

## 5. 各種事業

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

分子科学研究所が行う事業には、『先端的な研究を推進する拠点事業』、『国内の研究者への共同研究・共同利用支援に関する事業』、『研究者の国際ネットワーク構築に関する事業』、『研究力強化推進事業』がある。予算的には運営費交付金の一般経費・特別経費、文部科学省の委託事業、日本学術振興会等の競争的資金で実施している。運営費交付金の一般経費以外はいずれも期間が定められており、運営費交付金一般経費も毎年削減を受けている。第1期中期計画期間に特別経費であった3事業（UVSOR 共同利用事業、エクストリームフォトンクス連携事業（理化学研究所との連携）、研究設備ネットワーク事業）は2010年度からの第2期中期計画の開始において相当予算削減された上一般経費化された。その際、エクストリームフォトンクス連携事業はUVSOR 共同利用事業を広く光科学共同利用事業ととらえ、光科学関連の理化学研究所との連携はすべてその中に含まれることになった。なお、スーパーコンピュータ共同利用事業の特別経費については第1期中期計画期間の段階からすでに一般経費化されている。

(1) 『先端的な研究を推進する拠点事業』のUVSOR 共同利用事業（放射光分子科学）、エクストリームフォトンクス連携事業（レーザー分子科学）に関連するものとして、光創成ネットワーク研究拠点プログラム（分子科学研究所は分担）を2017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2015年度で終了し、2014年年度より「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（2007年度から「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」、2010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、2011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、2012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、2015年度には2016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」（2006年度～2010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2008年度より2011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、2015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。2013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

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2007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、2010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、2017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400を超える機関が参加しており、外部公開機器の登録台数は771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2,200台以上に上り、登録ユーザー数は約14,000名に達している（数値は2019年12月末現在）。表1には利用実績件数の推移を示した。発足当時から順調に学外利用数が増加し、2018年度には2400件/年に達している。2017年度に、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、2019年からは、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規約を改めた。これらの施策により、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る。

本事業では、2017年度より第三期中期計画に合わせて5年計画で事業を展開している。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3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（設備サポートセンター整備事業、新たな共用システム導入プログラム、先端研究基盤共用促進事業、等）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。さらに、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・研修会を積極的に開催した（表3）。これらの講習会・研修会の事業の実施においては、さきに述べた設備共用事業の他、文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム事業、国立大学法人機器・分析センター協議会、等とも連携しながら、企画、運営を行っている。

本事業に対しては、2017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継続的に措置されている。これまでは研究者間のつながりで運営されていたネットワーク型共同研究について、機関間の組織的な関係を強化し一層の発展を目指すことを目的に、連携の強化や集約による分野別予算の確保や人的・物的資源の有効活用等（マネージャー人件費や予約課金システム更新費、講習会強化費用等）が可能となった。これらの施策は本事業の安定運営に大きく寄与している。

今後は、①予約・課金システム等の安定運用と改善、②研究設備の相互利用加速事業の実施、③講習会・研修会の開催、④他の設備共用事業等との連携継続、⑤広報活動、⑥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

年度	学内利用	学外利用			
		国立大	公私大等	民間企業	計
2007	5,570	158	-	-	158
2008	7,081	122	-	-	122
2009	10,520	183	-	-	183
2010	48,833	306	54	4	364
2011	73,997	324	152	2	478
2012	85,128	447	106	25	578
2013	88,516	499	226	162	887
2014	108,863	619	317	241	1,177
2015	113,063	708	378	228	1,314
2016	111,728	807	439	298	1,544
2017	119,214	962	640	558	2,160
2018	143,829	1,133	656	654	2,443
2019	169,086	977	814	965	2,756

表2 2019年度加速事業課題一覧

地域	大学	部署	代表者	職名	課題名
北関東	宇都宮大学	産学イノベーション支援センター	松本 太輝	准教授	粉末X線回折装置のデータベース更新
東関東	千葉大学	共用機器センター	梶 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
	千葉大学	共用機器センター	梶 飛雄真	准教授	質量分析装置の制御用PC更新および整備
西関東・甲斐	東京農工大学	学術研究支援総合センター	野口 恵一	准教授	多目的X線回折装置の検出器と測定解析システムのアップグレード
	東京農工大学	学術研究支援総合センター	野口 恵一	准教授	透過電子顕微鏡の安定稼働のための修繕
	山梨大学	機器分析センター	山中 淳二	准教授	集束イオンビーム加工観察装置総合整備
西近畿	大阪大	理学研究科分析機器測定室	今田 勝巳	教授	理学研究科NMR装置群安定稼働の為の液体窒素再凝縮装置メンテナンス
中国	岡山大	大学院環境生命科学研究科	田村 隆	教授	単結晶X線構造解析装置を用いた大学内外の依頼測定活動の拡充
	岡山大	自然生命科学研究支援センター	高橋裕一郎	教授	産学官を対象としたプロテオミクス受託解析の機能強化とメタボロミクス解析の整備
	広島大	大学院工学研究院	定金 正洋	准教授	NMR (Varian400MR, system500, 600PS) のコンプレッサーおよび周辺設備の整備
四国	愛媛大	学術支援センター物質科学部門	内藤 俊雄	教授	単結晶X線構造解析装置の相互利用促進事業
	愛媛大	学術支援センター物質科学部門	内藤 俊雄	教授	核磁気共鳴装置の相互利用促進事業
九州	長崎大	産学官連携戦略本部	真木 俊英	准教授	長崎大学設備共同利用Webシステム導入事業
	長崎大	産学官連携戦略本部	真木 俊英	准教授	核磁気共鳴装置低温装置導入事業
	長崎大	産学官連携戦略本部	真木 俊英	准教授	光電子分光装置保守・整備事業
	鹿児島大	研究支援機構・研究支援センター	澤田 剛	准教授	走査型電子顕微鏡の修理・整備によ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 2019年度講習会・研修会開催一覧

講習会・研修会名	開催日	開催地	申込数
2019技術職員 有志の会 意見交換会	2019.4.9	分子科学研究所	19
質量分析研修～ JMS700 を用いた質量分析の基礎と応用～	2019.5.13	奈良先端大	1
第1, 2回技術英語ライティング講習会	2019.5.20	名古屋大学	9
質量分析個別研修会～ JMS-700 を用いた質量分析の基礎と応用～	2019.5.27-31	岩手大学	2
質量分析個別研修会～ JMS-700 を用いた質量分析の基礎と応用～	2019.6.17-21	信州大学	1
技術職員の組織化に関する意見交換会	2019.6.20	奈良先端大	29
質量分析個別研修会～ JMS-700 を用いた質量分析の基礎と応用～	2019.6.25-27	愛媛大学	1
第4, 5回技術英語 (ライティング) 研修会	2019.7.9	WEB セミナー	5
固体拡散 NMR 講習会	2019.7.16-17	東北大学	3
質量分析個別研修会	2019.7.25	奈良先端大	1
走査型 XPS 装置によるマッピング分析実践講習	2019.7.26	東北大学	4
NMR メンテナンス研修会	2019.8.1-2	名古屋大学	20
SEM セミナー～チャージアップ軽減：試料作製と観察ノウハウ～	2019.8.2	分子科学研究所	7
NMR 基礎講習会	2019.8.28	名古屋工業大学	10
質量分析個別研修会～ JMS700 を用いた negative モードでの測定～	2019.8.28	奈良先端大	5
NMR 個別研修	2019.9.4-6	岩手大学	2
第6回英語研修	2019.9.10	佐賀大学	10
NMR 個別研修	2019.9.11-13	岩手大学	2
ガラス細工技術研修—真空トラップの作成—	2019.9.12-13	長崎大学	14
第7, 8回英語研修	2019.9.13	WEB セミナー	4
第三回大学技術職員組織研究会	2019.9.27	鳥取大学	21
第9回技術英語研修	2019.9.30	静岡大学	7
XPSUPS 実践講習 (基礎編)	2019.10.10	奈良高専	2
IMS-TOF 法の測定講習	2019.10.11	京都大学	9
第10回技術英語研修	2019.10.24	大阪大学	10
NMR 個別研修	2019.11.7	九州大学	3
ナノテクノロジープラットフォーム技術者支援交流プログラム	2019.11.18-20	ナノプラ参画機関	2
固体 NMR 講習会	2019.11.13-14	広島大学	5
SEM_EDS セミナー	2019.12.13	鳥取大学	1
質量分析個別研修会	2019.11.27-29	信州大学	2
第11回英語研修	2019.12.13	名古屋大学	18
第12回英語研修	2019.12.18	愛媛大学	10
ESR 講習会	2019.12.25-26	山梨大学	6
NMR メンテ講習会@北大	2020.1.24	北海道大学	10
第7回北海道大学オープンファシリティーシンポジウム特別企画 SD 研修会	2020.1.24	北海道大学	30
ESR 講習会@分子研	2020.2.13	分子科学研究所	6
【中止】 SEM - EDX 測定実習会	2020.2.28	分子科学研究所	4
【中止】 NMR 拡散測定講習会	2020.3.5	名古屋工業大学	5
【中止】 UPS 講習会	2020.3.5	北陸先端大	3
【中止】 ICP-MS 講習会	2020.3.9	鳥取大学	4
【中止】 ミクロトーム (凍結法) 講習会	2020.3.10	分子科学研究所	5
【中止】 第3回有機元素分析研究会	2020.3.13	岡山大学	30
【中止】 若手技術職員限定 技術向上意見交換会	2020.3.17	サンプラザ天文館	30
【中止】 固体高温 NMR スピン-格子緩和時間 ( $T_1$ ) 測定講習会	2020.3.18	東北大学	3
【中止】 質量分析初・中級研修会	2020.3.25	大阪大学	3

## 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、2009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。2013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2015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2018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、2015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、2018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2018年度から設定することとなった。

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

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

このような体制を構築した上で、新たな分野融合的発想に基づく光技術の適用法や新技術開発につながる先駆的・挑戦的な萌芽研究を開拓・推進する「共同研究」、およびそれらを探索する「研究会」のプロジェクト提案を広く機構内外から公募し、教授会議での審査を経て、採択課題を推進することとなった。2019年度は、8件の共同研究を採択し（うち6件が機構外からの応募）、研究活動を支援している。所外からの応募による研究会1件も採択し、実施された。専任の特任助教は2018年度に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、2018年度末に着任して研究活動を開始した。

### 5-3 シミュレーションによる「自然科学における階層と全体」に関する 新たな学術分野の開拓（自然科学研究機構）

自然界の事象はマイクロからマクロまでの多数の階層で構成され、それぞれの階層に固有の運動法則に支配されている。さらに全体としては階層間で相互作用しながら時間発展し、その結果全体として大変複雑な様相を示す。本プロジェクトでは国立天文台、核融合科学研究所、分子科学研究所が連携して、自然科学における階層性、構造形成等の階層横断現象の解明を目指すとともに、関連研究機関との連携を推進することにより、学際領域としてのシミュレーション科学を通じての異分野の融合の推進を目指している。本プロジェクトにおける連携研究活動として、「階層構造とシミュレーション」、「分子シミュレーションとその応用」、「不均一系触媒の界面における化学反応とダイナミクス」等をテーマとした連携シンポジウムを2020年1月10、11日に国立天文台で開催した。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(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おり、2013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2019年度の支援装置・プログラム一覧、表2には2019年度の採択課題一覧、表3には2019年度採択・実施件数日数(2019年4月1日～2020年3月31日実施分)を示した。

表1 2019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 小坂谷貴典助教 山本航平助教 石山 修特任研究員	UVSOR・光分子科学 物質分子科学 物質分子科学 物質分子科学 機器センター
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 μmの描画が可能。段差計は、150 mmまでの領域でステッチングなしで測定可能。その他にも、精密温湿度調整付きのイエロークリーンプースは、フォトリソグラフィに関する一連の作業(基板洗浄、各種レジスト塗布、露光、現像、アッシング、エッチング)に利用可能。 小型2源RFスパッタ装置は、スパッタ電源RF300W、ターゲットサイズはφ3インチが2基設置可能で、Au、Nb、Tiなどを成膜することが可能。 [マスクレス露光装置(ナノシステムソリューションズDL-1000/IMC)、段差計(KLA Tencor P7)、精密温度調整機能付クリーンプース、マスクアライナー(ミカサ社製MA-10)、スピコーター(ミカサ社製MS-A100)、小型2源RFスパッタ装置(デボダウン)(クライオバック)]	山本浩史室長 青山正樹技術職員 高田紀子技術職員	装置開発室 装置開発室 装置開発室

	<p>3次元光学プロファイラーシステム (Nexview)</p> <p>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</p> <p>[精密温度調整機能付クリーンブース]</p>	<p>山本浩史室長 青山正樹技術職員 近藤聖彦技術職員 高田紀子技術職員</p>	<p>装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室</p>
装置開発	<p>分子科学の発展に資する装置類の開発・作製を支援。市販品では実現できない分子科学研究用装置類の図面/回路設計と、それらの製作および性能評価が可能。また、分子等模型および部品類の3D出力も可能。</p> <p>[NCフライス盤 (BN5-85A6 牧野フライス), NC旋盤 (SUPER QUICK TURN 100MY Mazak), プリント基板加工機 (Accurate A427A), 構造解析ソフト (ANSYS DesignSpace アンシス・ジャパン) など各種工作機器]</p>	<p>山本浩史室長 青山正樹技術職員 近藤聖彦技術職員 豊田朋範技術職員 水谷文保技術職員 松尾純一技術職員</p>	<p>装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室 計算科学研究センター 計算科学研究センター</p>
電解放出形走査電子顕微鏡	<p>走査電子顕微鏡を提供。主に施設利用に対応。</p> <p>[JEOL JSM-6700F (1) (試料2インチまで)]</p>	<p>横山利彦センター長 石山修特任研究員 外山亜矢技術支援員</p>	<p>機器センター 機器センター 機器センター</p>
低真空分析走査電子顕微鏡	<p>幅広い試料に対する、SEM観察とEDS元素分析の環境を提供。SEM本体は、日立ハイテクノロジー社製SU6600。10～300Paの低真空観察に対応し、絶縁性試料を導電処理なしで観察可能。分解能は、高真空1.2 nm (30 kV), 低真空3.0 nm (30 kV)。EDS分析装置は、BrukerAXS社製XFlash5060FQ及び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。</p> <p>[日立ハイテクノロジーSU6600, BrukerAXS_QUANTAX XFlash 5060FQ+XFlash6 10 コンバインシステム]</p>	<p>横山利彦センター長 石山修特任研究員 上田正技術職員 外山亜矢技術支援員</p>	<p>機器センター 機器センター 機器センター 機器センター</p>
電界放出形透過電子顕微鏡	<p>高輝度で高い干渉性の電子線が得られるフィールドエミッション電子銃 (FEG) を搭載した電子顕微鏡。ナノスケールオーダーの超高分解能の像観察や分析が可能。エネルギー分散型X線分析装置 (EDS) による微小部の元素分析、組成マップを測定が可能。STEM機能により走査透過像測定が可能。</p> <p>[JEOL_JSM-2100F (試料3mmφ以内)]</p>	<p>横山利彦センター長 伊木志成子特任専門員 上田正技術職員 賣市幹大技術職員</p>	<p>機器センター 機器センター 機器センター 機器センター</p>
単結晶X線回折	<p>単結晶試料にX線を入射すると、結晶構造を反映した回折点が得られる。この回折点の位置および強度から、結晶構造解析が行われる。構造解析により、原子の三次元座標 (立体構造) や原子間距離・結合距離、三次元の電子密度などの情報が得られる。数十～数百 mm サイズの単結晶試料が作成出来れば、3時間程度で測定～解析が可能。</p> <p>[Rigaku_MERCURY CCD-1・R-AXIS IV, MERCURY CCD-2]</p>	<p>横山利彦センター長 藤原基靖技術職員</p>	<p>機器センター 機器センター</p>
単結晶X線回折 (微小結晶用)	<p>高輝度X線: 光学系にコンフォーカルミラーを用いており、CCD-1, -2に比べ、約10倍の高輝度X線ビームが得られ、測定が難しかった微小結晶でも測定が可能。ビーム径はφ0.1～0.2 mmで、コリメータはバックグラウンド低減のためビーム径よりやや大きめの0.3mmのものが取付。</p> <p>低温測定: ガス吹き付け型の冷却装置で、到達温度はN<sub>2</sub>ガスモードで100 K, Heガスモードで24 K (実測)。到達時間は、N<sub>2</sub>で240分, Heで150分かかる。運転モードの切り替えは、HeからN<sub>2</sub>には迅速に切り替え可能だが、N<sub>2</sub>からHeの場合は、冷凍機を一旦室温に戻す必要。</p> <p>[Rigaku_HyPix-AFC]</p>	<p>横山利彦センター長 岡野芳則技術職員</p>	<p>機器センター 機器センター</p>

結晶スポンジ法を用いた分子構造解析	単結晶X線構造解析は、分子の立体構造を決定する上で最も強力な分析方法。しかしながら、この手法を用いるためには、構造を明らかにしたい試料の単結晶が不可欠であり、単結晶作製は時として大きな困難を伴う。藤田らが開発した「結晶スポンジ法」は、細孔性錯体の結晶（結晶スポンジ）を試料の溶液に浸すことで試料分子を結晶スポンジの細孔内に導入し、単結晶X線構造解析により試料分子の立体構造を明らかにするという「結晶化不要の単結晶X線構造解析法」。結晶スポンジ法を用いて、提供を受けた試料の立体構造解析の支援を実施。また、結晶スポンジ法に関連した協力研究も広く受付。 [Rigaku_XtaLAB P200, SuperNova]	藤田 誠卓越教授 横山利彦センター長	特別研究部門 機器センター
粉末X線回折	粉末試料にX線を照射し、回折されたX線の角度および強度を測定。主な利用法は定性分析（同定）である。既知試料の回折パターン（PDF：Powder Diffraction File）と照合することで測定試料の同定を行う。その他にも、ピークの有無や強度による結晶性や配向評価、ピーク幅による結晶子サイズ評価、小角領域の測定による粒子径の評価などにも用いられる。また測定精度によっては未知構造解析も可能。 [Rigaku_RINT-UltimaIII]	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 [Rigaku_NANO-Viewer]	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	物質にX線を照射すると、物質を構成する元素固有のエネルギー（波長）を持つ蛍光X線（特性X線）が発生。この蛍光X線のエネルギーを測定することにより、測定物質を構成する元素の分析（定性分析）を行うことができ、またそのエネルギーのX線強度から目的元素の濃度を求める（定量分析）ことが可能。蛍光X線分析装置とは、対象となる試料にX線を照射し、そこから発生する蛍光X線のエネルギーを測定することで、試料を構成する元素の種類や濃度を判断するために用いる装置。この装置の大きな特徴として、対象試料の範囲が広く、固体・液体・粉末など種々の形態で測定が可能であること、非破壊分析であること、測定作業が簡便で短時間で分析を行えることが挙げられる。応用範囲は多岐にわたり、金属、鉱物の組成分析の他、食品分析や土壌分析、環境分析でも利用。 [JEOL_JSX-3400RII]	横山利彦センター長 上田 正技術職員	機器センター 機器センター
機能性材料バンド構造顕微分析システム	静電半球型アナライザーを用いた機能性材料の価電子バンド構造測定システム。ディフレクターを使用することで2次元波数空間マッピングを行うことが可能。薄膜作製用真空チェンバー、試料表面処理チェンバー（電子衝撃加熱、通電加熱、Ar <sup>+</sup> スパッタが可能）、電子線回折装置、劈開機構を利用することができるため、様々な機能性材料の測定に対応。	解良 聡教授 田中清尚准教授 出田真一郎助教	光分子科学 UVSOR UVSOR
X線光電子分光	汎用のX線光電子分光器（Al,Mg-K $\alpha$ 線利用）を提供。施設利用として気軽に利用可能。 [Omicron_EA-125]	横山利彦センター長 伊木志成子特任専門員	機器センター 機器センター
電子スピン共鳴（E680）	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_E680]	横山利彦センター長 中村敏和チームリーダー 浅田瑞枝技術職員 上田 正技術職員 藤原基靖技術職員 伊木志成子特任専門員	機器センター 機器センター 機器センター 機器センター 機器センター

電子スピン共鳴 (EMX Plus, E500)	電子スピン共鳴 (ESR) 装置は、不対電子 (電子スピン) をプローブとした分光装置。静磁場中に置かれた電子スピンはエネルギー準位が分裂し、一定のマイクロ波を加えながら静磁場を掃引すると、このエネルギー差に相当する磁場で共鳴が起こる。この共鳴磁場や吸収強度などの観測から、電子スピンを持つ原子や分子の量、構造、電子状態などに関する情報が得られる。ESR 装置は、有機ラジカルや遷移金属などを含む物質の物性研究の他にも、放射線や酸化などにより不対電子が生じた岩石や食品の評価、触媒や重合反応などのプロセス追跡にも利用。 [Bruker_EMX Plus, E500]	横山利彦センター長 中村敏和チームリーダー 浅田瑞枝技術職員 藤原基靖技術職員 伊木志成子特任専門員	機器センター 機器センター 機器センター 機器センター 機器センター
SQUID 型磁化測定装置	SQUID 型磁化測定装置 (Quantum Design 社製 MPMS-7, MPMS-XL7) により、高感度磁化測定が可能。DC 測定に加え、AC 測定や光照射・圧力下の測定も可能。その他、超低磁場や角度回転オプションも利用可能。 [Quantum Design_MPMS-7, MPMS-XL7]	横山利彦センター長 中村敏和チームリーダー 浅田瑞枝技術職員 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 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)	熱分析装置では物質を温度制御しながら、その熱変化などを測定。示差走査型カロリメーター (DSC) による分子の構造変化時の熱変化を直接測定する方法や、等温滴定型カロリメーター (ITC) による分子間の結合時の熱変化を直接測定する方法などが可能。 [MicroCal_VP-DSC]	横山利彦センター長 水川哲徳技術職員 賣市幹大技術職員 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 機器センター
等温滴定型カロリメーター (溶液)	熱分析装置では物質を温度制御しながら、その熱変化などを測定。示差走査型カロリメーター (DSC) による分子の構造変化時の熱変化を直接測定する方法や、等温滴定型カロリメーター (ITC) による分子間の結合時の熱変化を直接測定する方法などが可能。温度一定下の条件において、リガンド滴下により 2 種の分子が相互作用する時に生じる反応熱を測定する。溶液中の生体高分子に特化した仕様。 [MicroCal_iTC200]	横山利彦センター長 水川哲徳技術職員 賣市幹大技術職員 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 機器センター
熱分析装置 (固体, 粉末)	熱分析とは、物質の温度を一定のプログラムによって変化させながら、その物質のある物理的性質を温度の関数として測定する分析法。熱流差を検出する示差走査熱量測定 (DSC) による融解・結晶化や比熱の測定、質量 (重量変化) を検出する熱重量測定 (TGA) による脱水・熱分解の測定などが可能。 [Rigaku_DSC8231, TG-DTA8122]	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	イオン化部はマトリックス支援レーザー脱離イオン化 (MALDI)、質量分離部が飛行時間型の質量分析計 (TOF-MS)。MALDI はマトリックスと呼ばれるイオン化を促進する試薬を試料と共にサンプルプレート上に結晶化させ、そこにレーザー光を照射する。マトリックスはレーザー波長に対して吸収を持っているので急速に加熱され試料と共に気化。試料は気相反応 (プロトン移動など) によってイオン化し、TOF-MS と呼ばれるイオン源で発生したイオンがフライトチューブ内を飛行し検出器まで到達する時間によって質量を測定する装置により分離、検出。MALDI によるイオン化は穏和で試料分子の分解が起こりにくく、TOF-MS は分子量が数万～十数万のタンパク質のような高分子を測定することが可能であり、発生したイオンの大部分が検出器に到達するため感度も高い点が挙げられる。 [Bruker Daltonics_microflex LRF]	横山利彦センター長 水川哲徳技術職員 賣市幹大技術職員 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 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]	横山利彦センター長 賣市幹大技術職員	機器センター 機器センター

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_IFS66v/S]	横山利彦センター長 賣市幹大技術職員	機器センター 機器センター
蛍光分光	蛍光分光光度計は、励起光を試料に当て、放出される蛍光強度やスペクトルを測定して物質の定量、定性分析を行う装置で、吸光分析である分光光度計よりも非常に高い感度で測定が可能。観測側（蛍光側）の分光器の波長を蛍光波長に固定し、励起側の分光器の波長をスキャンすると励起スペクトルが得られる。励起側の波長を固定（最も強い蛍光を生じる励起波長）し、観測側の分光器の波長をスキャンすると蛍光スペクトルが得られる。また、励起側分光器と観測側分光器の両方の波長をスキャンさせて測定できる装置もあり、簡単に蛍光励起スペクトルの測定が可能。 [HORIBA_SPEX Fluorolog]	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	測定する物質がどの程度光を吸収するかを波長分布として測定する装置。実際は、透過率を測定しソフトウェアで計算によって吸光度を求めており、物質の同定や性質、あるいは濃度（定量分析）を調べることが可能。付属装置によって、半導体・薄膜・ガラスやフィルムなどの固体試料の反射率・透過率測定が可能。 [SHIMADZU_UV-3600Plus]	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	円二色性分散計は光学活性分子の立体構造（相対～絶対配置、立体配座、生体高分子の高次構造）を解析する手段として利用。分光器から出た光は偏光子で直線偏光にされ、円偏光変調器で左右円偏光が交互に作られ試料を通過。この時、試料が光学活性物質であると円偏光の不等吸収が起こり（この現象を円二色性または CD と呼ぶ）、その左右円偏光の差吸光度 $\Delta A$ （通常は楕円率 $\theta$ で表される）が観測。楕円率とは直線偏光を光学活性物質の吸収波長で通過させると楕円偏光になるが、その楕円の短軸長軸の正接角 $\theta$ をもって定義され、 $\Delta A$ が小さいと $\theta = 33 \times \Delta A$ が成立。CD 測定でのフルスケールは $\theta$ 表示（単位 mdeg）。 [JASCO_J-720WI]	横山利彦センター長 水川哲徳技術職員 賣市幹大技術職員 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 機器センター
ピコ秒レーザー	超短パルスレーザーでは、不確定性原理によってパルスの時間幅と波長幅（バンド幅）を同時に狭くすることは相反するが、ピコ秒のレーザーはその両者、つまり時間分解能とエネルギー分解能の両方において高い分解能が得られるとされている。そのためピコ秒レーザーは、物理化学分光研究における超高速時間分解実験の分光用光源として用いられ、超高速時間分解吸収、或いは蛍光スペクトルを高い分解能で観測するための最も重要なツール。また、ピコ秒レーザーは、パルス幅が短くピークパワーが高いため、熱影響の少ない精密微細加工を実現できるツールとしても応用。 [Spectra-Physics, Quantronix_Millennia-Tsunami, TITAN-TOPAS]	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
$^1\text{H}$ 800MHz 溶液（高磁場 NMR）	800MHz 溶液 NMR による生体分子複合体をはじめとする低溶解性物質などの高感度・高分解能測定支援。極低温プローブによる $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ - $^{15}\text{N}$ 三重共鳴測定に対応。 [Bruker_AVANCE 800]	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
$^1\text{H}$ 600MHz 固体（高磁場 NMR）	600MHz 固体 NMR による蛋白などの生体分子、有機材料、天然物などの精密構造解析支援。 $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ - $^{15}\text{N}$ 三重共鳴実験まで対応。 [Bruker_AVANCE600]	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

<sup>1</sup> H 600MHz 溶液 (高磁場 NMR)	核磁気共鳴 (NMR) とは磁気モーメントをもつ原子核を含む物質を磁場の中におき、これに共鳴条件を満足する周波数の電磁波を加えたときにおこる共鳴現象。核磁気共鳴装置はこの共鳴現象を観測することによって、原子の化学的環境を反映した原子個々の情報 (どの原子とどの原子が隣り合っているか、原子間の距離がどの程度かなど) が得られるので、化合物の分子構造や組成、物理化学的性質を分析する方法として様々な分野で日常的に利用。 [JEOL_JNM-ECA600]	横山利彦センター長 水川哲徳技術職員 賣市幹大技術職員 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、有機薄膜の各種物性評価を支援。昇華精製装置による有機半導体単結晶の作製、真空蒸着装置・スピコート装置による有機薄膜の作製、太陽電池デバイス作製、擬似太陽光源を用いた太陽電池特性評価等が可能。また、ケルビンプローブ、AFM, SEM 等による、有機半導体薄膜の各種物性評価が可能。 [有機太陽電池の作製・評価、有機薄膜・単結晶の作製・各種物性評価]	平本昌宏教授 伊澤誠一郎助教	物質分子科学 物質分子科学
機能性分子システム創製 (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 廣部大地助教	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 (有機合成)	不斉分子触媒の配位子、不斉有機分子触媒などの合成、有機小分子の合成を支援。また、有機分子の光学異性体の光学純度の測定、ならびに、キラルセミアンプリングによる光学異性体の分離が可能。 [有機分子の設計、合成、解析、光学異性体の評価、分離精製]	榎山儀恵准教授 鈴木敏泰チームリーダー 大塚尚哉特任研究員	生命・錯体分子科学 機器センター 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	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実施。 [超高真空下での磁性薄膜作成・磁気光学 Kerr 効果によるその場観察評価。紫外レーザー磁気円二色性光電子顕微鏡も利用可]	横山利彦教授 小坂谷貴典助教 山本航平助教	物質分子科学 物質分子科学 物質分子科学
機能性分子システム創製 (金属錯体)	金属錯体の設計、合成、構造解析および触媒機能評価を支援。光学特性および電気化学特性の評価が可能。 [金属錯体の設計、合成、構造解析、光学特性評価、電気化学特性評価]	草本哲郎准教授	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 竹入史隆助教	物質分子科学 物質分子科学
機能性分子システム創製 (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 2019年度採択課題一覧 分子科学研究所担当分 (2020年3月31日現在)

(1) 協力研究

課 題 名	支援機器等	代 表 者
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
分子間力の精密制御を目的としたマイクロ空間の開発と新規物質材料の創製	装置開発	京都府立大学大学院生命環境科学研究科 沼田 宗典
縮退 $\pi$ 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
有機ディラック電子系における量子エンタングルメント開拓	有機FET	東邦大学理学部 田嶋 尚也
有機ディラック電子系をチャンネルとしたデバイスの表面評価	装置開発	東邦大学理学部 田嶋 尚也
ガラス流路の作製	装置開発	愛知教育大学教育学部 日野 和之
NMR装置を用いた糖鎖および糖タンパク質の動的構造解析	有機FET	名古屋大学大学院工学研究科 矢木 宏和
有機電荷移動錯体の压力下・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
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
A Density Functional Theory Insight towards the Design of Ionic Liquids for CO <sub>2</sub>	量子計算	Rajamangala University of Technology Thanyaburi Karan Bobuatong
Solvation and Interface Dynamics of Silver Nanoparticles Surrounded by Polymer Matrix and Small Organic Molecules	量子計算	Indian Institute of Information and Technology, Hyderabad U. Deva Priyakumar
ヒト肝ミクロソームを用いた $\alpha$ -PPPの光学活性代謝物の生成量評価	有機合成	石川県警察本部刑事部科学捜査研究所 村上 貴哉
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
低速摩擦すべりによる石英中のE <sub>1'</sub> 中心の生成機構の解明	E680	東北大学大学院理学研究科 田中 桐葉
ナノ炭素クラスターの電子状態の評価	量子計算	東京学芸大学教育学部 前田 優
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
エピタキシャル有機半導体pn接合の結晶性向上およびデバイス応用へ向けた探索(II)	太陽電池	東京理科大学理工学部 中山 泰生
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
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	機器センター 長協力研究	京都大学化学研究所 高谷 光
連続照射マイクロ波を用いた環境低負荷型反応の開発と天然由来日天然物創成への応用	結晶スポンジ法	大阪大学大学院薬学研究科 山田真希人
新規触媒の不斉環化反応の開発を目指したスピロ型ビスヒドロキサム酸塩およびキラルチオキサチリウム塩の合成	有機合成	横浜国立大学大学院環境情報研究院 星野雄二郎
キタエフ量子スピン液体物質へのキャリアドーピング	有機FET	東京大学大学院新領域創成科学研究科 橋本顕一郎
蛍石型構造を有する新規ヒドリド導電体の開発	無機材料	京都大学大学院工学研究科 陰山 洋
無人航空機の誘導制御機構の開発	装置開発	基礎生物学研究所 西海 望
C <sub>60</sub> 結晶の分光研究	太陽電池	京都大学化学研究所 金光 義彦
Theoretical Insight into Uranium-Based Endohedral Clusterfullerenes Sc <sub>2</sub> UX@C <sub>80</sub> (X = C & N)	量子計算	Xi'an Jiaotong University, China Xiang Zhao
紫外線光電子分光によるカーボン担持型メタン酸化触媒の電子状態解析	ARUPS	名古屋大学物質科学国際研究センター 山田 泰之
高品位有機単結晶表面・界面の超高真空中での安定性	太陽電池	筑波大学数理物質系 山田 洋一
環状骨格内に存在するヘテロ金属中心間のスピンカップリング挙動の追跡	金属錯体	お茶の水女子大学基幹研究院自然科学系 三宅 亮介
振動分解電子運動量分光へ向けた超高分解能電子分光器の開発	装置開発	東北大学多元物質科学研究所 中島 功雄
結晶スポンジ法を用いたステロイドおよびアルカロイド類の構造解析	結晶スポンジ法	東京農工大学大学院工学研究院 長澤 和夫
中温域で作動するプロトン導電体の開発	無機材料	大阪工業大学工学部 松田 泰明
光合成タンパク質複合体3Dモデル製作	装置開発	基礎生物学研究所 皆川 純
環境半導体マグネシウムシリサイド単結晶表面の電子構造と格子構造	ARUPS	山形大学理学部 北浦 守
有機半導体層の電子物性と光電変換機能	太陽電池	豊橋技術科学大学大学院機械工学系 伊崎 昌伸
有機ELデバイスの高機能化および電極界面物性評価	太陽電池	富山大学 森本 勝大
HIV-1ゲノムRNAの5'-UTRに由来するRNAの構造解析	E680	芝浦工業大学工学部 幡野 明彦
有機高分子の仕事関数の評価	太陽電池	理化学研究所 中野 恭兵
免疫調節活性を持つ複合脂質・糖質分子の構造解析	800 溶液	慶應義塾大学理工学部 藤本ゆかり
フッ素化有機n型半導体の開発	有機合成	慶應義塾大学理工学部 中嶋 敦
イオン性分子が形成する相のX線構造解析	無機材料	東京理科大学理学部 中 裕美子

『超原子ドーピング』概念に基づく高導電性 n 型有機半導体薄膜の作製と太陽電池応用	太陽電池	東北大学学際科学フロンティア 上野 裕 研究所
高磁場 NMR 計測によるオリゴ糖鎖の動的構造解析	800 溶液	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

## (2) 施設利用

課 題 名	支援機器等	代 表 者
バクテリア光センサータンパク質群の機能解析	iTC200	日本大学生物資源科学部 高野 英晃
パルス EPR を用いた一重項分裂により生じる五重項状態の構造に関する研究	E680	神戸大学分子フォトサイエンス 長嶋 宏樹 研究センター
X線結晶構造解析による新規合成有機化合物の構造決定	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
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	EMX E500 MS-7 XL-7 600 溶液	愛知工業大学工学部 梶田 裕二
新規金属導入ポリオキソメタレート錯体の酸化還元反応メカニズムの定量的解析	EMX E500 600 溶液	高知大学教育研究部 上田 忠治
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 VP-DSC iTC200 熱解析	愛知教育大学教育学部 日野 和之
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氣的性質の解明	CCD-1 CCD-2 微小結晶 MS-7 XL-7 熱解析	岐阜大学教育学部 萩原 宏明
多元化合物半導体ナノ粒子の光学特性および構造評価	ラマン 蛍光分光 紫外・可視 ・近赤外 ピコ秒	名古屋工業大学大学院物理工学専攻 濱中 泰
アゾベンゼン含有磁性錯体へ光渦 UV 照射による超分子らせん分子配向誘起の CD 測定	円二色性	東京理科大学理学部 秋津 貴城
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氣的性質	CCD-1 CCD-2 微小結晶 粉末 X 線 蛍光 X 線 E500 MS-7 XL-7	金沢大学国際基幹教育院 三橋 了爾
フッ化物正極の磁氣的性質の解明	MS-7	京都大学先端イノベーション拠点施設 高見 剛
三座配位子を有する新規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
Co/Cu 多層細線, NiPd ナノ粒子の磁氣的性質の解明	MS-7 XL-7	岐阜大学工学部 嶋 睦宏
Nb <sub>3</sub> Sn 超伝導線材の高磁場特性改善に向けた添加元素効果	MS-7 XL-7	核融合科学研究所 菱沼 良光
金属酵素活性部位のモデル錯体による電子構造解析	EMX E500 紫外・可視 ・近赤外 600 溶液	奈良女子大学研究院自然科学系 藤井 浩

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 微小結晶 MALDI-TOF	愛知学院大学薬学部	小川 法子
KI 結晶中に生成した AgI ナノ結晶の光学応答の研究	蛍光 X 線 蛍光分光 紫外・可視 ・近赤外 ピコ秒	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
光エネルギー変換物質の励起状態の研究	E680 蛍光分光 ピコ秒	大阪市立大学理学部	松岡 秀人
多周波 EPR 法を用いた光合成反応過程の解析	E680 EMX E500 MS-7 XL-7	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(etdt) <sub>2</sub> ] (M = Ni, Pd, Pt, Au) の合成および物性研究	MS-7 XL-7	日本大学文理学部	周 彪
幾何フラストレーション磁性体の合成と電場効果	CCD-1 微小結晶 MS-7 XL-7 熱解析	成蹊大学理工学部	藤田 渉
光受容タンパク質ロドプシン類 KR2 のレチナル構造の水和依存性解析 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 ラマン	名古屋工業大学大学院工学研究科 大分大学医学部	古谷 祐詞 小川 雄大
含窒素複素環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
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	EMX E500	豊田理化学研究所	黒田 新一
反転対称性の破れた反強磁性体における精密輸送特性測定に向けた試料加工法の確立	SEM 低 SEM MS-7 XL-7 ピコ秒	名古屋大学大学院工学研究科	浦田 隆広
超短パルスレーザー照射によるカーボン表面の撥水性制御	SEM 低 SEM ラマン FT 蛍光分光 紫外・可視 ・近赤外	名古屋工業大学	小野 晋吾
アミノピリジンを配位子とする二核金属錯体の構造解析と電子状態	CCD-1 CCD-2 微小結晶 MS-7 XL-7	島根大学大学院自然科学研究科	片岡 祐介
Cu(I) 錯体の励起状態構造の時間分解 ESR による解明	E680 EMX E500 紫外・可視 ・近赤外	群馬大学大学院理工学府	浅野 素子
異種金属一次元状多核錯体の構造解析と磁気物性	CCD-1 CCD-2 微小結晶 MS-7 XL-7	岐阜大学工学部	植村 一広
有機磁性体の低温構造と量子磁気状態の解明研究	CCD-1 CCD-2 微小結晶 EMX E500 MS-7 XL-7 熱解析	大阪府立大学大学院理学系研究科	細越 裕子

機能性ナノマテリアルの構造および物性評価	微小結晶 粉末X線 蛍光X線 EMX E500 MS-7 XL-7 熱解析 MALDI-TOF ラマン FT 蛍光分光 紫外・可視 ・近赤外 円二色性 ピコ秒	法政大学生命科学部	緒方 啓典
希土類金属ドーブ型ビスマフェライトナノ粒子の磁性に関する研究	XL-7	山形大学大学院理工学研究科	有馬ボシール アハンマド
金属ナノ粒子担持型グラフェンオキシ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
Zn 基準結晶のスピンガラスを含む磁気秩序と抵抗発散	CCD-1 CCD-2 粉末X線 MS-7 XL-7 熱解析	北海道大学大学院工学研究院	柏本 史郎
トポロジカル半金属候補材料マグネシウムタンタル窒化物薄膜の作製と物性評価	MS-7 XL-7	静岡大学大学院工学領域	川口 昂彦
ニトリル置換ジチアシクロペンテンオリゴマーの合成と固体状態での分子配列と電子状態の解明	CCD-1 CCD-2 微小結晶 EMX E500 MS-7 XL-7	静岡大学工学部	植田 一正
強弾性を有する有機-無機複合磁性体でのスピンドYNAMIXの研究	EMX E500 MS-7 XL-7	広島大学大学院理学研究科	井上 克也
複合機能材料を志向した有機結晶の構造と物性	CCD-1 CCD-2 微小結晶 XL-7	愛媛大学大学院理工学研究科	白旗 崇
c-FLIP タンパク質の新規機能獲得に関する検証 (第3期)	E500	京都大学大学院生命科学研究科	酒巻 和弘
深紫外発光デバイスの高効率化のための a 軸配向 Fe 添加 AlN 薄膜の単結晶化研究	低 SEM ラマン	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田 早紀
新奇鉄硫黄クラスター含有酵素の EPR による性状解析	EMX E500	埼玉大学大学院理工学研究科	藤城 貴史
昆虫のクチクラの微細構造の解析	低 SEM	基礎生物学研究所	安藤 俊哉
フェリ磁性フェライト薄膜およびナノ粒子における磁気配列に関する研究	E500 MS-7 XL-7	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
キラル有機伝導体の ESR 測定	微小結晶 E500	大阪大学大学院理学研究科	坪 広樹
ラマン分光法による腫瘍の細胞外マトリクス動態解析	ラマン	東北大学大学院医工学研究科	大嶋 佑介
ラマン分光法による電極触媒の結晶構造評価	ラマン	北九州市立大学国際環境工学部	天野 史章
糖鎖脂質含有二重膜表面で誘起されるアミドイド $\beta$ 会合状態の固体 NMR を用いた構造解析	600 溶液	名古屋市立大学大学院薬学研究科	矢木 宏和
空間反転対称性を持つトポロジカル磁性体の新規開拓	XL-7	大阪大学大学院基礎工学研究科	高橋 英史
$\text{Co}_{3-x}\text{Ni}_x\text{O}_4$ ( $x = 0-1.28$ ) の磁性の解明	MS-7 XL-7	岐阜大学大学院工学研究科	林 兼輔
酸化物固定化金属ナノクラスター・ナノ粒子触媒の表面構造解析	蛍光X線 ESCA 熱解析	名古屋大学大学院理学研究科	邨次 智
コロル多核錯体を利用した分子ワイヤーの開発	E500 MS-7 XL-7	島根大学大学院総合理工学研究科	池上 崇久

有効磁気モーメント法によるフリーラジカル数分析	E680 EMX E500 MS-7 XL-7	産業技術総合研究所物質計測標準研究部門	松本 信洋
光誘起複合機能的物質 TTF-R 系におけるアドバンスド ESR 法によるメカニズム解明	E680 EMX E500 MS-7 XL-7 微小結晶	新潟大学研究推進機構	古川 貢
金属錯体を捕捉した人工蛋白質の創成と評価	E500 VP-DSC	名古屋大学大学院理学研究科	榎原えりか
キノイド骨格を有するジフルオレノフラン誘導体の電子状態	EMX E500 MS-7 XL-7	城西大学理学部	秋田 素子
新規ファラデー材料に向けたナノ構造薄膜及びナノ磁性微粒子分散キセロゲルの磁氣的性質	MS-7 XL-7	静岡大学工学部	中嶋 聖介
新規共有結合性有機構造体の磁性研究	EMX E500 MS-7 XL-7	シンガポール大学	Donglin JIANG
光学異性体をもつ有機伝導体 DHTTP 系の電子スピン共鳴研究	E500 MS-7 XL-7	茨城大学理学部	西川 浩之
植物由来成分を用いた多価アルコールの合成とその架橋反応	MALDI-TOF	山梨大学大学院総合研究部	森長 久豊
半導体/超伝導体ナノ複合材料の磁気構造	MS-7 XL-7	神戸大学大学院理学研究科	内野 隆司
強磁性共鳴分析による白亜紀末北太平洋における生物源磁鉄鉱形状の変動の解読	EMX	海洋研究開発機構海域地震火山部門	白井 洋一
3d 遷移金属水酸化物ナノシートの水溶液中での安定化と磁性制御	MS-7 XL-7 紫外・可視 ・近赤外	金沢大学理工研究域	川本 圭祐
近赤外発光材料を志向したハロゲン結合性超分子錯体の構造解明	CCD-1 CCD-2 微小結晶 蛍光分光 ピコ秒	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	盛田 雅人
光照射電子スピン共鳴によるガーネットシンチレータ結晶における浅い電子捕獲中心の解明	EMX E500	山形大学理学部	北浦 守
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性能評価	SEM 低 SEM ピコ秒	名古屋大学未来社会創造機構	宇理須恒雄
ペロブスカイト化合物における電子状態の研究	EMX E500 MS-7 XL-7	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	大久保 晋
0.5eV より小さいバンドギャップを持つ熱電材料のバンドギャップ評価	FT	大阪府立大学大学院理学系研究科	小菅 厚子
グラフェンを付加させたハイブリッドポリマーの特性評価	SEM 低 SEM EMX E500 MS-7 XL-7 熱解析 ラマン FT 紫外・可視 ・近赤外	大阪工業大学工学部	平郡 論
複合機能的鉄錯体の波長依存した光誘起相の極低温構造解析	微小結晶	神戸大学大学院理学研究科	高橋 一志
開裂活性分子の加熱によるスピン生成	EMX	大阪大学大学院工学研究科	焼山 佑美
新規紅色細菌 <i>Blastochloris tepida</i> の耐熱性メカニズムの解明	VP-DSC	神戸大学大学院農学研究科	木村 行宏
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	E500 XL-7	名古屋工業大学ナノ材料・機能分子創製研究所	増田 秀樹

黒色 $ZrO_{2-x}$ における酸素欠損の結合状態, 電子状態の解明	ESCA EMX E500	熊本大学大学院先端科学研究部	松田 元秀
有機半導体における電子スピン緩和時間計測	E680	大阪市立大学大学院理学研究科	鐘本 勝一
複核金属内包フラーレンアニオンのスピン状態の解明	E680 EMX E500 MS-7 XL-7	首都大学東京理学部	兒玉 健
光照射 ESR 測定を用いた残光体の準安定キャリアの微細構造分析	EMX E500 ラマン 蛍光分光	東京理科大学基礎工学部	岩崎謙一郎
層状強誘電体酸化物 $Sr_2Nb_2O_7$ の低温結晶構造解析	微小結晶	名古屋工業大学	浅香 透
ハロゲン化 EDO-TTF の陽イオンラジカル塩における振動分光学的研究	ラマン	京都大学大学院理学研究科	中野 義明
CPP (シクロパラフェニレン) 関連分子の正イオン・負イオンラジカル生成とその ESR 測定	E680 EMX E500 MS-7 XL-7	京都大学化学研究所	加藤 立久
黒色酸化チタンの物性解析と光触媒機能	E500	信州大学繊維学部	浅尾 直樹
DNA 構造を利用したフラビントリプトファン光誘起ラジカルペア・システムの構築	E680 蛍光分光 紫外・可視 ・近赤外	大分大学全学研究推進機構	岡 芳美
相対論的振る舞いが期待される電子系の磁化率	MS-7 XL-7	愛媛大学大学院理工学研究科	内藤 俊雄
$^{183}W$ NMR による樹脂製造用のタングステン錯体触媒系の分析	600 溶液 TEM	岡山大学大学院自然科学研究科	押木 俊之
超耐熱性酵素の熱変性に関する研究	VP-DSC iTTC200 円二色性	信州大学工学部	天野 良彦
有機電子材料の低温ラマン分析	ラマン	物質材料研究機構	小林 由佳
等温滴定型熱量測定を ATP 合成酵素のヌクレオチド解離定数の解析	iTTC200 円二色性	沼津工業高等専門学校	三留 規誉
ペプチドオリゴマー分子の剛直性比較	E680 EMX E500	東京大学大学院工学系研究科	森本 淳平
Hyb 型ヒドロゲナーゼの HybA サブユニットの鉄硫黄クラスターの酸化還元状態に関する研究	EMX E500	兵庫県立大学大学院生命理学研究科	西川 幸志
$Nb_3Sn$ 薄膜の超伝導特性測定	MS-7 XL-7	高エネルギー加速器研究機構加 速器研究施設	許斐 太郎
分子内プロトン移動とスピン転移を発現する新規鉄二価錯体の磁気的挙動	MS-7 微小結晶用	九州大学先端物質化学研究所	中西 匠
ヘム-セレノラート錯体とヘム-チオラート錯体のスピン状態の比較研究	MS-7 XL-7	名古屋市立大学大学院薬学研究科	樋口 恒彦
ドライミスト噴霧器 噴霧成分分析及び, 原料 CaO の炭素化(経時変化) Fe クラスターの磁気特性の解明	低 SEM MS-7	名三工業株式会社 東京工業大学科学技術創成研究院	久野 一 脇坂 聖憲
新奇磁気伝導特性を示す窒化物薄膜の磁気特性評価	MS-7	名古屋大学大学院工学研究科	羽尻 哲也
フラーレン包接白金ポルフィリン錯体の精密結晶構造解析とロジウム-ジオキソレン錯体の原子価状態の解明	微小結晶 ESCA	岡山理科大学理学部	満身 稔
基板電子状態から独立した単層~数原子層 Bi 超薄膜の電子状態	ARUPS	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪 嘉之
遷移金属ダイカルコゲナイドの励起エネルギー依存 ARPES	ARUPS	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
窒素サーファクタント効果を用いた FeCo 合金超薄膜の作製および磁気特性	XMCD	東京大学物性研究所	宮町 俊生
不活性化した半導体基板上に成長させたフタロシアニン薄膜の電子状態と磁性	XMCD	横浜国立大学大学院工学研究院	大野 真也
フラーレン誘導体 LB 薄膜の表面観察と評価	3次元 マスクレス	愛知教育大学教育学部	日野 和之
神経細胞ネットワークハイスループットスクリーニング装置部品の開発	3次元 マスクレス	名古屋大学革新ナノバイオデバ イス研究センター	宇理須恒雄
無機系キラル結晶微細デバイスの作製	3次元 マスクレス	大阪府立大学大学院工学研究科	戸川 欣彦

リボソーム分取のためのマイクロ流体デバイスの開発	3次元 マスクレス	東京大学大学院総合文化研究科	豊田 太郎
ジャイアントベシクルを2次元平面状に集積するためのマイクロ流体 デバイスの開発	3次元 マスクレス	東北大学大学院理学研究科	今井 正幸
マイクロチャンバーを利用した細胞融合系の確立	3次元 マスクレス	基礎生物学研究所	坪内 知美

### (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。2019年度は3次元2件、ESR EMX 2件、CCD-1 1件、CCD-2 1件、MALDI-TOF 1件、紫外可視近赤外2件、蛍光分光2件、微小結晶1件、低SEM 1件、SEM 1件、ARUPS 1件が採択された。業種別内訳は大企業10件・中小企業1件・公的機関1件であった。

表3 2019年度利用件数一覧（2019年4月～2020年3月）

	協力研究	施設利用	非公開利用
採択件数	56	106	12
実施件数	49	104	12
実施日数	1257	1706	109

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（正式名称は「富岳（ふがく）」と決定）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，2015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：2014年度～2019年度（計画変更あり），システムとアプリケーションの開発。

〔2020年度～，運用・利用研究は，成果創出加速プロジェクトが開始予定〕

・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。

2014年4月～8月，文科省検討委員会で課題決定。

2014年10月公募開始，2014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」（スーパーコンピュータ「富岳」）を駆使することにより，太陽電池，人工光合成による新エネルギーの創出・確保，燃料電池，二次電池によるエネルギーの変換・貯蔵，また，メタンやCO<sub>2</sub>の分離・回収，貯蔵，触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用など，太陽光エネルギー，電気エネルギーや化学エネルギーにおいて中心的な役割を担う複雑で複合的な分子・物質過程に対する電子・分子レベルでの全系シミュレーションを行い，実験研究者，産業界と連携して，高効率，低コスト，また環境に優しく持続可能なエネルギー新規基盤技術を確立する。

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

##### (1) サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保——太陽電池，人工光合成

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

##### (2) サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵——燃料電池，二次電池

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

世代電池技術の重要問題に挑戦し、蓄電・水素エネルギー社会の実現に貢献する。

### (3) サブ課題C エネルギー・資源の有効利用——メタン、CO<sub>2</sub>、高効率触媒

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

### (4) 基盤アプリケーションの設計開発

ポスト「京」(スーパーコンピュータ「富岳」)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」(スーパーコンピュータ「富岳」)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，京大，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 19 名，事務局 2 名+補助者 1 名

・協力機関：78 機関，内企業 27 社

## 5-5-4 2019 年度について

2019 年度は、2016 年度から開始した本格実施(4 年間)の最終年度である。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、基幹機能の開発を完了し「富岳」へ向けた高度化対応を実施している。また、「京」および HPCI 第二階層のスーパーコンピュータを活用して先行的成果を幾つか創出することができた。2017 年度に行われた中間評価での指摘事項に対応するために設置したインフォマティクス活用ワーキンググループ(IA-WG)にて、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を検討している。8 月には第 2 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。3 月に「第 6 回公開シンポジウム」を岡崎コンファレンスセンターで開催し、課題責任者、サブ課題責任者による研究成果報告、基盤アプリ設計開発 WG からアプリケーションプログラム開発成果報告、AI-WG の検討結果報告を予定している。

## 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」(スーパーコンピュータ「富岳」)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。今まで、ご支援いただき誠にありがとうございました。

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

量子コンピュータ・量子シミュレータ・量子センサなど、近年開発競争が激化している量子科学技術は、電子や原子の「波の性質」を活かした質的に新しいテクノロジーである。スパコンでさえ10の何百乗年もかかるような計算を1秒以内で終わらせることができ、機能性材料・薬剤・情報セキュリティ・人工知能などに革命を起こし得るため、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、NSFおよびエネルギー省(DOE)において2019年より新たな量子科学技術プロジェクトが始まった。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」が進行中だ。英国では2014年から5年間で約500億円を投入した「The UK National Quantum Technologies Programme」の第2期が始まった。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進行中である。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2012年度に開始し、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の開発である。ここでは昨年度分子研レポートに報告して以降の研究拠点の活動を概括する。

本プロジェクトは、昨年度、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、より先鋭化させて推進している。

最近の外部向け事業としては、「公開シンポジウム」が2019年3月1日に第14回が東大本郷キャンパス、2019年10月7日に第15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、15回を超えた。さらに内部的な研究交流会として「触媒・電子論合同検討会」「電池・電子論合同検討会」を年2回ずつ開催し、実験と理論研究の交流を促進しながら、研究開発を推進している。合同検討会では実験・理論双方から、研究の進展の報告が行われ、ポスター発表による議論がされている。さらにESICBコロキウムとして、この分野における内外の著名な研究者を招へいた講演会も随時開催しており、現在で24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23、24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も積極的に行っており、実験と理論のインタープレイについては、成果として実験と理論の共著の論文も多く出てきているが、現状で十分とは考えていない。理論計算科学が触媒・電池材料開発を先導する、というプロジェクト本来の役割を今後、より一層意識して研究を進めることが期待されており、この分野における理論計算の役割の重要性がさらに高まってくるものと考えている。

## 5-8 分子科学国際共同研究拠点の形成

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

そこで、2012年度に国際共同の在り方を大きく見直し、2013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（2019-2021）」および「廈門大学化学系学科との分子科学研究加速事業（2019-2021）」が採択。

欧米およびアジアを相手とする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(2016-2021)」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. 2019年度国際共同学位プログラム構築支援事業】

タイのチュラロンコン大学との複数学位制度に関する調査・周知・打合せのため、教員を派遣して具体的な課程や条件を先方の教員と協議した。また同国の VISTEC とデュアルデGREEプログラムの覚え書きを締結した。

#### 【II. 新入生確保のための広報的事業】

アジアを相手とする IMS-IIPA 事業を支援。総合研究大学院大学物理科学研究科と東南アジア各国の主要大学と締結している研究教育交流協定に基づく IMS-IIPA 事業を実施し、6名の大学院生を招へいた。

### (4) 分子科学研究所経常経費

以上の(1)～(3)はそれぞれの枠組みでの種々の制約があり、運用できないものがあるため、研究所の経常経費から補填し運用している。例えば、半年以上滞在する外国人インターン生の支援は以上の枠組みでは困難なため、国内の特別共同利用研究員(以前の受託院生)に対する RA 雇用と同基準での支援を行っている。

## 5-8-2 分子研国際インターンシッププログラム (IMS-IIP)

それぞれの外部資金に合うように別々に実施してきた、院生を主なターゲットにした研修生(インターン)制度を見直し、大きな枠組みで研究所が主導して実施する基幹プログラムとして位置付ける方向で2012年度に見直した。それを受けて2013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、現地あるいはインターネット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、2013年

度は31名、2014年度は39名、2015年度は69名、2016年度は53名、2017年度は60名、2018年度は65名、2019年度の実績は表にあるように51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	タイ	マレーシア	韓国	台湾	オランダ	ポーランド	スリランカ	合計
国際交流提携先からの受入	8	2	2	11	4	4	4	0	0	0	35
その他共同研究による受入	1	2	0	3	0	6	1	1	1	1	16
合計	9	4	2	14	4	10	5	1	1	1	51

2019.1-12

### 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2015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・NANOTEC・VISTEC、マレーシアのマラヤ大学、インドのIISER Kolkata・IACS、韓国科学技術院自然科学部、台湾の国立交通大学・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あり、分子研・総研大の研究力強化と国際化に寄与している。今後はダブルディグリー制度など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としている。

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2004年度7件、

2005年度10件、2006年度12件、2007年度10件、2008年度9件、2009年度12件、2010年度13件、2011年度13件、2012年度11件である。

2013年度より様々な財源をもとに短期外国人研究者招へいプログラムを始めることで、従来の国際協力研究に加え、国際施設利用（協力的研究であり、単なる設備利用はない）にも拡大した結果、2013年度35件、2014年度31件、2015年度40件、2016年度45件、2017年度48件、2018年41件と推移しており、2018年10月から2019年9月までの1年間は44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

44件（2018.10-2019.9 実施状況）

代表者	研究課題名	相手国
飯野 亮太	ATP合成酵素の1分子観察	シンガポール
飯野 亮太	セルラーゼの1分子構造ダイナミクス	アメリカ
飯野 亮太	タンパク質のSTM観察	ドイツ
飯野 亮太	ヒト cytochrome P450 family 17, subfamily A のタンパク質工学	台湾
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
江原 正博	[2+2] Cycloaddition Reaction on the Basis of Fullerenes Actuated via Nitrene	中国
江原 正博	Theoretical Analysis on P-NMR of Phosphorus-Modified Zeolites	タイ
江原 正博	Theoretical Chemistry of Supramolecules and Frameworks Based on Metal Complexes	ノルウェー
大森 賢治	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	中国, オーストラリア, ドイツ 他
大森 賢治	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	フランス, オーストリア 他
岡本 裕巳	Observation and Manipulation of Optical Characteristics of Gold Nanoparticle Assemblies	ポーランド
岡本 裕巳	Plasmon Resonances of Metal Nanoparticles	韓国
岡本 裕巳	キラルプラズモンによる結晶核生成の可能性	台湾
加藤 晃一	Structural Basis of Functional Proteins for Understanding Their Working Mechanism Using Structural Biology and Biophysical Techniques	タイ
加藤 晃一	阻害剤添加による HIV 逆転写酵素の構造・ダイナミクスへの影響	タイ
加藤 政博	アンジュレータによる光渦放射	イラン
解良 聡	金属基板上の有機薄膜の軌道断層撮影	ドイツ
解良 聡	酸化物表面の電子構造	中国
解良 聡	ペロプスカイト型有機無機複合化合物の電子構造	中国
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
斉藤 真司	光合成細菌における励起エネルギー移動の研究	アメリカ
杉本 敏樹	パラジウム表面の原子レベル STM 観測	ドイツ
杉本 敏樹	表面界面における水の構造と機能解明	ドイツ
平等 拓範	固体レーザーの開発（セミナー，研究打合せ）	トルコ
平等 拓範	固体レーザーの開発（セミナー，研究打合せ）	ドイツ
平等 拓範	固体レーザーの開発（研究打合せ）	アメリカ
田中 清尚	ARPES Study of Electronic Compressibility in Hole Doped Perovskite Iridates	中国

田中 清尚	Study on Interaction between Charge Density Wave Collective Modes and Electrons	韓国
中村 敏和	1次元有機導体の物性解明	韓国
山本 浩史	光触媒に関する研究	中国
山本 浩史	有機超伝導デバイスの断面 STM 測定	台湾
松井 文彦	装置開発打ち合わせ	ドイツ
UVSOR 施設利用	Chemical and Spatial Identification for Gas-Dependent Nanobubbles Sandwiched in Graphene Liquid Cells	台湾
UVSOR 施設利用	Direct Molecular Level Observation of Micelle Formation in Marine Cloud Water Model Systems	フィンランド
UVSOR 施設利用	High-Pressure Soft X-Ray Microscopy of CO <sub>2</sub> Fluids	台湾
UVSOR 施設利用	Molecular Level Chemical and Structural Characterization of Individual Ambient Rural and Complex Laboratory Generated Secondary Organic Aerosol Samples	フィンランド
UVSOR 施設利用	Redox-Sensitive Nanocarriers for Controlled Dermal Drug Delivery	ドイツ
UVSOR 施設利用	Comprehensive Characterization of Monolithic Polymers by Scanning Transmission X-Ray Microscopy (STMX)	オーストラリア
UVSOR 施設利用	Interfacial Electronic Structure of Metal-Free Photocatalytic Water Splitting Material	台湾
UVSOR 施設利用	Microphysical and Chemical Properties of Soot Particles upon Aging	スウェーデン
UVSOR 施設利用	Oxidation-Sensitive Nanocarriers for Controlled Dermal Drug Delivery	ドイツ
UVSOR 施設利用	Probing Ion Pairing Effects in Hydrated Carboxylate Ions by Means of Soft X-Rays Absorption Spectroscopy	タイ, フランス
UVSOR 施設利用	Probing the Microscopic Electronic Structures for Developing Flexible/Foldable Supercapacitor	台湾

## 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2013年度から10年間の事業であり、(A)研究戦略や知財管理等を担う研究マネジメント人材群（所謂，URA：University Research Administrator）の確保・活用と(B)集中的な研究環境改革による大学等の教育研究機関の研究力強化のための支援事業である。

自然科学研究機構では、機構本部に研究力強化推進本部（担当理事が本部長）、5研究所に研究力強化戦略室が設置され、それぞれ研究マネジメント人材（自然科学研究機構では年俸制の特任教員、特任研究員、特任専門員の雇用を可能にした）を配置し、研究力強化戦略会議（議長は機構長。理事、各機関の長5名、各機関の副所長或いは相当職5名、及び推進本部特任教授がメンバー）の下で一体的に活動することになった。なお、研究力強化戦略室の室長は研究力強化戦略会議メンバーである副所長相当職（分子研の場合は研究総主幹）を機構長が指名し、各機関の以下に述べる項目に関する研究マネジメント体制を考えることになった。

自然科学研究機構では、研究力強化のために①国際共同研究支援、②国内共同研究支援、③広報、④研究者支援（外国人、女性、若手）の4本柱を立てて本事業を開始した。また現在では、これらに加えて、⑤IR（Institutional Research）の機能を事業に含めて運営することとなっている。戦略室の中に広報機能が入ることになったため、分子研では広報室は戦略室に一本化した。また、これまでの史料編纂室機能は研究評価・研究企画に利用すべくIR資料室的機能を持たせて戦略室に含め、⑤IR機能、及び評価・企画を含めて統合的に運用することにした。所長は、戦略室の支援によって、より広い見地からの研究力強化の戦略を立てる。

2019年は今年の活動に引き続き、以下の活動を行った。

- ・研究所の研究力強化のための評価・提言を戴いた。

研究顧問

2019年3月28日-29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）

- ・研究所の現状と将来に関する評価・提言を受けるため、国際諮問委員会を開催した（2019年12月9日-11日）。詳細は7-1に記載。
- ・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8名、ドイツ2名、フィンランド2名、タイ11名、マレーシア4名、韓国4名、台湾4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。

2019年6月 NANOTEC（タイ）、マラヤ大学、チュラロンコン大学、カセサート大学

2019年12月 カセサート大学

2019年12月 厦門大学

また同様に下記の受入れを行った。

2019年4月 国立交通大学（台湾）

2019年4月 厦門大学

2019年12月 韓国化学会 物理化学ディビジョン

2019年12月 中央研究院 原子與分子科學研究所

## 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2016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」（2017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（2016年～2021年度）計画の事業を申請し、採択された。その内容の概略は、以下の通りである。

従前の分子観測と分子理論は、分子そのものの特性を描き出すことで分子の多様な構造と機能を解明することに大きく寄与したが、マイクロとマクロの間で起こる分子システムに特徴的な挙動を観察し、それを解釈しようという視点が重要になりつつある。従来の分子観測法・理論から一步踏み出した、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。

2016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、2018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。