については，国際協力体制の構築に努めながら，JAXA 公募型小型計画・宇宙科学ミッションとしての実現に向けて準備を進める。

・【8–4】平成 30 年度に導入した世界最速の天文学専用スーパーコンピュータ「アテルイ II」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・ソフトウェアの研究・開発を通じ，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し，日本の数値天文学コミュニティ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，研究成果を社会に還元する。

【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。また，若手研究者の育成を目指した EAO fellowship（東アジア天文台博士研究員給費制度）を継続し，EACOA 加盟天文台・研究所のみならず，ハワイにおける研究活動も支援する。

（核融合科学研究所）

【10】ヘリカル方式の物理及び工学の体系化と環状プラズマの総合的理解に向けて，大型ヘリカル装置（LHD）の更なる性能向上を目指し，プラズマ制御，加熱及び計測機器，並びに安全管理設備の整備を進めて，重水素実験を実施する。これにより，第３期中期目標期間終了時までに，イオン温度 1 億 2,000 万度を達成し，核融合炉に外挿可能な超高性能プラズマを実現する。また，重水素放電におけるイオンの内部輸送障壁形成や粒子リサイクリング特性等に関する水素同位体効果を，共同研究を基盤とする学術研究により検証する。

・【10–1】大型ヘリカル装置（LHD）における重水素実験で取得したデータの解析を行い，加熱方法や粒子制御法の最適化を進める。電子サイクロトロン共鳴加熱（ECH）装置の制御システムを高性能化し，イオン温度とともに電子温度も同時に高温となる超高性能プラズマを実現する。同位体効果や，高エネルギー粒子の挙動を解明するために，温度・密度・電位分布とその揺動計測を高度化する。また，今後予定されている長時間放電に対応するための加熱機器を整備する。

【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的シミュレーション技法を開発する。並行して，上記目標を達成するための支援研究として，LHD プラズマを始めとする磁場閉じ込めプラズマの３次元平衡，輸送，不安定性，非線形発展についての実験結果との照合によりコードの完成度を高めるとともに，関連する基礎物理等に関するシミュレーション研究を行う。

・【11–1】数値実験炉の構築に向けて，①コアプラズマから周辺プラズマ・プラズマ対向壁までを含むシミュレーションコード群や使用する物理モデル群の整備・拡張，②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，④重水素実験との連携による水素同位体及び複数イオン種等の効果の解析，⑤コアプラズマにおける乱流輸送のモデルの拡張と統合輸送コードへの組み込み，を進める。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，非線形発展シミュレーション及び関連する基礎物理，データ可視化等に関する研究を行う。

【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，先進的な概念を取り入れつつ，ヘリカル炉の基本設計の改良を段階的に推進する。炉設計研究と要素技術開発研究のリンクの強化を進めながら，①「大口径強磁場導体試験装置」を用いた先進高温超伝導導体試験，②「熱・物質流動ループ」を用いた液体増殖材システムの強磁場下伝熱特性試験，③バナジウム合金，銅合金など高性能材料の改良と機能評価，④超高熱流機器試験体の高性能化・大型化と寿命評価，を重点的に推進する。さらに，第２期で立ち上げた大型試験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，ヘリカル炉の実現に向けた学術研究ロードマップの骨子をまとめる。

（基礎生物学研究所）

【13】多様な生物現象の基本原理を解明するために，最先端解析技術を用いて，細胞の構造・機能，発生・分化，神経系の働きや行動の制御，共生，進化，外部環境に対する応答等の機構を研究する。遺伝子やタンパク質解析技術や多様な先端顕微鏡によるバイオイメージング技術の高度化を進め，分子から個体レベルで統合的に解明することによって，世界を先導する独創的な生物学研究を推進する。

・【13–1】細胞の分化・増殖機構，発生現象を司るメカニズム，新規で多様な形質や共生系の進化，外部環境への適応や恒常性の維持等，生物現象の基盤を成す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。開発が進んでいるイベリアトゲイモリについては，遺伝子改変技術の高度化とトランスクリプトームデータの精度向上を実施し，情報発信を行う。
【15】バイオイメージング関連施設の国内ネットワークの構築，欧米を含む国際ネットワークへの参加を第３期中期目標期間終了時までに実現する。
・【15–1】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通して，国内研究者の支援を推進するとともに，九州，四国地区の研究者が参加しやすいよう，毎年岡崎で開催している画像解析トレーニングコースを熊本大学で開催する。昨年度，正式に参加することとなった国際バイオイメージングネットワーク（GBI）との連携を強化する。

（生理学研究所）
【16】生体の働きを担う機能分子の構造と動作・制御メカニズム及び細胞機能への統合，代謝調節・循環調節等の動的適応性の遺伝子・分子・細胞的基盤，循環や脳神経情報処理機構の構造的及び分子・細胞的基盤等の解明を目的とする研究を行うとともに，これらの病態への関わりを研究する。
・【16–1】生体機能分子の構造と作動機構及び細胞における役割の解明を目指す研究を進める。特に，イオンチャネルの機能調節機構，及び，細胞間結合の構造と機能に関する新規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，味覚調節の神経基盤や，グリア細胞の脳内血管保護作用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，ヒトの３次元形状知覚の計算モデルや，二名のヒトが相互協力している際の脳内機構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改良に向け，大量の連続する電子顕微鏡画像データセットの自動３次元再構築処理システムを導入する。また，新規高効率遺伝子導入ウイルスベクターシステムの開発を行う。
【18】脳－人体の働きとそのしくみについて，分子から個体を統合する空間的･時間的関連，及び多臓器連関の統合的理解のため，７テスラ超高磁場 MRI によるイメージング等の生体情報計測技術の高度化を行う。また，新規パラメータの取得法や，大規模データ解析法の開発を行う。
・【18–1】脳－人体の働きとそのしくみについて，分子から個体を統合する空間的・時間的関連，及び多臓器連関の統合的理解を目指す研究を進める。特に，７テスラ超高磁場 MRI の高い空間解像度と信号雑音比を活用し，社会性に関連の深い脳領域を対象に，個人レベルでの機能及び構造的結合性マップを取得する。

（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】理論・計算分子科学研究領域と協奏分子システム研究センターが連携し，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，機能性分子，タンパク質などの様々な分子システムの電子状態や構造などを解析し光物性や機能の発現機構を解明する。また，生命システムの機能を階層構造の観点から詳しく解析し，その結果を基に，優れた機能を有する分子システムを設計する。
【20】光分子科学の新たな展開を可能とする様々な波長域や高強度の光・電磁波を得るための高度な光源の開発及び先端的な分光法の開発を行うとともに，分子システムに内在する相互作用と高次機能発現機構の解明や高次機能と動的挙動の光制御に関する研究を行う。
・【20–1】光分子科学研究領域とメゾスコピック計測研究センターが連携し，先端的な光源や光計測・制御法の開発を行い，開発した計測，制御法を用いた以下の研究を行う。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，ナノ構造物質のキラル光学特性，光操作の実験研究及び解析を継続するとともに，特徴ある先端的なレーザー光源の生命科学等への応用，更に社会実装に向けた取り組みを行う。また，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継続する。
【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・光触媒・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と特別研究部門の連携により，金属錯体・有機触媒及び生体分子複合体の高次構造・動態・機能の基盤研究，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な基礎学理探求を基盤とし，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・センターにおいて，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や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等を行うとともに，機構本部において，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，戦略的国際研究交流加速事業等を継続し，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・応募書類作成補助等の支援を行う。
【23】該当する各機関が行う大型プロジェクトに関しては，プロジェクトを適切に推進するための体制構築及びその不断の点検を実施するとともに，リーダーやプロジェクトマネージャーなど推進体制を見直す。また，プロジェクトの達成目標に関し，研究者コミュニティの意見を踏まえ，各機関の運営会議等において迅速且つ適切な意思決定を行う。また，プロジェクトの推進に当たっては，立地する地元自治体や地元住民の理解を得て進めることが必要不可欠であることから，市民との懇談会や地元自治体との密な協議を通したリスクコミュニケーションを着実に実施する。
・【23–1】各機関の進めるプロジェクトの特性に応じ，研究者コミュニティの意見を反映させつつ，研究推進体制の見直しを行う。国立天文台では，大型プロジェクトに関して外部委員を含めた科学戦略委員会での議論を継続し，プロジェクト間の連携も含め，柔軟な組織運営を推進する。核融合科学研究所では，大型ヘリカル装置計画プロジェクトについて，国際的な研究ネットワークを活用し，研究課題の募集段階から，より効果的・効率的な実験計画の策定が可能な体制を整える。

・【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か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，平成30年度に台外委員を含めて新たに設置した科学諮問委員会を定期的に開催し，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等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に20%以上とする。新分野創成センターにおいては，恒常的な新分野の萌芽促進及び育成の仕組みを整備する。また，既存の研究分野について，新たな学問動向を踏まえて融合発展を図る等の見直しを行うことができる体制を整備する。（戦略性が高く意欲的な計画）

・【24-1】系外惑星探査プロジェクト室，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の全てに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３室全てに准教授クラスの室長を配置し，アストロバイオロジー分野のより強固な研究基盤を形成する。また，３室の連携を推進するための特任教員，研究者を採用し，組織の拡充を図る。
・【24-2】系外惑星探査プロジェクト室では，すばる望遠鏡，NASA/TESS宇宙望遠鏡等を用いた太陽近傍の地球型惑星探査を本格的に推進する。宇宙生命探査プロジェクト室では，系外惑星における光合成を含む惑星大気の研究を推進する。アストロバイオロジー装置開発室では，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開発研究を継続し，観測装置の設計と基礎開発を推進する。
・【24-3】新分野創成センターに平成30年度に設置した「先端光科学研究分野」及び「プラズマバイオ研究分野」について，恒常的に異分野融合研究を推進する。プラズマバイオ研究分野では名古屋大学・九州大学と共に設立したコンソーシアムの運営を行い，共同研究を推進する。機構の各機関の研究者で構成する新分野探査室において，引き続き新たな学問動向や融合発展に関する検討を継続する。

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に共同利用・共同研究の成果内容・水準を把握するとともに，大学の機能強化への貢献度を明らかにする。（戦略性が高く意欲的な計画）

・【25-1】各機関の研究施設の高性能化・高機能化を進め，より国際的に水準の高い共同利用・共同研究を推進する。
・【25-2】自然科学共同利用・共同研究統括システム（NOUS）における適用分野の更なる拡大を図り基盤整備を完了させるとともに，本格運用に向けた試行・開発を引き続き実施する。さらに，IR機能に係る開発を進める。

【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て，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を図るとともに，大学間連携による各大学の研究力強化に向けた取組について検討し，人材育成プログラム等の具体的な活動を試行的に実施する。

【27】頭脳循環拠点の機能を強化し，優秀な若手研究者の育成と活発な人材交流を通して新たな分野を大学で展開させるなど，大学の機能強化に貢献する。

・【27-1】各機関・センターにおいて，クロスアポイントメント制度やサバティカル制度を活用し，積極的な人材育成，研究の活性化等を図る。また，萌芽的分野を育成するために若手研究者を大学等から採用し，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，大学及び機構の機能強化に資する。

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ザーズ・ミーティング等を開催し，現状分析や天文学の動向を見ながら，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（せいめい望遠鏡）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，平成30年度末より開始した全国共同利用を推進する。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，アルマ望遠鏡や海外の大口径地上望遠鏡等との共同観測を含めた太陽研究を支援する。将来の飛翔体及び大型地上望遠鏡を用いた太陽観測にとって有効となる観測装置の開発を，全国の大学等と協力して，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】大型ヘリカル装置計画プロジェクトにおける国内共同研究について，引き続き一般・LHD 計画・双方向型の三つの制度を活用し，コミュニティの意見を幅広く取り入れる仕組みを維持する。国際共同研究については，新規研究者が LHD 研究に参加しやすくするため，一般共同研究の枠の中に新設したカテゴリである「LHD 国際共同研究」を活用する。これらのシステムを精力的に運用し，LHD の核融合分野における国際的学術拠点としての機能を強化するとともに，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ユーザ向けホームページなど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・高性能化，多角的活用を目指した検討を図る。工学基盤の一層の拡充のため，大型試験設備の活用を促進し，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の大学や民間等との共同研究，国際共同研究の展開を進める。また，文部科学省の核融合科学技術委員会に設置された原型炉開発総合戦略タスクフォースが策定した「原型炉開発に向けたアクションプラン」による原型炉研究開発を進める大学との共同研究を開始し，大学の研究力強化に貢献する。さらに，日米科学技術協力事業において新たに開始する「原型炉ダイバータにおける界面反応ダイナミクスと中性子照射効果（FRONTIER 計画）」の研究を支援する。
・【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，核融合科学研究所と中国・西南交通大学との共同プロジェクトとして中国に建設する新たなヘリカル装置について，西南交通大学と同装置の設計・研究に係る共同研究を進める。さらに，アメリカのウィスコンシン大学及びプリンストン大学と研究機器の共同開発を進め，プリンストン大学とは，LHD における共同実験を進める。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，バックアップ保存の側面からの研究支援を強化するため，生物遺伝資源の新規保存技術の開発を推進する。国際コンファレンス等を通じて，国際共同利用・共同研究の核となる活動を進め，関連研究者のネットワークを更に強化し，拡大する。
・【30–2】IBBP 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，凍結保存コンファレンスを開催し，成果の普及に努めるとともに，サケ科魚類などの保存技術講習会を４回開催する。NICA を通じて従来の学会等による広報とは異なったチャンネルによる大学執行部向けのプロジェクト広報を行う。
・【30–3】多様な顕微鏡，画像解析技術を用い，基本的な画像取得・解析と高度でより先端的な画像取得・解析からなる多層の支援体制を整備し，共同利用・共同研究を推進する。共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため，大型スペクトログラフの共同利用率を 90％に維持する。

（生理学研究所）

【31】分子から細胞，組織，システム，個体にわたる機能生命科学（生理学）及び脳科学分野の共同利用・共同研究拠点としての機能を強化する。年間，共同研究件数 100 件，生理研研究会 20 件を維持する。自然科学大学間連携推進機構（仮称）の一環としての７テスラ超高磁場 MRI 装置等を用いた脳・人体機能イメージングネットワークを構築し，全国の大学等研究機関との共同研究体制を確立する。先端光学・電子顕微鏡を用いた共同研究は，新規の共同研究者を開拓する。研究者へのニホンザルの提供については，安全でユーザーのニーズに沿った付加価値の高い個体の提供を目指し，他機関と協力し，品質信頼性の更なる向上に取り組むとともに，長期的供給体制の整備を継続する。遺伝子改変に用いるウィルスベクターの作成と提供についても更に推進する。また，共同利用研究の国際公募を実施し，国際共同研究を推進する。さらに，共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため，７テスラ超高磁場 MRI 装置の共同利用率を 60% に維持する。また，先端バイオイメージング支援プラットフォーム（電子顕微鏡技術支援，機能的磁気共鳴画像技術支援等）の形成などを通じて，生命科学を包括した支援体制を構築し，我が国の当該分野の高度化を推進する。
・【31–1】年間，共同研究件数 100 件，生理研研究会 20 件を維持する。
・【31–2】７テスラ超高磁場 MRI 装置による計画共同研究において，引き続き共同利用率 60％を目指す。また，ヒトと非ヒト霊長類の種間比較を念頭に，MRI 画像の収集とデータ共有の推進により，国内外研究施設との連携を強化する。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引き続き進める。
・【31–3】岡崎共通研究施設動物実験センターの改修を進め，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開発と共同利用・共同研究に向けた研究環境基盤の構築として，組織改編を行う。
・【31–4】ナショナルバイオリソースプロジェクト（NBRP）「ニホンザル」事業において，京都大学霊長類研究所への代表機関機能の移行を踏まえ，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提供に向け，育成・提供業務の集約化を進める。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】霊長類，齧歯類，魚類，などの特定神経路において，より特異的でかつ高効率な遺伝子導入を可能にするアデノ随伴ウイルスベクター，レンチウイルスベクター等を共同研究者に迅速に提供出来る体制を引き続き維持する。さらに，新しいタイプのウイルスベクターシステムの開発を進める。

・【31-6】三次元走査型電子顕微鏡（3D-SEM）等による画像データの解析速度の向上に向け，大量の連続する電子顕微鏡画像データセットの自動３次元再構築処理システムを導入する。
・【31-7】先端バイオイメージング支援プラットフォーム（電子顕微鏡技術支援，構造及び機能的磁気共鳴画像技術支援等）事業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 を超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。さらに，AMED 事業「戦略的国際脳科学研究推進プログラム」の中核的組織として，脳科学研究の国際対応に関する国内の調整業務を担いつつ，同事業での研究開発推進支援を進める。

（分子科学研究所）
【32】先端的な放射光光源やレーザーを用いた光科学実験装置，分子計算に最適化された大型計算機，種々の先端的分子計測装置を整備・強化し，それらを用いた分子システムの構造・機能・物性等の研究に対する高度な共同利用・共同研究を国際的に推進する。総合的及び融合的な新分野として，協奏分子システム研究センターにおいて新たな機能を持つ分子システムを創成するとともに，その機能解析のための新たな分子科学計測手法を開拓する共同研究拠点を形成する。また，共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため，極端紫外光研究施設（UVSOR）の共同利用率を 85% に，分子シミュレータの共同利用率を 100% に維持する。
・【32-1】極端紫外光研究施設において，共同利用率を 85% 以上に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。最先端設備である運動量分解光電子顕微鏡の開発研究を国際連携によって推進し，実験データの取得を開始する。
・【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。また，装置開発室の共同利用，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。
機器センターにおいては本務共同利用業務に加え，前出プロジェクトを通じ，全国の大学設備の効率的な運用，全国の大学に所属する技術職員等の人材育成，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，触媒反応の反応機構，タンパク質の構造形成･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，安定した計算環境の構築と運用コストの削減を図る。

（分野連携型センター）
【33】機構における新たな学問分野の創出を目指し，新分野の探査・萌芽促進・育成を担う新分野創成センター並びに国際的共同研究拠点を目指すアストロバイオロジーセンター及び次世代生命科学センター（仮称）等を設置し，共同利用・共同研究，各種研究プロジェクトの実施等に取り組む。また，岡崎３機関が共同運営する岡崎統合バイオサイエンスセンターについては，バイオネクストプロジェクト及びオリオンプロジェクトを推進してその機能を強化した上で，岡崎３機関の関連部門も含めた必要な組織改革を行い，平成 30 年度に創設する次世代生命科学センター（仮称）の中核組織として再編・統合する。
・【33-1】（新分野創成センター（CNSI））新分野創成センターにおいては，新たな学問分野を形成し得るものとして平成 30 年度に新設した「先端光科学研究分野」及び「プラズマバイオ研究分野」について，異分野融合研究を推進するとともに，新分野探査室において萌芽的分野の探査・検討を継続する。
・【33-2】（アストロバイオロジーセンター（ABC））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（ExCELLS））機構外の大学・研究機関に所属する研究者を代表とする ExCELLS 連携研究，並びに機構外の研究者がセンター内の教員と行う共同研究である ExCELLS 課題研究を拡充し，国内外の研究者との共同研究を進める。さらに，機構内の研究者がセンター内の教員及び機構外の研究者と行う ExCELLS 特別共同研究を新規に実施する。
・【33-4】（国際連携研究センター（IRCC））平成 30 年度に設置された国際連携研究センターにおいて機関・分野を超え海外機関と組織的に連携して行う分野融合研究を推進する。具体的には，既設の「アストロフュージョンプラズマ物理研究部門」のほか，「定量・イメージング生物学研究部門」を新たに設置し，両部門における異分野融合研究，国際交流を推進する。

（２）共同利用・共同研究の実施体制等に関する目標を達成するための措置
【34】自然科学共同利用・共同研究統括システム：NOUS（仮称）を構築し，大学の機能の強化への貢献度を把握するため，各機関の IR 機能の連携による機構全体の IR 機能体制の整備を行う。（戦略性が高く意欲的な計画）
・【34-1】各機関の IR 担当者で構成される研究力強化推進本部共同利用・共同研究室 IR 班において，機構全体の IR を推進するとともに，機構及び機関の特性を踏まえた大学の機能強化への貢献度指標を継続して更なる検討を行う。また，NOUS に研究成果に基づく IR 機能を追加し，IR のためのエビデンス収集に向けた開発を進める。
・【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・分析を引き続き行う。
・【34-3】NOUS の整備・改修を進めて機能・利便性を向上させ，各機関が実施する公募事業への更なる適用の拡大，活用の充実を図る。
【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）において，大学の研究力強化への貢献に向けて平成 30 年度に提案した具体的な取組について，大学と連携して現状把握・検討等を進め，着実に実施する。
・【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，引き続き積極的に推進するとともに，NICA を通じて，更なる大学間連携の強化・充実を図る。

3　教育に関する目標を達成するための措置

（1）大学院への教育協力に関する目標を達成するための措置

【36】総合研究大学院大学（以下「総研大」という。）との連係協力に関する協定に基づき，また，機構長の経営協議会への参加，教育担当理事のアドバイザリーボードへの参加等を通じて緊密に連係し，大学共同利用機関としての最先端の研究設備，各分野の基礎研究を支える基盤的設備等の研究環境を活かし，世界の一線で活躍できる若手研究者を育成すると同時に，学術の広範な知識を備え将来様々な分野で活躍するための総合的な能力及び高い研究倫理を大学院生に涵養する。そのため，下記の基盤機関において，それぞれ特色ある大学院教育を実施する。

◆国立天文台（天文科学専攻）
◆核融合科学研究所（核融合科学専攻）
◆基礎生物学研究所（基礎生物学専攻）
◆生理学研究所（生理科学専攻）
◆分子科学研究所（構造分子科学専攻・機能分子科学専攻）

・【36-1】総合研究大学院大学（以下「総研大」という。）の経営協議会への機構長の参加等を通じ，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の教育プログラムを実施し，学術の広範な知識を備え，世界の一線で活躍できる若手研究者を育成する。

【37】全国の国公私立大学の大学院教育に寄与するため，特別共同利用研究員，連携大学院などの制度を通じて大学院教育を実施する。

・【37-1】全国の国公私立大学より特別共同利用研究員を受け入れるとともに，連携大学院などの制度を通じて国内外の学生を指導し，大学院教育に協力する。

（2）人材養成に関する目標を達成するための措置

【38】総研大との密接な連係・協力によって，国内外より優秀な大学院生の受け入れを促進するとともに，国費の支援を受けた学生以外の学生に対するリサーチアシスタント制度の適用率を 90% 以上に維持する。海外の大学・研究機関と協定し，国際インターンシップなどにより，第３期中期目標期間において第２期を上回る学生，若手研究者を受け入れる。また，総研大の学生及びこれに準じた体系的な教育プログラムを履修する学生は，学位取得までの間に１回以上，海外での国際会議への参加又は研修を受けることとする。さらに，外国人留学生や若手研究者の就学，研究のサポート体制を充実するため，英語による就学・研究活動に関する各種情報提供及び外部資金獲得に関する支援を行う。

・【38-1】総研大と連携した体験学習や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，研究費公募の実施など，学習・研究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，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を行うことにより，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，国際インターンシップ等を実施するとともに，総研大事業「夏の体験入学」，「アジア・冬の学校」をはじめとした研修会，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等を通じて，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など，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】民間等との窓口機能を充実させ，共同研究，受託研究等の積極的な受け入れを図るとともに，機関の持つ最先端の研究成果，活用可能なコンテンツを様々な場を通じて広報するなど，産業界等との連携・技術移転を推進する。

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，引き続き国際的な研究者交流事業・共同研究事業を戦略的に推進するとともに，平成 30 年度に新たに設置した機構直轄の国際連携研究センターにおいて，プリンストン大学（米国），マックスプランク協会の関係研究所（ドイツ）との組織的な連携の下，国際研究交流を積極的に推進し，併せてその体制の整備・充実を図る。

【45】各機関においては，各機関が締結した国際交流協定などに基づき，海外の主要研究拠点との研究者交流，共同研究，国際シンポジウム及び国際研究集会等をそれぞれ毎年度１回以上開催し，連携を強化する。

・【45–1】各機関が締結した国際交流協定等に基づき，海外の主要研究拠点との間で研究者交流，共同研究を推進するとともに，国際シンポジウム及び国際研究集会等の開催を通じて国際的な連携を強化する。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の受入れや，独・マックスプランクプラズマ物理研究所，中国・西南交通大学等との核融合研究交流，その他の国際研究交流事業を行う。

【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制度の活用や国際公募を積極的に実施するなどにより，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】本機構のグローバリゼーションを推進するための基盤を整備するため，来訪外国人の要望にきめ細かく対応した外国人研究者の宿泊施設の確保やサポートスタッフの拡充などを行う。

・【49–1】グローバリゼーションを推進するための基盤を整備するため，外国人向けサポートデスクの設置や生活面に関する説明会の実施など，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連携事業の検討を進める。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，事務連携委員会は，広報，情報セキュリティ及び職員研修等について連携を推進し，I-URIC 連携企画として実施する。また，４機構及び総合研究大学院大学による「連合体」の設立をめざし，設立準備委員会が中心となって検討を行う。

・【50–2】新たな学術の芽を育てるため，異分野融合・新分野創成委員会は，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】共同利用・共同研究の意義を広く国民や社会に発信するため，事務連携委員会は，４機構合同の広報活動を引き続き進める。また，大学等に大学共同利用機関の活動を一層理解してもらえるよう，評価検討委員会は，共同利用・共同研究の成果や大学の機能強化等への貢献の可視化による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。

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とともに，そこでの助言や意見を参考に，各研究分野の特性を踏まえた業務の改善を１年以内に実施し，効率的な運営を進める。

【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】産学官連携を担当する理事を置き，機構として一体的な産業界との連携を図る体制を整備し，産学官連携の推進を図る。

【54】監事機能の強化を図るとともに，サポート体制を強化するため，監事が機構長選考方法や法人内部の意思決定システムをはじめとした法人のガバナンス体制等についても監査するとともに，内部監査組織と連携する。

・【54–1】監事機能の強化を実効的なものとするため，監事と機構長の定期的な意見交換の機会を設けるとともに，法人のガバナンス体制等に係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，年俸制の活用を促進する。

【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充実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，技術研究会その他の研修等により，技術交流を更に発展させるなど，業務に関する必要な知識及び技能の向上を図るとともに，自己啓発を促進する。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年５回以上実施するとともに，全職員が受講すべき研修の実施に当たっては，実施時期及び実施会場等を考慮して確実に受講可能な環境を整備するよう努める。

【58】女性研究者を積極的に採用し，女性研究者の割合を第３期中期目標期間終了時までに 13% に引き上げる。また，新たな男女共同参画推進アクションプログラムを設定・実行することにより，男女共同参画の環境を整備・強化する。さらに，出産，育児，介護支援など様々なライフステージにおいて柔軟な就労制度を構築する。

・【58–1】平成 28 年度より始めた第２次男女共同参画推進アクションプランの実行を通じて，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させるべく女性研究者を積極的に採用する施策等を講じる。また，様々な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，機構直轄研究施設（新分野創成センター，アストロバイオロジーセンター，生命創成探究センター，国際連携研究センター）の運営の評価を行う。

【60】研究基盤戦略会議における機能強化の方針，資源の再配分を始めとした組織改革の方針に基づき，各機関等において，教育研究組織の再編・改革等を行う。

・【60–1】研究基盤戦略会議における機能強化や組織改革の方針，運営の評価に基づき，各機関等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に，すべての機構内会議においてペーパーレス化を導入する。

・【61–1】経費の節減と事務等の合理化を図るため，事務等の共同実施を進めるとともに，職員向け Web サイトの充実による情報共有を推進するほか，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，応募に関する説明会の開催や Web ページを有効に活用した募集等の情報の周知を行う。

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，各機関等の節減事例を共有し，契約方法を見直すなど経費節減につなげる。

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】固定資産について，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，共同利用を停止し，廃止に向けた手続きを進める。さらに，伊根実験室については，その用途を廃止の上，建物を解体，土地（借地）を返還する。

Ⅳ　自己点検・評価及び当該状況に係る情報の提供に関する目標を達成するためにとるべき措置

１　評価の充実に関する目標を達成するための措置

【66】国際的見地から研究体制及び共同利用・共同研究体制について，様々な機構外の者の意見を反映させ，定期的に自己点検及び外部評価等を実施し，その結果を広く公開するとともに，当該意見に応じて見直しを行う。

・【66–1】国際的見地から研究体制及び共同利用・共同研究体制について，各機関の特性に応じた自己点検及び外部評価等を実施し，その結果を広く公開するとともに，必要に応じて見直しを行う。

【67】本機構の業務運営を改善するため，各機関の IR 機能の連携により機構全体の IR 機能を強化するとともに，平成 30 年度に機構全体の自己点検及び外部評価等を実施し，その結果を広く公開する。

・【67–1】引き続き，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，新たに構築する研究者総覧や ORCID を活用した研究業績把握を進める。また，平成 30 年度に実施した機構全体の自己点検及び外部評価の結果を踏まえ，必要な改善を機構運営に反映させる。

２　情報公開や情報発信等の推進に関する目標を達成するための措置

【68】機構シンポジウムを毎年度２回実施するとともに，ホームページ，プレスリリース，定期刊行物などの充実や，一般公開の実施を通して，本機構の研究を含む諸活動の状況を，積極的に社会に発信する。特に，国際化の観点から，英文のホームページを更に充実させ，そのアクセス数を増やすとともに，海外へのプレスリリース件数を６年間で 20% 増加するなど，多様な伝達手段を活用し，海外への情報発信をより積極的に行う。

・【68–1】機構本部広報室と各機関の広報担当が連携し，機構の研究成果や諸活動の状況等を，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，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更なる強化を図る。なお，機構シンポジウムは春と秋を目途として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て研究施設・設備等の充実のための計画的な整備を推進する。

【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，防災マニュアル等の見直しを行い，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かめ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】職員の過重労働及びそれに起因する労働災害の防止策について，各機関等が設置する安全衛生委員会等で検討するとともに，機構が設置する安全衛生連絡会議において報告し，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，ストレスチェック及びその結果を活用した管理・監督者向けの研修等を実施し，職場環境の改善等に取り組む。

【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】複数年を見通した情報セキュリティ対策基本計画を策定し，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じて，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。特に，CSIRT（Computer Security Incident Response Team）をはじめとした情報システム関係者の人材育成等に努めるとともに重要情報のリスクマネジメントを推進し，平成30年度に機構に設置した情報セキュリティ推進室を中心として，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。