



分子研リポート2020

現状・評価・将来計画

「分子研リポート 2020」 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.....	10
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.....	11
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 現 員.....	30
2-8-3 人事異動状況.....	31
2-9 財 政.....	33
2-9-1 財政状況.....	33
2-10 岡崎共通施設.....	37
2-10-1 岡崎情報図書館.....	37
2-10-2 岡崎コンファレンスセンター.....	37
2-10-3 岡崎共同利用研究者宿泊施設.....	37
2-10-4 職員会館.....	37
2-11 知的財産.....	38
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 2020 年度の実施状況.....	40
3-1-3 共同利用研究実施件数一覧.....	50
3-1-4 分子研研究会プログラム.....	51
3-2 国際交流と国際共同研究.....	54
3-2-1 外国人客員部門等及び国際交流.....	54
3-2-2 岡崎コンファレンス.....	56
3-2-3 日韓共同研究.....	56

3-3	大学院教育	58
3-3-1	特別共同利用研究員	58
3-3-2	総合研究大学院大学二専攻	59
3-3-3	オープンキャンパス	63
3-3-4	体験入学	64
3-3-5	総研大アジア冬の学校	65
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	65
3-3-7	統合生命科学教育コース群	66
3-4	その他	67
3-4-1	分子研コロキウム	67
4	研究支援等	69
4-1	技術課	70
4-1-1	技術研究会	70
4-1-2	技術研修	73
4-1-3	人事	74
4-1-4	受賞	74
4-2	安全衛生管理室	75
4-3	社会との交流	76
4-3-1	一般公開	76
4-3-2	分子科学フォーラム	76
4-3-3	市民向けシンポジウム	77
4-3-4	見学者受け入れ	78
4-3-5	その他	78
4-4	理科教育への協力	80
4-4-1	スーパーサイエンスハイスクール	80
4-4-2	コスモサイエンスコース	80
4-4-3	あいち科学技術教育推進協議会	81
4-4-4	国研セミナー	81
4-4-5	中学校での出前授業	82
4-4-6	職場体験学習	82
4-4-7	その他	82
4-5	情報発信	84
5	各種事業	91
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	93
5-2	新分野創成センター（自然科学研究機構）	96
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）	97
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）	98
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）	110
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）	111

5-7	分子科学国際共同研究拠点の形成	112
5-7-1	国際共同研究事業の財源	112
5-7-2	分子研国際インターンシッププログラム (IMS-IIP)	113
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)	114
5-7-4	短期外国人研究者招へいプログラム	114
5-8	研究大学強化促進事業 (文部科学省)	117
5-9	ネットワーク型研究加速事業 (自然科学研究機構)	118
5-10	分子科学研究所所長招聘会議	119
6.	研究活動の現状	121
6-1	論文発表状況	122
6-2	メゾスコピック計測研究センター	123
	織細計測研究部門	125
6-3	協奏分子システム研究センター	128
	階層分子システム解析研究部門	129
	機能分子システム創成研究部門	139
6-4	理論・計算分子科学研究領域	144
	理論分子科学第一研究部門	144
	理論分子科学第二研究部門	151
	計算分子科学研究部門	154
	理論・計算分子科学研究部門	169
6-5	光分子科学研究領域	171
	光分子科学第二研究部門	171
	光分子科学第三研究部門	176
	光源加速器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)	183
	電子ビーム制御研究部門 (極端紫外光研究施設)	186
	光物性測定器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)	193
	光化学測定器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)	196
6-6	物質分子科学研究領域	198
	電子構造研究部門	198
	分子機能研究部門	206
6-7	生命・錯体分子科学研究領域	216
	生体分子機能研究部門	216
	錯体触媒研究部門	232
	錯体物性研究部門	239
6-8	特別研究部門	246
6-9	社会連携研究部門	255
6-10	研究施設等	262
	機器センター	262
	計算科学研究センター (ネットワーク担当)	267
	技術課及び安全衛生管理室	268

7. 点検評価と課題	271
7-1 大学共同利用機関の教育研究等の検証	272
7-2 国際諮問委員会の答申レポート	277
8. 研究施設の現状と将来計画	287
8-1 極端紫外光研究施設 (UVSOR)	288
8-2 機器センター	292
8-3 装置開発室	295
8-4 計算科学研究センター	296
8-5 生命創成探究センター	298
9. 資料	301
9-1 歴代所長	301
9-2 評議員 (1976 ~ 1981)	302
9-3 評議員 (1981 ~ 2004)	303
9-4 運営顧問 (2004 ~)	307
9-5 外国人評議員 (1976 ~ 2004)	308
9-6 外国人運営顧問 (2004 ~)	309
9-7 運営に関する委員会委員 (1975 ~ 1981)	311
9-8 運営協議員 (1981 ~ 2004)	312
9-9 運営会議委員 (2004 ~)	316
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	319
9-11 自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則	320
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	323
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 ~ 33 年度)	324
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 ~ 33 年度)	326
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 3 年度)	331
9-16 大学共同利用機関の教育研究等の検証 (全文)	342

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、2020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)「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。後者では、アジア諸国(特にタイ、マレーシア)の若手研究者を1~6ヶ月招聘し、研究室での研究体験と成果発表による人材育成を行なっています。

分子研の人の流れは常に活発であり、2020年度も多くの人事異動がありました。4月1日付で平 義隆准教授(元産業技術総合研究所主任研究員)、倉持 光准教授(元理化学研究所光量子工学研究領域研究員)、瀬川泰知准教授(元名古屋大学大学院理学研究科特任准教授)、12月1日付で岡崎圭一准教授(元若手独立フェロー)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。同じく4月1日付で木村真一教授(大阪大学大学院生命機能研究科教授)が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。また、6月1日付で、機器センターに湊 丈俊主任研究員が着任されました。一方、昨年度3月31日付で生命・錯体分子科学研究領域の栗原 顕輔特任准教授が転出されました。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、2020年5月13日-14日にオンラインにて全ての研究室主宰者から提示される2020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年度はCOVID-19が猛威をふるい、国内外で人の移動の厳しく制限された1年でした。その為、分子科学研究所の教育研究は創設以来類を見ない制約の中での活動を強いられることになりました。4月13日から5月末までは、総合研究大学院大学の決定を受けて、学生は全て自宅待機となり、研究活動も遠隔での実施となりました。国際交流活動に対する影響は大きく、インターンシップなど人事交流を基本とする活動は大きく制限されました。一方その中で、研究会やシンポジウムなどをオンラインで開催することで、活発な情報交換が実現できたこと、ほぼ全ての会議がオンラインで開催されることになり、これまで進捗が遅れていたデジタルツールの利用が急激に活発となりました。また、在宅勤務が推奨され、事務作業にもデジタル化が加速されるなどのメリットも認められました。幸い、岡崎地区では深刻な感染状況には陥ることなく、比較的穏やかにこの1年を過ごすことができました。今後もしばらく続くであろう状況に鑑み、研究所の職員及び学生の安全や感染予防を第一に考えながらも活発な教育研究活動に励んでまいります。

今年度のレポートは各種評価・報告への利用を目的として記載項目や表の見せ方を整理しました。中期計画単位でまとめること、構成員全体が掌握できるようにしたことなどが主な変更点で、年度単位の報告書となります。本号は移行期に伴い、一部の記載内容について、2020年1月～2021年3月の活動状況に基づいたものとなっております。

2021年3月
自然科学研究機構
分子科学研究所 所長
川合 眞紀

2. 分子科学研究所の概要

2-1 研究所の目的

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

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

2-2 沿革

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

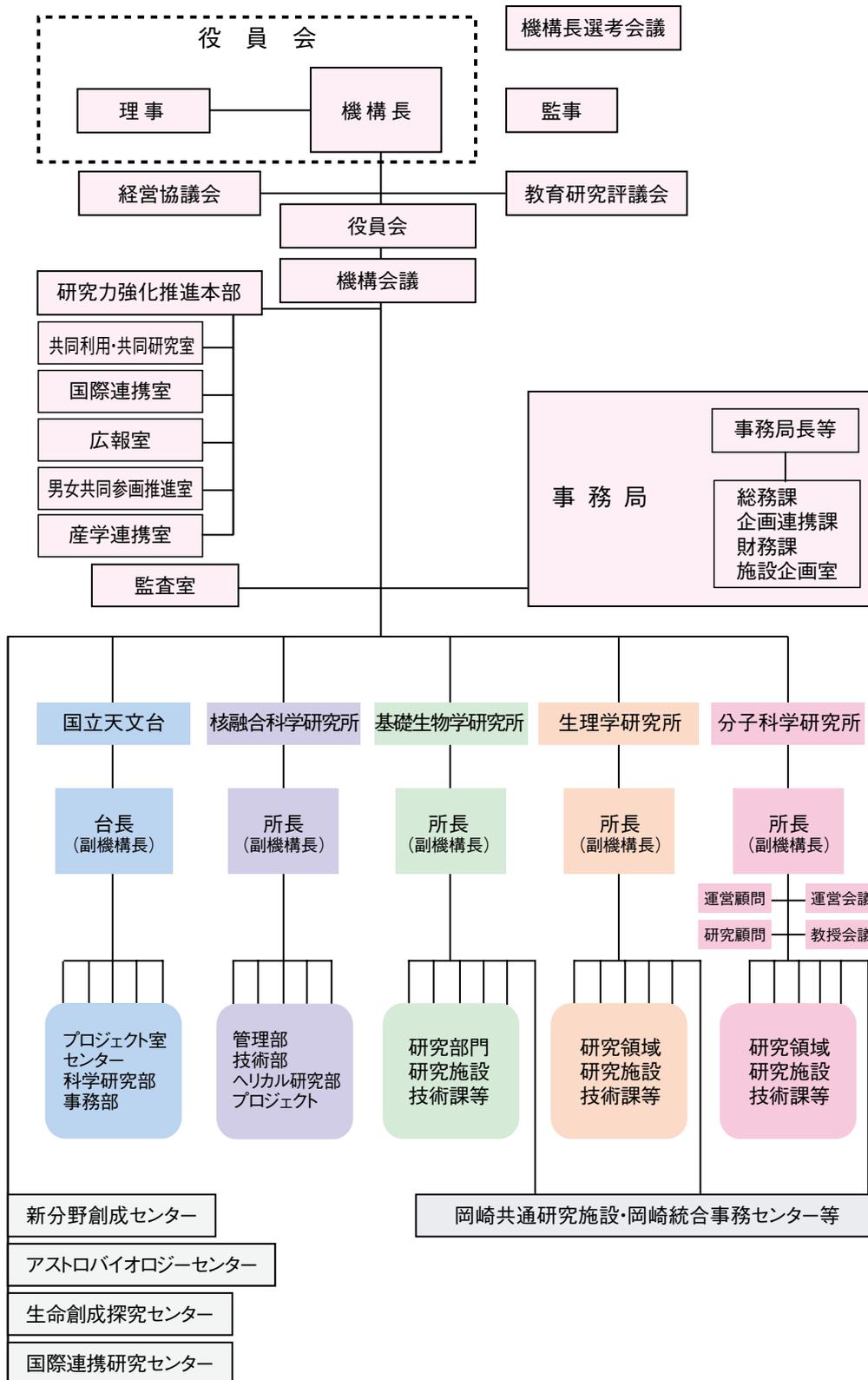
1965. 12.13 日本学術会議は、「分子科学研究所」(仮称)の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
1973. 10.31 学術審議会は、「分子科学研究所」(仮称)を緊急に設立することが適当である旨、文部大臣に報告した。
1974. 4.11 文部大臣裁定により、東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室(室長：井口洋夫前東京大学物性研究所教授、定員3名)及び分子科学研究所創設準備会議(座長：山下次郎前東京大学物性研究所長、学識経験者35人により構成)が設置された。
1974. 7. 6 分子科学研究所創設準備会議において、研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
1975. 4.22 国立学校設置法の一部を改正する法律(昭50年法律第27号)により「分子科学研究所」が創設され、初代所長に赤松秀雄前横浜国立大学工学部長が任命された。同時に、分子構造研究系(分子構造学第一研究部門、同第二研究部門)、電子構造研究系(基礎電子化学研究部門)、分子集団研究系(物性化学研究部門、分子集団研究部門)、機器センター、装置開発室、管理部(庶務課、会計課、施設課、技術課)が設置された。
1975. 12.22 外国人評議員の設置が制度化された。
1976. 5.10 理論研究系(分子基礎理論第一研究部門、同第二研究部門)、関連領域研究系(関連分子科学研究部門)、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 関連領域研究系関連分子科学研究部門が廃止され、関連領域研究系(関連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。

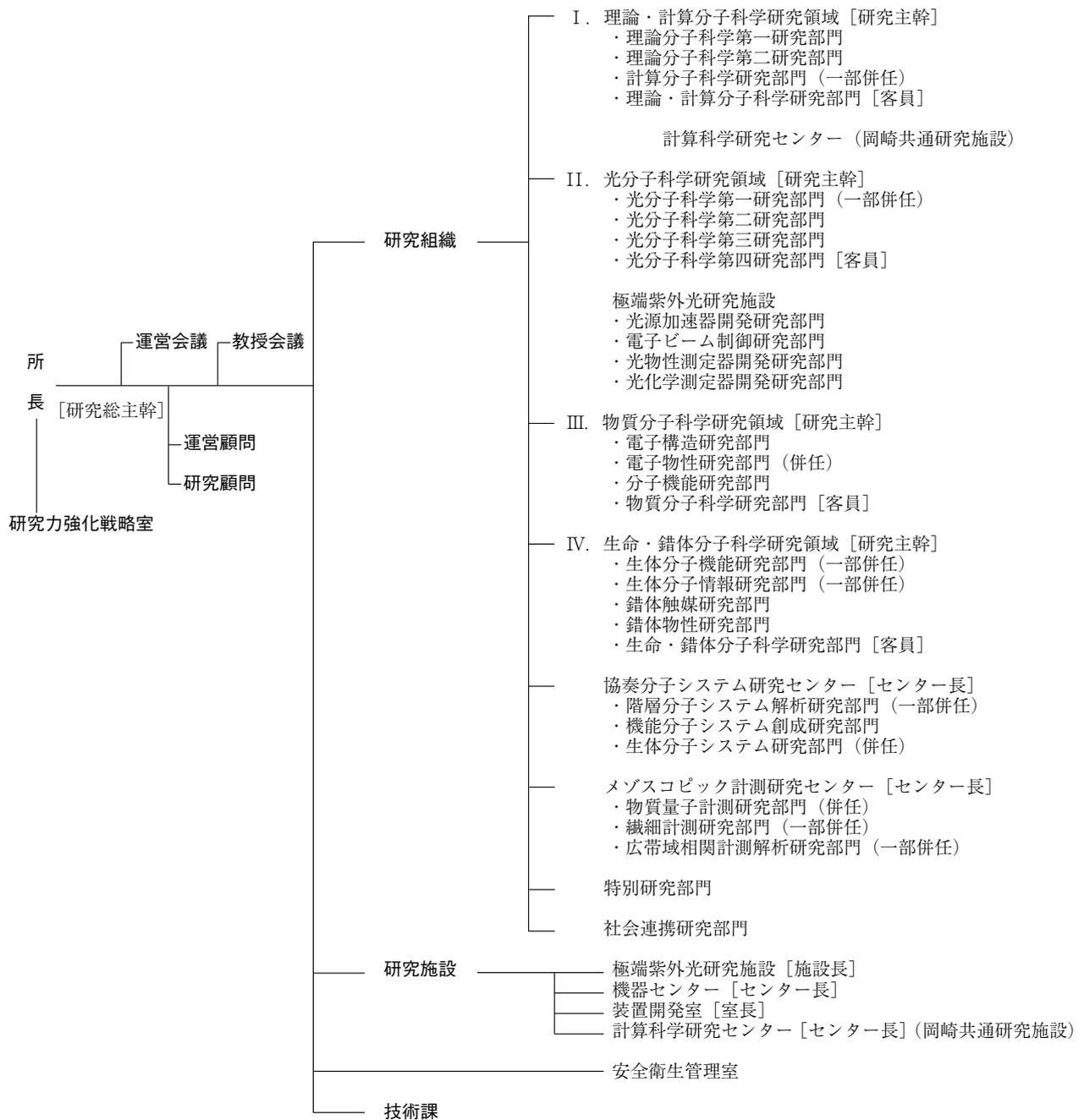
1979. 4. 1 分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され、管理局が総務部（庶務課、人事課、国際研究協力課）、経理部（主計課、経理課、建築課、設備課）、技術課に改組された。
1979. 11. 8 分子科学研究所創設披露式が挙行された。
1981. 4. 1 第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4.14 国立学校設置法の一部を改正する法律により、分子科学研究所と生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所、生理学研究所）は総合化され、岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され、管理局が岡崎国立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、先導分子科学研究部門が設置され、界面分子科学研究部門、分子クラスター研究部門が廃止された。極端紫外光実験施設が、極端紫外光研究施設に改組された。安全衛生管理室が設置された。
2004. 4. 1 第六代研究所長に中村宏樹分子科学研究所教授が任命された。
2005. 5.20 分子科学研究所創設30周年記念式典が挙行された。
2007. 4. 1 研究系及び錯体化学実験施設が廃止され、理論・計算分子科学研究領域 (理論分子科学第一研究部門、理論分子科学第二研究部門、計算分子科学研究部門、理論・計算分子科学研究部門)、光分子科学研究領域 (光分子科学第一研究部門、光分子科学第二研究部門、光分子科学第三研究部門、光分子科学第四研究部門)、物質分子科学研究領域 (電子構造研究部門、電子物性研究部門、分子機能研究部門、物質分子科学研究部門)、生命・錯体分子科学研究領域 (生体分子機能研究部門、生体分子情報研究部門、錯体触媒研究部門、錯体物性研究部門、生命・錯体分子科学研究部門) の4つの研究領域が設置された。極端紫外光科学研究施設に、光加速器開発研究部門、電子ビーム制御研究部門、光物性測定器開発研究部門、光化学測定器開発研究部門が設置 (名称変更) された。分子スケールナノサイエンスセンターに、ナノ分子科学研究部門、ナノ計測研究部門、ナノ構造研究部門が設置され、分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門、ナノ触媒・生命分子素子研究部門、ナノ光計測研究部門が廃止された。分子制御レーザー開発研究センターに、先端レーザー開発研究部門、超高速コヒーレント制御研究部門、極限精密光計測研究部門が設置された。機器センターが新たに設置された。広報室及び史料編纂室が設置された。
2010. 3.30 実験棟改修第1期工事 (耐震及び全面改修) が竣工した。
2010. 4. 1 第七代研究所長に大峯巖京都大学福井謙一記念研究センターリサーチリーダーが任命された。
2011. 3.30 実験棟改修第2期工事 (耐震及び全面改修) が竣工した。
2013. 4. 1 分子スケールナノサイエンスセンターが廃止され、協奏分子システム研究センター (階層分子システム解析研究部門、機能分子システム創成研究部門、生体分子システム研究部門) が設置された。
2013. 10. 1 広報室及び史料編纂室が廃止され、研究力強化戦略室が設置された。
2013. 12. 6 極端紫外光研究施設創設30周年記念式典が挙行された。
2016. 4. 1 第八代研究所長に川合眞紀東京大学大学院新領域創成科学研究科教授、理化学研究所理事長特別補佐が任命された。
2017. 4. 1 分子制御レーザー開発研究センターが廃止され、メゾスコピック計測研究センター (物質量子計測研究部門、繊細計測研究部門、広帯域相関計測解析研究部門) が設置された。
2018. 4. 1 岡崎統合バイオサイエンスセンターが廃止され、生命創成探究センターが設置された。特別研究部門が設置された。
2019. 4. 1 社会連携研究部門が設置された。
2020. 3.31 共同研究棟 A 棟、共同研究棟 B 棟及び共同研究棟 C 棟の改修工事が竣工した。
2021. 3.10 共同研究棟 D 棟の改修工事が竣工した。

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（2020年度）

菊池 昇	株式会社豊田中央研究所代表取締役所長
長我部 信行	株式会社日立製作所ライフ事業統括本部企画本部長 兼 ヘルスケアビジネスユニットチーフエグゼクティブ
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（2020年度）

MICHL, Josef	米国コロラド大学ボルダー校教授
TANG, Ching Wan	香港科技大学教授

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（2020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 2020.4-2022.3）（◎：議長 ○：副議長）

秋吉 一成	京都大学大学院工学研究科教授
鹿野田 一司	東京大学大学院工学系研究科教授
忍久保 洋	名古屋大学大学院工学研究科教授
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
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
芳賀 正明	中央大学理工学部名誉教授
福井 賢一	大阪大学大学院基礎工学研究科教授
藤井 正明	東京工業大学科学技術創成研究院教授
○村越 敬	北海道大学理学研究院教授
◎秋山 修志	協奏分子システム研究センター教授
飯野 亮太	生命・錯体分子科学研究領域教授
石崎 章仁	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
江原 正博	理論・計算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2017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，1999年1月から法人化直前の2004年3月までに採用された助教（2003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（2020，2021年度）（○：部会長）

秋吉 一成	（京大院教授）	○飯野 亮太	（分子研教授）
鹿野田 一司	（東大院教授）	石崎 章仁	（分子研教授）
忍久保 洋	（名大院教授）	江原 正博	（分子研教授）
中井 浩巳	（早稲田大院教授）	解良 聡	（分子研教授）
福井 賢一	（阪大院教授）	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（2020，2021年度）（○：委員長）

石森 浩一郎	（北大院教授）	齊藤 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）
大内 幸雄	（東工大院教授）	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）
秋山 修志	（分子研教授）	杉本 敏樹	（分子研准教授）
○魚住 泰広	（分子研教授）		

2-4-6 学会等連絡会議

所長の要請に基づき学会その他の学術団体等との連絡、運営会議委員各候補者等の推薦等に関することについて、検討し、意見を述べる。所長が議長を務める。

学会等連絡会議構成員（2020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	（東工大院教授）	武次 徹也	（北大院教授）
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）
椋山 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から独立した会議体として独自の見識のもとに候補者を選出し、運営会議に提案しその審議結果に対し教授会議として了承するかどうかを審議する。また、研究教育職員の任用に際しては人事選考部会からの報告結果を審議し、教授会議としての可否の投票を行う。

2-4-8 主幹・施設長会議

主幹・施設長会議は、所長の諮問に応じて研究所の運営等の諸事項について審議し、所長を補佐する。所長が議長を務める。そこでの審議事項の大半は教授会議に提案され、審議の上、決定する。特任助教（分子科学研究所特別研究員）及びIMSフェロー等の選考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	2020.10.14 (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	2020.8.18, 2021.3.1
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	2020.5.25
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	2020.10.22
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	2020.6.22, 12.18 (メール審議)
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	2020.4.3, 6.5, 8.7, 10.2, 12.4, 2021.2.5
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		2020.4.3, 6.5, 7.3, 9.4, 11.6, 12.4, 2021.1.8, 2.5, 3.5

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。	研究総主幹，研究主幹，研究施設長，計算科学研究センター長，大学院委員会委員長	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機関等の各種委員会等

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	(定例) 2020.4.17, 5.19, 6.16, 7.21, 9.15, 10.20, 12.15, 2021.1.19, 2.16, 3.16 (臨時) 2020.4.9, 5.28, 8.6, 2021.1.7
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	2020.8.4
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	委員会規則	2020.9.10, 2021.3.25
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審議。	教授1 技術職員3 室長が必要と認めた者2	委員会規則	2020.6.4, 9.18, 10.1, 10.8, 12.24, 2021.1.14, 1.20, 2.19(1), 2.19(2), 3.9 (全てメール 審議, 2/19 は2件)
岡崎共同利用研究支援施設運営委員会	岡崎コンファレンスセンター及び宿泊施設(ロッジ)の管理運営に関し必要な事項。	担当責任所長 教授又は准教授1 国際研究協力課長	委員会規則	2020.8.3, 2021.2.17
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	2020.4.21, 5.19, 6.16, 7.21, 8.18, 9.15, 10.20, 11.17, 12.15, 2021.1.19, 2.16, 3.16
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，研究所の代表(教授1)，副防火防災管理者(技術課長)，高圧ガス保安員統括者	委員会規則	2020.5.18 (メール審議), 8.27 (メール 審議)

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	2020.6.16, 9.18, 11.30, 2021.2.26
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	2020.9.2, 2021.3.15
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	2020.7.1, 11.30(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	2020.4.1 (メール審議), 6.15, 9.29 (メール審議)
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	-
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	2020.7.17 (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	2020.7.17 (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	2020.4.13, 5.13, 7.8, 8.20-21 (メール協議), 9.9, 11.11, 11.11-12 (メール協議), 12.2-8(メール協議), 12.22-25 (メール審議), 2021.1.13
施設整備委員会	岡崎 3 機関各地区の施設整備, エネルギー及び環境保全等に関する事項の立案を行い, 所長会議に報告する。	研究総主幹 教授 1 計算科学研究センター長 技術課長	委員会規則	2020.10.7, 2021.2.3
岡崎情報公開委員会	「独立行政法人等の保有する情報の公開に関する法律」を円滑に実施するため。	所長又は研究総主幹 教授 1	委員会規則	-
生命倫理審査委員会	機構におけるヒトゲノム・遺伝子解析研究を, 倫理的配慮のもとに適正に推進するため。	教授又は准教授 2	委員会規則	-

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
4, データサイエンス技術を活用した物性計算手法の開発

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，不均一系触媒，生体分子マシン等の電子状態や構造・機能の解明のための方法論の開発とそれに基づく理論・計算科学的研究

研究課題 1, 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, 生体分子マシンにおける機能発現ダイナミクスの解明
3, 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 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

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

理論・計算分子科学研究部門（客員）

研究目的 1, マテリアルズ・インフォマティクスによる機能材料設計迅速化
2, 第一原理分子シミュレーションによる機能性液体の物性予測と分子論の確立
3, 新奇な対称性やトポロジーを有する量子相の理論的開拓
4, 凝縮系の励起状態ダイナミクスに関する理論・計算科学研究

- 研究課題
- 1, 電子構造情報を基としたマテリアルズ・インフォマティクス的手法開発と応用
 - 2, 超臨界流体・イオン液体など不均一凝集系の大規模第一原理分子動力学法の開発と応用
 - 3, 磁性体や超伝導体における対称性・トポロジー・機能性の解明
 - 4, 分子シミュレーションによる光合成タンパク質の機能解明

光分子科学研究領域

- 研究目的
- 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を開発することを目的とする

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、微粒子系における励起状態と増強電場の研究、およびナノ・マイクロ物質のキラリティとキラル光学効果に関する研究

光分子科学第二研究部門

- 研究目的
- 物質の量子力学的な性質を、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、および超高速量子シミュレータ・量子コンピュータの研究開発

光分子科学第三研究部門

- 研究目的
- 新奇な分子機能の開拓と、それに関する動的プロセスの解明及び制御のための新しい方法論の開発を目指した研究を行う
- 研究課題
- 1, 真空紫外光・軟X線分光による分子あるいは低次元物質の表面・界面における物性研究

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, 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とその利用に関する研究

電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）

- 研究目的 光源の高性能化あるいは高度利用のための開発研究を行う
- 研究課題 1, 電子または光ビーム計測・制御技術に関する開発
2, 放射光を用いた新規分析法の開発研究

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
2, 分子固体・液体の化学状態の分光研究

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
3, 多次元分光計測法による新奇物性開拓

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

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 を用いたタンパク質の立体構造解析
 - 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 新規な光学的・磁氣的・電気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や分子集合体，化学反応系の設計・開発を行うとともに，多様な計測法を駆使して錯体，キラル分子，開殻電子系分子，共役系分子，生体分子およびそれらの集合体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

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分子機構を明らかにするとともに，生体分子の設計・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

生体分子情報研究部門

研究目的 先端計測技術により，生体分子や凝縮相分子の分子機構を解明する

- 研究課題
- 1, 溶液散乱と結晶構造解析を相補的に駆使した動的構造解析
 - 2, 先端的分光法による凝縮相分子の機能・構造・ダイナミクスの解明

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，集積化芳香族化合物の設計と合成，新規な物性，機能の開拓
- 研究課題 1, 開殻電子系に基づく新規光・電子・磁気物性の開拓
2, 3次元幾何構造をもつ有機共有結合結晶の合成と機能解明

生命・錯体分子科学研究部門（客員）

- 研究目的 1, 優れた光・電子機能性をもつ有機材料の創製
2, 有機伝導体の開発と機能開拓
3, 生体1分子計測による細胞および高次生命機能の理解
- 研究課題 1, 新奇な π 共役系の設計・合成，機能性有機材料の創製
2, π 電子-水素連動型有機伝導体の構造多様性探索と機能創出
3, マイクロデバイスによる膜タンパク質の1分子機能計測

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, 先端的分光法による複雑分子系の機能・構造・ダイナミクスの解明
3, タンパク質分子構造および機能の合理デザイン
4, 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, 酸水素化物を基本とした新規機能性材料の探索
3, 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, 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, 表面ナノ構造とその機能を解明するプローブ顕微鏡の開発

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を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いる。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（2012年度から2021年度）の代表機関・実施機関を担い、また2021年度からは文部科学省受託研究マテリアル先端リサーチインフラのスポーク機関として共同利用・民間利用拠点を務める。

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、ワークショップやスクール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、スーパーコンピュータ「富岳」成果創出プログラム、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3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
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
岡崎 進	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
薬師 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
伊藤 光男
井口 洋夫
茅 幸二
長倉 三郎
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
MAURYA, Manish	特任研究員

KALATHINGAL, Mahroof	大学院生
ZHU, Zhe	大学院生
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
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
白男川 貴史	大学院生
羽鳥 敦也	大学院生
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
谷本 勝一	特任研究員(IMSフェロー)
山内 仁喬	大学院生
宮澤 和久	大学院生
福原 大輝	大学院生
石田 干城	助教
理論・計算分子科学研究部門(客員研究部門)	
森 寛敏	客員教授(中央大理工)
柳瀬 陽一	客員教授(京大院理)
東 雅大	客員准教授(京大院工)
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
千葉 史朱香	事務支援員
赤羽 厚子	事務支援員
川口 律子*	事務支援員

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
溝口 道栄	大学院生
周 諭来	大学院生
TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh	大学院生
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)
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)
島田 賢也	客員教授(広大放射光)
香月 浩之	客員准教授(奈良先端 大先端科学)
川本 美奈子	事務支援員
萩原 久代	事務支援員

物質分子科学研究領域

	研究主幹(併) 横山 利彦
電子構造研究部門	
横山 利彦	教授
小板谷 貴典	助教
山本 航平	助教
中村 高大	特任研究員
杉本 敏樹	准教授
櫻井 敦教	助教
鶴岡 和幸	特任研究員
松尾 剛	特任専門員
佐藤 宏祐	大学院生
林 仲秋	大学院生
木村 真一	教授(クロスアポイント メント;阪大院生命機能) (特別研究部門)
電子物性研究部門	
山本 浩史	教授(併)
分子機能研究部門	
平本 昌宏	教授
伊澤 誠一郎	助教
LEE, Jihyun	大学院生
PALASSERY ITHIKKAL, Jasecla	大学院生
西村 勝之	准教授
小林 玄器	准教授
竹入 史隆	助教
NAWAZ, Haq	大学院生
石見 輝	大学院生
岡本 啓	大学院生
内村 祐	大学院生
久保田 亜紀子	技術支援員
今井 弓子	技術支援員
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)
横田 光代	事務支援員
石川 あずさ*	事務支援員
鈴木 愛*	事務支援員

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)	
武田 康太	特任助教(分子科学研究所特別研究員)	
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	
HIRANYAKORN, Methanee	大学院生	
関口 太一郎	大学院生	
與語 理那	特別共同利用研究員	
柚木 康弘	特別共同利用研究員	
齋藤 泰輝	特別共同利用研究員	
佐々木 雄大	特別共同利用研究員	
梅澤 美美子	特別共同利用研究員	
山田 梨乃	特別共同利用研究員	
磯野 裕貴子	技術支援員	
飯野 亮太	教授	
大友 章裕	助教	
武田 公利	特任研究員	
飯田 龍也	大学院生	
VISOOTSAT, Akasit	大学院生	
HONSA, Monique	特別共同利用研究員	
大国 泰子	技術支援員	
今 弥生	技術支援員	
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)	
倉持 光	准教授(併)	
塚本 寿夫	助教	
稲葉 香代	技術支援員	
錯体触媒研究部門		
魚住 泰広	教授	
奥村 慎太郎	助教	
間瀬 俊明	特任研究員	
新見 涼子	大学院生	
水野 翔太	大学院生	
鳥居 薫	技術支援員	

榎山 儀恵	准教授
大塚 尚哉	助教
藤波 武	特任研究員
堀 達暁	大学院生
大石 峻也	大学院生
大田 陽野	大学院生
加藤 雅之	大学院生
小谷 駿輔	大学院生
錯体物性研究部門	
草本 哲郎	准教授
松岡 亮太	助教
加藤 壮志	大学院生
木村 舜	特別共同利用研究員
瀬川 泰知	准教授
渡邊 幸佑	特別共同利用研究員
生命・錯体分子科学研究部門 (客員研究部門)	
深澤 愛子	客員教授(京大高等研究院)
渡邊 力也	客員教授(理研開拓研究本部)
上田 顕	客員准教授(熊本大院先端科学)
佐々木 時代	再雇用職員
福富 幸代	事務支援員
増田 道子	事務支援員
谷分 麻由子	事務支援員
中根 香織	事務支援員
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
SIMON, Damien Stephane	大学院生
和田 琴恵	技術支援員
杉坂 かな恵	技術支援員
鷺尾 みどり	技術支援員
古賀 信康	准教授(兼)(生命創成探究センター)
小杉 貴洋	助教
三本 齊也	大学院生
海田 新悟	大学院生
倉持 光	准教授

齊藤 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
廣部 大地	助教
森島 将基	大学院生
友田 美紗	大学院生
鍋井 庸次	大学院生
相澤 洋紀	大学院生
中島 良太	大学院生
村田 了介	技術支援員
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)
鈴木 博子	事務支援員
伊藤 敦子	事務支援員
鈴木 愛	事務支援員
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)
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)
熊谷 崇	准教授(兼)
野村 雄高	助教
野村 恵美子	事務支援員

特別研究部門	
藤田 誠	卓越教授(東大院工学系)
三橋 隆章	特任助教(分子科学研究所特別研究員)
JUNG, Youngcheol	特別共同利用研究員
影山 洸	特別共同利用研究員
和田 直樹	特別共同利用研究員
周 勃宇	特別共同利用研究員
陳 佳卓	特別共同利用研究員
木村 真一	教授(クロスアポイントメント; 阪大院生命機能(電子構造研究部門))
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)
増田 道子*	事務支援員
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)
竹家 トーマス啓	特任研究員
KAUSAS, Arvydas	特任研究員
YAHIA, Vincent	特任研究員
LIM, Hwanhong	特任研究員
川瀬 晃道	特別訪問研究員
辻 明宏	特別訪問研究員
佐藤 庸一	特別訪問研究員
石月 秀貴	特別訪問研究員
佐野 雄二	特命専門員
小野 陽子	事務支援員
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 将輝	助教
SALEHI DERAKHTANJANI, Elham	特任研究員
電子ビーム制御研究部門	
平 義隆	准教授
松田 博之	特任研究員
松井 文彦	主任研究員
大東 琢治	助教
光物性測定器開発研究部門	
田中 清尚	准教授
出田 真一郎	助教

光化学測定器開発研究部門

岩山 洋士	助教
水口 あき	技術支援員
石原 麻由美	事務支援員
稲垣 いつ子	事務支援員

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
長尾 春代	特任専門員
藤川 清江	技術支援員
石川 あずさ	事務支援員
兵藤 由美子	事務支援員
汲田 真知子	事務支援員

装置開発室

室長(併) 山本 浩史

石川 晶子	技術支援員
浦野 宏子	事務支援員

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
野川 京子	特任専門員
太田 みのり	特任専門員
矢崎 稔子	技術支援員
中村 理枝	技術支援員
霜出 郁子	事務支援員
杉山 加余子	事務支援員
鈴木 さとみ	事務支援員
神谷 美穂	事務支援員

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
金澤 悠紀	研究員
奥村 久士	准教授(兼)
大野 人侍	准教授
石田 干城	助教(兼)
宇野 明子	技術支援員
近藤 紀子	事務支援員
近藤 直子	事務支援員
川口 律子	事務支援員

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)
村木 めぐみ	技術支援員
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)
古賀 (巽) 理恵	特任研究員
南 慎太郎	特任研究員
中根 香織*	事務支援員

極限環境生命探査室

加藤 晃一	教授(併)
矢木 真穂	助教(併)

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
吉田 久史 再雇用職員

電子機器開発技術係
豊田 朋範 係長
松尾 純一 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
矢野 隆行 係長
近藤 直範 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
神谷 基司 係員

計算科学技術二係
内藤 茂樹 係長
長屋 貴量 係員

計算科学技術三係
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

朝倉 由希子 事務支援員
加茂 恭子 事務支援員
田中 景 事務支援員
鶴田 由美子 事務支援員

整理日付は2020年5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。

*事務支援員で複数の研究領域・研究施設を担当しているもの。

2-8-2 現 員

2020年5月1日現在

区 分 職 名		研究力強化戦 略室・安全衛 生管理室等	研究領域*1				研究部門	
			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	特別	社会連携
研究	教 授	1	2[2,0]	3[2,0]	3[1,0]	3[2,0]	1[0,1]	1
	准教授	0	3[1,0]	0[1,1]	3[2,0]	4[1,0]	1	0
	主任研究員	0	0	0	0	0	0	0
	助 教	0	6	6	6	9	0	0
	特任助教	0	0	1	0	1	1	0
	研究員	1	8	6	2	4	0	4
	小計	2	19[3,0]	16[3,1]	14[3,0]	21[3,0]	3[0,1]	5
研究 支援	技術職員	3	0*3					
	特任専門員*2	7	2*3					
	技術支援員	2	12*3					
	事務支援員	8	15*3					
	小計	20	29					
合計		22	107					

区 分 職 名		研究施設			岡崎共通研 究施設	自然科学研究 機構(分子研)	合 計	
		極端紫外光 研究施設	機器セン ター	装置開発室	計算科学研 究センター	生命創成探究 センター*4	所内 (女性/ 外国人)	[客員, 兼務]
研究	教 授	1	0	0	1	2	18 (1/0)	[7,1]
	准教授	2	0	0	1	2	16 (2/0)	[5,1]
	主任研究員	1	0	0	0	0	1 (0/0)	[0,0]
	助 教	4	0	0	0	2	33 (2/2)	[0,0]
	特任助教	0	0	0	0	0	3 (1/1)	[0,0]
	研究員	2	4	0	1	2	34 (6/12)	[0,0]
	小計	10	4	0	3	8	105 (12/15)	[12,2]
研究 支援	技術職員	11	7	9	7	0	37	
	特任専門員*2	0	5	0	0	0	14	
	技術支援員	1	1	2	1	0	19	
	事務支援員	2	3	1	3	0	32	
	小計	14	16	12	11	0	102	
合計		24	20	12	14	8	207	

所内職員は1の実数として表に現す、併任は数えない。女性(A)と外国人(B)研究者人数は、右端合計列に(A/B)で内数を記す。機構外本務の客員数(C)と兼務者数(D)は、[C,D]で外数で数える。

*1 メゾスコピック計測研究センターと協奏分子システム研究センターの職員は、PIが併任する研究領域に数える。

*2 助手を含む。

*3 研究領域・研究部門の事務支援員は、複数グループの支援を担当するため研究領域・研究部門全体で数える。技術職員、特任専門員、技術支援員、一部の事務支援員は上記の限りではないが、これに倣って記載する。

*4 生命創成探究センターの分子研併任PIグループを数える。ただし本務を分子研とする助教は研究領域に数える。

2-8-3 人事異動状況

(1) 分子科学研究所の人事政策

分子科学研究所では創立以来、研究教育職員（教授、准教授、助教）の採用に関しては厳密に公募の方針を守り、しかもその審議は全て所内5名、所外5名の委員で構成される運営会議人事選考部会に委ねられている。さらに、厳密な選考を経て採用された准教授、助教は分子科学コミュニティと分子科学研究所教員の流動性を保つため原則として内部昇任が禁止されている（例外は創立以来2件のみ）。教授、准教授の研究グループの研究活動に関しては、所長および運営顧問、研究顧問によるヒアリング、また研究領域あるいは施設ごとに国内委員と国外委員による点検・評価を受けている。さらに、教授、准教授の個人評価は confidential report の形で所長に報告されるなど、所長は教授、准教授の研究グループの活性化と流動性に心がけている。なお、助教が6年を越えて勤務を継続する場合は、毎年、本人の属する研究領域の主幹あるいは施設長が主幹・施設長会議においてそれまでの研究活動と転出の努力の状況を報告し、同会議で承認された後、教授会議では本人の属するグループの教授または准教授によって同様の手続きを行い、研究期間の1年延長の承認を得るという手続きをとっている。2011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、2017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。2015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。2017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。2019年より、同部門に大学教員をクロスアポイントメントで招聘する制度の運用を開始した。

(2) 創立以来の人事異動状況（2020年5月1日現在）

① 本務教員と研究員の頭脳循環（分子研のみ 岡崎共通研究施設は含まず 休職・休業含む）

着任人数

中期計画区分	第2期	第3期						現員数* 2020年5月1日現在
		2016	2017	2018	2019	2020	2016～2020計	
年 度	2010～2015							
教 授	6	1	0	0	2	1	4	18 (1/0)
准教授	8	2	0	2	3	3	10	17 (2/0)
主任研究員	0	0	0	1	0	1	2	1 (0/0)
助 教	21	2	4	5	4	3	18	35 (2/2)
特任助教	7	1	1	1	2	3	8	5 (1/1)
研究員	134	14	18	15	23	10	80	36 (6/12)
計	176	20	23	24	34	21	122	112 (12/15)

* (A/B) は、女性 (A) と外国人 (B) 研究者人数で内数

転出人数

中期計画区分	第2期	第3期					
	2010～2015	2016	2017	2018	2019	2020	2016～2020計
教授	9	0	1	1	0	0	2
准教授	8	1	2	4	1	1	9
主任研究員	0	0	0	0	0	0	0
助教	29	5	4	5	9	5	28
特任助教	7	1	2	0	1	1	5
研究員	142	8	14	22	19	15	78
計	195	15	23	32	30	22	122

② 客員教員等

区分	職名	創立～2020年度	現員数 ^{*2}
			2020年5月1日現在
客員研究部門（国内）	教授	164	7(1)
	准教授	175	5
国外 ^{*1}	教授	85	0
	准教授	51	0

* 1 外国人客員研究部門および外国人客員人数。外国人客員研究部門は2006年度をもって廃止。2007年より外国人研究職員。

* 2 () は女性の人数で内数。

2-9 財 政

2-9-1 財政状況

(単位：千円)

項 目		年 度					
		2015	2016	2017	2018	2019	2020
収 入	運営費交付金	3,051,664	2,874,614	3,037,793	2,286,166	2,267,343	2,171,164
	施設整備費補助金	0	0	80,000	0	602,790	269,940
	補助金等収入 小計	38,964	71,366	73,080	67,920	60,973	93,974
	研究大学強化促進費補助金	32,400	48,400	46,800	45,800	38,300	36,833
	科学技術人材育成費補助金	6,564	22,966	26,280	22,120	22,673	0
	先端研究設備整備費補助金	0	0	0	0	0	49,973
	中小企業経営支援等対策費補助金	0	0	0	0	0	7,168
	国立大学財務・経営センター施設費交付金	21,492	0	0	0	0	0
	自己収入	10,029	11,890	29,470	28,753	25,055	25,626
	産学連携等研究収入及び寄附金収入等 小計	1,152,236	1,195,855	1,408,087	1,733,856	1,125,284	749,476
	産学連携等研究収入	1,065,097	1,102,004	1,306,087	1,613,501	1,001,996	642,247
	寄附金	24,453	26,844	30,440	44,333	51,976	49,487
	大学院教育経費収入	62,686	67,007	71,560	76,022	71,312	57,742
	目的積立金取崩額	2,907	0	0	0	0	0
科学研究費助成事業（直接経費）	238,305	407,450	389,661	492,318	453,118	479,779	
収入合計	4,515,597	4,561,175	5,018,091	4,609,013	4,534,563	3,789,959	
支 出	人件費	945,744	972,649	981,592	946,412	907,535	965,954
	研究経費	782,696	545,845	550,286	532,908	531,766	607,004
	共同利用経費	524,773	551,128	653,901	636,962	849,783	505,535
	教育研究支援経費	0	0	0	0	0	0
	一般管理費	2,700	1,348	2,019	2,335	3,313	3,776
	施設整備費	21,492	0	80,000	0	602,790	269,940
	補助金等 小計	38,964	71,366	73,080	67,920	60,973	93,974
	研究大学強化促進費補助金	32,400	48,400	46,800	45,800	38,300	36,833
	科学技術人材育成費補助金	6,564	22,966	26,280	22,120	22,673	0
	先端研究設備整備費補助金	0	0	0	0	0	49,973
	中小企業経営支援等対策費補助金	0	0	0	0	0	7,168
	産学連携等研究経費及び寄附金事業費等 小計	1,077,377	1,167,117	1,243,105	1,692,623	1,087,798	722,209
	産学連携等研究費	1,004,018	1,086,050	1,161,348	1,595,398	989,107	633,151
	寄附金事業費	10,673	14,060	10,197	21,203	27,275	31,316
大学院教育経費	62,686	67,007	71,560	76,022	71,416	57,742	
科学研究費助成事業（直接経費）	199,701	433,048	374,167	367,091	336,345	331,697	
支出合計	3,593,447	3,742,501	3,958,150	4,246,251	4,380,303	3,500,089	

外部資金獲得状況の推移（実施課題数と交付金額）

区 分		年 度		2015	2016	2017	2018	2019	2020
		件数 (件)	金額 (千円)						
寄付金	分子科学研究所	件数 (件)		18	12	15	17	20	24
		金額 (千円)		18,140	15,920	25,021	25,483	37,505	37,224
	生命創成探究センター・岡崎共通研究施設 (分子研分)	件数 (件)		7	3	1	4	3	1
		金額 (千円)		9,240	1,800	2,000	4,500	3,100	2,000
文部科学省 科学研究費 助成事業 *	分子科学研究所	件数 (件)		87	66	83	97	81	76
		金額 (千円)		238,306	407,450	389,662	492,319	453,118	479,779
	生命創成探究センター・岡崎共通研究施設 (分子研分)	件数 (件)		14	12	15	16	15	20
		金額 (千円)		79,700	55,700	78,700	50,439	104,130	80,331
共同研究 *	分子科学研究所	件数 (件)		5	7	6	6	8	9
		金額 (千円)		67,342	53,156	58,961	36,374	35,396	34,337
	生命創成探究センター・岡崎共通研究施設 (分子研分)	件数 (件)		0	1	1	1	0	0
		金額 (千円)		0	2,700	4,644	3,457	0	0
受託研究 *	分子科学研究所	件数 (件)		22	20	24	25	25	21
		金額 (千円)		979,921	977,162	1,205,634	1,523,539	914,065	563,906
	生命創成探究センター・岡崎共通研究施設 (分子研分)	件数 (件)		3	4	3	2	1	2
		金額 (千円)		22,480	26,960	23,260	28,660	16,250	14,560
合計金額 (千円)				1,303,709	1,453,688	1,679,278	2,077,715	1,440,084	1,115,246

* 間接経費，産学官連携推進経費を含む。

科学研究費助成事業

代表者課題

(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	
	件数	交付金額	件数	交付金額	件数	交付金額
特別推進研究	2	178,150	0	0	2	178,150
新学術領域研究	3	63,830	2	15,470	5	79,300
挑戦的研究（萌芽）	5	17,580	1	3,250	6	20,830
若手研究	13	22,854	1	3,120	14	25,974
基盤研究（S）	1	34,970	0	0	1	34,970
基盤研究（A）	4	35,880	0	0	4	35,880
基盤研究（B）	10	44,880	3	10,911	13	55,791
基盤研究（C）	5	5,720	3	3,250	8	8,970
研究活動スタート支援	5	6,760	1	1,430	6	8,190
国際共同研究強化（B）	1	5,330	0	0	1	5,330
特別研究員奨励費	4	7,930	1	1,820	5	9,750
計	53	423,884	12	39,251	65	463,135

間接経費を含む。交付金額は分担者への配分金額を含む。

分担者課題

(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	
	件数	交付金額	件数	交付金額	件数	交付金額
特別推進研究	1	6,500	1	13,845	2	20,345
新学術領域研究	5	26,585	2	14,365	7	40,950
挑戦的研究（萌芽）	1	780	0	0	1	780
基盤研究（S）	1	4,940	2	5,850	3	10,790
基盤研究（A）	4	7,150	1	1,040	5	8,190
基盤研究（B）	6	4,940	1	4,940	7	9,880
基盤研究（C）	0	0	1	1,040	1	1,040
計	18	50,895	8	41,080	26	91,975

間接経費を含む。

事業体	事業名		実施課題数 (代表者／分担者)	交付金額
国立研究開発法人 科学技術振興機構	戦略的創造研究推進事業	さきがけ	10 /0	91,388
		CREST	0 /1	9,750
	未来社会創造事業	大規模プロジェクト型	0 /1	46,670
		探索加速型	0 /1	5,200
	研究成果展開事業	A-STEP	1 /0	5,000
文部科学省	科学技術試験研究委託事業	ナノテクノロジープラットフォーム事業	1 /0	330,147
		光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP	0 /3	61,725
		先端レーザーイノベーション拠点	0 /1	6,500
		元素戦略研究拠点	0 /1	13,000
国立研究開発法人 日本医療研究開発機構	次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発事業		0 /1	700
国立研究開発法人 日本原子力研究開発機構	英知を結集した原子力科学技術・人材育成推進事業		0 /1	6,826
独立行政法人 日本学術振興会	学術研究動向調査研究		1 /0	1,560
計			13 /10	578,466

間接経費を含む。

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（2021.3）岡崎情報図書館は雑誌 1,521 種（和 291, 洋 1,230）、単行本 96,742 冊（和 13,261, 洋 83,481）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 8,000 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1997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 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、技術課長、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長に報告し、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、2020年度はCOVID-19感染拡大の影響のためか減少に転じた。内容は、量子シミュレータ、太陽電池、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。

2019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15件、2020年度は、個人有0件、機構有5件であった（2021年2月25日現在）。

特許取得数と特許料収入

中期計画区分	第1期 以前	第2期	第3期					
年度	2007～ 2009 計	2010～ 2015 計	2016	2017	2018	2019	2020	2016～ 2020 計
出願件数	32	67	14	25	14	12	13	78
国内	15	37	10	11	11	8	8	48
国外	2	30	4	14	3	4	5	30
取得件数	8	59	3	13	9	11	13	49
国内	4	37	2	8	3	6	3	22
国外	3	22	1	5	6	5	10	27
総保有件数	15	66	63	75	84	87	97	97
国内	10	44	40	48	51	55	55	55
国外	5	23	23	27	33	32	42	42
特許料収入（千円） 国内外合計	294	1,670	2,128	7,300	6,737	8,219	8,307	32,691

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、アジア地域での分子科学の急速な発展に対応して、2006年度から2010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、東アジアでの分子科学の協力研究拠点ネットワーク形成を目的とし日本、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。その後、2011年度からはこの協力研究拠点形成の取組をより国際的に発展・拡充させ、分子科学国際共同研究拠点形成事業を開始している。

また、分子科学研究所は2008年より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、ASEAN諸国の若手研究者と大学院学生を招聘し、人材の育成に努めてきた。2011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、さらに2014年度には分子研全体の国際インターンシッププログラム（IMSIIIP）の枠組みの中でのアジア枠インターンシップ制度IMS-IIPAと名前を変え、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つつある。現在のIMS-IIPA事業は招聘若手研究者の滞在期間を最長6ヶ月に拡充し、原則としてMOU提携校との連携（応募、招聘）によって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（設立時は博士課程後期3年のみ；2006年度より5年一貫制博士課程）。総合研究大学院大学（総研大）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。

2020年度は先例のないコロナ禍により、外部からの研究者の出入りが伴う共同利用、多くの人が集う研究会、海外との往来が不可欠な国際インターンシップ、院生の研究教育に資する学会参加・発表、外部との研究交流、全てが低調に陥ってしまった。しかし、いつの時代にも、どのような体制下・環境下でも自然科学研究の本質が変わるものではない。来たるポスト・コロナにおいても全国共同利用機関として、アジアの研究ハブとして、また高度専門的な大学院教育の場としての役割を発展的に担っていく。

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。(関係機関に通知して、前期・後期の年2回の課題公募を行っており(前期には通年の課題も受付け)、また随時申請を受付けている。)

- (1) 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
- (2) 協力研究：所内の教授又は准教授等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)
- (3) 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。
 - (オ)「分子研研究会(on-web)」Zoom等によるweb開催を前提とするもの。
- (4) 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。
- (5) 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。
- (6) 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。
- (7) ①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。
②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 2020年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名 (通年)	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	九州大学大学院理学研究院 大谷 亮

(2) 協力研究

課 題 名 (通年)	提案代表者
水溶液中における有機イオンと水和水の微視的構造と動的挙動に関する研究	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター 富永 圭介
高度に配向制御した分子薄膜との協奏を利用した新奇磁性開発	千葉大学大学院工学研究院 山田 豊和
エピタキシャル有機半導体 pn 接合の電子構造評価	東京理科大学理工学部 中山 泰生
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
Diaminodiphenyldisulfide 誘導体を用いた触媒的 S-S 結合開裂と C-S 結合構築を伴う新規 benzothiazole の触媒合成	山形大学工学部 皆川 真規
部位特異的な化学修飾のための構造基盤の確立	鹿児島大学大学院理工学研究科 伊東 祐二
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
マイクロフロー空間内の局所光励起による超分子ダイナミクスの解析	京都府立大学大学院生命環境科学研究科 沼田 宗典
キラルプラズモンとキラル磁性結晶の結合系の開拓	大阪府立大学大学院工学研究科 戸川 欣彦
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

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確立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
CDW を示す遷移金属カルコゲナイドの波数空間でのバンド変調の研究	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
不安定共振器型マイクロチップレーザーを用いたガスブレイクダウンに関する研究	大阪大学工学部	赤松 史光
高強度マイクロチップレーザーを用いた高出力テラヘルツパラメトリック発生器の開発	名古屋大学大学院工学研究科	村手 宏輔

課 題 名 (前期)

提案代表者

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
ポリ(トリアリールホスフィンスルフィド)保護サブナノ金属クラスター触媒の開発	愛媛大学大学院理工学研究科	太田 英俊
新触媒反応を基盤とした分子物性解明と微結晶構造解析	名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所	村上 慧
センサータンパク質を駆動系とした可変型タンパク質超分子ナノ構造体の創製	奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	山中 優
UVSOR 光電子分光装置の超高性能化に向けた分光系と実験装置の性能把握実験	大阪大学産業科学研究所	菅 滋正
放射線照射により生成するマルトースのラジカル生成機構への水和水の効果	東京都立産業技術研究センター	中川 清子
有機半導体層のエネルギー状態と光電変換機能	豊橋技術科学大学院工学研究科	伊崎 昌伸

課 題 名 (後期)

提案代表者

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	大阪工業大学工学部	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	静岡大学農学部	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	山形大学理学部	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	九州シンクロトロン光研究センター	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	横浜国立大学理工学部	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	大阪大学産業科学研究所	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	関西学院大学理工学部	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	九州大学先端物質化学研究所	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	産業医科大学医学部	田中 悟

課 題 名 (後期二次募集)

提案代表者

放射線照射により生成するマルトースのラジカル生成機構への水和水の効果	東京都立産業技術研究センター	中川 清子
ナノスケール蓄光材料の新規開発と有機・無機媒体への分散	名城大学理工学部	西山 桂
モメンタムマイクロスコープを用いた高移動度有機半導体高配向膜の分子軌道トモグラフィ	筑波大学数理物質系	山田 洋一
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究科	林 雄二郎
糖アジドの還元にもなうライゲーション反応の開発	青森大学薬学部	鈴木 達哉
位相制御された逆コンプトン散乱ガンマ線の発生	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	高嶋 圭史
光合成アンテナ系の分子機構の解明に向けた計算化学的解析	名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所	藤本 和宏

(3) 研究会

課 題 名 (前期)

提案代表者

錯体化学に基づく分子の構造変換設計と機能制御	立命館大学生命科学部	越山 知美
------------------------	------------	-------

課 題 名 (後期)

提案代表者

ナノ空間で光が織りなす分子操作・化学反応制御の新展開	北海道大学大学院理学研究院	南本 大穂
Next Generation Spectro-Microscopy and Micro-Spectroscopy Workshop	分子科学研究所	大東 琢治
錯体化学から始まる学術展開の可能性	名古屋大学大学院工学研究科	松田亮太郎

(4) 若手研究活動支援

課題名	提案代表者
第18回 ESR 夏の学校：ESR 法の基礎・理論・生体応用	大阪市立大学大学院理学研究科 加藤 賢

(6) UVSOR 施設利用

課題名 (前期)	提案代表者
LCS ガンマ線を用いた環境半導体マグネシウムスタナイト結晶の陽電子消滅寿命解析	山形大学理学部 北浦 守
光子誘起陽電子消滅法を用いた材料分析に関する研究	産業技術総合研究所 豊川 弘之
UVSOR-BL1U からの LCS ガンマ線を用いた NRF 同位体 3D イメージング法の高分解能化	京都大学エネルギー理工学研究所 大垣 英明
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	広島大学大学院先進理工系科学研究科 高口 博志
環境半導体マグネシウムシリサイド結晶のテラヘルツ透過分光	山形大学理学部 北浦 守
ゲルマニウムに発生する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
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	分子科学研究所 高谷 光
アミノ酸ドーブした強誘電体のテラヘルツ分光	大阪大学大学院生命機能研究科 木村 真一
軟X線吸収分光法によるバルクヘテロ有機層/金属酸化物界面の電子状態評価	千葉大学大学院融合科学研究科 奥平 幸司
MTB 触媒反応で形成される Mo 炭化物活性種の L 殻 XANES 構造解析	埼玉工業大学工学部 有谷 博文
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
アモルファス化した Ag 添加ゼオライト蛍光体の局所環境解析	大阪府立大学大学院工学研究科 村田 秀信
スピネル構造 Mg _{1-x} Ni _x Al ₂ O ₄ 中のカチオン局所構造	九州大学大学院工学研究院 吉岡 聡
角度分解紫外光電子分光法による Au および SiO ₂ 上に作成した α-sexithiophene, p-sexiphenyl 薄膜の分子配向評価	千葉大学大学院融合科学研究科 奥平 幸司
軟X線吸収分光法による糖類分子と液体との相互作用の研究	東京大学大学院新領域創成科学研究科 佐々木 岳彦
軟X線 in situ XAFS 構造解析による白金合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
脂質二重膜中のリン脂質分子の電子状態測定によるイオン配位の評価	豊橋技術科学大学応用化学・生命工学系 手老 龍吾
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線共鳴散乱によるキラル液晶の精密構造解析	京都大学大学院理学研究科 高西 陽一
反応性有機金属触媒種の有機溶媒中軟X線 XAFS	分子科学研究所 高谷 光
軟X線吸収スペクトルの定量解析によるグリシンベタイン食塩水の特異な水和構造の解明	広島大学大学院先進理工系科学研究科 岡田 和正
吸着炭酸イオンに誘起される Fe・Ni 触媒の活性構造のオペランド XAFS 観測	山口大学大学院創成科学研究科 吉田 真明
Temperature Dependence of the Interaction of Calcium Dication with Water Probed by X-Ray Absorption Spectroscopy	Synchrotron SOLEIL CEOLIN, Denis
Mechanism Study of Reaction between Iron Salts and Organometallic Reagent by XAS	The Institute for Advanced Studies of Wuhan University LEI, Aiwen
不整合変調と自己束縛励起子発光の相関及び不規則場による発光の不均一広がり	秋田大学大学院理工学研究科 小玉 展宏
(Cs,Rb) ₂ ZnCl ₄ 混晶のオージェ・フリー発光のスペクトル変化から探る最外内殻正孔の格子緩和状態	山形大学理学部 北浦 守
シンチレータの熱消光の包括的研究	東北大学未来科学技術共同研究センター 黒澤 俊介
赤色発光ハロゲン化物シンチレータの網羅的研究	東北大学未来科学技術共同研究センター 黒澤 俊介
紫外発光アルミン酸亜鉛薄膜の配向性制御と膜質の評価	静岡大学大学院工学研究科 小南 裕子
気体試料を対象とした吸収および発光分光法の整備	分子科学研究所 岩山 洋士
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・不純物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
スピン軌道相互作用と電子相関の協奏による電子状態	大阪大学大学院生命機能研究科 木村 真一
フルオロオレフィ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科 山ノ井 航平
三元金属ハロゲン化物結晶中の Ti ⁺ センターの光学特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科 河相 武利
Na _{0.44} MnO ₂ 単結晶ナノワイヤーの Na 脱挿入過程のオペランド STXM 解析	産業技術総合研究所 細野 英司
STXM による高性能光触媒材料のオペランド二次元マッピング解析	産業技術総合研究所 三石 雄悟
フロー型セルを用いた帯電性ナノバブル周囲水の STXM マッピング	東京大学物性研究所 原田 慈久
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
アカスジキ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

STXM を用いたブレンドポリマーにおける化学状態解析 ビームラインおよび STXM の整備	分子科学研究所 分子科学研究所	大東 琢治 大東 琢治
放射光 CT と STXM-NEXAFS の連携による、隕石中の微小有機物粒子の 3 次元分布・構造の可視化と、初期太陽系における有機物進化の解明	高輝度光科学研究センター	上相 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と基礎 データの取得	海洋研究開発機構高知コア研究所	伊藤 元雄
Operando Microscopic Analysis at the Graphene-Metale Interface	Tamkang University	PONG, Way-faung
Penetration of Drug-Loaded Nanocarriers and Drug Release in Serine-Protease- Treated Skin	Freie University Berlin	RUEHL, Eckart gunther adolf
Comprehensive Understanding of Lithium Ion Insertion Mechanism via LiMn ₂ O ₄ Primary Particle Investigated by In-Situ Electrochemical STXM	Seoul National University	LIM, Jongwoo
Effects of Fuel Sulfur Content and Wet-Scrubbing on the Microphysical and Chemical Properties of Shipping Exhaust Particles	University of Gothenberg	KONG, Xiangrui
Needle-Shaped Hydroxyapatite Nanoparticles as Skin Penetration Enhancer	The National Nanotechnology Center of Thailand	MAHATNIRUNKUL, Thanisorn
表面吸着分子についての多電子同時計測	富山大学教養教育院	彦坂 泰正
BL4B 整備	分子科学研究所	岩山 洋士
アモルファス半導体光誘起現象の可逆性に関する研究	岐阜大学工学部	林 浩司
⊙ T 複合対称性で保護された新奇トポロジカル物質の開拓	東北大学大学院理学研究科	佐藤 宇史
SnS 単結晶の電子構造：バンドの起源の解明	東北大学多元物質科学研究所	鈴木 一誓
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
Rashba 型スピン軌道相互作用が誘起する磁性合金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
複合原子層における新奇電子構造の開拓	東京大学大学院工学系研究科附属量子相 エレクトロニクス研究センター	坂野 昌人
Ni ₂ P(10-10) 上に作成した Fe リン化合物薄膜の電子状態	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
角度分解光電子分光による二層系銅酸化物高温超伝導体 Bi2212 のスペクトル 形状の温度変化	分子科学研究所	出田真一郎
層状強磁性 MAX 相系化合物 Ce ₄ Mo ₄ Al ₇ C ₃ の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ディラック電子系 NiTe ₂ における Pd 置換効果による バンド分散の変化	大阪大学大学院理学研究科	宮坂 茂樹
単原子層 Bi 超薄膜のトポロジカル秩序とスピン・バレー偏極	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪 嘉之
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
波長 100 nm 真空紫外線の分光器 2 次光評価と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
強磁性鉄酸化物薄膜における光誘起磁化ダイナミクス	東京大学物性研究所	松田 巖
表面状態の変化した多層膜反射鏡の極端紫外光に対する反射率評価	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉岡 和夫
不純物ドーブしたマグネシウムシリサイド結晶のプラズマ周波数の温度依存性	山形大学理学部	北浦 守
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	分子科学研究所	高谷 光
電流による局在電子状態の融解現象の直接観測	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
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 ラフィー開発 (前年度からの継続研究)	広島大学大学院先進理工系科学研究科	藪田ひかる
低エネルギー高分解能 ARPES で探るトポロジカル超伝導	東北大学大学院理学研究科	佐藤 宇史
SnS 単結晶の電子構造：伝導電子の観測	東北大学多元物質科学研究所	鈴木 一誓
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 2	東京大学大学院理学系研究科	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 III	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
高エネルギー高分解能 ARPES による三層系銅酸化物高温超伝導体 Bi2223 の スペクトル形状の温度変化	分子科学研究所	出田真一郎
低励起エネルギー高分解能光電子分光による La _{(1-x)/3} Li _x NbO ₃ 単結晶の電子 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
角度分解光電子分光による高電子ドーブ鉄系超伝導体 LaFeAsO _{1-x} H _x のフェル ミ面及び超伝導ギャップ測定	大阪大学大学院理学研究科	宮坂 茂樹
再構成 Au 表面上グラフェンの共鳴角度分解光電子分光	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
トポロジカル近藤絶縁体単表面超構造による表面電子状態への影響	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪 嘉之
Understanding Low-Temperature Insulator Transitions in 2D Halide Perovskites	Concordia University	SALZMANN, Ingo
高速シンチレータ材料におけるエネルギー移動と内殻励起の寄与の定量的解析	東北大学大学院工学研究科	越水 正典

ボロンドープダイヤモンド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
VUV ガラス材料の光学特性評価	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

課 題 名 (後期) 提案代表者

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東海量子ビーム応用研究センター	早川 岳人
干渉計を用いたアンジュレータ放射の波形測定	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	高嶋 圭史
カーボンナノチューブに閉じ込めた硫黄原子鎖の構造	富山大学理学部	池本 弘之
高効率化を目指した超薄膜グラフェン電子収量用液体セルの開発	名古屋大学大学院理学研究科	三石 郁之
多層膜反射鏡の反射率測定	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉川 一朗
鏡面研磨した隕石片の極端紫外領域における反射率特性に関する研究	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉岡 和夫
彗星探査機に搭載する新型吸収セルの性能評価	宇宙航空研究開発機構太陽系科学研究系	桑原 正輝
BL5B における迷光除去マスク設置および温度安定化による取出し光エネルギー変動改善	京都大学エネルギー理工学研究所	全 炳俊
中～遠赤外吸収分光による高移動度有機半導体単結晶の分子・格子振動の探索	東京理科大学理工学部	中山 泰生
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
アンジュレータ放射光渦のダブルスリット回折実験	広島大学大学院先進理工系科学研究科	和田 真一
軟X線分光による有機マグネシウム化合物の構造解析	京都大学化学研究所	高谷 光
金基板上における共有結合性有機分子構造体の電子状態	分子科学研究所	解良 聡
軟X線 XAFS による有機マグネシウム化合物の構造解析	京都大学化学研究所	高谷 光
曖昧な「結晶性」を左右する物理的指標の解明	山形大学理学部	北浦 守

(7) 施設利用

② 装置開発室

課 題 名 (後期) 提案代表者

高周波磁場変調を用いた ESR 測定システムの構築	名古屋大学大学院理学研究科	三野 広幸
---------------------------	---------------	-------

③ 計算機利用

課 題 名 (通年) 提案代表者

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
カイラル分子が作り出す電子カイラリティの生成機構と場の量子論に基づく局所物理量による量子物性の研究	京都大学大学院工学研究科	瀬波 大土
高反応性のジボラン (4)・Al アニオンの性質の解明およびメタンの C-H 結合活性化へ向けた均一系触媒設計	名古屋大学大学院工学研究科	山下 誠
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	赤瀬 大
量子多成分系分子理論を用いた水素ダイナミクスと同位体効果の理論的研究	横浜市立大学データサイエンス学部	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
密度汎関数法計算の新たな展開とナノ表面・界面成長機構の解明	名古屋大学未来材料・システム研究所	押山 淳
量子力学 (QM) / 分子力学 (MM) 法によるハロ酸脱ハロゲン化酵素の反応機構解析	長浜バイオ大学メディカルバイオサイエンス学科	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
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	中央大学理工学部	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活性評価とシクロペンタジエノン金属錯体による金属配位子協働的結合切断反応の開発	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	お茶の水女子大学基幹研究院自然科学系	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
トポロジカル π 共役分子の構造と物性	分子科学研究所	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
立体選択的反応における溶媒効果と反応機構に関する理論研究	高知大学大学院総合人間自然科学研究科	金野 大助
分子シミュレーションを用いたヘロナミド類の抗真菌作用メカニズムの解明	理化学研究所生命機能科学研究センター	齋藤 大明
構造多糖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
全原子分子動力学計算の高分子研究への展開	名古屋大学大学院工学研究科	岡崎 進
生体・高分子自己集合系の分子シミュレーション	名古屋大学大学院工学研究科	篠田 渉
水溶液中の重金属イオンの活性炭に対する吸着挙動の解析	徳島大学大学院社会産業理工学研究部	吉田 健
多原子分子からなる溶質の溶媒和自由エネルギーを正確に求める OZ 理論の開発	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
パイ共役系環状化合物の合成研究と光物性	北里大学理学部化学科	長谷川真士
三次元パイ共役分子の構造と物性	大阪府立大学大学院理学系研究科	津留崎陽大
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科	山北 佳宏
ミオシン VI の反応サイクル全体の動的ランドスケープによるステップ運動機構の解明	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
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
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
脱溶媒和効果を考慮した手法による抗体と糖鎖間相互作用の比較研究	北里大学一般教育部	能登 香
軟X線光科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
遷移金属化合物および包接化合物の構造・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自然科学系	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5	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	早稲田大学大学院先進理工学研究科	中井 浩巳
タンパク質間相互作用の粗視化モデルの開発と電子伝達系への応用	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	京都大学大学院工学研究科	伊藤 彰浩
多元素クラスターの赤外解離分光のための赤外スペクトルの予測	東京大学大学院総合文化研究科	工藤 聡
重原子を含む化合物の基底・励起電子状態と分子物性に関する量子化学計算	東京都立大学大学院理学研究科	波田 雅彦
生体超分子の立体構造変化と機能	東京工業大学生命理工学院	北尾 彰朗
第一原理計算およびマテリアルズインフォマティクスによるナノ構造および原子層物質の形成と機能発現に関する研究	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
分子運動に起因する動的分子間相互作用を活用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
高分子構造変化における水の影響	信州大学国際ファイバー工学研究所	望月 建爾
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
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
第一原理分子動力学シミュレーションによる HCl 水溶液表面での Zundel, Eigen 構造研究	富山大学理工学研究部	石山 達也

光起電力デバイスの電荷移動メカニズム	日本女子大学理学部	村岡 梓
有機分子半導体膜中の積層構造欠陥の電子物性の研究	千葉大学大学院理学研究院	中山 隆史
反応経路自動探索を用いる触媒・発光材料の理論的研究	奈良先端科学技術大学院大学研究推進機構	畑中 美穂
イオン性液体におけるイオン伝導率、内部移動度、および Haven 比の包括的研究 1: イオン質量依存性	新潟大学理学部	大鳥 範和
ボー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
ジョードピアールを用いた APEX 反応の反応機構解明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
Theoretical Study to Improve IrOx-Type Electrodes for Water Oxidation	東京工業大学大学院化学専攻	Juhasz Gergely
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
質量分析法による生体分子の気相分解過程に関する研究	産業技術総合研究所	浅川 大樹
機械学習による溶媒とモデルの改善と酸解離定数への応用	筑波大学大学院数理工学系	松井 亨
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 電子系イオンの設計・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
タンパク質の機能を制御するペプチド・タンパク質の合理設計	東京大学大学院工学系研究科	森本 淳平
核変換溶融塩ターゲット開発に向けた DFT 分子動力学計算による熱力学量評価	東北大学大学院工学研究科	穴戸 博紀
極低温気相紫外分光と Franck-Condon シミュレーションによるホスト-ゲスト化合物の包接構造の研究	広島大学大学院理学研究科	井口 佳哉
ピンサー配位子を有する鉄錯体に関する理論的研究	北里大学理学部	神谷 昌宏
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	名古屋大学大学院理学研究科	野口 巧
Pd(II) 二核錯体を用いる光触媒的 C-H 塩素化反応の開発	東京大学生産技術研究所	村田 慧
複雑で多様な分子構造と電子状態および化学反応に関する研究	京都大学実験と理論計算科学のインタープレイ による触媒・電池の元素戦略研究拠点ユニット	福田 良一
計算化学を利用した有機化学反応機構の解明	公益財団法人乙卯研究所	黒内 寛明
計算化学を用いた触媒の理論設計および有機発光材料の物性解析	北海道大学大学院工学研究院	伊藤 肇
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
反応経路自動探索法の開発と応用	北海道大学大学院理学研究院	前田 理
遷移金属触媒による小分子活性化の反応機構についての DFT 研究	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
機械学習を用いた低熱伝導率ホイスラー型熱電変換材料の探索	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における紫外線損傷 DNA の修復機構の解明	理化学研究所生命機能科学研究センター	佐藤 竜馬
ケイ酸系溶融体より生ずる Ca_2SiO_4 結晶における $[\text{SiO}_4]^{4-}$ 錯体構造へ及ぼす固溶元素の影響	大阪大学大学院工学研究科	鈴木 賢紀
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
分子動力学法を用いた生体巨大分子の拡散係数の計算: 変性の効果	九州大学大学院理学研究院	秋山 良
生体系や表面系の凝縮系の第一原理計算による電子状態からの機能メカニズムの解明	理化学研究所	中村振一郎
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
分子金属錯体の精密制御に基づく配列・空間の創出	東京大学大学院理学系研究科	長田 浩一
新規合成反応の開発を志向した理論化学的研究	東京農業大学生命科学部	斉藤 竜男
静電場中における分子イオンの輸送ダイナミクス	金沢大学大学院自然科学研究科	玉舘 知也
ナノカーボンと有機物を用いた機能材料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	手島 正吾
膜透過ペプチドに対する細胞膜表面への移動過程に対する理論的研究	筑波大学計算科学研究センター	西澤 宏晃
加水分解酵素を用いる速度論的光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
高極性液晶化合物の分子動力学シミュレーション 2	九州大学先端物質化学研究所	奥村 泰志
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
工業原料を利用した精密化学変換反応の開発	大阪大学大学院工学研究科	生越 専介
種々の分子の原子間力顕微鏡像の理論計算	金沢大学ナノ生命科学研究所	炭竈 享司
超短レーザーパルスを用いたナノ分子の反応動力学イメージング理論	東北大学金属材料研究所	山崎 馨
金属有機構造体による水同位体分子認識	信州大学先鋭領域融合研究群先鋭材料研究所	田中 秀樹
分子動力学シミュレーションによる高分子液晶およびモデル液晶化合物の熱伝導特性解析	東京工業大学物質理工学院	古屋 秀峰
人工光合成のための界面の研究と強相関ソルバーの検証	神戸大学科学技術イノベーション研究科	天能精一郎
機能性分子集合体の分子動力学研究: ナノ界面における構造とダイナミクスの解析	兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科	鷺津 仁志

カルマン渦におけるキャピテーションの分子動力学計算 Structural Mechanism of T Cell Activation	東京大学物性研究所 大阪大学微生物病研究所	野口 博司 Floris Jan van Eerden
トリチウムベータ崩壊の生体高分子への影響 軸性キラルな発光色素の励起状態構造の解明 実験と計算の融合による気相生体分子の精密構造決定：分子認識機構の解明に向けて イオン性色素結晶を含む新規 π 電子系の合成と配列制御 微視的構造から考えるタンパク質の塩析・溶解 分子内および分子間電子移動の分子軌道法による研究 クロコン酸結晶における赤外スペクトルの理論研究	核融合科学研究所 岡山大学大学院自然科学研究科 東京工業大学科学技術創成研究院 山形大学大学院有機材料システム研究科 九州産業大学理工学部 神奈川大学総合理学研究所 高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	中村 浩章 高石 和人 平田 圭祐 山門 陵平 末松安由美 田仲 二郎 岩野 薫
金属錯体に関する理論的研究 水素結合クラスターにおける赤外誘起異性化反応の観測と異性化経路の探索 色素増感光電極・光触媒及び太陽電池等の計算化学的研究 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 低分子非晶質有機半導体材料の熱的・化学的安定性および電荷輸送特性に関する計算 アゾキラル金属錯体の電子状態の DFT 計算 キラル超分子集合体の理論的検討 蛋白質による DNA 加水分解における溶媒の役割 化学反応の <i>ab initio</i> 計算による研究 クラスター複合体の反応性解析 分子シミュレーションによる分子集合体の研究 エノールエステルの不斉加水分解 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 分子配列によって制御された有機ホウ素錯体の発色機構の解明 第一原理及び古典分子動力学計算による Si 関連物質の構造形成プロセスと電子物性の解明 光化学反応の制御と応用に関する理論的研究	静岡理工科大学理工学部 北里大学理学部 産業技術総合研究所 福岡大学薬学部 山形大学大学院有機材料システム研究科 東京理科大学理学部 東京大学大学院工学系研究科 九州工業大学大学院情報工学研究院 愛媛大学工学研究科理学系 豊田工業大学クラスター研究室 名古屋文理大学情報メディア学科 明星大学理工学部 早稲田大学国際教養学部 名古屋工業大学工学研究科 産業技術総合研究所	関山 秀雄 石川 春樹 草間 仁 池田 浩人 横山 大輔 秋津 貴城 伊藤 喜光 入佐 正幸 長岡 伸一 市橋 正彦 本多 一彦 松本 一嗣 稲葉 知士 小野 克彦 森下 徹也
生体分子および溶媒の構造機能相関の解明 水素結合系における光化学過程の理論的研究 振電相互作用に関する理論的研究 振動円二色性分光法の超分子キラリティへの応用 発光性金属錯体の励起状態の研究 歪んだ多環芳香族化合物の構造と性質 光機能性分子の電子状態・構造・スペクトル計算 新規な典型元素化合物の構造と反応性の研究 超分子錯体に関する熱力学的研究 遷移金属ダイカルコゲナイドの第一原理計算 (II) ジチアシクロペンテン環トライマー骨格を有する短波長赤外光吸収材料の電子状態解明 典型元素の特性を活用した有機エレクトロルミネッセンス用発光材料の開発 第一原理シミュレーションによる固体酸化物触媒の機能解明 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 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 タンパク質凝集の分子シミュレーション 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 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 星間空間における環状分子の生成経路探索 分子シミュレーションによるイオン液体の研究 大規模 GW/BSE 法による非フラレン電子アクセプター太陽電池の界面電荷移動状態の解析 微小管のシーム領域における構造集団の分子動力学計算解析 4次元 MRI による脳の機能及び構造解析 機械学習を用いた機能的 MRI データ解析 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 分子クラスターの広帯域高分解能振動回転分光による分子間相互作用の研究	量子科学技術研究開発機構量子ビーム科学研究部門 立命館大学生命科学部 弘前大学大学院理工学研究科 京都大学福井謙一記念研究センター 愛媛大学大学院理工学研究科 日本工業大学工学部 東邦大学理学部 室蘭工業大学工学研究科 学習院大学理学部 東京工業高等専門学校 大阪大学産業科学研究所 静岡大学学術院工学領域 茨城大学工学部物質科学工学科 東京大学大学院工学系研究科 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 生命創成探究センター アストロバイオロジーセンター 分子科学研究所 分子科学研究所 信州大学農学部 生理学研究所 生理学研究所 大阪府立大学大学院理学系研究科 東京工業大学理学院	黒崎 譲 高橋 卓也 山崎 祥平 佐藤 徹 佐藤 久子 大澤 正久 渡邊総一郎 飯森 俊文 狩野 直和 井手 智仁 田中慎一郎 植田 一正 吾郷 友宏 中山 哲 斉藤 真司 江原 正博 奥村 久士 長坂 将成 古賀 信康 小松 勇 石田 干城 藤田 貴敏 梅澤 公二 福永 雅喜 近添 淳一 酒巻 大輔 水瀬 賢太

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
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
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
量子化学計算による反応機構の解明	産業技術総合研究所	栢沼 愛
質量分析における有機過酸化物の安定性の考察	東邦大学医学部	岡 真悠子
チモールブルーおよびプロモチモールブルーの電子状態解析	弘前大学教育学部	島田 透
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
4d または 5d 金属を含む複核および三核金属錯体の電子状態	岐阜大学工学部	海老原昌弘
π 共役拡張型有機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	小汲 佳祐
短寿命種や界面化学種の振動スペクトル解析	筑波大学数理学系	石橋 孝章
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
分子シミュレーションによる抗体設計	東京大学大学院工学系研究科	黒田 大祐
チオエーテルをアンカーとして持つ有機金属分子ワイヤーの開発	東京工業大学化学生命科学研究科	田中 裕也
分子系における磁性およびフォノン物性の第一原理計算	分子科学研究所	南谷 英美
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
Multi-Scale Modeling of Interstellar Radical Species on Water Ice	北海道大学低温研究所	W. M. C. Sameera
炭素鎖分子の永久双極子モーメントの再評価	上智大学理工学部	久世 信彦
QTAIM 二元関数解析法による結晶および不安定物質中における弱い相互作用の解析	和歌山大学システム工学部	林 聡子
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
高周期 14 族元素を含む化合物の構造物性理論計算	首都大学東京大学院都市環境科学研究科	瀬高 渉
多座配位子で構造規制された遷移金属クラスターの構造、電子状態および反応性	奈良女子大学研究院自然科学系	浦 康之
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
新規機能性有機色素の開発	岐阜大学工学部	船曳 一正
理論計算ならびに機械学習を利用した有機半導体、触媒開発	相模中央化学研究所	已上 幸一郎
高周期元素含む高反応性化学結合の理論的研究	立教大学理学部	箕浦 真生
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
配位子の最適化による高活性重合触媒の設計	相模中央化学研究所	長岡 正宏
電子状態計算にもとづく低次元開殻分子系物質の構造 - 物性相関の解明	分子科学研究所	草本 哲郎
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
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
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
ヘキサアザトリフェニレン電荷移動錯体の構造評価	関西学院大学理工学部	田中 大輔
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
DFT Calculation of the Diffusion of Methoxy Species on TiO ₂ (110) Surface	北海道大学触媒科学研究所	LIU CAN
GaN を用いた次世代パワーデバイスの計算科学による設計	名古屋大学大学院工学研究科	白石 賢二
多核構造を有する前周期遷移金属アルキリデンおよびアルキリジンクラスターの合成	岡山大学大学院自然科学研究科	黒木 堯
理論計算に先導される特異環境で発光する新規 π 共役系分子の開発	名古屋大学大学院理学研究科	村井 征史
7-メチルグアニン力場の作成	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
人工光合成に向けた有機金属錯体の電子状態に関する研究	東京都立大学大学教育センター	立花 宏
ピロール・酸化プロピレンクラスターのキラル認識の研究	静岡大学理学部	松本 剛昭
カーボンナノチューブおよび窒化ホウ素ナノチューブの合成メカニズム解明に向けた量子化学計算と分子動力学シミュレーション	東京大学大学院工学系研究科	丸山 茂夫
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
金属酸化物ナノクラスターの設計とその電子状態解析	東京大学大学院工学系研究科	鈴木 康介
新規双極性有機典型元素化合物の創成と反応性	北里大学理学部	内山 洋介
タンパク質間相互作用の分子間相互作用シミュレーションによる予測	東京大学大学院工学系研究科	平林 祐介
三重項消滅アップコンバージョンのための金属クラスター増感剤に関する計算科学的研究	立教大学理学部	三井 正明
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 荘一郎
EGS5 を用いたガンマ線誘起陽電子消滅計測のシミュレーション	分子科学研究所	平 義隆
有機パラジウム錯体の触媒作用に関する研究	東京電機大学工学部	山本 哲也
縮合多環芳香族化合物に基づく有機発光材料の開発	東京農工大学大学院工学研究院	中野 幸司
銀ヒドリドナノクラスターの構造解明	広島大学大学院先進理工系科学研究科	水田 勉

二成分型液晶の構造解析	北里大学理学部	吉田 純
分子動力学シミュレーションと機械学習を組み合わせたプロテインキナーゼCリガンド結合能予測モデルの開発	香川大学農学部	柳田 亮
複数の反芳香族骨格を集積させた π 電子系の量子化学計算	名古屋工業大学大学院工学研究科	高木 幸治
典型元素の特性を活用した新機能 π 共役分子の開発	茨城工業高等専門学校	江川 泰暢
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
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
遷移金属錯体触媒を用いる有機反応の反応機構研究	分子科学研究所	高谷 光
溶液中金属錯体の電子状態と反応性の理論的研究	大阪大学大学院工学研究科	小杉 健斗
錯体配位子を用いたランタノイド錯体の磁気的性質	金沢大学国際基幹教育院	三橋 了爾
柔軟な骨格による巨大金属錯体構造の設計に向けた計算による配座予測方法の検討	お茶の水女子大学基幹研究院自然科学系	三宅 亮介
細胞内の超硫黄分子の振動解析	東北大学大学院薬学研究科	宮田 大輔
分子シミュレーションと物理化学測定によるレクチン-多糖類複合体の相互作用解析と機能改変	東京大学大学院工学系研究科	大川 将志
エステルダンス反応の位置選択性に関する理論的考察	早稲田大学先進理工学部	太田 英介
生物分子系の電子構造及び反応性の解明に向けた計算化学的解析	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
液相糖類分子のXASスペクトルシミュレーション	東京大学大学院新領域創成科学研究科	佐々木岳彦
分子自由度とスピンの理論的研究	奈良女子大学自然科学系	土射津昌久
シュウドアズリンMet16変異体のQM/MM計算	茨城大学理工学研究科	山口 峻英
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
拡張アンサンブル法を用いた糖鎖クラスターの立体構造予測	医薬基盤研究所	李 秀榮
新規超原子価ヨウ素化合物の探索	東京工業大学物質理工学院	信田 尚毅
サブユニット集積型ナノサイズ空孔錯体の自己集合過程および機能の解明	東京大学大学院工学系研究科	堂本 悠也
生体分子複合体系の全原子・粗視化分子シミュレーション研究	神戸大学大学院システム情報学研究科	田中 成典
柔構造を持つマルチドメインタンパク質の構造空間探索のための分子シミュレーション	生命創成探究センター	加藤 晃一
菌類・地衣類代謝物の放射性セシウム蓄積機構および抗ウイルス機能に関する計算科学研究	日本原子力研究開発機構システム計算科学センター	数納 広哉
新規高機能性の不斉触媒研究	名古屋工業大学工学部	中村 修一
機能性ピビリドナート配位子を有する遷移金属錯体触媒によるアルコール脱水素化反応の機構研究	京都大学大学院人間・環境学研究科	新林 卓也
理論計算による内包フラレンの研究	東北大学大学院理学研究科	岡田 洋史
マイクロフロー反応場を用いて創製される準安定超分子構造の解析	京都府立大学大学院生命環境科学研究科	沼田 宗典
Theoretical Studies of Light-Matter Interactions in Molecular Systems	京都大学大学院工学研究科	Nguyen Thanh Phuc
分子動力学シミュレーションによるアミロイドペプチドの安定化構造の解析	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
インターエレメント多重結合をもつ有機イオンの反応機構に関する量子化学的研究	奈良女子大学自然科学系	竹内 孝江
典型金属触媒反応の量子化学計算を用いた反応機構解明	大阪大学大学院工学研究科	西本 能弘
階層方程式を用いた電子フォノン相互作用に関する計算研究：有機太陽電池におけるエキシトン移動及びホルスタイン・ハバードモデルへの応用	京都大学大学院理学研究科	谷村 吉隆
理論計算を用いた求核性コバルト錯体の触媒作用の解明	広島大学大学院先進理工系科学研究科	米山 公啓
超高速分光と量子化学計算を用いた光機能性分子の励起状態ダイナミクスの解明	九州大学大学院理学研究院	宮田 潔志
深層学習によるヒトの知覚アルゴリズムの探求	基礎生物学研究所	渡辺 英治
高反応活性な典型元素及び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
中間的なスピン状態を経由するコバルト触媒反応の計算化学的機構解析	北海道大学大学院薬学研究科	小島 正寛
複雑な星間有機分子生成反応の理論的研究	東洋大学理工学部	田代 基慶
金属錯体場における小分子の捕捉・活性化に関する計算化学的考察	名古屋工業大学大学院工学研究科	小澤 智宏
高分子合成を志向した有機素反応の反応機構解析	群馬大学大学院理工学府	覚知 亮平
シリコン基板上の有機分子吸着構造と電子状態の解析	横浜国立大学大学院工学研究院	大野 真也
アルケニルフルオリド同士のメタセシス反応実現のに向けた新規支持配位子の設計	相模中央化学研究所	上地 達矢
分子磁性体の統計熱力学	大阪市立大学大学院理学研究科	塩見 大輔
大腸菌脂質分子の力場作成	東京大学生物生産工学研究センター	篠田 恵子
イオン・原子及びイオン・分子衝突の理論的研究	宮崎大学工学部	五十嵐明則

(計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業利用枠)

課 題 名 (通年)

提案代表者

(計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業利用枠)

貴金属フリーの汎用元素ナノ触媒に向けた第一原理計算触媒および電極の電子状態のための理論研究	北海道大学大学院理学研究院	武次 徹也
新規多機能電解液の保護膜形成機構に関する理論的解析	早稲田大学大学院理工学術院	中井 浩巳
生体分子マシンにおけるマルチスケールな機能ダイナミクスのシミュレーション	東京大学大学院工学系研究科	山田 淳夫
高強度フェムト秒パルスにより引き起こされるナノ分子の電子・反応動力学イメージングに関する動力学理論	分子科学研究所	岡崎 圭一
省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション	理化学研究所	山崎 馨
次世代二次電池・燃料電池開発による ET 革命に向けた計算・データ材料科学	名古屋大学未来材料・システム研究所	押山 淳
環境適合型機能性化学品	物質・材料研究機構エネルギー・環境材料研究拠点	館山 佳尚
	大阪大学大学院基礎工学研究科	松林 伸幸

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

分類	中期計画区分 年度	第3期							
		2016	2017	2018	2019	2020			
						前期	後期	計	登録者数
共同研究	(1) 課題研究	2	1	2	1	1	1	1	5
	(2) 協力研究* (ナノプラット)	82	73	45	37	21	30	51	106
研究会	(3) 研究会	7	10	10	7	1	3	4	89
	(4) 若手研究活動支援	1	2	1	2	1	0	1	42
	(5) 岡崎コンファレンス	3	1	1	2	0	0	0	0
	所長招へい	81	100	110	101	3	7	10	10
	UVSOR 研究会	1	1	1	1	0	1	1	89
施設利用	(6)UVSOR	142	160	213	186	89	15	104	566
	(ナノプラット)	38	43	2	4	1	1	2	7
	(7) ①機器センター (ナノプラット)	196	162	153	153	64	75	139	275
	(7) ②装置開発室 (ナノプラット)	2	2	3	3	0	1	1	2
(7) ③計算科学研究センター	221	224	248	268	269	0	269	1,142	

* UVSOR 利用を含む。

年度ごとの実績として、共同研究と施設利用の分類では課題件数を示す。(1) 課題研究、(7) ③計算科学研究センターは、通年で1課題を1件のまま計数、それ以外の通年課題は前期と後期の2期分として、1課題を2件として年度計に表す。研究会の分類では開催件数を示す。ただし、所長招へいは旅費支給者人数を示す。右端列にある登録者数は、共同研究と施設利用の分類では課題登録者数、研究会の分類では参加人数を示す。

3-1-4 分子研研究会プログラム

【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7月10日(金) (オンライン)

- 9:30 - 9:35 西原 寛錯体化学会会長 挨拶
9:35 - 9:40 大場 正昭実行委員長 挨拶
9:40 - 9:45 趣旨説明 越山 友美
座長：越山 友美
9:45 - 10:10 非平面ビルディングブロックからなる分子集合体
焼山 佑美 (大阪大学大学院工学研究科)
10:10 - 10:35 刺激に応答する金属錯体の機能制御
中井 英隆 (近畿大学理工学部応用化学科)
10:35 - 11:00 電子状態インフォマティクスによる機能性分子の探索
杉本 学 (熊本大学大学院先端科学研究部)

座長：小林 厚志

- 11:15 - 11:40 速度論的制御に基づく金属錯体型マクロサイクルの構造変換と機能創出
酒田 陽子 (金沢大学理工研究域物質化学系)
11:40 - 12:05 金属錯体ナノ空間における分子捕捉と反応
松田 亮太郎 (名古屋大学大学院工学研究科)
12:05 - 12:30 消光経路のデータベースと機械学習を用いるランノイド発光材料の理解・分子設計
畑中 美穂 (慶應義塾大学理工学部化学科)

座長：山田 鉄兵

- 13:30 - 13:55 3Dドメインスワッピングによる金属タンパク質の超分子創成
廣田 俊 (奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科)
13:55 - 14:20 高分解能電子顕微鏡による配位高分子の形成機構研究
原野 幸治 (東京大学大学院理学系研究科)
14:20 - 14:45 金属錯体ユニットを精密配置したマクロサイクルによる超分子構造体の構築と分子捕捉
中村 貴志 (筑波大学数理工学系)

座長：二瓶 雅之

- 15:00 - 15:15 含窒素グラフェンナノリボン構造を有する Fe/N/C 触媒の調製と評価
松元 香樹¹, 小野田 晃², 林 高史¹ (¹大阪大学大学院工学研究科, ²北海道大学大学院地球環境科学研究科)
15:15 - 15:30 二次元中空シート型配位高分子の構造と磁気特性の可逆的変換
芳野 遼, 大谷 亮, 大場 正昭 (九州大学大学院理学研究院)
15:30 - 15:55 タンパク質金属配位子を利用した反応制御
藤枝 伸宇 (大阪府立大学大学院生命環境科学研究科)
15:55 - 16:20 ソフトクリスタル特性と希土類錯体の発光
長谷川 美貴 (青山学院大学理工学部)
16:20 - 16:25 閉会の挨拶 林 高史錯体化学会副会長
16:45 - 18:45 ポスターセッション

【分子研研究会】

ナノ空間で光が織りなす分子操作・化学反応制御の新展開
2020年12月4日(金)～5日(土) (オンライン)

12月4日(金)

- 13:00 - 13:10 開会の挨拶 (南本大穂 (北海道大学))
一般講演：発表 20分, 質疑 5分
チュートリアル講演：発表 55分, 質疑 5分
第一セッション (座長：袁輪陽介 (大阪大学))
13:10 - 13:35 O-01 土井 謙太郎 (豊橋技術科学大学)「マイクロ・ナノ粒子の光操作と電気検出」
13:35 - 14:00 O-02 西山 嘉男 (金沢大学)「ナノ物質における時空間挙動の観測と制御」
14:00 - 14:25 O-03 赤松 大輔 (産業技術総合研究所)「光トラップされたナノ微粒子と冷却原子の相互作用の研究」

第二セッション (座長：南本大穂 (北海道大学))

- 14:45 - 15:10 O-04 西原 大志 (京都大学)「カーボンナノチューブの熱励起子輻射の研究」
15:10 - 15:35 O-05 杉本 敏樹 (分子科学研究所)「非線形レーザー分子分光で明らかになってきた固体表面上の水分子の特異な水素結合構造と物性・機能」
15:35 - 16:00 O-06 数間 恵弥子 (理化学研究所)「単一酸素分子のプラズモン誘起解離反応の実空間観測」

第三セッション (座長：南本大穂 (北海道大学))

- 16:20 - 17:20 T-01 ◆チュートリアル講演 笹木 敬司 (北海道大学)「光圧操作の基礎と応用」

12月5日 (土)

第四セッション (座長：細川千絵 (大阪市立大学))

- 9:00-10:00 T-02 ◆チュートリアル講演 岡本 裕巳 (分子科学研究所)「キラリティと光学活性の常識と常識はずれ」
10:00-10:25 O-07 石井 智 (物質・材料研究機構)「遷移金属窒化物の光励起ホットキャリアとその応用」
10:25-10:50 O-08 岩佐 豪 (北海道大学)「双極子近似を超えた近接場光と分子の多重極相互作用と励起状態制御に向けて」

第五セッション (座長：東海林竜也 (神奈川大学))

- 11:10-11:35 O-09 柚山 健一 (大阪市立大学)「界面での分子・ナノ粒子の光マニピュレーション」
11:35-12:00 O-10 有川 敬 (京都大学)「テラヘルツ光渦を用いた擬似局在表面プラズモンの多重極モード選択励起」
12:00-12:25 O-11 米谷 玲皇 (東京大学)「ナノメカニクスと光センシング」
12:25-12:30 閉会の挨拶 (南本大穂 (北海道大学))

【アジア連携分子研究会】

Next Generation Spectro-Microscopy and Micro-Spectroscopy Workshop

2020年10月28日 (水) ~ 29日 (木) (オンライン)

1 Day (Oct. 28)

- 13:30-14:00 Registration open (ZOOM connection test)
14:00-14:15 Opening
14:15-14:50 Dr. Fumihiko Matsui (IMS)
Soft-x-ray photoelectron momentum microscopy for selective atomic/molecular orbital excitation
14:50-15:25 Prof. Jongwoo Lim (Seoul National Univ.)
Operando electrochemical scanning x-ray transmission microscopy for lithium-ion batteries
15:25-16:00 Prof. Wen-Xin Tang (Chongqing Univ.)
In situ observation of meta-stable magnetization state in Fe/W(110) nanostructures
16:15-16:50 Dr. Takuji Ohgashi (IMS)
Current Status of the Scanning Transmission X-Ray Microscopy Beamline in UVSOR
16:50-17:25 Prof. Takafumi Sato (Tohoku Univ.)
Nano-ARPES study of novel topological materials
17:25-18:00 Dr. Takuya Masuda (National Institute for Materials Science)
Development of a laboratory-based in situ XPS apparatus for liquid samples and electrochemical interfaces
18:00-18:30 Discussion&Workshop photo

2 Day (Oct. 29)

- 13:30-14:00 Registration open (ZOOM connection test)
14:00-14:05 Second Day Opening
14:05-14:40 Dr. Hung-Wei Shiu (NSRRC)
STXM at TPS 27A1: Capabilities and Opportunities
14:40-15:15 Dr. Tzu-Hung Chuang (NSRRC)
Photoelectron related image and nanospectroscopy endstation at TPS 27A2: Capabilities and opportunities
15:15-15:50 Prof. Michael S Altman (Hong Kong Sci. Tech. Univ.)
Strain and Permeability of Graphene studied by Cathode Lens Microscopy, Diffraction and Spectroscopy
16:05-16:40 Dr. Michael Man (OIST)
Visualization of excitons in 2D semiconductor by time-resolved ARPES
16:40-17:15 Prof. Lijuan Zhang (Shanghai Synchrotron Radiation Facility)
Stability and inner structure of nanobubbles investigated by STXM
17:15-17:50 Dr. Nozomu Ishiguro (Tohoku Univ.)
Nano-scale Chemical State Visualization using Ptychography-XAFS
17:50-18:30 Discussion&Closing

【分子研研究会】

錯体化学から始まる学術展開の可能性

2021年3月11日（木）～12日（金） 岡崎コンファレンスセンターおよびオンライン

【3月11日（木）第1日】

- 13:00-13:10 開会の辞・趣旨説明
松田 亮太郎（名古屋大学大学院工学研究科）
- 13:10-13:50 脳内蛋白質複合体の研究を通して、生物無機化学の未来について考えること
横井 紀彦（自然科学研究機構生理学研究所）
- 13:50-14:30 超分子錯体化学を基盤とした細胞機能の模倣と制御
窪田 亮（京都大学大学院工学研究科）
- 14:30-15:10 対アニオンの設計による配位重合触媒作用の制御
田中 亮（広島大学大学院先進理工系科学研究科）
- 15:30-16:10 錯体化学に立脚した結合開裂過程の研究
森本 祐麻（大阪大学大学院理学研究科）
- 16:10-16:50 錯体化学研究から企業へ：研究開発ジャーニー
栗谷 真澄（昭和電工研究開発部）

【3月12日（金）第2日】

- 9:00-9:40 シアノ系金属錯体集積体の構造ひずみに基づく機能開拓
大谷 亮（九州大学大学院理学研究院）
- 9:40-10:20 結晶性多孔体の新機能開拓
貞清 正彰（東京理科大学理学部第一部）
- 10:20-11:00 金属クラスター集積空間におけるイオン輸送現象
吉成 信人（大阪大学大学院理学研究科）
- 11:20-12:00 柔軟な電子状態を示す外場応答性金属錯体の開発
関根 良博（熊本大学大学院自然科学研究科）
- 12:00-12:40 原子層半導体を舞台とする物質化学とデバイス工学
桐谷 乃輔（大阪府立大学大学院工学研究科）
- 12:40-13:00 講評・閉会の辞
北川 宏（京都大学大学院理学研究科・錯体化学会会長）

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 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
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
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
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
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
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
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
韓国化学会物理化学ディビジョン	韓国	分子科学研究所と韓国化学会物理化学ディビジョンとの日韓分子科学合同シンポジウムに関する覚書	日韓の分子科学分野の先導的研究者が集まるシンポジウムを定期的に開催し、両国の分子科学の発展に資する	2018.10.22	2022.10.21
中央研究院原子と分子科学研究所	台湾	分子科学研究所と中央研究院原子と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)	2020. 1.12	2023. 1.11
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
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
インド工科大学カンプル校	インド	自然科学研究機構分子科学研究所とインド工科大学カンプル校との分子科学分野における共同研究に関する覚書	学術交流及び共同研究等の実施	2020. 4. 1	2024. 3.31

表2 外国人研究者数の推移

(単位：人)

中期計画区分		第3期					
年度		2016	2017	2018	2019	2020	計
外国人研究職員（客員）		0	2	0	0	0	2
日本学術振興会外国人招へい研究者		1	1	1	1	0	4
日本学術振興会外国人特別研究員		0	0	0	0	0	0
国際協力研究員	長期	36	29	27	21	7	120
	短期	44	63	52	39	0	198
研究会参加者（オンライン参加者含）		50	9	34	39	61	193
招へい研究員等		35	27	34	36	2	134
合 計		166	131	148	136	70	651

国際協力研究員＝短期：施設利用者（学生含む）、長期：インターンシップ生

表3 外国人研究者の延べ来所人数の国別内訳推移

(単位：人)

中期計画区分	第3期					
年度	2016	2017	2018	2019	2020	計
フランス	23	19	24	20	0	86
ドイツ	27	20	20	40	1	108
イギリス	2	5	1	2	0	10
スウェーデン	9	5	0	5	0	19
フィンランド	5	8	6	5	1	25
アメリカ	15	12	12	5	0	44
中国	11	25	9	15	2	62
韓国	20	14	21	27	1	83
台湾	27	17	25	29	2	100
タイ	17	11	26	16	5	75
インド	3	6	6	2	0	17
マレーシア	0	3	6	3	1	13
その他*	20	25	24	21	0	90
合 計	179	170	180	190	13	732

*その他に含まれる主な国は、オーストラリア、シンガポール、オーストリア、オランダ、スイス、イスラエル、ロシア

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。

このような背景の下、2006年には全国の分子科学研究者の立案に基づく先導的な中小規模の国際研究会を開催する枠組みを維持継続するために、運営交付金による分子研独自の事業として「岡崎コンファレンス」を再開した。同年の第66回岡崎コンファレンスを皮切りに2007年以降は研究会の開催提案を広く公募し、全国共同利用による共同研究の一環として継続的に開催してきた。しかしながら2020年は世界的コロナ禍のため岡崎コンファレンスとしての国際研究会の提案・採択が無く、本コンファレンスは2019年の第80回を最後に開催されていない。一方で、2020年度にも岡崎コンファレンスの枠組みとは別に分子研PIが主導的に関与するwebを利用した幾つかの国際研究会が開催されている。2021年以降はいわゆるwith-/after-coronaの世界において国際研究集会のあり方も良くも悪くも変わらざるを得ないと考えられ、分子研共同利用においてもweb会議の環境整備・開催支援に注力しつつある。今後は研究会開催形式の変化にも柔軟に対応しwith-/after-coronaにおける「岡崎コンファレンス」をさらに活性化していきたい。

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

（2021年3月31日現在）

中期計画区分	第1期 以前	第2期 2010～ 2015	第3期						計
	1977～ 2009		2016	2017	2018	2019	2020	2016～ 2020 計	
北海道大学	12	0							12
室蘭工業大学	2	0							2
東北大学	13	6							19
山形大学	6	1							7
茨城大学	0	2							2
筑波大学	2	1							3
宇都宮大学	4	0							4
群馬大学	1	0							1
埼玉大学	2	0							2
千葉大学	5	1							6
東京大学	40	5		1	3	8	6	18	63
東京工業大学	42	5	2	1				3	50
お茶の水女子大学	6	0							6
横浜国立大学	1	2							3
金沢大学	11	0							11
新潟大学	6	0							6
福井大学	10	0							10
信州大学	5	1			1			1	7
岐阜大学	2	0							2
静岡大学	0	4							4
名古屋大学	99	59	12	9	11	5	13	50	208
愛知教育大学	1	0							1
名古屋工業大学	17	7			1			1	25
豊橋技術科学大学	40	0							40
三重大学	7	0							7
京都大学	47	2			3	2		5	54
京都工芸繊維大学	6	0							6
大阪大学	27	6		1				1	34
神戸大学	6	0							6
奈良教育大学	1	0							1
奈良女子大学	4	0							4
島根大学	1	0							1
岡山大学	16	0							16
広島大学	38	0							38

山口大学	1	0							1
香川大学	0	0			1			1	1
愛媛大学	9	0							9
高知大学	2	0							2
九州大学	45	3							48
佐賀大学	13	0							13
長崎大学	2	0							2
熊本大学	6	0							6
宮崎大学	6	0							6
琉球大学	1	0							1
北陸先端科学技術 大学院大学	6	1							7
奈良先端科学技術 大学院大学	0	0			1			1	1
総合研究大学院大学	0	0				1		1	1
首都大学東京	20	0							20
名古屋市立大学	34	14	2	2	4	5	6	19	67
大阪市立大学	4	0							4
大阪府立大学	2	0							2
姫路工業大学	1	0							1
学習院大学	1	0							1
北里大学	2	0							2
慶應義塾大学	9	0							9
上智大学	1	0							1
立教大学	0	2							2
中央大学	0	1							1
東海大学	3	0							3
東京理科大学	9	0							9
東邦大学	3	0							3
星薬科大学	1	0							1
早稲田大学	13	0							13
明治大学	1	0							1
名城大学	4	0							4
中部大学	0	0					1	1	1
岡山理科大学	1	0							1
海外機関	4	28	1	2	2	3	2	10	42
計	684	151	17	16	27	24	28	112	947

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専攻の入学人数、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。

担当教員と在籍学生数 単位：人

(2020年5月1日現在)

専攻		構造分子科学		機能分子科学	
担当教員	教授	7		8	
	准教授	6		6	
	助教	12		20	
	計	25		34	
学生数	入学年度	5年一貫 〈定員2〉	博士後期 〈定員3〉	5年一貫 〈定員2〉	博士後期 〈定員3〉
	2020	2	3	3(2)	2
	2019	0	2	4(1)	2(2)
	2018	4	1	3	2(2)
	2017	2	1(1)	1	2(1)
	2016	2	0	2(1)	1(1)
	2015	0	1	1	0
	計	10	8(1)	14(4)	9(6)

() は留学生数で内数。

フランス1名、中国3名、韓国1名、タイ2名、インド3名、パキスタン1名、二専攻合計で11名。

入学と学位取得の状況 単位：人

(2021年3月31日現在)

区分	専攻	中期計画区分	第1期以前	第2期	第3期						合計
		年度	1989～2009	2010～2015	2016	2017	2018	2019	2020	2016～2020計	
入学人数	構造分子科学	5年一貫	6	15	5	4	9	0	2	20	41
		博士後期	143	20	1	1	1	3	5	11	174
	機能分子科学	5年一貫	5	10	5	5	4	4	3	21	36
		博士後期	114	18	3	3	2	2	3	13	145
	計		268	63	14	13	16	9	13	65	396

学位 取得者数	構造分子科学	課程博士	112	20	4	6	3	2	4	19	151
		論文博士	12	0	0	0	0	0	0	0	12
	機能分子科学	課程博士	87	19	4	2	0	3	3	12	118
		論文博士	14	3	0	0	1	0	0	1	18
		計	225	42	8	8	4	5	7	32	299

外国人留学生数（国別入学者数） 単位：人

(2021年3月31日現在)

中期計画区分	第1期 以前	第2期	第3期						合計	
			1989～ 2009	2010～ 2015	2016	2017	2018	2019		2020
フランス	0, 1						0, 1		0, 1	2
ドイツ								1, 0	1, 0	1
ロシア	0, 1									1
チェコ	0, 1									1
カナダ					1, 0				1, 0	1
中国	19, 6	14, 5	0, 1				0, 1	0, 3	0, 5	49
韓国	2, 0					0, 1			0, 1	3
タイ	0, 1	2, 3	0, 2	0, 1				1, 0	1, 3	10
インド	1, 0	0, 2	0, 1			0, 1	0, 1		0, 3	6
バングラディッシュ	6, 2									8
パキスタン				1, 0					1, 0	1
ネパール	2, 1	0, 2								5
マレーシア		1, 0								1
ベトナム	0, 1	0, 1								2
フィリピン	0, 3									3
エジプト				0, 1					0, 1	1
ナイジェリア	0, 1									1
合計	30, 18	17, 13	0, 4	1, 2	1, 2	0, 3	2, 3	4, 14	4, 14	96

構造分子科学専攻(A)と機能分子科学専攻(B)の入学者数をA, Bで表す

大学別入学者数 単位：人

(2021年3月31日現在)

専攻	構造分子科学				機能分子科学				総計
	第1期 以前	第2期	第3期	計	第1期 以前	第2期	第3期	計	
	1989～ 2009	2010～ 2015	2016～ 2020		1989～ 2009	2010～ 2015	2016～ 2020		
北海道大学	2		2(2)	4(2)	2			2	6
東北大学	1		1	2	1	1(1)		2(1)	4
山形大学					2	1		3	3
千葉大学	5	1(1)	1	7(1)	3			3	10
東京農工大学	1		1(1)	2(1)					2
東京工業大学		3(3)		3(3)	3			3	6
新潟大学					1		1(1)	2(1)	2

長岡技術科学大学	1		1(1)	2(1)					2
金沢大学	2			2	3	1		4	6
信州大学	3		1	4	1			1	5
岐阜大学						1	1(1)	2(1)	2
名古屋大学	2	3(3)	5(5)	10(8)	5	2	4(3)	11(3)	21
愛知教育大学			1(1)	1(1)					1
名古屋工業大学	1			1			2(2)	2(2)	3
豊橋技術科学大学	5			5	2	1(1)		3(1)	8
京都大学	12(1)	3	2(1)	17(2)	16	1	1	18	35
大阪大学	5	1(1)		6(1)	4			4	10
神戸大学	4			4		1(1)		1(1)	5
鳥取大学	1			1		1		1	2
岡山大学	3	1		4	2		1	3	7
広島大学	1		1	2	3			3	5
徳島大学							1(1)	1(1)	1
九州大学	2	1(1)		3(1)	2		1	3	6
熊本大学	3(1)		1(1)	4(2)					4
群馬工業高等専門学校		1(1)		1(1)					1
奈良工業高等専門学校						1(1)	1(1)	2(2)	2
宇部工業高等専門学校							1(1)	1(1)	1
北九州工業高等専門学校			1(1)	1(1)					1
名古屋市立大学					3	1	3(3)	7(3)	7
大阪府立大学	2		1	3	2			2	5
兵庫県立大学	2		1(1)	3(1)	1			1	4
いわき明星大学						1		1	1
城西大学			1(1)	1(1)					1
北里大学	1		1(1)	2(1)					2
東海大学	1			1		1(1)		1(1)	2
東京電機大学	1			1			1(1)	1(1)	2
東京理科大学	3	1(1)	1	5(1)	1	1(1)		2(1)	7
東邦大学	1(1)		1(1)	2(2)	2			2	4
日本大学			1	1	2(1)		1	3(1)	4
法政大学	2	1(1)		3(1)					3
立教大学		1		1					1
神奈川大学			1(1)	1(1)					1
愛知工業大学							1(1)	1(1)	1
名城大学	3		1(1)	4(1)			1(1)	1(1)	5
立命館大学	1			1	2	1(1)	1(1)	4(2)	5
関西大学	1			1			1(1)	1(1)	2
福岡大学		1(1)		1(1)					1
海外機関・その他	30	17(2)	4(1)	51(3)	18	12(3)	11(3)	41(3)	92
合計	102(3)	35(15)	31(20)	168(38)	81(1)	28(10)	34(21)	143(32)	311

() は5年一貫で内数。

第1期(2009年度)以前の入学者があった大学を以下に示す。

東京大学(16名)。北陸先端科学技術大学院大学, 早稲田大学(7名)。学習院大学, 慶應義塾大学(6名)。お茶の水女子大学(5名)。愛媛大学(4名)。電気通信大学, 静岡大学, 東京都立大学(3名)。室蘭工業大学, 筑波大学, 京都工芸繊維大学, 山口大学, 鹿児島大学, 大阪市立大学, 姫路工業大学, 中央大学, 岡山理科大学(2名)。群馬大学, 横浜国立大学, 富山大学, 福井大学, 三重大学, 奈良女子大学, 佐賀大学, 琉球大学, 奈良先端科学技術大学院大学, 石巻専修大学, 青山学院大学, 国際基督教大学, 明星大学, 静岡理工科大学, 龍谷大学, 甲南大学, 放送大学(1名)。

専攻		2010～2019年度修了生の 修了直後の進路状況			1991～2019年度修了生の 現在の状況		
		構造分子科学	機能分子科学	計	構造分子科学	機能分子科学	計
大学・ 公的機関等	教授	0	0	0	13	13	26
	准教授	1	0	1	20	8	28
	講師	0	0	0	3	2	5
	助教	0	0	0	12	14	26
	研究職	23	14	37	—	—	—
	小計	24	14	38	—	—	—
進学				0	—	—	—
民間企業（研究職含む）		2	6	8	—	—	—
その他		7	5	12	—	—	—
合計		33	25	58	—	—	—

修了直後は1年以内の就職・進学先等。
各項目には海外の機関・団体等を含む。

3-3-3 オープンキャンパス

2020年6月6日（土）、Zoomを用いたオンライン形式で分子研オープンキャンパス「ひとつも分子も みんなちがってみんないい」を開催した。例年、分子研オープンキャンパスは分子研シンポジウムと同時開催されている（シンポジウムの翌日）。しかし、2つの異なるイベントを同時開催することで、オープンキャンパスの目的である「総研大生募集のための分子研の宣伝」が十分に果たせないことから、本年度は分子研オープンキャンパスの単独開催となった。加えて、新型コロナウイルス感染症の感染拡大に伴い、学生を分子研に招くことが難しくオンライン形式で実施することとなった。本イベントの宣伝は、ポスター（4/10送付。配布先として高専58校を新たに追加、大学生協の店舗を71拡充）および分子研HPで行った。さらに新たな試みとして、昨年度の夏の体験入学参加者、高専の就職情報等の窓口に案内メールを送付した（それぞれ4/27, 5/11）。結果として、参加人数は21名であった（参加申込23名：大学生11名、大学院生6名、社会人2名、高専生4名、1名キャンセル、1名欠席）。これまでに開催した分子研シンポジウム・オープンキャンパスの参加者のうち、単身で参加した人を、総研大入学をより前向きに考えている人と仮定して人数を数えると、例年10名程度であり、今年度の参加者数はこの数を大きく上回る。これは、オンライン形式のメリットである「気軽に参加できること」の結果であると考えている。残念な点は、コロナ禍で学生が登学できず、ポスターが学生の目にあまり触れなかったことである（ポスターを見て参加した人は2名）。しかし一方で、コロナ禍の解消でより多くの参加者を見込めることも示しており、次回以降の参加人数増加に期待が持てる。オープンキャンパス当日は、まず川合所長による分子研の紹介、江原教授による総研大・入試の紹介が行われ、続いて5つのセッションに分かれて各教員が最大40分の持ち時間で、学生と対話を交えながら研究室の紹介を行うというコンセプトでプレゼンを行った。発表する教員および発表の順番は、参加者の要望にできる限り答えられるようにした。また、セッション間の移動を可能にするため、各教員の開始時間は全てのセッションで同時刻にした。その後、質問会を実施し、事前に参加者から受け付けた質問（受験・就職・経済的サポート・研究生生活・研究に対する考え方等）、に回答した。本オープンキャンパスに参加した人のうち、6名が今年度中に分子研を訪問した。

3-3-4 体験入学

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。本年度は、新型コロナウイルス感染拡大に伴い、例年8月の第2週に受け入れてきた体験入学を中止し、感染者数が落ち着いている時期に、各研究室個別に見学者や体験入学者を受け入れる対応をとった（受入時期と感染症対策は岡崎三機関の規則に従った。）。選考の結果、本年度は27名の学生（学部学生17名、大学院修士課程学生3名、高専生5名、社会人2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。

6月6日(火)：分子研オープンキャンパス（オンライン開催）で体験入学の中止と研究室ごとの個別受入を周知

1月8日(金)：体験入学WEB説明会

参加者の内訳、受入研究室、受入期間は以下の通りである。

	所属	身分	学年	訪問先	受入期間
1	中部大学	学部	4	瀬川研究室	6月25日
2	日立金属株式会社	社会人	既卒	小林研究室・山本研究室	7月6日～8日
3	東京理科大学	学部	4	杉本研究室	7月1日
4	横浜市立大学	社会人	既卒	秋山研究室	7月3日
5	名城大学	学部	4	加藤研究室・飯野研究室	7月14日
6	京都大学	学部	3	杉本研究室	7月2日～4日
7	名城大学大学院	修士	2	魚住研究室	7月14日
8	筑波大学	学部	3	杉本研究室	9月9日～12日
9	東京理科大学	学部	3	瀬川研究室	10月9日
10	岐阜大学	学部	3	瀬川研究室	10月15日
11	福井大学	修士	2	秋山研究室	10月29日
12	名古屋大学 大学院	修士	2	瀬川研究室	11月18日
13	京都大学	学部	3	杉本研究室	12月17日～18日
14	京都大学	学部	3	杉本研究室	12月17日～18日
15	奈良工業高等専門学校	高専専攻科	1	瀬川研究室	3月8日～9日
16	奈良工業高等専門学校	高専	5	魚住研究室	3月15日～17日
17	岡山理科大学	学部	3	加藤研究室	3月8日～10日
18	近畿大学	学部	3	大森研究室	2月28日～3月4日
19	岐阜大学	学部	3	瀬川研究室	3月8日～9日

20	北海道大学	学部	4	小林研究室	2月25日～3月1日
21	京都大学	学部	3	杉本研究室	3月2日～6日
22	京都大学	学部	3	杉本研究室	3月2日～6日
	京都大学（2回目）	学部	3	杉本研究室	3月24日～27日
23	神奈川大学	学部	3	小林研究室	3月16日～17日
24	龍谷大学	学部	3	草本研究室	3月15日～18日
25	鶴岡工業高等専門学校	高専	5	小林研究室	3月9日～13日
26	鶴岡工業高等専門学校	高専専攻科	1	小林研究室	3月9日～13日
27	鶴岡工業高等専門学校	高専	5	小林研究室	3月9日～13日

3-3-5 総研大アジア冬の学校

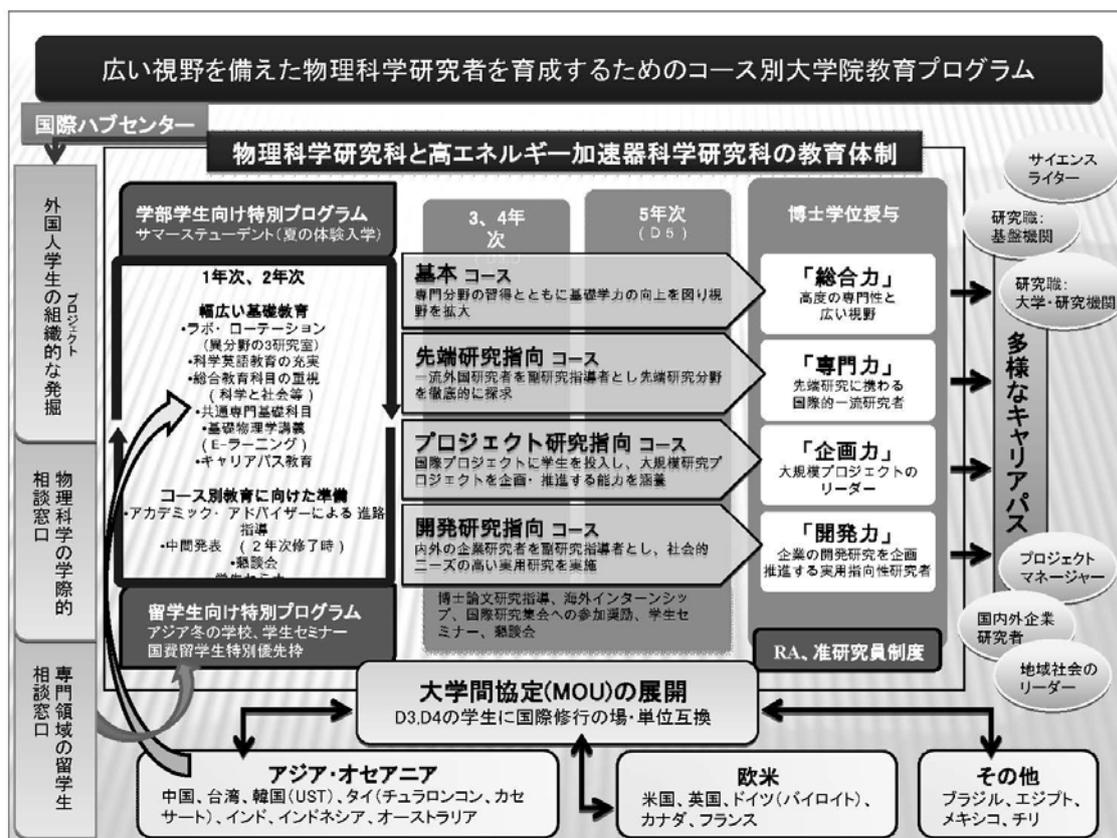
総研大・物理科学研究科では、研究科内の5専攻で行っている研究・教育活動をアジア諸国の大学院生及び若手研究者の育成に広く供するために、2004年度よりアジア冬の学校を開催してきた。新型コロナウイルスの感染拡大に伴い、2020年度の総研大アジア冬の学校は中止を決定した。

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」が実施された。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きた。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た。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年度以降もプログラムを継続してきたが、2019年度以降、本プログラムからの予算支援がなくなったため、「先端研究指向コース」等で実施するインターンシップは、全学で公募する「SOKEDNAI 研究派遣プログラム」へ統合されている。2018年度からは、基本コースは廃止されているが、当該コース科目を履修（単位取得）することは可能である。



3-3-7 統合生命科学教育コース群

総研大では、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」を設置している。

「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、8科目(①統合生命科学入門、②イメージング科学、③発生生物学III、④進化ゲノム生物学、⑤遺伝学、⑥生体分子シミュレーション入門、⑦機能生体分子科学、⑧統合進化学)が実施された。コロナ禍においての実施であったため、遠隔講義配信システムに代わりWeb会議システム(Zoom)を用いての実施となった。一部講義では、感染拡大防止を十分に考慮したうえで講義室及びZoomの併用という形で実施された。また、演習を含む講義では、受講者にPCモニターを2画面(講義用・演習用)用意してもらう等の工夫がされており、来年度以降の講義実施において参考になる機会となった。

3-4 その他

3-4-1 分子研コロキウム

分子研コロキウムは、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し、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。今年度 949 回を数える歴史あるセミナーであるが、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所員に正しく理解されているかは疑わしい状況にある。1988 年「総合研究大学院大学」の設立、2003 年「国立大学法人法」の制定にともない、所長、教授、准教授が、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るなど、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事実はあるが、コロキウム本来の趣旨に立ち返り、そ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、昨年度からの申し送りに基づき、(i) 領域推薦枠の導入と (ii) 4 月から 3 月までの通年開催を検討した。前者は、お招きする講師の選出に複数の教員が関わることでコロキウムへの関心を高めることが主な目的であり、後者は、コロキウムの開催が年末から年度末にかけて集中してしまうここ数年の傾向を考慮しての対策である。新型コロナウイルス感染拡大の影響により、当初の計画とは異なったが、領域推薦による開催は実現でき、通年開催の方針は次年度に引き継がれることになった。

コロナ禍においてもコロキウムを開催できる体制を整えるためにオンライン化を進めると共に、状況に応じて所外への公開やオンサイト・オンライン併用を採用するなどの対応をとった。研究者間の交流を目的として例年おこなわれてきたワイン会や懇親会は原則中止としたが、コロキウム後に別途オンラインの意見交換会などを設けるなどの代替案を採用した。オンライン化にともなって参加者は大幅に増え、所外公開時は 100 人前後の参加登録があるなど非常に盛況であった。議論も活発であり、オンライン化の良い面を認識することができた。一方で、所外公開のコロキウムでは、専門性の高い議論が活発におこなわれる反面、専門外の研究者や学生からの質問がし難いという意見もあり、運営方法はその都度改善していくことが必要になるであろう。新型コロナウイルス対策がきっかけであったが、オンラインでの所外発信という新しい選択肢ができたことで、コロキウムが講演者と所内外の研究者を広く巻き込んだ「ブレインストーミング」の場となることを期待したい。

以下に、2020 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	参加人数
942	2020. 7. 3 (オンライン)	気泡が形作る有機-水二相反応場と酸化反応	倉橋 拓也 (長崎県立大学看護栄養学部教授)	37
943	2020. 7.22 (オンライン)	分子キラリティによる電流/スピン流変換機能の創出	須田 理行 (京都大学大学院工学研究科准教授)	54
		分子研で行った生物学研究	塚本 寿夫 (神戸大学大学院理学研究科准教授)	
944	2020. 9. 2 (オンライン)	Controlling Single-Molecule Motion at Surfaces	Prof. Leonhard Grill (University of Graz, Austria)	109
945	2020.10. 7 (オンライン)	Scanning Tunneling Spectroscopy of Molecules on a Superconducting Substrate	Prof. Katharina Franke (Freie Universität Berlin)	86

946	2020.11. 6 (オンライン・ オンサイト併用)	Where Science and Venture Capital Meet	Mr. Ken Hood (FusionX Ventures)	
	2020.11. 6 (オンライン・ オンサイト併用)	Supramolecular Polymerization: Its Significance and Applications	相田 卓三 (東京大学大学院工学系研究 科教授)	107
947	2020.11.25 (オンライン・ オンサイト併用)	革新的イオニクス材料創成と全固体電池 の実現——リチウム系を中心に——	菅野 了次 (東京工業大学科学技術創成 研究院教授)	46
948	2020.12.16 (オンライン・ オンサイト併用)	プラズモンの化学のその先へ Beyond Plasmonic Chemistry	三澤 弘明 (北海道大学電子科学研究所 特任教授)	27
949	2021. 3.26 (オンライン・ オンサイト併用)	次世代放射光と東北大学の役割	村松 淳司 (東北大学国際放射光イノ ベーション・スマート研究セン ター教授)	44
		次世代放射光計画の概要とコアリジョン コンセプトについて	高田 昌樹 (東北大学国際放射光イノ ベーション・スマート研究セン ター 教授)	
		次世代放射光コアリジョンビームライン	中村 哲也 (東北大学国際放射光イノ ベーション・スマート研究セン ター 教授)	

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2020年4月1日現在で36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。なお、2021年4月より技術推進部として再編成される予定である。

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
令和 2	奈良先端科学技術大学院大学	令和 2 年 9 月 10-11 日	機器・分析	オンライン開催
	東北大学	令和 3 年 3 月 3-5 日	加工・開発, 電子回路・測定・実験, 分析・評価・観測, 生物・生命, 情報・ネットワーク, 安全・保守, 建築・土木, 社会貢献・組織運営, 実験・実習技術	オンライン開催

4-1-2 技術研修

1995 年度より、施設に配属されている技術職員を対象として、他研究所・大学の技術職員を一定期間、分子研の附属施設に受け入れ技術研修を行っている。分子研のような大学共同利用機関では、研究者同士の交流が日常的に行われているが、技術者同士の交流はほとんどなかった。他機関の技術職員と交流が行われれば、組織の活性化、技術の向上が図れるであろうという目的で始めた。この研修は派遣側、受け入れ側ともに好評だった。そこで、一歩進めて、他研究機関に働きかけ、受け入れ研修体制を作っていただいた。そうした働きかけの結果、1996 年度より国立天文台が実施し、1997 年度には高エネルギー加速器研究機構、1998 年度からは核融合科学研究所が受け入れを開始し現在も続いている。法人化後は、受け入れ側の負担や新しい技術の獲得には大きく寄与していないため、実施件数は少なくなってきた。そこで、2007 年度からセミナー形式で外部より講師を招き、併せて他機関の技術職員も交えて「技術課セミナー」を行っている。この「技術課セミナー」は今後、様々な技術分野のトピックを中心に定期的に開催する予定である。また、従来の受け入れ研修も小規模ながら続けている。なお、2020 年度は実施できなかった。

表 2 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

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）
中村永研	日本化学会化学技術有功賞（2021）

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、2004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。

特に今年度は、新型コロナウイルス感染症の予防および拡大防止のため、岡崎3機関等で策定されたコロナ対策活動指針に準拠して、法定の「安全講習」と「安全巡視」を実施した。また所内新型コロナウイルス感染症対策の基礎資料として、明大寺地区の全部門について所属員の動線調査を行い、それに基づき「各部門の消毒エリア想定図」を作成した。一方、化学物質管理の面では、そのオンライン管理の最新化のため、薬品管理システム（CRIS）をアップグレードし、操作説明会をオンラインで実施した。防災面では、南海トラフ地震発生の切迫性の高まりに対応するため、「実験室用耐震対策ガイドライン」、「防災訓練のシナリオ」、「緊急連絡のしおり」等の防災対策資料をより実践的なものへと改訂を行っている。

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、後者は一般公開、分子科学フォーラム、岡崎市民大学講座等である。また、全国の中学・高等学校の団体から、個人の申し込みまで、見学者を受け入れている。

4-3-1 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	入場者数
第11回	2006.10.21	2058人
第12回	2009.10.17	1346人
第13回	2012.10.20	1126人
第14回	2015.10.17	2600人
第15回	2018.10.20	3878人

4-3-2 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。当フォーラムには、隣接する岡崎高校のスーパーサイエンス事業のご協力を頂き、多数の高校生の皆さんにも参加して頂いている。さらに、小学生以下の小さなお子さんの参加も見うけられるようになった。若い参加層の皆さんから活発な質問をお寄せ頂き、講演を盛り上げて頂いている。地域に根差した公開講座会として、広く認知されてきている。

本年度の実施状況は以下の通り。(すべてオンライン開催)

回	開催日	テーマ	講演者	参加人数
125	2020.10.23	恋愛下手？ それじゃ科学は伝わらない ～何が人をその気にさせるのか～	小林 隆司 (物質材料研究機構広報室室長)	約200名 (愛知県内のSSH校 と研究者対象)
126	2020.12. 4	科学が進めば単位が変わる ～究極の基準を求めて～	臼田 孝 (産業技術総合研究所理事)	約250名 (累計572名)
127	2021. 2. 5	ラジカル——奇数個の電子をもつ分子 が示すユニークな機能	草本 哲郎 (分子科学研究所准教授)	約350名 (累計733名)

4-3-3 市民向けシンポジウム

(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31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（当時）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（当時）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。2020年度の第30回は分子科学研究所が企画し、機構と名古屋市科学館の主催で「宇宙科学と生命科学の深～いつながり」と題したシンポジウムをオンラインで開催した。

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ってきている。常設展示室に設置されている可搬式のグラフィックパネルや模型を適宜利用するなど、展示内容のさらなる充実に努めている。合わせて、十分な説明要員を確保するために研究者の積極的な参加も促している。

第30回自然科学研究機構シンポジウム「宇宙科学と生命科学の深～いつながり」プログラム
＜第一部：講演会＞ 13:30 - 15:40

- 13:30 - 14:10 本間 希樹（自然科学研究機構国立天文台教授）
「人類が初めてみたブラックホールの姿」
- 14:15 - 14:55 大東 琢治（自然科学研究機構分子科学研究所助教）
「有機物顕微分析法の宇宙科学への展開」
- 15:00 - 15:40 矢木 真穂（自然科学研究機構分子科学研究所助教）
「宇宙実験からアルツハイマー病の解明を目指す！」

＜第二部：パネルディスカッション＞ 15:50 - 16:30

司会：持田 大作（名古屋市科学館学芸課学芸員）

パネリスト：本間希樹，大東琢治，矢木真穂

今年度の実施状況は以下の通り。

回	開催日	テーマ	開催方法
30	2020. 9.26	宇宙科学と生命科学の深～いつながり	オンライン開催
31	2021. 3.13	生きているとは何か？	オンライン開催

(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。2020年度はオンライン開催となり, 分子科学研究所は竹入史隆助教が「ヒドリドが拓く水素の可能性」というタイトルで講演を行い, また広報よりオンラインブース展示に出展した。

実施状況は以下の通り。(中期計画第3期)

回	開催日	テーマ	会場／開催方法
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
11	2020.10.17,18	宇宙・物質・エネルギー・生命・情報・人間文化： オンラインで研究者と話そう	オンライン開催

4-3-4 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。2020年度は新型コロナウイルス感染症の感染拡大防止のため0件であった。

見学申込み

(中期計画第3期)

年度	団体申込 (施設見学 + 展示室見学)			個人申込 (展示室)	見学者総数
	団体数	見学者数	実施機関名	見学者数	
2016	9	281	愛知県弁護士会 東国大学附属女子高等学校 (韓国) ほか	18	299
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	25	331
2018	11	361	GENY 財団科学キャンプ (韓国) 浜松南高等学校 ほか	29	390
2019	13	375	安城シルバーカレッジ 開成学園理化学部 ほか	6	381
2020	0	0	該当なし	0	0

4-3-5 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2007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、文部科学省に公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や、あいちSTEMハイスクール研究指定校、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。同校は2020年度より、あいちSTEMハイスクール研究指定校となり、3研究所で出前授業を実施している。

（中期計画第3期）

開催日	講師	テーマ
2016. 7. 8	榎山 儀恵 准教授	—
2017. 7. 7	榎山 儀恵 准教授	キラル分子の建築家を目指して
2018. 7. 6	榎山 儀恵 准教授	キラル分子の建築家を目指して

2019. 7. 5	榎山 儀恵 准教授	キラル分子の建築家を目指して
2020. 8. 5	大東 琢治 助 教	軟X線顕微鏡による有機物分析の最先端～ドラッグデリバリーからはやぶさ、そしていかにして働かずにご飯を食べるようになったか
2020.12.21	Hyo Yong Ahn 特任助教	The Science of the Microscopic World—How to Make, Observe and Utilize Nanometer-Level Materials
2021. 3. 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 12 回（2020 年 12 月 25 日）は、感染拡大防止対策の上、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、研究所紹介の無人展示ブースを出展し、また、高校生によるポスタープレゼンテーションに対して、所内の研究者がコメンテーターとしてオンラインによる指導・助言を行った。

今期（中期計画第 3 期）開催された「科学三昧 in あいち」は以下の通りである。

回	開催日	会 場	参加者数
8	2016.12.27	岡崎コンファレンスセンター	840
9	2017.12.27	岡崎コンファレンスセンター	794
10	2018.12.26	名古屋大学	803
11	2019.12.27	岡崎コンファレンスセンター	795
12	2020.12.25	岡崎コンファレンスセンター	406

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通りである。（中期計画第 3 期）

回	開催日	テーマ	講 師
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 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。

分子科学研究所が今年度担当したものは以下の通りである。

開催日	テーマ	講師	対象校	聴講生徒数
2020. 9.25	超伝導って何？ 最先端研究施設から出張実験	松井 文彦 主任研究員 林 憲志 技術職員 片柳 英樹 助手	岩津中学校	134
2020.10. 6	世界は光で満ちている—光の不思議と謎に触れてみよう—	豊田 朋範 技術職員 片柳 英樹 助手	南中学校	123
2020.11.10 -11	おもしろい形の分子を作る	鈴木 敏泰 チームリーダー	美川中学校	171
2020.11.17	超伝導って何？ 最先端研究施設から出張実験	松井 文彦 主任研究員 林 憲志 技術職員 片柳 英樹 助手	福岡中学校	158
2020.11.19	世界は光で満ちている—光の不思議と謎に触れてみよう—	豊田 朋範 技術職員 片柳 英樹 助手	甲山中学校	35
2020.12. 4	科学者の役割	湊 丈俊 主任研究員	六ツ美北中学校	254

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、職場体験学習として中・高生の受け入れに協力している。2018年度より、研究グループによる受け入れを開始した。2020年度はCOVID19感染拡大の影響により実施されなかった。

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、2018年は、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。2020年の理科作品展は「おかざきッズ作品展」ホームページ内でオンライン開催（公開は2020年度末で終了）となった。

(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。2020年度は、新型コロナウイルス感染症の感染拡大防止の観点から岡崎市小中学校理科作品展はオンライン開催となったため、別途開催された選考会により、小学生7名、中学生3名の計10名の受賞を決定した。受賞者へのトロフィー、表彰状及び記念賞品贈呈の授与による表彰は各小中学校で行った。

(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。2020年度は、新型コロナウイルス感染症の感染拡大防止の観点から、写生会は中止となった。

4-5 情報発信

2020年1月～2021年3月は、日本語プレスリリース29件、英語プレスリリース21件、新聞報道55件、その他報道6件であった。

研究成果プレスリリース（共同発表を含む）

(2020.1～2021.3)

ホームページ 公開日	タイトル	発表雑誌	担当研究部門	共同研究 機関	整理 番号
2020. 1.24	二本足のリニア分子モータダイニンは小さな歩幅でふらふら歩く	Scientific Reports	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	東京大学 大阪大学	1901*
2020. 1.28	「第二世代」バイオディーゼル燃料合成の触媒を開発—高活性・高再利用性の固定化触媒による省エネ合成が可能に—	ACS Catalysis	生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門	理化学研究所 中部大学 東京工業大学 九州大学	1902
2020. 1.31	超好熱古細菌タンパク質がかたちづくる“tholos”のような分子の建築物を発見	Scientific Reports	生命創成探究センター 生命分子動秩序創発研究部門/ 生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	生理学研究所	1903
2020. 2. 5	色素分子の精密合成で有機太陽電池の電圧損失を3割削減に成功	ChemPlusChem	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門	静岡大学	1904*
2020. 2.10	結晶化した有機顔料は10マイクロメートルの厚さでも光と電気を変換できる	Frontiers in Energy Research	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門	東京農工大学	1905
2020. 3.16	細胞内の物流を促す分子のパスポートを利用したバイオ医薬品の生産向上	Nature Communications	生命創成探究センター 生命分子動秩序創発研究部門/ 生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	基礎生物学研究所 名古屋市立大学	1906
2020. 3.30	氷の表面における異常に高いプロトン活性の実証	Journal of Physical Chemistry Letters	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門	京都大学 豊田理化学研究所	1907*
2020. 4.21	分子を「ねじって」切断する～タンパク質骨格をつくるアミド結合の新活性化手法を開拓～	Nature Chemistry	特別研究部門	東京大学	2001
2020. 4.22	「スピンを噴き出すキララな結晶」磁石を使わず検出可能に！	Physical Review Letters	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	大阪府立大学 放送大学 東邦大学	2002
2020. 5.19	光電子運動量顕微鏡：マイクロメートルの機能性材料の電子状態を空間・運動量分解能：50 nm・0.01 Å ⁻¹ で可視化	Japanese Journal of Applied Physics	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門, 極端紫外光研究施設		2003*
2020. 6. 9	溶液中の蛋白質構造を正確に評価するための新規解析法を開発—構造評価の妨げとなる凝集の影響を実験データから除去—	Communications Biology	生命創成探究センター 生命分子動秩序創発研究部門/ 生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	京都大学 東京大学 名古屋市立大学	2004
2020. 6.16	アルツハイマー病発症の要因とされるアミロイド形成の宇宙実験—国際宇宙ステーション「きぼう」日本実験棟の微小重力環境では独特なかたちのアミロイド線維ができることを発見—	NPJ Microgravity	生命創成探究センター 生命分子動秩序創発研究部門/ 生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	生理学研究所 宇宙航空研究開発機構	2005
2020. 6.23	金属状の量子気体：全く新しい量子シミュレーション・プラットフォーム	Physical Review Letters	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門		2006*
2020. 6.29	グラフェンを用いた電子源用新規基板—半永久的再利用可能な基板—	Applied Physics Letters	極端紫外光研究施設	名古屋大学 米国・ロスアラモス国立研究所 高エネルギー加速器研究機構	2007

2020. 7.28	分子モーターの1方向性運動モデルの新規推定法の開発—キチナーゼの運動メカニズム解明につながる—	The Journal of Physical Chemistry B	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門, 生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	静岡大学	2008*
2020. 8.19	超伝導体内の電流を光で操ることに成功 究極の短パルスレーザー技術が拓くベタヘルツ電子テクノロジー	Nature Communications	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	東北大学 科学技術振興機構 中央大学 東北大学 他	2009
2020. 9.30	目的は同じでも手段は異なる：細菌とカビのセロビオヒドロラーゼが結晶性セルロースを連続的に分解する戦略の違いを解明	Journal of Biological Chemistry	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門		2010*
2020.10. 1	電子の蝶々型の空間分布を1000億分の2メートルの精度で観測！—放射光X線を用いた電子軌道の新規観測手法を提案—	Physical Review Research	機器センター, 物質分子科学研究領域 電子構造研究部門	名古屋大学 理化学研究所 高輝度光科学研究センター 東京大学	2011
2020.10. 8	新奇な磁性トポロジカル絶縁体ヘテロ構造の作成に成功—磁性とトポロジカル物性の協奏現象に新たな知見—	Nature Communications	極端紫外光研究施設	東京工業大学 広島大学 日本原子力研究開発機構 東京大学 他	2012
2020.10.26	リチウムの化学結合イメージングが可能なナノ顕微鏡の開発	Review of Scientific Instruments	極端紫外光研究施設		2013*
2020.11.11	核酸二重らせん構造に糖骨格は必要か？ ～人口核酸の安定化の仕組みを解明～	Communications Chemistry	生命創成探究センター 生命分子動秩序創成研究部門/ 生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	名古屋大学 名古屋市立大学 大阪大学	2014
2020.11.24	疎水性パッキングがゆるくても折り畳み能を示し超安定な人工タンパク質	Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America	生命創成探究センター 生命分子創成研究部門/ 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	大阪大学 理化学研究所 日本医療研究開発機構	2015*
2021. 2.12	テラヘルツパルスによって強誘電性電荷秩序状態を超高速に生成することに成功 ～磁氣的相互作用によって安定化する隠れた強誘電性を発見～	Nature Communications	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	東京大学 科学技術振興機構	2016
2021. 3. 6	マウス TRPV イオンチャネルにメントールが作用する構造基盤の解明	Communications Biology	生命創成探究センター 生命分子動態シミュレーション研究グループ/ 理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	生理学研究所	2017
2021. 3.10	ジグザグ型カーボンナノベルトの合成に成功 ～3種全ての型のカーボンナノチューブ構造を合成可能に～	Nature Chemistry	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門		2018*
2021. 3.16	三角形ラジカルを使って二次元ハニカムスピ格子構造を組み立てる	Journal of the American Chemical Society	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門	科学技術振興機構 東京大学 株式会社 MOLFEX 京都大学 他	2019*
2021. 3.18	放射光によるフェムト秒超高速緩和過程の時間追跡	Physical Review Letters	極端紫外光研究施設	富山大学 広島大学 九州シンクロトロン光研究センター	2020*
2021. 3.19	固い鎖で相転移を制御：無限アニオン鎖を持つ1次元電荷移動錯体の開発	Inorganic Chemistry	機器センター	名古屋大学	2021*
2021. 3.25	ナノグラフェンの二重らせん構造が電子回折で明らかに～分子の凹凸でパズルのように組み上がる～	Journal of the American Chemical Society	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門	理化学研究所 科学技術振興機構 名古屋大学 東京都立大学 他	2022*

* 分子科学研究所主体

EurekAlert! 公開日	タイトル	日本語版 整理番号
2020. 2. 3	Ancient Greek Tholos-Like Architecture Composed of Archaeal Proteins	1903
2020. 2. 5	Regioselective Functionalization of Perylenes Reduces Voltage Loss in Organic Solar Cells	1904
2020. 2.14	Tiny, Erratic Protein Motor Movements Revealed	1901
2020. 3.17	Passport Tagging for Express Cargo Transportation in Cells	1906
2020. 3.30	Unique Structural Fluctuations at Ice Surface Promote Autoionization of Water Molecules	1907
2020. 4.21	Chiral Crystals Blowing off Polarized Spins: Phenomena Detected without Magnets	2002
2020. 4.28	A Molecular Pressure Cooker Tenderizes Tough Pieces of Protein and Helps to Bite Off	2001
2020. 5.26	Photoelectron Momentum Microscope for μm -Material Electronic Structure Visualization	2003
2020. 6.16	Amyloid Formation in the International Space Station Gravity Affects Protein Assembly Related to Alzheimer's Disease	2005
2020. 6.22	A Metal-Like Quantum Gas: A Pathbreaking Platform for Quantum Simulation	2006
2020. 8. 3	Mathematical Modeling Revealed How Chitinase, a Molecular Monorail, Obeys a One-Way Sign	2008
2020. 9. 4	Electric Current Is Manipulated by Light in an Organic Superconductor—An Ultrashort Pulse Laser Opens a New Pathway toward Petahertz Electron Technology—	2009
2020. 9.24	Bridging the Gap between the Magnetic and Electronic Properties of Topological Insulators	2012
2020.10. 8	Bacterial Cellulose Degradation System Could Give Boost to Biofuels Production	2010
2020.10.28	Direct Observation of a Single Electron's Butterfly-Shaped Distribution in Titanium Oxide	2011
2020.12. 3	The Helix of Life: New Study Shows How “Our” RNA Stably Binds to Artificial Nucleic Acids	2014
2020.12.11	Researchers Find Why “Lab-Made” Proteins Have Unusually High Temperature Stability	2015
2021. 1.14	A Scanning Transmission X-Ray Microscope for Analysis of Chemical States of Lithium	2013
2021. 3.15	A Novel Recipe for Air-Stable and Highly-Crystalline Radical-Based Coordination Polymer	2019
2021. 3.17	Ultrafast Intra-Atom Motion Tracked Using Synchrotron Radiation	2020
2021. 3.25	Researchers Discover New Organic Conductor	2021

新聞報道

報道日	記事内容	新聞名	該当研究部門
2020. 1. 1	「あいちの名工」に仲間入り	岡崎ホーム ニュース	装置開発室
2020. 1. 9	DNA 格納たんぱく構造解明	日経産業	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
2020. 1.15	学士院奨励賞に石崎氏ら	中日	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門
2020. 1.31	再利用促進を	日刊工業	所長

2020. 2.28	色素分子精密合成で有機太陽電池電圧損失3割減	科学	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門
2020. 3.30	たんぱく質に「荷札」医薬量産	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
2020. 4. 7	日本学士院賞 斎藤氏ら9人	中日	所長
2020. 4. 7	斎藤氏ら9人に学士院賞	毎日	所長
2020. 4. 7	学士院賞斎藤氏ら9人	読売	所長
2020. 4. 7	日本学士院賞 斎藤氏ら9人	朝日	所長
2020. 4.10	学士院賞 斎藤通紀氏ら9人	科学	所長
2020. 4.19	ALS 会計へ寄付募る	中日	名誉教授
2020. 4.21	長倉三郎さん死去 99歳 化学理論の権威	読売	元所長
2020. 4.21	長倉三郎さん死去 99歳 分子の電荷移動理論	朝日	元所長
2020. 4.22	長倉三郎さん死去 99歳元日本学士院長	日本経済	元所長
2020. 4.22	長倉三郎氏	日刊工業	元所長
2020. 4.22	長倉三郎さん死去 世界的化学者	朝日	元所長
2020. 4.22	長倉三郎さん死去 化学分野で新概念	毎日	元所長
2020. 4.22	長倉三郎さん死去 元日本学士委員長	中日	元所長
2020. 4.27	ALS 解き明かす 岡崎の宇里須さん 資金援助で研究加速	東海愛知	名誉教授
2020. 5. 3	自己集合分子システムの創出と応用	中日	特別研究部門
2020. 6.16	分子研 UVSOR に光電子運動量顕微鏡導入	毎日	極端紫外光研究施設
2020. 6.23	電子の動きを再現 「金属上の量子気体」創作	東海愛知	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2020. 7. 3	新たな物質相「金属上の量子気体」創出 全く新しい量子シミュレーションに期待	科学	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2020. 7.31	グランフェンを用いた光電陰極電子源用基板を開発	科学	極端紫外光研究施設
2020. 8.28	分子モーターの1方向性運動	科学	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門
2020. 9. 2	宇宙と生命のつながり 26日自然科学研究機構シンポジウム	東海愛知	自然科学研究機構、分子研
2020. 9.12	宇宙と生命 26日シンポ	中日	自然科学研究機構、分子研
2020. 9.23	量子コンピューター実用へ前進	中日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2020. 9.23	ノーベル賞3賞 今年の注目は？	読売	特別研究部門
2020.10. 1	ノーベル賞注目の研究者たち 藤田誠先生	毎日	特別研究部門
2020.10.29	産学連携でも基礎研究重視	毎日	特別研究部門
2020.10.30	東大・藤田卓越教授が拠点 三井不動産「三井リンクラボ柏の葉」	日刊工業	特別研究部門
2020.11. 2	基礎研究評価の仕組みを	日本経済	特別研究部門

2020.11.17	量子コンピューターに注目 最速スパコン超え能力	福島民報	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2020.11.19	最速スパコン超えの能力 量子コンピューター熱帯びる開発競争	東京	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2020.11.20	開発競争激化 実現なるか 最速スパコン超え「量子コンピューター」	熊本日誌	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2020.11.21	量子コンピューター実現は? 世界で熱帯びる開発競争, 手法まだ定まらず	神戸	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2020.11.22	実用化目指し各国で開発競争 量子コンピューター 注目	中国 (セレクト)	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2020.11.23	量子コンピューターに注目	静岡	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2020.12. 2	「できない」計算可能に	日経産業	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2020.12. 3	はやぶさ2挑戦のリレー	中日	極端紫外光研究施設
2020.12. 3	分子科学フォーラムあすオンライン開催	中日	分子科学研究所
2020.12. 4	単位を語る 分子研公開講座	東海愛知	分子科学研究所
2020.12. 7	量子コンピューター 開発に熱気	信濃毎日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2020.12. 8	夢の量子コンピューター 開発競争に熱	福井	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2020.12.11	努力, 情熱 探究さらに	中日	特別研究部門
2020.12.16	最速スパコン超える能力	京都	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2020.12.19	量子コンピューターに熱視線	北海道	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2021. 1. 1	分子の「自己組織化」科学合成の新手法に	日経産業	特別研究部門
2021. 1. 9	量子コンピューター 世界で開発競争	河北	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2021. 1.14	科学記者の目 認知の錯誤に迫る	日経産業	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門
2021. 1.23	岡崎の分子研「ラジカル」講座 来月5日にオンラインで	中日	分子科学研究所
2021. 2. 2	「ラジカル」とは?	東海愛知	分子科学研究所
2021. 3.18	財団賞 12件 奨励金 14件 永井科学技術財団研究助成	日刊工業	極端紫外光研究施設

その他

(2020.1 ~ 2021.3)

発行日等	記事等内容	掲載誌等名	該当研究部門
2020. 1. 1	エネルギーから情報まで幅広い対応が可能なレーザー技術	Sheetmetal ましん&そふと	社会連携研究部門

2020. 3.25	国際チームを作り，申請書を書く過程から学んだこと（web掲載） https://www.amed.go.jp/program/list/20/01/010_hfsp30-06.html	日本医療研究 開発機構	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門
2020. 9.11	チョコちゃんに叱られる (テレビ出演)	NHK 総合	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門
2020.12. 1	未来を描く，小型集積レーザー	おかしん経済 月報	社会連携研究部門
2021. 1. 7	令和のブームはこれだ！ 2021 年度版「掌に乗るレーザーが世界を変えるイノベーション」	ミスター・ パートナー	社会連携研究部門
2021. 1.15	マイクロ固体フォトンクス国際会議開催	日本政府観光 局パンフレット	社会連携研究部門

5. 各種事業

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

分子科学研究所が行う事業には、『先端的な研究を推進する拠点事業』、『国内の研究者への共同研究・共同利用支援に関する事業』、『研究者の国際ネットワーク構築に関する事業』、『研究力強化推進事業』がある。予算的には運営費交付金の一般経費・特別経費、文部科学省の委託事業、日本学術振興会等の競争的資金で実施している。運営費交付金の一般経費以外はいずれも期間が定められており、運営費交付金一般経費も毎年削減を受けている。第1期中期計画期間に特別経費であった3事業（UVSOR 共同利用事業、エクストリームフォトンクス連携事業（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告し、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と呼び、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)、スピンドクター(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 ₂ 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 ₂ 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 ₂ には迅速に切り替え可能だが、N ₂ 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 ⁺ 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、吸収した光のフォトン数に対して分子から放出される発光フォトン数の割合で、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 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-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

¹ H 800MHz 溶液 (高磁場 NMR)	800MHz 溶液 NMR による生体分子複合体をはじめとする低溶解性物質などの高感度・高分解能測定支援。極低温プローブによる ¹ H- 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
¹ H 600MHz 固体 (高磁場 NMR)	600MHz 固体 NMR による蛋白などの生体分子, 有機材料, 天然物などの精密構造解析支援。 ¹ H- 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 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。 [超高真空中での磁性薄膜作成・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 ₂ H ₃ 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 _{1-y} Zr _{1-x} In _x O _{3-1/2x-y} 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 ₂ 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	
細菌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 ₃ 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 π 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 π 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}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 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 ₃₉ Co ₄₉ Cr ₉ Ni ₂ 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行く。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はいる。

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）

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。

「特別研究部門」では、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、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。「社会連携研究部門」では、産学官の連携研究の推進を目指している。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している。「小型集積レーザーコンソーシアム」は、平等拓範特任教授をリーダーとして、民間企業を中心に35機関の会員とともに研究を推進している。また、研究施設の高度化などを担う人材として主任研究員の採用を2018年から開始した。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
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
2019.9. ～ 2020.8.	2020	211	44

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（1997年4月設立）からの改組により、2017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2013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トな性質と、ミクロ階層の機能に富む特性が絡んだメゾスコピック領域に求め、分子の機能や反応の契機となる過程を明らかにするために、広い時空間領域で階層間のエネルギー・情報の変換を可視化する新発想の計測開発手法を開発する。（ここでいうマクロ、ミクロ、メゾスコピックは、相対的な階層であり、扱う系によって実際のスケールは異なる。また空間だけではなく、時間領域についてもメゾスコピック領域が考えられる。）これらを通じて、分子の素過程が系全体の大域的な機能を生む機構を解明する研究などに主眼を置いて推進する。この目的のために、旧分子制御レーザー開発研究センターの研究業績・資産を引き継ぎながらも、分子科学研究所の基盤となる四つの領域から関連する研究を遂行する研究者の参画を得て、それらをまたぐ領域横断的なセンターとして設置することとした。これにより、同様な組織構成を取った協奏分子システム研究センターとともに、分子物質のシステムとしての挙動・機能を研究する両輪として研究活動を展開することが可能となった。

このような新しい分子計測制御法を開発・利用していくためのセンターとして、2017年4月の発足時に以下の3部門と担当教員を置くこととした。

(1) 物質量子計測研究部門：大森賢治（教授、光分子科学研究領域からの併任）、信定克幸（准教授、理論・計算分子科学研究領域からの併任）

(2) 繊細計測研究部門：岡本裕巳（教授・センター長、専任）、平等拓範（准教授、専任）

(3) 広帯域相関計測解析研究部門：飯野亮太（教授、生命・錯体分子科学研究領域からの併任）、藤 貴夫（准教授、専任）

専任研究グループに所属する助教等のスタッフも本センターの各研究部門に所属する。また、旧分子制御レーザー開発研究センターに所属した技術職員も、引き続き本センターに所属させる。今後分子科学研究所に採用される教授・准教授も、状況に応じて上記のいずれかの部門の専任または併任ポストを占めることが想定されている。それぞれの部門の任務は、(1) 蓄積のある光観測・制御法を先鋭化し、更に量子系の構造変形を操作することによって、新しい量子相を作り出して制御し、量子情報処理など新規な分子の能力を引き出す；(2) 時空間を分解した計測法、増強光場を利用した超高感度・並列計測等による低摂動で繊細な分子計測法等を開発し、分子のありのままの姿を非破壊的に観測する；(3) 多変数スペクトロスコピー・多次元解析手法、高分解能広帯域計測法とその解析法を開発して分子の能力とそれを司る物理過程を明らかにし、従来とは質の異なる情報を獲得する革新的手法を開拓する；等を目指している。なお、信定准教授は2018年1月に残念ながら逝去された。平等准教授は2018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2019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、2018年5月には杉本敏樹准教授（物質量子計測研究部門）が物質分子科学研究領域からの、また2019年11月には江原正博教授（繊細計測研究部門）と南谷英美准教授（物質量子計測研究部門）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。2021年4月からは、熊谷 崇准教授が広帯域相関計測解析研究部門に専任で就任することが決まっている。

以上のような方針で分子システムの計測解析に関する研究を遂行すること、及びそれを通じて我が国の関連研究コミュニティにおける人材育成に寄与することが本センターの主なミッションであるが、同時にここで開発された新しいメゾスコピック計測手法を共同研究に供することも重要な機能の一つである。各研究グループの協力研究やその他のチャネルの共同研究を通じてそれを実施するほか、適宜醸成された計測手法・技術に関するセミナー等を開催する。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行っている。旧分子制御レーザー開発研究センターでは、分子科学研究所と理化学研究所の連携融合事業「エクストリーム・フォトニクス」を推進する母体となり、その主な研究活動終了後も、合同シンポジウム等の活動を自主的に継続してきたが、本センターはこの活動の継続のための推進母体ともなることが想定されている。なお、旧分子制御レーザー開発研究センターは、発足当初、種々の共用機器を保有して施設利用に供していたが、現在ではそれらの機器とその利用は全て機器センターに移っており、それを受けて本センターでは施設利用は想定していない。

織細計測研究部門

岡本 裕 巳 (教授) (2000年11月1日着任)

成島 哲也 (助教)

吉澤 大智 (助教)

AHN, Hyo-Yong (特任助教 (新分野創成センター))

山西 絢介 (学振特別研究員)

石川 晶子 (技術支援員)

野村 恵美子 (事務支援員)

A-1) 専門領域：ナノ光物理化学

A-2) 研究課題：

- a) キラルナノ・マイクロ物質における局所的な光学活性とその応用
- b) 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) 光学活性分光手法と顕微イメージングを組み合わせた新手法を開発し、それらを用いたナノ・マイクロ物質の局所光学活性に関する基礎研究、及び応用研究を推進している。ナノレベルの空間分解能での測定が可能な近接場光学顕微鏡による光学活性イメージングでは、主にキラルな構造を持つ金ナノ構造体を対象とし、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、高い対称性を持つアキラルな金属ナノ構造においても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を得た。その成果を基礎として、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実験手法を開発し、微結晶試料、液晶、生体組織等への応用を、共同研究を通じて推進している。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を示した。液晶分子集合体をテンプレートとした螺旋状金微粒子集合体では、螺旋の掌性による円二色性信号の差を検出することに成功した。また、円二色性イメージングの医療応用を想定した基礎研究を、医科学分野の研究者と共同で開始している。
- b) 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、偏光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。この研究展開を図ることを、現在の研究活動の今一つの柱としている。キラルな物質においては、左右円偏光に対する力学的な作用が異なることが期待され、我々はキラル金ナノ微粒子の円偏光による光トラッピングを行いその挙動を調べた。その結果、光トラッピングのキラル挙動の起源に関する重要な基礎的知見が得られ、論文執筆中である。

B-1) 学術論文

P. SZUSTAKEWICZ, N. KOWALSKA, D. GRZELAK, T. NARUSHIMA, M. GÓRA, M. BAGIŃSKI, D. POCIECHA, H. OKAMOTO, L. M. LIZ-MARZÁN and W. LEWANDOWSKI, “Supramolecular Chirality Synchronization in Thin Films of Plasmonic Nanocomposites,” *ACS Nano* **14**, 12918–12928 (2020).

C. KANZAKI, S. MATOBA, A. INAGAWA, G. FUKUHARA, T. OKADA, T. NARUSHIMA, H. OKAMOTO and M. NUMATA, “Linear Momentum of a Microfluid Realizes an Anisotropic Reaction at the Ends of a Supramolecular Nanofiber,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **94**, 579–589 (2021).

B-4) 招待講演

H. OKAMOTO, “Local Field Properties of Chiral Plasmons: Imaging and Functions,” Online Summer Conference on Chiral Plasmonics, Seoul (Korea) (online), July 2020.

[上記のほか、延期となった国際会議の招待講演 2 件 (うち基調講演 1 件)]

B-5) 特許出願

特願 2021-029181, 「円偏光照射器, 分析装置及び顕微鏡」, 成島哲也, 岡本裕巳 (自然科学研究機構), 2021 年.

特許第 6784396 号, 「円偏光照射器, 分析装置及び顕微鏡」, 成島哲也, 岡本裕巳 (自然科学研究機構), (登録日 2020 年 10 月 27 日).

B-6) 受賞, 表彰

岡本裕巳, 科学技術分野の文部科学大臣表彰 科学技術賞 (研究部門) (2020).

B-7) 学会および社会的活動

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術会議連携会員 (2017–2020).

日本学術会議会員 (2020–), 同化学委員会物理化学・生物物理化学分科会委員長 (2020–).

その他

自然科学研究機構教育研究評議員 (2016–).

プラズモニク化学研究会副会長 (2020–).

日本表面真空学会出版委員 (2014–). (成島哲也)

光科学異分野横断萌芽研究会アドバイザーボード (2015–). (成島哲也)

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, 構造光科学 (構造), 2020 年 6 月 30 日–7 月 3 日. (Zoom オンライン)

B-10) 競争的資金

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–2020 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

着任以来, 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。その中で近接場光学活性イメージング法を開発して金属ナノ構造の局所光学活性, キラルな光場の空間構造の解析に用い, そこからグループの主要な研究内容をキラル物質の局所光学活性のイメージングにシフトした。金属ナノ構造の近接場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, 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するなど, 成果が得られるようになってきた。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を数件行っている。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実際の共同研究も行っている。更に, 円二色性イメージングの医療応用に関する共同研究も開始している。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研究展開にも注力している。キラル微粒子の光トラッピングに関する新たな成果も出つつある段階にある。

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、倉持准教授）、兼任PIが6名（齊藤教授、青野教授、加藤教授、飯野教授、古賀准教授、小林准教授）の計9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。

2020年度の特筆すべき研究成果として、テラヘルツパルスによる強誘電性電荷秩序状態の超高速生成に関する共同研究（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からは、概日時計蛋白質の超長周期変異体のスクリーニングに関する共同研究成果が「*Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*」誌に（秋山グループ）、超安定な人工タンパク質の創成に関する共同研究成果が「*Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*」誌に発表され（古賀グループ）、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)

向山 厚 (助教)
古池 美彦 (助教)
欧陽 東彦 (特任研究員)
SIMON, Damien (大学院生)
鷺尾 みどり (技術支援員)
高家 マリ (技術支援員)
杉坂 かな恵 (技術支援員)
和田 琴恵 (技術支援員)
鈴木 博子 (事務支援員)

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 はシアロ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) を通じて、

- 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。2020 年度は、2019 年度に独自開発した *in vivo* スクリーニング系 (*Int. J. Mol. Sci.* 2019) と *in vivo* スクリーニング系の相補的利用により数多くの変異体を同定するとともに、それら変異体の機能構造解析を網羅的に実施した。代表的な成果は、超短周期 (0.6 d = 15 h, 60%) から超長周期 (6.6 d = 158 h, 660%) にわたるリズムを表出せしめた同一サイト (Tyr402) 点変異群の発見である (*Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2020)。温度補償された 600% の周期長変化を扱うことができる発振モデルは皆無であり、我々の発見を機に、既存モデルの更新もしくは根本的な書き換えを迫られるであろう。他サイトの変異を相加/相乗的に組み合わせることで、そのリズムを概週から概月、場合によってはその先の概年にまで引き延ばせる可能性がある。本発見は、概日リズムの基本設計を原点に立ち返って議論しなおすきっかけを世界中の研究者に与え得るだけでなく、概月リズム (海洋生物の産卵, 人間の月経周期) や概年リズム (動物の冬眠/繁殖, 植物の花芽形成) の設計原理にも指針を与え得るもので、関連分野でも相当の関心を集めることが予想される。その他の活動として、我々の概日時計研究を含めた岡崎における生物物理学分野の研究を紹介する記事を執筆した (*Biophys. Rev.* 2020)。

- 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（*Free Radical Biol. Med.* 2019）。

B-1) 学術論文

K. ITO-MIWA, Y. FURUIKE, S. AKIYAMA and T. KONDO, “Tuning the Circadian Period of Cyanobacteria up to 6.6 Days by the Single Amino Acid Substitutions in KaiC,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **117**, 20926–20931 (2020). doi: 10.1073/pnas.2005496117

I. ANZAI, E. TOKUDA, S. HANDA, H. MISAWA, S. AKIYAMA and Y. FURUKAWA, “Oxidative Misfolding of Cu/Zn-Superoxide Dismutase Triggered by Non-Canonical Intramolecular Disulfide Formation,” *Free Radical Biol. Med.* **147**, 187–199 (2020). doi: 10.1016/j.freeradbiomed.2019.12.017

B-3) 総説、著書

S. AKIYAMA, K. AOKI and Y. KUBO, “Biophysical Research in Okazaki, Japan,” *Biophys. Rev.* **12**, 237–243 (2020). doi: 10.1007/s12551-020-00633-4

S. AKIYAMA, “Treasurer’s Comments on the Financial Position of the Biophysical Society of Japan,” *Biophys. Rev.* **12**, 209–211 (2020). doi: 10.1007/s12551-020-00623-6

B-4) 招待講演（* 基調講演）

S. AKIYAMA, “Cyanobacterial circadian clock system through the chemistry of rhythm, structure, and evolutionary diversity,” ELSI 8th International Symposium, Tokyo (Japan), February 2020.* (*Keynote Lecture*)

秋山修志, GTR オンラインリトリート 2020, September 2020.

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).

学会の組織委員等

X線溶液散乱講習会主催 (2015–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術会議 連携会員 (2020.10–).

SPring-8長期利用分科会委員 (2019–).

B-10) 競争的資金

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

in vivo スクリーニング系を独自開発して論文化し (*Int. J. Mol. Sci.* 2019), *in vivo* スクリーニング系との相補的利用により数多くの変異体を同定した。これらの研究資産は我々の研究室を含めた研究コミュニティに供されており, 現在, 概日時計システムの機能構造解析が強力に推進されている。他方, KaiC ホモログ群を対象とした研究は, 我々が独自整備した基盤技術 (*Int. J. Biol. Macromol.* 2019) により最大の難所を超え, あと半年以内に論文投稿できる見込みである。Kai タンパク質の構造解析についても著しい進捗が見られた。必要な実験はほぼ完了しており, 現在, 論文執筆中である。

Kai タンパク質時計の普遍性と多様性の解明, および ATPase /リン酸化構造基盤の解明, いずれにおいても当初の目標を上回る新発見があっただけでなく, 更に深い奥行きと広がりを感じさせるものであった。波及効果の大きい論文として公表できるよう, 今の質を堅持しつつも更にペースを上げて研究を進める。

古賀 信 康 (准教授) (2014 年 4 月 1 日着任)

小杉 貴洋 (助教)
古賀 理恵 (特任研究員)
南 慎太郎 (特任研究員)
小林 直也 (特任研究員)
近藤 未菜子 (特別協力研究員)
三本 齊也 (大学院生)
海田 新悟 (大学院生)
鈴木 博子 (事務支援員)

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、5本あるいは6本ストランドから成る100残基以上のサイズの $\alpha\beta$ 型タンパク質構造のデザインに取り組んだ。しかし、NMRにより決定された構造では、内部のストランドの順番が入れ替わってしまっていた。計算機モデルとNMRによる実験構造を比較・解析することにより、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。これらを考慮して新たにデザインし、NMRにより構造を決定したところ、設計した通りのストランドの並びを有しており、発見したデザイン原理の有効性が示された。
- 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、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。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。生化学実験により、デザインしたタンパク質は安定な構造を形成し、ATPに対して800uMくらいの結合親和性を示した。今後は、結晶化して構造を解くことにより、ATPが設計した通りに結合しているのかを確認する。
- e) ヘム結合タンパク質のデザイン；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。これまで自然界のタンパク質構造を改造してヘム結合タンパク質をデザインしようと試みてきたが、設計した通りに結合しなかった。現在は、b)でデザインした α ヘリカル構造を融合してヘム結合部位を作ることにより、設計通りにヘムを結合するタンパク質のデザインに取り組んでいる。
- 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れ出していないだけなのか、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れ出せなかった、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、PET製品のバイオリサイクルに重要なPET分解酵素、および創薬ターゲットの一つであるGPCRの耐熱化を行っている。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GPCRの耐熱化も行っている。

B-1) 学術論文

T. KOSUGI, T. IIDA, M. TANABE, R. IINO and N. KOGA, “De Novo Design of Allosteric Control into Rotary Motor V_1 -ATPase by Restoring Lost Function,” *bioRxiv* 2020.09.09.288571 (2020). doi: 10.1101/2020.09.09.288571

R. KOGA, M. YAMAMOTO, T. KOSUGI, N. KOBAYASHI, T. SUGIKI, T. FUJIWARA and N. KOGA, “Robust Folding of a De Novo Designed Ideal Protein Even with Most of the Core Mutated to Valine,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **117**, 31149–31156 (2020). doi: 10.1073/pnas.2002120117

B-3) 総説, 著書

古賀理恵, 古賀信康, 「整合性原理に基づくタンパク質デザイン」, *生物物理* **60(6)**, 325–330 (2020). doi: 10.2142/biophys.60.325

B-4) 招待講演

古賀信康, 「Exploration of novel protein folds by de novo design」, 2020 World Conference on Protein Science 「Physics of Protein Evolution」, 2020年7月. (中止)

古賀信康, 「Exploration of novel protein folds by de novo design」, 第58回日本生物物理学会年会シンポジウム 「Biomolecular Design to Control their Functions」, オンライン開催, 2020年9月.

古賀信康, 「合理設計によるタンパク質配列空間の探索: NMRによる構造決定はその羅針盤」, 蛋白研セミナー 「生体系NMR法の最前線 基礎から学ぶ最新NMR解析法——構造解析の自動化」, オンライン開催, 2020年11月.

古賀信康, 「De novo design of novel protein structures」, Molecular Engine International Mini-workshop 「Molecular Engine in Virtual or Real World?」, オンライン開催, 2021年3月.

小杉貴洋, 「失われた機能を復活させて回転分子モーターをアロステリック制御する」, 第10回分子モーター討論会, オンライン開催, 2021年11月.

B-5) 特許出願

特開 2020-43777(P2020-43777A), 「耐熱性 β グルコシダーゼ」, 古賀信康, 小林直也, 南慎太郎(自然科学研究機構), 2020年.

B-6) 受賞, 表彰

小林直也, 井上研究奨励賞 (2020).

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- 令和 2 年度分野別専門委員：タンパク質設計・ドラッグデザイン (2015–2020).

その他

第 7 回森野ディスカッション Zoom 開催協力 (2020.8.31).

B-10) 競争的資金

科研費新学術領域研究, 「生体発動分子の創成：自然界の生体分子の改造とゼロからの設計」研究計画班 (代表：古田健也), 古賀信康, 小杉貴洋 (研究分担者) (2018 年–2023 年).

科研費基盤研究 (B), 「物理的に設計可能な蛋白質フォールド空間の解明：理論と実験的検証」 (代表：千見寺浄慈), 古賀信康 (研究分担者) (2019 年–2022 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, 「全身性代謝制御機構解明のための *in vivo* 微量必須栄養素イメージング法の開発」 (代表：中島健一朗), 古賀信康 (連携研究者) (2018 年–2021 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, 「地球上に存在しない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–2020 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).

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).

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がけ研究, 「タンパク質複合体を合理的に改造し, 細胞内機能を理解・制御する」, 小杉貴洋 (2020 年–2024 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–2021 年).

自然科学研究機構 ExCELLS 若手奨励研究, 「二つのドメインからなるヘム結合タンパク質の合理設計」, 小杉貴洋 (2020 年–2021 年).

自然科学研究機構 ExCELLS 若手奨励研究, 「自然界のタンパク質構造を再設計することでヘム結合タンパク質を合理的に設計する」, 小杉貴洋 (2018 年–2019 年).

C) 研究活動の課題と展望

これまでの研究活動により様々な形状のタンパク質構造を設計する技術の開発に成功した。今後は, 機能するタンパク質の設計に向けて, これらの技術を用いて設計したタンパク質を, ビルディングブロックとして組み合わせ, より巨大かつ複雑な形状のタンパク質を設計する技術開発に取り組む。また, 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ついても取り組む。

倉持 光 (准教授) (2020年4月1日着任)

米田 勇祐 (助教)

伊藤 敦子 (事務支援員)

A-1) 専門領域：物理化学, 超高速分光, 非線形分光, 超短パルス発生

A-2) 研究課題：

- a) 先端的超高速分光による機能性複雑分子の構造・ダイナミクスの解明
- b) 極短パルス光を用いた時間領域表面増強ラマン分光法の開発
- c) 反応性ポテンシャルエネルギー曲面上における波束の伝搬過程の可視化

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 先端的な超高速分光法を駆使する事で機能性複雑分子の構造・ダイナミクスを明らかにし、その機能発現を担う精緻な分子機構の解明に取り組んでいる。本年度はまず、光照射によって分極スイッチング（極性-非極性変換）を示す原子価異性錯体結晶の超高速ダイナミクスについて報告した。近年報告された [CrCo] 二核錯体は、可視光照射により結晶レベルで分極スイッチングを起こすことから分子性デバイス材料として注目を集めている。しかし、その機構の詳細は明らかではなく、より高速かつ効率の高い分極スイッチング材料の創製のために励起状態ダイナミクスに関する情報が望まれていた。そこで我々は 10 fs 時間分解能でのポンプ-プローブ分光測定を行い、[CrCo] 二核錯体結晶の励起状態ダイナミクスを調べた。その結果、光誘起分極スイッチングがわずか 280 fs で完了する超高速過程であり、準安定状態を利用した分極スイッチングとしては世界最速であることを明らかにした。さらに、結晶の格子振動がこの過程において重要な役割を果たしている可能性を見いだした。この他にも、近年注目を集める励起状態芳香族性に基づく新規分子材料系の励起状態構造ダイナミクスなどについても報告した。
- b) 表面増強ラマン分光 (SERS) は元来微弱なラマン散乱を高い感度で検出することを可能にするため、物質科学や生命科学など、広範な分野において活用されてきた。この SERS をさらに超短パルスを用いた非線形ラマン分光法と組み合わせることができれば、単一分子レベルでの構造ダイナミクス観測やプラズモン誘起化学反応の実時間追跡が可能であり、その発展が期待されている。しかし、超短パルスを用いた SERS 測定は技術的な困難によりこれまでほとんど未開拓であった。今回我々はサブ 8 fs パルスを用いた時間領域ラマン分光による金ナノ粒子上の吸着分子の SERS 測定に取り組み、適切な試料・共鳴条件、入射光強度を選択することで、 10^5 - 10^6 程の信号増強を得る事に成功した。この時間領域 SERS 測定はフェムト秒反応開始光を先に照射する事によって容易に時間分解測定へと発展可能である。すなわち、本研究によりフェムト秒時間分解 SERS への基盤が確立された。
- c) 化学反応において分子が多くの自由度からなる多次元ポテンシャルエネルギー曲面上をどのように伝播し、どのようにして反応生成物が生まれるのかは自明ではない。このようなポテンシャルエネルギー曲面上での分子の振る舞い、すなわち波束の伝播過程を明らかにすることは化学反応を理解する本質であるが、既存の時間分解分光法から得られる情報は限られている。本研究課題ではこうした反応性ポテンシャルエネルギー曲面上における核波束の伝播過程を可視化するべく、電子励起状態に対して 2 次元電子分光を行う、“過渡 2 次元電子分光法”の開発とその応用に取り組んでいる。サブ 8 fs パルスを用いた過渡 2 次元電子分光装置を開発し、モデル光化学反応系などから有意なデータが得られつつある。

B-1) 学術論文

R. KIMURA, H. KURAMOCHI, P. LIU, T. YAMAKADO, A. OSUKA, T. TAHARA and S. SAITO, “Flapping Peryleneimide as a Fluorogenic Dye with High Photostability and Strong Visible-Light Absorption,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **59**, 16430–16435 (2020). doi: 10.1002/anie.202006198

H. KURAMOCHI, G. AOYAMA, H. OKAJIMA, A. SAKAMOTO, S. KANEGAWA, O. SATO, S. TAKEUCHI and T. TAHARA, “Femtosecond Polarization Switching in the Crystal of a [CrCo] Dinuclear Complex,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **59**, 15865–15869 (2020). (Selected as a HOT paper) doi: 10.1002/ange.202004583

R. KOTANI, L. LIU, P. KUMAR, H. KURAMOCHI, T. TAHARA, P. LIU, A. OSUKA, P. B. KARADAKOV and S. SAITO, “Controlling the S_1 Energy Profile by Tuning Excited-State Aromaticity,” *J. Am. Chem. Soc.* **142**, 14985–14992 (2020). doi: 10.1021/jacs.0c05611

K. KOJIMA, R. KURIHARA, M. SAKAMOTO, T. TAKANASHI, H. KURAMOCHI, X. M. ZHANG, H. BITO, T. TAHARA and Y. SUDO, “Comparative Studies of the Fluorescence Properties of Microbial Rhodopsins: Spontaneous Emission Versus Photointermediate Fluorescence,” *J. Phys. Chem. B* **124**, 7361–7367 (2020). doi: 10.1021/acs.jpcc.0c06560

P. KUMAR, H. KURAMOCHI, S. TAKEUCHI and T. TAHARA, “Time-Domain Observation of Surface-Enhanced Coherent Raman Scattering with 10^5 – 10^6 Enhancement,” *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 6305–6311 (2020). doi: 10.1021/acs.jpcclett.0c01411

M. IWAMURA, A. FUKUI, K. NOZAKI, H. KURAMOCHI, S. TAKEUCHI and T. TAHARA, “Coherent Vibration and Femtosecond Dynamics of the Platinum Complex Oligomers upon Intermolecular Bond Formation in the Excited State,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **59**, 23154–23161 (2020). doi: 10.1002/anie.202011813

B-4) 招待講演

倉持 光, 「超高速ラマン分光で観る光受容タンパク質におけるプロトン移動ダイナミクス」, TIA 連携プログラム探索事業「かけはし」量子反応シンポジウム, 東京理科大学, 野田, 2020年3月.

倉持 光, 「極短パルスを用いた反応分子の実時間構造追跡」, 第5回“光”機到来! Q コロキウム, オンライン開催, 2020年6月.

H. KURAMOCHI, “Mapping Ultrafast Chemical Reaction Dynamics with Femtosecond Time-Resolved Time-Domain Raman Spectroscopy,” Department Seminar, Fritz Haber Institute, online, 2020年9月.

倉持 光, 「極短パルス光で迫る複雑分子系の反応ダイナミクス」, 日本分光学会年次講演会「分光夢シンポジウム」, オンライン開催, 2020年10月.

H. KURAMOCHI, “Fifth-Order Impulsive Stimulated Raman Spectroscopy for Visualizing Vibrational Coupling in Reactive Excited States,” The 7th Asian Spectroscopy Conference (ASC2019), online, 2020年12月.

B-6) 受賞, 表彰

倉持 光, 第13回井上リサーチアワード (2021).

倉持 光, 第13回分子科学会奨励賞 (2020).

倉持 光, 文部科学大臣表彰 若手科学者賞 (2020).

倉持 光, 分子科学研究奨励森野基金 (2020).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第8回アジア分光学会国際会議 (8th Asian Spectroscopy Conference, ASC2021) 運営委員 (2020–2021).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「構造物性科学」, 2020年12月1日–4日.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究, 「極限的電子分光法の開発による反応研究の革新」, 倉持 光 (2017年–2021年).

C) 研究活動の課題と展望

これまでに凝縮相分子の反応ダイナミクスは様々な時間分解分光法を用いて詳細に研究されてきたが, これらの研究は全て大多数の分子からなるアンサンブルの“平均像”を観てきた。一方, タンパク質などにおいて顕著であるように, 凝縮相において分子の置かれている環境やその構造は常に揺らいでおり, それは個々の分子の性質・反応性に多大な影響を与える。そのため, こうした揺動する分子の“個性”を反映した一つの分子本来の反応性を明らかにし, その多様性の起源を解明することは複雑分子系の化学反応の機構を最も基礎的なレベルで理解するために必須である。そこで, 今後は分子一つ一つの個性を反映した反応ダイナミクスとその変遷(揺らぎ)を直接観測することができる新しい超高速分光法の開発とその応用に取り組む。特に, タンパク質のような巨大生体分子を対象とし, これらの系に特有な大きな構造揺らぎの元で内包分子の反応性がどのように制御されるのか, 実験的に解明する。

機能分子システム創成研究部門

山本浩史（教授）（2012年4月1日着任）

須田 理行（助教）

広部 大地（助教）

佐藤 拓朗（助教）

PACHARIYANGKUN, Anna（インターンシップ）

CHAIWAI, Chaiyon（インターンシップ）

SAENNAWA, Wiyada（インターンシップ）

KUMSAMPAO, Jakkapan（インターンシップ）

相澤 洋紀（大学院生）

森島 将基（大学院生）

鍋井 庸次（大学院生）

中島 良太（大学院生）

URBAN, Adrian（大学院生）

MALATONG, Ruttapol（大学院生）

友田 美紗（大学院生）

村田 了介（技術支援員）

鈴木 愛（事務支援員）

A-1) 専門領域：分子物性科学

A-2) 研究課題：

- a) 有機モット・トランジスタ
- b) カイラル分子によるスピン偏極デバイス
- c) 無機カイラル金属における電流誘起スピン偏極

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機モット絶縁体である κ 型 BEDT-TTF (Bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene) 塩の薄膜単結晶を用いた電界効果デバイスを作製し、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。また、このような強相関電子系では、金属-絶縁体転移に附随して超伝導転移もしばしば観測されることから、電界効果による超伝導のスイッチングが可能となる。本年は化学的にドーブされたモット絶縁体として知られている、 κ -(BEDT-TTF)₄Hg_{2.89}Br₈ を用いて FET (Field Effect Transistor) や EDLT (Electric Double Layer Transistor) デバイスを作製し、その電界効果測定に挑戦した。
- b) CISS (Chirality-Induced Spin Selectivity) はカイラル分子に対してトンネル電流を流すと、分子を通過してきた電子のスピンが電流と平行あるいは反平行に偏極する現象であり、近年新たな有機スピントロニクスや光学分割の手段として注目されつつある。我々はこのようなスピン偏極が、これまでの実験で用いられてきた薄膜におけるトンネル

電流だけでなくバルク物質においても起きうると考え、不斉部位をもつ TTF (Tetrathiafulvalene) 誘導体のカチオンラジカル結晶や、金ナノ粒子を不斉分子で架橋した材料などに対して磁性電極を配線し、磁場下で磁気抵抗を計測した。その結果、これらのバルク材料でも非常に大きな磁気抵抗を観測できることが明らかとなった。

- c) CISS 効果は有機分子に限定されるものではなく、カイラルな構造を有する無機材料でも発現可能であると考えられる。我々は一軸性のカイラル金属である CrNb_3S_6 に着目し、これに電流を通じることによって生じるスピン偏極をいくつかの手法で検出した。まず、微細加工で作製した CrNb_3S_6 のマイクロストリップにタングステン電極を貼り付けることによって、表面に蓄積したスピン偏極を逆スピンホール効果で検出することに成功した。また、当該タングステン電極に電流を通じることによってスピンホール効果によるスピン流注入を行い、逆 CISS 効果による電圧発生を観測した。興味深いことに、これらの現象は全て線形応答領域で観測されている。 CrNb_3S_6 における CISS スピン偏極は、非局所配置によっても検出可能であった。さらには、 CrNb_3S_6 に電流を通じながら SQUID 磁束計で直接磁化を測ることにより、偏極しているスピンの絶対数を求めることにも成功した。その結果、CISS 効果で期待される電子数の 100,000 倍にもなる巨大なスピン偏極が観測された。この巨大なスピン偏極を生じる有効磁場は、パウリ常磁性モデルで換算すると最大電流値において 1000 T 程度になることが想定される。

B-1) 学術論文

Y. NAGAOKA, M. SUDA, I. YOON, N. CHEN, H. YANG, Y. LIU, B. A. ANZURES, S. W. PARMAN, Z. WANG, M. GRÜNWARD, H. M. YAMAMOTO and O. CHEN, “Bulk Grain-Boundary Materials from Nanocrystals,” *Chem* **7**, 509–525 (2021).

R. YOSHIMOTO, S. YAMASHITA, H. AKUTSU, Y. NAKAZAWA, T. KUSAMOTO, Y. OSHIMA, T. NAKANO, H. M. YAMAMOTO and R. KATO, “Electric Dipole Induced Bulk Ferromagnetism in Dimer Mott Molecular Compounds,” *Sci. Rep.* **11**, 1332 (10 pages) (2021).

H. YAMAKAWA, T. MIYAMOTO, T. MORIMOTO, N. TAKAMURA, S. LIANG, H. YOSHIMUCHI, T. TERASHIGE, N. KIDA, M. SUDA, H. M. YAMAMOTO, H. MORI, K. MIYAGAWA, K. KANODA and H. OKAMOTO, “Terahertz-Field-Induced Polar Charge Order in Electronic-Type Dielectrics,” *Nat. Commun.* **12**, 953 (11 pages) (2021).

A. PACHARIYANGKUN, M. SUDA, S. HADSADEE, S. JUNG SUTTIWONG, P. NALAOH, P. PATTANASATTAYAVONG, T. SUDYOADSUK, H. M. YAMAMOTO and V. PROMARAK, “Effect of Thiophene/Furan Substitution on Organic Field Effect Transistor Properties of Arylthiadiazole Based Organic Semiconductors,” *J. Mater. Chem. C* **48**, 17297–17306 (2020).

Y. UNOZAWA, Y. KAWASUGI, M. SUDA, H. M. YAMAMOTO, R. KATO, Y. NISHIO, K. KAJITA, T. MORINARI and N. TAJIMA, “Quantum Phase Transition in Organic Massless Dirac Fermion System α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ under Pressure,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **89**, 123702 (5 pages) (2020).

Y. KAWAKAMI, T. AMANO, H. OHASHI, H. ITOH, Y. NAKAMURA, H. KISHIDA, T. SASAKI, G. KAWAGUCHI, H. M. YAMAMOTO, K. YAMAMOTO, S. ISHIHARA, K. YONEMITSU and S. IWAI, “Petahertz Non-Linear Current in a Centrosymmetric Organic Superconductor,” *Nat. Commun.* **11**, 4138 (6 pages) (2020).

Y. NABEI, D. HIROBE, Y. SHIMAMOTO, K. SHIOTA, A. INUI, Y. KOUSAKA, Y. TOGAWA and H. M. YAMAMOTO, “Current-Induced Bulk Magnetization of a Chiral Crystal CrNb_3S_6 ,” *Appl. Phys. Lett.* **117**, 052408 (5 pages) (2020).

A. INUI, R. AOKI, Y. NISHIUE, K. SHIOTA, Y. KOUSAKA, H. SHISHIDO, D. HIROBE, M. SUDA, J. OHE, J. KISHINE, H. M. YAMAMOTO and Y. TOGAWA, “Chirality-Induced Spin-Polarized State of a Chiral Crystal CrNb_3S_6 ,” *Phys. Rev. Lett.* **124**, 166602 (6 pages) (2020).

Y. KAWASUGI, K. SEKI, J. PU, T. TAKENOBU, S. YUNOKI, H. M. YAMAMOTO and R. KATO, “Non-Fermi-Liquid Behavior and Doping Asymmetry in an Organic Mott Insulator Interface,” *Phys. Rev. B* **100**, 115141 (7 pages) (2019).

G. KAWAGUCHI and H. M. YAMAMOTO, “Control of Organic Superconducting Field-Effect Transistor by Cooling Rate,” *Crystals* **9**, 605 (8 pages) (2019).

S. OGIKUBO, G. HASHIMOTO, T. UBE, M. SUDA, H. M. YAMAMOTO and T. IKEDA, “Photoinduced Deformation and Isomerization of Azobenzene Liquid-crystalline Polymer Films at Cryogenic Temperature,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **676**, 30–35 (2019).

T. CHOOPPAWA, S. NAMUANGRUK, H. M. YAMAMOTO, V. PROMARAK and P. RASHATASAKHON, “Synthesis, Characterization, and Hole-Transporting Properties of Benzotriazatruxene Derivatives,” *J. Mater. Chem. C* **7**, 15035–15041 (2019).

Y. SHIOMI, J. LUSTIKOVA, S. WATANABE, D. HIROBE, S. TAKAHASHI and E. SAITOH, “Spin Pumping from Nuclear Spin Waves,” *Nat. Phys.* **15**, 22–26 (2019).

M. KAMEDA, D. HIROBE, S. DAIMON, Y. SHIOMI, S. TAKAHASHI and E. SAITOH, “Microscopic Formulation of Nonlinear Spin Current Induced by Spin Pumping,” *J. Magn. Magn. Mater.* **476**, 459–463 (2019).

N. ITO, T. KIKKAWA, J. BARKER, D. HIROBE, Y. SHIOMI and E. SAITOH, “Spin Seebeck Effect in Layered Ferromagnetic Insulators CrSiTe_3 and CrGeTe_3 ,” *Phys. Rev. B* **100**, 060402(R) (6 pages) (2019).

B-3) 総説, 著書

山本浩史, 「化学におけるカイラリティ」, *数理科学* **693(3)**, 66 (2021).

山本浩史, 「有機伝導体のナノ薄膜化とエレクトロニクス素材への展開」, *新東技報*, **38**, 83 (2020).

川楯義高, 関和弘, 柚木清司, 山本浩史, 「バンド幅とバンドフィリングの同時制御による分子性モット絶縁体の2次元超伝導相図」, *固体物理* **659**, 21 (2021).

須田理行, 山本浩史, 「分子モーターを用いた再構成可能スピン偏極デバイス」, *応用物理学会誌* **89(4)**, 203–207 (2020).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

H. M. YAMAMOTO, “Chirality based spintronics,” 2020 International Seminar on China-Japan-Korea Frontier New Materials Collaborations, Shanghai (China) (Online), November 2020.*

M. SUDA, “Generation and Manipulation of Spin-Polarized Current by Chiral Molecules,” CSJ Asian International Symposium, Noda (Japan), March 2020.

B-6) 受賞, 表彰

山本浩史, 永井科学技術財団学術賞 (2020).

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代表 (2019–2020).

分子科学会運営委員 (2018–), 幹事 (2020–), 顕彰委員長 (2020–).

学会の組織委員等

MRM2019組織委員 (2018–2019).

MRM2021組織委員 (2020–2021).

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 (2007–2020).

大学改革支援・学位授与機構専門委員 (2020–).

その他

Israel Science Foundation 審査委員 (2017–2019).

凝縮系科学賞審査委員 (2019–).

B-8) 大学での講義, 客員

東京大学教養学部総合文化研究科, 「物質基礎科学特殊講義I / 関連基礎科学特殊講義VIII」, 2020年12月.

B-10) 競争的資金

住友財団基礎科学研究助成, 「キラリティを有するスピン偏極電流による電気化学的不斉合成の実現」, 須田理行 (2019年–2020年).

科研費挑戦的研究(萌芽), 「キラル有機結晶における静的–動的キラリティ変換を用いたスピン流生成の開拓」, 広部大地 (2020年–2021年).

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がけ研究「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).

科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–2019年).

学術振興機構さきがけ研究「トポロジカル材料科学と革新的機能創出」, 「chiral-induced spin selectivityの幾何学的性質と分子スピン・光機能の探求」, 広部大地 (2020年–2023年).

C) 研究活動の課題と展望

カイラリティによるスピンド生成は、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、物性物理分野でも反転対称性を失った物質構造に基づく新たな物性発現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。本年の成果により、CISS がバルクの無機結晶において、線形応答領域でも観測されることを明らかにすることが出来たので、よりスピンド軌道相互作用の小さい有機分子でも同じような状況が実現できるのかどうか、さらに検証を進めて行きたい。同時に、様々な外場によるスピンドの制御や、詳細なメカニズムの解明など、より広い視点での展開を、共同研究によって実現していきたい。

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)

森 俊文 (助教)

甲田 信一 (助教)

稲垣 泰一 (学振特別研究員)

松村 祥宏 (学振特別研究員)

MAURYA, Manish (特任研究員)

KALATHINGAL, Mahroof (大学院生)

ZHU, Zhe (大学院生)

千葉 史朱香 (事務支援員)

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) 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
- d) 生体分子系の機能に関する理論研究：時計タンパク質 KaiC における概日リズム
- e) 生体分子系の機能に関する理論研究：光合成タンパク質における励起エネルギー移動

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 凝縮系の反応・構造変化に関して、酵素反応における cis-trans 異性化を例に解析を進めている。異性化反応の始状態と終状態を繋ぐ反応性軌跡を多数生成し、自由エネルギー面上の準静的な経路との比較を行った。その結果、反応性軌跡では準備された構造励起状態から迅速に遷移状態を越えて反応が起こり、集団的で緩慢な構造変化により表される自由エネルギー面上の反応経路とは異なることを明らかにした。
- b) 凝縮系の反応・構造変化に関して、凝縮系の動的な不均一揺らぎの下、構造変化や化学反応が如何に進行するかについて解析を進めている。とくに、時間依存の反応速度理論を展開するとともに、水溶液中の BPTI タンパク質を超長時間の分子動力学計算により構造変化速度と揺らぎ、チャンネル分子ポリセオナミド B の膜挿入ダイナミクスについて解析を行った。
- c) 水の熱力学的・動的特異的性質および凝縮系の反応・構造変化の解明の観点から、過冷却水の構造変化ダイナミクスの解析を進めている。その結果、温度低下により、構造変化の時間スケールが遅延化するだけでなく、ガラス転移への前兆として構造変化過程が定常ポワソン過程からバースト的な再生過程へと変化することなどが明らかになってきた。
- d) 生体分子系の機能に関して、シアノバクテリアにおける KaiC の概日リズムの解析を進めている。この概日リズムにおいて、KaiC におけるリン酸化および脱リン酸化と KaiB の結合の遅延のリズムの起源が未解明である。そこで、

KaiB と KaiC の結合に関する複数の実験を再現する理論スキームを構築し、この遅延が KaiC に由来することを提案した。

- e) 生体分子系の機能に関して、高等植物の光化学系 II 光捕集アンテナ複合体 LHCII における励起エネルギー移動の研究を行っている。励起エネルギー移動の解析には、クロロフィルの励起エネルギーやその揺らぎが必要となる。そこで、凝縮中のクロロフィル (Chl *a*, Chl *b*) の基底・励起電子状態を適切に記述するパラメータを決定した。この結果に基づき、現在、励起エネルギー移動の分子動力学計算に用いる LHCII 中の Chl *a*, Chl *b* の基底・励起電子状態に対する分子パラメータの開発を進めている。

B-1) 学術論文

T. KATO, K. NOBUSADA and S. SAITO, “Inverse Kohn-Sham Equations Derived from the Density Equation Theory,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **89**, 024301 (15 pages) (2020). DOI: 10.7566/JPSJ.89.024301

T. MORI and S. SAITO, “Dissecting the Dynamics during Enzyme Catalysis: A Case Study of Pin1 Peptidyl-Prolyl Isomerase,” *J. Chem. Theory Comput.* **16**, 3396–3407 (2020). DOI: 10.1021/acs.jctc.9b01279

S.-I. KODA and S. SAITO, “An Alternative Interpretation of the Slow KaiB-KaiC Binding of the Cyanobacterial Clock Proteins,” *Sci. Rep.* **10**, 10439 (7 pages) (2020). DOI: 10.1038/s41598-020-67298-7

Y. NAM, M. KALATHINGAL, S. SAITO and J. Y. LEE, “Tautomeric Effect of Histidine on β -Sheet Formation of Amyloid β 1–40: 2D-IR Simulations,” *Biophys. J.* **119**, 831–842 (2020). DOI: 10.1016/j.bpj.2020.07.009

N. MORITSUGU, T. NARA, S.-I. KODA, K. TOMINAGA and S. SAITO, “Molecular Mechanism of Acceleration and Retardation of Collective Orientation Relaxation of Water Molecules in Aqueous Solutions,” *J. Phys. Chem. B* **124**, 11730–11737 (2020). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c10036

B-3) 総説、著書

C. R. BAIZ, B. BŁASIAK, J. BREDEBBECK, M. CHO, J.-H. CHOI, S. A. CORCELLI, A. G. DIJKSTRA, C.-J. FENG, S. GARRETT-ROE, N.-H. GE, M. W. D. HANSON-HEINE, J. D. HIRST, T. L. C. JANSEN, K. KWAC, K. J. KUBARYCH, C. H. LONDERGAN, H. MAEKAWA, M. REPERT, S. SAITO, S. ROY, J. L. SKINNER, G. STOCK, J. E. STRAUB, M. C. THIELGES, K. TOMINAGA, A. TOKMAKOFF, H. TORII, L. WANG, L. J. WEBB and M. T. ZANNI, “Vibrational Spectroscopic Map, Vibrational Spectroscopy, and Intermolecular Interaction,” *Chem. Rev.* **120**, 7152–7218 (2020). DOI: 10.1021/acs.chemrev.9b00813

斉藤真司, 「多時間相関関数による凝縮系動力学の解析」, アンサンブル **22**, 110–117 (2020).

B-4) 招待講演

S. SAITO, “Effect of ion on collective orientation relaxation of water,” Dynamics of Chemical and Biological Systems, Kanpur (India), January 2020.

S. SAITO, “Effect of ion on collective orientation relaxation of water,” Department Seminar, Solid-state chemistry unit, Indian Institute of Science, Bangalore (India), January 2020.

斉藤真司, 「イオンによる水の集団回転運動の加速と減速の分子機構」, 分子フォト研究会「誘電応答から見るソフトマターの水和」, 神戸, January 2020.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子科学会運営委員 (2008–2012, 2016–2020).

分子科学会幹事 (2018–2020).

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

5th China-Japan-Korea Tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry, Organizing Committee (2020–2022).

Pacificchem2021 国内実行委員 (Computational and Theoretical 分野) (2017–2021).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

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 (2015–2021).

その他

森野基金 運営委員会委員 (2020–).

計算物質科学協議会 運営委員会委員 (2020–).

B-8) 大学での講義, 客員

神戸大学大学院理学研究科, 「量子化学特論」, 2021年1月25日–2月3日.

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」, 2020年12月1日–3日.

Indian Institute of Technology Kanpur, 客員教授, 2020年4月–2022年3月.

B-10) 競争的資金

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).

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

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

C) 研究活動の課題と展望

従来の反応論は, 反応座標に沿った運動はそれ以外の運動に比べ格段に遅いと仮定する。しかし, 生体分子や過冷却液体などの系では非常に幅広い時間スケールの運動が存在し, 従来の反応論における時間スケール分離の仮定が破綻する。これらの系における化学反応や構造変化における動的乱れと呼ばれる遅い揺らぎの影響を解析し, 構造変化や反応がどのように進むかについて明らかにする。また, 異常拡散の観点から過冷却水における構造変化の解析を進め, 構造欠陥と構造変化ダイナミクスとの関係, ガラス転移に向かうダイナミクスの変化について解明する。さらに, 我々は, 生体分子系の機能における揺らぎや構造変化の影響に関する理論研究を進めている。とくに, 構造変化や反応を考慮した数理モデルに基づく巨視的レベルの解析を進め, 時計タンパク質 KaiC の概日リズムの分子機構の解明を目指す。また, 高等植物の LHCII における励起エネルギー移動の分子機構の解明に向け, タンパク質中の色素の電子状態を適切に再現するパラメータを決定し, それに基づく励起エネルギーおよびその揺らぎ(スペクトル密度)の解析を進め, LHCII における効率的励起エネルギー移動の分子機構を解明する。

南 谷 英 美 (准教授) (2019 年 4 月 1 日着任)

下出 敦夫 (助教)

三輪 邦之 (特任助教 (分子科学研究所特別研究員))

日野出 憲治 (研究員)

奥川 伸一 (研究員)

赤羽 厚子 (事務支援員)

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：電子フォノン相互作用及び熱物性
- b) 吸着原子・分子が生み出す新奇界面磁性
- c) Dirac 電子系における特異な輸送特性

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ー対形成，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伝導特性や熱物性に与える影響に着目している。本年は層状物質における電子フォノン相互作用の精密計算から，アルカリ原子をドーピングした層状物質において，圧力による超伝導転移温度制御の可能性を示した。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。固体の熱物性については，原子に加わる力と系のエネルギーの第一原理計算結果を再現するニューラルネットワークポテンシャルを作成し，それをフォノン物性の計算に応用することで熱伝導率の計算時間を大幅に軽減した。
- 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，磁性を持った原子や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。本年は，吸着原子が生じる近藤状態のスペクトル形状から基板内の歪を解析しうること，層状超伝導物質にて生じるス波束縛状態の特異な空間分布について実験グループとの共同研究を進めた。加えて，最近は，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，鉄フタロシアニン (FePc) を Pt(111) 表面に吸着させた場合を対象として共同研究を行い，FePc の持つ磁気モーメントが Pt の伝導電子に対して磁性不純物として働いていること，FePc 分子において，スピン移行効果を用いた，電流による分子スピン制御が可能であることを示した。
- c) 電子のスピンとその相互作用は相対論的量子力学における Dirac 方程式に遡る。1 次元的な曲線に閉じ込められた電子を考えると，Dirac 方程式から出発して非相対論的極限をとることで，曲線の幾何学的構造と結合した新たなスピン軌道相互作用が生じることを示した。この幾何学的なスピン軌道相互作用によって，二重らせんに閉じ込められた系に電流を流すと，そのカイラリティに依存してスピン分極が生じる Edelstein 効果が起こることを示した。

B-1) 学術論文

- S. CHOI, S. HIROI, M. INUKAI, S. NISHINO, R. SOBOTA, D. BYEON, M. MIKAMI, E. MINAMITANI, M. MATSUNAMI and T. TAKEUCHI**, “Crossover in Periodic Length Dependence of Thermal Conductivity in 5d Element Substituted Fe₂ VAl-Based Superlattices,” *Phys. Rev. B* **102**, 104301 (10 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevB.102.104301
- H. GAMOU, K. SHIMOSE, R. ENOKI, E. MINAMITANI, A. SHIOTARI, Y. KOTANI, K. TOYOKI, T. NAKAMURA, Y. SUGIMOTO, M. KOHDA, J. NITTA and S. MIWA**, “Detection of Spin-Transfer from Metal to Molecule by Magnetoresistance Measurement,” *Nano Lett.* **20**, 75–80 (2020). DOI: 10.1021/acs.nanolett.9b03110
- K. SHIMIZU, W. LIU, W. LI, S. KASAMATSU, Y. ANDO, E. MINAMITANI and S. WATANABE**, “First-Principles Study of Li-Ion Distribution at γ -Li₃PO₄/Metal Interfaces,” *Phys. Rev. Mater.* **4**, 015402 (10 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.4.015402
- Z. NI, E. MINAMITANI, K. KAWAHARA, R. ARAFUNE, C.-L. LIN, N. TAKAGI and S. WATANABE**, “Mechanically Tunable Spontaneous Vertical Charge Redistribution in Few-Layer WTe₂,” *J. Phys. Chem. C* **124**, 2008–2012 (2020). DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b10423
- X. YANG, Y. YUAN, Y. PENG, E. MINAMITANI, L. PENG, J.-J. XIAN, W.-H. ZHANG and Y.-S. FU**, “Observation of Short-Range Yu-Shiba-Rusinov States with Threefold Symmetry in Layered Superconductor 2H-NbSe₂,” *Nanoscale* **12**, 8174–8179 (2020). DOI: 10.1039/d0nr01383h
- K. IWATA, T. MIYAMACHI, E. MINAMITANI and F. KOMORI**, “Sensing Surface Lattice Strain with Kondo Resonance of Single Co Adatom,” *Appl. Phys. Lett.* **116**, 051604 (4 pages) (2020). DOI: 10.1063/1.5142064
- P. MANO, E. MINAMITANI and S. WATANABE**, “Straintronic Effect for Superconductivity Enhancement in Li-Intercalated Bilayer MoS₂,” *Nanoscale Adv.* **3**, 3150–3155 (2020). DOI: 10.1039/D0NA00420K
- N. H. SHIMADA, E. MINAMITANI and S. WATANABE**, “Theoretical Prediction of Superconductivity in Monolayer h-BN Doped with Alkaline-Earth Metals (Ca, Sr, Ba),” *J. Phys.: Condens. Matter* **32**, 435002 (9 pages) (2020). DOI: 10.1088/1361-648X/aba674
- A. SHITADE and E. MINAMITANI**, “Geometric Spin–Orbit Coupling and Chirality-Induced Spin Selectivity,” *New J. Phys.* **22**, 113023 (8 pages) (2020). DOI: 10.1088/1367-2630/abc920
- A. SHITADE, K. MAMEDA and T. HAYATA**, “Chiral Vortical Effect in Relativistic and Nonrelativistic Systems,” *Phys. Rev. B* **102**, 205201 (6 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevB.102.205201
- A. DAIDO, A. SHITADE and Y. YANASE**, “Thermodynamic Approach to Electric Quadrupole Moments,” *Phys. Rev. B* **102**, 235149 (12 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevB.102.235149

B-3) 総説, 著書

- C.-L. LIN, N. KAWAKAMI, R. ARAFUNE, E. MINAMITANI and N. TAKAGI**, “Scanning Tunneling Spectroscopy Studies of Topological Materials,” *J. Phys.: Condens. Matter* **32**, 243001 (24 pages) (2020). DOI: 10.1088/1361-648X/ab777d
- S. WATANABE, W. LI, W. JEONG, D. LEE, K. SHIMIZU, E. MINAMITANI, Y. ANDO and S. HAN**, “High-Dimensional Neural Network Atomic Potential for Examining Energy Materials: Some Recent Simulations,” *J. Phys.: Energy* **3**, 012003 (16 pages) (2021). DOI: 10.1088/2515-7655/abc7f3

渡邊 光, 柳瀬陽一, 石塚 淳, 金杉翔太, 大同暁人, 角田峻太郎, 下出敦夫, 塩見雄毅, 「奇パリティ多極子相の分類学と電磁応答・超伝導」, *固体物理* **55**, 535–549 (2020).

B-4) 招待講演

E. MINAMITANI, “Molecular spins at surfaces: From Kondo singlet to application for spintronics,” The 3rd Symposium for The Core Research Clusters for Materials Science and Spintronics, Sendai (Japan), February 2020.

南谷英美, 「半導体材料における電子フォノン相互作用と熱伝導率のシミュレーション」, 2020年度関東支部学術講演会, 2020年4月. (新型コロナウイルスの影響により中止・招待講演は成立)

南谷英美, 「半導体における電子フォノン相互作用の精密解析」, 第4回フォノンエンジニアリング研究会, オンライン開催, 2020年12月.

E. MINAMITANI, “Ab-initio calculation of electron-phonon coupling in layered materials,” 2021 Taiwan-AVS symposium: Advances in Scanned Probe Microscopy, Online, January 2021.

南谷英美, 「表面界面物性における量子多体効果」(受賞記念講演), 2020年日本表面真空学会学術講演会, オンライン開催, 2020年11月.

下出敦夫, 「結晶における多極子の定式化と交差相関応答の理論的研究」(受賞記念講演), 日本物理学会第76回年次大会, オンライン開催, 2021年3月.

三輪邦之, 「ナノ接合内の分子における光電変換に関する理論的研究」(受賞記念講演), 日本物理学会第76回年次大会, オンライン開催, 2021年3月.

B-6) 受賞, 表彰

南谷英美, 第1回日本表面真空学会若手女性研究者優秀賞(2020).

下出敦夫, 日本物理学会若手奨励賞(領域8)(2020).

三輪邦之, 日本物理学会若手奨励賞(領域9)(2020).

南谷英美, 日本物理学会第二回米沢富美子記念賞(2021).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面真空学会ダイバーシティ推進委員会委員(2018–).

日本物理学会運営委員(領域3)(2020.10–2021.9). (下出敦夫)

学会の組織委員等

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

その他

IOP, Trusted Reviewer (2020).

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, 「基礎物理化学II」, 2020年7月1日–3日.

B-10) 競争的資金

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).

科研費若手研究,「温度勾配が誘起するスピンのダイナミクスの理論」, 下出敦夫 (2018年度-2020年度).

C) 研究活動の課題と展望

アモルファス材料を始めとする乱れを含んだ系へ研究を進めつつあるが, 結晶とは異なる「不規則ではあるが何らかの幾何的な構造」がある場合を扱うための工夫が必要であることを実感している。たとえば, ニューラルネットワークポテンシャルに関しては乱れの情報や短距離・中距離相関をよく記述できる特徴量が物理量の高精度予測のためには必要となることが予想される。この課題にデータサイエンス分野で発展が著しいトポロジカルデータ解析や多様体学習などの手法を試していきたい。

また, Dirac 電子系における特異な輸送特性について, 現実物質での発現・制御の可能性を探るため, 第一原理計算からの強束縛模型構築などと組み合わせた計算手法の開発や, それを応用した物質探索を進めていきたい。

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)

NGUYEN, Thanh Phuc (助教)

藤橋 裕太 (特任研究員)

赤羽 厚子 (事務支援員)

A-1) 専門領域：理論物理化学

A-2) 研究課題：

- a) 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) 近年、非古典光を用いた量子計測技術の分子科学、物質科学への応用に向けた機運が高まりつつある。レーザーなど古典光を用いた分光計測に比して卓越した優位性を有する量子計測技術を開発する上で、光の非古典的性質が果たす役割を明確にする必要がある。本研究課題では、複雑分子系の動的過程を時間分解計測することを念頭に、量子もつれ光子対の非古典相関を利用する量子分光計測の理論研究に取り組んでいる。

特に本年は、(1) もつれ光子対の発生方法としてポンプ光に CW レーザーを用いたパラメトリック下方変換を、(2) 光学系として Hong-Ou-Mandel 干渉計を用いて、時間分解スペクトルの定式化を行なった。レーザーを用いた分光計測では超短パルスの遅延制御によって時間分解測定を行うが、もつれ光子対の非古典相関を用いることによって同様の時間分解測定が可能となることを見出した。さらに、もつれ光子対の非古典相関が強い極限においては、本手法で得られるスペクトル情報がフォトンエコーなど非線形光学応答として得られる二次元分光スペクトルの情報に等価であることを示した。すなわち、CW 光および Hong-Ou-Mandel 干渉計など比較的簡単な光学系を用いることで、複数のレーザーパルスを注意深く制御することが求められるコヒーレント多次元分光法と同等の情報が得られる。このことは、光子対の非古典相関がもたらす量子分光計測の優位性を明確に示しているだけでなく、量子分光計測を展開するうえで非古典光をどのようにデザインするべきかについて重要な指針を提供している。量子分光計測の理論基盤を確立することに成功したと言える。

さらに現在、カスケードパラメトリック下方変換などを用いて生成される三光子もつれ状態を用いて、二光子同時計数測定に基づく時間分解計測手法の定式化を試みている。位相整合関数のスペクトル分布が周波数フィルタとして機能することで、時間分解スペクトルの特定の周波数領域を選択的に分解することが可能であることを明らかにし、非古典光を用いた時間分解能と周波数分解能の同時向上の可能性を理論的に示した。

B-1) 学術論文

A. ISHIZAKI, "Prerequisites for Relevant Spectral Density and Convergence of Reduced Density Matrices at Low Temperatures," *J. Phys. Soc. Jpn.* **89**, 015001 (2 pages) (2020). (Ranked in Top 20 Most Downloaded Articles of *J. Phys. Soc. Jpn.* in December 2019) DOI: 10.7566/JPSJ.89.015001

T. P. NGUYEN, Q. T. PHAM and A. ISHIZAKI, “Controlling the Nonadiabatic Electron Transfer Reaction Rate through Molecular-Vibration Polaritons in the Ultrastrong Coupling Regime,” *Sci. Rep.* **10**, 7318 (11 pages) (2020). DOI: 10.1038/s41598-020-62899-8

Y. FUJIHASHI, Y. SHIMIZU and A. ISHIZAKI, “Generation of Pseudo-Sunlight via Quantum Entangled Photons and the Interaction with Molecules,” *Phys. Rev. Res.* **2**, 023256 (7 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.2.023256

A. ISHIZAKI, “Probing Excited-State Dynamics with Quantum Entangled Photons: Correspondence to Coherent Multidimensional Spectroscopy,” *J. Chem. Phys.* **153**, 051102 (7 pages) (2020). (Selected as an Editor’s Pick) DOI: 10.1063/5.001543

B-4) 招待講演

A. ISHIZAKI, “Dynamics in Photosynthetic System: Quantum dissipation, vibrational assistance, and quantum light spectroscopy,” The 3rd International Forum on Quantum Metrology and Sensing, online, December 2020.

石崎章仁, 「量子科学技術に基づく複雑分子系の観測と制御の理論」, 電気通信大学大学院情報理工学研究科講演会, 東京都調布市 (オンライン開催), 2020年9月.

石崎章仁, 「タイトルTBA」, 量子科学と重力・宇宙の融合研究会, 九州大学, 福岡県福岡市, 2020年3月. (新型コロナウイルス感染拡大防止のため中止)

石崎章仁, 「量子散逸系として見る光補集系におけるダイナミクス」, 山田研究会「動的過程における右と左——非平衡, 非対称, 非線形が紡ぐ学際研究——」, アルカディア市ヶ谷, 東京都千代田区, 2020年2月. (新型コロナウイルス感染拡大防止のため自粛)

A. ISHIZAKI, “Theory of time-resolved optical spectroscopy with quantum light: Toward simultaneous enhancement of temporal and spectral resolutions,” Workshop on Quantum Foundations: Measurement & Entanglement, High Energy Accelerator Research Organization, Tsukuba (Japan), February 2020.

Y. FUJIHASHI and A. ISHIZAKI, “Quantum dynamical aspects of primary charge separation in photosystem II reaction center,” the 11th Asian Conference on Ultrafast Phenomena 2020, East China Normal University, Shanghai (China), January 2020.

B-6) 受賞, 表彰

藤橋裕太, 日本物理学会第15回若手奨励賞 (2021).

石崎章仁, 第16回日本学士院学術奨励賞 (2020).

石崎章仁, 第16回日本学術振興会賞 (2020).

NGUYEN, T. P., 第9回自然科学研究機構若手研究者賞 (2020).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

量子生命科学学会 学術委員会委員 (2019–2021).

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).

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–).

B-8) 大学での講義, 客員

電気通信大学大学院情報理工学研究科, 「物理工学特論」, 2020年9月14日–18日.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「基礎物理化学II」, 2020年7月7日–10日

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究「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).

文部科学省光・量子飛躍フラッグシッププログラム (Q-LEAP), 「Flagship プロジェクト: 量子生命技術の創製と医学・生命科学の革新」(代表: 馬場嘉信), 石崎章仁 (研究分担者) (2020年–2026年).

文部科学省光・量子飛躍フラッグシッププログラム (Q-LEAP), 「基礎基盤研究: 複雑分子系としての光合成機能の解明に向けた多次元量子もつれ分光技術の開発」(代表: 清水亮介), 石崎章仁 (研究分担者) (2018年–2023年).

科研費基盤研究(B), 「太陽光の効率利用のための励起子・電荷ダイナミクスの基礎理論の構築」(代表: 田村宏之), 石崎章仁 (研究分担者) (2018年–2021年).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型)「天然光合成系におけるエネルギーフローに関する実験・理論解析」(代表: 橋本秀樹), 石崎章仁 (研究分担者) (2017年–2022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)

ZHAO, Pei (特任研究員)

金澤 悠紀 (研究員)

白男川 貴文 (大学院生)

羽鳥 敦也 (大学院生)

川口 律子 (事務支援員)

杉本 縁 (事務支援員)

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) 金属ナノクラスターの安定性とキラル光物性の起源
- b) ヒドロキシフェニルトリアザスマネンの分子内励起プロトン移動による固相二重発光の起源
- c) シアノゲンの電子共鳴状態の振動構造に関する理論解析
- d) Pd-Au 合金触媒によるヒドロシリル化反応の Pd サイトと周辺サイトの重要性
- e) Pd₅₅ および Rh₅₅ ナノ粒子の電子構造とプロベン酸化の触媒活性の相関
- f) リン修飾 CHA ゼオライトの ³¹P NMR 化学シフトによる構造解明
- g) 複雑系錯体触媒の理論解析：ノルボルネンの立体効果を利用したメタ選択的 C-H 活性化

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 金属ナノ粒子の非対称性は、局在表面プラズモンによるキラル光物性増強など新規な機能発現への展開が期待できる。最近、実験的に不斉配位子で修飾した銀ナノクラスターのエナンチオ過剰誘導が成功し、キラル光物性が観測された。この光学活性の起源を解明するため、銀ナノクラスターの電子構造と光学物性について密度汎関数法に基づく理論研究を実施した。その結果、クラスターのコアが超原子の閉殻電子構造をとり安定であること、円二色性の起源が銀ナノクラスターのヘリカルな構造の電子状態を反映した金属-配位子電荷移動励起であることを理論的に解明した。
- b) 分子内に3つの OH-N 型水素結合をもつトリス (2-ヒドロキシフェニル) トリアザスマネン (OHPhTAS) は、固相で二重発光を示すが、非極性溶液中では発光しない。この二重発光は励起状態分子内プロトン移動 (ESIPT) に起因するが、分子内に3つの OH-N 型水素結合があり、その詳細は不明であった。TD-DFT 計算による S₁ 状態の断熱エネルギー曲面から、OHPhTAS ではトリエノール体 (EEE*) → モノケト体 (KEE*) の ESIPT が支配的であり、固相の二重発光はエネルギー障壁の低い EEE* および KEE* の2つの構造からの発光であること、液相では KEE* 状態から T₁/S₀ のポテンシャル交差を經由して基底状態に非断熱緩和し、二重発光が消失することを明らかにした。
- c) 共鳴状態は準安定状態であり、電子状態では準安定アニオン、多価イオン、内殻ホール状態などがある。我々は、電子共鳴状態の理論として独自の射影型 CAP/SAC-CI 法や ACCC SAC-CI 法を開発した。本年度は、シアノゲン (NCCN) の過渡的アニオン状態を、電子エネルギー損失分光法、正規化された解析接続理論、および複素ポテンシャル吸収法を用いて研究した。4つの共鳴状態 (0.36, 4.1, 5.3, 7.3 eV) を解析し、閾値付近 (0.36 eV) の ²Π_g 状態

の振動構造を複素ポテンシャル曲面に基づいて解明した。

- d) 内部アルキンや α,β -不飽和ケトンのヒドロシリル化反応を高効率で触媒する Pd-Au 合金触媒が開発された。そこで Pd-Au 合金クラスターと Pd-Au(111) 表面における内部アルキンのヒドロシリル化反応の反応機構を調査した。反応は Chalk-Harrod 機構に従うこと、律速段階は Pd-Au 合金クラスターではヒドロメタル化であり、Pd-Au(111) 表面では Si-C の還元的脱離であることを明らかにした。Pd サイトおよび周辺の Pd-Au サイトが吸着や活性中心として重要であり、これは均一系触媒にはない不均一系合金触媒の特徴であることを示した。
- e) 自動車排ガス浄化触媒（三元触媒）では、Pt, Pd ナノ粒子が CO や炭化水素の酸化に有効であり、Rh ナノ粒子は NO_x の還元にも有効である。Pd₅₅ および Rh₅₅ ナノクラスターの電子構造とプロペン酸化の触媒活性について調査し、プロペンがアクロレインと水に酸化される反応機構が有利であることを明らかにした。表面酸素への水素移動、OH のプロピレンへの攻撃、CHO からの水素移動で進行すること、Pd と Rh クラスターの反応性の違いが M-OH 結合の強さと相関すること、さらに M の d-バンドトップの位置と相関することを明らかにした。
- f) リン修飾したゼオライト (P-CHA) は、水熱処理に対して NO の NH₃ 選択的還元反応の耐久性が高い。この P-CHA の水熱耐久性について ³¹P MAS NMR および理論計算により解析した。水熱処理中の P-CHA の ³¹P NMR 化学シフトは -27 ~ -42 ppm の範囲で変化するが、これが水熱処理によるリン種の構造変化と相関することを明らかにした。理論計算によってフレームワーク内外のリン種の ³¹P NMR 化学シフトを計算し、水熱処理初期の -42 ppm のピーク増大はフレーム内のシリコアルミノリン酸塩 (SAPO) 種の生成に起因し、水熱処理後期の -29 ppm のピーク増大はフレーム分解後の縮合リン酸塩またはアルミノリン酸塩種であることを明らかにした。
- g) C-H 結合活性化は、C-H 結合を C-C 結合や C-X 結合に変換する重要な合成法であり、様々な方法が開発されてきた。これまで遷移金属錯体触媒によるオルト、パラ C-H 結合活性化は多く開発されてきたが、メタ選択的 C-H 活性化は限定されていた。最近、Yu らは Catellani 反応を参考にして、Pd(II) 錯体がノルボルネンとピリジン骨格を有する配位子により、オルト選択的な反応をメタ選択的な反応に変換できることを見出した。本研究では、DFT 計算によって、メタ選択的 C-H 結合活性化のメカニズムを解明した。Pd(II) および Pd(IV) を経由する様々な反応経路を検証し、このメタ選択的な C-H 結合活性化が、主にノルボルネンの立体効果によって制御されていることを明らかにした。

B-1) 学術論文

N. TAKAGI, M. EHARA and S. SAKAKI, "Theoretical Study of NO Dissociative Adsorption onto 3d Metal Particles M₅₅ (M = Fe, Co, Ni, and Cu): Relation between the Reactivity and Position of Metal Element in the Periodic Table," *ACS Omega* **6**, 4888–4898 (2021). DOI: 10.1021/acsomega.0c05838

A. TAKAMATSU, K. TAMAI, S. HOSOKAWA, T. TANAKA, M. EHARA and R. FUKUDA, "Oxidation and Storage Mechanisms for Nitrogen Oxides on Variously Terminated (001) Surfaces of SrFeO_{3- δ} and Sr₃Fe₂O_{7- δ} Perovskites," *ACS Appl. Mater. Interface* **13**, 7216–7226 (2021). DOI: 10.1021/acsaami.0c20724

M. OGURA, Y. SHIMADA, T. OHNISHI, N. NAKAZAWA, Y. KUBOTA, T. YOKOI, M. EHARA, K. SHIMIZU and N. TSUNOJI, "AFX Zeolite for Use as a Support of NH₃-SCR Catalyst Mining through AICE Joint Research Project of Industries-Academia-Academia," *Catalysts* **11**, 163 (13 pages) (2021). DOI: 10.3390/catal11020163

P. ZHAO, B. BOEKFA, K. SHIMIZU, M. OGURA and M. EHARA, "Selective Catalytic Reduction of NO with NH₃ over Cu-Exchanged CHA, GME, and AFX Zeolites: A DFT Study," *Catal. Sci. Technol.* **11**, 1780–1790 (2021). DOI: 10.1039/d0cy02342f

- S. XU, M. LI, G. PEI, P. ZHAO, X. ZHAO, G. WU, C. KONG, Z. YANG, M. EHARA and T. YANG**, “Stabilities, Electronic Structures, and Bonding Properties of 20-Electron Transition Metal Complexes $(Cp)_2TMO$ and their One-Dimensional Sandwich Molecular Wires ($Cp = C_5H_5, C_5(CH_3)H_4, C_5(CH_3)_5$; $TM = Cr, Mo, W$),” *J. Phys. Chem. A* **125**, 721–730 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpca.0c07402
- H. YONEZAWA, T. SHIRAOGAWA, M. HAN, S. TASHIRO, M. EHARA and M. SHIONOYA**, “Mechanistic Studies on Photoinduced Catalytic Olefin Migration Reactions at the Pd(II) Centers of a Porous Crystal, Metal-Macrocyclic Framework,” *Chem. –Asian J.* **16**, 202–206 (2021). (Front Cover) DOI: 10.1002/asia.202001306
- P. ZHAO, M. EHARA, A. SATSUMA and S. SAKAKI**, “Theoretical Insight into Oxidation Catalysis of Chromite Spinel MCr_2O_4 ($M = Mg, Co, Cu, \text{ and } Zn$): Volcano Plot for Oxygen-Vacancy Formation and Catalytic Activity,” *J. Catal.* **393**, 30–41 (2021). DOI: 10.1016/j.jcat.2020.11.006
- S. KINOSHITA, Y. HARABUCHI, Y. INOKUCHI, S. MAEDA, M. EHARA, K. YAMAZAKI and T. EBATA**, “Substitution Effect on the Nonradiative Decay and *trans* → *cis* Photoisomerization Route: A Guideline to Develop Efficient Cinnamate Based Sunscreens,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23**, 834–845 (2020). (Front Cover) DOI: 10.1039/D0CP04404D
- Y. PATHAK, K. S. JUNEJA, G. VARMA, M. EHARA and U. DEVA PRIYAKUMAR**, “Deep Learning Enabled Inorganic Material Generator (DING),” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 26935–26943 (2020). DOI: 10.1039/D0CP03508D
- G. PEI, P. ZHAO, S. XU, X. ZHAO, C. KONG, Z. YANG, M. EHARA and T. YANG**, “Stabilities, Electronic Structures and Bonding Properties of Iron Complexes $(E_1E_2)Fe(CO)_2(CNAr^{Tripp2})_2$ ($E_1E_2 = BF, CO, N_2, CN^-, \text{ or } NO^+$),” *ChemistryOpen* **9**, 1195–1201 (2020). DOI: 10.1002/open.202000248
- R. NAG, R. ČURÍK, M. TARANA, M. POLÁŠEK, M. EHARA, T. SOMMERFELD and J. FEDOR**, “Resonant States in Cyanogen $NCCN$,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 23141–23147 (2020). DOI: 10.1039/D0CP03333B
- Y.-X. ZHAO, M.-Y. LI, Y.-B. HAN, K. YUAN, M. EHARA and X. ZHANG**, “Theoretical Insight into Thermodynamically Optimal $U@C_{84}$: Three-Electron Transfer Rather Than Four-Electron Transfer,” *Inorg. Chem.* **59**, 12650–12658 (2020). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.0c01756
- M.-Y. LI, Y.-X. ZHAO, Y.-B. HAN, K. YUAN, K.-N. ZHANG, Y.-Q. CHEN, M. EHARA, S. NAGASE and X. ZHAO**, “Covalent Interactions Depended on the Distances between Metals and Fullerenes for Thermodynamically Stable $M@C_{78}$ ($M = La, Ce, \text{ and } Sm$),” *Inorg. Chem. Front.* **7**, 2538–2547 (2020). DOI: 10.1039/D0QI00428F
- R. N. DHITAL, K. NOMURA, Y. SATO, S. HAESUWANNAKIJ, M. EHARA and H. SAKURAI**, “Pt–Pd Nanoalloy for the Unprecedented Activation of Carbon-Fluorine Bond at Low Temperature,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **93**, 1180–1185 (2020). DOI: 10.1246/bcsj.20200112
- T. SHIRAOGAWA and M. EHARA**, “Theoretical Design of Photofunctional Molecular Aggregates for Optical Properties: An Inverse Design Approach,” *J. Phys. Chem. C* **124**, 13329–13337 (2020). (Supplementary Journal Cover) DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c01730
- H. YOSHIDA, J. KUMAR, M. EHARA, Y. OKAJIMA, F. ASANOMA, T. KAWAI and T. NAKASHIMA**, “Impact of Enantiomeric Ligand Composition on the Photophysical Properties of Chiral Ag_{29} Nanoclusters,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **93**, 834–840 (2020). (Selected Paper) DOI: 10.1246/bcsj.20200089

- B. ZHU, M. EHARA and S. SAKAKI**, “Propene Oxidation Catalysis and Electronic Structure of M_{55} Particle ($M = Pd$ or Rh): Differences and Similarities between Pd_{55} and Rh_{55} ,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 11783–11796 (2020). (Inside Front Cover) DOI: 10.1039/d0cp00169d
- Q. M. PHUNG, Y. KOMORI, T. YANAI, T. SOMMERFELD and M. EHARA**, “Combination of a Voronoi-Type Complex Absorbing Potential with the XMS-CASPT2 Method and Pilot Applications,” *J. Chem. Theory Comput.* **16**, 2606–2616 (2020). DOI: 10.1021/acs.jctc.9b01032
- M. PROMKATKAEW, S. SURAMITR, T. KARKIRD, M. EHARA and S. HANNONGBUA**, “DFT/TD-DFT Investigation on the Photoinduced Electron Transfer of Diruthenium and Viologen Complexes,” *J. Lumin.* **222**, 117121 (9 pages) (2020). DOI: 10.1016/j.jlumin.2020.117121
- M.-Y. LI, Z.-B. GAO, Y.-B. HAN, Y.-X. ZHAO, K. YUAN, S. NAGASE, M. EHARA and X. ZHAO**, “Potential Molecular Semiconductor Devices: Cyclo- C_n ($n = 10$ and 14) with Higher Stabilities and Aromaticities than Acknowledged Cyclo- C_{18} ,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 4823–4831 (2020). DOI: 10.1039/D0CP00167H
- T. SADHUKHAN, A. JUNKAEW, P. ZHAO, H. MIURA, T. SHISHIDO and M. EHARA**, “Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst,” *Organometallics* **39**, 528–537 (2020). (Supplementary Journal Cover) DOI: 10.1021/acs.organomet.9b00745
- S. SARTYOUNGKUL, M. EHARA and H. SAKURAI**, “Time-Dependent Density Functional Theory Investigation of Excited State Intramolecular Proton Transfer in Tris(2-hydroxyphenyl)triazasumanene,” *J. Phys. Chem. A* **124**, 1227–1234 (2020). DOI: 10.1021/acs.jpca.9b10340
- H. YOSHIDA, M. EHARA, U. DEVA PRIYAKUMAR, T. KAWAI and T. NAKASHIMA**, “Enantioseparation and Chiral Induction in Ag_{29} Nanoclusters with Intrinsic Chirality,” *Chem. Sci.* **11**, 2394–2400 (2020). DOI: 10.1039/c9sc05299b
- S. HU, P. ZHAO, W. SHEN, M. EHARA, Y. XIE, T. AKASAKA and X. LU**, “Crystallographic Characterization of $Er_2C_2@C_{80-88}$: Cluster Stretching with Cage Elongation,” *Inorg. Chem.* **59**, 1940–1946 (2020). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.9b03269
- M.-Y. LI, Y.-X. ZHAO, Y.-B. HAN, K. YUAN, S. NAGASE, M. EHARA and X. ZHAO**, “Theoretical Investigation of the Key Roles in Fullerene-Formation Mechanisms: Enantiomer and Enthalpy,” *ACS Appl. Nano Mater.* **3**, 547–554 (2020). DOI: 10.1021/acsanm.9b02110
- P. ZHAO, B. BOEKFA, T. NISHITOBA, N. TSUNOJI, T. SANO, T. YOKOI, M. OGURA and M. EHARA**, “Theoretical Study on ^{31}P NMR Chemical Shifts of Phosphorus-Modified CHA Zeolites,” *Microporous Mesoporous Mater.* **294**, 109908 (12 pages) (2020). DOI: 10.1016/j.micromeso.2019.109908
- T. YANG, C. KONG, S. YANG, Z. YANG, S. YANG and M. EHARA**, “Reaction Mechanism, Norbornene and Ligand Effects, and Origins of Meta-Selectivity of Pd/Norbornene-Catalyzed C–H Activation,” *Chem. Sci.* **11**, 113–125 (2020). DOI: 10.1039/c9sc04720d

B-4) 招待講演

- M. EHARA and T. SHIRAOGAWA**, “Theoretical Design of Photofunctional Molecular Aggregates for Optical Properties: An Inverse Design Approach,” Japan-Norway Bilateral Symposium from Fundamental Chemistry to Porous Materials: Theory and Experiment, Okazaki (Japan) (online), August 2020. (Invited Talk)

江原正博, 「不均一系触媒の構造と機能に関する理論研究」, 第126回触媒討論会「コンピューターの利用」(特別講演), 静岡(オンライン開催), 2020年9月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子科学会運営委員 (2020-).

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-).

理論化学会幹事, 選出方法検討委員, 企画委員 (2019-), 懸賞委員 (2020-2021).

学会の組織委員等

Pacificchem 2021: Symposium (#393) Triangle of Heterogeneous Catalysis, Surface Science, and Theory, Corresponding Symposium Organizer (2018-2021).

The Vth Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC) Conference, Sapporo, Japan, Organizing Committee (2019-2022).

The VIIIth Japan-Czech-Slovakia (JCS) Symposium on Theoretical Chemistry, Sapporo, Japan, Organization Committee (2019-2021).

Bilateral Programs (JSPS joint research projects, Japan-Norway), Symposium: Japan-Norway Bilateral Symposium from Fundamental Chemistry to Porous Materials: Theory and Experiment, 所内対応 (2020).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会学術システム研究センター専門研究員 (2020-).

学会誌編集委員

Journal of Computational Chemistry, Editor (2012-).

Theoretical Chemistry Accounts, Editorial Board (2015-).

The Chemical Record, Editorial Board (2015-).

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).

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-), 運営委員会委員 (2020-).

東京大学物性科学研究所 CCMS 運営委員会委員 (2020-).

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

大阪大学大学院理学研究科, 非常勤講師, 集中講義「量子化学特論」, 2021年1月20日-21日.

東京都立大学, 非常勤講師, 集中講義「物理化学特別講義I」, 2020年12月16日-17日

総合研究院大学院大学物理科学研究科, 分光学基礎コース, 2020年7月27日-29日.

大阪大学大学院工学研究科, 非常勤講師, 2008年-2020年, 集中講義「計算機化学」, 2020年4月16日-17日.

京都大学大学院工学研究科, 非常勤講師, 講義「量子化学II」, 2020年4月-7月.

京都大学実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点ユニット, 拠点教授, 2012年9月-2022年3月.

B-9) 学位授与

白男川貴文, 「Theoretical Study on the Design of Photofunctional Molecular Aggregates and Molecule-Plasmon Systems」, 2021年3月, 博士(理学).

金澤悠紀, 「Theoretical Study on the Excited States of Peralkylated Oligosilanes and the Resonance States of DNA and RNA Bases」, 2020年3月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「先進的量子状態理論に基づく不均一系触媒および光機能システム系の研究開発」, 江原正博(2020年-2022年).

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-2021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-2021年).

科研費基盤研究(S), 「光エネルギーの高度活用に向けた分子システム化技術の開発」(代表: 君塚信夫), 江原正博(研究分担者)(2020年-2024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」(代表: 田中庸裕), 江原正博(研究分担者)(2012年-2021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)

伊藤 暁 (助教)
谷本 勝一 (特任研究員 (IMS フェロー))
山内 仁喬 (大学院生)
宮澤 和久 (大学院生)
福原 大輝 (大学院生)
川口 律子 (事務支援員)

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) 赤外自由電子レーザーにより A β アミロイド線維が破壊される際の水分子の役割
- b) ポリフェノールによるアミロイド β (16-22) フラグメントの凝集阻害効果
- c) COVID-19 ウイルスの RNA 依存性 RNA ポリメラーゼに対する薬剤の作用機構
- d) パーキンソン病を引き起こす α シヌクレインフラグメントの凝集初期過程の解明

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 (A β) ペプチドが凝集してできたアミロイド線維が原因で発症すると言われている。我々は赤外自由電子レーザーを照射して A β のアミロイド線維を破壊する非平衡分子動力学シミュレーションを行った。その結果、水分子がタンパク質凝集体を破壊する新たなメカニズムを発見した。アミロイド線維中の C=O と N-H が形成する分子間水素結合は、レーザーパルスが照射されるたびに切断される。しかし、これらの結合は多くの場合その照射後に自然に再形成される。だが、C=O と N-H の間にたまたま水分子が入り込むと、水素結合の再形成が阻害されてしまう。規則的に並んでいる水素結合にとってそのような場所は欠陥となり、そこから分子間 β シートの全ての水素結合が切断される。このような水分子の役割は、他の既知のメカニズムとはまったく異なるものである。さらに、レーザーでアミロイド線維を破壊すると α ヘリックス構造が多く形成されることも発見し、その理由も突き止めた。
- b) ポリフェノールには A β ペプチドの凝集を阻害する効果があり、アルツハイマー病に対する薬剤候補分子として注目されている。A β の凝集する効果が特に高いポリフェノールとしてミリセチンとロスマリン酸が知られている。我々は A β ペプチドのフラグメントである A β (16-22) ペプチドとこれらのポリフェノールを含む系のレプリカ置換分子動力学シミュレーションを行った。その結果、A β (16-22) ペプチドの 22 番目のグルタミン酸 (Glu22) と 16 番目のリジン (Lys16) が最も高い確率でポリフェノールと結合することを見出した。A β (16-22) ペプチドは凝集する際に Glu22 のカルボキシル基と Lys16 のアミノ基との間の静電引力により反平行 β シートを形成する。我々のシミュレーション結果から Glu22 や Lys16 の側鎖にミリセチンやロスマリン酸が結合することで A β (16-22) ペプチド同士の凝集が抑制されることが分かった。
- c) 新型コロナウイルス感染症 (COVID-19) に対する治療薬として現在レムデシビルやファビピラビル (商品名アビガン) が注目されている。これらは COVID-19 ウイルスの RNA ポリメラーゼに対する RNA 複製阻害剤として機能することが期待されている。RNA ポリメラーゼは通常アデノシン三リン酸 (ATP) などのヌクレオチドを取り込んで RNA

- を複製する。レムデシビル、ファビピラビルは ATP などと競合して RNA ポリメラーゼに取り込まれて RNA の複製を阻害する。我々はこれらの薬剤や ATP を RNA ポリメラーゼの周辺に 100 個配置した分子動力学シミュレーションを実行した。その結果、どの薬剤や ATP も三リン酸のマイナス電荷が RNA ポリメラーゼの結合サイトにある Mg^{2+} イオンに引き寄せられて結合することが分かった。また、RNA ポリメラーゼには結合サイトに向かって複数のリジンがー列に並んでおり、このリジンのプラス電荷が「バケツリレー」のように薬剤や ATP を結合サイトに運んでいることも発見した。今回の発見により RNA ポリメラーゼによる効率的なリガンド認識の仕組みを解明した。この成果は NHK ニュースでも取り上げられた。(2020 年 8 月 31 日 NHK ニュース「スパコンで新型コロナ研究報告」)。
- d) 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、 $A\beta$ ペプチドとは異なり、2 次構造を形成せずに分子間 β シートを形成することが多いことを発見した。またその理由も明らかにした。

B-1) 学術論文

- M. YAMAUCHI and H. OKUMURA**, “Dimerization of α -Synuclein Fragments Studied by Isothermal-Isobaric Replica-Permutation Molecular Dynamics Simulation,” *J. Chem. Inf. Model.* **61**, 1307–1321 (2021). DOI: 10.1021/acs.jcim.0c01056
- T. H. D. NGUYEN, S. G. ITOH, H. OKUMURA and M. TOMINAGA**, “Structural Basis for Promiscuous Action of Monoterpenes on TRP Channels,” *Commun. Biol.* **4**, 293 (12 pages) (2021). DOI: 10.1038/s42003-021-01776-0
- K. UCHIDA, T. KITA, M. HATTA, S. G. ITOH, H. OKUMURA, M. TOMINAGA and J. YAMAZAKI**, “Involvement of Pore Helix in Voltage-Dependent Inactivation of TRPM5 Channel,” *Heliyon* **7**, e06102 (10 pages) (2021). DOI: 10.1016/j.heliyon.2021.e06102
- L. LE NGUYEN NGOC, S. G. ITOH, P. SOMPORNPIST and H. OKUMURA**, “Replica-Permutation Molecular Dynamics Simulations of an Amyloid- β (16–22) Peptide and Polyphenols,” *Chem. Phys. Lett.* **758**, 137913 (7 pages) (2020). DOI: 10.1016/j.cplett.2020.137913
- T. MIZUKAMI, S. FURUZAWA, S. G. ITOH, S. SEGAWA, T. IKURA, K. IHARA, H. OKUMURA, H. RODER and K. MAKI**, “Energetics and Kinetics of Substrate Analog-Coupled Staphylococcal Nuclease Folding Revealed by a Statistical Mechanical Approach,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **117**, 19953–19962 (2020). DOI: 10.1073/pnas.1914349117
- H. OKUMURA and S. G. ITOH**, “Molecular Dynamics Simulations of Amyloid- β (16-22) Peptide Aggregation at Air-Water Interfaces,” *J. Chem. Phys.* **151**, 095101 (12 pages) (2020). DOI: 10.1063/1.5131848
- S. TANIMOTO, K. TAMURA, S. HAYASHI, N. YOSHIDA and H. NAKANO**, “A Computational Method to Simulate Global Conformational Changes of Proteins Induced by Cosolvent,” *J. Comput. Chem.* **42**, 552 (12 pages) (2021). DOI: 10.1002/jcc.26481
- J. KAMMARABUTR, P. MAHALAPBUTR, H. OKUMURA, P. WOLSCHANN and T. RUNGROTMONGKOL**, “Structural Dynamics and Susceptibility of Anti-HIV Drugs against HBV Reverse Transcriptase,” *J. Biomol. Struct. Dyn.* **39**, 2502–2511 (2021). DOI: 10.1080/07391102.2020.1751715

B-3) 総説, 著書

S. G. ITOH and H. OKUMURA, “Promotion and Inhibition of Amyloid- β Peptide Aggregation: Molecular Dynamics Studies,” *Int. J. Mol. Sci.* **22**, 1859 (14 pages) (2021). DOI: 10.3390/ijms22041859

谷本勝一, 「液体の積分方程式理論による溶媒が生体分子の機能と構造に及ぼす影響の理論的研究」, アンサンブル **23**, 49–54 (2021).

奥村久士, 「アミロイド β (16–22) ペプチドの凝集と凝集阻害剤の分子動力学シミュレーション」, シミュレーション **40**, 16–21 (2021).

B-4) 招待講演

H. OKUMURA, “Role of water molecules in disruption of protein aggregates observed by non-equilibrium molecular dynamics simulations,” International Symposium “Frontier of structures and dynamics of water by advanced spectroscopic techniques,” The Annual meeting of the Spectroscopical Society of Japan, online, October 2020.

奥村久士, 「分子動力学シミュレーションで見る COVID-19 ウイルスの RNA ポリメラーゼとその阻害薬」, HPCI オープンセミナー 「スーパーコンピュータと COVID-19」, オンライン開催, 2021 年 1 月.

奥村久士, 「アルツハイマー病原因物質の分子動力学シミュレーション」, 金沢大学大学院自然科学研究科公開講演会, 金沢, 2020 年 12 月.

奥村久士, 「各種統計アンサンブルの生成法」, 第 14 回分子シミュレーションスクール, オンライン開催, 2020 年 9 月.

奥村久士, 「COVID-19 ウイルスの RNA ポリメラーゼと阻害薬候補の分子動力学シミュレーション」, 新型コロナウイルス感染症対応 HPCI 臨時研究課題記者勉強会, オンライン開催, 2020 年 8 月.

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–).

分子シミュレーション研究会幹事 (2011–2014, 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, 2020).

日本蛋白質科学会年会若手奨励賞審査委員 (2016–).

日本生物物理学会学生発表賞審査委員 (2020).

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スーパーコンピュータ共同利用委員会委員 (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, 「生体分子シミュレーション入門」, 2020 年 12 月.

金沢大学大学院自然科学研究科, 「分子動力学シミュレーション」, 2020 年 12 月.

名古屋市立大学大学院薬学研究科, 客員准教授, 2019 年 4 月–.

B-9) 学位授与

山内仁喬,「拡張アンサンブルアルゴリズムの開発と応用研究:蛋白質の安定性と凝集」,2021年3月,博士(理学).

C) 研究活動の課題と展望

- a) アルツハイマー病以外にもタンパク質凝集体が引き起こす病気が知られており,それらのタンパク質凝集体に赤外自由電子レーザーを照射し治療に役立てようとする試みがある。そこで次にハンチントン病などのポリグルタミン病の原因であるポリグルタミン鎖に対してレーザー照射する非平衡分子動力学シミュレーションを行う。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。
- b) れまでにA β (16-22)ペプチド1本とポリフェノールの全原子レプリカ置換分子動力学シミュレーションを行ったが,今後は複数本のA β (16-22)ペプチドとポリフェノールのシミュレーションを行う。このシミュレーションを通じて実際にポリフェノールが凝集を阻害するメカニズムを解明する。
- c) 全長のA β ペプチド(40および42残基)を32本水溶液中に配置した巨大系の分子動力学シミュレーションを行っている。これはA β ペプチドに関する世界最大のシミュレーションである。このシミュレーションを通じて,単量体 \rightarrow 二量体 \rightarrow 三量体 \rightarrow 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である。そこで α シヌクレインのN末領域が細胞膜に結合する過程を分子動力学シミュレーションで解明する。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も明らかにする。

岡崎圭一(特任准教授(若手独立フェロー))(2016年6月1日~2020年11月30日)
(准教授)(2020年12月1日着任)

MAHMOOD, Md. Iqbal (特任研究員)
JAUNET-LAHARY, Titouan (特任研究員)
千葉 史朱香 (事務支援員)

A-1) 専門領域：理論生物物理学

A-2) 研究課題：

- a) 分子モーターの1方向性運動モデル推定手法開発とキチナーゼへの応用
- b) トランスポーター Na^+/H^+ antiporter のイオン輸送メカニズムの解明
- c) 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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子モーターは、生体内でATP加水分解エネルギーなどの化学エネルギーを消費して、1方向性の運動をするタンパク質である。その作動原理を解明するため、分子モーターの運動を直接観察する実験手法である1分子観察が用いられてきた。しかし、化学エネルギーの消費、つまり化学状態の変化、がどのようにして分子モーターの1方向性の運動を生み出しているのかについては、まだよく分かっていない。我々は、分子モーターの運動を、化学状態に応じて切り替わる自由エネルギープロファイル上の拡散運動であると考え、通常1分子観察では観測されない化学状態を「隠れた」状態として隠れマルコフモデルによってモデル化した。そして、ベイズ推定の枠組みで、化学状態依存的自由エネルギープロファイル、拡散係数、状態間遷移速度定数を推定する手法を開発した。この手法を、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キチナーゼに応用した。その結果、キチナーゼは、まず、比較的低い自由エネルギー障壁を超えてブラウン運動することで糖鎖を触媒サイトに引き込み、糖鎖の加水分解反応と生成物解離により自由エネルギープロファイルが切り替わることで、1方向性運動を実現していることが分かった。
- b) 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、イオン結合サイトの交互アクセスの際の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。膨大なシミュレーションデータから詳細なメカニズムを調べるために、マルコフ状態モデルによる解析を行った。その結果、安定状態・中間状態を同定して、その間の遷移の時定数を明らかにした。
- c) 細胞膜は、多種多様なタンパク質と相互作用して、ダイナミックに変形する。例えば、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。このような細胞膜変形に関わるタンパク質の一つが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。従来の粗視化分子モデルでは、タンパク質構造を保持させるために弾性体ネットワークモデルを用いるが、このモデルでは大きな構造変化が記述できない。そこで、我々は、タンパク質折り畳みでよく用いられる郷モデルに置き換えることで、大きな構造揺らぎを再現するGö-MARTINIモデルの開発を行った。

B-1) 学術論文

J. WARNAU, D. WÖHLERT, K. OKAZAKI, Ö. YILDIZ, A. P. GAMIZ-HERNANDEZ, V. R. I. KAILA, W. KÜHLBRANDT and G. HUMMER, “Ion Binding and Selectivity of the Na⁺/H⁺ Antiporter MjNhaP1 from Experiment and Simulation,” *J. Phys. Chem. B* **124**, 336–344 (2020). DOI: 10.1021/acs.jpccb.9b08552

K. OKAZAKI, A. NAKAMURA and R. IINO, “Chemical-State-Dependent Free Energy Profile from Single-Molecule Trajectories of Biomolecular Motors: Application to Processive Chitinase,” *J. Phys. Chem. B* **124**, 6475–6487 (2020). DOI: 10.1021/acs.jpccb.0c02698

Y. MORI, K. OKAZAKI, T. MORI, K. KIM and N. MATUBAYASI, “Learning Reaction Coordinates via Cross-Entropy Minimization: Application to Alanine Dipeptide,” *J. Chem. Phys.* **153**, 054115 (8 pages) (2020). DOI: 10.1063/5.0009066

M. I. MAHMOOD, A. B. POMA and K. OKAZAKI, “Optimizing Gō-MARTINI Coarse-Grained Model for F-BAR Protein on Lipid Membrane,” *Front. Mol. Biosci.* **8**, 619381 (10 pages) (2021). DOI: 10.3389/fmolb.2021.619381

B-3) 総説, 著書

岡崎圭一, 「分子シミュレーションによる Na⁺/H⁺ 交換輸送体のメカニズム解明と輸送速度を上げる改変」, *生物物理* **60(2)**, 102–104 (2020). DOI: 10.2142/biophys.60.102

B-4) 招待講演

K. OKAZAKI, “Curvature induction and sensing of the F-BAR protein Pacsin1 on lipid membranes via molecular dynamics simulations,” 第58回日本生物物理学会年会, オンライン開催, 2020年9月.

岡崎圭一, 「分子モーターの1方向性運動モデルの新規推定法の開発——キチナーゼへの応用」, 第10回分子モーター討論会, オンライン開催, 2020年11月.

K. OKAZAKI, “Mechanism of Na⁺/H⁺ antiporter from transition path sampling and engineering of a faster transporter,” *Frontiers of Computational Physics from meV to MeV*, 金沢大学(オンライン開催とハイブリット), 2020年12月.

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学会幹事(分子シミュレーションスクール担当) (2021).

分子シミュレーションスクール世話人 (2016–2020).

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 (2021).

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).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト, 「全身性代謝制御機構解明のための *in vivo* 微量必須栄養素イメージング法の開発」(代表者: 中島健一郎), 岡崎圭一(研究分担者) (2018年–2020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。本年はこれまで、分子モーターの1方向性運動モデル推定手法開発、遷移パスサンプリングから反応座標を決める手法開発、さらに、Gō-MARTINIというタンパク質による細胞膜変形を記述する粗視化モデル改良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、トランスポーター Na^+/H^+ antiporter によるイオン輸送についての詳細な解析などに取り組んでいるところである。

石田 干城 (助教) (2004年11月1日着任)

川口 律子 (事務支援員)

A-1) 専門領域：理論化学, 計算化学

A-2) 研究課題：

- a) 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
- 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) 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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 生体内中の細胞壁の基本骨格部分を成す高分子セルロースを炭水化物へと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。量子化学計算と分子動力学シミュレーションを用いた研究から, イオン液体中でのセルロースの溶解・分解過程を分子レベルで明らかにした。具体的には, 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。一方, 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*, に掲載された。(*J. Phys. Chem. B* **124**, 3090–3012 (2020)) 現在は, さらにセルロースの分解に適したイオン液体の選定を分子レベルから可能にすることを目標とした研究へと発展させ, 続けている。具体的には, まず実験研究の結果をもとにセルロースの分解に適したイオン液体を選定し, 量子化学計算を用いてイオン液体の力場の設定を行った。続けて, 新たに設定された力場を用いて分子動力学シミュレーションを実行した。計算結果より, 陽・陰イオンの種類が異なると, 高分子セルロース内の疎水性領域と親水性領域でのセルロース鎖間へのイオン分子の侵入過程にも違いが生じることが分かった。さらにこの違いがイオン分子のセルロース鎖の溶解・分解過程にも影響を及ぼしていることが明らかになった。また, 現在はさらにセルロースの溶解・分解過程に対する温度効果についてシミュレーションによる研究を進めているところである。
- b) 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た研究を計画し, 進めている。具体的には, イオン液体中の構造解析から出発して研究を進めている。まず, 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。計算結果より, 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, このことが構造不均一性の原因を解く鍵となる可能性があ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が, 室温においても現れる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) これまでに提案・改良を行ってきた溶質分子の電子状態の時間依存変化を記述する時間依存形式の解析方法を色素分子中の光励起による電子移動反応の研究に応用した。この研究により, 励起状態での超高速電子移動反応と溶媒和過程に関してフェムト秒オーダーでの解析が可能になった。今年度は光励起によって引き起こされる電子移動と

エネルギー移動についてベタイン色素の問題へと適用し、溶媒効果の研究へと発展させた。現在、研究成果をまとめ、学術論文として投稿準備中である。

B-1) 学術論文

T. ISHIDA, “Theoretical Investigation of Dissolution and Decomposition Mechanisms of a Cellulose Fiber in Ionic Liquids,”
J. Phys. Chem. B **124**, 3090–3102 (2020). DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b11527

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~2021年3月31日)*)

千葉 史朱香(事務支援員)

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) 有機太陽電池における界面配向と電荷移動状態の相関の解析
- c) 非フラーレン系アクセプター太陽電池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) 有機半導体の電子物性の予測は合理的な材料開発のために必要不可欠である。本年度は、本グループで開発を行ってきた大規模電子状態計算手法を非局在化した励起状態に計算できるように拡張した。具体的には、GW/Bethe-Salpeter equation (BSE) 法, フラグメント分子軌道 (FMO) 法, 励起子モデルを組み合わせることにより、分子集合体の非局在化した励起状態を効率的に計算できる手法の開発に成功した。
- b) 電子ドナー/電子アクセプター界面の電子状態は界面のモルフォロジーや分子配向に依存するため、界面構造を適切に制御することが電荷分離の高効率化に必要である。そこで、本研究では face-on 配向と edge-on 配向のペンタセン/C₆₀ 界面を作成し電子状態計算を行うことにより、界面で形成される電子状態 (CT) 計算と界面配向の相関を解析し、特に電荷分離に関与する lowest CT 状態と光吸収に寄与する bright CT 状態に着目した。face-on 配向では、lowest CT 状態と bright CT 状態の両方が局在化している。一方、edge-on 配向では lowest CT 状態は局在化しているが、bright CT 状態が非局在化している。本研究により、電荷の非局在化を生かした太陽電池を設計するためには、界面分子を edge-on 配向に制御することが重要であることがわかった。
- c) 近年、フラーレン以外の分子を電子アクセプターに用いる試みが進められており、エネルギー変換効率が上昇を続けている。エネルギー変換効率が大きくなるのは、電荷再結合に伴うエネルギーロスを抑えつつ、電荷分離が効率的に起きるためである。しかし、なぜ非フラーレン系で効率的な電荷分離と電荷再結合の抑制が両立できるかはわかっていない。そこで、ペンタセン/C₆₀ とペンタセン/C8-PTCDI に対して電子状態計算を行い比較することにより、非フラーレン系太陽電池に特有の性質を解明した。本グループで開発した手法により解析を行った結果、ペンタセン/C8-PTCDI 系では光吸収により形成される励起電子より非局在化しているため、励起子束縛エネルギーと再配置エネルギーが減少することを明らかにした。これらはそれぞれ、電荷分離の効率化と電荷再結合の抑制に関与しており、非フラーレン太陽電池特有の性質であるといえる。

B-1) 学術論文

T. FUJITA, Y. NOGUCHI and T. HOSHI, "Revisiting the Charge-Transfer States at Pentacene/C₆₀ Interfaces with the GW/Bethe-Salpeter Equation Approach," *Materials* **13**, 2728 (15 pages) (2020). DOI: 10.3390/ma13122728

B-3) 総説, 著書

T. FUJITA, “First-Principles Investigations of Electronically Excited States in Organic Semiconductors,” in *Organic Solar Cells*, Springer; Singapore, pp. 155–193 (2021). DOI: 10.1007/978-981-15-9113-6_7

T. FUJITA and T. HOSHI, “FMO-Based Investigations of Excited-State Dynamics in Molecular Aggregates,” in *Recent Advances of the Fragment Molecular Orbital Method*, Springer; Singapore, pp. 547–566 (2021). DOI: 10.1007/978-981-15-9235-5_27

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 (2020–).

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 (2016–2021).

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).

C) 研究活動の課題と展望

今後の研究計画として, (i) 第一原理計算をベースとしたデバイス特性予測手法の開発と, (ii) FMO法とデータ科学的手法の連携を遂行していく。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。(i)では, 我々が開発を行ってきたFMO法と量子ダイナミクス法を組み合わせ手法に分子接合理論の考え方を取り入れることにより, FMO法から電流–電圧曲線などを予測できる手法を開発する。(ii)では, フラグメント間の様々な記述子に対してデータ科学的手法を用いて解析することにより, 分子集合体の構造に関する特徴量と光電子物性の特徴量との相関関係を抽出できる手法を開発する。

*) 2021年4月1日量子科学技術研究開発機構主幹研究員

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)

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)

溝口 道栄 (大学院生)

CHEW, Yeelai (大学院生)

TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh (大学院生)

川本 美奈子 (事務支援員)

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) バルク固体の極限コヒーレント制御
- g) 超高速量子シミュレータの開発
- h) 超高速量子コンピュータの開発

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次元位相メモリの可能性を実証することに成功した。
- d) 量子メモリ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 (~50 ナノケルビン) まで冷やした極低温のルビジウム原子をマイクロレベルで整列させた人工原子結晶にアト秒精度のコヒーレント制御法を適用することによって、3万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唯一・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。
- h) 上記の人工原子結晶とアト秒精度のコヒーレント制御法を組み合わせた世界唯一・最速の「超高速量子コンピュータ」の開発を進めている。

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,” *Phys. Rev. Lett.* **124**, 253201 (7 pages) (2020).

B-4) 招待講演

K. OHMORI, “Ultrafast and ultracold quantum simulator with attosecond precision,” EU FET Project COPAC Symposium “Parallel Computing Quantum Devices,” Online, March 2021.

大森賢治, 「アト秒精度の超高速量子シミュレータ開発と量子コンピュータへの応用」, 応用物理学会 春季学術講演会 シンポジウム「量子コンピュータの現状と展望」, オンライン開催, 2021年3月.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulator with attosecond precision at ultracold temperatures,” Optics Seminars OIST, Online, December 2020.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulator with attosecond precision at ultracold temperatures,” Fundamental Sciences and Quantum Technologies using Atomic Systems (FSQT 2020), Online, September 2020.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulator with attosecond precision at ultracold temperatures,” India-Japan Webinar on Quantum Technologies, Organized by the Embassy of India and by the Governments of India and Japan, Online, July 2020.

B-5) 特許出願

取得特許 US 10,824,114 B2, 「QUANTUM SIMULATOR AND QUANTUM SIMULATION METHOD」, 酒井寛人 (浜松ホトニクス), 大森賢治 (自然科学研究機構), 安藤太郎 (浜松ホトニクス), 武井宣幸 (自然科学研究機構), 豊田晴義, 大竹良幸, 兵土知子, 瀧口優 (浜松ホトニクス), (登録日 2020 年 11 月 3 日).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

原子・分子・光科学 (AMO) 討論会プログラム委員 (2003–).

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

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–).

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

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

International Symposium on Advanced Photonics “Next frontiers to be explored by advanced light source facilities” 組織委員 (2020).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

内閣官房イノベーション推進室イノベーション政策強化推進のための有識者会議委員 (2019).

文部科学省 科学技術・学術審議会 専門委員 (2015–).

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–).

科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 (CREST) 研究領域「量子状態の高度な制御に基づく革新的量子技術基盤の創出」(研究総括: 荒川泰彦) 中間評価委員 (2020–2021).

学会誌編集委員

Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, IOP, Editorial Board (2018–) and Section Editor for Quantum Technologies (2019–).

その他

上記「B-1) 学術論文」に記載した大森グループ・超高速量子シミュレータ・量子コンピュータ・ラボの最新の研究成果(2020年6月22日出版)「金属状の量子気体：全く新しい量子シミュレーション・プラットフォーム」(*Phys. Rev. Lett.* **124**, 253201 (2020))が、UC Boulder (米国コロラド大学ボルダー校)とNIST (米国国立標準技術研究所)の量子技術関連ホームページ「CUBit Quantum Initiative」や中日新聞・朝刊・社会面を始め、国内新聞各紙15件、および日米欧を中心とする世界中のニュースメディア42件の主要記事として大きく報道された。これによって、全世界的な分子研の知名度向上と研究力アピールに貢献。

ノーベル物理学賞発表(2020年10月6日)に先立ち、大森が日本テレビ放送網株式会社・報道局社会部より自然科学研究機構本部を通じ受賞候補者として取材を受け、写真・研究発表資料等を提出。並びに発表当日の大森の動静確認と受賞時の記者会見・映像取材のため記者の分子研待機の申し込み。

ノーベル物理学賞発表(2020年10月6日)に先立ち、大森がNHK本部(東京)や共同通信社よりノーベル物理学賞に関する取材を受ける。

大森賢治インタビュー記事：“今さら聞けない「そもそも量子力学って？」にトップ研究者が答えた！”(2020年8月18日)が「Yahoo! ニュース」「講談社・現代ビジネス」で大きく報道され、大森グループ・超高速量子シミュレータ・量子コンピュータ・ラボの研究内容が全国の一般市民へ周知されることによって分子研の研究力アピールに貢献。Yahoo! ニュースではアクセスランキングの上位にランクされる。

文部科学省 科学技術学術政策局 研究開発基盤課 量子研究推進室からの要請で、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータ開発状況を室長始め量子研究推進室メンバーにレクチャー(2020年9月2日)することによって日本政府への分子研の研究力アピールに貢献。

文部科学省 研究振興局 基礎研究振興課長の分子研訪問(2020年9月4日)に際して大森グループ・超高速量子シミュレータ・量子コンピュータ・ラボの視察に対応することによって日本政府への分子研の研究力アピールに貢献。

文部科学大臣政務官の分子研訪問(2020年7月2日)に際して大森グループ・超高速量子シミュレータ・量子コンピュータ・ラボの視察に対応することによって日本政府への分子研の研究力アピールに貢献。

内閣府 量子技術イノベーション戦略 最終報告(2020年1月)にロードマップ検討グループメンバー等として貢献するとともに、分子研・大森グループの超高速量子シミュレータが主要技術領域・重点課題としてハイライトされることによって分子研の国際的な認知度の向上に貢献。

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-)として議長会議(2020年1月9日、シンガポール)に出席し、分子研の国際的な認知度の向上に貢献。

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。

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がけ研究(受託研究),「極低温ドレスト原子集団の超精密制御による非可換トポロジカル量子現象の探索」, 素川靖司 (2016年–2020年).

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 原子・分子ベースの量子情報科学の開拓: アト秒精度の超高速コヒーレント制御技術によって, 原子・分子内の電子・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確立を目指す。さらに, 単一原子・分子の操作・読み出し技術の開発を進める。
- ④ 超高速量子シミュレータの開発: ほぼ絶対零度 (~50 ナノケルビン) まで冷やした極低温のルビジウム原子をミクロンレベルで整列させた人工原子結晶とアト秒精度の超高速コヒーレント制御技術を組み合わせた世界唯一・最速の「超高速量子シミュレータ」のさらなる高機能化を目指す。
- ⑤ 超高速量子コンピュータの開発: 極低温のルビジウム原子をミクロンレベルで整列させた人工原子結晶とアト秒精度の超高速コヒーレント制御技術を組み合わせた世界唯一・最速の「超高速量子コンピュータ」の開発を進める。

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)

長谷川 友里 (特任研究員 (IMS フェロー))

山田 一斗 (特任研究員)

YANG, Jinpeng (研究員)

萩原 久代 (事務支援員)

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) 配向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
- c) 有機半導体薄膜の電荷輸送機構の研究
- d) 有機半導体薄膜の界面電子単位接合機構の研究
- 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。UVSOR では BL7U における低エネルギー励起光を用いた界面電子状態評価を推進しつつ、BL6U における光電子運動量顕微鏡の開発と分子系への最適化を模索している。
- b) 高配向分子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、有機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きた。その後、高配向試料では広波数空間二次元分解測定が分子軌道の可視化に対応することが指摘され、新たな量子計測ツールになりうると期待されている。前述の放射光を利用した光電子運動量顕微鏡による高効率計測が強力である。特に単層膜界面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定量化し、局在電子系における一電子近似の限界を吟味しつつ、弱相互作用系の物理現象を議論するための新たな方法論の構築を目指している。
- c) 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する技術を確立した。分子間相互作用の大きさ、ホール有効質量、バンド伝導移動度を評価した。有機単結晶ヘテロ界面や温度依存測定による準粒子評価などより詳細な物性議論へ向けた発展的計測を進めている。有機無機混合ペロブスカイト系にこの技術を応用し、バンド分散関係の測定に成功した。

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。

- d) 本質的には絶縁物である有機分子が n 型 / p 型半導体として機能する起源を明らかにすべく研究を進めている。極めて高感度に光電子を捕捉し、評価可能な光電子分光装置を開発し、バンドギャップに生じる 10ppm レベルの状態密度検出に成功した。価電子帯トップバンドの状態密度分布がガウス型から指数関数型に変化し、基板フェルミ準位まで到達している様子をとらえた。ドナー・アクセプター半導体分子間の弱い vdW 結合から、分子と金属原子の局所的な強い化学結合によるギャップ準位形成までを統括検討し、エネルギー準位接合機構の解明を目指している。数値解析による定量評価を実施した。
- 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、局所構造と電子状態の相関研究を開始した。
- g) 有機分子薄膜や低次元物質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 (SPALED), 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

R. TAKEUCHI, S. IZAWA, Y. HASEGAWA, R. TSURUTA, T. YAMAGUCHI, M. MEISSNER, S. IDETA, K. TANAKA, S. KERA, M. HIRAMOTO and Y. NAKAYAMA, “Experimental Observation of Anisotropic of Valence Band Dispersion in the Dinaphtho[2,3-b:2',3'-f]thieno[3,2-b]thiophene (DNTT) Single Crystal,” *J. Phys. Chem. C* **125**, 2938–2943 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c09239

Y. LIU, S. TANG, J. FAN, E. GRACIA-ESPINO, J. YANG, X. LIU, S. KERA, M. FAHLMAN, C. LARSEN, T. WÅGGERBERG, L. EDMAN and J. WANG, “High-Solubility Perovskite Quantum Dots for Solution-Processed Light-Emission Devices,” *ACS Appl. Nano Mater.* **4**(2), 1162–1174 (2021). DOI: 10.1021/acsanm.0c02797

J. YANG, M. MEISSNER, T. YAMAGUCHI, B. XI, K. TAKAHASHI, S. ABDULLAH, X. LIU, H. YOSHIDA, M. FAHLMAN and S. KERA, “Temperature-Dependent Band Structure Evolution Determined by Surface Geometry in Organic Halide Perovskite Single Crystals,” *Phys. Rev. B* **102**, 245101 (6 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevB.102.245101

F. MATSUI, S. MAKITA, H. MATSUDA, T. YANO, E. NAKAMURA, K. TANAKA, S. SUGA and S. KERA, “Photoelectron Momentum Microscope at BL6U of UVSOR-III Synchrotron,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **59**, 067001 (9 pages) (2020). DOI: 10.35848/1347-4065/ab9184

T. KIRCHHUEBEL, S. KERA, T. MUNAKATA, N. UENO, R. SHIRAIISHI, T. YAMAGUCHI, K. YONEZAWA, T. UEBA, F. BUSSOLOTTI, J. YANG, T. YAMADA, R. MORI, S. KUNIEDA, T. HÜMPFNER, M. GRUENEWALD, R. FORKER and T. FRITZ, “The Role of Initial and Final States in Molecular Spectroscopies—the Example of Tetraphenyldibenzoperiflanthene (DBP) on Graphite,” *J. Phys. Chem. C* **124**, 19622–19638 (2020). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c05448

F. MATSUI, S. MAKITA, H. MATSUDA, T. UEBA, T. HORIGOME, H. YAMANE, K. TANAKA, S. KERA and N. KOSUGI, “Bulk and Surface Band Dispersion Mapping of the Au(111) Surface by Acceptance-Cone Tunable PES System,” *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **18**, 18–23 (2020). DOI: 10.1380/ejsnt.2020.18

G. D'AVINO, S. DUHM, R. DELLA VALLE, G. HEIMEL, M. OEHZELT, S. KERA, N. UENO, D. BELJONNE and I. SALZMANN, “Electrostatic Interactions Shape Molecular Organization and Electronic Structure of Organic Semiconductor Blends,” *Chem. Mater.* **32**, 1261–1271 (2020). DOI: 10.1021/acs.chemmater.9b04763

J. YANG, S.-X. REN, T. YAMAGUCHI, M. MEISSNER, L. CHENG, L. ZHOU, S. IDETA, K. TANAKA and S. KERA, “Valence Band Dispersion Measured in the Surface Normal Direction of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ Single Crystals,” *Appl. Phys. Express* **13**, 011009 (4 pages) (2020). DOI: 10.7567/1882-0786/ab6134

B-3) 総説, 著書

Y. NAKAYAMA, S. KERA and N. UENO, “Photoelectron Spectroscopy on Single Crystals of Organic Semiconductors: Experimental Electronic Band Structure for Optoelectronic Properties,” *J. Mater. Chem. C* **8**, 9090–9132 (2020). [review] DOI: 10.1039/D0TC00891

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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–).

日本放射光学会評議員 (2020–).

学会の組織委員等

第 33 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム 組織委員会委員 (2020).

The 10th Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (ASOMEA-X), International Committee (Tokyo, Japan 2020).

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軌道放射物性研究施設運営委員会委員 (2018–).

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 機関代表者 (2019–).

学会誌編集委員

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Editorial Board (2015–).

B-8) 大学での講義, 客員

東北大学大学院理学研究科, 委嘱教授, 「強相関電子物理学特論」, 2020 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–.

蘇州大学, 客員教授, 2014 年 4 月–.

B-10) 競争的資金

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、分子集合体における「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。2020年度は, マンパワー不足にCOVID-19問題が加わり実験活動が停滞した。試料作製条件の探査等の地道な予備実験の重要性を再認識した。次年度より着任する助教と共に研究アクティビティを再始動する。一方, UVSOR 施設長として国内コミュニティの基盤強化を推進するための利用支援に注力している。2020年2月に放射光利用実験の新規軸として, 光電子運動量顕微鏡装置を導入した。主任研究員である松井らを中心に装置開発を進めている。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た発展的な計画としており, 2021年度に逐次機能追加による装置更新作業を進め多彩な計測機能をもつ複合システムの完成を目指す。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および国際共同研究加速基金(B)によって, 装置開発とその利用展開についての国際共同研究を推進する。解良グループの寄与としては分子系のオールジャパン体制(実験班, 理論班)を構築し, 戦略的に上記装置を利用した新奇実験を牽引する。国内外で類似の新型装置の導入が計画されているため, 短期間にUVSOR 施設の地位を確立し, 優位性を確かなものにする必要がある。長期計画として次世代研究施設 UVSOR-IV(仮)計画の具体化作業を開始した。今後は国内外施設およびコミュニティの情報収集に注力する。

長坂 将成 (助教) (2007年4月1日着任)

萩原 久代 (事務支援員)

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線吸収分光法の開発
- c) 軟X線吸収分光法による光化学系 II タンパク質の構造解析
- d) 溶液光化学反応の超高速軟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) 1 keV 以下の軟X線領域には炭素, 窒素, 酸素の K 吸収端や遷移金属の 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。我々は 20 ~ 2000 nm の範囲で液体層を精密に厚さ制御する手法を独自に開発することで, 液体の軟X線吸収分光 (XAS) 測定を実現した。更に, XAS スペクトルのエネルギーシフトの高精度測定と量子化学に基づく内殻励起計算から, 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。これにより, 異なる濃度のアセトニトリル水溶液の局所構造を, 溶質 (C, N-K) と溶媒 (O-K) の寄与を分離して観測して, 水とアセトニトリルの双極子相互作用により, 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, B の K 吸収端や Si, P, S, Cl の L 吸収端が存在するため, 化学研究において重要である。しかしながら, 低エネルギー領域では, 目的の一次回折光 (160 eV 等) の透過率が高次回折光 (320 eV, 480 eV 等) と比較して極端に小さく, 一次回折光の強度変化が高次回折光の寄与に埋もれてしまうため, XAS 測定は不可能であった。我々はアルゴンガスを用いると, Ar-L 吸収端 (240 eV) により効率良く高次回折光を除去して, 60 ~ 240 eV の範囲で一次回折光の透過吸収スペクトルを測定できることを見出した。これは, 「水の窓領域」に次ぐ, 新たな軟X線透過窓である。また, 一次回折光と高次回折光の光エネルギー差に着目して, 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, 一次回折光の強度だけを計量する新しいタイプの軟X線検出器を開発した。
- c) 光化学系 II (PSII) タンパク質の酸素発生中心 Mn_4CaO_5 クラスターの局所構造解析を目指して, Mn-L, Ca-L, O-K 吸収端 XAS 測定を行った。液体層を構成する Si_3N_4 膜に PSII タンパク質包含脂質二重膜を調製することで, PSII が光活性を維持した状態で Si_3N_4 膜への担持に成功した。これにより, 光活性を維持した状態の PSII の Mn_4CaO_5 クラスターの構造を, 主要な元素を網羅して明らかにできる。
- d) 放射光から発生する 70 ps の時間幅の軟X線パルスと 100 fs スケールの可視・紫外光レーザーの同期による, 溶液光化学反応の超高速 XAS 測定手法の開発を行った。今後は, 開発した手法を用いて, 鉄錯体溶液の紫外光励起過程の超高速 XAS 測定を行うことで, 金属-配位子間電子遷移における, 中心金属 (Fe-L) と配位子 (C, N-K) の両方の局所電子状態変化の解明を目指している。

B-1) 学術論文

M. NAGASAKA, H. YUZAWA and N. KOSUGI, “Microheterogeneity in Aqueous Acetonitrile Solution Probed by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. B* **124**, 1259–1265 (2020). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c00551

M. NAGASAKA, “Soft X-Ray Absorption Spectroscopy in the Low-Energy Region Explored Using an Argon Gas Window,” *J. Synchrotron Radiat.* **27**, 959–962 (2020). DOI: 10.1107/S1600577520005883

M. NAGASAKA and H. IWAYAMA, “Photoelectron Based Soft X-Ray Detector for Removing High Order X Rays,” *Rev. Sci. Instrum.* **91**, 083103 (7 pages) (2020). DOI: 10.1063/5.0011302

T. TSUKAMOTO, A. KUZUME, M. NAGASAKA, T. KAMBE and K. YAMAMOTO, “Quantum Materials Exploration by Sequential Screening Technique of Heteroatomicity,” *J. Am. Chem. Soc.* **142**, 19078–19084 (2020). DOI: 10.1021/jacs.0c06653

S. TSUNEKAWA, F. YAMAMOTO, K.-H. WANG, M. NAGASAKA, H. YUZAWA, S. TAKAKUSAGI, H. KONDOH, K. ASAKURA, T. KAWAI and M. YOSHIDA, “Operando Observations of a Manganese Oxide Electrocatalyst for Water Oxidation Using Hard/Tender/Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. C* **124**, 23611–23618 (2020). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c05571

H. IWAYAMA, M. NAGASAKA, I. INOUE, S. OWADA, M. YABASHI and J. R. HARRIES, “Demonstration of Transmission Mode Soft X-Ray NEXAFS Using Third- and Fifth-Order Harmonics of FEL Radiation at SACLA BL1,” *Appl. Sci.* **10**, 7852 (7 pages) (2020). DOI: 10.3390/app10217852

G. MICHALOUDI, J. J. LIN, H. YUZAWA, M. NAGASAKA, M. HUTTULA, N. KOSUGI, T. KURTÉN, M. PATANEN and N. L. PRISLE, “Aqueous-Phase Behavior of Glyoxal and Methylglyoxal Observed with Carbon and Oxygen K-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy,” *Atmos. Chem. Phys.* **21**, 2881–2894 (2021). DOI: 10.5194/acp-21-2881-2021

H. WANG, M. HE, Y. LI, H. ZHANG, D. YANG, M. NAGASAKA, Z. LV, Z. GUAN, Y. CAO, F. GONG, Z. ZHOU, J. ZHU, S. SAMANTA, A. D. CHOWDHURY and A. LEI, “Electrochemical Oxidation Enables Regioselective and Scalable α -C(sp³)-H Acyloxylation of Sulfides,” *J. Am. Chem. Soc.* **143**, 3628–3637 (2021). DOI: 10.1021/jacs.1c00288

B-3) 総説, 著書

M. NAGASAKA, H. YUZAWA and N. KOSUGI, “Soft X-Ray Absorption Spectroscopy of Liquids for Understanding Chemical Processes in Solution,” *Anal. Sci.* **36**, 95–105 (2020). DOI: 10.2116/analsci.19R005

長坂将成, 小杉信博, 「精密厚さ制御による液体の軟X線透過吸収分光測定」, *日本物理学会誌* **75**, 496–503 (2020).

B-4) 招待講演

M. NAGASAKA, “Molecular Interactions in Liquids Probed by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy in Transmission Mode,” Conference on Laser and Synchrotron Radiation Combination Experiment 2020 (LSC 2020), OPTICS & PHOTONICS International Congress 2020, Online, April 2020.

長坂将成, 「放射光を活用した溶液の軟X線吸収分光法の開発と応用」, 茨城大学 令和2年度第1回量子線科学セミナー, オンライン開催, 2020年7月.

長坂将成, 「液体の軟X線吸収分光法のバイオ研究への展望」, 電気学会 光・量子デバイス研究会「医療・バイオ研究に有効なインターフェースと量子ビーム応用の未来」, オンライン開催, 2020年12月.

長坂将成,「軟X線吸収分光法による溶液の化学現象の解明」,第34回日本放射光学会年会,オンライン開催,2021年1月.

B-6) 受賞,表彰

M. NAGASAKA, H. YUZAWA and N. KOSUGI, *Analytical Sciences* Hot Article Award (2020).

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).

B-10) 競争的資金

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).

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 (2019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).

公益財団法人ソルト・サイエンス研究財団一般公募研究助成,「軟X線吸収分光法による塩水溶液の水和構造の元素選択的観測」,長坂将成 (2020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 (2020年).

科研費挑戦的研究(萌芽),「生体膜へのイオン配位状態の分子レベルでの理解:水中X線吸収分光」(代表:手老龍吾),長坂将成(研究分担者) (2020年–2021年).

自然科学研究機構分野融合型共同研究事業,「マイクロ波による化学反応加速機構の解明」,(代表:高谷 光),長坂将成(研究分担者) (2020年–2021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（特任教授）（2019年4月1日着任）
（クロスアポイントメント；広島大学放射光科学センター）

藤本 将輝（助教）
木村 信之介（特別共同利用研究員）
小杉 直（特別共同利用研究員）
中尾 海斗（特別共同利用研究員）
堀 遥輝（特別共同利用研究員）
稲垣 いつ子（事務支援員）
石原 麻由美（事務支援員）

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。UVSOR の将来計画に関する設計研究に着手し，既存加速器の更なる高度化の可能性，新しい光源加速器の検討を進めている。
- 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。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。
- c) 高エネルギー電子ビームによる光渦の生成に成功し，その原理の解明に世界に先駆けて成功した。自然界での光渦の生成の可能性について，研究を進めると共に，深紫外・真空紫外領域での物質系と光渦の相互作用に関する基礎研究を進めている。
- d) 外部レーザーと高エネルギー電子線を用いた逆コンプトン散乱によるエネルギー可変，偏光可変の極短ガンマ線パルス発生に関する研究を継続している。パルス幅数ピコ秒以下の超短ガンマ線パルスの生成，エネルギー可変性の実証に成功した。光陰極を用いた電子源の開発を進めている。また，これら偏極量子ビームの応用研究の開拓を進めている。

- e) アンジュレータ放射光波束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, H. YAMAGUCHI, M. YAMAMOTO, F. MATSUI, G. WANG, F. LIU, P. YANG, E. R. BATISTA, N. A. MOODY, Y. TAKASHIMA and M. KATOH, “Graphene as Reusable Substrate for Bialkali Photocathodes,” *Appl. Phys. Lett.* **116**, 251903 (5 pages) (2020). DOI: 10.1063/5.0010816

K. FUJIMORI, M. KITaura, Y. TAIRA, M. FUJIMOTO, H. ZEN, S. WATANABE, K. KAMADA, Y. OKANO, M. KATOH, M. HOSAKA, J. YAMAZAKI, T. HIRADE, Y. KOBAYASHI and A. OHNISHI, “Visualizing Cation Vacancies in Ce:Gd₃Al₂Ga₃O₁₂ Scintillators by Gamma-Ray-Induced Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy,” *Appl. Phys. Express* **13**, 085505 (4 pages) (2020). DOI: 10.35848/1882-0786/aba0dd

K. ALI, H. OHGAKI, H. ZEN, T. KII, T. HAYAKAWA, T. SHIZUMA, H. TOYOKAWA, Y. TAIRA, V. IANCU, G. TURTURICA, C. ALEXANDRU UR, M. FUJIMOTO and M. KATOH, “Selective Isotope CT Imaging Based on Nuclear Resonance Fluorescence Transmission Method,” *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **67**, 1976–1984 (2020). DOI: 10.1109/tns.2020.3004565

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA and M. KATOH, “Polarization Control in a Crossed Undulator without a Monochromator,” *New J. Phys.* **22**, 083062 (8 pages) (2020). DOI: 10.1088/1367-2630/aba730

Y. TAIRA, M. FUJIMOTO, S. RI, M. HOSAKA and M. KATOH, “Measurement of the Phase Structure of Elliptically Polarized Undulator Radiation,” *New J. Phys.* **22**, 093061 (12 pages) (2020). DOI: 10.1088/1367-2630/abb54a

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA and M. KATOH, “Electron Wave Packet Interference in Atomic Inner-Shell Excitation,” *Phys. Rev. Lett.* **126**, 113202 (6 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevLett.126.113202

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, 2020–).

日本放射光学会評議員 (2006–2009, 2010–2012, 2013–2015, 2016–2018, 2019–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

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–).

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(A), 「放射光の位相構造制御法の開発」, 加藤政博 (2020年–2022年).

科研費基盤研究(A), 「直線偏光ガンマ線のデルブリュック散乱」(代表: 早川岳人), 加藤政博 (研究分担者) (2018年–2020年).

科研費基盤研究(B),「LCS-NRFによる同位体3Dイメージング法の基盤確立」(代表:大垣英明),加藤政博(研究分担者)(2018年-2020年).

C) 研究活動の課題と展望

UVSORは2000年以降の継続的な高度化により,低エネルギーのシンクロトロン光源としては世界的にも最高レベルの性能に到達したが,国内外では新しい光源の建設稼働が相次ぎ,更なる競争力の向上が求められている。現在の加速器の更なる高度化の可能性を探るとともに,全く新しい加速器の建設についても検討を進める。

自由電子レーザー及び外部レーザーを用いたコンプトン散乱ガンマ線の発生とその利用法の開拓に取り組んできたが,材料評価などへの応用は実用段階に入りつつある。今後は,特異な性質を持つガンマ線発生法の開拓に重心を移す。

放射光による光渦の生成については,その光学的特性の詳細評価,さらに放射光光渦同士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ができた。今後は応用展開の開拓に重心を移す。また,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について先駆的な成果が出ており,こちらもさらに幅広く応用展開の可能性を探る。

電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）

平 義 隆（准教授）（2020年4月1日着任）

SALEHI, Elham（特任研究員）

神山 和輝（特別共同利用研究員）

山本 涼平（特別共同利用研究員）

稲垣 いつ子（事務支援員）

石原 麻由美（事務支援員）

A-1) 専門領域：ガンマ線計測，陽電子計測，光渦計測

A-2) 研究課題：

- a) 超短パルスガンマ線の発生と利用研究
- b) 短波長光渦の発生と計測技術開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 世界の放射光施設でも UVSOR の独自技術であるのは、超短パルスガンマ線を用いた陽電子計測によるバルク材料のナノメートル欠陥分析に関する研究である。フェムト秒レーザーと 750MeV 電子ビームの 90 度衝突逆トムソン散乱によって、超短パルスガンマ線を発生し、そのパルス幅は 5 ps と計算される。この超短パルス性とバックグラウンドの低さを活かしたガンマ線の利用研究として、陽電子計測による材料中の欠陥分析を行っている。陽電子は、対生成と呼ばれる現象によって材料内部でガンマ線から発生し、材料中の欠陥に捕獲される。欠陥の大きさによって陽電子の寿命が変化するために、陽電子寿命を測定することで材料中の欠陥を非破壊で分析することができる。さらに、ガンマ線は物質に対する透過率が高いため厚さ数 cm のバルク材料の欠陥分析を行うことが可能である。本分析技術は、現在 UVSOR の施設利用として利用可能である。ユーザー利用の研究成果が徐々に始まっており、ユーザー執筆の論文が今年 1 報 *Applied Physics Express* に掲載された。
- b) 本研究課題では、らせん波面を形成するエネルギー sub-MeV 以上のガンマ線渦を世界に先駆けて開発し、素粒子や原子核、物性研究への応用開拓を行うことを最終目標としている。このガンマ線は、位相構造がらせんであるために軌道角運動量（Orbital angular momentum: OAM）を運ぶということに大きな特徴がある。ガンマ線渦の発生には、平らが初めて見出した電子ビームと高強度円偏光レーザーの非線形逆トムソン散乱法を用いる。2019 年度から関西光科学研究所において高強度レーザーと 150MeV マイクロトロン電子加速器を用いた実験を行っている。今年度も引き続き実験を行う予定であり、光渦の特徴である空間分布が円環になることを測定することを目標としている。一方で、UVSOR の円偏光アンジュレータを用いて発生できる紫外光領域の光渦の計測技術開発も行っている。アンジュレータから発生する光渦に関しては世界の他の施設でも行われており、円偏光モードでの計測だけが行われていた。平らの計算により、楕円偏光モードでも位相構造をもつ光渦が発生することが新たに分かり、UVSOR で実証実験を行った。光渦を 2 重スリットに通したときの干渉縞をサンプリングモアレ法によって位相解析することで光渦の位相構造を測定し、計算との比較を行った。この結果に関して論文が *New Journal of Physics* に掲載された。

B-1) 学術論文

K. FUJIMORI, M. KITaura, Y. TAIRA, M. FUJIMOTO, H. ZEN, S. WATANABE, K. KAMADA, Y. OKANO, M. KATOH, M. HOSAKA, J. YAMAZAKI, T. HIRADE, Y. KOBAYASHI and A. OHNISHI, “Visualizing Cation Vacancies in Ce:Gd₃Al₂Ga₃O₁₂ Scintillators by Gamma-Ray Induced Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy,” *Appl. Phys. Express* **13**, 085505 (4 pages) (2020). doi: 10.35848/1882-0786/aba0dd

Y. TAIRA, M. FUJIMOTO, S. RI, M. HOSAKA and M. KATOH, “Measurement of the Phase Structure of Elliptically Polarized Undulator Radiation,” *New J. Phys.* **22**, 093061 (12 pages) (2020). doi: 10.1088/1367-2630/abb54a

B-4) 招待講演

平 義隆, 「アンジュレータを用いた光渦の発生」, 研究会「光の軌道角運動量の発生機構と物質相互作用の理解」, 2021年3月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会 ビーム物理領域運営委員 (2020–2021).

ビーム物理研究会 若手の会 幹事 (2020–).

ビーム物理研究会 若手の会 オブザーバー (2019–2020).

学会の組織委員等

日本加速器学会第 18 回年会組織委員 (2020–2021).

日本加速器学会第 18 回年会プログラム委員 (2021).

学会誌編集委員

日本放射光学会誌「放射光」編集委員 (2019–2021).

B-8) 大学での講義, 客員

理化学研究所, 客員研究員, 2018年9月–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B) (一般), 「非線形逆コンプトン散乱による軌道角運動量を運ぶ光子の生成」, 平 義隆 (2018年–2021年).

科研費基盤研究(A), 「放射光の位相構造制御法の開発」 (代表: 加藤政博), 平 義隆 (研究分担者) (2020年–2022年).

C) 研究活動の課題と展望

超短パルスガンマ線の利用研究に関しては, 現状ガンマ線の強度が低い点が課題である。来年度初めに新しいレーザーチャンバーをUVSOR 電子蓄積リングに導入し, ガンマ線の強度を 20 倍以上向上する予定である。また, 陽電子計測に関しては, 現在寿命のみの測定が可能であるが, 寿命運動量相関測定やスピン偏極陽電子の発生と計測技術開発を行い, 分析技術の拡充を図る。計算上は数ピコ秒のガンマ線が発生していると考えられるが, 超短パルスガンマ線のパルス幅計測手法の開発も行う。光渦に関しては, ガンマ線の波面計測の技術を開発し, ガンマ線渦が実験的に発生していることを実証する。

松 井 文 彦（主任研究員）（2018 年 4 月 1 日着任）

松田 博之（特任研究員）
稲垣 いつ子（事務支援員）
石原 麻由美（事務支援員）

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を突破口とした UVSOR の高度化
- b) 運動量分解光電子分光に関する新規現象を基盤とした測定手法確立
- c) 新奇表面電子物性・化学特性の応用展開

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) 拠点構築を主務とする。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装する MM の導入を実現し、論文発表・プレスリリースを通じて成果を発信した。②並行して全天球エネルギー・スピン分析器を考案し特許出願した。上記の MM は 3 \AA^{-1} までの波数空間の一括測定ができるため価電子帯研究で有効な運動エネルギー 36 eV 以下の領域では全天球をカバーすることができるが、原子配列を研究するのに有効な運動エネルギー 500 eV 以上の領域ではせいぜい 15° の領域でしかない。新規分析器は 2 keV でも全天球の放出光電子を取り込むことができ、後段のスピン偏向器でスピンの3次元ベクトル解析ができるようになる。①は high-end 型価電子帯光電子分光装置、②は内殻光電子ホログラフィー測定装置である。両者を融合させ、スピン3次元ベクトル解析を実・逆空間で自在にマッピングできる唯一無二の装置を構築する礎となる。
- 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。③分子科学で重要となる CNO 吸収端の光を用い、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。特に、吸収端にてグラファイトの π バンドが選択的に励起される様子を波数空間上で可視化したが、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グラフェンから π 共役系分子への展開に歩を進め、お家芸としての共鳴光電子回折法を確立しつつある。④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である。
- c) 光電子回折・分光を用いて典型的な高温超伝導体 Bi2212 や代表的騒擾物質 TiSe₂ の相転移前後の電子状態をとらえた。劈開試料表面の局所部分の精密分析の成功は今後の共同研究を呼び込む重要な成果である。共同研究先から Ir 単結晶薄膜の電子状態評価の依頼を受け、バンド分散の測定に成功した。この薄膜は新しいスピン2次元フィルターとして有望な材料であり、上記で述べたスピン3次元ベクトル解析への応用展開につながるものである。

B-1) 学術論文

F. MATSUI, S. MAKITA, H. MATSUDA, T. YANO, E. NAKAMURA, K. TANAKA, S. SUGA and S. KERA, “Photoelectron Momentum Microscope at BL6U of UVSOR-III Synchrotron,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **59**, 067001 (9 pages) (2020). doi: 10.35848/1347-4065/ab9184

H. MATSUDA and F. MATSUI, “90°-Deflection Imaging Electron Analyzer for Measuring Wide 2D Angular Distribution and Perpendicular Spin Texture,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **245**, 147001 (11 pages) (2020). doi: 10.1016/j.elspec.2020.147001

H. MATSUDA and F. MATSUI, “Principle and Basic Design of Omnidirectional Photoelectron Acceptance Lens,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **59**, 046503 (11 pages) (2020). doi: 10.35848/1347-4065/ab7bac

T. MATSUSHITA T. MURO, T. YOKOYA, K. TERASHIMA, Y. KATO, H. MATSUI, N. MAEJIMA, Y. HASHIMOTO and F. MATSUI, “Theory for High-Angular-Resolution Photoelectron Holograms Considering the Inelastic Mean Free Path and the Formation Mechanism of Quasi-Kikuchi Band,” *Phys. Status Solidi B* **257**, 2000117 (5 pages) (2020). doi: 10.1002/pssb.202000117

T. MATSUSHITA, T. MURO, F. MATSUI, N. HAPPO and K. HAYASHI, “Data Processing for Atomic Resolution Holography,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **59**, 020502 (10 pages) (2020). doi: 10.7567/1347-4065/ab4b3a

I. I. OGORODNIKOV, M. V. KUZNETSOV, F. MATSUI, D. Y. USACHOV and L. V. YASHINA, “Enhanced Surface Sensitivity of X-Ray Photoelectron Holography through the Example of Bi₂Te₃(111) Surface,” *Appl. Surf. Sci.* **505**, 144531 (6 pages) (2020). doi: 10.1016/j.apsusc.2019.144531

L. GUO, H. YAMAGUCHI, M. YAMAMOTO, F. MATSUI, G. WANG, F. LIU, P. YANG, E. R. BATISTA, N. A. MOODY, Y. TAKASHIMA and M. KATOH, “Graphene as Reusable Substrate for Bialkali Photocathodes,” *Appl. Phys. Lett.* **116**, 251903 (5 pages) (2020). doi: 10.1063/5.0010816

F. MATSUI, S. MAKITA, H. MATSUDA, T. UEBA, T. HORIGOME, H. YAMANE, K. TANAKA, S. KERA and N. KOSUGI, “Bulk and Surface Band Dispersion Mapping of the Au(111) Surface by Acceptance-Cone Tunable PES System,” *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **18**, 18–23 (2020). doi: 10.1380/ejsnt.2020.18

B-3) 総説, 著書

松井文彦, 松下智裕, 大門寛, 「光電子分光詳論」, 丸善出版株式会社; 東京, pp. 1–298 (2020). ISBN 978-4-621-30537-9

B-4) 招待講演

松井文彦, 「光電子を用いた2次元層状物質の原子レベル解析」, 日本学術振興会マイクロビームアナリシス第141委員会研究会, Nagoya (Japan), February 2020.

B-5) 特許出願

F. MATSUI and H. MATSUDA, “Electrostatic Lens, and Parallel Beam Generation Device and Parallel Beam Convergence Device which use Electrostatic Lens and Collimator,” US 10614992, 2020.04.07 patented.

PCT/JP2020/047288, 「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), 2020年.

特願 2020-118687, 「静電偏向収束型エネルギー分析器, 結像型電子分光装置, 反射結像型電子分光装置, およびスピントル分布イメージング装置」, 松田博之, 松井文彦(自然科学研究機構), 2020年.

B-6) 受賞, 表彰

松井文彦, 永井科学技術財団永井奨励賞 (2021).

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, プログラム委員 (2018-2020).

14th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation (SRI2021), Scientific Program Committee (2020-2021).

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 R026 先端計測技術の将来設計委員会運営委員 (2019-).

学会誌編集委員

日本表面真空学会出版委員 (2013-).

その他

出前授業「超伝導って何? 最先端研究施設から出前実験」岡崎市立岩津中学校 (2020).

出前授業「超伝導って何? 最先端研究施設から出前実験」岡崎市立福岡中学校 (2020).

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)

稲垣 いつ子 (事務支援員)

石原 麻由美 (事務支援員)

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) 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, FZP) の開発により, リチウム K 吸収端 (~55 eV) の高分解能吸収分光を可能とした。この際にビームラインの高次光強度を定量的に測定する手法の開発を行い, 含有高次光強度を測定したところ, 0.1%以下まで除去されていることがわかった。これに伴って, FZP の回折限界である空間分可能 72 nm を達成した。
- b) 昨年度まで開発を行ってきた大気非曝露試料搬送システムを用いて, 100% 充電状態のリチウムイオン電池の, 大気曝露下での劣化条件のプロセスの解明を行った。

B-1) 学術論文

T. OHIGASHI, H. YUZAWA and N. KOSUGI, “A Low-Pass Filtering Fresnel Zone Plate for Soft X-Ray Microscopic Analysis down to the Lithium K-Edge Region,” *Rev. Sci. Instrum.* **91**, 103110 (5 pages) (2020). DOI: 10.1063/5.0020956

Y. HIGAKI, K. KAMITANI, T. OHIGASHI, T. HAYAKAWA and A. TAKAHARA, “Exploring the Mesoscopic Morphology in Mussel Adhesive Proteins by Soft X-Ray Spectromicroscopy,” *Macromolecules* **22**, 1256–1260 (2021). DOI: acs.biomac.0c01746

M. UESUGI, K. HIRAHARA, K. UESUGI, A. TAKEUCHI, Y. KAROUJI, N. SHIRAI, M. ITO, N. TOMIOKA, T. OHIGASHI, A. YAMAGUCHI, T. YADA and M. ABE, “Development of a Sample Holder for Synchrotron Radiation-Based Computed Tomography and Diffraction Analysis of Extraterrestrial Materials,” *Rev. Sci. Instrum.* **91**, 035107 (8 pages) (2020). DOI: 10.1063/1.5122672

Y. R. LU, Y. F. WANG, Y. C. HUANG, J. L. CHEN, C. L. CHEN, Y. C. LIN, Y. G. LIN, W. F. PONG, T. OHIGASHI, N. KOSUGI, C. H. KUO, W. C. CHOW and C. L. DONG, “Effect of Fe₂Co₃ Coating on ZnO Nanowires in Photoelectrochemical Water Splitting: A Synchrotron X-Ray Spectroscopic and Spectromicroscopic Investigation,” *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **209**, 110469 (7 pages) (2020). DOI: j.solmat.2020.110469

T. MANSIKKALA, M. PATANEN, A. KARKONEN, R. KORPINEN, A. PRANOVICH, T. OHIGASHI, S. SWARAJI, J. SEITOSONEN, J. RUOKOLAINEN, M. HUTTULA, P. SARANPAA and R. PIISPANEN, “Lignans in Knotwood of Norway Spruce: Localisation with Soft X-Ray Microscopy and Scanning Transmission Electron Microscopy with Energy Dispersive X-Ray Spectroscopy,” *Molecules* **25**, 2997 (22 pages) (2020). DOI: molecules25132997

M. ITO, N. TOMIOKA, K. UESUGI, M. UESUGI, Y. KODAMA, I. SAKURAI, I. OKADA, T. OHIGASHI, H. YUZAWA, A. YAMAGUCHI, N. IMAE, Y. KAROUJI, N. SHIRAI, T. YADA and M. ABE, "The Universal Sample Holders of Microanalytical Instruments of FIB, TEM, NanoSIMS, and STXM-NEXAFS for the Coordinate Analysis of Extraterrestrial Materials," *Earth, Planets Space* **72**, 133 (11 pages) (2020). DOI: s40623-020-01267-2

B-3) 総説, 著書

大東琢治,「有機物顕微分析の最先端——ドラッグデリバリーからはやぶさ2まで——」, 第29回日本有病者歯科医療特別号, 10-12 (2020).

B-4) 招待講演

大東琢治,「はやぶさ2の帰還, そして分析へ」, 神戸常磐大学第4回サイエンスカフェ, オンライン開催, 2021年3月.

大東琢治,「有機物顕微分析の最先端——ドラッグデリバリーからはやぶさ2まで——」, 第29回日本有病者歯科医療学会総会, 神戸国際会議場, 神戸, 2020年2月.

大東琢治,「有機物顕微分析法の宇宙科学への展開」, 第30回自然科学研究機構シンポジウム「宇宙科学と生命科学の深〜いつながり」, オンライン開催, 2020年9月.

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).

第27回日本放射光学会年会シンポジウム組織委員会 (2013), 座長 (2013, 2018, 2020).

応用物理学会シンポジウム「軟X線イメージングの描く未来」座長 (2021).

学会誌編集委員

Synchrotron Radiation News, Editor (2017-).

その他

第4回KITサイエンスカフェ「はやぶさ2の帰還, そして分析へ」講師 (2021).

出前授業「軟X線顕微鏡による有機物分析の最先端〜ドラッグデリバリーからはやぶさ, そしていかにして働かずにご飯を食べるようになったか」岡崎北高校 (2020).

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, 2011年8月-.

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-2021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）

出田 真一郎（助教）
細谷 知輝（特別共同利用研究員）
古田 貫志（特別共同利用研究員）
松永 和也（特別共同利用研究員）
山本 凌（特別共同利用研究員）
稲垣 いつ子（事務支援員）
石原 麻由美（事務支援員）

A-1) 専門領域：物性物理学，放射光科学

A-2) 研究課題：

- a) 高温超伝導体の電子状態の解明
- b) 新規スピン分解角度分解光電子分光装置の開発
- c) 角度分解光電子分光における低温技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) UVSOR BL7U, BL5Uにおいて、銅酸化物高温超伝導体 Bi2212 の角度分解光電子分光測定を行った。超伝導転移温度の上下でのスペクトルを比較することで、超伝導によるスペクトラルウェイト変化の運動量空間依存性とホール濃度依存を導出することに成功した。これまで長い間有効とされてきたフェルミアーク描像を否定する結果が得られており、高温超伝導が超伝導ギャップよりも超流動密度に強く影響を受けていることを示唆している。現在論文にまとめている。
- b) UVSOR BL5Uは高分解能角ビームラインとしてユーザー利用を開始している。同時に高効率スピン分解角度分解光電子分光測定の開発も進めている。2020年度はコロナ渦による UVSOR のビームタイムのキャンセルが多かったが、この時間を利用してスピン分解 ARPES の開発が大きく進み、Au(111) 表面バンドのラッシュバ分裂をスピン分解してイメージスペクトルを取得することに成功した。運動量空間分解能や検出効率なども既存システムを大きく上回ることも確認できた。ただし、測定時には頻繁にスピントラゲットの磁化操作をする必要があり、このままではユーザー利用を開始できない。そこで、2021年度にスピンの向きをあらゆる方向に変更できるスピンマニピュレータを導入し、問題の解決を図る予定である。
- 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, 7U用に開発した冷却可能な5軸6軸マニピュレータは、これまで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。最近、新たにソフトウェアによる熱伝導解析を導入した。新たな改良案に基づいて、現在さらなる低温化を目指して開発を進めている。

B-1) 学術論文

C. LIN, T. ADACHI, M. HORIO, T. OHGI, M. A. BAQIYA, T. KAWAMATA, H. SATO, T. SUMURA, K. KOSHIISHI, S. NAKATA, G. SHIBARA, K. HAGIWARA, M. SUZUKI, K. ONO, K. HORIBA, H. KUMIGASHIRA, S. IDETA, K. TANAKA, Y. KOIKE and A. FUJIMORI, "Extended Superconducting Dome Revealed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy of Electron-Doped Cuprates Prepared by the Protect Annealing Method," *Phys. Rev. Res.* **3**, 013180 (8 pages) (2021).

K. NAKAYAMA, R. TSUBONO, G. N. PHAN, F. NABESHIMA, N. SHIKAMA, T. ISHIKAWA, Y. SAKISHITA, S. IDETA, K. TANAKA, A. MAEDA, T. TAKAHASHI and T. SATO, "Orbital Mixing at the Onset of High-Temperature Superconductivity in $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x/\text{CaF}_2$," *Phys. Rev. Res.* **3**, L012007 (6 pages) (2021).

R. TAKEUCHI, S. IZAWA, Y. HASEGAWA, R. TSURUTA, T. YAMAGUCHI, M. MEISSNER, S. IDETA, K. TANAKA, S. KERA, M. HIRAMOTO and Y. NAKAYAMA, "Experimental Observation of Anisotropic Valence Band Dispersion in Dinaphtho[2,3-b:2',3'-f]thieno[3,2-b]thiophene (DNFTT) Single Crystals," *J. Phys. Chem. C* **125**, 2938–2943 (2021).

K. KURODA, Y. ARAI, N. REZAEI, S. KUNISADA, S. SAKURAGI, M. ALAEI, Y. KINOSHITA, C. BAREILLE, R. NOGUCHI, M. NAKAYAMA, S. AKEBI, M. SAKANO, K. KAWAGUCHI, M. ARITA, S. IDETA, K. TANAKA, H. KITAZAWA, K. OKAZAKI, M. TOKUNAGA, Y. HAGA, S. SHIN, H. S. SUZUKI, R. ARITA and T. KONDO, "Devil's Staircase Transition of the Electronic Structures in CeSb," *Nat. Commun.* **11**, 2888 (9 pages) (2020).

D. PINEK, T. ITO, K. FURUTA, Y. KIM, M. IKEMOTO, S. IDETA, K. TANAKA, M. NAKATAKE, P. L. FEVRE, F. BERTRAN and T. OUISSE, "Near Fermi Level Electronic Structure of Ti_3SiC_2 Revealed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy," *Phys. Rev. B* **102**, 075111 (11 pages) (2020).

H. ANZAI, K. MORIKAWA, H. SHIONO, H. SATO, S. IDETA, K. TANAKA, T. ZHUANG, K. T. MATSUMOTO and K. HIRAOKA, "Temperature Dependence of the Kondo Resonance in the Photoemission Spectra of the Heavy-Fermion Compounds YbXCu_4 ($X = \text{Mg}, \text{Cd}, \text{and Sn}$)," *Phys. Rev. B* **101**, 235160 (7 pages) (2020).

F. MATSUI, S. MAKITA, H. MATSUDA, T. YANO, E. NAKAMURA, K. TANAKA, S. SUGA and S. KERA, "Photoelectron Momentum Microscope at BL6U of UVSOR-III Synchrotron," *Jpn. J. Appl. Phys.* **59**, 067001 (9 pages) (2020).

J.-P. YANG, S.-X. REN, T. YAMAGUCHI, M. MEISSNER, L.-W. CHENG, L. ZHOU, S. IDETA, K. TANAKA and S. KERA, "Valence Band Dispersion Measured in the Surface Normal Direction of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ Single Crystals," *Appl. Phys. Express* **13**, 011009 (4 pages) (2020).

B-4) 招待講演

田中清尚, 「UVSOR における軌道分解測定とスピン分解光電子分光, 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, 2020年6月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

WIRMS2021組織委員 (2020).

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 (2016-) (出田真一郎)

C) 研究活動の課題と展望

2020年度はコロナ渦による UVSOR のビームタイムのキャンセルが多かったが、この時間を利用してスピン分解 ARPES の開発が大きく進み、目標としていたイメージでのスピン分解スペクトルの取得に成功した。また運動量空間分解能や検出効率なども既存システムを大きく上回ることも確認できた。ただし、測定時には頻繁にスピントラゲットの磁化操作をする必要があり、このままではユーザー利用を開始できない。そこで、2021年度にスピンの向きをあらゆる方向に変更できるスピンマニピュレータを導入し、問題の解決を図る予定である。できるだけ早いユーザー利用の開始を目指す。

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）

稲垣 いつ子（事務支援員）

石原 麻由美（事務支援員）

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) 液晶相物質の軟X線共鳴散乱法の開発
- b) X線自由電子レーザーを用いた溶液光学反応のフェムト秒実時間観測手法の開発

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。特にスメクチック相を示す液晶分子はメゾスコピック領域である数 nm ～ 100 nm 程度の空間スケールで分子配向に構造を持っており，その構造を明らかにすることが液晶相物質の誘電率などの物性を理解する上で重要である。このようなメゾスコピック領域の構造測定としX線小角散乱が考えられるが，非共鳴におけるX線散乱は電子密度の変調に敏感であるが，分子配向の変化に対しては感度が弱い。一方共鳴散乱は内殻電子の遷移先の非占有軌道と入射光偏光ベクトルとの角度に強く依存し，分子配向に敏感な散乱である。そのため，共鳴散乱は，メゾスコピック領域の分子配向構造を調べる上で極めて有用であるが，液晶分子は主に軽元素の炭素，酸素，窒素原子で構成されており，そのK殻吸収端は軟X線領域であるため，軟X線を用いる必要がある。本年度は，軟X線共鳴散乱法を実現すべく，装置開発を行った。装置の立ち上げでは，共同研究者らと共にキラルスメクチック液晶を用いて，数 nm から 10nm の周期構造に由来する回折像の観測に成功し，本軟X線共鳴散乱法が液晶におけるメゾスコピック領域の構造を明らかにするうえで有用な測定方法であることを示した。
- b) X線自由電子レーザー SACLA BL1 を利用した液体試料用のポンプ・プローブ法による時間分解・透過型軟X線吸収分光器の開発を提案し，2020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。本年度は，溶液試料を用いた透過型軟X線吸収分光を実現すべく，20 から 2000 nm の範囲で液体試料厚を調整可能な液体セルを開発し，SACLA BL1 にて水および酢酸溶液の軟X線吸収スペクトルを計測した。今後，同期光学レーザーと組み合わせることで，ポンプ・プローブ法による時間分解軟X線吸収スペクトルを実現し，溶液の光化学反応を明らかにする。

B-1) 学術論文

H. IWAYAMA, M. NAGASAKA, I. INOUE, S. OWADA, M. YABASHI and J. R. HARRIES, "Demonstration of Transmission Mode Soft X-Ray NEXAFS Using Third- and Fifth-Order Harmonics of FEL Radiation at SACLA BL1," *Appl. Sci.* **10**, 7852 (7 pages) (2020).

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA and M. KATOH, “Polarization Control in a Crossed Undulator without a Monochromator,” *New J. Phys.* **22**, 083062 (8 pages) (2020).

M. NAGASAKA and H. IWAYAMA, “Photoelectron Based Soft X-Ray Detector for Removing High Order X Rays,” *Rev. Sci. Instrum.* **91**, 083103 (7 pages) (2020).

A. FERTE, J. PALAUDOUX, F. PENENT, H. IWAYAMA, E. SHIGEMASA, Y. HIKOSAKA, K. SOEJIMA, K. ITO, P. LABLANQUIE, R. TAIEB and S. CARNIATO, “Advanced Computation Method for Double Core Hole Spectra: Insight into the Nature of Intense Shake-up Satellites,” *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 4359 (11 pages) (2020).

Y. HIKOSAKA, H. IWAYAMA and T. KANEYASU, “Zeeman Quantum Beats of Helium Rydberg States Excited by Synchrotron Radiation,” *J. Synchrotron Radiat.* **27**, 675 (6 pages) (2020).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

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, 2018–2020).

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)

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)

石川 あずさ (事務支援員)

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* 測定を行っている。2020 年前半には、兼ねてから開発を続けていた繰返し型時刻記録法に基づいた時間分解雰囲気制御型硬X線光電子分光法を論文として発表した。また、PEFC Pt 合金電極の硫黄被毒の影響について取り組み成果が上がった。2019 年度で NEDO 事業が終了し、より一般的な触媒等について対象を拡げる計画である。
- 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。2020 年前半は、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 解析と局所電子状態・幾何構造解析に関する研究も継続的に進めており、2020 年前半に中国との国際共同研究と国内民間企業との共同研究を実施した。

B-1) 学術論文

S. KITOU, T. MANJO, N. KATAYAMA, T. SHISHIDOU, T. ARIMA, Y. TAGUCHI, Y. TOKURA, T. NAKAMURA, T. YOKOYAMA, K. SUGIMOTO and H. SAWA, "Collapse of the Simple Localized $3d_1$ Orbital Picture in Mott Insulator," *Phys. Rev. Res.* **2**, 033503 (8 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.2.0335032020

T. NAKAMURA, Y. TAKAGI, S. CHAVEANGHONG, T. URUGA, M. TADA, Y. IWASAWA and T. YOKOYAMA, "Quick Operando Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy for Reaction Kinetic Measurements of Polymer Electrolyte Fuel Cells," *J. Phys. Chem. C* **124**, 17520–17527 (2020). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c04871

- K. KAWAGUCHI, T. MIYAMACHI, T. IIMORI, Y. TAKAHASHI, T. HATTORI, T. YOKOYAMA, M. KOTSUGI and F. KOMORI**, “Realizing Large Out-of-Plane Magnetic Anisotropy in L10-FeNi Films Grown by Nitrogen-Surfactant Epitaxy on Cu(001),” *Phys. Rev. Mater.* **4**, 054403 (7 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.4.054403
- Y. SONG, Q. SUN, T. YOKOYAMA, H. ZHU, Q. LI, R. HUANG, Y. REN, Q. HUANG, X. XING and J. CHEN**, “Transforming Thermal Expansion from Positive to Negative: The Case of Cubic Magnetic Compounds of (Zr,Nb)Fe₂,” *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 1954–1961 (2020). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.9b03880
- K. YAMAMOTO, S. E. MOUSSAOUI, Y. HIRATA, S. YAMAMOTO, Y. KUBOTA, S. OWADA, M. YABASHI, T. SEKI, K. TAKANASHI, I. MATSUDA and H. WADATI**, “Element-Selectively Tracking Ultrafast Demagnetization Process in Co/Pt Multilayer Thin Films by the Resonant Magneto-Optical Kerr Effect,” *Appl. Phys. Lett.* **116**, 172406 (5 pages) (2020). DOI: 10.1063/5.0005393
- Y. SHIOZAWA, T. KOITAYA, K. MUKAI, S. YOSHIMOTO and J. YOSHINOBU**, “The Roles of Step-Site and Zinc in Surface Chemistry of Formic Acid on Clean and Zn-Modified Cu(111) and Cu(997) Surfaces Studied by HR-XPS, TPD, and IRAS,” *J. Chem. Phys.* **152**, 044703 (12 pages) (2020). DOI: 10.1063/1.5132979
- J. YOSHINOBU, K. MUKAI, H. UEDA, S. YOSHIMOTO, S. SHIMIZU, T. KOITAYA, H. NORITAKE, C.-C. LEE, T. OZAKI, A. FLEURENCE, R. FRIEDLEIN and Y. YAMADA-TAKAMURA**, “Formation of BN-Covered Silicene on ZrB₂/Si(111) by Adsorption of NO and Thermal Processes,” *J. Chem. Phys.* **153**, 064702 (11 pages) (2020). DOI: 10.1063/5.0011175
- T. KOITAYA, A. ISHIKAWA, S. YOSHIMOTO and J. YOSHINOBU**, “C–H Bond Activation of Methane through Electronic Interaction with Pd(110),” *J. Phys. Chem. C* **125**, 1368–1377 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c09537
- Y. ISHII, K. YAMAMOTO, Y. YOKOYAMA, M. MIZUMAKI, H. NAKAO, T. ARIMA and Y. YAMASAKI**, “Soft X-Ray Vortex Beam detected by In-Line Holography,” *Phys. Rev. Appl.* **14**, 064069 (9 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevApplied.14.064069
- S. CHAVEANGHONG, T. NAKAMURA, Y. TAKAGI, B. CAGNON, T. URUGA, M. TADA, Y. IWASAWA and T. YOKOYAMA**, “Sulfur Poisoning Pt and PtCo Anode and Cathode Catalysts in Polymer Electrolyte Fuel Cells Studied by Operando Near Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23**, 3866–3873 (2021). DOI: 10.1039/D0CP06020H
- Y. WAKISAKA, H. UEHARA, Q. YUAN, D. KIDO, T. WADA, M. UO, Y. UEMURA, T. YOKOYAMA, Y. KAMEI, S. KURODA, A. OHIRA, S. TAKAKUSAGI and K. ASAKURA**, “Extracting the Local Electronic States of Pt Polycrystalline Films Surface under Electrochemical Conditions Using Polarization-Dependent Total Reflection Fluorescence X-Ray Absorption Fine Structure Spectroscopy,” *Electron Struct.* **2**, 044003 (2020). DOI: 10.1088/2516-1075/abd1ca

B-3) 総説, 著書

- T. YOKOYAMA and Y. IWASAWA**, “Operando Observation of Sulfur Species that Poison Polymer Electrolyte Fuel Cell Studied by Near Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *SPRING-8 Research Frontiers 2019*, 64–65 (2020).
- T. URUGA, M. TADA, O. SEKIZAWA, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA and Y. IWASAWA**, “Status of Synchrotron Radiation X-Ray-Based Multi-Analytical Beamline BL36XU for Fuel Cell Electrocatalysis Research at SPRING-8,” *Synchrotron Radiation News* **33**, 26–28 (2020).

山本航平,「第40回真空紫外・X線物理国際会議(VUVX2019)報告」,放射光 **32**, 333–335 (2019).

Y. UEMURA, T. YOKOYAMA, T. KATAYAMA, S. NOZAWA and K. ASAKURA, “Tracking the Local Structure Change during the Photoabsorption Processes of Photocatalysts by the Ultrafast Pump-Probe XAFS Method,” *Appl. Sci.* **10**, 7818 (16 pages) (2020). DOI: 10.3390/app10217818

B-4) 招待講演

横山利彦,「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被毒硫黄状態追跡」,第126回触媒討論会「界面分子変換の機構と制御」,オンライン開催,2020年9月.

T. YOKOYAMA, “Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy on Polymer Electrolyte Fuel Cells under Working Conditions,” APXPS2020 (7th Annual Ambient-Pressure X-Ray Photoemission Spectroscopy Workshop 2020), Pohang Accelerator Laboratory, Korea (online), December 2020.

横山利彦,「文科省ナノテクノロジープラットフォームの現状と次期マテリアルDXプラットフォームへの期待」,計算科学研究センター・ナノテクノロジープラットフォーム事業合同ワークショップ——データ科学に基づく理論・計算化学と実験科学の協働を目指して——,分子科学研究所,2021年1月.

K. YAMAMOTO, “Photo-Induced Magnetization Dynamics Observed with Synchrotron Radiation and Free Electron Lasers,” Conference on Laser and Synchrotron Radiation Combination Experiment 2020 (LSC2020), online, March 2020.

小坂谷貴典,「軟X線雰囲気光電子分光を用いた不均一触媒反応のオペランド分光測定」,ISSPワークショップ「次世代放射光へのイノベーション」,東京大学物性研究所,柏,2020年2月.

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).

日本放射光学会評議員(2004–2005, 2008–2010, 2011–2012, 2014–2015, 2018–2019, 2020–2021).

学会の組織委員等

XAFS 討論会プログラム委員(1998–2020).

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).

広島大学放射光科学研究センター運営委員(2018–2019).

広島大学放射光科学研究センター協議会委員(2020–).

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).

本多記念会本多フロンティア賞選考委員(2016, 2019).

公益信託分子科学研究奨励森野基金推薦委員(2018–).

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がけ研究「革新的触媒の科学と創製」領域,「オペランド観測に基づくメタン転換触媒および反応場の設計」,小坂谷貴典(2017年-2021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, 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.

B-11) 産学連携

共同研究, 新報国製鉄(株),「インバー合金特性」,横山利彦(2020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イナミクス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)

櫻井 敦教 (助教)
斎藤 晃 (学振特別研究員)
鶴岡 和幸 (特任研究員)
市井 智章 (特任研究員)
松尾 剛 (特任専門員)
高橋 翔太 (特任専門員)
佐藤 宏祐 (大学院生)
林 伸秋 (大学院生)
横田 光代 (事務支援員)
志村 真希 (事務支援員)

A-1) 専門領域：物理化学, 分光学, 機能物性化学, 表面界面物性科学

A-2) 研究課題：

- a) メタン水蒸気改質光触媒反応における活性キャリアのオペランド赤外分光
- b) 氷の表面における異常に高いプロトン活性の実証
- c) アモルファス氷超薄膜の結晶化メカニズムと特異なサイズ効果の起源解明
- 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と装置構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 天然ガス中に豊富に含まれる資源であるメタンと地球上にあまねく存在する水を用いて太陽光から水素生成を行う光触媒反応は、持続可能な社会の実現に向けて重要な化学技術である。我々は、強度を矩形的に変調した紫外光を照射しながら光触媒反応の活性評価と赤外吸収分光計測を同時に行うことができる独自の装置を構築した。Pt 及び Pd を助触媒として担持させた β - Ga_2O_3 光触媒において、メタンの水蒸気の混合ガス雰囲気下で水素生成反応に直接関与する活性光誘起電子の微弱な赤外分光スペクトル測定に世界初で成功した。 Ga_2O_3 の伝導帯下端より約 0.25 eV 安定化された単位に存在する光誘起電子が水素発生反応の活性種であることを見出した。
- b) 氷表面のプロトンは、氷の電荷輸送、雷雲の帯電、極域成層圏や星間空間における不均一化学反応等に直接関係する重要な化学種である。我々は、軽水 (H_2O) の結晶氷とその同位体である重水 (D_2O) の結晶氷の積層氷に対して氷表面と内部における H/D 交換反応を同時に調べた。その結果、氷最表面層における H/D 交換の速度定数が氷内部層に比べ 3 桁以上も大きいことが明らかになった。プロトンの『移動度』が結晶氷の表面は内部よりも 3 桁程度低かったことから、氷表面層のプロトンの濃度が内部層に比べて 6 桁以上も高くなっていることを定量的に実証することに成功した。
- c) 非晶質物質の結晶化メカニズムは、結晶核の形成のされ方に応じて不均一核生成メカニズムと均一核生成メカニズムに分類される。水分子が非晶質的に固まったアモルファス氷の薄膜において、核生成メカニズムに関する統一的理解が得られていなかった。我々は、Pt(111) をモデル基板としてアモルファス氷の超薄膜を作製し、その厚さを数 nm から数十 nm の範囲で系統的に変化させながら、薄膜表面及び薄膜全体の結晶化過程を系統的に調べた。その結果、結晶化が均一核生成メカニズムで進行している確固たる証拠を突き止めた。さらに、均一核生成により結晶化が進行しているにもかかわらず、結晶化キネティクスや結晶化温度が薄膜の厚さに依存して大きく変調されていく新奇現象を発見した。水

素結合の構造解析を行ったところ、熱力学的に最安定なアモルファス氷（結晶化の一手手前の状態）の水素結合の強さが薄膜の厚さに依存して顕著に変化する特異なサイズ効果があることを見出した。

- 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きた。三端子電極を用いた電気化学エッチングにおいて、形状再現性良く 50nm 程度の先端曲率半径を持つプラズモニックナノ Au 探針を作製することに成功した。超高真空中で Au ナノ探針の先端を先鋭化させるためのスパッタリング装置を立ち上げ、先端曲率半径を 10 nm 以下に加工することにも成功した。STM 装置内部に設置しているレンズ等の光学系の配置を改良することにも取り組み、GaAs(110) からの STM 発光の検出感度を 2 桁程度改善することにも成功した。これまでに立ち上げてきた外部光学系（超短パルスレーザーシステム）を用いた可視・中赤外レーザー光の照射によって極微ラマン分光や極微和周波発生分光を行う準備が整いつつある。

B-1) 学術論文

H. SATO and T. SUGIMOTO, “Operando FT-IR Spectroscopy of Steam-Methane-Reforming Photocatalyst under Irradiation of Intensity Modulated UV Light,” *Vac. Surf. Sci.* **63**, 476–481 (2020). doi: 10.1380/vss.63.476

F. KATO, T. SUGIMOTO and Y. MATSUMOTO, “Direct Experimental Evidence for Markedly Enhanced Surface Proton Activity Inherent to Water Ice,” *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 2524–2529 (2020). doi: 10.1021/acs.jpcclett.0c00384

K. HARADA, T. SUGIMOTO, F. KATO, K. WATANABE and Y. MATSUMOTO, “Thickness Dependent Homogeneous Crystallization of Ultrathin Amorphous Solid Water Films,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 1963–1973 (2020). doi: 10.1039/C9CP05981D

T. SUGIMOTO and Y. MATSUMOTO, “Orientational Ordering in Heteroepitaxial Water Ice on Metal Surfaces,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **29**, 16435–17012 (2020). doi: 10.1039/D0CP01763A

B-3) 総説, 著書

T. SUGIMOTO, “Unique Hydrogen-Bond Structures of Water Molecules at Ice Surface,” *Chemistry and Chemical Industry* **73(6)**, 490 (1 page) (2020). (in Japanese)

T. SUGIMOTO, “Peculiar Hydrogen-Bond Structure, Physical Properties and Function of Interfacial Water Molecules Elucidated by Nonlinear Laser Spectroscopy,” *Mol. Sci.* **14**, A0112 (13 pages) (2020). doi: 10.3175/molsci.14.A0112

B-4) 招待講演

T. SUGIMOTO, “Infrared spectroscopy of water-assisted carrier trapping at TiO₂ photocatalyst surfaces with distinct morphologies,” The 3rd Integrated Research Consortium on Chemical Sciences (IRCCS3) Joint International Symposium, Nagoya University, Nagoya (Japan), January 2020.

杉本敏樹, 「赤外分光法を基軸とした電子・分子分光計測の挑戦～水分解光触媒の高活性化に向けた表面エンジニアリングの学理構築～」, 第5回実用エネルギー材料開発のためのオペランド解析研究会, 名古屋工業大学, 名古屋, 2020年3月.

杉本敏樹, 「固体表面の対称性の破れに誘起される水分子集合体の新奇な水素結合構造物性の開拓」, 日本物理学会第75回年次大会, 若手奨励賞受賞記念講演, 名古屋大学, 名古屋, 2020年3月.

杉本敏樹,「非線形レーザー分子分光で明らかになってきた固体表面上の水分子の特異な水素結合構造と物性・機能」, 分子研研究会, オンライン開催, 2020年12月.

杉本敏樹,「固体表面での水素分子の核スピンドYNAMIXスに見られる磁気・電氣的応答」, 第8回物質階層を横断する会, オンライン開催, 2020年12月.

杉本敏樹,「固体表面における物理吸着小分子種のコヒーレント非線形分光」, 日本物理学会第76回年次大会, オンライン開催, 2021年3月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面真空学会若手部会幹事 (2018-).

分子科学会運営委員 (2020-).

学会の組織委員等

The 9th International Symposium on Surface Science (ISSS-9), Publication committee (2019-2021).

8th Asian Spectroscopy Conference (ASC2021), Organizing committee (2019-2022).

International Workshop on Nonlinear Optics at Interfaces 2022, Conference vice Chair (2019-2022).

その他

分子科学若手の会夏の学校分子科学研究所対応者 (2018-)

B-10) 競争的資金

防衛装備庁安全保障技術研究推進制度(タイプS),「ジャイアント・マイクロフォトンクスによる高出力極限固体レーザー」(代表:平等拓範), 杉本敏樹(研究分担者) (2020年度-2024年度).

科学技術振興機構さきがけ研究,「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).

科研費若手研究,「MHzパルスレーザーを基軸とした近接場和周波発生分光法の開拓」, 櫻井敦教 (2020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がけ研究,「オペランド分光計測に基づくメタンの部分酸化還元光触媒反応場の創製と学理構築」, 杉本敏樹 (2016年度-2019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。

分子機能研究部門

平 本 昌 宏 (教授) (2008 年 4 月 1 日着任)

伊澤 誠一郎 (助教)

谷原 佑輔 (研究員)

宇都 祥子 (研究員)

LEE, Jihyun (大学院生)

PALASSERY ITHIKKAL, Jaseela (大学院生)

中村 由佳 (事務支援員)

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) 水平接合有機太陽電池

b) 10 マイクロメートルの光電変換層を持つ有機太陽電池

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 最近、我々は、電子とホールを基板に対して水平方向に取り出す「水平交互相合」という、有機太陽電池のための新しい接合構造を提案した。今回、高速移動度を示す、C8-BTBT (ホール移動度：43 cm²/Vs) と PTCDI-C8 (電子移動度：1.7 cm²/Vs) を積層した2層セルを作製し、水平接合長さ依存性を評価し、これまでの常識を破る、1.8 cm というマクロな水平接合距離で太陽電池動作させることに成功した。電子とホールの拡散距離は、4.6 と 4.7 mm と決定できた。キャリアトラップが拡散距離を決めており、水平接合セルでは、トラップを介した無輻射再結合によって、約 90% の光電流が失われていることが分かった。これは、トラップとして働く分子欠陥を除去することで、水平接合セルの性能をさらに向上できる可能性を示している。

b) 有機太陽電池においては、ドナー／アクセプターをブレンドした光電変換層の厚さは、電子・ホールのルート形成が難しいために、これまで 100 nm 以下で、太陽光全てを吸収利用できなかった。今回、溶媒分子として働く共蒸発分子を蒸着チャンバーに導入して、ブレンド膜の結晶化相分離を行い、10 マイクロメートルの厚さまで、電子・ホールのルートを形成し、光電変換層としての効率を低下させることなく、太陽光全てを吸収利用することに成功した。有機ブレンド膜が従来考えられていたよりも桁違いに大きい厚さでも光電変換素子に利用できることが実証されたことにより、今後の有機太陽電池や有機発光ダイオードなどの有機光電変換素子の、より自由な設計による発展が期待できる。

B-1) 学術論文

K. FUJIMOTO, S. IZAWA, Y. ARIKAI, S. SUGIMOTO, H. OUE, T. INUZUKA, N. UEMURA, M. SAKAMOTO, M. HIRAMOTO and M. TAKAHASHI, “Regioselective Bay-Functionalization of Perylenes toward Tailor-Made Synthesis of Acceptor Materials for Organic Photovoltaics,” *ChemPlusChem* **85**, 285–293 (2020). DOI: 10.1002/cplu.201900725

M. KATAYAMA, T. KAJI, S. NAKAO and M. HIRAMOTO, “Ultra-Thick Organic Pigment Layer up to 10 μm Activated by Crystallization in Organic Photovoltaic Cells,” *Front. Energy Res., Section Solar Energy* **8**, 1–12 (2019). DOI: 10.3389/fenrg.2020.00004

J.-H. LEE, A. PERROT, M. HIRAMOTO and S. IZAWA, “Photoconversion Mechanism at *pn*-Homojunction Interface in Single Organic Semiconductor,” *Materials* **13**, 1727 (8 pages) (2020). DOI: 10.3390/ma13071727

Y. NAKAYAMA, M. IWASHITA, M. KIKUCHI, R. TSURUTA, K. YOSHIDA, Y. GUNJO, Y. YABARA, T. HOSOKAI, T. KOGANEZAWA, S. IZAWA and M. HIRAMOTO, “Electronic and Crystallographic Examinations of the Homoepitaxially-Grown Rubrene Single Crystals,” *Materials* **13**, 1978 (11 pages) (2020). DOI: 10.3390/ma13081978

Y. YABARA, S. IZAWA and M. HIRAMOTO, “Donor/Acceptor Photovoltaic Cells Fabricated on *p*-Doped Organic Single-Crystal Substrates,” *Materials* **13**, 2068 (8 pages) (2020). DOI: 10.3390/ma13092068

K. FUJIMOTO, M. TAKAHASHI, S. IZAWA and M. HIRAMOTO, “Development of Perylene-Based Non-Fullerene Acceptors,” *Materials* **13**, 1978 (11 pages) (2020). DOI: 10.3390/ma13081978

R. TAKEUCHI, S. IZAWA, Y. HASEGAWA, R. TSURUTA, T. YAMAGUCHI, M. MEISSNER, S. IDETA, K. TANAKA, S. KERA, M. HIRAMOTO and Y. NAKAMURA, “Experimental Observation of Anisotropic Valence Band Dispersion in the Dinaphtho[2,3-b:2',3'-f]thieno[3,2-b]thiophene (DNTT) Single Crystal,” *J. Phys. Chem. C* **125**, 2938–2943 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c09239

K. FUJIMOTO, S. IZAWA, A. TAKAHASHI, T. INUZAKA, K. SANADA, M. SAKAMOTO, Y. NAKAYAMA, M. HIRAMOTO and M. TAKAHASHI, “Curved Perylene Diimides Fused with Seven-Membered Rings,” *Chem. –Asian J.* **16**, 690–695 (2021). DOI: org/10.1002/asia.202100066

B-3) 総説, 著書

S. IZAWA, K. FUJIMOTO, M. TAKAHASHI and M. HIRAMOTO, “Reduction of Voltage Loss in Organic Solar Cells—Toward the Realization of Organic Solar Cells Comparable to the High Efficient Inorganic Solar Cells,” *Clean Energy* **29**, 42–48 (2020). (in Japanese)

M. HIRAMOTO and S. IZAWA, “New Era of Organic Solar Cells—Close Up of Suppression of Non-Radiative Recombination,” *Kagaku* **75**, 68–69 (2020). (in Japanese)

M. HIRAMOTO and S. IZAWA, “Organic Solar Cells Using High-Mobility Organic Semiconductors,” *Fine Chemical* **49**, 39–45 (2020). (in Japanese)

M. HIRAMOTO and S. IZAWA, *Organic Solar Cells—Energetic and Nanostructural Design*, M. Hiramoto and S. Izawa, Eds., Springer Nature Singapore Pte Ltd. (2020). DOI: 10.1007/978-981-15-9113-6

M. Hiramoto, Chap.1. “Basic Principles of Modern Organic Solar Cells,” pp. 1–22.

M. Hiramoto, Chap. 2. “A Path to the Blended Junction,” pp. 23–44.

M. Hiramoto, Chap. 3. “Percolation Toward Lateral Junctions,” pp. 45–74.

M. Hiramoto, Chap. 9. “Parts-per-Million-Level Doping Effects and Organic Solar Cells Having Doping Based Junctions,” pp. 217–254.

M. Hiramoto, Chap. 10. “Proposal for Future Organic Solar Cells,” pp.255–267.

S. Izawa, Chap. 8. “Open-Circuit Voltage in Organic Solar Cells,” pp. 195–216.

B-4) 招待講演

平本昌宏,「高移動度有機半導体を用いた有機太陽電池」,第69回高分子討論会特別発表(招待講演),S12. 2N01IL 有機・ハイブリッドエレクトロニクス材料の研究,オンライン開催,2020年9月.

平本昌宏,伊澤誠一郎,「有機太陽電池における種々の接合」,有機エレクトロニクス(OME)研究会,オンライン開催,2021年3月.

伊澤誠一郎,「有機太陽電池の電圧損失抑制のための界面構造探索と新規分子の開発」,電子情報通信学会総合大会シンポジウム:プリントド・フレキシブルエレクトロニクスの新展開,広島,2020年3月.

伊澤誠一郎,「有機半導体界面で起こる電荷分離と再結合」,応用物理学会北陸・信越支部講演会,オンライン開催,2020年10月.

伊澤誠一郎,「有機半導体界面での新原理フォトンアップコンバージョン」,電子情報通信学会総合大会シンポジウム:フレキシブル有機エレクトロニクスの若手シンポジウム,オンライン開催,2021年3月.

伊澤誠一郎,「有機半導体界面での光電変換機能の開拓」,第68回応用物理学会春季学術講演会 有機分子・バイオエレクトロニクス分科会奨励賞受賞記念講演,オンライン開催,2021年3月.

B-5) 特許出願

特願 2020-104543,「光電変換素子」,伊澤誠一郎,平本昌宏(自然科学研究機構),2020年.

特願 2020-115747,「ペリレン化合物,及びその製造方法」,高橋雅樹,藤本圭佑,平本昌宏,伊澤誠一郎(自然科学研究機構),2020年.

特願 2020-115744,「ペリレン二量体化合物を製造する方法,ペリレン二量体化合物,及び有機薄膜太陽電池」,高橋雅樹,藤本圭佑,平本昌宏,伊澤誠一郎(自然科学研究機構),2020年.

B-6) 受賞,表彰

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奨励賞(2021).

伊澤誠一郎,コニカミノルタ画像科学奨励賞(2021).

伊澤誠一郎,花王科学奨励賞(2020).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

Korea-Japan Joint Forum (KJF)—Organic Materials for Electronics and Photonics, Organization Committee Member (2003-).

「有機固体における伝導性・光伝導性および関連する現象」に関する日中合同シンポジウム組織委員(2007-).

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

応用物理学会若手チャプター幹事(2018-). (伊澤誠一郎)

文部科学省,学術振興会,大学共同利用機関等の委員等

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」事後評価分科会分科会長(2020.11-2021.3).

学会誌編集委員

Materials, Special Edition “Organic Solar Cell and Optoelectronic Functional Materials,” Guest Editor, 2019.4–2020.11.

その他

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

東京理科大学理工学研究科先端化学専攻, 特別講義1 (令和2年度) 「有機太陽電池」, 遠隔講義 (3, 4時限), 2020年7月8日.

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 (令和2年度), 大阪大学中之島センター, 「有機太陽電池(I)(II)」, 2020年1月.

B-10) 競争的資金

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を用いた新原理太陽電池」, 平本昌宏 (2019年–2021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).

花王科学奨励賞, 「ドナー/アクセプター界面の精密制御による有機太陽電池の高効率化」, 伊澤誠一郎 (2020年–2021年).

コニカミノルタ画像科学奨励賞, 「低エネルギー光利用のための新原理フォトンアップコンバージョン」, 伊澤誠一郎 (2021年–2022年).

C) 研究活動の課題と展望

平本は, 研究員1名を雇用し, 学生1名 (Jasecla 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, 有機薄膜によるフォトンアップコンバージョン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。

共同研究では, 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, すでに論文を3報発表している。

平本は Springer 発行の英文書籍 “Organic Solar Cells” を執筆し, 2020年12月に出版した。

今年度は, コロナの影響により, フランス ChimieParisTech からの2名, タイ国チュラロンコン大からの1名の国際インターンシップ生の来日が中止となり, 研究推進に大きな影響があった。しかし, 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, 今後も, これらを利用して研究室のアクティビティを強化する。

西村 勝之 (准教授) (2006年4月1日着任)

横田 光代 (事務支援員)

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 による糖脂質含有脂質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) クマムシ由来高耐熱性タンパク質の固体 NMR を用いた構造解析
- c) アミロイドタンパク質の大量発現系の確立と試料調製
- d) 固体 NMR プローブの開発
- e) 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 β) はアルツハイマー病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 β 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 β 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きた。前報告までの実験結果から二次構造を同定し，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ていた。今回新たに磁気双極子相互作用に基づく ^{13}C 同種核相関 NMR 実験を，安定同位体非標識 A β で希釈した同試料に適用し，これまで区別が困難であった分子内，分子間の相関信号の区別に成功した。この解析から得られた分子内，分子間の近，中長距離情報に基づき，NMR データのみから大まかな分子配座の検討に成功した。さらに本年度から奥村グループと共同研究を行い，固体 NMR データを抑制条件として用いた MD 計算により，同分子の詳細な分子構造，および分子配座の決定に成功した。
- b) クマムシは特徴的な乾眠メカニズムを有し，乾眠状態で数十年生存することが可能である。これには，クマムシ固有のタンパク質が関与していると考えられているが，その詳細は不明である。クマムシの中で構成タンパク質が良く研究されているヨコヅナクマムシの熱耐性が非常に高い secretory abundant heat soluble (SAHS) タンパク質，および cytosolic-abundant heat soluble (CAHS) タンパク質の構造を固体 NMR を用いて解析することを試みた。本研究は，名古屋市立大学佐藤匡史准教授グループと分子研加藤晃一教授のグループとの共同研究である。Val 残基のみ全 ^{13}C ， ^{15}N 標識，Ile 残基のみ ^{15}N 標識した [U- ^{13}C C, ^{15}N]Val-[U- ^{15}N]Ile-SAHS，および Phe 残基のみ全 ^{13}C ， ^{15}N 標識，Tyr 残基のみ ^{15}N 標識した [U- ^{13}C C]Phe-[^{15}N]Tyr-CAHS に関して，2次元 ^{13}C 同種核相関 NMR，および2次元 ^{13}C - ^{15}N 異種核間相関 NMR 測定を行った。SAHS タンパク質に関して，残基数と同じ6対の信号を観測し，この内の1つの信号の絶対帰属に成功した。CAHS タンパク質に関して，残基数と同じ3種の Phe 信号を観測まで完了した。SAHS，CAHS タンパク質共に，変異株を用いた信号の内訳の決定を来年度行う予定である。
- c) 複数の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。この内の一つに関して大腸菌を用いた大量発現系構築，精製を試みてきたが，構造解析に必要な高純度試料精製法の確立には至っていない。このため，別のアミロイドタンパク質の大量発現系構築に主軸を移すと共に，同タンパク質の重要ドメインに関して，まず化学合成により同位体標識試料の調製を行った。現在，固体 NMR 測定のための試料調製検討実験を行うと共に，固体 NMR を用いた脂質膜との相互作用解析を行っている。

- d) 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 プローブの開発を行ってきた。まずベースとなる 400MHz NMR 用 2.5mm 試料管用固体 MAS $^1\text{H-X}$ (可変) 二重共鳴プローブの製作を行った。本プローブでは, 最終的に 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の 2 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, 製作した。さらに, 故障時のメンテナンスと更なる高効率化を考慮して設計変更を行った改良版プローブの設計, 部品製作が完了し, 組み立て中である。また, 多くの共通構造を有する $^1\text{H-}^{13}\text{C-}^{15}\text{N}$ 三重共鳴プローブは, 同改良版をベースに再設計し, 同様に組み立て中である。さらに, すべての部品を独自設計のモジュールに置き換えるため, 独自のスピニングモジュールの開発を開始した。本モジュール設計では, 現在使用している外径 2.5 mm 試料管より設計が容易な, 4.0 mm 試料管を対象としたデザインの異なる 2 種類の試作品の設計を行った。一種目の試作品は製作が完了し, 回転テストでは比較的良好な結果が得られた。現在, 2 種類の試作品の部品製作中である。後者のテスト結果を考慮し, 両試作品の長所を組み合わせたデザインを最終品として製作中である。また, 同モジュール完成後, 試料量が必要な安定同位体非標識試料などの低感度試料を対象とした 4.0 mm 試料管用固体 MAS $^1\text{H-X}$ 二重共鳴プローブを製作する予定である。
- e) 固体 NMR を用いた分子材料の構造解析に関して, 2 件の共同研究を引き続き行っている。大阪大学の戸部義人教授グループが開発された有機分子材料に関して, 固体 NMR を用いた電子状態解析の共同研究を行っている。解析対象の残り 1 分子の合成が難航しており, 複数回の合成方法の改良検討を行ってきたが未だ完成には至っていない。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, 同グループが開発された分子材料の解析を行っている。暫定的な信号帰属, および状態解析を完了しているが, 現状では, 詳細な解析を行うにはスペクトル感度が著しく不足しており, 試料密度向上のための試料調製法を検討中である。

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第 22 回国際磁気共鳴会議 (ISMAR), 第 9 回アジア太平洋 NMR シンポジウム (AP-NMR), 第 60 回 NMR 討論会 (NMRSJ), 第 60 回電子スピンスイエンズ学会 (SEST2021) 合同会議組織委員 (2020–2021).

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).

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 (2020).

C) 研究活動の課題と展望

これまで行ってきた脂質二重膜上で形成されるアミロイド β タンパク質オリゴマーの研究が, 構造および配座モデルの検討まで完了し, 本年度から奥村グループとの共同研究を行い, ようやく固体 NMR データに基づいた詳細な分子構造および配座決定が完了した。一方, 別のアミロイドタンパク質の大量発現系構築を別の共同研究先と進めて来たが, その性質上, 発現精製共に著しく苦戦している。一方, 開発を行ってきた独自の固体 NMR プローブは改良が進み, より良い状態になりつつある。また, 開発プローブの全ての部品を独自設計品に置き換えるためのモジュール

開発も進んでおり、残り2つとなった。現在、最難関のスピンングモジュールの開発を行っており、試作品の回転テストは良好な結果を得ている。今後これらを活用、発展させて行きたい。これまで何年間か、上述のような性質の異なる全ての作業を一人で行ってきたが、生産性に限界があり、特に新規試料の調製初期段階では多くの地道な作業が必要である為、試料調製を担う有能なスタッフを渴望している。本年度は本の執筆も2部行っており、年度末は時間に追われたが、どうにか締め切りに間に合わせることができそうである。

小林 玄 器 (准教授) (2018年4月1日着任)

竹入 史隆 (助教)

NAWAZ, Haq (大学院生)

AYU, Nur Ika Puji (大学院生)

内村 祐 (大学院生)

岡本 啓 (大学院生)

石見 輝 (大学院生)

今井 弓子 (技術支援員)

久保田 亜紀子 (技術支援員)

西川 匡子 (技術支援員)

鈴木 愛 (事務支援員)

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) 相転移に伴って高温で H⁻ 超イオン導電性を示す AE_2LiH_3O ($AE = Sr, Ba$) に元素置換を施す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 $10^{-3} S \cdot cm^{-1}$ 以上の導電率を 300 °C 以下で達成することができた。
- b) Ga を構成元素とする酸水素化物, 水素化硫化物, 水素化ハロゲン化物など, これまでとは異なる構造, 組成の新物質を創製し, 物質探索の新たな方向性を得た。
- c) H⁻ 導電体を電解質に用いた固体デバイスの創製に向け, 電極材料や緩衝層への応用が期待できる水素化物と酸水素化物の成膜に成功し, デバイス作製のための技術習得ができた。

B-1) 学術論文

N. MATSUI, Y. HINUMA, Y. IWASAKI, K. SUZUKI, J. GUANGZHONG, H. NAWAZ, Y. IMAI, M. YONEMURA, M. HIRAYAMA, G. KOBAYASHI and R. KANNO, “The Effect of Cation Size on Hydride-Ion Conduction in $LnSrLiH_2O_2$ ($Ln = La, Pr, Nd, Sm, Gd$),” *J. Mater. Chem. A* **8**, 24685–24694 (2020).

T. YAMAMOTO, A. CHIKAMATSU, S. KITAGAWA, N. IZUMO, S. YAMASHITA, H. TAKATSU, M. OCHI, T. MARUYAMA, M. NAMBA, W. SUN, T. NAKASHIMA, F. TAKEIRI, K. FUJII, M. YASHIMA, Y. SUGISAWA, M. SANO, Y. HIROSE, D. SEKIBA, C. M BROWN, T. HONDA, K. IKEDA, T. OTOMO, K. KUROKI, K. ISHIDA, T. MORI, K. KIMOTO, T. HASEGAWA and H. KAGEYAMA, “Strain-Induced Creation and Switching of Anion Vacancy Layers in Perovskite Oxynitrides,” *Nat. Commun.* **11**, 5923 (8 pages) (2020).

H. NAWAZ, F. TAKEIRI, A. KUWABARA, M. YONEMURA and G. KOBAYASHI, “Synthesis and H⁻ Conductivity of a New Oxyhydride Ba_2YHO_3 with Anion-Ordered Rock-Salt Layers,” *Chem. Commun.* **56**, 10373–10376 (2020).

J. YANAGISAWA, T. HIRAOKA, F. KAOBAYASHI, D. SAITO, M. YOSHIDA, M. KATO, F. TAKEIRI, G. KOBAYASHI, M. OHBA, L. F. LINDOY, R. OHTANI and S. HAYAMI, “Luminescent Ionic Liquid Formed from a Melted Rhenium(V) Cluster,” *Chem. Commun.* **56**, 7957–7960 (2020).

Y. MATSUDA, K. FUNAKOSHI, R. SEBE, G. KOBAYASHI, M. YONEMURA, N. IMANICHI, D. MORI and S. HIGASHIMOTO, “Arrangement of Water Molecules and High Proton Conductivity of Tunnel Structure Phosphates, $\text{KMg}_{1-x}\text{H}_{2x}(\text{PO}_3)_3 \cdot y\text{H}_2\text{O}$,” *RSC Adv.* **10**, 7803–7811 (2020).

F. TAKEIRI, T. YAJIMA, S. HOSOKAWA, Y. MATSUSHITA and H. KAGEYAMA, “Topochemical Anion Insertion into One-Dimensional Bi Channels in Bi_2PdO_4 ,” *J. Solid State Chem.* **286**, 121273 (5 pages) (2020).

B-3) 総説, 著書

小林玄器, 竹入史隆, 山本健太郎, 内本喜晴, 「複合アニオン化合物の電池材料」, 「複合アニオン化合物の科学」, 4.3節, pp. 165–177 (2021).

B-4) 招待講演

小林玄器, 「 H^- 導電体の物質開拓と電気化学デバイスへの応用可能性」, 日本化学会第 101 回春季年会, オンライン開催, 2021 年 3 月.

小林玄器, 「 H^- 導電体の物質開拓」, 水素・燃料電池材料研究会, オンライン開催, 2020 年 10 月.

小林玄器, 「ヒドリド導電体の開発と電気化学デバイスへの応用可能性」, ポリマーフロンティア 21 (COVID-19 により書面討論), 東工大蔵前会館, 東京, 2020 年 4 月.

G. KOBAYASHI, “A H^- Superionic Conductor $\text{Ba}_{1.8}\text{LiH}_{2.8}\text{O}_{0.9}$,” 71st Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, Belgrade (Serbia) (Online), September 2020.

B-5) 特許出願

特願 2020-058742, 「ヒドリドイオン伝導体及びその製造方法」, 陰山洋, 生方宏樹, 小林玄器, 竹入史隆 (京都大学, 自然科学研究機構), 2020 年.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

一般社団法人日本固体イオニクス学会社員 (2020–).

学会の組織委員等

第 61 回電池討論会実行委員 (2020).

B-9) 学位授与

NAWAZ, Haq, 「Anion arrangement and H^- conductivity in layered perovskite-type oxyhydrides」, 2020 年 9 月, 博士 (理学).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究研究 (B), 「ヒドリド導電体の物質科学—低温作動化に向けた物質設計指針の構築—」, 小林玄器 (2020 年–2022 年).

科研費基盤研究(B),「軽元素カチオン置換に基づく中低温作動プロトン伝導体の創製」(代表:松井敏明),竹入史隆(研究分担者)(2020年–2022年).

科学技術振興機構さきがけ研究,「複合アニオン固体電解質を用いたヒドリドインターカレーション反応の開拓」,竹入史隆(2020年–2023年).

科研費若手研究,「酸水素化物の構造物性開拓」,竹入史隆(2019年–2020年).

科研費新学術領域研究(公募研究),「アニオン配列制御に基づくヒドリド導電体の開発」,竹入史隆(2019年–2020年).
新学術領域研究(研究領域提案型)「ハイドロジェノミクス:高次水素機能による革新的材料・デバイス・反応プロセスの創成」,「高速・局所移動水素と電子とのカップリングによる新発想デバイスの設計」(代表:森 初果),小林玄器(研究分担者)(2018年–2022年).

科研費基盤研究(B),「ヒドリド伝導性水素膜とそれに基づくメンブレンリアクターの基盤技術創成」(代表:青木芳尚),小林玄器(研究分担者)(2018年–2020年).

科研費基盤研究(S),「超イオン導電体の創出」(代表:菅野了次),小林玄器(研究分担者)(2017年–2020年).

科学技術振興機構未来社会創造事業探索加速型,「実用的中温作動型水素膜燃料電池の開発」(代表:青木芳尚),小林玄器(研究分担者)(2017年–2021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

電気化学測定系の改良によって測定の精度が上がり,電気化学物性,構造相転移,水素ダイナミクスの整合性が確認できたことで,H⁻超イオン導電体Ba₂LiH₃Oに関する成果を論文投稿し,現在査読過程である(特許は2016年度に出願済み)。昨年度から今年度にかけては,Ba₂LiH₃Oへの元素置換を検討しており,超イオン導電相への転移温度の低下と導電率の向上に成功した。本研究の主導的役割を担った学生は,2019年度の日本化学会東海支部長賞を受賞するなど,高い評価を得た。今後は,H⁻導電体の更なる低温作動化に向け,組成と構造の最適化に挑戦する。また,Ba₂LiH₃Oの超イオン導電相への構造相転移は,Ba/欠損,H/欠損,H/Oの3種類の不規則化が段階的または協奏的に生じている可能性があり,固体化学の基礎的な観点からも興味深い研究対象である。今後は,中性子回折による核密度分布解析(MEM解析)や全散乱による局所構造解析(PDF解析)を駆使し,相転移挙動の詳細を明らかにすることで,H⁻導電体の導電率向上に資する物質設計指針の構築を目指したい。このH⁻導電機構に関する研究については,これまでの計算,固体NMR,中性子弾性散乱などを専門とする研究者との共同研究を今後も継続していく。

K₂NiF₄型酸水素化物以外のH⁻含有化合物の合成についても進展が見られ,前例の無かったGa系酸水素化物の合成,水素化ハロゲン化物,水素化硫化物の創製に成功するなど,新しい方向性が見出せた。合成方法についても,従来の高圧合成に頼らない手法として,あらたにメカノケミカル合成を検討し,焼成過程で分解してしまう原料も合成に用いることができるようになった。元素選択の幅が広がるのが期待できる。

H⁻のイオン導電現象の電池反応への応用に関しては,昨年度に水素化・脱水素化反応や金属電極への水素脱挿入に成功したデバイス構成を基に,電極厚み,成膜条件,界面修飾等を最適化し,性能向上と原理検証を進めていきたい。電極材料として期待できる,H⁻インターカレーション材料の物質探索を本格的に開始した。また,電極/電解質の接合を行うための技術開発を新たに検討した。

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）

村木 則文（助教）

武田 康太（特任助教（分子科学研究所特別研究員））

NAM, Dayeon（特任研究員）

村木 めぐみ（技術支援員）

中根 香織（事務支援員）

A-1) 専門領域：生物無機化学

A-2) 研究課題：

- a) ヒドロゲナーゼ生成に関与するタンパク質の構造機能相関解明
- b) バクテリアの走化性制御系における酸素センサーシステムの構造機能相関解明
- c) 鉄イオンセンサー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) 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活性部位を構成する金属中心の構造から [FeFe] 型, [NiFe] 型, [1Fe] 型の3種類に分類される。本研究では, [NiFe] 型ヒドロゲナーゼの活性中心生成における, 複数のアクセサリータンパク質やシャペロンタンパク質間での複合体形成や, 反応中間体として形成される金属錯体のタンパク質間輸送反応の詳細を明らかにすることを目的として研究を進めている。これまでに, ヒドロゲナーゼ活性中心の構築に必須な CO の生合成反応に関与する HypX の結晶構造を決定し, HypX が補酵素 A (CoA) を補因子として結合していることを明らかにした。得られた構造を基に, 下記に述べるような HypX による CO 生合成反応の反応スキームを提案した。CO 生合成反応ではまず, HypX の N 末ドメイン中で N¹⁰-formyl-tetrahydrofolate から CoA へのホルミル基転移反応が進行し, formyl-CoA が生成する。生成した formyl-CoA は, ホルミル基が C 末ドメインに位置するよう, 大きくそのコンフォメーションが変化する。その後, C 末ドメイン中で formyl-CoA の脱カルボニル反応が進行し, CO が生成する。formyl-CoA のコンフォメーション変化の過程は, MD シミュレーションによっても検討した。生成した CO を効率よく利用するため, 活性中心の構成ユニットである Fe(CO)(CN)₂ 錯体生合成反応に関与するアクセサリータンパク質 HypC/HypD と HypX が三者複合体を形成することを明らかにした。
- b) 酸素センサータンパク質 HemAT とシグナル伝達タンパク質である CheA, CheW から構成される, 酸素に対する走化性制御システムにおける酸素センシングならびに酸素に依存したシグナル伝達反応の分子機構解明を目的として研究を行っている。好熱性 *Bacillus* 属細菌である *Bacillus smithii* 由来の HemAT, CheA, CheW を単離精製し, CheA/CheW の二者複合体, HemAT/CheA/CheW の三者複合体が溶液中で安定に生成することを明らかにした。クライオ電顕によるこれら複合体の立体構造決定の予備実験として, ネガティブ染色した複合体サンプルの電子顕微

鏡像の観測を行ったところ、直径が 220 ~ 310 Å のサイズが異なるリング状構造が観測された。分子サイズから考えると、CheA, CheA/CheW, および HemAT/CheA/CheW それぞれの trimer of dimer が形成されていると考えられる。本酸素センサーシステムにおいては、CheA と CheW がシグナル伝達の足場となるリング状構造を形成し、そこにセンサータンパク質である HemAT が付加した超分子複合体を形成するものと推定される。現在、この仮説を検証するための実験を進めている。

- c) イネの細胞内鉄イオンセンサーとして機能すると考えられているユビキチンリガーゼ HRZ による鉄イオンセンシング機構、および鉄イオンによる HRZ の機能制御機構の解明を目的として研究を進めている。HRZ の全長タンパク質、および HRZ 中に存在するヘムエリスリン様ドメイン、亜鉛フィンガードメインを大腸菌で発現させた場合、封入体を形成し、可溶性画分には発現しなかった。一方、タンパク質のフォールディングシャペロンとして機能するトリガーファクターとの融合タンパク質として発現させると、可溶性画分に発現することが分かった。現在、結晶構造解析に適用可能な状態の試料調製法確立に向けて検討を進めている。

B-1) 学術論文

Y. OHNISHI, N. MURAKI, D. KIYOTA, H. OKUMURA, S. BABA, Y. KAWANO, T. KUMASAKA, H. TANAKA and G. KURISU, “X-Ray Dose-Dependent Structural Changes of the [2Fe-2S] Ferredoxin from *Chlamydomonas reinhardtii*,” *J. Biochem.* **167**, 549–555 (2020). doi: 10.1093/jb/mvaa045

D. SEO, N. MURAKI and G. KURISU, “Kinetics and Structural Insight into a Role of the Re-Face Tyr328 Residue of the Homodimer Type Ferredoxin-NADP⁺ Oxidoreductase from *Rhodospseudomonas palustris* in the Reaction with NADP⁺/NADPH,” *Biochim. Biophys. Acta, Bioenerg.* **1861**, 148140–148154 (2020). doi: 10.1016/j.bbabi.2019.148140

B-3) 総説, 著書

村木則文, 「コリネバクテリアのヘム取り込みの仕組み」, *日本結晶学会誌* **62**, 78–79 (2020).

青野重利, 「生命金属が関与するガス分子センサータンパク質」, 「生命金属ダイナミクス——生体内における金属の挙動と制御」, 城宜嗣, 津本浩平, 監修, NTS, p.176–186 (2021).

B-4) 招待講演

青野重利, 「NiFe 型ヒドロゲナーゼの活性中心構築に必要な CO 生合成反応の分子機構」, 日本農芸化学会大会 2020, 九州大学(福岡市), 2020年3月. (オンラインでは開催されなかったが大会は成立扱い)

村木則文, 「水素代謝酵素の活性中心に必須な一酸化炭素を生合成する分子機構」, 日本農芸化学会中部支部第 188 回例会, オンライン開催, 2020年11月.

青野重利, 「Molecular mechanism of CO biosynthesis required to assemble the active site in NiFe-hydrogenase」, 日本農芸化学会大会 2021, オンライン開催, 2021年3月.

B-7) 学会および社会的活動

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 (2019–2020).

学会誌編集委員

Chemistry Letters, Section Editor (2013–).

その他

総合研究大学院大学物理科学研究科副研究科長 (2020–).

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」(総括班), 「生命金属科学」分野の創成による生体金属動態の統合的研究」(代表: 津本浩平), 青野重利 (研究分担者) (2019年–2023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).

科研費基盤研究(C), 「NiFe型ヒドロゲナーゼの成熟化における一酸化炭素輸送機構の解明」, 村木則文 (2020年–2023年).

武田科学振興財団ライフサイエンス研究助成, 「一酸化炭素の生合成を鍵反応とする金属酵素ヒドロゲナーゼの活性中心構築反応」, 村木則文 (2020年).

C) 研究活動の課題と展望

生物は、様々な外部環境変化にさらされながら生育するため、外部環境変化に応答して細胞内の恒常性を維持する精緻なシステムを有している。このような外部環境変化に応答した恒常性維持システムには、外部環境の変化を感知するためのセンサータンパク質が必要不可欠である。我々の研究グループでは、遷移金属が関与するセンサータンパク質の構造機能相関解明、および遷移金属の細胞内恒常性維持機構の解明を目指して研究を進めている。今後は、構造生物学的、ならびに生化学・分子生物学的な実験手法を活用し、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）

矢木 真穂（助教）

谷中 冴子（助教）

鈴木 達哉（研究員）

GOH, Ean Wai（インターンシップ）

WILASRI, Thunchanok（インターンシップ）

HIRANYAKORN, Methanee（大学院生）

関口 太郎（大学院生）

柚木 康弘（特別共同利用研究員）

與語 理那（特別共同利用研究員）

斉藤 泰輝（特別共同利用研究員）

小藤 加奈（特別共同利用研究員）

梅澤 芙美子（特別共同利用研究員）

佐々木 雄大（特別共同利用研究員）

山田 梨乃（特別共同利用研究員）

磯野 裕貴子（技術支援員）

福富 幸恵（事務支援員）

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) タンパク質の翻訳後修飾体のコンフォメーションダイナミクス：タンパク質は限られたサイズのゲノムの中にコードされており、それらの大部分は糖鎖やユビキチンなどによる翻訳後修飾を通じて多様化している。糖鎖とユビキチン（Ub）鎖は、それぞれ‘グリココード’と‘Ub コード’といった生物学的情報を担っており、そうした情報は特異的に相互作用するタンパク質によって読み解かれる。糖鎖と Ub 鎖の溶液中における3次元構造動態を探索するため、我々は NMR 分光法を基軸とするアプローチ法を開発した。その結果、プロテアソームによる分解の目印として機能する Lys48 連結型 Ub 鎖について、各コンフォーマーの存在割合の定量化が可能となった。これにより、Ub 鎖の中で最も遠位の Ub ユニットが、Ub 認識タンパク質との相互作用面を最も露出しており、その遠位端への変異導入が他の Ub ユニットの相互作用面の溶媒露出に遠隔的に影響を与えることが明らかとなった。このことは、Ub 鎖がアロステリックに制御可能なマルチドメインタンパク質を創成するためのユニークなデザインフレームワークとなり得ることを示している。一方、カイコの蛹を用いた抗体の安定同位体標識技術を開発するとともに、動物細胞発現系を用いて安定同位体標識を施した抗体の Fc 領域に結合した糖鎖の NMR 信号を帰属し、糖鎖修飾を受けたマルチドメインタンパク質の分子内相互作用ネットワーク探索の基盤を構築した。また、重水素標識を利用した中性子小角散乱法を高度化し、溶液中における抗体の分子複合体の構造解析に応用した。さらに、オリゴ糖鎖の非結合状態における構造空間をリモデリングすることで、タンパク質への結合親和性を向上させるアプローチを開発した。この方

法は、NMRを用いて検証した分子動力学シミュレーションに基づいて、立体障害なしに標的タンパク質にアクセス可能なマイナーコンフォーマーの割合を増加させるようにオリゴ糖鎖アナログを設計・創成するものである。

- b) タンパク質集合体のダイナミクスを探る統合的な生物物理学アプローチ：ExCELLSの複数の研究グループおよび外部の研究者ネットワークとの共同で開発してきた統合的な生物物理学的アプローチを、様々な生体分子集合系へと応用し、この1年間で以下に述べるような成果が得られた。①機能的なアノテーションがなされていない古細菌由来の2種類のタンパク質（PbaAとPF0014）が、古代ギリシャ建造物のトロスのようなユニークな構造体へと共集合することを明らかにし、これにより、機能的なタンパク質ケージを設計するための新しいフレームワークを提供した。②抗原を含む膜に結合した抗体が自発的に6量体のリング状構造を形成し、それによって補体成分C1qをリクルートする動的なプロセスを可視化することができた。③国際宇宙ステーションを用いて微小重力環境下でのアミロイドβ（Aβ）の分子集合について調べたところ、微小重力環境下ではAβの線維化の過程が著しく遅くなり、異なる形態のアミロイド線維が形成されることが明らかとなった。④血液凝固第V因子および第VIII因子の細胞内輸送を担うカーゴ受容体複合体が、これらの糖タンパク質に組み込まれた10残基ほどのアミノ酸配列を分泌経路の“パスポート”として認識していることを示した。このパスポート配列をタグとして付加するだけで、組換え糖タンパク質の分泌量を有意に高めることができることも実証した。これらの知見は、バイオ医薬品として利用される組換え糖タンパク質の生産収率を向上させるための有用なツールをもたらすものである。⑤配位結合を介して集合する人工脂質の細胞表面における挙動をキャラクタライズするとともに、糖骨格を持たない人工核酸の結晶構造を決定するなど、人工生命分子の設計・創成に向けての構造基盤をもたらす研究成果を得た。

B-1) 学術論文

M. L. A. DE LEOZ, D. L. DUEWER, A. FUNG, L. LIU, H. K. YAU, O. POTTER, G. O. STAPLES, K. FURUKI, R. FRENKEL, Y. HU, Z. SOSIC, P. ZHANG, F. ALTMANN, C. GRUBER, C. SHAO, J. ZAIA, W. EVERS, S. PANGELLEY, D. SUCKAU, A. WIECHMANN, A. RESEMANN, W. JABS, A. BECK, J. W. FROEHLICH, C. HUANG, Y. LI, Y. LIU, S. SUN, Y. WANG, Y. SEO, H. J. AN, N. C. REICHARDT, J. E. RUIZ, S. ARCHER-HARTMANN, P. AZADI, L. BELL, Z. LAKOS, Y. AN, J. F. CIPOLLO, M. PUČIĆ-BAKOVIĆ, J. ŠTAMBUK, G. LAUC, X. LI, P. G. WANG, A. BOCK, R. HENNIG, E. RAPP, M. CRESKEY, T. CYR, M. NAKANO, T. SUGIYAMA, P. A. LEUNG, P. LINK-LENCZOWSKI, J. JAWOREK, S. J. YANG, H. ZHANG, T. KELLY, S. KLAPOETKE, R. CAO, J. Y. KIM, H. K. LEE, J. LEE, J. S. YOO, S. R. KIM, S. K. SUH, N. DE HAAN, D. FALCK, G. S. M. LAGEVEEN-KAMMEIJER, M. WUHRER, R. J. EMERY, R. P. KOZAK, L. P. LIEW, L. ROYLE, P. A. URBANOWICZ, N. PACKER, X. SONG, A. EVEREST-DASS, E. LATTOVÁ, S. CAJIC, K. ALAGESAN, D. KOLARICH, T. KASALI, V. LINDO, Y. CHEN, K. GOSWAMI, B. GAU, R. AMUNUGAMA, R. JONES, C. J. M. STROOP, K. KATO, H. YAGI, S. KONDO, C. T. YUEN, A. HARAZONO, X. SHI, P. MAGNELLI, B. T. KASPER, L. K. MAHAL, D. J. HARVEY, R. M. O'FLAHERTY, P. RUDD, R. SALDOVA, E. S. HECHT, D. C. MUDDIMAN, J. KANG, P. BHOSKAR, D. MENARD, A. SAATI, C. MERLE, S. MAST, S. TEP, J. TRUONG, T. NISHIKAZE, S. SEKIYA, A. SHAFER, S. FUNAOKA, M. TOYODA, P. DE VREUGD, C. CARON, P. PRADHAN, N. C. TAN, Y. MECHREF, S. PATIL, J. S. ROHRER, R. CHAKRABARTI, D. DADKE, M. LAHORI, C. ZOU, C. W. CAIRO, B. REIZ, R. M. WHITTAL, C. LEBRILLA, L. D. WU, A. GUTTMAN, M. SZIGETI, B. G. KREMKOW, K. LEE, C. SIHLBOM, B. ADAMCZYK, C. JIN, N. G. KARLSSON, J. ÖRNROS, G. LARSON, J. NILSSON, B. MEYER, A. WIEGANDT, E. KOMATSU, H. PERREAULT, E. D. BODNAR, N. SAID,

Y. N. FRANCOIS, E. LEIZE-WAGNER, S. MAIER, A. ZECK, A. J. R. HECK, Y. YANG, R. HASELBERG, Y. Q. YU, W. ALLEY, J. W. LEONE, H. YUAN and S. E. STEIN, “NIST Interlaboratory Study on Glycosylation Analysis of Monoclonal Antibodies: Comparison of Results from Diverse Analytical Methods,” *Mol. Cell. Proteomics* **19**, 11–30 (2020). doi:10.1074/mcp.RA119.001677

S. YANAKA, R. YOGO, H. WATANABE, Y. TANIGUCHI, T. SATOH, N. KOMURA, H. ANDO, H. YAGI, N. YUKI, T. UCHIHASHI and K. KATO, “On-Membrane Dynamic Interplay between Anti-GM1 IgG Antibodies and Complement Component C1q,” *Int. J. Mol. Sci.* **21**, 147 (12 pages) (2020). doi: 10.3390/ijms21010147

M. YAGI-UTSUMI, A. SIKDAR, C. SONG, J. PARK, R. INOUE, H. WATANABE, R. N. BURTON-SMITH, T. KOZAI, T. SUZUKI, A. KODAMA, K. ISHII, H. YAGI, T. SATOH, S. UCHIYAMA, T. UCHIHASHI, K. JOO, J. LEE, M. SUGIYAMA, K. MURATA and K. KATO, “Supramolecular Tholos-Like Architecture Constituted by Archaeal Proteins without Functional Annotation,” *Sci. Rep.* **10**, 1540 (10 pages) (2020). doi: 10.1038/s41598-020-58371-2

G. GEORGE, S. NINAGAWA, H. YAGI, T. SAITO, T. ISHIKAWA, T. SAKUMA, T. YAMAMOTO, K. IMAMI, Y. ISHIHAMA, K. KATO, T. OKADA and K. MORI, “EDEM2 Stably Disulfide-Bonded to TXNDC11 Catalyzes the First Mannose Trimming Step in Mammalian Glycoprotein ERAD,” *eLife* **9**, e53455 (19 pages) (2020). doi: 10.7554/eLife.53455

H. YAGI, M. YAGI-UTSUMI, R. HONDA, Y. OHTA, T. SAITO, M. NISHIO, S. NINAGAWA, K. SUZUKI, T. ANZAI, Y. KAMIYA, K. AOKI, M. NAKANISHI, T. SATOH and K. KATO, “Improved Secretion of Glycoproteins Using an N-Glycan-Restricted Passport Sequence Tag Recognized by Cargo Receptor,” *Nat. Commun.* **11**, 1368 (9 pages) (2020). doi: 10.1038/s41467-020-15192-1

K. YAMADA, Y. YAMAGUCHI, Y. UEKUSA, K. AOKI, I. SHIMADA, T. YAMAGUCHI and K. KATO, “Solid-State ¹⁷O NMR Analysis of Synthetically ¹⁷O-Enriched D-Glucosamine,” *Chem. Phys. Lett.* **749**, 137455 (5 pages) (2020). doi: 10.1016/j.cplett.2020.137455

T. SATOH, M. NISHIO, K. SUZUKI, M. YAGI-UTSUMI, Y. KAMIYA, T. MIZUSHIMA and K. KATO, “Crystallographic Snapshots of the EF-Hand Protein MCFD2 Complexed with the Intracellular Lectin ERGIC-53 Involved in Glycoprotein Transport,” *Acta Crystallogr., Sect. F: Struct. Biol. Commun.* **76**, 216–221 (2020). doi: 10.1107/S2053230X20005452

K. MORISHIMA, A. OKUDA, R. INOUE, N. SATO, Y. MIYAMOTO, R. URADE, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO, R. HIRANO, T. KUJIRAI, H. KURUMIZAKA and M. SUGIYAMA, “Integral Approach to Biomacromolecular Structure by Analytical-Ultracentrifugation and Small-Angle Scattering,” *Commun. Biol.* **3**, 294 (7 pages) (2020). doi: 10.1038/s42003-020-1011-4

M. YAGI-UTSUMI, S. YANAKA, C. SONG, T. SATOH, C. YAMAZAKI, H. KASAHARA, T. SHIMAZU, K. MURATA and K. KATO, “Characterization of Amyloid β Fibril Formation under Microgravity Conditions,” *NPJ Microgravity* **6**, 17 (6 pages) (2020). doi: 10.1038/s41526-020-0107-y

M. HIRANYAKORN, S. YANAKA, T. SATOH, T. WILASRI, B. JITYUTI, M. YAGI-UTSUMI and K. KATO, “NMR Characterization of Conformational Interconversions of Lys48-Linked Ubiquitin Chains,” *Int. J. Mol. Sci.* **21**, 5351 (12 pages) (2020). doi: 10.3390/ijms21155351

T. SUZUKI, S. YANAKA, T. WATANABE, G. YAN, T. SATOH, H. YAGI, T. YAMAGUCHI and K. KATO, “Remodeling of the Oligosaccharide Conformational Space in the Prebound State to Improve Lectin-Binding Affinity,” *Biochemistry* **59**, 3180–3185 (2020). doi: 10.1021/acs.biochem.9b00594

- H. YAGI, S. YANAKA, R. YOGO, A. IKEDA, M. ONITSUKA, T. YAMAZAKI, T. KATO, E.Y. PARK, J. YOKOYAMA and K. KATO.** “Silkworm Pupae Function as Efficient Producers of Recombinant Glycoproteins with Stable-Isotope Labeling,” *Biomolecules* **10**, 1482 (12 pages) (2020). doi: 10.3390/biom10111482
- R. OHTANI, K. KAWANO, M. KINOSHITA, S. YANAKA, H. WATANABE, K. HIRAI, S. FUTAKI, N. MATSUMORI, H. UJI-I, M. OHBA, K. KATO and S. HAYAMI.** “Pseudo-Membrane Jackets: Two-Dimensional Coordination Polymers Achieving Visible Phase Separation in Cell Membrane,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **59**, 17931–17937 (2020). doi: 10.1002/ange.202006600
- M. YAGI-UTSUMI, M. S. CHANDAK, S. YANAKA, M. HIRANYAKORN, T. NAKAMURA, K. KATO and K. KUWAJIMA.** “Residual Structure of Unfolded Ubiquitin as Revealed by Hydrogen/Deuterium-Exchange 2D NMR,” *Biophys. J.* **119**, 2029–2038 (2020). doi: 10.1016/j.bpj.2020.10.003
- Y. KAMIYA, T. SATOH, A. KODAMA, T. SUZUKI, K. MURAYAMA, H. KASHIDA, S. UCHIYAMA, K. KATO and H. ASANUMA.** “Intrastrand Backbone-Nucleobase Interactions Stabilize Unwound Right-Handed Helical Structures of Heteroduplexes of L- α TNA/RNA and SNA/RNA,” *Commun. Chem.* **3**, 156 (10 pages) (2020). doi: 10.1038/s42004-020-00400-2
- S. RATANABUNYONG, N. AEKSIRI, S. YANAKA, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO, K. CHOOWONGKOMON and S. HANNONGBUA,** “Characterization of New DNA Aptamers for Anti-HIV-1 Reverse Transcriptase,” *ChemBioChem* **22**, 915–923 (2021). doi: 10.1002/cbic.202000633
- A. OKUDA, R. INOUE, K. MORISHIMA, T. SAIO, Y. YUNOKI, M. YAGI-UTSUMI, H. YAGI, M. SHIMIZU, N. SATO, R. URADE, K. KATO and M. SUGIYAMA,** “Deuteration Aiming for Neutron Scattering,” *Biophys. Physicobiol.* **18**, 16–27 (2021). doi: 10.2142/biophysico.bppb-v18.003
- S. RATANABUNYONG, M. YAGI-UTSUMI, S. YANAKA, K. KATO, K. CHOOWONGKOMON and S. HANNONGBUA,** “Investigation of RT1t49 Aptamer Binding to Human Immunodeficiency Virus 1 Reverse Transcriptase,” *J. Curr. Sci. Technol.* **11**, 51–59 (2021).
- M. YAGI-UTSUMI, T. TANAKA, Y. OTSUBO, A. YAMASHITA, S. YOSHIMURA, M. NISHIDA and K. KATO,** “Cold Atmospheric Plasma Modification of Amyloid β ,” *Int. J. Mol. Sci.* **22**, 3116 (9 pages) (2021).

B-3) 総説、著書

- 加藤晃一，與語理那，「抗体に秘められた結合部位の発見——免疫分子の働く姿をリアルタイムで観測！」，*academist Journal*, <https://academist-cf.com/journal/?p=12589> (2020).
- 佐藤匡史，加藤晃一，「タンパク質の品質管理とN型糖鎖」，「糖鎖生物学」，北島 健，佐藤ひろ，門松健治編，名古屋大学出版会，pp. 83–95 (2020).
- 加藤晃一，山口拓実，「糖鎖の動的構造解析」，「糖鎖生物学」，北島 健，佐藤ひろ，門松健治編，名古屋大学出版会，pp.109-110 (2020).
- 矢木宏和，加藤晃一，「免疫と糖鎖（Ⅲ）——獲得免疫——」，「糖鎖生物学」，北島 健，佐藤ひろ，門松健治編，名古屋大学出版，pp. 223–236 (2020).

T. SATOH and K. KATO, “Recombinant Expression and Purification of Animal Intracellular L-Type Lectins,” in *Lectin Purification and Analysis, Methods in Molecular Biology*, J. HIRABAYASHI, Ed., Humana Press; New York, **2132**, pp. 411–417 (2020).

S. YANAKA, R. YOGO and K. KATO, “Biophysical Characterization of Dynamic Structures of Immunoglobulin G,” *Biophys. Rev.* **12**, 637–645 (2020).

矢木宏和, 加藤晃一, 「HPLC を用いた抗体医薬の糖鎖解析」, 「医薬品／化粧品／食品分野における HPLC・GC 分析テクニック」, 技術情報協会, pp. 310–319 (2020).

谷中冴子, 加藤晃一, 「複雑な糖鎖のコンフォメーション空間の探査と変化——計算と実験の統合によるアプローチ」, *化学* **75**, 30–71 (2020).

B-4) 招待講演

K. KATO, “Dynamic sugar codes that determine protein functions and fates,” SOKENDAI Asian Winter School “Challenges for New Frontiers in Molecular Science: From Basics to Advanced Researches,” 岡崎, 2020年1月.

M. YAGI-UTSUMI, “NMR characterization of the conformations and interactions of amyloid- β on glycolipid membrane,” 7th International Postgraduate Conference on Pharmaceutical Sciences (iPOPS 2020), 千葉, 2020年2月.

矢木真穂, 「ガングリオシド膜上におけるアミロイド β の構造転移」, 第93回日本生化学会大会, オンライン開催, 2020年9月.

S. YANAKA, “Impacts of the N-glycan variation of antibodies on their dynamic structures of functional relevance,” The 58th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, オンライン開催, 2020年9月.

矢木真穂, 「宇宙実験からアルツハイマー病の解明を目指す!」, 第30回自然科学研究機構シンポジウム「宇宙科学と生命科学の深〜いつながり」, オンライン開催, 2020年9月.

加藤晃一, 「分子研における NMR 共同利用研究の現況と展望」, 文部科学省最先端研究基盤共用促進事業 NMR 共用プラットフォームシンポジウム 2020, 理化学研究所横浜キャンパス, 2020年10月.

加藤晃一, 「アルツハイマー病発症のカギとなるアミロイド線維のかたちの変化〜「きぼう」で発見! 宇宙では独特なかたちのアミロイド線維ができる〜」, 国際宇宙ステーション「きぼう」利用シンポジウム 2021 【DAY2】 “サイエンス” で宇宙最先端に行く」, オンライン開催, 2021年2月.

B-6) 受賞, 表彰

関口太一郎, 比較グライコーム研究会 2020 online シンポ「糖の起源と進化〜宇宙 & 深海〜」奨励賞 (2020).

齋藤泰輝, 2020年度糖鎖科学中部拠点奨励賞 (2021).

梅澤美美子, 令和2年度日本生化学会中部支部支部長賞 (2021).

谷中冴子, 令和3年度物理系薬学学会奨励賞 (2021).

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–).

日本生化学会評議員 (2002–).

日本糖質学会評議員 (2003–), 理事 (2013–).
日本核磁気共鳴学会幹事 (2020–).
日本蛋白質科学会理事 (2015–).
日本糖鎖科学コンソーシアム幹事 (2012–), 常任幹事 (2016–).

学会の組織委員等

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–).
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–).
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–).
公益財団法人水谷糖質科学振興財団選考委員 (2016–).
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–).
Glycobiology, Editorial board member (2011–).
Scientific Reports, Editorial board member (2015–).
International Journal of Molecular Sciences, Editorial board member (2017–).

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」「一般教養科目 創薬と生命」「創薬科学・知的財産活用論」「物理系実習」, 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–.

B-10) 競争的資金

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関連機構の解明」, 加藤晃一 (2019年–2022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–2021年).
科研費挑戦的研究(萌芽), 「パスポート配列の導入による糖タンパク質の分泌経路と糖鎖修飾の制御」, 加藤晃一 (2020年–2021年).
科研費若手研究, 「糖鎖とタンパク質が織りなす抗体のアロステリックネットワークの探査」, 谷中冴子 (2020年–2021年).

科研費基盤研究(C),「スピン脱塩カラムと二次元NMRによる変性蛋白質残存構造の解析」(代表:桑島邦博),加藤晃一(研究分担者)(2020年-2022年).

AMED次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発,「NMRと計算技術の統合による糖鎖の3次元構造ダイナミクスの体系的評価法の開発」(代表:矢木宏和),加藤晃一(研究分担者)(2016年-2021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」(代表:藤田 誠),矢木真穂(研究分担者)(2019年-2023年).

科研費基盤研究(S),「新世代中性子構造生物学の開拓」(代表:杉山正明),矢木真穂(研究分担者)(2018年-2022年).

B-11) 産学連携

太陽日酸(株),「タンパク質の安定同位体標識技術の開発」,加藤晃一(2020年).

C) 研究活動の課題と展望

これまでの成果をさらに発展させて,複雑な生命分子システムを舞台とする分子科学を開拓する。すなわち,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「みる」アプローチ法を発展させるとともに,得られたデータを情報科学的に「よむ」ためのアプローチ法を開拓する。さらに,階層横断的な機能解析を実施し,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創発する仕組みを理解するためには,生命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継続するとともに,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した研究を展開する。

飯野 亮太 (教授) (2014年6月1日着任)

大友 章裕 (助教)
KIM, Ju-Young (特任研究員)
野島 達也 (特任研究員)
VISOOTSAT, Akasit (特任研究員)
武田 公利 (特任研究員)
HONSA, Monique (インターンシップ)
YANG, Ling (インターンシップ)
飯田 龍也 (大学院生)
大国 泰子 (技術支援員)
今 弥生 (技術支援員)
中根 香織 (事務支援員)

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) リニア分子モーターダイニンの高速高精度1分子計測
- b) リニア分子モータープロセシブキチナーゼの1分子計測とタンパク質工学

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 二本足で歩くリニア分子モーターダイニンの運動の高速高精度1分子観察を達成した。直径30ナノメートルの金ナノ粒子をプローブとし、独自に開発した全反射型暗視野レーザー顕微鏡で1分子観察を行った。100マイクロ秒の時間分解能と1ナノメートル以下の位置決定精度で、細胞内の条件に近い高濃度ATPでのダイニンの速い歩行運動の一步一步を可視化することに初めて成功した。観察試料には、微小管に結合した状態の分子構造の詳細が以前の低温電子顕微鏡観察で明らかとなっている、キメラダイニンを利用した。マイクロ秒レベルの高速1分子観察の結果、以前のミリ秒レベルの低速1分子観察と同様、ダイニンの歩行運動は前進だけでなく後退や横方向への動きを多く含む、酔っ払いのようなふらふらした歩き方であることを確認した。しかし以前の観察とは異なり、歩幅が小さくその分布がシャープであることが初めて明らかになった。この結果は、従来の低速1分子観察では歩行運動の一步一步を分解して可視化できていなかったことを強く示唆する。歩幅の大きさは、微小管に沿った方向が前後ともに8nm、微小管に垂直な方向が左右ともに5nmであり、レールである微小管上のダイニン結合部位間の最小間隔と同等であることが明らかになった。興味深いことに、前進する確率(27%)は後退する確率(15%)の高々1.8倍程度であり、さらに横に進む確率(左右共に25%)と同程度であった。残りは同じ場所に再び結合するか(6%)、斜めに進んだ(2%)。この挙動は、ほぼ100%の確率で一步一步前進するキネシンとは大きく異なる。また、一步一步の時間間隔は10ミリ秒程度で、1個のATPが分解されるのに要する時間と同程度であった。本結果は、ATPが1個分解されると一步一步動くというモデルを支持する。さらに一步一步の時間間隔の分布から、ダイニンではそれぞれの足が協調せずに独立に動くモデルが支持された。これらの結果は、2本の足が高度に協調して後ろ足が常に前足を追い越しながら16nmの歩幅で正確に歩行するキネシンとは全く異なっている。このように、ダイニンとキネシンでは歩行運動の仕組みが大きく異なることが明らかとなった。

- b) 結晶性多糖のキチンは昆虫や甲殻類の外殻を構成する構造多糖であり、セルロースに次いで地球上の賦存量が多いバイオマスである。プロセスキチナーゼは常温常圧という温和な条件でキチンを加水分解するため、キチンの効率的分解と有効利用を目的とした観点で基礎・応用研究の両方が精力的に行われている。本課題では、全反射蛍光顕微鏡および高速原子間力顕微鏡を用いた1分子計測により、セラチア菌由来のプロセシブキチナーゼ *SmChiA* の変異体 *SmChiA*(F232W/F396W) の高活性化機構を解明した。具体的には、*SmChiA*(F232W/F396W) はキチン鎖の末端に結合した後、解離するまでに天然型よりも多く加水分解反応サイクルを繰り返すため（反応の連続性すなわちプロセシビティが高い）、より高いキチン分解活性を示すことを明らかにした。さらに、Multiple sequence alignment, Site-saturation mutagenesis, および分注ロボットを用いた試料調製とキチン分解活性測定自動化を組み合わせた効率的タンパク質工学により、さらに活性の高い変異体、*SmChiA*(F232W/F396W/S538V) の創出に成功した。

B-1) 学術論文

A. VISOOTSAT, A. NAKAMURA, T.-W. WANG and R. IINO, “Combined Approach to Engineer a Highly Active Mutant of Processive Chitinase Hydrolyzing Crystalline Chitin,” *ACS Omega* **5**, 26807–26816 (2020). DOI: 10.1021/acsomega.0c03911

A. NAKAMURA, D. ISHIWATA, A. VISOOTSAT, T. UCHIYAMA, K. MIZUTANI, S. KANEKO, T. MURATA, K. IGARASHI and R. IINO, “Domain Architecture Divergence Leads to Functional Divergence in Binding and Catalytic Domains of Bacterial and Fungal Cellobiohydrolases,” *J. Biol. Chem.* **295**, 14606–14617 (2020). DOI: 10.1074/jbc.RA120.014792

S. YAMAGUCHI, R. TAKAGI, T. HOSOGANE, Y. OHASHI, Y. SAKAI, S. SAKAKIHARA, R. IINO, K. V. TABATA, H. NOJI and A. OKAMOTO, “Single Cell Array Enclosed with a Photodegradable Hydrogel in Microwells for Image-Based Cell Classification and Selective Photorelease of Cells,” *ACS Appl. Bio Mater.* **3**, 5887–5895 (2020). DOI: 10.1021/acsabm.0c00583

K. OKAZAKI, A. NAKAMURA and R. IINO, “Chemical-State-Dependent Free Energy Profile from Single-Molecule Trajectories of Biomolecular Motor: Application to Processive Chitinase,” *J. Phys. Chem. B* **124**, 6475–6487 (2020). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c02698

J. ANDO, T. SHIMA, R. KANAZAWA, R. SHIMO-KON, A. NAKAMURA, M. YAMAMOTO, T. KON and R. IINO, “Small Stepping Motion Of Processive Dynein Revealed by Load-Free High-Speed Single-Particle Tracking,” *Sci. Rep.* **10**, 1080 (11 pages) (2020). DOI: 10.1038/s41598-020-58070-y

A. VISOOTSAT, A. NAKAMURA, P. VIGNON, H. WATANABE, T. UCHIHASHI and R. IINO, “Single-Molecule Imaging Analysis Reveals the Mechanism of a High-Catalytic-Activity Mutant of Chitinase A from *Serratia marcescens*,” *J. Biol. Chem.* **295**, 1915–1925 (2020). DOI: 10.1074/Jbc.RA119.012078

B-3) 総説, 著書

A. NAKAMURA, K. OKAZAKI, T. FURUTA, M. SAKURAI, J. ANDO and R. IINO, “Crystalline Chitin Hydrolase is a Burnt-Bridge Brownian Motor,” *Biophys. Physicobiol.* **17**, 51–58 (2020). DOI: 10.2142/biophysico.BSJ-2020004

R. IINO, K. KINBARA and Z. BRYANT, “Introduction: Molecular Motors,” *Chem. Rev.* **120**, 1–4 (2020). DOI: 10.1021/acs.chemrev.9b00819

飯野亮太, 「生きものが機械でもいいじゃない」, *生物物理* **61**, 1 (2021).

安藤 潤, 飯野亮太, 「銀, 金, 銀金合金ナノ粒子の光散乱を利用したマルチカラー生体1分子追跡」, フォトニクス ニュース **6**, 132–136 (2021).

中村彰彦, 岡崎圭一, 古田忠臣, 櫻井 実, 飯野亮太, 「セラチア菌由来キチン加水分解酵素の運動機構」, 応用糖質 科学 **10**, 89–95 (2020).

安藤 潤, 中村彰彦, 山本真由子, ソンチホン, 村田和義, 飯野亮太, 「多色・高速1分子イメージング 金銀ナノ 粒子による多色・高速生体1分子イメージング」, 光学 **49**, 249 (2020).

B-4) 招待講演

R. IINO, “Watching Unexpected Motions of Protein Molecular Motors,” Serendipity Symposium 2020, Shimizu (Japan), December 2020.

R. IINO, “Watching Dynamic Motions of Protein Molecular Motors One at A Time,” Colloquium in the Department of Physics, Oregon State University, Corvallis, Oregon (USA), February 2020.

R. IINO, “Processive Chitinase: A Burnt-Bridge Brownian Motor Hydrolyzing Crystalline Polysaccharide,” The Symposium “Molecular Motors” At the Biophysical Society 64th Annual Meeting, San Diego, California (USA), February 2020.

R. IINO, “Visualizing Dynamic Motions of Protein Molecular Motors With Plasmonic Nanoprobes,” The 1st International Symposium on Molecular Engine, Chiba (Japan), January 2020.

飯野亮太, 「生体分子モーターを観る, 壊す, 創る」, 東北大学大学院工学研究科応用物理学セミナー, オンライン開催, 2020年11月.

飯野亮太, 「タンパク質分子モーターを観る, 壊す, 創る」, 東京大学大学院工学系研究科化学生命工学専攻「ハイブリッドレクチャー」, オンライン開催, 2020年11月.

飯野亮太, 「タンパク質の基礎」, 新学術領域合同シンポジウム——ソフトロボット学と発動分子科学の境界——, オンライン開催, 2020年11月.

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 (A-13. モータータンパク質) (2020).

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 (2019.3–2021.2).

学会誌編集委員

米国生物物理学会誌 *Biophysical Journal*, Editorial Board Member (2020–2022).

Frontiers in Bioengineering and Biotechnology, Associate Editor (2015.4.29–2020.6).

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 (2012.4–2021.3).

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–).

B-8) 大学での講義, 客員

大阪大学大学院工学研究科, 非常勤講師, 「生命化学特別講義I」, 2020年.

東北大学大学院工学研究科, 非常勤講師, 「応用物理学特別講義」, 2020年.

B-9) 学位授与

VISOOTSAT, Akasit, 「Single-molecule analysis and engineering of chitinase A from *Serratia marcescens*」, 2020年9月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

科研費特別研究員奨励費, 「V-ATPaseが電気化学ポテンシャルによって回転する機構の解明」, 大友章裕 (2020年-2023年).

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-2020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).

C) 研究活動の課題と展望

生体分子モーター等の細胞内で働くナノサイズの生体分子機械は, 人間が作ったマクロなサイズの機械と比べてはるかに小さく, ブラウン運動の活用等, 全く異なる作動原理で働くと考えられる。ダイニンの研究成果により, 細胞内で働くリニア分子モーターの動きは必ずしも正確でないことが明らかになった。本成果は, 細胞内物質輸送という機能の達成は, 不正確な動きでも可能であることを示している。人工分子でナノサイズのリニアモーターを設計する上での制限が大きく緩和され, その実現可能性が向上したと考えられる。今後は, 我々が最近開発した高速高精度マルチカラー1分子観察法を適用し, ダイニンの2本の足の動きを同時に可視化してその歩行運動のメカニズムをさらに深く理解したいと考えている。また, プロセシブキチナーゼについては, 得られた高活性変異体の加水分解反応の素過程を解明し, 高活性化の機構の解明に取り組む。さらに, 回転分子モーター V-ATPase における ATP 加水分解モーター V_1 とイオン輸送モーター V_o のエネルギー変換カップリングの機構を解明する。

栗原 顕 輔 (特任准教授) (2014年5月1日～2020年3月31日)*)

松尾 宗征 (特任研究員)

福富 幸恵 (事務支援員)

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) 原始細胞を自己触媒的に自己再生産する分子システムとして再構成する。チオエステルを骨格とする単純な一分子から、自発的に自己再生産を行う原始細胞モデルの創成を目指した。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、レーザー走査型共焦点顕微鏡にて確認した。この液滴に同分子を再添加すると、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。顕微ラマンによる観測から、この液滴は液-液相分離を呈した。また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、液滴はこれら高分子を取込み濃縮した。Research Square に報告書を提出した (doi:10.21203/rs.3.rs-65297/v1)。

B-1) 学術論文

M. MATSUO, K. KURIHARA, T. TOYOTA, K. SUZUKI and T. SUGAWARA, “Physicochemical Cause and Effect Observed in DNA Length-Dependent Division of Protocell as the Primitive Flow of Information,” *Clin. Med. Biochem.* **6(3)**, 150 (3 pages) (2020).

M. MATSUO, Y. HIRATA, K. KURIHARA, T. TOYOTA, T. MIURA, K. SUZUKI and T. SUGAWARA, “Environment-Sensitive Intelligent Self-Reproducing Artificial Cell with a Modification-Active Lipo-Deoxyribozyme,” *Micromachines* **11**, 606 (18 pages) (2020).

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).

科研費挑戦的研究(萌芽), 「自己増殖液滴による生命起源仮説の統合」, 栗原顕輔 (2020年-2023年).

C) 研究活動の課題と展望

本研究で構築した液滴は、水中で養分を吸収・変換することで増殖を示す。液-液相分離の性質から、RNA や DNA などの核酸だけでなく脂質も取り込み、マイクロメートルスケールの粒子も内部に取り込むことに成功した。

この液滴は組成を調整することにより様々な物質を内包することができるため、用途に応じた薬剤を内包できる新規ドラッグデリバリーシステム(DDS)キャリアなどに応用が可能である。さらに複数種の液滴を用いることで液滴に最適なペプチド高分子を自発的に合成できる系が構築できると考えている。

*) 2020年4月1日海洋開発研究機構特任研究員

宇都宮大学研究支援員

大阪大学特任准教授

錯体触媒研究部門

魚 住 泰 広 (教授) (2000年4月1日着任)

奥村 慎太郎 (助教)
間瀬 俊明 (特任研究員)
小島 啓佑 (共同研究員)
田澤 文 (派遣研究員)
新見 涼子 (大学院生)
水野 翔太 (大学院生)
鳥居 薫 (技術支援員)
谷分 麻由子 (事務支援員)
佐々木 時代 (事務支援員)

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

A. OHNO, T. SATO, T. MASE, Y. M. A. YAMADA and Y. UOZUMI, "A Convuluted Polyvinylpyridine-Palladium Catalyst for Suzuki-Miyaura Coupling and C-H Arylation," *Adv. Synth. Catal.* **362**, 4687–4698 (2020). DOI: 10.1002/adsc.202000742

T. SATO, Y. UOZUMI and Y. M. A. YAMADA, “Catalytic Reductive Alkylation of Amines in Batch and Microflow Conditions Using a Silicon-Wafer-Based Palladium Nanocatalyst,” *ACS Omega* **5**, 26938–26945 (2020). DOI: 10.1021/acsomega.0c04329

A. E. PURTA, S. ICHII, A. TAZAWA and Y. UOZUMI, “C–H Arylation of Thiophenes with Aryl Bromides by a Parts-per-Million Loading of a Palladium NNC-Pincer Complex,” *Synlett* **31**, 1634–1638 (2020). DOI: 10.1055/s-0040-1707213

Y. M. A. YAMADA, H. BAEK, T. SATO, A. NAKAO and Y. UOZUMI, “Metallically Graded Silicon Nanowire and Palladium Nanoparticle Composites as Robust Hydrogenation Catalysts,” *Commun. Chem.* **3**, 81 (8 pages) (2020). DOI: 10.1038/s42004-020-0332-z

R. N. DHITAL, A. SEN, T. SATO, H. HU, R. ISHII, D. HASHIZUME, H. TAKAYA, Y. UOZUMI and Y. M. A. YAMADA, “Activator-Promoted Aryl Halide-Dependent Chemoselective Buchwald-Hartwig and Suzuki-Miyaura Type Cross-Coupling Reactions,” *Org. Lett.* **22**, 4797–4801(2020). DOI: 10.1021/acs.orglett.0c01600

S. MIZUNO, H. TSUJI, Y. UOZUMI and M. KAWATSURA, “Synthesis of α -Tertiary Amines by the Ruthenium-Catalyzed Regioselective Allylic Amination of Tertiary Allylic Esters,” *Chem. Lett.* **49**, 645–647 (2020). DOI: 10.1246/cl.20010

T. OSAKO, J. SRISA, K. TORII, G. HAMASAKA and Y. UOZUMI, “Iterative Preparation of Platinum Nanoparticles in an Amphiphilic Polymer Matrix: Regulation of Catalytic Activity in Hydrogenation,” *Synlett* **31**, 147–152 (2020). DOI: 10.1055/s-0037-1611813

H. BAEK, K. KASHIMURA, T. FUJII, S. TSUBAKI, Y. WADA, S. FUJIKAWA, T. SATO, Y. UOZUMI and Y. M. A. YAMADA, “Production of Bio Hydrofined Diesel, Jet Fuel, and Carbon Monoxide from Fatty Acids Using a Silicon Nanowire Array-Supported Rhodium Nanoparticle Catalyst under Microwave Conditions,” *ACS Catal.* **10**, 2148–2156 (2020). DOI: 10.1021/acscatal.9b04784

H. HU, H. OTA, H. BAEK, T. MASE, Y. UOZUMI and Y. M. A. YAMADA, “Second-Generation *meta*-Phenolsulfonic Acid–Formaldehyde Resin as a Catalyst for Continuous-Flow Esterification,” *Org. Lett.* **22**, 160–163 (2020). DOI: 10.1021/acs.orglett.9b04084

B-3) 総説, 著書

T. OSAKO, A. OHTAKA and Y. UOZUMI, “Development of Polymer-Supported Transition Metal Catalysts and Their Green Synthetic Applications,” in *Catalyst Immobilization: Methods and Applications*, chapter 10, pp. 325–368 (2020). DOI: 10.1002/9783527817290.ch10

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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–).

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

SYNLETT 誌アジア地区編集主幹 (2002-).

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-).

その他

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, 2015年-2020年.

B-9) 学位授与

ICHII, Shun, 「Development of Efficient Carbon-Carbon Bond Forming Reactions Using a ppb to ppm Loading Amount of a Palladium NNC-Pincer Complex」, 2020年3月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

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-2020年).

科学技術振興機構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-2020年).

科学技術振興機構A-STEP 研究, 「超高機能触媒を用いる次世代型連続フロープロセスの開発」, 魚住泰広 (2019年-2020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), 希少元素の元素循環・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(2014年-2020年)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)。現在, 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。またグループ内での奥村博士との協働による遷移金属錯体光触媒の開発、分子研内外の研究者とチームで取り組み遷移金属触媒カップリング反応の極端紫外光分光を利用したオペランド観察による反応機構解析、企業との産学連携による基幹的有機化合物の工業生産プロセスへの展開研究などの共同研究に取り組みつつある。さらに、基礎研究として、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。

榎山 儀 恵 (准教授) (2014年6月1日着任)

大塚 尚哉 (助教)
藤波 武 (特任研究員)
堀 達暁 (大学院生)
大石 峻也 (大学院生)
大田 陽野 (大学院生)
加藤 雅之 (大学院生)
小谷 駿輔 (大学院生)
牛田 妃菜乃 (事務支援員)

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) ペルフルオロヨウ化アリールを母骨格とするハロゲン結合供与体触媒の開発
- c) ハロゲン結合を活用する高分子触媒反応場の開発
- d) 三中心四電子ハロゲン結合を活用するハロニウム錯体触媒の開発
- e) 全フッ素ハロゲン化リレン化合物の精密合成と多機能性材料への応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) キラルプレンステッド酸触媒存在下、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。さらに、得られた生成物を β アミノ酸誘導体へと変換し、本触媒反応の有用性を示した。論文再投稿に向けて、有機化学実験による反応検討データの収集を完了した。現在、論文の改訂作業を進めている。また、鈴木敏泰研究員との共同研究を実施し、エナンチオ選択性の発現機構を計算化学的に検証することで、アザアレンウムを介した連鎖型反応機構を提案した。論文審査コメントに基づき種々反応検討を行い、本反応機構の妥当性を評価した。有機小分子による不斉連鎖型反応は、これまで報告されていない。反応機構の新規性に焦点を当てた論文内容に改訂し、論文投稿準備を進めている。
- b) 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。江原グループとの共同研究、岡山大自然生命科学研究支援センターでの HOESY 測定により、本反応の触媒作用機構を明らかにし、論文をまとめた。論文審査コメントに基づいて、触媒反応の継時変化と対照実験の追加実験を実施し、鈴木敏泰研究員との共同研究により、反応の駆動力と推測される分子間の静電相互作用を計算化学的に明らかにした。さらに、提案された分子間の静電相互作用を分光学的に検証するため、岡山大自然生命科学研究支援センターでの ^1H - ^{19}F HOESY 測定を予定している。これらの追加実験をもとに論文改訂作業を進めており、 ^1H - ^{19}F HOESY 測定が完了次第、論文を投稿する。また、ペルフルオロヨードベンゼンで得られた成果をもとに、触媒母骨格の立体的影響ならびに電子的影響を詳細に調査し、線形回帰分析を実施した。ハメット定数をもとにハロゲン結合供与能および触媒活性の予測モデルを構築することに成功した。現在、電子的影響の詳細について、論文を執筆中である。

- c) 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合成した高分子と DMAP から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。産総研触媒化学融合研究センター中島チーム長および田中主任研究員と共同研究を実施し、固体 DNP-NMR 測定により高分子触媒中の DMAP とそのハロゲン結合供与能を検証した。分光学的に触媒活性中心となる DMAP を同定することに初めて成功した。現在、これらの成果をまとめ、論文を執筆中である。岐阜医療科学大学の萬代准教授と共同研究を実施し、開発した高分子固定化触媒の不斉触媒化を試みた。水系溶媒での反応にも関わらず、中程度のエナンチオ選択性が得られることを見出した。現在、エナンチオ選択性の向上をめざし、共同研究を継続している。
- d) エチニルビスピリジン配位子とするヨードニウム錯体やジアリールヨードニウムトリヨードの合成と単結晶 X 線回折に成功した。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。これらの成果を 2 報の学術論文にまとめ、論文を投稿した。論文審査コメントにおいて、提案した反応機構の追加実験を求められ、NMR や CSI-MS 測定により本錯体触媒の反応駆動力を実験化学的に検証した。開発したハロニウム錯体触媒反応では、触媒の一価ヨウ素と反応基質の電子豊富な化学種との三中心四電子ハロゲン結合の形成が反応駆動力となっていることを見出した。現在、得られた実験結果を追加して、各々、論文の改訂作業を進めている。開発したハロニウム錯体触媒の適用範囲の拡充や選択的反応への展開に着手した。具体的には、ピリジン配位子の置換基修飾や対アニオンへの不斉導入を行い、様々な構成要素からなるハロニウム錯体触媒のライブラリーを構築した。これらの単結晶作成と構造解析に成功し、錯体分子内の三中心四電子結合と反応基質との複合体形成を考察した。
- e) 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および単結晶 X 線構造解析に成功した。全フッ素ヨウ化ペリレンおよびその誘導体が、市販の全フッ素ヨウ化ベンゼンとは異なる分子配列を形成し、従来よりも強力なハロゲン結合供与能を有することを明らかにした。現在、合成と構造に関する論文とハロゲン結合供与能に関する論文を執筆中である。全フッ素ハロゲン化ペリレン化合物の合成にあたり、その最小骨格である F7 ナフタレンへのハロゲン化反応の開発を行った。安定で取り扱いが容易な $\text{Mg}(\text{TMP})_2 \cdot 2\text{LiBr}$ が本反応の脱プロトン化に有効であることを見出した。市販で入手可能なハロゲン化剤を用いることで、ヨウ素化、臭素化、塩素化、F7 ナフタレンに対する全てのハロゲン化に成功した。

B-6) 受賞、表彰

大石峻也, 日本化学会東海支部長賞 (2020).

大石峻也, CSJ 化学フェスタ 2020 優秀ポスター発表賞 (2020).

B-7) 学会および社会的活動

学会誌編集委員

日本化学会化学と工業編集委員 (2017, 2018, 2019).

有機合成化学協会編集協力委員 (2020).

その他

出前授業愛知県立岡崎北高等学校 (2016, 2017, 2018, 2019, 2020).

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,「鑄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).

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).

C) 研究活動の課題と展望

地球上に生存する生命を特徴付ける性質のひとつがキラリティーである。ほとんど全ての生体系は、本来的にキラルでありエナンチオマー的に純粋である。このことは、物質のキラリティーが至るところで私たちの日常に浸透している所以である。私たちの社会に欠かすことのできない物質・材料にキラリティーを組み入れること、それを可能にする一連の方法論を開発することは、次世代の純粋化学と応用化学の両面、そして材料科学において、極めて大きな意味をもつ。

当グループでは、キラル分子を供給する方法論の開拓とその確立を目指し、有機小分子の設計・合成と反応開発を進めている。これまでに「ハロゲン結合」のドナー・アクセプターとなる有機分子の精密合成に成功し、これらの有機分子が、反応空間の構築と有機合成反応の促進に有用であることを見出してきた。特に、所内外の研究グループと共同研究を実施することで、ハロゲン原子を起点とする様々な分子間相互作用を詳細に考察し、これらの分子間相互作用が合成した有機分子の機能発現に重要な役割を果たしていることを明らかにしつつある。2020年度後期は、前期に投稿した論文の審査コメントをもとに、追加実験を実施し論文改訂作業を進めてきた。2021年度中の投稿完了を予定している。

新たな分子性触媒・分子変換反応を開発し、さらに、機能性有機分子材料の開発へと研究を展開することで、精密有機合成により水素結合やハロゲン結合を精密にデザインする学術的戦略を確立する。近い将来、本戦略が、新機能性物質創成の有力な手段として汎用されることを目標に、引き続き研究を遂行する。

錯体物性研究部門

草 本 哲 郎 (准教授) (2019年1月1日着任)

松岡 亮太 (助教)
加藤 壮志 (大学院生)
木村 舜 (特別共同利用研究員)
中貝 梢 (技術支援員)
増田 道子 (事務支援員)

A-1) 専門領域：分子物性化学, 錯体化学

A-2) 研究課題：

- a) ラジカルの多重項に基づくスピン-発光相関機能の創出とメカニズム解明
- b) 三回対称構造を有するラジカルに基づく物質開拓
- c) ラジカル結晶における固体発光機能の探究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 光安定ラジカル PyBTM を 10wt% ドープした分子結晶は、極低温において磁場に応答する発光挙動 (magnetoluminescence) を示す。その背景には、ラジカルの集積化により新たに生まれるスピン自由度が本質的な役割を果たしている可能性がある。本研究では、magnetoluminescence のメカニズムの理解、中でもラジカルであることが本現象に対しどのように影響しているのか、を解明することを目的として、PyBTM を様々な濃度でドープした分子結晶に対し、発光スペクトルに加え発光寿命の磁場および温度依存性を詳細に調べた。この結果を速度方程式ならびに量子力学的シミュレーションを基に解析した結果、基底状態におけるスピン状態分布の変化 (静的磁場効果) と励起状態における磁場誘起項間交差 (動的磁場効果) のうち、前者の寄与が magnetoluminescence 挙動に対し支配的であることを見出した。これは、本現象が通常の閉殻分子では実現が困難であり、開殻電子系であるラジカルならではの新奇物性であることを意味している。これと並行して、PyBTM が配位した亜鉛錯体を合成し、この物質が magnetoluminescence を示す初めてのラジカル金属錯体であることを明らかにした。また励起状態におけるラジカルエキシマー形成が分子内ではなく分子間で生じることを見出した。
- b) 二次元系物質は、構造の低次元性や特徴的なバンド構造トポロジーに由来する機能を示す。我々はなかでも二次元ハニカム構造を有する開殻錯体高分子に着目し、新規物質開発及び機能創出を進めている。本研究では、目的物質の構成要素となる三回対称構造を有するラジカルを新たに開発した。さらにラジカルと金属イオンとの配位結合形成により狙い通りの二次元ハニカム構造が形成できることを見出した。特に磁気モーメントを有する銅イオンを用いた場合、銅イオンとラジカルの不対電子間に強磁性的な交換相互作用が働くこと、また物質の磁気秩序状態が磁場に応答して変化する (反強磁性秩序 \leftrightarrow 強磁性秩序) ことを見出した。これは同様の分子構造を有する零次元系および一次元系物質では見られなかった新しい機能である。
- c) 開殻分子の固体発光は、閉殻分子のそれとは特徴やメカニズムが異なることが予想できるが、発光性の開殻分子結晶の例が極めて少なく、研究が十分には進められてこなかった。我々は室温において固体発光するラジカル分子結

晶を世界に先駆けて開発した。加えて、この分子結晶が近赤外領域で発光することを明らかにした。この物質は開殻分子凝縮系の励起状態ダイナミクスや発光メカニズムの基礎学理の解明を可能とする有力物質である。

B-1) 学術論文

S. KIMURA, M. UEJIMA, W. OTA, T. SATO, S. KUSAKA, R. MATSUDA, H. NISHIHARA and T. KUSAMOTO, “An Open-Shell, Luminescent, Two-Dimensional Coordination Polymer with a Honeycomb Lattice and Triangular Organic Radical,” *J. Am. Chem. Soc.* **143**, 4329–4338 (2021). DOI: 10.1021/jacs.0c13310

S. KIMURA, S. KIMURA, K. KATO, Y. TEKI, H. NISHIHARA and T. KUSAMOTO, “A Ground-State-Dominated Magnetic Field Effect on the Luminescence of Stable Organic Radicals,” *Chem. Sci.* **12**, 2025–2029 (2021). DOI: 10.1039/D0SC05965J

S. KIMURA, S. KIMURA, H. NISHIHARA and T. KUSAMOTO, “Excimer Emission and Magnetoluminescence of Radical-Based Zinc(II) Complexes Doped in Host Crystals,” *Chem. Commun.* **56**, 11195–11198 (2020). DOI: 10.1039/D0CC04830E

C. OHDE, T. KUSAMOTO and H. NISHIHARA, “Effects of Halogen Atom Replacement on the Structure and Magnetic Properties of a Molecular Crystal with Supramolecular Two-Dimensional Network Mediated via Sulfur’s σ -Holes,” *J. Magn. Magn. Mater.* **497**, 165986 (6 pages) (2020). DOI: 10.1016/j.jmmm.2019.165986

R. MATSUOKA, S. HIMORI, G. YAMAGUCHI and T. NABESHIMA, “Kinetic and Thermodynamic Behaviors of Pseudorotaxane Formation with C_{3v} Macrocyclic BODIPY Trimers and the Remarkable Substituent Effect on Ring-Face Selectivity,” *Org. Lett.* **22**, 8764–8768 (2020). DOI: 10.1021/acs.orglett.0c02840

R. MIYAKE, E. SUGANUMA, S. KIMURA, H. MORI, J. OKABAYASHI and T. KUSAMOTO, “Cyclic Heterometallic Interactions Formed from a Flexible Tripeptide Complex Showing Effective Antiferromagnetic Spin Coupling,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **60**, 5179–5183 (2020). DOI: 10.1002/anie.202013373

H. MAEDA, A. BAJPAYEE, T. KUSAMOTO and H. NISHIHARA, “Construction of Bis(2,6-bis(1-methylbenzimidazol-2-yl)pyridine)iron(II) Coordination Polymer for Incorporation of Magnetic Function,” *J. Inorg. Organomet. Polym. Mater.* **30**, 147–152 (2020). DOI: 10.1007/s10904-019-01375-x

R. YOSHIMOTO, S. YAMASHITA, H. AKUTSU, Y. NAKAZAWA, T. KUSAMOTO, Y. OSHIMA, T. NAKANO, H. M. YAMAMOTO and R. KATO, “Electric Dipole Induced Bulk Ferromagnetism in Dimer Mott Molecular Compounds,” *Sci. Rep.* **11**, 1332 (10 pages) (2021). DOI: 10.1038/s41598-020-79262-6

B-3) 総説、著書

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」, *Bull. Jpn. Soc. Coord. Chem.* **75**, 35–41 (2020). DOI: 10.4019/bjscc.75.35

Y. CHIBA, T. NAKAMURA, R. MATSUOKA and T. NABESHIMA, “Synthesis and Functions of Oligomeric and Multidentate Dipyrrin Derivatives and their Complexes,” *Synlett* **31**, 1663–1680 (2020).

B-4) 招待講演

草本哲郎,「ラジカル——奇数個の電子をもつ分子が示すユニークな機能」, 市民公開講座第 127 回分子科学フォーラム, オンライン開催, 2021 年 2 月.

T. KUSAMOTO, “A Cu(II)-radical heterospin magnetic chain: Temperature-dependent Jahn-Teller distortion correlated to π -conjugation and magnetic properties,” RSC Dalton Transactions New Talent: Asia-Pacific Desktop Seminar, online, February 2021.

草本哲郎,「開殻電子系分子が示す機能」, 第 132 回フロンティア材料研究所学術講演会(無機化学セミナー)「殻自由度を利用した材料・機能開発」, オンライン開催, 2020 年 12 月.

草本哲郎,「安定ラジカルが示す発光機能」, 第 2 回“光”機到来! Q コロキウム, オンライン開催, 2020 年 6 月.

草本哲郎,「企業での経験と今の自分」, 分子科学研究所所長招聘会議「光り輝く博士課程卒業生」, オンライン開催, 2020 年 6 月.

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-).

学会の組織委員等

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」所内対応 (2020).

分子研研究会「錯体化学から始まる学術展開の可能性」所内対応 (2021).

錯体化学会第 70 回討論会実行委員 (2020).

錯体化学会第 69 回討論会実行委員 (2019).

The 1st Asian Conference on Molecular Magnetism (1stACMM) 組織委員 (2020).

その他

錯体化学若手の会第 7 回ウェブ勉強会主催 (2020).

第 25 回錯体化学若手の会中部・東海支部勉強会主催 (2019).

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」, 2020 年 9 月-.

山形大学理学理学科, 集中講義,「化学特別講義 A」, 2020 年 7 月.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究,「三回対称ラジカルを基とするカゴメーハニカムハイブリッド格子の構築と機能開拓」, 草本哲郎 (2020 年-2024 年).

科研費基盤研究(B),「発光ラジカルの集積化に基づく開殻物質創製と電子スピン・発光協奏物性の開拓」, 草本哲郎 (2020年–2022年).

科研費挑戦的研究(萌芽),「単層ヘテロスピリ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).

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、通常の開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・磁気関連物性を創製・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) スピン-発光関連機能のメカニズムの解明、(b) 二次元ハニカム構造を有する開殻錯体高分子の合成と磁気特性の調査、(c) 室温で近赤外発光を示す新しいラジカル分子結晶の開発、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) では、試料の発光特性の磁場効果の詳細な探究を可能とする測定系として、7 Tまでの磁場発生が可能なマグネットを測定装置系に組み込むことを進める。この新測定装置系を用いて研究を加速させ、ラジカルの magnetoluminescence 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、メカニズムの全容解明に繋げる。(b) および(c) については、有機化合物の高い分子設計性や金属錯体の特長である金属イオン及び幾何構造の多様性を基に、新しいラジカル金属錯体を開発し、これまでになかった光関連機能あるいは励起状態特性の創出を目指す。

瀬川 泰知 (准教授) (2020年4月1日着任)

杉山 晴紀 (助教)
渡邊 幸佑 (特別共同利用研究員)
中野 さち子 (技術支援員)
谷分 麻由子 (事務支援員)

A-1) 専門領域：有機合成化学, 構造有機化学

A-2) 研究課題：

- a) 3次元幾何構造をもつ機能性有機構造体の合成と機能解明
- b) 分子の概念を拡張する新たな分子トポロジーの確立
- c) 電子回折結晶構造解析の有機機能性材料開発への活用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 湾曲構造をもつ π 共役有機分子の合成と構造解析を行った。大環状に π 共役が繋がった筒状芳香族炭化水素分子の合成およびその反応性の解明に成功した (学術論文リスト 2,6,7)。また、カーボンナノベルトの構造とひずみエネルギーの関係について、量子化学計算によって新たな知見を得た (学術論文リスト 4)。
- b) カテナン, ロタキサン, 分子ノットといったトポジカルな分子構造の効率的合成法の検討を行っている。全てベンゼン環でできた分子であるシクロパラフェニレンを用いてカテナンを合成する技術をすでに開発しているが、従来よりも小さいサイズである [9]シクロパラフェニレンを用いてカテナンを作ることに成功した。X線結晶構造解析によって構造決定し、カテナントポロジーを有する分子であることを確認した (学術論文リスト 5)。
- c) 湾曲した π 共役分子が作る超分子ナノワイヤーの3次元構造が電子回折結晶構造解析によって解析することに成功した。密な二重らせん構造によって、置換基のない縮環芳香族炭化水素が安定なナノワイヤーとして有機溶媒のゲル化剤として働くことを初めて見出した。電子回折がサブマイクロメートルオーダーの有機構造体の構造解析に対して絶大な威力を発揮することを明確に示した (学術論文リスト 1)。

B-1) 学術論文

K. KATO, K. TAKABA, S. MAKI-YONEKURA, N. MITOMA, Y. NAKANISHI, T. NISHIHARA, T. HATAKEYAMA, T. KAWADA, Y. HIJIKATA, J. PIRILLO, L. T. SCOTT, K. YONEKURA, Y. SEGAWA and K. ITAMI, “Double-Helix Supramolecular Nanofibers Assembled from Negatively Curved Nanographenes,” *J. Am. Chem. Soc. ASAP* **143**, 5465–5469 (2021). DOI: 10.1021/jacs.1c00863

K. Y. CHEUNG, K. WATANABE, Y. SEGAWA and K. ITAMI, “Synthesis of a Zigzag Carbon Nanobelt,” *Nat. Chem.* **13**, 255–259 (2021). DOI: 10.1038/s41557-020-00627-5

B. RODRÍGUEZ-HERNÁNDEZ, T. NELSON, N. OLDANI, A. MARTÍNEZ-MESA, L. URANGA-PIÑA, Y. SEGAWA, S. TRETIAK, K. TAMI and S. FERNANDEZ-ALBERTI, “Exciton Spatial Dynamics and Self-Trapping in Carbon Nanocages,” *J. Phys. Chem. Lett.* **12**, 224–231 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.0c03364

K. WATANABE, Y. SEGAWA and K. ITAMI, “A Theoretical Study on the Strain Energy of Helicene-Containing Carbon Nanobelts,” *Chem. Commun.* **56**, 15044–15047 (2020). DOI: 10.1039/D0CC06373H

S. MATSUBARA, Y. KOGA, Y. SEGAWA, K. MURAKAMI and K. ITAMI, “Creation of Negatively Curved Polyaromatics Enabled by Annulative Coupling that Forms an Eight-Membered Ring,” *Nat. Catal.* **3**, 710–718 (2020). DOI: 10.1038/s41929-020-0487-0

Y. LI, Y. SEGAWA, A. YAGI and K. ITAMI, “A Nonalternant Aromatic Belt: Methylene-Bridged [6]Cycloparaphenylene Synthesized from Pillar[6]arene,” *J. Am. Chem. Soc.* **142**, 12850–12856 (2020). DOI: 10.1021/jacs.0c06007

H. SHUDO, M. KUWAYAMA, Y. SEGAWA and K. ITAMI, “Synthesis of Cycloptycenes from Carbon Nanobelt,” *Chem. Sci.* **11**, 6775–6779 (2020). DOI: 10.1039/D0SC02501A

M. NAGASE, K. KATO, A. YAGI, Y. SEGAWA and K. ITAMI, “Six-Fold C–H Borylation of Hexa-*peri*-hexabenzocoronene,” *Beilstein J. Org. Chem.* **16**, 391–397 (2020). DOI: 10.3762/bjoc.16.37

Y. SAITO, K. YAMANOUE, Y. SEGAWA and K. ITAMI, “Selective Transformation of Strychnine and 1,2-Disubstituted Benzenes by C–H Borylation,” *Chem* **6**, 985–993 (2020). DOI: 10.1016/j.chempr.2020.02.004

Y. SEGAWA, M. KUWAYAMA and K. ITAMI, “Synthesis and Structure of [9]Cycloparaphenylene Catenane: An All-Benzene Catenane Consisting of Small Rings,” *Org. Lett.* **22**, 1067–1070 (2020). DOI: 10.1021/acs.orglett.9b04599

B-3) 総説, 著書

K. Y. CHEUNG, Y. SEGAWA and K. ITAMI “Synthetic Strategies of Carbon Nanobelts and Related Belt-Shaped Polycyclic Aromatic Hydrocarbons,” *Chem. –Eur. J.* **26**, 14791–14801 (2020). DOI: 10.1002/chem.202002316

B-4) 招待講演

瀬川泰知, 「MicroED 構造有機化学」, 第一回バーチャル化学フロンティア研究会, オンライン開催, 2020年5月.

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, 「基礎錯体化学」, 2020年7月14日–20日.

B-10) 競争的資金

旭硝子財団研究助成, 「微小結晶の構造解析を基軸とする3次元有機共有結合ネットワークの開発」, 瀬川泰知 (2020年度–2021年度).

大幸財団自然科学系学術研究助成, 「革新的構造解析手法に基づく有機半導体材料の開発」, 瀬川泰知 (2020年度–2021年度).

豊秋奨学会研究費助成, 「ナノ構造制御を鍵とする有機超分子繊維材料の開発」, 瀬川泰知 (2020年度–2021年度).

科研費挑戦的研究(萌芽), 「新たな機械的結合の提唱と展開」, 瀬川泰知 (2019年度–2020年度).

科研費基盤研究(B), 「トポロジカル π 共役化学の開拓」, 瀬川泰知 (2019年度–2021年度).

B-11) 産学連携

共同研究, 関東化学(株), 「ゲル化能をもつ湾曲芳香族炭化水素」, 瀬川泰知 (2020年).

C) 研究活動の課題と展望

2020年度は研究グループの立ち上げを行った。新型コロナウイルス感染症の影響で研究室工事が遅延したが、9月より有機合成実験を始めることができた。3次元的な分子設計による特異なトポロジーをもった有機構造体の創製に向けて、本年度は湾曲芳香族炭化水素に関する研究論文の発表を行った。特に、ゲル化能を示す湾曲芳香族炭化水素のナノワイヤー構造を電子回折構造解析で決定したことで、これまで構造決定不可能であったサブマイクロメートルオーダーの有機構造体の合成化学を、電子回折という新たな武器によって強力に推進できることを示した。今後は新たなトポロジーをもつ有機分子や3次元ネットワーク高分子の合成を行い、既存の有機合成の限界を突破した物質創製研究を遂行していく。

6-8 特別研究部門

藤田 誠 (卓越教授) (2018年4月1日着任)

三橋 隆章 (特任助教 (分子科学研究所特別研究員))

CHAN, Kwun Wa (研究員)

ALBERTSMA, Jelco (インターンシップ)

CHEN, Jiazhuo (特別共同利用研究員)

YU, Zhengsu (特別共同利用研究員)

ZHOU, Boyu (特別共同利用研究員)

和田 直樹 (特別共同利用研究員)

影山 洸 (特別共同利用研究員)

JUNG, Youngcheol (特別共同利用研究員)

増田 道子 (事務支援員)

A-1) 専門領域：錯体化学, 有機化学, 超分子化学

A-2) 研究課題：

- a) 結晶スポンジ法を駆使した, 生物の二次代謝に関する研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 我々の錯体化学, 有機化学, 超分子化学に関する基礎研究から生まれた技術の一つに結晶スポンジ法がある。結晶スポンジ法とは, 解析対象化合物を結晶化すること無く, X線結晶構造解析による構造解析を可能とする手法である。本方法を用いることにより, 化合物の構造決定に要する時間が短縮されることや, 既存の構造決定手法では構造決定が困難な化合物の解析が可能になることなどが期待される。本法が大きな役割を果たし得る研究領域の一つとして, 生物の二次代謝に関する研究が挙げられる。生物は, 二次代謝と呼ばれる経路によって様々な複雑化合物を産生するが, これら化合物の構造決定が二次代謝経路に関する研究のボトルネックの一つであった。我々は, 結晶スポンジ法を本研究領域に応用することで, 研究を大きく加速することに取り組んでおり, 実際, 多数の二次代謝由来の化合物について結晶スポンジ法による解析に成功している。

B-1) 学術論文

H. TAKEZAWA, R. TABUCHI, H. SUNOHARA and M. FUJITA, “Confinement of Water-Soluble Cationic Substrates in a Cationic Molecular Cage by Capping the Portals with Tripodal Anions,” *J. Am. Chem. Soc.* **142**, 17919–17922 (2020).

DOI: 10.1021/jacs.0c08835

T. MITSUHASHI, L. BARRA, Z. POWERS, V. KOJASOY, A. CHENG, F. YANG, Y. TANIGUCHI, T. KIKUCHI, M. FUJITA, D. J. TANTILLO, J. A. PORCO JR and I. ABE, “Exploiting the Potential of Meroterpenoid Cyclases to Expand the Chemical Space of Fungal Meroterpenoids,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **59**, 23772–23781 (2020). DOI: 10.1002/anie.202011171

Y. DOMOTO, M. ABE, K. YAMAMOTO, T. KIKUCHI and M. FUJITA, “‘Eggs in Egg Cartons’: Co-Crystallization to Embed Molecular Cages into Crystalline Lattices,” *Chem. Sci.* **11**, 10457–10460 (2020). DOI: 10.1039/D0SC03191G

A. SAITO, T. SAWADA and M. FUJITA, “X-Ray Crystallographic Observation of Chiral Transformations within a Metal–Peptide Pore,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **59**, 20367–20370 (2020). DOI: 10.1002/anie.202007731

Y. TAMURA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, “A Robust Double-Walled Knotted Cage Revealed Guest Binding through Adaptive Portal Expansion,” *Chem. Lett.* **49**, 912–914 (2020). DOI: 10.1246/cl.200282

H. TAKEZAWA, K. SHITAZAWA and M. FUJITA, “Enhanced Reactivity of Twisted Amides Inside a Molecular Cage,” *Nat. Chem.* **12**, 574–578 (2020). DOI: 10.1038/s41557-020-0455-y

Y. MORISHITA, T. SONOHARA, T. TANIGUCHI, K. ADACHI, M. FUJITA and T. ASAI, “Synthetic-Biology-Based Discovery of a Fungal Macrolide from *Macrophomina phaseolina*,” *Org. Biomol. Chem.* **18**, 2813–2816 (2020). DOI: 10.1039/D0OB00519C

Y. TAMURA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, “A Double-Walled Knotted Cage for Guest-Adaptive Molecular Recognition,” *J. Am. Chem. Soc.* **142**, 5504–5508 (2020). DOI: 10.1021/jacs.0c00459

I. MORITA, T. MORI, T. MITSUHASHI, S. HOSHINO, Y. TANIGUCHI, T. KIKUCHI, K. NAGAE, N. NASU, M. FUJITA, T. OHWADA and I. ABE, “Exploiting a C–N Bond Forming Cytochrome P450 Monooxygenase for C–S Bond Formation,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **59**, 3988–3993 (2020). DOI: 10.1002/anie.201916269

Y. INOMATA, T. SAWADA and M. FUJITA, “Metal–Peptide Torus Knots from Flexible Short Peptides,” *Chem* **6**, 294–303 (2020). DOI: 10.1016/j.chempr.2019.12.009

Y. DOMOTO, M. ABE, T. KIKUCHI and M. FUJITA, “Self-Assembly of Coordination Polyhedra with Highly Entangled Faces Induced by Metal–Acetylene Interactions,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **59**, 3450–3454 (2020). DOI: 10.1002/anie.201913142

B-3) 総説, 著書

T. SAWADA and M. FUJITA, “Folding and Assembly of Metal-Linked Peptidic Nanostructures,” *Chem* **6**, 1861–1876 (2020). DOI: 10.1016/j.chempr.2020.07.002

B-6) 受賞, 表彰

藤田 誠, 中日文化賞 (2020).

藤田 誠, クラリベイト栄誉引用賞 (2020).

服部 弘, **Wolfgang Kroutil**, 三橋隆章, 藤田 誠, 令和2年度文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム「秀でた利用成果」優秀賞 (2020).

B-7) 学会および社会的活動

学会誌編集委員

Chemical Science 誌, Editorial Board (2018–).

Acc. Chem. Soc. 誌, Editorial Board (2018–).

B-10) 競争的資金

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

近年, 合成生物学的手法を駆使することで, 遺伝子組み換え生物に新規化合物を生産させることが容易になりつつあり, 医薬品のリード化合物となるような新規有用化合物を探索・取得する方法として期待される。こうした効率的に新規化合物を取得できる手法と, 取得した化合物の構造決定を容易にする結晶スポンジ法を組み合わせることで, 有用化合物の探索源となりうる新規化合物ライブラリーの構築を達成したいと考えている。

木村真一（教授）（2020年4月1日着任）
（クロスアポイントメント；大阪大学大学院生命機能研究科）

石川 あずさ（事務支援員）

A-1) 専門領域：物性物理学，量子ビーム科学

A-2) 研究課題：

- a) 機能性固体・薄膜の電子状態の分光研究
- b) 物質科学に向けた新しい放射光分光法の開発
- c) 新しい量子ビームを使った分析技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 機能性固体・薄膜の電子状態の分光研究：磁性と伝導が複雑に絡み合うことにより新しい機能が現れる固体・薄膜について，低温・高圧・高磁場下の赤外・テラヘルツ分光と高分解能三次元角度分解光電子分光および時間分解分光により，機能性の起源である電子状態を詳細に決定している。また，それらの実験条件に合わせた第一原理電子状態計算を組み合わせることで，機能性固体・薄膜の電子状態の総合的な情報を得ている。
- b) 物質科学に向けた新しい放射光分光法の開発：UVSOR や次世代放射光で用いることを想定した新たな分光法を開発する。特に，電子構造のダイナミクスを可視化することを目標に，新たな光電子分光法と赤外分光法の開発を進めており，物質科学への応用を図る。
- c) 新しい量子ビームを使った分析技術の開発：スピン偏極高輝度電子源を用いた高エネルギー分解能スピン・角度分解共鳴電子エネルギー損失分光法の開発を進めている。

B-1) 学術論文

Y. OHTSUBO, N. TOKUMASU, H. WATANABE, T. NAKAMURA, P. LE FÈVRE, F. BERTRAN, M. IMAMURA, I. YAMAMOTO, J. AZUMA, K. TAKAHASHI and S. KIMURA, “One-Dimensionality of the Spin-Polarized Surface Conduction and Valence Bands of Quasi-One-Dimensional Bi Chains on GaSb(110)-(2×1),” *Phys. Rev. B* **101**, 235306 (8 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevB.101.235306

B-2) 国際会議のプロシーディングス

S. KIMURA, Y. YOKOYAMA, Y. NAKAJIMA, H. WATANABE, J. SICHELSCHEIDT, V. SÜß, M. SCHMIDT and C. FELSER, “Magneto-Optics of the Weyl Semimetal TaAs in the THz and IR Regions,” *JPS Conf. Proc.* **30**, 011017 (5 pages) (2020). DOI: 10.7566/JPSCP.30.011017

B-3) 総説，著書

大坪嘉之，木村真一，伊賀文俊，「トポロジカル近藤絶縁体の表面電子状態——研究の最近の発展——」，*固体物理* **55**, 337–349 (2020).

B-4) 招待講演

木村真一,「トポロジカル近藤絶縁体の表面電子状態」,ワークショップ(4)「超伝導物質,トポロジカル物質」,物質・材料研究機構,つくば,2021年3月.

木村真一,「トポロジカル近藤絶縁体の電子状態」,日本物理学会第76回年次大会,領域8シンポジウム「近藤効果研究の新展開——現代の近藤効果——」,オンライン開催,2021年3月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会評議員(2006–2008.9, 2009.10–2011.9, 2012.10–2014.9, 2015.10–2017.9, 2018.9–2020.9).

UVSOR 利用者懇談会会長(2014.4–2016.3, 2018.4–2020.3, 2020.4–2022.3).

VUV・SX 高輝度光源利用者懇談会会長(2018.4–2020.3).

UVSOR 利用者懇談会世話人(2000.4–2002.3, 2014.4–2016.3, 2018.4–2020.3, 2020.4–2022.3).

VUV・SX 高輝度光源利用者懇談会幹事(2006.4–2008.3, 2008.4–2010.3, 2010.4–2012.3, 2020.4–2022.3).

学会の組織委員等

11th International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources, Chair of Program Committee, Member of Local Committee (Hiroshima, Japan, September 2021).

第34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(広島, 2021.1).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

東京大学放射光連携研究機構物質科学ビームライン課題審査委員会委員(2009.4–2011.3, 2011.4–2013.3, 2017.4–2019.3, 2021.4–2023.3, 委員長(2018.4–2020.3).

UVSOR 課題採択小委員会委員(2002.4–2014.3, 2020.4–2022.3).

分子科学研究所極端紫外光研究施設運営委員会委員(2002.4–2014.3, 2020.4–2022.3).

佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター評価専門委員(2014.4–2016.3, 2016.4–2018.3, 2018.4–2020.3, 2020.4–2022.3).

広島大学放射光科学研究センター協議会委員(2018.4–2020.3, 2020.4–2022.3).

SPring-8/SACLA 成果審査委員会「査読者」(2016.4–2018.3, 2018.4–2020.3, 2020.4–2022.3).

量子科学技術研究開発機構 次世代放射光施設利用研究検討委員会委員(2019.4–2022.3).

佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター評価委員(2020.11–2021.3).

B-8) 大学での講義, 客員

大阪大学理学部,「光物理学」,2020年4月10日–8月7日.

大阪大学大学院理学研究科,「シンクロトロン分光学」,2020年4月10日–8月7日.

大阪大学大学院生命機能研究科,「生体ダイナミクス概論III」,2020年5月12日,19日.

大阪大学大学院生命機能研究科,「基礎物理学実習」,2020年7月13日–17日.

大阪大学全学共通科目,「学問の扉『理系研究生活の基本』」,2020年7月22日.

大阪大学全学共通科目,「学問の扉『放射光とレーザー』」,2020年7月22日.

大阪大学全学共通科目,「力学詳論II」,2020年10月2日–2021年2月12日.

大阪大学理学部物理学科,「先端物理学・宇宙地球科学輪講」,2020年10月23日.

大阪大学大学院生命機能研究科,教授,2013年7月-.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「スピン分解共鳴電子エネルギー損失分光法の確立とスピン量子物性への応用」,木村真一(2020年-2022年).

(公財)光科学技術研究振興財団,「新規内殻共鳴分光法の開発と中間状態の電子状態の検証」,木村真一(2020年-2022年).

(公財)村田学術振興財団,「共鳴電子エネルギー損失分光法による元素選択的バルクプラズモンの観測」,木村真一(2019年-2020年).

C) 研究活動の課題と展望

物質機能の起源である電子構造を明確にすることは、物性の理解を深め、新しい機能性を創りだすのに重要である。そのため、準粒子を観測するための手段として、これまで放射光を使った角度分解光電子分光と赤外・テラヘルツ分光を推進してきた。現在は、準粒子とともに重要な集団励起の観測を行うために、内殻共鳴電子エネルギー損失分光法(rEELS)の開発を進めている。クロスアポイントメントの5年間で、rEELSをスピン分解、角度分解、時間分解に拡張するとともに、スピン・角度分解共鳴逆光電子分光法の開発も行っていく。

高 谷 光 (准教授) (2019 年 12 月 1 日着任)
(クロスアポイントメント; 京都大学化学研究所)

萩原 久代 (事務支援員)

A-1) 専門領域: 有機合成化学, 有機金属化学, ペプチド科学, X線吸収分光

A-2) 研究課題:

- a) X線吸収分光を基盤とする革新触媒の創製
- b) マイクロ波照射による有機反応促進機構の解明
- c) メタル化ペプチド基盤人工酵素を用いる木質バイオマスの循環資源化

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 溶液X線種分光と量子化学計算の融合によって, NMR等の従来の分析手法では困難な常磁性金属錯体触媒のその場観察手法の開発を目的とした研究を推進している。特に UVSOR (BL3U) において, 長坂博士と共同研究を行ない, 酸素や水分に対して敏感な不安定な触媒活性種の溶液軟X線吸収分光法の開発に成功した。具体的には, 鉄錯体触媒を用いるクロスカップリング反応の重要な中間体となるアリーール鉄錯体の有機溶媒溶液中での Fe L 端吸収測定を行うために, 有機溶剤に対して高い耐性を持つピーク樹脂製のフローセルを開発し, このセルに有機溶媒溶液の送液に伴い発生する静電気を除去するためにアースされた金蒸着 SiN 窓材を用いることで, フロー条件下で長時間安定して Fe L 端スペクトルの積算を行うことに成功した。本法では, 常に新鮮なサンプル溶液が供給されるため, 軟X線によるサンプルダメージを最小限に抑えることが可能である。また, フローリアクタを接続することで, 実際の反応に用いる試薬と触媒を流路内で反応させ, 系中に生成する触媒活性種のその場観察が可能となる。2020年度では, 別途調製・単離精製した触媒中間体を用いた溶液軟X線分光を行ったが, 2021年度では, フローリアクタの設計・製造と, これを用いた均一系錯体触媒の *in situ* 軟X線分光について詳細な検討を行いたい。
- b) マイクロ波照射化学合成は, 電熱ヒータ等の従来型の通常熱源を用いる反応と比べて, 1/10程度のエネルギー消費量で, 最大1000倍にも達する反応加速効果が得られること, 反応物質や触媒選択加熱による反応制御によって所望の物質のみを高選択的に合成できる優れた特徴を有する。しかしながら, この様な加速現象の発見から30年以上が経過した現在でも, マイクロ波照射によって化学反応が加速される分子科学的な機序は明らかになっていない。我々は, マイクロ波による反応加速現象の学理解明を目的として, 2020年度より分子研(田中, 長坂)と核融合研(加藤, 村上)の融合研究を立上げ, マイクロ波照射下における化学反応のその場観察と分子動力学・QM/MMによる分子挙動のシミュレーションについて基礎検討を行っている。2020年度は, コロナのためにマイクロ波装置の製造が遅れたが, UVSORの赤外/THzビームライン(BL1B/BL6B)の光学系に挿入できるマイクロ波反応装置の開発に成功した。加藤, 村上らとは軟X線スペクトル解析のため内核励起計算法について基礎検討を行った
- c) 木質バイオマスはリグニン, セルロース, ヘミセルロースを主成分とする夾雑な生体分子である。我々は, リグニンおよびセルロースを認識するペプチドと金属触媒を結合した人工酵素を開発し, これを用いて木質夾雑系からのリグニン/セルロース選択的な分子変換法の開発に取り組んでいる。2020年度には, リグニン認識能を有する12残基ペプチドに高い酸化能を有する Ru 錯体触媒を結合した人工酵素の合成に成功した。また, 蛍光異方性測定と分子動力学計算によってペプチドのリグニン認識においてペプチド残基とリグニン水酸基および芳香族骨格の水素結合

と CH/ π 型相互作用が支配的であることを明らかにした。2021 年度では、分子動力学計算によるリグニン認識機構について検討を行いたい。

B-1) 学術論文

Y. KANAZAWA, T. MITSUDOME, H. TAKAYA and M. HIRANO, “Pd/Cu-Catalyzed Dehydrogenative Coupling of Dimethyl Phthalate: Synchrotron Radiation Sheds Light on the Cu Cycle Mechanism,” *ACS Catal.* **10**, 5909–5919 (2020). DOI: 10.1002/chem.202001438

T. KIMURA, S. MIYAGAWA, H. TAKAYA, M. NAITO and Y. TOKUNAGA, “Locking the Dynamic Axial Chirality of Biphenyl Crown Ethers through Threading,” *Chem. –Asian. J.* **15**, 3897–3903 (2020). DOI: 10.1002/asia.202001046

B-3) 総説, 著書

H. TAKAYA, “Mechanistic Studies on Microwave-Assisted Organic Reactions,” *Chemistry and Chemical Engineering* **73(3)**, 230–231 (2020). (in Japanese)

B-4) 招待講演

H. TAKAYA, “Recent Advances in Microwave-Assisted Organic Reactions,” 100th CSJ Meeting, Noda (Japan), March 2020.

H. TAKAYA, “Microwave-Assisted Organic Synthesis in Medicinal Chemistry,” Nihon Medi-Physics Co., Tokyo (Japan), February 2020.

H. TAKAYA, “DFT-XAS-Based Mechanistic Study on Homogeneous Transition-Metal Catalysis,” Special Lecture in IMS Organometallic Division, Okazaki (Japan), August 2020.

H. TAKAYA, “Microwave-Assisted Organic Reactions,” 433th RISH Symposium on Recent Advances on Microwave Technology, Japan (online), October 2020.

H. TAKAYA, “Recent Advances in Microwave-Assisted Organic Synthesis,” 101th CSJ Meeting, Japan (online), March 2021.

H. TAKAYA, “DFT-XAS-Based Mechanistic Study on Homogeneous Catalysis,” 58th SPring-8 Cutting-Edge Spectroscopic Analysis on Recent Advances High-Resolution X-Ray Fluorescence Spectroscopy, Japan (online), March 2021.

B-5) 特許出願

JP2020-016437, “Synthesis of Asymmetric Diaryl Amines,” M. NAKAMURA, H. TAKAYA, H. KAWASAKI and S. NISHIDA (Kyoto University), 2020.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

SPring-8 利用推進懇談会「SPring-8 先端放射光技術による化学イノベーション研究会」代表 (2017–2021).

学会の組織委員等

日本化学会春季年会 ATP 企画委員 (2015–2021).

日本化学会第 101 春季年会 ATP 企画 TIC 「インフォマティクスで変わる化学合成」幹事 (2021).

日本化学会第101春季年会特別企画「化学者のための放射光ことはじめ——微小単結晶・粉末・非晶質X線構造解析の基礎と応用」代表幹事(2021).

日本学術振興会産学協力研究委員会「電磁波励起反応場R024委員会」幹事委員(2018–2021).

学会誌編集委員

日本電磁場エネルギー応用学会機関誌編集委員(2019–2021).

B-8) 大学での講義, 客員

京都大学工学部工業化学科,「有機化学II」,2020年1月.

京都大学工学部工業化学科,「有機分光学」,2020年4月–8月.

京都大学大学院工学研究科化学系専攻,「先端有機化学」,2020年4月–8月.

京都大学大学院工学研究科化学系専攻,「物質変換化学」,2020年4月–8月.

B-10) 競争的資金

自然科学研究機構分野融合型共同研究事業,「マイクロ波による化学反応促進機構の解明」,高谷 光(2020年–2021年).

増屋記念基礎研究振興財団2020年度研究助成,「マイクロ波–光創発による未活用バイオマスの循環資源化」,高谷 光(2020年).

B-11) 産学連携

共同研究,日本メジフィジクス(株),「 α 線放出型がん治療薬の開発」,高谷 光(2020年).

共同研究,(株)ダイセル,「マイクロ波を用いるセルロース高度変換プロセスの開発」,高谷 光(2018年–2020年).

共同研究,(株)マンダム,「アミノ酸・ペプチド基盤毛髪改質剤の開発」,高谷 光(2018年–2020年).

共同研究,JXTG エネルギー(株),「鉄系重合触媒のXAFSによる系中解析」,高谷 光(2018年–2020年).

共同研究,抗菌化研(株),「アミン酸を含む銀抗菌剤の分析と開発」,高谷 光(2017年–2020年).

C) 研究活動の課題と展望

XAS 研究においては,触媒と反応基質を混合・反応させて任意のタイミングでXAS 測定が行えるフローリアクタの開発と,これを用いる均一系触媒反応機構に関する研究,およびマイクロ波照射下におけるin situ 反応解析に必要な溶液分光セルおよびUVSORの軟X線光源に挿入可能なマイクロ波反応装置の開発に注力した研究を行なう。また,これらXAS 測定から得られたスペクトルを用いた構造解析のために溶媒を含めた触媒活性種,反応機構解析のためにQM/MM による内核励起スペクトルシミュレーションに取り組む。

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)

(クロスアポイントメント; 理化学研究所放射光科学研究センター)

佐野 雄二 (特命専門員)

竹家 啓 (特任研究員)

YAHIA, Vincent (特任研究員)

LIM, Hwanhong (特任研究員)

KAUSAS, Arvydas (特任研究員)

石月 秀貴 (特別訪問研究員)

佐藤 庸一 (特別訪問研究員)

松田 美帆 (技術支援員)

小林 純 (技術支援員)

水嶋 一彦 (技術支援員)

小野 陽子 (事務支援員)

稲垣 弥生 (事務支援員)

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ンニクスの展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

分子科学に関連して重要な波長域にレーザーの高輝度光を展開する為の固体レーザー, 非線形波長変換法につき包括的な研究を進めている。特には近年のマイクロ固体フォトンニクス [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, 新たなフォトン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ンクスで実証した。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

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, "Polarity Inversion of Crystal Quartz Using a Quasi-Phase Matching Stamp," *Opt. Express* **28**, 6505–6510 (2020). DOI: 10.1364/OE.386991

F. CASSOURET, A. KAUSAS, V. YAHIA, G. AKA, P. LOISEAU and T. TAIRA, "High Peak-Power Near-MW Laser Pulses by Third Harmonic Generation at 355 nm in Ca₅(BO₃)₃F Nonlinear Single Crystals," *Opt. Express* **28**, 10524–10530 (2020). DOI: 10.1364/OE.384281

O. SAITO, E. SEN, Y. OKABE, N. HIGUCHI, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, "Laser Wavelengths Suitable for Generating Ultrasonic Waves in Resin-Coated Carbon Fiber Composites," *ASME J. Nondestructive Evaluation* **3**, 031103 (11 pages) (2020). DOI: 10.1115/1.4046719

K. TAMURA, H. OHBA, M. SAEKI, T. TAGUCHI, H. H. LIM, T. TAIRA and I. WAKAIDA, "Development of a Laser-Induced Breakdown Spectroscopy System Using a Ceramic Micro-Laser for Fiber-Optic Remote Analysis," *J. Nucl. Sci. Technol.* **57**(10), 1189–1198 (2020). DOI: 10.1080/00223131.2020.1776648

Y. SANO, "Quarter Century Development of Laser Peening without Coating," *Metals* **10**, 152 (11 pages) (2020). DOI: 10.3390/met10010152

Y. SANO, K. AKITA and T. SANO, "A Mechanism for Inducing Compressive Residual Stresses on a Surface by Laser Peening without Coating," *Metals* **10**, 816 (12 pages) (2020). DOI: 10.3390/met10060816

S. TOKITA, H. KOKAWA, S. KODAMA, Y. S. SATO, Y. SANO, Z. LI, K. FENG and Y. WU, “Suppression of Intergranular Corrosion by Surface Grain Boundary Engineering of 304 Austenitic Stainless Steel Using Laser Peening Plus Annealing,” *Mater. Today Commun.* **25**, 101572 (7 pages) (2020). DOI: 10.1016/j.mtcomm.2020.101572

鷺坂芳弘, 川崎泰介, **V. YAHIA**, 平等拓範, 佐野雄二, 「サブナノ秒マイクロチップレーザーによるレーザーピーンフォーミングの変形特性」, *塑性と加工 (日本塑性加工学会論文誌)* **62**, 8–13 (2021). DOI: 10.9773/sosei.62.8

Y. SATO and T. TAIRA, “Study on the Specific Heat of $Y_3Al_5O_{12}$ between 129 K and 573 K,” *Opt. Mater. Express* **11**, 551–558 (2021). DOI: 10.1364/OME.416480

B-2) 国際会議のプロシーディングス

H. H. LIM and T. TAIRA, “H>27 MW Peak Power Doughnut Mode Nd:YAG Microchip Laser,” *LASE, SPIE Photonics West 2020*, 11259-70 (2020).

T. KAWASAKI, V. YAHIA and T. TAIRA, “Sub-Ns Pulse Shaping of Microchip Laser Under Amplification,” *LASE, SPIE Photonics West 2020*, 11259-23 (2020).

Y. SATO and T. TAIRA, “Difference Between Experimental Value and Debye-Model in the Specific Heat of $Y_3Al_5O_{12}$,” *The 9th Advanced Lasers and Photon Sources Conference (ALPS2020), OPIC2020, ALPSp-02* (2020). (Online)

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics Toward Tiny Integrated Power Lasers,” *The 9th Advanced Lasers and Photon Sources Conference (ALPS2020), OPIC2020, ALPS5-02* (2020). (Online)

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Characterization of QPM Quartz Device Fabricated by a Stamp Method,” *The 9th Advanced Lasers and Photon Sources Conference (ALPS2020), OPIC2020, ALPS15-05* (2020). (Online)

H. OHBA, K. TAMURA, R. NAKANISHI, M. SAEKI, H.H. LIM, T. TAIRA, K. AKAOKA and I. WAKAIDA, “Rare Earth Elements Detection in Mixed Oxide Using a Fiber Optic LIBS with a Ceramic Micro-Laser,” *11th International Conference on Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS 2020)*, P2-10 (2020). (Online)

A. KAUSAS, R. ZHANG, X. ZHOU, Y. HONDA, M. YOSHIDA and T. TAIRA, “Room Temperature 2J Laser Amplifier with Direct Bonded DFC Chip,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid State Lasers (ASSL), OSA Laser Congress 2020, ATu2A.2* (2020). (Online)

T. TAIRA, “Microchip Lasers,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid State Lasers (ASSL), OSA Laser Congress 2020, JTu7A.1* (2020). (Online) (Tutorial)

H. H. LIM and T. TAIRA, “High-Brightness Unstable Cavity Nd:YAG/Cr⁴⁺:YAG Microchip Laser,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid State Lasers (ASSL), OSA Laser Congress 2020, JTh6A.9* (2020). (poster) (Online)

V. YAHIA and T. TAIRA, “Investigation on Gain Aperture as a Compact Tool for Spatial Beam Shaping,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid State Lasers (ASSL), OSA Laser Congress 2020, JTh6A.10* (2020). (poster) (Online)

K. TAKEYA, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Quantitative Evaluation of Birefringence of Quartz Crystal in Terahertz Region,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid State Lasers (ASSL), OSA Laser Congress 2020, JTh6A.20* (2020). (poster) (Online)

Y. SATO and T. TAIRA, “Specific Heat of $Y_3Al_5O_{12}$ Under Cryogenic and Room Temperature Conditions,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid State Lasers (ASSL), OSA Laser Congress 2020, JTh6A.21* (2020). (poster) (Online)

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics Toward Table-Top XFEL,” *Ceramic and Crystal Materials for Optics and Photonics-Session II, Materials Science & Technology 2020 (MS&T20)*, November 2-6 (2020). (Invited) (Online)

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Stamp Method for QPM Quartz Fabrication,” *Mid-Infrared Coherent Sources (MICS)*, MTu3C.1 (2020). (Online)

T. TAIRA, “Opening Remarks,” *LASE Plenary and Hot Topics I and II, SPIE Photonics West 2021*, 6–11 (2021). (Invited) (Online)

H. H. Lim and T. TAIRA, “Life-Time Evaluation of Monolithic >MW Peak Power Nd:YAG/Cr:YAG Ceramic Microchip Lasers,” *LASE, SPIE Photonics West 2021*, 11664-16 (2021). (Online)

B-3) 総説, 著書

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).

平等拓範, 「マイクロドメイン制御による小型集積パワーレーザー」, *協会誌セラミックス* **55**, 113–116 (2020).

平等拓範, 「レーザの開発と加工への応用展開」, *説苑, FORM TECH REVIEW 2019* **29**, 63–64 (2020).

大場弘則, 若井田育夫, 平等拓範, 「過酷環境下での遠隔レーザー分析技術」, *日本原子力学会誌* **62**, 263–267 (2020).

平等拓範, 「マイクロ固体フォトニクスによる小型集積レーザー——ビッグサイエンスから社会実装にわたるイノベーション“ジャイアント・マイクロフォトニクス”に向けて——」, *応用物理* **90**, 155–161 (2021).

H. H. LIM and T. TAIRA, “Life-Time Evaluation of Monolithic >MW Peak Power Nd:YAG/Cr:YAG Ceramic Microchip Lasers,” *Proc. of SPIE*, 116640L (6 pages) (2021). DOI: 10.1117/12.2578393

B-4) 招待講演

平等拓範, 「進化するレーザーと自動車・移動体応用」, レーザー学会学術講演会第40回年次大会, 仙台, 2020年1月.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics Toward Tiny Integrated Power Lasers,” The 9th Advanced Lasers and Photon Sources Conference (ALPS2020), OPIC2020, Yokohama (Japan) (Online), April 2020.

平等拓範, 「バーチャル見学会:プロモーションビデオと併用【SPRING-8】→【SACLA】→【レーザー加速プラットフォーム】」, 光産業技術振興協会, 2020年度多元技術融合光プロセス研究会第2回研究交流会, オンライン開催, 2020年9月.

平等拓範, 「マイクロフォトニクスの自動車応用——点火, 加工, 計測など——」, 日本光学会, 第27回レーザーディスプレイ技術研究会, オンライン開催, 2020年9月.

平等拓範, 「レーザー科学と革新にかかる光源に関する考察」, 日本光学会, 光エレクトロニクス産学連携専門委員会, 第321回研究会「光エレクトロニクスの将来」, オンライン開催, 2020年10月.

T. TAIRA, “Microchip lasers,” OSA Topical Meeting on Advanced Solid State Lasers (ASSL), OSA Laser Congress 2020, Online, October 2020. (Tutorial)

平等拓範, 「マイクロフォトニクスによるチップレーザー—これからの30年」, 光産業技術振興協会, 研究会設立30周年記念行事2020年度第3回光材料・応用技術研究会, オンライン開催, 2020年11月.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics Toward Table-Top XFEL,” *Ceramic and Crystal Materials for Optics and Photonics-Session II, Materials Science & Technology 2020 (MS&T20)*, Online, November 2020.

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94回レーザ加工学会講演会, オンライン開催, 2020年11月.

平等拓範,「ジャイアント・マイクロフォトニクスによる高出力極限固体レーザー」, 超高速光エレクトロニクス時限研究専門委員会, 超高速光エレクトロニクス (UFO) 研究会第5回研究会, オンライン開催, 2020年12月.

平等拓範,「ロボット適用マイクロフォトニクスによる小型集積レーザー」, レーザー学会学術講演会第41回年次大会, オンライン開催, 2021年1月.

平等拓範,「マイクロフォトニクスによるレーザー駆動電子加速光源」, レーザー学会学術講演会第41回年次大会, オンライン開催, 2021年1月.

吉田光宏, 張 勳, 周翔宇, 平等拓範, 石月秀貴, A. KAUSAS, 佐藤庸一, V. YAHIA, 辻 明宏,「マイクロフォトニクスを利用したKEKにおける高出力パルスレーザー開発・レーザー加速研究」, レーザー学会学術講演会第41回年次大会, オンライン開催, 2021年1月.

平等拓範,「国際会議Photonics West 2021 報告」, 光産業技術振興協会, 第4回光材料・応用技術研究会, オンライン開催, 2021年3月.

平等拓範,「マイクロチップレーザーの開発および展開」, 日本非破壊検査協会, 2020年度第2回先進超音波計測に関する萌芽技術研究会, オンライン開催, 2021年3月.

T. TAIRA, “Opening Remarks,” LASE Plenary and Hot Topics I and II, SPIE Photonics West 2021, Online, March 2021.

B-5) 特許出願

特願 2020-044709,「光発振器, 光発振器の設計方法およびレーザー装置」, 平等拓範, LIM, Hwan Hong (自然科学研究機構), 2020年.

特願 2021-008025,「光学素子, 光学装置, および, 光学素子の製造方法」, 平等拓範 (自然科学研究機構), 2021年.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

レーザー学会研究会委員 (1999-).

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-).

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-).

米国光学会 The Optical Society (OSA) フェロー (2010-).

国際光工学会 The International Society for Optical Engineering (SPIE) (米国) フェロー (2012-).

米国光学会 The Optical Society (OSA) 評議員 (Council, Board of Meeting) (2014-).

米国電気電子学会 The Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE) フェロー (2014-).

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

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).

Advanced Solid State Laser Conference (ASSL'20), 国際会議プログラム委員会委員 (Materials Program Committee) (2020).

SPIE, SPIE Laser Award 委員 (米国, ベリンハム) (2020).

CLEO/Europe 2021, Solid-State Lasers, 国際会議分科委員 (ドイツ, ミュンヘン) (2020–2021).

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–).

日本学術振興会接合界面創成技術第191委員会委員 (2017–).

B-8) 大学での講義, 客員

大阪大学, 「Micro Solid-State Photonics (1)(2)—Introduction of Lasers—」, 2020年6月1日, 3日.

光産業創成大学院大学, 客員教授, 2020年7月–.

B-10) 競争的資金

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」 (代表: 神戸大学和氣弘明), 平等拓範 (再委託) (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」 (代表: 公益財団法人高輝度光科学研究センター熊谷孝), 平等拓範 (再委託) (2017年–2026年).

文部科学省平成30年度科学技術試験研究委託事業 (Q-LEAP) 「先端レーザーイノベーション拠点「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」部門」, 「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」 (②a.10KHz 赤外OPCPA光源の開発), 再委託 (東京大学), 平等拓範 (2018年–2027年).

中小企業経営支援等対策費補助金 戦略的基盤技術高度化支援事業 (サポイン), 「狭隘部への適用が可能な可搬型レーザーピーニング装置の開発」 (事業管理機関: 公益財団法人名古屋産業科学研究所, 総括研究代表者: LAcubed), 平等拓範 (副総括研究代表者), (2020年–2022年).

安全保障技術研究推進制度, 「ジャイアント・マイクロフォトンクスによる高出力極限固体レーザー」, 平等拓範 (2020年–2024年).

B-11) 産学連携

(株)コンボン研究所, 「マイクロ固体フォトンクスの基礎研究」, 平等拓範 (2020年).

(株)村田製作所, 「水晶波長変換デバイスの研究」, 平等拓範 (2020年).

東海光学(株), 「高出力密度レーザー材料に適した表面処理法の開発」, 平等拓範 (2020年).

(株)ユニタック, 「超小型皮膚疾患用レーザー治療器の開発」, 平等拓範 (2020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。

6-10 研究施設等

機器センター

湊 文 俊（主任研究員）（2020年6月1日着任）

兵藤 由美子（事務支援員）

A-1) 専門領域：表面界面科学，エネルギー変換，物理化学

A-2) 研究課題：

- a) 走査プローブ顕微鏡の高度化と物性・反応機構の解明
- b) 表面界面におけるエネルギー変換の機構解明
- c) 環境浄化反応の材料物性と反応機構解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 大気中，光照射状態，磁場印加状態，または高低温状態，高低湿状態，液中，電気化学反応中などの様々な反応環境において，表面や界面の形状，機械特性，電気特性，電子状態などを解析できる新しい走査プローブ顕微鏡を，杉本敏樹准教授，上田正技術職員らと共に，立ち上げ稼働させた。電極／電解液界面の解析のために，走査プローブ顕微鏡のカンチレバーの振動振幅や減衰信号などから界面分子分布や粘性を解析するシステムを構築した。また，高感度検出のために，周波数変調システムを導入し，光学系と組み合わせることで，光誘起の電子状態変化やナノ構造体の誘起力などを検出した。また，走査プローブ顕微鏡像から新しい情報を取り出す方法として，走査プローブ顕微鏡像の画像の特徴を認識し，抽出する方法を構築した。この技術を，得られた走査プローブ顕微鏡像に適用し，局所的な特徴を初めて明らかにすることに成功している。
- b) 本課題は，電極と電解質の界面の状態を解析し制御することで，エネルギー変換反応を促進させる方法を見出すことを目的としている。電極と電解液の界面には，空間電荷層や電気二重層など界面特有の状態が生成し，エネルギー変換反応に対して大きな影響を与えている。これらの界面の状態を解析し，界面設計することで反応を促進させる。本年度は，a)に記載した振動振幅や減衰信号などから界面の分子分布や粘性を解析するシステムを用いて，金属電極と電解液の界面の状態を解析した。また，電極表面で進行する電気化学反応量をマッピングし，電極表面組成や構造などの界面状態と反応量の相関を解析した。
- c) 東日本大震災によって被災した福島第一原子力発電所からは，大量の放射性汚染水が発生している。これまで吸着材を用いた除染作業が行われているが，より高性能かつ安価な材料の開発が強く望まれている。本研究では，開発を進める新しい吸着材について，材料表面や反応液との界面における構造，電子状態などの物性や反応機構を解析する。本研究は，信州大学，東北大学，Diamond Light Source（英国），The University of Sheffield（英国）との国際共同研究であり，日本原子力研究開発機構英知事業の国際協力型廃炉研究プログラム（日英）として2020年から開始している。本年度は，吸着材となる金属酸化物のナノ構造や電子状態が調製条件によって変化する様子を解析し，吸着性能との相関を明らかとした。また，吸着反応によって構造や電子状態が変化する様子を解析した。さらに，得られた顕微鏡やスペクトルデータの特徴解析による詳細な解析を進めている。

B-1) 学術論文

H. NAKANO, T. MATSUNAGA, T. MORI, K. NAKANISHI, Y. MORITA, K. IDE, K.-I. OKAZAKI, Y. ORIKASA, T. MINATO, K. YAMAMOTO, Z. OGUMI and Y. UCHIMOTO, “Fluoride-Ion Shuttle Battery with High Volumetric Energy Density,” *Chem. Mater.* **33**, 459–466 (2021). doi: 10.1021/acs.chemmater.0c04570

M. KAWASAKI, K.-I. MORIGAKI, G. KANO, H. NAKAMOTO, T. MINATO, R. TAKEMOTO, J. KAWAMURA, T. ABE and Z. OGUMI, “Lactone-Based Liquid Electrolytes for Fluoride Shuttle Batteries,” *J. Electrochem. Soc.* **168**, 010529 (10 pages) (2021). doi: 10.1149/1945-7111/abdaff

K. UMEDA, K. KOBAYASHI, T. MINATO and H. YAMADA, “Molecular-Scale Solvation Structures of Ionic Liquids on a Heterogeneously Charged Surface,” *J. Phys. Chem. Lett.* **19**, 8094–8099 (2020). doi: 10.1021/acs.jpcclett.0c02356

A. C. KUCUK, T. YAMANAKA, T. MINATO and T. ABE, “Influence of LiBOB as an Electrolyte Additive on the Performance of BiF₃/C for Fluoride Shuttle Batteries,” *J. Electrochem. Soc.* **167**, 120508 (2020). doi: 10.1149/1945-7111/abaa18

H. KONISHI, R. TAKEKAWA, T. MINATO, Z. OGUMI and T. ABE, “Effect of Anion Acceptor Added to the Electrolyte on the Electrochemical Performance of Bismuth(III) Fluoride in a Fluoride Shuttle Battery,” *Chem. Phys. Lett.* **755**, 137785 (5 pages) (2020). doi: 10.1016/j.cplett.2020.137785

K. UMEDA, K. KOBAYASHI, T. MINATO and H. YAMADA, “Atomic-Scale Three-Dimensional Local Solvation Structures of Ionic Liquids,” *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 1343–1348 (2020). doi: 10.1021/acs.jpcclett.9b03874

Y. TAKABAYASHI, K. KIMURA, S. KAWAUCHI, H. NAKAMOTO, H. KONISHI, A. C. KUCUK, T. MINATO, S. FUJINAMI, T. NAKATANI, H. KIUCHI, R. TAKEKAWA, T. ABE and K. HAYASHI, “X-Ray Total Scattering of Electrolytes in Liquid-Based Fluoride Shuttle Battery: Electrolyte Composition Dependence of the Low-Q Peak,” *Phys. Status Solidi B* **257**, 2000202 (6 pages) (2020). doi: 10.1002/pssb.202000202

H. KONISHI, T. MINATO, T. ABE and Z. OGUMI, “Electrochemical performance of BiF₃-BaF₂ Solid Solution with Orthorhombic, Hexagonal, and Cubic Phases on a Fluoride Shuttle Battery System,” *ChemistrySelect* **5**, 4943–4946 (2020). doi: 10.1002/slct.202000713

H. KONISHI, T. MINATO, T. ABE and Z. OGUMI, “Reactivity of the Electrolyte Anion Acceptor: An Important Factor in Achieving High Electrochemical Performance of a Lead (II) Fluoride Electrode in a Fluoride Shuttle Battery,” *J. Electroanal. Chem.* **871**, 114103 (2020). doi: 10.1016/j.jelechem.2020.114103

B-3) 総説, 著書

湊 丈俊, 「走査プローブ顕微鏡による二酸化チタン表面の欠陥の物性解明と反応解析」, *触媒* **62**, 15–21 (2020).

B-4) 招待講演

T. MINATO, “Interface Analysis during the Energy Conversion by Scanning Probe Microscopy,” Asian International Symposium in the 101th Chemical Society of Japan Annual Meeting, International Symposium on Molecular Science Cosponsored by Japan Society for Molecular Science, online, March 2021.

T. MINATO, “Mechanism of Energy Conversion at Electrode/Electrolyte Interface in Rechargeable Batteries,” 28th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy, online, December 2020.

T. MINATO, “Electrode/Electrolyte Interface in Rechargeable Battery,” Asian International Symposium in the 100th Chemical Society of Japan Annual Meeting, International Symposium on Molecular Science Cosponsored by Japan Society for Molecular Science, March 2020. (The meeting was cancelled by the influence of Covid-19 Coronavirus. The presentation was conducted.)

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会領域運営委員 (2019–2020).

学会の組織委員等

日本物理学会領域 10 格子欠陥・ナノ構造分科第 30 回格子欠陥フォーラム (分子研後援事業) 実行委員 (2020).

その他

出前授業「サイエンスセミナー『科学者の役割』」(岡崎市立六ッ美北中学校) (2020).

B-10) 競争的資金

日本原子力研究開発機構「英知を結集した原子力科学技術・人材育成推進事業」, 「国際協力型廃炉研究プログラム」, 「革新的水質浄化剤の開発による環境問題低減化技術の開拓」(代表: 浅尾直樹(教授) 信大/日本, Joseph Hriljac (Science Group Leader) Diamond Light Source / 英), 湊 丈俊(分担) (2020年–2023年).

中村 敏 和 (チームリーダー)

B-1) 学術論文

- S. KITOU, T. TSUMURAYA, H. SAWAHATA, F. ISHII, K. HIRAKI, T. NAKAMURA, N. KATAYAMA and H. SAWA**, “Ambient Pressure Dirac Electron System in Quasi-Two-Dimensional Molecular Conductor α -(BETS)₂I₃,” *Phys. Rev. B* **103**, 035135 (8 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.103.035135
- E. ITO, S. TAKANO, T. NAKAMURA and T. TSUKUDA**, “Dimerization and Bonding of Icosahedral M@Au₁₂ (M = Pd, Pt) Superatoms,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **160**, 645–649 (2021). DOI: 10.1002/anie.202010342
- A. ROHWER, M. DRESSEL and T. NAKAMURA**, “Deuteration Effects on the Transport Properties of (TMTTF)₂X Salts,” *Crystals* **10**, 1085 (18 pages) (2020). DOI: 10.3390/cryst10121085
- S. KITOU, Y. HOSOGI, R. KITAURA, T. NAITO, T. NAKAMURA and H. SAWA**, “Direct Observation of Molecular Orbitals Using Synchrotron X-Ray Diffraction,” *Crystals* **10**, 998 (14 pages) (2020). DOI: 10.3390/cryst10110998
- H. HIRAI, S. TAKANO, T. NAKAMURA and T. TSUKUDA**, “Understanding Doping Effects on Electronic Structures of Gold Superatoms: A Case Study of Diphosphine-Protected M@Au₁₂ (M = Au, Pt, Ir),” *Inorg. Chem.* **59**, 17889–17895 (2020). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.0c00879
- S. KITOU, T. MANJO, N. KATAYAMA, T. SHISHIDOU, T. ARIMA, Y. TAGUCHI, Y. TOKURA, T. NAKAMURA, T. YOKOYAMA, K. SUGIMOTO and H. SAWA**, “Collapse of the Simple Localized 3d¹ Orbital Picture in Mott Insulator,” *Phys. Rev. Res.* **2**, 033503 (8 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.2.033503
- K. GOTO, M. ASADA, T. NAKAMURA and F. TANI**, “Switching Photomechanical Response by Structural Phase Transition and Evaluating Responsivity from Relaxation,” *ChemPhotoChem* **4**, 1–73 (2020). DOI: 10.1002/cptc.201900269

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

- T. NAKAMURA**, “Magnetic Resonance Investigation of One-dimensional Organic Conductors,” The 5th International Symposium of Quantum Beam Science (ISQBS), Ibaraki Univ. (Japan) and Online, November 2021.
- T. NAKAMURA**, “ESR Investigation of Functional Molecular Magnetic Materials,” Modern Development of Magnetic Resonance 2020, Zavoisky Physical-Technical Institute (Russia) and Online, September 2021.*

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

電子スピンスイエンズ学会代議員 (2018–).

学会の組織委員等

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

国立研究開発法人科学技術振興機構 創発的研究支援事業 外部専門家 (2020).

その他

「化学便覧 基礎編 改訂6版 日本化学会編集」, 篠原久典他(編), 丸善, 編集委員 (2020). ISBN 978-4-621-30521-8

鈴木 敏 泰 (チームリーダー)

B-1) 学術論文

T. INOUE, M. SHIBUTA, T. SUZUKI and A. NAKAJIMA, “Occupied and Unoccupied Levels of Half-Fluorinated and Perfluorinated Rubrene Thin Films Probed by One- and Two-Photon Photoemission,” *J. Phys. Chem. C* **124**, 12409–12416 (2020). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c01162

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) 次期 ORION（Okazaki Research Institutes Organization Network）である ORION2022 の構築に向け，Google Workspace 等のクラウドサービス利用を前提とした統合的なシステム開発を行っている。従来のようなファイヤーウォールの内側と外側といった境界の無いゼロトラスト環境下において運用管理性，利便性及び情報セキュリティをバランスさせるかが課題となっている。その中で認証と認可及び端末の健全性が最重要であり，これらの自動的な監視及び検証システム開発に取り組んでいる。現在は現行システムである ORION2017 上でプロトタイプを開発し評価を行っている。また，テレワーク環境構築と運用に関して研究会での発表を行っている。
- b) ORION2017 で基本的なセキュリティ対策は行っているが，複雑高度化する情報セキュリティに十分対応出来なくなってきた。そこで，昨年度整備されたシステムログの集中管理・解析基盤を用いた自動解析による定型業務フローの自動化に取り組んでいる。また，新たな認証システムの開発を行っている。

C) 研究活動の課題と展望

テレワーク及びGoogle Workspace 等のクラウドサービス利用拡大などによる境界の無いゼロトラスト環境への対応が課題となっている。さらに，近年いわゆるDXの推進など情報セキュリティとIT化，利便性の向上要求とのバランスをとり制御可能な体制構築が必須となっている。その為，ユーザや端末の認証と認可及び証跡がきわめて重要となると共にデータが生成処理されるユーザ端末の健全性確保が要求される。ORION2022構築に向け，クラウド等ORION外部のサービスを含んだ統合型ユーザ／端末管理・認証基盤の開発，現在のログ解析基盤を拡張発展させクラウド・ログを取り込みORIONとクラウドの一貫した取扱と分析を可能とする情報セキュリティ・インシデント対応基盤やそれらを統合し自動制御するシステムの開発が必要であり，現在ORION2022の仕様化と調達を行っている。今後は，ORION2022に向けたプロトタイプ開発，本番環境構築及び運用について詳細な検討と実施を行っていく。

技術課及び安全衛生管理室

B-1) 学術論文

S. KOSUGI, N. SUZUKI, N. KUMAGAI, H. IWAYAMA, E. SHIGEMASA, F. KOIKE and Y. AZUMA, “Dominance of Angular Momentum Exchange in the PCI Recapture of Photoelectrons Revealed by High Resolution Auger Electron Measurements of Kr,” *J. Phys. B* **52**, 245002 (6 pages) (2019).

A. FERTÉ, J. PALAUDOUX, F. PENENT, H. IWAYAMA, E. SHIGEMASA, Y. HIKOSAKA, K. SOEJIMA, K. ITO, P. LABLANQUIE, R. TAÏEB and S. CARNIATO, “Advanced Computation Method for Double Core Hole Spectra: Insight into the Nature of Intense Shake-up Satellites,” *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 4359–4366 (2020).

M. NAGASAKA, H. YUZAWA and N. KOSUGI, “Microheterogeneity in Aqueous Acetonitrile Solution Probed by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. B* **124**, 1259–1265 (2020).

M. ITO, N. TOMIOKA, K. UESUGI, M. UESUGI, Y. KODAMA, I. SAKURAI, I. OKADA, T. OHIGASHI, H. YUZAWA, A. YAMAGUCHI, N. IMAE, Y. KAROUJI, N. SHIRAI, T. YADA and M. ABE, “The Universal Sample Holders of Microanalytical Instruments of FIB, TEM, NanoSIMS, and STXM-NEXAFS for the Coordinated Analysis of Extraterrestrial Materials,” *Earth, Planets Space* **72**, 133 (11 pages) (2020).

T. SAISOPA, K. KLAIPHET, P. SONGSIRIRITTHIGUL, W. POKAPANICH, S. TANGSUKWORAKHUN, C. SONGSIRIRITTHIGUL, C. SAIYASOMBAT, Y. RATTANACHAI, H. YUZAWA, N. KOSUGI and D. CÉOLIN, “Investigation of Solvated Calcium Dication Structure in Pure Water, Methanol, and Ethanol Solutions by Means of K and L_{2,3}-Edges X-Ray Absorption Spectroscopy,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **244**, 146984 (6 pages) (2020).

T. OHIGASHI, H. YUZAWA and N. KOSUGI, “A Low-Pass Filtering Fresnel Zone Plate for Soft X-Ray Microscopic Analysis down to the Lithium K-Edge Region,” *Rev. Sci. Instrum.* **91**, 103110 (5 pages) (2020).

S. TSUNEKAWA, F. YAMAMOTO, K.-H. WANG, M. NAGASAKA, H. YUZAWA, S. TAKAKUSAGI, H. KONDOH, K. ASAKURA, T. KAWAI and M. YOSHIDA, “Operando Observations of a Manganese Oxide Electrocatalyst for Water Oxidation Using Hard/Tender/Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. C* **124**, 23611–23618 (2020).

K. FUJIMORI, M. KITAURA, Y. TAIRA, M. FUJIMOTO, H. ZEN, S. WATANABE, K. KAMADA, Y. OKANO, M. KATOH, M. HOSAKA, J. YAMAZAKI, T. HIRADE, Y. KOBAYASHI and A. OHNISHI, “Visualizing Cation Vacancies in Ce:Gd₃Al₂Ga₃O₁₂ Scintillators by Gamma-Ray-Induced Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy,” *Appl. Phys. Express* **13**, 085505 (4 pages) (2020).

F. MATSUI, S. MAKITA, H. MATSUDA, T. YANO, E. NAKAMURA, K. TANAKA, S. SUGA and S. KERA, “Photoelectron Momentum Microscope at BL6U of UVSOR-III Synchrotron,” *J. J. Appl. Phys.* **59**, 067001 (9 pages) (2020).

F. MATSUI, S. MAKITA, H. MATSUDA, T. UEBA, T. HORIGOME, H. YAMANE, K. TANAKA, S. KERA and N. KOSUGI, “Bulk and Surface Band Dispersion Mapping of the Au(111) Surface by Acceptance-Cone Tunable PES System,” *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **18**, 18–23 (2020).

B-6) 受賞, 表彰

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).

中村永研, 日本化学会化学技術有功賞 (2021).

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1」, 2020年12月22日-24日.

岡野泰彬, 中部大学非常勤講師, 「力学」, 2020年春期, 「基礎電磁気学」, 2020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。

2020年度は、文部科学省が新たな機関評価の方式を設定したのに基づき、8月に「自己検証報告書」を提出し、それをもとに外部有識者による「外部検証」が実施され、その結果が2021年1月に公表された。

2019年に実施された国際諮問委員会による点検評価結果は、海外からの委員を含めた検証結果として上述の「自己検証報告書」に反映された。これらの経緯を踏まえ、国際諮問委員会からいただいた提言やご指摘に対して、2021年6月に分子研としての回答を提出した。ここでは、自己検証報告書および外部検証結果の概要とともに、国際諮問委員会への回答書を掲載した。

2019年12月の国際諮問委員会から始まった研究所に対する一連の点検評価結果は、2022年4月からの次期計画へ反映すべく、自然科学研究機構における次期研究目標及び計画の策定への反映に取り組んでいる。

(川合真紀)

7-1 大学共同利用機関の教育研究等の検証

2020年3月に文部科学省では、第4期中期目標期間における大学共同利用機関のあり方に関する議論に基づき、中長期的な構想に基づく学術研究推進の観点から、大学共同利用機関が学術研究の動向に対応しているか、学術の発展に寄与しているか、我が国の研究力向上に資するものとなっているかを検証することとしている（6年ごとの実施を想定）。この方針に基づき、2020年8月に各機構からの自己検証報告書の提出を求め、それに対して9月から12月にかけて外部検証を行い報告書を提出することとなった。外部検証は、「研究環境基盤部会大学共同利用機関改革に関する作業部会の委員を中心に、専門性や分野融合等に配慮し所要の有識者を加える体制」で、特定の大学共同利用機関に直接の利害関係を有しない者で構成する「委員会で行うこととされた。

検証にあたっては、「大学共同利用機関として備えるべき要件」が7点設定され、それぞれに対して「主な観点」と「指標例」がいくつか示されている。指標は定量的なものとは限らない。「備えるべき要件」は以下のとおりである：＜運営面＞＜中核拠点性＞＜国際性＞＜研究資源＞＜新分野の創出＞＜人材育成＞＜社会との関わり＞。それぞれの「備えるべき要件」に対して3～6項目の「主な観点」が示されており、その中には自己検証に際して必ず評価すべき項目と、選択して評価する項目がある。

これらの検証におけるガイドラインの詳細は、以下のwebページに掲載されている。

https://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu4/010/toushin/mext_01137.html

https://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu4/010/toushin/1382719_00001.htm

以下では、上記のガイドラインに沿って作成した自己検証結果報告書、及びそれに対する外部検証結果の、分子研部分の要点（自己検証結果報告書の「全体概要」、及び外部検証結果の「総合所見」）を示す。全文は参考資料として第9章に添付する。

自己検証結果報告書

全体概要

分子科学研究所は、分子科学分野の中核研究機関として(1)学術研究の推進、(2)若手研究者の育成、そして(3)共同利用・共同研究の推進を、研究所が果たすべき3つの柱と位置付けて国内外の分子科学研究を牽引してきた。

研究組織は、4研究領域（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）と領域を繋ぐ2つの研究センター（協奏分子システム研究センターとメゾスコピック計測研究センター）からなり、分子科学の研究基盤を構成している。加えて、自然科学研究機構に設置されている生命創成探究センター（ExCELLS）に人員を供出して、分子科学の観点から同センターの運営に寄与している。研究を支援する施設としては、極端紫外光研究施設（UVSOR）、計算科学研究センター、機器センター、装置開発室を擁し、各施設の運営は、技術部門に所属する技術職員と研究者との協力で成り立っている。

I. 運営面

分子科学研究所の運営は、研究所の現状の評価及び将来計画への提言を旨とする顧問（運営顧問、研究顧問、外国人運営顧問）、研究教育職員の人事、共同利用・共同研究等研究所の運営に関する重要事項について、所内外の委員で構成される運営会議、そして所内の教授及び准教授（客員を含む）から構成される教授会議が所長の諮問に

応じる会議体を構成する。さらに、中期計画中期には、運営顧問を中心に現況の評価及び将来計画に対する意見聴取を行う。今期については、2019年12月に分子科学研究所 国際諮問委員会を開催し、本自己検証に関係する評価及び提言をいただいた。

顧問は全て外部の者で構成される（総計8名）。評価結果は、研究所の運営に反映すると同時に、研究者に対しては所長裁量経費としての毎年の配分額に反映される。運営会議（外部10名、内部11名）は、分子科学及びその関連分野の学術研究者から構成される。顧問及び運営会議の委員は所内外比11:18の構成である。

研究不正・会計不正等防止のための措置として、岡崎3機関等不正使用防止計画推進室会議による自己点検を実施しているほか、自然科学研究機構に設置されている機構不正行為防止委員会の活動により、適切なコンプライアンス確保に向けた体制は整備されている。

II. 中核拠点性

分子科学分野を牽引する教職員で構成され、当該分野を牽引する研究所として十分な実績を挙げている。分子科学分野及び関連する科学分野の優れた成果を顕彰する学会賞を多く受賞している。特に若手の研究水準の高さは当該分野で国内随一である。

分子科学分野の中核的研究所として、研究所創設以来多くの中核研究者を大学や研究所に輩出し、人的基盤の拡充に寄与してきた。分子科学分野の旗艦研究所として、卓越教授制度を設け先鋭的な分子科学研究を支援すると同時に、分子科学分野の中堅人材の育成を目指すために、大学などに所属する教員に対してクロスアポイントメント制度により一定期間研究に専念する時間と環境を提供するなど、分野の総合的な発展に寄与している。また、我が国の大型プロジェクトの代表機関として、全国の大学教員の活動の取りまとめを支援している。

共同利用・共同研究の実施件数はいずれも研究施設規模に見合う数字である。共同研究の成果は査読付きの論文として公表されており、実施状況は良好である。施設利用については、公表される論文中に分子科学研究所の果たした役割への記載が十分ではないケースがあり、今後は利用成果についても把握に努める必要がある。

III. 国際性

所外の研究者の申請を可能とする様々な国際研究集会を支援している。毎年1～2件開催される「岡崎コンファレンス」は分子科学分野のトップレベル研究者を国内外から招聘し、分子科学分野の重要課題について国内研究者との交流を促進している。さらに海外機関と国際交流協定を結び、インターンシップなども含めた幅広い世代の人材交流を推進している。研究顧問（国内機関1名、海外機関1名）、外国人運営顧問2名、外国人客員教授等による毎年の研究者評価・運営に対するアドバイスが適切に実施されているほか、今中期計画中期にあたる2019年度は国際諮問委員会による研究所の評価と将来計画へのアドバイスをいただいた。

研究所の各部署には、英語で職務遂行が可能な職員を配置し、所内文書は全て日英併記である。共同利用・共同研究に参加する外国人研究者に対し、来所前後いずれも技術面・生活面で必要な支援が得られるように体制が整えられている。2016年以降、所内人事は全て国際公募である。

IV. 研究資源

先端的な計測機器や加工装置群に加えて、放射光施設である極端紫外光研究施設（UVSOR）、岡崎3機関共通施設の大型計算機施設である計算科学研究センター等を擁し、これらを全国の共同利用や国を超えた国際共同研究に

開放して、コミュニティの研究展開に寄与している。年間 600 件近い共同研究・施設利用が実施されており、2,000 名以上にのぼる所外の研究者が来所し、その成果として、年間あたり 300 報を超える研究論文が発表されている。

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、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」、ポスト京の重点課題「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」などの代表機関・責任機関として他機関と連携しながら、施設、設備等の整備・共同運用を行っている。

各共同利用施設に適切に教員、技術職員、事務職員が配置されているほか、共同利用・共同研究を全体的に支援するための事務部署が設置されており、共同利用・共同研究を支援する体制が十分に整備されている。

V. 新分野の創出

学際的・融合的領域における研究実績は、分子科学分野及び周辺研究分野を対象とした学術・技術賞を多くの職員が受賞している事に現れている (II. 中核拠点性の項目を参照)。また、外部機関所属の研究者による共同利用・共同研究の研究実績は高く評価されている (IV. 研究資源の項目を参照)。研究所は創設以来、次世代の分子科学分野を創出することを重要なミッションとしてきた。研究室主宰者(教授、助教授あるいは准教授)の選考にあたっては、独創的な研究提案を重視して人事選考を実施してきた。また、内部昇格を禁止して、研究所における研究領域の固定化を回避し、研究分野の流動化を促すとともに、転出した研究者が在籍時に創出した研究を大学等で更に発展・展開させることに寄与している。

研究組織を適切に見直し、研究分野の流動化に対応させている。2000年に設置した岡崎統合バイオサイエンスセンター、それを発展的に廃止して2018年に新設した生命創成探究センターに参画した。2019年度からはクロスアポイントメント制度を活用し、他大学の研究者が所内研究者と連携して新たな研究展開を目指す研究活動を行っている。この他、分子科学研究所が主体となり、国内の5つの物性科学関連研究拠点が共同して新たな研究領域の発展を目指す「物性科学連携研究体」の構築を目指した活動を開始している(学術会議マスタープラン2020に重点大型研究計画 No. 22として記載:<http://www.scj.go.jp/ja/info/kohyo/pdf/kohyo-24-t286-1-p1.pdf>, 自然科学研究機構概算要求事項)。

VI. 人材育成

総合研究大学院大学の基盤機関として大学院教育を実施すると同時に、関連する大学の要請に応じて特別共同利用研究員として大学院生を受け入れ、次世代の分子科学を担う研究者の育成に取り組んでいる。修士課程を含む全ての大学院生に対してリサーチアシスタント(RA)として経済支援を行っている。また、共同利用研究の申請事項の一つとして「若手研究活動支援」を設置するなど、主体的かつ積極的に分子科学分野の後継者の育成に取り組んでいる。

分子科学研究所では、創設時から内部昇格を禁止することで高い流動性を保ち、コミュニティに多くの人材を輩出してきた。今中期計画期間中にすでに准教授8名、助教23名とおおよそ半数の教員が転出している。独立した研究グループを主宰する准教授の採用は、28歳から38歳の若手研究者を登用し、現在、本務教員の66%が44歳以下である。また、外国人研究者14名(助教2名、特任助教1名、博士研究員11名)が在籍しており、海外研究者を含む若手研究者の採用や育成に積極的に取り組んでいる。

女性研究者は現在11名(所長1、准教授2、助教2、特任助教1、研究員5)が在籍しており、全教員・研究員数の10%に相当する。男女共同参画推進への取り組み、特に子育て・介護中の研究者に対する支援として、構内に保育園を設置しているほか、ライフステージに合わせた柔軟な就労制度の更なる拡充を進めている。

VII. 社会との関わり

ホームページやプレスリリースによる研究成果の広報活動を進めている。さらに、市民公開講座や研究所一般公開、希望団体への研究施設の見学対応、岡崎市観光協会と連携した各種市民向けイベントへの協力を通じて、市民への広報活動を強化している。スーパーサイエンスハイスクール事業への協力、小・中学校の理科教員を対象としたセミナーの開催、職場体験学習の生徒受け入れ、国際化学オリンピックへの協力など、岡崎市内及び近隣の小学校から高等学校までの様々なレベルでの理科教育に協力して地域社会と連携している。

岡崎商工会議所と連携して隔年開催されるイベントで展示ブースを設置し、地域の民間企業による施設利用促進を図っている。2019年度からは複数の民間企業など外部機関と連携し運営するオープンイノベーション拠点「社会連携研究部門」を新設した。社会実装が求められる先端的な小型固体レーザーの研究開発を強力的に推進し、社会人を含めた研究者育成及び産学を交えた人材流動化の促進に取り組んでいる。また、文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム事業及び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の拠点として、民間企業の施設・機器利用を積極的に受け入れている。

自由記述

【概要】

研究者が研究と教育に専念できるよう、事務の効率化及び事務作業の分業化を推進している。研究力強化戦略室を設け、研究所の運営に係る事務作業を担っている。評価・将来計画、共同研究、国際、施設、広報に担当教員を配置すると同時に、人事管理、評価・研究支援、国際、情報発信を担当する URA 職員を雇用して関係する作業を実施している。

会議の効率化の一例として、毎月開催することが規定されている対面で行う教授会議を原則年4回の季節開催とし、審議を必要としない報告事項はホームページに掲載あるいは、メールなどで通知することとした。所内会議及び、岡崎3機関に共通の委員会を大幅に整理し、職員の時間効率の改善を図っている。

外部検証結果

総合所見

分子科学分野の中核的研究拠点として質・量ともに顕著な研究成果を上げているほか、人材育成の面でもコミュニティの活性化に大きく貢献しており、自己検証のとおり、大学共同利用機関として備えるべき要件に照らして十分な活動を行っていると思われる。

多くの海外研究機関が予算や人員を拡充している中、国際的研究競争力を維持するためにも、安定的な財源はもとより、関係する研究機関との一層の連携強化を図り体制の充実が求められる。

(優れた点等)

○分子科学分野の中核拠点として、質・量とも十分な研究成果を上げ、分野をけん引している。また、学際的・融合的領域においても高い研究水準にある。ナノテクノロジープラットフォーム事業の実施機関としても研究コミュニティの活性化に寄与している。

○研究者の内部昇格を禁止していることにより、准教授・助教が全国の国公立大学の物理化学教員などとして転出して中核研究者となっており、分野への人材輩出においても貢献している。

○学位取得後3年以内の若手研究者に研究室を主宰する機会を与える若手独立フェロー制度等の様々な施策により、優れた若手研究者が育成されていることは特筆に値する。

○外部有識者から構成される運営顧問、研究顧問、外国人運営顧問からの助言・評価の他、学会等連絡会議からの意見を適切に運営に反映させている。

(課題、改善を要する点等)

○共同利用課題の審査における所外委員の割合について早急に改善が必要である。

○国際共著率は40%程度と高いが、国際的な中核研究拠点として、更なる向上を目指してほしい。また、同様の国際拠点との比較のためベンチマークの資料を自己検証で示すべきではないか。

○今後の日本の成長分野である新材料分野(化学・素材分野)では産業界との連携が不可欠であり、今後、取組を更に強化、発展させることが求められる。

○海外の研究機関の予算や研究者が増える中で、専任教員数が減少していることから、現在の国際競争力を維持することができるよう財源強化が必要である。

○大学共同利用機関はコミュニティが一体となって運営に当たる組織であり、各種会議の議事録、規則などは適切に公開されるべきである。

(その他)

○国内では関連分野の大学の共同利用・共同研究拠点や理化学研究所などとの連携強化の具体策を検討し、その遂行により日本の分子科学を含む、物質・材料・物性科学等マテリアル分野の発展を更に推し進めることを期待したい。東京大学物性研究所、京都大学化学研究所、東北大学金属材料研究所、SPring-8、KEK物構研、物質・材料研究機構等と物質科学研究をネットワーク化することで関連研究分野の発展と国際的な存在感の大幅な改善があり得るのではないか。

○分子研の優れた取組と活動をクロスアポイントメント制度等も活用して更に全国的に展開し、今後も促進してもらいたい。

7-2 国際諮問委員会の答申レポート

Response to the Advisory Report of IMSAC2019

July 01, 2021

Institute for Molecular Science

Institute for Molecular Science Advisory Council 2019 was conducted during the 4th year of the term of DG Maki Kawai. Along with the terms of references given as guidelines, IMSAC reported their findings and suggestions to DG in February 2020.

DG and all the members of the Institute are very proud to receive the approved comment from IMSAC that IMS is recognized as the research core of the molecular science community. We are grateful for the suggestions made in the Advisory Report and will sincerely work to improve IMS.

In 2020, the Japanese government conducted an inspection for the Inter-University Research Institutes, where IMS was asked to deliver a report of “Self-Inspection” along with the guide-line which was delivered during the IMSAC. We were asked to include the voice from the international community in our “Self-Inspection” and the corresponding part of the Advisory Report of IMSAC 2019 was delivered to our “Self-Inspection.” Our document of “Self-Inspection” was examined by the committee and IMS has received the response, which is called “External-Inspection” in January 2021. This response is also attached to the respective part of the document.

This document “Response to the Advisory Report of IMSAC 2019” is to clarify how IMS will work forward to reflect the suggestion from IMSAC. Some have already been overcome, while others may still need time to realize. We believe our response satisfies the member of IMSAC2019.

July 1st, 2021

Maki Kawai

Director General,

Institute for Molecular Science

Response to the Advisory Report of IMSAC 2019

Institute for Molecular Science Advisory Council (IMSAC) was conducted between 10th and 11th December 2019 at the Institute for Molecular Science in Okazaki, Japan. All the AC members and our Science Advisors, Prof. Hrvoje Petek and Prof. Atsushi Nakajima met in Okazaki. It was fortunate that we were able to conduct the AC on-site before the worldwide trapping of COVID-19 pandemic. Director General of IMS has received the report from IMSAC on 13th February 2020. The corresponding part of the report was reflected in the “Self-Inspection” of IMS delivered to MEXT in August 2020, followed by the examination by MEXT. The response of which was delivered in so-called “External-Inspection” in January 2021. “Response to the Advisory Report of IMSAC 2019” is meant to inclusively report the reflection as above and to how IMS makes use of the Advisory Report in our planning towards the future.

IMS appreciates IMSAC for their tremendous effort in carefully examining to understand the present status of the Institute and discovering our strength and weakness. The advice and suggestions given by IMSAC are valuable for us to settle the future direction of the Institute.

Four important findings of IMSAC were summarized in “5. Summary and Suggestions.” They are: 1) Concerning the importance of the UVSOR facility to IMS, a concrete mid- or long-term vision on the facility is indispensable, 2) Plan for the reform of the department structure, beforehand of the retirement of several full professors, 3) Accepting foreign researchers is a vital issue for increasing the presence of the Institute, <Hire non-Japanese professors>, and 4) IMS should change the management system for separating administrative work from the scientific activities of full professors.

IMS seriously understands the importance and will reflect the advice to our plan for the coming next mid-term. Since the sections in “4. IMS as the Inter-University Research Institute” cover all the points mentioned in the Advisory Report of IMSAC 2019 and correspond to the “External-Inspection,” according to the order of this Chapter 4., the details of our response to each point are described in [1] to [7] as follows.

In this Response	In Advisory Report of IMSAC 2019
[1] Administration	4-1. Administration 5. Summary and Suggestions- 4)
[2] Core Institute to lead the community for Molecular Sciences	4-2. Core Institute to lead the community for Molecular Sciences
[3] Institute as an International Core	4-3. Institute as an International Core 5. Summary and Suggestions- 3)
[4] Research Resources	2-1. UVSOR Synchrotron Facility 2-2. Instrument Center 4-4. Research Resources 5. Summary and Suggestions- 1)
[5] Commitment to innovate new area of science	1. Science Activity of IMS 4-5. Commitment to innovate new area of science 5. Summary and Suggestions- 2)
[6] Cultivating personnel	4-6. Cultivating personnel
[7] Relation to Society	4-7. Relation to Society

IMSAC’s advice on “3. Revitalization Strategy Measured” is inevitable. AC advised to invite more distinguished professors to raise the IMS profile even higher, specifically to hire scholars from abroad in line with the good successful practice model of OIST. IMS acknowledges the practical suggestions given here. Although OIST is operated with a high standard of budget from the Japanese government which is one order of magnitude large compared to the domestic universities under the control of MEXT, IMS will learn their strategy of hiring scholars from abroad and will consider reflecting our management.

Hereafter our “Response to the Advisory Report of IMSAC 2019” quotes the section number of Chapter 4. of the Advisory Report. Following the Response, the brief English-translated summary from the “External-Inspection” originally written in Japanese by MEXT is attached.

[1] Administration

AC appreciates the transparency of the administration and operation of IMS including the process of recruitment of researchers and faculties. In the meanwhile, AC noted the importance of IMS to set mid- to long-term strategic plans for future initiatives along with new directions and make priorities in the use of its resources, in order to enhance cooperative researches in IMS with outside scientists. They also suggested having an informal board of people to give thoughts on research areas to focus on.

We consider it is worth hearing the thoughts of an informal board on the strategic plans for future initiatives and steering the Institute along the line. We will discuss the possibility of planning such kind of informal board meeting on the mid- to long-term future perspectives of research strategies. On the other hand, we consider that another function of IMS is also important, to hire promising young scientists and provide a research environment to promote their talent, and to produce influential scientists back to universities and research institutes. To achieve that, it may be essential to open the personnel recruitment with the research areas as wide as possible. We consider that the balance between the two should be carefully managed.

AC pointed out that it is necessary to add one or more URAs who collect information and analyze statistics of the research fields and communicate with the science communities or funding agencies.

In the Research Enhancement Strategy Office and some other sections of IMS, a few URAs (or equivalent) are assigned. Some of them have Ph.D. degrees. They actually conduct collection of information and analysis, but further addition of URA staff is preferable. Basically, we may expect a URA to function as a professional person who not only collects information and analyzes statistics of the research fields but also takes charge of various activities such as negotiations with external organizations and budget acquisition, based on the information. To achieve that, we need to hire talented personnel and offer reasonable status and treatment commensurate with it. We need to discuss it, along with the issue of the personnel cost.

[2] Core Institute to lead the community for Molecular Sciences

Recognizing the importance of IMS to continue to be the core institute to lead the community for molecular sciences, four points were noted by the AC.

Owing to the reduction of the budget in the national university, AC suggests supporting the shared use of standard equipment. Also, cutting-edge equipment and facility, which a university cannot manage, are essential to promote novel molecular science. We realize the situation of universities and thus the importance of upgrading the standard equipment for the purpose. IMS will continue to introduce large facilities for shared use, for example, we have installed an electron-beam lithography system in 2018 and a probe microscopy system in 2019.

AC points out the 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 it to other worldwide SR facilities. A momentum microscope recently installed in UVSOR will become one of the key instruments to lead the cutting-edge research of this facility.

AC concerns about the small number of scientists allocated in the Institute and strongly suggests the need for IMS to make a strategy to involve external scientists in the activities in IMS. Calling collaboration with universities and institutes is the most important activities with the community and we will keep encouraging. IMS started inviting external scientists as visiting professors to IMS by cross-appointment of three months per year for five years term from universities and institutes. We have one visiting Full Professor and one Associate Professor working in UVSOR in April 2021 and are planning to expand to other departments increasing the number in the coming years.

AC also points out to continue the discussion about the direction of IMS as the core research institute in the field of molecular science towards the success of the Institute for the next 50 years. A similar suggestion was made in [1] and thus the response is given in the respective section.

[3] Institute as an International Core

IMS is delighted to know that its activities as an international core institute are highly recognized both by AC and by the External-Inspection committee. Since its foundation, the IMS system has enabled a lot of Japanese researchers both inside and outside IMS to make collaboration with foreign researchers as well as to hold international conferences. International joint research program, global use of facilities program, and international internship program have facilitated exchanges of human resources and ideas in a worldwide molecular science community. IMS also provides visiting professor positions to foreign researchers, typically for three to six months. However, this visiting scholar system is not actively utilized at the moment. Hence a suggestion has been made both by AC and by the External-Inspection committee that one or two regular faculty positions can be intentionally assigned to non-Japanese scholars. This is quite an important message in terms of both the diversity and international visibility of IMS. Although IMS has already started to make regular announcements of open positions to the international community, such proactive communication suggested by AC is needed in the next step. Therefore, IMS will take measures in the next term recruitment both for regular and visiting positions regarding the international laboratory operation. Probably this should be designed in combination with the recruitment for several full professor positions which will be available within the forthcoming five to six years. AC has also suggested implementing a sabbatical system in IMS, which is not at all active now, although an internal regulation has been already set up. This situation is connected with the heavy burden of full professors in IMS which has been pointed out in another part of the AC advice. IMS will start to discuss how to organize a queue for sabbatical leave in order to make the system real and to facilitate mutual human resource exchange with foreign institutes and universities

[4] Research Resources

IMS will keep our four facilities and contribute to promoting molecular science worldwide. We realize the increasing demand for open-use facilities from the local universities. IMS will carefully observe the opinion of the community and tune the operation of our facility.

AC appreciates that IMS is operating large facilities such as the Research Center for Computational Science and the UVSOR light sources, that are not suitable for each university could maintain. As for the future perspective, AC suggests we discuss the future status of UVSOR.

On UVSOR Synchrotron Facility:

UVSOR Synchrotron Facility is a unique facility for low-energy synchrotron radiation (SR) light sources. The facility is quite old and is facing time to revitalize. Along with the advice from the AC and Prof. Umbach's assessment report, the UVSOR team has drafted their plan through the discussion with the user community.

Since 2017, the future direction of UVSOR has been discussed in multiple committees and working groups consisting of related domestic and foreign researchers. We are promoting the use of high-brilliance SR, UVSOR-III, which is rare internationally in vacuum-ultraviolet (VUV) photon range, by domestic and foreign researchers, and doing development and utilization of novel quantum-beam sources by accelerator researchers. In particular, the development of a photoelectron momentum

microscope, which is expected as next-generation spectroscopy, started in 2020. The strengthening of such “only one character” of UVSOR is positioned as the most important issue in mid-term plans.

Besides, as planned in the Master plan 2020 “Network of academic infrastructures in SR science,” three facilities (Photon Factory, Institute of Materials Structure Science High Energy Accelerator Research Organization, KEK; Hiroshima Synchrotron Radiation Center, Hiroshima University; UVSOR) will cooperate to advance the SR-related technology, working on joint research, and human resource development for the continuous development of SR science in Japan. The mid-term goal of UVSOR-III is to continue these activities over the next 10 years to harvest cutting-edge results. At the same time as maintaining the activity of advanced research, it is important to expand and strengthen the user community in the future, in particular, the SR-used research should expand to chemical and bio-related systems where the use of VUV radiation has not been widespread historically. Due to the COVID-19 pandemic, technological development of automation and remoteization, as well as standardization of equipment, is being promoted in various places, and UVSOR has also started R&D of related techniques as a short-term plan. This work is also an effective link to the proposition of expanding the SR-user community.

In the long term, now it is time to consider how to deal with the deterioration of the UVSOR against the sustainability of the unique activities. UVSOR could take a leading position in Japan which is required to support academic research using the low-energy VUV photons that the large-scale facility SPring-8 and the medium-sized facility Tohoku Ring (tentative) cannot cover. Through internal discussions at IMS, it was concluded that the construction proposal of the next UVSOR is important for satisfying such demands. Yet, the achievement done by the mid-term plan must be essential to realize the construction plan. From 2020, the examination of the concrete SR facility design and usage concept was started mainly by the in-house committee members. In the next, we will shift to the work of embodying the construction plan by hearing the opinions of SR users and disseminating it to the community.

On Instrument Center:

IMS will continue listening to the user’s voice and will pay attention to renew instruments that are necessary. Recent demand from local universities should be reflected in the arrangement. IMS performs a call for the renewal and demand for new instruments, annually that will be the base of the action.

[5] Commitment to innovate new area of science

AC appreciated the commitment of IMS to cultivate new fields in molecular science, and the validity of the IMS system to provide independent groups for young talented researchers. AC noted that IMS and its community should survey the activities of the research areas to plan future directions to cultivate.

With the retirements of several senior professors in another several years in mind, we will extensively discuss, in the Institute and with the community, the future plans of the research areas in molecular science, and accelerate planning the recruitment of PIs. All the recruitment will be opened internationally, and we will not hesitate to hire non-Japanese scientists if the candidate is excellent and meets the conditions.

Science Activity of IMS

IMS appreciates the careful examination and the cordial advice given by AC. We are planning to restructure the departments in the near future, where your advice to each of the present departments is precious and we will seriously take those into account.

On Department of Theoretical and Computational Molecular Sciences:

IMS acknowledges the AC's suggestions that the department does not miss the current wave of participation in the AI/Data Science world and that theoretical scientists are effectively embedded within topical experimental research groups.

IMS will reflect the idea of such integration of theory and experiments in consultation with project leaders and principal investigators. This is valuable for the interpretation of data in cutting-edge areas.

On Department of Photo-Molecular Science:

As pointed out by AC, the department has a limited number of groups at present. IMS will start planning to restructure the departments in the coming years and accordingly the recruitment of group leaders will follow.

On Department of Materials Molecular Science:

We appreciate the precious advice from AC to strengthen IMS from the materials science point of view. The way how to integrate the activity of IMS with our community outside the Institute is the key. We will seriously take the point into account upon the restructuring of the department.

On Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science:

It has been advised in the past as well to reconsider the name of this department. We will take this seriously during the restructuring process.

On Research Center of Integrative Molecular Systems (CIMoS):

The Center represents one of the two research directions of IMS at present, together with CMS (below), appealing our thought by structuring the organization to MEXT that was necessary in the past. Our foci are to realize new molecular systems and to create or investigate new methodology to measure and understand the molecular systems with new functions.

On Center for Mesoscopic Sciences (CMS):

CMS represents another focus of IMS as described above. We set a second Research group starting from April 2021, accordingly to gradually strengthening the activity.

Upon our restructuring, IMS will consider an appropriate structure for the Institute.

[6] Cultivating personnel

AC appreciates the successful role of IMS in growing young researchers, specifically associate professors many of whom have been promoted to be full professors in decent universities and institutional labs. As was pointed out by AC, however, IMS has been struggling to have graduate students, and the decrease in the number of students in Japan would make the situation even worse.

AC encouraged improved flexibility of career paths for young scientists.

We will continue the discussion on further enhancement of the framework and the system that meet requirements for the establishment of a flexible career path, particularly for young researchers.

For the advertisement of the Institute, IMS has been providing multiple opportunities that students can experience research environments and facilities of IMS, *e.g.*, open campus, hands-on research activities, and so forth. In the past few years, we have been trying to reconstruct the programs so as to be more effective for recruiting highly motivated and talented graduate students. We will continue the efforts.

In terms of attracting international students, IMS has been developing networks with overseas institutions through the use of international internship programs, international joint research programs, and global use of facilities programs. Currently, a quarter of the students working at IMS are international. To recruit more international students who are motivated to do doctoral research at IMS, we will consider the further enhancement and substantive use of the networks. In addition, we have just started to re-examine the scholarships that are sufficient for international students to live in Okazaki.

AC recommends keeping high ability of technical staff, in the description on Equipment Development Center. We take the advice seriously and have recently revitalized the system for our technical staff. IMS will continue to facilitate to give them incentives.

[7] Relation to Society

We think it is significant to share our research topics with the general public to obtain their support for the institution, and AC appreciates our efforts through the public forum, “Molecular Science Forum” and the acceptance of group tours to show the research environment and facilities of IMS. We will analyze the effects of the current public relations activities and thereby develop new types of activities, *e.g.*, online events.

To contribute to society through solving practical issues by applying results of fundamental research at IMS, we established Division of Research Innovation and Collaboration and launched the TILA Consortium under the support from private sectors. To further the effort to connect the fundamental research to actual industry for open innovation, AC suggests IMS develop some industry incubator programs so that researchers can venture into making start-up companies. Related to the TILA Consortium, a venture company, LAcubed has been already established in 2019. As a future subject, however, we need further consideration to build a solid framework for making start-up companies.

External-Inspection by MEXT

Opinion from MEXT received on January 2021

Translated from Japanese to English by IMS

General remarks

Excellent points

IMS appropriately reflects voices from the community to their management. Councilors, Senior Scientific Advisors, and Foreign Councilors are directly giving advice to the Director General, and the Liaison Committee of Scientific Societies to select external members of Councilors are considered as some of the good practice.

By prohibiting the internal promotion of researchers, associate professors and assistant professors have been transferred to universities and national institutes and have become core researchers in physics and chemistry faculty at national, public, and private universities nationwide. IMS has contributed to the cultivation of human resources in the field.

It is worth noting that excellent young researchers are being cultivated through various measures such as the Young Independent Fellow System, which gives young researchers within three years of obtaining an opportunity to preside over the laboratory.

Points that need to be improved

IMS is a member of the Inter-University Research Institute Corporation that has to be operated with the corresponding science community and thus the Institute has to be managed in an open mind. Minutes of the Advisory Committee, which is the highest decision-making body of the Institute, and other conferences and committee meetings should be published properly. The same is true for the rules of the Institute.

In the field of materials science (chemical/materials field), which is considered as the growing field of Japan in the future, cooperation with the industrial sector is indispensable, and it is worth required to further strengthen and develop the efforts.

[1] Administration

The committee highly acknowledges the principle of IMS in prohibiting the internal promotion of researchers, with which IMS has been successful in contributing to the cultivation of human resources in the field by transferring associate professors and assistant professors as core researchers in physics and chemistry faculty of national, public and private universities nationwide.

[2] Core Institute to lead the community for Molecular Sciences

Within four years during the third term, 100 researchers have been transferred from the Institute, which is great. Since the foundation of the Institute, 46% of the people transferred from IMS became to be Professors, 28% became Associate Professors. Counting those transferred from Associate Professor of IMS, 81% are promoted to professors, a number of which is the proof that IMS greatly contributes to the circulation of human resources, and is the core base in this field in Japan.

In the third term, an average of more than 700 joint researches are conducted annually, and more than 300 papers are reported annually as a result of utilizing facilities, which is proof that IMS is the core base. It is also commendable that IMS has been in charge of coordinating important measures that lead the field of molecular science as the nanotechnology platform etc. as a core institute.

[3] Institute as an International Core

Points that need to be improved

It is commendable that international joint research is increasing, with international co-authored papers exceeding 37% from 2016 to 2019, and would like to expect IMS for further improvement as an international core research institute. Since 2016, IMS has been promoting international joint research and supporting internships and internationalization is in progress. IMS is considered to be a research institution with a high degree of internationality when viewed comprehensively. In order to clarify its internationality, IMS should make a benchmark to compare the activities with other international institutions. Also, it is necessary for IMS to work on increasing the number of laboratories presided over by foreigners.

[4] Research Resources

UVSOR, computational resources, and general-purpose measuring equipment are shared. UVSOR is a light source that covers long-wavelength regions, and in the third term, a total of 4,949 people contributed to 873 programs, reaching a shared usage rate of 87.5%. Of these, the international shared utilization rate of the facility's beamline BL4U (STXM) is 28%. Shared use

at the Research Center for Computational Science and Instrument Center is also operated to meet the needs of users. What is noteworthy about the number of the shared use of general-purpose equipment is that the national universities with priority support group 1 (community contribution type) are becoming the major users, and it can be seen that IMS is making a great contribution to local universities nationwide.

IMS allocates 37 technical staff to maintain the facility, and 34 staff to provide technical and administrative support related to joint use and joint research. Improving the treatment of technical staff and their career paths is an issue for Japan as a whole, but the expectation that IMS takes the initiative is high.

Nowadays the SR light source is considered as an infrastructure for academic research and industrial use. UVSOR was built many years ago and its facilities are aging. Discussions have been held on the future direction of the SR facility both domestically and internationally, and upgrade of the facility and nurture human resource are being promoted. While further accelerating these efforts, the expectation of UVSOR to develop as a facility with unique strengths is high.

[5] Commitment to innovate new area of science

IMS has contributed to creating many new research fields by its researchers and also through joint research, and is considered to be an institute that delivers a high level of research in interdisciplinary and integrated fields.

Since IMS prohibits internal promotion, 66% of faculty members are young researchers, and the opportunity to preside over the laboratory to young researchers within three years after obtaining a Ph.D. degree under the Young Independent Fellow System is appreciated.

[6] Cultivating personnel

Excellent points

Associate professors and assistant professors have been transferred to universities and national institutes and have become core researchers in physics and chemistry faculty at national, public, and private universities nationwide. IMS has contributed to cultivating human resources in the field.

In particular, the fact that many young researchers have received awards from related academic societies is proof that young researchers are well nurtured in the Institute. This is also clear from the fact that the number of projects to be implemented in the PRESTO Strategic Creative Research Promotion Project of the Japan Science and Technology Agency (JST) has been steadily increasing from four to five, six and ten cases in the four years of the third term.

It is noteworthy that IMS is conducting the research at a high level and succeeding in developing human resources.

Points that need to be improved

The number of foreign students is about a quarter at present, it would be nice if IMS could increase it a little more.

[7] Relation to Society

Excellent points

Through websites, press releases, public lectures, and research institutes, IMS is actively making efforts to disclose research content to the general public, and it can be said that the number of participants and viewers is also high.

LAcubed Co., Ltd. was established as a venture company, and sales in FY2019 were 14.72 million yen, delivering the application

of laser technology. As for IMS as a whole, the number of patents acquired in the four years of the third term was 36 (including 17 overseas), and the number of patents held in FY2019 was 87 (including 32 overseas). Patent fee income is 8.21 million yen, which exceeds the patent acquisition and maintenance cost of 5.68 million yen.

IMS has newly established the “Division of Research Innovation and Collaboration,” an open innovation base that operates collaboration with external organizations including private companies and local cities. It is working to foster researchers, including those in the private sectors, and promotes the mobilization of human resources through industry and academia. In addition, it is commendable that IMS is actively promoting the use of facilities by the private sector. Collaboration with industry should be further promoted.

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は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、全国規模でナノテクノロジーネットワーク事業や大学連携研究設備ネットワーク事業を推進し、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、2018年に新しい人事交流制度を開始した。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。2020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木村真一教授（大阪大学大学院生命機能研究科教授）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。

（川合真紀）

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 37 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。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、UVSOR では 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、回折限界光源に迫る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。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、全 14 ビームラインのうち 6 基の先端計測放射光ビームライン設備が成熟し、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。その他の標準共同利用ビームライン（8 基）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。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、次期施設の建設計画（UVSOR-IV:仮）を算段する時期にある。本施設規模（小型放射光施設）の光源加速器技術と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不可欠であり、光源として放射光のみならずレーザー光源を組み合わせるようなフレキシブルかつ自由度の高い高度研究支援環境のための設備設計が重要であろう。後者はレーザー加速器など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、国内の他施設の建設計画に留意する必要がある。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 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帯（物性機能発現領域）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赤外光から真空紫外光の連続波長可変分光による材料評価システムの提供

8-1-2 光源加速器の現状と将来計画

将来計画の基本的な考え方は過去レポート 2018, 2019 もご参照いただきたい。次年度はユーザーコミュニティの意見聴取とともに、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重ね内容を充実させていく。

現有の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、2012 年度の高度化で設置された設備群の経年劣化から数年以内に更新時期を迎えることを想定する必要がある。更には当初建設期 1983 年来、未更新の基本設備も残されており、老朽化設備全般への対応が緊迫した課題である。設備トラブルによる不測の運転停止をさげ、国際的にも希少かつ競争力のある貴重な極端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。このうち数億円規模の高額設備以外については逐次更新を行ってきたが、過去の履歴から計画的に更新可能な老朽設備（電磁コイル、シンクロコンデンサ、ストレージコンデンサ、クライストロン、シンクロ偏向ダクト真空ベローズの一部）は、今後 10 年間を目安に所長裁量経費によりその約 6 割について更新完了させることを決定し、2019 年度より順次進めている。緊急性の観点で当面の設備トラブルへの対処としては、これらの更新作業でほぼ十分と判断する。しかしシンクロ偏向ダクト残分、シンクロ電磁コイルが設立以来 38 年間未更新のままとなり、不測の事態は残される。また今後 10 年をめどにシンクロ電源、電磁石電源、各種高圧電源等が二度目の更新時期を迎え、定期的な運営資金準備の観点で大型設備の持続性担保は根本的な課題である。さらに付帯する空調設備、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。建屋も 1983 年の建設であり耐久年数の点で改修時期が迫っている。これらの山積する改修要素から次期施設建設計画がコストパフォーマンスの点で有効であると考えている。

一方、光源グループによる新規光源探査や量子ビーム開発とその利用にかかる研究は、今や UVSOR の独創性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。広島大学へ転出した加藤教授にはクロスアポイントメント制度により、光源開発研究を継続していただく。2020 年度、平准教授が着任し、パルスガンマ線発生と陽電子消滅によるビーム利用研究を推進することとなった。そこで「将来検討ワーキング」を開催し、BLIU の今後の展開について議論した。BLIU での研究テーマの多様化にともない作業環境の改善が必要で、レーザー光源の光学ハッチの移設が提案され、旧 BL8B 跡地へと移動することとした。作業は今年度末のシャットダウン期間を利用する。これにより BL1B の実験スペースとの干渉問題が解決し、BLIU での作業性が向上すると共に、BL3U へのファイバーレーザーの取り回しなど今後の拡張性に長ける仕様となる。また強力なレーザー光源の導入で現在の 150 倍の強度のガンマ線が発生可能だが、放射線の遮蔽について保護システムを構築することとなった。

8-1-3 ビームラインと利用状況：コロナ禍対応

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、設備の順次高度化が必要で、施設予算と外部研究費等により開発研究を継続している。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 線吸収分光は物性・機能研究の点で世界的競争力がある。数年をかけて開発が終了したビームラインは施設利用課題としてユーザー利用が開始されているが、今後は国際利用率を増加させる方針である。また標準的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、アンジュレータ光源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。今年度はベンディングラインの在り方について「将来検討ワーキング」を開催した。特にBL1BとBL6Bの赤外テラヘルツビームラインとBL3BとBL7Bの真空紫外（VUV）ビームラインを利用している外部の先生方をお招きし、これらのビームラインの今後について意見交換をした。またクロスアポイントメント制度でUVSORを利用されている高谷准教授（京都大）と木村教授（大阪大）からも関連する話題をご提供いただき、UVSORでの利用展開をご説明いただいた。

2020年度はコロナ禍の感染拡大防止対策により全世界的規模で研究活動に支障があった。放射光施設ではそれぞれの地域環境とユーザー環境に応じた対応がとられたようである。UVSOR施設では分子科学研究所の活動制限方針に従い可能な限り研究活動を停止させない、研究者の計画的な実験活動を支援するという大方針で年間運営を行った。具体的には以下の方針をとった。

・2020年度に既に配分された前期ビームタイムはそのまま有効であり、所属機関の規定に準じて来所可能であれば課題を実施することができる。

- ・全ての前期課題を後期課題へ移行し、例外無く採択する。
- ・前期に実施しても後期ビームタイム配分には影響しない。
- ・通年申請課題における前期キャンセル分の補填は原則として無し。
- ・後期の新規利用申請は停止し、残ビームタイムの配分は特別随時申請課題にて対応する。

結果として、ほとんどの申請課題で何某かの実験を実施することができたが、5件（うち海外申請3件）の申請課題については全く都合を調整することが叶わず、課題実施不能と終わった。実施された海外申請についてもユーザーの来日はほぼ不能であったため、多くの課題は所内研究者による代行実験となった。また来所人数を抑えた三密回避の目的と所属機関の派遣指針の影響により、大学院生の来所者数が昨年度比で7割と大きく減少した。今回のコロナ禍では課題実施数の観点では確かに大きな影響はなかったと総括できるが、実施された研究の「質」の面では、のちのち影響はあったと評価されるのではないかと危惧する。実質的な実験従事者の規模縮小やメンバ変更による実験成果への影響、あるいは長期的には学生の経験機会が奪われたことによる人材育成への影響が懸念される。一方で、DX志向の強まりにより自動化・遠隔化・標準化などの技術開発が世界中で活発となった。硬X線を利用した構造解析は自動化がかねてより進んでおりコロナ禍において功を奏したようであるが、VUV-軟X線領域では「真空」の技術的制約により難題を抱えている。それでもこれを機にVUV領域でのDX関連の技術開発が各施設で開始され競争が激化するであろう。国内施設間の情報共有など連携強化の側面が重要視されている。UVSORにおいてもベンディングラインで技術職員が代行測定を担当する試みを実施した。汎用的な設備のDX化に有効であるだけでなく、技術職員の意識改革にもつながったと思われる。試行的にBL3Bにて岩山助教が中心となり、DX要素技術の更新を開始した。

8-1-4 中長期計画

2018年度より、UVSOR-IIIの後継となる次期VUV放射光施設の建設に関する議論が進められていたが、今年度は本格的な議論を開始し所内を中心に積極的に意見交換を行った。中期計画としては前述のように特定の先端手法や光源開発、既存の先端設備を利用した成果発信が最重要課題であり、副次的にDX化の要素技術開発を行うことが求められる。これらは長期計画としての次期VUV放射光施設の建設に向けたマスターピースにもなるものである。特に本施設のオンリーワン要素の強化が最重要課題で、新奇光源開発とその応用展開に加え、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、次期 VUV 放射光施設を中心とした「分子機能・材料物性計測によるマテリアル科学の研究拠点」の構築を目指したい。

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、長坂助教らが構築した溶液の軟 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。今後はより広範な分野への研究展開を意識して、クロスアポイントメント制度を活用した効果的な共同研究展開と人材育成を推進したい。BL4U は大東助教らによる軟 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、リチウム端の X 線吸収イメージング (STXM) に世界で初めて成功するなど共用を含めた多彩な利用展開を見せている。BL5U, BL7U では田中准教授らにより、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。同じく光電子分光法を軸に物性研究に注力している HiSOR 施設との施設間連携が重要である。UVSOR では STXM イメージング装置の開発に次ぐ中期計画として、光電子分光ビームラインの重点整備計画があり、2019 年度より松井主任研究者らが中心となり、イメージング装置として次世代型の光電子運動量顕微鏡 (Photoelectron Momentum Microscope: PMM) の開発を BL6U にて推進している。2020 年 2 月にテスト測定を開始し、2021 年度末にはスピン検出機構を含めた拡張増設を完了させ、国際的に唯一無二の実験設備を構築する予定である。今後は、時間軸を研究課題に紐込むための技術開発を推進できる主任研究者やクロスアポイントメント制度による効果的な共同研究展開と人材育成を推進したい。BL1U では平准教授、加藤教授 (クロスアポイントメント) 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。

中長期的な視点で国内における 10 の放射光施設の役割分担と連携強化が求められている。中でも学術系 3 施設 (UVSOR, PF, HiSOR) の果たす放射光関連分野の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。今年度はコロナ禍により活動は停滞しているが、次年度はビームライン開発研究のワーキングを立ち上げ若手研究者と技術者を中心に議論が開始される予定である。

本報告は、UVSOR 施設運営委員会 (2018 年度より年 2 回)、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 年度より年 1 回)、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 (本リポート参照)。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 (分子研リポート 2016 から 2019 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い、2021年度からは文部科学省受託研究マテリアル先端リサーチインフラのスポーク機関として共同利用・民間利用拠点を務めることとなっている。

2020年度は、2019年度末に導入された高速原子間力顕微鏡の研究・共同利用を推進することなどを目的として、機器センター初の主任研究員・湊 丈俊が着任した。2019年度から中村敏和と鈴木敏泰が分析チーム、合成チームのチームリーダーとして加わっており、先端的な共同利用の推進体制が整いつつある。この3名は、先端的・開発的な共同利用（協力研究並びに施設利用）の推進に加え、俯瞰的視野に立った機器センターの運営、設備の維持・管理・開発・更新を行い、さらには、大学共同利用機関法人としての大学等への組織的な機能強化貢献をミッションとする。専任技術職員は、昨年と同じく7名であり、2020年度で定年退職の1名を引き継ぐ形で2021年度から1名の新規採用が確定している。また、技術系特任専門員2名、技術支援員1名（2020年度に技術支援員1名を特任専門員に変更）、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。なお、2021年度から技術課が技術推進部に組織改編され、機器センター配属の技術職員は機器分析ユニットに所属することとなった。新たにユニット長が置かれ、機器分析ユニットのマネジメントに従事する。

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、機器センターは比較的汎用性の高い装置群を集中的かつ経常的に管理している。2012年7月より、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。また、2015年度からは機器センター所有の設備のうち所外公開装置すべてをナノプラットフォームにて運用している。さらに、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。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、さらには2019年度末に最先端の高速原子間力顕微鏡2機が導入された。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。2020年度は、老朽化した可視・紫外円二色性分散計の設備更新を行い、かつ、新型コロナウイルス感染症対策の2020年度第2次補正予算により400 MHz、600 MHz溶液核磁気共鳴の液体ヘリウム再凝縮器を付加することができた。また、新規文部科学省プログラムであるマテリアル先端リサーチインフラの2020年度第3次補正予算によりデータ連携・遠隔操作機能付電子スピン共鳴装置の導入が予定されている。

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、これまで点在していた機器センター機器室を共同研究棟A棟（旧極低温棟）と実験棟一部に集約しつつある。2021年度以降も引き続き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。

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。なお、大学共同利用機関法人評価において、所外運営委員を半数以上とすることが求められ、次回の運営委員交代時（2022年度）から所外委員比を増やすこととなった。機器センターは大学連携研究設備ネットワーク、ナノプラットフォーム、マテリアル先端リサーチインフラの事業を推進しつつ、大学利用共同機関法人として大学等の研究者への直接的な研究強化貢献のみならず、大学等への組織的な機能強化貢献にも積極的・具体的に寄与すべきであろう。

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などの一部装置の停止を決定している。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。

2021 年度から文部科学省マテリアル先端リサーチインフラプログラムが始動し、分子科学研究所はスポーク機関としてマテリアル DX プラットフォーム形成に関与することとなった。このプログラムの主たる目的は、マテリアルデータベースのデータ収集・蓄積、プラットフォーム構築、AI 等を用いたデータベース利活用等であり、追ってマテリアルの構造・物性計測における測定自動化・遠隔化、マテリアル創成における合成自動化・AI 解析等によるハイスループット化を計画している。DX は省庁を跨いだ大規模な国家プロジェクトであり、機器センターもその一翼を担う組織として積極的にデータ収集・蓄積さらには特徴ある解析アプリの提供等による利活用を推進していきたい。

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 件超に及ぶ。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、2021 年度より新たな試みとして、外部依頼を有償で受け入れる制度も整えた。

装置開発室は大きく機械工作を担当するメカトロニクスセクションと電子回路工作を担当するエレクトロニクスセクションに分かれている。メカトロニクスセクションでは従来の機械加工技術の超精密化に向けた取り組みに加え、近年では、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、3D プリンタ、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。2020 年度は、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年度に分子科学研究所の電子計算機センターから岡崎共通研究施設の計算科学研究センターへの組織改組が行われ、現在は分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所の3研究所により運営されている。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。2020年度においても、計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業や各種スクールの開催をはじめとした様々な活動を展開している。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。

2021年3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、2020年度は271研究グループにより、総数1,103名(2021年3月末現在)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、生物物理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。また最近、錯体化学分野や有機化学分野など幅広い分野の研究者の利用も増加している。

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スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム、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3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、2020年度はこれらプロジェクトにコンピュータ資源の一部(10%以下)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、計算科学研究センター・

ナノテクノロジープラットフォーム事業合同ワークショップ「データ科学に基づく理論・計算科学と実験科学の協働を目指して」と2つのスクール「第10回量子化学スクール」と「第14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。また、東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所、大阪大学ナノサイエンスデザインセンターと協力し、我が国の最先端の計算物質科学技術を振興し、世界最高水準の成果創出と、シミュレーション技術、材料情報科学技術の社会実装を早期に実現するため、計算物質科学協議会を設立・運営し、分野振興を行っている。

2020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。

「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。2020年度は、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、並びに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（一般・シーズ発掘）を実施した。

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、慶應義塾大学先端生命科学研究所と連携した極限環境耐性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、2020年度は、電子顕微鏡を用いて、生命と物質の境界を探る物質-生命境界領域研究グループを新規に設置した。

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。2020年度は、新型コロナウイルス感染症の影響により、シンポジウムの開催は延期となったが、分野横断型の研究集会（ExCELLS シンポジウム）や若手が主体的に企画運営する研究集会（ExCELLS 若手交流リトリート）をオンライン開催し、海外の研究者との研究交流を図った。また、一般市民を対象とする自然科学研究機構シンポジウムにおいては、生命創成探究センターが主体となって、研究成果と諸活動の状況を発信した。

加えて、学術交流協定を締結しているアカデミアシニカ（台湾）の研究者との共同利用研究を実施し、外国人研究職員の受け入れも行った。

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・ ヴィオダイナミックス研究所長		○	○
神田 慶也 九州大理学部長		○	○ (九州大学長)
齋藤 一夫 東北大理教授		○	○
ジョージ・ポーター 英国王立研究所教授化学部長			○

9-3 評議員 (1981 ~ 2004)

氏名	所属	第1期 '81.6.1 ~ '83.5.31	第2期 '83.6.1 ~ '85.5.31	第3期 '85.6.1 ~ '87.5.31	第4期 '87.6.1 ~ '89.5.31	第5期 '89.6.1 ~ '91.5.31	第6期 '91.6.1 ~ '93.5.31	第7期 '93.6.1 ~ '95.5.31	第8期 '95.6.1 ~ '97.5.31	第9期 '97.6.1 ~ '99.5.31	第10期 '99.6.1 ~ '01.5.31	第11期 '01.6.1 ~ '03.5.31	第12期 '03.6.1 ~ '04.3.31
赤松 秀雄	東大名譽教授, 分子研名誉教授	○	○	○	○ '88.1.8 逝去								
石川 忠雄	慶應大学長	○											
石塚 直隆	名大学長	○~'81.7.22											
飯島 宗一	名大学長	○ '81.9.1~	○	○	○~'87.7.21								
植村 泰忠	東大理教授, 東京理大教授	○	○	○									
神田 慶也	九大学長	○											
小谷 正雄	東京理科大学長	○											
小松 登	豊田中研所長	○	○										
齋藤 一夫	東北大理教授, 国際基督教大教授	○	○~'84.5.15			○	○	○					
榊 米一郎	豊橋技科大学長	○	○~'84.3.31										
島村 修	相模中央研最高顧問 理事	○	○										
田島弥太郎	遺伝研所長	○											
馬場 宏明	北大応電研所長	○	○	○	○								
福井 謙一	京大工教授, 京都工織大学長, 基礎化学研究所長	○	○	○	○	○	○						
藤巻 正生	お茶女大家政教授, お茶女大学長	○	○	○									
向坊 隆	東大名譽教授	○											
森 大吉郎	宇宙研所長	○	○'83.11.25 逝去										
亀谷 哲治	星薬科大学長		○	○									
角戸 正夫	姫路工大学長		○	○									
本多 波雄	豊橋技科大学長		○'84.4.16~	○	○	○							

氏名	所属	第1期 '81.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31	第9期 '97.6.1～ '99.5.31	第10期 '99.6.1～ '01.5.31	第11期 '01.6.1～ '03.5.31	第12期 '03.6.1～ '04.3.31
田中 郁三	東工大理教授,理学部長, 学長, 学位授与機構長		○	○	○	○	○						
中嶋 貞雄	東大物性研所長		○										
小田 稔	宇宙研所長		○'84.2.16~	○	○								
斎藤 喜彦	慶應大理工教授			○	○								
森田 正俊	豊田中研代表取締役			○	○	○							
伊東 椒	東北大理教授, 徳島文理大薬教授			○	○	○							
鈴木 進	東北大金材研所長			○									
豊沢 豊	東大物性研所長, 中央大理工教授			○	○	○	○						
平野 龍一	東大名誉教授			○	○								
藤田 栄一	大阪薬科大学長, 京大名誉教授				○	○	○						
西原 春夫	早稲田大学総長				○	○							
倉田 道夫	三菱瓦斯化学(株) 顧問				○	○							
朽津 耕三	長岡技科大教授, 城西大理教授				○	○	○	○					
田丸 謙二	東京理科大理教授				○	○	○						
早川 幸男	名大学長				○'87.7.22~	○	○'92.2.5 逝去						
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	統計数理研所長					○	○	○					
三ヶ月 章	日本学術振興会学術相 談役, 東大名誉教授					○	○						
伊藤 昌壽	東レ(株)相談役最高顧問						○	○	○				
佐々木慎一	サイエンスクリエイト (株)常任顧問						○	○	○				
佐野 博敏	東京都立大学長						○						
櫻井 英樹	東北大理学部長, 東北大理教授						○	○					
松永 義夫	神奈川大理教授						○	○	○				
秋本 俊一	学士院会員						○	○	○				

氏名	所属	第1期 '81.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31	第9期 '97.6.1～ '99.5.31	第10期 '99.6.1～ '01.5.31	第11期 '01.6.1～ '03.5.31	第12期 '03.6.1～ '04.3.31
岩村 秀	九大有機化学基礎研究センター教授							○	○				
加藤 延夫	名大総長							○	○	○			
黒田 晴雄	東京理科大総合研教授							○	○	○			
塩野 宏	成蹊大法教授							○	○	○			
田中 久	前京都薬科大学長							○	○				
堀 幸夫	金沢工業大副学長							○	○				
森本 英武	(株)豊田中央研顧問							○	○				
守谷 亨	東京理科大理工教授							○	○				
大瀧 仁志	立命館大理工教授								○	○			
清水 良一	統数研所長								○	○	○		
田隅 三生	埼玉大理教授, 理学部長								○	○			
土屋 荘次	早稲田大理工学総合研究センター客員教授								○	○	○	○	○
又賀 昇	(財)レーザー技術総合研第5研究部長								○	○			
丸山 和博	京都工繊大学長								○	○			
大塚 榮子	(独)産業技術総合研フェロー									○	○	○	○
京極 好正	(独)産業技術総合研生物情報解析研究センター長									○	○	○	
後藤 圭司	豊橋技科大学長									○	○	○	○
高橋 理一	(株)豊田中央研代表取締役所長									○	○	○	○
中西 敦男	学術著作権協会常務理事									○	○		
細矢 治夫	お茶水女子大理教授									○	○	○	○

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	'20. 4.1 ~ '22.3.31
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						○	○	○
長我部 信行 日立製作所ライフ事業統括本部 企画本部長兼ヘルスケアビジネス ユニットチーフエグゼクティブ								○

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 ~ '20.3.31	'20. 4. 1 ~
FLEMING, Graham R. 米国カリフォルニア大学 バークレー校教授	○								
JORTNER, Joshua イスラエルテルアビブ大学 教授	○								
NORDGREN, Joseph スウェーデンウプサラ大学 教授		○							
CASTLEMAN, A. Worford Jr. 米国ペンシルバニア州立大学 教授		○							
MILLER, William H. 米国カリフォルニア大学 バークレー校教授			○						
LAUBEREAU, Alfred ドイツミュンヘン工科大学 教授			○						
STACE, Anthony John 英国ノッティンガム大学教授				○					
SAUVAGE, Jean-Pierre フランスストラスブール大学 教授				○					
WOLYNES, Peter 米国ライス大学教授					○				
BERRY, Rechard Stephen 米国シカゴ大学名誉教授					○ (~'12.3.31)				
WALMSLEY, Ian A. 英国オックスフォード大学 副学長					○ ('12.4.1~)	○			
O'HALLORAN, Thomas V. 米国ノースウェスタン大学 教授						○			

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		○	○	○	
吉原経太郎 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					○

氏名	所属	第1期 '81.5.1 ~ '83.4.30	第2期 '83.5.1 ~ '85.4.30	第3期 '85.5.1 ~ '87.4.30	第4期 '87.5.1 ~ '89.4.30	第5期 '89.5.1 ~ '91.4.30	第6期 '91.5.1 ~ '93.4.30	第7期 '93.5.1 ~ '95.4.30	第8期 '95.5.1 ~ '97.4.30	第9期 '97.5.1 ~ '99.4.30	第10期 '99.5.1 ~ '01.4.30	第11期 '01.5.1 ~ '03.4.30	第12期 '03.5.1 ~ '04.3.31
山寺 秀雄	分子研教授(客員) (名大理教授)	○											
田仲 二郎	名大理教授	○	○人										
伊藤 光男	東大理教授		○	○(副)人									
木村 雅男	北大理教授		○○共										
黒田 晴雄	東大理教授		○共										
高柳 和夫	宇宙研教授		○	○									
中島 威	東大理教授		○人										
中村 宏樹	分子研教授	○ (共'82.5.1~)	○共	○	○人	○人	○共	○人	○	○	◎共	○人	○人
丸山 有成	分子研教授(客員) (お茶女大理教授)		○	○	○	○人	○人	◎					
山本 明夫	分子研教授(客員) (東工大名誉教授)		○		○	○							
茅 幸二	慶應大理工教授			○共	○共	○共							
菅野 暁	東大物性研教授			○	○								
坪村 宏	阪大基礎工教授			○人									
細矢 治夫	お茶女子理教授			○人	○人								
又賀 昇	阪大基礎工教授			○共	○~'88.3.31								
松永 義夫	北大理教授			○人	○人								
北川 禎三	分子研教授			○共	○人・共	○人・共	○	○人	○人	○	○'00.4.1~	◎	◎
齋藤 一夫	分子研教授			○									
青野 茂行	金沢大院自然科学研 究科長				○	○							
安積 徹	東大理教授				○人	○人							
原田 義也	東大教養学教授				○人	○(副)人							
松尾 拓	九大工教授				○共								
丸山 和博	分子研教授(客員) (京大理教授)			○	○'88.6.1~								
大瀧 仁志	分子研教授				○'88.4.1~	○	○共						
薬師 久彌	分子研教授				○'88.9.1~	○共	○人	○人	○共	○共	○共	○人	○人

氏名	所属	第1期 '81.5.1 ~ '83.4.30	第2期 '83.5.1 ~ '85.4.30	第3期 '85.5.1 ~ '87.4.30	第4期 '87.5.1 ~ '89.4.30	第5期 '89.5.1 ~ '91.4.30	第6期 '91.5.1 ~ '93.4.30	第7期 '93.5.1 ~ '95.4.30	第8期 '95.5.1 ~ '97.4.30	第9期 '97.5.1 ~ '99.4.30	第10期 '99.5.1 ~ '01.4.30	第11期 '01.5.1 ~ '03.4.30	第12期 '03.5.1 ~ '04.3.31
木田 茂夫	分子研教授				○~'88.3.31								
岩田 末廣	分子研教授					○人	○人	○'94.4.1~	○人	○人	○~'00.3.31		
志田 忠正	京大理教授					○人	○人						
田隅 三生	東大理教授					○人	○						
仁科雄一郎	東北大金材研教授					○共	○						
村田 好正	東大物性研教授					○	○(副)						
中筋 一弘	分子研教授					○	○人	○人 (~'94.3.31)					
飯島 孝夫	学習院大理教授						○人	○(副)					
伊藤 公一	大阪市立大理教授						○人	○人					
小川禎一郎	九大総合理工教授						○共	○共					
小尾 欣一	東工大理教授						○共	○					
京極 好正	阪大蛋白研教授						○人	○人					
田中 晃二	分子研教授						○	○共	○人	○人	○共	○共	○共
齋藤 修二	分子研教授						○~'92.4.1	○共	○共	◎共			
川崎 昌博	北大電子科学研教授							○人	○人				
近藤 保	東大理教授							○人	○(副)人				
斎藤 軍治	京大理教授							○	○				
塚田 捷	東大理教授							○共	○共				
山口 兆	阪大理教授							○人	○人				
宇理須恆雄	分子研教授							○共 (~'94.5.1~)	○共	○共	○	○共	○共
中村 晃	分子研教授							○					
小杉 信博	分子研教授								○人	○人	○共	○人	○人
渡辺 芳人	分子研教授								○共	○共	○人	○~'02.3.31	
大澤 映二	豊橋技科大工教授								○	○共			
生越 久靖	福井高専校長								○	○			
小谷 正博	学習院大理教授								○人	○人			
西 信之	分子研教授								○人	○人	○人	○共	○共
三上 直彦	東北大院理教授								○共	○人			
岡田 正	阪大院基礎工教授									○	○共		
加藤 重樹	京大院理教授									○人	○人		

氏名	所属	第1期 '81.5.1 ~ '83.4.30	第2期 '83.5.1 ~ '85.4.30	第3期 '85.5.1 ~ '87.4.30	第4期 '87.5.1 ~ '89.4.30	第5期 '89.5.1 ~ '91.4.30	第6期 '91.5.1 ~ '93.4.30	第7期 '93.5.1 ~ '95.4.30	第8期 '95.5.1 ~ '97.4.30	第9期 '97.5.1 ~ '99.4.30	第10期 '99.5.1 ~ '01.4.30	第11期 '01.5.1 ~ '03.4.30	第12期 '03.5.1 ~ '04.3.31
小谷野猪之助 関一彦 田中武彦 簇野嘉彦 小林速男	姫路工業大理教授 名大物質科学国際研究 七教授 九大院理教授 九大院総合理工教授 分子研教授									○共 ○人 ○人 ○(副) ○人	○共 ○人 ○人 ○(副) ○人		
阿知波洋次 北原和夫 濱口宏夫 松本和子 平田文男	東京都立大院理教授 国際基督教大教養教授 東大院理教授 早稲田大理工教授 分子研教授										○ ○ ○人 ○人 ○人	○人共 (人'02.4.1~) ○ ○人 ○人 (~'02.3.31) ○人	○人 ○ ○人 ○人 ○人
藤井正明 阿久津秀雄 宇田川康夫 太田信廣 川合眞紀	分子研教授 阪大蛋白研教授 東北大多元研教授 北大電子科学研教授 理化学研主任研究員										○人	○人 ○ ○(副)人 ○人 ○	○人 ○(副)人 ○人
榊茂好 菅原正 魚住泰広 西川恵子 岡本裕巳 加藤隆子	九大有機化学基礎七 教授 東大院総合文化教授 分子研教授 千葉大院自然科学教授 分子研教授 核融合科学研教授											○人 ○共 ○'02.4.1~	○人 ○共 ○ ○人 ○

9-9 運営会議委員 (2004 ~)

◎ 議長 人－人事選考部に属する委員
 (副) 副議長 共－共同研究専門委員会に属する委員

氏名・所属 (当時)		第1期 '04.4.1～ '06.3.31	第2期 '06.4.1～ '08.3.31	第3期 '08.4.1～ '10.3.31	第4期 '10.4.1～ '12.3.31	第5期 '12.4.1～ '14.3.31	第6期 '14.4.1～ '16.3.31	第7期 '16.4.1～ '18.3.31	第8期 '18.4.1～ '20.3.31	第9期 '20.4.1～ '22.3.31
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	○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	第9期 '20.4.1～ '22.3.31
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	○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	○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	○共
秋山 修志 分子研教授						○	○人	○人	◎共
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					
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 東工大院理工教授				○人	○人				
佃 達哉 東大院理教授				○人	○人				
朝倉 清高 北大触媒セ教授				○	○	○			
神取 秀樹 名工大院工教授				○	○(副)人	○(副)人			
河野 裕彦 東北大院理教授				○	○共	○			
寺寄 亨 九大院理教授				○人	○人	○人			
水谷 泰久 阪大院理教授				○人	○人	○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		

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28～33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28～33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ともに、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】
- 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か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 社会人学び直しなどの生涯教育を通じた社会貢献を目的として、専門的技術獲得のためのトレーニングコースや、小中学校の理科教員を対象とした最新の研究状況を講演するセミナーを実施する。【42】
- ③ 民間等との共同研究や受託研究等を受け入れるとともに、最先端の研究成果や活用可能なコンテンツについて、産業界等との連携を図り技術移転に努めるとともに、第3期中期目標期間終了時において、基礎的な自然科学が産業界のイノベーションに如何に貢献したかに関する実績を取りまとめ、社会へ発信する。【43】

5 その他の目標を達成するための措置

(1) グローバル化に関する目標を達成するための措置

- ① 機構長のリーダーシップの下、機構が締結した国際交流協定等に基づき、グローバル化の進展に対応した国際的拠点形成のための研究者交流事業や国際共同事業を推進する。【44】

- ② 各機関においては、各機関が締結した国際交流協定などに基づき、海外の主要研究拠点との研究者交流、共同研究、国際シンポジウム及び国際研究会等々をそれぞれ毎年度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3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、中期目標を達成する。
 - ・ [1-2] 機構本部の研究力強化推進本部と各機関の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引き続き取り組む。
- [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を深めるとともに、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またはオンライン参加を奨励し、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探査のための連携拠点を国内の大学に設け、NASA アストロバイオロジー活動、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を維持・発展させる。
- [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の「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、引き続きそれぞれ公募研究やワークショップ等を実施し、研究の促進及び分野の形成を図るとともに、分野の成熟について調査し新分野創成センターとして支援を継続するかの判断をする。また、新分野探査室において、新たな分野の立ち上げに向けた検討を行う。
 - ・ [3-2] 生命創成探査センターにおいて、機構内外の研究者との緊密な連携を更に強化して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] 各機関によるネットワーク型研究加速事業において、機関間連携や国際拠点形成に向けた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。第3期中期目標期間の最終年度として、本事業による研究成果の検証を行う。

各分野の特記事項を以下に示す。

（国立天文台）

- [4] すばる望遠鏡及び超広視野主焦点カメラ（HSC）を用いて、従来の約10倍の天域にわたって遠方宇宙を探査することにより、天体の形成過程や宇宙の大規模構造の起源についての研究を推進する。また、太陽系及び太陽系外の惑星形成領域を観測するための装置（分光器、撮像器等）を開発し、惑星の形成過程や、太陽系外惑星の性質についての研究を推進する。第3期中期目標期間終了時まで、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] すばる望遠鏡の共同利用観測を推進するとともに、その主力観測装置である超広視野主焦点カメラ（HSC）を用いた、従来の約10倍の天域にわたって遠方宇宙を探査する観測計画（戦略枠プログラム）を完成させ、天体の形成過程や宇宙の大規模構造の起源について高い研究成果を上げる。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、近赤外線ドップラー分光器（IRD）による戦略枠プログラムを推進して地球型系外惑星の検出を目指す。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、第4期中期目標期間からの本格観測開始に向けて、東京大学等と共同でハワイ現地での装置部品の受入れ・据付け・調整を継続する。並行して、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を行い、科学観測手法の検討を進める。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。
- [5] アジア、北米、欧州の国際共同科学事業であるアタカマ大型ミリ波サブミリ波干渉計（アルマ望遠鏡）を用いて、太陽系外の惑星形成や銀河形成の解明に取り組むとともに、生命の起源に関する様々な物質の探査を行う。アルマ望遠鏡の運用継続のため国際分担責任を果たすとともに、第3期中期目標期間終了時まで、次世代のバンド1受信機66台の組立てを完了する。
 - ・ [5-1] 引き続き、アルマ望遠鏡の運用・保守の国際的責務を果たす。新型コロナウイルス感染症の影響により、令和2年3月より望遠鏡の科学運用（共同利用観測）をおよそ一年間停止したが、令和3年度は通常の安定的な運用状態に復帰させる。日本の国際貢献分に応じて観測時間を確保し、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、太陽系外の惑星形成や銀河形成の解明、生命の起源に関する様々な物質の探査を進めて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受信機について、目標どおり66台の組立てを完了する。
- [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（TIO）の最小限の運用に必要な共通経費を分担する。TIOの一員として、ハワイ・マウナケアにおける建設再開に向けた取組み（現地関係者との話し合いやTIO本部のハワイへの移転など）を最優先で進めるとともに、TIOガバナンスの改善を継続する。また、国際協力による科学研究や観測装置開発の計画を検討し、国内においては運用期に向けた大学共同利用・共同研究の準備を行う。日本が分担している望遠鏡本体構造及び研磨加工を含む主鏡分割鏡の製作について、現地建設再開後の本格的製造再開に向けて、円滑な製造とコストリスク低減のため、研究開発・試作検証などに取り組む。また、第一期観測装置IRIS撮像系について技術検討や設計を更に進め、最初の詳細設計審査（令和3年度実施予定）に合格する。マウナケアでの建設ができない場合に備え、TIO及びTMT参加機関と共に、代替建設地スペイン・カナリア諸島・ラパルマにおける建設及び運用計画を検討する。

- 【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の開発研究を進める。
- ・【7-1】先端技術センターにおいて、重力波プロジェクト及び全国の大学等と共同し、KAGRAの第4期国際重力波観測運転（新型コロナウイルス感染症の影響により、開始時期は調整中）ネットワークへの参加に向け、国立天文台が担当する機器のインストール完了及び、必要な機器の整備を実施する。また、第5期国際重力波観測運転での更なる性能向上に向けて、防振系、補助光学系、ミラーの性能評価系をはじめとした様々な装置の開発・検討を進める。
 - ・【7-2】重力波プロジェクトにおいて、東京大学宇宙線研究所の主導の下、高エネルギー加速器研究機構と協力して、重力波望遠鏡KAGRAの機器改修及び調整運転を継続し、次期国際共同観測に向けて感度の更なる向上を目指す。
 - ・【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）を用いた大規模並列計算システムを導入し、共同利用に供する。また、GPU用シミュレーションコードの開発を継続し、それを用いたシミュレーション研究を推進する。
- 【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、「小型JASMINE」に関して、期待される科学成果、衛星システム、データ解析等のより詳細な検討や開発を進め、宇宙航空研究開発機構（JAXA）宇宙科学研究所で実施される審査の準備を引き続き行う。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】JAXA宇宙科学研究所と協力して、小惑星探査機「はやぶさ2」について、小惑星Ryuguのリモートセンシングデータを分析・解析し、成果論文を公表する。木星系探査機「JUICE」搭載レーザー高度計（GALA）は、必要に応じて欧州宇宙機関における打ち上げ前試験を支援する。火星衛星探査計画（MMX）では、測地学的手法を用いた火星衛星内部構造推定の検討を進め、関連する観測機器LIDARの開発を支援する。
 - ・【8-3】太陽観測衛星「ひので」の科学運用（第4期延長運用：令和3～令和5年度）をJAXA宇宙科学研究所と協力して行い、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・周期活動に関する科学目標の達成に向けて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。
 - ・【8-4】引き続き、世界最速の天文学専用スーパーコンピュータ「アテルイII」を中心とする共同利用計算機システムを安定に運用し、日本全国の研究者の共同利用に供する。同時に大規模シミュレーション用ハードウェア・ソフトウェアの研究・開発を通じ、シミュレーション天文学拠点として優れた成果を上げる。さらに、次期スーパーコンピュータ（第4期中期目標期間中に導入予定）の検討を開始する。計算基礎科学連携拠点やHPCIコンソーシアムでの活動を通じ、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、東アジア中核天文台連合（EACOA）に参加する中国・韓国・台湾の天文台・研究所と協力して、米国ハワイ島にある東アジア天文台（EAO）を運用する。また、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。

（核融合科学研究所）

- 【10】ヘリカル方式の物理及び工学の体系化と環状プラズマの総合的理解に向けて、大型ヘリカル装置（LHD）の更なる性能向上を目指し、プラズマ制御、加熱及び計測機器、並びに安全管理設備の整備を進めて、重水素実験を実施する。これにより、第3期中期目標期間終了時までには、イオン温度1億2,000万度を達成し、核融合炉に外挿可能な超高性能プラズマを実現する。また、重水素放電におけるイオンの内部輸送障壁形成や粒子リサイクリング特性等に関する水素同位体効果を、共同研究を基盤とする学術研究により検証する。
- ・【10-1】大型ヘリカル装置（LHD）において、電子サイクロトロン共鳴加熱（ECH）装置のマイクロ波入射方向を最適化し、平成29年度に達成したイオン温度1億2,000万度のプラズマの高電子温度化を更に進め、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、プラズマ中に高エネルギー粒子を注入する「中性粒子ビーム入射加熱装置」のイオン源電極を改造するとともに、イオン加速を行う「イオンサイクロトロン周波数帯加熱装置」を増強整備して、高エネルギー粒子閉じ込め研究を更に加速する。水素同位体効果について、メカニズム解明の鍵と目されるプラズマ中の「乱流」との関係計測精度を高めることにより調べる。さらに、イオンの内部輸送障壁形成や粒子リサイクリング特性に与える水素同位体の影響に関しても、共同研究を基盤とする学術研究により検証する。
- 【11】プラズマシミュレータ（スーパーコンピュータシステム）を有効活用して、数値実験炉の構築に向けたコアプラズマから周辺プラズマ・プラズマ対向壁までを含むシミュレーションコードの整備・拡張・高精度化及び統合化のための研究を進めるとともに、平成31年度中において、プラズマシミュレータの性能を現行機種と比べて4倍以上に向上させ、それに対応した各種3次元コードの最適化を行う。また、平成31年度までに、コアプラズマにおける乱流輸送のモデル化と統合輸送コードへの組み込み、第3期中期目標期間終了時までには、各種輸送コードに複数イオン種効果を取り込む。さらに、第3期中期目標期間終了時までには、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によるイオンサイクロトロン共鳴周波数帯加熱（ICRF）波動の効果の解析（3）令和2年度までに開発されたタンクステン・炭素への水素照射の分子動力学シミュレーション技法を用いたプラズマ対向材の物性評価による周辺プラズマ輸送解析の高度化（4）LHD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、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い、実験結果との照合によりコードの完成度を高める。
- 【12】核融合炉の早期実現を目指し、平成28年度でヘリカル炉の概念設計をまとめ、各開発課題の数値目標を具体化する。炉設計の精密化の推進、それと連動した基幹機器の高性能化と高信頼性、規格基準の確立に向けた開発研究を推進することにより、第3期中期目標期間終了時までには、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、炉設計研究と要素技術開発研究のリンクを強化して総合的な研究開発を進め、（1）「大

口径強磁場導体試験装置」等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腐食を含む物質移行試験、(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データベース構築、(4)超高温熱流機器試験体のLHDプラズマ照射と総合性能評価を行う。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等を引き続き促進するとともに、規格・基準構築に向けての知見の集積を行う。これらに基づいて、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、ヘリカル炉の実現に向けた学術研究ロードマップを報告書にまとめる。

(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jing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】これまでに導入してきた、バイオイメーjing、光操作技術、大規模遺伝子解析、ゲノム編集技術、バイオインフォマティクス、画像解析などの研究手法を更に高度化し、引き続き、細胞の分化・増殖機構、発生・再生現象、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において、定量的かつ統合的な生命現象の解析を行う。これらの活動により、世界を先導する独創的な生物学研究の推進という目標を達成する。
- 【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認し、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・共同研究を実施する。様々な新規モデル生物に対し、遺伝子操作から表現型解析までを円滑にかつ効率的につなぐ研究パイプラインを整備する。確立した技術については、データベースやトレーニングコースを通じて公開する。こうした取組みを通じて、生物資源の充実という目標を達成する。
- 【15】バイオイメーjing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】既に実現できている国内ネットワークを通して、画像の取得から解析手法の提供までを含めた、バイオイメーjing研究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し、国内のイメーjingネットワーク強化を更に推進する。先端バイオイメーjing支援プラットフォーム(ABiS)では、Euro-Bioimagingが推進する、Global Bioimagingの参加メンバーとして、令和3年秋に実務者会議に参加して最先端イメーjing技術の情報共有を図り、次期の活動につなげるべく、国際イメーjingネットワーク連携を更に活発化させる。

(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・細胞の基盤、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】陽イオンチャンネルが有する多様な機能とその分子基盤等の解明に向けた研究を推進し、第4期中期目標期間を見据えて、生体機能分子の構造と作動機構及び細胞における役割に関する成果を取りまとめる。
- ・【16-2】心臓機能に重要な役割を果たす代謝型受容体の新規内在化機構、グリア細胞と神経活動との関連及びオリゴデンドロサイトの神経軸索選択性の基盤等について解明し、代謝・循環調節及び神経情報処理の、動的側面と分子細胞機構に関する成果を取りまとめる。
- 【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】運動障害と視床下核機能の関連、及び共感の神経基盤等の解明に向けた研究を推進し、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に関する研究成果について総括する。
- ・【17-2】大容量の電顕画像解析を可能とする超薄切片回収用テープの新素材の開発及び、二光子超解像顕微鏡法の改善のための新規検出器等の開発等を行い、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各種改良技術を取りまとめ、第4期中期目標期間での研究活動に資する。
- 【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jing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】脳内表象の処理機構とその動態、及び視覚ノイズに対する脳波の時系列波形の個人特有な一貫性などを明らかにする。また、7テスラMRI及びMRスペクトロスコーピーにより、ヒトを対象とした運動学習に伴う大脳皮質神経ネットワークの結合変化並びに代謝変化に関する研究を推進する。それらにより、脳-人体の働きとそのしくみについての統合的理解を深める。

(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・計算科学的手法の開発を更に推進して第4期中期目標期間に展開する基礎を確立する。既に、光・量子科学技術に基づく分子系の観測と制御、不均一系触媒の反応機構、生体分子系の構造形成・機能などを解明してきており、これらの成果に基づく触媒、表面や生体分子などを含む複雑分子系の反応、物性、機能、観測・制御の更なる解明及び学理構築を目指した理論・計算科学研究を展開する。さらに、第4期中期目標期間を見据えて成果を取りまとめる。
- 【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、原子分子システムの機能解析のための新たな計測・制御法開拓におけるコミュニティの拠点とする。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ラ光学特性に基づく物質機能の開拓を継続し成果を取りまとめるとともに、第4期中期目標計画に向けて固体表面等における分子計測・計測制御手法の開拓に着手する。また、放射光を用いた有機材料、環境エネルギー材料等の先端計測を推進して放射光の化学的利用をより強化し、成果を取りまとめる。
- 【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、及び新規物性計測手法開発などの一連の成果を集約する。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への展開に着手する。
- ・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、展開研究を継続する。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・創製を推進し、第4期中期目標期間を見据えて成果を取りまとめる。

(2) 研究実施体制等の整備に関する目標を達成するための措置

- ・【22】学術研究推進の基本である各研究者の自由な発想による挑戦的な研究活動を促進するため、新たな方向性を探る研究や学際的研究を推進する研究グループの形成支援、若手研究者の支援、競争的資金の獲得支援、国際的環境の整備等を強化する。
- ・【22-1】各機関・センターにおいて、機関内の個々の研究者が応募できる研究推進経費の充実や研究進捗状況の審査を踏まえた若手研究者への研究経費助成等を行うとともに、機構本部において、若手研究者による分野間連携研究プロジェクト、分野融合型共同研究事業、戦略的国際研究交流加速事業等を継続し、個人の自由な発想に基づく学術研究等を進展させる。これらの事業の総括を行い、第4期中期目標期間に向けた足掛とする。
- ・【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】各機関で実施するプロジェクトの特性に応じ、研究者コミュニティの意見を反映させつつ、研究推進体制等の見直しを行う。
- ・【23-2】プロジェクトの進捗に関し、該当機関の運営会議等において進捗報告を行い、研究者コミュニティの意見も踏まえつつ、その推進について迅速かつ適切な意思決定を行う。
- ・【23-3】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、地元住民等への研究の安全性等の説明を通じ、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。(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の国内外から特任教員、研究者を採用し、体制整備を完了させ、外国人研究者割合20%を達成する。
- ・【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高分散分光装置IRD、及びNASA/TESS宇宙望遠鏡等と連携するための多色撮像装置MuSCATシリーズによる太陽近傍の地球型系外惑星探査を継続し、ハビタブルな惑星候補を見つける。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、九州大学及び東北大学と設立したコンソーシアムの運営、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、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。また、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。(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。コロナ禍での経験を基に研究のDX化を検討・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、蓄積した共同利用・共同研究の書誌情報や令和3年度から新たに取得する書誌情報以外の情報をIRに活用し、大学の機能強化への機構の貢献度を明らかにする。
- ・【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】機構が立ち上げた自然科学大学間連携推進機構(NICA)協議会の場を活用して、参画大学の意見を踏まえた分野別研究ネットワークの充実を図るとともに、大学間連携による各大学の研究力強化に向けた取組みとして実施している研究者や技術者の育成プログラム等の成果を検証し、第4期中期目標期間に向けた連携の在り方について検討する。
- ・【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、研究の活性化等を引き続き図る。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、連携する海外機関と共同で若手研究者を国際公募により採択した後、機構で採用し、連携する海外の研究機関で研究に従事させることにより、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】外部委員を過半数含む科学諮問委員会やユーザーズ・ミーティング等を開催し、国内外の研究者コミュニティから共同利用の現状や将来計画等への意見を取り入れながら、海外においてすばる望遠鏡、アルマ望遠鏡の運用を継続し、TMT（30m 光学赤外線望遠鏡）建設再開に向けた取組みを進める。京都大学岡山天文台の 3.8m 望遠鏡（せいめい望遠鏡）について、京都大学の協力の下、国立天文台が主体となって、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% に維持し、共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供する。
 - ・【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国内外の研究者に提供し、アルマ望遠鏡や海外の大口径地上望遠鏡（DKIST, SST, GREGOR 等）、海外の太陽観測衛星（Interface Region Imaging Spectrograph [IRIS], Parker Solar Probe, Solar Orbiter 等）との共同観測を含めた太陽研究を支援する。また、将来の飛翔体及び大型地上望遠鏡を用いた太陽観測を見据えて、必要となる先端の観測技術の開発を、国内外の大学等と協力して進める。
 - ・【28-3】自然科学大学間連携推進機構（NICA）の一環として、引き続き、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する。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する。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、引き続き国内共同研究の基盤として位置付け、大学からの研究成果創出に資する。また、国際共同研究については、引き続き「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新規実験提案の窓口となる、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。これらの共同研究の実施に際し、テレビ会議や遠隔実験参加システムを活用する。
 - ・【29-2】数値実験炉研究プロジェクトでは、プラズマシミュレータの利用環境の継続的な整備、シンポジウム・報告会等の開催によるシミュレーション科学の普及、講習会・プログラム最適化支援等を通じたシミュレーションコードの高度化等により、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引き続き 100% に維持する。また、今後のプラズマシミュレータの更なる高性能化に向けた調査研究を行う。
 - ・【29-3】核融合工学研究プロジェクトでは、共同研究制度を活用し、ヘリカル炉開発を促進する設計検討を共同研究により進め、成果をまとめる。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共同研究の機能を強化し、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、成果をまとめる。原型炉研究開発を進めるための大学との共同研究を更に推進し、これまでの成果をまとめる。日米科学技術協力事業「原型炉ダイバート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引き続き支援する。
 - ・【29-4】2 国間・多国間協定等に基づく連携事業を引き続き推進する。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、世界最大級のヘリカル装置である LHD と、同研究所の W7-X における装置間比較研究を継続して実施する。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、共同研究を更に進める。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、LHD における共同実験を継続して進める。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も引き続き推進する。これらの共同研究の実施に際し、テレビ会議や遠隔実験参加システムを活用する。

(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を強化し、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。国際バイオイメージングネットワーク（GBI）の実務者会議に参加し、情報共有と意見交換を行い連携を強化する。以上の活動により、第3期中期目標期間中での20件程度の国際共同利用・共同研究実施を達成する。

- ・【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第3期中期目標期間の平均として前年度比で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、生物遺伝資源の保存技術開発に関するコンファレンスを開催し、保存技術開発の推進に努めるとともに、技術講習会を開催するなど成果の普及に努める。以上の活動により、中期計画で掲げた数値目標を達成する。
- ・【30-3】引き続き、多様な顕微鏡、画像解析技術において、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、引き続き大型スベクトログラフの共同利用率を90%に維持し、中期計画の目標を達成する。先端バイオイメージング支援プラットフォームでは、既に実現した国内外のネットワーク形成を更に推進する。

（生理学研究所）

- 【31】分子から細胞、組織、システム、個体にわたる機能生命科学（生理学）及び脳科学分野の共同利用・共同研究拠点としての機能を強化する。年間、共同研究件数100件、生理研研究会20件を維持する。自然科学大学間連携推進機構（仮称）の一環としての7テスラ超高磁場MRI装置等を用いた脳・人体機能イメージングネットワークを構築し、全国の大学等研究機関との共同研究体制を確立する。先端光学・電子顕微鏡を用いた共同研究は、新規の共同研究者を開拓する。研究者へのニホンザルの提供については、安全でユーザーのニーズに沿った付加価値の高い個体の提供を目指し、他機関と協力し、品質信頼性の更なる向上に取り組むとともに、長期的供給体制の整備を継続する。遺伝子改変に用いるウ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】年間の共同研究件数100件以上、生理研研究会20件以上を維持する。
- ・【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、MRI画像の収集とデータ共有の推進により、構築した国内外研究施設との連携を更に強化し、またヒトと非ヒト霊長類の種間比較研究体制を構築する。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国際共同研究を引き続き進め、拡散強調画像を用いたヒト脳の機能構造解析に関する研究成果を取りまとめる。
- ・【31-3】動物資源共同利用研究センターにおいて、第4期中期目標期間を見据え、稼働エリアを広げるとともに、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を引き続き進める。また、令和2年度に開始した所内への公募に加えて、所外各機関への公募を開始する。
- ・【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、効率的な運営及び微生物学的に安全で付加価値の高い動物の提供のための事業集約化を実現する。繁殖を停止した動物の飼養保管方法、及び有効利用を含む取扱いに関する方策については、動物愛護にも十分配慮し、引き続き慎重に検討を進める。
- ・【31-5】遺伝子改変動物作製に資する始原生殖細胞の初期発生過程に関する研究を行う。さらに、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し、霊長類、齧歯類、魚類、などの特定神経路において、より特異的でかつ高効率な遺伝子導入を可能にする技術を開発する。
- ・【31-6】大容量の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実質的な運用を進めつつ、第4期中期目標期間を見据え、三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な解析技術に関する成果をまとめる。
- ・【31-7】先端バイオイメージング支援プラットフォーム（電子顕微鏡技術支援、構造及び機能的磁気共鳴画像技術支援等）事業などを通じて構築した、生命科学を包括した支援体制を更に充実させるとともに、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、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】先進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、種々の先進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。放射光の化学的利用を継続しつつ、光電子運動量顕微鏡を活用した新規物性研究を国際的な共同研究で推進し、第4期中期目標期間での更なる展開に備える。
- ・【32-2】機器センター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」プロジェクトを引き続き推進し、全国の大学にある先進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・共同研究について業績・成果の取りまとめを行う。協奏分子システム研究センターにおいては、非凡な機能を有する分子システムの解析やそれらを基盤としたデバイス開発に取り組むとともに、業績・成果の取りまとめを行う。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、先進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は、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、分子科学、物性科学、生物物理等の幅広い分野に対する共同利用事業を推進する。不均一系触媒の反応機構、光機能分子の光物性、生体機能分子系の構造形成・機能に関する理論・計算分子科学研究を実施する。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、元素戦略プロジェクト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。令和4年12月のシステム更新に向けて次期システムの構成を検討する。

（分野連携型センター）

- 【33】機構における新たな学問分野の創出を目指し、新分野の探査・萌芽促進・育成を担う新分野創成センター並びに国際的共同研究拠点を目指すアストロバイオロジーセンター及び次世代生命科学センター（仮称）等を設置し、共同利用・共同研究、各種研究プロジェクトの実施等に取り組む。また、岡崎3機関が共同運営する岡崎統合バイオサイエンスセンターについては、バイオネクストプロジェクト及びオリオンプロジェクトを推進してその機能を強化した上で、岡崎3機関の関連部門も含めた必要な組織改革を行い、平成30年度に創設する次世代生命科学センター（仮称）の中核組織として再編・統合する。

- ・【33-1】(新分野創成センター(CNSI))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について勉強会等を行う。
- ・【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継続する。
- ・【33-3】(生命創成探究センター(ExCELLS))令和2年度までに機構外の大学・研究機関に所属する研究者を代表とするExCELLS連携研究を2件、機構外の研究者がセンター内の教員と行うExCELLS課題研究(シーズ発掘)を14件(内1件は課題研究(一般)に発展)を採択・実施したが、これらの共同研究の更なる拡充を目指し、国内外の研究者との共同研究を推進する。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特別共同研究も引き続き実施する。
- ・【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・ボンにブランチを置き、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】機構全体のIR推進を実施するため、本部及び各機関のIR担当者が協力する体制の下、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。また、大学の機能強化への貢献度を総合的に把握するため、教育、国際化、分野融合等への貢献を把握できる指標の収集機能をNOUSに実装し、NOUSを中心とした機構のIR体制の整備を行う。
- ・【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】引き続きユーザーからの要望等に基づき、NOUSの改良を進めて機能・利便性を向上させ、各機関が実施する公募事業への更なる適用の拡大、活用の充実を図る。
- ・【35】自然科学大学間連携推進機構:NICA(仮称)を通じ、大学との緊密な連携の下に、天文学、核融合科学、分子科学、基礎生物学、生理学の各分野における大学の研究力強化に貢献するため、平成30年度までに、資源配分や支援内容の総合的な意見集約のシステムを構築する。
- ・【35-1】自然科学大学間連携推進機構(NICA)において議論され、大学の研究力強化への貢献に向けて実施する具体的な取組みを着実に実施する。
- ・【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・充実をさせ、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)
- ・【36-1】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。コロナ禍により国際会議のオンライン化が進んでおり参加が容易になっているが、可能であれば研究者との直接的に接触出来る機会を与えることが好ましいことから、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。
- 【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】コロナ禍による国際人事交流への制限が解消されることを期待し、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継続し、制限が解除されれば若手研究者を世界トップレベルの研究機関へ派遣する体制を維持する。
- ・【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。特に令和2年1月に連携協定を締結した東京都港区の「港区立みなと科学館」での展示等への協力を通じ、地域の教育研究活動に貢献する。
新型コロナウイルス感染症の状況を注視し、適宜、オンラインでの実施も含め柔軟に対応する。
- 【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。
新型コロナウイルス感染症の状況を注視し、適宜、オンラインでの実施も含め柔軟に対応する。
- 【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が中心となって、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、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。

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（IRCC）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IRCC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。さらに、令和元年12月に締結された本機構とドイツ学術交流会（DAAD）との協定に基づき、日独間で共同研究者を含むグループの相互交流による研究促進事業を実施し、国際共同研究を支援する。
- 【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】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引き続き促進し、外国人研究者の割合を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】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引き続き促進し、外国人研究者の招へいを約20%増加させた目標値を達成する。
- 【48】機構の研究活動の国際的評価や国際共同事業等の推進のため、ネット会議等の利用を含めた国際的な会議・打合せの回数を6年間で約20%増加させる。
- ・【48-1】機構の研究活動の国際的評価や国際共同事業等の推進のため、ネット会議等の利用を含めた国際的な会議・打合せを積極的に行い、国際的な会議・打合せの回数を約20%増加させた目標値を達成する。
- 【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」設立に向け、「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・総合研究大学院大学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・新分野創成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・共同研究の意義や成果を国民や社会、大学等へ発信するため、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、評価検討委員会は、共同利用・共同研究が果たす大学の機能強化等への多様な貢献を可視化す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年以内に実施し、効率的な運営を進める。
- 【53】機構長のリーダーシップの下で機構の強みや特色を生かし、教育、研究、社会貢献の機能を最大化できるように、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】引き続き、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り、機構長を補佐する体制を維持する。
- 【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に係る監査の一環として、監事が役員会等の重要な会議に陪席する。また、監事と内部監査組織が連携して機構全体の監査を行うとともに、情報共有を図るための会合を定期的に開催する。
- 【55】優秀な若手・外国人の増員や研究者の流動性向上などにより教育研究の活性化を図るため、クロスアポイントメントを含む混合給与及び研究教育職員における年俸制の活用による人事・給与システムの弾力化に取り組む。特に、年俸制については、業績評価体制を明確化し、退職手当に係る運営費交付金の積算対象となる研究教育職員について年俸制導入等に関する計画に基づき促進し、年俸制職員の割合を第3期中期目標期間終了時まで全研究教育職員の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】令和2年度に導入した新たな年俸制により、新規採用者や希望者の年俸制への転換を進め全研究教育職員の25%以上とする目標を達成する。また、計画的な人事採用計画により若手研究者比率35%程度を引き続き維持する。
- 【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】新たに導入した評価制度について、より公正な評価結果となるよう、制度の検証を行う。また、URAなどの高度専門人材について、多様な人材の確保とそのキャリアパスの更なる充実に向けた検討を行う。
- 【57】技術職員、事務職員の資質と専門的能力の向上を図るため、職能開発、研修内容を充実するとともに、自己啓発の促進並びに研究発表会、研修等への積極的な参加を促す。事務職員については、機構全体を対象として、各役職・業務に応じた研修を毎年度5回以上実施する。
- 【57-1】技術職員については、技術研究会その他の研修等により、技術交流を更に発展させるなど、業務に関する必要な知識及び技能の向上を図るとともに、自己啓発を促進する。事務職員については、機構全体を対象として、各役職・業務に応じた研修を年5回以上実施するとともに、全職員が受講すべき研修の実施に当たっては、実施時期及び実施会場等を考慮して確実に受講可能な環境を整備するよう努めるとともに、外部機関で実施している研修にも積極的に受講できる環境を整備する。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。女性研究者を積極的に採用する施策等を講じ、女性研究者の割合を13%に引き上げるとする目標を達成する。また、在宅勤務制度の本格的な運用を開始するなど、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、各機関等においても運営会議等で議論し、研究動向を踏まえた組織の改編の検討を行う。

3 事務等の効率化・合理化に関する目標を達成するための措置

- 【61】事務局と各機関及び他機構の事務部門との連携を強化し、事務の共同実施等による事務処理の効率化を進める。また、テレビ会議システムによる会議開催を促進し、機構内会議に占めるテレビ会議の比率を、前年度比1以上とする。さらに、経費の節減と事務等の合理化を図るため、第3期中期目標期間終了時まで、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。また、原則としてすべての機構内会議をテレビ会議で行うこととし、機構内の各種会議におけるペーパーレス化を更に進め、目標を達成する。

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、新たな外部資金獲得方策を検討・実施し、収入増を図る。

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することで、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、機構全体の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】すべての固定資産を対象に毎年度実施している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・運用を図る。また、所期の目的を達成し活用されなくなった資産については、Web ページに情報を掲載することで再利用の促進を図るとともに、人事流動性を活かした柔軟な資産の受入・移譲を通じた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】平成29年度までに運用計画を検討し、運用継続の可否を含めた結論を得ているものの、その後の施設の状況や利用状況などを踏まえて、効率的かつ効果的な運用を図る観点から、将来計画の不断の見直しを行いつつ、存続の要否も含めて検討し、適切な管理・運用を図る。

IV 自己点検・評価及び当該状況に係る情報の提供に関する目標を達成するためにとるべき措置

1 評価の充実に関する目標を達成するための措置

- 【66】国際的見地から研究体制及び共同利用・共同研究体制について、様々な機構外の者の意見を反映させ、定期的に自己点検及び外部評価等を実施し、その結果を広く公開するとともに、当該意見に応じて見直しを行う。
- ・【66-1】国際的見地から研究体制及び共同利用・共同研究体制について、各機関の特性に応じた自己点検及び外部評価等を実施し、その結果を広く公開するとともに、必要に応じて見直しを行う。
 - 【67】本機構の業務運営を改善するため、各機関のIR機能の連携により機構全体のIR機能を強化するとともに、平成30年度に機構全体の自己点検及び外部評価等を実施し、その結果を広く公開する。
 - ・【67-1】研究力強化推進本部、共同利用・共同研究室IR班において、機構として外部の評価分析ツール等を活用した各機関、各研究組織、機関横断的組織等の現況分析を実施するとともに、新たに構築する研究者総覧やORCIDを活用した研究業績把握を進める。また、平成30年度に実施した機構全体の自己点検及び外部評価の結果を踏まえ、必要な改善を機構運営に反映させる。

2 情報公開や情報発信等の推進に関する目標を達成するための措置

- 【68】機構シンポジウムを毎年度2回実施するとともに、ホームページ、プレスリリース、定期刊行物などの充実や、一般公開の実施を通して、本機構の研究を含む諸活動の状況を、積極的に社会に発信する。特に、国際化の観点から、英文のホームページを更に充実させ、そのアクセス数を増やすとともに、海外へのプレスリリース件数を6年間で20%増加するなど、多様な伝達手段を活用し、海外への情報発信をより積極的に行う。
- ・【68-1】機構本部広報室と各機関の広報担当が連携し、機構の研究成果や諸活動の状況等を、シンポジウムや一般公開、Web ページ、報道発表など多様な伝達手段により、一般社会等へ積極的に分かりやすく発信する。また、積極的に海外へプレスリリースを行うとともに、英文による情報発信の更なる強化を図る。なお、機構シンポジウムは春と秋を目途として2回実施する。

V その他業務運営に関する重要目標を達成するためにとるべき措置

1 施設設備の整備・活用等に関する目標を達成するための措置

- 【69】グローバル化の推進やイノベーションの創出など教育研究の質の向上の観点から、国の財政措置の状況を踏まえ、キャンパスマスタープランの年次計画に沿った研究施設・設備等の充実を図る。
- ・【69-1】教育研究の質の向上に対応するため、各機関のキャンパスマスタープランの年次計画に沿って研究施設・設備等の充実のための計画的な整備を推進する。
 - 【70】施設マネジメントポリシーの点検・評価に基づき、重点的かつ計画的な整備を進め、施設整備の見直しを毎年度実施し、施設の効率的かつ効果的な活用を図る。
 - ・【70-1】施設マネジメントポリシーに基づく、施設実態調査及び満足度調査を行うとともに、その結果に基づき重点的・計画的な整備並びに、施設の有効活用を推進する。
 - 【71】施設・設備の安全性・信頼性を確保し、所要の機能を長期間安定して発揮するため、計画的な維持・保全を行う。
 - ・【71-1】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】安全管理を担当する者による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に基づき策定した職場復帰支援制度を通じて、メンタルヘルス不調による休職者の職場復帰に向けた支援に努める。
 - 【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】令和元年に策定したサイバーセキュリティ対策基本計画についてPDCAを実施するとともに、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、各機関の管理責任者による不正行為防止計画及び不正使用防止計画の実施状況の検証を行う。また、eラーニングによる研究倫理教育を実施するとともに、各種啓発活動の実施、競争的資金等の不正使用防止に係るコンプライアンス教育等を実施する。

（別紙1）

自己検証結果報告書

令和2年8月

大学共同利用機関法人 自然科学研究機構

分子科学研究所

目次

全体概要	1
Ⅰ. 運営面	4
Ⅱ. 中核拠点性	8
Ⅲ. 国際性	12
Ⅳ. 研究資源	15
Ⅴ. 新分野の創出	20
Ⅵ. 人材育成	23
Ⅶ. 社会との関わり	26
自由記述	31

全体概要

分子科学研究所は、分子科学分野の中核研究機関として(1)学術研究の推進、(2)若手研究者の育成、そして(3)共同利用・共同研究の推進を、研究所が果たすべき 3 つの柱と位置付けて国内外の分子科学研究を牽引してきた。

研究組織は、4 研究領域(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)と領域を繋ぐ 2 つの研究センター(協奏分子システム研究センターとメゾスコピック計測研究センター)からなり、分子科学の研究基盤を構成している。加えて、自然科学研究機構に設置されている生命創成探究センター(ExCELLS)に人員を供出して、分子科学の観点から同センターの運営に寄与している。研究を支援する施設としては、極端紫外光研究施設(UVSOR)、計算科学研究センター、機器センター、装置開発室を擁し、各施設の運営は、技術部門に所属する技術職員と研究者との協力で成り立っている。

I. 運営面

分子科学研究所の運営は、研究所の現状の評価及び将来計画への提言を旨とする顧問(運営顧問、研究顧問、外国人運営顧問)、研究教育職員の人事、共同利用・共同研究等研究所の運営に関する重要事項について、所内外の委員で構成される**運営会議**、そして所内の教授及び准教授(客員を含む)から構成される**教授会議**が所長の諮問に応じる会議体を構成する。さらに、中期計画の中盤には、運営顧問を中心に現況の評価及び将来計画に対する意見聴取を行う。今期については、2019 年 12 月に**分子科学研究所 国際諮問委員会**を開催し、本自己検証に関係する評価及び提言をいただいた。

顧問は全て外部の者で構成される(総計 8 名)。評価結果は、研究所の運営に反映すると同時に、研究者に対しては所長裁量経費としての毎年の配分額に反映される。運営会議(外部 10 名、内部 11 名)は、分子科学及びその関連分野の学術研究者から構成される。顧問及び運営会議の委員は所内外比 11:18 の構成である。

研究不正・会計不正等防止のための措置として、岡崎 3 機関等不正使用防止計画推進室会議による自己点検を実施しているほか、自然科学研究機構に設置されている機構不正行為防止委員会の活動により、適切なコンプライアンス確保に向けた体制は整備されている。

II. 中核拠点性

分子科学分野を牽引する教職員で構成され、当該分野を牽引する研究所として十分な実績を挙げている。分子科学分野及び関連する科学分野の優れた成果を顕彰する学会賞を多く受賞している。特に若手の研究水準の高さは当該分野で国内随一である。

分子科学分野の中核的研究所として、研究所創設以来多くの中核研究者を大学や研究所に輩出し、人的基盤の拡充に寄与してきた。分子科学分野の旗艦研究所として、卓越教授制度を設け先鋭的な分子科学研究を支援すると同時に、分子科学分野の中堅人材の育成を目指すために、大学などに所属する教員に対してクロスアポイントメント制度により一定期間研究に専念する時間と環境を提供するなど、分野の総合的な発展に寄与している。また、我が国の大型プロジェクトの代表機関として、全国の大学教員の活動の取りまとめを支援している。

共同利用・共同研究の実施件数はいずれも研究施設規模に見合う数字である。共同研究の成果は査読付きの論文として公表されており、実施状況は良好である。施設利用については、公表される論文中に分子科学研究所の果たした役割への記載が十分ではないケースがあり、今後は利用成果についても把握に努める必要がある。

III. 国際性

所外の研究者の申請を可能とする様々な国際研究集会を支援している。毎年 1~2 件開催される「岡崎コンファレンス」は分子科学分野のトップレベル研究者を国内外から招聘し、分子科学分野の重要課題について国内研究者との交流を促進している。さらに海外機関と国際交流協定を結び、インターンシップなども含めた幅広い世代の人材交流を推進している。研究顧問(国内機関 1

自然科学研究機構 分子科学研究所 研究活動の状況

名、海外機関 1 名)、外国人運営顧問 2 名、外国人客員教授等による毎年の研究者評価・運営に対するアドバイスが適切に実施されているほか、今中期計画中期盤にあたる 2019 年度は国際諮問委員会による研究所の評価と将来計画へのアドバイスをいただいた。

研究所の各部署には、英語で職務遂行が可能な職員を配置し、所内文書は全て日英併記である。共同利用・共同研究に参加する外国人研究者に対し、来所前後いずれも技術面・生活面で必要な支援が得られるように体制が整えられている。2016 年以降、所内人事は全て国際公募である。

IV. 研究資源

先端的な計測機器や加工装置群に加えて、放射光施設である極端紫外光研究施設(UVSOR)、岡崎 3 機関共通施設の大型計算機施設である計算科学研究センター等を擁し、これらを全国の共同利用や国を超えた国際共同研究に開放して、コミュニティの研究展開に寄与している。年間 600 件近い共同研究・施設利用が実施されており、2,000 名以上にのぼる所外の研究者が来所し、その成果として、年間あたり 300 報を超える研究論文が発表されている。

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、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」、ポスト京の重点課題「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」などの代表機関・責任機関として他機関と連携しながら、施設、設備等の整備・共同運用を行っている。

各共同利用施設に適切に教員、技術職員、事務職員が配置されているほか、共同利用・共同研究を体系的に支援するための事務部署が設置されており、共同利用・共同研究を支援する体制が十分に整備されている。

V. 新分野の創出

学際的・融合的領域における研究実績は、分子科学分野及び周辺研究分野を対象とした学術・技術賞を多くの職員が受賞している事に現れている(Ⅱ 中核拠点性の項目を参照)。また、外部機関所属の研究者による共同利用・共同研究の研究実績は高く評価されている(Ⅳ 研究資源の項目を参照)。研究所は創設以来、次世代の分子科学分野を創出することを重要なミッションとしてきた。研究室主宰者(教授、助教授あるいは准教授)の選考にあたっては、独創的な研究提案を重視して人事選考を実施してきた。また、内部昇格を禁止して、研究所における研究領域の固定化を回避し、研究分野の流動化を促すとともに、転出した研究者が在籍時に創出した研究を大学等で更に発展・展開させることに寄与している。

研究組織を適切に見直し、研究分野の流動化に対応させている。2000 年に設置した岡崎統合バイオサイエンスセンター、それを発展的に廃止して 2018 年に新設した生命創成探究センターに参画した。2019 年度からはクロスポイントメント制度を活用し、他大学の研究者が所内研究者と連携して新たな研究展開を目指す研究活動を行っている。この他、分子科学研究所が主体となり、国内の 5 つの物性科学関連研究拠点が共同して新たな研究領域の発展を目指す「物性科学連携研究体」の構築を目指した活動を開始している(学術会議マスタープラン 2020 に重点大型研究計画 No. 22 として記載: <http://www.scj.go.jp/ja/info/kohyo/pdf/kohyo-24-t286-1-p1.pdf>、自然科学研究機構概算要求事項)。

VI. 人材育成

総合研究大学院大学の基盤機関として大学院教育を実施すると同時に、関連する大学の要請に応じて特別共同利用研究員として大学院生を受け入れ、次世代の分子科学を担う研究者の育成に取り組んでいる。修士課程を含む全ての大学院生に対してリサーチアシスタント(RA)として経済支援を行っている。また、共同利用研究の申請事項の一つとして「若手研究活動支援」を設置するなど、主体的かつ積極的に分子科学分野の後継者の育成に取り組んでいる。

分子科学研究所では、創設時から内部昇格を禁止することで高い流動性を保ち、コミュニティに多くの人材を輩出してきた。今中期計画期間中にすでに准教授 8 名、助教 23 名とおよそ半数の教員が転出している。独立した研究グループを主宰する准教授の採用は、28 歳から 38 歳の若手研

自然科学研究機構 分子科学研究所 研究活動の状況

研究者を登用し、現在、本務教員の 66%が 44 歳以下である。また、外国人研究者 14 名(助教 2 名、特任助教 1 名、博士研究員 11 名)が在籍しており、海外研究者を含む若手研究者の採用や育成に積極的に取り組んでいる。

女性研究者は現在 11 名(所長 1、准教授 2、助教 2、特任助教 1、研究員 5)が在籍しており、全教員・研究員数の 10%に相当する。男女共同参画推進への取り組み、特に子育て・介護中の研究者に対する支援として、構内に保育園を設置しているほか、ライフステージに合わせた柔軟な就労制度の更なる拡充を進めている。

Ⅶ. 社会との関わり

ホームページやプレスリリースによる研究成果の広報活動を進めている。さらに、市民公開講座や研究所一般公開、希望団体への研究施設の見学対応、岡崎市観光協会と連携した各種市民向けイベントへの協力を通じて、市民への広報活動を強化している。スーパーサイエンスハイスクール事業への協力、小・中学校の理科教員を対象としたセミナーの開催、職場体験学習の生徒受け入れ、国際化学オリンピックへの協力など、岡崎市内及び近隣の小学校から高等学校までの様々なレベルでの理科教育に協力して地域社会と連携している。

岡崎商工会議所と連携して隔年開催されるイベントで展示ブースを設置し、地域の民間企業による施設利用促進を図っている。2019 年度からは複数の民間企業など外部機関と連携し運営するオープンイノベーション拠点「社会連携研究部門」を新設した。社会実装が求められる先端的な小型固体レーザーの研究開発を強力に推進し、社会人を含めた研究者育成及び産学を交えた人材流動化の促進に取り組んでいる。また、文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム事業及び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の拠点として、民間企業の施設・機器利用を積極的に受け入れている。

自由記述

【概要】

研究者が研究と教育に専念できるよう、事務の効率化及び事務作業の分業化を推進している。研究力強化戦略室を設け、研究所の運営に係る事務作業を担っている。評価・将来計画、共同研究、国際、施設、広報に担当教員を配置すると同時に、人事管理、評価・研究支援、国際、情報発信を担当する URA 職員を雇用して関係する作業を実施している。

会議の効率化の一例として、毎月開催することが規定されている対面で行う教授会議を原則年 4 回の季節開催とし、審議を必要としない報告事項はホームページに掲載あるいは、メールなどで通知することとした。所内会議及び、岡崎 3 機関に共通の委員会を大幅に整理し、職員の時間効率の改善を図っている。

I. 運営面

開かれた運営体制の下、各研究分野における国内外の研究者コミュニティの意見を踏まえて運営されていること

【主な観点】

- ◎① 共同利用・共同研究の実施に関する重要事項であって、機関の長が必要と認めるものについて、当該機関の長の諮問に応じる会議体として、①当該機関の職員、②①以外の関連研究者及び①②以外でその他機関の長が必要と認める者の委員で組織する運営委員会等を置き、①の委員の数が全委員の2分の1以下であること
- ◎② 上記の体制が、国内外の研究者コミュニティの意向を把握し、適切に反映できる人数・構成となっていること
- ◎③ 研究活動における不正行為及び研究費の不正使用への対応に関する体制が整備される等、適切なコンプライアンスが確保されるための体制が実施されていること
- ◎④ 共同利用・共同研究の課題等を広く国内外の関連研究者から募集し、関連研究者その他の当該機関の職員以外の者の委員の数が全委員の数の2分の1以上である組織の議を経て採択が行われていること

【自己検証結果】

【検証する観点】 ◎①、◎②、◎③、◎④

【設定した指標】

1. 開かれた運営体制の下に研究所が運営されているか(観点①)
2. 外部委員の構成は、共同利用・共同研究推進上十分に広い意見を聴取できる比率になっているか(観点①②④)
3. 学術コミュニティの意見を共同利用施設の運営に反映させる仕組みが整備されているか(観点②④)
4. 研究活動における不正行為及び研究費の不正使用への対応に関する体制が整備されているか。不正防止対策及びその実施状況(観点③)

(本文)

1. 開かれた運営体制の下に研究所が運営されているか(観点①)

自己検証結果: 所長の諮問に応じる会議体を有し、研究所運営に関する重要事項全てにおいて、外部委員を多く含む委員会からの諮問を受けられる体制が整っている。かつ、これら会議体からいただいた評価及び提言を研究所の運営に反映できている。

分子科学研究分野に対して、学術の先端研究を推進すること、当該分野の次の世代を担う若手人材の育成をすること、そして、共同利用・共同研究を通じて当該分野の研究を支援することが、分子科学研究所に課せられた役割である。所内では教授及び准教授(客員を含む)で構成される教授会議の議を経て、研究所の運営に関する重要事項を所長が決定する。所外からの意見は、顧問及び運営会議を通して所の運営に反映される。

顧問の役割は、研究所運営に対する**評価と将来計画への提言**である。顧問は外部有識者で構成される。

- 運営顧問: 研究所運営全体に対する評価と将来計画への提言。4名で構成。
現在、民間企業の経営者、東海地区の民間研究所の経営者、関連学術分野の研究者から構成されている。2020年4月現在の名簿を表I-1に示す。中期計画の進行状況に合わせて1~2年ごとに研究所の現況を確認いただき、評価と提言をいただく。顧問会議の開催記録を表I-2に示す。
- 研究顧問: 分子科学に造詣の深い国内外の2名の委員で構成。全ての研究室主宰者に対して、

自然科学研究機構 分子科学研究所 研究活動の状況

毎年の研究進捗状況を確認し評価いただく。評価結果は毎年の所長裁量経費配分に反映される(表 I-3)。

- 外国人運営顧問: 分子科学分野で指導的立場にある外国人研究者 2 名で構成(任期 2 年)。研究所の運営及び専門分野の研究の評価と提言をいただく。表 I-4 に外国人運営顧問名と訪問記録を掲載。評価レポート公開部分については「分子研リポート」及びホームページで公開している。

表 I-1: 運営顧問の名簿と所属 (2016 年 4 月～2020 年 8 月現在)

晝馬 明 (浜松ホトニクス株式会社代表取締役社長) (2020 年 3 月まで)
 長我部 信行 (株式会社日立製作所 ライフ事業統括本部企画本部長 兼 ヘルスケアビジネスユニットチーフエグゼクティブ) (2020 年 4 月から)
 菊池 昇 (株式会社豊田中央研究所 代表取締役所長)
 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)

表 I-2: 顧問会議の開催記録

2016 年 12 月 7 日 分子科学研究所の運営についての説明と所内見学。意見交換
 2019 年 12 月 9 日～11 日 国際諮問委員会を主導
 国際諮問委員会の報告書の全文はホームページに掲載 (<https://www.ims.ac.jp/publications/report2019/710.pdf>)。全員集まったの会議以外にも、運営顧問の先生方には適宜所長に対してアドバイスをいただいている。例: 社会連携研究部門の運営方針、国際諮問委員会の開催方式について。

表 I-3: 研究顧問名簿及び評価会議開催記録

Hrvoje Petek (米国ピッツバーク大学 教授)
 中嶋 敦 (慶應大学 教授)
 2017 年 4 月 3 日～6 日
 2017 年 12 月 26 日～27 日
 2018 年 4 月 3 日～4 日
 2019 年 3 月 28 日～29 日
 2019 年 12 月 9 日～11 日 国際諮問委員会
 2020 年 5 月 13 日～14 日 オンライン会議で開催

表 I-4: 外国人運営顧問 訪問記録

Ron Naaman (イスラエル国ワイツマン科学研究所 教授)
 2016 年 3 月 2 日～3 日、2018 年 8 月 3 日、2019 年 12 月 9 日～11 日 国際諮問委員会
 Peter J. Rossky (米国ライス大学自然科学研究部 部長・教授)
 2017 年 3 月 12 日～14 日、2019 年 12 月 9 日～11 日 国際諮問委員会
 Benjamin List (ドイツ国マックスプランク石炭研究所 所長)
 2017 年 11 月 13 日～14 日、2018 年 11 月 8 日～9 日、2019 年 12 月 9 日～11 日 国際諮問委員会
 Eberhard Umbach (ドイツ国ヴェルツブルク大学 名誉教授・カールスルーエ工科大学 元学長)
 2018 年 2 月 27 日～3 月 2 日、2018 年 11 月 10 日～16 日

運営会議の役割は、研究所の重要事項に対する審議と可否の判断であり、関連研究コミュニティの委員で構成される(表 I-5 運営会議委員名簿)。運営会議には、人事選考部会及び共同研究専門委員会が設置され、所外委員を含む人事選考部会は研究所の教員全ての人事選考を行い、最終候補者を所長に提言する(表 I-6 に開催記録)。共同研究専門委員会は、共同研究公募内容の審査及び採択に係る審議を担う。

表 I-5: 運営会議委員名簿(2020 年 4 月から任期 2 年)

秋吉 一成	京都大学大学院工学研究科 教授	(人)
鹿野田一司	東京大学大学院工学系研究科 教授	(人)
忍久保 洋	名古屋大学大学院工学研究科 教授	(人)
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	
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	(人)
芳賀 正明	中央大学理工学部 名誉教授	
藤井 正明	東京工業大学 科学技術創成研究院 教授	(共)
福井 賢一	大阪大学大学院基礎工学研究科 教授	(人)

自然科学研究機構 分子科学研究所 研究活動の状況

○村越 敬	北海道大学理学研究院 教授	
◎秋山 修志	分子科学研究所 協奏分子システム研究センター 教授	(共)
飯野 亮太	分子科学研究所 生命・錯体分子科学研究領域 教授	(人・部会長)
石崎 章仁	分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 教授	(人)
魚住 泰広	分子科学研究所 生命・錯体分子科学研究領域 教授	(共・委員長)
江原 正博	分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 教授	(人)
岡本 裕巳	分子科学研究所 メゾスコピック計測研究センター 教授	
加藤 晃一	分子科学研究所 生命創成探究センター 教授	
解良 聡	分子科学研究所 光分子科学研究領域 教授	(人)
齊藤 真司	分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 教授	(共)
山本 浩史	分子科学研究所 協奏分子システム研究センター 教授	(共)
横山 利彦	分子科学研究所 物質分子科学研究領域 教授	(人)

(◎議長、○副議長、(人)は人事選考部会委員、(共)は共同研究専門委員会委員)

表 I-6: 人事選考部会開催記録(人事選考案件数と委員会開催回数: 2019 年度)

人事選考案件数: 教授 1 件(クロスアポイントメント教員)、准教授 4 件(うち複数名同時公募 1 件、次年度継続案件 1 件、クロスアポイントメント教員 1 件)、主任研究員 2 件、助教 8 件(うち前年度引継ぎ案件 2 件、次年度継続案件 3 件)、客員教授・客員准教授(計 7 名同時公募)

委員会開催回数: 人事選考部会 22 回(うち書面審議 15 回)、人事選考小委員会 23 回

2. 外部委員の構成は、共同利用・共同研究推進上十分に広い意見を聴取できる比率になっているか (観点①②④)

自己検証結果: 分子科学研究所の共同利用・共同研究に係る運営は、広く学術コミュニティからの意見を反映する体制の下に行われている。機関の運営に係る全顧問・委員に占める外部研究者の割合は、2 分の 1 を超えている。共同利用課題の採択を審議する委員会の所外委員は 2 分の 1 に満たないため、今後各運営委員会の規程変更を行う。

研究所の運営に対する意見は、顧問及び運営会議を経て聴取される。顧問は計 8 名。全て所外委員で構成される。運営会議は所内 11 名、所外 10 名で構成。これら委員会の所内外比は、11:18 で、所外委員が過半数を占める。顧問のうち 3 名は海外の著名研究者。さらに運営顧問には 2 名の産業界からの委員が含まれる(前項の表を参照)。

運営会議の所外委員の選考は、「学会等連絡会議」が担当する(表 I-7)。この会議は分子科学分野に関連する学会からの推薦を受けた委員で構成される。運営会議所外委員は、関連学会からの意見を十分に反映したものとなっている。共同利用課題の採択は各施設の運営委員会(表 I-8)においては所内委員の数が 2 分の 1 を超えるため、その対応を自由記述に記した。

表 I-7: 学会等連絡会議委員名(所外 13 名、所内 5 名)と推薦学会

林 高史	大阪大学大学院工学研究科 教授	: 錯体化学会
黒田 一幸	早稲田大学理工学術院 教授	: 日本化学会
北川 進	京都大学高等研究院 iCeMS 拠点長	: 日本化学会
八島 栄次	名古屋大学大学院工学研究科 教授	: 日本化学会
林 重彦	京都大学大学院理学研究科 教授	: 日本生物物理学会
竹中 康司	名古屋大学大学院工学研究科 教授	: 日本物理学会
廣井 善二	東京大学物性研究所 教授	: 日本物理学会
細越 裕子	大阪府立大学大学院理学系研究科 教授	: 日本物理学会
矢橋 牧名	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	: 日本放射光学会
大島 康裕	東京工業大学理学院 教授	: 分子科学会
武次 徹也	北海道大学大学院理学研究院 教授 大学院総合化学院学院長	: 分子科学会
中澤 康浩	大阪大学大学院理学研究科 教授	: 分子科学会
山口 祥一	埼玉大学大学院理工学研究科 教授	: 分子科学会
所内委員:	飯野、石崎、岡本、解良、横山	

表 I-8: 各施設の運営委員会における委員構成

UVSOR 運営委員会(施設長 1 名、所内委員 9 名、所外委員 7 名)、計算科学研究センター運営委員会(施設長 1 名、所内委員 3 名、機構内委員 4 名、所外委員 5 名)、機器センター運営委員会(施設長 1 名、所内委員 8 名、所外委員 5 名)、装置

自然科学研究機構 分子科学研究所 研究活動の状況

開発室運営委員会(施設長1名、所内委員12名、所外委員5名)

3. 学術コミュニティの意見を共同利用施設の運営に反映させる仕組みが整備されているか(観点④)

自己検証結果: 共同利用施設の運営は学術コミュニティの意見を十分に反映できる仕組みが整備され、現況の把握と将来計画についての意見聴取が滞りなく行われている。

運営会議の共同研究専門委員会によって、共同研究に係る課題の審査が行われているほか、運営会議本会議で審査結果に対する審議が行われている。

表 I-9: 共同研究専門委員会 2019 年度開催記録

開催件数: 5 件(うち小委員会 2 件、書面審議 2 件)

表 I-5掲載のメンバーに加え、石森浩一(北海道大学教授)、大内幸雄(東京工業大学教授)、唯美津木(名古屋大学教授)、杉本敏樹、田中清尚、西村勝之が参加。

2019 年度 後期審査: 第 81 回小委員会 8 月 7 日、本委員会 8 月 19 日～8 月 28 日書面審議

2019 年度 後期採択報告: 第 76 回委員会 10 月 17 日

2020 年度 前期通年審査: 第 82 回小委員会 1 月 20 日、本委員会 1 月 30 日～2 月 7 日書面審議

UVSOR 及び計算科学研究センターは、学術コミュニティにとって欠かせない大型施設であり、それぞれ関連学術コミュニティの委員からなる施設の運営委員会を有し、その運営及び将来計画に対する意見聴取を常に行っている。

表 I-10: UVSOR 及び計算科学研究センターの運営委員会 2019 年度開催記録

UVSOR 運営委員会(第 74 回 8 月 23 日、第 75 回 2 月 21 日開催)

1) 申請書フォーマットの変更、2) 評点 S の課題の優遇措置の実施、3) NOUS の運用、4) BL7B の今後の予定、5) 海外ユーザー向けの申請環境の整備、6) はやぶさ 2 プロジェクト、7) PF、HiSOR との 3 施設間共通申請課題の設定、8) UVSOR の将来計画について、報告説明がなされた。特に日本学術会議マスタープラン 2020「放射光学術基盤ネットワーク」に基づく施設間の連携ネットワーク、人材育成の強化について意見交換がなされた。

計算科学研究センター運営委員会(第 39 回 9 月 4 日、第 40 回 3 月 18 日開催)

計算資源の効率活用について報告、次期スパコン調達に係る導入スケジュール、複数の大学附置研と連携した計算物質科学協議会の立ち上げについて説明がなされた。

4. 研究活動における不正行為及び研究費の不正使用への対応に関する体制が整備されているか(観点③)

自己検証結果: 不正防止対策については、自然科学研究機構による不正行為防止規程に則りながら、岡崎 3 機関で対応している。分子科学研究所に不正防止委員会を設置し、所内の個別案件に対応している。

岡崎 3 機関等不正使用防止計画推進室会議による自己点検を毎年実施している。不正防止対策及びその実施状況を以下に示す。

表 I-11: 不正防止関係説明会の 2019 年度開催実績

ハラスメント防止研修会: 6 月 13 日

研究費不正使用・研究活動における不正行為に係る説明会: 9 月 18 日、24 日

公的研究費の不正使用防止に関するコンプライアンス研修: 1 月 15 日、22 日、3 月 13 日～31 日(日英対応: e-learning)

新任職員に対する会計ルール、不正使用、安全保障貿易管理などの説明会: 4 月 15 日

表 I-12: 自然科学研究機構に設置されている不正行為防止委員会の 2019 年度活動状況

大学共同利用機関法人自然科学研究機構不正行為防止委員会(第 17 回): 7 月 11 日

研究活動上の不正行為を防止するための基本方針として、「大学共同利用機関法人自然科学研究機構における研究活動上の不正行為への対応に関する規程」(平成 20 年自機規程第 74 号)が定められている。さらに当該規程の第 8 条第 2 項に基づき、自然科学研究機構における研究活動上の不正行為に関する通報窓口も「大学共同利用機関法人自然科学研究機構における研究活動上の不正行為に関

する通報窓口規程」に定められている。

2019年12月に開催された国際諮問委員会からの、運営面についてのレポートを付す。

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.

II. 中核拠点性

各研究分野に関わる大学や研究者コミュニティを先導し、長期的かつ多様な視点から、基盤となる学術研究や最先端の学術研究等を行う中核的な学術研究拠点であること

【主な観点】

- ◎① 当該機関の研究実績、研究水準、研究環境、研究者の在籍状況等に照らし、法令で規定する機関の目的である研究分野において中核的な研究施設であること
- ◎② 対象となる当該研究分野において先導的な学術研究の基盤として、国内外の研究者コミュニティに必要不可欠であり、学術コミュニティ全体への総合的な発展に寄与していること
- ◎③ 当該機関に属さない関連研究者が当該機関を利用して行った共同利用・共同研究等による研究実績やその水準について、研究分野の特性に応じ、当該研究分野において高い成果を挙げていること
- ◎④ 研究者コミュニティの規模や施設の規模等に対応して、共同利用・共同研究に国内外から多数の関連研究者が参加していること

【自己検証結果】

【検証する観点】 ◎①、◎②、◎③、◎④

【設定した指標】

1. 分子科学分野の中核的な研究施設としての研究実績、研究水準、研究環境、研究者の在籍状況（観点①）
2. 分子科学分野の総合的な発展に寄与しているか（観点②）
3. 所外研究者が行った研究の実施状況とその成果（観点③④）

（本文）

1. 分子科学分野の中核的な研究施設としての研究実績、研究水準、研究環境、研究者の在籍状況（観点①）

自然科学研究機構 分子科学研究所 研究活動の状況

自己検証結果: 分子科学分野を牽引する教職員で構成され、当該分野を牽引する研究所として十分な実績を挙げている。

分子科学分野及び関連する科学分野の優れた成果を顕彰する学会賞を多く受賞している(表Ⅱ-1)。特に若手の研究水準の高さは当該分野で国内随一である(表Ⅱ-2)。参考として図Ⅱ-1に科学技術振興機構(JST)の戦略的創造研究推進事業(さきがけ)への採択状況も示す。論文発表件数などの状況は表Ⅱ-3に、国際会議などでの発表状況は表Ⅱ-4の通りである。

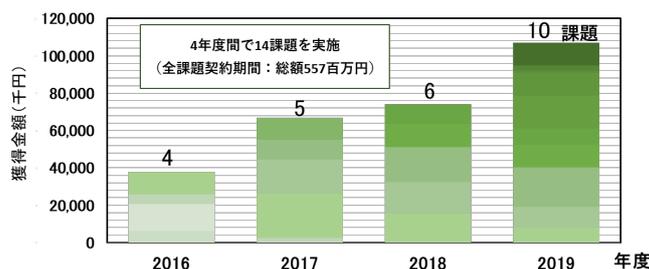
表Ⅱ-1: 関連学会の各賞、文部科学大臣表彰、日本学士院の各賞等(順不同)

2006年	小林速男(日本化学会学会賞)、鈴木光一(日本化学会化学技術有功賞) 江東林(文部科学大臣表彰若手科学者賞)
2007年	魚住泰広(日本化学会学術賞、GSC 文部科学大臣賞)、吉田久史(日本化学会化学技術有功賞) 井口洋夫(京都賞)、大森賢治(日本学術振興会賞、日本学士院学術奨励賞)
2008年	諸熊奎治(日本学士院賞・恩賜賞)、柳井毅(Chemical Physics Letters Most Cited Paper 2003-2007 Award) 田中晃二(錯体化学会賞)、木村真一(文部科学大臣表彰)、山田陽一(文部科学大臣表彰若手科学者賞)
2009年	水谷文保(日本化学会化学技術有功賞)、大森賢治(アメリカ物理学会フェロー)
2010年	諸熊奎治(瑞宝中綬賞)、平等拓範(アメリカ光学会フェロー)、唯美津木(文部科学大臣表彰若手科学者賞)
2011年	岡本裕巳(日本化学会学術賞)、香月浩之(文部科学大臣表彰若手科学者賞)、永瀬茂(文部科学大臣表彰) 平等拓範(国際光学会フェロー)、加藤晃一(日本薬学会学術振興賞、ベルツ賞一等賞)
2012年	諸熊奎治(文化功労者)、永瀬茂(日本化学会学会賞、APATCCFukui 賞)、大森賢治(ドイツフンボルト賞)
2013年	櫻井英博(日本化学会学術賞)、柳井毅(国際量子分子科学アカデミーメダル)、平等拓範(レーザー学会業績賞)
2014年	魚住泰広(文部科学大臣表彰)、平等拓範(IEEE fellow)、望月建爾(日本学術振興会 育志賞)
2015年	小杉信博(日本化学会学会賞)
2016年	川合眞紀(フンボルト賞、アメリカ真空学会 Medard W. Welch Award)、秋山修志(日本学術振興会賞) 正岡重行(日本学術振興会賞)
2017年	川合眞紀(紫綬褒章)、平本昌宏(応用物理学会フェロー)、石崎章仁(文部科学大臣表彰若手科学者賞)
2018年	藤田誠(ウルフ賞化学部門)、川合眞紀(ロレアル・ユネスコ女性科学賞)、山本浩史(日本化学会学術賞) 高山敬史(日本化学会化学技術有功賞)、水谷伸雄(日本化学会化学技術有功賞) 大森賢治(文部科学大臣表彰)、須田理行(文部科学大臣表彰若手科学者賞)
2019年	藤田誠(日本学士院賞・恩賜賞)、近藤聖彦(日本化学会化学技術有功賞)、平等拓範(レーザー学会フェロー) 堀米利夫(日本放射光学会功労報賞)、南谷英美(文部科学大臣表彰若手科学者賞)
2020年	川合眞紀(日本学士院賞)、藤田誠(中日文化賞)、岡本裕巳(文部科学大臣表彰) 倉持光(文部科学大臣表彰若手科学者賞)、石崎章仁(日本学術振興会賞、日本学士院学術奨励賞)

表Ⅱ-2: 関連学会等の若手賞(順不同): 2006~2020年までの受賞件数

【分子科学奨励森野基金 若手奨励賞】12件 【日本化学会進歩賞】5件 【日本化学会女性化学者奨励賞】2件
【分子科学会奨励賞】8件 【日本物理学会奨励賞】9件 【日本分光学会奨励賞】2件 【レーザー学会進歩賞】3件
【日本生物物理学会若手奨励賞】3件 【日本蛋白質科学会若手奨励賞】3件 【日本放射光学会奨励賞】6件
【日本加速器学会奨励賞】1件 【日本薬学会奨励賞】1件 【有機合成化学奨励賞】1件 【錯体化学会研究奨励賞】1件
【原子衝突学会若手奨励賞】1件 【電子スピンスイェンス学会奨励賞】1件 【高分子学会 Wiley 賞】1件
【サー・マーティン・ウッド賞】1件 【分子シミュレーション研究会学術賞】1件

図Ⅱ-1: JSTの若手育成事業(さきがけ)での採択数と事業費総額



表Ⅱ-3: 学術論文の発表件数

論文発表状況	第2期	第3期				
	2010-2015年 6年間平均	2016年	2017年	2018年	2019年	2016-2019年 4年間平均
論文数(報) (うちTop10%論文数)	248.3 (58.2)	186 (36)	185 (31)	209 (39)	203 (30)	195.8 (34.0)
本務教員数	79.0	81	82	75	70	77.0
論文数(報) 本務教員数(人)	3.14	2.30	2.26	2.79	2.90	2.54

表Ⅱ-4: 学術情報を共有する場(国際会議など)での基調講演・招待講演の数

	第2期	第3期				
	(6年間) 合計/平均	2016年度	2017年度	2018年度	2019年度	(4年間) 合計 / 平均
招待講演数(件)	1,162 / 194	259	281	264	209	1,013 / 253
うち基調講演数(件)	—	10	13	16	14	53 / 13
招待講演数 /本務教員数	2.5	3.2	3.4	3.5	3.0	3.3

2. 分子科学分野の総合的な発展に寄与しているか(観点②)

自己検証結果: 分子科学分野の中核的研究所として、当該分野の若手中堅研究者を多く輩出し、人的基盤の拡充に寄与してきた。国の大型プロジェクトの代表機関として、全国の大学教員の活動の取りまとめを支援している。また、分子科学分野の旗艦研究所として卓越教授を設けるなど、分野の総合的な発展に寄与している。

研究所創設以来 45 年間で、500 名を超える当該分野の中核研究者を輩出し、分子科学研究分野の基盤形成に寄与してきた。これまで国公立大学の物理化学教員の大半の育成に関与しており、全国7大学における理学部の物理化学関係の教授 45 人のうち 18 人が分子科学研究所に在籍経験がある。内部昇進を禁止して、大学研究機関との人事交流を奨励している。第三期中期目標期間における教員の着任・転出の実績を表Ⅱ-5に示す。准教授/助教の半数程度が 4~6 年間で入れ替わっていることが見て取れる。また、図Ⅱ-2には、研究所創設以来転出した者の現在の職種を示した。大学以外の所属については、相当する教育職で現職を表示した。転出がキャリアアップにつながっていることがわかる。

表Ⅱ-5: 教員の着任・転出の実態(右下円グラフは助教の転出直後の職種)

着任	2010-2015 合計	2016	2017	2018	2019	2016-2019 合計	2020年4月現在 現員数(女性/外国人)
所長	1	1	0	0	0	1	1 (1/0)
教授	5	0	0	0	2	2	18 (0/0)
准教授	8	2	0	2	3	7	17 (2/0)
主任研究員	0	0	0	1	0	1	1 (0/0)
助教	21	2	4	5	4	15	32 (2/2)
特任助教	7	1	1	1	2	5	5 (1/1)
研究員	134	14	18	15	23	70	36 (5/12)
計	176	20	23	24	34	101	110 (11/15)

転出	2010-2015 合計	2016	2017	2018	2019	2016-2019 合計
所長	1	0	0	0	0	0
教授	8	0	1	1	0	2
准教授	8	1	2	4	1	8
主任研究員	0	0	0	0	0	0
助教	29	5	4	5	9	23
特任助教	7	1	2	0	1	4
研究員	142	8	14	22	19	63
計	195	15	23	32	30	100

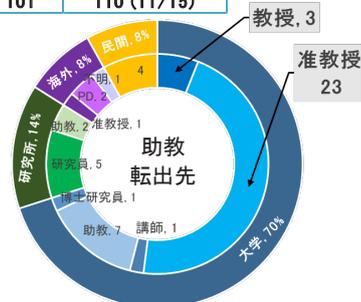
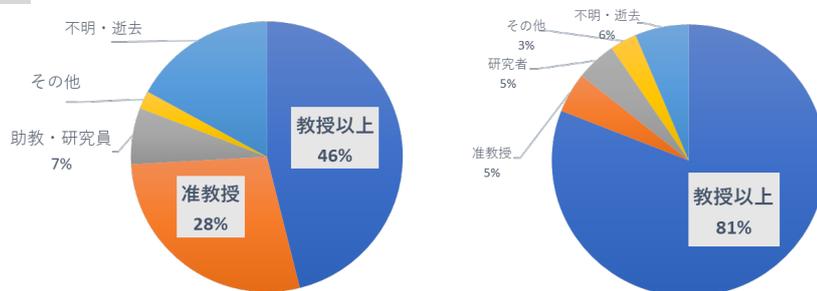


図 II-2: 転出した助教(左)及び准教授(右)の現在の職種(定年後は退職時の職位で表示)



分子科学分野を先導する国の施策について、中核拠点としてこれら施策の取りまとめを担当してきた。ナノテクノロジープラットフォーム事業(2012～2020 年度)では、物質合成プラットフォームの取りまとめ機関を務める 2016 年からの中期計画期間中に 900 件を超える協力研究と施設利用があった。大学連携研究設備ネットワークの代表機関としては、73 国立大学法人を始めとして公立私立大学が有する機器の共同利用推進を支援している。ポスト京プロジェクト(2012～2019 年度)では、重点課題 5(エネルギー課題)の責任機関を務めた。

クロスアポイントメント制度により大学などに所属する教員に対して、一定期間(5年)研究に専念する時間と環境を提供し、分子科学分野の中堅人材の育成を目指す。2018 年に始めた当制度では、准教授と教授をそれぞれ 1 名採用し、運用を始めたところである。さらに、国際的なセンターとしての研究の旗印として特別研究部門を設置し、藤田誠教授(東京大学大学院工学系研究科)を卓越教授として招聘した。

3. 所外研究者が行った研究の実施状況とその成果(観点③④)

自己検証結果: 共同利用・共同研究の実施件数はいずれも研究施設規模に見合う数字である。共同研究の成果は査読付きの論文として公表されており、実施状況は良好である。施設利用については、公表される論文への記載が十分ではなく、今後は利用成果についても定量的な把握に努める必要がある。

共同利用・共同研究は公募による課題と各研究者の固有課題とからなる。それらの実施状況を以下に示す。

図 II-3: 共同利用採択課題件数と施設利用登録者数

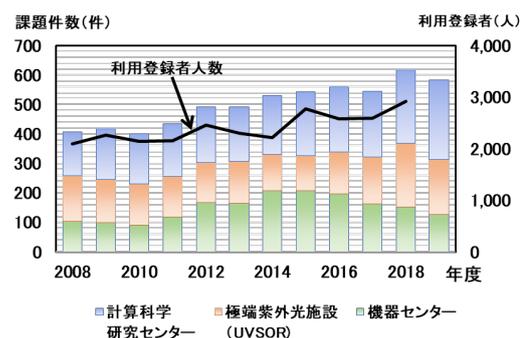


図 II-4: 共同研究課題数

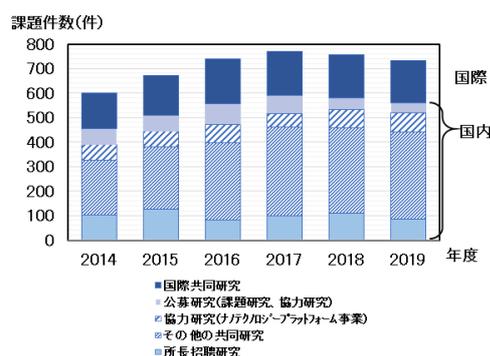
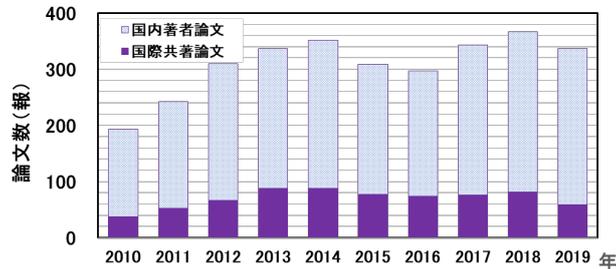


図 II-5: 施設利用の成果として報告された論文数(共同利用成果)



2019年12月に開催された国際諮問委員会からの、中核拠点性についてのレポートを付す。

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.

Ⅲ. 国際性

国際共同研究を先導するなど、各研究分野における国際的な学術研究拠点としての機能を果たしていること

【主な観点】

- ◎① 国際的な調査・研究活動について、当該研究分野における国際的な中核的研究施設であると認められること
- ◎② 海外の研究機関に在籍する研究者をアドバイザーや外部評価委員、運営委員会等の委員に任命するなど、当該研究分野の国際的な動向を把握し、運営に反映するために必要な体制が整備されていること
- ◎③ 研究者の在籍状況や外国人の共同研究者数・割合等について、当該研究分野において、国際的に中核的な研究施設であると認められること
- ◎④ 国際的な学術研究拠点として多様で優秀な人材を獲得するため、外国人研究者など人材の多様性や流動性の確保のための支援・取組が行われていること
- ◎⑤ 外国人研究者に向けた共同利用・共同研究体制の整備が十分に行われていること

【自己検証結果】

【検証する観点】◎①、◎②、③、④、⑤

【設定した指標】

1. 国際的な研究活動の展開状況（観点①）
2. 海外研究機関に在籍する研究者による評価・アドバイスの実施状況（観点②）
3. 人材の多様性・流動性が確保されているか（観点③）
4. 外国人研究者のための、英語で職務遂行が可能な職員の配置状況（観点④）
5. 共同利用・共同研究に参加する外国人研究者に対し、申請施設の利用に関する技術的支援、必要な情報の提供その他の支援を行うために必要な体制の整備状況（観点⑤）

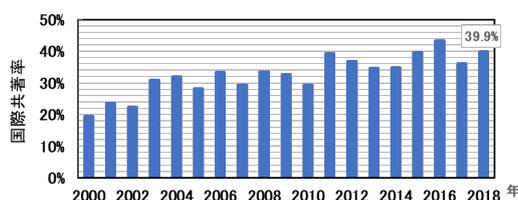
（本文）

1. 国際的な調査・研究活動の展開状況（観点①）

自己検証結果: 研究所内外の研究者が海外機関に在籍する研究者との共同研究・調査交流を展開するための支援体制が整っており、実際に国際共同研究や国際シンポジウム等が活発に行われている。

自然科学研究機構で実施している「戦略的国際研究交流加速事業」及び「ネットワーク型研究加速事業」の一環として、分子科学研究所では「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（2016～2021年度）」、「分子観察による物質・生命の階層横断的な理解（2016～2021年度）」を実施し、欧米・アジア諸国との国際共同研究及びインターンシップ事業等の支援を行っている。その結果、国際共著論文の割合は年々増加しており、2016～2019年度での平均で37%を超えるに至っている（図Ⅲ-1）。

図Ⅲ-1: 所内研究者論文の国際共著率



岡崎コンファレンス、ミニ国際シンポジウムを定期的で開催し、最先端の研究を展開する海外研究者を招聘、共同研究の推進と学術動向調査を実施した（表Ⅲ-1）。これらのシンポジウムはコミュニティから提案を公募している。短期外国人研究者招聘プログラムとして、国際協力研究、国際施設利用などを実施しており、第二期中期目標期間（2010～2015年度の6年間）では合計143件（23.8件/年）であった利用件数は、第三期中期目標期間（2016～2019年度の4年間）では178件（44.5件/年）に増加した（表Ⅲ-1）。海外からの若手研究者の中長期の招聘事業として、アジア地区を対象としているIMS-IIPA（IMS International Internship Program Asia）を内包する、海外すべてを対象とした分子研国際インターンシッププログラム事業IMS-IIP（IMS International Internship Program）を実施している。受け入れ人数は、第三期中期目標期間（2016～2019年度）では206名であり、第二期中期目標期間（2010～2015年度で合計350名）から継続して、順調にプログラムの成果を挙げている。

表Ⅲ-1: 国際研究交流活動の実施状況

区分	第2期 6年間合計/平均	2016年度	2017年度	2018年度	2019年度	2016-2019年度 4年間合計/平均
岡崎コンファレンス	6 / 1	3	0	1	2	6 / 1.5
国際シンポジウム（ミニ国際/アジア連携）	12 / 2	1	1	3	0	5 / 1.3
国際共同研究（短期外国人研究者招へいプログラム）	143 / 24	45	48	41	44	178 / 44.5
国際インターンシップ生（IIP, IIPA; 受入）	350 / 58	53	56	51	46	206 / 51.5
総研大生国際インターンシップ制度（派遣）	10 / 2	6	1	1	2	10 / 2.5
学術交流協定数（総研大との締結を含む）	15（第2期終了時点）	17	15	19	18	-

自然科学研究機構 分子科学研究所 研究活動の状況

第三期中期目標期間(2016～2019年度)中、海外研究機関との間で新たに8件の国際交流協力協定を締結し(表Ⅲ-2)、国際共同研究や共用装置の国際共同開発を推進している。例えば、ペーター・グリュンベルグ研究所(ドイツ)との学術協定を元に、双方の研究者・技術者の往来を通じて装置開発が進められ、2019年度に国際的最高の水準の研究設備(光電子運動量顕微鏡)が分子科学研究所に導入され、現在も新機能を追加することで研究開発を継続している。この他、大型研究施設 UVSOR では海外からの施設利用も多く、国際的に競争力の高いビームラインでは平均で25%を超える海外利用率がある(詳細はⅣ.研究資源を参照)。

表Ⅲ-2: 国際交流協定締結先一覧: 16 機関 (2020年8月現在)

2016年度以降の新規締結機関: ユーリヒ総合研究機構 ペーター・グリュンベルグ研究所(ドイツ)、ベルリン自由大学(ドイツ)、オウル大学(フィンランド)、厦門大学 固体表面物理化学国家重点実験室(中国)、国立交通大学理学部(台湾)、成均館大学化学科(韓国)、国立ナノテクノロジー研究センター(タイ)、ウィタヤシリメディー科学技術大学院大学(タイ)
その他の締結機関: 国立パリ高等化学学校(フランス)、韓国高等科学技術院自然科学部(韓国)、中央研究院 原子・分子科学研究所(台湾)、韓国化学会 物理化学ディビジョン(韓国)、マラヤ大学 理学部(マレーシア)、カセサート大学 理学部(タイ)、チュラロンコン大学 理学部(タイ)、科学技術総合大学院大学(韓国)

日本語に加えて、英語でのプレスリリースを積極的に増やし、プレスリリースの英語化率を第三期開始時の11%から70%に向上させた(Ⅶ.社会との関わり、図Ⅶ-1を参照)。

2. 海外の研究機関に在籍する研究者による評価・アドバイスの実施状況(観点②)

自己検証結果: 国際諮問委員会による評価が行われているほか、研究顧問2名(国内機関1名、海外機関1名)、外国人運営顧問2名、外国人客員教授等による評価・アドバイスが適切に実施されている。

2019年12月に国内機関在籍有識者6名、海外機関在籍有識者3名による国際諮問委員会を実施し、所長による諮問を行った。諮問委員会から、研究所全体の運営に関するアドバイスを受け、その結果を本報告書の該当部分に記載している。答申では、国際的分子科学コミュニティにおける分子科学研究所の高い評価が確認された。また、今後の方策として、1～2名の研究室主宰者を国際限定で公募してはどうかとの提案があった。

毎年度1回、海外機関在籍者1名を含む研究顧問によって、全所内研究グループの研究成果と計画をヒアリングし、その評価を所長に答申している。所長はその答申を元に、各研究グループに必要な支援・アドバイスを実施している。また、外国人運営顧問2名による点検を定期的に行っており、研究領域ごとアドバイスを受けている。外国人運営顧問は1週間程度研究所に滞在し、研究者へヒアリングを行ってレポートを作成する。これらの評価・点検レポートは「分子研レポート」に掲載し、研究所のホームページで公開している。さらに、3ヶ月以上の長期滞在を可能とする外国人客員教授制度により海外機関在籍者を招聘し、個々の研究グループ及び関連研究者へのアドバイスが行われている。

3. 人材の多様性・流動性が確保できているか(観点③)

自己検証結果: 内部昇進を禁ずることによって活発な人事が行われており、採用・転出ともに高いレベルの流動性が保たれている。活発な人事を通して多様な人材を確保している。

外国人研究者、女性研究者の人数は、2020年4月現在でそれぞれ15名、11名であり、これは全教員・研究員数の14%、10%に相当する(Ⅱ.中核拠点性、表Ⅱ-5を参照)。また、2016年より研究所として初の女性所長を迎えており、日本化学会(1878年創設)初の女性会長としても活躍している。今後の、女性研究者の割合向上に関しては自由記述に記載した。また、研究室主宰者の外国人研究者を増やすことも課題である。2016年より人事公募を全て日英併記とし、海外在住の研究者にもアクセスが出来るようにしている。2016～2019年度の4年間に、42件の国際公募が実施された。

4. 外国人研究者のための、英語で職務遂行が可能な職員の配置状況(観点④)

自己検証結果: 研究所の各部署において、英語で職務遂行が可能な職員を積極的に採用しており、基本的な所内配布文書は全て日英併記となっている。

研究力強化戦略室、受付(研究所内総務)、事務センター、技術課、広報室に英語で職務遂行が可能な職員を配置し、配布文書、各種申請文書の日英併記化を行った。また、英語での装置利用・装置開発に支障のない環境を整えてあり、所内外の外国人による利用が行われている。TOEIC などの英語能力試験の受験を費用負担により奨励しており、事務支援業務にあたる者の英語対応能力の向上を推進している。また、事務支援員の新規採用には簡便な英語読み書きテストを実施し、英語対応能力の高い者を優先して採用している。

5. 共同利用・共同研究に参加する外国人研究者に対し、申請施設の利用に関する技術的支援、必要な情報の提供その他の支援を行うために必要な体制の整備状況(観点⑤)

自己検証結果: 共同利用・共同研究に参加する外国人研究者に対し、来所前・来所後どちらの場面でも技術面・生活面で必要な支援が得られるように体制が整えられている。

海外から来る研究者の支援のためのワンストップサービスを提供するため、国際担当 URA を 2012 年から雇用し、ビザ取得支援・国内での居住環境整備支援・役所等の公的手続き支援・緊急時対応などを行っている。技術職員への支援依頼も基本的に英語で受け付けるとともに、各種安全ガイダンスなども英語で受講できるように整備されている。研究所のホームページを日英 2 言語対応とし、外国人研究者が研究面・技術面・生活面で必要な情報を得られるように対応した。また、Life@Okazaki という特設ページを設け、滞在中の研究者だけでなくこれから研究所に来る(ことを検討している)研究者に対しても、生活面での不安を少しでも取り除き快適に過ごせるよう積極的な情報提供を行っている(年間およそ 3 万件のアクセス数)。さらに滞在中の外国人に対しては、IMS International Bulletin というページを設け、新型コロナウイルス感染症に関する我が国の現状を伝える英語サイトの紹介や、周辺でのイベント情報などを提供し、居住環境の改善に努めている。

2019 年 12 月に開催された国際諮問委員会からの、国際性についてのレポートを付す。

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.

IV. 研究資源

最先端の大型装置や貴重な学術資料・データ等、個々の大学では整備・運用が困難な卓越した学術研究基盤を保有・拡充し、これらを国内外の研究者コミュニティの視点から、持続的かつ発展的に共同利用・共同研究に供していること

【主な観点】

① 共同利用及び共同研究のために保有している施設、設備、学術資料、データベース等の研

- 研究資源が、仕様、稼働状況、利用状況等に鑑み、当該研究分野における国際的な水準に照らして、卓越したものと認められること
- ◎② 施設、設備、学術資料、データベース等の研究資源を保有し、学術研究基盤として外国人研究者を含め、共同利用・共同研究に活発に利用されていること
 - ③ 国内外の大学（共同利用・共同研究拠点を含む）や研究機関等と連携してネットワークを形成し、施設、設備、学術資料、データベース等の研究資源の整備や共同運用に取り組んでいること
 - ④ 共同利用・共同研究に参加する関連研究者に対する支援業務に従事する専任職員（教員、技術職員、事務職員等）が十分に配置されていること

【自己検証結果】

【検証する観点】 ◎①、◎②、③、④

【設定した指標】

1. 保有している施設、設備による共同利用・共同研究の実施状況（観点①②）
2. 他の大学や研究機関との連携による施設、設備等の整備・共同運用体制（観点③）
3. 共同利用・共同研究支援体制の整備状況（観点④）

（本文）

1. 保有している施設、設備による共同利用・共同研究の実施状況（観点①②）

自己検証結果: 先端機器と汎用機器をバランス良く整備し、研究者コミュニティの意見を取り入れた運営を実施している。設備が適切に維持・更新され、施設の高度化や、利用普及が行われており、保有施設・設備が学術研究基盤として活発に利用されている。

分子科学研究所では、シンクロトン放射光施設、スーパーコンピュータや汎用大型コンピュータなどの大型研究施設、物性測定・化学分析・分光計測に関する汎用測定装置等を維持・運営し、全国の大学研究者に広く供用している。共同利用に供する施設には、運営委員会が設置され、研究者コミュニティの意見を反映した運営が実施されている（Ⅰ. 運営面、表Ⅰ-10を参照）。また、各施設の利用実績も今中期計画期間も順調に伸びている。共同利用施設の設備は、運営委員会からの意見を反映する以外に、自主的な整備を常に心がけている。機種更新や新規導入は、所内担当者を通じたアンケート調査を毎年履行することにより検討し、所長裁量経費で充当している（表Ⅳ-1）。

表Ⅳ-1: 機器センター、装置開発室に整備/更新された主な機器の一覧

オペランド走査型プローブ顕微鏡システム、電子ビーム描画装置、MALDI-TOF 型質量分析装置、X線溶液散乱装置、粉末・薄膜X線回折装置、示差走査熱量計・差動型示差熱天秤

また、これらのハードウェアを中心とした共同利用に加え、分野横断的な課題に関する討論を深め、分子科学の新しい発展を探るための有効な手段として、所外の研究者の提案をもとにした研究会を毎年複数回開催している。このように所内外で研究者が活発に交流することにより、年間600件近い共同研究・施設利用が実施されており（Ⅱ. 中核拠点性、図Ⅱ-3を参照）、2,000人にも上る所外の研究者が参加、その成果として、年間あたり300報を超える研究論文が発表されている。

共同利用研究に参加した研究者数、機関数は、岡崎3機関施設である計算科学研究センターの施設利用、分子科学研究所が実施機関となっているナノテクノロジープラットフォーム事業の実施数も含め、第二期中期目標期間（2010～2015年度）では合計14,032人（延べ24,550人）、1,004機関、第三期中期目標期間（2016～2018年度）では8,089人（延べ11,844人）、609機関と、高い水準を維持している。特に、共同利用に参加した機関数は、第二期中期目標期間では年平均167機関であったのが、第三期中期目標期間では年平均203機関へと増加し、より広く研究コミュニティの活性化に寄与した。

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である極端紫外光研究施設 (UVSOR) では、世界最高レベルの極端紫外光を提供している。利用件数は第二期中期目標期間 (2010~2015 年度) では延べ 1,030 件 (172 件/年)、第三期中期目標期間 (2016~2019 年度) では 873 件 (218 件/年) であり、高い需要度を維持している (表 IV-2)。ビームラインのうちの 2 本 (BL3U、BL4U) では、国際共同利用の割合を高い水準で維持しており、2019 年度は海外からの利用が 3 割を超えるなど国際的にも高い競争力を示している (表 IV-3)。また、ビームラインあたりの年平均共同利用者数も、第二期中期目標期間中 (79.5 人) に比べ、第三期中期目標期間 (88.4 人) では増加しており、大学共同利用機関としての共同研究推進に貢献している。

表 IV-2: UVSOR の利用状況と共同利用率

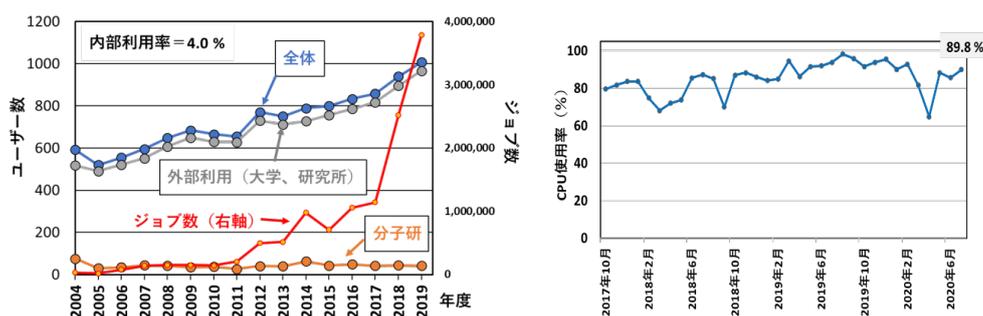
	第2期 (6年間)		第3期				(4年間) 合計 / 平均
	合計 / 平均	2016年	2017年	2018年	2019年		
共同利用率	-	87.0%	86.0%	88.0%	89.0%	87.5%	
共同利用課題数(件)	1,030 / 172	206	222	234	211	873 / 218	
共同利用者延べ人数(人・週) (1人の人が2週間滞在した場合を2と数える)	- / 1,153	1,200	1,278	1,278	1,193	- / 1,237	
BL当たりの平均共同利用者人数	477 / 79.5	85.7	91.3	91.3	85.2	354 / 88.4	
BL4U, BL3Uの国際共同利用者人数	257 / 42.8	31.0	34.0	40.0	60.0	165 / 41.3	
一週間当たりの共同利用者人数 (人/稼働週数)	33.0	33.3	35.5	35.5	32.2	34	

表 IV-3: UVSOR におけるビームライン BL4U (STXM) の国際共同利用率

年度	2016	2017	2018	2019	第3期平均合計	
利用日数	国際	28	33	22	35	118
	国内	72.5	76	85	64	297.5
国際共同利用率	28%	30%	21%	35%	28%	

計算科学研究センターでは、旧来「超高速シミュレータ」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いたシステムを、2017 年に「高性能分子シミュレータ」の 1 システムに統合し、共同利用の多様な計算要求に応えるための汎用性と、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体制を構築した。その結果、ジョブ数の大幅な向上が可能となり、外部機関所属の利用を含むユーザー数も年々増加傾向にある。このことは、本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。2019 年度はユーザー数が 1000 を超え、ジョブ数は 300 万に達しているほか、CPU 使用率も概ね 80% 以上を維持している (図 IV-1)。

図 IV-1: 計算科学研究センターの利用ユーザー数・ジョブ数 (左) と CPU 使用率 (右)



機器センターでは、物性測定・化学分析・分光計測に関する汎用測定装置等を維持・運営し、これに必要な寒剤 (液体ヘリウム) の安定供給を行っている。第三期では、利用者アンケートに基づいて高精度

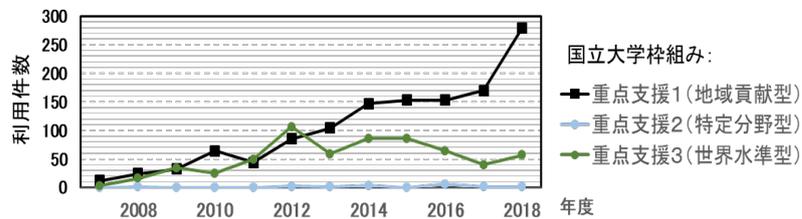
プローブ顕微鏡、粉末X線回折装置、高精度質量分析計などを導入し、最先端の機器を共同利用に提供しているほか、本年6月には主任研究員を1名配置して、より高度な運用に努めている。

装置開発室では、分子科学研究に必要な様々な実験装置の製作・開発を通して、所外研究者へ施設利用の提供を行っている。第三期中期目標期間になってからは、開発要素の大きな依頼を「協力研究」として受け入れることを開始し、これまでに45件の協力研究を受け入れた。

新たに創設された生命創成探求センターを通して、主に生物分野との融合型共同利用・共同研究を推進した。(2019年度の実績:一般共同利用研究13件、機器利用研究4件)

共同利用設備には、先端機器のほか汎用性の高い機器も備え、バランスを考えた運営を心がけている。分子科学研究所に特有の先端機器に関しては、特定の大学に偏らない広い利用者分布が記録されている。一方で汎用的な機器については、地域貢献型の大学(大学の類型では重点支援1のグループ)の利用者増加が顕著であり、大学における研究現場の現状を反映している(図IV-2)。共同利用機関として、国内の大学における研究事情をよく把握し、常に当該研究分野の先端研究の牽引と、研究者層の厚み増強の両方を睨んだ運営が求められる。

図IV-2: 汎用性の高い共同設備の利用件数の推移

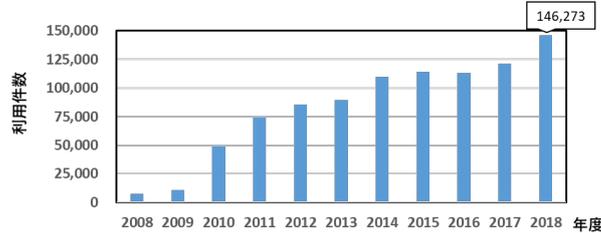


2. 他の大学や研究機関との連携による施設、設備等の整備・共同運用体制(観点③)

自己検証結果: 共同整備事業の代表機関・責任機関として他機関と連携しながら施設、設備等の整備・共同運用を行っている。

全国の参画大学等が所有する研究設備の相互利用と共同利用を推進する「大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用の促進」事業(文部科学省)の事務局として、大学間での研究設備の有効活用体制の構築に貢献している。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を実施した。また、マネージャー及びコーディネーター2名を配置し、展示会や学会等での啓発活動の強化、参画機関等への訪問・要望調査や他設備共用事業との連携による相互利用・共同利用の推進活動も継続して実施した。その結果、第二期中期目標期間(2010~2015年度)と第三期中期目標期間(2016~2018年度)を比較すると、利用件数は、事業全体で年平均87,200件から126,973件へ増加した(図IV-3)。

図IV-3: 設備ネットワーク利用状況(大学間利用の件数;学内利用は除く)



2012年度から実施している「ナノテクノロジープラットフォーム事業」を通じて、先端的構造機能物性評

価に対する共同利用支援の強化、先端ナノテク分子・物質合成拠点の形成、支援者と利用者双方の若手を育成できる環境の構築などを図っている。本事業で実施している協力研究の件数は、第二期中期目標期間(2012～2015年度)の194件/4年から、第三期中期目標期間(2016～2019年度)では291件/4年となっている。

「京」コンピュータの後継機を開発するための文部科学省「フラッグシップ 2020」(通称:ポスト「京」)において、2014年度(2015年2月)より分子科学研究所が責任機関となり、重点課題「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」を推進し、学術・研究のネットワーク形成・推進に寄与している。

3. 共同利用・共同研究支援体制の整備状況(観点④)

自己検証結果: 各共同利用施設に適切に教員、技術職員、事務職員が配置されているほか、共同利用・共同研究を全体的に支援するための事務部署が設置されており、共同利用、共同研究を支援する体制が十分に整備されている。

各共同利用施設には、施設長として教員が配置されているほか、極端紫外光研究施設、計算科学研究センターには専属教員が配置されており、施設の維持管理に対する業務を遂行している。また、現場で施設を維持管理する技術職員(計37名)と、共同利用・共同研究に係る技術支援、事務支援を行う職員(特任専門員11名、技術支援員7名、事務支援員16名)が適切に配置されている(表IV-4)。

表IV-4: 共同利用・共同研究の支援体制

区分	事務センター	分子科学研究所					計
		施設系				戦略室等	
		UVSOR	機器センタ	装置開発室	計算機センタ		
施設長		1	1	1	1		4
教育研究職員		8	1	0	5	1	15
博士研究員		1			2		3
特任研究員		1	4				5
事務職員	2						2
技術職員		11	7	9	7	3	37
特任専門員		0	5			6	11
技術支援員		1	1	2	1	2	7
事務支援員	2	2	2	1	3	6	16
計	4	25	21	13	19	18	100

共同利用に供する施設や設備は常に専門家による高度化を経て、先端機器としての役割を継続する必要がある。施設には必要に応じて主任研究員を配置し、施設の高度化を推進している。2018年に着任した松井文彦主任研究員は、UVSORに設置するMomentum Microscope(光電子運動量顕微鏡)をドイツの研究所と共同開発している。2～3年後には共同利用設備として公開を予定している。また、施設と関連して採用したクロスアポイントメント教員は、施設利用対象分野の拡大を牽引している。

2019年度に、共同利用に関係する建物三棟の施設改修を行い、老朽化の進行していた配管等の内部設備の更新を行った。またこれに伴い、技術職員のオフィス及び利用者控え室の統合を実行し、組織や分野を超えた研究交流及び技術交流を促進するためのオープンラボ形式へのリノベーションを行った。また、計測に必要なサンプル準備の支援を行うための化学準備室を充実させた。

2020年度に研究力強化戦略室の中に共同利用推進室を設置し、これまで施設間で共有が不十分であった各種書式や利用者情報などの一元化に着手した。運営会議の部会である共同研究専門委員会、事務センターの部局である共同利用係と共同して、利用者の利便性向上と、研究成果の捕捉率向上を目指して活動を開始している。

2019年12月に開催された国際諮問委員会からの、研究資源についてのレポートを付す。

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.

V. 新分野の創出

社会の変化や学術研究の動向に対応して、新たな学問分野の創出や展開に戦略的に取り組んでいること

【主な観点】

- ◎① 学際的・融合的領域における当該機関の研究実績やその水準について、研究分野の特性に応じ、著しく高い成果を挙げていると認められること
- ◎② 学際的・融合的領域において当該機関に属さない関連研究者が当該機関を利用して行った共同利用・共同研究による研究実績やその水準について、研究分野の特性に応じ、著しく高い成果を挙げていると認められること
- ◎③ 研究の進展に応じた異分野の融合と新分野の創出のため、他の大学（共同利用・共同研究拠点を含む）や研究機関等との連携について、研究組織の再編等の必要性を含め定期的に検討を行っていること

【自己検証結果】

【検証する観点】 ◎①、◎②、◎③

【設定した指標】

1. 所内の研究者が中心となって新たな分野の開拓・発展がなされた状況（観点①）
2. 所外の研究者が所内の研究者と共同することで新たな分野の開拓・発展がなされた状況（観点②）
3. 新分野の創出のため、他の研究機関との連携についての検討状況、及び組織再編の状況（観点③）

（本文）

1. 所内の研究者が中心となって新たな分野の開拓・発展がなされた状況（観点①）

自己検証結果：新しい研究分野の開拓に貢献し、高い人事流動性も手伝って所内に閉じることなく、新分野の発展に寄与している。

分子科学研究所では、次世代の関連新分野を創出することを重要なミッションとして研究所運営を行ってきた。そのための方策の一つとして、研究室主宰者(PI:教授、助教授あるいは准教授)の選考にあたっては、所内及びコミュニティの研究者の間で十分な議論の上に、なるべく広い研究領域を設定した公募を行い、候補者の従来の研究分野での実績はもとより、独創的な研究提案を重視して人事選考を実施してきた。また、内部昇格禁止の施策により、研究所における研究領域の固定化を回避して、人事ばかりでなく研究分野の流動化を促すとともに、転出した研究者が所内で創出した研究を大学等でさらに発展・展開させることに寄与している。実際に多くの研究者(准教授、助教はほぼ全て)が所外に転出し、多くの場合に昇任していることは、分子科学研究所在籍中に挙げた成果が高く評価されていると考えることができる(Ⅱ.中核拠点性、表Ⅱ-5、図Ⅱ-2を参照)。学際的・融合的領域における研究実績は、分子科学分野周辺研究分野を対象とした学術・技術賞を多くの職員が受賞している事にも現れている(Ⅱ.中核拠点性、表Ⅱ-2を参照)。これらの点は、2019年に開催した国際諮問委員会の報告でも高く評価されている。

これらの施策、運営の結果として、例えば以下に述べるような分子科学関連の新分野、学際的・融合的研究分野・領域の創出に貢献してきている。

- 固体物性化学、合成化学の研究領域からは、有機伝導体、有機磁性体の研究分野の創出に貢献し、分子科学研究所はこの分野の拠点機関の一つとなった。
- 電子状態動力学的研究分野からは、その後大きく発展することになる光触媒や有機太陽電池の利用研究の走りとなる研究に貢献した。
- 錯体化学の領域からは、現在化学分野で大きな注目を集めている自己組織化ナノ空間分子の研究が分子科学研究所を起点として展開し、それに基づく結晶スポンジ法などに発展している。
- 有機合成化学においては、2次元高分子の研究領域の創出につながる成果が得られた。

2. 所外の研究者が所内の研究者と共同することで新たな分野の開拓・発展がなされた状況(観点②)

自己検証結果:柔軟な共同利用共同研究体制の中、所外研究者と共同して多くの新しい科学分野の開拓に貢献した。特に、分光学を用いての物質科学への貢献は大きい。

分子科学関連研究分野の中核拠点として、大学等多数の所外との共同研究を行い(Ⅱ.中核拠点性、図Ⅱ-3、図Ⅱ-4、図Ⅱ-5を参照)、その結果として、例えば以下に述べるような分子科学関連の新分野、学際的・融合的研究分野・領域の創出に寄与してきている。

- 放射光科学分野では、有機分子科学分野の物性研究を先導した。また、酸化物超伝導体のホールの起源を世界で最初に同定する研究を支援した。
- 高分解能分光の研究からは、星間分子科学が創出され、天文学との融合領域の創出にも貢献した。
- 振動分光学や超高速分光学の研究からは、これを生命科学に適用する分野が創出され、生体分子科学、構造生物学、光生物学を牽引する拠点の一つとなった。
- 有機合成化学においては、後に野依博士のノーベル賞受賞に本質的な寄与をなすこととなる不斉合成触媒(BINAP)の開発が行われた。
- 理論化学の分野からは、ナノ光物性理論及びその汎用プログラムの開発が進み、ナノサイエンスの新領域創出に大きく貢献した。

3. 新分野の創出のため、他の研究機関との連携についての検討状況、及び組織再編の状況(観点③)

自己検証結果:大学共同利用機関として、多くの大学研究者を受け入れ分子科学分野の発展に貢献してきた。クロスアポイントメントにより大学教員を招聘し、5年の単位で研究に一定時間専念できる制度を開始し、分子科学分野の研究力強化に資する体制を整えている。

新分野創出を企図した他の研究機関との連携として、法人化以前の 2003 年度までは、流動研究部門制度を運用し、他大学の教員が 2 年間、分子科学研究所の専任教員として研究活動を行う制度を継続して実施した。2019 年度から、クロスアポイントメントを活用した、新たな流動的な研究人事制度を開始し、他大学の研究者が一定期間(5 年を目処)、所内研究者と連携して新たな研究展開を目指す連携研究活動を行っている。

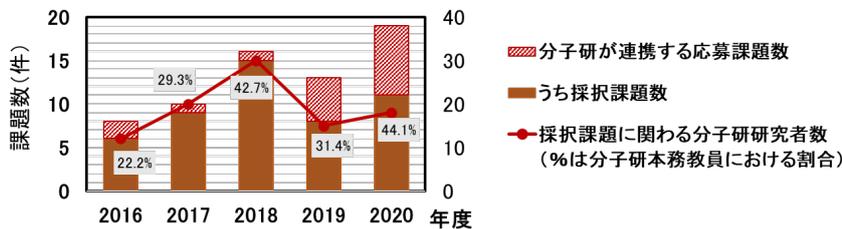
新たな研究領域を創出・発展させることを目的とした、他機関との連携による新たな研究組織の設置も行ってきた。例えば岡崎 3 機関、あるいは自然科学研究機構の組織として 2000 年に設置した岡崎統合バイオサイエンスセンター、それを発展的に廃止して 2018 年に新設した生命創成探究センターに参画した。

また所内においては研究分野の進展に呼応してしばしば組織改編を行ってきた。2007 年までの研究系の機会あるごとの再編、2007 年の研究系から 4 研究領域への再編、また例えば 2004 年に分子スケールナノサイエンスセンター、2013 年に協奏分子システム研究センター、2017 年にメソスコピック計測研究センターを設置して時代の要請に応えている。

分子科学研究所が中核機関となり、国内の 5 つの物性科学関連研究拠点が共同して新たな研究領域の発展を目指す「物性科学連携研究体」の構築を目指した活動を開始している(日本学術会議マスタープラン 重点大型研究計画に記載、自然科学研究機構概算要求事項)。

自然科学研究機構では各種の公募型プロジェクトを推進している。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といった事業のほか、新分野創成センターで分野融合的な研究プロジェクトの公募が行われており、分子科学研究所からも萌芽的共同研究の課題を提案し実施している。また、新分野創成センターには分子科学研究所から先端光科学分野長として職員が参加し、プロジェクト推進に積極的に貢献している。

図 V-1: 自然科学研究機構における新分野創成プロジェクトへの参加状況



2019 年 12 月に開催された国際諮問委員会からの、新分野創出についてのレポートを付す。

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.

VI. 人材育成

優れた研究環境を活かした若手研究者の育成やその活躍機会の創出に貢献していること

【主な観点】

- ① 総合研究大学院大学の基盤機関として、大学と協力し、大学共同利用機関の優れた研究環境を活用して主体的に当該分野の後継者の育成等に取り組んでいること
- ② 連携大学院制度等を活用し、国内外の大学院生を受け入れ、共同利用・共同研究に参加させるなど大学院教育に積極的に関与していること
- ③ ポストドクター等の時限付き職員の任期終了後のキャリア支援に取り組むなど、若手研究者の自立支援や登用を進め、研究に取り組みやすい環境を整備していること
- ④ 若手研究者(海外研究者を含む)の採用や育成に積極的に取り組んでいること
- ⑤ 女性研究者を含めた人材の多様化に取り組んでいること
- ⑥ 先端的・国際的な共同研究等への大学院生の参画を通じた人材育成に取り組んでいること

【自己検証結果】

【検証する観点】①、②、③、④、⑤、⑥

【設定した指標】

- 1. 総合研究大学院大学の基盤機関としての取り組み状況(観点①⑥)
- 2. 「特別共同利用研究員」受け入れ状況及び国内外の大学院教育への協力(観点②④)
- 3. 海外研究者を含む若手研究者の人数・割合(観点④)
- 4. ポストドクターを含む若手研究者の採用及び支援・育成の取り組み状況(観点③④)
- 5. 女性研究者の人数・割合、人材の多様化に対する取り組み状況(観点④⑤)

(本文)

1. 総合研究大学院大学の基盤機関としての取り組み状況(観点①⑥)

自己検証結果：基盤機関として最先端の研究環境を最大限に活かした大学院教育を実施し、また経済支援を行うことで、広い視野と国際的に高い水準の能力を備えた次世代分子科学を担う研究者の育成を行っている。

分子科学研究所は、総合研究大学院大学物理科学研究科における構造分子科学専攻及び機能分子科学専攻を受け持ち、基盤機関として最先端の研究環境を最大限に活かした大学院教育を実施することで、広い視野と国際的に高い水準の能力を備えた次世代分子科学を担う研究者の育成に取り組んできた(図VI-1に修了者の現在の状況)。2020年8月現在、41名の大学院生が分子科学研究所において研究活動を行っている。

図VI-1：分子科学2専攻修了者の現在の状況(2019年12月)



自然科学研究機構 分子科学研究所 研究活動の状況

大学院教育においては、分子科学の基礎的・専門的知識に関する講義や各主任指導教員による演習・講究に加えて、広い視野を備えた物理科学研究者を育成することを目的とした「コース別教育プログラム」を物理科学研究科各専攻及び高エネルギー加速器科学研究科各専攻と合同で実施している。また、毎年数名の大学院生がマサチューセッツ工科大学、カリフォルニア工科大学、イェナ大学、パリ第7大学など海外最先端研究室に3ヶ月程度の短期留学を行っており、先端的・国際的な共同研究への大学院生の参画を通じた人材育成に取り組んでいる。また、総合研究大学院大学の基盤機関として、当該2専攻に属する大学院生への経済支援を目的にリサーチアシスタント(RA)制度を充実させている。日本学術振興会特別研究員及び外国人国費留学生を除く全ての大学院生に対して、1～2年次には年額85万円以上を、3～5年次には年額99万円以上を給与として支給している。上記取り組みの成果として、第三期中期目標期間(2019年度までの4年間)において、当該2専攻に属する大学院生に対して分子科学会、理論化学会、錯体化学会、生物物理学会及び英国王立化学会など主要関連学会から最優秀発表賞など29件の受賞があった(表VI-1)。

表VI-1: 総合研究大学院大学の学生数、学位授与の状況

	2016年度	2017年度	2018年度	2019年度	2020年度
入学者数(留学生)	14(4)	13(3)	16(3)	9(3)	10(2)
在籍者数(留学生)	42(16)	44(15)	47(12)	42(12)	41(11)
RA採用者	30	32	37	37	28
日本学術振興会特別研究員	5	5	3	3	5
外国人国費留学生	4	4	5	5	3
博士学位授与数	8	8	4	5	-
海外機関への短期留学件数	6	1	1	2	-
主要関連学会における受賞数	6	11	6	6	-

2. 「特別共同利用研究員」受け入れ状況及び国内外の大学院教育への協力(観点②④)

自己検証結果: 分子科学研究における中核拠点として、特別共同利用研究員として大学院生を受け入れ、充実した環境で研究に専念する機会を提供することで研究者養成に資している。また、卓越大学院プログラムに連携機関として参画し大学院教育に協力している。

分子科学研究所は、分子科学研究における中核拠点として共同利用に供するとともに、各大学の要請に応じて特別共同利用研究員として大学院生を受け入れ、充実した環境で研究に専念する機会を提供することで研究者養成に資している。2020年8月現在、22名の大学院生が分子科学研究所において研究活動を行っている。総合研究大学院大学に属する大学院生だけでなく、特別共同利用研究員として在籍する他大学に属する大学院生についてもリサーチアシスタント制度を充実させており、日本学術振興会特別研究員などの公的な経済支援を受けていない大学院生に対して博士前期課程には年額50万円以上を、博士後期課程には年額60万円以上を支給している(表VI-2)。

表VI-2: 特別共同利用研究員の受け入れ、学位取得状況

	2016年度	2017年度	2018年度	2019年度	2020年度
受入数(海外機関等 内数)	17(1)	17(2)	27(2)	24(3)	22(2)
RA採用者数	15	14	23	14	12
学位取得者数	9	6	4	3	-

2019年からは名古屋大学卓越大学院プログラム「トランスフォーマティブ化学生命融合研究大学院プログラム」に連携機関として参画し、名古屋大学における大学院教育に協力している。さらに、分子科学研究所・共同利用研究の公募事項の一つとして「若手研究活動支援」を設置し、大学院生が主体的に企画する分子科学に関連した各種活動に対して支援を続けている。研究所内外を問わず全ての大学院生が代表者として予算申請可能であり、1961年から続く「分子科学若手の会 夏の学校」も現在は

自然科学研究機構 分子科学研究所 研究活動の状況

本予算枠で経費支援を行っている。このように大学院教育及び特別共同利用研究員とは異なる形態によっても、次世代の分子科学研究を担う大学院生育成に主体的かつ積極的な取り組みを続けている。

3. 海外研究者を含む若手研究者の人数・割合（観点④）

自己検証結果:本務教員の66%が44歳以下の研究者であり、また、外国人研究者については助教2名、特任助教1名、博士研究員11名の計14名が在籍している。外国人研究者を含む若手研究者の採用や育成に積極的に取り組んでいる。

分子科学研究所では、創設時から内部昇格禁止を維持することにより高い流動性を保ち、コミュニティに多くの人材、中核となる研究者を輩出してきた。第二期中期目標期間（6年間）では准教授8名、助教29名が転出したが、第三期中期目標期間（2019年度までの4年間）ではすでに准教授8名、助教23名が転出しており、高い水準で流動性を維持している（Ⅱ.中核拠点性、表Ⅱ-5）。また、独立した研究グループを主宰する准教授の採用にあたり、第二期から第三期にかけて28歳から38歳の若手研究者を登用してきた（表Ⅵ-3）。その結果として、2020年8月現在において本務教員の66%が44歳以下の研究者である。また、外国人研究者については助教2名、特任助教1名、博士研究員11名の計14名が在籍しており、外国人研究者を含む若手研究者の採用や育成に積極的に取り組んでいる（表Ⅵ-4）。

表Ⅵ-3:准教授(特任を含む)の採用時年齢(2010~2020年度)

採用時年齢(歳)	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38
人数	1	0	1	0	1	0	4	2	2	3	1

表Ⅵ-4:教員・研究員の年齢構成(2020年8月)

職名	年齢(歳)					合計人数
	~34歳	35~44	45~54	55~64	65歳~	
教授	0	1	7	10	0	18
准教授	0	14	3	0	0	17
主任研究員	0	1	1	0	0	2
助教(外国人)	16(2)	18(1)	2(0)	0	0	36(3)
助手	0	0	1	1	0	2
博士研究員(外国人)	15(7)	4(3)	4(1)	5(0)	1(0)	29(11)
計	31(9)	38(4)	18(1)	16(0)	1(0)	104(14)
比率(%)	29.8	36.5	17.3	15.4	1.0	

※()内は内数。教授、准教授は特任教員、クロスアポイントメント教員を含む。博士研究員は、博士号を持つ研究員を数え、特任研究員を含む。

4. 博士研究員を含む若手研究者の採用及び支援・育成の取り組み状況（観点③④）

自己検証結果:学位取得後3年以内の若手研究者に研究室を主宰する機会を与え、その独自性と柔軟な発想をもとに自立した研究をさせる若手独立フェロー制度を通して、若手研究者の活躍機会の創出及び育成に貢献している。また、時限付き職員の任期終了後のキャリア支援にも取り組んでいる。

学位取得後3年以内の若手研究者に研究室を主宰する機会を与え、その独自性と柔軟な発想をもとに自立した研究をさせる若手独立フェロー制度を2012年度から施行している。現在までに5名が任期付き特任准教授として採用され、任期を終えた3名のうち2名が分子科学研究所の教授及び准教授（通常の公募を経て採用）、また1名が所外の特任准教授として活躍しており、若手研究者の活躍機会

の創出及び育成に貢献している。また、博士研究員など時限付き職員の任期終了後のキャリア支援に関して、基礎生物学研究所・生理学研究所と合同で「博士人材のためのキャリアバスセミナー&相談会」を毎年開催している。

5. 女性研究者の人数・割合、人材の多様化に対する取り組み状況（観点④⑤）

自己検証結果：女性研究者の人数は11名（全教員・研究員数の10%）であり、自然科学研究機構の第三期中期目標値（13%）に対して満足できる状況ではない。多様化していく人材に対する取り組みとして、子育て・介護中などライフステージにおける柔軟な就労制度の更なる拡充を進めている。

2020年4月現在、女性研究者の人数は11名（所長1、准教授2、助教2、特任助教1、研究員5）であり、これは全教員・研究員数の10%に相当する（Ⅱ.中核拠点性、表Ⅱ-5）。女性研究者の人数・割合については、自然科学研究機構の第三期中期目標値（13%）達成に向けて取り組みを続けているが、現状では満足できる状況にはない。

多様化していく人材に対する取り組みとして、海外研究者の研究生活支援についてはⅢ.国際性に記載している。また、男女共同参画推進への取り組み、特に子育て・介護中の研究者に対する支援として、育児休業・育児部分休業制度、子の看護休暇制度、岡崎事業所内保育施設の設置、介護休業・介護部分休業制度、介護休暇制度、妊娠・育児期間中にある女性研究者の研究業務を補佐するアカデミックアシスタント制度を第二期中期目標期間までに施行している。第三期では、2017年度にアカデミックアシスタント制度を男性研究者にも拡張し、2018年度にベビーシッターや病児・病後児保育など保育サービスに要する費用を一部支援する制度、2019年度に子の出張帯同に関わる交通費を一部支援する制度、さらに2020年度には育児・介護の支援を主たる目的とする在宅勤務制度を新たに導入し、ライフステージにおける柔軟な就労制度の更なる拡充を進めている。

2019年12月に開催された国際諮問委員会からの、人材育成についてのレポートを付す。

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.

Ⅶ. 社会との関わり

広く成果等を発信して、社会と協働し、社会の多様な課題解決に向けて取り組んでいること

【検証する観点】

- ① 産業界等にも開かれた研究機関として、利用可能な研究設備、研究成果、研究環境等の大学共同利用機関が持つ機能を社会へ提供し、また、分かりやすく発信していること
- ② 地域社会や国全体の課題の解決に向けて貢献できる分野や内容について、それらの課題解決に取り組み、情報発信していること
- ③ 研究成果を広く社会と共有し、社会との協働・共創を通じて、新たな研究の展開につなげるとともに、社会の諸活動の振興に寄与していること
- ④ 研究成果を公開し、研究者のみならず広く社会における利活用に積極的に取り組むとともに、論文及び論文のエビデンスとしての研究データ等を公開・保存していること

【自己検証結果】

【検証する観点】 ①、②、◎③

【設定した指標】

1. 情報発信・情報公開状況（観点①②）
2. 国や地域社会との連携状況（観点①②③）
3. 産学連携状況（観点②③）

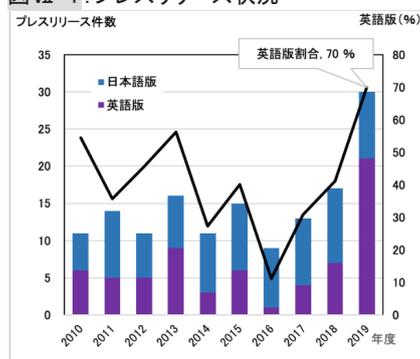
（本文）

1. 情報発信・情報公開状況（観点①②）

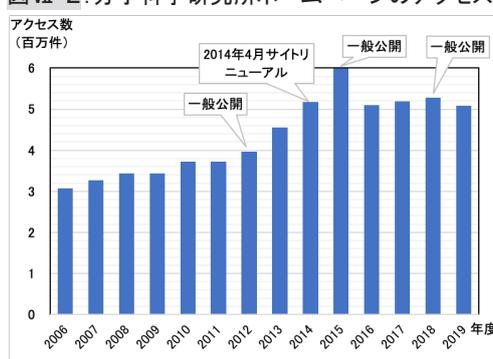
自己検証結果: ホームページやプレスリリースによって最先端の研究成果を分かりやすく社会に発信することによって分子科学の意義を広く社会と共有し、一般公開や研究所見学の受け入れを通して研究現場の臨場感を体感していただくことによって、科学の意義を広く社会と共有することに取り組んでいる。

分子科学研究所は、ホームページやプレスリリースによって最先端の研究成果を分かりやすく社会に発信することによって、分子科学の意義を広く社会と共有することに取り組んできた。2016～2019年度にかけて、ホームページにて 69 件の日本語プレスリリース、33 件の英語プレスリリースを実施した。第二期の該当する期間（2012～2015 年度）と比較して 30%増加している。さらに、米国科学振興協会の情報発信サービス（EurekAlert!）等を利用して英語プレスリリースを 25 件実施するなどして国内外のコミュニティに向けた周知活動を精力的に行った（図Ⅶ-1）。当該期間の新聞掲載数が 37 件、テレビ放映が 1 件あった。また、ホームページへのアクセス数は、2016～2019 年度では年間平均 516 万件を超えており、第二期中期目標期間における年間平均 452 万件と比較して 14%増加している（図Ⅶ-2）。

図Ⅶ-1: プレスリリース状況



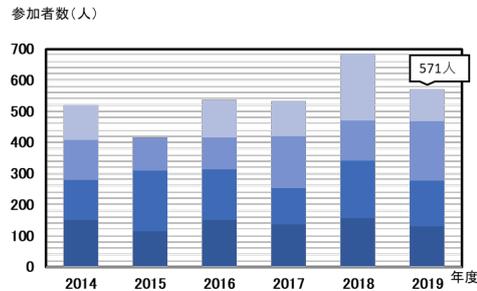
図Ⅶ-2: 分子科学研究所ホームページのアクセス数



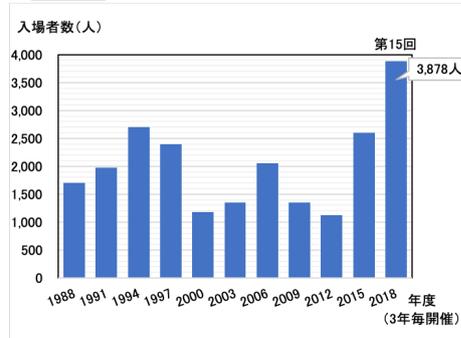
分子科学の内容を一般市民や他の分野の研究者にも知らせる趣旨のもと、市民公開講座「分子科学フォーラム」を年 4 回開催している。幅広い分野で先導的な立場にある研究者や技術者を講師として招き、多様なテーマで講演会を実施している。どの回も 100 人を超える多数の参加者があり、地域に根差した公開講演会として広く認知されている（図Ⅶ-3）。さらに、研究所一般公開や研究所施設見学の受け入れを通して研究現場の臨場感を体感していただくことによって、科学の意義を広く社会と共有することに取り組んできた。分子科学研究所では一般公開を 3 年ごとに開催し、実験室の公開及び講演会を行っている。岡崎市との連携で展開した新たな広報活動が功を奏し、2018 年に開催した第 15 回一般公開の来場者数は過去最高 3,878 人を数えた（図Ⅶ-4）。所内には展示室を常設しており、分子科学の研究に用いられる研究手法の原理が理解できるよう体験型展示 8 種類を用意している。小学校から高等学校の児童・生徒や民間企業など、年間およそ 300 人の見学者が来訪している（図Ⅶ-5）。これら市民公開講座や一般公開等のイベント開催は、受信希望登録されたメールアドレスに「情報メール」を

配信することによっても周知広報している。情報メール登録者数は年々増加しており、地域社会からの関心の高まりが窺い知れる(図VII-6)。

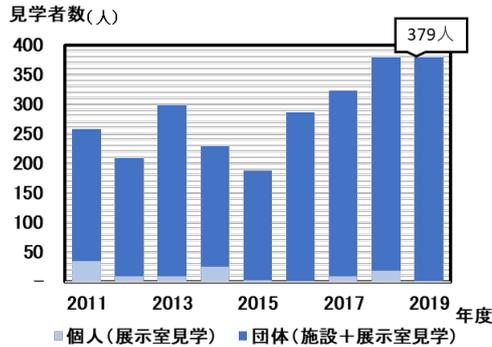
図VII-3: 市民公開講座参加者数



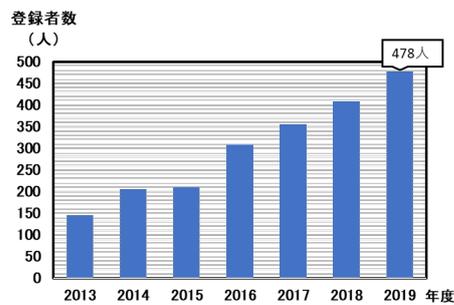
図VII-4: 研究所一般公開の入場者数



図VII-5: 研究所見学者数



図VII-6: 情報メール登録者数



2. 国や地域社会との連携状況(観点①②③)

自己検証結果: 地域の商工会議所や観光協会と連携することによって地域の民間企業からの施設利用の利用促進の広報として貢献している、また、岡崎市内及び近隣の小学校から高等学校までの様々なレベルでの理科教育に対して協力している。

2007年より岡崎商工会議所(岡崎ものづくり推進協議会)と連携を開始し、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」へ展示ブースを設置することで、地域の民間企業からの施設利用の利用促進の広報として貢献している。また、2018年より岡崎市観光協会との連携を開始し、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うことが可能となった。

分子科学研究所は、岡崎3機関で連携しつつ、また単独で、岡崎市内及び近隣の小学校から高等学校までの様々なレベルでの理科教育に対して協力している。

- スーパーサイエンススクール: 隣接する県立岡崎高校のスーパーサイエンス事業に協力している。また、国際化学オリンピック出場者への実験指導を行った(他に海陽中等教育学校)。
- 国研セミナー: 岡崎市内の小・中学校の理科教員を対象としたセミナーを毎年開催している。

自然科学研究機構 分子科学研究所 研究活動の状況

- 出前授業:岡崎市内の小中学校を対象に、科学実験などを通して科学への興味・関心を高めることを目的に、毎年およそ5名の本務教員が小中学校において出前授業を行っている。
- 職場体験学習:岡崎市内及び近隣の中学校・高等学校の要請により、職場体験学習として生徒の受け入れに協力している。2018年には研究グループによる受け入れを開始し、参加者が従前に比較して約2倍に増加した。2018年度は13名、2019年度は18名の参加者があった。

3. 産学連携状況（観点③）

自己検証結果:複数の民間企業など外部機関と連携し運営するオープンイノベーション拠点「社会連携研究部門」を新設することで、社会実装が求められる先端的な固体レーザーの研究開発を強力に推進し、さらに社会人をも含めた研究者育成及び産学交えた人材流動化の促進に取り組んでいる。また、施設利用の民間利用を積極的に推進している。

2019年度に、複数の民間企業など外部機関と連携し運営するオープンイノベーション拠点「社会連携研究部門」を新設した。本研究部門では、分子科学研究所が世界に誇る超小型レーザー技術を基軸とし、産学官を交えた知識集約型の光科学とイノベーションの拠点「小型集積レーザーコンソーシアム」を形成・活動することにより、社会実装が求められる先端的な固体レーザーの研究開発を強力に推進し、さらに社会人をも含めた研究者育成及び産学交えた人材流動化の促進に取り組む。本部門の運営にあたり、コンソーシアムを形成する会員企業等の会費収入を研究部門運営資金とする制度を構築し運用を開始した。現在、次に示す25団体が参画している:(株)ユニタック、(株)サンテック、(株)ニデック、(株)オプトクエスト、(株)三菱電機、(株)デンソー、(株)パナソニック、(株)三琇プレジジョン、(株)コンボン研究所、(株)豊田中央研究所、(株)東海光学、(株)IHI、(株)浜松ホトニクス、(株)日本レーザー、(株)レーザーシステム、(株)村田製作所、(株)ハナムラオプティクス、(株)山寿セラミックス、(株)駿河精機、(株)神島化学工業、(株)島津製作所、(株)進和、(株)成田製作所、岡崎信用金庫、愛知県額田郡幸田町。

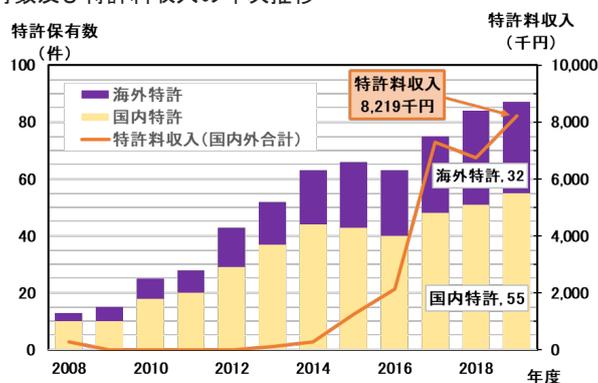
また、2019年4月には株式会社LAcubedを設立し、同年10月に自然科学研究機構発ベンチャーとして認定された。LAcubedは、社会連携研究部門が開発を進めてきた「超小型レーザー」「レーザーピーニング」の技術を活用し、社会インフラのメンテナンスなど効率的な実施がこれまで困難であった地球規模の課題に対して国内外の大学・研究機関・企業等と協力することにより社会実装を含めた研究開発を推進し付加価値の高いソリューションを提供している。社員数は4名、資本金は100万円、2019年度の売上は1,472万円である。

企業との共同研究数及び産学連携論文数は、第二期中期目標期間ではそれぞれ年平均6件及び5報であったが、第三期(2016~2019年度)においては年平均5.5件及び4.5報であった。

共同利用・施設利用の民間利用実績に関して、分子科学研究所は、文部科学省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」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おり、民間等の非公開利用も積極的に受け入れている。また、文部科学省「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(設備ネットワーク事業)」において国立大学73法人及び公私立大学に加えて、利用者として民間企業も参画している。所内設備の民間利用件数は、第三期中期目標期間(2016~2019年度)において年平均24.7件であった。

特許の出願件数及び取得件数は、第三期中期目標期間(2016~2019年度)において年平均それぞれ15.2件(国内9、海外6.2)、9件(国内4.7、海外4.2)であった。2019年度の特許保有件数は87件(国内55、海外32)であり第二期末2015年度の66件(国内43、海外23)から30%増加した。また2019年度において特許取得と維持にかかる費用568万円の支出に対して特許料収入は821万円であり、収支のバランスは良い。特許料収入は2015年度の212万円に比して3.8倍に増加した(図VII-7)。

図VII-7: 特許保有数及び特許料収入の年次推移



2019年12月に開催された国際諮問委員会からの、社会との関わりについてのレポートを付す。

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.

自由記述

1. 本文で述べたように、分子科学研究所では運営と研究評価とにおいてそれぞれ独立した諮問組織を有しており、多くの所外顧問・所外委員に参加頂いて、十分にコミュニティの意見を反映させることができるように設計されている。運営顧問(外部 4 名)、外国人運営顧問(外部 2 名)、研究顧問(外部 2 名)、運営会議委員(外部 10 名、内部 11 名)の外部計 18 名、内部 11 名の意見を反映させる構成になっているため、研究所の運営に携わる全顧問・委員のうち所内委員は 2 分の 1 以下である。I. 運営面の主な観点①では、運営会議単体の所内委員の数を 2 分の 1 以下にするように求めているようにも読めるが、その定義や必要性が現時点では必ずしも明確ではなく、実質として既に分子科学研究所は「開かれた運営体制の下、各研究分野における国内外の研究者コミュニティの意見を踏まえて運営」されていると判断できることから、本報告書では対応を保留する。
2. 共同利用課題の採択を審議する組織として、1 年以内に各施設の運営委員会内に課題選定小委員会を置き、その所内委員の数を 2 分の 1 以下とすることで、I. 運営面の主な観点④に対応する。
3. 所内組織の再編成について
現在分子科学研究所は、4 つの研究領域で構成されている。学術の発展には学際的な交流が必須とされており、領域間の交流を活性化することは大事である。先の国際諮問委員会からは、研究所の規模に鑑み 2 つ程度の領域に再編するのが妥当ではないかとのアドバイスをいただいている。次期中期計画中に適切な領域構成を検討し、将来に向けての基盤を築く予定である。
4. 研究者が研究と教育に専念できるよう、事務の効率化及び事務作業の分業化を推進している。研究力強化戦略室を設け、研究所の運営に係る事務作業を担っている。評価・将来計画、共同研究、国際、施設、広報に担当教員を配置すると同時に、人事管理、評価・研究支援、国際、情報発信を担当する URA 職員を雇用して関係する作業を実施している(図)。

図: 研究力強化戦略室の構成



同時に研究所運営に関わる会議開催の効率化を目指し、教員の時間確保を試みている。その一例として、毎月開催することが規定されている対面で行う教授会議を 2016 年度から原則年 4 回の季節開催とし、審議を必要としない報告事項はホームページに掲載あるいは、メールなどで通知することとした。所内会議を減らすと同時に、岡崎 3 機関に共通の委員会は、第二期終了時点で 36 委員会構成されていたのを大幅に整理し、現時点では 22 委員会とし、職員の時間効率の改善を図った。さらなる整理を検討している。

自然科学研究機構 分子科学研究所 研究活動の状況

5. 外国人研究者数、特に研究室主宰者数増加に向けた施策について
国際諮問委員会でも指摘を受けたように、研究室主宰者クラスの陣容を強化するための施策が求められている。分子科学研究所には外国人客員教員の制度があるので、この制度を利用してサバティカル期間の教員の確保やクロスアポイントメントを利用した海外機関との協力体制などは今後の課題である。国外の研究者から見て、当該研究所が魅力あるポジションを提供できているよう、条件整備も考慮する必要がある。
6. 女性研究者数のさらなる向上に向けた施策について
女性研究者の人数(割合)は准教授2名を含む11名(10%)であり、自然科学研究機構の第三期中期目標値(13%)達成に向けて取り組みを続けているが、現状では満足できる状況にはない。この是正は今後も重要な課題である。
男女共同参画の観点からの環境整備(保育園設置、育児介護期間中の研究者への支援)は整ってきている。近年は共稼ぎ世帯が多いので、当事者以外の家族の生活環境への支援も大事な要素となっている。東海地区は、大学も企業も多いので、周辺事業者との協力体制を整えることも今後の重要施策となろう。
7. 技術職員の待遇改善
当研究所の技術職員の半数以上は、修士課程以上を修了した高学歴人材である。地域内の製造業系民間企業に比べて、技術職員の待遇面は十分とは言えず、技術職員の技量に見合った給料体系を再構築する必要がある。

令和2年度 大学共同利用機関の検証

自己検証結果報告書 正誤表

大学共同利用機関法人自然科学研究機構

分子科学研究所

通し番号	該当の頁・箇所	誤	正
1	9頁・図II-1タイトル部	JSTの若手育成事業（さきがけ）での採択数と事業費総額	JSTの若手育成事業（さきがけ）での採択数 ^{注）} と事業費総額 <u>注）新規採択課題数＋継続課題数－転出者の課題数</u>
2	22頁・図V-1		

外部検証結果

1. 大学共同利用機関名

自然科学研究機構 分子科学研究所

2. 総合所見

分子科学分野の中核的研究拠点として質・量ともに顕著な研究成果を上げているほか、人材育成の面でもコミュニティの活性化に大きく貢献しており、自己検証のとおり、大学共同利用機関として備えるべき要件に照らして十分な活動を行っていると思われる。

多くの海外研究機関が予算や人員を拡充している中、国際的研究競争力を維持するためにも、安定的な財源はもとより、関係する研究機関との一層の連携強化を図り体制の充実が求められる。

(優れた点等)

○分子科学分野の中核拠点として、質・量とも十分な研究成果を上げ、分野をけん引している。また、学際的・融合的領域においても高い研究水準にある。ナノテクノロジープラットフォーム事業の実施機関としても研究コミュニティの活性化に寄与している。

○研究者の内部昇格を禁止していることにより、准教授・助教が全国の国公私立大学の物理化学教員などとして転出して中核研究者となっており、分野への人材輩出においても貢献している。

○学位取得後3年以内の若手研究者に研究室を主宰する機会を与える若手独立フェロー制度等の様々な施策により、優れた若手研究者が育成されていることは特筆に値する。

○外部有識者から構成される運営顧問、研究顧問、外国人運営顧問からの助言・評価の他、学会等連絡会議からの意見を適切に運営に反映させている。

(課題、改善を要する点等)

○共同利用課題の審査における所外委員の割合について早急に改善が必要である。

○国際共著率は40%程度と高いが、国際的な中核研究拠点として、更なる向上を目指してほしい。また、同様の国際拠点との比較のためベンチマークの資料を自己検証で示すべきではないか。

○今後の日本の成長分野である新材料分野（化学・素材分野）では産業界との連携が不可欠であり、今後、取組を更に強化、発展させることが求められる。

○海外の研究機関の予算や研究者が増える中で、専任教員数が減少していることから、現在の国際競争力を維持することができるよう財源強化が必要である。

○大学共同利用機関はコミュニティが一体となって運営に当たる組織であり、各種会議の議事録、規則などは適切に公開されるべきである。

(その他)

○国内では関連分野の大学の共同利用・共同研究拠点や理化学研究所などの連携強化の具体策を検討し、その遂行により日本の分子科学を含む、物質・材料・物性科学等マテリアル分野の発展を更に推し進めることを期待したい。東京大学物性研究所、京都大学化学研究所、東北

大学金属材料研究所、SPring-8、KEK 物構研、物質・材料研究機構等と物質科学研究をネットワーク化することで関連研究分野の発展と国際的な存在感の大幅な改善があり得るのではないか。

○分子研の優れた取組と活動をクロスアポイントメント制度等も活用して更に全国的に展開し、今後も促進してもらいたい。

3. 観点毎の所見

<運営面>

○運営会議のほか、研究所の評価や将来計画への提言をする顧問を置き、運営会議と顧問会議の委員数を合計することで外部委員が過半数を占めるものの、大学共同利用機関としては運営会議の外部委員比率を半数以上とすることが望ましい共同利用課題の審査についても 11 名中 7 名が所内委員からなる委員会で行われており、研究者コミュニティの意見を十分反映した共同利用・共同研究の審査となるよう検討を求めたい。また、これらの会議体が研究所の迅速な意思決定に影響を及ぼさないよう留意すべきである。

○「物性科学連携研究体」を通じた国内の研究拠点との連携に向けた取組を進めているが、連携強化の観点から、運営会議にこれらの研究拠点からの委員を加えることを検討しても良いのではないかと。

○教授会は年 4 回で効率化が図られたということであるが、情報の共有、議決に関し構成員の意見が反映されているか、十分注意すべきである。

○大学共同利用機関として開かれた研究所であり、その意味で、最高決定機関である運営会議などの小会議の議事録は、迅速に公表すべきである。また、所内の諸規則も公開すべきではないかと。

○研究不正・研究費不正使用の防止については、コンプライアンス研修や研究倫理教育研修などに教職員を参加させるなど適切に実施されている。

<中核拠点性>

○第 3 期 4 年間に於ける専任教職員一人あたりの論文数は 10.3 点で、TOP10%論文の割合や若手を含んだ多くの研究者が賞を受けている点などから中核拠点としてふさわしい研究水準を維持していると考えられる。

○第 3 期において共同研究を年度平均 700 件以上実施しており、施設利用の成果として報告された年間 300 編を超える論文数も中核拠点性を示している。分子科学分野を先導する国の施策について、ナノテクノロジープラットフォーム事業等、中核拠点としてこれら施策の取りまとめを担当してきたことも評価できる。

○特に関連学会等の若手賞受賞が多いことは若手研究者が育っていることの証左である。このことは科学技術振興機構（JST）戦略的創造研究推進事業さきがけの実施課題数が第 3 期 4 年間で 4 件→5 件→6 件→10 件と順調に伸びていることから明らかである。

○さらに、内部昇格を禁止していることから、第 3 期 4 年間で 100 名の研究者が転出しており、研究所創設以来、分子研助教から転出した 46%が教授以上、28%が准教授になっている。また、同じく分子研准教授から転出した 81%が教授以上になっていることから、人材流動化に大きく寄与しており、分子研が我が国における当該分野の中核拠点となっている。

○クロスアポイントメント制度を活用して大学等の研究者に研究に専念する環境を提供する制度も大学共同利用機関の役割の一つとして評価されるべきであろう。運用を開始して以来日が浅いが、今後の展開が注目される。

<国際性>

○国際共著論文が、2016～2019年で37%を超えるなど、国際共同研究が増加していることは評価できるが、国際的な中核研究拠点として、更なる向上を目指してほしい。2016年から国際共同加速事業などを実施して国際共同研究の促進やインターナショナルシップの支援を行っており、国際化が進みつつある。総合的に見て高い国際性を持った研究機関であると考えられるが、それを明示する意味でも、他の国際的機関との活動を比較するため、研究所の特長を示すベンチマーキングを通して自己検証を行うべきではないか。また、外国人主宰の研究室を増やすことにも取り組んでほしい。

○国際諮問委員会を開催して外部の意見を取り入れることも行っているが、国際諮問委員会の委員構成について3分の2が国内の研究者である点は再検討の余地があるのではないかと。

○外国人研究者のための英語で職務遂行が可能な職員を適切に配置している。また、海外から来る研究者支援のためのワンストップサービスを提供するために、国際担当 URA を雇用していることは評価したい。

<研究資源>

○UVSOR、計算資源、汎用測定装置を共同利用に供している。UVSORは長波長領域をカバーする放射光源で、第3期で延べ4,949名による873件の共同利用があり、共同利用率87.5%に達している。この内、同施設のビームラインBL4U(STXM)の国際共同利用率は28%である。計算科学センターや機器センターにおける共同利用も共同利用者の需要に合った運営がなされている。汎用機器の共同利用件数で特筆すべきは、重点支援1（地域貢献型）の国立大学の利用が多いことであり、分子研が全国の地方大学等に大きな貢献をしていることがわかる。

○上記のような共同利用・共同研究のために、施設の維持管理を担う技術職員37名、共同利用・共同研究に係る技術支援・事務支援を行う職員34名を配置している。技術職員の待遇改善・キャリアパスについては日本全体の問題だが、分子研には率先して取り組んでいただきたい。

○放射光源が学術研究や産業利用のインフラであると位置づけられるに至った現在、UVSORは、建設から長年が経過し施設も老朽化している。内外で施設の今後の方向性について議論を重ね、施設の高度化事業や人材育成が進められているが、これらの取組を更に加速させつつ、UVSORを他にはない強みのある施設に発展させていきたい。

○ナノテクノロジープラットフォーム事業の実施機関として、コミュニティに貢献しているほか、大学連携研究設備ネットワーク事業においても中核的役割を果たし、利用件数の大幅な増加をもたらしている。

<新分野の創出>

○分子研はその研究者、あるいは所内外の研究者の共同研究によって数多くの新しい研究分野の創出に貢献しており、学際的・融合的領域において高い研究水準にあると考えられる。固体物性化学や錯体化学等の領域における新分野創出を行っており、2020年度の自然機構の新分野創成プロジェクトには、分子研本務教員のうち44.1%が課題申請した。

○分子科学と生物分野の融合として、岡崎統合バイオサイエンスセンター、生命創成研究センターへの発展的新設などが、新分野に貢献している。

○新規材料や化学産業関連素材など我が国が強みをもつ分野との融合は重要であり、例えば、物性科学連携研究体などを通じて、材料分野、物性分野との交流による更なる新分野創出が期待される。

<人材育成>

○総研大の基盤機関としてだけでなく特別共同利用研究員の受入れを積極的に進め、大学院教育に取り組んでいる。総研大物理科学研究科の構造分子科学専攻と機能分子科学専攻では、第3期4年目終了までに25名の総研大生が博士号を取得している。この他、同期間に総研大以外の大学から延べ85名を特別共同利用研究員として受け入れ、総研大生と合わせて延べ202名

をRAとして採用し、経済支援を行っている。毎年数名を海外最先端研究室に短期留学させるなど若手人材育成に注力している。さらに、名古屋大学卓越大学院を連携機関として大学院教育に貢献している。

○分子研は内部昇格を禁止しているため、教員の66%が若手研究者であることが特長であり、若手独立フェロー制度により学位取得後3年以内の若手研究者に研究室を主宰する機会を与えていることは評価したい。共同利用研究の申請に「若手研究活動支援」を設けていて、機関外の若手研究者育成にも寄与している。科学技術振興機構（JST）戦略的創造研究推進事業さきがけにおいて10課題が進行中との状況は特筆に値する。

○子育て・介護中の研究者支援等も進めていることは評価しうが、女性研究者比率は2019年度で10%であることから、長期的な対応が必要である。

○外国人留学生はほぼ4分の1であるが、もう少し増やせると良いのではないかと。

<社会との関わり>

○WEBサイト、プレスリリース、公開講座、研究所公開を通じて積極的に一般社会に対し研究内容を公開する取組を行っており、参加者、閲覧者の数においても高い水準であると言える。

○ベンチャーとして株式会社LAcubedを設立し、レーザー技術の応用などにより2019年度の売り上げは1,472万円であった。第3期4年間の特許取得件数は36件（うち海外17件）、2019年度の保有件数は87件（うち海外32件）で、特許料収入は821万円と特許取得・維持費の568万円を上回っている。

○複数の民間企業など外部機関と連携し運営するオープンイノベーション拠点「社会連携研究部門」を新設し、社会人をも含めた研究者育成及び産学交えた人材流動化の促進に取り組んでいる。また、施設利用の民間利用を積極的に推進していることは評価できる。産業界との連携はより進めるべきである。

<自由記述>

○国内では関連分野の大学の共同利用・共同研究拠点や理化学研究所等との連携強化により分子科学の発展に貢献することを期待したい。

○分子研の研究力及び人材育成力の高さは、特筆すべきである。一方、予算上、専任教員数を減らざるを得ない状況であることから、国際的研究競争力を今後も維持し続けるためにも、分子研に対する更なる財政支援を検討してもらいたい。

○固定観念にとらわれない所長のリーダーシップに今後も期待している。

分子研レポート 2020

現状・評価・将来計画

2021年9月発行

大学共同利用機関法人 自然科学研究機構

分子科学研究所長 川合 真紀

編集責任者 解良 聡

