

「分子研リポート 2019」 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 研究領域.....	15
2-6 研究施設.....	21
2-7 研究部門等.....	23
2-8 構成員.....	24
2-8-1 構成員.....	24
2-8-2 人事異動状況.....	32
2-9 財 政.....	33
2-9-1 現 員.....	33
2-9-2 財 政.....	33
2-10 岡崎共通施設.....	36
2-10-1 岡崎情報図書館.....	36
2-10-2 岡崎コンファレンスセンター.....	36
2-10-3 岡崎共同利用研究者宿泊施設.....	36
2-10-4 職員会館.....	36
2-11 その他.....	37
2-11-1 知的財産.....	37
3. 共同研究と大学院教育.....	39
3-1 共同利用研究.....	40
3-1-1 共同利用研究の概要.....	40
3-1-2 2019年度の実施状況.....	40
3-1-3 共同利用研究実施件数一覧.....	56
3-2 国際交流と国際共同研究.....	57
3-2-1 外国人客員部門等及び国際交流.....	57
3-2-2 岡崎コンファレンス.....	61
3-2-3 日韓共同研究.....	67

3-3	大学院教育	69
3-3-1	特別共同利用研究員	69
3-3-2	総合研究大学院大学二専攻	70
3-3-3	オープンキャンパス・分子研シンポジウム	74
3-3-4	夏の体験入学	75
3-3-5	総研大アジア冬の学校	76
3-3-6	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	76
3-3-7	統合生命科学教育コース群	78
4	研究支援等	79
4-1	技術課	80
4-1-1	技術研究会	80
4-1-2	技術研修	83
4-1-3	人事	84
4-1-4	受賞	84
4-2	安全衛生管理室	86
4-3	社会との交流	87
4-3-1	自然科学研究機構シンポジウム	87
4-3-2	大学共同利用機関シンポジウム	88
4-3-3	分子科学フォーラム	89
4-3-4	分子研コロキウム	89
4-3-5	岡崎市民大学講座	91
4-3-6	その他	92
4-4	理科教育への協力	93
4-4-1	スーパーサイエンスハイスクール	93
4-4-2	コスモサイエンスコース	93
4-4-3	あいち科学技術教育推進協議会	94
4-4-4	国研セミナー	94
4-4-5	小中学校での出前授業	95
4-4-6	職場体験学習	98
4-4-7	その他	99
4-5	一般公開	100
4-6	見学者受け入れ	101
4-7	プレスリリース	103
5	各種事業	107
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	109
5-2	新分野創成センター（自然科学研究機構）	112
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）	113
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）	114

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)	127
5-5-1	はじめに	127
5-5-2	重点課題⑤研究課題について	127
5-5-3	重点課題⑤実施体制について	128
5-5-4	2019年度について	128
5-5-5	今後の課題と取組みについて	128
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)	129
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)	130
5-8	分子科学国際共同研究拠点の形成	131
5-8-1	国際共同研究事業の財源	131
5-8-2	分子研国際インターンシッププログラム (IMS-IIP)	132
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)	133
5-8-4	短期外国人研究者招へいプログラム	133
5-9	研究大学強化促進事業 (文部科学省)	136
5-10	ネットワーク型研究加速事業 (自然科学研究機構)	137
6.	研究活動の現状	139
6-1	論文発表状況	140
6-2	メゾスコピック計測研究センター	141
	織細計測研究部門	143
	広帯域相関計測解析研究部門	149
6-3	協奏分子システム研究センター	153
	階層分子システム解析研究部門	154
	機能分子システム創成研究部門	161
6-4	理論・計算分子科学研究領域	168
	理論分子科学第一研究部門	168
	理論分子科学第二研究部門	178
	計算分子科学研究部門	181
	理論・計算分子科学研究部門	195
6-5	光分子科学研究領域	200
	光分子科学第二研究部門	200
	光分子科学第三研究部門	206
	光源加速器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)	213
	電子ビーム制御研究部門 (極端紫外光研究施設)	216
	光物性測定器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)	221
	光化学測定器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)	223
6-6	物質分子科学研究領域	225
	電子構造研究部門	225
	電子物性研究部門	234
	分子機能研究部門	237
6-7	生命・錯体分子科学研究領域	247
	生体分子機能研究部門	247
	生体分子情報研究部門	269
	錯体触媒研究部門	271
	錯体物性研究部門	280

6-8	特別研究部門	290
6-9	社会連携研究部門	294
6-10	研究施設等	306
	計算科学研究センター（ネットワーク担当）	306
	技術課及び安全衛生管理室	308
7.	点検評価と課題	309
7-1	国際諮問委員会による点検評価	310
8.	研究施設の現状と将来計画	327
8-1	極端紫外光研究施設（UVSOR）	328
8-2	機器センター	331
8-3	装置開発室	334
8-4	計算科学研究センター	335
8-5	生命創成探究センター	337
9.	資 料	339
9-1	歴代所長	339
9-2	評議員（1976～1981）	340
9-3	評議員（1981～2004）	341
9-4	運営顧問（2004～）	345
9-5	外国人評議員（1976～2004）	346
9-6	外国人運営顧問（2004～）	347
9-7	運営に関する委員会委員（1975～1981）	348
9-8	運営協議員（1981～2004）	349
9-9	運営会議委員（2004～）	353
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	355
9-11	自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則	356
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	359
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）	360
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）	362
9-15	大学共同利用機関法人自然科学研究機構年度計画（令和2年度）	367

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。また、分子研独自の産学協同研究を推進することを目的に、2019年度には「社会連携研究部門」を設置しました。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。2019年度からは、分子研の共同利用の施設や設備の高度な利用を目指して、所外の研究機関との協定に基づき、クロスアポイントメントによる研究人事を開始しました。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。

このレポートには、2019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。

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 Programme)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。海外の大学などとの組織的な連携協定も積極的に進めています。2019年度は、新たに中国廈門大学の固体表面物理化学国家重点実験室と機関間協定を締結し、研究職員の交流及び廈門大学の大学院生を招聘し国際的な人材育成を強化しています。

分子研の人の流れは常に活発であり、2019年度も多くの人事異動がありました。4月1日付で南谷英美准教授(元東京大学工学系研究科講師)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。また、12月1日付で高谷光准教授(京都大学化学研究所准教授)が新たな制度である、クロスアポイントメント教員として着任され、5年間の研究開発を始められました。4月1日付で、社会連携研究部門に平等拓範特任教授(国立研究開発法人理化学研究所放射光科学研究センター・チームリーダー)が着任され、オープンイノベーションに向けた新たな取り組みが始まりました。一方、昨年度3月31日付で極端紫外光研究施設の加藤政博教授が転出され、広島大学放射光科学センター教授に着任されました。加藤政博教授は、引き続きクロスアポイントメントで分子科学研究所教授として極端紫外光研究施設の運営にご尽力いただきます。同じく3月31日付でメゾスコピック計測研究センターの藤貴夫准教授と生命・錯体分子科学研究領域の正岡重行准教授も転出され、それぞれ豊田工業大学大学院工学研究科教授と大阪大学工学研究科教授に着任されました。また、長年にわたり分子科学研究所の教育研究に対するご業績と運営に対するご貢献に対して、4月1日付で、小杉信博先生と渡辺芳人先生に名誉教授が授与されました。ここでは、研究室の

主宰者のお名前のみを書かせていただきましたが、多くの助教の方々が着任あるいは転出されました。転出された先生方には、分子研の科学と技術を支えてこられたこと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、2019年3月28日－29日に岡崎にて全ての研究室主宰者から提示される2019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。2020年度の研究計画についてのヒアリングは、2020年5月13日－14日に行う予定です。

2019年度は中期計画の4年目に当たります。次年度は、次期中期計画策定に向けての検討を開始する時期に当たります。そこで、この機に研究所の運営に対するアドバイスと将来に向けての検討事項についてご意見をいただくことを目的として、国際諮問委員会を2019年12月9日－11日の3日間開催し、国際的な観点からのご意見をいただきました。国際諮問委員会は、運営委員を中心として外国人運営顧問を勤められた方々および国内外の有識者に参加いただきました。委員会は松本吉泰豊田理化学研究所常勤フェロー、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、森 初果東京大学物性研究所所長、瀧川 仁東京大学物性研究所教授、石川 哲也理化学研究所放射光科学研究センター長、Peter Rossky ライス大学教授、Ron Naaman ワイツマン科学研究所教授、Benjamin List ドイツマックス・プランク石炭研究所教授の9名で構成され、研究所の運営に対して活発なご議論をいただきました。当委員会のレポートは、松本吉泰委員長、Peter Rossky 副委員長を中心にまとめられ、本誌にも掲載されております。

2020年3月
自然科学研究機構
分子科学研究所 所長
川合 真紀

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。

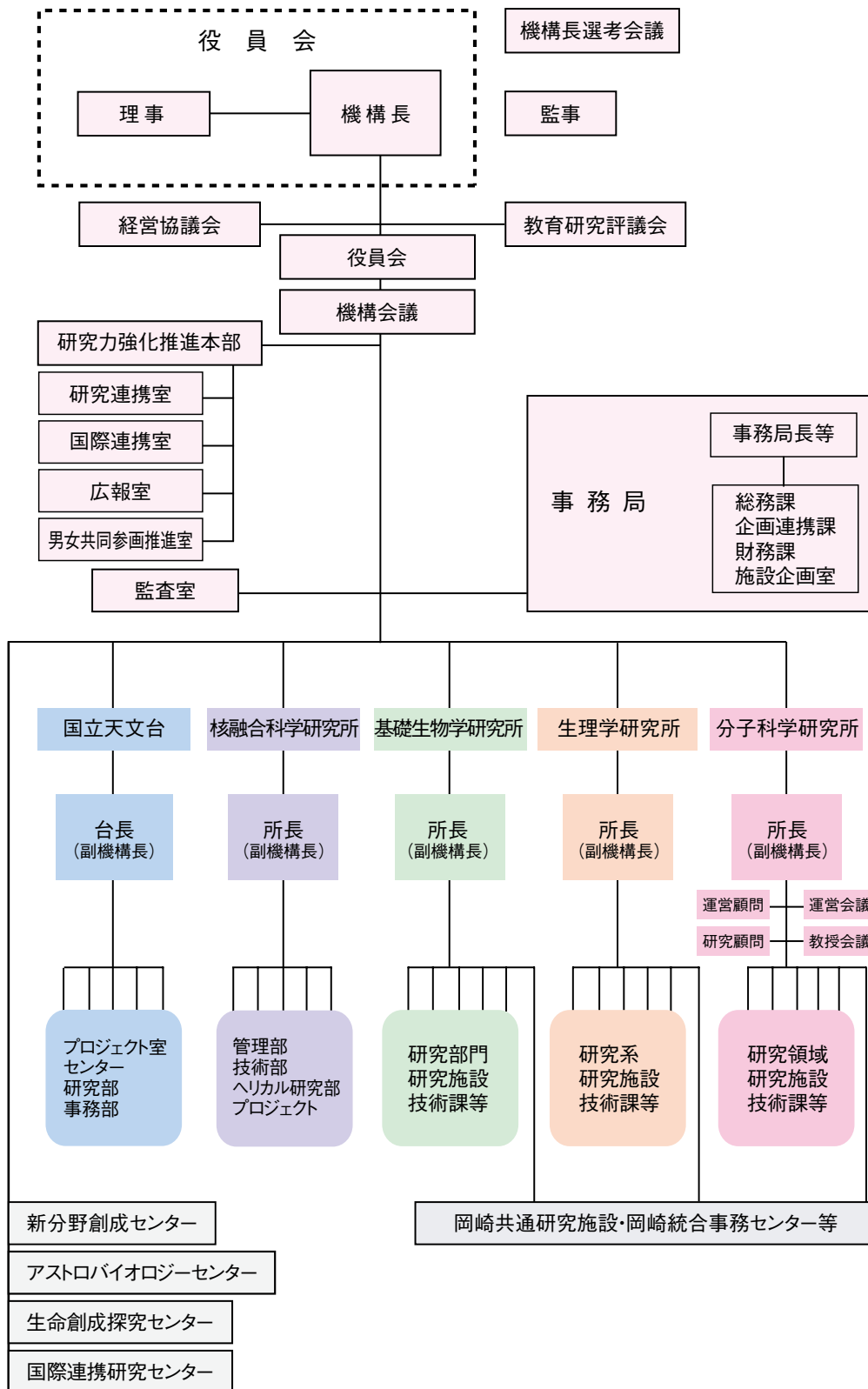
1965. 12.13 日本学術会議は、「分子科学研究所」(仮称)の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
1973. 10.31 学術審議会は、「分子科学研究所」(仮称)を緊急に設立することが適当である旨、文部大臣に報告した。
1974. 4.11 文部大臣裁定により、東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室(室長：井口洋夫前東京大学物性研究所教授、定員3名)及び分子科学研究所創設準備会議(座長：山下次郎前東京大学物性研究所長、学識経験者35人により構成)が設置された。
1974. 7. 6 分子科学研究所創設準備会議において、研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
1975. 4.22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

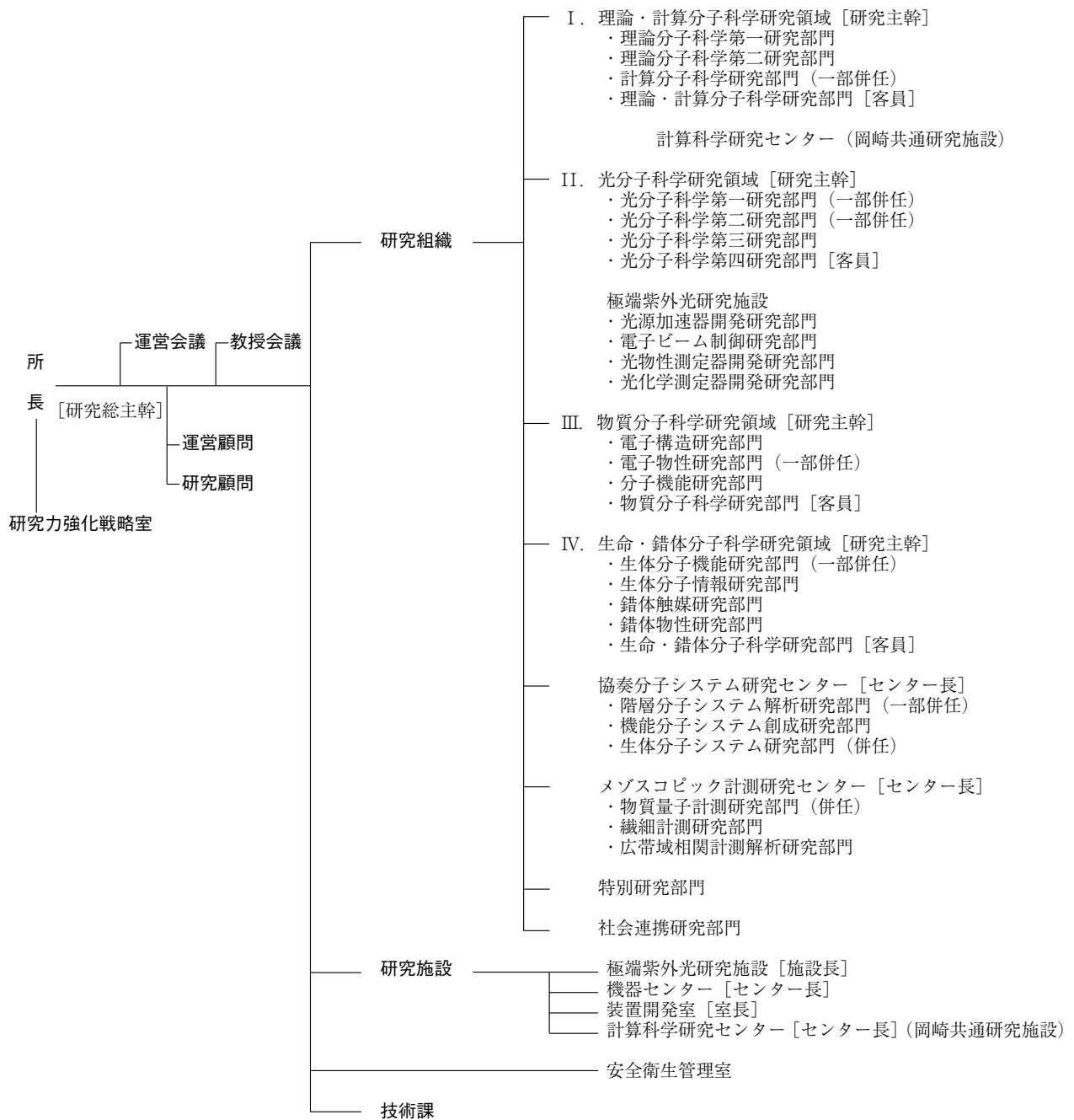
1979. 4. 1 分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され、管理局が総務部（庶務課、人事課、国際研究協力課）、経理部（主計課、経理課、建築課、設備課）、技術課に改組された。
1979. 11. 8 分子科学研究所創設披露式が挙行された。
1981. 4. 1 第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4.14 国立学校設置法の一部を改正する法律により、分子科学研究所と生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所、生理学研究所）は総合化され、岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され、管理局が岡崎国立共同研究機構管理局となり、技術課が研究所所属となった。
1982. 4. 1 研究施設として極端紫外光実験施設（UVSOR）が設置された。
1982. 6.30 極端紫外光実験棟第1期工事（1,281 m²）が竣工した。
1983. 3.30 極端紫外光実験棟第2期工事（1,463 m²）が竣工した。
1983. 4. 1 電子構造研究系に分子エネルギー変換研究部門が、分子集団研究系に分子集団動力学研究部門、極端紫外光研究部門が設置された。
1983. 11.10 極端紫外光実験施設ストレージリング装置に電子貯蔵が成功した。
1984. 2.28 極端紫外光実験施設の披露が行われた。
1984. 4.11 研究施設として、錯体化学実験施設（錯体合成研究部門、錯体触媒研究部門）が設置された。流動研究部門制度が充足し錯体化学実験施設に錯体合成研究部門が設置された。
1985. 5.10 分子科学研究所創設10周年記念式典が挙行された。
1987. 4. 1 第三代研究所長に井口洋夫分子科学研究所教授が任命された。
1989. 2.28 分子科学研究所南実験棟（3,935 m²）が竣工した。
1989. 5.28 分子集団研究系に界面分子科学研究部門が、関連領域研究系に有機構造活性研究部門（共に流動研究部門）が設置された。
1991. 3.27 極端紫外光実験棟（増築）（283 m²）が竣工した。
1991. 4.11 極端紫外光科学研究系（反応動力学研究部門）が設置された。基礎光科学、界面分子科学、極端紫外光の各研究部門は分子集団研究系から極端紫外光科学研究系へ振替された。
1993. 4. 1 第四代研究所長に伊藤光男前東北大学教授が任命された。
1993. 12. 3 極端紫外光実験施設創設10周年記念式典が挙行された。
1994. 1.31 電子計算機センター棟（増築）（951 m²）が竣工した。
1995. 3.31 関連領域研究系有機構造活性研究部門（流動）が廃止された。
1995. 4. 1 理論研究系に分子基礎理論第四研究部門が設置された。
1995. 5.12 分子科学研究所創設20周年記念式典が挙行された。
1996. 5.11 関連領域研究系に分子クラスター研究部門（流動）が設置された。
1997. 4. 1 機器センター、極低温センター、化学試料室が廃止され、分子制御レーザー開発研究センター、分子物質開発研究センターが設置された。
1999. 4. 1 第五代研究所長に茅幸二慶應義塾大学教授が任命された。
2000. 4. 1 電子計算機センター、錯体化学実験施設錯体合成研究部門が廃止され、電子計算機室が設置された。共通研究施設として、統合バイオサイエンスセンター、計算科学研究センター、動物実験センター、アイソトープ実験センターが設置された。
2002. 2.28 山手2号館（統合バイオサイエンスセンター、計算科学研究センター）（5,149 m²）が竣工した。
2002. 3.11 山手1号館A（動物実験センター、アイソトープ実験センター）（4,674 m²）が竣工した。
2002. 4. 1 関連領域研究系分子クラスター研究部門（流動）、極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門（流動）、分子物質開発研究センターが廃止され、分子スケールナノサイエンスセンター（分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門、ナノ触媒・生命分子素子研究部門、ナノ光計測研究部門、界面分子科学研究部門（流動）、分子クラスター研究部門（流動））が設置された。
2003. 8.20 山手4号館（分子科学研究所分子スケールナノサイエンスセンター）（3,813 m²）が竣工した。
2003. 12. 2 極端紫外光実験施設創設20周年記念式典が挙行された。

2004. 3. 1 山手5号館 (NMR) (664 m²) が竣工した。
2004. 3. 8 山手3号館 (統合バイオサイエンスセンターなど) (10,757 m²) が竣工した。
2004. 4. 1 国立大学法人法により、国立天文台、核融合科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所、分子科学研究所が統合再編され、大学共同利用機関法人自然科学研究機構が創設された。岡崎国立共同研究機構管理局が、大学共同利用機関法人自然科学研究機構岡崎統合事務センターとなり、総務部 (総務課、国際研究協力課)、財務部 (財務課、調達課、施設課) に改組された。
2004. 4. 1 理論研究系が理論分子科学研究系に改組された。計算分子科学研究系 (計算分子科学第一研究部門、計算分子科学第二研究部門、計算分子科学第三研究部門) が設置された。分子スケールナノサイエンスセンターに、先端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。
2019. 4. 1 社会連携研究部門が設置された。

2-3 組織

大学共同利用機関法人自然科学研究機構





[註] 外国人客員と研究施設客員はそれぞれの研究領域の客員部門で対応する。また、研究部門間の併任は、研究領域を跨ぐことも可能であり、適宜、人事流動等に応じて見直す。

2-4 運 営

分子科学研究所は、全国の大学共同利用機関としての機能をもつと同時に独自の研究・教育のシステムを有している。この項では、これらに関する研究所運営の組織とそれぞれの機能について説明する。

2-4-1 運営顧問

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

自然科学研究機構では創設準備の段階から各研究所の自律性を保つことを基本原則として、機構憲章を作成した。その精神に基づき、上記①、②の機能は法律上の組織だけに任せるのではなく、各研究所別に適切な内部組織を置くことになった。ただし、機能①については、所長の諮問組織で審議するのは不適當なため、形式的には機構長の諮問組織的な位置付けで、その都度、各研究所別に大学共同利用機関長選考委員会を設置することにした。その委員は教育研究評議会と経営協議会の機構外委員も候補に加えて、機構外から機構長によって選ばれる。一方、機能②については必要に応じて各研究所で適当な内部組織（所長の諮問組織）を構成することになった。その結果、分子科学研究所では運営顧問制度（外国人評議員に代わる外国人運営顧問も含む）を発足させた。第一期中期計画期間（2004年度～2009年度）の6年間の運営顧問は国内4名、海外2名で運用してきたが、第二期中期計画期間（2010年度～2015年度）の最初の3年間は、国際的な研究機関としての運営面を中心に諮問するため、海外2名で運用した。4年目となり、国内3名を新たに追加した。第三期中期計画期間（2016年度～2021年度）に入り、体制を見直すこととなり、国内4名と海外2名で運用している。

運営顧問（2019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（2019年度）

LIST, Benjamin	ドイツマックスプランク石炭研究所所長
UMBACH, Eberhard	ドイツヴェ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（2019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・センター長を中心として、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)	齐藤真司(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)(2018年度)
魚住泰広(分子研教授)	杉本敏樹(分子研准教授)(2019年度)

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（2019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）

竹中 康司（名大院教授）

廣井 善二（東大物性研教授）

細越 裕子（大阪府大院教授）

（日本放射光学会推薦）

矢橋 牧名（理研グループディレクター）

（錯体化学会推薦）

林 高史（阪大院教授）

（分子科学会推薦）

大島 康裕（東工大教授）

武次 徹也（北大教授）

中澤 康浩（阪大院教授）

山口 祥一（埼玉大院教授）

（日本生物物理学会推薦）

林 重彦（京大院教授）

【所内委員】

飯野 亮太（分子研教授）

石崎 章仁（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、研究教育職員の内任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フェロー等の選考に関する審議を行う。主幹・施設長会議の構成員は各研究領域の主幹、研究施設長・センター長等の教授で、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	2019.8.21 (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	2019.8.23, 2020.2.21
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	-
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	2019.8.22
安全衛生委員会	安全衛生管理に関する事項。	(原則) 各研究室から各 1 施設から必要数	委員会規則 管理規則	2019.6.14, 12.24
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	2019.4.5, 6.1, 8.20, 10.10, 12.6
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		2019.4.5, 6.7, 9.6, 11.1, 12.6, 2020.1.8, 2.7, 3.6

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	2019.4.16, 5.21, 6.18, 7.16(メール審議), 9.17, 11.19, 12.17, 2020.1.21, 2.18, 3.17
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	2019.6.19
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	-
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	2019.6.3, 7.24, 9.10, 11.21, 2020.1.30 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 准教授1	委員会規則	2019.7.23, 2020.1.20
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	2019.4.16, 5.21, 6.18, 7.16, 8.20, 9.17, 10.15, 11.19, 12.17, 2020.1.21, 2.18, 3.17
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	2019.6.4(メール審議), 8.29(メール審議), 10.4, 2020.1.27
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	2019.5.2, 9.12, 12.1
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	2019.9.4, 2020.3.18

動物資源共同利用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	2019.7.2, 8.19(メール審議), 12.27(メール審議)
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	2019.7.23, 2020.1.20
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	2019.6.10
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	2019.10.15
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	2019.4.5 (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	2019.4.12 (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	2019.5.8, 7.10, 9.11, 2020.1.8, 3.11
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	2019.9.24 (メール審議)
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	2019.4.16, 9.17
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	2019.9.2, 12.20(メール審議)

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 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き機能性分子や生体分子, 表面・界面系などを含む凝縮系の構造, 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 凝縮系における反応ダイナミクス, 物性, 機能の解明のための理論および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, 多体効果や幾何学的効果を取り込んだ輸送現象理論の研究
3, 表面界面物性の理論研究

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
2, 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

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, 大規模電子状態計算法の開発
2, 有機半導体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で, 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, それに関する動的プロセスの解明及び制御を目指した研究を行う

研究課題 1, 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, 電気化学反応や触媒反応の変換場における局所構造と電子状態の研究
2, 空間構造を持つ放射光の発生と利用法の開拓
3, 極低温リユードベリ原子を用いた超高速量子シミュレータ・量子コンピュータの開発

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機能性無機材料の探索

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じた新しい先端的研究分野の開拓

- 研究課題
- 1, 物質キラリティによる量子スピン制御
 - 2, アドバンスド ESR 技術を用いた機能性物質のメカニズム解明
 - 3, Bi-layer 型分子磁性体における磁気特性起源の解明

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様な機能の発現が，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

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, 開殻電子系に基づく新規光・電子・磁気物性の開拓

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

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. 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

織細計測研究部門

- 研究目的 低摂動で織細な分子計測法等、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
 3. 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

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

2-6 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じた極限の探求）、科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業「計算物質科学人材育成コンソーシアム」、「元素戦略プロジェクト」（研究拠点形成型）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。

2-7 研究部門等

特別研究部門

- 研究目的
- 1, 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
 - 2, 分子科学分野において独創的な研究を行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場を提供する

社会連携研究部門

- 研究目的
- 分子研と企業などからの資金によって運営するオープンイノベーション拠点とし産官学の共同研究を実施する

2-8 構成員

2-8-1 構成員*

川合眞紀	所長
岡本裕巳	研究総主幹(併)
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
小杉信博	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
渡辺芳人	名誉教授

物故名誉教授

赤松秀雄
井口洋夫
伊藤光男
茅幸二
花崎一郎
丸山有成
諸熊奎治

理論・計算分子科学研究領域 研究主幹(併) 齊藤真司

理論分子科学第一研究部門

齊藤真司	教授
森俊文	助教
甲田信一	助教
松村祥宏	学振特別研究員
稲垣泰一	学振特別研究員
MAURYA, Manish	特任研究員
南谷英美	准教授
下出敦夫	助教
奥川伸一	研究員
日野出憲治	研究員

飯田 健二	准教授(委嘱)(北大触媒研)
加藤 隆士	特任専門員
理論分子科学第二研究部門	
石崎 章仁	教授
NGUYEN, Thanh Phuc	助教
藤橋 裕太	特任研究員
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)
ZHAO, Pei	特任研究員
KUDUVA RADHAKRISHNAN, Vignesh	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)
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	客員教授(東大院工)
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 IqbqI	特任研究員
JAUNET USAGE JAUNET-LAHARY, Titouan Teddy	特任研究員

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
DE LÉSÉLEUC, Sylvain	助教
富田 隆文	特任助教(分子科学研究所特別研究員)
ZHANG, Yichi	特任研究員(IMS フェロー)
BHARTI, Vineet	特任研究員
國見 昌哉	特任研究員
光分子科学第三研究部門	
解良 聡	教授
長谷川 友里	特任研究員(IMS フェロー)
HAGENLOCHER, Jan	学振外国人特別研究員(JSPS サマープログラム)(Eberhard Karls Universität Tübingen) '19.6.11 ~ '19.9.8
山田 一斗	特任研究員
YANG, Jinpeng	研究員
長坂 将成	助教
高谷 光	准教授(クロスアポイントメント; 京大化研)(特別研究部門)

光分子科学第四研究部門（客員研究部門）

福井賢一	客員教授（阪大院基礎工）
金安達夫	客員准教授（九州シンクロトロン）
香月浩之	客員准教授（奈良先端大先端科学）

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
小坂谷貴典	助教
山本航平	助教
中村高大	特任研究員
CHAVEANGHONG, Suwilai	特任研究員
杉本敏樹	准教授
櫻井敦教	助教

電子物性研究部門

山本浩史	教授(併)
須田理行	助教(併)

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）

岸根順一郎	客員教授（放送大教養）
古川貢	客員准教授（新潟大研究推進）
大島勇吾	客員准教授（理研加藤分子物性研究室）

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
飯野亮太	教授
武田公利	特任研究員
大友章裕	研究員
栗原顕輔	特任准教授(兼)（生命創成探究センター）
倉橋拓也	助教

生体分子情報研究部門

秋山修志	教授(併)
向山厚	助教(併)
古池美彦	助教(併)
塚本寿夫	助教

錯体触媒研究部門

魚住泰広	教授
奥村慎太郎	助教
PUTRA, Anggi Eka	特任研究員
杉山祐也	特任研究員
SHEN, Guanshuo	特任研究員
間瀬俊明	特任研究員
檜山儀恵	准教授
大塚尚哉	特任研究員
藤波武	特任研究員

錯体物性研究部門

草本哲郎	准教授
松岡亮太	助教

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)

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	特任研究員
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

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)
南谷英美	准教授(併)

織細計測研究部門

岡本 裕 巳	教 授
成 島 哲 也	助 教
吉 澤 大 智	助 教
AHN, Hyo-Yong	特任助教(併)(新分野創成センター)
山 西 絢 介	特任研究員
江 原 正 博	教 授(併)

広帯域相関計測解析研究部門

飯 野 亮 太	教 授(併)
野 村 雄 高	助 教

特別研究部門

藤 田 誠	卓越教授(東大院工学系)
高 谷 光	准教授(クロスアポイントメント;京大化研)(光分子科学第三研究部門)

社会連携研究部門

平 等 拓 範	特任教授(クロスアポイントメント;理研 SPring-8)
佐 野 雄 二	特任研究員
竹家 トーマス啓	特任研究員
KAUSAS, Arvydas	特任研究員
ZHENG, Lihe	特任研究員
YAHIA, Vincent	特任研究員
LIM, Hwanhong	特任研究員

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	特任教授(クロスアポイントメント;広大 HiSOR)
藤 本 將 輝	助 教
SALEHI DERAKHTANJANI, Elham	特任研究員

電子ビーム制御研究部門

松 井 文 彦	主任研究員
松 田 博 之	特任研究員
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
---------	-----

機器センター センター長(併) 横 山 利 彦

中 村 敏 和	特任研究員
鈴 木 敏 泰	特任研究員
大 原 三 佳	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
伊木志成子	特任専門員
長谷川久	特任専門員
石川あずさ	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) 田中彰治	
戸村正章	助手
田中彰治	特任研究員

研究力強化戦略室 室長(併) 岡本裕巳	
片柳英樹	助手
福井豊	特任専門員
永園尚代	特任専門員
亀高愛	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) 江原正博	
斉藤真司	教授(兼)
江原正博	教授
奥村久士	准教授(兼)
石田干城	助教(兼)
大野人侍	准教授

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

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)
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)
古賀信康	准教授
小杉貴洋	助教(兼)
南慎太郎	学振特別研究員
古賀(巽)理恵	特任研究員
小林直也	特任研究員
栗原顕輔	特任准教授
松尾宗征	特任研究員
夏目ゆうの	特別訪問研究員

技術課 課長 繁 政 英 治
青 山 正 樹 技術課付班長
中 村 永 研 技術課付班長
水 谷 文 保 技術課付班長

機器開発技術班 班長 近 藤 聖 彦

機器開発技術一係

水 谷 伸 雄 係 長
菊 地 拓 郎 係 員

機器開発技術二係

高 田 紀 子 主 任
木 村 幸 代 係 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 林 憲 志

極端紫外光技術一係

手 島 史 綱 主 任
牧 田 誠 二 主 任
太 田 紘 志 係 員

極端紫外光技術二係

近 藤 直 範 主 任
矢 野 隆 行 主 任
湯 澤 勇 人 係 員

極端紫外光技術三係

山 崎 潤 一 郎 係 長

光計測技術係

酒 井 雅 弘 係 長
岡 野 泰 彬 主 任

機器利用技術班 班長 高 山 敬 史

機器利用技術一係

藤 原 基 靖 主 任
浅 田 瑞 枝 係 員

機器利用技術二係

岡 野 芳 則 主 任
水 川 哲 徳 主 任
上 田 正 主 任
賣 市 幹 大 主 任

計算科学技術班 班長 岩 橋 建 輔

計算科学技術一係

松 尾 純 一 主 任

神 谷 基 司 係 員

計算科学技術二係

長 屋 貴 量 係 員

計算科学技術三係

内 藤 茂 樹 係 長

澤 昌 孝 主 任

木 下 敬 正 係 員

学術支援班 班長

学術支援一係

原 田 美 幸 係 長

学術支援二係

内 山 功 一 係 長

(極端紫外光研究施設)

堀 米 利 夫 特任専門員

* 整理日付は2020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。

2-8-2 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。令和元年より、大学教員をクロスアポイントメントで招聘して流動研究制度の運用を開始した。

(2) 創立以来の人事異動状況（2020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	主任研究員	助教/助手	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	84	1	292	164	5	25	233
転出者数	7	39	76	0	259	128	3	24	231
現員	1	11(1)	8(1)	1	33	36	2	1	2

() は委嘱で外数。

② 客員研究部門

職名 区分	教授	准教授
就任者数	159	173
現員	6	6

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。

2-9 財 政

2-9-1 現 員

2020.1.1

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(4)	1(3)		6	9(7)		9(7)
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(2)	3(2)		5(1)	10(5)		10(5)
生命・錯体分子科学研究領域		2(5)	2(1)		5(4)	9(10)		9(10)
研究施設		3(7)	1(4)	1	14	19(11)		19(11)
特別研究部門		(1)	1			1(1)		1(1)
技術課							36	36
小計	1	11(21)	8(12)	1	33(5)	54(38)	36	90(38)
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)		0(1)	1(3)		1(3)
合計	1	14(22)	10(13)	1	35(9)	61(44)	36	97(44)

() 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。

2-9-2 財 政

(単位：千円)

科目等 \ 年度	2015 年度	2016 年度	2017 年度	2018 年度	2019 年度
人件費	1,174,409	1,173,853	1,221,654	1,159,087	1,077,605
運営費, 設備費	2,197,850	2,136,073	2,282,332	2,719,960	2,363,342
施設費	21,492	31,528	80,000	0	602,790
合計	3,393,751	3,341,454	3,583,986	3,879,047	4,043,737

寄付金

区 分	2015 年度	2016 年度	2017 年度	2018 年度	2019 年度
件数 (件)	18	12	15	17	20
金額 (千円)	18,140	15,920	25,021	25,483	37,505

共通研究施設を除く

科学研究費助成事業

区 分	2015 年度	2016 年度	2017 年度	2018 年度	2019 年度
件数 (件)	56	65	63	58	60
金額 (千円)	239,580	487,690	475,020	428,220	399,110

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

2019 年度科学研究費助成事業

受入件数一覧

2019 年 12 月 23 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	7	2	9
挑戦の萌芽研究		0	0	0
挑戦的研究	(開拓)	0	0	0
挑戦的研究	(萌芽)	5	0	5
若手研究	(A)	2	1	3
若手研究	(B)	2	0	2
若手研究		11	2	13
基盤研究	(S)	1	0	1
基盤研究	(A)	5	0	5
基盤研究	(B)	12	1	13
基盤研究	(C)	5	1	6
特別研究員奨励費		2	1	3
特別研究員奨励費	外国人	0	0	0
研究活動スタート支援		6	1	7
奨励研究		0	0	0
国際共同研究強化	(B)	1	0	1
合計		60	9	69

* 分担金受入件数を除く

(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		47,300	0	47,300
新学術領域研究	領域	59,900	17,100	77,000
挑戦の萌芽研究		0	0	0
挑戦的研究	(開拓)	0	0	0
挑戦的研究	(萌芽)	10,400	0	10,400
若手研究	(A)	2,700	1,300	4,000
若手研究	(B)	0	0	0
若手研究		15,300	3,000	18,300
基盤研究	(S)	32,300	0	32,300
基盤研究	(A)	66,100	0	66,100
基盤研究	(B)	56,770	3,100	59,870
基盤研究	(C)	5,700	1,300	7,000
特別研究員奨励費		2,200	1,000	3,200
特別研究員奨励費	外国人	0	0	0
研究活動スタート支援		6,600	1,100	7,700
奨励研究		0	0	0
国際共同研究強化	(B)	1,800	0	1,800
合計		307,070	27,900	334,970

- * 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	2015年度	2016年度	2017年度	2018年度	2019年度
件数(件)	4	9	7	6	3
金額(千円)	61,750	46,443	64,825	36,593	19,792

2019年12月31日現在

受託研究

区分	2015年度	2016年度	2017年度	2018年度	2019年度
国	2	2	2	2	2
独立行政法人等	17	17	20	19	20
大学等	3	4	4	5	5
民間企業他	2	1	1	0	0
合計件数(件)	24	24	27	26	27
合計金額(千円)	998,355	949,377	1,050,602	1,203,984	767,865

(岡崎共通研究施設を含む)
2019年12月31日現在

2-10 岡崎共通施設

2-10-1 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（2019.12）岡崎情報図書館は雑誌 1,516 種（和 292, 洋 1,224）、単行本 96,661 冊（和 13,264, 洋 83,397）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。

2-10-2 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 m²、鉄筋コンクリート造2階建てで、大型スクリーン及びAV機器等を備えた200余名が参加可能な大隅ホール、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。

2-10-3 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：12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	

2-10-4 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

2-11 その他

2-11-1 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、材料のキラリティを検出・分離する装置、防災用の通知システム制御装置、レーザー用水晶光学素子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。

2018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8件、2019年度は、個人有0件、機構有6件であった（2019年12月4日現在）。

3. 共同研究と大学院教育

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

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

3-1 共同利用研究

3-1-1 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。

3-1-2 2019年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名	提案代表者
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
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
機能性材料占有・非占有バンド構造	千葉大学大学院融合科学研究科 吉田 弘幸
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(IV)	東京理科大学理工学部 中山 泰生
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
マルチドメインタンパク質の動的構造と機能連関の解明	京都大学複合原子力科学研究所 杉山 正明
金属触媒によるアミノベンゼンチオールとジオールを原料とした新規ベンゾチアジン誘導体合成法の開発	山形大学工学部 皆川 真規
フロー合成のための不斉固定化有機触媒の開発	東北大学大学院理学研科化学専攻 林 雄二郎
レクチンナノブロックによる機能性人工タンパク質超分子複合体の設計開発	信州大学繊維学部 新井 亮一
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
垂直入射レーザーコンプトン散乱による円偏光ガンマ線の生成と偏極度測定	名古屋大学シンクロトロン光研究センター 高嶋 圭史
高効率なスピン偏極電子検出器の開発に向けた表面の化学状態制御法の創出とスピン分解光電子分光技術の確立	東京大学大学院理学系研究科 岡林 潤

課 題 名 (前期)	代 表 者
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
RISM 理論と分子シミュレーションによる pKa 予測手法の開発	九州大学大学院理学研究院 吉田 紀生
CsK ₂ Sb カソード基板に用いるグラフェンの加熱洗浄効果の評価	名古屋大学シンクロトン光研究センター 郭 磊
環境調和反応の集積化	九州大学大学院薬学研究院 大嶋 孝志

課 題 名 (後期)	代 表 者
RISM 理論と分子シミュレーションによる pKa 予測手法の開発	九州大学大学院理学研究院 吉田 紀生
階層的多孔構造材料の光触媒機能に関する研究	名古屋大学未来材料・システム研究所 中西 和樹
UVSOR 光電子分光装置の超高性能化に向けての BL6U の実験ステーション、上流分光系、リング光源安定性等の性能把握実験	大阪大学産業科学研究所 菅 滋正
環状分子膜上の磁性原子による量子スピン格子の作製と電子状態解明	千葉大学大学院工学研究院 山田 豊和
高移動度有機半導体の高配向膜を利用した分子軌道イメージング	筑波大学数理物質系 山田 洋一
トポロジカル絶縁体の圧力誘起超伝導機構の解明にむけた角度分解光電子分光研究	岡山大学異分野基礎科学研究所 久保園芳博
配位子保護金属クラスターの磁性に関する研究	東京大学大学院理学系研究科 高野慎二郎
白金 (111) 面上のナノグラフェンの角度分解光電子分光および共鳴 Auger 電子分光	東京農工大学大学院工学研究院 遠藤 理
スポット分析型高分解能電子線回折 (SPA-LEED) によるツイスト 2 層グラフェンの構造解析	九州大学大学院工学研究院 田中 悟
CDW を示す遷移金属カルコゲナイド NbSe ₂ の光電子角度分布	大阪大学産業科学研究所 田中慎一郎

(3) 研究会

① 【分子研研究会】

マイクロビームアナリシス研究会 [放射光による物質の原子レベルイメージング]
2019 年 5 月 21 日 (火) ~ 22 日 (水) 岡崎コンファレンスセンター小会議室

5 月 21 日 (火)

13:00 ~ 13:40	招待講演 ○解良 聡 (分子科学研究所) 「有機半導体分子の電子状態の特徴とその局在性の変遷」
13:40 ~ 14:15	招待講演 ○大東琢治 (分子科学研究所) 「UVSOR における走査型透過 X 線顕微鏡の応用研究」
14:15 ~ 14:50	○小川貴志 (韓国標準科学研究院), 高井義造 (大阪大学) 「シリンドリカルレンズを使用した電子顕微鏡用モノクロメータの開発」
14:50 ~ 15:20	休憩・ポスターセッション
15:20 ~ 15:55	招待講演 ○佐々木裕次 (東京大学) 「X 線 1 分子追跡法とその汎用化から生まれた新計測法」
15:55 ~ 16:30	招待講演 ○松井公佑, 唯美津木 (名古屋大学) 「オペランド CT-XAFS 法による固体高分子形燃料電池の 3 次元イメージング」
16:40 ~ 17:50	分子研施設見学
18:00 ~ 20:00	意見交換会

5 月 22 日 (水)

9:30 ~ 10:05	○松井文彦 (分子科学研究所) 「共鳴光電子回折と極端紫外光電子分光ビームライン刷新整備計画」
10:05 ~ 10:40	GRMN 構築分科会活動報告 ○角森史昭 (東京大学) ほか 「八代海の海底土壌のラドンとラジウム濃度分布の特徴」
11:20 ~ 11:30	研修セミナー開催報告 ○北村壽朗 (島津製作所)
11:30 ~ 12:00	○後藤敬典 (名古屋工業大学, 物質材料研究機構) 「AES・SE の DB と仕事関数の実験的考察その 2」

ポスター発表

- 小川貴志 (韓国標準科学研究院), 高井義造 (大阪大学), 山澤 雄, 川井 聡, 毛利 淳, 荒井紀明, 片根純一, 揚村寿英 (日立ハイテクノロジーズ)
「シリンドリカルレンズ型モノクロメータの走査型電子顕微鏡への応用」
- 野島 雅 (東京理科大学)
「回転電場を用いた水クラスターの連続質量分離」
- 田口達也 (浜松ホトニクス)
「マイクロフォーカスX線源を用いたX線非破壊検査の撮影事例と最新動向」
- 白木 将 (日本工業大学)
「表面界面制御・分析技術を活用した全固体電池研究」
- 松井文彦 (分子科学研究所)
「UVSOR-III 施設紹介」

② 【分子研研究会】

単分子有機化学の挑戦

2019年5月28日(金) 分子科学研究所研究棟201号室

- 13:30-13:40 開会挨拶と趣旨説明
中西和嘉 (物質・材料研究機構機能性材料研究拠点 主任研究員)
- 13:40-14:30 「原子間力顕微鏡を用いた単分子の構造観察と操作」
川井茂樹 (物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 主幹研究員)
- 14:30-15:20 「生物類似表面触媒作用を用いるナノ炭素細線の合成」
坂口浩司 (京都大学エネルギー理工学研究所 教授)
- 15:40-16:30 「走査型トンネル顕微鏡による単一分子化学反応の解析」
数間恵弥子 (理化学研究所 Kim 表面界面科学研究室 研究員)
- 16:30-17:20 「高速高解像度透過電顕を用いた単分子反応速度論解析」
中村栄一 (東京大学総括プロジェクト機構・大学院理学系研究科 特任教授)
- 17:20-17:30 総括
中村栄一 (東京大学総括プロジェクト機構・大学院理学系研究科 特任教授)
- 17:30-18:00 フリーディスカッション, 写真撮影
- 18:30- 意見交換会

③ 【分子研研究会】

化学・情報科学の融合による新化学創成に向けて

2019年5月30日(木) 岡崎コンファレンスセンター小会議室

- 9:00- 9:10 趣旨説明
山下善之 教授 (東京農工大学大学院)
- Overview (9:10-10:20)
- 9:10- 9:20 佐藤一彦 研究センター長 (産業技術総合研究所材料・化学領域触媒化学融合研究センター)
永田賢二 主任研究員 (物質・材料研究機構)
AIによる分野横断型の新しい化学の創成
- 9:20- 9:40 松原誠二郎 教授 (京都大学大学院)
情報科学を活用した化学教育の変革
- 9:40-10:00 高橋孝志 特任教授 (横浜薬科大学)
化学データの戦略的収集と戦略的創出
- 10:00-10:20 長谷部伸治 特定教授 (京都大学国際高等教育院)
情報科学を活用した化学学術・生産の連携システム構築
- 10:30-11:45 パネルディスカッション
司会 山下善之 教授 (東京農工大学大学院)
松原誠二郎 教授 (京都大学大学院)
君塚信夫 教授 (九州大学大学院)
菅原洋子 名誉教授 (北里大学理学部)
関根千津 取締役副社長 ((株)住化技術情報センター)
茶谷直人 教授 (大阪大学大学院)
上村みどり 上席研究員 (帝人ファーマ(株))
石原 司 主任研究員 (産業技術総合研究所)
高橋孝志 特任教授 (横浜薬科大学)
永田賢二 主任研究員 (物質・材料研究機構)
長谷部伸治 特定教授 (京都大学国際高等教育院)
松原誠二郎 教授 (京都大学大学院)
山下善之 教授 (東京農工大学大学院)
山本浩史 教授 (分子科学研究所)

④ 【分子研研究会】
 固体化学フォーラム研究会
 2019年6月10日(月)～11日(火) 岡崎コンファレンスセンター

6月10日(月)

10:00	開会挨拶	島川 祐一	京大	
10:05	所長挨拶	川合 真紀	分子研	
Session 1	座長	山本 浩史	分子研	
10:15L1		大坪 主弥	京大	多孔性金属錯体ナノチューブの疎水性空間における超プロトン伝導
10:45L2		草本 哲郎	分子研	開殻 π 電子系が拓く発光・磁気特性
11:15L3		植村 卓史	東大	錯体ナノ空間で高分子を制御する
Session 2	座長	島川 祐一	京大	
13:00L4		東 正樹	東工大	ビスマス、鉛ペロブスカイトの系統的な電荷分布変化と巨大負熱膨張
13:30L5		関真 一郎	東大	磁気スキルミオンの物質設計
14:00L6		石渡晋太郎	阪大	新しい磁性リン化合物の高圧合成
Session 3	座長	草本 哲郎	分子研	
14:45L7		山本 浩史	分子研	有機強相関トランジスタを用いた物性科学
15:15L8		下谷 秀和	東北大	有機半導体レーザーの開発
Session 4	座長	宮坂 等	東北大	
16:00L9		所 祐子	筑波大	フォノンモード計算を用いた電荷移動型相転移錯体の設計
16:30L10		正岡 重行	阪大	5つの金属イオンが織りなす触媒機能
17:10	ポスター発表 (前後半 40分ずつ)			
18:30	懇親会			

6月11日(火)

Session 5	座長	竹入 史隆	分子研	
9:00L11		解良 聡	分子研	有機半導体の輸送電荷の特徴：光電子分光法による電子状態測定から
9:30L12		石坂 香子	東大	VTe_2 の構造相転移：特異な電子構造と格子ダイナミクス
10:00L13		木内 久雄	京大	operando 硬X線光電子分光法による全固体電池計測の装置開発と反応解析
Session 6	座長	解良 聡	分子研	
10:45L14		櫻井 敦教	分子研	赤外超高速分光で明らかにする固体酸化物中プロトン伝導メカニズム
11:15L15		平山 雅章	東工大	電極/電解質界面におけるリチウムイオン導電現象
11:45				写真撮影+ポスター表彰+昼食
Session 7	座長	廣井 善二	東大	
13:00L16		藤田 晃司	京大	層状ペロブスカイト酸化物における酸素八面体回転エンジニアリング：新規強誘電体・圧電体の開拓
13:30L17		大場 史康	東工大	半導体物性の系統的理論予測とデータ駆動型新物質探索
14:00L18		近藤 剛弘	筑波大	ホウ素と水素で構成される二次元物質ホウ化水素シートの特性
Session 8	座長	小林 玄器	分子研	
14:45L19		有田亮太郎	東大	機能反強磁性体のクラスター多極子理論
15:15L20		中山 将伸	名工大	材料シミュレーションによる蓄電池材料の効率探索
15:45	閉会挨拶	廣井 善二	東大	
16:00	ラボツアー希望者			

⑤ 【分子研研究会】
量子位相自由度を用いた新たな機能性分子システムの開拓
2019年8月5日(月)～6日(火) 分子科学研究所研究棟301号室

8月5日(月)

13:30-14:00 はじめに
山本 浩史(分子研)

第一部：位相の制御

14:00-14:30 「振動ポラリトンを用いた化学反応制御」
香月 浩之(奈良先端大)

14:30-15:00 「ラジカル対の量子制御」
前田 公憲(埼玉大)

15:00-15:30 「テラヘルツ・赤外パルスによる電子分極のコヒーレント制御」
岡本 博(東大)

第二部：励起と位相

16:00-16:30 「電流励起有機半導体レーザー」
安達 千波矢(九大)

16:30-17:00 「有機単結晶DFBレーザー」
下谷 秀和(東北大)

17:00-17:30 「シフトカレントの欠陥耐性とダイナミクス」
中村 優男(理研)

17:30-18:00 T.B.A.
宮島 大吾(理研)

18:00-18:30 「Topological Aspects of Nonlinear Optical Effects」
森本 高裕(東大)

8月6日(火)

第三部：準位縮退と位相

10:00-10:30 「トポロジカルドメインエンジニアリング」
賀川 史敬(東大)

10:30-11:00 「有機ディラック電子系における量子現象」
田嶋 尚也(東邦大)

11:00-11:30 「単分子膜の構造解析」
若林 裕助(東北大)

11:30-12:00 全体ディスカッション
司会：山本 浩史(分子研)

⑥ 【分子研研究会】
有機ディラック電子系におけるトポロジカル現象と新奇物性開拓
Topological Physics and Organic Massless Dirac Systems
2019年8月8日(木)～10日(土) 分子科学研究所研究棟301号室

8月8日(木)

13:00-13:10 はじめに
田嶋尚也(東邦大理)

13:10-13:30 α -(BETS)₂I₃ と α -(BEDT-STF)₂I₃ の輸送特性
田嶋尚也(東邦大理)

13:30-13:50 α -D₂I₃ (D = ET, STF, BETS) の精密解析による構造物性研究
鬼頭俊介(名大工)

13:50-14:10 第一原理計算による α -(BETS)₂I₃ の構造と電子状態
圓谷貴夫(熊本大先導)

14:10-14:30 α -(BETS)₂I₃ の ¹³C NMR
藤山茂樹(理研)

14:30-14:50 α -(STF)₂I₃ の構造と物性
内藤俊雄(愛媛大理)

14:50-15:20 ディラック・ワイル・トポロジカル物質の軌道電流に起因する核磁気緩和率
前橋英明(東大理)

15:40-16:05 単一成分分子性結晶におけるノーダルライン半金属
加藤礼三(理研)

- 16:05-16:25 分子性導体のディラック電子系における電気伝導度
鈴村順三 (名大理)
- 16:25-16:50 ノーダルライン状態の帯磁率
小形正男 (東大理)
- 16:50-17:10 常圧 massless Dirac 電子系候補物質の NMR 研究
関根孝彦 (東大工)
- 17:10-17:30 有機導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ における電子相関効果と温度圧力相図
田中康寛 (早稲田理工)
- 17:30-17:50 有機ディラック系物質における軌道反磁性の観測
鴻池貴子 (物材機構)
- 18:30- 意見交換会

8月9日(金)

- 9:30- 9:55 Excitonic 相としての電荷秩序
福山秀敏 (東理大)
- 9:55-10:25 強相関系励起子絶縁体の電子状態とスピン軌道相互作用の効果
石原純夫 (東北大理)
- 10:25-10:45 Ta₂NiSe₅ における光誘起エキシトニック絶縁体-金属相転移
宮本辰也 (東大新領域)
- 11:05-11:25 励起子絶縁体 Ta₂NiSe₅ の輸送現象
中埜彰俊 (名大理)
- 11:25-11:55 Ta₂NiSe₅ のエキシトニック相と光誘起半金属相
溝川貴司 (早稲田理工)
- 13:15-13:45 有機ディラック電子系におけるスピン-軌道相互作用と電子相関効果
森成隆夫 (京大人環)
- 13:45-14:05 有機ディラック電子系 α -(BEDT-TTF)₂I₃ における非一様電荷秩序と輸送現象
大木大悟 (名大理)
- 14:05-14:35 第一原理手法を用いたトポロジカル物性と物質開拓
平山元昭 (理研 CEMS)
- 14:35-14:55 An Old Compound: Is It a New Candidate for Dirac Electrons in Organics?
Woun Kang (梨花大)
- 15:15-15:45 強相関ディラック電子系における量子相転移の臨界性
大塚雄一 (理研 RCCS)
- 15:45-16:15 スピン軌道固体の g 因子とトポロジー: ディラック電子を超えて
伏屋雄紀 (電通大)
- 16:15-16:35 τ 型有機導体におけるディラック電子とトポロジカルギャップ
長田俊人 (東大物性研)
- 16:35-16:45 有機ディラック電子系研究概観
澤 博 (名大工)

8月10日(土)

- 9:30-11:50 所内・所外教員の意見交換会

⑦ 【分子研研究会】

錯体化学に基づく分子の構造変換設計と機能制御
2020年3月1日(日)~3月2日(月) 岡崎コンファレンスセンター小会議室

新型コロナウイルス流行に伴い開催中止

(4) 若手研究活動支援

課 題 名	提案代表者
第59回分子科学若手の会夏の学校講義内容検討会	東京大学大学院理学系研究科 小松原 航
分子科学若手の会分野交流若手の研究会: 分子科学の未踏領域の探求	東京大学大学院理学系研究科 小松原 航

(5) 岡崎コンファレンス

課題名

提案代表者

キラリテリ誘起スピン選択およびその関連現象 先端表面計測の挑戦—実空間・逆空間・実時間における微視的構造とダイナミクスの解明への新展開	分子科学研究所 Fritz-Haber Institute of the Max-Planck Society	山本 浩史 熊谷 崇
--	--	---------------

(6) UVSOR 施設利用

(前期)

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 円偏光アンジュレータ光照射による生体有機分子への光学活性発現 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 LCS ガンマ線による QED 非線形効果	東京理科大学理学部 横浜国立大学大学院工学研究院 京都大学エネルギー理工学研究所	秋津 貴城 高橋 淳一 大垣 英明
ペロブスカイト鉛ハライド結晶のテラヘルツ領域偏光反射分光 IV 族半導体中の新種不純物中心・格子欠陥の電子状態に関する研究 生体系物質のテラヘルツ分光 III ゼオライトの Al 酸点上 Mo 炭化物触媒活性種の XAFS による構造解析 溶解度を制御した水酸アパタイト表面に吸着した微量元素の局所環境解析 アルミナに担持されたガリウム酸化物の局所構造解析 高速重イオン照射による Al 系スピネル構造化合物の不規則化 溶液法により作製したペロブスカイト薄膜のエネルギー分解光電子分光測定 角度分解紫外光電子分光法による分子ドーピング膜の電子状態と分子配向評価 脂質二重膜を構成するリン脂質分子の電子状態とイオン濃度依存性 液晶・液体相転移点近傍における臨界ゆらぎの観測 ビームライン整備 軟 X 線吸収分光法によるタンパク質の元素選択的観測 軟 X 線吸収分光法による液相の光化学反応の機構解明 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 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 軟 X 線吸収分光法で探るグリシンペプチン及びジメチルグリシンの水和 ニッケル水分解触媒への炭酸・アミノ酸吸着のオペランド C-K 端 XAFS 観測 Probing Ion Pairing Effects in Hydrated Carboxylate Ions by Means of Soft X-Rays Absorption Spectroscopy 2 次元・変調構造による励起子の増感を利用した真空紫外・極端紫外光の波長変換 分子性結晶の相転移とオージェ・フリー発光の温度相関 中性 K 中間子稀崩壊実験のためのシンチレーター類の単一光子計数法による蛍光寿命測定と素材評価 新規シンチレータのエネルギー輸送効率とバンド構造の解明 深紫外発光アルミン酸亜鉛薄膜の形成過程解明および光学特性の評価 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欠陥形成と構造に伴う変化の解析 時間分解発光法を用いた希土類酸化物における励起子発光の局在化 NaCl:I- 結晶における光励起キャリアの動的振る舞いの解明 真空紫外吸収分光法による酸化マグネシウム単結晶の欠陥準位の研究 アポトシスのクロマチン凝集過程における DNA リン酸結合状態の可視化 STXM による Na イオン電池電極材料の電子状態マッピング 高活性光触媒材料の STXM による水溶液中での核生成と結晶成長メカニズムの解明 星間有機物の物性理解 隕石から探る木星大移動説：ユレイライトの炭素質物質の STXM 分析 STXM による細胞核及び細胞質における定量的分子イメージングの精度向上 STXM を用いたポリマー材料の配向解析 BL4U の整備 硫黄架橋ゴムの二相不均一網目構造の特性化 (3)	量子科学技術研究開発機構高崎量子応用研究所 山形大学理学部 東北学院大学工学部 大阪大学大学院生命機能研究科 埼玉工業大学工学部 大阪府立大学大学院工学研究科 大阪市立大学複合先端研究機構 九州大学大学院工学研究院 千葉大学大学院工学研究院 千葉大学大学院工学研究院 豊橋技術科学大学環境・生命工学系 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 京都大学化学研究所 広島大学大学院理学研究科 山口大学大学院創成科学研究科 Synchrotron SOLEIL 秋田大学大学院理工学研究院 山形大学理学部 山形大学学士課程基盤教育機構 東北大学未来科学技術共同研究センター 静岡大学大学院工学領域 名古屋大学大学院工学研究科 福井大学学術研究院工学系部門 大阪府立大学大学院理学系研究科 九州シンクロトロン光研究センター 東北大学多元物質科学研究所 産業技術総合研究所 産業技術総合研究所 東京大学大学院理学系研究科 横浜国立大学大学院工学研究院 東海大学工学部 分子科学研究所 分子科学研究所 京都工芸繊維大学分子化学系	早川 岳人 北浦 守 原 明人 木村 真一 有谷 博文 村田 秀信 吉田 朋子 吉岡 聡 吉田 弘幸 奥平 幸司 手老 龍吾 岩山 洋士 長坂 将成 長坂 将成 長坂 将成 浜坂 剛 高谷 光 岡田 和正 吉田 真明 CEOLIN, Denis 小玉 展宏 大西 彰正 田島 靖久 黒澤 俊介 小南 裕子 吉野 正人 牧野 哲征 河相 武利 小林 英一 江島 丈雄 朝倉 大輔 三石 雄悟 左近 樹 癸生川陽子 伊藤 敦 大東 琢治 大東 琢治 池田 裕子

地球外物質に含まれる有機物の分子構造を用いた低温の温度変化に基づいた地球外有機物の進化過程解明と、「はやぶさ2」試料の機関横断面連携分析システムの構築	高輝度光科学研究センター	上 梶 真之
STXMを用いた未変性炭素質コンドライト中の太陽系初期有機物の発見：その官能基組成から起源に迫る	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とその同位体二次元分布から読み解く地球外有機物の形成環境	海洋研究開発機構高知コア研究所	伊藤 元雄
反応性縮毛矯正剤処理毛髪における局所化学反応の可視化	大分大学理工学部	檜垣 勇次
Oxidation-Sensitive Nanocarriers for Controlled Dermal Drug Delivery	Freie University Berlin	RUEHL, Eckart
Microphysical and Chemical Properties of Soot Particles Upon Aging	University of Gothenberg	KONG, Xiangrui
Interfacial Electronic Structure of Metal-Free Photocatalytic Water Splitting Material	Tamkang University	PONG, Way-faung
High-Pressure Soft X-Ray Microscopy of CO ₂ Fluids	Lawrence Berkeley National Laboratory	GUO, Jinghua
Probing the Microscopic Electronic Structures for Developing Flexible/Foldable Supercapacitor	National Synchrotron Radiation Research Center	HSU, Yao-jane
Comprehensive Characterization of Monolithic Polymers by Scanning Transmission X-Ray Microscopy (STMX)	University of South Australia	ARRUA, Dario
BL4B のビームライン光学系の調整・整備	分子科学研究所	岩山 洋士
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 II	富山大学教養教育院	彦坂 泰正
アモルファス半導体の光誘起現象に関する研究	岐阜大学工学部	林 浩司
エキゾチックノーダル物質におけるフェルミアーク探索	東北大学大学院理学研究科	佐藤 宇史
Rashba スピン軌道相互作用を有する垂直磁化薄膜の角度分解光電子分光	東京大学大学院理学系研究科	岡林 潤
Fe ₂ P 単結晶表面上に作成した Ni ₂ P 薄膜の電子状態	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 の電子構造研究	分子科学研究所	出田真一郎
立方晶カイラル化合物 NiSbS の 3 次元角度分解光電子分光	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤 孝寛
NdFeAs _{1-x} P _x O _{0.9} F _{0.1} 単結晶のホール面における超伝導ギャップの組成依存性	大阪大学大学院理学研究科	田島 節子
異方的金属絶縁体転移物質の顕微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
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	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪 嘉之
Investigating Electronic Structures of the Strained Transition Metal Dichalcogenide Monolayers	Seoul National University	KIM, Changyoung
波長 100 nm 真空紫外線直入射反射ミラーの開発	東北大学多元物質科学研究所	羽多野 忠
ビームラインミラー角度測定系の開発とフィードバック制御による変動補償	京都大学エネルギー理工学研究所	全 炳俊
異方的金属絶縁体物質のテラヘルツ偏光顕微分光	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
低エネルギー高分解能 ARPES による新奇トポロジカル超伝導体の開拓	東北大学大学院理学研究科	佐藤 宇史
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 3	東京工業大学理学院	平原 徹
有機半導体結晶における電子フォノン相互作用による電子状態変調	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
不足ドーブ三層系銅酸化物高温超伝導体 Bi2223 の低エネルギー角度分解光電子分光による電子構造の温度変化	分子科学研究所	出田真一郎
層状 MAX 相化合物 V ₂ AlC におけるディラック半金属的電子状態の研究	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤 孝寛
近藤絶縁体の表面電子構造の面方位依存性	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
角度分解光電子分光法による NiTe ₂ のタイプ II ディラックコーンの Pd 置換効果及び Ti インターカレーション効果の研究	大阪大学大学院理学研究科	宮坂 茂樹
遷移金属ダイカルコゲナイドの励起エネルギー依存 ARPES	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
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
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
ボロンドープダイヤモンド薄膜の複素屈折率測定 (II)	福井大学学術研究院工学系部門	福井 一俊
複合型複素屈折率測定装置の整備	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および光電子収量分光測定によるバンド構造と再結合過程の解明	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田 早紀
新材料による真空紫外レンズの評価	大阪大学レーザー科学研究所	清水 俊彦
原子核乾板の最小電離粒子に対する感度評価	名古屋大学大学院理学研究科／未来材料・システム研究所	中村 光廣
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
Probing GdFeCo and TbFeCo Ferrimagnetic Amorphous Alloys with X-Ray Absorption Spectroscopy	東京大学物性研究所	松田 巖

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
環境半導体マグネシウムシリサイド n 型結晶の赤外分光	山形大学理学部	北浦 守
Ti 添加 III 族窒化物のバンドギャップ狭小の機構解明と人工光合成光電極材料としての最適組成探索	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田 早紀
極紫外光を用いた Na の光学特性に関する研究	日本原子力研究開発機構高速炉・新型炉研究開発部門	河口 宗道
軟X線コヒーレント制御実験へ向けた蛍光検出法の開発	九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫
太陽軟X線撮像分光ロケット実験と衛星計画に向けた CMOS センサーの評価	国立天文台	成影 典之
磁気円二色性を利用した円偏光X線生成のための強磁性合金薄膜の透過X線の評価	分子科学研究所	山本 航平
(後期)		
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	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
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
ペロブスカイト鉛ハライド結晶のテラヘルツ領域偏光反射分光	山形大学理学部	北浦 守
IV 族半導体中の新種不純物中心・格子欠陥の電子状態に関する研究	東北学院大学工学部	原 明人
生体系物質のテラヘルツ分光 III	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
ゼオライトの Al 酸点上 Mo 炭化物触媒活性種の XAFS による構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
溶解度を制御した水酸アパタイト表面に吸着した微量元素の局所環境解析	大阪府立大学大学院工学研究科	村田 秀信
アルミナに担持されたガリウム酸化物の局所構造解析	大阪市立大学複合先端研究機構	吉田 朋子
溶液法により作製したペロブスカイト薄膜のエネルギー分解光電子分光測定	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分子ドーピング膜の電子状態と分子配向評価	千葉大学大学院工学研究院	奥平 幸司
2次元・変調構造による励起子の増感を利用した真空紫外・極端紫外光の波長変換	秋田大学大学院理工学研究所	小玉 展宏
分子性結晶の相転移とオージェ・フリー発光の温度相関	山形大学理学部	大西 彰正
中性 K 中間子稀崩壊実験のためのシンチレーター類の単一光子計数法による蛍光寿命測定と素材評価	山形大学学士課程基盤教育機構	田島 靖久
新規シンチレータのエネルギー輸送効率とバンド構造の解明	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薄膜の形成過程解明および光学特性の評価	静岡大学学術院工学領域	小南 裕子
NaCl:I- 結晶における光励起キャリアの動的振る舞いの解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
真空紫外吸収分光法による酸化マグネシウム単結晶の欠陥単位の研究	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
BL4B のビームライン光学系の調整・整備	分子科学研究所	岩山 洋士
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 II	富山大学教養教育院	彦坂 泰正
アモルファス半導体の光誘起現象に関する研究	岐阜大学工学部	林 浩司
ビームラインミラー角度測定系の開発とフィードバック制御による変動補償	京都大学エネルギー理工学研究所	全 炳俊
異方的金属絶縁体物質のテラヘルツ偏光顕微分光	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
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
3d 遷移金属添加 AlN の発光/励起スペクトル測定および光電子収量分光測定によるバンド構造と再結合過程の解明	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田 早紀
原子核乾板の最小電離粒子に対する感度評価	名古屋大学大学院理学研究科/未来材料・システム研究所	中村 光廣
二光子相関によるアンジュレータ光パルスの計測	広島大学放射光科学研究センター	加藤 政博
マイクロ波照射下における有機分子挙動のテラヘルツ分光観察	京都大学化学研究所	高谷 光
軟X線吸収分光法を用いた有機薄膜/金属酸化物界面電子状態の解析	千葉大学大学院工学研究院	奥平 幸司
有機無機ハイブリッドペロブスカイト FMAPbI ₃ に添加した Rb 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と衛星計画に向けた CMOS センサーの評価	国立天文台 SOLAR-C 準備室	成影 典之
軟X線 in situ XAFS 構造解析による白金サブナノ粒子の構成原子数依存の電気化学挙動の解明	東京工業大学科学技術創成研究院	葛目 陽義
脂質二重膜を構成するリン脂質分子の電子状態とイオン濃度依存性	豊橋技術科学大学環境・生命工学系	手老 龍吾
配向膜を用いた液晶分子の分子配列の観測	分子科学研究所	岩山 洋士
軟X線吸収分光法によるタンパク質の元素選択的観測	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
軟X線分光法によるメタン酸化触媒反応活性種の直接観測	名古屋大学物質科学国際研究センター	山田 泰之
軟X線 XAFS による溶液中触媒活性種の電子構造解析	京都大学化学研究所	高谷 光

Mechanism Study of between Iron Salts and Organometallic Reagent by XAFS	Wuhan University	AIWEN, Lei
Dependency of Micelle Formation in Aqueous Environmental Model Systems on Acidity and the Presence of Co-Solutes	University of Oulu	PRISLE, Nonne
原子核乾板中の AgBr:I 微結晶の低温での発光特性の研究	東邦大学理学部	中 竜大
希土類イオン添加酸化物の真空紫外励起による発光の欠陥形成および組成変化に伴う変化の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野 正人
新材料による真空紫外レンズの評価	大阪大学レーザー科学研究所	清水 俊彦
ジフルオロエチレンの光誘起幾何異性体変換の動的解明	大阪大学レーザー科学研究所	山ノ井航平
一次元単結晶活物質材料におけるリチウム脱挿入過程のオペランド STXM 解析	産業技術総合研究所	朝倉 大輔
STXM による溶液中での金属酸化物の結晶成長メカニズムの解明	産業技術総合研究所	三石 雄悟
温泉堆積物に含まれるホウ素の分布と化学形態—ホウ素排水処理技術の開発に向けて	東京農工大学農学研究院	橋本 洋平
STXM による細胞内蛋白質イメージングと厚い試料への適用の試み	東海大学工学部	伊藤 敦
STXM を用いた電子収量法による絶縁試料の配向解析	分子科学研究所	大東 琢治
アカズギンカメムシの構造色の in-situ 分析	分子科学研究所	大東 琢治
BL4U の整備	分子科学研究所	大東 琢治
硫黄架橋ゴムの網目ドメインネットワークの特性化	京都工芸繊維大学分子化学系	池田 裕子
加熱時における雰囲気の変化による地球外有機物の組織変化と分子構造の変化過程と、母天体での高分子化過程	高輝度光科学研究センター	上 摺 真之
はやぶさ2帰還試料測定のための機関間連携分析システムの構築	海洋研究開発機構高知コア研究所	伊藤 元雄
Probing the Microscopic Electronic Structure for High Specific Capacitance of Vanadium Oxide Supercapacitor	National Synchrotron Radiation Research Center	HSU, Yao-jane
Penetration of Drug-Loaded Nanocarriers and Drug Release in Serine-Protease-Treated Skin	Freie University Berlin	RUEHL, Eckart
Characterizing Ultrastructural Features in Tissues of Human Patients with Storage Diseases	University of Oulu	MINNA, Patanen
Molecular Level Chemical and Structural Characterization of Individual Aerosol Particles: Organosulfates and Nano-Plastics	University of Oulu	PRISLE, Nonne
遷移金属添加 CeO ₂ 中の磁性元素の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
軟X線 XAFS 構造解析による酸化スズサブナノ粒子の構成原子数依存の電子状態変化挙動の解明	東京工業大学科学技術創成研究院	葛目 陽義
Ti 添加Ⅲ族窒化物のバンドギャップ狭小の機構解明と人工光合成光電極材料としての最適組成探索	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田 早紀
OT 複合対称性で保護された新奇トポロジカル物質の開拓	東北大学材料科学高等研究所	佐藤 宇史
角度分解光電子分光によるワイル磁性体とその機能物性の開拓	東京大学物性研究所	近藤 猛
空間反転対称性の破れた新しい結晶構造が生み出すバルク物質中のスピン偏極ディラック電子状態の開拓	東京大学物性研究所	櫻木 俊輔
Rashba 型スピン軌道相互作用が誘起する磁性界面の電子状態計測	東京大学大学院理学系研究科	岡林 潤
Ag(100) 上に作成した VO(100) 薄膜における 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
一軸圧印加した Ba _{1-x} K _x Fe ₂ As ₂ の電子構造の研究	分子科学研究所	出田真一郎
立方晶カイラル化合物 NiSbS(111) 面における 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
光陰極の量子効率向上のための NEA 表面の電子構造観測	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
波数空間における遷移金属カルコゲナイドの光電子分光と第一原理計算の比較	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
ARPES Study of Electronic Compressibility in Hole Doped Perovskite Iridates	Westlake University	RUIHUA, He
Electronic Structure Study on van der Waals Heterostructures: Mini Bands and the Mott Gap Induced by Moire Superlattice	Seoul National University	KIM, Changyoung
マイクロ波照射下における有機分子挙動のテラヘルツ分光観察	京都大学化学研究所	高谷 光
環境半導体マグネシウムシリサイド n 型結晶の不純物状態	山形大学理学部	北浦 守
地球外有機物の 3 次元分布観察を目指した高輝度赤外分光マイクロトモグラフィ開発	広島大学大学院理学研究科	藪田ひかる
縮重に近い軌道を有する Me ₄ N[Pt(dmit) ₂] ₂ の電子構造の研究	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 で探る新奇界面超伝導の起源	東北大学材料科学高等研究所	佐藤 宇史
二重トポロジカル絶縁体の時間反転対称性の破れの効果の検証	東京工業大学理学院	平原 徹
有機半導体結晶における電子フォノン相互作用による電子状態変調 II	分子科学研究所	解良 聡
BL7U 光電子エンドステーションの整備	分子科学研究所	田中 清尚
高エネルギー分解能 ARPES による三層系銅酸化物高温超伝導体 Bi2223 のドーピング依存性	分子科学研究所	出田真一郎
層状 MAX 相化合物 Ti ₂ SnC および Ti ₃ SiC ₂ の低励起エネルギー偏光依存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

角度分解光電子分光によるタイプII デイラック電子系 NiTe ₂ における Ni イ ンターカレーション効果の研究	大阪大学大学院理学研究科	宮坂 茂樹
希ガス中加熱によるトポロジカル近藤絶縁体単表面の改質	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪 嘉之
一硫化サマリウムの電子状態・電荷ダイナミクスに及ぼす元素置換の効果 ～新規アクチュエーター開発を目指して～	名古屋大学大学院工学研究科	横山 泰範
Operando Microscopic Analysis at the Graphene-Metal Interface	Tamkang University	PONG, Way-faung
軟X線分光によるバイオマス中軽金属成分の分析	京都大学化学研究所	高谷 光
STXM を用いた水および NaCl 溶液中の帯電性ナノバブル周囲水の電子状態観測	東京大学物性研究所	原田 慈久
Needle-Shaped Hydroxyapatite Nanoparticles as Skin	The National Nanotechnology Center of Thailand	MAHATNIRUNKUL, Thanison
内殻励起による AlN の不純物発光測定	福井大学学術研究院工学系部門	福井 一俊
光電子放出分布の偏光特性および光エネルギー依存性の測定	広島大学大学院理学研究科	高口 博志

(7) 施設利用

① 装置開発室

位相分解波動関数イメージング装置の開発と運用	東京工業大学大学院理学院	水瀬 賢太
差動排気高濃度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

分子動力学法による水の3次元ラマン・THz 振動分光計算	京都大学大学院理学研究科	谷村 吉隆
生体分子の機能発現反応に関する理論的研究	千葉大学大学院薬学研究院	星野 忠次
触媒分子系および生体分子系の量子化学と反応動力学	北海道大学触媒科学研究所	長谷川 淳也
拡張アンサンブル法による分子シミュレーション	名古屋大学大学院理学研究科	岡本 祐幸
複合電子系の構造, 電子状態, 反応過程, 溶媒と構造に関する理論的研究	京都大学福井謙一記念研究センター	榊 茂好
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
場の量子論に基づく局所物理量による量子物性の研究	京都大学大学院工学研究科	瀬波 大土
金属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	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
複雑分子系におけるテラヘルツ帯から赤外領域のスペクトル解析	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
ハロ酸脱ハロゲン化酵素とシステム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	お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科	森 寛敏
溶液界面の構造と機能の計算化学	東北大学大学院理学研究科	森田 明弘
10族金属によるオレフィン重合触媒の機構解析と有機デバイスを指向した芳香族化合物の設計	東京大学大学院工学系研究科	野崎 京子
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および、フラビン-金属イオン配位錯体の振電バンドの理論的解析	東京工業大学科学技術創成研究院	宮崎 充彦
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
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
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
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
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
複素環式化合物の合成および反応性に関する理論研究	高知大学大学院総合人間自然科学研究科	金野 大助
リン脂質フリップを誘起する膜貫通ペプチドの計算分子設計	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
シミュレーションによるガラス状態の弾性と塑性の研究	東京大学大学院総合文化研究科	池田 昌司
OZ 理論から求まる二原子分子溶質の溶媒和自由エネルギー補正に関する研究: クーロン相互作用を考慮する場合	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
非平面型バイ共役分子の構造と物性	大阪府立大学大学院理学系研究科	津留崎陽大
ナノカーボン・アミノ酸・クラスターの反応動力学の量子化学的研究	電気通信大学大学院情報理工学研究所	山北 佳宏
クラウドリング分子のクラスター構造が核酸の安定性に与える影響の解析	甲南大学先端生命工学研究所 (FIBER)	杉本 直己
ミオシン VI の長距離ステップ運動を利用した高効率な動作メカニズムの解明	名古屋大学大学院工学研究科	寺田 智樹
タンパク質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	岡山大学大学院自然科学研究科	松本 正和
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
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
生体分子のマルチコピー・マルチスケールシミュレーション	横浜国立大学大学院生命医科学研究科	森次 圭
発光性金属錯体および集合体の電子状態に関する計算化学的アプローチ	北海道大学大学院理学研究院	加藤 昌子
軟X線光学に関する理論的研究	広島大学大学院理学研究科	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	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	山下 晃一
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	立教大学理学部化学科	スングラム アル ルモジラジャ
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
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
分子集合体のシミュレーション 4	北里大学理学部	米田 茂隆
ナノマテリアル及び生体分子の機能・物性・反応性に関する理論的研究	早稲田大学先進理工学研究所	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
触媒を用いた化学反応機構の理論的解明	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	首都大学東京理工学研究所	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構造および原子層物質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
タンパク質の構造と機能発現の関連性	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所	山崎 祥平
不凍タンパク質が氷に吸着する分子機構	信州大学国際ファイバー工学研究所	望月 建爾
金属クラスターの構造とその反応性	東京大学大学院理学系研究科	小安喜一郎
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	島根大学総合理工学部	影島 博之
両親媒性分子集合体からなる大規模不均一系中の物質輸送シミュレーションの構築	名古屋大学大学院工学研究科	吉井 範行
アルコール単分子膜/水界面での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所	石山 達也
有機光起電力デバイスの電荷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	京都大学福井謙一記念研究センター	佐藤 徹
有機絶縁分子膜中の金属原子クラスターの動的挙動の研究	千葉大学大学院理学研究院	中山 隆史
希薄溶液中の球状および棒状分子の回転拡散係数と Stoke-Einstein-Debye の関係の分子論的表式の確立	新潟大学理学部	大鳥 範和
APEX 反応および APEX 重合反応の反応機構とナノカーボン分子の構造物性解明研究	名古屋大学大学院理学研究科	伊藤 英人
Accurate Estimation of Electrode Potential on TiO_2 Type Cathodes	東京工業大学大学院理学院	Juhasz Gergely
メゾスケールサイズを有する金属錯体の電子状態解析	東京工業大学化学生命科学研究科	田中 裕也

多機能配位子をもつ金属錯体の構造および反応性に関する理論研究	理化学研究所	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
質量分析法による生体分子のラジカル分解過程に関する研究	産業技術総合研究所	浅川 大樹
機械学習に夜溶媒モデルの精度向上を目指したデータの解析	筑波大学大学院数理物質系	松井 亨
複合ナノクラスター・分子複合体の構造および電子状態に関する研究	慶應義塾大学理工学部	角山 寛規
液体の統計力学理論による生体分子機能の解析	九州大学大学院理学研究院	吉田 紀生
新規 π 電子系の設計・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
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
遷移金属クラスターと有機化合物の反応解析	東京大学大学院工学系研究科	丸山 茂夫
量子化学計算による光合成水分解反応の分子機構の解明	名古屋大学理学研究科	野口 巧
レニウム (I) フタロシアニン錯体の電気化学的 CO ₂ 還元反応	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
計算化学的手法を用いた有機合成反応の機構、有機物質の物性解明	慶應義塾大学薬学部	東林 修平
量子化学計算と機械学習で拓く触媒化学・材料科学	相模中央化学研究所	已上 幸一郎
化学反応動力学理論計算を活用した有機化学反応の反応機構解析	乙卯研究所	黒内 寛明
有機金属錯体を用いた触媒および発光性材料の理論的デザインと物性解析	北海道大学大学院工学研究院	伊藤 肇
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：脂質分子の影響	東京大学先端科学技術研究センター	篠田 恵子
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
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その物性改変	東京大学大学院工学系研究科	黒田 大祐
反応自動探索法の開発と応用	北海道大学	前田 理
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
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
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
青色光受容体蛋白質の DNA 修復機構の理論的解析	理化学研究所	佐藤 竜馬
多核 Mn 錯体に触媒される水分解の非断熱電子動力学による研究	京都大学福井謙一記念研究センター	山本憲太郎
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
ナノコンジット材料開発における第一原理と分子動力学を用いた計算科学の革新	National Institute of Advanced Industrial Science and Technology	Pradeep Varadwaj
小分子の変換反応を指向した遷移金属触媒合成に関する理論的研究	相模中央化学研究所	長岡 正宏
光・電子機能有機分子材料の機能解明とデザインのための計算化学シミュレーション	高度情報科学技術研究機構計算科学技術部	河東田道夫
分子動力学シミュレーションを用いた固体・液体界面における分子構造とダイナミクス	茨城大学工学部	城塚 達也
液体中の生体分子の拡散係数の分子動力学計算とその基本セルサイズ依存性	九州大学大学院理学研究院	秋山 良
細胞内メタボライトによる非特異的相互作用の分子動力学シミュレーション	前橋工科大学生命情報学科	優 乙石
ポストメタロセン触媒によるオレフィン重合反応および連鎖移動反応に関する理論的研究	名古屋大学大学院情報学研究所	三澤 奈々
第一原理分子動力学法による基底状態および励起状態の生体系への展開	理化学研究所	中村 振一郎
細胞内における蛋白質の動的構造の解明を目指した分子動力学シミュレーション	理化学研究所	松岳 大輔
MTS-MD/3D-RISM-KH 法を応用した結合自由エネルギー予測法の確立	立命館大学生命科学部	杉田 昌岳
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	神奈川大学総合理学研究所	田仲 二郎
有機化合物における置換基効果の微視的機構	鳥取大学大学院工学研究科	早瀬 修一
クロコン酸結晶における赤外スペクトルの理論研究	高エネルギー加速器研究機構	岩野 薫
高反応性のジボラン (4)・Al アニオン・ヘテロベンゼン類の性質の解明	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
分子クラスターの新規高分解能振動回転分光法の開発	東京工業大学理学院	水瀬 賢太
薬物と飲食物に含まれる生理活性物質との相互作用解析	福岡大学薬学部	池田 浩人
高い内部自由度を有する低分子非晶質有機半導体材料の凝集状態に関する計算	山形大学大学院有機材料システム研究科	横山 大輔
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
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
超臨界条件下の水-有機溶媒混合系の並進ダイナミクスと溶媒と構造	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

DFT によるアン磁性金属錯体の遷移と電子状態	東京理科大学理学部	秋津 貴城
パイ共役系分子による発光材料の開発	北里大学理学部	長谷川真士
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
all head-to-tail 環状 poly(3-hexylthiophene) の構造および紫外可視吸収スペクトルと蛍光スペクトルに関する理論的研究	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
汎用分子力場の改良と液体シミュレーション	東京大学先端科学技術センター	山下 雄史
クラスター複合体による化学反応の解明	豊田工業大学クラスター研究室	市橋 正彦
分子シミュレーションによる分子集合体の研究	名古屋文理大学	本多 一彦
エノールエステルの不斉加水分解におけるアルブミンの作用	明星大学理工学部	松本 一嗣
量子化学計算による炭素 1 原子を含む分子の酸化還元反応過程の解明	早稲田大学国際教養学部	稲葉 知士
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	名古屋工業大学工学研究科	小野 克彦
第一原理量子論による次世代 Emerging メモリの設計指針の獲得	名古屋大学大学院工学研究科	白石 賢二
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量子ビーム科学研究部門	黒崎 譲
生体分子および溶媒の構造機能相関の解明	立命館大学生命科学部	高橋 卓也
ボウル型共役化合物の物性調査, および金属クラスター触媒の活性評価研究	大阪大学大学院工学研究科	櫻井 英博
修飾核酸の分子動力学計算のための基盤構築	量子科学技術研究開発機構生体分子シミュレーショングループ	桜庭 俊
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
液晶性錯体の安定構造解析	北里大学理学部	吉田 純
格子モデルを用いたタンパク質トポロジーの熱力学的解析	三重大学総合情報処理センター	白井 伸宙
ペプチドナノリングの分子及びイオン捕捉能に関する理論的研究	高千穂大学人間科学部	竹内 淨
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
SiNN ピンサー配位子を有する 10 族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	恵良田知樹
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ものづくり環境学科	大澤 正久
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
光機能性分子の電子状態および振動スペクトル計算	室蘭工業大学工学研究科	飯森 俊文
新規な典型元素化合物の構造の研究	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物質工学科	井手 智仁
有機半導体蒸着膜の自発的配向分極現象の解明	明治大学理工学部	野口 裕
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
アルカリ金属を利用した炭素固体合成反応の計算化学的解明	北海道大学大学院工学研究院	島田 敏宏
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
マルチスケール構造を有する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
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
プロモチモールブルーの色と構造の関係	弘前大学教育学部	島田 透
遷移金属ダイカルコゲナイドの第一原理計算	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
機械学習を用いた非対称コマ分子の 3 次元整列制御	東北大学大学院理学研究科	大槻 幸義
気相ナノ粒子の輸送と荷電に関する分子動力学的解析	金沢大学大学院自然科学研究科	玉館 知也
凝縮系における緩和および反応ダイナミクスの理論研究	分子科学研究所	斉藤 真司
ナノ構造体の光・電子物性の第一原理計算	分子科学研究所	飯田 健二
複雑系の量子状態理論の開発と不均一系触媒および光機能システム系への応用	分子科学研究所	江原 正博
タンパク質凝集の分子シミュレーション	分子科学研究所	奥村 久士
NCN- 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	生命創成探究センター	古賀 信康
初期地球の隕石衝突における有機分子の熱分解反応と生存率	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
染色体の原子間力顕微鏡像の理論予測	金沢大学ナノ生命科学研究所	炭竈 享司
MD シミュレーションを用いたアクチン線維の安定性の研究	東海学院大学健康福祉学部	小田 俊郎

医工連携に基づいた人体内の固液混相流解析	東海大学工学部	高橋 俊
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
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
凝集誘起発光についての理論的研究	千葉工業大学工学部	山本 典史
溶媒効果を考慮した手法による抗体の糖鎖認識機構に関する理論的研究	北里大学一般教育部	能登 香
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
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
理論計算を基盤とする新規合成反応の開拓	東京農業大学生命科学部	斉藤 竜男
金属中心キラリティーの精密制御と錯体の性質解明	東京大学大学院理学系研究科	長田 浩一
五核鉄クラスターの電子状態と反応性の理論解析	名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所	柳井 毅
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
ヘキサアザトリフェニレン誘導体が形成する電荷移動錯体の物性評価	関西学院大学理工学部	田中 大輔
カテキン誘導体の分子内カップリング反応に対する DFT 計算	富山県立大学工学部	占部 大介
有機ケイ素材料の合成と物性解明	茨城工業高等専門学校	江川 泰暢
糖結合タンパク質 hGal-1 とファルネシル基類似化合物の相互作用解析	東北大学大学院薬学研究所	宮田 大輔
Si-H 基を含む二水素結合クラスターにおけるクラスター内イオン-分子反応過程の解明	北里大学理学部	石川 春樹
計算化学的なアプローチに基づく新規近赤外発光素子の開発	岡山大学大学院自然科学研究科	村井 征史
有機分子の光励起状態における構造変化の研究	北海道大学大学院理学研究院	小門 憲太
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	奈良女子大学大学院自然科学系	浦 康之
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
新規パイ共役化合物の構造-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
DNA と金属錯体の相互作用	中央大学理工学部	千喜良 誠
光誘起過渡構造変化を利用した分子間反応開発	東京大学大学院総合文化研究科	正井 宏
イミダクロプリドの光分解過程の解明ならびに規則炭素触媒における反応理解	東北大学多元物質科学研究所	山本 雅納
三重項-三重項消滅フォトンアップコンバージョン分子材料の計算科学的研究	立教大学理学部	三井 正明
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拡張と応用計算	岐阜大学工学部	宇田川太郎
Multi-Scale Modeling of Interstellar Radical Species on Water Ice	Institute of Low Temperature Science	W. M. C. Sameera
多核前周期遷移金属錯体反応場を用いた金属アルキリデン種の合成と反応	岡山大学大学院自然科学研究科	黒木 堯
ナノバイオ物質の電子状態・構造・機能の相関	名古屋大学未来材料・システム研究所	押山 淳
有機ケイ素化合物の構造と性質	群馬大学大学院理工学部	久新 莊一郎
短寿命種や界面化学種の振動スペクトル解析	筑波大学	石橋 孝章
抗金属錯体抗体の分子認識基盤の分光学による理解	医薬基盤・健康・栄養研究所	秋葉 宏樹
表面吸着分子の電子及びフォノン物性	分子科学研究所	南谷 英美
理論計算による内包フラーレンの研究	東北大学大学院理学研究科	岡田 洋史
超原子価化合物の電子・幾何構造の分光学的研究	広島大学大学院理学研究科	井口 佳哉
分子動力学計算と先端的計測による抗体の動的構造解析	生命創成探究センター	谷中 冴子
π 共役拡張型有機半導体材料の開発に関する理論計算	東京都立産業技術研究センター	小波 佳祐
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	名古屋大学未来社会創造機構	松尾 豊
中分子医薬品の膜透過性に対する分子動力学シミュレーション	筑波大学計算科学研究センター	西澤 宏晃
ジアリール基をもつジピリド縮環型 NHC 配位子を有するイリジウム錯体の合成とその応用	広島大学大学院理学研究科	山本 陽介
相関電子系の特異な物性に関する数値的研究	千葉大学大学院理学研究科	太田 幸則
ジチアシクロペンテンオリゴマーの電子状態解析	静岡大学学術院工学領域	植田 一正
メタロゲルミレンを用いた触媒反応の研究	東北大学大学院理学研究科	渡邊 孝仁
高い反芳香族性を示す $4n\pi$ 電子系の設計と構築	首都大学東京理学部	西長 亨
配位子保護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
機能性開殻分子の構造-物性-電子状態相関の解明	分子科学研究所	草本 哲郎
遷移金属触媒と基質との相互作用に関する理論的考察	早稲田大学理工学術院総合研究所	太田 英介
量子化学と統計力学に基づく溶液中金属錯体の理論的研究	総合研究大学院大学物理科学研究科	小杉 健斗
Theoretical Study of Molecular Vibrational Polariton in the Ultrastrong Coupling Regime	分子科学研究所	NGUYEN, Thanh Phuc
ナノ流路内部を運動するイオン液体輸送特性の流路幅依存性の評価及び定式化	福井大学学術研究院工学系部門	福島 啓悟

深層神経ネットワークによる脳理論の検証	基礎生物学研究所	渡辺 英治
加水分解酵素を用いる速度論的光学分割の機構解明と合成化学的応用	大阪大学大学院薬学研究科	赤井 周司
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
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
密度汎関数法による1,4-ジアゼピン誘導体の構造解析	東京都市大学工学部	塩月 雅士
典型元素の特性を活用した光機能性分子の開発	茨城大学工学部	吾郷 友宏
SH2ドメインを単特異的に活性化するモチーフの開発	東京大学大学院工学系研究科	梅根輝来人
DFT計算を用いた反応機構の解明による選択的有機合成反応の開発	奈良教育大学理科教育講座	山崎 祥子
植物由来のπ電子系化合物における分子内相互作用のエネルギー解析	杏林大学保健学部	田中 薫
遷移金属錯体を用いた有機フッ素化合物の不活性結合切断反応の機構解明	大阪大学大学院工学研究科	生越 専介
原子層制御エッチング反応過程に関するab initio密度汎関数理論研究	奈良女子大学大学院自然科学系	竹内 孝江
有機反応への電場効果の検証	岐阜大学	安藤 香織
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
分子の構造, 反応, 機能の理論研究	放送大学教養学部	橋本 健朗
遷移系列イオンを含む化合物の反応制御に関する理論的研究	岐阜大学地域科学部	和佐田裕昭
π電子部位連結化合物の大振幅ねじれ運動ポテンシャルにおける垂直配向障壁の分光学的精度と量子化学計算	日本大学工学部	奥山 克彦
新奇低次元遷移金属カルコゲナイドの電子状態の解明	首都大学東京理学部	中西 勇介
気相分子クラスターの構造と分子間相互作用の理論的解析とレーザー分光研究	東北大学大学院理学研究科	松田 欣之
シュウドアズリンにおける弱い相互作用の効果	茨城大学理工学研究科	Taborosi Attila
ヘム輸送体へのヘム結合過程のシミュレーション	理化学研究所	田村 康一
高極性液晶化合物の分子動力学シミュレーション	九州大学先端物質化学研究所	奥村 泰志

3-1-3 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～'12		'13		'14		'15		'16		'17		'18		'19		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	110	941	2	27	1	11	2	32	2	30	1	8	2	22	1	7	人数： 登録人数
協力研究	4,297	6,795	64	183	64	206	62	205	82	246	73	229	45	148	36	131	〃
所長 招へい	4,621	4,621	156	156	103	103	128	128	80	80	100	100	116	116	84	84	人数： 旅費支給者
研究会	349	5,993	10	254	6	162	11	195	7	151	10	201	10	174	7	88	〃
若手研究活動 支援（若手研 究会等）	5	66	1	21	2	38	1	16	1	14	2	41	1	21	2	32	〃
岡崎コンファ レンス	1	29	1	18	1	34	1	21	3	115	0	0	1	35	2	66	〃
施設利用 I	2,211	5,215	41	105	44	191	20	52	2	6	2	6	3	9	2	2	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)	5,457	18,612	204	786	199	751	235	844	221	813	236	914	248	985	264	1,024	〃
協力研究 (ナノプラット)	540	1,209	52	123	63	147	64	174	75	144	69	154	81	151	66	127	人数： 登録人数
施設利用 (ナノプラット)	348	896	132	378	174	453	197	618	196	493	185	554	164	475	139	434	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	18,134	44,574	663	2,051	657	2,096	721	2,285	669	2,092	678	2,217	671	2,136	603	1,995	

- * 施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用 (‘19年度の数値は、2020.1.10 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～'12		'13		'14		'15		'16		'17		'18		'19		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	25	25	1	1	1	1	1	1	3	3	4	4	1	1	0	0	人数： 旅費支給者
研究会	50	889	1	37	1	37	1	30	1	41	1	43	1	30	1	42	〃
施設利用	3,393	16,524	142	732	125	649	119	732	142	762	160	867	213	1,067	185	954	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	3,890	19,042	144	770	127	687	121	763	146	806	165	914	215	1,098	186	996	

- * 合計には課題研究，協力研究，招へい協力研究を含む。 (‘19年度の数値は、2020.1.10 現在)

3-2 国際交流と国際共同研究

3-2-1 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
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
18	0	2	8	3	131	144
19	0	1	6	0	108	115
合計	12	21	151	221	1,211	1,616

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
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
18	9	2	14	16	20	12	0	71	144
19	2	2	9	10	20	10	0	62	115
合計	124	32	143	167	218	277	5	650	1,616

表3 海外からの研究者（2019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	'19.12. 7-'19.12.12
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			
HAGENLOCHER, Jan	ドイツ	Eberhard Karls Universitat Tuebingen 大学院生	'19. 6.11-'19. 9. 8
3. 国際共同研究			
SAENNAWA, Wiyada	タイ	Suranaree University of Technology 学生	'18. 6.14-'19.10. 1
MOHAMAD ZAKARIA, Siti Mastura Binti	マレーシア	University of Malaya 学生	'18.11. 1-'19. 4.29
LEE, Pui Kee	マレーシア	University of Malaya 大学院生	'18.11. 1-'19. 4.29
Huang, Wei-Hong	台湾	国立交通大学学生	'19. 3. 1-'19. 4.26
CASSOURET, Florent	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'19. 4. 5-'19. 8.27
DOWE, Nicolas	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'19. 4. 5-'19. 8.27
WANG, Tak-Wai	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'19. 4. 5-'19. 8.27
Adrien, Girault	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'19. 4. 5-'19.10. 5
Jeremy, Roudinga	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'19. 4. 5-'19.10. 5
CAGNON, Benjamin	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'19. 4. 5-'19. 8.27
MARIE, Vincent	フランス	フランス国立パリ高等化学学校	'19. 4. 5-'19. 8.27
Schnapka, Vincent	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'19. 4. 5-'19. 8.27
Aminreza, Khodabandeh	オーストラリア	University of South Australia 研究員	'19. 7.16-'19. 7.20
Lai, Yu-Ling	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 研究員	'19. 8. 6-'19. 8.11
Shiu, Hung-Wei	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 研究員	'19. 8. 6-'19. 8.11
Le, Lan Nguyen Ngoc	タイ	Chulalongkorn University 大学院生	'19. 9. 6-'20. 3.31
Wilasri, Thunchanok	タイ	Kasetsart University 大学院生	'19. 9.30-'20. 3.25
Yang, Ling	台湾	National Chiao Tung University 大学院生	'19.10. 1-'20. 2.15
Wu, Yi-Ju	台湾	National Chiao Tung University 大学院生	'19.10. 1-'19.12.21
Jakkapan, Kumsampao	タイ	VISTEC 大学院生	'19.10. 1-'20. 9.30
Gamage Don Kaveendra Virajith Maduwantha	スリランカ	Sabaragamuwa University of Sri Lanaka 大学院生	'19.10. 4-'20. 3.31
Priestley, Michael	スウェーデン	University of Gothenburg 研究員	'19.10.15-'19.10.19
Goh, Ean Wai	マレーシア	University of Malaya 大学院生	'19.10.16-'20. 3.31
Chang, Yeet Hoong	マレーシア	University of Malaya 大学院生	'19.11. 1-'19. 4.30
Hasin, Panitat	タイ	Kasetsart University 講師	'19.12. 2-'20. 4.30
4. 所長招へい協力研究員			
三輪邦之	アメリカ	Northwestern University 博士研究員	'19. 7. 3-'19. 7. 7
落合達海	イギリス	University of Edinburgh 海外特別研究員	'19.10. 7-'19.10.15
熊谷 崇	ドイツ	マックスプランクフリッツ・ハーバー研究所グループリーダー	'19.10.12-'19.10.15
5. 招へい研究員			
BOBUATONG, Karan	タイ	Rajamangala University of Technology Thanyaburi 博士研究員	'19. 4. 1-'19. 5. 2
UDAYAKUMER, Deva Priyakumar	インド	International Institute of Information Technology 日本学術振興会外国人特別研究員	'19. 4.18-'19. 6. 2
HSU, Chain-Shu	台湾	National Chiao Tung University 教授	'19. 4.11-'19. 4.14
WU, Tung-Kung	台湾	National Chiao Tung University 准教授	'19. 4.11-'19. 4.14
杉山輝樹	台湾	National Chiao Tung University 准教授	'19. 4.11-'19. 4.14
LI, Yaw-Kuen	台湾	National Chiao Tung University 教授	'19. 4.11-'19. 4.14
SAENNAWA, Wiyada	タイ	Suranaree University of Technology 大学院生	'19. 4. 1-'19.10. 1
MOHAMAD ZAKARIA, Siti Mastura	マレーシア	University of Malaya 大学院生	'19. 4. 1-'19. 4.30
LEE, Pui Kee	マレーシア	University of Malaya 大学院生	'19. 4. 1-'19. 4.30
JERRY, Stahlberg	スウェーデン	Swedish University 研究員	'19. 4.24-'19. 4.25
LIN, Chun-Liang	台湾	National Chiao Tung University 助教	'19. 4.23-'19. 4.24
CHIU, Ya-Ping	台湾	National Taiwan University 教授	'19. 4.23-'19. 4.24
KONG, Xiangrui	スウェーデン	University of Gothenburg 大学院生	'19. 6.25-'19. 6.29 '19.10.15-'19.10.19
PEI, Xiangyu	スウェーデン	University of Gothenburg 研究員	'19. 6.25-'19. 6.29
WOJCIK, Janusz	ポーランド	Jagiellonian University 教授	'19. 7. 8-'19. 7. 9

VIJAYAN, Jayadev	ドイツ	Max Planck Institute of Quantum Optics 大学院生	'19. 7.14-'19. 7.20
CHANG, Rakwo	韓国	Kwangwoon University 教授	'19. 7.28-'19. 7.31
JANG, Joonkyung	韓国	Pusan National University 教授	'19. 7.28-'19. 7.31
KIM, Jun Soo	韓国	Ewha Womans University 准教授	'19. 7.28-'19. 7.31
SUNG, Jaeyoung	韓国	Chung-Ang University 教授	'19. 7.28-'19. 7.31
CHOI, Cheol Ho	韓国	Kyugpook National University 教授	'19. 7.28-'19. 7.31
RHEE, Young Min	韓国	KAIST 教授	'19. 7.28-'19. 7.31
JU, Sang-Yong	韓国	Yonsei University 准教授	'19. 7.28-'19. 7.31
SONG, Jae Kyu	韓国	Kyung Hee University 教授	'19. 7.28-'19. 7.31
CHOI, Myong Yong	韓国	Gyeongsang National University 教授	'19. 7.28-'19. 7.31
PARK, Seung Min	韓国	Kyung Hee University 教授	'19. 7.28-'19. 7.31
KIM, Tae Kyu	韓国	Pusan National University 准教授	'19. 7.28-'19. 7.31
LIM, Manho	韓国	Pusan National University 教授	'19. 7.28-'19. 7.31
KHODABANDEH, Aminreza	オーストラリア	University of South Australia 研究員	'19. 7.16-'19. 7.20
ZHAO, Xiang	中国 (香港含む)	Xi'an Jiaotong University 教授	'19. 7.27-'19. 8.30
			'20. 1.14-'20. 2.14
HUANG, Tzu-His	台湾	Tamkang University 大学院生	'19. 7.22-'19. 7.27
HUANG, Yu-Cheng	台湾	National Chiao Tung University 大学院生	'19. 7.22-'19. 7.27
			'19. 8.19-'19. 8.24
CHANG, Han-Wei	台湾	Tamkang University 研究員	'19. 7.22-'19. 7.26
PACHARIYANGKUN, Anna	タイ	VSITEC 大学院生	'19. 9. 6-'19.12. 4
YU, Li-Chung	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 研究員	'19. 8. 6-'19. 8.11
SHIU, Hung-Wei	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 准教授	'19. 8. 6-'19. 8.11
LAI, Yu-Ling	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 非常勤研究員	'19. 8. 6-'19. 8.11
CEOLIN, Denis	フランス	Synchrotron SOLEIL 研究員	'19. 8. 5-'19. 8.24
SAISOPA, Thanit	タイ	Suranaree University of Technology 研究員	'19. 8. 5-'19. 8.24
BORSUP, Jongrak	タイ	Suranaree University of Technology 大学院生	'19. 8. 5-'19. 8.24
KLAIPHET, Kanchanasuda	タイ	Suranaree University of Technology 大学院生	'19. 8. 5-'19. 8.24
HSU, Wei-Hao	台湾	Academia Sinica 研究員	'19. 8.19-'19. 8.24
DONG, Chung-Li	台湾	Tamkang University 助教	'19. 8.19-'19. 8.24
LEE, Suyoung	韓国	Seoul National University 大学院生	'19. 9. 2-'19. 9. 7
			'19.11.25-'19.11.30
PARK, Heonjoon	韓国	Seoul National University 大学院生	'19. 9. 2-'19. 9. 7
			'19.11.25-'19.11.30
OH, Dong Jin	韓国	Seoul National University 大学院生	'19. 9. 2-'19. 9. 7
			'19.11.25-'19.11.30
PALASSERY, Jaseela	インド	University of Calcutta 学生	'19. 8.19-'19. 9.30
RUEHL ECKART, Gunther Adolf	ドイツ	Free University of Berlin 教授	'19. 9. 8-'19. 9.14
GERMER, Gregor	ドイツ	Freie University Berlin 大学院生	'19. 9. 8-'19. 9.14
FLESCH, Roman	ドイツ	Freie Universitat 助教	'19. 9. 9-'19. 9.15
KUO, Jer-Lai	台湾	Academia Sinica Research Fellow	'19. 9.21-'19. 9.22
TAKAHASHI, Kaito	台湾	Academia Sinica 准教授	'19. 9.21-'19. 9.22
林 倫年	台湾	National Taiwan University 主任研究員	'19. 9.21-'19. 9.22
YOSHIDA, Daisuke	台湾	Academia Sinica 博士研究員	'19. 9.21-'19. 9.21
HUANG, Qian-Rui	台湾	Academia Sinica 博士研究員	'19. 9.21-'19. 9.26
YEH, Shou-Hao	台湾	Academia Sinica 大学院生	'19. 9.21-'19. 9.22
TZENG, Sheng-Yuan	台湾	Academia Sinica 大学院生	'19. 9.21-'19. 9.22
ZHAO, Geng	中国 (香港含む)	Westlake University 大学院生	'19. 9.13-'19.10.25
WEN, Wei	中国 (香港含む)	Westlake University 大学院生	'19. 9.13-'19.10.25
HE, Ruihua	中国 (香港含む)	Westlake University 准教授	'19. 9.13-'19.10.25
PRIESTLEY, Michael	スウェーデン	University of Gothenburg 博士研究員	'19.10.15-'19.10.19
SONG, Zhen	中国 (香港含む)	Westlake University 大学院生	'19.10.20-'19.10.25
HONG, Caiyum	中国 (香港含む)	Westlake University 大学院生	'19.10.20-'19.10.25
AKA, Gerard	フランス	フランス国立パリ高等化学学校教授	'19.10.11-'19.10.17
MAHATNIRUNKUL, Thanisorn	タイ	National Nanotechnology Center 研究員	'19.11.20-'19.11.23
MUNTWILER, Matthias	スイス	Paul Scherrer Institute Beamline Scientist	'19.12.14-'19.12.19

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
中央研究院 原子分子科学 研究所	台湾	分子科学研究所と中央研究 院原子分子科学研究所との 間の分子科学における協 力に関する覚書	共同研究（物質関連分子科 学、原子、分子との光科学、 理論と計算の分子科学）	2017. 1.12	2020. 1.11	所長	所長
韓国化学会 物理化学ディ ビジョン	韓国	分子科学研究所と韓国化学会 物理化学ディビジョンとの 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	2019.10.23	2024.10.22	校長	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
ベルリン自由大 学	ドイ ツ	自然科学研究機構分子科学 研究所とベルリン自由大学 との分子科学分野における 日独共同研究プロジェクト に関する協定	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	2019. 6.21	2022. 6.20	学長	所長
固体表面物理化 学国家重点実験 室	中国	自然科学研究機構分子科学 研究所と固体表面物理化学 国家重点実験室との協定	分子科学の学術推進と共同 研究の実施	2019.12.23	2024.12.22	所長	所長

(2019.12.31 現在)

3-2-2 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こととなり、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。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を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。令和元年度は下記2件の岡崎コンファレンスを開催した。

会議名：第80回岡崎コンファレンス

“Chirality-Induced Spin Selectivity and Its Related Phenomena”

期間：2019年5月15日(水)～5月18日(土)

場所：岡崎コンファレンスセンター

組織委員：山本浩史（分子科学研究所）、Ron Naaman（Weizmann Institute）

内容：

分子の持つキラルな構造と、電子の（スピンと並進運動を組み合わせた）キラルな運動とを結びつける効果として、Chirality-Induced-Spin-Selectivity (CISS) が2011年に発見され、これを使った関連研究が新たなキラリティの活用手段として注目されている。キラリティは「掌性」とも言われ、材料においてはそれを構成する原子の配置が自身の鏡像体と重ならなくなる性質の事であるが、無機材料・有機材料を問わずに広く存在する概念であるため、CISS効果についてもその適用範囲が今後大きく広がる可能性が期待される。本コンファレンスでは、これまでCISS効果を研究してきた主に物理化学系の研究者と、それを理論的に解明しようとしてきた理論物性物理の研究者、そして似たような対称性を持つ Edelstein 効果や電気磁気キラル二色性 (Electro-Magneto-Chiral Dichroism) を調べている物性科学の研究者などが初めて一堂に会し、材料はDNAやタンパク質から分子モーター、無機ナノチューブまで、測定手段は光電子分光、電気化学、電子デバイス計測など、多様な物質と計測手法におけるそれぞれのCISS効果について、活発に議論した。コンファレンス終了時には、このような会合を続けて開催していく必要が確認され、このコミュニティの活動がゴードンコンファレンスなどに引き継いでいかれることとなった。

招待講演者として海外から20名、国内から7名が参加し、口頭発表を行った。さらにポスター発表は15件、聴講者を含む参加者は総勢で75名（うち所内14名）であった。

以下に招待講演者を挙げる。

Invited Speakers (海外)

Ron Naaman (Weizmann Inst.)
Helmut Zacharias (Univ. of Munster)
Ismael Diez Perez (Kings college London)
Jie Song (Shanghai Jiao Tong Univ.)
Jeanne Crassous (Univ. Rennes 1)
Karl Heinz Ernst (Empa)
Eric Vetter (North Carolina State Univ.)
David Waldeck (Univ. of Pittsburgh)
Jean-Philippe Ansermet (Ecole Polytechnique Federale de Lausanne)
Michael Therien (Duke Univ.)
Amnon Aharony (Hebrew Univ.)
Ora Entin-Wohlman (Ben Gurion Univ.)
Vladimiro Mujica (Arizona State Univ.)
Xu Yang (Univ. of Groningen)
Ai-Min Guo (Central South Univ.)
Yossi Paltiel (Hebrew Univ.)
Sandipan Pramanik (Univ. of Alberta)
Claudio Fontanesi (Univ. degli Studi di Modena e Reggio)
Narcis Avarvari (Angers Univ.)
Jeremy Levy (Univ. of Pittsburgh)

Invited Speakers (国内)

Yasuhiro Utsumi (Mie Univ.)
Yoshihiro Iwasa (Univ. of Tokyo)
Shuichi Murakami (Tokyo Tech)
Tetsuaki Ito (Tokyo Univ. of Science)
Kazuyuki Ishii (Univ. of Tokyo)
Yoshihiko Togawa (Osaka Pref. Univ.)
Masayuki Suda (IMS)

以下にプログラムを示す。

15th May

13:30-13:40	Opening Hiroshi M. Yamamoto (IMS)
13:40-14:20	Electronic Spin Filtering by Helical Molecules Helmut Zacharias (Univ. of Munster)
14:20-15:00	Spin-Dependent Transport in Bioinspired Single-Molecule Junctions Ismael Diez Perez (Kings college London)

- 15:00-15:40 CISS Effect on DNA Nanostructures
Jie Song (Shanghai Jiao Tong Univ.)
- 16:00-16:40 Chiroptical and Photophysical Properties of Multifunctional Molecules Based on Helicenes
Jeanne Crassous (Univ. Rennes 1)
- 16:40-17:20 Chirality-Dependent Electron Spin Filtering by Molecular Monolayers of Helicenes
Karl Heinz Ernst (Empa)
- 17:20-18:00 Chirality Induced Magnetoresistance in 2D Chiral Hybrid Perovskites
Eric Vetter (North Carolina State Univ.)
- 16th May**
- 9:30-10:10 Adventures with Chiral Induced Spin Selectivity
David Waldeck (Univ. of Pittsburgh)
- 10:10-10:50 Spin-Dependent Electrochemical Charge Transfer Probed by Magnetic Resonance
Jean-Philippe Ansermet (Ecole Polytechnique Federale de Lausanne)
- 11:10-11:50 Light-Driven Molecular Switch for Reconfigurable Spin Filters
Masayuki Suda (IMS)
- 11:50-12:30 Chiral, Low-Resistance Organic and Nanoscale Frameworks that Uniquely Propagate Spin Polarized Currents
Michael Therien (Duke Univ.)
- 13:30-15:00 (Plenary lecture)
Polarized Spin Induced Enantio-Specific Chemistry
Ron Naaman (Weizmann Inst.)
- 15:30-16:10 Spin Current and Torque in Chiral Molecules
Amnon Aharony, Ora Entin-Wohlman, Yasuhiro Utsumi
- 16:10-16:50 Chirality-Induced Spin Selectivity Effect and Spin-Dependent Chemistry
Vladimiro Mujica (Arizona State Univ.)
- 16:50-17:30 Spin-Dependent Electron Transmission Model for Chiral Molecules in Solid-State Nanodevices
Xu Yang (Univ. of Groningen)
- 18:00-20:30 Poster Presentations
- 17th May**
- 9:30-10:10 Spintronics and Superconducting Spintronics Based on Chiral Molecules
Yossi Paltiel (Hebrew Univ.)
- 10:10-10:50 Nanotubes and Effects on Magnetoresistance and Spin Filtering
Sandipan Pramanik (Univ. of Alberta)
- 11:10-11:50 Theory of Chiral Transport in Chiral Crystals
Shuichi Murakami (Tokyo Tech)
- 11:50-12:30 Current-Induced Magnetization in Elemental Tellurium
Tetsuaki Itou (Tokyo Univ. of Science)
- 13:30-14:10 Electron Spin Polarizations and Magneto-Chiral Dichroism of Porphyrinic Compounds
Kazuyuki Ishii (Univ. of Tokyo)
- 14:10-14:50 Chiral TTF and Metal-Dithiolene Materials
Narcis Avarvari (Angers Univ.)
- 14:50-15:30 Nontrivial Electrical Transport Phenomena on Chiral Magnetic Materials
Yoshihiko Togawa (Osaka Pref. Univ.)
- 16:00-17:30 -----
Molecular Science Forum
Shuichi Murakami (Tokyo Tech)
- 18:00-20:00 Banquet
- 18th May**
- 9:30-10:10 CISS Effect in Chiral Imprinted Ni Revealed via XNCD
Claudio Fontanesi (Univ. degli Studi di Modena e Reggio)

10:10-10:50	Chiral Transport in Heteropolar Nanotubes Yoshihiro Iwasa (Univ. of Tokyo)
10:50-11:30	Engineered Helicity of One-Dimensional LaAlO ₃ /SrTiO ₃ Nanowires Jeremy Levy (Univ. of Pittsburgh)
11:30-11:45	Closing Ron Naaman (Weizmann Inst.)

(afternoon) Excursion

会議名：第81回岡崎コンファレンス

“Synthetic, Biological, and Hybrid Molecular Engines”

期間：2019年12月2日(月)～12月4日(水)

場所：岡崎コンファレンスセンター

組織委員：杉本敏樹(分子科学研究所), 熊谷 崇(フリッツハーバー研究所)

内容：

物質表面の構造や物性、化学的機能を原子・分子レベルで調べる表面科学研究は、化学産業で重要な電気化学反応や触媒化学反応などの分子論的素過程の解明に加え、ナノサイエンスおよびナノテクノロジーの発展に大きく貢献してきた。このような発展を支える表面計測・分光分野は、近年目覚ましく発展するレーザーや放射光などの光関連技術、走査プローブ顕微鏡、ナノスケール微細加工技術、そして計算科学との高度な融合により、新たな局面を迎えつつあります。このように、様々な分野の最先端技術が組み合わされることによって飛躍的な発展を遂げ得る表面計測・分光分野の性質上、積極的に異分野研究者の接点を増やすこと、とりわけ若手・中堅研究者の密な研究交流と長期的な研究協力の芽となる機会を作り出すことは本質的に重要である。そこで、本コンファレンスでは、表面計測・分光を専門とする研究者の講演を中心に企画しつつも、触媒科学や材料科学、及びそれらに本質的に関わる理論分野の研究者を呼びこむことに努め、「表面界面におけるキャリアダイナミクス」、「表面反応のオペランド分光」、「新概念に基づくメタンのC-H活性化」、「近接場光学の物理と化学」、「新奇な2次元物質や分子集合体」、「高度な水素利用に向けた物質開発と計算科学の挑戦」などに関するトピックに集中的に議論を行った。外国人招待講演者12名、日本人招待講演者21名、ポスター発表者25名を含めて参加者は80名を超える比較規模の大きな会議となった。

以下に招待講演者を挙げる。

Akimitsu Narita (MPI for Polymer Research/OIST)

Alex Paarmann (Fritz-Haber Institute)

Aliaksei Mazheika (Technical Univ. Berlin)

Atsushi Urakawa (Delft Univ. of Technology)

Christopher Kley (Fritz-Haber Institute)

Emiko Kazuma (RIKEN)

Genki Kobayashi (Institute for Molecular Science)

Hajo Freund (Fritz-Haber Institute)

Hirohito Ogasawara (Stanford Linear Accelerator Center)

Hiroshi Imada (RIKEN)

Julia Stähler (Fritz-Haber Institute)

Jun Haruyama (Univ. of Tokyo)
 Jun Yoshinobu (Univ. of Tokyo)
 Kazuhiro Takanabe (Univ. of Tokyo)
 Kazunari Yoshizawa (Kyushu Univ.)
 Ken Sakaushi (National Institute for Materials Science)
 Leonhard Grill (Univ. of Graz)
 Makoto Fujita (Univ. of Tokyo/Institute for Molecular Science)
 Mariana Rossi (Fritz-Haber Institute)
 Masaaki Yoshida (Yamaguchi Univ.)
 Nian Lin (The Hong Kong Univ. of Sci. and Technol.)
 Ralph Ernstophner (Fritz-Haber Institute)
 Satoru Takakusagi (Hokkaido Univ.)
 Shiwei Wu (Fudan Univ.)
 Susumu Yamamoto (Tohoku Univ.)
 Takahiro Kondo (Univ. of Tsukuba)
 Takanori Koitaya (Institute of Molecular Science)
 Takashi Kumagai (Fritz-Haber Institute)
 Takashi Suzuki (Univ. of Tokyo)
 Toshiki Sugimoto (Institute for Molecular Science)
 Ya-Ping Chiu (National Taiwan Univ.)
 Yoshiaki Sugimoto (Univ. of Tokyo)
 Yujin Tong (Fritz-Haber Institute)

以下にプログラムを示す。

December 2nd, 2019

12:30–13:30	Registration
13:30–13:40	<i>Opening Remarks</i> (Maki Kawai, Toshiki Sugimoto & Takashi Kumagai)
13:40–15:10	Model Catalyst and its Perspective (Chair: Maki Kawai)
(90 min)	13:40-14:20 Hajo Freund (Fritz-Haber Institute) “Model Systems in Heterogeneous Catalysis at the Atomic Level”
	14:20-14:45 Takahiro Kondo (Univ. of Tsukuba) “Vibration-Driven Reaction of CO ₂ with Hydrogen at Cu Surfaces”
	14:45-15:10 Jun Yoshinobu (Univ. of Tokyo) “Adsorption, Activation and Reaction of Inert Molecules on Model Catalysts”
15:10–15:50	<i>Break & Free discussion</i>
(40 min)	
15:50–17:40	New Approach for Electrochemistry (Chair: Julia Stähler)
(110 min)	15:50-16:20 Yujin Tong (Fritz-Haber Institute) “Structures and Dynamics at Electrochemical Interfaces Studied by Nonlinear Spectroelectrochemistry”
	16:20-16:45 Masaaki Yoshida (Yamaguchi Univ.) “Operando Observation of All Elements in Water Splitting Electrocatalysts”
	16:45-17:15 Christopher Kley (Fritz-Haber Institute) “Revealing Catalytic Materials at the Nanoscale: From UHV STM to In Situ Electrochemical AFM”
	17:15-17:40 Jun Haruyama (Univ. of Tokyo) “Electrode Potential and Charge Transfer Reaction Using Density Functional Theory Combined with Implicit Solvation Model”

17:40–18:00 *Break & Free discussion*
(20 min)
18:00–20:00 *Poster & Welcome reception*
(120 min)

December 3rd, 2019

9:00–10:15 **Operando Spectroscopy for Surface Reactions** (Chair: Yujin Tong)
(75 min)
9:00- 9:25 Hirohito Ogasawara (SLAC)
“Elucidation of Surface Reaction Pathway Using Ultrafast Soft X-Ray Spectroscopy”
9:25- 9:50 Susumu Yamamoto (Tohoku Univ.)
“Operando Observation of Photo-Excited Carriers and Molecules at Solid Surfaces Using Soft X-Ray Spectroscopies”
9:50-10:15 Satoru Takakusagi (Hokkaido Univ.)
“Development of Operando PTRF-XAFS Technique for Determining 3D Structure of Active Sites in Heterogeneous Catalysis”
10:15–10:50 *Break & Free discussion*
(35 min)
10:50–12:05 **New Approach for Near-Field Physics and Chemistry** (Chair: Ralph Ernstofer)
(75 min)
10:50-11:15 Takashi Kumagai (Fritz-Haber Institute)
“Near-Field Physics and Chemistry in Plasmonic STM Junctions”
11:15-11:35 Emiko Kazuma (RIKEN)
“Single Molecule Study of Plasmon-Induced Chemical Reactions”
11:35-12:05 Alex Paarmann (Fritz-Haber Institute)
“Far-Field Approach to Optical Near Fields: Nonlinear Infrared Spectroscopy and Microscopy”
12:05–12:15 *Conference photo*
13:30–14:45 **New Concept for Methane Activation** (Chair: Atsushi Urakawa)
(75 min)
13:30-13:55 Kazunari Yoshizawa (Kyushu Univ.)
“Orbital Concept for Methane Activation by Metal-Oxo Species: Enzyme to Surface”
13:55-14:20 Kazuhiro Takanabe (Univ. of Tokyo)
“Crucial Role of OH Radicals in Improving Selectivity in the Oxidative Coupling of Methane”
14:20-14:45 Takanori Koitaya (Institute of Molecular Science)
“Catalytic Activation of C1 Molecules Studied by Ambient-Pressure XPS”
14:45–15:15 *Break & Free discussion*
(30 min)
15:15–16:40 **Electron Dynamics in 2D Systems** (Chair: Nian Lin)
(85 min)
15:15-15:45 Ralph Ernstoph (Fritz-Haber Institute)
“Ultrafast Electron Dynamics: Momentum- and Real-Space Perspective”
15:45-16:15 Shiwei Wu (Fudan Univ.)
“Second Harmonic Generation: A Symmetry Probe for 2D Materials”
16:15-16:40 Takashi Suzuki (Univ. of Tokyo)
“Ultrafast Carrier Dynamics in a Twisted Bilayer Graphene Quasicrystal Studied by Time- and Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy”
16:40–17:05 *Break & Free discussion*
(25 min)
17:05–18:00 **Carrier Dynamics in Condensed Phase and Interface** (Chair: Fumio Komori)
(55 min)
17:05-17:35 Julia Stähler (Fritz-Haber Institute)
“ZnO: Ultrafast Generation and Decay of a Surface Metal”
17:35-18:00 Toshiki Sugimoto (Institute for Molecular Science)
“Challenge of Infrared Spectroscopy: Unveiling Water-Assisted Carrier Trapping at TiO₂ Nano-Photocatalyst with Distinct Particle Morphologies”
18:10–18:50 *Shuttle Bus for Conference Dinner (From OCC to Okazaki New Grand Hotel)*
19:00-21:00 *Conference dinner (Okazaki New Grand Hotel)*

December 4th, 2019

9:00–10:20 **Molecular Materials** (Chair: Leonhard Grill)
(80 min)
9:00- 9:30 Makoto Fujita (Univ. of Tokyo/Institute for Molecular Science)
“TBA”
9:30- 9:55 Akimitsu Narita (MPI for Polymer Research/OIST)
“Bottom-up Chemical Synthesis of Atomically Precise Graphene Nanostructures”
9:55-10:20 Ya-Ping Chiu (National Taiwan University)
“Light-Induced Molecular Dipole Reordering in Halide Perovskites”
10:20–10:50 *Break & Free discussion*
(30 min)

10:50–12:35 (105 min)	<p>Scanning Probe Techniques for Molecular Systems (Chair: Takashi Kumagai)</p> <p>10:50-11:20 Leonhard Grill (Univ. of Graz) “Manipulation of Single Molecules: Wires, Switches and Motors”</p> <p>11:20-11:50 Nian Lin (The Hong Kong Univ. of Science and Technology) “Desine, Synthesis and Characterization of Low-Dimensional Conjugated Metal–Organic Coordination Structures on Surfaces”</p> <p>11:50-12:15 Yoshiaki Sugimoto (Univ. of Tokyo) “Imaging and Force Spectroscopy of Individual Atoms/Molecules Using Atomic Force Microscopy”</p> <p>12:15-12:35 Hiroshi Imada (RIKEN) “STM Study of Exciton Creation and Annihilation in a Single Molecule”</p>
13:45–15:05 (80 min)	<p>Hydrogen Dynamics and Engineering (Chair: Toshiki Sugimoto)</p> <p>13:45-14:15 Mariana Rossi (Fritz-Haber Institute) “How Theory Can Elucidate Anharmonic Quantum Nuclear Fluctuations and Hydrogen Dynamics at Finite Tem-Peratures”</p> <p>14:15-14:40 Genki Kobayashi (Institute for Molecular Science) “Study on Hydride Ion Conductive Oxyhydrides”</p> <p>14:40-15:05 Ken Sakaushi (National Institute for Materials Science) “Quantum Effects in Proton Transfer at Electrified Surfaces”</p>
15:05–15:35 (30 min)	<i>Break & Free discussion</i>
15:35–16:25 (50min)	<p>In-Situ/Operando Techniques for Catalysis (Chair: Kazuhiro Takanabe)</p> <p>15:35-16:00 Atsushi Urakawa (Delft Univ. of Technology) “Holistic Understanding of Catalytic Performance through Physicochemical Gradients Present in Reactors”</p> <p>16:00-16:25 Aliaksei Mazheika (Technical Univ. Berlin) “Ab Initio Machine-Learning Study of CO₂ Activation on Semiconductor Oxide Surfaces”</p>
16:25–16:55 (30 min)	<p>Panel discussion (Chair: Jun Yoshinobu)</p> <p>Hajo Freund, Leonhard Grill, Atsushi Urakawa, Ralph Ernstofer</p>
16:55–17:00	<i>Closing Remarks</i> (Toshiki Sugimoto)

3-2-3 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。第17回シンポジウム「Advances in Materials and Molecular Sciences」は、2019年7月に名古屋にて、新学術領域研究「光合成分子機構の学理解明と時空間制御による革新的光-物質変換系の創製」との共催で実施された。日本側11件、韓国側12件の講演と19件のポスターセッションがあった。次回第18回は2021年韓国にて開催予定で、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）
17	2019年7月	Advances in Materials and Molecular Sciences	名古屋

3-3 大学院教育

3-3-1 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 ～2009	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
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	40	3	1	1					1	3	8
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	5	1								1	
岐阜大学	2										
静岡大学		2	2								
名古屋大学	99	4	11	12	11	9	12	12	9	11	5
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	47			1	1					3	2
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	
総合研究大学院大学											1
首都大学東京	20										
名古屋市立大学	34	4	2	3	2	2	1	2	2	4	5
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	4	1	3	6	6	8	4	1	2	2	3
計	684	17	27	30	24	27	26	17	16	27	24

*外国の大学等

3-3-2 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（2019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	4	14
機能分子科学専攻	8	5	19
計	15	9	33

在籍学生数（2019年12月現在） 単位：人 (年度別)

入学年度専攻		2014	2015	2016	2017	2018	2019	計	定員
構造分子科学専攻	5年一貫	1	1	2	2	6	0	12	2
	博士後期	0	1	0	1	1	2	5	3
機能分子科学専攻	5年一貫	0	2	2	1	6	4	15	2
	博士後期	0	0	1	2	2	2	7	3

学位取得状況 単位：人 (年度別)

専攻	1991～2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	112(12)	2	2	6	4	2	4	4	6	3	0	145(12)
機能分子科学専攻	87(14)	5	1	3	6	1(3)	3	4	2	0(1)	2	114(18)

() 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	1989～2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019
構造分子科学専攻	149(6)	5(1)	1(1)	6(2)	5(4)	11(4)	7(3)	6(5)	5(4)	10(9)	3(0)
機能分子科学専攻	119(5)	4(2)	6(2)	8(2)	4	2(1)	4(3)	8(5)	8(5)	6(4)	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		
	1989-2017年度	2018年度	2019年度	1989-2017年度	2018年度	2019年度
中国	32			12		
フランス				1		1
ロシア				1		

バングラディッシュ	6			2		
インド	1			3	1	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	3			7		
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～'17年度	'18年度	'19年度	'89～'17年度	'18年度	'19年度	
北海道大学	3(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				2(1)			2(1)
長岡技術科学大学	2(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	1			5
岐阜大学				1	1(1)		2(1)
静岡大学	2			1			3
名古屋大学	8(5)	2(2)		9(2)		2(1)	21(10)
愛知教育大学		1(1)					1(1)
名古屋工業大学	1			2(2)			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)		1	17			34(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)			3			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				2(2)			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				5(1)	1(1)	1(1)	7(3)
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)		1	2(1)			7(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)				1(1)	5(2)
立命館大学	1			4(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	48(3)	1(1)		36(4)	1	2(1)	88(9)

*外国の大学等

() は5年一貫で内数

修士生の現職身分別進路（2019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	43	38	81
民間企業	27	18	45
その他	28	22	50
計	146	115	261

3-3-3 オープンキャンパス・分子研シンポジウム

2019年6月7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2019を開催し、引き続き8日（土）に分子研オープンキャンパス2019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13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63名であった（オープンキャンパス・分子研シンポジウムいずれか一方のみを含む）。参加者構成は、学部学生42名、大学院生12名、大学教員及び関連機関6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	4	0	0	1	0	5
関東	18	2	0	2	0	22
甲信越	1	0	0	0	1	2
北陸	0	1	1	0	0	2
東海	9	2	0	2	0	13
近畿	7	5	1	1	2	16
中国・四国	0	0	0	0	0	0
九州・沖縄	3	0	0	0	0	3
合計	42	10	2	6	3	63

3-3-4 夏の体験入学

2019年8月6日(火)から9日(金)までの4日間、分子科学研究所において、第16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。選考の結果、本年度は27名の学生(学部学生23名、大学院修士課程学生4名)を受け入れて実施した。実施スケジュールは以下のとおりである。

8月6日(火)：オリエンテーション，配属研究室にて研究体験

8月7日(水)，8日(木)：配属研究室にて研究体験

8月9日(金)：UVSORと計算科学研究センターの見学，体験内容報告会，交流会

参加者の内訳，体験内容，受入研究室は以下の通りである。

	所属	学年	体験内容	対応教員
1	大阪市立大学	学部4年	金属タンパク質を対象とした研究を体験してみよう	青野 教授
2	国際基督教大学	学部3年		
3	名古屋大学	学部3年		
4	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
5	東海大学	学部1年		
6	神戸大学	学部3年	タンパク質1分子の動きを観察してみよう	飯野 教授
7	京都大学	学部2年		
8	京都大学	学部2年	量子系のダイナミクス，光との相互作用について学びます	石崎 教授
9	名古屋大学	学部2年	フロンティア軌道理論と量子化学計算	江原 教授
10	東京農工大学	学部4年		
11	東京大学	学部3年	レーザー冷却された原子集団の観測と物質波回折	大森 教授
12	名古屋大学	学部2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
13	東京電機大学	修士2年	ナノの金属ロッドを作って波動関数を見る	岡本 教授
14	東北大学	修士1年		
15	立命館大学	学部3年	有機EL，有機太陽電池の作製と発光・発電測定	平本 教授
16	関西大学	学部3年		
17	京都大学	学部2年	有機トランジスタ	山本 教授

18	京都大学	修士1年	キラル分子を合成し、その機能を探索する	榎山 准教授
19	愛知工業大学	学部4年		
20	愛知工業大学	学部4年		
21	龍谷大学	学部3年	イオン導電体を合成し、結晶構造とイオン導電率の関係を調べよう	小林 准教授
22	龍谷大学	学部3年		
23	京都大学	学部2年	最先端のパルスレーザー非線形分光計測を用いたとっても難しい分子分光研究への挑戦！	杉本 准教授
24	筑波大学	学部3年		
25	埼玉工業大学	学部3年		
26	京都大学	学部2年	安定なラジカルを合成してその発光特性を調べてみよう！	草本 准教授
27	東北大学	学部2年		

3-3-5 総研大アジア冬の学校

2020年1月16日（木）分子科学研究所明大寺地区南実験棟において、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16回目になる。アジア全域から参加者を募り、総研大生14名と若手研究者を含めた教職員10名に加え、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）8名と国内の他大学から2名の留学生と1名の教員を受け入れ、計35名で実施した。今年度のテーマは、作年度に引き続き「Challenges for New Frontiers in Molecular Science: From Basic to Advanced Researches」とし、参加者によるフラッシュトークおよびポスター発表を実施後、3名の講師によって最先端の研究成果に基づく講義が行われた（講演者は下記の通り）。また、今年度から、参加者の投票によってポスター賞を選出する試みを取り入れ、22件のポスター発表の中から3件を優秀ポスターとして表彰した。フラッシュトークおよびポスター発表では、所内の総研大生、教員とインターンシップ生との交流が持たれ大変盛況であった。

KATO, Koichi (IMS, SOKENDAI)

“Dynamic Sugar Codes that Determine Protein Functions and Fates”

SODEOKA, Mikiko (RIKEN)

“New Methodologies for Chemical Biology Research”

YAMAMOTO, Hisashi (Chubu University)

“New Peptide Synthesis for Changing Drug Industry From Lewis Acid Catalyst to Peptide Synthesis”

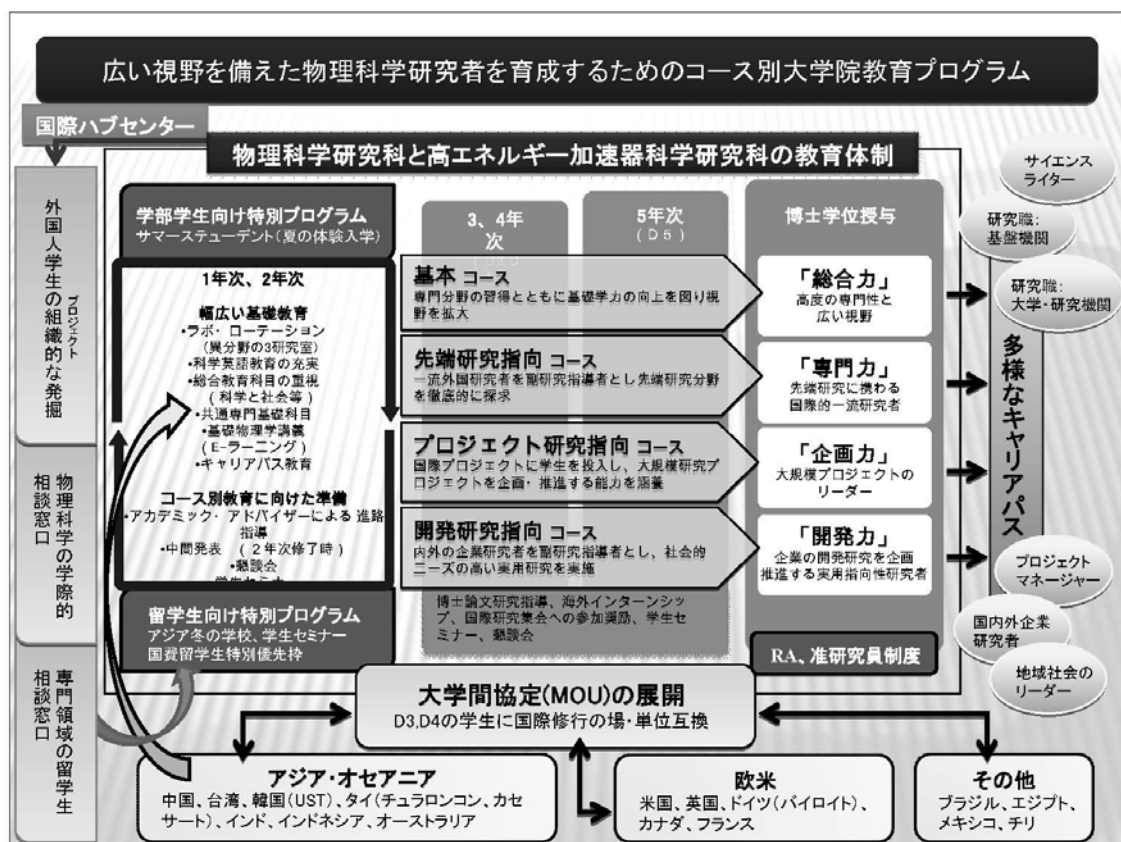
3-3-6 広い視野を備えた物理科学研究者を育成するためのコース別教育プログラム

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。



3-3-7 統合生命科学教育コース群

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きた (<http://ibep.nips.ac.jp/index.html>)。

2019年度より総合的な教育の視点から、研究領域に関連する問題や課題に応じて、各研究科・専攻が開設する授業科目群をグループとしてまとめ、狭義の専門分野を超えて広く本学の学生に履修を促す「コース群」が設置され、「統合生命科学教育プログラム」より「統合生命科学教育コース群」として新たなスタートをきることとなった。

「統合生命科学教育コース群」としては、これからの生物学に寄与することの出来る研究者を育成するために、生物科学のみならず、物理科学、数理科学、情報科学などに通じる学際的かつ統合的な生命観を育てることを目的とする授業科目群を提供している。

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分子細胞生物学Ⅱ、④バイオインフォマティクス演習、⑤発生生物学Ⅱ、⑥生体分子シミュレーション入門*、⑦基礎生体分子科学、⑧構造生体分子科学、⑨統合進化学*が実施された。⑦バイオインフォマティクス演習について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ている。

*履修登録者無しのため中止

4. 研究支援等

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

技術課は、研究支援組織の中核になる大きな集団を構成している。分子科学研究所は、法人化後、技術課に所属する技術職員を公募で選考採用したり、研究室配属の技術職員を研究施設に配置転換したりすることによって、大型の研究施設を維持管理する部門や共同利用を直接支援する部門を増強した。平成19年度に組織編成を大きく見直したが、新しい研究センターの設置や研究所の構想により即した体制を整えるため、平成25年7月に7技術班を6技術班に再編し一部の人員配置換えも行った。（「2-8 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、専任の特任研究員と助手、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2019年4月1日現在で34名である。技術職員は、主に研究施設に配属され、それぞれの持つ高い専門技術で研究教育職員と協力し、先端的かつ独創的な研究を技術面から支え、大学共同利用機関の使命を果たすために努力している。各施設に配属された技術職員の対応する技術分野は広範囲に渡っている。機械、電気、電子、光学、情報、といった工学知識や各要素技術の技能を基に支援業務として実験機器の開発、システム開発等を行い、物理・化学・生命科学を基に物質の構造解析や化学分析等を支援している。この様に技術職員の持っているスキルを活用し、UVSOR やスパコン、レーザーシステム、X線回折装置、電子顕微鏡、ESR、SQUID、NMR など大型設備から汎用機器の維持管理、施設の管理・運用も技術職員の役割としている。さらに、科学の知識を基に研究所のアウトリーチ活動も職務として担い、広報に関する業務、出版物の作成も行っている。所内の共通業務としてネットワークの管理・運用、安全衛生管理も技術課の業務として行っている。安全衛生管理では、研究所の性質から毒物・劇物・危険物など薬品知識や低温寒剤等高压ガスの知識、放射線管理、その他技術的な側面から毎週職場巡視を行い、分子研の安全衛生管理に寄与している。

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

4-1-1 技術研究会

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

表1 技術研究会開催機関

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

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

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

平成 31 令和元	分子科学研究所	令和元年 8 月 29-30 日	機器・分析	
	千葉大学（高エネルギー加速器 研究機構共催）	令和 2 年 3 月 5-6 日	機械工作, 実験装置, 計測制御, 真空低温, 情報処理	開催中止
	鹿児島大学	令和 2 年 3 月 18-20 日	実験・実習, 地域貢献, 安全衛生	開催中止

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、一步進めて、他研究機関に働きかけ、受け入れ研修体制を作っていたいただいた。そうした働きかけの結果、1996 年度より国立天文台が実施し、1997 年度には高エネルギー加速器研究機構、1998 年度からは核融合科学研究所が受け入れを開始し現在も続いている。法人化後は、受け入れ側の負担や新しい技術の獲得には大きく寄与していないため、実施件数は少なくなってきた。そこで、2007 年度からセミナー形式で外部より講師を招き、併せて他機関の技術職員も交えて「技術課セミナー」を行っている。この「技術課セミナー」は今後、様々な技術分野のトピックを中心に定期的に開催する予定である。また、従来の受け入れ研修も小規模ながら続けている。

表 2, 3 に分子研での受け入れ状況を示す。

表 2 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
平成 30 年度	14
令和元年度	13

表3 2019年度技術研修受入状況(2019.4.1～2020.3.31)

氏名	所属	受入期間	備考
丹松美由紀	鳥取大学	2019.8.28～8.30	2019年度分子科学研究所 機器・分析技術研究会
森 加奈恵	佐賀大学	2019.8.28～8.30	2019年度分子科学研究所 機器・分析技術研究会
玉木 俊昭	東北大学	2019.8.28～8.30	2019年度分子科学研究所 機器・分析技術研究会
江端 新吾	東京工業大学	2019.8.28～8.30	2019年度分子科学研究所 機器・分析技術研究会
東嶺 孝一	北陸先端科学技術大学院大学	2019.8.29～8.30	2019年度分子科学研究所 機器・分析技術研究会
徳永 誠	埼玉大学	2019.8.29～8.30	2019年度分子科学研究所 機器・分析技術研究会
鎌田 浩子	愛媛大学	2019.8.29～8.30	2019年度分子科学研究所 機器・分析技術研究会
大久保賢治	北海道大学	2019.8.29～8.30	2019年度分子科学研究所 機器・分析技術研究会
平田 暁子	富山大学	2019.8.29～8.30	2019年度分子科学研究所 機器・分析技術研究会
修行 美恵	九州工業大学	2019.12.19～12.21	分子科学研究所 2019年度技術課セミナー
藤崎 聡美	岩手大学	2019.12.19～12.21	分子科学研究所 2019年度技術課セミナー
奥村 由香	大阪大学	2019.12.19～12.21	分子科学研究所 2019年度技術課セミナー
一條 肇	東北大学	2019.12.19～12.21	分子科学研究所 2019年度技術課セミナー

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)
- 鈴木光一 日本化学会化学技術有功賞(2007)
- 吉田久史 日本化学会化学技術有功賞(2008)
- 水谷文保 日本化学会化学技術有功賞(2009)

青山正樹	日本化学会化学技術有功賞（2012）
高山敬史	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）
近藤聖彦	日本化学会化学技術有功賞（2020）
堀米利夫	第7回日本放射光学会功労報賞（2020）
藤原基靖	ナノテクノロジープラットフォーム令和元年度技術支援貢献賞（2020）
浅田瑞枝	ナノテクノロジープラットフォーム令和元年度技術支援貢献賞（2020）
伊木志成子	ナノテクノロジープラットフォーム令和元年度技術支援貢献賞（2020）

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。

南海トラフ地震発生の切迫性の高まりに対応するため、特殊な実験機器類が設置された実験室環境における地震発生時の安全性確保と機器の被害の防止、および被災後の速やかな研究環境の復旧を目指して「実験室用耐震対策ガイドライン」を新たに策定した。加えて、「防災訓練のシナリオ」や「緊急連絡のしおり」をより実践的なものに改訂した。また「安全ガイド2020-2023年度版」として、日本語／改訂版、および英語／新規刊行版を配布する作業を行っている。

4-3 社会との交流

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

4-3-1 自然科学研究機構シンポジウム

当シンポジウムは2006年より年2回のペースで実施され、下記のようにこれまでに計28回開催されている。

本シンポジウムに対する分子科学研究所の関与は次の通りである。第1回において、「21世紀はイメージング・サイエンスの時代」と銘打ったパネルディスカッション中で、岡本裕巳教授が「ナノの世界まで光で見えてしまう近接場光学」というタイトルで講演を行った。第2回目は、講演会全体の企画を分子科学研究所が中心となって行った（詳細は「分子研レポート2006」を参照）。第7回では、加藤晃一教授が自らの体験に基づいて「研究の醍醐味とは何か」を伝える講演を行った。第11回では、大峯巖所長が「水の揺らめきの世界；揺らぎと反応と生命」というタイトルで講演を行った。第14回は、再び講演会全体の企画を分子科学研究所が中心となって行った（詳細は「分子研レターズ68号」を参照）。第21回では、正岡重行准教授が「人工光合成への挑戦～植物に学ぶ分子デザイン～」というタイトルで講演を行った。

また、講演会の開催と併せて、展示コーナーを設けてビデオやパネルを用いた説明を行なっている。常設展示室に設置されている可搬式のグラフィックパネルや模型を適宜利用するなど、展示内容のさらなる充実に努めている。合わせて、十分な説明要員を確保するために研究者の積極的な参加も促している。

実施状況は以下の通り。

回	開催日	テーマ	会場
1	2006. 3.21	見えてきた！ 宇宙の謎。生命の謎。脳の謎。科学者が語る科学最前線	サンケイプラザ
2	2006. 9.24	爆発する光科学の世界—量子から生命体まで—	東京国際フォーラム
3	2007. 3.21	宇宙の核融合・地上の核融合	東京国際フォーラム
4	2007. 9.23	生命の生存戦略 われわれ地球生命ファミリーはいかにしてここにかくあるのか	東京国際フォーラム
5	2008. 3.20	解き明かされる脳の不思議	東京国際フォーラム
6	2008. 9.23	宇宙究極の謎	東京国際フォーラム
7	2009. 3.20	科学的発見とは何か 「泥沼」から突然「見晴らし台へ」	東京国際フォーラム
8	2009. 9.23	脳が諸学を生み、諸学が脳を統合する	学術総合センター—橋記念講堂
9	2010. 3.21	ビックリ 4Dで見るサイエンスの革新	東京国際フォーラム
10	2010.10.10	多彩な地球の生命—宇宙に仲間はいらるのか—	学術総合センター—橋記念講堂
11	2011. 6.12	宇宙と生命—宇宙に仲間はいらるのか II—	ナディアパーク
12	2012. 3.20	知的生命の可能性 —宇宙に仲間はいらるのか 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
28	2019. 8.24	SF / 未来 / 科学技術 —科学技術は夢見た未来を創れるか—	東京国際交流館
29	2020. 3.14	秘められた力を引き出す～体・心・運動～	東京国際交流館（新型コロナウイルスの流行により開催中止）

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10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
10	2019.10.20	宇宙・物質・エネルギー・生命・情報・人間文化 その謎に挑む	日本科学未来館

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
121	2019. 5.17	新しい物質科学が拓くスピントロニクス	村上 修一 (東京工業大学教授)
122	2019.10.18	『一家に1枚周期表』に込めた思い	玉尾 皓平 (豊田理化学研究所所長)
123	2019.12.13	量子力学に残された100年の謎に迫る	大森 賢治 (分子科学研究所教授)
124	2020. 1.24	自然の力を借りてみよう！ ～動く光を使って分子を自在に並べる方法の開発～	宍戸 厚 (東京工業大学教授)

4-3-4 分子研コロキウム

分子研コロキウムは今年度940回を超える歴史あるセミナーであり、各々の専門分野で講師をお招きして開催する部門公開セミナーとは一線を画す。所長はもとより、所内全ての教授、准教授、研究者が集い、各人の専門分野を越えて学問的な刺激を享受することを趣旨とする。1988年「総合研究大学院大学」の設立により、基盤となる研究活

動に大学院生への研究教育活動の用務が加わった。さらに、2003年「国立大学法人法」の制定にともない、所長、教授、准教授は、研究所・大学院の運営により多くの時間を割かざるを得なくなった。コロキウムに参加する所員は、年々、減少する一途にあり、コロキウム本来の趣旨が正しく理解されているかも疑わしい。コロキウムが始まった1976年当時と現在とでは、研究所を取り巻く状況が大きく異なってきたことは事実であるが、コロキウム本来の趣旨に立ち返り、コロキウムの存在意義を高めるべく、2010年度からコロキウムの改革が進められている。

本年度は、各研究分野の分子研研究会、総研大・分子研オープンキャンパス、夏の体験入学が開催される5、6、7、8月のコロキウム開催を見送り、所長の出席可能な期日を確認したうえで、9月から3月上旬までの間にコロキウムを開催することにした。多くの参加者を期待して、分子に関連する研究分野のトップランナーで、さらに、異分野融合研究や産学連携を推進されている40歳代から70歳代までの研究者を講師としてお招きした。また、所内若手研究者の交流を目的として、適宜、ワイン会を開催し、若手独立フェロー業績報告会をコロキウムとして開催した。昨年度と異なり、所長は予定されていたコロキウムに出席、昨年度に比べて所内の参加者数は増加し活発な議論の場に戻りつつある。

今後、分子研コロキウムが、時流を超えて「本来のコロキウムの姿」を取り戻し、講演者・所内研究者全員が深く自由に議論し新たな発想を生み出すことができる「ブレインストーミング」の場となることを期待する。そのためには、運営方法の改革ならびに運営システムの整備が、早急に必要である。

以下に、2019年度に行われた分子研コロキウム一覧を示す。

回	開催日	テーマ	講演者
931	2019. 4.23	Quasi-Particle Interference Studies of Low-Dimensional Quantum Materia	Prof. Chun-Liang Lin (National Chiao Tung University)
		Photo-Driven Molecular Dipole Reordering in Metalorganic Halide Perovskite	Prof. Ya-Ping Chiu (National Taiwan University)
		走査型プローブ顕微鏡による一酸化炭素分子の精密振動分光 Precise Vibrational Spectroscopy of a Single CO Molecule	岡林 則夫 (金沢大学理工研究域助教)
932	2019.10. 9	反応経路自動探索法：化学反応創成のための新技術	前田 理 (北海道大学大学院理学研究院教授)
933	2019.10.23	柱状環状ホスト分子ピラー [n] アレーンを基にした超分子材料の創製	生越 友樹 (京都大学大学院工学研究科教授)
934	2019.11.12	THz-APRES Band Structure Movies of Dirac Surface Current	Prof. Ulrich Höfer (Philipps-University of Marburg)
935	2019.11.19	低温走査トンネル顕微鏡を用いた先端計測による強相関電子系の研究 Advanced Scanning Tunneling Microscopy Techniques on Strongly Correlated Electron Systems	吉田 靖雄 (金沢大学理工研究域准教授)
936	2019.12.18	マルチスケール錯体化学による多孔性ソフトマテリアルの創成	古川 修平 (京都大学物質-細胞統合システム拠点准教授)
937	2019.12.19	Taming Atomic Giants How Rydberg Atoms Became Veritable Quantum Simulators	Prof. and Vice President Matthias Weidemüller (Heidelberg University)
938 ^{*1}	2020. 1. 8	Single Molecule Switching and Sensing	Prof. Eric Borgurt (Temple University)

939*2	2020. 1.16	ケミカルバイオロジー研究のための新手法 New Methodologies for Chemical Biology Research	袖岡 幹子 (理化学研究所主任研究員)
		医薬の世界を根底から革新するペプチド合成 ルイス酸触媒の開発からペプチド合成へ New Peptide Synthesis for Changing Drug Industry From Lewis Acid Catalyst to Peptide Synthesis	山本 尚 (中部大学教授 総合工学研究所長 分子性触媒センター長, シカゴ大学名誉教授, 名古屋大学名誉教授)
940*3	2020. 1.17	大規模電子状態計算による有機半導体材料の理論研究 Theoretical Studies of Organic Semiconductor Materials Based on Large-Scale Electronic Structure Calculations	藤田 貴敏 (分子科学研究所特任准教授)
		生体分子マシンにおける機能ダイナミクスの分子シミュレーションとモデリング Molecular Simulation and Modeling of Functional Dynamics in Biomolecular Machines	岡崎 圭一 (分子科学研究所特任准教授)
941	2020. 2.21	ハーバー・ボッシュ法を超えるアンモニア合成法への挑戦——「窒素社会」の実現に向けて	西林 仁昭 (東京大学大学院工学系研究科教授)

- * 1 森野レクチャーとの共催
- * 2 アジア冬の学校との共催
- * 3 若手独立フェロー報告会

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

4-3-6 その他

(1) 岡崎商工会議所（岡崎ものづくり推進協議会）との連携

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

(2) 岡崎市観光協会との連携

2018年より岡崎市観光協会と連携を開始し、各種市民向けのイベント等で相互に協力することで、市民への広報活動がより活発に行えるようになってきている。

実施日	内容
2018.10.20	一般公開 キッチンカーのご提供
2019. 6.13	岡さんぽ（岡崎市観光協会主催のイベント）への協力
2019.10.11	岡さんぽ（岡崎市観光協会主催のイベント）への協力

4-4 理科教育への協力

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

4-4-1 スーパーサイエンスハイスクール

愛知県立岡崎高等学校が2002～2005年度にSSH指定校となったことを契機として、分子科学研究所は同校のSSH事業に協力してきた。2007年度には、再度、指定を受け、5年間にわたる第二次SSH事業がスタートしている。これまでは、スーパーサイエンス部の支援が主な活動であったが、2011年度に同校が「コアSSH」としての指定を受けたのに際して、他校も含む理科教員の研修をお願いしたいとの依頼が分子研に寄せられた。これに対応して、2012年2月4日にはNMRの原理と応用に関する研修会を実施し、県内から8名の高校教員が参加して午前・午後を費やして講義ならびに実習を受講した。2013年3月9日には、「分子を探る、放射光の科学」としてUVSORにおいて研修会を実施した（5校7名が参加）。2014年2月10日にはSSH進路オリエンテーション（2年生理系対象の講演会）の講師対応も行った。また、魚住グループ、山本グループによる「国際化学オリンピック」に参加された同校生徒さんに対する実験指導・支援（見事、銀メダルを受賞された）も行った。尚、山本グループは海陽中等教育学校の生徒さんの実験指導・支援も行った（見事、金メダルを受賞された）。岡崎高校への支援としてはその他に、イングリッシュコミュニケーション研修に対して当研究所の外国人博士研究員が講師として参加した。岡崎高校は2018年度に4回目となるSSH指定を受け、新たに「SSHの日」を設定して生徒の成果発表を行うなど、新規の活動を展開しており、分子科学研究所はこれに協力している。

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	榎山 儀恵 准教授
2017. 7. 7	榎山 儀恵 准教授
2018. 7. 6	榎山 儀恵 准教授
2019. 7. 5	榎山 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）、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。第 11 回（2019 年 12 月 27 日）は、岡崎コンファレンスセンターにて開催された。分子研では、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	シンクロトン放射とは (加速器・分光器・測定器の見学)	渡邊 誠 助教授 春日 俊夫 助教授
6	1986.10. 4	人類は元素をいかに利用してきたか	齋藤 一夫 教授
9	1987. 6.13	レーザーの応用について	吉原経太郎 教授
12	1987. 9.26	コンピュータで探る分子の世界	柏木 浩 助教授
15	1988. 7. 2	目で見える低温実験・発光現象と光酸化現象	木村 克美 教授
18	1988.10.29	人工光合成とは何か	坂田 忠良 助教授
21	1989. 6.24	星間分子と水——生命を育む分子環境——	西 信之 助教授
24	1989.10.21	常温での超伝導は実現できるか	那須奎一郎 助教授
27	1990. 6.23	目で見える結晶の生成と溶解 ——計算機による実験（ビデオ）——	大瀧 仁志 教授
30	1990.10.20	電気と化学	井口 洋夫 所長
33	1991. 6.22	自己秩序形成の分子科学 ——分子はどのようにしてリズムやパターンを作り出すか——	花崎 一郎 教授
37	1991.12.14	からだと酸素、そしてエネルギー：その分子科学	北川 禎三 教授
39	1992. 7. 7	サッカーボール分子の世界	加藤 立久 助教授
42	1992.11.13	炭酸ガスの化学的な利用法	田中 晃二 教授

45	1993. 6.22	化学反応はどのように進むか？	正 畠 宏祐 助教授
48	1993.10. 1	宇宙にひろがる分子の世界	齋藤 修二 教 授
51	1994. 6.21	分子の動き	伊藤 光男 所 長
54	1995. 6.20	生体内で活躍する鉄イオン——国境なき科学の世界——	渡辺 芳人 教 授
57	1996. 6.28	分子を積み上げて超伝導体を作る話	小林 速男 教 授
60	1997. 6.13	生体系と水の分子科学	平田 文男 教 授
63	1998. 6.12	電子シンクロト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	彗田 博一 助教授
75	2002. 6. 4	クラスターの科学——原子・分子集団が織りなす機能——	佃 達哉 助教授
78	2003. 6.24	科学のフロンティア——ナノサイエンスで何ができるか？	小川 琢治 教 授
81	2004. 6.22	生命をささえる分子の世界——金属酵素のしくみを探る	藤井 浩 助教授
84	2005. 6.28	環境に優しい理想の化学合成	魚住 泰広 教 授
87	2006. 6.20	電気を流す分子性結晶の話	小林 速男 教 授
90	2007. 6.15	光で探る生体分子の形と機能	小澤 岳昌 准教授
93	2008. 6.17	宇宙の光を地上で作る——シンクロトン光源——	加藤 政博 教 授
96	2009. 6. 9	化学結合をいかに教えるか	平本 昌宏 教 授
101	2010.11. 9	生命の営みと「水」 ——化学・物理の理論とコンピュータで探る分子スケールの生命現象——	平田 文男 教 授
104	2011.11. 1	原子のさざ波と不思議な量子の世界	大森 賢治 教 授
105	2012. 6. 5	電気はどうして流れるのか	中村 敏和 准教授
109	2013.11.26	身近になってきた有機エレクトロニクス	山本 浩史 教 授
112	2014.11.28	生物の時間をはかるタンパク質時計	秋山 修志 教 授
115	2015.11.10	タンパク質で出来たナノサイズの機械が動く仕組みを探る	飯野 亮太 教 授
118	2016.11. 1	人工光合成への挑戦～植物に学ぶ分子デザイン～	正岡 重行 准教授
121	2017.11.21	金属と生物：金属が生体内で示す様々な機能	青野 重利 教 授
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
126	2019. 7.30	合理設計で探索する広大なタンパク質配列空間	古賀 信康 准教授

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コモ	小川 琢治 教 授
美川中	2007. 2.26	生物から学ぶ光と色	小澤 岳昌 助 教 授
矢作西小	2007.12. 4	原子の世界	櫻井 英博 准 教 授
六ツ美北部小	2008.10.10	ミクロの世界の不思議	平本 昌宏 教 授
矢作中	2009.12. 4	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
岩津中	2010.10. 6	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
東海中	2010.11.30	電気を流す物ってどんな物？	中村 敏和 准 教 授
岩津中	2011. 7.11	電気を流す物の性質、磁界のはたらき	中村 敏和 准 教 授
河合中	2011.10.17	計算機シミュレーションで見る原子・分子の世界	伊藤 暁 助 教
常磐中	2011.10.19	光の不思議	寺内かえで 技術職員
六ツ美中	2012. 1.17	魔法の物質「触媒」ってなんだろう？	唯 美津木 准 教 授
竜南中	2012. 1.27	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
矢作北中	2012. 2.14	目で見えないものを見る光	岡本 裕巳 教 授
額田中	2012. 6.21	植物から学ぶ人工光合成	正岡 重行 准 教 授
岩津中	2012. 6.29	魔法の物質「触媒」ってなんだろう？	唯 美津木 准 教 授
甲山中	2012. 7.11	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
竜南中	2012.10.19	計算機シミュレーションで見る原子・分子の世界	伊藤 暁 助 教
矢作中	2012.11. 8	光と分子	長坂 将成 助 教
城北中	2013. 2.12	小さすぎる世界を覗いてみよう	鹿野 豊 特任准教授
南中	2013.10. 9	計算機シミュレーションで見る原子・分子の世界	伊藤 暁 助 教
常磐中	2013.11.20	バイオフィルムって何？	吉岡 資郎 助 教
竜海中	2013.11.27	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
矢作北中	2013.12. 6	「電気はどうして流れるの!？」 電磁誘導・超伝導を体験しよう	中村 敏和 准 教 授
葵中	2014. 1.16	光で探る分子のダイナミックな姿	大島 康裕 教 授
竜南中	2014. 3.14	Chemistry meets computing	倉重 佑輝 助 教
六ツ美北中	2014. 7.14	光エネルギーとタンパク質	古谷 祐詞 准 教 授
城北中	2014. 9.26	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
河合中	2014.10.20	結晶学入門 ～分子のかたち、私たちがのかたち～	村木 則文 特任助教
新香山中	2014.10.30	時間の顕微鏡——目では見えない高速な出来事を観察する光の技	岡本 裕巳 教 授
北中	2015. 1.29	水中での有機分子変換反応 ～水と油の関係改善でグリーン反応～	大迫 隆男 助 教
竜南中	2015. 3. 6	計算化学～実験でも暗記でもない化学	福田 良一 助 教
岩津中	2015. 7.16	生き物の「分子」と「進化」	塚本 寿夫 助 教

新香山中	2015.10.28	分子に光があたると何がおこるのか？	飯田 健二 助 教
翔南中	2015.11.11	キラル分子と私たち～キラル分子の建築家を目指して～	楳山 儀恵 准 教 授
福岡中	2015.11.12	分子の光と秘密	平本 昌宏 教 授
甲山中	2015.11.30	シミュレーションで見る生物とタンパク質	森 俊文 助 教
矢作北中	2015.12. 4	タンパク質～生命の営みを支える分子～	向山 厚 助 教
城北中	2016. 2.12	タンパク質の奏でる生体リズム～生物はどのようにして時間をはかるのか？～	秋山 修志 教 授
美川中	2016. 7.13	原子, 分子って何？	斉藤 真司 教 授
翔南中	2016.11. 8	光る分子とエネルギーの話	山本 浩史 教 授
矢作北中	2016.12. 2	身近な化学反応から学ぼう！ タンパク質のかたちとはたらき	矢木 真穂 助 教
福岡中	2016.12. 6	電気はどうして流れるの!? 電磁誘導・超伝導を体験しよう！	中村 敏和 准 教 授
城北中	2017. 2.14	宇宙の光で見えない原子・分子を探る	繁政 英治 准 教 授
東海中	2017.10.17	おもしろい形の分子を作る	鈴木 敏泰 准 教 授
岩津中	2017.10.18	温度と分子の状態変化	中村 彰彦 助 教
河合中	2017.11.22	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
美川中	2017.11.30	液体窒素で探る, 物質の性質 —理科の楽しみ方と使い方—	片柳 英樹 助 教
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
福岡中	2019. 9.26	東海地区最大級の元素周期表を作ろう	松井 文彦 主任研究員 片柳 英樹 助 手
南中	2019. 9.27	東海地区最大級の元素周期表を作ろう	松井 文彦 主任研究員 片柳 英樹 助 手
常磐中	2019.10. 8	X線で見える小さな世界 ～塗り薬からはやぶさ2まで～	大東 琢治 助 教
河合中	2019.10.15	ホテルの合唱・歌い合う地球のリズム —自然界をつらぬく同期現象	片柳 英樹 助 手 豊田 朋範 技術職員
六ツ美北中	2019.10.29	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 手
東海中	2019.11.12	おもしろい形の分子を作る	鈴木 敏泰 チームリーダー

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，岡崎市立常盤中学校，岡崎市立北中学校，岡崎市立河合中学校，岡崎市立竜海中学校
2014	5	7	豊田市立上郷中学校，岡崎市立竜海中学校，岡崎市立東海中学校，岡崎市立福岡中学校，岡崎市立美川中学校
2015	4	8	岡崎市立翔南中学校，岡崎市立竜海中学校，岡崎市立東海中学校，岡崎市立竜南中学校
2016	6	8	岡崎市立北中学校，岡崎市立翔南中学校，岡崎市立城北中学校，高浜市立高浜中学校，豊田市立上郷中学校，豊田市立益富中学校
2017	4	7	岡崎市立北中学校，岡崎市立甲山中学校，岡崎市立竜海中学校，豊田市立上郷中学校

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
2019	6	18	岡崎市立矢作中学校 (物質分子科学研究領域平本 G, 極端紫外光研究施設), 豊田市立上郷中学校 (物質分子科学研究領域平本 G), 岡崎市立翔南中学校 (協奏分子システム研究センター山本 G, 生命創成探究センター加藤 G, 栗原 G, メゾスコピック計測研究センター), 岡崎市立葵中学校 (装置開発室, 生命・錯体分子科学研究領域椋山 G), 岡崎市立額田中学校 (計算科学研究センター, 研究力強化戦略室), 六ツ美中学校 (計算科学研究センター, 装置開発室, 研究力強化戦略室)

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。2019年度は、9月に同校の式方式により表彰を行った。

4-5 一般公開

研究活動や内容について、広く一般の方々に理解を深めていただくため研究所内を公開し、説明を行っている。現在では岡崎市にある3つの研究所が輪番に公開を実施しているので、3年に1回の公開となっている。公開日には実験室の公開と講演会が行われ、約3,800人の見学者が分子研を訪れる。

回数	実施月日	備考
第1回	1979.11. 9 (Fri)	創設記念一般公開
第2回	1980.11.15 (Sat)	
第3回	1981.11.14 (Sat)	3研究所同時公開
第4回	1985. 5.11 (Sat)	10周年記念一般公開
第5回	1988.11. 5 (Sat)	入場者 1700人
第6回	1991.10.26 (Sat)	入場者 1974人
第7回	1994.11.12 (Sat)	入場者 2700人
第8回	1997.11.15 (Sat)	入場者 2400人
第9回	2000.10.21 (Sat)	入場者 1183人
第10回	2003.10.25 (Sat)	入場者 1600人
第11回	2006.10.21 (Sat)	入場者 2058人
第12回	2009.10.17 (Sat)	入場者 1346人
第13回	2012.10.20 (Sat)	入場者 1126人
第14回	2015.10.17 (Sat)	入場者 2600人
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 明治大学附属中野中学・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)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	GENY 財団科学キャンプ(韓国) 浜松南高等学校 ほか
2019	13	375	安城シルバーカレッジ, 東国大学附属女子高等学校(韓国), 星城高等学校, (株)豊田自動織機, 東海大学付属高輪台高 等学校, 大阪星光学院(中学校・高等学校), 浜松南高等 学校, 開成学園理化学部, 浜松日体大中学校, 高蔵寺高等 学校, 三重大学大学院工学研究科, 岡崎愛好会, 三島小学校

(2003年度から2006年度までの見学者数には、職場体験の参加者数を含む。)

個人申込み(分子研展示室)

年度	受入件数	見学者数
2010	13	33
2011	13	35
2012	3	9
2013	4	9
2014	5	25
2015	1	2
2016	1	18
2017	8	25
2018	3	29
2019	2	6

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）

(2019年)

ホームページ 公開日	タイトル	担当研究部門
2019. 1. 7	世界最短波長「超蛍光」の観測 —新たなコヒーレント光源の開発に向けて—	極端紫外光研究施設／技術課
2019. 2. 1	先端の光科学に役立つ第一原理計算ソフトウェア SALMON の 開発	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門
2019. 2. 5	ドーピング有機半導体の電気伝導度を決定づける、鍵となる因子 を発見	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門
2019. 2.19	新概念有機太陽電池によって高効率化への道筋を拓く —水平交互多層接合によってバルクヘテロ接合を超える—	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門
2019. 3.25	電子と正孔の両方が「波動」性を示す有機半導体 pn 接合の実証 ～有機半導体エピタキシー技術が新しい有機太陽電池開発の 可能性を拓く～	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門
2019. 4.17	トランスポーターがイオンを輸送する瞬間のシミュレーション に成功—高速トランスポーターをデザイナー—	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門
2019. 5.13	有機トランジスタで超伝導の条件を探る —電圧とひずみで試料の超伝導を制御—	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
2019. 6. 3	時計タンパク質が概日リズムを生み出す巧妙な仕掛け	生命創成探究センター 生命分子動秩序創成研究グループ
2019. 6. 7	キララル分子モーターを利用した電子スピンの光・熱による制御	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
2019. 6.25	新発想のレーザー技術で狭帯域の高エネルギーテラヘルツ波 を発生 小型粒子加速器へのマイルストーン	社会連携研究部門
2019. 8.19	免疫学の常識を覆す！ 抗体と受容体の新たな結合部位の発見	生命創成探究センター 生命分子動秩序創成研究グループ
2019. 9.13	スピントロニクスの方法を活用しスピン液晶状態の特徴を初め て解明 スピントロニクスと量子磁性の融合領域の創生に道	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
2019. 9.26	新型の光応答性タンパク質であるヘリオロドプシンの構造を 解明	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門
2019.10.16	有機太陽電池の電圧損失の抑制に成功	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門
2019.10.17	高活性な白金サブナノクラスター触媒の創製と構造決定に成 功—白金使用量を低減した燃料電池への応用に期待—	計算科学研究センター
2019.10.25	回転分子モーター V ₁ の化学力学エネルギー変換機構を解明	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門
2019.11. 5	放射光による原始の量子状態お制御に世界で始めて成功！	極端紫外光研究施設
2019.11. 7	金属タンパク質の活性発現に必要な一酸化炭素を生合成する 仕組み	生命創成探究センター 金属生命科学研究グループ
2019.11.25	1兆分の1秒で起こる超高速な磁性の変化を元素別に解明 ～レーザー励起磁化反転の鍵～	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門

2019.11.25	病原性細菌が増殖に必須な鉄イオンを取り込み仕組みを原子レベルで解明	生命創成探究センター 金属生命科学グループ
2019.11.25	光学顕微鏡によるマルチカラー高速高精度1分子観察を実現	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門
2019.12. 2	水分子間の水素結合に隠された量子力学的効果の発見！ ～結合を強める量子効果と弱める量子効果が織り成す水分子水素結合の特異性～	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門
2019.12. 4	放射光により原子の形を自在に変えることに成功 —放射光による量子状態制御の応用—	極端紫外光研究施設
2019.12.13	有機分子で初めてスピン移行に成功 ～分子を利用した集積量子演算への第一歩～	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門
2019.12.13	ペプチド鎖が精密に編み込まれた名のカプセルの合成に初成功 ～24交点の絡まりトポロジーをもつ球殻ウイルス状分子構造～	特別研究部門
2019.12.18	新規なヒストンシャペロン Abo1 の構造動態を解明 ～新たながん治療薬開発の可能性を秘めたクロマチンリモデリング制御機能の理解へ～	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
2019.12.18	高活性・高耐久性のエステル化固定化接媒 —第二世代型ポリフェノールスルホン酸樹脂接培の開発に成功—	生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門
2019.12.26	SOD1 タンパク質が毒性の高い異常な構造を形成する新たなメカニズムを提唱—神経難病 ALS の発症機序解明に期待—	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

新聞報道

(2019年)

報道日	記事内容	新聞名	該当研究部門
2019. 1.10	共同利用・共同研究 連携・多様性重要に 拠点の今とこれから	日刊工業	計算科学科学研究センター
2019. 1.18	アルツ病原因物質 形成の仕組み解明	科学	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門
2019. 1.27	「新世代の活性炭」応用間近 気体貯蔵・解析へ ナノテク駆使	科学	特別研究部門
2019. 3. 8	新コンセプト有機太陽電池 分子研が動作成功	科学	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門
2019. 4.12	植物の葉緑体に学ぶ金属錯体の開発	読売	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門
2019. 4.19	平成31年度 科学技術分野の文部科学大臣表彰	科学	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門
2019. 4.21	人工光合成の実現目指す	朝日	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門
2019. 5.23	女性科学賞受賞	読売	所長
2019. 6.20	最先端レーザー追求 分子研コンソーシアム発足	中日	社会連携研究部門
2019. 6.21	産学連携で研究開発	東海愛知	社会連携研究部門
2019. 6.21	光や熱で電子スピン制御	日経産業	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

2019. 6.28	キラル分子モーターの回転運動利用	科学	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
2019. 7. 5	自発的な研究 創造性育む	日本経済	所長
2019. 7.12	採取した岩石帰還心待ち	中日	極端紫外光研究施設
2019. 7.28	テラヘルツ波強力に発生	日本経済	社会連携研究部門
2019. 8.17	免疫細胞と抗体に新たな結合部 異物攻撃促進 新薬へ期待	中日	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
2019. 9. 6	自然科学系研究助成太幸財団が 10 件決定	中日	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
2019. 9.17	創薬研究に貢献 日本学士院賞・恩賜賞	中日	特別研究部門
2019.10. 5	ノーベル街道 祭り支度	中日	研究所
2019.10.23	学術・産学官 つなぐ役割果たす	日刊工業	所長
2019.11. 1	有機太陽電池の電圧損失 無機と同等水準まで 抑制	科学	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門
2019.11. 8	回転分子モーター V_1 の化学力学エネ変換機構 解明	科学	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門
2019.11.17	先端人 「世界最短」のレーザー開発	朝日	メゾスコピック計測研究センター 広帯域相関計測解析研究部門
2019.11.22	金属酵素の活性に必須な CO 生合成の仕組み解明	科学	生命創成探究センター 金属生命科学研究グループ
2019.12. 5	川合所長が再任	東海愛知	研究所
2019.12. 5	学術研究 6 件に助成金	中日	生命創成探究センター 構成生物学研究グループ
2019.12.10	細菌が鉄取り込む仕組み解明	日経産業	生命創成探究センター 金属生命科学研究グループ
2019.12.13	病原性細菌の増殖に必須 鉄イオン取り込む仕 組み	科学	生命創成探究センター 金属生命科学研究グループ
2019.12.23	ペプチドでカプセル状構造	日経産業	特別研究部門

その他

(2019 年)

発行日等	記事等内容	掲載誌等名	該当研究部門
2019. 3.24	宇宙飛行士の健康管理術 III ～健康長寿のヒントは、宇宙にある～ (テレビ出演)	BS 朝日	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

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 スピナー格子緩和時間 (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

	<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を得られる。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N₂ガスモードで100 K, Heガスモードで24 K (実測)。到達時間は、N₂で240分, Heで150分かかる。運転モードの切り替えは、HeからN₂には迅速に切り替え可能だが、N₂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 ⁺ 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 α 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 ΔA （通常は楕円率 θ 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 θ をもって定義され、 ΔA 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 θ 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
^1H 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 ^1H - ^{13}C - ^{15}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
^1H 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。 ^1H - ^{13}C - ^{15}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

¹ 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 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
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 ₂	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 α -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 _{1'} 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ソチリウム塩の合成	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 ₆₀ 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 ₂ UX@C ₈₀ (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 ₃ Sn 超伝導線材の高磁場特性改善に向けた添加元素効果	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) ₂] (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 β 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
コロー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
光誘起複合機能性物質 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	榊原えりか
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気的性質	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
複合機能性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	iTC200 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)	低 SEM	名三工業株式会社	久野 一
Fe クラスターの磁気特性の解明	MS-7	東京工業大学科学技術創成研究院	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CO₂の分離・回収，貯蔵，触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用など，太陽光エネルギー，電気エネルギーや化学エネルギーにおいて中心的な役割を担う複雑で複合的な分子・物質過程に対する電子・分子レベルでの全系シミュレーションを行い，実験研究者，産業界と連携して，高効率，低コスト，また環境に優しく持続可能なエネルギー新規基盤技術を確立する。

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

(1) サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保——太陽電池，人工光合成

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

(2) サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵——燃料電池，二次電池

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

世代電池技術の重要問題に挑戦し、蓄電・水素エネルギー社会の実現に貢献する。

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

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

(4) 基盤アプリケーションの設計開発

ポスト「京」(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	Theoreticla 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 Techeniques	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 ₂ 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。

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。

6. 研究活動の現状

分子科学研究所は、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。また、自然科学研究機構直属の組織「生命創成探究センター」（2018年4月発足）は、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。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る。2019年度には、産学官の連携研究を推進することを目指して、「社会連携研究部門」を新設した。ここでは、コンソーシアムを作り所外からのニーズを反映するオープンイノベーションの拠点として研究室を運営する新しい試みとして「小型集積レーザーコンソーシアム」を発足させ、平等拓範特任教授に着任いただいた。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った。2019年度からは、分子研の共同利用の施設や設備の高度な利用を目指して、所外の研究機関との協定に基づき、クロスアポイントメントによる研究人事を開始した。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る。

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
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
2018.9. ~ 2019.8.	2019	214	29

6-2 メゾスコピック計測研究センター

メゾスコピック計測研究センター（以後「本センター」）は、旧分子制御レーザー開発研究センター（平成9年4月設立）からの改組により、平成29年4月に設立された。分子科学研究所の研究対象は、広い意味での分子物質であることは設立当初から変わらないが、当初は一つ一つの分子の挙動に重点をおいて注目されていたのが、最近では様々な分子やナノ構造体などがシステムを作って発現する機能・特性の解明と制御、及び新しい機能を持つシステムの構築に重点がシフトしてきている。それによって、分子の物質・エネルギー・情報変換能力を精緻に引き出すことが初めて可能になると考えられる。そのような新しい研究の方向性に対応する一つの方策として、分子科学研究所では平成25年4月に協奏分子システム研究センターが設立されたところである。

分子計測の先端的手法では、時間、空間、波長、パワーなどにおいて極限に向かう方向が精力的に推し進められ、大きな成果を上げてきた。そうした手法では、理想化された極限条件下で系に大きなエネルギーの擾乱を与えて素過程の挙動を解析する方法が一般的であった。現在もその方式の重要性に変わりはないが、このような従来型計測法の可能性と限界も少しずつ明らかになってきている。本センターでは、従来の手法とは一線を画した、繊細・広帯域・多次元の計測解析手法で分子システムの挙動・機能のありのままの姿に迫り、また低摂動・超精密制御で新たな量子機能を創出する、革新的実験法の開発が必要という立場をとる。新たな分子能力の創発の現場を、マクロ階層の強靱でロバスタな性質と、ミクロ階層の機能に富む特性が絡んだメゾスコピック領域に求め、分子の機能や反応の契機となる過程を明らかにするために、広い時空間領域で階層間のエネルギー・情報の変換を可視化する新発想の計測開発手法を開発する。（ここでいうマクロ、ミクロ、メゾスコピックは、相対的な階層であり、扱う系によって実際のスケールは異なる。また空間だけではなく、時間領域についてもメゾスコピック領域が考えられる。）これらを通じて、分子の素過程が系全体の大域的な機能を生む機構を解明する研究などに主眼を置いて推進する。この目的のために、旧分子制御レーザー開発研究センターの研究業績・資産を引き継ぎながらも、分子科学研究所の基盤となる四つの領域から関連する研究を遂行する研究者の参画を得て、それらをまたぐ領域横断的なセンターとして設置することとした。これにより、同様な組織構成を取った協奏分子システム研究センターとともに、分子物質のシステムとしての挙動・機能を研究する両輪として研究活動を展開することが可能となった。

このような新しい分子計測制御法を開発・利用していくためのセンターとして、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兼任）、信定克幸（准教授、理論・計算分子科学研究領域からの兼任）
- (2) 繊細計測研究部門：岡本裕巳（教授・センター長、専任）、平等拓範（准教授、専任）
- (3) 広帯域相関計測解析研究部門：飯野亮太（教授、生命・錯体分子科学研究領域からの兼任）、藤 貴夫（准教授、専任）

専任研究グループに所属する助教等のスタッフも本センターの各研究部門に所属する。また、旧分子制御レーザー開発研究センターに所属した技術職員も、引き続き本センターに所属させる。今後分子科学研究所に採用される教授・准教授も、状況に応じて上記のいずれかの部門の専任または兼任ポストを占めることが想定されている。それぞれの部門の任務は、(1) 蓄積のある光観測・制御法を先鋭化し、更に量子系の構造変形を操作することによって、新しい量子相を作り出して制御し、量子情報処理など新規な分子の能力を引き出す；(2) 時空間を分解した計測法、増強光場を利用した超高感度・並列計測等による低摂動で繊細な分子計測法等を開発し、分子のありのままの姿を非破壊的に観測する；(3) 多変数スペクトロスコーピー・多次元解析手法、高分解能広帯域計測法とその解析法を開発して分子の能力とそれを司る物理過程を明らかにし、従来とは質の異なる情報を獲得する革新的手法を開拓する；等を目指している。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、また藤准教授は平成31年4月に豊田工業大学に、それぞれ転出した。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、また

令和元年11月には江原正博教授と南谷英美准教授が理論・計算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ン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・フォトンクス」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。

織細計測研究部門

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を開発し、試料の測定を行ってきた。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50nm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。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とその利用の研究に適用しており、これが次に述べるように現時点でのグループの主要な研究内容に発展している。
- b) キラルな構造を持つ金ナノ構造体（主に2次元構造）を電子線描画法で作製し、開発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開始し、国内外の幾つかの研究グループとの共同研究も実施している。蛍光分子とキラルな金属ナノ構造の組み合わせにより、高い円偏光度を示す蛍光が得られ、その起源をプラズモンモードとの関連において明らかにした。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。キラルな構造を持つ金属有機構造体（MOF）微結晶の掌性同定に成功しており、多数の微結晶の掌性同定に有効であることが確認されている。
- 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、予備的な結果を得ている。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

S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, “Active Control of Chiral Optical Near Fields on a Single Metal Nanorod,” *ACS Photonics* **6**, 677–683 (2019).

T. YAMADA, T. EGUCHI, T. WAKIYAMA, T. NARUSHIMA, H. OKAMOTO and N. KIMIZUKA, “Synthesis of Chiral Labtb and Visualization of Its Enantiomer Excess by Induced Circular Dichroism Imaging,” *Chem. –Eur. J.* **25**, 6698–6702 (2019).

C. GILROY, S. HASHIYADA, K. ENDO, A. S. KARIMULLAH, L. D. BARRON, H. OKAMOTO, Y. TOGAWA and M. KADODWALA, “Roles of Superchirality and Interference in Chiral Plasmonic Biodetection,” *J. Phys. Chem. C* **123**, 15195–15203 (2019).

K. Q. LE and H. OKAMOTO, “Circularly Polarized Two-Photon-Induced Luminescence from Plasmonic Two-Dimensional Chiral Au Nanostructures,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **1220**, 012004 (4 pages) (2019).

S. HASHIYADA, K. ENDO, T. NARUSHIMA, Y. TOGAWA and H. OKAMOTO, “Spectral Properties of Chiral Electromagnetic Near Fields Created by Chiral Plasmonic Nanostructures,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **1220**, 012050 (4 pages) (2019).

B-3) 総説, 著書

成島哲也, 岡本裕巳, 「円二色性によるキラル分光イメージング」, *生物物理* **59**, 035–038 (2019).

岡本裕巳, 「プラズモン共鳴のエキゾチックな時空間構造」, 「プラズモンと光圧が導くナノ物質科学——ナノ空間に閉じ込めた光で物質を制御する——」, 日本化学会編, 化学同人, pp. 48–56 (2019).

H. OKAMOTO, “Local Optical Activity of Nano- to Microscale Materials and Plasmons,” *J. Mater. Chem. C* **7**, 14771–14787 (2019).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

橋谷田俊, 成島哲也, 岡本裕巳, 「金属ナノ構造における局在光電場のキラリティ」, レーザー学会学術講演会第39回年次大会, 東京, 2019年1月.

T. NARUSHIMA, “Analysis of Local Chirality with Microscopic Circular Dichroism Imaging,” The 23rd Hiroshima International Symposium on Synchrotron Radiation, Materials and Biomolecular Science using VUV-SX Synchrotron Radiation, Hiroshima (Japan), March 2019.

成島哲也, 「ホモキラリティの起源としての星間塵ナノ微粒子の可能性」, 第1043回国立天文台談話会, 東京, 2019年4月.

H. OKAMOTO, “Visualization of nanoscale local chirality of plasmons,” 9th International Multidisciplinary Conference on Optofluidics (IMCO2019), Hong-Kong (China), June 2019.

T. NARUSHIMA, “A closer look at an optical near-field on interstellar dust nanoparticles as source of homochirality,” NAOJ workshop on Connecting Fundamental Physics, Chemistry, and the Origins of Biomolecular Homochirality, National Astronomical Observatory of Japan, Tokyo (Japan), June 2019.

岡本裕巳, 「プラズモン物質における光のキラリティの局所的増強とその利用」, 第16回プラズモニック化学シンポジウム「キラルプラズモンの基礎と展開」, 東京, 2019年6月.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA and T. NARUSHIMA, “Nanoscale imaging and control of chiral optical fields,” The 10th International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT 2019), Singapore, June 2019.

H. OKAMOTO, “Nanoscale Imaging and Control of Chiral Plasmons,” 10th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META2019), Lisbon (Portugal), July 2019.

H. OKAMOTO, “Visualization of chiral plasmons and near-field interactions,” The International Symposium on Plasmonics and Nanophotonics (iSPN2019), Ikuta Shrine Hall, Kobe (Japan), November 2019.*

H. OKAMOTO, “Imaging, Control, Impact of Chiral Plasmons,” Materials Research Meeting 2019, Yokohama Symposia, Yokohama (Japan), December 2019.

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).

The International Symposium on Plasmonics and Nanophotonics (iSPN2019), International Organizing Committee (2019).

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–).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2017–2018).

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-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–2019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–2019年).
- 科研費研究活動スタート支援,「Amplification of Chiral Light-Matter Interaction Using Bottom-Up 3D Chiral Nanoparticle」, AHN, Hyo-Yong (2019年–).
- 科研費研究活動スタート支援,「円偏光磁気力顕微鏡による局所磁場観測と局所磁場による磁性ナノ粒子制御」, 山西絢介 (2019年–).

C) 研究活動の課題と展望

近接場分光イメージングによる研究を推進し、分子研着任当初の数年間では金属ナノ構造体に関して波動関数や光電場の空間分布をイメージするという独自の研究領域を拓いた。金属ナノ構造による光の局在化や増強などの性質・機能に関する新たな情報と方法論を提供し、多くの追従研究を生んだと考えている。その後研究を次のフェーズに進め、時間分解近接場分光では、10fsレベルの時間分解能で近接場測定を実現し、金属ナノ構造の多モードコヒーレント励起後の時空間ダイナミクスのイメージングが可能となるなど、一つの山を越える段階に到達したと考えている。その更なる展開のアイデアもあるが、非常に高度な技術を要する実験であり、人員も限られる状況下では困難が大きい。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、プラズモン由来の強くねじれた局所光場の存在、また対称性の高いアキラルな構造でも局所的に強い光学活性を示すという、ユニークな成果も得られた。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、成果が得られるようになってきた。例として、高い円偏光度を示す発光物

質系を見出し、その起源を解明した。通常の回折光学系による(遠方場)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。これらの近接場及び遠方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おり、国内外との共同研究も開始している。また物質および光のキラリティは磁性との相関においても興味を持たれ、ナノ光学の観点からこの方向への研究展開についても検討を開始し、一部実際の共同研究も始めた。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おり、新たな成果も出つつある段階にある。

広帯域相関計測解析研究部門

藤 貴 夫 (准教授) (2010年2月1日～2019年3月31日)*)

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，そのスペクトルを可視光領域に変換することで，単一ショット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。赤外像を可視領域に変換し，高性能な可視光用ハイスピードカメラで撮影した。赤外用カメラで直接計測する場合は，3000 ショット (3s) 積算する必要があるが，可視光への波長変換によって，単一ショット (1 ms) でのイメージ撮影を実現した。
- b) 本研究室で開発された光電場波形計測技術では，赤外領域のパルスの波形を計測することを行ってきた。今年度は，可視から近赤外領域のパルスについて，波形計測を行うため，5 fs 以下の 800 nm のパルスを発生させることを行った。チタンサファイア増幅器出力を中空ファイバに入射して，600–1000 nm まで広がったスペクトルを得ることができた。そのパルスの波形を単一ショットで計測し，5 fs のパルスが出ていることを確認した。
- c) 前年度は，チャープパルス増幅を基本としたトリウム固体レーザー再生増幅器を開発し，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。このレーザーの出力を，YAG 結晶や偏波保持 ZBLAN ファイバに集光し，2.5–4 μm の帯域をもった白色光を発生できた。その白色光の位相について調べたところ，再生増幅の周回数を少なくすると，コヒーレンスが高くなることがわかった。今後は，前置増幅のファイバー増幅器をもう一段増やし，コヒーレンスの高いパルスを発生させることを行う予定である。

B-1) 学術論文

S. A. REZVANI, Y. NOMURA and T. FUJI, "Generation and Characterization of Mid-Infrared Supercontinuum in Bulk YAG Pumped by Femtosecond 1937 nm Pulses from a Regenerative Amplifier," *Appl. Sci.* **9**, 3399 (10 pages) (2019).

S. A. REZVANI, Y. NOMURA, K. OGAWA and T. FUJI, "Generation and Characterization of Mid-Infrared Supercontinuum in Polarization Maintained ZBLAN Fibers," *Opt. Express* **27**, 24499–24511 (2019).

S. A. REZVANI, Y. NOMURA, K. OGAWA and T. FUJI, "White Light Generation with 2- μm Femtosecond Pulses from a Tm:YAP Regenerative Amplifier," *レーザー研究* **47**, 644–649 (2019).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

S. A. REZVANI, Y. NOMURA, K. OGAWA and T. FUJI, “Generation and characterization of polarized supercontinuum pulses from ZBLAN fibers pumped by femtosecond 2 μm pulses from a regenerative amplifier,” *OSA Laser Congress 2019 (ASSL, LAC, LS&C)*, Ath2A.4. (2019).

Y. NOMURA, H. MURAKOSHI and T. FUJI, “Short-wavelength thulium-doped fiber laser for three-photon microscopy,” *OSA Laser Congress 2019 (ASSL, LAC, LS&C)*, Ath2A.7. (2019).

S. A. REZVANI, Y. NOMURA, K. OGAWA and T. FUJI, “Characterization of supercontinuum pulses generated using a 2 μm thulium-based regenerative amplifier,” *2019 Conference on Lasers and Electro-Optics Europe and European Quantum Electronics Conference*, ca-11.6 (2019).

Y. NOMURA, H. MURAKOSHI and T. FUJI, “Ultrafast light source at 1.8 μm based on thulium-doped fibers for three-photon microscopy,” *2019 Conference on Lasers and Electro-Optics Europe and European Quantum Electronics Conference*, cj-1.4 (2019).

Y. NOMURA and T. FUJI, “Ultrafast thulium-doped fiber laser system at 1.8 μm for multiphoton microscopy,” *CLEO: Science and Innovations*, SF2L.6 (2019).

F. KUMAKI, H. SHIRAI, Y. NOMURA and T. FUJI, “High harmonic generation in solids driven by sub-cycle mid-infrared pulses from laser filamentation,” *EPJ Web of Conferences*, **205**, 02023 (2019).

B-3) 総説, 著書

藤 貴夫, 「サブサイクル中赤外光パルスの発生と固体物理学への応用」, *固体物理* **54**, 693–704 (2019).

B-4) 招待講演

藤 貴夫, 「フェムト秒ツリウム固体レーザー再生増幅器の開発とそれを光源とした中赤外白色光発生」, 超高速光エレクトロニクス研究会第1回研究会, 電気通信大学, 調布, 2019年9月.

T. FUJI, “High harmonic generation in solids driven by sub-cycle mid-infrared pulses,” *IWTAQD 21*, Nagoya (Japan), June 2019.

藤 貴夫, 「サブサイクル中赤外光パルスによる固体からの高次高調波発生」, レーザー学会学術講演会第39回年次大会, 東海大学高輪キャンパス, 東京, 2019年1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 (2017–2018).
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部会主査 (2019–).
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)
電子情報通信学会超高速光エレクトロニクス特別研究専門委員会第2部会副査 (2019–).
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).
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, 座長 (2018–2019).

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).

学術誌編集委員

Optics Express, Associate Editor (2018–).

B-10) 競争的資金

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト, 「プラズマを使ったフェムト秒中赤外光パルス発生の研究」, 藤 貴夫 (2010年–2011年).

科研費基盤研究(B), 「超広帯域コヒーレント中赤外光を用いた新しい分光法の開拓」, 藤 貴夫 (2012年–2014年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト, 「超短中赤外パルスを用いた生細胞内分子の無染色ライブイメージング法の開発」, 藤 貴夫 (2012年).

科学技術振興事業団先端計測分析技術・機器開発プログラム要素技術タイプ,「超広帯域コヒーレント赤外分光技術の開発」,藤 貴夫 (2012年–2015年).

科研費挑戦的萌芽研究,「自己参照による光電場の直接測定」,藤 貴夫 (2014年–2016年).

科研費特別研究員奨励費,「高次高調波発生による高繰り返し極端紫外光源の開発およびその応用」,野村雄高 (2010年).

豊秋奨学会海外渡航旅費助成,「153 nmにおけるコヒーレントな高繰り返し準連続光源」,野村雄高 (2011年).

光科学技術研究振興財団研究助成,「トリウム添加ファイバーによるフェムト秒レーザーの開発」,野村雄高 (2012年–2013年).

科研費若手研究(B),「中赤外領域における高繰り返しフェムト秒パルス光源の開発」,野村雄高 (2013年–2014年).

光科学技術研究振興財団研究助成,「自己参照による光電場波形の直接計測」,藤 貴夫 (2015年–2016年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携プロジェクト,「新規赤外フェムト秒レーザーによる超深部シナプス内分子活性化イメージング」,藤 貴夫 (2015年–2017年).

天田財団一般研究開発助成,「高出力 2 μ m 超短パルスレーザー光源の開発」,野村雄高 (2015年–2017年).

科学技術振興機構さきかけ研究「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

ファイブレ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、可視光領域へ拡張することを試みている。赤外パルスレーザーの開発では、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。また、そのパルスから発生させた白色光は、再生増幅器の周回数を少なくすることで、コヒーレンスが高くなることがわかった。今後、さらに再生増幅器の性能を高め、高強度赤外光パルス発生や、赤外ハイパースペクトラルイメージング装置の開発し、様々な分野へ応用することを考えている。

*) 2019年4月1日豊田工業大学大学院工学研究科教授

6-3 協奏分子システム研究センター

6-3-1 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）、兼任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。

2019年度の特筆すべき研究成果として、キラル分子モーターを利用した電子スピン制御に関する研究（山本グループ）が科学雑誌「*Nature Communications*」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からは、「*Nature Chemical Biology*」「*International Journal of Molecular Sciences*」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出すことが求められる。既に一部のグループ間で共同研究が進行中であるが、より多くのセンター構成員で共有できる新しい研究プロジェクトを練り上げていく必要がある。専門から少し離れた分野でのプロジェクト立案には人的交流が何よりも重要であるため、研究グループの居室を南実験棟の3階の1フロアに集中させ、一部をオープンスペースとして運用しつつ、科学的な議論や交流を活発に進めている。

その他、CIMoS セミナー、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。

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, *Biophys. Physicobiol.* 2016, *Sci. Rep.* 2018) 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 が抑制的制御を受けて低活性化 (12 ATP d^{-1}) かつ温度補償 (温度非依存) されていること,
- ③ ATPase の遅い時間スケールを分子システム全体に波及させる巧妙な仕組みが整備されていること,

等を明らかにしてきた。しかしながら、これら①～③を実現している構造基盤が KaiC のどこに位置しているのか依然として不明であった。そこで2019年度は、KaiC にアミノ酸置換を網羅的に導入した変異体ライブラリを作製し、そこから上記①～③の項目に影響を及ぼす時計変異体を効率的にスクリーニングする系を構築した。

変異体ライブラリを効率的に調製するための工夫として、変異体 KaiC の発現および精製の手順を大幅に見直した。具体的には、発現系のスケールダウン、並列処理を指向した精製工程のブロック化、アフィニティ・タグの最適化などに取り組み、これらの相乗効果によって複数のライブラリ候補を並列かつ迅速に調製できるようになった。他方、ライブラリから時計変異体を選別するための指標である ATPase 活性についても、計測手法の効率化と高感度化を実施した。これらの創意工夫により、全体として従来比 10 倍以上のスループットを実現し、多数の周期変異体や温度補償変異体を発見するに至った (*Int. J. Mol. Sci.* 2019)。これ以外にも、KaiC の進化系統樹に基づいたライブラリ・スクリーニング系を新たに確立した (*Int. J. Biol. Macromol.* 2019)。両スクリーニング法から得た結果をもとに、アミノ酸変異の「空間配置」と「機能への影響」の相関関係が整理され、①～③を実現している構造基盤が同定されるものと期待される。

- 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 (*Nat. Chem. Biol.* 2019, *Free Radical Biol. Med.* 2019)。

B-1) 学術論文

D. OUYANG, Y. FURUIKE, A. MUKAIYAMA, K. ITO-MIWA, T. KONDO and S. AKIYAMA, "Development and Optimization of Expression, Purification, and ATPase Assay of KaiC for Medium-Throughput Screening of Circadian Clock Mutants in Cyanobacteria," *Int. J. Mol. Sci.* **20**, 2789–2800 (2019). doi: 10.3390/ijms20112789

M. OKUMURA, K. NOI, S. KANEMURA, M. KINOSHITA, T. SAIO, Y. INOUE, T. HIKIMA, S. AKIYAMA, T. OGURA and K. INABA, “Dynamic Assembly of Protein Disulfide Isomerase in Catalysis of Oxidative Folding,” *Nat. Chem. Biol.* **15**, 499–509 (2019). doi: 10.1038/s41589-019-0268-8

A. MUKAIYAMA, D. OUYANG, Y. FURUIKE and S. AKIYAMA, “KaiC from a Cyanobacterium *Gloeocapsa* sp. PCC 7428 Retains Functional and Structural Properties Required as the Core of Circadian Clock System,” *Int. J. Biol. Macromol.* **131**, 67–73 (2019). doi: 10.1016/j.ijbiomac.2019.03.051

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

S. AKIYAMA, “Keynote Lecture “Frontiers of the Intermolecular Interactions Analysis of Biomolecules promoted by BioSAS,” PF Workshop, Tsukuba (Japan), September 2019.* (*Keynote Lecture*)

S. AKIYAMA, “ATPase-Based in vitro Screening for KaiC Clock Mutants in Cyanobacteria,” XVI Congress of the European Biological Rhythms Society, Lyon (France), August 2019.

S. AKIYAMA, “Cyanobacterial circadian clock system through the chemistry of rhythm, structure, and evolutionary diversity,” V World Congress of Chronobiology, Suzhou (China), April 2019.* (*Keynote Lecture*)

秋山修志, “Biochemistry and Structure of Circadian Clock Protein, KaiC,” 第 92 回日本生化学会大会, パシフィコ横浜, 横浜, September 2019.

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」, 第 13 回分子科学討論会, 名古屋大学, 名古屋, September 2019.

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).

D. OUYANG, V World Congress of Chronobiology (Suzhou, China), The poster presentation award (2019).

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 (2019–2020).

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 長期利用分科会委員 (2019–).

SPring-8 利用研究課題審査委員会 (2011–2018).

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).

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) $\alpha\beta$ 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 $\alpha\beta$ 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 $\alpha\beta$ 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 $\alpha\beta$ 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18種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典型的な全てのループパターンを網羅した5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。これまでに、そのうちの3つに対して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。また、これら5つの異なる形状のデザインとは別に、計算機で長さ70残基、形状約800種類、配列約8000種類もの大量のデザイン配列を作り出すことに成功した。今後は、これら大量のデザイン配列を折りたたみ能や機能でスクリーニングする。
- c) デザインタンパク質の安定化機構の解明：デザインしたタンパク質の多くは、100℃でも変性しないという極めて興味深い特性を有する。この異常に高い安定性は、タンパク質の主鎖を局所的に制限することによって探索すべき構造空間を小さくしたことに起因するのか、あるいは、疎水性コアパッキングのような非局所相互作用によるものなのかを、疎水性コアのLeu, IleをValに変えてパッキングを損なうことにより調べた。その結果、全部で10残基のLeu, IleをValに変えても、タンパク質は同じトポロジーへと折りたたみ、かつ、まだ100℃以上の安定性を示した

ことから、タンパク質の主鎖を望みのトポロジーに折りたたみやすいうように制限することがデザインタンパク質の極度な安定性を生み出していることが示唆された。

- 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、b) でデザインした α ヘリカル構造を融合してアデニン環結合部位を作ることにより、高い ATP 結合親和性を示すタンパク質設計に取り組んでいる。
- 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ないだけなのか、これらの謎に迫る。網羅的なタンパク質立体構造データベース検索を行い、8つの新規トポロジーを同定した。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たところ、デザインしたタンパク質は安定な構造を形成していた。そこで、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。とりわけ、8つのうちの1つのトポロジーは、両端を引っ張ったときに結び目を形成するという極めて特異な構造であり、折りたたみが難しそうな自然界に現存しない新規トポロジーを持つタンパク質をも人工的に創り出すことに成功したという事実は、これら8つの新規トポロジーは偶然生物が見つけないで、あるいは、進化の過程で淘汰されたということを示唆している。
- 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 PET 製品のバイオリサイクルに重要な PET 分解酵素の耐熱化を行っている。また、デザインタンパク質が極めて安定であることを利用して、デザインタンパク質そのものを融合する手法を使って創薬ターゲットの一つである GPCR の耐熱化も行っている。

B-1) 学術論文

S. BASAK, R. P. NOBREGA, D. TAVELLA, L. M. DEVEAU, N. KOGA, R. TATSUMI-KOGA, D. BAKER, F. MASSI and C. R. MATTHEWS, “Networks of Electrostatic and Hydrophobic Interactions Modulate the Complex Folding Free Energy Surface of a Designed $\beta\alpha$ Protein,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **116**, 6806–6811 (2019).

H. MURAKOSHI, H. HORIUCHI, T. KOSUGI, M. ONDA, A. SATO, N. KOGA and J. NABEKURA, “ShadowR: A Novel Chromoprotein with Reduced Non-Specific Binding and Improved Expression in Living Cells,” *Sci. Rep.* **9**, 12072 (11 pages) (2019).

B-3) 総説, 著書

R. KOGA and N. KOGA, “Consistency principle for protein design,” *Biophys. Physicobiol.* **16**, 304–309 (2019).

小杉貴洋, 古賀理恵, 古賀信康, 「合理デザインによる新規タンパク質の創出: 現状とその可能性」, *実験医学*, 羊土社, **37(18)**, 11月号, 3089–3095 (2019).

B-4) 招待講演

古賀信康, 「タンパク質構造の合理的耐熱化法の開発」, ImPACT 野地プログラム最終成果報告会——人工細胞リアクタが拓くイノベーション——, 東京, 2019年3月.

古賀信康, 「タンパク質分子の合理設計: ゼロからの創成と天然物の改造」, 酵素工学研究会第81回講演会, 京都大学北部総合教育研究棟益川ホール, 京都, 2019年4月.

古賀信康, 「Generation of de novo designed protein structure library」, 沖縄科学技術大学院大学, 沖縄, 2019年7月.

古賀信康, 「合理的設計による新規タンパク質配列空間の探索」, 理化学研究所, 横浜, 2019年7月.

古賀信康, 「人工タンパク質構造ライブラリーの創出」, 第71回日本生物工学会大会シンポジウム「タンパク質工学におけるドライウエット技術融合の新展開」, 岡山, 2019年9月.

古賀信康, 「De novo design protein structure library」, 金沢大学ナノ生命科学研究所, 金沢, 2019年11月.

T. KOSUGI, “Design of Allosteric Site to Regulate Rotary Molecular Motor V_1 -ATPase,” Frontier Bioorganization Forum 2019, KIAS, Soul (Korea), 2019年7月.

T. KOSUGI, “Allosteric Regulation of V_1 -ATPase by Designing Walker Motif in Non-catalytic Interface,” The 2nd Tokyo ATPase Workshop, 東京大学, 東京, 2019年9月.

S. MINAMI, “Design of new fold proteins yet-unexplored in nature,” 分子研研究会「New Frontier in Protein Design & Engineering」, Okazaki, 2019年3月.

N. KOBAYASHI, “Cumulative thermostabilization of β -glucosidase with structure-based sequence profile information,” 分子研研究会「New Frontier in Protein Design & Engineering」, Okazaki, 2019年3月.

B-6) 受賞, 表彰

古賀信康, 第13回日本蛋白質科学会年会若手奨励賞 (2013).

古賀信康, 第51回日本生物物理学会年会若手奨励賞 (2013).

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 (2015-2019).

学会の組織委員等

分子研研究会「New Frontier in Protein Design & Engineering」(岡崎)オーガナイザー, 座長 (2019.3.15).

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).

第 114 回国研セミナー「合理設計で探索する広大なタンパク質配列空間」(岡崎市立小豆坂小学校)講師 (2019.7.30).

情報機構「タンパク質のデザイン技術——現状と今後の展望」(東京)講師 (2019.9.13).

B-8) 大学での講義, 客員

東京医科歯科大学,「大学院特別講義」, 2019 年 6 月 21 日.

京都大学理学部, 客員准教授,「化学特別講義 2」, 2019 年 12 月 9 日-11 日.

名古屋大学工学部,「応用物理学特論」,「応用物理学特別講義」, 2019 年 12 月 16 日-18 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 F₁-ATPase の動作原理」, 古賀信康 (2015 年-2019 年).

科学技術振興機構さきかけ研究,「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).

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 9 名で活動を行なった。前年度からの課題として, 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, に今年度も取り組んできた。結果として①について, ある程度手法を確立することができた。今後は②について, より注力していきたい。

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)₂Cu[N(CN)₂]X (X = Cl, Br) の薄膜単結晶を用いたFETを作製し、その電気的特性を測定した。モット絶縁体中では電子間に働くクーロン反発と格子整合のために本来金属的であるべきキャリアの伝導性が極端に低い状態が実現しているが、トランジスタのゲート電界により静電キャリアドーピングが行われると実効的なクーロン反発が遮蔽されて金属的な伝導性が復活する。こうした原理による伝導性スイッチングはこれまでの半導体デバイスではほとんど使われてこなかったが、我々のグループが世界に先駆けて原理検証したものである。本年はモット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、さらに光反応による単分子膜の熱安定性向上を検討した。
- b) 上記モット絶縁体のモットハバードギャップを歪みや静電キャリアドーピングで小さくしていくと、低温において超伝導状態が実現することが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、いくつかの系で分子や結晶構造のカイラリティに由来すると思われる磁気抵抗効果を見出した。

B-1) 学術論文

M. SUDA, Y. THATHONG, V. PROMARAK, H. KOJIMA, M. NAKAMURA, T. SHIRAOGAWA, M. EHARA and H. M. YAMAMOTO, "Light-Driven Molecular Switch for Reconfigurable Spin Filters," *Nat. Commun.* **10**, 2455 (7 pages) (2019).

G. KAWAGUCHI, A. A. BARDIN, M. SUDA, M. URUICHI and H. M. YAMAMOTO, "An Ambipolar Superconducting Field-Effect Transistor Operating above Liquid Helium Temperature," *Adv. Mater.* **31**, 1805715 (6 pages) (2019).

H. ITO, Y. EDAGAWA, J. PU, H. AKUTSU, M. SUDA, H. M. YAMAMOTO, Y. KAWASUGI, R. HARUKI, R. KUMAI and T. TAKENOBU, “Electrolyte-Gating-Induced Metal-Like Conduction in Nonstoichiometric Organic Crystalline Semiconductors under Simultaneous Bandwidth Control,” *Phys. Status Solidi PRL* **13**, 1900162 (6 pages) (2019).

T. CHOOPPAWA, M. SUDA, M. URUICHI, M. KUNASETH, S. NAMUANGRUK, P. RASHATASAKHON and H. M. YAMAMOTO, “Development of Highly Soluble Perylenetetracarboxylic Diimide Derivative for n-Type Monolayer Field-Effect-Transistor,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **669**, 94–105 (2019).

Y. KAWASUGI, K. SEKI, S. TAJIMA, J. PU, T. TAKENOBU, S. YUNOKI, H. M. YAMAMOTO and R. KATO, “Two-Dimensional Ground-State Mapping of a Mott-Hubbard System in a Flexible Field-Effect Device,” *Sci. Adv.* **5**, eaav7282 (9 pages) (2019).

D. HIROBE, M. SATO, M. HAGIHARA, Y. SHIOMI, T. MASUDA and E. SAITOH, “Magnon Pairs and Spin Nematic Correlation in the Spin Seebeck Effect,” *Phys. Rev. Lett.* **123**, 117202 (7 pages) (2019).

B-4) 招待講演

H. M. YAMAMOTO, “Light-driven Molecular Switch for Reconfigurable Spin Filters,” Chirality @ The Nanoscale, Ascona (Switzerland), October 2019.

H. M. YAMAMOTO, “Spin Filter Driven by Molecular Motor,” 5th Japan-Thai workshop on TCC2019, Yokohama, October 2019.

H. M. YAMAMOTO, “Band-filling and Band-width control for κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]X embedded in field effect devices,” ISCOM2019, Tomar (Portugal), September 2019.

H. M. YAMAMOTO, “Light-driven molecular switch for reconfigurable spin filters,” 17th Japan-Korea Symposium on Molecular Science, Nagoya, July 2019.

H. M. YAMAMOTO, “Light-driven molecular switch for reconfigurable spin filters,” ANSCSE2019, Chiang Mai (Thailand), June 2019.

須田理行, 「機能性有機単分子膜を利用した固体物性の外場制御」, 第10回分子アーキテクトニクス研究会, 福岡(日本), 2019年11月.

M. SUDA, “Photo-control of Solid-state Electronic Properties by Interface Molecular Engineering,” Colloquium on Advanced Molecular Materials, Wako (Japan), July 2019.

M. SUDA and H. M. YAMAMOTO, “Light-driven Molecular Switch for Reconfigurable Spin Filters,” The 80th Okazaki Conference “Chirality-induced spin selectivity and its related phenomena,” Okazaki (Japan), May 2019.

須田理行, 「分子キラリティ制御に基づくスピン偏極電流の生成と外場制御」, 早稲田大学高等研究所「Top Runner's Lecture Collection of Science—物質の構造と対称性をもたらす電磁交差応答の最前線：マルチフェロイクスとスピントロニクス—」, 早稲田大学, 東京(日本), 2019年4月.

須田理行, 「界面光異性化分子を用いた電子物性の光制御」, 日本物理学会第74回年次大会シンポジウム「有機分子と表面の出会いがもたらす多体相関物性」, 福岡(日本), 2019年3月.

D. HIROBE, “Spin Seebeck Effects in One-dimensional Spin Liquids,” Spintronics Meets Topology in Quantum Materials, Santa Barbara (U.S.A.), November 2019.

B-5) 特許出願

特願 2019-092958,「キラリティ検出装置, キラリティ検出方法, 分離装置及び分離方法」, 戸川欣彦, 宍戸寛明, 山本浩史(大阪府立大学, 自然科学研究機構), 2019年.

特願 2019-092959,「キラル物質装置」, 戸川欣彦, 宍戸寛明, 山本浩史(大阪府立大学, 自然科学研究機構), 2019年.

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).

山本浩史, 日本化学会学術賞 (2019).

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

物理学会領域7副代表 (2018).

物理学会領域7代表 (2019-).

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 80th Okazaki conference 議長 (2019).

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

東北大学大学院理学系研究科, 「強相関電子物理学特論」, 2019 年 12 月.

東北大学大学院理学系研究科, 委嘱教授, 2015 年 4 月–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A), 「有機強相関電子デバイスによる伝導性と磁性の制御」, 山本浩史 (2019 年–2022 年).

科学技術振興機構さきかけ研究「電子やイオンの能動的制御と反応」, 「スピン角運動量の能動的制御による革新的電気化学反応の創出」, 須田理行 (2019 年–2022 年).

科研費基盤研究(B), 「有機結晶表面への光キャリア注入と光誘起二次元超伝導の創出」, 須田理行 (2019 年–2021 年).

大幸財団自然科学系学術研究助成, 「キラル分子モーター修飾ナノ粒子を利用した高スピン偏極電流の生成と外場制御」, 須田理行 (2019 年–2020 年).

科研費挑戦的研究(萌芽), 「表面修飾ダイヤモンドにおける電界誘起超伝導の実現」, 須田理行 (2019 年–2020 年).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型)(公募研究), 「キラル配位子修飾金属ナノ粒子ネットワークに基づく新奇スピントロニクス素子の創出」, 須田理行 (2019 年–2020 年).

徳山科学技術振興財団研究助成, 「ポテンシャル乱れを排除した表面修飾ダイヤモンドにおける電界誘起高温超伝導の実現」, 須田理行 (2019 年).

野口遵研究助成金, 「キラル分子の利用による“磁性体と磁場を必要としない”新奇スピントロニクス素子の開発」, 須田理行 (2018 年–2019 年).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型)(公募研究), 「 π 電子系単分子膜 FET における歪み誘起相転移現象の探索」, 須田理行 (2017 年–2018 年).

科研費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かけ研究, 「電子相関を利用した新原理有機デバイスの開発」, 山本浩史 (2009 年–2013 年).

科研費若手研究(A), 「超分子ナノワイヤーの冗長性拡張による金属化」, 山本浩史 (2008 年–2011 年).

科研費特定領域研究(公募研究),「電極との直接反応によるDCNQIナノ単結晶作成とその機能探索」, 山本浩史 (2006年-2008年).

C) 研究活動の課題と展望

カイラリティによるスピン流生成は, 近年益々注目されるようになってきている。どちらかと言うと化学分野で注目されているCISSのみならず, 物性物理分野でも同じような対称性に基づく議論が盛んになされており, 両者の共通点と相違点を検討しながら実験を進めていく必要があると考えられる。CISSはこれまで薄膜トンネルデバイス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や, 線形応答領域での計測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～2019年3月31日)*)

A-1) 専門領域：有機合成化学

A-2) 研究課題：

- a) ペ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、すべての水素をフッ素に変換するシンプルな手法であり、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、ペリレン化合物の完全フッ素化を目指している。今年度は、フッ素化ペリレン ($C_{20}F_{12}$) の前駆体である $C_{20}F_8(OMe)_4$ 、 $C_{20}F_8H_4$ 、 $C_{20}F_8I_4$ の合成に成功した。また、 $C_{20}F_8(OMe)_4$ および $C_{20}F_8I_4$ については、単結晶 X 線構造解析を行うことができた。DFT 計算から予想されたように、ペリレンのナフタレン環は、フッ素原子の立体反発により 25 度から 27 度ねじれている。完全にハロゲン化された $C_{20}F_8I_4$ では、2次元のブリック状の π スタックが見られ、さらにシート間ではフッ素とヨウ素間に 3.01 Å のハロゲン結合が存在する。このユニークな結晶構造が有機半導体の性能にどう影響するか興味深い。現在、所内外の物性研究者に提供すべく、収率の向上と大量合成に取り組んでいる。
- b) 最近、榎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。昨年度、SMD/M06-2X-D3/6-311+G(d,p) レベルでの DFT 計算を行い、[1,3]-転位反応における二つの多段階ルートを提案した。今年度は、[3,3] シグマトロピー転位における立体化学について、詳細な DFT 計算を行った。その結果、キラルプレンステッド酸触媒による不斉転位反応において、イオン対の形成が特に重要であることがわかった。

B-1) 学術論文

C. JONGWOHAN, Y. HONDA, T. SUZUKI, T. FUJINAMI, K. ADACHI and N. MOMIYAMA, “Brønsted Acid-Initiated Formal [1,3]-Rearrangement Dictated by β -Substituted Ene-Aldimines,” *Org. Lett.* **21**, 4991–4995 (2019).

Y. NAKAYAMA, R. TSURUTA, N. MORIYA, M. HIKASA, M. MEISSNER, T. YAMAGUCHI, Y. MIZUNO, T. SUZUKI, T. KOGANEZAWA, T. HOSOKAI, T. UEBA and S. KERA, “Widely Dispersed Intermolecular Valence Bands of Epitaxially Grown Perfluoropentacene on Pentacene Single Crystals,” *J. Phys. Chem. Lett.* **10**, 1312–1318 (2019).

C) 研究活動の課題と展望

4月より機器センター・合成チームのチームリーダーとなり、主にナノプラット協力研究の有機合成支援を担当することとなった。今年度は、石川県警科学捜査研究所(ヒト肝ミクロソームを用いた α -PPPの光学活性代謝物の生成量評価)、横浜国立大学(新規触媒的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ントリウム塩の合成)、慶応義塾大学(フッ素化有機n型半導体の開発)の申請を受け入れ、楳山グループの支援の下、それぞれ期待された成果を上げることができた。また、ペリレン骨格の全ハロゲン化に成功したので、分子・物質合成プラットフォームを通じて、大学や企業の研究者にサンプルを提供していきたい。

*) 2019年4月1日分子科学研究所機器センターチームリーダー

6-4 理論・計算分子科学研究領域

理論分子科学第一研究部門

齊藤真司（教授）（2005年10月1日着任）

A-1) 専門領域：物理化学，理論化学

A-2) 研究課題：

- a) 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・動的影響
- 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：光合成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：過冷却水の構造変化動力学

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基質の反応が進むこと等を解明した。本解析で明らかになった動的特徴は、過冷却液体などに見られる稀に起こる構造変化を想起させるものであり、それらの系や酵素反応の反応ダイナミクスの一般的特徴と考えている。
- b) 化学反応に関する研究として、凝縮系の不均一かつ動的な揺らぎの下で、構造変化や化学反応が如何に起こっているか一分子速度論の観点から解析も進めている。超長時間の分子動力学計算のデータを用い、水溶液中の BPTI タンパク質の構造変化動力学が如何に起こっているかについて解析している。また、1 価の陽イオンが選択的に透過するポリセオナミド B (pTB) におけるイオン透過機構の解明に向け、pTB の膜侵入や pTB によるイオン透過の動力学が如何に起こっているかについても解析を進めている。
- c) 生体分子系の機能発現機構に関する研究の一例として、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。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、KaiC の構造変化やリン酸化反応などの解析を進めている。
- d) 生体分子系の機能発現の解析として、光合成系の励起エネルギー移動 (EET) の解析を行っている。光合成系では、吸収された光エネルギーが反応中心へと効率よく伝達される。しかし、単純な系においても、その効率的 EET の分子機構は未解明である。我々は EET の解析に対し効率的な動力学計算手法を開発し、Fenna-Matthews-Olson (FMO) タンパク質の EET の解析を進めてきた。その結果、各色素の励起エネルギーに依存した揺らぎにより効率的な EET が達成されることを初めて明らかにした。
- e) 水の熱力学的性質の動的起源の解明に向け、構造変化を引き起こしやすい水素結合欠陥を特定するとともに、低温においても構造緩和が引き起こされることを解明した。さらに、低温・高温極限および調和振動子系で正しく振る舞

う量子力学的複素比熱の表式を理論仮説として導き、また、複素エントロピーの定義から振動および構造変化に由来するエントロピーを説明する理論を提案した。この結果を現実系に応用し、水では振動エントロピーが低温においても支配的であることを説明するとともに、ガラス転移に向かい比熱やエントロピー変化における動力学的起源を説明した。

B-1) 学術論文

T. MORI and S. SAITO, “Conformational Excitation and Non-Equilibrium Transition Facilitate Enzymatic Reactions: Application to Pin1 Peptidyl-Prolyl Isomerase,” *J. Phys. Chem. Lett.* **10**, 474-480 (2019).

S. SAITO and B. BAGCHI, “Thermodynamic Picture of Vitrification of Water through Complex Specific Heat and Entropy: A Journey through ‘No Man’s Land’,” *J. Chem. Phys.* **150**, 054502 (14 pages) (2019).

T. L. C. JANSEN, S. SAITO, J. JEON and M. CHO, “Theory of Coherent Two-Dimensional Vibrational Spectroscopy,” *J. Chem. Phys.* **150**, 100901 (17 pages) (2019). (Perspective)

S. FUJIWARA, H. NAKAMURA, H. LI, H. MIYANISHI, T. MIZOGUCHI, T. YASUNAGA, T. OTSUKA, Y. HATANO and S. SAITO, “Computational Strategy for Studying Structural Change of Tritium-Substituted Macromolecules by a Beta Decay to Helium-3,” *J. Adv. Simulat. Sci. Eng.* **6**, 94–99 (2019).

H. LI, S. FUJIWARA, H. NAKAMURA, H. LI, T. MIZOGUCHI, T. YASUNAGA, T. OTSUKA, Y. HATANO and S. SAITO, “Structural Changes in Tritium-Substituted Polymeric Materials by Beta Decays: A Molecular Dynamics Study,” *Plasma Fusion Res.* **14**, 3401106 (5 pages) (2019).

S. SAITO, M. HIGASHI and G. R. FLEMING, “Site-Dependent Fluctuations Optimize Electronic Energy Transfer in the Fenna-Matthews-Olson Protein,” *J. Phys. Chem. B* **123**, 9726–9772 (2019).

B-3) 総説, 著書

M. OKUDA, M. HIGASHI, K. OHTA, S. SAITO and K. TOMINAGA, “Vibrational Frequency Fluctuations of Ionic and Non-Ionic Vibrational Probe Molecules in Aqueous Solutions,” in *Coherent Multidimensional Spectroscopy*, M. Cho, Ed., Springer Series in Optical Sciences, Springer; Singapore, Chapter 12, pp. 259–285 (2019).

B-4) 招待講演

S. SAITO, “Supercooled water: Structure, dynamics, thermodynamics, and glass transition,” IMS symposium “Water at interfaces 2018,” Okazaki (Japan), January 2019.

S. SAITO, “Circadian rhythm of Kai system: A reaction model considering reactions and conformational changes,” Dynamics at the Interface of Chemistry and Biology, Bangalore (India), February 2019.

S. SAITO, “Supercooled water: Structure, dynamics, thermodynamics, and glass transition,” Department Seminar, Institute of Physics, National Chiao-Tung University, Hsinchu (Taiwan), May 2019.

S. SAITO, “Functions of biomolecular systems,” Colloquium, Institute of Physics, National Chiao-Tung University, Hsinchu (Taiwan), May 2019.

S. SAITO, “Excitation energy transfer in the Fenna-Matthews-Olson protein optimized by site-dependent fluctuations,” Indo-Japan workshop on “Frontiers in Molecular Spectroscopy: From Fundamentals to Applications in Chemistry and Biology,” Kobe (Japan), October–November 2019.

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, 2015–2019).

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).

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

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学研究費委員会専門委員 (2006, 2014, 2015).

科学研究費助成事業評価委員会評価者 (2013, 2015).

情報学研究所運営委員会委員 (2010–2014).

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 (2016–2019).

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).
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–).
総合研究大学院大学全学入試監理委員会委員 (2019–).
理化学研究所研究業績報告会アドバイザー (2019).

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」, 齊藤真司 (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(C), 「酵素反応の動的機構の理論的解明」, 森 俊文 (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」, 齊藤真司 (2016年度–2020年度).
科研費新学術領域研究(研究領域提案型)(公募研究), 「タンパク質の構造変化と化学反応が織り成す協働的な反応機構の解明」, 森 俊文 (2016年度–2017年度).
科研費若手研究(B), 「タンパク質の動的構造と機能発現ダイナミクスの分子論的解明」, 森 俊文 (2015年度–2018年度).
科研費研究活動スタート支援, 「天然変性タンパク質の動的構造と機能発現機構の分子論的解明」, 森 俊文 (2014年度).
科研費基盤研究(B), 「生体分子の構造履歴ダイナミクスと機能発現の分子機構の理論的解明」, 齊藤真司 (2013年度–2015年度).
科研費挑戦的萌芽研究, 「生体分子の構造変化に伴う状態遷移ダイナミクスの解析手法の開発とその応用」, 齊藤真司 (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」, 齊藤真司 (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」, 齊藤真司 (2010年度–2012年度).
科研費特定領域研究(計画研究), 「空間・時間不均一ダイナミクス理論の構築」, 齊藤真司 (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複雑な揺らぎの中から、とくに、遅い環境揺らぎをもつ生体分子系や(過冷却)液体等における化学反応が如何に起こり、機能・熱力学的性質が如何に生み出されるかについて、理論的解明を進めている。具体的には、生体分子系における化学反応の描像の獲得に加え、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分子論的理解を目指している。また、生体分子系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にいたる研究を進めている。さらに、最近、独自に開発してきた方法論を用いて 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を解明した。今後、FMO タンパク質の励起エネルギー移動における振動の影響の解明を進めるとともに、高等植物における効率的励起エネルギー移動の分子機構の解明に向けた研究を進める。また、過冷却水の構造変化動力学の研究に関し、過冷却液体における揺らぎの中から如何に構造歪みが生じ構造緩和が進行するのかを解析することにより、構造欠陥と構造変化ダイナミクスの関連および過冷却液体に普遍的に見られる不均一構造変化動力学解明を目指している。

南谷英美 (准教授) (2019年4月1日着任)

A-1) 専門領域：計算材料学, 物性物理学

A-2) 研究課題：

- a) 固体におけるフォノン物性：電子フォノン及びフォノンフォノン相互作用
- b) 吸着分子が生み出す新奇界面磁性

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) フォノンは格子振動の量子であり、電気抵抗、超伝導体をもたらすクーパ対形成、絶縁体における熱伝導など、固体物理の各所で重要な役割を果たしている。これらの物性は、電子とフォノン、そしてフォノンとフォノンの相互作用によって決定されている。我々は特に、これらの相互作用が熱物性に与える影響に着目している。電子フォノン相互作用については、密度汎関数摂動理論を用いた相互作用強度の定量計算に加え、電子とフォノンのボルツマン方程式に基づいた、電子系からフォノン系へのエネルギー移行を追跡するためのプログラム開発を行っている。フォノンフォノン相互作用については、熱伝導率の計算に着目し、機械学習を援用することで計算時間を大幅に抑制することを目指している。フォノンフォノン相互作用の計算には、多数の変位パターン下で各原子にかかる力を計算することが必要になる。本年度は、高次元ニューラルネットワークポテンシャル (HDNNP) を用いて、微小な変位が入った Si および GaN 結晶における力を、第一原理計算と同等の精度で、かつ 800 分の 1 程度の計算時間で求められることを示した。さらに、HDNNP による熱伝導率計算が、第一原理計算を使った場合の結果を良く再現することも示した。
- b) 分子吸着が表面物性に様々な影響を与えることは、表面科学の分野では広く知られている。我々はこれまで、磁性を持った分子が吸着した際の近藤効果の発現を中心に理論的研究を進めてきた。最近では、分子吸着によって、金属基板の持つ磁性やスピン軌道相互作用に由来した電子状態を変調しうる可能性にも着目している。分子吸着に伴う界面磁性変調は *spinterface* と呼ばれ、スピントロニクス分野でも素子性能の向上や新規デバイス動作の可能性から注目されている。この分野の実験研究者と共同研究を進め、成果としてまず、鉛フタロシアニン (Pb-Phthalocyanine:PbPc) の単分子膜を Cu(111) 表面に形成した場合、スピン軌道相互作用由来の大きなバンド分裂をもった界面電子状態が現れ、スピン流を電流に変換する *inverse Edelstein* 効果が発現することを発見した。

B-1) 学術論文

H. ISSHIKI, K. KONDOU, S. TAKIZAWA, K. SHIMOOSE, T. KAWABE, E. MINAMITANI, N. YAMAGUCHI, F. ISHII, A. SHIOTARI, Y. SUGIMOTO, S. MIWA and Y. OTANI, "Realization of Spin-Dependent Functionality by Covering a Metal Surface with a Single Layer of Molecules," *Nano Lett.* **19**, 7119–7123 (2019).
E. MINAMITANI, M. OGURA and S. WATANABE, "Simulating Lattice Thermal Conductivity in Semiconducting Materials Using High-Dimensional Neural Network Potential," *Appl. Phys. Express* **12**, 095001 (5 pages) (2019).
T. UCHIHASHI, S. YOSHIZAWA, E. MINAMITANI, S. WATANABE, Y. TAKAGI and T. YOKOYAMA, "Persistent Superconductivity in Atomic Layer-Magnetic Molecule van der Waals Heterostructures: A Comparative Study," *Mol. Syst. Des. Eng.* **4**, 511–518 (2019).

B-4) 招待講演

E. MINAMITANI, “Computation of phonon related transport properties in semiconducting materials,” Summit of Materials Science 2019 and GIMRT User Meeting 2019, Tohoku University, Sendai (Japan), 2019年11月.

E. MINAMITANI, “Theory of single spin spectroscopy at surfaces: From Kondo singlet to spin-orbit interaction,” Exploring the Limits of Nanoscience with Scanning Probe Methods, Physikzentrum Bad Honnef (Germany), 2019年10月.

E. MINAMITANI, “Ab-initio simulation of phonon related transport phenomena: Inelastic electron tunneling spectroscopy & thermal conductivity,” Electron-phonon coupling: Computational methods for electronic transport in nanostructures and in bulk materials, Lugano (Switzerland), 2019年10月.

E. MINAMITANI, “Computation of Phonon Related Many-body Interactions in Semiconducting Materials,” The 17th Japan-Korea Symposium on Molecular Science, Nagoya (Japan), 2019年7月.

南谷英美, 「非弾性分光で探る表面界面の素励起: 理論的側面を中心に」, 第17回SPRING-8 ユーザー協同体顕微ナノ材料科学研究会・第14回日本表面科学会放射光表面科学研究部会・第3回プローブ顕微鏡研究部会合同シンポジウム, つくば, 2019年3月.

B-6) 受賞, 表彰

南谷英美, ロレアル・ユネスコ女性科学者日本奨励賞 (2008).

E. MINAMITANI, 6th International Symposium on Surface Science, Best Poster Awards (2011).

南谷英美, 日本物理学会若手奨励賞 (2017).

南谷英美, 分子科学研究奨励森野基金 (2018).

南谷英美, 平成31年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞 (2019).

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9領域運営委員 (2014–2015).

応用物理学会人材育成委員会委員 (2014–2015).

応用物理学会男女共同参画委員会委員 (2015–2016).

日本表面真空学会ダイバーシティー推進委員会委員 (2018–).

学会の組織委員等

22nd International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices (ICSNN 2020), Program committee (2019–2020).

B-10) 競争的資金

科研費研究活動スタート支援, 「表面吸着磁性分子系における特異なスピン物性の解明」, 南谷英美 (2011年度–2012年度).

科研費若手研究(B), 「吸着分子のスピン状態解明に向けた階層的理論手法開発と近藤効果・磁気異方性への応用」, 南谷英美 (2013年度–2015年度).

科研費若手研究(B), 「スピン物性と電子相関を活用した分子素子設計のための理論手法開発」, 南谷英美 (2015年度–2016年度).

科学技術振興機構さきがけ研究,「層状物質における電子フォノン相互作用の波数・エネルギー分解第一原理解析」, 南谷 英美 (2017年度-2020年度).

C) 研究活動の課題と展望

物質における熱の生成と伝搬は、基礎科学と応用の双方で重要な課題である。応用面では特に、半導体における定量的な熱生成・熱伝導シミュレーションが強く求められている。まずは第一原理計算と半古典描像であるボルツマン方程式を組み合わせた手法のプログラム開発を進め、半導体材料内の熱生成とその伝搬を追跡する計算技術の構築を目指す。現在の研究は主に、完全結晶を対象としているが、さらにデバイス動作で重要となる表面・界面、そして現実の物質では避けられない欠陥を含んだ系に広げること注力する。

電子のボルツマン方程式については、ベリー曲率に代表される多バンド効果を取り入れる手法が提案されている。一方で、フォノンのボルツマン方程式における多バンド効果の可能性や、温度勾配を多バンド効果にどのように取り入れるかについては、未だ不明な点が多い。ボルツマン方程式を介して、多バンド効果についての基礎理論研究と、第一原理計算による定量計算を組み合わせることで、現実物質における電磁場・歪・温度勾配を利用した、新奇な熱生成・熱伝搬の制御法の可能性を探る。

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) ナノ界面系の光や電圧に対する応答機構の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 異種物質が接して構成される界面系は，電子デバイスや触媒の開発に関連して盛んに研究が行われている。近年では，二次元層状物質や金属ナノクラスターなどを用いて幾何的構造が精密に設計されるようになっており，光・電子機能に対する原子レベルの理解の深化が求められている。これまで我々は，第一原理計算プログラム SALMON を用いて，ナノサイズの界面系の光電子物性を明らかにしてきた。本年度は，実験グループと連携しつつ，近接場光を利用する光触媒や受光素子について，光学応答性の解析を進めた。また，銀ナノクラスターを酸化チタンに担持したヘテロ構造における光励起電子ダイナミクスについて，SALMON を用いて解析を行った。それにより，銀ナノクラスターから生じる光誘起電場によって，銀から酸化チタンへと電子が直接移動することを明らかにした。

B-1) 学術論文

T. YATSUI, S. OKADA, T. TAKEMORI, T. SATO, K. SAICHI, T. OGAMOTO, S. CHIASHI, S. MARUYAMA, M. NODA, K. YABANA, K. IIDA and K. NOBUSADA, “Enhanced Photo-Sensitivity in a Si Photodetector Using a Near-Field Assisted Excitation,” *Commun. Phys.* **2**, 62 (8 pages) (2019).

T. YATSUI, Y. NAKAHIRA, Y. NAKAMURA, T. MORIMOTO, Y. KATO, M. YAMAMOTO, T. YOSHIDA, K. IIDA and K. NOBUSADA, “Realization of Red Shift of Absorption Spectra Using Optical Near-Field Effect,” *Nanotechnology* **30**, 34LT02 (8 pages) (2019).

M. NODA, K. IIDA, M. YAMAGUCHI, T. YATSUI and K. NOBUSADA, “Direct Wave-Vector Excitation in an Indirect-Band-Gap Semiconductor of Silicon with an Optical Near-Field,” *Phys. Rev. Appl.* **11**, 044053 (7 pages) (2019).

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 (2019).

B-4) 招待講演

K. IIDA, “First-Principles Study of Heterostructures Consisting of Two-Dimensional Layered Materials under Light and Voltage Bias,” 17th Japan-Korea Symposium on Molecular Science “Advances in Materials and Molecular Sciences,” 愛知，名古屋，2019年7月。

K. IIDA, “Massively Parallel Calculations for Photoexcited Electron Dynamics in Nanostructures,” 二国間共同研究オープンセミナー「Theoretical and Computational Chemistry of Complex Systems」，愛知，岡崎，2019年7月。

B-6) 受賞, 表彰

飯田健二, 第12回分子科学会奨励賞 (2019).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

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」世話人 (2018).

第21回理論化学討論会実行委員 (2018).

B-10) 競争的資金

科研費若手研究, 「光と印加電圧の相乗効果によって発現する薄膜とナノ粒子間の電子移動の機構解明」, 飯田健二 (2019年-2021年).

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」 (代表: 佐藤良太, 飯田健二 (研究分担者) (2018年-2022年).

文部科学省ポスト「京」重点課題(7)次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成 (代表: 矢花一浩), 「サブ課題B 光・電子融合デバイス」, 飯田健二 (研究分担者) (2018年-2019年).

科学技術振興機構 A-STEP 機能検証フェーズ試験研究タイプ, 「アイセーフ波長用高効率Si 受光センサの開発」 (代表: 八井崇), 飯田健二 (研究分担者) (2019年-2020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指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。

- b) 例えば光化学系 II 反応中心における初期電荷分離反応では、熱揺らぎ程度のエネルギー領域に複数の電子状態が存在する。しかし、既存の時間分解レーザー分光法では周波数分解能と時間分解能は Fourier 共役のトレードオフ関係にあり、その動的過程の実時間観測は困難なことが多い。本研究課題では、複雑分子系における分光学的研究への応用を念頭に、量子もつれ光を光源とする時間分解分光法の理論の構築を試みている。もつれ光子対の量子相関を利用することによりレーザーパルスなど古典光では不可能な周波数分解能と時間分解能の両立が可能となるような非線形光学応答関数の Liouville 経路を見出し、現在、分光シグナルの定式化を進めている。

さらに微小光共振器に閉じ込められた光と分子の相互作用を用いた分子系の観測と制御の理論研究も展開している。凝縮相における分子の電子励起エネルギーは気相の値から大きく変わり、また、量子ダイナミクスや化学反応ダイナミクスに大きな影響を与える。しかし、分子環境との相互作用による分光スペクトルのブロードニングのため凝縮相分子の電子励起エネルギーを正確に測定することは困難を極める。本年度は、分子系を微小光共振器に閉じ込められた光と強く結合させることにより生成される分子ポラリトンに着目し、凝縮相分子の電子励起エネルギーを正確に測定し得る手法を提案した。更に、分子ポラリトンに対する熱揺らぎの影響を調べることにより、分子ポラリトンのピーク幅と分子数を結ぶ指数スケールリングを導いた。この指数は分子環境のダイナミクスに関する情報を与えることを明らかにした。

B-1) 学術論文

T. P. NGUYEN and A. ISHIZAKI, "Precise Determination of Excitation Energies in Condensed-Phase Molecular Systems Based on Exciton-Polariton Measurements," *Phys. Rev. Research* **1**, 033019 (9 pages) (2019).

T. P. NGUYEN and A. ISHIZAKI, "Control of Quantum Dynamics of Electron Transfer in Molecular Loop Structures: Spontaneous Breaking of Chiral Symmetry under Strong Decoherence," *Phys. Rev. B* **99**, 064301 (9 pages) (2019).

B-4) 招待講演

A. ISHIZAKI, “Effects of dephasing upon quantum dynamical phenomena in condensed phase molecular processes,” Materials Research Meeting 2019 Materials Innovation for Sustainable Development Goals, Yokohama (Japan), December 2019.

A. ISHIZAKI, “Generation of pseudo-sunlight via quantum entangled photons and the interaction with molecules,” Department of Physics, University of Warwick, Coventry (U.K.), November 2019.

A. ISHIZAKI, “Intramolecular vibrations complement the robustness of primary charge separation in the photosystem II reaction center,” The 3rd International Solar Fuels Conference/International Conference on Artificial Photosynthesis-2019, Hiroshima (Japan), November 2019.

A. ISHIZAKI, “Generation of pseudo-sunlight via quantum entangled photons and the interaction with molecules,” Workshop on Biological Sensing and its Application, Keio University, Tokyo (Japan), October 2019.

Y. FUJHASHI and A. ISHIZAKI, “Intramolecular vibrations complement the robustness of primary charge separation in the photosystem II reaction center,” BIRS Workshop Charge and Energy Transfer Processes: Open Problems in Open Quantum Systems (19w5016), Alberta (Canada), August 2019.

石崎章仁, 「量子と古典のはざままで——分子系における量子散逸系とそのダイナミクス」, 東京大学先進科学研究機構, 東京都目黒区, 2019年7月.

A. ISHIZAKI, “Effects of dephasing upon quantum dynamical phenomena in condensed phase molecular processes,” the 23rd International Annual Symposium on Computational Science and Engineering, Chiang Mai University, Chiang Mai (Thailand), June 2019.

A. ISHIZAKI, “Generation of pseudo-sunlight via quantum entangled photons and the interaction with molecules,” Workshop on Quantum Noise and Quantum Environments, RIKEN, Wako (Japan), June 2019.

B-6) 受賞, 表彰

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

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

石崎章仁, 第 18 回サー・マーティン・ウッド賞 (2016).

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

石崎章仁, 第 10 回凝縮系科学賞 (2015).

石崎章仁, 日本物理学会第 10 回若手奨励賞 (2015).

A. ISHIZAKI, Short-term Fellowship at Wissenschaftskolleg zu Berlin (2012).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会領域 12 領域運営委員 (2017–2018).

日本化学会東海支部常任幹事 (2017–2018).

学会の組織委員等

日本学術振興会第 3 回日英先端科学シンポジウム企画委員 (2019).

The 1st QST International Symposium プログラム委員 (2016–2017).

The 45th World Chemistry Congress of the International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC-2015) 組織委員・物理化学 (2015).

第3回NINS Colloquium 「自然科学の将来像」運営組織委員 (2014).

NTU-IMS Faculty Exchange Meeting 世話人 (2014).

第22回化学ソルベール会議 scientific secretary (2010).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

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

その他

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

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

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきかけ研究「量子技術を適用した生命科学基盤の創出」領域, 「時間分解量子もつれ分光法: 理論基盤の構築と生体分子系への応用」, 藤橋裕太 (2019年-2023年).

科研費若手研究, 「Theoretical study of nonlinear optical responses of ultracold atomic systems: towards a high-resolution coherent multidimensional spectroscopy investigation of quantum many-body effects」, NGUYEN, Thanh Phuc (2019年-2022年).

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

Human Frontier Science Program, Young Investigator Grant 2017 “Regulation of photosynthetic light harvesting: how does protein conformation control photophysics?” G. Schlau-Cohen, 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」, 石崎章仁 (2013年-2017年).

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

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

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進めている。

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) 光学物性に関する分子集合体の理論的逆設計法の開発と応用
- b) 単層カーボンナノチューブの化学修飾による量子欠損の生成と近赤外発光波長制御
- c) Pt 発光錯体の熱耐性燐光発光制御：芳香族性および π 共役構造と発光性能の相関
- d) 多配置電子相関理論に基づく電子共鳴状態理論の開発と電子付加結合解離系への応用
- e) 担持白金サブナノクラスターの構造と酸素還元反応に対する高い触媒活性の要因
- f) 金属微粒子触媒の理論解析：低温 NO 還元反応の反応機構および金属ナノ粒子の系統的分類
- g) ロジウムナノシートによる CO-NO 反応の高い触媒活性の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子集合体の光学物性は、分子組成と集合体の構造により大きく変化することが知られており、新奇光学物質の開発を目指して、様々な分子集合体が開発されている。研究開発においては、光機能-構造の関係の解明と設計指針が必要とされる。本年度、光学物性の計算の逆問題に基づく光機能性分子集合体の設計法を開発した。本方法は、候補分子集合体を表すハミルトニアンを導入し、全探索が困難である莫大な候補分子集合体群において最適化による合理的かつ効率的な設計を可能にした。この方法を複数の候補分子種と候補空間配置をもつ一次元分子集合体の設計に適用し、強い光吸収・円二色性 (CD) をもつ集合体の分子組成・構造を提案した。また、適切な分子集合体の設計・形成と構成分子数の増大により、非線形的に CD を増大可能であることを明らかにした。高い光機能を得るために設計法による提案と精密な分子種・分子配向制御が重要であることを示した。
- b) 単層カーボンナノチューブ (SWCNT) では、化学修飾による分子変換および発光性量子欠陥が注目されている。実験と協力し、SWCNT の化学修飾による量子欠損の生成と近赤外発光の波長制御を研究した。第 1 - 第 3 世代のデンドロンを置換基に用い、置換基の立体効果によって付加位置を制御し、発光特性を制御することに成功した。また、分岐・環状アルキル基の化学修飾による付加位置制御および熱処理による発光波長制御にも成功し、その制御機構を理論計算によって明らかにした。さらに様々な径とカイラル指数の SWCNT(m,n) の系統的な理論計算を実施し、局所的 Clar 構造の六員環が最大数になるように置換され、発光波長を理論予測できることを見出した。この基礎原理に基づいて、径の異なる SWCNT の近赤外領域の発光波長制御が可能であることを示した。
- c) ヘテロ環状配位子を有する Pt, Ir 錯体は、金属-配位子電荷移動励起状態 ($^3\text{MLCT}$) から強い燐光発光を示す。本研究では、*trans*-Bis[(b-iminomethyl)aryloxy]Pt(II) 分子群を設計・合成し、77 K の低温において高い量子収率で強い燐光発光を示すことを見出した。一部の錯体では高温で消光するが、無輻射失活は $^3\text{MLCT}$ の反応面から最低エネルギー交差点 (MECP) を経由して基底状態に緩和することを理論的に明らかにした。さらに燐光発光の熱耐性は、 $^3\text{MLCT}$ の安定構造と MECP のエネルギー差に相関していることを示した。また、MECP の相対エネルギー位置は、MECP 近傍で Pt $d\sigma^*$ 軌道が配位子の π^* 軌道と相互作用する強さによることを明らかにし、配位子のヘテロ環の芳香族性により制御できることを示した。

- d) 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。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、任意の形状の分子に適用できるポロノイ・ポテンシャルを開発した。本年度は、多配置電子相関理論である XMS-CASPT2 法に複素吸収ポテンシャルを導入し、多配置性が重要となる結合解離領域やフェッシュバッハ共鳴に適用できる CAP/XMS-CASPT2 法を開発・実装した。この方法を H_2CO 分子や $\text{CH}_2\text{CH-Cl}$ 分子の結合解離、 N_2 分子の結合解離に適用し、方法の信頼性と有効性を検証した。 $\text{CH}_2\text{CH-Cl}$ 系では、電子付加共鳴状態 π^* から σ^* へと緩和し、C-Cl 結合解離が誘起される反応経路を明らかにした。
- e) 燃料電池には白金が利用されているが、白金は希少元素であり、使用量の低減が求められている。特に、正極における酸素還元反応 (ORR) において、高活性な白金ナノクラスターの電極触媒への利用が期待されている。慶應義塾大学・中嶋グループでは独自のパルスマグネトロンスパッタリング法により、原子数が数個から数百個のナノクラスターを固体基板上に担持させる方法を開発し、確立している。最近、この手法を用いて、担持白金 6 量体が現行の白金標準触媒に比べて ORR が 1.7 倍程度高い質量活性を示すことを見出した。本研究では、グラフェン担持白金 6 量体の局所安定構造を DFT 計算によって精査し、EXAFS の計測結果と比較することにより、6 量体の構造が双四面体構造であることを明らかにした。さらに白金 6 量体の d 軌道エネルギーレベルや電荷分布から白金サブナノクラスターの触媒活性の起源を議論した。
- f) 三元触媒の研究開発では、希少元素である PGM 元素の低減やユビキタス元素への転換が期待されている。NO 還元反応は特に重要であり、様々な担持微粒子触媒が検討されている。我々は、銅元素に着目した研究開発を実施している。Cu クラスターでは、NO-CO 反応において低温では NO の二酸化が起こり、 N_2O を経由する反応機構が進行することを提案した。さらに Ru, Rh, Pd, Ag クラスターについて、金属クラスター (M_{13} , M_{55}) の理論計算モデルを用いて検討し、 $\text{M} = \text{Ru}$, Rh では NO の吸着解離が起こり、原子状 N から反応が進行すること、 $\text{M} = \text{Pd}$ では NO の分子状吸着が起こること、 $\text{M} = \text{Ag}$ では NO の二酸化から反応が進行することを明らかにした。またこれらの反応機構が金属の d 軌道と s 軌道のエネルギーレベルと相関すること、金属の電子構造で分類されることを示した。
- g) Rh は三元触媒に実装されており、高活性であるが希少元素であり、その減量が望まれている。最近、熊本大・町田グループの独自のアークプラズマ法により、Rh ナノシートが Rh ナノ粒子よりも NO 還元反応で高い触媒活性を示すことを見出され、Rh の大幅な減量の方法が開発された。本研究では、第一原理分子動力学シミュレーションの遷移状態探索により、NO 還元反応について Rh ナノシートと Rh ナノ粒子の触媒活性について比較・検討した。 Rh_{55} クラスター (1 nm 程度の直径) では、構造を柔軟に緩和できるために N 原子の配置に合わせて構造が歪み、中間体を安定化し、エネルギー障壁が高くなることを明らかにした。一方、Rh(111) 面のナノシートは剛直な形状を持ち、N 原子のホッピングが容易になり、安定な中間体を生成しないことから、Rh ナノ粒子よりも高活性であることを明らかにした。

B-1) 学術論文

Y. MAEDA, H. MURAKOSHI, H. TAMBO, P. ZHAO, K. KURODA, M. YAMADA, X. ZHAO, S. NAGASE and M. EHARA, “Thermodynamic Control of Quantum Defects on Single-Walled Carbon Nanotubes,” *Chem. Commun.* **55**, 13757–13760 (2019).

Y.-X. ZHAO, M.-Y. LI, P. ZHAO, M. EHARA and X. ZHAO, “New Insight into $\text{U}@C_{80}$: Missing $\text{U}@D_3(31921)-C_{80}$ and Nuanced Enantiomers of $\text{U}@C_1(28324)-C_{80}$,” *Inorg. Chem.* **58**, 14159–14166 (2019).

- H. TSUNOYAMA, A. OHNUMA, K. TAKAHASHI, A. VELLOTH, M. EHARA, N. ICHIKUNI, M. TABUCHI and A. NAKAJIMA**, “Enhanced Oxygen Reduction Activity of Platinum Subnanocluster Catalysts through Charge Redistribution,” *Chem. Commun.* **55**, 12603–12606 (2019).
- S. HU, W. SHEN, P. ZHAO, T. XU, Z. SLANINA, M. EHARA, X. ZHAO, Y. XIE, T. AKASAKA and X. LU**, “Crystallographic Characterization of $\text{Er}_2\text{C}_2@C_2(43)\text{-C}_{90}$, $\text{Er}_2\text{C}_2@C_2(40)\text{-C}_{90}$, $\text{Er}_2\text{C}_2@C_2(44)\text{-C}_{90}$, and $\text{Er}_2\text{C}_2@C_1(21)\text{-C}_{90}$: The Role of Cage-Shape on Cluster Configuration,” *Nanoscale* **11**, 17319–17326 (2019).
- Y.-X. ZHAO, M.-Y. LI, R.-S. ZHAO, K. YUAN, P. ZHAO, M. EHARA, S. NAGASE and X. ZHAO**, “Pivotal Role of Nonmetal Atoms in the Stabilities, Geometries, Electronic Structures, and Isoelectronic Chemistry of $\text{Sc}_3\text{X}@C_{80}$ (X = C, N and O),” *J. Comput. Chem.* **40**, 2730–2738 (2019).
- Y.-X. ZHAO, K. YUAN, M.-Y. LI, M. EHARA and X. ZHAO**, “In-Depth Theoretical Probe into Novel Mixed-Metal Uranium-Based Endohedral Clusterfullerenes $\text{Sc}_2\text{UX}@I_h(31924)\text{-C}_{80}$ (X = C, N),” *Inorg. Chem.* **58**, 10769–10777 (2019).
- N. TAKAGI, K. ISHIMURA, R. FUKUDA, M. EHARA and S. SAKAKI**, “Reaction Behavior of NO Molecule on Surface of M_n Particle (M = Ru, Rh, Pd, and Ag; $n = 13$ and 55): Theoretical Study of Its Dependence on Transition-Metal Element,” *J. Phys. Chem. A* **123**, 7021–7033 (2019).
- P. ZHAO, Y. MAEDA and M. EHARA**, “Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on Clar Sextet Theory,” *J. Phys. Chem. C* **123**, 18629–18637 (2019).
- S. KINOSHITA, Y. INOKUCHI, Y. ONITSUKA, H. KOHGUCHI, N. AKAI, T. SHIRAOGAWA, M. EHARA, K. YAMAZAKI, Y. HARABUCHI, S. MAEDA and T. EBATA**, “The Direct Observation of the Doorway $^1n\pi^*$ State of Methylcinnamate and Hydrogen-Bonding Effects on the Photochemistry of Cinnamate-Based Sunscreens,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 19755–19763 (2019).
- S. HU, P. ZHAO, W. SHEN, P. YU, W. HUANG, M. EHARA, Y. XIE, T. AKASAKA and X. LU**, “Crystallographic Characterization of $\text{Er}_3\text{N}@C_{2n}$ ($2n = 80, 82, 84, 88$): The Importance of a Planar Er_3N Cluster,” *Nanoscale* **11**, 13415–13422 (2019).
- M. SUDA, Y. THATHONG, V. PROMARAK, H. KOJIMA, M. NAKAMURA, T. SHIRAOGAWA, M. EHARA and H. M. YAMAMOTO**, “Light-Driven Molecular Switch for Reconfigurable Spin Filters,” *Nat. Commun.* **10**, 2455 (7 pages) (2019).
- Y. MAEDA, K. KURODA, H. TAMBO, H. MURAKOSHI, Y. KONNO, M. YAMADA, P. ZHAO, X. ZHAO, S. NAGASE and M. EHARA**, “Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes,” *RSC Adv.* **9**, 13998–14003 (2019).
- G. HAMASAKA, H. TSUJI, M. EHARA and Y. UOZUMI**, “Mechanistic Insight into the Catalytic Hydrogenation of Nonactivated Aldehydes with a Hantzsch Ester in the Presence of a Series of Organoboranes: NMR and DFT Studies,” *RSC Adv.* **9**, 10201–10210 (2019).
- T. SHIRAOGAWA and M. EHARA**, “Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines,” *ChemPhotoChem* **3**, 707–718 (2019). (Front Cover)
- H. YOSHIDA, K. KOIZUMI, M. BOERO, M. EHARA, S. MISUMI, A. MATSUMOTO, Y. KUZUHARA, T. SATO, J. OHYAMA and M. MACHIDA**, “High Turnover Frequency CO–NO Reactions over Rh Overlayer Catalysts: A Comparative Study Using Rh Nanoparticles,” *J. Phys. Chem. C* **123**, 6080–6089 (2019).

N. TAKAGI, K. ISHIMURA, H. MIURA, T. SHISHIDO, R. FUKUDA, M. EHARA and S. SAKAKI, “Catalysis of Cu Cluster for NO Reduction by CO: Theoretical Insight into the Reaction Mechanism,” *ACS Omega* **4**, 2596–2609 (2019).

R. INOUE, M. NAITO, M. EHARA and T. NAOTA, “Heat-Resistant Properties in the Phosphorescence of Trans-Bis[β -(Iminomethyl)Aryloxy] Platinum(II) Complexes: Effect of Aromaticity on d- π Conjugation Platforms,” *Chem. –Eur. J.* **25**, 3650–3661 (2019).

M. EHARA and U. DEVA PRIYAKUMAR, “Gold-Palladium Nanocluster Catalysts for Homocoupling: Electronic Structure and Interface Dynamics,” *Chem. Rec.* **19**, 947–959 (2019).

S. M. A. H. SIDDIKI, M. N. RASHED, M. A. ALI, T. TOYAO, P. HIRUNSIT, M. EHARA and K. SHIMIZU, “Lewis Acid Catalysis of Nb₂O₅ for Reactions of Carboxylic Acid Derivatives in the Presence of Basic Inhibitors,” *ChemCatChem* **11**, 383–396 (2019).

N. TAKAGI, M. NAKAGAKI, K. ISHIMURA, R. FUKUDA, M. EHARA and S. SAKAKI, “Electronic Processes in NO Dimerization on Ag and Cu Clusters: DFT and MRMP2 Studies,” *J. Comput. Chem.* **40**, 181–190 (2019). (Festschrift for Prof. Keiji Morokuma)

T. SHIRAOGAWA, G. CANDEL, R. FUKUDA, I. CIOFINI, C. ADAMO, A. OKAMOTO and M. EHARA, “Photophysical Properties of Fluorescent Imaging Biological Probes of Nucleic Acids: SAC-CI and TD-DFT Study,” *J. Comput. Chem.* **40**, 127–134 (2019). (Festschrift for Prof. Keiji Morokuma)

B-3) 総説, 著書

M. EHARA and Y. MORISAWA, “Theoretical and Experimental Molecular Spectroscopy of Far-Ultraviolet Region,” in *Molecular Spectroscopy: A Quantum Chemistry Approach*, Y. Ozaki, M. J. Wojcik and J. Popp, Eds., Wiley, pp. 119–145 (2019).

前田 優, 山田道夫, 江原正博, 「化学修飾によるカーボンナノチューブの機能化と評価」, “Chemical Functionalization and Characterization of Carbon Nanotube,” *炭素* **290**, 183–194 (2019).

高木 望, 福田良一, 江原正博, 榎 茂好, 「コアシェル型複合金属クラスターの安定性と電子状態:理論的アプローチ」, *J. Comput. Chem., Japan*, 特集号「触媒・電池の元素戦略研究:理論計算化学からのアプローチ」, **18**, 38–48 (2019).

B-4) 招待講演

T. SHIRAOGAWA and M. EHARA, “Theoretical Design of Photofunctional Molecular Aggregates for Chiroptical Properties: An Inverse Design Approach,” International Symposium on Circularly Polarized Luminescence and the Related Phenomena, Tokyo (Japan), December 2019.

M. EHARA, “Reaction and Dynamics at Interface Region of Condensed-Phase Au-Pd Nanocluster Catalysts,” Japan-India Mini Workshop, Kobe (Japan), October 2019.

M. EHARA, “Coordination Asymmetry: Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems,” The 9th Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC 2019), Sydney (Australia), September 2019.

M. EHARA, “Theoretical Approaches for Coordination Asymmetry: Photoreaction in MMF and Chiroptical Spectroscopy,” Combination of Theoretical/Computational Studies and Experiments toward Porous Coordination Polymers/ Metal Organic Frameworks, Oslo (Norway), August 2019.

M. EHARA, "Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems," Pure and Applied Chemistry International Conference 2019 (PACCON 2019), Bangkok (Thailand), February 2019.

江原正博,「合金微粒子触媒の構造と機能に関する理論研究」,触媒学会若手会第40回夏の研修会,愛知,田原,2019年7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).

白男川貴史, 第22回理論化学討論会最優秀ポスター賞 (2019).

白男川貴史, 第13回分子科学討論会優秀ポスター賞 (2019).

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 (2018–2019).

理論化学会幹事 (2019–).

学会の組織委員等

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

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

第3回分子科学討論会実行委員 (2009).

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

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

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

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

分子研研究会「触媒の分子科学：理論と実験のインタープレイ最前線」所内対応 (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).

分子研研究会「電池の分子科学：理論と実験のインタープレイ最前線」所内対応 (2018).

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, 副実行委員長 (2018–2019).

Pacificchem 2020: Symposium (#393) Triangle of Heterogeneous Catalysis, Surface Science, and Theory, Corresponding Symposium Organizer (2018–2020).

The Vth Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC) Conference, Sapporo, Japan, Organizing Committee (2019–2020).

The VIIIth Japan-Czech-Slovakia (JCS) Symposium on Theoretical Chemistry, Sapporo, Japan, Organization Committee (2019–2020).

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–).

量子化学スクール世話人 (2011–).

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–).

計算物質科学スパコン共用事業運営委員会委員 (2019-).
計算物質科学連絡会議委員 (2019-).
計算物質科学協議会準備委員会委員 (2019-).
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-).
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-).

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, 「基礎理論化学」, 2019年7月4日-5日, 9日-10日.
総合研究大学院大学物理科学研究科, 分光学基礎コース, 2019年3月11日-13日.
大阪大学大学院工学研究科, 非常勤講師, 2008年-2019年, 集中講義「計算機化学」, 2019年4月25日-26日.
京都大学実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点ユニット, 拠点教授, 2012年9月-.
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

二国間交流事業共同研究(日本-ノルウェー), 「錯体超分子構造体の理論化学」, 江原正博 (2019年-2020年).
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-2019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) 全長のアミロイドβペプチドの凝集シミュレーション
- b) 赤外自由電子レーザーによるAβアミロイド線維の破壊
- c) αシヌクレインフラグメントの2量体形成過程の分子動力学シミュレーション
- d) クマムシのタンパク質RvSAHS1の構造安定性の解明

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ペプチドのオリゴマー構造やその形成過程は明らかになっていない。そこで我々は42アミノ酸残基からなるAβペプチドAβ42の凝集過程を大規模分子動力学シミュレーションにより調べた。陽的な水中に32本の全長Aβペプチドを入れ、そのダイナミクスと構造変化の過程を調べた。その結果、時間が経過するにつれ分子間βシート構造を持つ凝集体が生成された。その構造を今後解析する予定である。
- b) Aβペプチドのアミロイド線維に対し赤外自由電子レーザーを照射する非平衡分子動力学シミュレーションを行った。照射するレーザーの波数をAβアミロイド線維の主鎖におけるC=O二重結合の伸縮モードと共鳴させると水素結合を形成しているN-HとC=O間の距離が離れ、アミロイド線維が破壊された。さらに破壊された後のAβペプチドの構造を調べたところ、ヘリックス構造が多く形成されていた。この現象はこれまでの実験と一致するものである。この理由を解明するため、種々の構造に対する共鳴波数を計算したところ、ヘリックス構造だけ共鳴波数がずれており、そのためヘリックス構造だけが形成されやすくなっていることを明らかにした。
- c) αシヌクレインは水溶液中で特定の構造を持たない、140残基のアミノ酸で構成される天然変性タンパク質である。凝集して繊維を形成することでパーキンソン病を引き起こすと言われている。特にαシヌクレイン繊維形成の核となる領域のフラグメントに着目し、そのフラグメント2本に対して定温定圧レプリカ置換シミュレーションを実行した。その結果、分子間反平行βシートを形成する構造が最も存在確率が高いこと、およびその凝集過程を明らかにした。
- d) クマムシは乾燥に伴い樽のような形状に移行し乾眠状態に至る。乾眠状態のクマムシは高温や低温、放射線照射などの極限環境を生き抜く能力があるが、極限環境下でクマムシの細胞が保護される仕組みは明らかでない。クマムシに発現するタンパク質RvSAHS1の構造の揺らぎがその乾眠機構に関わると考えられているため、全原子分子動力学シミュレーションを用いてRvSAHS1の構造の安定性を調べた。その結果、RvSAHS1のβバレル構造が大きく揺らぐこと、RvSAHS1のN末端にある天然変性領域が大きく揺らぐことなどの性質を発見した。一方、良く似た構造を取るヒトの肝臓にある脂肪酸結合タンパク質ではこれらの性質は確認されなかった。RvSAHS1のこれらの性質が果たす機能を今後考察する。

B-1) 学術論文

Y. TACHI, Y. OKAMOTO and H. OKUMURA, "Conformational Change of Amyloid-β 40 in Associated with Binding to GM1-Glycan Cluster," *Sci. Rep.* **9**, 6853 (11 pages) (2019).

M. YAMAUCHI and H. OKUMURA, “Replica Sub-Permutation Method for Molecular Dynamics and Monte Carlo Simulations,” *J. Comput. Chem.* **40**, 2694–2711 (2019).

S. G. ITOH, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and H. OKUMURA, “Effects of a Hydrophilic/Hydrophobic Interface on Amyloid- β Peptides Studied by Molecular Dynamics Simulations and NMR Experiments,” *J. Phys. Chem. B* **123**, 160–169 (2019).

N. MURAKI, K. ISHII, S. UCHIYAMA, S. G. ITOH, H. OKUMURA and S. AONO, “Structural Characterization of HypX Responsible for CO Biosynthesis in the Maturation of NiFe-Hydrogenase,” *Commun. Biol.* **2**, 385 (12 pages) (2019).

S. YANAKA, R. YOGO, R. INOUE, M. SUGIYAMA, S. G. ITOH, H. OKUMURA, Y. MIYANARI, H. YAGI, T. SATOH, T. YAMAGUCHI and K. KATO, “Dynamic Views of the Fc Region of Immunoglobulin G Provided by Experimental and Computational Observations,” *Antibodies* **8**, 39 (13 pages) (2019).

K. KERDPOL, J. KICUNTOD, P. WOLSCHANN, S. MORI, C. RUNGNIM, M. KUNASETH, H. OKUMURA, N. KUNGWAN and T. RUNGROTMONGKOL, “Cavity Closure of 2-Hydroxypropyl- β -cyclodextrin: Replica Exchange Molecular Dynamics Simulations,” *Polymers* **11**, 145 (15 pages) (2019).

Y. KAWASHIMA, K. ISHIMURA and M. SHIGA, “Ab Initio Quantum Mechanics/Molecular Mechanics Method with Periodic Boundaries Employing Ewald Summation Technique to Electron–Charge Interaction: Treatment of the Surface-Dipole Term,” *J. Chem. Phys.* **150**, 124103 (14 pages) (2019).

N. TAKAGI, K. ISHIMURA, R. FUKUDA, M. EHARA and S. SAKAKI, “Reaction Behavior of the NO Molecule on the Surface of an M_n Particle ($M = \text{Ru, Rh, Pd, and Ag}$; $n = 13$ and 55): Theoretical Study of Its Dependence on Transition-Metal Element,” *J. Phys. Chem. A* **123**, 7021–7033 (2019).

B-3) 総説, 著書

M. YAMAUCHI, Y. MORI and H. OKUMURA, “Molecular Simulations by Generalized-Ensemble Algorithms in Isothermal-Isobaric Ensemble,” *Biophys. Rev.* **11**, 457–469 (2019).

B-4) 招待講演

奥村久士, 「アルツハイマー病を引き起こすタンパク質凝集体の分子動力学シミュレーション」, 広島大学放射光科学研究センター HiSOR セミナー, 広島, 2019年11月.

奥村久士, 「分子動力学シミュレーションで見る生体分子の構造変化: アミロイド線維の形成と赤外自由電子レーザーによる破壊」, FEL-TUS 医工融合シンポジウム, 東京, 2019年11月.

奥村久士, 「タンパク質凝集の分子動力学シミュレーション」, 第2回ExCELLS シンポジウム, 岡崎, 2019年11月.

奥村久士, 「各種統計アンサンブルの生成法」, 第13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, 2019年9月.

奥村久士, 「A β アミロイド線維の分子動力学シミュレーション」, 第9回高分子物理学研究会, 豊田, 2019年8月.

奥村久士, 「分子動力学シミュレーションで見るアルツハイマー病原因物質」, 九州大学公開講演会最新化学談話シリーズ令和元年度第1回談話会, 福岡, 2019年7月.

奥村久士, 「Development of replica-permutation method and molecular dynamics simulations of amyloid- β aggregates」, 東京工業大学第5回北尾研セミナー, 東京, 2019年5月.

奥村久士,「コンピューターシミュレーションで見るアルツハイマー病原因物質」, 近畿大学第4回DoIK シンポジウム, 福岡, 2019年3月.

奥村久士,「アミロイドβ ペプチドのオリゴマーとアミロイド線維の分子動力学シミュレーション」, スーパーコンピュータワークショップ 2018, 愛知, 2019年1月.

伊藤 暁,「レプリカ置換分子動力学法の生体高分子への応用」, 第9回高分子物理学研究会, 豊田, 2019年8月.

伊藤 暁,「分子シミュレーションで解き明かすアルツハイマー病に関連する生体高分子の凝集過程」, 平成31年度九州地区高分子若手研究会・夏の講演会, 北九州, 2019年7月.

石村和也,「大規模並列量子化学計算プログラムSMASHの開発と応用計算」, 第7回材料系ワークショップ, 東京, 2019年2月.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations for aggregation of amyloid-β peptides,” IMS-PCOSS Bilateral Symposium, Xiamen (China), December 2019.

H. OKUMURA, “Molecular insight into protein aggregation by computer simulation,” 2nd International Conference on Materials Research and Innovation, Bangkok (Thailand), December 2019.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations of full-length amyloid-β peptides,” 23rd International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE23), Chiang Mai (Thailand), June 2019.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations of proteins,” Taiwan IBC-ExCELLS MOU Workshop 2019, Taipei (Taiwan), June 2019.

H. OKUMURA, “All-atom molecular dynamics simulations of amyloid-β aggregates,” International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2019, Rhodos (Greece), May 2019.

S. G. ITOH, “Aggregation process of amyloid-β peptides by the Coulomb replica permutation method,” 23rd International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE23), Chiang Mai (Thailand), June 2019.

K. ISHIMURA, “Development of Massively Parallel Quantum Chemistry Calculation Program SMASH and its Applications,” 34th Computational Materials Design (CMD) Workshop, Osaka (Japan), February 2019.

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, 日本化学会東海支部長賞 (2018).

山内仁喬, International HPC Summer School 2018, Parallel Programming Challenge GPU track, Winner (2018).

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」, 2019年12月12日.

九州大学大学院理学研究院, 化学特別講義「拡張アンサンブル分子動力学法と生物化学への応用」, 2019年7月16日–18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42アミノ酸残基からなるA β ペプチドA β 42の凝集過程の全原子分子動力学シミュレーションを実行した。今後このデータを解析する。具体的には何量体が形成しやすいのか, N末に存在する荷電性アミノ酸残基や β ドメインに存在する疎水性残基の役割に注目して解析を行う。さらに40アミノ酸残基からなるA β 40についても同様の大規模分子動力学シミュレーションを実行する。

- b) アルツハイマー病の原因とされるA β ペプチドのアミロイド線維に対し赤外自由電子レーザーを照射する非平衡分子動力学シミュレーションを行ったが、A β ペプチドは脳深部に存在するため実際にアルツハイマー病患者の脳にレーザーを照射するのは難しい。それに対し、透析アミロイドーシスの原因である β 2 ミクログロブリンのアミロイド線維は手首の皮膚近くに存在するため将来的にレーザー照射治療が実現する可能性は比較的高い。そこで β 2 ミクログロブリンのアミロイド線維に対してレーザーを照射する分子動力学シミュレーションを行い、その破壊過程をA β アミロイド線維の場合と比較、議論する。
- c) 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A β 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。
- d) α シヌクレインの凝集には細胞膜との結合が重要と考えられている。また、細胞膜に結合するのは α シヌクレインのN末領域であることが分かっている。そこで α シヌクレインのN末領域と細胞膜を陽溶媒中に用意し、分子動力学シミュレーションを実行する。数種類の細胞膜についてシミュレーションを行い、 α シヌクレインが結合しやすい細胞膜とそうでない細胞膜の特徴とその理由を明らかにする。
- e) クマムシの活動状態におけるRvSAHS1の動的性質を明らかにしたので、次に乾燥状態におけるRvSAHS1の動的、静的性質を解明するため、乾燥状態におけるRvSAHS1の分子動力学シミュレーションを行う。具体的には水を徐々に取り除くシミュレーションを行い、その構造変化を調べる。さらにRvSAHS1がリガンドを取り込むことが機能に重要と考えられるのでリガンドを取り込む過程のシミュレーションも行う。

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, 及び改良を進め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。今年度はこの方法を光励起によって引き起こされる電子移動とエネルギー移動が重要となるバタイン色素の問題へと適用し, 計算・研究を行った。現在, 研究成果を学術論文として投稿準備中である。
- b) イオン液体中の構造解析から出発し, 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行った。得られた結果より, 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を明らかにした。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) 生体内の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。量子化学計算を用いた研究から, 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。さらに, 陰イオンによる分子内水素結合の分断によりセルロース鎖の剛性が弱くなることで陰イオンの高分子セルロース中への侵入が起こり, 続いて分子間水素結合の分断が陰イオンにより促進されることが明らかになった。また, 陽イオンはセルロース鎖中のグルコース環上周辺に存在し, ファンデルワールス力によるグルコース環との相互作用によってセルロース鎖の溶解に寄与していることも明らかにした。これらの研究成果は学術論文としてまとめられ, 学術雑誌, *The Journal of Physical Chemistry*, に現在投稿中である。

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、分極関数のフラグメント近似と、分子内の電子相関を GW で扱いつつ環境の分極効果を COHSEX で考慮する方法を組み合わせることにより、大規模系における GW 準粒子エネルギーを効率よく計算する手法を提案した。また、BSE 法による励起状態計算の実装もおこなった。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/C₆₀ 界面の電荷移動 (CT) 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。本研究では開発した FMO-GW/BSE 法をペンタセン/C₆₀ 界面構造に適用し、界面 CT 状態の誘起分極エネルギーや励起子束縛エネルギーの解析を行った。また、得られた界面 CT 状態のエネルギーが外部量子収率スペクトルから見積もられる実験値とよく一致していることも確認した。

B-1) 学術論文

T. FUJITA, Y. NOGUCHI and T. HOSHI, "Charge-Transfer Excited States in the Donor/Acceptor Interface from Large-Scale GW Calculations," *J. Chem. Phys.* **151**, 114109 (8 pages) (2019).

T. HOSHI, H. IMACHI, A. KUWATA, K. KAKUDA, T. FUJITA and H. MATSUI, "Numerical Aspect of Large-Scale Electronic State Calculation for Flexible Device Material," *Jpn. J. Ind. Appl. Math.* **36**, 685–698 (2019).

B-4) 招待講演

T. FUJITA, "Development of the Large-Scale GW+Bethe-Salpeter Equation Method Based on Fragment Molecular Orbital Method for Applications to Organic Materials," The Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC 2019), University of Sydney, Sydney (Australia), October 2019.

T. FUJITA, "Charge Transfer States at the Organic Donor–Acceptor Interface from the Many-Body Green Function Method," IMS-IAMS Joint Discussion, Institute for Molecular Science, Okazaki, Aichi (Japan), September 2019.

藤田貴敏, 「大規模第一原理計算による有機半導体材料の電子物性研究」, ELSEES 研究会, 中央大学, 東京 (日本), 2019年9月.

T. FUJITA, “Theoretical Investigation on Effects of Polarization and Delocalization on Excited States in Organic Semiconductors,” CEMS Topical Meeting on Organic Photoelectrons: Theory, Materials, Interfaces, and Spectroscopy, Riken, Wako, Saitama (Japan), July 2019.

藤田貴敏, 「フラグメント分子軌道法の開発と有機半導体材料への応用」, 物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の新展開」, 東京大学物性研究所, 千葉, 柏(日本), 2019年4月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

量子生命科学会評議員 (2019-).

学会誌編集委員

理論化学会誌「フロンティア」編集委員 (2019-).

その他

量子化学スクール世話人 (2016-).

有機固体若手の会世話人 (2018-2019).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「第一原理計算による光励起物性予測と有機光電子材料への応用」, 藤田貴敏 (2019年-2021年).

科研費特別研究員奨励費, 「大規模電子状態計算を用いた水クラスターの理論的研究」, 藤田貴敏 (2010年-2011年).

C) 研究活動の課題と展望

今後はFMO-GW/BSE法の開発を進める予定である。現在の実装では電子励起が一分子に局在化した励起状態しか取り扱うことができないが、今後開発を進めることにより分子集合体で形成される非局在化した励起状態も計算できる手法を実装する予定である。さらに、FMO法による励起状態計算と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。開発した手法を太陽電池系に適用することにより、エネルギー変換効率を上昇させるための分子設計の指針を得る。

岡崎 圭一（特任准教授（若手独立フェロー））（2016年6月1日着任）

A-1) 専門領域：理論生物物理学

A-2) 研究課題：

- a) 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
- b) F-BAR タンパク質 Pacsin1 が引き起こす生体膜変形メカニズムの解明
- c) 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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ナトリウムイオンとプロトン細胞の内外で交換するトランスポーター Na^+/H^+ antiporter（交換輸送体）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と長時間平衡 MD シミュレーションより明らかにした。さらに、交互アクセスにおける構造変化ダイナミクスを、遷移パスサンプリング手法を用いた MD シミュレーション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て相互作用を弱めることで、元の野生型より速くイオンを輸送する変異体が得られた。これは、構造変化の遷移状態バリアが下がったことによって交互アクセスの速度が上がったことによると考えられる。
- b) 細胞において生体膜はダイナミックに変形し、エンドサイトーシスなどで見られるように一部切り離されて袋状構造（ベシクル）を作って細胞内外の物質輸送に使われる。このような生体膜変形は、一連のタンパク質が誘起している。その一つが F-BAR タンパク質であり、その中でも Pacsin1 というものに我々は注目した。Pacsin1 は、生体膜を様々な直径のチューブやベシクルに変形することが知られている。このような多様な膜変形能の分子メカニズムを解明するため、Pacsin1・生体膜系の全原子・粗視化シミュレーションを行った。まず、全原子 MD シミュレーションにより Pacsin1 が膜上で構造変形することが見られた。これを参照として、粗視化 MD におけるタンパク質力場を調整した。次に、粗視化 MD シミュレーションにより Pacsin1 の膜上での会合と会合複合体による膜変形のシミュレーションを行った。そこで得られた膜の曲率は、実験で見られていた太いチューブの曲率を説明することができた。また、バックルした膜を用意して、その曲がった膜上で Pacsin1 がどのように曲率をセンシングするかシミュレーションで調べた。その結果、Pacsin1 がセンシングした曲率は、縞模様のチューブやベシクルの曲率を説明できることがわかった。
- c) 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 Brownian ratchet 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。このメカニズムの背後にある自由エネルギープロファイルと拡散係数を、隠れマルコフモデルに基づいた新規手法を開発して、推定している。

B-1) 学術論文

K. OKAZAKI, D. WÖHLERT, J. WARNAU, H. JUNG, Ö. YILDIZ, W. KÜHLBRANDT and G. HUMMER, “Mechanism of the Electroneutral Sodium/Proton Antiporter PaNhaP from Transition-Path Shooting,” *Nat. Commun.* **10**, 1742 (10 pages) (2019). doi: 10.1038/s41467-019-09739-0

M. I. MAHMOOD, H. NOGUCHI and K. OKAZAKI, “Curvature Induction and Sensing of the F-BAR Protein Pacsin1 on Lipid Membranes via Molecular Dynamics Simulations,” *Sci. Rep.* **9**, 14557 (11 pages) (2019). doi: 10.1038/s41598-019-51202-z

B-3) 総説, 著書

中村彰彦, 岡崎圭一, 古田忠臣, 櫻井 実, 飯野亮太, 「キチン加水分解酵素は熱ゆらぎを利用して1方向に動きながら結晶性バイオマスを分解する」, *生物物理* **59(6)**, 330–333 (2019).

B-4) 招待講演

岡崎圭一, 「遷移パスサンプリングによる膜輸送タンパク質の基質輸送メカニズムの解明」, スーパーコンピュータワークショップ 2018, 岡崎市, 2019年1月.

K. OKAZAKI, A. NAKAMURA and R. IINO, “Dynamic energy landscape of a linear motor chitinase from single-particle tracking trajectories,” The 57th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Miyazaki (Japan), September 2019.

K. OKAZAKI, “Molecular simulation and modeling of functional dynamics in F₀F₁ ATP synthase,” 2nd Tokyo ATPase Workshop, The University of Tokyo, Tokyo, September 2019.

岡崎圭一, 「生体分子マシンにおける機能ダイナミクスの分子シミュレーション」, 第12回ChemBioハイブリッドレクチャー, 東京大学, 東京, 2019年10月.

B-6) 受賞, 表彰

岡崎圭一, 日本生物物理学会若手奨励賞 (2014).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

分子シミュレーションスクール世話人 (2016–2019).

日本生物物理学会分野別専門委員 (アロステリズム) (2017).

日本生物物理学会運営委員 (2010–2011).

その他

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

B-10) 競争的資金

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。本年は、トランスポーター Na^+/H^+ antiporter についてと F-BAR タンパク質 Pacsin1 についての論文をそれぞれ出版することができた。さらに、糖鎖分解型モーター・キチナーゼの1方向性運動モデル推定についても論文にまとめているところである。このようなメカニズム解明の研究と並行して、シミュレーションを用いた合理的デザインによるバイオセンサー開発も進めているところである。

6-5 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

M. MIZOGUCHI, Y. ZHANG, M. KUNIMI, A. TANAKA, S. TAKEDA, N. TAKEI, V. BHARTI, K. KOYASU, T. KISHIMOTO, D. JAKSCH, A. GLÄTZLE, M. KIFFNER, G. MASELLA, G. PUPILLO, M. WEIDEMÜLLER and K. OHMORI, “Ultrafast Creation of Overlapping Rydberg Electrons in an Atomic BEC and Mott-Insulator Lattice,” *arXiv* 1910.05292 (2019).

H. KATSUKI, Y. OHTSUKI, T. AJIKI, H. GOTO and K. OHMORI, “Engineering Quantum Wave-Packet Dispersion with a Strong Non-Resonant Femtosecond Laser Pulse,” *arXiv* 1910.08241 (2019).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

K. OHMORI, “Ultrafast many-body electron dynamics in an ultracold atomic BEC and Mott insulator lattice,” Topical Conference on Quantum Computing 2019 (TCQC2019), Kyoto Brighton Hotel, Kyoto (Japan), December 2019.*

K. OHMORI, Panel Discussion on Quantum Simulation, Topical Conference on Quantum Computing 2019 (TCQC2019), Kyoto Brighton Hotel, Kyoto (Japan), December 2019.*

K. OHMORI, “Ultrafast many-body electron dynamics in an ultracold atomic BEC and Mott insulator lattice,” Annual Conference Series “Frontiers in Synthetic Quantum Systems; 2019 Focus: Quantum Simulations in Optical Lattices and Beyond,” Tian-Ping Hotel, Shanghai (China), December 2019.*

大森賢治, 「量子力学に残された100年の謎に迫る」, 第123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(日本), 2019年12月.*

大森賢治, 「量子力学100年の謎と量子テクノロジー」, 自然科学研究機構 教育研究評議会, 東京(日本), 2019年11月.

K. OHMORI, “Ultrafast many-body electron dynamics in an ultracold atomic BEC and Mott insulator lattice,” The Conference “Quantum Computing in Near Term,” Programme on “Quantum Simulation—from Theory to Applications,” Erwin Schrödinger International Institute for Mathematics and Physics (ESI), Universität Wien, Vienna (Austria), October 2019.

K. OHMORI, “Japan’s quantum-technology policy and its international strategy,” The EU Quantum Flagship event: “Exploring and Making Quantum Technology,” Aalto University, Helsinki (Finland), October 2019.*

K. OHMORI, Panel Discussion: International Cooperation in Quantum Technology, The EU Quantum Flagship event: “Exploring and Making Quantum Technology,” Aalto University, Helsinki (Finland), October 2019.*

大森賢治,「アト秒・ナノメートル精度の超高速量子シミュレータの開発と量子コンピューティングへの応用」, JST 戦略的創造研究推進事業 新技術説明会 ～情報処理～, JST 東京本部別館, 東京 (日本), 2019年9月.*

K. OHMORI, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas,” The 14th Femtochemistry Conference, Jin Jiang Hotel, Shanghai (China), August 2019.*

K. OHMORI, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas,” P&A AMO Seminar, Rice University, Houston (USA), July 2019.

K. OHMORI, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas,” TSRC Workshop “Quantum Dynamics and Spectroscopy in Condensed-Phase Materials and Bio-Systems,” Telluride Science Research Center (TSRC), Telluride (USA), June 2019.

K. OHMORI, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas,” International Symposium: Highly-excited States and Non-covalent Interactions, The University of Manchester, Manchester (U.K.), June 2019.*

K. OHMORI, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas,” The 4th International Workshop on Rydberg Atoms and Molecules, Hangzhou (China), June 2019.*

K. OHMORI, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas,” IAS Workshop “Quantum Simulation of Novel Phenomena with Ultracold Atoms,” The Hong Kong University of Science and Technology, Hong Kong (China), May 2019.

大森賢治,「量子シミュレーションの国内外の動向と展望」, JST CRDS, JST 東京本部別館, 東京 (日本), 2019年4月.

大森賢治,「量子シミュレーションの国内外の動向と課題」, 日本物理学会 第74回年次大会シンポジウム「量子シミュレーションの最前線: 極低温粒子系から探る宇宙・ハドロン・物性物理」, 九州大学, 福岡 (日本), 2019年3月.*

大森賢治,「量子力学に残された100年の謎に迫る」, 経団連 第1回産学連携セミナー, 経団連会館, 東京 (日本), 2019年2月.

溝口道栄,「極低温ボース-アインシュタイン凝縮体の超高速リユードベリ励起」, 岐阜大学, 岐阜市 (日本), 2019年9月.

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).

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).

European Research Council (ERC), Invited Panel Evaluator (2007).

European Research Council (ERC), Invited Expert Referee (2007–).

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).

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

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

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

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

ゴードン会議 (Gordon Research Conference: GRC) “Quantum Control of Light and Matter,” 2019 副議長, 2021 議長 (2017–).

ゴードン会議 (Gordon Research Conference: GRC) 評議会メンバー (2019–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

内閣府 量子技術イノベーション戦略・ロードマップ検討グループメンバー (2019–).

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).

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

長い伝統と世界的な権威を誇る米国のゴードン会議 (Gordon Research Conference: GRC) の副議長 (2019), 議長 (2021), 評議会メンバー (2019-) として分子研の国際的な認知度の向上に貢献.

第 123 回分子科学フォーラム (2019 年 12 月 13 日, 岡崎コンファレンスセンター 大隈ホール) において, およそ 200 名の超満員 (立ち見多数) の聴衆の前で「量子力学に残された 100 年の謎に迫る」と題した一般公開講演を行い, 市民への分子研の研究力アピールに貢献.

内閣府および文部科学省からの依頼で, 内閣府 量子技術イノベーション戦略のロードマップ策定を担当 (2019-).

内閣府および文部科学省からの依頼で, 量子テクノロジーに関する日欧 2 者間会議の議長として日欧の今後の協力体制の構築に貢献 (2019 年 12 月 17 日, 京都プライトンホテル).

日本政府代表 (内閣府および文部科学省) として EU 量子フラッグシップ全体会議 (2019 年 10 月, ヘルシンキ) に招かれ, 招待講演・パネルディスカッションを通じて量子テクノロジー分野における日米欧の今後の協力体制の構築に貢献.

文部科学省 科学技術学術審議会 量子科学技術委員会の主査代理・専門委員として, 量子テクノロジー開発および量子ビーム (放射光施設・大型レーザー施設) 利用推進に関する政策検討に貢献.

JST CRDS からの依頼で, 量子シミュレーションの国内外の動向と展望に関するレクチャー (2019 年 4 月 22 日, JST 東京本部別館) を行い, 内閣府 量子技術イノベーション戦略の戦略プロポーザルの提案に貢献.

分子研 国際諮問委員会において文科省 Q-LEAP プログラムにおける超高速量子シミュレータ開発に関するプレゼンを行うとともに諮問委員のラポッターに対応し, 分子研の研究力アピールに貢献.

自然科学研究機構 教育研究評議会 (2019 年 11 月 28 日, 自然科学研究機構 本部) において「量子力学 100 年の謎と量子テクノロジー」に関する講演を行い, 分子研の研究力アピールに貢献.

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 A. 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.

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

Heidelberg University, 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かけ研究(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).

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

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単位接合機構の研究
- 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。2019年より新型運動量分解光電子顕微鏡の開発をUVSOR 施設の中期計画として進める。
- 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。有機単結晶ヘテロ界面の成膜に成功し，エネルギー分散関係の検出に成功した。温度依存測定による準粒子評価を進めている。
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，準粒子描像に基づいた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単位形成までを統括検討し，エネルギー単位接合機構の解明を目指している。数値解析による定量評価を実施した。
- 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。UVSOR 施設における新型運動量分解光電子顕微鏡の利用が不可欠である。

- 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。国際共同による二次元検出器を利用したフォノン分散実験を開始した。
- 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。プローブ顕微鏡実験を共同研究で推進し、構造と電子状態の相関研究を開始した。
- 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

H. YAMANE, F. MATSUI, T. UEBA, T. HORIGOME, S. MAKITA, K. TANAKA, S. KERA and N. KOSUGI, “Acceptance-Cone-Tunable Electron Spectrometer for Highly-Efficient Constant Energy Mapping,” *Rev. Sci. Instrum.* **90**, 093102 (7 pages) (2019).

R. NEMOTO, P. KRUEGER, A. HARTINI, T. HOSOKAI, M. HORIE, S. KERA and T. YAMADA, “Well-Ordered Monolayer Growth of Crown-Ether Ring Molecules on Cu(111) in Ultra-High Vacuum: A STM, UPS, and DFT Study,” *J. Phys. Chem. C* **123**, 18939–18950 (2019).

R. SCHLESINGER, F. BUSSOLOTTI, J. YANG, S. SADOFEV, A. VOLLMER, S. BLUMSTENGEL, S. KERA, N. UENO and N. KOCH, “Gap States Induce Soft Fermi Level Pinning upon Charge Transfer at ZnO/Molecular Acceptor Interfaces,” *Phys. Rev. Mater.* **3**, 074601 (8 pages) (2019).

S. PARK, T. SCHULTZ, A. HAN, A. ALJARB, X. XU, P. BEYER, A. OPITZ, R. OVSYANNIKOV, L.-J. LI, M. MEISSNER, T. YAMAGUCHI, S. KERA, P. AMSALEM and N. KOCH, “Electronic Band Dispersion Determination in Azimuthally Disordered Transition-Metal Dichalcogenide Monolayers,” *Commun. Phys.* **2**, 68 (6 pages) (2019).

T. KIRCHHUEBEL, O. L. A. MONTI, T. MUNAKATA, S. KERA, R. FORKER and T. FRITZ, “The Role of Initial and Final States in Molecular Spectroscopies,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 12730–12747 (2019).

Y. NAKAYAMA, R. TSURUTA, N. MORIYA, M. HIKASA, M. MEISSNER, T. YAMAGUCHI, Y. MIZUNO, T. SUZUKI, T. KOGANEZAWA, T. HOSOKAI, T. UEBA and S. KERA, “Widely Dispersed Intermolecular Valence Bands of Epitaxially Grown Perfluoropentacene on Pentacene Single Crystals,” *J. Phys. Chem. Lett.* **10**, 1312–1318 (2019). (*Front Cover selected*)

M. SCHWARZE, C. GAUL, R. SCHOL, F. BUSSOLOTTI, A. HOFACKER, K. S. SCHELLHAMMER, B. NELLI, B. D. NAAB, Z. BAO, D. SPOLTRE, K. VANDEWAL, J. WIDMER, S. KERA, N. UENO, F. ORTMANN and K. LEO, “Molecular Parameters Responsible for Thermally Activated Transport in Doped Organic Semiconductors,” *Nat. Mater.* **18**, 242–248 (2019).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

S. KERA, "Energy and spatial distribution of frontier orbital state for organic thin films," 2nd International Conference on Materials Research and Innovation (ICMARI), Bangkok (Thailand), December 2019.

S. KERA, "A perspective of frontier orbital state for weakly bound molecules on the surface," 25th Users' Meeting & Workshops at NSRRC; Workshop II: Scientific Opportunities of Soft X-Ray/VUV Nano-Spectroscopy & Nano-Imaging at TPS, Hsinchu (Taiwan), September 2019.

S. KERA, "Photoelectron spectroscopy of semiconducting organic molecules," 18th European Conference on Applications of Surface and interface Analysis (ECASIA), Dresden (Germany), September 2019.* [Keynote]

S. KERA, "Evolution of π orbital state upon assembling the molecules on the surface," 14th International Symposium on Functional π -Electron Systems (F π 14), Berlin (Germany), June 2019.

S. KERA, "Imaging electron delocalization upon assembling the molecules," 1st international workshop on momentum microscopy and spectroscopy, Okazaki, February 2019.

S. KERA, "Electronic band dispersion of perovskite single crystal: MAPbI₃," International Workshop on Organic Semiconductors and Related Materials, Chiba, January 2019.

解良 聡, 「有機半導体の輸送電荷の特徴: 光電子分光法による電子状態測定から」, 第4回固体化学フォーラム, 岡崎, 2019年6月.

解良 聡, 「有機半導体分子の電子状態の特徴とその局在性の変遷」, 日本学術振興会マイクロビームアナリシス第141委員会第176回研究会, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2019年5月.

解良 聡, 「分子集合体における電子局在性」, 第17回SPRING-8 ユーザー協同体顕微ナノ材料科学研究会・第14回日本表面真空学会放射光表面化学研究部会・第3回日本表面真空学会プローブ顕微鏡研究部会合同シンポジウム, つくば, 2019年3月.

解良 聡, 「光電子分光法による有機半導体の物性・機能評価」, 第13回応化談話会節分サロン, 東大, 東京, 2019年2月.

解良 聡, 「有機半導体結晶における電子格子相互作用」, 第32回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 福岡国際会議場, 福岡, 2019年1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 17th Japan-Korea Molecular Science Symposium, Chair (Nagoya 2019).

第32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会委員長, 同実行委員会副委員長 (2019).

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

京都大学大学院理学研究科, 客員教授, 「化学特別講義」, 2019 年

広島大学大学院理学研究科, 客員教授, 「放射光科学特論 II」, 2019 年.

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–2019 年.

蘇州大学, 客員教授, 2014 年 4 月–2019 年.

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DEM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-).
科研費国際共同研究加速基金(国際共同研究強化(B)),「光電子波数顕微鏡法で切り拓くナノスピン・オービトロニクス」,解良 聡(2019年-).

C) 研究活動の課題と展望

機能性分子に代表される弱相互作用物質系の高配向試料作製法と精密電子状態計測で蓄積したノウハウを集結し,集合体における「電子の真の姿を見出すこと」でその機能・物性の根源を理解することを主眼として進めている。シンクロトロン放射光を利用した各先端分光法(角度分解光電子分光法,共鳴光電子分光法,軟X線吸収分光法,X線定在波分光法など),高感度紫外光電子分光法,気相光電子分光法,レーザー励起二光子光電子分光法,低エネルギー逆光電子分光法,スポット分析型低速電子線回折法を用いた実験を進めている。今年度はメンバーが総替わりし,新たに博士研究員2名による新体制でスタートした。継続的な国際共同研究により研究成果の発信力を維持した。次年度は助教の確保が責務である。一方,UVSOR放射光施設の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している。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軸として,運動量分解光電子顕微鏡(Momentum Microscope)装置を導入する。装置導入において,欧米からの遅れを取り戻すべく基本設計に独自性を含めるため,開発メーカーとの議論を進めてきた。またドイツの装置開発拠点であるユーリッヒ研究所との学術協定を締結し,装置開発とその利用展開についての共同研究を推進することで同意した。予算的な支援として国際共同研究加速基金(B)の獲得に成功した。次年度は本装置の利用を推進するが,有機固体系のオールジャパン体制(実験班,理論班)を構築し,戦略的に新奇実験を牽引する。国内の量子ビーム関連施設の将来計画が随所で俄かに動きだし,UVSOR施設についても次世代施設UVSOR-IVの計画立案に奔走した。次年度は具体的な予算獲得の方策を検討する段階に移行する。

長坂将成(助教)(2007年4月1日着任)

A-1) 専門領域：物理化学, 軟X線分光学

A-2) 研究課題：

- a) 軟X線吸収分光法による液体の局所構造解析
- b) 低エネルギー領域の軟X線吸収分光測定のための検出器の開発
- c) 電極固液界面の局所構造解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 1 keV 以下の軟X線領域には化学研究に重要な C, N, O の K 吸収端や遷移金属 (Mn, Fe など) の L 吸収端が存在するため, 液体の局所構造を元素選択的に調べられる有望な光領域である。しかしながら, 軟X線の液体による吸収が大きく, 液体層を 1 μm 以下にしなければ軟X線吸収分光 (XAS) 測定が不可能であった。我々は液体層の厚さを 20 nm ~ 2000 nm の範囲で調整できる透過型液体セルを独自に開発して, 液体試料の XAS 測定に成功した。更に, 量子化学に基づく内殻励起計算の結果と, XAS によるピークシフトを比較することで, 異なる元素ごとに液中の分子間相互作用を調べる手法を確立した。本年度は微小不均一性を示すアセトニトリル水溶液の XAS 測定を行い, 水とアセトニトリルの双極子相互作用により, アセトニトリルのクラスターが生成することで, 中間の濃度領域で微小不均一性が現れることを明らかにした。
- b) 200 eV 以下の低エネルギー領域には, Li-K, B-K, P-L, S-L 吸収端があるため重要であるが, 回折格子により分光された一次光の透過率が非常に小さく, 高次光に埋もれてしまうため, XAS 測定は困難であった。そこで, 試料を透過した軟X線を金基板に照射して, 放出される Au 4f 光電子の運動エネルギー分析により, 一次光由来の光電子強度だけを収量する新しいタイプの検出器を開発した。
- c) Au(111) 電極上の水の局所構造を調べるために, 蛍光収量型の電気化学セルを開発した。これにより, 異なる電位における水の構造変化と, 電極表面での酸化物形成を, O-K 吸収端 XAS 測定から調べた。

B-1) 学術論文

M. NAGASAKA, H. YUZAWA, N. TAKADA, M. AOYAMA, E. RÜHL and N. KOSUGI, “Laminar Flow in Microfluidics Investigated by Spatially-Resolved Soft X-Ray Absorption and Infrared Spectroscopy,” *J. Chem. Phys.* **151**, 114201 (7 pages) (2019).
J. REN, D. S. ACHILLEOS, R. GOLNAK, H. YUZAWA, J. XIAO, M. NAGASAKA, E. REISNER and T. PETIT, “Uncovering the Charge Transfer between Carbon Dots and Water by In Situ Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. Lett.* **10**, 3843–3848 (2019).

B-4) 招待講演

M. NAGASAKA, “Soft X-Ray Absorption Spectroscopy of Liquid for Understanding Chemical Processes in Solution,” Japan-Korea Molecular Science Symposium “Advances in Materials and Molecular Sciences,” Nagoya (Japan), July 2019.
長坂将成, 「軟X線 XAFS の使いどころ: 何が観えて何が解かるのか」, 日本化学会第 99 春季年会特別企画講演「化学者のための放射光ことはじめ——XAFS 構造解析の基礎と先端応用」, 甲南大学, 兵庫, 神戸, 2019 年 3 月。
長坂将成, 「軟X線 XAFS による溶液反応のその場観測」, 電磁波励起反応場第 188 委員会 2019 年度第 1 回ワークショップ「マイクロ波「その場」観察の新展開」, 東京工業大学大岡山キャンパス, 東京, 2019 年 5 月。

長坂将成,「液体の軟X線吸収分光測定の実状と今後の展望」,第25回HiSOR研究会「小型放射光リングによる多彩な量子ビームの発生と応用」,広島大学,広島,東広島,2019年10月.

長坂将成,「軟X線吸収分光法による溶液反応のオペランド観測」,日本表面真空学会放射光表面科学研究部会「放射光を利用したオペランド表面界面観測の最先端:構造から機能・反応へ」,つくば国際会議場,茨城,つくば,2019年10月.

B-6) 受賞,表彰

長坂将成,第25回井上研究奨励賞(2009).

長坂将成,第4回分子科学会優秀講演賞(2010).

長坂将成,第18回日本放射光学会奨励賞(2014).

長坂将成,平成27年度電気化学会論文賞(共同受賞)(2015).

長坂将成,分子科学研究奨励森野基金(2016).

長坂将成,日本化学会第31回若い世代の特別講演会特別講演証(2017).

長坂将成,第10回分子科学会奨励賞(2017).

長坂将成,自然科学研究機構若手研究者賞(2019).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会行事委員(2013–2015,2017–2019).

学会の組織委員等

第14回XAFS討論会プログラム委員(2011),実行委員(2011).

日本放射光学会第7回若手研究会共同世話人(2014).

International Workshop on Trends in Advanced Spectroscopy in Materials Science (TASPEC), Organizing Committee (2018).

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(スタートアップ),「共鳴X線光電子分光法による分子クラスターの電子状態の解明」,長坂将成(2007年–2008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).

住友財団基礎科学研究助成,「下部臨界温度を持つ溶液の局所構造解析とその起源の解明」,長坂将成(2014年–2015年).

光科学技術研究振興財団研究助成,「軟X線吸収分光法による電極固液界面の紫外光励起過程の解明」,長坂将成(2015年–2016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).

旭硝子財団研究奨励(第1分野),「オペランド軟X線吸収分光法による電気二重層の局所構造変化の解明」,長坂将成(2017年–2018年).

自然科学研究機構新分野創成センター先端光科学研究分野プロジェクト,「軟X線吸収分光法による光化学系IIタンパク質の酸素発生中心の構造解析」,長坂将成(2018年,2019年).

科研費基盤研究(B),「超高速軟X線吸収分光法による光化学系IIタンパク質の光合成反応の機構解明」,長坂将成(2019年–2021年).

公益財団法人村田学術振興財団研究助成,「軟X線吸収分光法によるリチウムイオン電池のオペランド測定」,長坂将成(2019年–2020年).

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～2019年3月31日)*
(特任教授) (2019年4月1日着任)

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。
- d) 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。
- e) 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。
- f) アンジュレータ放射光の時間構造に着目した研究に原子分子物理学研究者と共同で取り組み, 2連のアンジュレータからの自然放射を用いた孤立原子の量子状態制御に世界で初めて成功した。

B-1) 学術論文

L. GUO and M. KATOH, "pn-Type Substrate Dependence of CsK₂Sb Photocathode Performance," *Phys. Rev. Accel. Beams* **22**, 033401 (6 pages) (2019).

H. ZEN, H. OHGAKI, Y. TAIRA, T. HAYAKAWA, T. SHIZUMA, I. DAITO, J.-I. YAMAZAKI, T. KII, H. TOYOKAWA and M. KATOH, “Demonstration of Tomographic Imaging of Isotope Distribution by Nuclear Resonance Fluorescence,” *AIP Adv.* **9**, 035101 (7 pages) (2019).

H. KAWAGUCHI and M. KATOH, “Orbital Angular Momentum of Liénard–Wiechert Fields,” *Prog. Theor. Exp. Phys.* **2019**, 083A02 (18 pages) (2019).

Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA and M. KATOH, “Coherent Control in the Extreme Ultraviolet and Attosecond Regime by Synchrotron Radiation,” *Nat. Commun.* **10**, 4988 (5 pages) (2019).

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA and M. KATOH, “Controlling the Orbital Alignment in Atoms Using Cross-Circularly Polarized Extreme Ultraviolet Wave Packets,” *Phys. Rev. Lett.* **123**, 233401 (5 pages) (2019).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. KATOH, “Optical Vortex Emitted from Free Electrons in Nature,” *SPIE Proc. 11099, Light in Nature VII*, 1109903 (2019).

B-4) 招待講演

M. KATOH, “Spatial Structure of Radiation from Relativistic Electrons,” The 38th JSST Annual International Conference on Simulation Technology, Miyazaki (Japan), November 2019.

M. KATOH, “Structured light beams from synchrotron,” International Conference on Materials and Systems for Sustainability 2019, Nagoya (Japan), November 2019.

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).

高嶋圭史, 保坂将人, 山本尚人, 加藤政博, 竹田美和, 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, 2019–).

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tron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tron放射による真空紫外コヒーレント光渦ビームの発生」, 加藤政博(2014年–2016年).
科研費基盤研究(A), 「渦放射光発生技術の高度化と利用への展開」, 加藤政博(2017年–).

C) 研究活動の課題と展望

UVSORは2000年以降の高度化により, 既に低エネルギーのシンクロtron光源としては世界的にも最高レベルの性能に到達した。この光源性能を100%引き出すための安定性の向上を目指し, パルス六極磁石による高度な入射方式の開発やビーム不安定性抑制法の開発を名古屋大学と協力し継続している。また老朽化対策や将来計画に関する検討にも積極的に取り組む。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と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tron光センター, 富山大学などと協力し継続して進める。二連アンジュレータを用いた孤立原子系の量子状態制御は今後幅広い波長域へ展開できる可能性があり, 外部資金の獲得にも努め, 引き続き世界を先導する研究に注力する。

*) 2019年4月1日広島大学放射光科学センター教授

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，電子分光計測技術，放射光科学

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 オリジナルの Momentum Microscope (MM) 導入計画推進を主務とする。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を実現した。②他方、受け入れ予定の BL6U で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を完成させ、これを利用した成果が国際学会での招待講演に繋がった。③並行して全天球エネルギー・スピン分析器を考案、特許出願し開発中である。①は価電子帯光電子分光用の high-end 型、②は汎用型の波数分解光電子分光装置、③は内殻光電子ホログラフィー用の角度・スピン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。また、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。共鳴 Auger 電子スペクトルに価電子帯分散があらわれる現象の発見は重要であり国際学会で招待講演の内容となった。②光エネルギー可変性を活かし k_z 分散測定や偏光特性を活かした原子軌道波動関数解析の知見は BL6U での共同研究推進の基盤となっている。
- c) 光電子回折・分光を用いて Mo_4O_{11} や層状物質など低次元物質の電子構造相転移の研究している。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。試料作製・物性評価グループとの共同研究を進め、アルカリ金属ドーブ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た。

B-1) 学術論文

F. MATSUI, S. MAKITA, H. MATSUDA, T. OHIGASHI, H. YAMANE and N. KOSUGI, "Identification of Twinning-Induced Edges on the Cleaved Graphite Crystal Surface," *J. Phys. Soc. Jpn.* **88, 114704 (3 pages) (2019).**

F. MATSUI, K. YASUDA, N. MAEJIMA, H. MATSUI, T. MATSUSHITA and H. DAIMON, “Chemical and Magnetic Properties of Polycrystalline Iron Surface Revealed by Auger Electron Holography, Spectroscopy, and Microscopy,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **58**, 110602 (8 pages) (2019).

T. KINOSHITA, T. MURO, T. MATSUSHITA, H. OSAWA, T. OHKOCHI, F. MATSUI, H. MATSUDA, M. SHIMOMURA, M. TAGUCHI and H. DAIMON, “Progress in Photoelectron Holography at SPring-8,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **58**, 110503 (11 pages) (2019).

D. Y. USACHOV, A. V. TARASOV, F. MATSUI, M. MUNTWILER, K. A. BOKAI, V. O. SHEVELEV, O. Y. VILKOV, M. V. KUZNETSOV, L. V. YASHINA, C. LAUBSCHAT, A. COSSARO, L. FLOREANO, A. VERDINI and D. V. VYALIKH, “Decoding the Structure of Interfaces and Impurities in 2D Materials by Photoelectron Holography,” *2D Materials* **6**, 045046 (2019).

E. UESUGI, T. UCHIYAMA, H. GOTO, H. OTA, T. UENO, H. FUJIWARA, K. TERASHIMA, T. YOKOYA, F. MATSUI, J. AKIMITSU, K. KOBAYASHI and Y. KUBOZONO, “Fermi Level Tuning of Ag-Doped Bi₂Se₃ Topological Insulator,” *Sci. Rep.* **9**, 5376 (8 pages) (2019).

H. YAMANE, F. MATSUI, T. UEBA, T. HORIGOME, S. MAKITA, K. TANAKA, S. KERA and N. KOSUGI, “Acceptance-Cone-Tunable Electron Spectrometer for Highly-Efficient Constant Energy Mapping,” *Rev. Sci. Instrum.* **90**, 093102 (7 pages) (2019).

M. TAGUCHI, F. MATSUI, N. MAEJIMA, H. MATSUI and H. DAIMON, “Disorder and Mixed Valence Properties of Sr₂FeMoO₆ Studied by Photoelectron Diffraction and X-Ray Absorption Spectroscopy,” *Surf. Sci.* **684**, 53–56 (2019).

T. GREBER, A. P. SEITSONEN, A. HEMMI, J. DREISER, R. STANIA, F. MATSUI, M. MUNTWILER, A. A. POPOV and R. WESTERSTRÖM, “Circular Dichroism and Angular Deviation in X-Ray Absorption Spectra of Dy₂ScN@C₈₀ Single-Molecule Magnets on *h*-BN/Rh(111),” *Phys. Rev. Mater.* **3**, 014409 (5 pages) (2019).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. FUJITA, H. OTA, T. MATSUSHITA, T. MURO, Y. SENBA and F. MATSUI, “Mapping Nanometer and Micrometer-Scale Structures at Graphite Surface by Photoelectron Diffraction,” *Surf. Interface Anal.* **51**, 74–78 (2019).

Y. HASHIMOTO, M. TAGUCHI, S. FUKAMI, H. MOMONO, T. MATSUSHITA, H. MATSUDA, F. MATSUI and H. DAIMON, “Site-Sensitive X-Ray Photoelectron Spectroscopy of Fe₃O₄ by Photoelectron Diffraction,” *Surf. Interface Anal.* **51**, 115–119 (2019).

B-3) 総説, 著書

R. EGUCHI and F. MATSUI, “Graphite and Intercalated Compound Superconductors: Atomic and Electronic Structures,” in *Physics and Chemistry of Carbon-Based Materials: Basis and Applications*, Y. Kubozono, Ed., Springer Nature; Singapore Pte Ltd., Chapter 1, pp. 1–28 (2019).

B-4) 招待講演

F. MATSUI, “Resonant Auger electron diffraction and resonant photoelectron spectroscopy,” ALC’19, Kyoto (Japan), October 2019.

B-5) 特許出願

特願 2019-190516, 「球面収差調整カソードレンズ, 球面収差補正静電型レンズ, 電子分光装置, 及び光電子顕微鏡」, 松田博之, 松井文彦(自然科学研究機構), 2019年.

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-).

12th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices '19 出版委員 (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).

科研費国際共同研究加速基金(国際共同研究強化(B)), 「光電子波数顕微鏡法で切り拓くナノスピン・オービトロニクス」(代表: 解良 聡), 松井文彦(研究分担者) (2019年-2022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) リチウム K 吸収端 (~55 eV) の高分解能吸収分光の実現に向けて、高次光フィルター機能を備えた高効率の集光光学素子 (Fresnel zone plate) の開発を行なった。これを用いた光学系の評価を行なった結果、エネルギー分解能 ($E/\Delta E$) は約 1,700 で、空間分可能 83 nm であることが判った。これを用いてリチウムイオン電池電極を FIB 加工した試料に分布する、リチウムの化学状態分析を行なった。
- b) JAMSTEC 高知コア研, 極地研究所, SPring-8, JAXA, そして分子研の5機関での分析機器において、試料の大気非暴露条件下を維持したまま分析を行うことのできる“施設間横断型分析システム”の構築を行い、これを用いて大気非暴露条件下でリチウムイオン電池の観察を行なった。ここで得られた成果は論文として、現在投稿中である。

B-1) 学術論文

K. SHINOHARA, S. TONE, T. EJIMA, T. OHIGASHI and A. ITO, “Quantitative Distribution of DNA, RNA, Histone and Proteins Other than Histone in Mammalian Cells, Nuclei and a Chromosome at High Resolution Observed by Scanning Transmission Soft X-Ray Microscopy (STXM),” *Cells* **8**, 164 (20 pages) (2019).

M. Y. ISMAIL, M. PATANEN, J. A. SIRVIO, M. VISANKO, T. OHIGASHI, N. KOSUGI, M. HUTTULA and H. LIIMATAINEN, “Hybrid Films of Cellulose Nanofibrils, Chitosan and Nanosilica—Structural, Thermal, Optical, and Mechanical Properties,” *Carbohydr. Polym.* **218**, 87–94 (2019).

F. MATSUI, S. MAKITA, H. MATSUDA, T. OHIGASHI, H. YAMANE and N. KOSUGI, “Identification of Twinning-Induced Edges on the Cleaved Graphite Crystal Surface,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 114704 (3 pages) (2019).

B-4) 招待講演

T. OHIGASHI, “Development of in-situ sample cells for scanning transmission X-ray microscopy,” The 23rd International Annual Symposium on Computational Science and Engineering, Cheng Mai (Thailand), June 2019.

T. OHIGASHI, “Recent Status and Developments of a Scanning Transmission X-Ray Microscopy Beamline in UVSOR-III Synchrotron,” 25th NSRRC User’s Meeting and Workshop, Hsinchu (Taiwan), September 2019.

T. OHIGASHI, “Recent developments and researches by using scanning transmission X-ray microscopy in UVSOR synchrotron,” 7th International Conference of Sabaragamuwa University of Sri Lanka, Belihuloya (Sri Lanka), November 2019.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

SpectroNanoscropy 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 (2018-2019).

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

出前授業「X線で見える小さな世界～塗り薬からはやぶさ2まで～」岡崎市立常盤中学校 (2019).

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-).

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) μ フォーカス角度分解光電子分光と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、鉄系高温超伝導体 $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ の角度分解光電子分光測定を行った。近年新しく報告され注目を集めている C_4 相の組成においてのみ、特異な超伝導ギャップを観測した。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ほぼ完全に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、中性子散乱で C_4 相においてのみ観測されている異常な振る舞いが、フェルミ面間のネスティングを考慮することで説明できることが判明した。
- b) ビームラインとエンドステーションの全面的な更新を行っていた UVSOR 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、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 $400 \text{ (H)} \times 120 \text{ (V)} \mu\text{m}$ から $23 \text{ (H)} \times 40 \text{ (V)} \mu\text{m}$ に集光することに成功している。今年度は試料を動かすことなく電子状態の運動量空間依存性を測定できるディフレクターの開発が終了し、BL5U で利用できるすべての励起光エネルギー・レンズモードにおいて、ディフレクターの使用が可能となった。さらに試料位置のモーター制御と連動した光電子取得ソフトウェアを開発・実装し、光電子強度の空間依存性をマッピングできるようになった。この開発により微細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、これまで試料を 12 K までしか冷却することができなかったため、その性能を十分に生かすことができていなかったが、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。現在さらなる低温化を目指して、ソフトウェアによる熱伝導解析を行っている。

B-1) 学術論文

T. ADACHI, S. IDETA, Z. TIN, H. USUI, K. TANAKA, S. MIYASAKA and S. TAJIMA, “Electronic Structure of $\text{Sr}_{1-y}\text{Ca}_y\text{Fe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ ($x = 0.25, y = 0.08$) Revealed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 084701 (8 pages) (2019).

Y. OHTSUBO, Y. YAMASHITA, K. HAGIWARA, S. IDETA, K. TANAKA, R. YUKAWA, K. HORIBA, H. KUMIGASHIRA, K. MIYAMOTO, T. OKUDA, W. HIRANO, F. IGA and S. KIMURA, “Non-Trivial Surface States of Samarium Hexaboride at the (111) Surface,” *Nat. Commun.* **10**, 2298 (7 pages) (2019).

S. YAMANAKA, K. TONAMI, M. IWASHITA, K. YOSHIDA, R. TAKEUCHI, S. IDETA, K. TANAKA, K. MASE, K. YAMADA, H. YOSHIDA and Y. NAKAYAMA, “High Sensitivity Detection of the Frontier Electronic States of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ Single Crystals by Low Energy Excitation,” *Appl. Phys. Express* **12**, 051009 (5 pages) (2019).

K. TANAKA, N. HIEU, G. VINCINI, T. MASUI, S. MIYASAKA, S. TAJIMA and T. SASAGAWA, “Quantitative Comparison between Electronic Raman Scattering and Angle-Resolved Photoemission Spectra in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ Superconductors: Doping Dependence of Nodal and Antinodal Superconducting Gaps,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 044710 (6 pages) (2019).

H. SHIONO, S. ISHIHARA, K. MIMURA, H. SATO, E. SCHWIER, K. SHIMADA, M. TANIGUCHI, S. IDETA, K. TANAKA, T. ZHUANG, K. MATSUMOTO, K. HIRAOKA and H. ANZAI, “Temperature Dependence of the Kondo Resonance Peak in Photoemission Spectra of YbCdCu_4 ,” *AIP Conf. Proc.* **2054**, 040013 (4 pages) (2019).

B-4) 招待講演

田中清尚, 「UVSORにおける高温超伝導体の超伝導ギャップ測定, 先端磁気分光と理論計算の融合研究: 『界面多極子相互作用』が拓く新しい学理」, 東京, 2019年6月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

日本放射光学会プログラム副委員長 (2019).

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・スピンストライブ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。今年度は角度分解光電子分光装置の電子レンズ部(ディフレクター)の開発が完了し、昨年度導入した μ フォーカスビームと合わせることで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）

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) 液晶相物質の in situ 透過型軟X線吸収分光法の開発
- b) X線自由電子レーザーを用いた時間分解・透過型軟X線吸収分光法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 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。水などの液相のX線吸収スペクトル計測を可能にした UVSOR BL3U の液体セルを用いて，in situ 液晶相での液晶分子を対象に透過型X線吸収スペクトル計測を行っている。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 (5cb) を用いた。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 °C, 35 °C 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。

固相・液晶相・液体相でX線吸収スペクトルのピークシフトが観測されたが，このエネルギーシフトから局所的な液晶分子周辺の弱い相互作用による電子状態の変化を理解するためには，高精度な理論計算と比較する必要がある。内殻空孔状態を計算することができるソフトウェア Stobe を導入し，量子化学計算を行えるよう環境を整え，スペクトルのピークアライメントを行った。

ベンゼン環由来の C 1s→ π^* に対応するピークの温度変化に着目すると，固相から液晶相相転にともない高エネルギーシフトしていることが明らかになった。ベンゼン分子の先行研究例によると，このエネルギーシフトは分子間のベンゼン環間の π - π 相互作用が弱くなっていることに相当する。観測された高エネルギーシフトは固相から液晶相になり分子位置の秩序を失い，分子間の相互作用が弱くなったためと考えられる。

- b) X線自由電子レーザー SACLA BL1 を利用した液体試料用の pump-probe 法による時間分解・透過型軟X線吸収分光器の開発を提案し，2019年度 SACLA 基盤開発プログラムに採択され研究を進めている。化学反応の多くは溶液内で起こり，また光合成をはじめとした光化学反応また生命現象は細胞液内でおこることを考えると，固相・気相に加え液相を研究対象に加えることは重要である。特に，軟X線領域は生命において重要な炭素，窒素，酸素元素の K 殻吸収端を含む。SACLA BL1 の利用可能な基本波（1次光）の光エネルギーは約 40 ~ 120 eV であり，これまで軟X線吸収分光は難しいと思われていたが，我々は5次光，すなわち 600 eV までレーザー発振していることを気体試料 Ar(2p) および CO₂(Cl_{1s}, O_{1s}) の透過型X線吸収スペクトルにより明らかにし，本 BL にて透過型軟X線吸収分光法が可能であることを示した。

B-1) 学術論文

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA and M. KATOH, “Controlling the Orbital Alignment in Atoms Using Cross-Circularly Polarized Extreme Ultraviolet Wave Packets,” *Phys. Rev. Lett.* **123**, 233401 (5 pages) (2019).

Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA and M. KATOH, “Coherent Control in the Extreme Ultraviolet and Attosecond Regime by Synchrotron Radiation,” *Nat. Commun.* **10**, 4988 (5 pages) (2019).

H. FUKUZAWA, R. R. LUCCHESI, X. J. LIU, K. SAKAI, H. IWAYAMA, K. NAGAYA, K. KREIDI, J. R. HARRIES, Y. TAMENORI, Y. MORISHITA, I. H. SUZUKI, N. SAITO and K. UEDA, “Probing Molecular Bond-Length Using Molecular-Frame Photoelectron Angular Distributions,” *J. Chem. Phys.* **150**, 174306 (5 pages) (2019).

H. IWAYAMA and J. R. HARRIES, “Resonant-Auger-State-Selected Dissociation Dynamics and Dissociation Limits of N 1s \rightarrow π^* Core Excited N₂ Molecules Studied Using a Two-Dimensional Auger-Electron-Photoion Coincidence Method,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **232**, 40–44 (2019).

K. FUCHIZAKI, T. SAKAGAMI and H. IWAYAMA, “Pressure-Induced Local Symmetry Breaking upon Liquid–Liquid Transition of GeI₄ and SnI₄,” *J. Chem. Phys.* **150**, 114501 (11 pages) (2019).

J. R. HARRIES, H. IWAYAMA, S. KUMA, M. IIZAWA, N. SUZUKI, Y. AZUMA, I. INOUE, S. OWADA, T. TOGASHI, K. TONO, M. YABSHI and E. SHIGEMASA, “Superfluorescence, Free-Induction Decay, and Four-Wave Mixing: Propagation of Free-Electron Laser Pulses through a Dense Sample of Helium Ions,” *Phys. Rev. Lett.* **121**, 263201 (5 pages) (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).

第 32 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 (2019).

日本物理学会領域1運営委員(原子・分子分科) (2018–2019).

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).

6-6 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。2019年も引き続き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。2019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、X線自由電子レーザー SACLA を用いて、磁性薄膜の元素選択スピンドYNAMIXの研究を推進した。さらに、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も継続的に進めており、2019年は国際共同研究も実施した。

B-1) 学術論文

Y. WAKISAKA, D. KIDO, H. UEHARA, Q. YUAN, F. E. FEITEN, S. MUKAI, S. TAKAKUSAGI, Y. UEMURA, T. YOKOYAMA, T. WADA, M. UO, O. SEKIZAWA, T. URUGA, Y. IWASAWA and K. ASAKURA, “Development of Surface Fluorescence X-Ray Absorption Fine Structure Spectroscopy Using a Laue-Type Monochromator,” *Chem. Rec.* **19**, 1157–1165 (2018).

S. IKEMOTO, X. HUANG, S. MURATSUGU, S. NAGASE, T. KOITAYA, H. MATSUI, G. YOKOTA, T. SUDOH, A. HASHIMOTO, Y. TAN, S. YAMAMOTO, J. TANG, I. MATSUDA, J. YOSHINOBU, T. YOKOYAMA, S. KUSAKA, R. MATSUDA and M. TADA, “Reversible Low-Temperature Redox Activity and Selective Oxidation Catalysis Derived from the Concerted Activation of Multiple Metal Species on Cr and Rh-Incorporated Ceria Catalysts,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 20868–20877 (2019).

A. ISHIHARA, T. NAGAI, K. UKITA, M. ARAO, M. MATSUMOTO, L. YU, T. NAKAMURA, O. SEKIZAWA, Y. TAKAGI, K. MATSUZAWA, T. NAPPORN, S. MITSUSHIMA, T. URUGA, T. YOKOYAMA, Y. IWASAWA, H. IMAI and K. OTA, “Emergence of Oxygen Reduction Activity in Zirconium Oxide-Based Compounds in Acidic Media: Creation of Active Sites for Oxygen Reduction Reaction,” *J. Phys. Chem. C* **123**, 18150–18159 (2019).

T. UCHIHASHI, S. YOSHIKAWA, E. MINAMITANI, S. WATANABE, Y. TAKAGI and T. YOKOYAMA, “Persistent Superconductivity in Atomic Layer-Magnetic Molecule van der Waals Heterostructures: a Comparative Study,” *Mol. Syst. Des. Eng.* **4**, 511–518 (2019).

T. HATTORI, T. MIYAMACHI, T. YOKOYAMA and F. KOMORI, “Electronic and Magnetic Properties of the Fe₂N Monolayer Film Tuned by Substrate Symmetry,” *J. Phys.: Condens. Matter* **31**, 255001 (6 pages) (2019).

T. YOKOYAMA and S. CHAVEANGHONG, “Anharmonicity in Elastic Constants and Extended X-Ray-Absorption Fine Structure Cumulants,” *Phys. Rev. Mater.* **3**, 033607 (10 pages) (2019).

L. YU, Y. TAKAGI, T. NAKAMURA, T. SAKATA, T. URUGA, M. TADA, Y. IWASAWA, S. MASAOKA and T. YOKOYAMA, “Operando Observation of Sulfur Species Poisoning Polymer Electrolyte Fuel Cell Studied by Near Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. C* **123**, 603–611 (2019).

T. KOITAYA, S. YAMAMOTO, Y. SHIOZAWA, Y. YOSHIKURA, M. HASEGAWA, J. TANG, K. TAKEUCHI, K. MUKAI, S. YOSHIMOTO, I. MATSUDA and J. YOSHINOBU, “CO₂ Activation and Reaction on Zn-Deposited Cu Surfaces Studied by Ambient-Pressure X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *ACS Catal.* **9**, 4539–4550 (2019).

J. TANG, S. YAMAMOTO, T. KOITAYA, A. YOSHIGOE, T. TOKUNAGA, K. MUKAI, I. MATSUDA and J. YOSHINOBU, “Mass Transport in the PdCu Phase Structures during Hydrogen Adsorption and Absorption Studied by XPS under Hydrogen Atmosphere,” *Appl. Surf. Sci.* **480**, 419–426 (2019).

J. TANG, S. YAMAMOTO, T. KOITAYA, Y. YOSHIKURA, K. MUKAI, S. YOSHIMOTO, I. MATSUDA and J. YOSHINOBU, “Hydrogen Adsorption and Absorption on a Pd-Ag Alloy Surface Studied Using In-Situ X-Ray Photoelectron Spectroscopy under Ultrahigh Vacuum and Ambient Pressure,” *Appl. Surf. Sci.* **463**, 1161–1167 (2019).

B-3) 総説, 著書

横山利彦, 高木康多, 中村高大, 唯美津木, 宇留賀朋哉, 岩澤康裕, 「専用ビームラインの研究から～ BL36XU (電気通信大学) ～オペランド大気圧硬X線光電子分光による固体高分子形燃料電池の劣化・被毒機構追跡」, *SPring-8/SACLA 利用者情報* **24**, 257–262 (2019).

T. URUGA, M. TADA, O. SEKIZAWA, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA and Y. IWASAWA, “SPring-8 BL36XU: Synchrotron Radiation X-Ray-Based Multi-Analytical Beamline for Polymer Electrolyte Fuel Cells under Operating Conditions,” *Chem. Rec.* **19**, 1444–1456 (2019).

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——農水産・医療, エネルギー, 環境, 材料開発分野などへの応用——」, 東北放射光施設推進会議推進室編集, アグネ技術センター, p. 110–116 (2019).

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——農水産・医療, エネルギー, 環境, 材料開発分野などへの応用——」, 東北放射光施設推進会議推進室編集, アグネ技術センター, p.257–263 (2019).

高木康多, 横山利彦, 岩澤康裕, 「雰囲気制御型硬X線光電子分光による固体高分子形燃料電池電極のオペランド計測」, *表面と真空* 2019 特集「オペランド計測による電池・燃料電池の動的過程」, **62**, 1–6 (2019).

T. KOITAYA, S. YAMAMOTO, I. MATSUDA and J. YOSHINOBU, “Surface Chemistry of Carbon Dioxide on Copper Model Catalysts Studied by Ambient-Pressure X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **17**, 169–178 (2019).

B-4) 招待講演

横山利彦,「ミクロの世界をのぞく～光を使って～」,唐津市民講座,唐津,2019年9月.

横山利彦,「XAFSの展望」,日本XAFS研究会夏の学校2019,唐津,2019年9月.

T. YOKOYAMA, “Thermal Expansion and Elasticity Softening of Alloys,” Invited Seminar in University of Science and Technology Beijing, Beijing (China), May 2019.

横山利彦,「XAFS基礎」,Nanotech CUPAL第8回KEK放射光利用技術入門コース,つくば,2019年3月.

小坂谷貴典,「軟X線雰囲気光電子分光を用いたメタン転換反応のオペランド観測」,2019年日本表面真空学会学術講演会,つくば,2019年10月.

K. YAMAMOTO, “Element specific observation of photo-induced magnetization dynamics by using x-ray free electron laser,” The Japan Society of Applied Physics, Sapporo (Japan), 2019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).

山本航平,第46回応用物理学会講演奨励賞(2019).

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(2015–2020).

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).

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(1998–2019).

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(2005,2011,2019,2020).

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・学術審議会研究開発基盤部会委員(2019–).

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(2017–2018).

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(2017–2019).

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, 2019).

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

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「物性科学概論」, e-learning, 2019年.

B-10) 競争的資金

科研費研究活動スタート支援, 「放射光X線を用いた強磁性体の光誘起磁性ダイナミクスの元素選択的観察」, 山本航平 (2019年–2021年).

科学技術振興機構さきかけ研究「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」, 小坂谷貴典 (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」, 小坂谷貴典 (2017年–2019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).

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).

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、2017年度に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月に小坂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、さらには、2019年4月に山本航平助教が着任し、SACLA/SPring-8を利用して、磁性薄膜のフェムト秒超高速スピンドYNAMICSおよびコヒーレントX線回折・共鳴X線磁気散乱による磁性薄膜イメージング研究を進めている。

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，分光学，機能物性化学，表面界面物性

A-2) 研究課題：

- a) 和周波発生振動分光法による結晶氷表面の新たな構造転移の発見とナノサイズ効果の解明
- b) 水分子間水素結合において特異的に競合する2種の量子効果の解明
- c) オペランド赤外分光法によるメタン水蒸気改質光触媒の反応活性種の解明
- d) 水素感度と極微空間分解能を有する非線形顕微分光法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 水分子の集合体である氷は地球大気においては極域の上空に，宇宙においては星間分子雲に偏在しており，その表面は大気や分子雲の環境に重要な影響を及ぼす種々の化学反応・分子進化の反応場として機能している。我々は，氷表面における水分子の微視的な構造や動的性質を解明するべく，超高真空中で作製した高純度な単結晶氷 1h の最安定 (0001) 表面（ベール面）に対してヘテロダイン検出和周波発生（SFG）振動分光を行った。氷表面の水素結合 OH の伸縮振動バンドとダングリング OH の伸縮振動バンドについてピーク強度と波数分布の温度依存性を系統的に測定した。その結果，従来の研究において存在が想定されていた『結晶氷最表面における水素（ダングリング OH）秩序相（Fletcher 相）』が実際には存在しないことを実証することに成功した。また，「結晶氷の最表面層には結晶相とも液体相（擬似液体相）とも異なる“熱力学的に安定”な中間相（非晶質相）が 120 K から 200 K の温度領域において存在する」ことを世界初で発見した。さらに，ナノサイズの単結晶氷 1h の微粒子を作成し，その (0001) 表面について同様の測定を行ったところ，この結晶相-中間相の転移温度が氷のナノサイズ化に伴って 90 K 程度にまで低下することを見出した。
- b) 水素は最も軽い元素であるため，水素を介して形成される分子間の水素結合は，その零点振動やトンネル効果といった「核の量子効果」の影響を一般に強く受ける。我々は，様々な同位体濃度比をもつ同位体混合結晶氷 ($\text{H}_2\text{O}+\text{HDO}+\text{D}_2\text{O}$) を作製し，その氷の昇温脱離過程を同位体選択的かつ系統的に世界初で観測した。その結果，①水素結合の切断を直接担う脱離水分子が重水素化されることによって水素結合のエネルギーが増大すること（脱離分子種依存性），及び②脱離水分子と相互作用する周囲の水分子が重水素化されることによって水素結合のエネルギーが減少すること（同位体環境依存性）を発見した。遷移状態理論と水素結合の量子力学的モデル計算による考察の結果，①脱離分子種依存性については，脱離分子の表面吸着状態（始状態）における『束縛回転振動の零点エネルギー』に起因することを導き出した。さらに，②同位体環境依存性については，H を介した O-H \cdots O 結合と D を介した O-D \cdots O 結合で分子間ポテンシャルに差異を生じさせる『非調和結合における量子効果』に起因することを見出した。この二種類の量子効果が競合することにより，H を D に置換することで水分子間の水素結合距離が長くなる（体積が大きくなる）にもかかわらず，その結合はむしろ強くなる（結合エネルギーは大きくなる）という特異な現象が水分子の凝集系（液体水や氷）において発現することを明らかにすることができた。
- c) 非常に安定なメタン分子の C-H 結合を活性化させるには典型的には 700 °C 以上の高温が必要となり大量のエネルギー消費を伴う。メタン活性化を室温近傍で実現する化学技術として，我々は NaTaO_3 や TiO_2 ， Ga_2O_3 などの酸化物微粒子光触媒によるメタンの水蒸気改質反応に着目し，メタン活性化に資する光触媒反応メカニズムを解明するための拡散反射オペランド赤外分光装置を独自に構築した。メタンガスや水蒸気の圧力を系統的に変化させた条件

下での反応評価とオペランド赤外分光により、これらの光触媒試料に対して普遍的に、35–40 kJ/mol 程度のエネルギーでメタン分子が酸化的解離吸着する過程がメタン改質光触媒反応全体の律速過程であることが明らかになった。また、このメタン初期酸化反応を直接担う触媒表面の活性種は水酸基ラジカル（水分子が光誘起正孔を補足して解離したもの）であることを解明することに成功し、酸化物表面の酸素イオン種はメタン活性化に直接寄与していないことが判明した。これにより、光照射によって生じた光誘起正孔 (h^+) を表面吸着水分子と反応させて水酸基ラジカル ($\cdot\text{OH}$) に効率的に変換させることがメタン改質反応活性の増大に極めて重要であることが明らかになった。

- d) 表面界面水分子系の水素結合ネットワークにおいて重要な構造情報である“水分子の配向（水素の H-up・H-down 配置）”を極微空間分解能で観測する“原子スケールの極微分光法”の開発に取り組んでいる。三端子電極を用いた電気化学エッチングを用いてプラズモニック金属（Au など）をベースとした STM 探針の作製に成功した。現在達成している先端曲率半径は数十 nm であり、さらに探針先端を先鋭化させるためのスパッタリングやナノ微細加工に取り掛かる準備を進めている。また、新たに導入した STM 装置による単原子像の取得にも成功しており、次いで極微分光を実施するために必要な STM 装置内外の光学系の構築を進めている。

B-1) 学術論文

T. SUGIMOTO, Y. OTSUKI, T. ISHISYAMA, A. MORITA, K. WATANABE and Y. MATSUMOTO, “Topologically Disordered Mesophase at Topmost Surface of Crystalline Ice Between 120 and 200 K,” *Phys. Rev. B* **99**, 121402(R) (7 pages) (2019).

Y. OTSUKI, K. WATANABE, T. SUGIMOTO and Y. MATSUMOTO, “Enhanced Structural Disorder at a Nanocrystalline Ice Surface,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 20442–20453 (2019).

H. KATO, T. SUGIMOTO, K. HARADA, K. WATANABE and Y. MATSUMOTO, “Unveiling Two Deuteration Effects on Hydrogen-Bond Breaking Process of Water Isotopomers,” *Phys. Rev. Mater.* **3**, 112001(R) (7 pages) (2019).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

A. SAKURAI, K. ANDO and S. ASHIHARA, “Ultrafast Proton/Deuteron Dynamics in Solid Oxide Observed with Infrared Pump-Probe Spectroscopy,” *EPJ Web of Conferences* **205**, 04024 (3 pages) (2019).

B-3) 総説、著書

杉本敏樹, 「水分子凝集系における水素原子の位置に敏感な和周波発生振動分光法」, *エレクトロニクスコミュニケーション* **34**, 19–24 (2019).

杉本敏樹, 石山達也, 「和周波発生振動分光計測と分子シミュレーションからみる氷表面の分子構造」, *アンサンブル：分子シミュレーション研究会誌* **21**, 177–184 (2019).

B-4) 招待講演

T. SUGIMOTO, “Proton ordering in heteroepitaxial ice films,” IMS Symposium Water at Interfaces 2018, Okazaki Conference Center, Okazaki (Japan), January 2019.

T. SUGIMOTO, “Emergent proton ordering in heteroepitaxial ice films on metal substrates,” International Workshop on Nonlinear Optics at Interfaces 2019, Fudan University, Shanghai (China), June 2019.

T. SUGIMOTO, “Challenge of infrared spectroscopy: Unveiling water-assisted carrier trapping at TiO₂ nano-photocatalyst with distinct particle morphologies,” The 81st Okazaki Conference, Okazaki Conference Center, Okazaki (Japan), December 2019.

杉本敏樹,「水分子の向きが揃った特殊な結晶水の生成」, 第119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, 2019年1月.

杉本敏樹,「高効率水分解光触媒の実現に向けた触媒表面分光計測の挑戦」, 第1回シンポジウム「階層縦断的アプローチによる革新的光エネルギー変換系の開拓」, 神戸大学, 神戸, 2019年4月.

櫻井敦教,「超高速分光で切り開く固体中プロトン伝導メカニズムの理解」, 2019年度日本分光学会年次講演会「分光学夢シンポジウム」, 京都大学, 京都, 2019年5月.

B-6) 受賞, 表彰

杉本敏樹, 第14回日本物理学会若手奨励賞 (2019).

杉本敏樹, 第12回分子科学会奨励賞 (2019).

杉本敏樹, 分子科学研究奨励森野基金 (2018).

杉本敏樹, 日本分光学会奨励賞 (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).

T. SUGIMOTO, PCCP Prize 2018 (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ーピー 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).

日本表面真空学会若手部会幹事 (2018–).

学会の組織委員等

The 9th International Symposium on Surface Science (ISSS-9), Publication committee (2019–2020).

8th Asian Spectroscopy Conference (ASC2021), Organizing committee (2019–2021).

International Workshop on Nonlinear Optics at Interfaces 2021, Conference vice Chair (2019–2021).

The 81st Okazaki Conference, Conference Chair (2019).

IMS Symposium Water at Interfaces 2018, Conference co-Chair (2018–2019).

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・学術研究所科学技術動向研究センター専門調査員 (2014–2016).

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,「基礎光化学」,2019年7月15日-17日.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきかけ研究,「原子スケール極微和周波分光法の開発と界面水分子の局所配向イメージングへの応用展開」,杉本敏樹(2019年度-2022年度).

科研費基盤研究(A),「水素感度と極微空間分解能を有する非線形顕微分光法の開発と表面水素結合系への応用」,杉本敏樹(2019年度-2021年度).

科研費研究活動スタート支援,「金属表面水素の高分解能計測を可能とする新規顕微分光法の開発」,櫻井敦教(2019年度-2020年度).

科学技術振興機構さきかけ研究,「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年度-2019年度).

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年度-2018年度).

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年度-2017年度).

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年度-2015年度).

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年度-2015年度).

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年度).

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～2019年3月31日)*)

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) 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ドイナミクス計測, 多重パルスシステムによる構造解析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。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) 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-1) 学術論文

J. MORIMOTO, Y. FUKUDA, D. KURODA, T. WATANABE, F. YOSHIDA, M. ASADA, T. NAKAMURA, A. SENOO, S. NAGATOISHI, K. TSUMOTO and S. SANDO, “A Peptoid with Extended Shape in Water,” *J. Am. Chem. Soc.* **141**, 14612–14623 (2019).

M. SUYAMA, S. TAKANO, T. NAKAMURA and T. TSUKUDA, “Stoichiometric Formation of Open-Shell $[\text{PtAu}_{24}(\text{SC}_2\text{H}_4\text{Ph})_{18}]^-$ via Spontaneous Electron Proportionation between $[\text{PtAu}_{24}(\text{SC}_2\text{H}_4\text{Ph})_{18}]^{2-}$ and $[\text{PtAu}_{24}(\text{SC}_2\text{H}_4\text{Ph})_{18}]^0$,” *J. Am. Chem. Soc.* **141**, 14048–14051 (2019).

S. KITOU, A. NAKANO, S. KOBAYASHI, K. SUGAWARA, N. KATAYAMA, N. MAEJIMA, A. MACHIDA, T. WATANUKI, K. ICHIMURA, S. TANDA, T. NAKAMURA and H. SAWA, “Effect of Cu Intercalation and Pressure on Excitonic Interaction in 1T-TiSe₂,” *Phys. Rev. B* **99**, 104109 (10 pages) (2019).

S. KITOU, S. KOBAYASHI, T. KANEKO, N. KATAYAMA, S. YUNOKI, T. NAKAMURA and H. SAWA, “Honeycomb Lattice Type CDW Formed by Cooperative Interaction in Cu Intercalated 1T-TiSe₂,” *Phys. Rev. B* **99**, 081111(R) (6 pages) (2019).

A. HATANO, N. TERADO, Y. KANNO, T. NAKAMURA and G. KAWAI, “Synthesis of a Protected Ribonucleoside Phosphoramidite-Linked Spin Label via an Alkynyl Chain at the 5' Position of Uridine,” *Synth. Commun.* **49**, 136–145 (2019).

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, 電子スピンスイエンズ学会奨励賞 (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).

電子スピンスイエンズ学会担当理事 (2004–2005).

電子スピンスイエンズ学会運営理事 (2006–2011).

電子スピンスイエンズ学会副会長 (2014–2015).

電子スピンスイエンズ学会会長 (2016–2018).

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

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

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

第57回電子スピンスイエンズ学会年会 (札幌), プログラム委員 (2018).

第13回分子科学討論会 (名古屋), 実行委員 (2019).

第58回電子スピンスイエンズ学会年会 (川崎), 実行委員, プログラム委員 (2019).

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

電子スピンスイエンズ学会編集委員 (2003).

電子スピンスイエンズ学会編集委員長 (2004–2005).

電子スピンスイエンズ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ドYNAMIX研究」, 中村敏和 (2008年–2011年).

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

C) 研究活動の課題と展望

本グループでは, 分子性固体の電子状態(磁性, 導電性)を主に微視的な手法(ESR, NMR)により明らかにしてきた。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きた。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きた。

*) 2019年4月1日分子科学研究所機器センターチームリーダー

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) *pn* ホモ接合有機太陽電池
- b) バンド伝導性有機半導体を用いた有機太陽電池

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機太陽電池では、ドナー (D) /アクセプター (A) の2種類の半導体材料を用いて励起子を解離するが、D/Aのエネルギー差に起因する電圧ロスが大きい問題がある。そこで今回、電子とホールの両方に対して高移動度を示す両極性の有機半導体である、ジインデノバレン (DIP) 1種類のみを用いた有機太陽電池を作製した。DIP層に、アクセプターとドナードーパント (MoO_3 , Cs_2CO_3) をそれぞれ共蒸着することで、*pn* ホモ接合を形成した。ドーピング濃度5%において、ノンドープに比べて8倍の短絡電流密度の増加を観測した。内蔵電界が接合界面の数分子に集中し、隣接分子のHOMO, LUMOが電荷分離エネルギー関係になり、30%の非常に高い内部量子効率で励起子を解離する機構を提案し実証した。以上のように、有機太陽電池においても、単結晶シリコンと同様に、1種類の半導体に *pn* 接合を形成して高効率で光電変換を起こすことができることを実証した。
- b) バンド伝導性を示すルプレン単結晶バルクに、アクセプター (MoO_3) を5 ppmの極微量ドーピングし、生成キャリア濃度の温度依存性をHall効果によって測定した結果、ホール生成の活性化エネルギーとして、90 meVというかなり小さな値を観測した。同じ系において、表面ドーピングを行った場合も同様の結果が得られた。この結果は、バンド伝導有機半導体におけるドーピングでは、プラス電荷とマイナス電荷が弱く束縛された、ワニエ励起子型の状態が形成され、室温においても高効率でキャリア生成できることを示している。また、バンド伝導性有機半導体の超高速移動度を利用して、基板に水平方向にキャリアを取り出す水平2層セルを作製し、驚異的な水平距離1.3 mmのキャリア輸送に成功し、開放端電圧1.0 V、曲線因子0.48の美しい光起電力特性を観測した。
バンド伝導有機半導体は、キャリア生成、キャリア輸送において、これまでにない性能を示し、新しい有機太陽電池材料として非常に有望である。

B-1) 学術論文

M. KIKUCHI, S. MAKMUANG, S. IZAWA, K. WONGRAVEE and M. HIRAMOTO, "Doped Organic Single Crystal Photovoltaic Cell," *Org. Electron.* **64**, 92–96 (2019).

M. KIKUCHI, M. HIROTA, T. KUNAWONG, Y. SHINMURA, M. ABE, Y. SADAMITSU, A. M. MOH, S. IZAWA, M. IZAKI, H. NAITO and M. HIRAMOTO, "Lateral Alternating Donor/Acceptor Multilayered Junction for Organic Solar Cells," *ACS Appl. Energy Mater.* **2**, 2087–2093 (2019).

S. IZAWA, A. PERROT, J. LEE and M. HIRAMOTO, "Organic *pn* Homo Junction Solar Cell," *Org. Electron.* **71**, 45–49 (2019).

M. KIKUCHI, S. IZAWA, N. RAI and M. HIRAMOTO, “Very Low Activation Energy for Carrier Generation of Surface Doped Organic Single Crystals Observed by Hall Effects,” *Appl. Phys. Lett.* **115**, 113301 (4 pages) (2019).

H. UENO, I. JEON, H. LIN, A. THOTE, T. NAKAGAWA, H. OKADA, S. IZAWA, M. HIRAMOTO, S. MARUYAMA and Y. MATSUO, “Li@C₆₀ Endohedral Fullerene as Supramolecular Dopant for C₆₀ Electron-Transporting Layer Promoting Efficiency in Perovskite Solar Cells,” *Chem. Commun.* **55**, 11837–11839 (2019).

S. IZAWA, N. SHINTAKU, M. KIKUCHI and M. HIRAMOTO, “Importance of Interfacial Crystallinity to Reduce Open-Circuit Voltage Loss in Organic Solar Cells,” *Appl. Phys. Lett.* **115**, 153301 (4 pages) (2019).

B-3) 総説, 著書

S. IZAWA and M. HIRAMOTO, “Doping for Controlling Donor/Acceptor Interfacial Structure in Organic Solar Cells,” *The Review of Laser Engineering*, Special Issue on Recent Progress in Solar Cell Controlled by Surface Structures and Interface Between Two Materials, **47(3)**, 151–155 (2019). (in Japanese)

M. HIRAMOTO, “pn-Control of Phthalocyanine Films and Doping Sensitization,” *Kagaku Kogyo*, Special Issue on New Developments of Phthalocyanines, **70(3)**, 203–207 (2019). (in Japanese)

M. HIRAMOTO, “Development of New Concept Organic Solar Cell Using Lateral Alternating Multilayered Junction,” *Clean Energy*, **28(6)**, 48–54 (2019). (in Japanese)

M. HIRAMOTO, M. KIKUCHI and S. IZAWA, “Lateral Junction for Single Crystalline Organic Solar Cells,” in *Liquid and Single Crystals: Properties, Manufacturing and Uses*, J. Groosen, Ed., NOVA Science Publishers, Inc.; New York, Chapter 6, pp. 205–239 (2019).

B-4) 招待講演

M. HIRAMOTO, “Bandgap Science for Organic Solar Cells,” NANO TALK #10 “Advances in Photovoltaic Materials and Fabrications,” NANOTEC, Bangkok (Thailand), June 2019.

M. HIRAMOTO, “Bandgap Science for Organic Solar Cells,” 2nd International Conference on Materials Research and Innovation (ICMARI), Kasetsart University, Bangkok (Thailand), December 2019.

平本昌宏, 伊澤誠一郎, 「高移動度有機半導体を用いた有機太陽電池」, 有機エレクトロニクス研究会「有機材料・薄膜, 有機デバイス一般」, 愛知県日間賀島, 2019年1月.

平本昌宏, 「高移動度有機半導体を用いた有機太陽電池」, 有機EL討論会(第29回例会), 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2019年11月.

平本昌宏, 「有機太陽電池」, 高専-豊橋技術科学大学太陽電池シンポジウム」, 妙義グリーンホテル, 群馬県富岡市, 2019年12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).

伊澤誠一郎, 10th International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics (M&BE10) 若手研究者講演賞 (2019).

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 (2007–2010).

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)

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会常任幹事 (2019–2020). (伊澤誠一郎)

応用物理学会若手チャプター副代表 (2018–2020). (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)

10th International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics (M&BE10), Nara, June 25-27, 国際会議実行委員 (2019). (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 31年度), 大阪大学中之島センター, 「有機太陽電池(I)(II)」, 2019年1月8日.

B-9) 学位授与

菊地 満, 「Effects of Charge Carrier Transport on Device Performance of Organic Crystalline Solar Cells」, 2019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).

科研費挑戦的研究(萌芽),「ドーピング有機単結晶ウェハーを用いた新原理太陽電池」,平本昌宏 (2019年-2021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(谷原)を雇用し, 学生1名(Jaseela P. I. (M1), 2019.10入学)を指導し, 科研費研究テーマ「有機単結晶エレクトロニクス」及び「ドーピング有機単結晶ウェハーを用いた新原理太陽電池」を推進している。伊澤助教は, 有機太陽電池における電荷再結合抑止による電圧ロス低減, ノンフラーレンアクセプターに関する研究を強力に推進し, 学生1名(Ji-Hyun Lee (D2), 2018.10入学)を指導し, 論文量産態勢に入り, 研究室の柱になっている。今年度受け入れた国際インターンシップ生2名(Adrien Girault, Jeremy Roudin (M1, 2019.4-2019.8, Chimie ParisTech))は, 平本, 伊澤で1名ずつ分担して指導した。

密接な共同研究が増えている。高橋教授(静岡大学工学部)の研究室において合成した新規ノンフラーレンアクセプターを用いて有機太陽電池を作製評価し, 論文執筆段階に入り, 科研費を共同出願した。榎山准教授(分子研)の合成した両極性有機半導体を用いて, 両極性ドーピングと太陽電池応用の研究を進めている。

なお, 国際インターンシップ生として2017年に半年在籍したS. Makmuang (Chulalongkorn 大博士課程学生)の仕事が論文として掲載されたこともあり, 特別共同利用研究員として, 来年度1年間在籍予定。学生は海外主体となっている。国際インターンシップ学生, 共同研究は, マンパワー強化に有効で, これらを利用して研究室のアクティビティーをさらに強化する。

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) アミロイドタンパク質の大量発現系の確立
- c) 固体 NMR プロープの開発
- d) 固体 NMR を用いた各種分子材料の構造解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) アミロイド β タンパク質 ($A\beta$) はアルツハイマー病の発症に深く関与すると考えられ，凝集して不溶性のアミロイド線維を形成する。本研究では， $A\beta$ と高い親和性を有する糖鎖脂質 GM1 を含有した脂質膜下で形成される $A\beta$ オリゴマーの構造解析に基づき，アミロイド線維形成分子機構を解明することを目的としており，加藤 (晃) 教授グループと共同研究を行っている。これまで行った実験結果に基づき二次構造を同定し，GM1 存在下では，前研究で決定した中性脂質膜上で誘起される構造とは異なる分子構造を示すことが判明した。複数の ^{13}C 同種核相関二次元 NMR 実験から得た長距離相関信号に基づき，分子間配座の検討を行うと共に，異なる距離依存性条件下で同二次元相関実験の追実験を行った。検討の結果，大まかな分子配座モデル案の構築に成功した。現在，長距離相関信号の分子内，分子間の寄与を区別する同二次元相関実験を行っており，これで全ての実験を完了し，詳細な分子構造決定を完結する予定である。
- b) 昨年度からアミロイドタンパク質の大量発現系の構築に関して，国立感染症研究所の谷生道一博士と共同研究を行っている。複数回発現系を変更し，ようやく大腸菌を用いた目的タンパク質の大量発現まで実験法を確立した。現在，高純度精製法の確立を試みている。
- c) 独自デザインの実験実現を最終目的として，現在使用している Bruker 社製分光器，および周辺機器と完全互換性を有する独自の固体 NMR プロープの開発を昨年度より行っている。まずベースとなる固体 NMR プロープとして 2.5mm 試料管用試料回転モジュール，および回転検出用の光電圧変換モジュール，温度センサーの3部品のみ同社製部品を使用し，それ以外を全て独自に設計，制作した 2.5mm 試料管用固体 MAS $^1\text{H-X}$ 二重共鳴プロープの制作を行った。プロープ設計と同時並行で各部品の改良を行い，部品製作，設置に必要な治具から独自に開発した。ヒーターモジュール以外の各モジュールの個別動作確認を完了し，配線と調整を残す段階まで完了した。また，多くの共通構造を有する $^1\text{H-}^{13}\text{C-}^{15}\text{N}$ 三重共鳴プロープ，および試料管径の異なる 4.0mm 試料管用固体 MAS $^1\text{H-X}$ 二重共鳴プロープの開発も同時並行で進めている。最終的に，今回購入したモジュールも，全て独自設計モジュールに置き換えるため，これらのモジュール開発も行っており，温度センサーは設計を完了した。
- d) 固体 NMR を用いた分子材料の構造解析に関して，昨年度より3件の共同研究を引き続き行っている。茨城大学の福元博基准教授のグループとの共同研究で，同グループで開発された新規含フッ素透明性樹脂に関連する分子の解析を行った。次に，大阪大学の戸部義人教授グループとの共同研究で，同グループで開発された有機分子材料の電子状態解析を行った。 $^1\text{H-}^{13}\text{C}$ 異種核相関二次元 NMR の解析から，研究対象分子の一つに関して解析を完了し，比較対象試料の調製完了を待つ状態である。さらに，愛知教育大学の西 信之教授，日鉄ケミカルとの共同研究で，同グループで開発された分子材料の解析を行い，信号の暫定的な帰属，および状態解析を行った。

B-1) 学術論文

S. KATAOKA, H. FUKUMOTO, T. KAWASAKI-TAKASUKA, T. YAMAZAKI, K. NISHIMURA, T. AGOU and T. KUBOTA, "Effective Synthesis of Fluorine-Containing Phenanthrene Bearing Hydroxyl Group Using Mallory Reaction and Its Application for Fluorinated Polymers," *J. Fluorine Chem.* **218**, 84–89 (2019).

B-6) 受賞, 表彰

西村勝之, 日本核磁気共鳴学会優秀若手ポスター賞 (2002).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本核磁気共鳴学会評議員 (2009–2010, 2013–2014).

日本核磁気共鳴学会選挙管理委員 (2005).

日本生物物理学学会分野別専門委員 (2004–2009).

学会の組織委員等

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

第 51 回 NMR 討論会プログラム委員 (2012).

学会誌編集委員

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

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

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「超分子構造の分子間配座解析に資する固体 NMR 解析法開発とその適用」, 西村勝之 (2019 年–2021 年).

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 (2019).

C) 研究活動の課題と展望

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 ペプチドオリゴマーの研究が, ようやく構造モデル構築まで到達した。前研究の中性脂質膜上での構造との比較から GM1 の役割が明瞭になり, 研究総括に近づいている。また, 同研究後の次期ターゲットのアミロイドタンパク質の大量発現系の構築を, 別の共同研究先と進めてきた。予定より大幅に遅れ 2 年近く苦戦したが, ようやくゴールが見えた状態である。来年度からは次期研究に注力したいと思う。さらに昨年度から開発を行っている独自の固体 NMR プローブが, ようやく完成間近な状態となった。今後, これを活用, 発展させて行きたい。

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) 電気化学測定系の改良によって, AE_2LiH_3O ($AE = Sr, Ba$) の高温相の導電率を正確に計測できるようになり, Sr 系, Ba 系共に, 高温相では $10^{-2} \text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$ を超える極めて高い導電率がほぼ温度に依存せずを得られることが明らかになった。アレニウスプロットから見積もられた活性化エネルギーは $10 \sim 30 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ 程度であり, H⁻ 超イオン導電状態であると考えられる。また, AE_2LiH_3O ($AE = Sr, Ba$) の Li や Ba の一部を他の元素に置換することで高温相を安定化することができ, 実用性能の基準値である $10^{-3} \text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$ 以上の導電率を $300 \text{ }^\circ\text{C}$ 以下で達成することができた。
- b) 中性子準弾性散乱測定から, Ba_2LiH_3O が温度上昇に伴って超イオン導電状態に転移する過程の水素のダイナミクスを調べた結果, 高温相での高い導電率は, H⁻ の移動度の大幅な向上ではなく, イオン導電機構の変化が主に関与していることが示唆された。
- c) H⁻ 導電体を電解質に用いた固体デバイスを作製し, 電気化学的な Ti への水素吸蔵放出に成功した。これは, 電気化学デバイス反応によって $\text{H}^- \rightleftharpoons \text{e}^- + \text{H}^0$ の酸化還元を制御した初めての例である。

B-1) 学術論文

H. UBUKATA, T. BROUX, F. TAKEIRI, K. SHITARA, H. YAMASHITA, A. KUWABARA, G. KOBAYASHI and H. KAGEYAMA, "Hydride Conductivity in an Anion-Ordered Fluorite Structure $LnHO$ with an Enlarged Bottleneck," *Chem. Mater.* **31**, 7360–7366 (2019).

T. BROUX, H. UBUKATA, C. J. PICKARD, F. TAKEIRI, G. KOBAYASHI, S. KAWAGUCHI, M. YONEMURA, Y. GOTO, C. TASSEL and H. KAGEYAMA, "High-Pressure Polymorphs of $LaHO$ with Anion Coordination Reversal," *J. Am. Chem. Soc.* **141**, 8717–8720 (2019).

F. TAKEIRI, A. WATANABE, A. KUWABARA, H. NAWAZ, N. AYU, M. YONEMURA, R. KANNO and G. KOBAYASHI, " Ba_2ScHO_3 : H⁻ Conductive Layered Oxyhydride with H⁻ Site Selectivity," *Inorg. Chem.* **58**, 4431–4436 (2019).

N. MATSUI, G. KOBAYASHI, K. SUZUKI, A. WATANABE, A. KUBOTA, Y. IWASAKI, M. YONEMURA, M. HIRAYAMA and R. KANNO, "Ambient Pressure Synthesis of La_2LiHO_3 as a Solid Electrolyte for a Hydrogen Electrochemical Cell," *J. Am. Ceram. Soc.* **102**, 3228–3235 (2019).

B-3) 総説, 著書

小林玄器, 「ヒドリド導電体～物質開発の現状と電池への応用可能性～」, *電気化学 (DENKIKAGAKU)*, **87(Autumn)**, 227–232 (2019).

小林玄器,「H⁻ 導電体の物質開発:新たな水素利用技術の創出に向けて」, *化学と工業 (Chemistry & Chemical Industry)* **72(8)**, 668–670 (2019).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

小林玄器,「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～新物質開拓とエネルギーデバイスへの応用可能性～」, 第119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, 2019年1月.

小林玄器,「ヒドリド導電性酸水素化物の物質開拓」, 第4回科学技術交流財団「マイクロフォトニクス」研究会, 分子科学研究所明大寺キャンパス, 岡崎, 2019年2月.

小林玄器,「ヒドリドイオン導電性材料の物質開拓」, 電気化学会第86回大会, 京都大学吉田キャンパス, 京都, 2019年3月.* (田川記念固体化学奨励賞受賞講演)

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体の物質開拓と電気化学デバイスへの応用可能性」, 日本学術振興会先進セラミックス第124委員会第158回会議, 東京工業大学田町キャンパス, 東京, 2019年8月.

小林玄器,「H⁻ 導電性酸水素化物のアニオン配列制御とイオン導電特性」, 日本金属学会 2019年秋期講演大会, 岡山大学津島キャンパス, 岡山, 2019年9月.*

小林玄器,「H⁻ 導電性酸水素化物のアニオン配列制御とイオン導電特性」, 2019年第80回応用物理学会秋期学術講演会, 北海道大学札幌キャンパス, 札幌, 2019年9月.

小林玄器,「H⁻ 導電体および電気化学デバイス開発の現状と課題」, 第2回ヒドリドイオニクス研究会, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2019年10月.

G. KOBAYASHI, “Study on H⁻ Conductive Oxyhydrides,” The 81st Okazaki Conference “Forefront of Measurement Technologies for Surface Chemistry and Physics in Real-Space, k-Space, and Real-Time,” Okazaki (Japan), December 2019.

G. KOBAYASHI, “Study on H⁻ Conductive Oxyhydrides,” IMS-PCOSS Bilateral Symposium, Xiamen (China), December 2019.

B-6) 受賞, 表彰

小林玄器, 分子科学研究奨励森野基金 (2019).

小林玄器, 田川記念固体化学奨励賞 (2019).

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 回高压討論会実行委員 (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).
- 第 4 回固体化学フォーラム研究会世話人 (2019).
- 第 2 回ヒドリドイオニクス研究会 (第 75 回固体イオニクス研究会) 世話人 (2019).

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「基礎電子物性論」, 2019 年 12 月 16 日-17 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かけ研究「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

若手独立フェローとして着任した 2013 年度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, Ba₂LiH₃O が合成できたことで大きく進展した。Ba₂LiH₃O が 300-400 °C で示す H⁻ 導電特性 ($\sigma \geq 10^{-2} \text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$) は, 格子内からの脱水などの影響によりプロトン (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り, 無加湿下で負の電荷を保ったまま単一でイオン拡散できる H⁻ ならではの特徴を活かすことができた結果といえる。また, 今年度は, Ba₂LiH₃O に元素置換を施す事で超イオン導電性を示す高温相を低温で安定化させることに成功しており, 300 °C 以下で実用性能の導電率を得ることができた。今後は 200 °C 以下で実用性能を達成することが具体的な目標となる。

K₂NiF₄ 型構造以外の骨格構造を有する H⁻ 導電性酸水素化物の合成も着実に進展しており, 物質開発の新しい方向性が見出せた。中性子準弾性散乱や固体 NMR による H⁻ 導電機構解析も H⁻ 超イオン導電状態での導電機構の変化を捉えており, 今後のさらなる研究により, H⁻ 導電体の学理を体系化していきたい。

H⁻ のイオン導電現象の電池反応への応用に関しては, 合成した酸水素化物を固体電解質に用いた電気化学デバイスを作製し, 水素化・脱水素化反応への応用を検討した。H⁺ を用いた従来技術と比較して高効率に反応が進行することが明らかとなり, 水素化・脱水素化反応における H⁻ 利用の優位性が認められた。今後は, 反応の原理検証, デバイス構成の最適化, H⁻ が関与する素反応の開拓を目指す。一方, Ti などの金属電極に H⁻ 導電体を利用して水素吸蔵放出することにも成功しており, デバイス構造の最適化による可逆性の向上を目指すと共に新たな応用可能性を検証していきたい。

6-7 生命・錯体分子科学研究領域

生体分子機能研究部門

青野重利（教授）（2002年5月1日着任）

A-1) 専門領域：生物無機化学

A-2) 研究課題：

- a) コリネバクテリアのヘム取込みに関与するヘム結合・輸送タンパク質の構造機能相関解明
- b) ヒドロゲナーゼ生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) コリネバクテリア属細菌 *Corynebacterium glutamicum* のヘム取り込み系は、宿主からのヘム獲得、およびヘムトランスポーターへのヘム輸送に関与するタンパク質 HtaA, HtaB と細胞内にヘムを取り込むトランスポーターシステムである HmuT-HmuUV から構成されている。本研究では、本システムによるヘム取込み反応の詳細な分子機構を明らかにするため、HtaA, HtaB の結晶構造解析を行った。HtaA はリンカーでつながれた N 末端ドメイン (HtaA-N) と C 末端ドメイン (HtaA-C) から、HtaB は 1 つのドメインから構成されている。HtaA-N, HtaA-C, HtaB は、いずれもホロ型 (ヘム結合型) として単離精製された。本研究で決定した HtaA-C および HtaB の全体構造は、以前に構造決定した HtaA-N と高い相同性を示した。いずれの構造においても、Tyr が第 5 配位子としてヘム鉄に配位しており、Tyr は近傍の His と水素結合を形成していた。また、HtaA-N で観測されていた、ヘムプロピオン酸と Ser 間での水素結合、Phe とヘムピロール環の間の π - π スタッキングも、HtaA-N, HtaA-C, HtaB すべてで保存されており、これらの相互作用が、ヘム認識に重要な役割を果たしていることを示唆している。全体構造が高い相同性を示す一方、結合するヘムの配向やヘム結合部位周辺のループの長さには、違いが見られた。ヘム獲得・輸送反応において、ヘム軸配位子である Tyr と近傍の His 間での水素結合が果たす役割を明らかにするため、His を Ala に置換した HtaA-N, HtaA-C, HtaB の変異型タンパク質を調製した。いずれの変異体も、アポ型として単離精製されたことから、これら変異体ではヘムへの結合親和性が低下していることが分かった。これら変異体の結晶化条件のスクリーニングを行った結果、HtaA-C の H434A 変異体の結晶が得られ、その結晶構造を決定した。HtaA-C の H434A 変異体の結晶構造では、非対称単位中の 2 分子が N 末端の β -strand のドメインスワップによって二量体を形成していた。この二量体構造では、ヘムの軸配位子となる Tyr が隣り合う分子のヘム結合領域に入り込んでいることが分かった。これらの結果を基に、HtaA/HtaB 間でのヘム輸送反応において、タンパク質がダイナミックに構造変化 (ドメインスワッピングが起こる) することにより、ホロ型 HtaA とアポ型 HtaB 間で同様な二量体構造を過渡的に形成し、ヘム輸送反応が進行するという反応モデルを提唱した。
- b) 水素ガスの酸化反応・プロトンの還元反応を触媒する酵素であるヒドロゲナーゼは、バクテリアなどによる水素代謝において中心的な役割を果たしている他、最近では燃料電池用触媒としての利用も期待されている金属酵素である。活性中心の構造の違いにより、[NiFe] 型、[FeFe] 型、[Fe] 型の 3 種のヒドロゲナーゼが存在するが、いずれの場合も活性中心の Fe には、CO が配位している。この CO は、酵素反応により生合成されることが分かっているが、CO 生成反応の分子機構は不明な状況であった。本研究では、[NiFe] 型ヒドロゲナーゼが利用している CO の生合成に関

わる酵素 (HypX) の結晶構造を決定し, HypX がこれまでに全く例の無い反応により CO を合成していることを明らかにした。HypX は二つのドメイン (N 末ドメインと C 末ドメイン) から構成されており, 分子内部にはこれら二つのドメインにまたがる形でキャビティーが存在している。また, C 末ドメイン側のキャビティーには, 補酵素 A (coenzyme A: CoA) が結合していることが分かった。得られた結晶構造を基に, 下記のような CO 合成反応機構を提唱した。HypX の N 末ドメインと C 末ドメインでは, それぞれ異なる二つの化学反応が進行する。N 末ドメインでは, 反応基質として N 末ドメイン中のキャビティーに結合したホルミルテトラヒドロ葉酸から CoA へのホルミル基転移反応が進行する。この時, キャビティー中の CoA は直鎖状に伸びたコンフォメーションを取り, CoA の末端にある -SH 基は N 末ドメインに結合したホルミルテトラヒドロ葉酸中のホルミル基の側に位置し, CoA へのホルミル基転移反応によりホルミル-CoA が反応中間体として生成する。生成したホルミル-CoA は, CoA 分子の末端部分に存在するホルミル基が, HypX の C 末ドメイン中の酵素活性サイトに位置するよう, キャビティー中で大きくそのコンフォメーションが変化する。C 末ドメインでは, ホルミル-CoA からの CO 脱離反応が進行し, CO と CoA が生成する。

B-1) 学術論文

N. MURAKI, C. KITATSUJI, Y. OKAMOTO, T. UCHIDA, K. ISHIMORI and S. AONO, “Structural Basis for Heme Transfer Reaction in Heme Uptake Machinery from Corynebacteria,” *Chem. Commun.* **55**, 13864–13867 (2019).

N. MURAKI, K. ISHII, S. UCHIYAMA, S. G. ITOH, H. OKUMURA and S. AONO, “Structural Characterization of HypX Responsible for CO Biosynthesis in the Maturation of NiFe-Hydrogenase,” *Commun. Biol.* **2**, 385 (12 pages) (2019).

B-4) 招待講演

青野重利, 「ヘムが関与する生体内シグナルセンシングおよびシグナル伝達」, 同志社大学ナノ・バイオサイエンス研究センター私大戦略「細胞自在操作のための分子化学技術の開発拠点形成」2018年度成果報告会, 同志社大学, 京田辺市, 2019年4月.

S. AONO, “Structural Characterization of HypX Responsible for CO Biosynthesis in the Maturation of [NiFe]-Hydrogenases,” Frontier Bioorganization Forum 2019, Seoul (Korea), July 2019.

S. AONO, “Structural Characterization of HypX Responsible for CO Biosynthesis to assemble the active site of [NiFe]-Hydrogenase,” 2019 Korea-Taiwan-Japan Biological Inorganic Chemistry Symposium, Taichung (Taiwan), November 2019.

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, 2019–2020).
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–).
豊田理化学研究所審査委員会委員 (2019–).

B-10) 競争的資金

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).
科研費新学術領域研究「生命金属科学」(計画研究), 「生命金属動態を鍵反応とするセンサー分子システムの構築と生理機能制御」, 青野重利 (2019年–2023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、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のみならず、これら新規金属タンパク質の生合成反応機構解明に関する研究も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) 代表的な抗体である免疫グロブリン G (IgG) の Fc 領域に結合している糖鎖は、免疫細胞上に発現している Fc γ 受容体 (Fc γ R) との相互作用を通じて発揮されるエフェクター機能の発動に大きな影響を与えている。これまで、IgG と Fc γ R の相互作用は、IgG から切り出した Fc 断片を対象にした結晶構造解析がもたらす静的情報に基づいて議論されてきた。これに対して我々は、両者の相互作用の実態解明に向けて、糖鎖を含めた Fc の 3 次元構造ダイナミクスを精査した。そのために、水溶液中の Fc の分子動力学計算を実施し、その結果を核磁気共鳴法 (NMR) と X 線小角散乱により実験的に評価した。これにより、Fc を構成する糖鎖とアミノ酸残基の相互作用のネットワークの動態を可視化することが可能となり、糖鎖が規定する Fc 局所の構造ダイナミクスが Fc γ R との会合を制御する仕組みが明らかとなった。また、細胞膜上での IgG の分子挙動を理解するために、高速原子間力顕微鏡を用いて細胞膜模倣環境における Fc γ R と IgG の相互作用をリアルタイムで観測するとともに、水素重水素交換質量分析法により IgG と Fc γ R との相互作用部位を探索した。その結果、IgG と Fc γ R の相互作用には、Fc 領域のみならず Fab 領域も直接関わっていることを初めて明らかにした。本研究の成果は、タンパク質工学的な分子デザインを通じて抗体医薬の高機能化をはかる上で重要な知見を与えるものである。一方、NMR がバイオ医薬品としての抗体の構造評価をする上で実用的なツールとなることを、大規模な国際共同研究を通じて実証することができた。
- b) 巨大プロテアーゼ複合体であるプロテアソームの構造形成がサブユニット集合を介助する一連のシャペロンの関与のもとで進行するプロセスであることに注目し、複合体の中核をなす α リングを標的として、その形成過程を追跡した。 α リングは 7 種類の異なるサブユニット (α 1- α 7) から成るヘテロ 7 量体である。溶液中における集合状態を解析したところ、 α 7 のみが 7 量体のリングが 2 つ重なったホモ 14 量体を形成することが明らかとなった。さらに、結晶構造情報に基づいて部位特異的変異を施すことで、 α 7 のホモ 14 量体を 7 量体化することや、単量体として安定に存在させるなど、その集合状態を制御することに成功した。こうして単量体化した α 7 と特定のサブユニット同士を組み合わせることにより、ヘテロ 14 量体構造を構築することにも成功した。また、X 線結晶構造解析によりアッセンブリーシャペロンである PAC3 および PAC4 の 3 次元構造を決定するとともに、NMR 解析を通じて、PAC3 上の α 6 サブユニットの結合部位と予想されるループが柔軟な構造をとることを明らかにした。一方、シアノバクテリアの概日リズムを担う時計タンパク質の相互作用に関しても、NMR と質量分析を組み合わせた構造解析を実施した。その結果、KaiC のリング内に埋もれている C 末端が、ATP の加水分解に伴って溶液中に露出することによって KaiA と相互作用することを見出した。さらに、ATP の加水分解に伴う KaiC 6 量体と KaiB との協同的な結合を捉えるとともに、KaiB 間の協同的な相互作用に重要なアミノ酸残基を同定した。以上の研究を通じて、タンパク質の離合集散の分子機構の構造基盤を与える知見を得ることができた。

B-1) 学術論文

S. G. ITOH, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and H. OKUMURA, “Effects of a Hydrophilic/Hydrophobic Interface on Amyloid- β Peptides Studied by Molecular Dynamics Simulations and NMR Experiments,” *J. Phys. Chem. B* **123**, 160–169 (2019).

R. G. BRINSON, J. P. MARINO, F. DELAGLIO, L. W. ARBOGAST, R. M. EVANS, A. KEARSLEY, G. GINGRAS, H. GHASRIANI, Y. AUBIN, G. K. PIERENS, X. JIA, M. MOBILI, H. G. GRANT, D. W. KEIZER, K. SCHWEIMER, J. STÄHLE, G. WIDMALM, E. R. ZARTLER, C. W. LAWRENCE, P. N. REARDON, J. R. CORT, P. XU, F. NI, S. YANAKA, K. KATO, S. R. PARNHAM, D. TSAO, A. BLOMGREN, T. RUNDLÖF, N. TRIELOFF, P. SCHMIEDER, A. ROSS, K. SKIDMORE, K. CHEN, D. KEIRE, D. I. FREEDBERG, T. SUTER-STAHLE, G. WIDER, G. ILC, J. PLAVEC, S. A. BRADLEY, D. M. BALDISSERI, M. I. SFORÇA, A. C. M. ZERI, J. Y. WEI, C. M. SZABO, C. A. AMEZCUA, J. B. JORDAN and M. WIKSTRÖM, “Enabling Adoption of 2D-NMR for the Higher Order Structure Assessment of Monoclonal Antibody Therapeutics,” *mAbs* **11**, 94–105 (2019).

Y. HARADA, T. SUZUKI, T. FUKUSHIGE, Y. KIZUKA, H. YAGI, M. YAMAMOTO, K. KONDO, H. INOUE, K. KATO, N. TANIGUCHI, T. KANEKURA, N. DOHMAE and I. MARUYAMA, “Generation of the Heterogeneity of Extracellular Vesicles by Membrane Organization and Sorting Machineries,” *Biochim. Biophys. Acta, Gen. Subj.* **1863**, 681–691 (2019).

T. MATSUI, S. KAMATA, K. ISHII, T. MARUNO, N. GHANEM, S. UCHIYAMA, K. KATO, A. SUZUKI, N. ODAUEDA, T. OGAWA and Y. TANAKA, “SDS-Induced Oligomerization of Lys49-Phospholipase A₂ from Snake Venom,” *Sci. Rep.* **9**, 2330 (8 pages) (2019).

NARENTUYA, Y. TAKEDA-UCHIMURA, T. FOYEZ, Z. ZHANG, T. O. AKAMA, H. YAGI, K. KATO, Y. KOMATSU, K. KADOMATSU and K. UCHIMURA, “GlcNAc6ST3 Is a Keratan Sulfate Sulfotransferase for the Protein-Tyrosine Phosphatase PTPRZ in the Adult Brain,” *Sci. Rep.* **9**, 4387 (11 pages) (2019).

Y. HARADA, Y. KIZUKA, Y. TOKORO, K. KONDO, H. YAGI, K. KATO, H. INOUE, N. TANIGUCHI and I. MARUYAMA, “N-Glycome Inheritance from Cells to Extracellular Vesicles in B16 Melanomas,” *FEBS Lett.* **593**, 942–951 (2019).

T. SATOH, M. YAGI-UTSUMI, K. OKAMOTO, E. KURIMOTO, K. TANAKA and K. KATO, “Molecular and Structural Basis of the Proteasome α Subunit Assembly Mechanism Mediated by the Proteasome-Assembling Chaperone PAC3-PAC4 Heterodimer,” *Int. J. Mol. Sci.* **20**, 2231 (10 pages) (2019).

T. SEKIGUCHI, T. SATOH, E. KURIMOTO, C. SONG, T. KOZAI, H. WATANABE, K. ISHII, H. YAGI, S. YANAKA, S. UCHIYAMA, T. UCHIHASHI, K. MURATA and K. KATO, “Mutational and Combinatorial Control of Self-Assembling and Disassembling of Human Proteasome α Subunits,” *Int. J. Mol. Sci.* **20**, 2308 (14 pages) (2019).

Y. YUNOKI, K. ISHII, M. YAGI-UTSUMI, R. MURAKAMI, S. UCHIYAMA, H. YAGI and K. KATO, “ATP Hydrolysis by KaiC Promotes Its KaiA Binding in the Cyanobacterial Circadian Clock System,” *Life Sci. Alliance* **2**, e201900368 (7 pages) (2019).

S. YANAKA, R. YOGO, R. INOUE, M. SUGIYAMA, S. G. ITOH, H. OKUMURA, Y. MIYANOIRI, H. YAGI, T. SATOH, T. YAMAGUCHI and K. KATO, “Dynamic Views of the Fc Region of Immunoglobulin G Provided by Experimental and Computational Observations,” *Antibodies* **8**, 39 (13 pages) (2019).

R. YOGO, Y. YAMAGUCHI, H. WATANABE, H. YAGI, T. SATOH, M. NAKANISHI, M. ONITSUKA, T. OMASA, M. SHIMADA, T. MARUNO, T. TORISU, S. WATANABE, D. HIGO, T. UCHIHASHI, S. YANAKA, S. UCHIYAMA and K. KATO, “The Fab Portion of Immunoglobulin G Contributes to Its Binding to Fcγ Receptor III,” *Sci. Rep.* **9**, 11957 (10 pages) (2019).

R. INOUE, T. NAKAGAWA, K. MORISHIMA, N. SATO, A. OKUDA, R. URADE, R. YOGO, S. YANAKA, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO, K. OMOTO, K. ITO and M. SUGIYAMA, “Newly Developed Laboratory-Based Size Exclusion Chromatography Small-Angle X-Ray Scattering System (La-SSS),” *Sci. Rep.* **9**, 12610 (12 pages) (2019).

R. MURAKAMI, Y. YUNOKI, K. ISHII, K. TERAUCHI, S. UCHIYAMA, H. YAGI and K. KATO, “Cooperative Binding of KaiB to the KaiC Hexamer Ensures Accurate Circadian Clock Oscillation in Cyanobacteria,” *Int. J. Mol. Sci.* **20**, 4550 (10 pages) (2019).

C. CHO, J. JANG, Y. KANG, H. WATANABE, T. UCHIHASHI, S. J. KIM, K. KATO, J. Y. LEE and J.-J. SONG, “Structural Basis of Nucleosome Assembly by the Abo1 AAA+ATPase Histone Chaperone,” *Nat. Commun.* **10**, 5764 (13 pages) (2019).

B-3) 総説, 著書

M. YAGI-UTSUMI, “NMR Characterization of Conformational Dynamics and Molecular Assemblies of Proteins,” *Biol. Pharm. Bull.* **42**, 867–872 (2019).

加藤晃一, 矢木真穂, 山口拓実, 「糖鎖解析技術：核磁気共鳴 (NMR) 法」, 「糖鎖分析」, 日本分析化学会編, 丸善出版, pp. 209–214 (2019).

植草義徳, 加藤晃一, 矢木真穂, 「NMR による糖鎖-タンパク質相互作用の解析」, 「糖鎖分析」, 日本分析化学会編, 丸善出版, pp. 246–252 (2019).

矢木宏和, 鈴木達哉, 谷中冴子, 山口拓実, 加藤晃一, 「核磁気共鳴分光法と分子動力学計算を通じて観る糖鎖の動的構造とレクチンの糖鎖認識の理解」, *医学のあゆみ* **69**, 761–767 (2019).

C. SATO, K. KATO, Y. YAMAGUCHI, D. KOHDA, R. KATO, K. G. N. SUZUKI, K. KIKUCHI, G. HIRAI, Y. KIZUKA, K. TANAKA, Y. NAKASHIMA and M. SETOU, “Structural Biology of Glycans,” in *Glycoscience: Basic Science to Applications*, N. Taniguchi, T. Endo, J. Hirabayashi, S. Nishihara, K. Kadomatsu, K. Akiyoshi and K. F. Aoki-Kinoshita, Eds., Springer, Singapore, 35–63 (2019).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

K. KATO and T. SATO, “Mechanistic insights on the dynamics of proteasome formation,” 2019 EWU-NCU joint symposium (第3回名古屋市立大学-梨花女子大学ジョイントシンポジウム), 名古屋, 2019年2月.

矢木真穂, 「神経変性疾患の解明を目指した構造生物学研究」, サントリー生命科学財団セミナー, 京都, 2019年3月.

加藤晃一, 「極限環境生命探査: ExCELLS の挑戦」, 宇宙科学談話会, 相模原, 2019年3月.

加藤晃一, 「生命分子システムの動秩序形成機構の探究」, 第3回名古屋リズム研究会, 名古屋, 2019年3月.

K. KATO, “Determinants for Glycoprotein Fates in Cells,” International Symposium on Bio-CHAINS from Single Molecules to Highly Organized Systems, 岐阜, 2019年6月.

K. KATO, “What is ExCELLS?” ExCELLS visit talks, Taipei (Taiwan), 2019年6月.

M. YAGI-UTSUMI, “Biophysical characterization of environment-dependent biomolecular assemblies,” ExCELLS visit talks, Taipei (Taiwan), 2019年6月.

加藤晃一, 白瀧千夏子, 「生命創成探究センター (ExCELLS) の共同利用研究」, 第19回日本蛋白質科学会年会・第71回日本細胞生物学会大会合同年次大会, 神戸, 2019年6月.

K. KATO, “Experimental and Computational Approaches for Elucidating Glycofunctional Mechanisms,” The 23rd International Annual Symposium on Computational Science and Engineering: Expanding Your Mind, Chiang Mai (Thailand), 2019年6月.*

K. KATO, “NMR characterization of dynamic conformations and interactions of functional oligosaccharides and antibody glycoproteins,” 8th Asia-Pacific NMR Symposium, Singapore, 2019年7月.

S. YANAKA, R. YOGO, R. INOUE, M. SUGIYAMA, S. G. ITOH, H. OKUMURA, Y. MIYANOIRI, H. YAGI, T. SATOH, T. YAMAGUCHI and K. KATO, “Dynamic Views of the Fc Portion of Immunoglobulin G Provided by Experimental and Computational Observations,” Frontier Bioorganization Forum 2019, Seoul (Korea), 2019年7月.

M. YAGI-UTSUMI, S. G. ITOH, H. OKUMURA, K. NISHIMURA and K. KATO, “NMR characterization of conformational transition of amyloid- β on ganglioside membrane,” Frontier Bioorganization Forum 2019, Seoul (Korea), 2019年7月.

K. KATO, T. SUZUKI, T. WATANABE, T. SAITO, G. YAN, T. SATOH, S. YANAKA, H. YAGI and T. YAMAGUCHI, “Biomolecular engineering of Lewis X-containing oligosaccharides,” Frontier Bioorganization Forum 2019, Seoul (Korea), 2019年7月.

加藤晃一, 「令和初めての夏に想う, 抗体のNMR から学んだこと」, 第20回若手NMR研究会, 蒲郡, 2019年8月.

谷中冴子, 「抗体の構造研究から学ぶ, 研究者ってどんな職業?」, 中高生のための未来教室——ホンネで語るライフサイエンスの道! , 東京, 2019年9月.

K. KATO, R. YOGO, H. YAGI and S. YANAKA, “Dynamic Views of Structures and Interactions of Antibodies,” The 10th Toyota RIKEN International Workshop on Science of Life Phenomena Woven by Water and Biomolecules, 長久手, 2019年9月.

S. YANAKA, “Experimental and computational observations of the dynamics of the Fc region of immunoglobulin G,” Satellite meeting for PF Workshop “Marriage of Computational and Experimental Techniques for Solution Small-Angle Scattering,” Kumatori, 2019年9月.

加藤晃一, 「物質と生命をつなぐ分子のオーケストレーション」, 第3回J-PARC 国際シンポジウム「宇宙・物質・生命の起源を求めて」市民公開講座, つくば, 2019年9月.

M. YAGI-UTSUMI and K. KATO, “Biophysical characterization of environment-dependent protein assemblies of physiological and pathological interest,” 第57回日本生物物理学会年会, 宮崎, 2019年9月.

K. KATO, “Lessons Learned from Antibody NMR,” Prof. Yoji Arata memorial session, The 58th Annual Meeting of the Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan, Kawasaki, 2019年11月.

矢木真穂, 「アルツハイマー病の解明を目指したNMR 構造研究」, 東京大学社会連携講座: 革新分子構造解析講座公開シンポジウム——低分子からタンパク質まで, 統合分子構造解析——, 東京, 2019年11月.

矢木真穂, 「古細菌タンパク質の高次構造多型の解析」, 2019年度第1回中性子構造生物学研究会, 東京, 2019年11月.

K. KATO, T. SUZUKI, T. WATANABE, T. SAITO, G. YAN, T. SATOH, S. YANAKA, H. YAGI and T. YAMAGUCHI, “Glycoengineering based on biomolecular science,” 2nd International Conference on Materials Research and Innovation (ICMARI), Bangkok (Thailand), 2019年12月.

K. KATO, “Biophysical insights into dynamical protein assembly systems,” IMS-PCOSS Bilateral Symposium, Xiamen (China), 2019年12月.

B-6) 受賞, 表彰

加藤晃一, 日本薬学会奨励賞 (2000).

神谷由紀子, 特定領域研究「タンパク質の社会」全体班会議ポスター優秀賞 (2008).

西尾美穂, 第 73 回日本生化学会中部支部例会奨励賞 (2009).

神谷由紀子, 糖鎖科学名古屋拠点若手研究者奨励賞 (2009).

矢木真穂, 第 74 回日本生化学会中部支部例会奨励賞 (2010).

西尾美穂, 糖鎖科学名古屋拠点第 8 回「若手の力フォーラム」奨励賞 (2010).

加藤晃一, 日本薬学会学術振興賞 (2011).

矢木真穂, 第 11 回蛋白質科学会年会若手奨励賞 (2011).

山本さよこ, The International Symposium on Nuclear Magnetic Resonance 2011 (ISNMR 2011) 若手ポスター賞 (2011).

加藤晃一, 第 48 回ヘルツ賞 1 等賞 (2011).

山口拓実, 日本化学会第 92 春季年会優秀講演賞 (学術) (2012).

Y. ZHANG, 平成 24 年度総合研究大学院大学学長賞 (2012).

雲井健太郎, 第 12 回日本蛋白質科学会年会ポスター賞 (2012).

山口拓実, 第 15 回日本糖質学会ポスター賞 (2013).

Y. HANG, 糖鎖科学中部拠点奨励賞 (2013).

山口拓実, 第 7 回バイオ関連化学シンポジウム講演賞 (2013).

山口拓実, 第 3 回自然科学研究機構若手研究者賞 (2014).

T. ZHU, 第 87 回日本生化学会大会若手優秀発表者賞 (鈴木紘一メモリアル賞) (2014).

矢木真穂, The 3rd International Symposium of “Dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions” Poster Presentation Award (2015).

A. SIKDAR, The Winter School of Sokendai/ Asian CORE Program, Poster Presentation Award (2015).

T. ZHU, 第 12 回「若手の力」フォーラム平成 27 年度糖鎖科学中部拠点奨励賞 (2015).

T. ZHU, The 4th International Symposium of “Dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions” Poster Presentation Award (2015).

谷中冴子, 第 32 回井上研究奨励賞 (2016).

谷中冴子, 第 80 回日本生化学会中部支部例会奨励賞 (2016).

與語理那, OIIB retreat 2016 Best Poster Award (2016).

柚木康弘, 第 4 回将来を見据えた生体分子の構造・機能解析から分子設計に関する研究会優秀発表賞 (2016).

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

柚木康弘, 第 81 回日本生化学会中部支部会奨励賞 (2017).

與語理那, 第 81 回日本生化学会中部支部会奨励賞 (2017).

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).
齋藤泰輝, 第 6 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 (2018).
本田怜奈, 日本化学会東海支部長賞 (2018).
與語理那, 日本薬学会第 139 年会学生優秀発表賞 (2018).
齋藤泰輝, 第 1 回日本糖質学会優秀講演賞 (2019).
本田怜奈, 第 21 回日本糖質学会ポスター賞 (2019).
柚木康弘, 第 26 回学術大会日本時間生物学会優秀ポスター賞 (2019).
梅澤芙美子, 第 3 回 Glycolleague 優秀発表賞 (2019).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本バイオイメーキング学会評議員 (1995–), 理事 (2012–2016).
日本生化学会評議員 (2002–), 代議員 (2005–).
日本糖質学会評議員 (2003–), 理事 (2013–).
日本核磁気共鳴学会評議員 (2006–2012, 2016–), 理事 (2008–2012, 2014–), 副会長 (2016–2017), 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 回バイオイメーキング学会組織委員・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–).
ISMAR-APNMR-NMRSJ-SEST2021 合同会議実行委員会委員, 募金委員会委員長 (2019–).

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」「生命薬科学研究入門」「薬学概論」「一般教養科目 創薬と生命」「免疫学」「バイオインフォマティクス」「創薬科学・知的財産活用論」, 2015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」, 2015年- .
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–2016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マイクロ–マクロ相関の探査と設計原理の探求」,加藤晃一(2013年–2018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–2017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–2019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–2019年).

宇宙航空研究開発機構「さほう」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–2019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–2019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–2020年).

科研費基盤研究(A),「先端計測アプローチの統合による抗体の構造動態と機能発現の連関機構の解明」,加藤晃一(2019年–2023年).

科研費基盤研究(C),「タンパク質分子を取り巻く環境を考慮した構造解析によるアミロイド形成機構の解明」,矢木真穂(2019年–2022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 (2019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 (2019年).

東ソー(株),「単一糖鎖結合抗体のFcR への結合性解析」,加藤晃一 (2019年).

C) 研究活動の課題と展望

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。微小重力環境下において形成したアミロイド線維の構造解析を遂行するとともに、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。こうした目的に向けて、緩歩動物の乾眠現象の分子機構、深海における生命体共生の分子基盤、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，タンパク質工学

A-2) 研究課題：

- a) 回転分子モーター V_1 の化学力学エネルギー変換機構を解明
- b) 光学顕微鏡によるマルチカラー高速高精度1分子観察を実現

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 高速高精度な1分子解析を用い，高分解能の構造情報が得られている腸球菌由来の V_1 モーターを対象とし，回転運動の詳細な1分子解析を行うことに成功した。具体的には， V_1 モーターの回転軸に直径 40 nm の金ナノ粒子を回転運動の可視化プローブとして取り付け，独自に開発した対物レンズ型全反射照明暗視野レーザー顕微鏡を用いて 100 マイクロ秒の時間分解能で回転運動を1分子解析することに成功した。1分子解析の結果，1個の ATP の加水分解に相当する 120° の回転がさらに，40° と 80° のより小さな角度の回転（サブステップ）に分離できることを初めて発見した。また，ATP 加水分解が遅い変異体を用い，さらに反応生成物の ADP を加えた実験では，本来の回転方向（ V_0 部分からみて反時計回り）とは逆向きに -80° もしくは -40° 回転する様子が観察された。回転運動中の停止時間の分布を解析することで，40° サブステップ前の停止では3つ，80° サブステップ前の停止では1つ，合計で4つの時定数が得られ，これらの時定数が ATP 加水分解反応の4つの素過程（ATP の結合，ATP のリン酸結合の開裂，反応生成物 ADP の解離，反応生成物リン酸の解離）に対応することを明らかにした。さらに，1分子解析で得られた結果を X 線結晶構造解析による構造情報と組み合わせることで， V_1 の化学力学共役機構のモデルを提案した。本研究で明らかにした V_1 の化学力学共役機構では，反応生成物のリン酸が先に V_1 から解離し，もう一つの反応生成物の ADP は後から解離する。類縁の F_1 モーターとの比較で興味深いのは， F_1 ではこの順番が逆（ADP が先，リン酸が後）な点である。細胞内には ATP と ADP の両方が存在し，しかも ATP の濃度は ADP の 10 倍程度高いことが知られている。 F_1 が細胞内で ATP 加水分解の逆反応である ATP 合成を行うためには，このような細胞内環境下で ATP ではなく ADP を選択的に結合する必要がある。 F_1 は逆反応の ATP 合成時，リン酸を先に結合することで ATP の結合を防いでいると考えられる。他方，細胞内での V_1 の役割は ATP 加水分解によるイオンの能動輸送（電気化学ポテンシャルの形成）であり，この場合はリン酸と ADP のどちらが先に解離しても問題ない。このように， F_1 と V_1 の化学力学共役機構の違いは，それぞれの生理的な役割と密に関係していることが示唆された。
- b) 光学顕微鏡によるマルチカラー高速1分子イメージングを実現した。銀ナノ粒子は紫色光に，金銀合金ナノ粒子（金と銀を 1：1 で混合）は青色光に共鳴し，それらの光を強く散乱する。光の波長によって散乱の効率が異なる特性を利用することで，金，銀，金銀合金ナノ粒子を見分けられると考えた。3種のナノ粒子の散乱光を選択的に捉えるため，マルチカラー全反射暗視野顕微鏡を開発した。照明光学系は共鳴波長に合致した複数のレーザー（404 nm，473 nm，561 nm）で構成され，3種のナノ粒子を同時に照明することができる。また，検出光学系にスリットを開いた分光器を用いることで，高速 CMOS カメラの受光面の異なる部分に，各波長の散乱像を同時に結像できる。プローブには，直径 30 nm の銀ナノ粒子，30 nm の金銀合金ナノ粒子，40 nm の金ナノ粒子を用いた。本装置では，銀ナノ粒子は 404 nm，金銀合金ナノ粒子は 473 nm，金ナノ粒子は 561 nm のチャンネルでそれぞれ，高いコントラストの散乱像が得られた。また得られた散乱像のシグナル／ノイズ比は高く，100 マイクロ秒の時間分解能で 2 nm，1 ミリ

秒の時間分解能で 0.6 nm の位置決定精度を達成できた。次に、開発した装置で生体分子の観察を行った。まず、ガラス基板上に形成した人工生体膜中を拡散運動するリン脂質の様子を観察した。金、銀、金銀合金ナノ粒子で標識されたリン脂質の挙動を、100 マイクロ秒の時間分解能で同時に追跡することに成功した。また、膜上の金ナノ粒子と金銀合金ナノ粒子が近接して粒子対を形成する様子を観察することができた。金属ナノ粒子は、お互いが非常に近接すると相互作用して、共鳴波長が長波長（赤色）側へシフトすることが知られている。開発装置に赤色（649 nm）のレーザー光をさらに追加して計測したところ、粒子対の近接に伴って赤色の散乱光が増大する様子も捉えられた。粒子対が近接する時間は数ミリ秒程度であり、開発装置はこのような一過的な現象を詳細に捉えることを可能にした。さらに、生体内で物質輸送を担うモータータンパク質キネシンの観察も行った。キネシンの片足に金、銀、金銀合金ナノ粒子を結合させ、100 マイクロ秒の時間分解能で動きを観察した。先行研究と一致する 16 nm の歩幅で、レールである微小管の上を直進する様子を捉えることができた。

B-1) 学術論文

J. ANDO, A. NAKAMURA, M. YAMAMOTO, C. SONG, K. MURATA and R. IINO, “Multicolor High-Speed Tracking of Single Biomolecules with Silver, Gold, Silver-Gold Alloy Nanoparticles,” *ACS Photonics* **6**, 2870–2883 (2019). DOI: 10.1021/acsp Photonics.9b00953

T. IIDA, Y. MINAGAWA, H. UENO, F. KAWAI, T. MURATA and R. IINO, “Single-Molecule Analysis Reveals Rotational Substeps and Chemo-Mechanical Coupling Scheme of *Enterococcus hirae* V₁-ATPase,” *J. Biol. Chem.* **294**, 17017–17030 (2019). DOI: 10.1074/jbc.ra119.008947

Y. ZHANG, Y. MINAGAWA, H. KIZOE, K. MIYAZAKI, R. IINO, H. UENO, K.V. TABATA, Y. SHIMANE and H. NOJI, “Accurate High-Throughput Screening Based on Digital Protein Synthesis in a Massively Parallel Femtoliter Droplet Array,” *Sci. Adv.* **5**, eaav8185 (11 pages) (2019). DOI: 10.1126/sciadv.aav8185

B-3) 総説、著書

中村彰彦, 岡崎圭一, 古田忠臣, 櫻井 実, 飯野亮太, 「キチン加水分解酵素は熱ゆらぎを利用して1方向に動きながら結晶性バイオマスを分解する」, *生物物理* **59**, 330–333 (2019).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

R. IINO, “Single-molecule dynamics of motor proteins visualized by plasmonic nanoprobe,” 2nd NIBB-Princeton Joint Symposium, Okazaki (Japan), October 2019.

R. IINO, “Watching dynamic motions of protein motors with plasmonic nanoprobe,” Seminar at School of Chemistry, University of Southampton, Southampton (U.K.), October 2019.

R. IINO, “Watching dynamic motions of protein motors with plasmonic nanoprobe,” Seminar at School of Chemistry,, University of Manchester, Manchester (U.K.), October 2019.

R. IINO, “Watching dynamic motions of protein motors with plasmonic nanoprobe,” PhysChem seminar, School of Chemistry, University of Edinburgh, Edinburgh (U.K.), October 2019.

R. IINO, “Watching dynamic motions of protein motors with plasmonic nanoprobe,” Seminar at School of Chemistry, University of Bristol, Bristol (U.K.), October 2019.

R. IINO, “Watching dynamic motions of hydrolysis-powered protein motors with plasmonic nanoprobe,” The 10th Toyota RIKEN international workshop, Nagakute (Japan), September 2019.

R. IINO, “Visualizing dynamic motions of protein molecular motors with plasmonic nanoprobe,” 2019 Japan-Korea Molecular Science Symposium, Nagoya (Japan), July 2019.

R. IINO, “Watching motor protein dynamics with plasmonic nanoprobe,” 2nd East Asian Symposium on Single-Molecule Biological Sciences, Seoul (Korea), July 2019.

R. IINO, “Single-molecule dynamics of protein molecular motors visualized by plasmonic nanoprobe,” The workshop in NCCR, University of Basel, Basel (Switzerland), February 2019.

R. IINO, “Dynamics of Protein Molecular Motors Visualized with Plasmonic Nanoprobe,” LaSIE Seminar, Osaka University, Osaka (Japan), January 2019.

飯野亮太, 「プラズモニクナノプローブでタンパク質分子モーターの動きを観る」, OCU 先端光科学シンポジウム, 大阪市立大学, 大阪, 2019年10月.*

飯野亮太, 「プラズモニクナノ粒子を用いた分子モーターの高速高精度1分子イメージング」, 第9回分子モーター討論会, 国立遺伝学研究所, 三島, 2019年6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」, 高分子学会バイオミメティクス研究会, 産総研臨海副都心センター, 東京, 2019年6月.

飯野亮太, 「1分子計測, 構造解析, シミュレーションで探るタンパク質分子モーターの作動機構」, 第24回べん毛研究交流会, ホテル明山荘, 蒲郡, 2019年3月.

中村彰彦, 「ATPに頼らず動く新規リニアモーター酵素」, 生体エネルギー研究会第45回討論会, 九州工業大学, 福岡, 2019年12月.

B-6) 受賞, 表彰

中村彰彦, 日本生物物理学会若手奨励賞 (2019).

飯田龍也, 日本生物物理学会学生発表賞 (2019).

中村彰彦, ATI (公益財団法人新世代研究所) 研究奨励賞 (2019).

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

日本生物物理学会理事 (2019.6–2021.5).

日本生物物理学会中部支部長 (2019.5–2021.4).

日本化学会東海支部常任幹事 (2019.3–2020.2).

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).

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) (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).
日本生物物理学会代議員 (2014–2016).
日本生物物理学会中部支部会計 (2019.6–2020). (中村彰彦)

学会の組織委員等

第 25 回日本バイオイメーキ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 (2012.4.2–2020.3).
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)
公益財団法人新世代研究所水和ナノ構造研究会委員 (2019.4.2–2020.3).

B-10) 競争的資金

住友財団環境研究助成, 飯野亮太 (2019年).
自然科学研究機構 ExCELLS 特別共同研究, 飯野亮太 (2019年).
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分子オンゲ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グリ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).

C) 研究活動の課題と展望

回転分子モーターについては、今後は V_1 部分だけでなく、V-ATPase (V_0 と V_1 の複合体全体)を対象とし、エネルギー変換機構、エネルギー変換効率および可逆性について理解したいと考えている。V-ATPaseは、ナノサイズのエネルギー変換装置であり、ナノサイズの発電装置とも言える。本研究を、V-ATPaseのエネルギー変換の仕組みの研究へとさらに発展させることで将来、生体に適合した発電装置の開発等に繋がる可能性が期待される。また、金属ナノ粒子を用いたマルチカラーイメージングでは、複数種の生体分子により発現される生命現象を、マイクロ秒の時間分解能とナノメートルの位置決定精度で詳細に捉えることを可能にする。また、モータータンパク質をはじめとする生体分子機械は、複数の部品が複合体を形成して機能する。今後は、モータータンパク質内部の複数の部品がいかに関係して直進運動や回転運動を実現するのか、その仕組みを解明する。

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) 生命起源解明を志向した液-液相分離を示す液滴型原始細胞の構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 現在の生命の始祖である原始細胞は、自己触媒的に自己再生産する分子システムと捉えることができる。本研究課題では単純な分子を出発物質とする原始細胞モデルの創成を目指し、水中で再帰的にかつ自己触媒的に自己再生産を行う液滴の構築を試みた。我々は水中で自発的なペプチド生成反応を行うようなチオエステル化シスチンを設計・合成し、ペプチド生成を伴いながら水中で液滴を形成することを微分干渉顕微鏡にて確認した。さらに同じチオエステル化シスチンを液滴に再添加すると、液滴が繰り返し肥大・融合・分裂ダイナミクスを起こすことを見いだした。この液滴は液-液相分離を示しており、脂質や水溶性高分子である RNA や DNA などの核酸を外部より添加すると、脂質を液滴の内側領域に、核酸を液滴の外側領域に取込み濃縮した。

B-1) 学術論文

Y. NATSUME, E. NOGUCHI and K. KURIHARA, “Spontaneous Localization of Particles in Giant Vesicles Owing to Depletion Force,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 033001 (5 pages) (2019).

M. MATSUO, Y. KAN, K. KURIHARA, T. JIMBO, M. IMAI, T. TOYOTA, Y. HIRATA, K. SUZUKI and T. SUGAWARA, “DNA Length-Dependent Division of a Giant Vesicle-Based Model Protocell,” *Sci. Rep.* **9**, 6916 (11 pages) (2019).

M. MATSUO, S. OHYAMA, K. SAKURAI, T. TOYOTA, K. SUZUKI and T. SUGAWARA, “A Sustainable Self-Reproducing Liposome Consisting of a Synthetic Phospholipid,” *Chem. Phys. Lipids* **222**, 1–7 (2019).

H. ITOGA, R. MORIKAWA, T. UETA, T. MIYAKA, Y. NATSUME and M. TAKASU, “Effect of Particles with Repulsive Interactions Enclosed in both Rigid Spherical Shells and Flexible Fluid Vesicles Studied by Monte Carlo Simulation,” *Phys. Rev. E* **99**, 042418 (12 pages) (2019).

I. ISHII, Y. OMINATO, A. KARASAWA, T. TAKAHASHI, M. MATSUO, K. SUZUKI and T. SUGAWARA, “Morphological Changes of Kinetically Trapped Tubular Vesicles Driven by the Production of Synthetic Phospholipids in a Vesicular Membrane,” *Chem. Lett.* **48**, 932–935 (2019).

B-3) 総説, 著書

夏目ゆうの, 村岡 梓, 「数物科学科における初学年の物理実験——数学, 情報, 物理の3コース制での取り組み」, *大学の物理教育* **25**, 91–95 (2019).

松尾宗征, 「人工細胞はシンギュラリティを越えられるか!? ——現代の錬金術で生命の創発に挑む」, *academist Journal*, <https://academist-cf.com/journal/?p=11629> (2019).

B-4) 招待講演

Y. NATSUME, “A study of crowding effect in a cell model using a statistical mechanics approach,” The 57th Annual Meeting of The Biophysical Society of Japan, Miyazaki (Japan), September 2019.

栗原顕輔, 「物理学および化学的原始細胞モデルの構築」, H30年度アストロバイオロジーセンター若手分野間連携ワークショップ, 三鷹, 2019年2月.

栗原顕輔, 「ペプチド合成系を内包する自己再生産分子集合体の構築」, 第19回優秀論文賞受賞講演会, 品川, 2019年9月.

K. KURIHARA, “Constructive biology approach to supramolecular artificial cell,” The 3rd UK-Japan Frontiers of Science Symposium (UK-Japan FoS 2019), Urayasu, Chiba (Japan), November 2019.

B-6) 受賞, 表彰

栗原顕輔, クリタ水・環境科学研究優秀賞 (2018).

松尾宗征, 愛知県わかしやち奨励賞 (2019).

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).

職場体験学習受入岡崎市立翔南中学校 (2019年). (栗原顕輔, 夏目ゆうの, 松尾宗征)

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」, 2019年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,「リビ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ボソームの開発」,栗原顕輔 (2014年–2016年).

積水化学自然に学ぶものづくり研究助成,「生物の細胞内液-液相分離に学ぶ自己組織化するソフトマテリアルの創製」,松尾宗征 (2019年–2020年).

中部科学技術センターみらい・学術助成,最優秀提案「新規ドラッグデリバリーシステムに応用可能な自己増殖するペプチド液滴の創製」,松尾宗征 (2019年–2020年).

C) 研究活動の課題と展望

本研究課題で用いた液滴型人工細胞は液-液相分離しており,その疎水性,親水性にかかわらず物質を取込む性質が認められた。このような液-液相分離を示す液滴は,原始細胞の進化過程において潜在的に各進化段階の物質も吸収,濃縮するため,数多く存在する生命起源仮説を否定することなく,各仮説の隔たりを埋めることができるミッシングリンクを提供できると期待される。

今後は触媒能を発現するRNAであるリボザイムを内包する液滴の形成と,その液滴の増殖を目標とし,より生命らしい機能を持つ液滴型人工細胞の構築を行う予定である。従来の生命起源に関する仮説では, RNA を生命起源とするRNAワールドが確立した後に, RNA とタンパク質様の物質との相互作用により生命の構築がなされて,情報と触媒作用機能を併せもつ生命システムが創発されると考えられているが,今後の研究課題ではRNAを含む液滴内部でペプチドの合成が起こるため,相互作用が大きい初期段階でのカップリングが可能となるだろう。

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。本年度は，酸素ガスを加圧して金属錯体触媒と反応させることで，酸素分子を末端酸化剤として活用することを検討した。気体を圧縮すると，断熱圧縮により加熱されて可燃物が存在するとそのまま燃焼する。そのため可燃物である有機基質や溶媒，金属錯体触媒を酸素ガス存在下で加圧するには大きな危険が伴う。そこで有機反応溶液を水溶液中に酸素ガスで分散させて，その結果生成するエマルジョン様溶液を加圧することを考案した。本年度は，この計画を実現するための装置開発に取り組んだ。
- b) メタンの酸化反応では，生成したメタノールがさらに酸化される過剰酸化が大きな問題となっている。本研究では，過剰酸化の問題に焦点を絞って検討する目的で，メタンとオゾンの等量反応を検討した。気相中ではメタンとオゾンガスは100min程度の時間軸で反応して，主として一酸化炭素と二酸化炭素を生成することが知られている。この反応を水溶液中のファインバブル中で行うことで，反応初期に生成するメタノール等を過剰酸化される前に抽出分離することを試みた。メタンとオゾンを等量混合可能な装置を新規に製作した。またメタンを定量することで，メタン酸化反応の進行を追跡する手法を確立した。

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).

科研費基盤研究(C),「食品科学応用を目指したファインバブル活性酸素の基礎化学研究」, 倉橋拓也(2019年-2022年).

生体分子情報研究部門

塚本 寿夫 (助教) (2014年2月1日着任)

A-1) 専門領域：光生物学, 生物物理学

A-2) 研究課題：

- a) 動物のオプシンのシグナル伝達特性を活用した新規光操作ツールの開発
- b) 哺乳動物カリウムイオンチャネルの環境依存的構造変化の解析
- c) アゲハチョウ尾端光受容機能を担うタンパク質の解明
- d) サンゴ幼生ではたらく光受容タンパク質の分光特性と遊泳行動との関連

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 動物のオプシンは光受容に伴い三量体 G タンパク質を活性化する, 光感受性 GPCR である。また, 三量体 G タンパク質によって機能制御される様々なイオンチャネルが神経細胞などに存在している。そこで, 様々な色の光で活性化されるオプシンをイオンチャネルと融合させたタンパク質 (群) を作製し, それらが実際に光依存的にチャネル機能を操作できることを電気生理学的解析から明らかにした。これらの融合タンパク質は, 光によって細胞機能を操作するツールとして有用であると考えられる。
- b) 2018年に, 特異なイオン選択性を示すカリウムチャネル TWIK-1 について, イオン環境を変えた際に, イオン選択性を生み出す選択フィルタ部位にどのような構造変化が生じるのかを赤外分光法を用いて解析した結果を報告した (Tsukamoto *et al.*, *J. Biol. Chem.*, 2018)。これに引き続き2019年には, TWIK-1 が外部環境を感知すると考えられる細胞外ドメインに部位特異的蛍光標識を導入し, 結晶構造解析からは不明であった, 透過するイオンの「入り口」を構成するアミノ酸残基がどのような配置になっているのかについて知見を得ることができた。
- c) 前年度までに, 総合研究大学院大学蟻川教授らとの共同研究から, アゲハチョウの生殖行動を制御する尾端光受容細胞に発現する光受容タンパク質候補を同定し, その遺伝子配列を明らかにしていた。そして2018年度にその遺伝子についてゲノム編集技術 (CRISPR/Cas9) を用いて破壊するために, アゲハチョウ受精卵にガイド RNA と Cas9 タンパク質をインジェクションしていた。2019年度は得られたゲノム編集個体を交配させて, 候補タンパク質の遺伝子機能を欠損した純系の確立に取り組んだ。その結果, 交配を進めると受精卵の孵化率が落ちるため, F1 系統での解析が必要であることがわかった。
- d) 前年度までに, 基礎生物学研究所上野教授・酒井博士との共同研究から, サンゴの幼生の遊泳行動が環境光の波長 (色) 変化によって制御されることがわかっていた。また酒井博士が同定したサンゴのオプシンのうち, 一つが紫外光を受容することを見出し, このことはサンゴ幼生が紫外線の弱い環境を好んで着底することと関連すると考えられた。今年度はサンゴの紫外光受容オプシンがどのようなメカニズムで紫外光を感知しているのかを解析し, 2番目の膜貫通ヘリックスに存在する一つの残基のはたらきで, 紫外光を感知できるようになっていることを見出した。

B-1) 学術論文

T. NAGATA, M. KOYANAGI, H. TSUKAMOTO, E. MUTT, G. F. X. SCHERTLER, X. DEUPI X and A. TERAOKA,
“The Counterion-Retinylidene Schiff Base Interaction of an Invertebrate Rhodopsin Rearranges upon Light Activation,”
Commun. Biol. **2**, 180 (9 pages) (2019).

B-4) 招待講演

塚本寿夫,「チャンネル機能の操作ツールとしての無脊椎動物光受容体」,生理研研究会「イオンチャンネルと生体膜のダイナミクス:構造生物学の先にあるもの」,吹田,2019年10月.

塚本寿夫,「“総力戦”としての光操作技術」,第57回日本生物物理学会年会,宮崎,2019年9月.

塚本寿夫,「無脊椎動物オプシンの物性を利用してイオンチャンネルを光操作する」,ISSPワークショップ「レチナルタンパク質の光機能発現の物理と化学」,柏,2019年9月.

B-6) 受賞,表彰

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

日本生物物理学会分野別専門委員(2012).

学会誌編集委員

日本生物物理学会「生物物理」誌編集委員(2017-2018).

その他

日本学術振興会サマープログラム2015,グループディスカッション・ディスカッサー(2015).

出前授業「生き物の分子と進化」岡崎市立岩津中学校(2015).

B-8) 大学での講義,客員

奈良教育大学教育学部,「生物科学特別講義」,2019年8月16日-19日.

B-10) 競争的資金

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ン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-2019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かけ研究,「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).

自然科学研究機構「ネットワーク型研究加速事業(国際)」生理研プロジェクト「機能タンパク質の構造と機能のダイナミクスと,それに基づく細胞・生体システム作動機構の研究拠点の形成」,塚本寿夫(分子研からの参画メンバーとして)(2019年-2021年).

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。
- e) 超高触媒活性を示す単原子触媒種の発生・発現を見出し, その構造評価および有機分子変換触媒としての適用一般性を確立しつつある

B-1) 学術論文

H. HU, A. OHNO, T. SATO, T. MASE, Y. UOZUMI and Y. M. A. YAMADA, "Self-Assembled Polymeric Pyridine Copper Catalysts for Huisgen Cycloaddition with Alkynes and Acetylene Gas: Application in Synthesis of Tazobactam," *Org. Process. Res. Dev.* **23**, 493–498 (2019).

G. HAMASAKA, H. TSUJI, M. EHARA and Y. UOZUMI, "Mechanistic Insight into the Catalytic Hydrogenation of Nonactivated Aldehydes with a Hantzsch Ester in the Presence of a Series of Organoboranes: NMR and DFT Studies," *RSC Adv.* **9**, 10201–10210 (2019).

T. OSAKO, R. KAISER, K. TORII and Y. UOZUMI, "Aqueous Flow Hydroxycarbonylation of Aryl Halides Catalyzed by an Amphiphilic Polymer-Supported Palladium-Diphenylphosphine Catalyst," *Synlett* **30**, 961–966 (2019).

S. YAN, S. PAN, T. OSAKO and Y. UOZUMI, "Solvent-Free A(3) and KA(2) Coupling Reactions with mol ppm Level Loadings of a Polymer-Supported Copper(II)-Bipyridine Complex for Green Synthesis of Propargylamines," *ACS Sustainable Chem. Eng.* **7**, 9097–9102 (2019).

H. OHTA, H. TOBAYASHI, A. KUROO, M. NAKATSUKA, H. KOBAYASHI, A. FUKUOKA, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI, H. MURAYAMA, M. TOKUNAGA and M. HAYASHI, “Surface Modification of a Supported Pt Catalyst Using Ionic Liquids for Selective Hydrodeoxygenation of Phenols into Arenes under Mild Conditions,” *Chem. –Eur. J.* **25**, 14762–14766 (2019).

A. OHTAKA, M. KAWASE, A. USAMI, S. FUKUI, M. YAMASHITA, K. YAMAGUCHI, A. SAKON, T. SHIRAKI, S. NAGATA, Y. KIMURA, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI, T. SHINAGAWA, O. SHIMOMURA and R. NOMURA, “Mechanistic Study on Allylic Arylation in Water with Linear Polystyrene-Stabilized Pd and PdO Nanoparticles,” *ACS Omega* **4**, 15764–15771 (2019).

S. ICHII, G. HAMASAKA and Y. UOZUMI, “The Hiyama Cross-Coupling Reaction at Parts Per Million Levels of Pd: In Situ Formation of Highly Active Spirosilicates in Glycol Solvents,” *Chem. –Asian J.* **14**, 3850–3854 (2019).

G. HAMASAKA, D. ROY, A. TAZAWA and Y. UOZUMI, “Arylation of Terminal Alkynes by Aryl Iodides Catalyzed by a Parts-per-Million Loading of Palladium Acetate,” *ACS Catal.* **9**, 11640–11646 (2019).

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*, D. Morales-Morales, Ed., Elsevier (2019). ISBN: 978-0-12-812931-9

B-4) 招待講演

魚住泰広, 「化学合成プロセスを変革する超活性固定化触媒」, JST 戦略的創造研究推進事業新技術説明会～製造技術・情報・材料～, 東京, 2019年3月.

Y. UOZUMI, “Organic Transformations in Water with Amphiphilic Polymer-Supported Transition Metal Catalysts,” Ciclo de Conferencias del IQOG, Alicante (Spain), March, 2019.

Y. UOZUMI, “Organic molecular transformations in water with amphiphilic resin-supported platinum nanoparticles,” 4th Green Sustainable Conference 2019, Dresden (Germany), May 2019.

Y. UOZUMI, “Organic Reactions in Water with Amphiphilic Polymeric Transition Metal Catalysts,” Thieme Chemistry Workshop, Wuhan (China), June 2019.

Y. UOZUMI, “NCN Pincer Palladium Complexes: Their Preparation and Reacting Properties,” ICHAC 2019, Prag (Czech), July 2019.

魚住泰広, 「水中での有機分子変換を実現する高分子固定化触媒の開発」, 第124回触媒討論会, 長崎市, 2019年9月.

Y. UOZUMI, “Development of Polymer Supported Catalysts and Their Flow Application,” International Conference on Super Functional Catalysts (ICSFC), Awaji, November 2019.

B-5) 特許出願

特願 2019-031807, 「銀ナノ粒子樹脂複合体及び水素化触媒」, 魚住泰広, 大迫隆男 (自然科学研究機構), 2019年.

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・サステイナブル・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

中国三峡大学, 楚天学者教授, 2019年–.

B-9) 学位授与

Shen Guanshuo, 「The development of green catalysts for organic transformations」, 2019年9月, 博士(理学).

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イ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–2018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–2018年).

科学技術進行機構ACCEL 研究, 「触媒開発に立脚した基幹化学プロセスの徹底的効率化」, 魚住泰広 (2012年–2019年).

科学技術進行機構A-STEP 研究, 「サリチル酸と誘導体の革新的連続フロープロセスの開発」, 松田仁史 (2019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した(2007年-2019年)。2019年度ま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つつある。なかでも最近では未開拓元素群の触媒反応性(とくにCu, Fe, Ag)の探索と確立、さらに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を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) プロトンを触媒とする不斉骨格転位反応の開発
- b) ハロゲン結合を活用する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ア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) 多機能性材料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) キラルプレnstेटド酸触媒存在下、エン-アルジミンの触媒的不斉形式的1,3-転位反応に成功した。フェナンスリル基を有するキラルピナフチルリン酸を用いることで、良好なエナンチオ選択性が発現することを見出した。また、鈴木敏泰研究員との共同研究により、エナンチオ選択性の発現機構を検証した。
- b) ヨードニウムを活性中心とするキラル有機ルイス酸触媒の合成に成功し、その三次元構造を単結晶X線構造解析により明らかにした。
- c) 種々のペル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所支援センターでのHOESY測定により、本反応の触媒作用機構を明らかにした。
- d) テトラフルオロヨードスチレンを機能性モノマーとして用い、ラジカル重合により、ハロゲン結合供与部位を有する高分子を合成した。合成した高分子とDMAPからDMAPプリント高分子触媒を調製し、調製した高分子触媒が、水中でのアシル基転移反応に有効であることを見出した。
- e) エチルビスピリジンを配位子とするヨードニウム錯体やジアリア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) 多機能性材料の開発を目的として、全フッ素ハロゲン化ペリレン化合物の合成を実施した。構成素子となる部分フッ素化ナフタレンの位置選択的フッ素化法を確立し、メタ位をヨウ素置換した全フッ素ヨウ化ペリレンの合成に成功した。

B-1) 学術論文

C. JONGWOHAN, Y. HONDA, T. SUZUKI, T. FUJINAMI, K. ADACHI and N. MOMIYAMA, "Brønsted Acid-Initiated Formal [1,3]-Rearrangement Dictated by β -Substituted Ene-Aldimines," *Org. Lett.* **21**, 4991–4995 (2019).

B-3) 総説、著書

N. MOMIYAMA, "Noncovalent Interactions in the Design of Chiral Brønsted Acid Catalyst," in *Noncovalent Interactions in Catalysis*, K. T. Mahmudov, M. N. Kopylovich, M.-F. C. Guedes da Silva, A.-J. L. Pombeiro, Eds., The Royal Society of Chemistry, Chapter 10, pp. 209–231 (2019).

B-4) 招待講演

榎山儀恵, 「ハロゲン結合を基盤とする精密制御反応場の創成に向けて」, 新学術領域「精密制御反応場」第7回公開シンポジウム, 仙台, 2019年5月.

榎山儀恵, 「ハロゲン結合を活用する有機分子変換システム創成」, 名城大学農学部天然物有機化学研究室特別研究講演会, 名古屋, 2019年9月.

B-6) 受賞, 表彰

榎山儀恵, 大学女性協会第17回守田科学研究奨励賞 (2015).

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

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

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

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

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

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本化学会東海支部代議員 (2015, 2016).

学会の組織委員等

総研大アジア冬の学校主催 (2015, 2016).

分子研シンポジウム主催 (2017).

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, 2019).

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, 2019).

職場体験学習受入岡崎市立南中学校 (2018), 岡崎市立葵中学校 (2019).

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-9) 学位授与

Chanantida Jonwohan, 「Brønsted Acid-initiated Formal [1,3]-Rearrangement Reaction of β -Substituted Ene-Aldimines」, 2019年9月, 博士(理学).

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」, 榎山儀恵 (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」, 榎山儀恵 (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」, 榎山儀恵 (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」, 榎山儀恵 (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톤の環境調和合成法の開発」, 榎山儀恵 (2017年–2018年).

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

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」, 榎山儀恵 (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」, 榎山儀恵 (2016年–2017年).

公益財団法人豊秋奨学会平成 28年度研究助成,「異なる酸性官能基の隣接位導入による超高活性キラル分子性触媒の開発」, 榎山儀恵 (2016年–2017年).

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」, 榎山儀恵 (2016年–2017年).

2015年度内藤記念科学奨励金・研究助成,「ペルフルオロピナフチル誘導体の分子修飾に基づくキラルハロゲン結合供与体触媒の設計・開発」, 榎山儀恵 (2016年–2017年).

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」, 榎山儀恵 (2015年–2016年).

平成 27年度徳山科学技術振興財団研究助成,「ハロゲン化ペルフルオロアールの創製と触媒機能創出」, 榎山儀恵 (2015年–2016年).

2015年度ヨウ素研究助成金,「キラルヨウ素結合供与体触媒の設計・開発を基盤とする不斉合成」, 榎山儀恵 (2015年–2016年).

科研費基盤研究(C),「有機分子アリル化剤の開発を基軸とする革新的不斉有機分子触媒反応の開拓」, 榎山儀恵 (2011年–2013年).

科研費若手研究(B),「ペルフルオロフェニル基の特性を利用した不斉有機酸触媒の開発とアリル化反応への応用」, 榎山儀恵 (2009年–2010年).

科研費特定領域研究「協奏機能触媒」,「 π -アリル・O価鉄複合体—キラルプレンステッド酸触媒による新規アリル化反応の開発」, 榎山儀恵 (2008年–2009年).

科研費若手研究(スタートアップ),「酵素模倣型キラル求核触媒の設計および不斉反応の探索」, 榎山儀恵 (2007年–2008年).

公益信託林女性自然科学者研究助成基金,「アゾール／グアニジン 2成分系キラル求核触媒の設計開発および不斉反応の探索」, 榎山儀恵 (2007年–2008年).

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、本来的にキララ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、キララ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・合成と触媒の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。2019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、国内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ラ化学からキララ分子の振る舞いを明らかにするキララ分子科学への応用展開をめざしたい。

錯体物性研究部門

正岡重行(准教授)(2011年2月1日~2019年3月31日)*)

A-1) 専門領域：錯体化学

A-2) 研究課題：

- 鉄5核錯体への化学修飾による酸素発生過電圧の低減
- 近赤外光を駆動力とする光誘起プロトン共役電子移動反応の開発
- 段階的錯形成法を駆使した異種金属錯体の系統的合成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- 当グループでこれまでに開発された高い酸素発生能を有する鉄5核錯体 (**Fe₅-H**) に対し、化学修飾を施し、より穏和な(低過電圧)条件で反応が進行する触媒の開発に取り組んだ。より具体的には、金属錯体の構成要素である多座配位子に対し、電子供与性のメチル (**Me**) 基或いは電子吸引性のプロモ (**Br**) 基を導入した新規鉄5核錯体(以下それぞれ **Fe₅-Me** 及び **Fe₅-Br** と呼称)を開発した。**Fe₅-Me** においては、置換基導入に伴い鉄イオンの電子密度が増大し、錯体の酸化電位が **Fe₅-H** と比較して低電位側にシフトした。それに伴い、酸素発生の鍵中間体である4電子酸化種がより穏和な条件で生成し、その結果、酸素発生過電圧が低減できることが見出された。**Fe₅-Br** においては、電子吸引性置換基の影響で錯体の酸化還元電位は **Fe₅-H** よりも高電位側にシフトした。しかしながら、**Fe₅-H** ならびに **Fe₅-Me** においては4電子酸化体の生成が酸素発生に必須であったのに対し、**Fe₅-Br** では3電子酸化体が **water-coupled electron transfer** を起こすことで酸素発生反応が進行し、過電圧も小さくなることが明らかになった。すなわち、**Fe₅-Br** においては、高酸化状態を経由せずに触媒反応が進行することで、反応の過電圧が低減された。以上本研究では、過電圧を低減するための2つの戦略を提唱することに成功した。
- 光誘起型のプロトン共役電子移動は、逆電子移動を抑制することができるため、光-化学エネルギー変換を効率的に行うために重要な反応であると考えられている。本研究では、このような光誘起プロトン共役電子移動を近赤外光を用いて駆動することに初めて成功した。近赤外光は太陽光エネルギーの約半分を占めるエネルギー源であるためにその効率的利用を行うことは極めて重要な研究対象である。このような反応系を構築するために、①近赤外光領域に強い吸収能を持ち、②良好な電子移動能を示し、③プロトン受容サイトを有する歪んだフタロシアニン化合物 (**1**) に着目した。**1**、トリエチルアミン、水、アスコルビン酸ナトリウムを含む溶液に対し、近赤外光を照射したところ、光誘起プロトン共役電子移動反応が進行し、**1-H^{-•}** が生成することが明らかになった。また得られた **1-H^{-•}** の溶液を大気下に開放することで **1** へと可逆的に変換されることも示され、このサイクルは複数回繰り返すことが可能であった。すなわち、本反応系は非常に高い安定性を持つことが判明した。また、反応メカニズムに関しても、過渡吸収分光測定ならびに速度論的同位体効果によって知見を得、反応系中に含まれる種々の化合物が果たす役割についても明らかにした。
- 本研究では、3,5-bis(2-pyridyl)pyrazole (**Hbpp**) と複数種類の金属イオンを段階的に錯形成することで様々な異種金属多核錯体を系統的かつ選択的に合成する手法の開発を目指し研究を行った。具体的な戦略は以下の通りである。まず、第1段階として比較的配位子交換速度が遅い金属イオンと **Hbpp** 配位子との反応により単核錯体を合成する。そして得られた単核錯体を配位子交換速度が速い金属イオンと反応させる。その結果、金属イオンのスクランプリ

ングが抑制され、望みの金属イオン配置を有する異種金属多核錯体のみが得られることとなる。第一の金属イオンとしては Ru イオンを選択した。

Ru イオンと 3,5-bis(2-pyridyl)pyrazole とを反応させたところ 2 種類の単核錯体, *fac*-[Ru(Hbpp)₃]²⁺ ならびに *mer*-[Ru(Hbpp)₃]²⁺ が得られた。そこで、それぞれの単核錯体と各種第一遷移金属イオンとの反応について検討した。その結果、*fac*-[Ru(Hbpp)₃]²⁺ を用いた場合には異種金属 5 核錯体が、*mer*-[Ru(Hbpp)₃]²⁺ を用いた場合には、異種金属 4 核錯体がそれぞれ得られることが明らかになった。得られた錯体の金属イオン配置については単結晶 X 線解析により明らかにし、段階的に錯形成が進行していることならびに錯形成中に金属イオンのスクランプリングが起きていないことが確認された。すなわち、多様な核数・金属イオン種を有する金属錯体を自在に合成するための手段が確立されたと言える。

B-1) 学術論文

T. ENOMOTO, M. KONDO and S. MASAOKA, “Proton-Coupled Electron Transfer Induced by Near-Infrared Light,” *Chem. –Asian J.* **14**, 2806–2809 (2019). (Selected as a Very Important Paper (VIP))

R. KUWANO, M. YOKOGI, K. SAKAI, S. MASAOKA, T. MIURA and S. WON, “Room-Temperature Benzylic Alkylation of Benzylic Carbonates: Improvement of Palladium Catalyst and Mechanistic Study,” *Org. Process Res. Dev.* **23**, 1568–1579 (2019).

V. K. K. PRANEETH, M. KONDO, M. OKAMURA, T. AKAI, H. IZU and S. MASAOKA, “Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation: Substituents Provide Two Routes to Control Onset Potentials,” *Chem. Sci.* **10**, 4628–4639 (2019).

Y. LIWEI, Y. TAKAGI, T. NAKAMURA, T. SAKATA, T. URUGA, M. TADA, Y. IWASAWA, S. MASAOKA and T. YOKOYAMA, “Operando Observation of Sulfur Species Poisoning Polymer Electrolyte Fuel Cell Studied by Near Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. C* **123**, 603–611 (2019).

B-3) 総説, 著書

榎本孝文, 正岡重行, 「近赤外光を駆動力とする光誘起電子移動反応」, *化学と工業* **72(1)**, 25 (2019).

B-4) 招待講演

S. MASAOKA, “Development of Molecular Modules for Artificial Photosynthesis,” The 69th Conference of Japan Society of Coordination Chemistry, S4: Coordination Chemistry Unveiled in Homogeneous Solutions, Nagoya University, Nagoya, September 2019.

S. MASAOKA, “Development of Molecular Catalysts for Artificial Photosynthesis,” QSCC, Nagoya, September 2019.

S. MASAOKA, “Development of Molecular Catalysts for Artificial Photosynthesis,” Functional Molecules for Energy Conversion, Catalysis and Nanotechnology, HeKKSaGOn in Heidelberg, Heidelberg (Germany), September 2019.

正岡重行, 「5つの金属イオンが織り成す革新機能」, 関西学院大学, 三田, 2019年8月.

正岡重行, 「5つの金属イオンが織り成す革新機能」, 近畿大学総合理工学研究科, 東大阪, 2019年7月.

正岡重行, 「5つの金属イオンが織り成す触媒機能」, 第4回固体化学フォーラム, 岡崎, 2019年6月.

S. MASAOKA, “Development of Molecular Catalysts for Artificial Photosynthesis,” 15th International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry (ISABC15), Nara (Japan), June 2019.

正岡重行,「人工光合成への挑戦～植物に学ぶ触媒デザイン～」, 2019年度ゴールド・メダル賞記念講演会, 日本プレスセンター, 東京, 2019年5月.

正岡重行,「5つの金属イオンが織り成す革新機能」, 第29回平塚シンポジウム「元素の多様性と物質科学」, 神奈川大学湘南ひらつかキャンパス, 平塚, 2019年3月.

正岡重行,「金属錯体を触媒とする光化学的／電気化学的小分子変換」, 第16回ささかけ領域会議, 愛媛大学理学部大会議室, 松山, 2019年2月.

B-6) 受賞, 表彰

友田美紗, 第9回CSJ 化学フェスタ 2019 優秀ポスター発表賞 (2019).

伊豆 仁, 15th International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry (ISABC15), Elsevier Best Poster Prize (2019).

正岡重行, 第25回ゴールド・メダル賞 (2019).

S. K. LEE, 第1回SOKENDAI 賞 (2018).

P. 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).

P. 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).

S. K. LEE, 4th Japan-Taiwan-Singapore-Hong Kong Quadrilateral Symposium on Coordination Chemistry, Chemistry Letters Young Award (2017).

伊豆 仁, 第50回酸化反応討論会ポスター賞 (2017).

P. 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).

P. CHINAPANG, Energy & Environmental Science Outstanding Student Presentation Award (2017).

P. CHINAPANG, International Conference on Artificial Photosynthesis (ICARP2017), Excellent Poster Award (2017).

伊豆 仁, International Conference on Artificial Photosynthesis (ICARP2017), Excellent Poster Award (2017).

正岡重行, 平成28年度日本学術振興会賞 (2016).

岡村将也, 正岡重行, 近藤美欧, 第5回ネイチャー・インダストリー・アワード特別賞 (2016).

榎本孝文, Dalton Transactions Prize (2016).

榎本孝文, 錯体化学会第66回討論会ポスター賞 (2016).

榎本孝文, 日本化学会東海支部長賞 (2016).

S. K. LEE, The Winter School of Asian-Core Program, Poster Award (2016).

榎本孝文, 第27回配位化合物の光化学討論会ポスター賞 (2015).

榎本孝文, 2015年度総研大物理科学学生セミナー Adobe 賞 (2015).

榎本孝文, 伊豆 仁, 深津亜里紗, 2015年度総研大物理科学学生セミナー優秀発表賞 (2015).

深津亜里紗, International Conference on Artificial Photosynthesis (ICARP2014), Excellent Poster Award (2014).

伊豆 仁, 第4回CSJ 化学フェスタ 2014 優秀ポスター発表賞 (2014).

伊東貴宏, CrystEngComm Poster Prize (2014).
伊東貴宏, 錯体化学会第 64 回討論会ポスター賞(2014).
岡村将也, 錯体化学会第 63 回討論会学生講演賞 (2013).
中村 豪, 平成 25 年度 (第 4 回) 総合研究大学院大学学長賞 (2013).
吉田将己, 第 2 回 CSJ 化学フェスタ 2012 優秀ポスター賞 (2012).
中村 豪, 第 2 回 CSJ 化学フェスタ 2012 優秀ポスター賞 (2012).
岡村将也, 第 2 回 CSJ 化学フェスタ 2012 優秀ポスター賞 (2012).
村瀬雅和, 第 2 回 CSJ 化学フェスタ 2012 優秀ポスター賞 (2012).
近藤美欧, 第 5 回資生堂女性研究者サイエンスグラント (2012).
正岡重行, 若い世代の特別講演会特別講演証 (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 (2018–2019).
日本化学会東海支部代議員 (2017–2019).
錯体化学会副事務局長 (2015–2019).
錯体化学会理事 (2015–2017).
錯体化学会ホームページ委員 (2013–2019).
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「錯体化学を基盤とした階層構造制御と機能発現」所内対応 (2019).
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

関西学院大学大学院理工学研究科, 集中講義「化学特殊講義 XIII」, 2019年8月.

B-9) 学位授与

榎本孝文, 「Development of Photochemical Systems Based on Photoinduced Electron Transfer」, 2019年3月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A), 「多核クラスター錯体を用いた小分子変換のための学理創出」, 正岡重行 (2019年–2023年).

第50回(2019年度)三菱財団自然科学研究一般助成, 「金属錯体を触媒とするC1化合物の多電子酸化還元」, 正岡重行 (2019年–2020年).

科研費新学術領域研究(公募研究), 「多核金属錯体への高次非対称性の導入による電子・プロトン移動能の精密制御」, 近藤美欧 (2019年–2020年).

科研費新学術領域研究(計画研究), 「光化学的刺激/電気化学的刺激による金属錯体触媒のオンデマンド活性化」, 正岡重行 (2017年–2021年).

科研費新学術領域研究(公募研究), 「アシンメトリック金属イオン集積に立脚した新奇機能性分子群の創製」, 近藤美欧 (2017年–2018年).

科研費挑戦的研究(萌芽), 「結晶性ホストへの戦略的機能統合による革新的触媒システムの構築」, 近藤美欧 (2017年–2019年).
徳山科学技術振興財団研究助成, 「多核異種金属錯体のオンデマンド合成による高効率な二酸化炭素還元触媒系の創出」, 近藤美欧 (2016年–2017年).

科研費基盤研究(B), 「クラスター錯体によるエネルギーキャリアのテーラーメイド合成」, 正岡重行 (2016年–2018年).

科研費研究活動スタート支援, 「多核錯体への柔軟なプロトン移動能の導入と水の酸化反応への影響」, 岡村将也 (2016年–2017年).

科研費新学術領域研究(公募研究), 「鉄五核触媒の分子構造制御に基づく低過電圧酸素発生」, 正岡重行 (2015年–2016年).

科研費若手研究(A), 「反応性超分子フレームワーク: 反応場の構築と反応の可視化」, 近藤美欧 (2015年–2018年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト, 「光合成モジュールの人為的再構成によるサイボーグ植物の創出」, 正岡重行 (2015年).

自然科学研究機構新分野創成センター宇宙における生命研究分野プロジェクト, 「低温度星まわりの生命居住可能惑星において起こり得る光合成反応の分子科学的考察」, 正岡重行 (2015年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「異種金属多核錯体による革新的電気化学物質変換」, 正岡重行 (2014年–2016年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト, 「酸素発生型光合成への挑戦: 機構理解と新機能創出」, 正岡重行 (2014年).

科研費若手研究(A), 「配位不飽和な自己集合性多核錯体を触媒とする多電子酸化還元反応」, 正岡重行 (2013年–2015年).

科研費新学術領域研究(公募研究), 「水の酸化の超高効率化を目指した超分子錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2013年–2014年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト, 「酸素発生型光合成への挑戦: 機構理解と新機能創出」, 正岡重行 (2013年).

科学技術振興機構先導的物質変換領域, 「超分子クラスター触媒による水を電子源としたCO₂還元反応系の構築」, 近藤美欧 (2012年–2017年).

科研費挑戦的萌芽研究,「二次元反応場への金属錯体集積と水を基質とする革新的多電子物質変換」, 正岡重行 (2012年-2013年).

科研費若手研究(B),「高効率触媒界面の構築を目指した錯体プラットフォームの開発」, 近藤美欧 (2012年-2013年).

第5回資生堂女性研究者サイエンスグラント,「界面電子移動プログラミングによる水の完全光分解系の構築」, 近藤美欧 (2012年-2013年).

学融合推進センター公募研究事業事業枠③女性研究者支援,「界面電子移動反応を利用した水の完全光分解システムの創製」, 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製」, 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」, 近藤美欧 (2019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。2019年は, a) 鉄5核錯体への化学修飾による酸素発生過電圧の低減, b) 近赤外光を駆動力とする光誘起プロトン共役電子移動反応の開発, c) 段階的錯形成法を駆使した異種金属錯体の系統的合成に関する研究を並行して実施し, それぞれ重要な知見を得た。今後は, a) に関しては, 反応の低過電圧化を利用した光駆動型酸素発生反応系の開発に取り組みたいと考えている。b) 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。c) では, 得られた異種金属多核錯体の物性を精査し, 新たな機能性分子の創出を目指したい。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。

*) 2019年4月1日大阪大学大学院工学研究科教授

草 本 哲 郎 (准教授) (2019 年 1 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：分子物性化学

A-2) 研究課題：

- 発光性ラジカルの物質開発と多重項に基づく発光機能の創出
- 外部刺激を用いた開殻電子系分子の電子状態制御と新奇物性開拓
- ラジカル集積体における構造-物性相関に基づく新機能創出

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- 高い光安定性を有する発光ラジカル PyBTM を 10wt% ドープした分子結晶は、4.2 K において磁場に応答する発光スペクトルを示す。その背景にはラジカルモノマー励起状態とラジカルエキシマー励起状態を関係づける“ラジカルペア”が関わっていることを見出している。本研究では、磁場効果のメカニズムの更なる理解を目指し、磁場印加時に発光スペクトルに加えて発光寿命がどのように変化するか、を調べた。その結果、発光寿命が磁場に応答する成分と応答しない成分が共存していることを見出した。これらの結果を速度方程式ならびに量子シミュレーションにより解析した結果、①基底状態におけるスピン状態分布の変化（静的磁場効果）、②励起状態にあるラジカルペアにおける磁場誘起項間交差（動的磁場効果）、ならびに③ラジカルモノマーとラジカルペア間における可逆なエキシトンのやりとり、の3点が磁場効果発現の鍵要因となる、という知見を得ることができた。
- 電子アクセプター性を有する発光ラジカル PyBTM と電子ドナー性骨格であるトリフェニルアミンが共役した新しいラジカル TPA-R を開発した。TPA-R は近赤外領域 ($\lambda_{\max} = 910 \text{ nm}$) において電荷移動励起状態に由来する発光を示すことを明らかにした。電気化学的光学スペクトル測定ならびに DFT 法による電子状態計算により、TPA-R では SOMO と HOMO のエネルギー準位が逆転した non-Aufbau な特異電子状態が実現していることを見出した。興味深いことに、酸性条件下にて生成する TPA-RH⁺（プロトン付加体）も TPA-R と同様 SOMO-HOMO 逆転した電子状態を有している。さらに過剰量の酸存在下では、基底状態においてトリフェニルアミン部位からラジカル部位への分子内電子移動が起こり新たなラジカル [TPA]^{•+}-RH が生成することを見出した。
- ピリジル基を二つ有するラジカル bisPyTM と銅イオンからなる一次元鎖錯体では、銅イオン回りの配位環境における Jahn-Teller (JT) 歪みの方向が、温度により徐々に変化することを明らかにした。この歪みに伴い銅イオンに配位している hfac 配位子の π 共役構造も変化する。興味深いことに、100 K 付近において銅イオンの JT 軸の方向が変化する。この軸方向変化に連動して銅イオン上の不対電子スピン密度の配向が変化した結果、100 K 以下の低温領域では、銅イオンとラジカルの不対電子スピン間に働く強磁性相互作用 ($J/k_B = 46 \text{ K}$) が高温領域のそれ ($J/k_B = 11 \text{ K}$) よりも増大することを明らかにした。本系は、JT 歪み、 π 共役の自由度、磁気特性が協奏することで温度に応答するユニークな物性を示す系であることが分かった。加えて、bisPyTM の異性体として芳香環上の窒素の置換位置が異なる新しいラジカルの開発に成功し、これが銅イオンとの錯形成反応により一次元鎖錯体を構築することを見出した。

B-1) 学術論文

S. KIMURA, H. UCHIDA, T. KUSAMOTO and H. NISHIHARA, “One-Dimensional Magnetic Chain Composed of Cu^{II} and Polychlorinated Dipyridylphenylmethyl Radical: Temperature-Dependent Jahn-Teller Distortion Correlated to π -Conjugation and Magnetic Properties,” *Dalton Trans.* **48**, 7090–7093 (2019). (Selected as a HOT article)

A. TANUSHI, S. KIMURA, T. KUSAMOTO, M. TOMINAGA, Y. KITAGAWA, M. NAKANO and H. NISHIHARA, “NIR Emission and Acid-Induced Intramolecular Electron Transfer Derived from a SOMO–HOMO Converted Non-Aufbau Electronic Structure,” *J. Phys. Chem. C* **123**, 4417–4423 (2019).

K. KATO, S. KIMURA, T. KUSAMOTO, H. NISHIHARA and Y. TEKI, “Luminescent Radical-Excimer: Excited-State Dynamics of Luminescent Radicals in Doped Host Crystals,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **58**, 2606–2611 (2019). (*Selected as a HOT paper*)

T. USUI, Z. LIU, H. IGARASHI, Y. SASAKI, Y. SHIRAMATA, H. YAMADA, K. OHARA, T. KUSAMOTO and T. WAKIHARA, “Identifying the Factors Governing the Early-Stage Degradation of Cu-Chabazite Zeolite for NH₃-SCR,” *ACS Omega* **4**, 3653–3659 (2019).

H. OKADA, H. UENO, Y. TAKABAYASHI, T. NAKAGAWA, M. VRANKIĆ, J. ARVANITIDIS, T. KUSAMOTO, K. PRASSIDES and Y. MATSUO, “Chemical Reduction of Li⁺@C₆₀ by Decamethylferrocene to Produce Neutral Li⁺@C₆₀^{•-},” *Carbon* **153**, 467–471 (2019).

B-3) 総説, 著書

T. KUSAMOTO and H. NISHIHARA, “Zero-, One- and Two-Dimensional Bis(dithiolato)metal Complexes with Unique Physical and Chemical Properties,” *Coord. Chem. Rev.* **380**, 419–439 (2019).

B-4) 招待講演

草本哲郎, 「安定有機ラジカルが示す発光機能」, 有機EL 討論会第 29 回例会, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2019 年 11 月.

草本哲郎, 「ラジカルが示すユニークな機能: 電気, 磁気, そして発光特性」, 自然科学研究機構事務局会議室, 東京, 2019 年 11 月.

草本哲郎, 「安定ラジカルを基とする発光機能創出」, 第 4 回有機若手ワークショップ, 京都大学理学研究科セミナーハウス, 京都, 2019 年 11 月.

T. KUSAMOTO, “Luminescence and Structure-Magnetism Correlation of Open-Shell Metal Complexes,” 7th Asian Conference on Coordination Chemistry (ACCC7), Putra World Trade Centre, Kuala Lumpur (Malaysia), October 2019.

草本哲郎, 「錯体化学を基とする開殻電子系分子の光機能創出」, 錯体化学会第 69 回討論会, 名古屋大学東山キャンパス, 愛知, 名古屋, 2019 年 9 月.

T. KUSAMOTO, “Magnetoluminescence in photostable radicals,” Spin Chemistry Meeting 2019, Courtyard by Marriott West Pushkin Hotel, St. Petersburg (Russia), August 2019.

T. KUSAMOTO, “Photostable Organic Radicals with Unique Photofunctions,” 17th Japan-Korea Symposium on Molecular Science, Hotel Sunroute Plaza Nagoya, Nagoya (Japan), July 2019.

T. KUSAMOTO, “Magnetoluminescence in photostable radicals,” 9th Pacific Symposium on Radical Chemistry (PSRC-9), Asilomar Conference Grounds, California (U.S.A.), June 2019.

草本哲郎, 「開殻π電子系が拓く発光・磁気特性」, 第 4 回固体化学フォーラム研究会, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2019 年 6 月.

B-6) 受賞, 表彰

草本哲郎, 錯体化学会研究奨励賞 (2019).

木村 舜, 日本化学会第 99 回春季年会学生講演賞 (2019).

木村 舜, Spin Chemistry Meeting 2019 Best Poster Award (2019)

草本哲郎, 第 5 回分子科学討論会 優秀講演賞 (2011).

草本哲郎, International School & Symposium on Multifunctional Molecule-based Materials (ISSMMM), first poster award in Chemistry (2011).

草本哲郎, 東京大学大学院理学系研究科研究奨励賞 (2010).

草本哲郎, 日本化学会第 88 春季年会学生講演賞 (2008).

草本哲郎, BCSJ Award (2006).

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 (2019-).

錯体化学会副事務局長 (2019-).

錯体化学会ホームページ委員 (2019-).

錯体化学若手の会 中部・東海支部世話人 (2019-).

錯体化学会 将来計画委員会委員 (2017-).

錯体化学若手の会 事務局会計 (2017).

錯体化学若手の会 事務局代表 (2016).

錯体化学若手の会 関東支部世話人 (2012-2018).

学会の組織委員等

錯体化学会第 69 回討論会実行委員 (2019).

The 1st Asian Conference on Molecular Magnetism (ACMM2020) 組織委員 (2019).

43rd International Conference on Coordination Chemistry (ICCC 2018) セッション S3 主催 (2018).

錯体化学会第 67 回討論会シンポジウム S3 主催 (2017).

その他

第 25 回錯体化学若手の会中部・東海支部勉強会主催 (2019).

錯体化学若手の会関東支部後期勉強会 2018 主催 (2018).

錯体化学若手の会関東支部前期勉強会 2018 主催 (2018).

錯体化学若手の会関東支部後期勉強会 2017 主催 (2017).

錯体化学若手の会関東支部前期勉強会 2017 主催 (2017).

錯体化学若手の会関東支部後期勉強会 2016 主催 (2016).

錯体化学若手の会関東支部前期勉強会 2016 主催 (2016).

錯体化学若手の会関東支部後期勉強会 2015 主催 (2015).

錯体化学若手の会関東支部前期勉強会 2015 主催 (2015).

錯体化学若手の会関東支部後期勉強会 2014 主催 (2014).

錯体化学若手の会関東支部前期勉強会 2014主催 (2014).
錯体化学若手の会夏の学校 2014主催 (2014).
錯体化学若手の会関東支部後期勉強会 2013主催 (2013).
錯体化学若手の会関東支部前期勉強会 2013主催 (2013).
錯体化学若手の会関東支部後期勉強会 2012主催 (2012).

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」, 2019年度後期.
総合研究大学院大学物理科学研究科, 「機能物性化学」, 2019年5月-6月

B-10) 競争的資金

科研費挑戦的研究(萌芽), 「単層ヘテロスピンハニカムナノシートの創製」, 草本哲郎 (2019年-2020年).
加藤科学振興会研究助成, 「高効率発光を実現する革新的なラジカル分子材料の創出」, 草本哲郎 (2019年).
池谷科学技術振興財団研究助成, 「グラフェン様ハニカムスピン配置を有する分子性二次元物質「ラジカルナノシート」の創製」, 草本哲郎 (2018年-2019年).
科研費若手研究(A), 「発光開殻分子の異方的集積と光・電気・磁気機能の創出」, 草本哲郎 (2017年-2019年).
科研費挑戦的萌芽研究, 「二重項発光の特長解明: ラジカルは高エネルギー効率なELデバイスを実現できるか?」, 草本哲郎 (2016年-2018年).
イオン工学振興財団研究助成, 「金属ジチオレン錯体のイオン性結晶を基盤とする量子スピン液体の実現」, 草本哲郎 (2016年).
松籟科学技術振興財団研究助成, 「ナノスケールフォトスピントロニクスを指向した有機ラジカルナノシートの創製」, 草本哲郎 (2015年).
小笠原科学技術振興財団研究助成, 「ナノスケールフォトスピントロニクスを指向した二次元ポリマー物質「ラジカルナノシート」の創製と革新機能の創出」, 草本哲郎 (2015年).
村田学術振興財団研究助成, 「ラジカル分子の二重項励起状態に基づく革新発光機能の増強」, 草本哲郎 (2014年).
科研費若手研究(B), 「光スイッチング分子性導体」, 草本哲郎 (2012年-2015年).

C) 研究活動の課題と展望

有機ラジカルや磁性金属錯体に代表される開殻電子系分子は、不対電子に基づき、通常の閉殻分子とも無機物質とも異なる物性を発現する。我々の研究グループでは、開殻電子系分子を用いてユニークな光・電気・磁気相関物性を創製・解明することで、物性科学に新概念と革新をもたらすことを目指して研究を進めている。今年度は、(a) ラジカルの発光寿命の磁場効果、(b) 化学刺激応答性ドナーアクセプター型発光ラジカルの合成と機能、(c) ヘテロスピン一次元鎖錯体の構造-物性相関に基づく新機能開拓、の研究を推進し、それぞれにおいて重要な成果を得ることができた。今後は(a)については新開発した発光ラジカルの発光の磁場効果を調べ、これまでの研究結果と比較することで、ラジカルの発光の磁場効果における「普遍性」と「非普遍性: 分子特有のパラメータ」を明らかにし、磁場効果発現メカニズムの全容解明に繋げる。(b) および(c) では、「ラジカルならではの発光特性」を実現することを目標に、新しい発光ラジカルならびにラジカル異方集積体の物質開発を進める。

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) 中空錯体に包接したタンパク質の科学
- b) 結晶スポンジ法と合成生物学を組み合わせた超速物質探索

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 我々は、配位結合駆動の自己集合により形成される中空錯体に、タンパク質を閉じ込める独自技術を開発した。現在、この技術を基盤とした、タンパク質関連技術の構築を推進している。具体的には、タンパク質の安定化、機能の向上や改変、更にはタンパク質の種類によらない結晶化手法の開発などを行っており、化学の分野のみならず生化学や構造生物学の分野に波及する研究を展開している。
- b) 近年、合成生物学的な技術を用いることで、新規天然由来化合物を迅速に取得することが可能になりつつある。こうした発展により、創薬シード化合物などの有用化合物の探索が容易になることが期待されている。しかし、取得した新規化合物を創薬の現場などで利用していくにあたっては、その化学構造を決定する必要がある。現状では、この構造決定の段階に、多くの時間と労力がかかることが問題となっている。そこで、我々が開発した構造決定技術である“結晶スポンジ法”を用いることで、この問題を解決し、新規化合物の探索と利用を大幅に加速することを狙っている。実際に、合成生物学的手法を駆使して見出だした新規化合物の内、NMR や MS だけでは構造決定困難な化合物を中心に構造決定に取り組み、解析に成功している。

B-1) 学術論文

T. SAWADA, Y. INOMATA, K. SHIMOKAWA and M. FUJITA, “A Metal-Peptide Capsule by Multiple Ring Threading,” *Nat. Commun.* **10**, 5687 (8 pages) (2019).

Z. POWERS, A. SCHARF, A. CHENG, F. YANG, M. HIMMELBAUER, T. MITSUHASHI, L. BARRA, Y. TANIGUCHI, T. KIKUCHI, M. FUJITA, I. ABE and J. A. PORCO Jr., “Biomimetic Synthesis of Meroterpenoids by Dearomatization-Driven Polycyclization,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **58**, 16141–16146 (2019).

S. HOSHINO, T. MITSUHASHI, T. KIKUCHI, C. P. WONG, H. MORITA, T. AWAKAWA, M. FUJITA and I. ABE, “Structural Elucidation of Tenebrathin: Cytotoxic C-5-Substituted γ -Pyrone with a Nitroaryl Side Chain from *Streptoalloteichus tenebrarius*,” *Org. Lett.* **21**, 6519–6522 (2019).

B. CHRIST, C. XU, M. XU, F.-S. LI, N. WADA, A. J. MITCHELL, X.-L. HAN, M.-L. WEN, M. FUJITA and J.-K. WENG, “Repeated Evolution of Cytochrome P450-Mediated Spiroketal Steroid Biosynthesis in Plants,” *Nat. Commun.* **10**, 3206 (11 pages) (2019).

W. CULLEN, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, “Demethylenation of Cyclopropanes via Photo-Induced Guest-to-Host Electron Transfer in a M_6L_4 Cage,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **58**, 9171–9173 (2019).

H. TAKEZAWA, T. KANDA, H. NANJO and M. FUJITA, “Site-Selective Functionalization of Linear Diterpenoids through U-Shaped Folding in a Confined Artificial Cavity,” *J. Am. Chem. Soc.* **141**, 5112–5115 (2019).

T. SAWADA, A. SAITO, K. TAMIYA, K. SHIMOKAWA, Y. HISADA and M. FUJITA, “Metal–Peptide Rings form Highly Entangled Topologically Inequivalent Frameworks with the Same Ring- and Crossing-Numbers,” *Nat. Commun.* **10**, 921 (7 pages) (2019).

Y. TACHI, S. SATO, M. YONEYA, M. FUJITA and Y. OKAMOTO, “Two Polyhedral Frameworks of an $M_{12}L_{24}$ Spherical Complex Revealed by Replica-Exchange Molecular Dynamics Simulations,” *Chem. Phys. Lett.* **714**, 185–189 (2019).

B-3) 総説, 著書

和田直樹, 藤田 誠, 「結晶スポンジ法による天然化合物の構造決定」, *ファルマシア* **55**, 668–670 (2019).

B-4) 招待講演

M. FUJITA, “Coordination Self-Assembly: From Origins to the Latest Advances,” XXXVII Biennial Of Chemistry, Donostia-San Sebastian (Spain), May 2019.

M. FUJITA, “Self-Assembly of Archimedean/non-Archimedean Solids Under Mathematical Restriction,” ISMSC2019, Lecce (Italy), June 2019.

M. FUJITA, “Coordination Self-Assembly: From the Origins to the Latest Advances,” Seminar, University of South Florida, Tampa (U.S.A.), April 2019.

M. FUJITA, “Coordination Self-Assembly: From the Origins to the Latest Advances,” Raymond Siedle Lecture, University of Indianapolis, Indianapolis (U.S.A.), April 2019.

M. FUJITA, “Crystalline Sponge Method for Synthetic and Natural Product Studies,” Inorganic Seminar, Indiana University, Bloomington (U.S.A.), April 2019.

M. FUJITA, “Coordination Self-Assembly: From Origins to the Latest Advances,” The 30th Anniversary Todai-Unistra Symposium, Strasbourg (France), May 2019.

M. FUJITA, “Coordination Self-Assembly: From the Origins to the Latest Advances,” Padova (Italy), May 2019.

M. FUJITA, “Coordination Self-Assembly: From the Origins to the Latest Advances,” Siegfried Huenig Lectureship at Wuerzburg, Wuerzburg (Germany), June 2019.

M. FUJITA, “Coordination Self-Assembly: From the Origins to the Latest Advances,” seminar hosted by Prof. Ivan Huc, Munich (Germany), June 2019.

M. FUJITA, “Coordination Self-Assembly for Nanostructure Construction,” Nanjing Symposium, Nanjing (China), June 2019.

M. FUJITA, “Crystalline Sponge Method: Applications to Natural Product Chemistry and Drug Discovery,” SIMM, Shenzhen (China), September 2019.

B-6) 受賞, 表彰

藤田 誠, 有機合成化学奨励賞 (1994).

藤田 誠, ルイパスツール大学(仏)客員教授 (1999).

藤田 誠, 日本化学会 学術賞 (2000).
藤田 誠, 東京テクノフォーラム ゴールドメダル賞 (読売新聞)(2001).
藤田 誠, 日本IBM 科学賞 (2001).
藤田 誠, ルイパスツール大学 (仏) 客員教授 (2002).
藤田 誠, 名古屋シルバーメダル (2003).
藤田 誠, Earl L. Muettterties Memorial Lecturers (UC Berkeley)(2003).
藤田 誠, アイザット・クリステンセン賞 (2004).
藤田 誠, G.W.Wheland Award (シカゴ大学 Lectureship 賞)(2006).
藤田 誠, 中国人民大学化学系名誉教授 (2007).
藤田 誠, 文部科学大臣表彰 科学技術賞 (研究部門)(2009).
藤田 誠, 江崎玲於奈賞 (2010).
藤田 誠, 錯体化学会賞 (2010).
藤田 誠, H. C. Brown Lecturer (Purdue 大学) (2011).
藤田 誠, 3M Lectureship Award (British Columbia 大学) (2011).
藤田 誠, トムソン・ロイター 第3回リサーチフロントアワード (2012).
藤田 誠, Kharasch Lecturers (シカゴ大学) (2012).
藤田 誠, Abbott Lecturer (イリノイ大学) (2012).
藤田 誠, 日本化学会賞 (2013).
藤田 誠, Arthur C. Cope Scholar Award (アメリカ化学会賞)(2013).
藤田 誠, Merck-Karl Pfister Visiting Professorship (MIT Lectureship 賞)(2013).
藤田 誠, ISNSCE 2014 Nanoprize (2014).
藤田 誠, 紫綬褒章 (2014).
藤田 誠, Fred Basolo Medal (ノースウエスタン大学)(2014).
藤田 誠, John Osborn Lecturer (ストラスブール大学)(2015).
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).
藤田 誠, 恩賜賞・日本学士院賞 (2019).
藤田 誠, 東京大学卓越教授 (2019).

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).

科研費特別推進研究,「空間捕捉によるタンパク質の構造・機能制御および高効率構造解析」, 藤田 誠 (2019年-2024年).

C) 研究活動の課題と展望

我々のグループでは、自己組織化によって全く新しい空間を構築し、その前人未踏の空間における化学を探求することを基本に、研究活動を続けていく。特に、①タンパク質の空間的捕捉に立脚したタンパク質関連技術の開発、および、②結晶スポンジ法と合成生物学の掛け合わせによる新規化合物の探索・構造決定には、今後も精力的に取り組む予定である。①は、今後の発展次第では、タンパク質の利用・解析方法を大きく変革し、生化学・構造生物学の世界をはじめ、広範な領域にパラダイムシフトを起こす可能性を秘めた技術であると考えている。②においては、結晶スポンジ法を利用することで、新規化合物の発見を大幅に高速化すると同時に、様々な化合物を解析していくことを通じて、結晶スポンジ法の技術自体も更に向上させることを目指す。

6-9 社会連携研究部門

平等拓範（特任教授）（2019年4月1日着任）*

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

A-2) 研究課題：

- a) マイクロドメイン構造制御に関する研究
- b) マイクロドメイン光制御に関する研究
- c) マイクロ固体フォトニクスの展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

分子科学に関連して重要な波長域にレーザーの高輝度光を展開する為の固体レーザー，非線形波長変換法につき包括的な研究を進めている。特に近年のマイクロ固体フォトニクス [マイクロチップ Nd:YVO₄ レーザー（1990年），Yb:YAG レーザー（1993年），セラミックレーザー（1997年），バルク擬似位相整合（QPM）素子：大口径周期分極反転 MgO:LiNbO₃（PPMgLN）（3mm厚2003年，5mm厚2005年，10mm厚2012年）] を先導すると共に，共同研究を通し赤外域分子分光などにその展開を図っている。国際誌の雑誌編集，特集号企画から国際シンポジウム・会議の企画提案，開催に積極的に参加する事でその成果を内外に発信している。

- a) マイクロドメイン構造，界面（粒界面，結晶界面，さらには自発分極界面）を微細に制御する固相反応制御法の研究として，レーザーセラミックス，レーザー素子，分極反転素子の作製プロセスの高度化を図っている。特に，固体レーザーの発光中心である希土類イオンの軌道角運動量を利用したマイクロドメインの配向制御は，これまで不可能だった異方性セラミックスによるレーザー発振を成功させただけでなく原理的にはイオンレベルでの複合構造を可能とする。さらに最近，表面活性接合による異種材料接合に成功し，Distributed Face Cooling（DFC）構造による Tiny Integrated Laser（TILA）なる次世代の高性能な高集積小型レーザーに関するコンセプトが検証された。これより，新たなフォトニクスを創出できるものと期待している。
- b) 光の発生，増幅，変換の高度制御を可能とする為の研究として，希土類イオンの発光・緩和機構の解明，固体中の光，エネルギー伝搬，さらにはマイクロドメイン構造と光子及び音子の相互作用機構解明，非線形光学過程の解明，モデル化を進めている。Yb レーザーの機構解明，Nd レーザーの直接励起可能性，希土類レーザーの励起光飽和特性，YVO₄ の高熱伝導率特性の発見，実証に繋がったばかりでなく，マイクロ共振器の高輝度効果，レーザー利得と非線形光学過程の量子相関などの興味深い展開も見せている。特にレーザー科学発展の中で生じたパルスギャップ領域であるサブナノ秒からピコ秒の便利な光源開拓に関する貢献，パルスギャップレーザーによる新現象の解明などが期待できる。
- c) 開発した光素子を用いた新規レーザー，波長変換システムの開発と展開を図っている。これまで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

S. W. JOLLY, N. H. MATLIS, F. AHR, V. LEROUX, T. EICHNER, A.-L. CALENDRON, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, F. X. KÄRTNER and A. R. MAIER, “Spectral Phase Control of Interfering Chirped Pulses for High-Energy Narrowband Terahertz Generation,” *Nat. Commun.* **10**, 2591 (8 pages) (2019).

T. KAWASAKI, V. YAHIA and T. TAIRA, “100 Hz Operation in the 10 PW/sr-cm² Class Nd:YAG Micro-MOPA,” *Opt. Express* **27**, 19555–19561 (2019).

川崎泰介, **V. YAHIA**, 平等拓範, 「100Hz 繰り返し 100mJ 高輝度マイクロ MOPA (Master Oscillator Power Amplifier)」, レーザー研究 **47**, 221–224 (2019).

佐藤庸一, 平等拓範, 「非等方性結晶の透明セラミックス化」, レーザー研究 **47**, 442–447 (2019).

L. ZHENG, A. KAUSAS and T. TAIRA, “>30 MW Peak Power From Distributed Face Cooling Tiny Integrated Laser,” *Opt. Express* **27**, 30217–30224 (2019).

H. H. LIM and T. TAIRA, “High Peak Power Nd:YAG/Cr:YAG Ceramic Microchip Laser with Unstable Resonator,” *Opt. Express* **27**, 31307–31315 (2019).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

N. H. MATLIS, S. W. JOLLY, F. AHR, V. LEROUX, T. EICHNER, A.-L. CALENDRON, K. RAVI, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, A. R. MAIER and F. X. KAERTNER, “Demonstration of 0.6mJ Multicycle THz Pulses via Chirp-and-Delay Down Conversion of Broadband Lasers with Precise Spectral Phase Tuning and Large PPLN,” *2018 43rd International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves (IRMMW-THz 2018)*, Tu-A2-1b-4 (2018).

L. ZHENG and T. TAIRA, “Surface Activated Bonding (SAB) Based Sub-Nanosecond Distributed Face Cooling (DFC) Handheld Laser,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATu5A.5 (2018).

T. KAWASAKI, V. YAHIA and T. TAIRA, “100Hz Operation in the PW/sr/cm² Class Micro-MOPA,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATu5A.6 (2018).

H. H. LIM and T. TAIRA, “14 MW Doughnut Beam Nd:YAG/Cr:YAG Ceramic Microchip Laser with Unstable Cavity,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATh2A.8 (2018).

Y. SATO and T. TAIRA, “Suppression of the Secondary Phase at Grain Boundaries in Yb:FAP Anisotropic Laser Ceramics,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATh3A.3 (2018).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Study on QPM Quartz for Intense-Laser Pumped 266 nm Generation,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATh4A.7 (2018).

- V. YAHIA and T. TAIRA**, “Theoretical and Experimental Study of Gain Aperture Device for Ubiquitous High Power Lasers,” *14th Laser Ceramics Symposium (LCS2018)*, P1-C-27K (2018).
- T. KAWASAKI, V. YAHIA and T. TAIRA**, “100Hz Repetition Rate and the PW/sr/cm² Class Micro-MOPA,” *14th Laser Ceramics Symposium (LCS2018)*, P1-C-27L (2018).
- L. ZHENG, A. KAUSAS and T. TAIRA**, “>30MW, Sub-Ns Tiny Integrated Laser for Robot Arm,” *14th Laser Ceramics Symposium (LCS2018)*, P1-C-27M (2018).
- H. H. LIM and T. TAIRA**, “High Peak-Power Doughnut-Mode Monolithic Nd:YAG/Cr:YAG Ceramic Microchip Laser,” *14th Laser Ceramics Symposium (LCS2018)*, P1-C-27N (2018).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Study of the Secondary Phase in Transparent Anisotropic Yb:FAP Ceramics,” *14th Laser Ceramics Symposium (LCS2018)*, P2-C-29C (2018).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Study on QPM-Structured Quartz by Sub-Nanosecond Microchip Laser Pumping,” *14th Laser Ceramics Symposium (LCS2018)*, P2-C-29E (2018).
- T. KAWASAKI, V. YAHIA and T. TAIRA**, “100 Hz Repetition Rate, >2 PW/sr-cm² Highly Brightness Micro-MOPA within the Paper Size A3,” *LASE, SPIE Photonics West 2019*, 10899-31 (2019).
- N. MATLIS and T. TAIRA**, “THz Acceleration for Compact electron & X-Ray Sources,” *6th Banff Meeting on Structural Dynamics* (2019).
- N. H. MATLIS, D. ZHANG, A. FALLAHI, M. FAKHARI, H. CANKAYA, A.-L. CALENDRON, F. AHR, K. RAVI, S. JOLLY, V. LEROUX, T. EICHNER, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, A. R. MAIER and F. X. KAERTNER**, “THz-Based Acceleration for Compact Electron and X-Ray Sources,” *French-German Thz Conference 2019 (FGTC 2019)*, S05-6 (2019).
- V. YAHIA and T. TAIRA**, “Gain Aperture Study in High-Gain Conditions for High-Energy Micro-MOPA,” *The 7th Laser Ignition and Giant-microphtonics Conference (LIC 2019), OPIC 2019*, LIC3-02 (2019).
- T. KAWASAKI, V. YAHIA and T. TAIRA**, “100 Hz Repetition Rate, 190 mJ and 10 PW/sr/cm² Class Micro-MOPA,” *The 7th Laser Ignition and Giant-microphtonics Conference (LIC 2019), OPIC 2019*, LIC3-03 (2019).
- A. KAUSAS, L. ZHENG and T. TAIRA**, “Tiny Integrated Laser for Robot Arm Mounting,” *The 7th Laser Ignition and Giant-microphtonics Conference (LIC 2019), OPIC 2019*, LIC6-02 (2019).
- R. MIYAGAWA, S. YOSHIKAWA, H. H. LIM, T. TAIRA and O. ERYU**, “Dependence of Pulse-Width and Pulse-Number on LIPSS Formation by Ultra-Short Pulse Laser Irradiation,” *The 7th Laser Ignition and Giant-microphtonics Conference (LIC 2019), OPIC 2019*, LIC6-04 (2019).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “QPM-Structured Quartz for Intense-Laser Pumped 266 nm Generation,” *The 7th Laser Ignition and Giant-microphtonics Conference (LIC 2019), OPIC 2019*, LICp-08 (2019).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Saturable Absorption in Cr⁴⁺ YAG Ceramics,” *The 7th Laser Ignition and Giant-microphtonics Conference (LIC 2019), OPIC 2019*, LICp-09 (2019).
- A. KAUSAS, L. ZHENG and T. TAIRA**, “Tiny Integrated Laser by Room Temperature Surface Activated Bonding,” *6th International Workshop on Low Temperature Bonding for 3D Integration (LTB-3D)*, 220-06 (2019).
- H. H. LIM, T. TAIRA, H. OHBA and K. TAMURA**, “Fiber Microchip Laser Induced Breakdown Spectroscopy (FM-LIBS) as Alternative for Fiber Optic (FO) LIBS,” *International Topical Workshop on Fukushima Decommissioning Research (FDR2019)*, FDR2019-1109 (2019).

K. TAMURA, H. OHBA, M. SAEKI, T. TAGUCHI, H. H. LIM, T. TAIRA, A. TAGAWA and I. WAKAIDA, “Radiation Dose Rate Effects of Microchip-Laser Induced Breakdown Spectroscopy for Remote Analysis of Severe Accident Reactor,” *3rd Asian Symposium on Laser Induced Breakdown Spectroscopy (ASLIBS2019)*, P-35 (2019).

F. CASSOURET, A. KAUSAS, G. AKA, P. LOISEAU and T. TAIRA, “High Efficiency Third Harmonic Generation at 355 nm in CBF (Ca₅(BO₃)₃F) Single Crystal Using Micro-MOPA,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, AW1A.3 (2019).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Polarity Inversion of Crystal Quartz Using a QPM Stamp,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, AW1A.5 (2019).

H. H. LIM, T. TAIRA, H. OHBA and K. TAMURA, “Second Harmonic Generation Under High Dose-Rate Gamma Ray Irradiation,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, JW2A.22 (2019).

T. KAWASAKI, V. YAHIA and T. TAIRA, “Study of Microchip Laser Pulse Shaping Under Amplification,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, JW2A.24 (2019).

V. YAHIA and T. TAIRA, “Study of Gain Aperture Under High Pump Power for the Development of High-Brightness Ultra-Compact MOPA,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, JTh3A.11 (2019).

Y. SANO, Y. SAKINO, K. MASAKI, T. SANO and T. TAIRA, “Laser Peening with 10 mJ Class Pulse Energy and Its Application to Life Extension of Infrastructure,” *SPIE Photonics Asia 2019*, 11183-23 (2019).

B-3) 総説, 著書

平等拓範, 「内燃機関におけるレーザ着火——ジャイアントマイクロフォトニクスの可能性——」, *静電気学会誌* **42**, 262–268 (2018).

佐野雄二, 「研究総括の役割 (ImPACT)」, 特別寄稿, *応用物理* **88**, 539–541 (2019).

Y. SATO and T. TAIRA, “Report on OPIC2019 the 7th Laser Ignition and Giant-Microphtonics Conference 2019 (LIC2019),” *The Review of Laser Engineering* **47**, 650–651 (2019).

B-4) 招待講演

平等拓範, 「ジャイアントマイクロフォトニクスによるバイオ・イメージングの可能性」, 日本学術振興会, 第158委員会・185委員会 2018年度合同研究会, 浜松, 2018年10月.

平等拓範, 「Conference Report ASSL2018」, 光産業技術振興協会, 第3回光材料・応用技術研究会, 米原, 2018年11月.

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)*, Ohio (U.S.A.), October 2018.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics,” 14th Laser Ceramics Symposium (LCS2018), Okazaki (Japan), November 2018.

平等拓範, 「マイクロドメイン制御によるユビキタスパワーレーザー: バイオ, 加工から粒子加速まで」, 先端融合研究環極みプロジェクトキックオフシンポジウム, 神戸, 2019年1月.

平等拓範, 「自動車・移動体へのレーザー応用最前線」, レーザー学会学術講演会第39回年次大会, 東京, 2019年1月.

鄭 麗和, 平等拓範, 「レーザー材料の常温接合」, レーザー学会学術講演会 39回年次大会, 東京, 2019年1月.

佐藤庸一, 平等拓範, 「マイクロドメインの量子状態評価を基にした異方性レーザーセラミックスの設計」, レーザー学会学術講演会 39回年次大会, 東京, 2019年1月.

平等拓範,「20mJ 超を達成した手のひらサイズのサブナノ秒マイクロチップレーザー」, ImPACT 佐野 PM プログラム「ユビキタス・パワーレーザーによる安全・安心・長寿社会の実現」最終シンポジウム成果報告会, 東京, 2019年 2月.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics Toward Tiny Integrated Power Laser,” SPIE Optics + Optoelectronics 2019, Prague (Czech), April 2019.

T. TAIRA, “Opening Remarks,” The 7th Laser Ignition and Giant-microphtonics Conference (LIC 2019), OPIC 2019, Yokohama (Japan), April 2019.

H. H. LIM and T. TAIRA, “Mechanism of Pulse-Width Scaling Law of Laser Induced Breakdown Threshold in Air,” The 7th Laser Ignition and Giant-microphtonics Conference (LIC 2019), OPIC 2019, Yokohama (Japan), April 2019.

I. WAKAIDA, H. OHBA, K. TAMURA, K. AKAOKA, M. OBA, M. MIYABE, H. H. LIM and T. TAIRA, “Non-Separation, Direct and In Situ Remote Analysis for Surveillance and Characterization of Nuclear Debris in Decommissioning of Fukushima Daiichi Nuclear Power Station by Fiber-Optic Laser Induced Breakdown Spectroscopy,” The 7th Laser Ignition and Giant-microphtonics Conference (LIC 2019), OPIC 2019, Yokohama (Japan), April 2019.

T. TAIRA and H. ISHIZUKI, “High Average Power Ultrafast Lasers: Large Aperture Quasi-Phase Matched Nonlinear Devices,” CLEO 2019, San Jose (U.S.A.), May 2019.

H. H. LIM and T. TAIRA, “High Brightness Microchip Lasers and Applications,” Proceedings of 18th Advanced Lasers and Their Applications (ALTA 2019), Jeju (Korea), May 2019.

T. TAIRA, “Dramatical Improvement of Surface Damage Threshold in Laser Ceramics,” International Conference on Pacific Rim Laser Damage & Thin Film Physics and Applications (SPIE-PLD/TFPA 2019), Qingdao (China), May 2019.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics: Tiny Integrated High-Brightness Laser,” 8th International Symposium on Optical Materials (IS-OM8), Wroclaw (Poland), June 2019.

平等拓範,「マイクロチップ小型集積パワーレーザーの開発」, 第 91回レーザー加工学会講演会, 大阪, 2019年 6月.

T. TAIRA, “Micro Solid-State Photonics from Laser Ceramics Toward Tiny Integrated Laser,” 8th Applied Optics and Photonics China (AOPC 2019), Beijing (China), July 2019.

T. TAIRA, “Tiny Integrated Lasers Based on Micro Solid-State Photonics,” 7th IAPLE Annual Conference (IAPLE 2019), Hokkaido (Japan), July 2019.

T. TAIRA, “Micro Solid-State Photonics for High Power Laser Ceramics,” 15th Laser Ceramics Symposium (LCS2019), Zakopane (Poland), September 2019.

B-5) 特許出願

特願 2019-023641,「レーザー加工装置及びレーザー加工方法」, 平等拓範, 鄭 麗和, 林 桓弘, 佐野雄二(自然科学研究機構), 2019年.

特願 2018-173008,「光発振器」, 平等拓範, 林 桓弘(自然科学研究機構), 2018年.

特願 2019-113115,「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, 鄭 麗和(自然科学研究機構), 2019年.

特願 2019-064157,「レーザー点火装置, 宇宙用エンジン及び航空用エンジン」, 平等拓範 (IHI (株), IHI エアロスペース (株), 自然科学研究機構), 2019年.

特願 2019-160502,「水晶光学素子及びその製造方法」, 石月秀貴, 平等拓範(自然科学研究機構), 2019年.

特願 2019-170783, 「レーザ装置及びパルス幅変更方法」, 平等拓範, 川崎泰介, ヤヒア ヴァンサン(自然科学研究機構), 2019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).

平等拓範, (社)レーザー学会フェロー (2019).

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ー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-).

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).

米国光学学会 The Optical Society (OSA), Charles Hard Townes Award 表彰委員会委員 (Award Committee) (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).

レーザー学会「ユビキタス・パワーレーザー」技術専門委員会主査 (日本, 大阪府)(2018-2021).

科学技術交流財団「マイクロ固体フォトニクス」研究会座長 (日本, 豊田市)(2018-2020).

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).
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 (EPE11) 国際会議委員会共同議長 (2013–2014).
応用物理学学会学術講演会プログラム編集委員会委員 (2013–2014).
Materials Committee, Advanced Solid State Lasers (ASSL) 2014 国際会議プログラム委員会委員 (2013–2014).
Optics & Photonics International Congress 2015 (OPIC2015) 国際会議組織委員会委員 (2014–2015).
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).
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).
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).

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).

米国光学会 (OSA) Advanced Solid State Lasers (ASSL) 2017 国際会議統括議長 (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).

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 International 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).

SPIE 8th Applied Optics and Photonics China (AOPC 2019), Conf1: Advanced Laser Materials and Laser Technology 国際会議委員会共同議長 (中国, 北京) (2018–2019).

Optics & Photonics International Congress 2019 (OPIC2019) 国際会議組織委員会委員 (日本, 横浜) (2018–2019.6).

The 8th Pacific Rim Laser Damage (SPIE-PLD2019) 国際会議テクニカルプログラム委員会委員 (中国, 青島) (2018–2019).

Advanced Solid State Laser Conference (ASSL'19), Materials 国際会議プログラム委員会委員 (オーストリア, ウィーン) (2018–2019).

SPIE Photonics West 2019, -Components and Packaging for Laser Systems V (Conference 10899) 国際会議プログラム委員会委員 (米国, サンフランシスコ) (2018–2019).

SPIE Photonics West, LASE, 国際会議委員会共同議長 (米国, サンフランシスコ) (2020–2023).

Mid-Infrared Coherent Sources (MICS) 2020, テクニカル・プログラム委員会委員 (チェコ, プラハ) (2019–2020).

Pacific Rim Laser Damage 2020 (PLD2020), 国際会議国際委員会委員 (日本, 横浜) (2019–2020).

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).

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).

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).

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).

出前授業「レーザー研究の最先端と可能性」岡崎市立東海中学校 (2018).

B-10) 競争的資金

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, 「車載型マイクロレザ点火エンジンの低燃費・高出力特性の実証研究」, 研究リーダー, 平等拓範 (シーズ育成プロデューサー (株)日本自動車部品総合研究所) (2008年–2011年).

科研費基盤研究(B), 「小型可搬な広帯域波長可変中赤外レーザーの開発研究」, 平等拓範 (2009年–2011年).

科学技術振興機構先端計測分析技術・機器開発プログラム (機器開発タイプ), 「次世代質量イメージングのためのUVマイクロチップレーザーを用いた計測システムの開発」, 平等拓範 (2010年–2013年).

科研費基盤研究(C), 「超短パルス発生への適用を目指した傾斜型擬似位相整合デバイスの研究」, 石月秀貴 (2010年–2012年).

科学技術交流財団平成 24 年度共同研究推進事業, 「エンジン点火用高輝度マイクロチップレーザー」, 研究統括者 平等拓範 (2012年–2013年).

科研費基盤研究(C), 「大口径広帯域擬似位相整合デバイスを用いた高出力超短パルス発生の研究」, 石月秀貴 (2013年–2015年).

科学技術振興機構先端計測分析技術・機器開発プログラム (実証・実用化タイプ), 「次世代質量イメージング用UVマイクロチップレーザー」の実用実証化」, 平等拓範 (2013年–2015年).

NEDO 戦略的省エネルギー技術革新プログラム, 「高性能ジャイアントパルスマイクロチップレーザー (GP-MCL) の開発」, 再委託 (研究代表 リコー, デンソー) (2013年–2017年).

革新的研究開発推進プログラム (ImPACT) 「ユビキタス・パワーレーザーによる安全・安心・長寿社会の実現 (佐野 PM)」, 「マイクロチップレーザーの開発」, 平等拓範 (2014年-2018年).

科研費基盤研究 (A), 「マイクロ固体フォトニクスによる次世代レーザー点火・燃焼計測」, 平等拓範 (2015年-2017年).

文部科学省平成 28年度技術試験研究委託事業, 「先進的光計測技術を駆使した炉内デブリ組成遠隔その場分析法の高度化研究」, 再委託 (研究代表原子力機構廃炉国際共同研究センター若井田育夫), 平等拓範 (2016年-2018年).

科学技術振興機構 CREST 研究, 「ホログラム光刺激による神経回路再編の人為的創出」, 再委託 (研究代表神戸大学和氣弘明), 平等拓範 (2017年-2022年).

科学技術振興機構未来社会創造事業 (大規模プロジェクト型) 「レーザー駆動による量子ビーム加速器の開発と実証」, 再委託 (研究代表公益財団法人高輝度光科学研究センター熊谷教孝), 平等拓範 (2017年-2026年).

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」 (② a.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) コンボン研究所, 「マイクロ固体フォトニクスの基礎研究」, 平等拓範 (2019年).

(株) 村田製作所, 「水晶波長変換デバイスの研究」, 平等拓範 (2019年).

(株) 豊田中央研究所, 「マイクロチップレーザーを活用した材料加工技術の開発」, 平等拓範 (2019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できると期待される。しかし、その加速のための高強度レーザーが非常に大型であることが深刻な問題となり、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、レーザー加速による小型加速器の構築を目指すと共に、レーザー加速に資する先端レーザー科学を、別途、社会連携研究、小型集積レーザー (TILA, Tiny Integrated Laser) コンソーシアムにて製造、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

6-10 研究施設等

計算科学研究センター（ネットワーク担当）

大野人侍（准教授）（1996年4月1日着任，2019年10月1日昇任）

A-1) 専門領域：情報科学，ネットワーク運用技術及びサイバーセキュリティ

A-2) 研究課題：

- a) ソフトウェアを用いたネットワークの自動制御
- b) ログ解析等によるネットワーク／サイバーセキュリティの自動最適化及び認証

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ORION（Okazaki Research Institutes Organization Network）2017の構築及び運用を通して，内部ユーザ及び端末の事前登録による認証基盤や，端末のネットワークへの自動接続制御，所外者（ゲスト）に対する認証ネットワークの開発・構築，運用等を行ってきた。この他にも，ネットワーク運用負荷の低減，システム可用性の向上及びセキュリティ向上を配慮した安定的なネットワーク運用が行えるようにした。昨年度より，岡崎3機関 CSIRT チームリーダーに指名され，CSIRT 構築の検討と実際の構築・運用を行なっている。CSIRT 構築検討を通して，現在運用中の ORION2017 では高度化する情報セキュリティへの対応及び情報セキュリティ運用担当者の負担が軽減出来ないことがあらわになり，その対策として次期 ORION までのつなぎとなる情報セキュリティ強化策の策定及び実施を行なった。主な対策は，情報セキュリティ専任担当者の新規雇用及びログ解析基盤の強化等である。これによりログ集約を更に進め自動解析による業務フローの自動化などの対象範囲の拡大が出来る環境を整えることが出来た。
- b) 昨年度に行なわれた機構情報セキュリティポリシーの改訂による処理すべきログ量の増加に対応する新システムの設計と構築を行なった。これにより，解析すべきセキュリティ機器やネットワーク機器，サーバ等の増加に対応しつつ，現実的な処理時間内でそのデータを解析するシステムの整備が行えた。これにより，特にサイバーセキュリティの業務フローの自動化推進が期待できる。

B-4) 招待講演

大野人侍，「本番環境に必要なストレージシステム」，(株)DDN Tintri 事業部「Tintricity 2019」，東京，2019年5月。

C) 研究活動の課題と展望

ソフトウェアを用いたネットワーク及びサイバーセキュリティの自動制御及びログ解析等によるネットワーク及びサイバーセキュリティの自動最適化の連携を推し進めるとともに，近年急激にその重要性及び業務量が増した情報セキュリティへの対応を進める事が喫緊の課題となっている。システム化は単純な自動化だけではなく，人間による判断を意図的に挿入するなど出来なければならない。

しかしながら，ネットワーク運用の複雑性や情報セキュリティ業務過多などの状況を考慮し，過度に運用者への負担にならないよう，更に言えば，負担軽減につながるようなシステムで無ければならず，これら新たに加わった視点への対応も考える

必要がある。ログ解析基盤等、現在運用を進めているシステムに関しても技術面だけではなく、既存業務フローとの適合を考慮すると共に、情報セキュリティポリシーへの適合の自動確認等、運用面での考慮を行なったシステム開発を行なっていく必要がある。

更に、2022年4月から運用開始となる予定の次期ORIONに関して新たな認証基盤の構築が必要となり、その研究と実験的実装を行っていく必要がある。

技術課及び安全衛生管理室

B-1) 学術論文

J. R. HARRIES, H. IWAYAMA, S. KUMA, M. IIZAWA, N. SUZUKI, Y. AZUMA, I. INOUE, S. OWADA, T. TOGASHI, K. TONO, M. YABASHI and E. SHIGEMASA, “Superfluorescence, Free-Induction Decay, and Four-Wave Mixing: Propagation of Free-Electron Laser Pulses through a Dense Sample of Helium Ions,” *Phys. Rev. Lett.* **121**, 263201 (6 pages) (2018).

Y. HIKOSAKA and E. SHIGEMASA, “Metastability of Carbonyl Sulfide Dications Studied by Multi-Electron–Ion Coincidence Spectroscopy,” *Int. J. Mass Spectrom.* **439**, 13–18 (2019).

Y. IE, Y. OKAMOTO, T. INOUE, S. TONE, T. SEO, Y. HONDA, S. TANAKA, S. K. LEE, T. OHTO, R. YAMADA, H. TADA and Y. ASO, “Highly Planar and Completely Insulated Oligothiophenes: Effects of π -Conjugation on Hopping Charge Transport,” *J. Phys. Chem. Lett.* **10**, 3197 (8 pages) (2019).

J. MORIMOTO, Y. FUKUDA, D. KURODA, T. WATANABE, F. YOSHIDA, M. ASADA, T. NAKAMURA, A. SENOO, S. NAGATOISHI, K. TSUMOTO and S. SANDO, “A Peptoid with Extended Shape in Water,” *J. Am. Chem. Soc.* **141**, 14612 (12 pages) (2019).

M. NAGASAKA, H. YUZAWA, N. TAKADA, M. AOYAMA, E. RÜHL and N. KOSUGI, “Laminar Flow in Microfluidics Investigated by Spatially-Resolved Soft X-Ray Absorption and Infrared Spectroscopy,” *J. Chem. Phys.* **151**, 114201 (7 pages) (2019).

H. YAMANE, F. MATSUI, T. UEBA, T. HORIGOME, S. MAKITA, K. TANAKA, S. KERA and N. KOSUGI, “Acceptance-Cone-Tunable Electron Spectrometer for Highly-Efficient Constant Energy Mapping,” *Rev. Sci. Instrum.* **90**, 093102 (7 pages) (2019).

G. KAWAGUCHI, A. A. BARDIN, M. SUDA, M. URUICHI and H. M. YAMAMOTO, “An Ambipolar Superconducting Field-Effect Transistor Operating above Liquid Helium Temperature,” *Adv. Mater.* **31**, 1805715 (6 pages) (2019).

B-8) 大学での講義, 客員

繁政英治, 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I」, 2019年10月3日–4日, 10月21日–22日.

岡野泰彬, 中部大学非常勤講師, 「力学」, 2019年春期, 「基礎電磁気学」, 2019年秋期.

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。

2019年度は，国際諮問委員会による点検評価を実施した。

（川合真紀）

7-1 国際諮問委員会による点検評価

分子科学研究所の現状と将来に関する評価・提言を受けるため、国際諮問委員会を組織し、2019年12月9日－11日に、委員が一堂に会して委員会を開催した。評価委員は運営顧問の他、分子科学の広い領域をカバーするよう委員の専門分野の分布を考慮して、各分野で業績と見識のあるシニアの研究者数名に依頼した。委員構成は以下の通りである。

諮問委員 (Councilors)

本本吉泰	公益財団法人豊田理化学研究所 フェロー, 京都大学 名誉教授 (委員長)
Peter ROSSKY	Dean, Wiess School of Natural Sciences, Rice University, USA (副委員長)
晝馬 明	浜松ホトニクス株式会社 代表取締役社長
石川哲也	理化学研究所放射光科学研究センター センター長
菊池 昇	株式会社豊田中央研究所 代表取締役社長
Benjamin LIST	Director, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Germany
森 初果	東京大学物性研究所 教授・所長
Ron NAAMAN	Aryeh and Mintzi Katzman Professor, Department of Chemical Physics, The Weizmann Institute of Science, Israel
瀧川 仁	東京大学物性研究所 教授

研究顧問 (Senior Scientific Advisors)

中嶋 敦	慶應義塾大学理工学部 教授
Hrvoje PETEK	Professor, Department of Physics and Astronomy, University of Pittsburgh, USA

各委員には事前に研究所の現状に関する資料を送付した上で、委員会当日には、各研究領域、センター、施設の長がそれぞれの現状と課題等について説明し、またいくつかのプロジェクトに関してその代表者が経緯と状況を説明し、質疑を受けた。

Program of IMS Advisory Council 2019

December 9 (Mon)

14:00-17:30	<i>Lab tour (optional)</i> IMS Labs & Facilities (on-site, Myodaiji & Yamate)
18:00-18:30	<i>Presentation on Terms of Reference</i> Maki KAWAI, Director General

December 10 (Tue)

9:00-10:30	<i>Opening Remarks, Present status & Future prospective of IMS</i> Maki KAWAI, Director General Hiromi OKAMOTO, Deputy Director General
<i>Presentation of Departments & Research Centers</i>	
10:50-11:30	Department of Theoretical and Computational Molecular Science Shinji SAITO, Director
11:30-12:10	Department of Materials Molecular Science Toshihiko YOKOYAMA, Director
13:30-14:10	Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science Ryota IINO, Director

- 14:10-14:50 Department of Photo-Molecular Science & Center for Mesoscopic Sciences (CMS)
Hiromi OKAMOTO, Director (CMS)
- 14:50-15:30 Research Center of Integrative Molecular Systems
Shuji AKIYAMA, Director

Featured topics

- 15:50-16:10 Photon Frontier Network & Quantum Technology Flagship (Q-LEAP) programs by MEXT
Kenji OHMORI, Director (Dpt. of Photo-Molecular Science)
- 16:10- Division of Advanced Molecular Science
Makoto FUJITA, Distinguished Professor
- 16:30-16:50 Division of Research Innovation and Collaboration
Takunori TAIRA, Project Professor

Presentation of Interdisciplinary research center

- 16:50-17:30 Exploratory Research Center on Life and Living Systems (ExCELLS)
Koichi KATO, Director

December 11 (Wed)

- 8:30- 9:00 IMSAC Members' Meeting

Presentation of Facilities

- 9:00- 9:30 UVSOR Synchrotron Facility
Satoshi KERA, Director
- 9:30-10:00 Research Center for Computational Science
Masahiro EHARA, Director
- 10:00-10:30 Equipment Development Center
Hiroshi YAMAMOTO, Director
- 10:30-11:00 Instrument Center
Toshihiko YOKOYAMA, Director
- 11:30-12:30 *Reports from Senior Scientific Advisors followed by discussion*
Professor Atsushi NAKAJIMA
Professor Hrvoje PETEK

Preparation of the Reports

- 12:30-14:00 IMSAC Members' Working Lunch
- 14:00-14:30 Q & A
- 14:30-17:00 Draft Writing

以下に諮問委員会から提出された報告書を掲載する。

Advisory Report

December 2019

Institute for Molecular Science

Advisory Council

Preface

The Advisory Council of the Institute for Molecular Science (IMSAC) convened from December 9th to 11th 2019 at IMS in Okazaki.

At the opening presentation, Maki Kawai, Director General of IMS, outlined the mission of the institute and her operation of the institute during the period from April 2016 to the present. In addition, she provided the following Terms of References as guidelines for the IMSAC to provide advice and recommendations.

The IMSAC is asked to advise on the governance, strategies, research systems, and management policies necessary for IMS to fulfill its mission. The key components to consider are as follows:


1. Activity of IMS during the period of present DG (From April 2016 till present)
 - 1-1 Science activity of IMS as a whole
 - 1-2 Organization of IMS, such as Divisions, Research Centers and other activities
 - 1-3 Revitalization of IMS measured
 - 1-4 Activity as the Inter-University Research Institute
 - 1-4-1 Activity of the joint research projects and the shared facilities
 - 1-4-2 Organization of the joint research systems
 - 1-4-3 Revitalization measured
2. Advice on the future perspective for IMS

The IMSAC is also asked to advise on the suitability of IMS as the Inter-University Research Institute, referring to the guideline given by our Government. (Expecting Guide Line shown in the Additional Report from Director General)

The members of IMS Advisory Council are:

Yoshiyasu Matsumoto, chairman	Toyota Physical and Chemical Research Institute
Peter J. Rosicky, vice-chairman	Wiess School of Natural Sciences, Rice University
Akira Hiruma	Hamamatsu Photonics K.K.
Tetsuya Ishikawa	RIKEN SPring-8 Center
Noboru Kikuchi	Toyota Central R&D Labs, Inc.
Benjamin List	Max-Planck-Institut für Kohlenforschung
Hatsumi Mori	The Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo
Ron Naaman	The Weizmann Institute of Science
Masashi Takigawa	The Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo

This advisory report reviews the current situations of IMS and describes various suggestions from the IMS Advisory Council. We hope that this report helps IMS for further growth as a worldwide center of molecular science research.



Yoshiyasu Matsumoto

Chairman of IMSAC

1. Science Activity of IMS

The mission of Institute for Molecular Science (IMS) is to promote the progress of molecular science that currently covers a wide range of research topics, through mutual exchange of human resources between domestic universities and through international collaboration with the world's scientific society. For this purpose, IMS has been actively fostering many joint programs, with the aim of establishing a research core in advanced molecular science. IMS has been providing maximum opportunities for collaborative

research and full utilization of its state-of-the-art facilities by all Japanese researchers in the field and building a robust research network among the international scientific community.

IMS consists of four departments as a concrete foundation of molecular science, two research centers representing research foci at present, four research facilities to support research teams, and two divisions exhibiting advances of the field scientifically and socially. Moreover, Exploratory Research Center on Life and Living Systems (ExCELLS) has been established to integrate knowledge from the three institutes of NIBB, NIPS, and IMS, in the quest for the secret keys to life and living. The challenge of IMS continues.

1-1. Department of Theoretical and Computational Molecular Science

The Theoretical and Computational Molecular Science group derives from its foundational role in the development of IMS. It began with the appointment of quantum chemist Keiji Morokuma as the Founding Director of the Department in 1977, the nomination in 1982 of theorist Iwao Ohmine as a young associate professor (and later the seventh Director General), and the promotion of IMS Prof. Hiroki Nakamura, a theoretical chemical dynamicist, as the sixth Director General of IMS.

The present Department has evolved a great deal from these days, with a broad range of current topics represented by the present faculty. The issues pursued by the theory group represent an excellent balance across the current frontier topics in the area. Specifically, there is a strong representation of condensed phase molecular science, including nanoscale materials and biomolecular systems, of dynamics including quantum systems, and of electronic structure theory with advanced applications of new methods that are opening up access to complex molecular systems at an accurate *ab initio* correlated electron level. Noticeably missing are individuals who are making only incremental contributions to problem areas that are primarily addressed by earlier work. This absence shows the strength of the group on an international scale.

Of primary importance, the theoretical and computational research now going on at the IMS is uniformly excellent and represents in every project, research that is of world-class. The problems being attacked are at the frontiers of science, and the approaches are cutting edge. There is no gap between the research topics represented at IMS and those of primary focus in Europe or the USA. The self-awareness of their competitive position as scientists in the broad perspective is outstanding. Most importantly, individuals are global scientists, who are knowledgeable about the worldwide network of theoretical and computational molecular science. This represents an enormous change from the early years of IMS and a notable evolution continuing even during the past five years. We attribute the attainment of such a high point of success to outstanding leadership.

It is essential for the individuals in the Theory group, in particular, not to miss the current wave of participation in the AI/Data Science world. Molecular theorists, who also have refined mathematical and computational skills, are uniquely capable of implementing such methods in very relevant and impactful contexts, an ability missing from individuals trained as AI experts but without “molecular intuition.”

Regarding organization, the success of the deployment of Prof. Okumura as a joint appointment in the ExCELLS research thrust points to a more general opportunity. The embedding of theoretical scientists within topical experimental research groups typically stimulates opportunities for collaborative science that remain unrealized when these skills are separated. The embedding increases the impact of both experimental and theoretical efforts. Such integration of theorists should be considered more generally, in consultation with project leaders and principal investigators. We believe this would be well received by all involved and would be particularly valuable for the interpretation of data in cutting-edge areas such as single-molecule spectroscopy and advanced imaging.

1-2. Department of Photo-Molecular Science

This department aims for (1) developing light sources including synchrotron radiation, (2) facilitating new spectroscopic methods, and (3) studying the properties, functionalities, and reactivity of materials. The works of each PI group are excellent, and some are at the forefront of science.

(1) Development of light sources: UVSOR is the largest facility in IMS, dedicated to UV and soft X-ray range. In the past, the facility has undergone continued refurbishment and improvement to be competitive with the other synchrotron light sources providing light in a similar range. The enormous effort paid for this optimization and development of lower emittance deserves admiration. The group in UVSOR has been working actively in developing new light source technologies, including generation of structured light and a laser Compton scattering gamma-ray source.

(2) New spectroscopic methods: The department has succeeded in developing new spectroscopic methods. It is fascinating to see the cutting-edge research to develop a quantum simulator using a coherent control technique targeting an ensemble of ultracold Rb atoms in Rydberg states. This project depends on impressive former achievements, including coherent control in the gas phase and solid para hydrogen. Also, various kinds of x-ray spectroscopic methods have emerged with UVSOR that enable identification of local chemical states of specimen. In particular, the application of x-ray absorption spectroscopy to liquid and liquid-liquid interface is impressive.

(3) Characterization of materials: IMS has been one of the core institutes in the field of organic semiconductors since the former Director General Prof. Inokuchi conducted the project of organic semiconductors, intensively. This tradition continues. As an in-house activity, measurements with high precision have been done on the electronic structure of functional organic molecules at surfaces and interfaces by using angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES).

Therefore, the department has achieved excellent progress addressing all the three aims. However, the department suffers from a shortage of research groups. It is necessary to hire new PIs to reinforce the department; alternatively, IMS needs a grand design for the near future to restructure the department accordingly.

1-3. Department of Materials Molecular Science

Some of the research subjects missing in the department can be adapted by collaboration with other laboratories, but it is essential to have 2–3 people that are in the material synthesis community and can help in matching research groups from outside the IMS with the groups internal to the department.

Given the central role material science is playing in modern science, the department must be strengthened significantly, and its size should be doubled. It is indeed essential to keep the high standard of hiring, but it is also important to widen the research topics. If possible, it will be useful to hire people that spend time in leading labs outside Japan, or even foreigners, so that the ties between the department and the international community will be tightened. Also, one should consider including in the department a theoretician working on electronic and magnetic properties of materials. Such a theoretician could collaborate with the experimental groups.

A possible approach is to combine the department with other departments and to establish a more substantial department for “Chemical Physics.”

1-4. Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science

The overall impression of the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science is excellent. It is suggested to consider finding a more appropriate name for this department, for example, "Complex Molecular Science," if IMS holds the current many small departments (see the other suggestion regarding the reconstruction of departments in 3). The PIs in this section tackle various grand challenges, ranging from the study of the physical properties of extended π -electron systems, over super high-performance catalysis, ultimately to the self-assembly of living systems. Considering the breadth of the scientific investigations covering physical chemistry, chemical synthesis, inorganic and organic chemistry, materials chemistry as well as biochemistry and chemical biology, strategically, hiring at least one additional PI, in the broader area of synthetic chemical biology/biochemistry, is recommended. He/she could help make the bridge between the more biology-oriented activities (for example by Prof. Kato) and those that are more chemical/material/chemical physics-oriented. The already consummated recruitment (Assoc. Prof. Kusamoto, who will work on open-shell molecules) and those that are planned (probably in the area of chemical synthesis of π -systems) are highly promising.

1-5. Research Center of Integrative Molecular Systems (CIMoS)

The Center aims at strengthening the research performances of IMS, as part of a globally competitive strategy. The research center aims not only to reveal the underlying rationale for the behavior of individual molecules and molecular assemblies in terms of molecular science but also to create and to study new molecular systems and their structural and electronic properties. The research themes the people in the center pursue are highly sophisticated and internationally competitive, and the level of engagement of each member is quite intense in terms of research activity. The atmosphere in the center and the physical setting support the exchange of ideas among both the senior faculty members and the students. It is expected that the significance of the center will further increase, with the introduction of frank and candid exchange of views among the research groups. Some creative collaborations between laboratories have already begun, with high expectations for paving the way to state-of-the-art research fields. The center is serving as an excellent example of how to organize interdisciplinary research.

1-6. Center for Mesoscopic Sciences (CMS)

The focus of this center is stated to be "to elucidate the processes that trigger the functions and reactions of molecular systems in the mesoscopic regime." Up to now, the center has developed a method for generating and controlling the chiral optical field. This method would be beneficial for analyzing handedness in molecules and nanocomposites. Usually, circular dichroism (CD) is challenging to detect. The development of CD microscopy makes it possible to apply this method to materials in the mesoscopic range. Despite the impressive growth, it is difficult to see how the center is organized to produce cutting-edge research work. The center needs to clarify its vision and select the right PIs to fit. Communication among the people in the center and collaborative practices are highly encouraged to meet the goal of the center.

1-7. Division of Advanced Molecular Science

Thanks to the strong leadership of the current Director General, a new division, Division of Advanced Molecular Science, has been established, which allows a distinguished scholar to have an opportunity to maintain his/her research activity in IMS even after mandatory retirement in university. It is noteworthy that Distinguished Prof. Fujita, invited to this Division, used to work in IMS as an associate professor. He has achieved outstanding work on self-assembled molecular systems based on coordination chemistry.

Furthermore, he has recently developed a versatile method for structural analysis of molecules, crystalline sponge method, which does not require crystallization of samples. This Division helps to significantly increase the scientific visibility of IMS.

1-8. Division of Research Innovation and Collaboration

IMS has been one of the leading institutes in Japan for both experimental and theoretical research. Moreover, IMS has initiated a program in which they focus not only on academic research but also on innovation working with industry. TILA (Tiny Integrated Laser) consortium is such a program, yielding a micro solid-state laser advancement and creating an industrial application that will maximize the benefit of research results and meet industry needs. The advance of laser technology has provided many applications, and we have been benefiting from them, such as distance measurement for construction, eye surgery, and satellite-based atmospheric research. The integration of a tiny microchip laser with high power and stability will give us much broader application possibilities. With it, even a tabletop accelerator could be possible, which could bring new scientific research.

The time is ripe to have stronger and more coordinated work between academic research organizations and industry to find more advanced usage for these high power lasers.

It is essential to reorganize the current Industry-Government Agency-Research/University relationship to realize such collaboration. We need a research organization to advance the science, government agency to fund the research and industry to commercialize the technology. However, top research organizations have very little time to convert their science to the technology that many companies can use. Meanwhile, some local universities in Japan have limited talent to advance science but have a significant responsibility to contribute to local industry advancement. Therefore, it may be best to expand the current three-way Industry-Research/University-Government collaboration (I-R-G) into a four-way relationship: Industry-Research/University (Science)-Local University (Technology)-Government agency (I-S-T-G). The essence is already evident in the TILA consortium. Including local technological universities to focus on actual applications of tiny microchip laser for small-to-medium companies may lead to new applications in more extensive areas.

2. Activity of the Shared Facilities, ExCELLS, and the Joint Research Projects

IMS houses open-use research facilities to promote the discovery of molecular behaviors and properties. Four facilities have been settled: (1) UVSOR Synchrotron Facility, (2) Instrumental Center, (3) Equipment Development Center, (4) Research Center for Computational Science. Moreover, (5) Exploratory Research Center on Life and Living Systems (ExCELLS) has been recently established. With these facilities and the organization in addition to (6) Joint usage and joint research projects, IMS promotes collaboration with universities and research institutes around the world.

2-1. UVSOR Synchrotron Facility

Prof. Umbach's assessment report provides a comprehensive analysis of possible future courses for the UVSOR facility. It is entirely up to the IMS management decision which option the Director General would take, but we would add some information that may help to make the decision.

The present UVSOR is not very far from the ideal "diffraction-limited light source" because of the continuous improvements made so far. The problem is not the light source performance, but the aging of components which could deteriorate the stability and reliability of the facility. Almost no new development is necessary to refurbish the light source itself. Therefore, the upgrade cost

would not be very high.

The unique position of UVSOR in the Japanese synchrotron radiation (SR) research community is that it is the facility for chemistry. Although there are six operating SR facilities in the low energy range like UVSOR in Japan, UVSOR is the only facility serving mostly academic users, including many chemists. Some people are considering a league among SR facilities for academic users, Photon Factory, UVSOR, and HiSOR as an entity to negotiate with MEXT. It requires a thorough analysis of what this cooperative “league” will bring.

From a different point of view, UVSOR could be a low energy member of the Japanese advanced SR facilities with nearly diffraction-limited performance. SPring-8 will cover the high-energy part, and the Tohoku new 3 GeV facility will include the mid-energy part. This direction may open up a possibility to operate UVSOR under the “Act on the Public Utilization of the Specific Advanced Large Research Facilities” as are SPring-8 or J-PARC.

The “weight” of chemistry is increasing in the SR research community. The reason for this is that not only academic users but also industrial users are growing at a high pace. Internationally, many pharmaceutical industries are participating in SR researches. However, not only the pharmaceutical companies but also many polymer companies have jumped into the SR research in Japan. In considering the future direction of UVSOR, it may be essential to decide whether the facility would include more industrial users or not. This decision is strongly related to the future standing point of UVSOR in an academic league, or a diffraction-limited facility league. Technically, UVSOR can serve the structural biology community by installing some new components.

That said, UVSOR is a conventional light source that can serve general users who may not be familiar with the synchrotron radiation. The number of users from IMS is decreasing, while the outside users are increasing. The management principle of the facility should move to a more “user-oriented” focus. A short-term solution could be to maintain the present UVSOR while applying the patches. However, IMS should have a concrete mid-term or long-term vision on the light source facility. We recommend setting up an internal task-force to make a plan for UVSOR in collaboration with the user community. A broader discussion in the landscape of the Japanese SR community may also be necessary.

2-2. Instrumental Center

Missions of the Instrument Center are: (1) to promote the state-of-the-art instrument and to maintain necessary conventional equipment for in-house and external researchers, (2) to manage three projects as representatives for promoting joint-research/joint-use. The plans are “Nanotechnology Platform Program (Platform of Molecule and Material Synthesis)” by The Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT), “Inter-University Network for Efficient Utilization of Research Equipment (Equipment NW)” by MEXT, and programs in National Institutes of Natural Sciences (NINS)–Inter-University Cooperative Association (NICA).

The recent improvement of the instrument center is an increase in the number of members for strengthening the system of joint-research/joint-use. Two team leaders (TLs), Dr. Toshikazu Nakamura (analytical TL), and Dr. Toshiyasu Suzuki (synthetic TL) joined to support and promote research with in-house and external researchers.

As for instruments, a new E-beam lithography system was settled in 2018 and is taken care of in Equipment Development Center, and a local micro-probe system will be set in 2020. On the other hand, there are still old apparatuses, which were introduced more than 20 years ago: e.g., MPMS-SQUID (Magnetic Property Measurement System-Superconducting quantum interference device) and PPMS (Physical Property Measurement System). In-house and external researchers have commonly utilized these apparatuses.

It is recommended to plan for updating the old conventional and useful machines and appliances. Recent MPMS-SQUID and PPMS with recycling He systems might be helpful to save Liq. He.

2-3. Equipment Development Center

In the Equipment Development Center (EDC), various pieces of experimental equipment necessary for molecular science research have been manufactured and developed. This EDC is composed of the mechatronics section, electronics section, photolithography section, and digital engineering section, where technical associates and technical fellows with advanced technology and skills have been working. Since the establishment of IMS, technical associates have worked closely with researchers inside and outside IMS to develop various experimental devices and instruments that enable their original research. Workshops on machining, electronic circuit work, and micro-machining are open to researchers and students to disseminate technology.

The mission of EDC is to work strategically as a central technology hub to develop molecular science by responding to the requests of researchers.

The ability of the technical staff is essential to utilize and maintain the new experimental equipment. It is practical to give the technical associates incentive like special salary to employ and keep superior technical associates with specialized techniques in this EDC.

2-4. Research Center for Computational Science

As a national shared computer center, the Research Center for Computational Science (RCCS) provides an advanced computational environment and libraries to about 150 groups of domestic molecular/biomolecular scientists with a very large-scale calculational resource that would be difficult to create on one university's home ground.

The RCCS provides state-of-the-art computational resources to academic researchers in molecular science and related fields, *e.g.*, quantum chemistry, biomolecular simulations, bioinformatics, and solid-state physics. The computer systems consist of multiple NEC CPU and GPU clusters with a current estimated total peak performance of 4 Pflops. Also, there is a developmental Fujitsu Server with an architecture that mimics that of the "K computer."

The Computer Center of IMS, which was the forerunner of the RCCS, was established in 1977, primarily to provide an opportunity for large scale computation in molecular science, which could not be carried out at regional university computer centers. Further, the Center supported experimental data collection and analysis, developed and maintained the program library and database in molecular science, and provided the computational service to neighboring National Institute for Basic Biology and National Institute for Physiological Sciences.

In 2000, the Center was reorganized into the RCCS of the Okazaki National Research Institutes to extend its activity to the frontier between molecular and biosciences. Since then, the Center has also been engaged as a partner in science by developing new theories and simulation methods. After 2004, when Okazaki National Research Institutes, itself, was reorganized into the National Institutes of Natural Sciences, the Center has been active as a member of Okazaki Research Facilities.

The Center is managed and operated by a faculty oversight committee, traditionally led by one or more members of the Department of Theoretical and Computational Molecular Science, continuing the tradition, since the founding of the computational resource, that the head of that department has a unique role within the RCCS leadership. There is, also, a substantial professional staff that provides a consistently excellent and reliable service to a large number of users (typically ~700 individual users on an annual basis).

The role of this Center in the success of the IMS has been critical and is increasing as computational materials science, computational

biology and biophysics, and the long tradition of computational chemistry play increasingly more significant roles in science and engineering. It is evident in the fact that the RCCS has been a *critical asset* in obtaining large projects for IMS that involve computational scientists and that bring significant funding for computational resources. In particular, the Center made a substantial contribution to the project, “Grid Application Research in Nanoscience,” by IMS as a grid computer center, which was a part of the activity of the national project, “National Research Grid Initiative (NAREGI),” by MEXT, Japan, from 2003 to 2005. Now, the Center is working as a significant component of the project, “Development of New Computational Methods for Large-Scale Systems and Establishment of Bases for Advanced Simulation of Molecular and Material Systems,” by IMS forming a part of the project, “Formation of Interdisciplinary and International Bases Across Fields of Study,” by NINS. The Center is playing an important role, too, in the national project, “Grand Challenge to Next Generation Nanoscience,” by IMS in “Development & Application of Advanced High-Performance Supercomputer Project” by MEXT, Japan.

2-5. Exploratory Research Center on Life and Living Systems (ExCELLS)

A key goal laid out by Director General in her report to the IMSAC is for the IMS to be the nexus for collaboration between universities and across NINS. The Inter-university Research Institute Corporation appears to have been set up to promote this function, here through the National Institutes of Natural Sciences (NINS). However, the NINS “Collaborative Research Map” and the descriptions of such efforts are uniformly vague, and evidence of collaboration from previous reports is essentially all anecdotal.

This situation may change. The Exploratory Research Center on Life and Living Systems (ExCELLS) was launched in April of 2018 directly under the National Institutes of Natural Sciences. As it is relatively early, a thorough evaluation of this center cannot yet be conducted. However, the concept of the center and the personnel it has assembled are of outstanding potential.

The hugely ambitious ultimate goal of the Exploratory Research Center on Life and Living Systems is to answer the question, “What is life?” Within ExCELLS, new approaches to observing biological entities, for example, under extreme conditions, to the deciphering of hidden information through big data analysis, and ultimately to creating living systems, will be developed. Furthermore, ExCELLS is specifically designed to promote interdisciplinary research collaborations between different investigators. The center covers a topic of utmost current interest and has a genuinely outstanding potential for successfully contributing to some of the grand challenges of science.

Dr. Koichi Kato directs the center, ExCELLS, whose individual highly interdisciplinary scientific program has been described in the context of the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science.

A question that arose was how all the extraordinarily diverse and interdisciplinary activities could be focused on a common goal. The “Golgi Atlas” project, to which many of the groups can contribute at least in principle, appears to be a good starting point for such efforts. Prof. Kato personally emphasized that he considers his role as the director of this program to unite the different research activities and groups. Considering how he leads his research department, there is little doubt that he will be at least as successful with the current center ExCELLS.

2-6. Joint Usage and Joint Research Projects

Joint-research/joint-usage is a vital mission for IMS as one of the institutes affiliated with the Inter-University Research Institute Corporation in Japan.

There are several joint-usage and joint-research projects in IMS as follows:

(1) Large network-type projects funded directly by the government:

(1-1) The Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT) Flagship Project, Priority Research Issue, “Development of New Fundamental Technologies for High-Efficiency Energy Creation, Conversion/Storage, and Use.” This post-K computer program will terminate on Mar. 31, 2020. The following program needs to be planned to promote computer science.

(1-2) MEXT Nanotechnology Platform Program, Platform of Molecule and Material Synthesis. This program started in July 2012 to promote public usage of various nanotechnology facilities and lasts until Mar. 2022. This program is recommended to be continued to encourage joint-research/joint-usage.

(1-3) Inter-University Network for Common Utilization of Research Equipment. This program was launched to construct a nationwide network in 2007. As of June 2019, the number of registered users amounts to 13,000 from 385 universities/institutions/companies covering over 3,500 laboratories in Japan. Since this program is practical and useful for researchers in Japan, it should be planned to be continued in the future.

(2) Small-size projects supported by IMS:

The joint studies programs (special projects, research symposia, joint studies programs), the international Okazaki conference, and international and inter-institutional collaboration symposia have been carried out as the joint-research/joint-use institute. To promote the globalization of the institute, various kinds of flexible international programs, such as short-term (1–2 months/year for several years) visiting foreign professor program and short visiting researcher program might be useful. It is also recommended to actively invite female international researchers to maintain the diversity of human resources in IMS.

One crucial thing that appears missing at IMS is a *quantitative* record of collaboration; data on collaborative grants, collaborative papers, co-supervised researchers, and so on, can provide evidence for such interactions or their absence that can be tracked and used by Department heads/Center Directors.

3. Revitalization Strategy Measured

The current Director General (DG) presented the initiatives she has taken from 2016 to revitalize the institution. Her foci were to bring in some senior scientists to attract the community and general society to increase the scientific visibility of the institute.

Along this line, the DG has introduced new Divisions. Among them, the establishment of Division of Advanced Molecular Science, in which Distinguished Prof. M. Fujita has been invited as a PI, will lead to the significant success for reinforcing the scientific visibility of IMS. It would be advisable to invite more distinguished professors to raise the IMS profile even higher. Also, hiring scholars from abroad will be much encouraged. There might be some technical difficulties concerning salary, housing, or other things, but OIST (Okinawa Institute of Science and Technology Graduate University) will be a good practice model to enhance the globalization of IMS.

Setting Division of Research Innovation and Collaboration attracted the local community of innovation. Major invention of tiny solid laser by Project Prof. Takunori Taira has advanced to the phase of change, which excites private companies, leading to collaboration with society.

The organization of the Institute has too many and too small departments. Restructuring the current departments is highly encouraged; for example, one could divide all the existing departments into two departments: One is physical molecular science, and the other is soft matters chemistry (or molecular life science).

It is also essential to reinforce the section of university-research-administrators (URA) to reduce the burden of particularly full professors in IMS, which allows them to concentrate on their research projects as described in 4-1.

As one of the Inter-University Research Institutes, IMS needs to promote cooperative researches with scholars in universities. For this purpose, the DG has established the Division of Intensive Research, where IMS invites adjunct professors to develop new ways to use facilities of IMS. Hiring Dr. Matsui as a Senior Researcher in the UVSOR facility helps support the activity of UVSOR. Otherwise, the shortage of researchers and technical staff in the facility makes the operation and update planning of the facilities more difficult. Moreover, as described in 2-1, IMS should have a concrete mid-term or long-term vision on the light source facility.

The current DG has reassigned the jobs of a couple of associate professors, which has not been done by any former Director Generals: Dr. Shigemasa was reassigned to the Head of Technical Division, Dr. Nakamura to the team leader of Analysis team and Dr. Suzuki to that of Molecular Synthesis team in the Instrument Center. These reassignments are expected to further enhance the activities of cooperative researches with scientists from outside universities and research institutes.

Another particular example of change is new flexibility in the hiring process. Prof. Ishizaki and Assoc. Prof. Kobayashi were hired under non-traditional terms, where they could be promoted and stay at IMS, rather than being required to move to another organization. Also, recently, positions have been opened to international candidates. These are quite positive changes in terms of enabling the development of the most influential possible group of scientists at IMS accessing the open global marketplace.

We note that the Department of Theoretical and Computational Molecular Science and the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science have hired a few female faculty members of the IMS, an important step. The relatively new and cross-cutting ExCELLS group appears to be the only one that has a significant female representation, by international standards. It would be invaluable to the Theory group's apparent broad role in leading the standard for theoretical chemistry in Japan if the group were able to identify and hire additional female faculty in this field and, particularly, entry-level female faculty. These individuals would serve as appealing role models that could place the Department in a position to take a leadership role in actively attracting female graduate students in the broader physical sciences, in a virtuous cycle.

4. IMS as the Inter-University Research Institute

Institute for Molecular Science (IMS) is one of the 17 institutes specified as Inter-University Research Institute Corporation. The fundamental mission of these institutes is to contribute to the development of academic research at universities or to support them by maintaining large facilities necessary for shared use among scientific communities.

IMS is required to have a suitable shape as an Inter-University Research Institute in terms of the following seven components.

4-1. Administration

The administration and operation of IMS, as well as the process of recruitment of researchers and faculties, are transparent to the research community to meet the fundamental mission of Inter-University Research Institute Corporation. Also, IMS maintains communication channels accessible to the researchers of molecular science so that IMS can adequately consider their opinion for better operation of the institute. It is essential to enhance cooperative researches in IMS with outside scientists in various established sub-fields of molecular science.

At the same time, it should be equally important to explore new directions and encourage collaborative challenges between researchers with different expertise and knowledge to create new sub-fields of molecular science. IMS should have mid- to long-term

strategic plans for future initiatives along with new directions and make priorities in the use of its resources. It will be helpful to have an informal board of people who can give thoughts to the director and the senior managers of the institute to decide which areas to focus on various possibilities. They may not represent the majority of the molecular science researchers but should have specific views on what would be the promising fields to pursue.

The effectiveness of administration is an important issue. Senior faculties of any major institute in Japan are now required to spend a significant amount of time and effort for administration. As a result, they are challenged to find sufficient time for their research. Their commitments are necessary when an important decision has to be made. However, they should be freer from other administrative duties such as institutional research, some aspects of public relations, and proposing funding agencies. For this to happen, one of the critical elements would be the addition of one or more talented university-research-administrators (URA) who can handle such tasks as collecting information and analyzing statistics of the relevant research fields and communicating with community or funding agencies. Since the URA system in Japan started relatively recently, only several years ago, those in the early stage of the career need to have a senior partner to consult.

The employment system of researchers has changed dramatically in Japan for the past twenty years. At IMS, internal promotion used to be strictly forbidden. However, a variety of career paths with various degrees of independence for young scientists is now available with successful examples. Such flexibility in hiring and promotion would be generally encouraged.

4-2. Core Institute to Lead the Community for Molecular Sciences

IMS was established in 1975 as a research institute under the direct control of the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT), aiming to become the center of excellence in the scientific field of molecular science. IMS now belongs to Inter-University Research Institute Corporation, National Institutes for Natural Sciences. Many Japanese researchers in the field of physical chemistry had been a member of IMS, so that IMS has produced many outstanding physical chemists.

IMS has worked as the core research institute of molecular science for the past 44 years, conducting cutting-edge researches, joint-research/joint-use, holding symposiums on recent research topics, and various issues, including research environment, and organizing projects such as research equipment networks for leading molecular science research.

The researchers in the field of molecular science demand both standard and cutting-edge equipment for their research. Owing to the reduction of the budget in the national university and less supply of liquid He, the standard equipment is necessary to maintain the research activities and to support researchers. Also, cutting-edge equipment and facility, which a university cannot manage, are essential to promote novel molecular science.

The large facilities in IMS are UVSOR light source facility and computational center. The low-energy SR (<1 GeV) is an essential facility for solid-state scientists to determine the band dispersion, which cannot be covered by laser and other facilities. It is of importance to discuss the benefit of UVSOR for cutting-edge research in addition to the common usage in the scientific field of chemistry by comparing to other world-wide SR facilities.

Since IMS currently has Yamate campus besides Myodaiji, it has a more substantial area but a smaller population than in the old time. IMS needs to make a strategy to involve external scientists in the activities in IMS; for example, the quantum chemistry and computational school in IMS should keep attracting students and academic and industry researchers.

Looking ahead to the next 50 years, it is essential to continue the discussion about the direction of IMS as the core research institute in the field of molecular science.

4-3. Institute as an International Core

Based on high reputation of IMS in international research communities through their world-class high-level facility as well as research activity known through journal publication, IMS annually organizes Okazaki Conference in which prominent leading core researchers in Molecular Science are invited from overseas countries, while international and inter-institutional collaboration symposia are also organized both in Japan and overseas. Furthermore, between 2018 and 2019, 22 participants are counted in IMS international internship programs, two students from abroad, in addition to nine foreign internship students participated to SOKENDAI Asian Winter School, and over 100 researchers are counted in the international joint research program and global use of facilities program. These facts show IMS's high reputation as an internationally well-recognized core institution in Molecular Science.

To build up further the high reputation of IMS as an international core, for example, it may be suggested that at least one or two regular faculty positions in IMS are intentionally assigned to non-Japanese scholars who can facilitate diversity of IMS activity both in Japan and in overseas. It naturally implies that their research activity would be published in every IMS annual report so that IMS diversity can be recognized internationally. Since IMS has already established close collaboration with many European and Asian institutions, including universities, IMS may exchange sabbatical leave programs so that their faculty can work in other overseas institutions in a rather long period to promote deeper collaboration in research. Foreign faculty naturally invites international students and post-doctoral students from abroad, and he/she also assists the mixing of talent internationally.

4-4. Research Resources

The *required mission* advocates the ideal situation for research resources. This is quite common for this kind of statement. When assessing what is happening from the statement of *our mission*, it should be acknowledged that the IMS runs shared facilities that are too large to be managed by a single university, and at least intends to perform maintenance and the appropriate renovation of the facilities to promote active use by the scientific community.

The Report from the DG of IMS addressed the various scales of large shared facilities. Among them, it may be necessary to discuss in more detail the two largest facilities, UVSOR and Computational Resources. High-power computational resources are distributed across many places in Japan. The hardware development is mostly performed in the industrial sector. Therefore, the academy comprises mostly of users. It seems not so difficult to keep the computational resources if the appropriate budget is secured. However, a synchrotron radiation facility like UVSOR developed in the academic sector demands each managing institute to provide operating and developing staff. If the IMS plans to start a large-scale upgrade of UVSOR, the current number of accelerator personnel is far less than will be needed.

Each Inter-University Research Institute Corporation has a mission to manage the shared large facilities used mostly for academic research at universities. Significantly increased demand from industrial communities would always present a challenge for these facilities. The IMS should scrutinize the present situation with UVSOR to determine whether the current management scheme is appropriate. In particular, global competition is growing in synchrotron radiation research, accompanied by an accelerating technical revolution of light sources. Much more frequent upgrades are required to keep up with global trends.

More open shared facilities, notably including the industrial sectors, are supposed to be the responsibility of National Research and Development Agencies like RIKEN (SPring-8 & SACLA, K-Computer), JAEA (J-PARC), and QST (New SR facility in Sendai). These agencies, like the IMS, are overseeing the operation of shared facilities (customer-oriented service) and basic research (pursuit of self-interest) simultaneously, without making a clear distinction between different managing principles.

A thorough examination should be necessary to make the different managing principles compatible within a single institute when the IMS decides to conduct a globally competitive upgrade of UVSOR.

4-5. Commitment to Innovate New Area of Science

IMS commits itself to cultivate new fields of science, particularly in molecular science, which is achievable with new ideas of researchers in IMS and enough funding to realize these ideas. Also, recruiting researchers with potent capabilities is necessary. IMS has provided an excellent opportunity for young and talented researchers to make their independent group. The validity of this system can easily be recognized if one considers that many former IMS associate professors have obtained full professorships in decent universities and work as leaders in the field of molecular science. The spirit of this IMS continues in the term of the current Director General: IMS has recently hired talented young researchers as associate professors such as Drs. Kobayashi, Sugimoto, Minamitani, and others.

In the coming several years, several professors will be retired. Thus, IMS meets the time of necessity to reform the structure and prepare for opening new fields. IMS and its community should survey the current activities in molecular science and related areas to plan future directions for IMS to cultivate. IMS should not hesitate to hire non-Japanese scholars if it is needed for fulfilling this purpose.

4-6. Cultivating Personnel

IMS has been very successful for growing, particularly young researchers, for example associate professors. As stated earlier, many former associate professors of IMS have been promoted to be full professors in decent universities and institutional labs. A symbolic example is Distinguished Prof. Fujita, who used to work as an associate professor in IMS, is now a Professor at the University of Tokyo and the PI in Division of Advanced Molecular Science in IMS.

In contrast, IMS has been struggling to have graduate students. This is the structural problem in this country, and has not been changed and will be challenging to change in the short term. The decrease in the number of students in Japan makes the situation even worse. As pointed out during our discussion, IMS should recruit international students who are highly motivated to do Ph.D. works in molecular science. For this purpose, IMS needs to have the right tactics to attract international students, including the advertisement of the institute and preparation of special scholarships enough for international students to live in Okazaki.

4-7. Relation to Society

For an Institution like IMS, it is a top priority to focus on cutting-edge scientific researches. However, to get general public support for the institution, it is essential to share their research topic with the general public in plain language that is easy to understand. For that, it is good that IMS is hosting seminars for public forum titled “Molecular Science Forum” four times a year. They are also accepting group tours to show the model of their vast research machine. Such public relations should be encouraged.

Also, the program like TILA consortium, connecting the top research to actual industry for open innovation, is essential. To advance the concept further, IMS may be willing to have some industry incubator program so that researchers themselves venture into making startup companies. The activity like the TILA consortium may lead to further innovative activity as potential startups. Large companies would be willing to invest in such a startup by sending engineers as well as providing seed money needed. Researchers at IMS could be CTO or top scientific advisers while engineers from a company being CEO.

If it is too much deviation for IMS to take the road toward making their own incubator, it would be desirable for researchers to take a post of scientific adviser for such startup companies. Many companies, either large established companies with a new project or startup companies, can appreciate such help.

Mentioning about the effects of basic science on our society, it is not apparent whether or not basic science will provide an immediate impact on society. But a study like quantum simulator work by Prof. Ohmori's group could potentially offer us a massive benefit to the future of our society by a deeper understanding of the quantum world, which may lead to the advancement of quantum computers. Although the work, such as Prof. Ohmori's, is the basic research that may bring us breakthrough knowledge, society should not look for a quick return.

5. Summary and Suggestions

IMS has been keeping research activities of world-class, and many of the problems being attacked are the frontiers of science. The current Director General has made new attempts to make IMS more visible scientifically, including the establishment of Division of Advanced Molecular Science, where a distinguished scholar of another organization is invited to open a new lab also in IMS. This widens the research area of the Institute and allows the renowned scholar to perform a cutting-edge project even after retirement from the current organization. This win-win situation surely helps to raise the scientific visibility of IMS.

Despite the success in research accomplished in IMS, the Institute has a few problems to be overcome soon. First, the Institute needs to have a concrete mid- or long-term vision on the UVSOR facility. This kind of a large-scale facility is critical for an Inter-University Research Institute. Second, the Institute is facing the time to reform the structure of the Institute and to prepare for opening new fields as several full professors will be retired in several years. It is advisable to start planning for future directions of the Institute. Third, accepting foreign researchers is also a vital issue for increasing the presence of the Institute. IMS should have more foreign researchers and Ph.D. students. Having Japanese graduate students is going to be more difficult because of a decrease in the number of students in Japan. Hiring non-Japanese professors may encourage superb international students to come to IMS. Henceforth, also for this purpose, IMS should manage to improve the research environment for a full professor to attract talented scholars all over the world. It is advisable to change the management system for separating administrative works from the scientific activities of full professors.

8. 研究施設の現状と将来計画

共同利用設備を充実させ、大学等の共同利用研究者の研究支援を行うことが大学共同利用機関の主要な役目のひとつである。1975年の研究所発足当初から装置開発室と機器センターを設置し、1976年に化学試料室、1977年に極低温センターを設置した。さらに1979年には電子計算機センターに大型計算機を導入し、1983年から極端紫外光実験施設（UVSOR 施設）で放射光源装置が運転を開始した。これらの施設では単に設備を設置するだけでなく、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。

教員の流動性が高い分子科学研究所では、着任後の研究立ち上げスピードの速さが求められる。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り、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。また、分子研転出後もこれらの施設を利用することで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も、共同利用設備として施設の管理下でさらに広くの共同利用に供されるケースもある。このように、研究所にとって施設の充実、研究職員が流動していくシステムそのものを支援する意味もあり、施設の継続的な運営が重要である。高度な施設運営を維持するために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。

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。

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。特別研究部門では、（1）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）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クロスアポイントメント教員として12月1日付で高谷 光准教授（京都大学化学研究所准教授）が着任され、化学マシンとしてのUVSORの運用強化に尽力している。

（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」を發してから 36 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旧施設は廃止され, 新施設が新地に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。2 度の高度化で生まれ変わった現在の UVSOR-III は, 別の見方をすれば国内で最も若い放射光施設であり, 国際的にみても特に 10 eV 付近をカバーする真空紫外光領域では希少な第三世代放射光施設で, 今後の国際連携の発展が期待されている。また中型放射光施設として建設が決定した東北リング (仮) と大型放射光施設 SPring-8 とともに 3 機関で国際的な先端放射光施設としての研究主導が求められる。一方, 国際研究力の維持には高い光源性能に見合う実験設備の整備が不可欠であるが, UVSOR-III として 8 年目を迎え, 6 種の先端的な挿入光源ビームライン設備 (全ビームライン数: 14 ライン) が成熟し, 主として材料科学, 光化学, 環境エネルギー分野の先端の実験成果の収穫期に入った。また UVSOR の高い光源性能とコンパクトな運転体制の特徴を活かした, 独自性の高い特徴的な研究開発が行われており, 新規量子ビーム源の開発や回折限界光源の特性を利用した放射光コヒーレンスの科学も推進している。その他の汎用性ビームライン (8 種) においても, 国際的に唯一無二の可視光から真空紫外光まで連続した波長可変な分光システムが稼働しており, 材料開発研究にて貴重な成果が発信されている。

先端研究の活動力の維持と同時に, 今後の放射光利用においてユーザーコミュニティの拡張と増強が重要であり, 特に歴史的に放射光利用が普及していない化学・バイオ系への分野展開が国際的な命題である。こうした潜在的放射光利用者となりうる同分野を長年にわたり支えてきた分子科学研究所への期待は高い。分子科学研究所は 2018 年度から新たな試みとして, 主任研究員制度とクロスアポイントメント制度の 2 つの新しい人事システムを始めた。UVSOR ではビームライン設備の先端高度化を担う人材として主任研究員制度を活用し, 光電子関連分野の増強を行った。一方, ケミカルマシンへ向けた分野開拓を担う人材としてクロスアポイントメント制度を活用し, 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招聘した。今後, 先端放射光設備を使った化学研究に集中的に取り組む時間を提供する。また加速器部門は専任スタッフが転出したが, 引き続きクロスアポイントメントで UVSOR 施設の運営にご協力いただいている。

さらに 30 余年来にわたり積み重ねられた貴重な学術資産と, 共同利用環境の継続的支援を視野に入れると, 次期施設計画 (UVSOR-IV) を算段する時期にある。本施設規模 (小型放射光施設) の光源加速器性能は既に概ね極限化されており, さらなる光源性能の向上を含めた加速器設備の抜本的な改修が必要であるか否かの判断には, 既存技術の成熟度に応じた導入の是非, あるいは根本的な技術革新など次世代技術の登場が待たれる。そのため現時点で検討しうる次期施設の形態について, 方向性としては大きく 2 つに分かれる。①現状のリング型光源加速器性能を基本構造とし, ビームライン実験設備の高度利用に特化することで未踏の学術を広く開拓する先端施設, ②低エネルギー光領域の光源性能を究極的に極限化し, 未踏の光源を利用して選択と集中により学術を開拓する先端施設。前者は爆発的にコミュニティ拡大に繋がるようなロールモデルが第一段階として不可欠であり, 後者は光源加速器技術の開発とその利用法の斬新な提案が求められる。いずれにせよ, 現状の UVSOR-III は次施設建設までへの研究活動の持続性を担保することが責務で, 現有の先端光源性能および最適化光源性能を少なくとも今後 7 ~ 10 年程度維持することに

よる、先端的量子ビーム実験環境・設備の継続的な提供とその高度化・汎用化による計測分野開拓が最重要課題である。UVSOR の国際的なコア・コンピタンスをまとめる。

- 1) 国際的に希少な低エネルギー領域をカバーする世界最高水準の高輝度 VUV 光源とその学術利用
- 2) 易放射線損傷試料に最適化された放射光源と先端分析システムを提供する国際的に希少な実験施設
- 3) 国際的に唯一無二の可視光から真空紫外光への低エネルギー帯の波長可変分光システムの提供

8-1-2 現状と将来計画

将来計画の基本的な考え方は前記レポート 2018 もご参照いただきたい。次年度は具体的な次期施設の形態を具現化する作業を中心に、次期施設建設計画の検討を開始すべきと考える。

光源加速器については、従来の 15～20 年の設備更新サイクルを鑑みると、耐久性から数年以内に更新時期を迎える基本設備の更新はもちろんであるが、特に当初建設期 1983 年来、未更新の基本設備の更新が緊迫した課題である。設備トラブルによる不測の停止をさげ、国際的にも希少かつ競争力のある貴重な真空紫外放射光源を安定供給し続けることで、多彩な分野の学術発展に資する大学共同利用機関の使命を果たす責務がある。過去の履歴から判断可能な老朽設備の更新は所長裁量経費により、今後 10 年間を目安にその約 6 割について更新完了させる。当面の設備トラブルへの対処として緊急性の観点では、この更新作業でほぼ十分と判断する。付帯する空調設備、冷却設備や放射線管理設備は、UVSOR 施設棟の改修工事のタイミングも併せて検討する。また新規光源探索にかかる研究は、今や UVSOR の独創性「オンリーワン」の代名詞とも呼べるもので、多彩な学術利用あるいは産業利用の展開が期待できるため、今後も精力的に推進する。次年度には光源探索を強化すべく准教授 1 名の着任を予定している。

ビームライン実験設備については、10 年程度の国際的な先端研究の開発サイクルに後れを取らぬように、各ビームラインの利用状況と国際動向を踏まえ、順次設備の高度化が必要である。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、民間利用約 6% @ 先端アンジュレータライン）。また汎用設備であるベンディングラインにおいても、国際的に唯一無二の波長帯をカバーする光反射・吸収測定設備を提供しており、貴重な材料物性評価の成果が発信され続けている。ベンディングラインは設備の希少性と稼働率を鑑みて将来計画を立て、以下の先端ビームラインとのバランスを取りつつ運用を継続していく。

ここで、UVSOR-III の後継となる次期施設建設を算段するにあたっては、本施設のオンリーワン要素の強化が最重要課題である。設立当初に萌芽的に掲げられた「ケミカルマシン」の旗印を確固たるものとし、長年蓄積された計測ノウハウを元に、独創的に放射光の化学利用を推進する研究施設として「ケミカルマシン」の完成を目指したい。そのためには高度研究者支援パッケージングとして、分子科学研究所の全面的な協力が不可欠である。UVSOR-III 光源は THz、赤外、真空紫外線から軟 X 線領域をカバーするため、物性・機能研究に最適化されている。BL3U では、溶液の軟 X 線分光による電子状態測定を通じた化学反応の追跡が可能であり、新規ユーザーを巻き込みつつ精力的に行われている。クロアポ制度のポストを活用し、効果的な共同研究展開と人材育成を推進する。BL4U は軟 X 線分光の顕微イメージングが可能であり、産業界の要望が強く、多彩な利用展開を見せている。昨年度はリチウム端の X 線吸収イメージングに世界で初めて成功している。BL5U、BL6U、BL7U では光電子分光法を基軸とした先端装置開発と、多彩な新規物質群の（スピン）電子状態・電子構造研究が推進されている。光電子分光法を軸に物性研究に注力して

いる HiSOR 施設との機関間連携が重要である。UVSOR の中期計画として、光電子分光ビームラインの重点整備計画があり、2019年度より主任研究員を軸として次世代型の光電子運動量顕微鏡 (photoelectron momentum microscope) の開発を推進している。2020年2月にテスト測定を開始し、2021年度にはスピン検出機構の増設を予定している。パワーユーザーにより設備評価と最適化を実施し、2022年度にはビームライン整備を完了し、その後速やかに一般ユーザー利用開始を目指している。冒頭にも述べたが、ビームライン BLIU では光源加速器の研究者らにより、コンパクトな高性能 UVSOR-III 光源を用いて、アト秒コヒーレンス制御や短パルスガンマ線発生など、極めて独創的な研究が進められている。国際レベルで本施設でしか実施できない種類の研究であり、今後は開発された量子ビームの各種計測への応用展開が待たれる。UVSOR の施設としての特徴は、小型で小回りの効く運用体制にある。今後もスピード感のある光源開発研究や、先端装置の開発研究の展開を維持する。

本施設の利用者動向や将来建設計画に関連する外因として、2018年度に国内の第三世代放射光施設計画 (3 GeV リング東北計画) が具現化し、連鎖する如く国内における量子ビーム関連施設の将来計画が大きく動き始めた点がある。そんな中、日本放射光学会が中心となり、学術機関が運用する3つの放射光施設間 (UVSOR, PF, HiSOR) で連携ネットワークを強化していくことが同意された。日本学術会議にて「第24期学術の大型研究計画に関するマスタープラン」が承認され、本プログラム「放射光学術基盤ネットワーク」が「学術大型研究計画」の内定を得ている。要点は、これまでの我が国における放射光施設の稼働状況をふまえ、今後のコミュニティの活性化に資する計画である。学術系3施設は多様な共同利用・共同研究により、優れた研究成果の創出と人材育成・輩出を40年近くにわたり担うことで、世界一の放射光超大国を作り上げ、海外からの協力要請にも積極的に対応してきた。国内のその他の共用放射光施設は利用者に課金するが、学術系3施設は昨今の資金的に厳しい状況に置かれている大学研究者に対して高度な研究機会を有効に与えている。この学術系3施設の果たす学術基盤としての役割は今後も欠かせず、3施設の基盤強化とネットワーク化を進めながら、技術革新や人材育成・輩出の中核的役割を果たす必要がある。共有する諸課題を連携により解決し、国内各施設へ還元することで、放射光超大国として放射光科学の継続的発展に貢献し、新たな科学技術の創出につなげることが提案の趣旨である。連携活動の実態としては、各施設の研究会に相互参加し、各種情報 (ユーザー、装置開発、人材育成、国際連携状況など) を共有する段階にある。いずれの施設も各設備の老朽化による次期計画が緊迫した課題であることが見えている。一方で、施設間のユーザーの重複が少なく、これらのユーザーの共有によるコミュニティの活性化を模索する案が議論された。あるいは複数施設を利用し成果につなげることができる放射光パワーユーザーへの支援も検討され、複施設を相互に利用可能な新申請形態の議論が始まった。このような連携活動について、多くの放射光ユーザーが集うタイミングで合同研究会を開催するなどしてユーザーへ周知し、協力を求める方針である。その他に、技術職員の研修や研究者の相互乗り入れなど、人材育成の仕組みづくりが重要な課題である。分子科学研究所としては、回折限界光源を供給する施設として国際競争力のある本施設の国際的な位置付けを明確にしつつ、次期施設建設へ向けた戦略への支援が求められる。

本報告書は、UVSOR 施設運営委員会 (2018年7月、2019年2月、同7月)、UVSOR 将来検討ワーキング・小委員会 (2018年10月以降逐次)、UVSOR 利用者懇談会 (2018年11月、2019年11月)、国際諮問委員会 (2019年12月) における意見交換を元に改訂してきたものである (本りポート参照)。また継続して外国人運営顧問により意見聴取も行われている (分子研りポート 2016, 2017, 2018 参照)。

8-2 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。

2019年度は、センター内の組織改編が行われた。中村敏和（前電子物性研究部門准教授）と鈴木敏泰（前協奏分子システム研究センター准教授）の2名が、それぞれ分析チーム、合成チームのチームリーダーとして加わり、共同利用チーム（チームリーダーはセンター長）と合わせて3つのチームが構成された。専任技術職員は、昨年と比べて2名増員され（1名配置換、1名新規採用）7名となり、また、技術系特任専門員1名、技術支援員2名、事務支援員1名が配置されている。これに加えて、前述2事業において、特任研究員2名、技術系特任専門員1名、技術系派遣職員1名、事務系特任専門員3名、事務系派遣職員2名を配置している。また、2019年度末の高速原子間力顕微鏡の導入に向けて、機器センターとしては初の主任研究員1名が選考中である。

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じた利用となった。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。2019年度には、オペランド多目的粉末・薄膜X線回折装置が導入され、年度末には高速原子間力顕微鏡2機が導入予定である。さらに、もともと競争資金で購入された汎用的な機器の共有・共同利用機器化が始まり、高性能二重収束質量分析計（所内共通機器、魚住教授より）、ESI-TOF型質量分析装置（所内共通機器、藤田卓越教授より）、電界放出形透過電子顕微鏡（共同利用機器、魚住教授より）が登録されている。

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、2017～2019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の機器。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な関与が不可欠である。特に、新規ユーザーの開拓は、分子科学の新領域形成へと繋がると期待されるものであり、これまで分子研との繋がりがあまり深くはなかった研究者層・学協会との積極的な連携を模索することにも取り組む。先端的機器は不断の性能更新が宿命であるが、全ての面でトップたることは不可能であるので、意識して差別化を行い、分子研ならではの機器集合体を構成することに留意する。

これらを機能的に運営するため組織改編が行われ、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前准教授、合成チームのチームリーダーに鈴木敏泰前准教授が配置換えされた。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っている。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っている。

2019年度には、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ており、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、2020年度以降、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。

8-3 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、近年は年間 30 件程度を受け入れている。当初は施設利用が多かったが、2016 年度からは、開発要素の大きな依頼は「協力研究」として受入れることとした。また、2019 年度より新たな試みとして、民間の有償利用も受け入れることとしている。

装置開発室は大きく機械工作を担当するメカトロニクスセクションと電子回路工作を担当するエレクトロニクスセクションに分かれている。メカトロニクスセクションでは従来の機械加工技術の超精密化に向けた取り組みに加え、近年では、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、2019 年度には 5 軸加工機と電子ビームリソグラフィ装置の導入を行った。また、附属 3 棟の改修により、工作环境およびクリーンルームの整備を行うこともできた。今後も、装置開発室の将来計画・将来像の検討を進めながら、その方向性を強く意識しつつ、日常の実験研究を支えるための基盤的設備、先端技術習得のための先進設備、双方の更新・導入を進める。また、他機関との連携や、他機関共用設備の利用も積極的に検討する。

8-4 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。2019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。

2019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1077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4.24 PFlopsで総メモリ容量222 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98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 16, 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、2019年度は268研究グループにより、総数1,007名(2020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ェアを提供していることを示している。

計算科学研究センターは、国家基幹技術の一つとして位置づけられているポスト「京」開発事業(フラッグシップ2020プロジェクト)において、ポスト「京」を用いて重点的に取り組むべき社会的・科学的課題(重点課題)のうち、とくにナノサイエンスに関わるアプリケーション開発「重点課題(5) エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」において重要な役割の一端を担っている。また、同「重点課題(7) 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」、ポスト「京」萌芽的課題アプリケーション開発「萌芽的課題 基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」、科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業「計算物質科学人材育成コンソーシアム」、元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>とも連携を行っている。これら5つの大規模並列計算を志向したプロジェクトを支援し、各分野コミュニティにおける並列計算の高度化へさらなる取り組みを促すことを目的として東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所が共同で

「計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業 (SCCMS)」を運営しており、2019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「凝縮系の構造, 物性, ダイナミクス」と2つのウィンタースクール「第9回量子化学スクール」と「第13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。

2019年度 システム構成

高性能分子シミュレータシステム 4.24 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	2,352 コア (24 コア × 98 ノード) 3.0 GHz
総理論性能	226 TFlops (2,304 GFlops × 98 ノード) + 944 TFlops (NVIDIA Tesla P100 × 192, V100 × 20)
総メモリ容量	19 TB (192 GB × 98 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)

8-5 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。2019年9月にはバイオフィトニクス研究グループを新規に立ち上げた。

「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。

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。2019年は、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の活動に加えて、機構外の研究者がセンター内の複数のグループとともに異分野融合研究に取り組む ExCELLS 課題研究を実施し、そのうち1件はシーズ発掘から本格研究に発展した。

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。海洋研究開発機構と連携した深海・地下生命研究グループと極限環境生命分子研究グループが活動しており、これらに加えて、生命の極限環境適応に関する研究を推進する客員研究グループを新規に設置する準備を進めている。

異分野融合研究を推進するためのセミナーや研究会も活発に行っており、海外との研究者との学際的交流を企図したシンポジウムも開催している。2019年度は、アカデミアシニカ生物化学研究所（台湾）と学術交流協定を締結し、同研究所からの外国人研究職員の受け入れ準備を進めている。

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 川合真紀 (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	東大名譽教授 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			○		○					
榎 米一郎	豊橋技科大学長	○	○ ~ '84.3.31										
島村 修	相模中央研最高顧問 理事	○	○										
田島弥太郎	遺伝研所長	○											
馬場 宏明	北大応電研所長	○	○	○		○							
福井 謙一	京大工教授, 京都工織大学長, 基礎化学研究所長	○	○	○		○							
藤卷 正生	お茶女大家政教授, お茶女大学長	○	○	○									
向坊 隆	東大名譽教授	○											
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 '83.6.1～ '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	東工大理工学部学部長， 学位授与機構長		○	○	○	○	○						
中嶋 貞雄	東大物性研所長	○											
小田 稔	宇宙研所長	○	○	○	○								
斎藤 喜彦	慶應大理工教授		○	○	○								
森田 正俊	豊田中研代表取締役		○	○	○								
伊東 椒	東北大理教授， 徳島文理大薬教授			○	○	○							
鈴木 進	東北大金属材料研所長			○	○	○							
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	長岡技術大教授， 城西大理教授				○	○	○	○					
田丸 謙二	東京理科大学教授				○	○	○	○					
早川 幸男	名大大学長				○	○	○	○					
千原 秀昭	阪大理教授，(社)化学 情報協会専務理事				○	○	○	○					
米澤貞次郎	近畿大理工学総合研 教授，近畿大理工教授				○	○	○	○					
赤池 弘次	統計数理研究所長				○	○	○	○					
三ヶ月 章	日本学術振興会学術相 談役，東大名誉教授				○	○	○	○					
伊藤 昌壽	東レ(株)相談役最高顧問				○	○	○	○					
佐々木慎一	サイエンスクリエイト (株)常任顧問				○	○	○	○					
佐野 博敏	東京都立大学長				○	○	○	○					
櫻井 英樹	東北大理学部長， 東北大理教授				○	○	○	○					
松永 義夫	神奈川大理教授				○	○	○	○					
秋本 俊一	学士院会員				○	○	○	○					

氏名	所属	第1期 '83.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31	第9期 '97.6.1～ '99.5.31	第10期 '99.6.1～ '01.5.31	第11期 '01.6.1～ '03.5.31	第12期 '03.6.1～ '04.3.31
岩村秀	九大有機化学基礎研究センター教授							○	○				
加藤延夫	名大総長							○	○	○			
黒田晴雄	東京理科大総合研教授							○	○	○			
塩野宏	成蹊大法教授							○	○	○			
田中久	前京都薬科大学長							○	○	○			
堀幸夫	金沢工業大副学長							○	○	○			
森本英武	(株)豊田中央研顧問							○	○	○			
守谷亨	東京理科大理工教授							○	○	○			
大瀧仁志	立命館大理工教授							○	○	○			
清水良一	統数研所長							○	○	○			
田隅三生	埼玉大理教授, 理学部長							○	○	○			
土屋莊次	早稲田大理工学総合研 究センター客員教授							○	○	○			○
又賀昌	(財)レーザー技術総合 研第5研究部長							○	○	○			
丸山和博	京都工繊大学長							○	○	○			
大塚榮子	(独)産業技術総合研 フェロー							○	○	○			○
京極好正	(独)産業技術総合研生 物情報解析研究セン ター長							○	○	○			
後藤圭司	豊橋技科大学長							○	○	○			○
高橋理一	(株)豊田中央研代表取 締役所長							○	○	○			○
中西敦男	学術著作権協会 常務理事							○	○	○			○
細矢治夫	お茶水女子大理教授							○	○	○			○

氏名	所属	第1期 '83.6.1～ '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 保真	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 莊次 (台湾)国立交通大学講座教授 東京大学名誉教授	○	○	○				
益田 隆司 電気通信大学長	○						
江崎 信芳 京都大学化学研究所長		○					
野口 宏 中日新聞編集局文化部長		○	○ (~'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, Recharad Stephen 米国シカゴ大学名誉教授					○ (~'12.3.31)			
WALMSLEY, Ian A. 英国オックスフォード大学 副学長					○ ('12.4.1~)	○		
O'HALLORAN, Thomas V. 米国ノースウェスタン大学 教授						○		
NAAMAN, Ron イスラエルワイツマン科学研究所 教授							○	
ROSSKY, Peter J. 米国ライス大学自然科学研究部 部長・教授							○	
UMBACH, Eberhard ドイツミュンヘン国立科学アカデミー 理事, カールスルーエ工科大学教授								○
LIST, Benjamin ドイツマックス・プランク 石炭研究所所長								○

9-7 運営に関する委員会委員 (1975 ~ 1981)

氏名・所属(当時)	'75.7.15 ~ '77.3.31	'77.4.1 ~ '78.3.31	'78.4.1 ~ '79.3.31	'79.4.1 ~ '80.3.31	'80.4.1 ~ '81.3.31
浅原 照三 芝浦工大工教授	○	○			
伊藤 光男 東北大理教授	○				
井口 洋夫 分子研教授	○	○	○	○	○
大野 公男 北大理教授	○	○	○	○	○
角戸 正夫 阪大蛋白研所長	○	○	○		
神田 慶也 九大理教授	○	○ (理学部長)	○ (~'78.11.7)		
朽津 耕三 東大理教授	○			○	
田中 郁三 東工大理学部長	○			○ (教授)	
坪村 宏 阪大基礎工教授	○				
豊沢 豊 東大物性研教授	○	○			
長倉 三郎 東大物性研教授	○	○	○	○	
中島 威 東北大理教授	○	○	○		
細矢 治夫 お茶水大理助教授	○			○	○
又賀 昇 阪大基礎工教授	○			○	
村田 好正 学習院大理教授	○	○ (東大物性研 助教授)	○	○	
山寺 秀雄 名大理教授	○				
吉田 善一 京大工教授	○				
和田 昭充 東大理教授	○	○			
廣田 榮治 分子研教授		○ (委員長)	○ (委員長)	○ (委員長)	○ (委員長)
伊東 椒 東北大理教授		○	○		
大木 道則 東大理教授		○	○		
大瀧 仁志 東工大総合工研教授		○	○		
馬場 宏明 北大応用電研教授		○	○		
福井 謙一 京大工教授		○	○	○	
齋藤 喜彦 東大理教授		○		○	○
諸熊 奎治 分子研教授		○	○	○	
吉原經太郎 分子研教授		○			
霜田 光一 東大理教授			○	○	
武内 次夫 豊橋技科大教授			○	○	
山本 常信 京大理教授			○	○	
岩村 秀 分子研教授			○		
坂田 忠良 分子研助教授			○		
木下 実 東大物性研助教授				○	
黒田 晴雄 東大理教授				○	○
山下 雄也 名大工教授				○	○
高谷 秀正 分子研助教授				○	
花崎 一郎 分子研教授				○	○
安積 徹 東北大理助教授					○
志田 忠正 京大理助教授					○
鈴木 洋 上智大理工教授					○
伊達 宗行 阪大理教授					○
田仲 二郎 名大理教授					○
千原 秀昭 阪大理教授					○
土屋 莊次 東大教養助教授					○
永沢 満 名大工教授					○
務台 潔 東大教養助教授					○
藤田純之佑 名大理教授					○
塚田 捷 分子研助教授					○

9-8 運営協議員 (1981 ~ 2004)

◎ 会長 (議長) 人 - 人事選考部会に属する運営協議員
 (副) 副会長 (副議長) 共 - 共同研究専門委員会

氏名	所属	第1期 '81.5.1 ~ '83.4.30	第2期 '83.5.1 ~ '85.4.30	第3期 '85.5.1 ~ '87.4.30	第4期 '87.5.1 ~ '89.4.30	第5期 '89.5.1 ~ '91.4.30	第6期 '91.5.1 ~ '93.4.30	第7期 '93.5.1 ~ '95.4.30	第8期 '95.5.1 ~ '97.4.30	第9期 '97.5.1 ~ '99.4.30	第10期 '99.5.1 ~ '01.4.30	第11期 '01.5.1 ~ '03.4.30	第12期 '03.5.1 ~ '04.3.31
伊藤 憲昭	名大工教授	○共											
大野 公男	北大理教授	○人	○										
角戸 正夫	阪大蛋白研所長	○(副)											
朽津 耕三	東大理教授	○人	○人										
鈴木 洋	上智大理工教授	○											
千原 秀昭	阪大理教授	○人	○										
土屋 莊次	東大養学教授	○共 (共~'82.4.30)		○									
豊沢 豊	東大物性研教授	○人											
廣田 襄	京大理教授	○人 (人~'82.3.31)		○人	○(副)・人								
米澤貞次郎	京大工教授	○共 (共~'82.5.1~)											
井口 洋夫	分子研教授	◎人	◎人	◎									
岩村 秀	分子研教授	○人・共	○人	○人	○ ~'87.5.31								
木村 克美	分子研教授	○共	○共	○人・共	○人・共	○ (◎'90.1.29~)	○ (◎~'92.3.31)						
花崎 一郎	分子研教授	○	○	○	○	○共	○人・共	○人・共	○				
廣田 榮治	分子研教授	○人	○人	○人	○	○ (◎~'90.1.16)							
藤山 常毅	分子研教授	○ (82.4.30死亡)											
諸熊 奎治	分子研教授	○人・共 (共~'82.4.30)	○人	○人	○共	○人	○人 (◎~'92.2.14)						
吉原經太郎	分子研教授	○人・共	○人・共	○人・共	○人	○人							
田中 郁三	分子研教授(客員) (東大理教授)	○											
笹野 高之	分子研教授(客員) (阪大基礎工教授)	○	○人										

氏名	所属	第1期 '83.5.1~ '83.4.30	第2期 '83.5.1~ '85.4.30	第3期 '85.5.1~ '87.4.30	第4期 '87.5.1~ '89.4.30	第5期 '89.5.1~ '91.4.30	第6期 '91.5.1~ '93.4.30	第7期 '93.5.1~ '95.4.30	第8期 '95.5.1~ '97.4.30	第9期 '97.5.1~ '99.4.30	第10期 '99.5.1~ '01.4.30	第11期 '01.5.1~ '03.4.30	第12期 '03.5.1~ '04.3.31
山寺 秀雄	分子研教授(客員) (名大理教授)	○											
田仲 二郎	名大理教授	○	○人										
伊藤 光男	東北大理教授		○	○(副)人									
木村 雅男	北大理教授		○										
黒田 晴雄	東大理教授		○										
高柳 和夫	宇宙研教授		○	○									
中島 威	東北大理教授		○人										
中村 宏樹	分子研教授	○(共'82.5.1~)	○	○	○人	○人	○共	○人	○		◎共	○人	○人
丸山 有成	分子研教授(客員) (お茶女大理教授)		○	○	○	○人	○人	◎					
山本 明夫	分子研教授(客員) (東工大名誉教授)		○	○	○	○	○人						
茅 幸二	慶應大理工教授			○共	○共	○共							
菅野 暁	東大物性研教授			○	○								
坪村 宏	阪大基礎工教授			○人	○人								
細矢 治夫	お茶女子理教授			○人	○人								
又賀 昇	阪大基礎工教授			○共	○~'88.3.31								
松永 義夫	北大理教授			○人	○人	○人	○	○人	○人		○'00.4.1~	◎	◎
北川 禎三	分子研教授			○共	○人・共	○人・共	○	○人	○人		◎	◎	
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 '83.5.1~ '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	○人	○人	○'94.4.1~	○人	○人	○~'00.3.31		
岩田未廣	分子研教授					○人	○人						
志田忠正	京大理教授					○人	○人						
田隅三生	東大理教授					○人	○						
仁科雄一郎	東北大金属材料研教授					○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					
小川楨一郎	九大総合理工教授						○人	○人					
小尾欣一	東大理教授						○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						○	○共	○共	◎共	○共	○共	○共
川崎昌博	北大電子科学研教授						○~'92.4.1	○人	○人				
近藤保	東大理教授							○人	○(副)人				
斎藤軍治	京大理教授							○	○				
塚田捷	東大理教授							○共	○共				
山口兆	阪大理教授							○人	○人				
宇理須恆雄	分子研教授							○共 (94.5.1~)	○共	○共	○	○共	○共
中村晃	分子研教授							○					
小杉信博	分子研教授								○人	○人	○共	○人	○人
渡辺芳人	分子研教授								○共	○共	○人	○~'02.3.31	
大澤映二	豊橋技科大工教授								○	○共			
生越久清	福井高専校長								○	○			
小谷正博	学習院大理教授								○人	○人	○人	○共	○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	○人	○共	○共
岡田正	阪大院基礎工教授									○	○共	○人	○人
加藤重樹	京大院理教授									○人	○人	○共	○人

氏名	所属	第1期 '81.5.1~ '83.4.30	第2期 '83.5.1~ '85.4.30	第3期 '85.5.1~ '87.4.30	第4期 '87.5.1~ '89.4.30	第5期 '89.5.1~ '91.4.30	第6期 '91.5.1~ '93.4.30	第7期 '93.5.1~ '95.4.30	第8期 '95.5.1 ~ '97.4.30	第9期 '97.5.1~ '99.4.30	第10期 '99.5.1~ '01.4.30	第11期 '01.5.1~ '03.4.30	第12期 '03.5.1~ '04.3.31
小谷野猪之助 関一彦	姫路工業大理教授 名大物質科学国際研 究七教授									○共 ○人	○共 ○人		
田中武彦	九大院理教授									○人	○人		
篠野嘉彦	九大院総合理工教授									○(副)	○(副)		
小林速男	分子研教授									○人	○人	○共	○共
阿知波洋次	東京都立大院理教授									○	○	○人共 (人'02.4.1~)	○人
北原和夫	国際基督教大教養教授									○	○	○	○
江口宏夫	東大院理教授									○人	○人	○人	○人
松本和子	早稲田大理工教授									○人	○人	○人 (~'02.3.31)	○人
平田文男	分子研教授									○人	○人	○人	○人
藤井正明	分子研教授									○人	○人	○人	○人
阿久津秀雄	阪大蛋白研教授											○	○
宇田川康夫	東北大多元研教授											○(副)人	○(副)人
太田信廣	北大電子科学研教授											○人	○人
川合眞紀	理化学研主任研究員											○	○
榎茂好	九大有機化学基礎七 教授											○人	○人
菅原正	東大院総合文化教授											○共	○共
魚住泰広	分子研教授											○	○
西川恵子	千葉大院自然科学教授											○	○
岡本裕巳	分子研教授											○	○
加藤隆子	核融合科学研教授												○

9-9 運営会議委員 (2004～)

○ 議長
(副) 副議長

人-人事選考部会に属する委員
共-共同研究専門委員会に属する委員

氏名・所属(当時)	第1期 '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					
齊藤 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				
富宅喜代一 神戸大院理名誉教授			○(副)人	○(副)人				
山下 正廣 東北大院理教授			○人	○人				
渡辺 芳人 名大副総長, 教授			○	○				
山縣ゆり子 熊本大院薬教授				○	○			
上村 大輔 神奈川大理教授				○	○			
山内 薫 東大院理教授				○	○			
森 健彦 東工大大院理工教授				○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 名工大大院工教授				○	○(副)人	○(副)人		
河野 裕彦 東北大院理教授				○	○共	○		
寺寄 亨 九大院理教授				○人	○人	○人		
水谷 泰久 阪大院理教授				○人	○人	○人		
大西 洋 神戸大院理教授						○共	○共	
鈴木 啓介 東工大大院理工教授						○	○	
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）

法第4条第1項第1号に掲げる教育研究組織に該当する組織	該当する職	分子研規則による種別	任期	任期更新に関する事項	
				可否	任期
分子科学研究所に置かれる研究領域及び研究施設	助教	5年に満たない任期を残す者	分子研規則による残任期間	可	任期を定めずに採用
		5年を越える任期を残す者	5年		

9-11 自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

平成16年4月1日

分研規則第4号

自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

(目的)

第1条 この規則は、自然科学研究機構分子科学研究所（以下「研究所」という。）の設置目的及び社会的使命を達成するため、研究活動等の状況について自己点検・評価、及び外部の者による評価（以下「外部評価」という。）を行い、もって研究所の活性化を図ることを目的とする。

(点検評価委員会)

第2条 研究所に、前条の目的を達成するため分子科学研究所点検評価委員会（以下「委員会」という。）を置く。

2 委員会は、次に掲げる者をもって組織する。

- 一 研究所長
- 二 研究総主幹
- 三 研究主幹
- 四 研究施設の長
- 五 本部研究連携室の研究所所属の研究教育職員
- 六 技術課長
- 七 その他研究所長が必要と認めた者

3 前項第7号の委員の任期は、2年とし、再任を妨げない。

(委員長)

第3条 委員会に委員長を置き、研究所長をもって充てる。

2 委員長に事故があるときは、研究総主幹がその職務を代行する。

(招集)

第4条 委員会は、委員長が招集し、その議長となる。

(点検評価委員会の任務)

第5条 委員会は、次に掲げる事項について企画、検討及び実施する。

- 一 自己点検・評価及び外部評価の基本方針に関すること。
- 二 自己点検・評価及び外部評価の実施に関すること。
- 三 自己点検・評価報告書及び外部評価報告書の作成及び公表に関すること。
- 四 独立行政法人大学評価・学位授与機構が行う評価に係る諸事業への対応に関すること。
- 五 その他自己点検・評価及び外部評価に関すること。

(点検評価事項)

第6条 委員会は、次の各号に掲げる事項について点検評価を行うものとする。

- 一 研究所の在り方、目標及び将来計画に関すること。
- 二 研究目標及び研究活動に関すること。
- 三 大学等との共同研究体制及びその活動に関すること。
- 四 大学院教育協力及び研究者の養成に関すること。
- 五 研究教育職員組織に関すること。
- 六 研究支援及び事務処理に関すること。
- 七 国立大学法人総合研究大学院大学との関係及び協力に関すること。
- 八 施設設備等研究環境及び安全に関すること。
- 九 国際共同研究に関すること。
- 十 社会との連携に関すること。
- 十一 学術団体との連携に関すること。
- 十二 管理運営に関すること。
- 十三 学術情報体制に関すること。
- 十四 研究成果等の公開に関すること。
- 十五 財政に関すること。
- 十六 点検評価体制に関すること。
- 十七 その他委員会が必要と認める事項

2 前項各号に掲げる事項に係る具体的な点検評価項目は、委員会が別に定める。

(専門委員会)

第7条 委員会に、専門的事項について調査審議するため、専門委員会を置くことができる。

2 専門委員会に関し必要な事項は、委員会が別に定める。

(点検評価の実施)

第8条 自己点検・評価又は外部評価は、毎年度実施する。

(点検評価結果の公表)

第9条 研究所長は、委員会が取りまとめた点検評価の結果を、原則として公表する。ただし、個人情報に係る事項、その他委員会において公表することが適当でないと認めた事項については、この限りではない。

(点検評価結果への対応)

第10条 研究所長は、委員会が行った点検評価の結果に基づき、改善が必要と認められるものについては、その改善に努めるものとする。

(庶務)

第11条 委員会の庶務は、岡崎統合事務センター総務部総務課において処理する。

(雑則)

第12条 この規則に定めるもののほか、委員会の運営に関し必要な事項は、委員会の議を経て研究所長が定める。

附則

- 1 この規則は、平成16年4月1日から施行する。
- 2 この規則施行後、第2条第2項第7号により選出された最初の委員の任期は、同条第3項の規定にかかわらず、平成18年3月31日までとする。

9-12 自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則

平成16年4月1日

分研規則第5号

自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則

(設置)

第1条 自然科学研究機構分子科学研究所（以下「研究所」という。）に、研究所の将来計画について検討するため、将来計画委員会（以下「委員会」という。）を置く。

(組織)

第2条 委員会は、次の各号に掲げる委員をもって組織する。

- 一 研究所長
- 二 研究総主幹
- 三 研究所の教授数名
- 四 研究所の准教授数名
- 五 その他分子科学研究所長（以下「研究所長」という。）が必要と認めた者

2 前項第3号、第4号及び第5号の委員の任期は、1年とし、再任を妨げない。ただし、補欠の委員の任期は、前任者の残任期間とする。

3 前項の委員は、研究所長が委嘱する。

(委員長)

第3条 委員会は、研究所長が招集し、その委員長となる。

(専門委員会)

第4条 委員会に、専門的な事項等を調査検討させるため、専門委員会を置くことができる。

(委員以外の者の出席)

第5条 委員長は、必要に応じて、委員以外の者を委員会に出席させ、意見を聴取することができる。

(庶務)

第6条 委員会の庶務は、岡崎統合事務センター総務部総務課において処理する。

附則

1 この規則は、平成16年4月1日から施行する。

2 この規則施行の後最初の任命に係る委員の任期は、第2条第2項の規定にかかわらず、平成17年3月31日までとする。

附則

この規則は、平成19年4月1日から施行する。

9-13 大学共同利用機関法人自然科学研究機構中期目標(第三期,平成28～34年度)

(前文) 研究機構の基本的な目標

大学共同利用機関法人自然科学研究機構(以下「本機構」という。)は、宇宙、エネルギー、物質、生命等に関わる自然科学分野の拠点的研究機関を設置・運営することにより国際的・先導的な研究を進めるとともに、本機構が設置する各大学共同利用機関(以下「各機関」という。)の特色を活かしながら、更に各々の分野を超え、広範な自然の構造と機能の解明に取り組み、自然科学の新たな展開を目指して新しい学問分野の創出とその発展を図るとともに、若手研究者の育成に努める。また、大学共同利用機関としての特性を活かし、大学等との連携の下、我が国の大学の自然科学分野を中心とした研究力強化を図る。これらのミッションを踏まえ、特に第3期中期目標期間においては、機構長のリーダーシップの下、以下の組織改革及び研究システム改革を通じて、機能強化を強力に推進する。

組織改革については、機関の枠を超え、異分野連携による新分野の創成を恒常的に行う新分野創成センターの組織再編、既存機関とは独立した国際的研究拠点の創設、研究基盤戦略会議における機能強化の方針及び資源再配分等の組織改革の方針に基づく教育研究組織の再編等を行う。

研究システム改革については、本機構の行う公募型の共同利用・共同研究の申請から審査・採択、成果報告・分析までを統合的に管理するシステム(自然科学共同利用・共同研究統括システム)を整備して、それらの成果の分析評価を行うとともに、本機構と各大学との緊密な連携体制の下で、大学の各分野の機能強化に貢献する新たな仕組み(自然科学大学間連携推進機構)を構築する。また、柔軟な雇用制度(多様な年俸制、混合給与)の導入等の人事・給与システム改革を通じて若手研究者の育成、女性研究者の支援、外国人研究者の招へいに取り組む。

これら2つの改革を着実に推進するため、本機構のIR(Institutional Research)機能を整備するとともに、これら第3期中期目標期間における特色ある改革の問題点や課題を、内部的に自己点検を実施し、それを受けて改革の効果について外部評価を受ける。また、研究活動における不正行為及び研究費の不正使用等のコンプライアンスの諸課題についても機構全体で包括的かつ横断的に取り組む。

◆ 中期目標の期間及び教育研究組織

1 中期目標の期間

平成28年4月1日から平成34年3月31日までの6年間とする。

2 大学共同利用機関

本機構に、以下の大学共同利用機関を置く。

国立天文台
核融合科学研究所
基礎生物学研究所
生理学研究所
分子科学研究所

I 研究機構の教育研究等の質の向上に関する目標

1 研究に関する目標

(1) 研究水準及び研究の成果等に関する目標

本機構は、天文学、核融合科学、物質科学、生命科学等の自然科学分野の学術研究を積極的に推進するとともに、各分野間の連携を図り、優れた研究成果を上げる。

天文学分野では、太陽系からビッグバン宇宙までを研究対象として、国内外の大型研究基盤施設及び設備の建設・運用を行い、これらを大学等の研究者の共同利用に供することにより、我が国の観測天文学、シミュレーション研究、理論天文学を牽引し、人類が未だ認識していない宇宙の未知の領域を開拓する。

国内の研究拠点のほか、アメリカ合衆国に設置したハワイ観測所、チリ共和国に設置したチリ観測所においても業務運営を円滑に実施する。また、日米中印加による国際共同科学事業である30m光学赤外線望遠鏡(TMT)計画のメンバー機関として、アメリカ合衆国ハワイ州において建設を推進する。

核融合科学分野では、我が国における核融合科学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、生物現象の基本原則に関する統合的理解を深め、国内生物学コミュニティを先導し、基礎生物学分野の発展に寄与する。

生理学分野では、分子から細胞、組織、システム、個体にわたる各レベルにおいて先導的な研究をするとともに、各レベルを有機的に統合し、ヒトの機能とその仕組み、更にその病態の解明に寄与する。

分子科学分野では、物質・材料の基本となる分子及び分子集合体の構造、機能、反応に関して、原子・分子及び電子のレベルにおいて究明することにより、化学現象の一般的法則を構築し、新たな現象や機能を予測、実現する。

(2) 研究実施体制等に関する目標

国際的かつ先端的な学術研究を持続的に推進するため、十分な研究体制を確保する。

2 共同利用・共同研究に関する目標

(1) 共同利用・共同研究の内容・水準に関する目標

本機構は、各専門分野を先導する国際的学術拠点として、国内外の研究者との共同利用・共同研究を抜本的に強化し、優れた研究成果を上げる。

(2) 共同利用・共同研究の実施体制等に関する目標

共同利用・共同研究機能の強化のため、研究者コミュニティ及び各大学等の要請に対応し得る柔軟な体制を構築する。

3 教育に関する目標

(1) 大学院等への教育協力に関する目標

自然科学分野において国際的に通用する高度な研究的資質を持ち、広い視野を備えた研究者を育成するため、総合研究大学院大学(以下「総研大」という。)との一体的関係及びその他の大学との多様な連携によって、本機構の高度の人材・研究環境を活かして、特色ある大学院教育を実施する。

(2) 人材育成に関する目標

自然科学分野において優れた研究成果を生み出せる大学院生を含む若手研究者の養成を行う。特に、総研大との一体的関係及びその他の大学との多様な連携による大学院教育によって、新しい学術的分野の問題を発掘及び解決できる人材の育成を行い、社会の要請に応える。

- 4 社会との連携及び社会貢献に関する目標
国民の科学に対する関心を高めるとともに、最先端の研究成果を社会に還元する。
- 5 その他の目標
 - (1) グローバル化に関する目標
我が国の代表的な自然科学分野の国際的頭脳循環のハブとして、人材交流を含む国際間の多様な研究交流を推進する。
 - (2) 大学共同利用機関法人間の連携に関する目標
4 大学共同利用機関法人は、互いの適切な連携により、より高度な法人運営を推進する。
- II 業務運営の改善及び効率化に関する目標
 - 1 組織運営の改善に関する目標
機構長のリーダーシップの下で、機構本部及び各機関間の連携により、機構として戦略的かつ一体的な運営を推進する。
 - 2 教育研究組織の見直しに関する目標
新たな学問分野の創出、共同利用・共同研究機能の向上の観点から、各機関等の研究組織を見直し、必要な体制整備、組織再編等を行う。
 - 3 事務等の効率化・合理化に関する目標
機構における事務組織について、事務局機能の強化を図るとともに、事務局と各機関間の一層の連携強化により、効率的な体制を構築する。
- III 財務内容の改善に関する目標
 - 1 外部研究資金、寄附金その他の自己収入の増加に関する目標
外部研究資金その他の自己収入の効果的な確保と増加を図るための基盤を強化する。
 - 2 経費の抑制に関する目標
適切な財政基盤の確立の観点から、業務・管理運営等の見直しを行い、効率的かつ効果的な予算執行を行う。
 - 3 資産の運用管理の改善に関する目標
資産の効率的かつ効果的な運用管理を行う。
- IV 自己点検・評価及び当該状況に係る情報の提供に関する目標
 - 1 評価の充実に関する目標
国際的に優れた研究成果を上げるため、研究体制、共同利用・共同研究体制や業務運営体制について、様々な機構外の者の意見を反映させ、適宜、見直し、改善・強化するために自己点検、外部評価等を充実する。
 - 2 情報公開や情報発信等の推進に関する目標
本機構の実情や果たしている機能、運営内容や研究活動について、広く国内外に分かりやすい形で示すように適切かつ積極的に情報公開や情報発信を行う。
- V その他業務運営に関する重要目標
 - 1 施設設備の整備・活用等に関する目標
本機構の施設設備に係る基本方針及び長期的な構想に基づき、キャンパスマスタープランの充実を図り、既存施設の有効活用や計画的な維持管理を含めた効率的かつ効果的な施設マネジメントを行う。
 - 2 安全管理に関する目標
事故及び災害を未然に防止するため、広く安全管理・危機管理体制の強化を図り、役職員の意識向上を通じた安全文化の醸成に取り組む。また、職員の健康を増進することにより、快適な職場環境創りに積極的に取り組むとともに、情報セキュリティポリシーに基づき、適切な情報セキュリティ対策を行う。
 - 3 法令遵守等に関する目標
研究不正の防止、研究費不正の防止に係る管理責任体制の整備を図るとともに、研究者倫理に関する研修等の充実により、法令遵守を徹底する。

9-14 大学共同利用機関法人自然科学研究機構中期計画(第三期,平成28～34年度) (VI以降を省略)

I 研究機構の教育研究等の質の向上に関する目標を達成するためにとるべき措置

1 研究に関する目標を達成するための措置

(1) 研究水準及び研究の成果等に関する目標を達成するための措置

- ① 大学共同利用機関法人自然科学研究機構(以下「本機構」という。)は、天文学、核融合科学、分子科学、基礎生物学、生理学の各分野(以下「各分野」という。)における拠点的研究機関(以下「機関」という。)の役割と機能を更に充実させ、国際的に高い水準の研究成果を上げる。【1】
- ② アストロバイオロジーセンターにおいて、第一線の外国人研究者の招へい、若手研究者の海外派遣に取り組むとともに、大学等と連携して国際的かつ先端的な共同利用・共同研究を推進し、当該分野の国際的研究拠点を形成する。【2】
- ③ 機関の枠を超え、異分野連携による新分野の創成を恒常的に担う新分野創成センターにおいて、新分野の萌芽促進及び分野間連携研究プロジェクト等を通じた次世代の学問分野の育成を行う。また、既存のブレインサイエンス研究分野及びイメージングサイエンス研究分野を融合発展させた次世代生命科学センター(仮称)を平成30年度に創設する。併せて、機構の5機関による機関間連携ネットワークによる共同利用・共同研究事業を推進し、新分野の萌芽を見出だす基盤を整備するとともに、新たな研究者コミュニティの形成を促す。【3】

各分野の特記事項を以下に示す。

(国立天文台)

- ① すばる望遠鏡及び超広視野主焦点カメラ(HSC)を用いて、従来の約10倍の天域にわたって遠方宇宙を探索することにより、天体の形成過程や宇宙の大規模構造の起源についての研究を推進する。また、太陽系及び太陽系外の惑星形成領域を観測するための装置(分光器、撮像器等)を開発し、惑星の形成過程や、太陽系外惑星の性質についての研究を推進する。第3期中期目標期間終了時まで、次世代観測装置として超広視野主焦点分光器を東京大学等と共同で開発し、初期宇宙、銀河の進化、暗黒物質、暗黒エネルギー等の研究を推進する。【4】
- ② アジア、北米、欧州の国際共同科学事業であるアタカマ大型ミリ波サブミリ波干渉計(アルマ望遠鏡)を用いて、太陽系外の惑星形成や銀河形成の解明に取り組むとともに、生命の起源に関する様々な物質の探索を行う。アルマ望遠鏡の運用継続のため国際分担責任を果たすと同時に、第3期中期目標期間終了時まで、次世代のバンド1受信機66台の組立てを完了する。【5】
- ③ 日米中印加の国際共同事業である30m光学赤外線望遠鏡(TMT)の建設を推進し、日本の役割として望遠鏡本体構造の製作、主鏡分割鏡の製造及び一部研磨加工、第一期観測装置の製作を行う。【6】
- ④ 大型望遠鏡、次世代観測装置、超高速計算機等の開発研究、整備及び運用を行い、科学技術の発展向上に寄与する。このため全国の大学等と先端的開発研究を進める。【7】
- ⑤ 地上からの天文学(地上に設置した望遠鏡やスーパーコンピュータを用いた研究)の推進を軸として、将来の観測装置開発のための基礎的技術研究を推進し、新たな科学技術の基盤の創成に寄与する。【8】
- ⑥ 東アジア地域の大学・天文学研究機関との連携を強化するため、東アジア天文台の運用(望遠鏡の共同運用)や若手研究者の育成(研究員の受入れ等)を共同で行う。【9】

(核融合科学研究所)

- ① ヘリカル方式の物理及び工学の体系化と環状プラズマの総合的理解に向けて、大型ヘリカル装置(LHD)の更なる性能向上を目指し、プラズマ制御、加熱及び計測機器、並びに安全管理設備の整備を進めて、重水素実験を実施する。これにより、第3期中期目標期間終了時まで、イオン温度1億2,000万度を達成し、核融合炉に外挿可能な超高性能プラズマを実現する。また、重水素放電におけるイオンの内部輸送障壁形成や粒子リサイクリング特性等に関する水素同位体効果を、共同研究を基盤とする学術研究により検証する。【10】
- ② プラズマシミュレータ(スーパーコンピュータシステム)を有効活用して、数値実験炉の構築に向けたコアプラズマから周辺プラズマ・プラズマ対向壁までを含むシミュレーションコードの整備・拡張・高精度化及び統合化のための研究を進めるとともに、平成31年度中において、プラズマシミュレータの性能を現行機種と比べて4倍以上に向上させ、それに対応した各種3次元コードの最適化を行う。また、平成31年度までに、コアプラズマにおける乱流輸送のモデル化と統合輸送コードへの組み込み、第3期中期目標期間終了時まで、各種輸送コードに複数イオン種効果を取り込む。さらに、第3期中期目標期間終了時まで、タンクステンを中心とするプラズマ対向材の物性値評価に必要であるプログラミングの改善や新たなモデルの構築により分子動力学的シミュレーション技法を開発する。並行して、上記目標を達成するための支援研究として、LHDプラズマを始めとする磁場閉じ込めプラズマの3次元平衡、輸送、不安定性、非線形発展についての実験結果との照合によりコードの完成度を高めるとともに、関連する基礎物理等に関するシミュレーション研究を行う。【11】
- ③ 核融合炉の早期実現を目指し、平成28年度でヘリカル炉の概念設計をまとめ、各開発課題の数値目標を具体化する。炉設計の精密化の推進、それと連動した基幹機器の高性能化と高信頼性、規格基準の確立に向けた開発研究を推進することにより、第3期中期目標期間終了時まで、大型高磁場超伝導マグネットと先進ブランケットシステムの実規模試作の工学設計をまとめるとともに、ヘリカル炉に向けた学術研究ロードマップを報告書にまとめる。並行して、第2期で立ち上げた大型設備である「熱・物質流動ループ」や「大口径強磁場導体試験装置」等の拡充と拠点化による国内外との共同研究の機能強化、及び規格・基準構築に向けての知見の集積化による核融合工学の体系化と学際研究への寄与を図るとともに、関連技術の産業界への展開・促進を図る。【12】

(基礎生物学研究所)

- ① 多様な生物現象の基本原理解明するために、最先端解析技術を用いて、細胞の構造・機能、発生・分化、神経系の働きや行動の制御、共生、進化、外部環境に対する応答等の機構を研究する。遺伝子やタンパク質解析技術や多様な先端顕微鏡によるバイオイメージング技術の高度化を進め、分子から個体レベルで統合的に解明することによって、世界を先導する独創的な生物学研究を推進する。【13】
- ② 社会性や共生といった高次元生物現象を研究するために適した数種の新規生物種の繁殖及び遺伝子改変技術を確認し、生物資源を充実させる。【14】
- ③ バイオイメージング関連施設の国内ネットワークの構築、欧米を含む国際ネットワークへの参加を第3期中期目標期間終了時まで実現する。【15】

(生理学研究所)

- ① 生体の働きを担う機能分子の構造と動作・制御メカニズム及び細胞機能への統合、代謝調節・循環調節等の動的適応性の遺伝子・分子・細胞的基盤、循環や脳神経情報処理機構の構造的及び分子・細胞的基盤等の解明を目的とする研究を行うとともに、これらの病態への関わりを研究する。【16】

- ② 認知・行動・感覚などの高次脳機能の脳内メカニズム、心理現象のメカニズムや社会的行動等の神経科学的基盤の解明に迫る。そのための革新的脳情報抽出手法及び神経活動やネットワーク機能の操作手法の導入・改良を行う。【17】
- ③ 脳-人体の働きとそのしくみについて、分子から個体を統合する空間的・時間的関連、及び多臓器連関の統合的理解のため、7テスラ超高磁場MRIによるイメージング等の生体情報計測技術の高度化を行う。また、新規パラメータの取得法や、大規模データ解析法の開発を行う。【18】

(分子科学研究所)

- ① 量子力学、統計力学、分子シミュレーション等の理論的・計算化学的方法により、小分子系から生体分子、ナノ物質などの高次複雑分子系に至る様々な分子システムの構造・性質とその起源を解明するとともに、新たな機能開拓に向けた研究を行う。【19】
- ② 光分子科学の新たな展開を可能とする様々な波長域や高強度の光・電磁波を得るための高度な光源の開発及び先端的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、新規な電氣的・磁氣的・光学的特性や高効率な物質変換・エネルギー変換を目的とした新たな分子物質や化学反応系の設計・開発を行う。【21】

(2) 研究実施体制等に関する目標を達成するための措置

- ① 学術研究推進の基本である各研究者の自由な発想による挑戦的な研究活動を促進するため、新たな方向性を探る研究や学際的研究を推進する研究グループの形成支援、若手研究者の支援、競争的資金の獲得支援、国際的環境の整備等を強化する。【22】
- ② 該当する各機関が行う大型プロジェクトに関しては、プロジェクトを適切に推進するための体制構築及びその不断の点検を実施するとともに、リーダーやプロジェクトマネージャーなど推進体制を見直す。また、プロジェクトの達成目標に関し、研究者コミュニティの意見を踏まえ、各機関の運営会議等において迅速且つ適切な意思決定を行う。また、プロジェクトの推進に当たっては、立地する地元自治体や地元住民の理解を得て進めることが必要不可欠であることから、市民との懇談会や地元自治体との密な協議を通じ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は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は共同利用・共同研究の成果内容・水準を把握するとともに、大学の機能強化への貢献度を明らかにする。【25】
- ② 自然科学大学間連携推進機構 (NINS Interuniversity Cooperative Association : NICA) (仮称) を構築し、各機関における個別の大学間連携を集約し、より広くかつ柔軟に大学の研究力強化を推進する。【26】
- ③ 頭脳循環拠点の機能を強化し、優秀な若手研究者の育成と活発な人材交流を通して新たな分野を大学で展開させるなど、大学の機能強化に貢献する。【27】

各分野の特記事項を以下に示す。

(国立天文台)

天文学分野において、研究者コミュニティの意見をとりまとめ、その総意に基づいて、大型研究基盤施設及び設備の建設・開発・運用を行うとともに、国内観測拠点の整理・統合を進める。アルマ望遠鏡の使用に関する東アジア地域の窓口機関として、日本を含む東アジア地域の研究者に対し、観測提案の準備、観測データ解析、論文化等の支援を行う。自然科学大学間連携推進機構 (仮称) の一環として、光学赤外線分野及び電波 VLBI 分野等における大学間連携を促進し、全国の大学等及び海外の研究機関等が保有する観測装置を連携させた共同利用・共同研究システムを構築するなど、大学等における天文学・宇宙物理学の発展に貢献する。さらに、共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため、すばる望遠鏡の共同利用率を90%に、天文シミュレーションシステムの共同利用率を100%に維持する。【28】

(核融合科学研究所)

LHDによる重水素プラズマ実験、プラズマシミュレータによる大規模シミュレーション及び大型試験設備を活用した炉工学研究を高度な共同利用・共同研究として国内外に展開する。国内においては、その質を上げること、国外については、その機会を増やすことを目標とする。自然科学大学間連携推進機構 (仮称) の一環としての双方向型共同研究を始めとする大学間ネットワークを整備・活用した共同研究を先導することにより、大学からの研究成果創出に資する。2国間・多国間協定に基づく連携事業については限られた予算の中で研究計画を重点化し、より高い成果を目指す。国際熱核融合実験炉 (ITER) 等の国際事業に対しても、卓越した研究拠点として連携協定の下、大学とともに核融合科学研究所が知見を持つ分野で更なる連携協力を図る。また、共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため、大型ヘリカル装置及びプラズマシミュレータの共同利用率を100%に維持する。【29】

(基礎生物学研究所)

生物機能解析センターの機能を更に高度化し、遺伝子発現や代謝産物の定量的解析、分子や細胞、組織、個体レベルでの時空間動態観察など、統合的な解析を可能にするために、次世代シーケンサーや先端顕微鏡などの設備の高度化、技術支援員などの充実を図る。また、共同利用・共同研究の一部を国際的にも開かれたものとし、第3期中期目標期間中に20件程度の国際共同利用・共同研究を実施する。自然科学大学間連携推進機構 (仮称) の一環として、大学サテライト7拠点との連携により、生物遺伝資源のバックアップ保管数を毎年度対前年度比で約10%程度増加させる。また新規生物遺伝資源保存技術開発共同利用研究を年間10件程度採択するとともに、凍結保存カンファレンスを定期開催 (第3期中期目標期間中に6回) し、生物学・材料科学・有機合成化学の異分野間連携を推進する。さらに得られた成果を中心に保存技術講習会を大学サテライト拠点と共同で開催する。大学間連携による昆虫、海生生物など新規モデル生物開発拠点を形成し、特徴ある生物機能をもつ生物をモデル化することにより、新たな生物機能の解明を目指す研究を推進する。さらに、共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため、大型スペクトログラフの共同利用率を90%に維持する。また、先端バイオイメージング支援プラットフォーム (光学顕微鏡技術支援、画像解析技術支援等) の形成などを通じて、生命科学を包括した支援体制を構築し、我が国の当該分野の高度化及び国際ネットワーク形成を推進する。【30】

(生理学研究所)

分子から細胞、組織、システム、個体にわたる機能生命科学(生理学)及び脳科学分野の共同利用・共同研究拠点としての機能を強化する。年間、共同研究件数100件、生理研研究会20件を維持する。自然科学大学間連携推進機構(仮称)の一環としての7テスラ超高磁場MRI装置等を用いた脳・人体機能イメージングネットワークを構築し、全国の大学等研究機関との共同研究体制を確立する。先端光学・電子顕微鏡を用いた共同研究は、新規の共同研究者を開拓する。研究者へのニホンザルの提供については、安全でユーザーのニーズに沿った付加価値の高い個体の提供を目指し、他機関と協力し、品質信頼性の更なる向上に取り組むとともに、長期的供給体制の整備を継続する。遺伝子改変に用いるウィルスベクターの作成と提供についても更に推進する。また、共同利用研究の国際公募を実施し、国際共同研究を推進する。さらに、共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため、7テスラ超高磁場MRI装置の共同利用率を60%に維持する。また、先端バイオイメージング支援プラットフォーム(電子顕微鏡技術支援、機能的磁気共鳴画像技術支援等)の形成などを通じて、生命科学を包括した支援体制を構築し、我が国の当該分野の高度化を推進する。【31】

(分子科学研究所)

先端的な放射光源やレーザーを用いた光科学実験装置、分子計算に最適化された大型計算機、種々の先端的分子計測装置を整備・強化し、それらを用いた分子システムの構造・機能・物性等の研究に対する高度な共同利用・共同研究を国際的に推進する。総合的及び融合的な新分野として、協奏分子システム研究センターにおいて新たな機能を持つ分子システムを創成するとともに、その機能解析のための新たな分子科学計測手法を開拓する共同研究拠点を形成する。また、共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため、極端紫外光研究施設(UVSOR)の共同利用率を85%に、分子シミュレータの共同利用率を100%に維持する。【32】

(分野連携型センター)

機構における新たな学問分野の創出を目指し、新分野の探査・萌芽促進・育成を担う新分野創成センター並びに国際的共同研究拠点を狙う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。)との連携協力に関する協定に基づき、また、機構長の経営協議会への参加、教育担当理事のアドバイザーボードへの参加等を通じて緊密に連携し、大学共同利用機関としての最先端の研究設備、各分野の基礎研究を支える基盤設備等の研究環境を活かし、世界の一線で活躍できる若手研究者を育成すると同時に、学術の広範な知識を備え将来様々な分野で活躍するための総合的な能力及び高い研究倫理を大学院生に涵養する。そのため、下記の基盤機関において、それぞれ特色ある大学院教育を実施する。
 - ◆国立天文台(天文科学専攻)
 - ◆核融合科学研究所(核融合科学専攻)
 - ◆基礎生物学研究所(基礎生物学専攻)
 - ◆生理学研究所(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携・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 社会人及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な研究者の能力を活用するため、外国人研究者の招へいを6年間で約20%増加させる。【47】
- ⑤ 機構の研究活動の国際的評価や国際共同事業等の推進のため、ネット会議等の利用を含めた国際的な会議・打合せの回数を6年間で約20%増加させる。【48】
- ⑥ 本機構のグローバル化を推進するための基盤を整備するため、来訪外国人の要望にきめ細かく対応した外国人研究者の宿泊施設の確保やサポートスタッフの拡充などを行う。【49】

(2) 大学共同利用機関法人間の連携に関する目標を達成するための措置

4 大学共同利用機関法人間の連携を強化するため、大学共同利用機関法人機構長会議の下で、計画・評価、異分野融合・新分野創成、事務連携などに関する検討を進める。特に、4機構連携による研究セミナー等の開催を通じて異分野融合を促進し、異分野融合・新分野創成委員会において、その成果を検証して次世代の新分野について構想する。また、大学共同利用機関法人による共同利用・共同研究の意義や得られた成果を4機構が連携して広く国民や社会に発信する。【50】

II 業務運営の改善及び効率化に関する目標を達成するためにとるべき措置

1 組織運営の改善に関する目標を達成するための措置

- ① 社会のニーズを的確に反映し、幅広い視点での自立的な運営改善に資するため、経営協議会及び教育研究評議会からの指摘事項等への対応を1年以内に行うとともに、フォローアップを毎年度実施する。【51】
- ② 専門分野ごと又は境界領域・学際領域ごとに、外部評価における提言や外部の学識経験者からの指導・助言に基づき、指摘から1年以内に、研究活動計画、共同利用・共同研究等における重要事項の改善を行う。【52】
- ③ 機構長のリーダーシップの下で機構の強みや特色を生かし、教育、研究、社会貢献の機能を最大化できるよう、権限と責任が一致した意思決定システムの確立や、法人運営組織の役割分担を明確化するとともに、新たに対応が求められる事案については、担当理事を明確化する。また機構長を補佐する体制の強化を図る。【53】
- ④ 監事機能の強化を図るとともに、サポート体制を強化するため、監事が機構長選考方法や法人内部の意思決定システムをはじめとした法人のガバナンス体制等についても監査するとともに、内部監査組織と連携する。【54】
- ⑤ 優秀な若手・外国人の増員や研究者の流動性向上などにより教育研究の活性化を図るため、クロスアポイントメントを含む混合給与及び研究教育職員における年俸制の活用による人事・給与システムの弾力化に取り組む。特に、年俸制については、業績評価体制を明確化し、退職手当に係る運営費交付金の積算対象となる研究教育職員について年俸制導入等に関する計画に基づき促進し、年俸制職員の割合を第3期中期目標期間終了時までに全研究教育職員の25%以上に引き上げる。また、若手研究者の割合は、第3期中期目標期間中において全研究教育職員の35%程度を維持する。【55】
- ⑥ 職員の研究に対するインセンティブを高めるため、職員の適切な人事評価を毎年度行い、問題点の把握や評価結果に応じた処遇を行う。また、URA (University Research Administrator) などの高度な専門性を有する者等、多様な人材の確保と、そのキャリアパスの確立を図るため、URAと研究教育職員等との相互異動など多様な雇用形態のロールモデルを構築する。【56】
- ⑦ 技術職員、事務職員の資質と専門的能力の向上を図るため、職能開発、研修内容を充実するとともに、自己啓発の促進並びに研究発表会、研修等への積極的な参加を促す。事務職員については、機構全体を対象として、各役職・業務に応じた研修を毎年度5回以上実施する。【57】
- ⑧ 女性研究者を積極的に採用し、女性研究者の割合を第3期中期目標期間終了時までに13%に引き上げる。また、新たな男女共同参画推進アクションプログラムを設定・実行することにより、男女共同参画の環境を整備・強化する。さらに、出産、育児、介護支援など様々なライフステージにおいて柔軟な就労制度を構築する。【58】

2 教育研究組織の見直しに関する目標を達成するための措置

- ① 各分野の研究動向の詳細な把握の上で、機構長のリーダーシップの下、機構長を議長とした研究基盤戦略会議において、機能強化及び資源の再配分の方針の策定を行うとともに、新たな組織の運営の評価を行い、機能強化を強力に推進する。【59】
- ② 研究基盤戦略会議における機能強化の方針、資源の再配分を始め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（令和2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】機構本部に設置した研究力強化推進本部と各機関に設置した研究力強化戦略室が連携して、行動計画に沿った活動を推進する。研究大学強化促進事業のフォローアップ結果を踏まえ、国際的先端研究の推進支援、国内の共同利用・共同研究の推進支援、国内外への情報発信・広報力強化、若手・女性・外国人研究者の支援、IRによる戦略立案、研究大学コンソーシアムの運営及び産業界との連携強化に取り組む。
- [2] アストロバイオロジーセンターにおいて、第一線の外国人研究者の招へい、若手研究者の海外派遣に取り組むとともに、大学等と連携して国際的かつ先端的な共同利用・共同研究を推進し、当該分野の国際的研究拠点を形成する。（戦略性が高く意欲的な計画）
- ・【2-1】太陽系外惑星の探査、大気観測・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、当該外国人研究者を窓口に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、連携基盤を拡充し、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、ワシントン大学、アリゾナ大学、マックスプランク研究所、カリフォルニア工科大学等と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、既存のプ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、それぞれ公募研究やワークショップ等を実施し、異分野融合研究を推進する。また、新分野探査室において、新分野の創成に向けた検討を行い、併せて、勉強会を実施する。
 - ・【3-2】生命創成探究センターにおいて、機構内外の研究者との緊密な連携の下、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】機構の実施するネットワーク型研究加速事業の下、各機関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索することにより、天体の形成過程や宇宙の大規模構造の起源についての研究を推進する。また、太陽系及び太陽系外の惑星形成領域を観測するための装置（分光器、撮像器等）を開発し、惑星の形成過程や、太陽系外惑星の性質についての研究を推進する。第3期中期目標期間終了時まで、次世代観測装置として超広視野主焦点分光器を東京大学等と共同で開発し、初期宇宙、銀河の進化、暗黒物質、暗黒エネルギー等の研究を推進する。
- ・【4-1】すばる望遠鏡及びその主力観測装置である超広視野主焦点カメラ（HSC）、平成30年度に搭載した近赤外線ドップラー分光器（IRD）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し、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・ドームの改修を進め、装置部品の搬入・据付けを引き続き進める。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引き続き行う。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。国際共同運用の骨子を元に国際共同運用参加候補国と具体的な協議を行う。
- [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同時に、第3期中期目標期間終了時まで、次世代のバンド1受信機66台の組立てを完了する。
- ・【5-1】アルマ望遠鏡の運用・保守の国際的責務を果たし、アルマ望遠鏡の本格運用（共同利用観測）を継続する。日本の国際貢献分に応じて引き続き観測時間を確保し、運営への参加を強化するとともに、アジア地域の中核機関としてユーザーコミュニティとの連携を維持・強化し、高い研究成果を上げる。また、アルマの更なる機能拡張のための基礎開発として、新規受信機の国際共同研究開発を継続する。東アジア・アルマ地域センターと天文データセンターの協力の下、アルマ望遠鏡のデータ利用者のための解析環境を維持する。次世代のバンド1受信機の開発を進める。
- [6] 日米中印加の国際共同事業である30m光学赤外線望遠鏡（TMT）の建設を推進し、日本の役割として望遠鏡本体構造の製作、主鏡分割鏡の製造及び一部研磨加工、第一期観測装置の製作を行う。
- ・【6-1】TMTの建設を担うTMT国際天文台の共通経費を分担し、ハワイ・マウナケアにおける建設再開に向けた取組を進めるとともに、マウナケアでの建設ができない場合の代替建設地の準備など、あらゆる事態に備えた検討と必要な対応をとる。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的な運用計画を代替建設地の場合も含めて検討する。日本が分担している望遠鏡本体構造及び主鏡分割鏡の製作については、現地建設再開時に作業を再開できるよう準備する。第一期観測装置IRIS撮像系については詳細設計を進める。
- [7] 大型望遠鏡、次世代観測装置、超高速計算機等の開発研究、整備及び運用を行い、科学技術の発展向上に寄与する。このため全国の大学等と先端的開発研究を進める。
- ・【7-1】先端技術センターにおいて、全国の大学等と共同し、KAGRAのアップグレードに向けて、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。また、令和3年度に開始が予定されている国際重力波観測ネットワーク（第4期）へのKAGRAの参加に向けて、必要な機器のインストールに貢献する。
 - ・【7-2】令和元年度に実施した重力波望遠鏡KAGRAの観測運転結果に基づき、より高い感度を実現するための機器の改修と調整運転を、東京大学宇宙線研究所及び高エネルギー加速器研究機構と密に協力しながら実施する。

- ・【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の試験機を導入する。試験機を用いて、GPUに最適化した多体や流体シミュレーションコードの開発を継続する。
- 【8】地上からの天文学（地上に設置した望遠鏡やスーパーコンピュータを用いた研究）の推進を軸として、将来の観測装置開発のための基礎的技術研究を推進し、新たな科学技術の基盤の創成に寄与する。
- ・【8-1】位置天文観測衛星計画では、令和元年度にJAXA宇宙科学研究所により公募型小型計画3号機の唯一の候補に選定された「小型JASMINE」に関して、期待される科学成果、衛星システム、データ解析等の検討をさらに進め、JAXAで実施される次段階の審査の準備も行う。超小型衛星の「Nano-JASMINE」に関しては、打ち上げに備えた準備を継続する。
- ・【8-2】小惑星探査機「はやぶさ2」について、探査機位置の精密決定にもとづき、総合的な小惑星科学研究を推進するとともに、レーザー高度計（LIDAR）のデータを公開する。木星系探査機「JUICE」搭載レーザー高度計（GALA）では必要に応じてドイツ航空宇宙センターから欧州宇宙機関への打ち上げモデルの納入審査を支援する。火星サンプリング計画（MMX）がプロジェクト化された場合は、測地学的手法を用いた火星衛星内部構造探査のための観測機器エンジニアリングモデルの試験・打ち上げモデルの設計に参加する。
- ・【8-3】引き続き、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）と協力して行い、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検討・開発を進める。
- ・【8-4】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かつ効率的に運用し、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。特に、ファイルサーバと汎用GPU（演算加速器）の増強を行う。計算基礎科学連携拠点やHPCIコンソーシアムでの活動を通じ、日本の数値天文学コミュニティの意見集約窓口としての役割を果たす。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】引き続き若手研究者の育成を目指したEACOA Fellowship（東アジア博士研究員給費制度）への支援を継続するとともに、米国ハワイ島にある東アジア天文台（EAO）の運用への協力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、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、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）の電子サイクロトロン共鳴加熱（ECH）装置を増強し、重水素実験によって高性能化したイオン温度1億2,000万度のプラズマの高電子温度化を更に進める。また、水素同位体効果の解明に向けて、プラズマ中の乱流を可視化する揺動（揺らぎ）計測システムを増強整備し、揺らぎの構造を明らかにする。さらに、LHDにおける重水素実験によって著しい進展がみられる高エネルギー粒子閉じ込め研究を加速するため、高エネルギー粒子計測システムを整備し、ヘリカル型核融合炉実現に必要な高エネルギー粒子閉じ込めデータベースの構築を進める。
- 【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、各種輸送コードに複数イオン種効果を取り込む。さらに、第3期中期目標期間終了時まで、タン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な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】性能向上したプラズマシミュレータを用いて、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へのイオンサイクロトロン共鳴周波数帯加熱（ICRF）波動の効果の導入、③複数輸送コードの結合によるプラズマ壁相互作用・周辺プラズマ輸送の解析、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、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、先進的な概念導入の深化を図りつつ、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のため、要素技術開発研究組織の見直しを進めつつ、①「大口径強磁場導体試験装置」等大型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物質移行、③バナジウム合金、銅合金、タングステン合金など高性能材料の改良と機能評価、④先進超高温熱流機器試験体の高性能化・大型化と繰り返し耐熱特性試験による寿命評価を行う。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研究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を詳細化する。

（基礎生物学研究所）

- 【13】多様な生物現象の基本原則を解明するために、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・再生現象や行動を司る脳神経系の構造と機能、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引き続き進める。そのために、遺伝子やタンパク質の機能、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、さらにゲノム編集技術、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、新たなモデル化となる生物を探す。それらに対する繁殖・飼育技術の確立、遺伝子情報の整備を進めるとともに、最適化されたゲノム編集技術等による遺伝子機能解析手法の開発を行う。また、研究者コミュニティの関心やニーズの高い解析技術について、新規モデル生物への適用を進める。これらの技術や情報について、データベースを通じて情報発信を進める。
- 【15】バイオイメージング関連施設の国内ネットワークの構築、欧米を含む国際ネットワークへの参加を第3期中期目標期間終了時まで実現する。
- ・【15-1】画像取得から解析までを含めた、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継続するとともに、画像解析技術普及のためのトレーニングコースを開催する。国際バイオイメージングネットワーク（GBI）のメンバー国として実務者会議を岡崎で開催し、イメージング分野の情報共有や意見交換を行うなど、国際連携活動を活発化する。

(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、膜タンパク質の機能調節の分子基盤、及び構造との連関に関する研究に取り組む。
- ・【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、慢性疼痛病態の神経メカニズム、及び抗炎症物質等の作用機序の分子基盤等を明らかにする。
- 【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、社会性の神経基盤に関する研究及び、不随意運動の制御機構の解明を目指した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、大容量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の本格的導入と実質的な運用の開始を目指す。また、経頭蓋磁気刺激-脳波計測による脳情報抽出手法の開発を行う。
- 【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をヒトと非ヒト霊長類に適用し、ヒトの社会性に関連の深い脳領域を対象に機能及び構造的結合性マップを取得するとともに、非ヒト霊長類での相同領域ネットワークを同定する。

(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・計算科学的手法を開発するとともに、表面・界面や生体分子システムなどを含む様々な系の構造・物性や機能の発現機構を解明する。
- 【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、極端紫外光研究施設が連携し、先端的な光源や光計測・制御法の開発、それらを用いた研究を行い、分子システムの機能解析のための分子科学計測法の開拓を推進する。光格子あるいは光ピンセットを用いて整列させた極低温リユードベリ原子を用いた超高速量子シミュレータの開発、ナノ構造物質のキラル光学特性に基づく物質機能の開拓、光操作の実験及び解析を継続する。また、放射光分光による超伝導物質や機能性分子材料等の各種環境下における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、新規な電氣的・磁氣的・光学的特性や高効率な物質変換・エネルギー変換を目的とした新たな分子物質や化学反応系の設計・開発を行う。
- ・【21-1】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・創成と特性向上、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。また生命システムの自律的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、天然には存在しない新規の分子システムや分子機械を設計する。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、所属下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る。また、海外の研究費助成機関と連携し、若手人材育成に向けた新たな研究費助成制度を設ける。

- 【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、研究の進展に合わせ適切に研究推進体制の見直しを行う。
- ・ 【23-2】 プロジェクトの進行に関し不断の点検を行い、該当機関の運営会議等においてその進捗報告を行い、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】 各機関が推進する研究の内容や成果を広く社会に発信するとともに、地元住民等との適切なリスクコミュニケーションを図る。特に核融合科学研究所では、地元住民等と、実験内容や安全管理状況に関する情報を密に共有する「市民説明会」を実施する。
- 【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。当該研究拠点における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】 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にそれぞれ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、継続して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。3室の連携を図るため、国内外から特任教員、研究者を採用して組織の充実を図り、外国人研究者の割合20%以上を目指す。
- ・ 【24-2】 系外惑星探査プロジェクト室では、すばる望遠鏡における近赤外光分散分光装置IRDによる太陽系近傍の地球型系外惑星探査を継続し、NASA/TESS宇宙望遠鏡等と連携するための多色撮像装置MuSCAT3を開発し惑星探査を開始する。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では、次世代望遠鏡による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の活動として、プラズマバイオ研究分野では、名古屋大学と九州大学と設立したコンソーシアムの運営及びプロジェクト公募を行い、プラズマバイオロジー分野のすそ野拡大及び定着を目指す。先端光科学研究分野では、プロジェクト公募だけでなく、主に海外機関との連携に向けた研究を推進する。新分野探査室では、新たな分野の立ち上げに向け、勉強会等を行い、準備を進める。

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】 基盤整備された自然科学共同利用・共同研究統括システム(NOUS)を活用し、公募型共同利用・共同研究を推進するとともに、蓄積されたデータを、共同利用・共同研究の成果内容・水準を把握するIRに活用するための開発を進める。
- 【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】 各機関における個別の大学間連携を集約する形で平成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、広い大学間連携による大学に共通する研究力強化に向けた取組について検討し、研究者や技術者の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。特に国際連携研究センターでは、若手研究者を国際公募で採用し、海外の研究機関に従事させることにより、新たな領域で世界をリードする優秀な研究者を育成する。

各分野の特記事項を以下に示す。

(国立天文台)

- 【28】 天文学分野において、研究者コミュニティの意見をとりまとめ、その総意に基づいて、大型研究基盤施設及び設備の建設・開発・運用を行うとともに、国内観測拠点の整理・統合を進める。アルマ望遠鏡の使用に関する東アジア地域の窓口機関として、日本を含む東アジア地域の研究者に対し、観測提案の準備、観測データ解析、論文化等の支援を行う。自然科学大学間連携推進機構(仮称)の一環として、光学赤外線分野及び電波VLBI分野等における大学間連携を促進し、全国の大学等及び海外の研究機関等が保有する観測装置を連携させた共同利用・共同研究システムを構築するなど、大学等における天文学・宇宙物理学の発展に貢献する。さらに、共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため、すばる望遠鏡の共同利用率を90%に、天文シミュレーションシステムの共同利用率を100%に維持する。
- ・ 【28-1】 すばる望遠鏡、アルマ望遠鏡の運用及びTMT実現を目指しつつ、研究者コミュニティへの窓口として、科学戦略委員会及びユース・ミーティング等を開催し、現状分析や天文学の動向を見ながら、大学と共に国内観測拠点の運用に資する。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つて、全国共同利用を継続する。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】 引き続き名古屋大学、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提供し、アルマ望遠鏡や海外の大口径地上望遠鏡、Interface Region Imaging Spectrograph(IRIS)やParker Solar Probe等の太陽観測衛星との共同観測を含めた太陽研究を支援する。また、引き続き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。
- ・ 【28-3】 光赤外線天文学研究教育ネットワーク事業においては、参加大学が運用する光赤外望遠鏡を用いてマルチメッセンジャー天文学観測や多波長天文学観測を実施し、国内VLBIネットワーク事業においては、参加大学が運用する電波望遠鏡などを組み合わせてサーベイ観測や時間領域観測を実施して、大学での研究と教育を推進する。

(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では、コミュニティの意見を幅広く取り入れる仕組みを有する、「一般」・「LHD計画」・「双方向型」・「原型炉研究開発」の四つの共同研究制度を、国内共同研究の基盤として位置付ける。また、国際共同研究については、「LHD国際プログラム委員会」と「LHDワークショップ」を活用するとともに、国際的学術拠点として海外からの実験提案に対して広く門戸を開くために新設した、一般共同研究のカテゴリ「LHD国際共同研究」を活用し、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、ユーザーへの新型プラズマシミュレータの特徴・利用方法等の周知、シミュレーションコードの移行支援、プログラム最適化支援を行う。これらを通じて、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。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。
 - ・【29-3】核融合工学研究プロジェクトでは、共同研究制度を活用し、ヘリカル炉開発の更なる精密化を行い、炉の小型化・高性能化に加えて、体積中性子源等への多様な展開も視野に入れた検討を進める。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。原型炉研究開発を進める大学との共同研究を更に進め、大学の研究力強化に貢献する。また、日米科学技術協力事業「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）」の着実な進展に向けた研究を支援する。
 - ・【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（CFQS）について、共同研究を進める。さらに、アメリカのウイ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、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・共同研究の基盤強化と新たなモデル生物の開発を進める。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、バックアップ保存技術開発の研究支援により、生物遺伝資源の新規保存技術の開発を推進する。また、国際カンファレンス等を通じて、国際共同利用・共同研究の核となる活動を進め、関連研究者のネットワークを更に強化し、拡大する。先端バイオイメージング支援プラットフォーム（ABiS）を窓口として参加している、国際バイオイメージングネットワーク（GBI）の実務者会議を岡崎で開催し、情報共有や意見交換を行い連携を強化する。
 - ・【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、凍結保存カンファレンスを開催し、成果の普及に努めるとともに、ラットの遺伝資源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・解析の普及、及び高度でより先進的な画像取得・解析からなる多層の支援を行い、共同利用・共同研究を推進する。共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため、大型スペクトログラフの共同利用率を90%に維持する。

(生理学研究所)

- 【31】分子から細胞、組織、システム、個体にわたる機能生命科学（生理学）及び脳科学分野の共同利用・共同研究拠点としての機能を強化する。年間、共同研究件数100件、生理研究会20件を維持する。自然科学大学間連携推進機構（仮称）の一環としての7テスラ超高磁場MRI装置等を用いた脳・人体機能イメージングネットワークを構築し、全国の大学等研究機関との共同研究体制を確立する。先端光学・電子顕微鏡を用いた共同研究は、新規の共同研究者を開拓する。研究者へのニホンザルの提供については、安全でユーザーのニーズに沿った付加価値の高い個体の提供を目指し、他機関と協力し、品質信頼性の更なる向上に取り組むとともに、長期的供給体制の整備を継続する。遺伝子改変に用いるウイルスベクターの作成と提供についても更に推進する。また、共同利用研究の国際公募を実施し、国際共同研究を推進する。さらに、共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため、7テスラ超高磁場MRI装置の共同利用率を60%に維持する。また、先端バイオイメージング支援プラットフォーム（電子顕微鏡技術支援、機能的磁気共鳴画像技術支援等）の形成などを通じて、生命科学を包括した支援体制を構築し、我が国の当該分野の高度化を推進する。
- ・【31-1】年間、共同研究件数100件、生理研究会20件を維持する。
 - ・【31-2】7テスラ超高磁場MRI装置による計画共同研究において、引き続き共同利用率60%を目指す。また、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】組織改編された動物資源共同利用研究センターの一部施設の稼働を開始するとともに、その改修を完了させる。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体制強化のため、人員配置を進める。
- ・【31-4】ナショナルバイオリソースプロジェクト（NBRP）「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に向け、引き続き事業の集約化を進める。また、繁殖を停止したニホンザルの飼養や取り扱いに関する方策について議論を進め、有効利用に関して検討を進める。
- ・【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。また、胚盤胞補完法を用いた効率的な同種及び異種細胞作製手法の開発を行う。
- ・【31-6】3次元走査型電子顕微鏡（3D-SEM）等による画像データの効率的解析のため、大容量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の本格的導入と実質的な運用の開始を目指す。
- ・【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所を運営する。さらに、日本医療研究開発機構（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、共同利用率を引き続き85%以上に維持するため、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・共同研究による放射光の化学的利用を促進する。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する。
- ・【32-2】機器センターにおいては本務共同利用業務に加え、「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」プロジェクトを通じて、全国の大学にある先端的計測設備の相互利用による効率的な運用、全国の大学に所属する技術職員等の人材育成、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。協奏分子システム研究センターにおいては、分子システムの構造やダイナミクスの解析、及び各種デバイス用分子システムの高度化・高機能化に取り組む。また、装置開発室の共同利用、機器センターとの連携を通じて、先端的計測設備の相互利用による効率的な運用と、構造機能物性評価に関する共同利用・共同研究を推進する。
- ・【32-3】計算科学研究センターにおいて、スーパーコンピュータの計算資源を100%共同利用に提供し、触媒反応の反応機構、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、スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム、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めざすアストロバイオロジーセンター及び次世代生命科学センター（仮称）等を設置し、共同利用・共同研究、各種研究プロジェクトの実施等に取り組む。また、岡崎3機関が共同運営する岡崎統合バイオサイエンスセンターについては、バイオネクスプロジェクト及びオリオンプロジェクトを推進してその機能を強化した上で、岡崎3機関の関連部門も含めた必要な組織改革を行い、平成30年度に創設する次世代生命科学センター（仮称）の中核組織として再編・統合する。
- ・【33-1】（新分野創成センター（CNSI））新たな学問分野の創出を目指す新分野創成センターでは、プラズマバイオ研究分野及び先端光科学研究分野において、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たな研究分野となり得る萌芽的研究の探査及び勉強会等を行う。
- ・【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国際的共同研究拠点をめざすアストロバイオロジーセンター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引き続き実施する。
- ・【33-3】（生命創成探究センター（ExCELLS））次世代の生命科学を探究する目的で設立された生命創成探究センター（ExCELLS）では、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課題研究をさらに拡充し、国内外の研究者との共同研究を進める。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特別共同研究を引き続き実施する。
- ・【33-4】（国際連携研究センター（IRCC））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、米国・プリンストン大学とドイツ・ボンにランチを置き、国際選考委員会が国際公募により採用した特任研究員の活動により、「アストロフュージョンプラズマ物理研究部門」及び「定量・イメージング生物学研究部門」の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】研究力強化推進本部に置かれた共同利用・共同研究室のIR班において、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の更なる検討を継続して実施するとともに、引き続きNOUSにより公募型共同利用・共同研究の実績を収集し、IR検討のためのエビデンスとして提供する機能開発を進める。
- ・【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、NOUSによって蓄積されたデータから、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】基盤が整備され本格運用が始まったNOUSについて、ユーザーからの声を反映すべく、必要に応じて利便性を向上させるための改善・機能追加を行い、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が期待できる具体的な取組を、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】NICAを通じて、各機関が推進する双方向型、大学連携型、ネットワーク型等の共同利用・共同研究の大学の研究力強化への貢献について、大学執行部の認識向上を図るとともに、大学間連携の強化・充実にさせ、これらの事業を更に推進する。

3 教育に関する目標を達成するための措置

(1) 大学院への教育協力に関する目標を達成するための措置

- ・【36】総合研究大学院大学（以下「総研大」という。）との連携協力に関する協定に基づき、また、機構長の経営協議会への参加、教育担当理事のアドバイザーボードへの参加等を通じて緊密に連絡し、大学共同利用機関としての最先端の研究設備、各分野の基礎研究を支える基盤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、国内外の大学・研究機関との協定等に基づき、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携・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。また、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とともに、評価に応じた研究費のサポートを行う。
- ・【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。講演には講演者の出身高校の生徒を招き講演者とのふれあいの場を設けるなど次世代育成の機会を作る。
- ・【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を活用し、若手人材の育成を強化する。特に国際連携研究センターでは、若手研究者を国際公募で採用し、海外の研究機関に従事させることにより、優秀な研究者を育成する。

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。特に連携協定を締結した東京都港区が開設する「みなと科学館」への展示への協力などを通じ、地域の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】研究力強化推進本部産学連携室と各機関が連携し、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。また、平成28年度以降の民間等との共同研究や受託研究の実績を整理・分析する。

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、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との関係研究所（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する。特に国際連携研究センターでは、海外の大学と若手研究者を共同で雇用し、優秀な研究者を育成する。
- 【45】 各機関においては、各機関が締結した国際交流協定などに基づき、海外の主要研究拠点との研究者交流、共同研究、国際シンポジウム及び国際研究集会等をそれぞれ毎年度1回以上開催し、連携を強化する。
- ・ 【45-1】 各機関が締結した国際交流協定等に基づき、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推進する。
- 【46】 国内外の優秀な研究者を集め、国際的な研究機関として広い視点を取り込むため、外国人研究者の採用を促進し、外国人研究者の割合を第3期中期目標期間終了時までに8%に引き上げる。
- ・ 【46-1】 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、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。これにより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。
- 【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】 国際間の研究交流を促進するため、また第一線の国際的研究者の能力を活用するため、戦略的国際研究交流加速事業等の活用や外国人客員制度等の運用の弾力化により外国人研究者の招へいを促進する。これにより外国人研究者の招へいを6年間で約20%増加させる。
- 【48】 機構の研究活動の国際的評価や国際共同事業等の推進のため、ネット会議等の利用を含めた国際的な会議・打合せの回数を6年間で約20%増加させる。
- ・ 【48-1】 機構の研究活動の国際的評価や国際共同事業等の推進のため、ネット会議等の利用を含めた国際的な会議・打合せを積極的に行う。
- 【49】 本機構のグローバル化を推進するための基盤を整備するため、来訪外国人の要望にきめ細かく対応した外国人研究者の宿泊施設の確保やサポートスタッフの拡充などを行う。
- ・ 【49-1】 外国人研究者の要望にきめ細かく対応するため、アンケート調査を実施してニーズを把握するとともに、支援体制の整備を図り、外国人研究者の滞在に関するサポートや国際交流関連事業の支援を行う。

(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】 第4期中期目標期間開始時における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、「連合体」設立準備委員会が中心となって検討を行う。
- また、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。
- ・ 【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、大学等における大学共同利用機関の活動の一層の理解促進のため、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多様な貢献を可視化できる新たな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 to 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】 外部理事を複数登用し、機構運営体制の強化を図る。具体的には、外部から非常勤理事を登用し、経営力の強化を図るとともに、運営の透明性の確保を図る。
- 【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出席する。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み。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推進し、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】クロスアポイントメントを含む混合給与の活用を進めるとともに、新たな年俸制の給与体系を導入し、年俸制職員の比率を引き上げる。また、若手研究者の比率については35%程度を維持する。
 - 【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】 月給制や年俸制といった給与体系の違いにかかわらず、機関の研究分野に応じた研究教育職員の的確な目標設定や、その業績の適切な評価が年齢等を問わず研究分野や職位等の特性を反映した形で公平・公正に行われるよう全ての研究教育職員を対象とする評価制度を構築する。
 - 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。また、他の大学共同利用機関法人と連携した研修も積極的に実施する。
 - 【58】 女性研究者を積極的に採用し、女性研究者の割合を第3期中期目標期間終了時まで13%に引き上げる。また、新たな男女共同参画推進アクションプログラムを設定・実行することにより、男女共同参画の環境を整備・強化する。さらに、出産、育児、介護支援など様々なライフステージにおいて柔軟な就労制度を構築する。
 - ・【58-1】 平成28年度より始めた第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、女性研究者の積極的な登用に努め目標を達成する。また、育児・介護の支援を主たる目的とする在宅勤務（テレワーク）制度を導入するなど、ライフステージにおける柔軟な就労制度の拡充を図る。
- 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、各機関等の運営会議等において研究動向等を踏まえた組織改編の必要性について議論する。
- 3 事務等の効率化・合理化に関する目標を達成するための措置**
- 【61】 事務局と各機関及び他機構の事務部門との連携を強化し、事務の共同実施等による事務処理の効率化を進める。また、テレビ会議システムによる会議開催を促進し、機構内会議に占めるテレビ会議の比率を、前年度比1以上とする。さらに、経費の節減と事務等の合理化を図るため、第3期中期目標期間終了時まで、すべての機構内会議においてペーパーレス化を導入する。
 - ・【61-1】 経費の節減と事務等の合理化を図るため、事務等の共同実施を進めるとともに、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前年度比1以上とする。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、機構内広報誌やWebページを有効に活用した募集等の情報の周知を行う。また、産学連携委員会の下にWGを設置し、新たな外部資金獲得に向けた方策についての検討を行う。
- 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、各機関はもとより他大学等における節減事例を共有し、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するなど、固定資産の適正かつ効率的な管理を図る。また、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、その利用促進を図る。また、乗鞍観測所については、関係機関等と調整しつつ、廃止に向けた手続きを進める。

IV 自己点検・評価及び当該状況に係る情報の提供に関する目標を達成するためにとるべき措置

1 評価の充実に関する目標を達成するための措置

- 【66】国際的見地から研究体制及び共同利用・共同研究体制について、様々な機構外の者の意見を反映させ、定期的に自己点検及び外部評価等を実施し、その結果を広く公開するとともに、当該意見に応じて見直しを行う。
- 【66-1】国際的見地から研究体制及び共同利用・共同研究体制について、各機関の特性に応じた自己点検及び外部評価等を実施し、その結果を広く公開するとともに、そこで得た意見・提言等を踏まえ、必要に応じて見直しを行う。
- 【67】本機構の業務運営を改善するため、各機関のIR機能の連携により機構全体のIR機能を強化するとともに、平成30年度に機構全体の自己点検及び外部評価等を実施し、その結果を広く公開する。
- 【67-1】機構として外部の評価分析ツール等を活用した各機関、各研究組織、機関横断的組織等の現況分析を実施するとともに、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、引き続き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、機構の研究結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】インフラ長寿命化計画（個別施設計画）に基づき、計画的な維持・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】安全管理に係る特別相互巡視を行い、その結果を機関に持ち帰り活かすことにより、研究施設における従来の想定を超えた事態に対応できる防災・防火体制の再構築を図る。また、関係行政機関と連携した防災訓練等を実施する。
- 【73】職員の過重労働及びそれに起因する労働災害を防止するため、労働災害の要因調査・分析を行うとともに、メンタルヘルスケアのためのストレスチェック及び講習会を毎年度実施する。
- 【73-1】職員の過重労働及びそれに起因する労働災害を防止するため、各機関等が設置する安全衛生委員会等で労働災害の要因調査・分析を行った結果を機構が設置する安全衛生連絡会議において報告するとともに、長時間にわたる過重労働が見られる部署に対する是正指導などの必要な措置を講じる。また、法令に基づくストレスチェックの結果を活用した検討会等を実施することにより、職場環境の改善などに努める。メンタルヘルス不調による健康障害を予防するための心の健康づくり計画を策定するとともに、メンタルヘルス不調による退職者への職場復帰支援制度を整備する。
- 【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、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、不正行為及び研究費不正使用防止の年度計画を立て、各機関の管理責任者による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。