

## 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）」が実施された。これは2019年度で終了し、富岳成果創出加速プログラムとして継続した（分子科学研究所としての活動は行っていない）。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勧奨し、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期中期計画期間には独自の分子研国際共同プログラムを進めた。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5-8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ばかりでなく、公私立大学や企業も含めた500近くの機関が参加しており、外部公開機器の登録台数は、751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2,700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2021年3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、現在では2,500件／年以上に達している。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に拡大したことに加え、2019年度からは、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・研修会を開催した（表3）。なお、今年度の講習会・研修会は新型コロナウイルス感染症の拡大を受け、すべてWEB会議形式で実施した。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	354	6	4	364
2011	73,997	438	38	2	478
2012	85,128	490	63	25	578
2013	88,516	576	149	162	887
2014	108,863	682	254	241	1,177
2015	113,063	757	329	228	1,314
2016	111,728	798	448	298	1,544
2017	119,077	1,005	698	594	2,297
2018	143,789	1,154	671	658	2,483
2019	169,051	1,005	820	966	2,791
2020	146,621	962	701	948	2,611

表2 2020年度加速事業課題一覧

地域	大学	部署	代表者	職名	課題名
東関東	千葉大学	共用機器センター	梶 飛雄真	准教授	核磁気共鳴装置の固体プローブ修理と固体測定環境の強化
	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機能の整備
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	教授	核磁気共鳴分光装置の総合メンテナンス
	横浜国立大学	機器分析評価センター	栗原 靖之	教授	相互利用を促進するためのガスクロマトグラフ質量分析の汎用プローブ増設事業
	山梨大学	機器分析センター	山中 淳二	准教授	FIB・ESR・FE-TEM 総合整備事業
北陸	金沢大学	理工研究域	大橋 政司	准教授	極低温粉末X線回折装置のGM冷凍機更新及び測定温度領域の拡大
東近畿	奈良先端大	物質科学教育研究センター	川合 壯	教授	EPMA装置再稼働およびその供用開始のための施設整備事業
西近畿	大阪大学	産業科学研究所	鈴木 健之	准教授	固体核磁気共鳴装置の保守整備による依頼利用促進
	大阪市立大学	大学院工学研究科	辻 幸一	教授	先端的蛍光X線分析装置の相互利用のための整備
中国	広島大学	技術センター	網本 智子	契約専門職員	ロータリーポンプ交換による高性能ハイブリッド型質量分析システムの機能復活
	鳥取大学	研究推進機構研究基盤センター	森本 稔	准教授	質量分析計(Thermo scientific Exactive)の基板修理による安定的な装置利用の維持と相互利用促進
四国	愛媛大学	学術支援センター 物質科学部門	谷 弘幸	准教授	有機微量元素分析装置利用促進事業
九州	長崎大学	産学官連携戦略本部	真木 俊英	准教授	元素分析装置整備および経費安定化事業
	長崎大学	産学官連携戦略本部	真木 俊英	准教授	二重収束型質量分析装置整備事業
その他	分子科学研究所	機器センター	横山 利彦	教授	液体He利用磁性・構造解析機器群を用いた物質科学共同利用

表3 2020年度講習会・研修会開催一覧

講習会・研修会名	申請者	開催日	参加数
EPMA 実習会	五十嵐 文子 (新潟大)	中止	-
NMR 技術研修会	北村 悟 (北大)	2020.12.3	15
		2021.2.19	19
第3回有機元素分析研究会	平野 敏子 (京大)	中止	-
XPS-UPS の技術習得に関する講習会	西村 泰央 (鹿児島大)	中止	-
横断的機器分析講習会 (英語研修に変更)	大原 美佳 (分子研)	2020.6.25 2020.7.30 2020.8.27 2020.9.28 2020.10.26 (計5回)	46
質量分析技術研修会	三宅 里佳 (大阪大)	2020.5.29 2020.7.31 2020.10.2 2020.10.30 2020.12.22 (計5回)	182

## 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。2020年度は、10件の共同研究を採択し（うち7件が機構外からの応募）、研究活動を支援している。2019年度には所外からの応募による研究会1件も採択し、実施された。また教授会議で企画するワークショップとして、2019年度には“Chiro-Optical Effects in Nnomaterials”を、2020年度にはオンラインで「先端光科学研究分野勉強会」を開催した。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行っている。

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

自然界の事象はマイクロからマクロまでの多数の階層で構成され、それぞれの階層に固有の運動法則に支配されている。さらに全体としては階層間で相互作用しながら時間発展し、その結果全体として大変複雑な様相を示す。本プロジェクトでは国立天文台、核融合科学研究所、分子科学研究所が連携して、自然科学における階層性、構造形成等の階層横断現象の解明を目指すとともに、関連研究機関との連携を推進することにより、学際領域としてのシミュレーション科学を通じての異分野の融合の推進を目指している。本プロジェクトにおける連携研究活動として、物質創成過程などを対象とした「分子シミュレーションとその応用」、生命現象や不均一触媒反応のための「界面の化学反応とダイナミクス」、プラズマ医療応用などで見られる「プラズマと中性ガス、液体、固体との相互作用」、惑星形成や星間ダスト進化などに関連した「ダスト成長・破壊」、各科学分野における「深層学習とデータ科学」、基礎科学における「階層性」等をテーマとした連携シンポジウムを2021年1月7、8日にオンライン研究会として開催した。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2020年度の支援装置・プログラム一覧、表2には2020年度の採択課題一覧、表3には2020年度採択・実施件数日数(2020年4月1日～2021年3月31日実施分)を示した。

表1 2020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。 [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)]	山本浩史室長 近藤聖彦技術職員 木村幸代技術職員 石川晶子技術支援員	装置開発室 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 (ZIGO 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 近藤聖彦技術職員 菊地拓郎技術職員 木村幸代技術職員 水谷信雄技術職員</p>	<p>装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室 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。市販品では実現できない研究用装置類の金属工作図面作成、電気電子回路設計、それらの製作および性能評価。]</p>	<p>山本浩史室長 近藤聖彦技術職員 豊田朋範技術職員 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 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>
走査プローブ顕微鏡	<p>形状測定、機械特性測定、電気特性測定、ケルビンプローブ測定に特化した走査プローブ顕微鏡を用いた共同研究が可能。</p> <p>[Bruker Dimension XR Icon NanoElectrical]</p> <p>電気化学測定に特化した走査プローブ顕微鏡を用いた共同研究が可能。</p> <p>[Bruker Dimension XR Icon NanoElectrochemical]</p>	<p>横山利彦センター長 湊 丈俊主任研究員 上田 正技術職員 杉本敏樹准教授</p>	<p>機器センター 機器センター 機器センター 物質分子科学</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 岡野芳則技術職員</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）	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 $\phi 0.1 \sim 0.2$ 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。 低温測定：ガス吹き付け型の冷却装置で、到達温度はN <sub>2</sub> ガスモードで100 K、Heガスモードで24 K（実測）。到達時間は、N <sub>2</sub> で240分、Heで150分かかる。運転モードの切り替えは、HeからN <sub>2</sub> には迅速に切り替え可能だが、N <sub>2</sub> からHeの場合は、冷凍機を一旦室温に戻す必要。 [Rigaku_HyPix-AFC]	横山利彦センター長 岡野芳則技術職員	機器センター 機器センター
結晶スポンジ法を用いた分子構造解析	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 三橋隆章特任助教	特別研究部門 機器センター 特別研究部門
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
オペランド多目的X線回折	試料にX線を照射し、回折・反射・散乱されたX線を観測することで、化合物の同定・定量・配向性、薄膜の膜厚・粗さ、粒径・空隙径分布などの情報が得られる。本装置では、各種ミラー・ステージ・オプションにより、様々な測定に対応可能である。 [Panalytical Empyrean]	横山利彦センター長 小林玄器准教授 竹入史隆助教 藤原基靖技術職員	機器センター 物質分子科学 物質分子科学 機器センター
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
機能性材料バンド構造顕微分析システム	静電半球型アナライザーを用いた機能性材料の価電子バンド構造測定システム。ディフレクターを使用することで2次元波数空間マッピングを行うことが可能。薄膜作製用真空チェンバー、試料表面処理チェンバー（電子衝撃加熱、通電加熱、Ar <sup>+</sup> スパッタが可能）、電子線回折装置、劈開機構を利用することができるため、様々な機能性材料の測定に対応。	解良 聡教授 田中清尚准教授 出田真一郎助教	光分子科学 UVSOR UVSOR
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 3-21]	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
絶対 PL 量子収率測定装置	物質に光を照射し励起された電子が基底状態に戻る際に発光する光を観測することで、発光材料の絶対発光量子収率を測定する装置である。PL 量子収率とは、吸収した光の光子数に対して分子から放出される発光光子数の割合で、発光の効率を表す。 [HAMAMATSU Quantaaurus-QY C11347-01]	横山利彦センター長 上田 正技術職員	機器センター 機器センター
円二色性分散	円二色性分散計は光学活性分子の立体構造（相対～絶対配置、立体配座、生体高分子の高次構造）を解析する手段として利用。分光器から出た光は偏光子で直線偏光にされ、円偏光変調器で左右円偏光が交互に作られ試料を通過。この時、試料が光学活性物質であると円偏光の不等吸収が起こり（この現象を円二色性または CD と呼ぶ）、その左右円偏光の差吸光度 $\Delta A$ （通常は楕円率 $\theta$ で表される）が観測。楕円率とは直線偏光を光学活性物質の吸収波長で通過させると楕円偏光になるが、その楕円の短軸長軸の正接角 $\theta$ をもって定義され、 $\Delta A$ が小さいと $\theta = 33 \times \Delta A$ が成立。CD 測定でのフルスケールは $\theta$ 表示（単位 mdeg）。 [JASCO J-1500]	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

<sup>1</sup> H 800MHz 溶液 (高磁場 NMR)	800MHz 溶液 NMR による生体分子複合体をはじめとする低溶解性物質などの高感度・高分解能測定支援。極低温プローブによる <sup>1</sup> H- <sup>13</sup> C- <sup>15</sup> 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
<sup>1</sup> H 600MHz 固体 (高磁場 NMR)	600MHz 固体 NMR による蛋白などの生体分子, 有機材料, 天然物などの精密構造解析支援。 <sup>1</sup> H- <sup>13</sup> C- <sup>15</sup> N 三重共鳴実験まで対応。 [Bruker_AVANCE600]	横山利彦センター長 西村勝之准教授	機器センター 物質分子科学
<sup>1</sup> H 600MHz 溶液 (高磁場 NMR)	核磁気共鳴 (NMR) とは磁気モーメントをもつ原子核を含む物質を磁場の中におき, これに共鳴条件を満足する周波数の電磁波を加えたときにおこる共鳴現象。核磁気共鳴装置はこの共鳴現象を観測することによって, 原子の化学的環境を反映した原子個々の情報 (どの原子とどの原子が隣り合っているか, 原子間の距離がどの程度かなど) が得られるので, 化合物の分子構造や組成, 物理化学的性質を分析する方法として様々な分野で日常的に利用。 [JEOL_JNM-ECA600]	横山利彦センター長 水川哲徳技術職員 賣市幹大技術職員 長尾春代技術支援員	機器センター 機器センター 機器センター 機器センター
機能性分子システム創製 (太陽電池)	有機半導体を用いた有機薄膜太陽電池の作製・評価, 有機薄膜の各種物性評価を支援。昇華精製装置による有機半導体単結晶の作製, 真空蒸着装置・スピコート装置による有機薄膜の作製, 太陽電池デバイス作製, 擬似太陽光源を用いた太陽電池特性評価等が可能。また, ケルビンプローブ, AFM, SEM 等による, 有機半導体薄膜の各種物性評価が可能。 [有機太陽電池の作製・評価, 有機薄膜・単結晶の作製・各種物性評価]	平本昌宏教授 伊澤誠一郎助教	物質分子科学 物質分子科学
機能性分子システム創製 (有機 FET)	分子性伝導体や有機分子を用いたトランジスタの作製・評価を支援。電気分解による単結晶成長, レーザー加工によるデバイス作製, 低温・磁場下における輸送特性測定および顕微反射赤外による物性の評価が可能。 [有機 FET の設計・製作・各種評価, 有機伝導体半導体合成]	山本浩史教授 廣部大地助教	協奏分子センター 協奏分子センター
機能性分子システム創製 (有機合成)	不斉分子触媒の配位子, 不斉有機分子触媒などの合成, 有機小分子の合成を支援。また, 有機分子の光学異性体の光学純度の測定, ならびに, キラルセミアンカラム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 大塚尚哉助教	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 松岡亮太助教	生命・錯体分子科学 生命・錯体分子科学

機能性分子システム創製 (無機材料)	無機材料の合成と結晶構造・物性の評価を支援。超高压装置を利用した高温・高压下での物質合成、X線回折による結晶構造解析、温度・雰囲気制御下での電気化学的物性評価が可能。 [無機材料の設計・合成・各種評価]	小林玄器准教授 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 2020年度採択課題一覧 分子科学研究所担当分(2021年3月31日現在)

(1) 協力研究

課題名	支援機器等	代表者
X線小角散乱法によるPDIファミリータンパク質とPDI酸化酵素との複合体の構造解析	SAXS	関西学院大学理工学部 金村 進吾
キヌクリジンの完全重水素化	有機合成	北海道大学理学研究院 河本 充司
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
銅・亜鉛スーパーオキシドディスムターゼ様タンパク質の構造解析	SAXS	慶應義塾大学理工学部 古川 良明
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
有機電荷移動錯体の圧力下・フィリング制御下での電子相転移の探索と機構解明	有機FET	名古屋大学大学院工学研究科 伊東 裕
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(III)	太陽電池	東京理科大学理工学部 中山 泰生
有機ディラック電子系を用いたアクション電磁応答開拓	有機FET	東邦大学理学部 田嶋 尚也
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	800NMR 溶液	名古屋市立大学大学院薬学研究所 矢木 宏和
スピロ型ビスヒドロキサマート塩およびキラルチオキサントリウム塩の合成と不斉触媒反応への応用	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
トポロジカル絶縁体薄膜積層構造への磁気秩序導入	ARUPS	大阪大学大学院生命機能研究科 大坪 嘉之
有機半導体薄膜の精密構造制御と占有準位エネルギー状態観測	ARUPS	千葉大学大学院工学研究院 吉田 弘幸
六方晶格子を持つ水素化合物ハライドBa <sub>2</sub> H <sub>3</sub> X(X=Cl, Br, I)のヒドリド導電特性	無機材料	京都大学大学院工学研究科 生方 宏樹
キラルプラズモンによる円偏光発光増強	有機合成	理化学研究所 橋谷田 俊
無水有機プロトン伝導体イミダゾリウム-コハク酸塩粉末における分子配向無秩序化を伴う構造転移及び相挙動の研究	無機材料	東京大学物性研究所 出倉 駿
ハロゲン結合を活用する不斉求核触媒の高分子固定化	有機合成	岐阜医療科学大学薬学部 萬代 大樹
高酸素欠損型Ba <sub>1-y</sub> Zr <sub>1-x</sub> In <sub>x</sub> O <sub>3-1/2x-y</sub> の精密構造解析	無機材料	北海道大学工学部 青木 芳尚
トリペプチド環状錯体を利用した各種ヘテロ環状金属イオン配列の磁気的相互作用の解明	金属錯体	お茶の水女子大学基幹研究院 三宅 亮介
高溶解性ねじれ型ペリレンジイミドの合成と有機太陽電池への応用	太陽電池	静岡大学工学部 藤本 圭佑
F2PyBTM安定発光性ラジカルの誘導体の開発	金属錯体	龍谷大学先端理工学部 服部 陽平
ナノサイズ希土類発光バイオマーカーの新規合成と農作物中への吸収測定	太陽電池	名城大学理工学部 西山 桂
免疫調節活性を持つ複合脂質・糖質分子の構造解析	800NMR 溶液	慶應義塾大学理工学部 藤本ゆかり
層状水酸化物中に含まれる電子周りの局所構造解析	E680	東京工業大学元素戦略研究センター 北野 政明
GaSe 終端 Ge(111) 表面の電子状態測定	ARUPS	北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科 高村由起子
高濃度変性剤中の蛋白質残存構造の解析	800NMR 溶液	東京大学大学院理学系研究科 桑島 邦博
ヒドリドイオン導電性水素化合物の安定性評価	無機材料	東京工業大学物質理工学院 松井 直喜
原子・分子クラスターの電子軌道可視化法の開発	装置開発	東京工業大学理学院 山崎 優一
BaTaO <sub>2</sub> N 粉末光触媒の活性とフェルミレベルの相関の検討	ARUPS	信州大学先鋭材料研究所 久富 隆史
PDMS 製マイクロ流路の作成	装置開発	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 山下 翔平
化学酵素合成法によるポリユビキチン鎖の調製 [公開猶予中]	有機合成	名古屋市立大学大学院薬学研究所 佐藤 匡史
固体NMRを用いたPrionフラグメントと脂質膜の相互作用解析	600NMR 固体	国立感染症研究所 谷生 道一

マイクロ波合成グラフェン類の構造・物性解析	機器センター 長協力研究	京都大学化学研究所	高谷 光
ヘテロ原子を含む微量化合物の結晶スポンジ法による構造決定 無水有機プロトン伝導体コハク酸イミダゾリウムの結晶破碎による構造転移消失挙動の研究	スポンジ法 オペラント	University of Hawaii at Hilo 東京大学物性研究所	Shugeng Cao 出倉 駿

## (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の機能解析	iTC200	日本大学生物資源科学部	高野 英晃
金属イオン結合により制御される酵素の結合と安定性の熱力学的解析	VP-DSC iTC200 円二色性	京都府立大学大学院生命環境科学研究所	織田 昌幸
3元系フッ化物における充放電に伴う磁性変化の解明	MS-7	京都大学先端イノベーション拠点施設	高見 剛
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
磁性酸化物の磁気物性向上とその機構の解明	MS-7 XL-7	物質・材料研究機構	林 兼輔
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	MS-7 XL-7 ピコ秒	名古屋大学大学院工学研究科	浦田 隆広
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
単一分子性ディラック電子系 $[M(dmdt)_2]$ に関する研究	MS-7 XL-7	日本大学文理学部	周 彪
外場応答性金属錯体の構造、磁性、熱特性の解明	CCD-1 CCD-2 微小結晶 粉末 X 線 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工学研究科	濱中 泰
非共有結合性相互作用を用いた金属錯体の配位構造制御と磁気的性質	CCD-1 CCD-2 微小結晶 粉末 X 線 EMX E500 MS-7 XL-7	金沢大学国際基幹教育院	三橋 了爾
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	豊橋技術科学大学応用化学・生命工学系	藤沢 郁英
キノン骨格を有するジチアシクロペンテントライマーの合成と結晶中での分子配列および電子状態の解明	CCD-1 CCD-2 微小結晶 EMX E500 MS-7 XL-7	静岡大学学術院工学領域	植田 一正
ビスマス置換マンガン窒化物の物性解明 金属酵素反応中間体の電子構造と磁気的性質の研究	XL-7 EMX E500 紫外可視近 赤外 600 溶液	静岡大学学術院工学領域 奈良女子大学研究院自然科学系	川口 昂彦 藤井 浩

遷移金属が置換した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
多元素金属クラスター酵素 HCP の反応休止状態、基質結合状態、反応中間体の EPR スペクトル測定	E500	埼玉大学大学院理工学研究科	藤城 貴史
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
三元系合金母材を用いた内部補強 Nb <sub>3</sub> Sn 超伝導線材の高磁場特性における第三元素添加効果	MS-7 XL-7	核融合科学研究所	菱沼 良光
Sn ナノ細線の電気伝導特性、CoNiGa ナノ粒子の磁気的性質の解明	MS-7 XL-7	岐阜大学工学部	嶋 睦宏
希土類金属ドーブ型ビスマス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
超耐熱性酵素の熱変性に関する研究	VP-DSC iTC200 MALDI-TOF 円二色性	信州大学工学部	天野 良彦
量子スピン液体状態を示す新規磁性物質の合成と物性評価	CCD-1 微小結晶 MS-7 XL-7 熱解析	成蹊大学理工学部	藤田 渉
半導体/超伝導体複合材料の磁気構造の解明	MS-7 XL-7	神戸大学大学院理学研究科	内野 隆司
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
機能性材料の構造および電子物性評価	微小結晶 粉末 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
DNA 構造を利用したフラビニー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 VP-DSC iTC200	大分大学全学研究推進機構	岡 芳美
有機-無機複合磁性体の物性評価	EMX E500 MS-7 XL-7	広島大学大学院理学研究科	井上 克也
含窒素 $\pi$ 拡張キノイド型ドナー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
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	愛知学院大学薬学部	小川 法子
異種金属多核錯体の集積構造と磁気物性の評価	CCD-1 CCD-2 微小結晶 MS-7 XL-7	岐阜大学工学部	植村 一広
KI 結晶中に生成したサイズの異なる AgI ナノ結晶の光学応答の研究	低 SEM 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



有機 $\pi$ 電子系化合物を成分とする有機電子材料の構造と物性	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
気体試料・有機ラジカル試料の ESR スペクトル測定	EMX E500 MS-7 XL-7	産業技術総合研究所	松本 信洋
有機ラジカル量子磁性体の低温構造と磁気状態の解明	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
金属錯体の光励起多重項状態の時間分解 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
Tsai 型正二十面体準結晶相の熱力学的安定性と電子物性	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
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	東京都立大学理学部	兒玉 健
$^{183}\text{W}$ NMR による樹脂製造用のタングステン錯体触媒系の分析 亜鉛コバルトフェライトの薄膜およびナノ粒子における強磁性に関する研究	600 溶液 E500 MS-7 XL-7	岡山大学大学院自然科学研究科 名古屋工業大学先進セラミック ス研究センター	押木 俊之 安達 信泰
多相ナノ構造薄膜におけるマルチフェロイック特性の評価	MS-7 XL-7	静岡大学工学部	中嶋 聖介
アドバンスド ESR 法による米糠による環境計測	微小結晶 E680 EMX E500	新潟大学研究推進機構	古川 貢
有機伝導体 TMTTF 系の構造と物性研究	EMX E500 MS-7 XL-7	名古屋大学大学院工学研究科	澤 博
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	EMX E500 MS-7 XL-7	茨城大学大学院理工学研究科	西川 浩之
開裂活性分子の加熱によるスピン生成 SQUID ならびに ESR を用いた $\text{MAu}_{24}$ クラスターの電子スピン分布研究	EMX EMX E500 MS-7 XL-7	大阪大学大学院工学研究科 東京大学大学院理学研究科	焼山 佑美 高野慎二郎
新しいメソ多孔性炭素の開発	SEM 低 SEM TEM 熱解析 蛍光分光 紫外可視近 赤外 ピコ秒	愛知教育大学教育学部	日野 和之
モリブデン硫化物担持グラフェンオキシドの化学状態の解明	SEM TEM	関西学院大学理工学部	橋本 秀樹
分子の集合化によって生じる絡み合い構造の構築とその機能化	iTC200 蛍光分光	福井大学学術研究院	徳永 雄次
アントシアニンによる青色発光の化学機構の解明	円二色性	名古屋大学大学院情報学研究科	吉田 久美

任意波形発振器を用いた、スピンダイナミクスのコヒーレント制御法の開発	E680 蛍光分光 紫外可視近 赤外	埼玉大学大学院理工学研究科	長嶋 宏樹
銅金属配位に由来するペプチド構造変化の電子スピン測定による評価	E680 E500	京都大学大学院福井謙一研究センター	加藤 立久
大環状有機分子ラジカルイオンの電子スピン状態決定	E680 E500	京都大学化学研究所	加藤 立久
鉄酸化物の酸素発生触媒活性に対する酸素欠陥濃度依存性	ラマン	山梨大学クリーンエネルギー研究センター	高嶋 敏宏
構造制御が施されたセラミックス粒子の電子状態および磁気特性の解明	E500 MS-7 XL-7	熊本大学大学院先端科学研究部	松田 元秀
アラニン線量計と SQUID を用いた新規線量測定法の開発	MS-7	産業技術総合研究所	山口 英俊
磁性イオンの無い BEDT-TSF 塩の伝導面内相互作用の研究	ラマン	愛媛大学大学院理工学研究科	山本 貴
セラミックス変形治具を用いた高速摩擦実験による ESR 信号特性変化に関する研究	EMX E500	東北大学大学院理学研究科	田中 桐葉
酸素発生反応のための酸化イリジウム電極触媒の構造解析	ラマン	北九州市立大学国際環境工学部	天野 史章
カーボンナノチューブの自発的集積化によるマクロスコピックパターンニングの研究	SEM 低 SEM ラマン	早稲田大学理工学術院	松田 佑
複合酸化物触媒の表面構造解析	TEM 熱解析 ラマン	名古屋大学大学院理学研究科	邨次 智
D- アミノ酸酸化酵素とカンナビノイドの相互作用のピコ秒レーザー蛍光分析	ピコ秒	名城大学薬学部	金田 典雄
ナトリウムイオン伝導性固体電解質の物性評価	オペランド XL-7 熱解析	大阪工業大学工学部	平郡 諭
ニオブズサンプルの臨界磁場測定	MS-7 XL-7 低 SEM	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設	許斐 太郎
ベイボクロミズム特性を示すロジウム二核錯体の構造解析と熱分析	CCD-1 CCD-2 微小結晶 オペランド 熱解析	島根大学総合理工学部	矢野なつみ
「公開猶予中」	EMX 600 溶液		
カプトムシ外骨格の観察及び元素分析	低 SEM	基礎生物学研究所	森田 慎一
Keggin 型ポリ金属酸コバルト (II) 錯体の遅い磁気緩和挙動の解明	XL-7 MS-7	日本大学文理学部	石崎 聡晴
光電変換材料の励起状態ダイナミクス研究	E680 蛍光分光 ピコ秒	大阪市立大学理学部	松岡 秀人
ヘテロ構造半導体ナノ結晶における界面構造が及ぼすキャリアダイナミクスの調査	TEM	関西学院大学理工学部	江口 大地
カーボンドットの構造と発光特性の評価	TEM ピコ秒	早稲田大学	井村 考平
Fe <sub>39</sub> Co <sub>49</sub> Cr <sub>9</sub> Ni <sub>2</sub> 合金における低熱膨張特性発現機構の解明	XL-7	新報国製鉄(株)	藤井 啓道
新規鉄二価中性錯体結晶が示す光誘起ダブルプロトン移動の観測	微小結晶 MS-7	九州大学先端物質化学研究所	中西 匠
遠赤外分光法によるアミロイド線維の構造解析	FT	東京理科大学総合研究院赤外自由電子レーザー研究センター	川崎 平康
Interaction of Protein with Polymers	iTC200	北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	Robin Rajan
組織粉碎溶液が発する自家蛍光機序解明に関する蛍光分析の試み	蛍光分光	長岡技術科学大学院工学研究科	小松 啓志
高原子価金属ニトロシル錯体の構築	EMX E500 600 溶液	名古屋工業大学大学院未来材料創成工学専攻	小澤 智宏
生体適合性ナノ粒子とウイルスの相互作用解析	iTC200	岐阜薬科大学薬学部	田原 耕平
温度可変 X 線回折法を用いたホイスラー型熱電変換材料の結晶性評価	オペランド	名古屋工業大学大学院工学研究科	宮崎 秀俊

ポルフィリノイド多量体を利用した新規磁性材料の合成と物性の解明	EMX E500 MS-7 XL-7	島根大学大学院自然科学研究科	池上 崇久
主鎖改変型ペプチドの剛直性評価	E680 EMX E500	東京大学大学院工学系研究科	森本 淳平
複合機能的鉄錯体の凍結相と光誘起相の極低温構造解析 乾眠機構の解明を基軸とした生命の極限環境適応戦略の探究 光合成生物とその色素の吸光・蛍光測定	微小結晶 円二色性 蛍光分光 紫外可視近 赤外	神戸大学大学院理学研究科 生命創成探究センター アストロバイオロジーセンター	高橋 一志 田中 冨 滝澤 謙二
ヘム-カルコゲナート錯体のスピン状態に関する比較研究	MS-7	名古屋市立大学大学院薬学研究科	樋口 恒彦
窒素サーファクタント効果により作製した多層 FeCo 合金超薄膜の磁気特性	XMCD	電気通信大学大学院情報理工学 研究科	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
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	マスクレス 3次元	京都府立大学大学院生命環境科 学研究科	沼田 宗典
無機系キラル結晶微細デバイスの作製	マスクレス	大阪府立大学大学院工学研究科	戸川 欣彦
マイクロチャンバーを利用した細胞融合系の確立	マスクレス	基礎生物学研究所	坪内 知美
フラーレン誘導体 LB 薄膜の表面観察と評価	3次元	愛知教育大学教育学部	日野 和之
神経細胞ネットワーク機能超解像解析装置の開発	マスクレス	(株) NANORUS	宇理須恒雄
がん細胞特異的結合分子探索効率を向上させるマイクロ流路デバイスの開発	マスクレス	豊田工業高等専門学校	神永 真帆

### (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。2020年度は3次元2件、ESR EMX 2件、MALDI-TOF 1件、蛍光分光1件、紫外可視近赤外1件、低SEM 1件、微小結晶2件、無機材料1件が採択された。業種別内訳は大企業9件・その他1件であった。

表3 2020年度（令和2年度）利用件数一覧（2020年4月～2021年3月）

	協力研究	施設利用	非公開利用
採択件数	35	93	10
実施件数	32	79	10
実施日数	1042	1085	50

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 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・量子コンピュータの開発を目指す。

## 5-6 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10年間のプロジェクトとして開始し、2021年度に最終年度を迎える。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りポートに報告して以降の研究拠点の活動を概括する。

本プロジェクトでは、触媒・電池分野の中でも希少元素低減または希少元素フリーの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、2020年3月4日に予定していた第16回公開シンポジウムが新型コロナウイルス感染拡大の影響で延期になり、2021年11月10日に第16回、2021年3月10日に第17回をオンライン形式で開催し、それぞれ200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、17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、研究の方向付けのために毎年合宿形式で実施している「電子論検討会」は新型コロナウイルス感染拡大の影響で開催を延期しているが、「触媒・電子論合同検討会」「電池・電子論合同検討会」において、研究交流を深める努力を行っている。これらの検討会では、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、最終年度における研究の方向性、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ている。

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、近年では実験と理論の協働は成功しており、実験と理論の共著の論文が多く出ている。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目的を果たせてきていると考えており、この分野における理論・計算科学の役割の重要性がさらに高まっていくものと考えている。

## 5-7 分子科学国際共同研究拠点の形成

分子科学研究所は、創設以来、多くの国際共同事業を主催するとともに、外国人客員教授を始めとする優れた外国人研究者を計画的に受入れて国際共同研究を推進し、国際的に開かれた研究所として内外から高い評価を得ている。近年、科学研究のグローバル化が急速に進むとともに、インドや東南アジアを含む広い意味での東アジア地区の科学研究も欧米追随ばかりでなく活性化しており、分子科学研究所においても、21世紀にふさわしい新たな国際共同研究拠点を構築していくことが必要となっている。このような状況の中、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）。

### 5-7-1 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（Institute for Molecular Science International Internship Program）事業や共同研究を支援。一部の事業は新型コロナウイルスの感染拡大により中止や延期に至っている。

#### (2) 自然科学研究機構「ネットワーク型研究加速事業」

自然科学分野において、国内外の大学や研究機関との幅広い連携による共同研究を推進し、異分野連携による新たな学問分野の開拓や、自然現象シミュレーションや新技術の開発を生かした創造的研究活動を推進する、国際的にも評価される機関間連携ネットワークを構築し、分野融合型や国際的共同利用・共同研究拠点を形成することを目的とする（5-9参照）。

#### 【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 (Institute for Molecular Science International Internship Program in Asia) 事業、共同研究等を支援。一部の事業は新型コロナウイルスの感染拡大により中止または延期。

### (3) 総合研究大学院大学

#### 【I. 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 事業を支援する予定であったが、新型コロナウイルスの感染拡大の影響で中止。

### (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。

## 5-7-2 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名あるいは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年度は51名の受入れを行えるまでに順調に拡大している。2020年度は新型コロナウイルスの感染拡大により、25名にとどまっている。

	フィンランド	ドイツ	オランダ	アメリカ	タイ	マレーシア	台湾	韓国	中国	スリランカ	合計
国際交流提携先からの受入	5	0	0	0	6	2	2	0	0	0	15
その他共同研究による受入	0	2	1	1	0	0	0	4	1	1	10
合計	5	4	1	1	6	2	2	4	1	1	25

2020.1-2021.3

### 5-7-3 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、中国のアモイ大学、インドのIIT Kanpur、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おり、分子研・総研大の研究力強化と国際化に寄与している。今後はダブルディグリー制度などとの組み合わせによって、さらに魅力的な制度となるよう改良していく予定である。この一年の実績は上記IMS-IIP事業の実績に含まれている。

### 5-7-4 短期外国人研究者招へいプログラム

これまで分子科学研究所では、国内の共同利用研究者と同様、1、2週間程度の滞在（年通算では1ヶ月程度になるケースもある）で施設利用研究を実施する枠組みがなかった。そのため、短期外国人研究者招へいプログラムを設定し、中部国際空港を起点として、国内研究者と同様、分子科学研究所に滞在中の滞在費を支援することにした。海外の所属機関と中部国際空港の間の旅費については原則、支給しないが、財源によっては支給が前提のものもあるため、LCC等の利用によって国内旅費より低額になるケースなどで例外的に支給することもある。現在のところ、施設利用のすべてにおいて、直接、海外からの申請を認めているわけではなく、UVSOR施設のように国際的に見て競争力のある設備を利用した研究に限られているため、欧米やアジアでも中国、韓国、台湾のような科学技術が進んでいる国の研究者を対象としている。なお、研究者に随行して共同研究に参加する院生はIMS-IIP事業の短期分として中長期分に合算してカウントすることにしていく。

一方、国際協力研究については、海外からの直接申請ではなく、研究所内の教員による国際共同研究の提案を受け、所内委員による審査を経て①海外の教授、准教授クラスの研究者の短期招へい、②若手外国人研究者の短期招へいなどが「分子科学国際共同研究拠点の形成」の主要プログラムとして実施されていた。その実績は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（協力研究的であり、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、2019年44件と推移しており、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。2020年度は新型コロナウイルスの感染拡大により、その件数は30件にとどまっている。

国際共同研究

30件（2019.10-2020.9 実施状況）

代表者	研究課題名	相手国
飯野 亮太	Single-Molecule FRET Analysis of Processive Cellulase	アメリカ
飯野 亮太	Single-Molecule Analysis of Unconventional Kinesin	アメリカ
江原 正博	DFT/TD-DFT Investigation on the Photoinduced Electron Transfer of Diruthenium and Viologen Complexes	タイ
江原 正博	Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst	タイ
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	フランス, イギリス, ドイツ
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, イギリス, ドイツ, オーストリア
岡本 裕巳	Observation and Manipulation of Optical Characteristics of Gold Nanoparticle Assemblies	ポーランド
岡本 裕巳	Near-Field Optical Characteristics of Chiral Plasmonic Nanostructures	イギリス
岡本 裕巳	Plasmon Resonances of Metal Nanoparticles	韓国
奥村 久士	レプリカ置換法の効率のレプリカ数依存性	タイ
加藤 晃一	超高磁場 NMR を活用したタンパク質翻訳後修飾の研究	韓国
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	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	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
平等 拓範	小型集積レーザーコンソーシアムに関する打ち合わせ、情報収集。国際共同研究打ち合わせ。	フランス
平等 拓範	小型集積レーザーコンソーシアムに関するセミナー	ドイツ
田中 清尚	ARPES Study of Electronic Compressibility in Hole Doped Perovskite Iridates	中国
山本 浩史	有機超伝導デバイスの断面 STM 測定	台湾
山本 浩史	光触媒に関する研究	中国
山本 浩史	キラル分子を用いたスピン偏極	イスラエル
山本 浩史	キラル有機伝導体におけるスピントロニクス	フランス
山本 浩史	分子モーターを用いた有機スピントロニクス	タイ
松井 文彦	装置開発打ち合わせ	ドイツ
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	Needle-Shaped Hydroxyapatite Nanoparticles as Skin Penetration Enhancer	タイ
UVSOR 施設利用	Operando Microscopic Analysis at the Graphene-Metal Interface	ドイツ, 台湾
UVSOR 施設利用	Characterizing Ultrastructural Features in Tissues of Human Patients with Storage Diseases	フィンランド

UVSOR 施設利用	Molecular Level Chemical and Structural Characterization of Individual Aerosol Particles: Organosulfates and Nano-Plastics	フィンランド
UVSOR 施設利用	Dependency of Micelle Formation in Aqueous Environmental Model Systems on Acidity and the Presence of Co-Solutes	フィンランド
UVSOR 施設利用	Penetration of Drug-Loaded Nanocarriers and Drug Release in Seine-Protease-Treated Skin	ドイツ

## 5-8 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。

2020年度は前年度の活動に引き続き、以下の活動を行った。

- ・ 研究所の研究力強化のための評価・提言を戴いた。

研究顧問

2020年5月13日-14日（オンラインで実施）

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）

- ・ 国際インターンシップ生の受入れを継続して行った（MOUに基づくものはフィンランド5名、タイ3名、台湾1名、その他のものはドイツ2名、中国1名、韓国4名、アメリカ1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継続して行った。
- ・ アジアとの連携強化のため、例年、MOU締結大学等での視察・打合せ・研究会、および先方からの受入れを行っているが、2020年度はCOVID-19感染拡大の影響で実施実績はなかった。

## 5-9 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。この他、本事業に関わる研究会やセミナーを2018年度4件、2019年度7件、2020年度6件開催した（2020年度はほぼ全てがオンライン開催となった）。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（2020年度はCOVID-19感染拡大のためほぼ実施が不可能となった）。

## 5-10 分子科学研究所所長招聘会議

分子科学研究所 所長招聘会議は、我が国の学術の姿、研究力強化、大学及び共同研究機関の変容と変革、大学院教育戦略・国際化、科学政策・評価などについて産官学の意見・考えを基に多角的統括的に討議することを目的に、2001年からはほぼ1年に1回の頻度で開催されている。日本学術会議 化学委員会、日本化学会 戦略企画委員会と分子科学研究所の共同主催として開催され、日本学術会議 化学委員会の主要活動の一つに位置づけられている。分子科学研究所は運営事務局として参画する。

ここ数年は初夏の頃に本会議を開催しており、2020年度は、「光り輝く博士課程卒業生」というタイトルで、わが国の学術および産業界での研究力推進において博士課程修了者が果たす役割について議論を行った。日本学術会議 化学委員会でも世界におけるわが国の研究力低下の問題に対する解決策を検討される中、本会議では6名の講師を招き、企業で活躍する博士の存在意義を実績データ・事例の紹介を基に検討し、その重要性を再認識した。さらに、国際的観点から博士の重要性、国力・研究力の維持向上等、技術立国日本の近未来への指針について議論した。

なお、2020年度は COVID-19 感染の深刻な状況に鑑み、WEB による公開シンポジウムとして開催したところ、全国から 103 名の参加者があった。

開催テーマ：「光り輝く博士課程卒業生」

開催日時：2020年6月3日 13時～17時

プログラム：

挨拶 川合真紀（分子科学研究所 所長）

報告 加藤昌子（日本学術会議化学委員会 委員長，北海道大学 教授）

講演

趣旨説明

「博士課程の目指すこと・その評価、中国の2020年改革に学ぶこと」

中村栄一（東京大学 特別教授）

「若手研究者の活性化に向けて：CSTIの施策を中心に」

橋本和仁（物質・材料研究機構 理事長）

「博士課程卒業生への期待」

小林喜光（三菱ケミカルホールディングス 会長）

「データからみる日本の博士人材の現状と課題」

磯谷桂介（文部科学省科学技術・学術政策研究所（NISTEP）所長）

「企業での経験と今の自分」

草本哲郎（分子科学研究所 准教授）

「化学分野での博士の活躍状況、博士課程で学んで欲しいこと」

長瀬公一（東レ経営研究所 特別研究員）

総合討論

共催：日本学術会議 化学委員会，日本化学会 戦略企画委員会，分子科学研究所

運営事務局：分子科学研究所（岡本裕巳 教授）