

分子研リポート2021

現状・評価・将来計画

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

「分子研リポート 2021」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
2-10 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　2021 年度の実施状況 40
3-1-3　共同利用研究実施件数一覧 53
3-1-4　分子研研究会プログラム 54
3-2　国際交流と国際共同研究 56
3-2-1　外国人客員部門等及び国際交流 56
3-2-2　岡崎コンファレンス 58
3-2-3　日韓共同研究 58

3-3　大学院教育 60
3-3-1　特別共同利用研究員 60
3-3-2　総合研究大学院大学二専攻 61
3-3-3　オープンキャンパス 65
3-3-4　体験入学 66
3-3-5　総研大アジア冬の学校 67
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 67
3-3-7　統合生命科学教育コース群 69
3-4　その他 70
3-4-1　分子研コロキウム 70

4．研究支援等 73
4-1　技術推進部 74
4-1-1　技術研究会 75
4-1-2　技術研修 76
4-1-3　人　事 76
4-1-4　受　賞 77
4-2　安全衛生管理室 78
4-3　研究力強化戦略室 79
4-4　社会との交流 80
4-4-1　一般公開 80
4-4-2　分子科学フォーラム 80
4-4-3　市民向けシンポジウム 81
4-4-4　見学者受け入れ 82
4-4-5　その他 83
4-5　理科教育への協力 84
4-5-1　スーパーサイエンスハイスクール 84
4-5-2　コスモサイエンスコース 84
4-5-3　あいち科学技術教育推進協議会 85
4-5-4　国研セミナー 85
4-5-5　中学校での出前授業 86
4-5-6　職場体験学習 86
4-5-7　その他 86
4-6　情報発信 88

5．各種事業 95
5-1　新分野創成センター（自然科学研究機構） 97
5-2　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） 98
5-3　光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP（文部科学省） 99
5-4　実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点 Elements Strategy Initiative for Catalysis and Battery (ESICB)（文部科学省） 100
5-5　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 101
5-6　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） 104
5-7　マテリアル先端リサーチインフラ（文部科学省） 117

5-8　NMR プラットフォーム（文部科学省）....118
5-9　分子科学国際共同研究拠点の形成....119
5-9-1　国際共同研究事業の財源....119
5-9-2　分子研国際インターンシッププログラム（IMS-IIP）....120
5-9-3　分子研アジア国際インターンシッププログラム（IMS-IIPA）....121
5-9-4　短期外国人研究者招へいプログラム....121
5-10 ネットワーク型研究加速事業（自然科学研究機構）....123
5-11 研究大学強化促進事業（文部科学省）....124
5-12 URA による研究 DX を推進するデータの整備・構築　MIRAI-DX プロジェクト（文部科学省）....125
5-13 分子科学研究所所長招聘会議....126

6．研究活動の現状....127
6-1　論文発表状況....128
6-2　メゾスコピック計測研究センター....129
繊細計測研究部門....131
広帯域相関計測解析研究部門....135
6-3　協奏分子システム研究センター....138
階層分子システム解析研究部門....139
機能分子システム創成研究部門....149
6-4　理論・計算分子科学研究領域....153
理論分子科学第一研究部門....153
理論分子科学第二研究部門....160
計算分子科学研究部門....163
6-5　光分子科学研究領域....177
光分子科学第二研究部門....177
光分子科学第三研究部門....184
光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）....191
電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）....194
光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）....201
光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）....207
6-6　物質分子科学研究領域....209
電子構造研究部門....209
分子機能研究部門....216
6-7　生命・錯体分子科学研究領域....227
生体分子機能研究部門....227
錯体触媒研究部門....240
錯体物性研究部門....247
6-8　特別研究部門....252
6-9　社会連携研究部門....265
6-10 研究施設等....271
機器センター....271
計算科学研究センター（ネットワーク担当）....275
技術推進部及び安全衛生管理室....276

７．点検評価と課題 279
7-1　運営顧問による点検評価 280
7-2　理論・計算分子科学研究領域の評価 282
7-2-1　Josef Michl 外国人運営顧問 282
7-3　物質分子科学研究領域の評価 285
7-3-1　Ching W. Tang 外国人運営顧問 285

８．研究施設の現状と将来計画 289
8-1　極端紫外光研究施設（UVSOR） 290
8-2　機器センター 296
8-3　装置開発室 299
8-4　計算科学研究センター 300
8-5　生命創成探究センター 302

９．資　　料 305
9-1　歴代所長 305
9-2　運営顧問（2004 ～） 306
9-3　外国人運営顧問（2004 ～） 307
9-4　運営会議委員（2004 ～） 308
9-5　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） 311
9-6　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） 313
9-7　大学共同利用機関法人自然科学研究機構第４期中期目標 314
9-8　大学共同利用機関法人自然科学研究機構第４期中期計画 316
9-9　自然科学研究機構分子科学研究所規則リンク集 323
9-10 分子科学研究所運営顧問会議議事要旨抜粋 324

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。

このリポートには，2021 年度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」および「マテリアル先端リサーチインフラ」,（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，2021 年度も多くの人事異動がありました。４月１日付で熊谷 崇准教授（元フリッツハーバー研究所グループリーダー）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。11 月１日付で大西 洋教授（神戸大学大学院理学研究科教授）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。同じく, 11 月 16 日付で, 極端紫外光研究施設に松井文彦教授（元分子科学研究所主任研究員）が着任されました。一方, 昨年度３月 31 日付で理論･計算分子科学研究領域の藤田貴敏特任准教授(若手独立フェロー）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，2021 年４月 26 日－ 28 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 2021 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。

2021 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。昨年に続き，分子科学研究所の教育研究は大きな制約の中での活動を強いられました。制約も 2 年目となると，徐々に制約下での活動にも慣れてきました。とはいえ人事交流を基本とする国際交流活動がほぼ停止状態にあることの影響は大きく，今後は元の活動レベルにまで回復できるか，試練の時期を迎えます。研究会やシンポジウムは一部を除きオンラインで開催されました。幸い，2021 年度も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。

2022 年 3 月

自然科学研究機構

分子科学研究所　所長

川合　眞紀

2．分子科学研究所の概要

2-1　研究所の目的

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

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

2-2　沿　　革

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

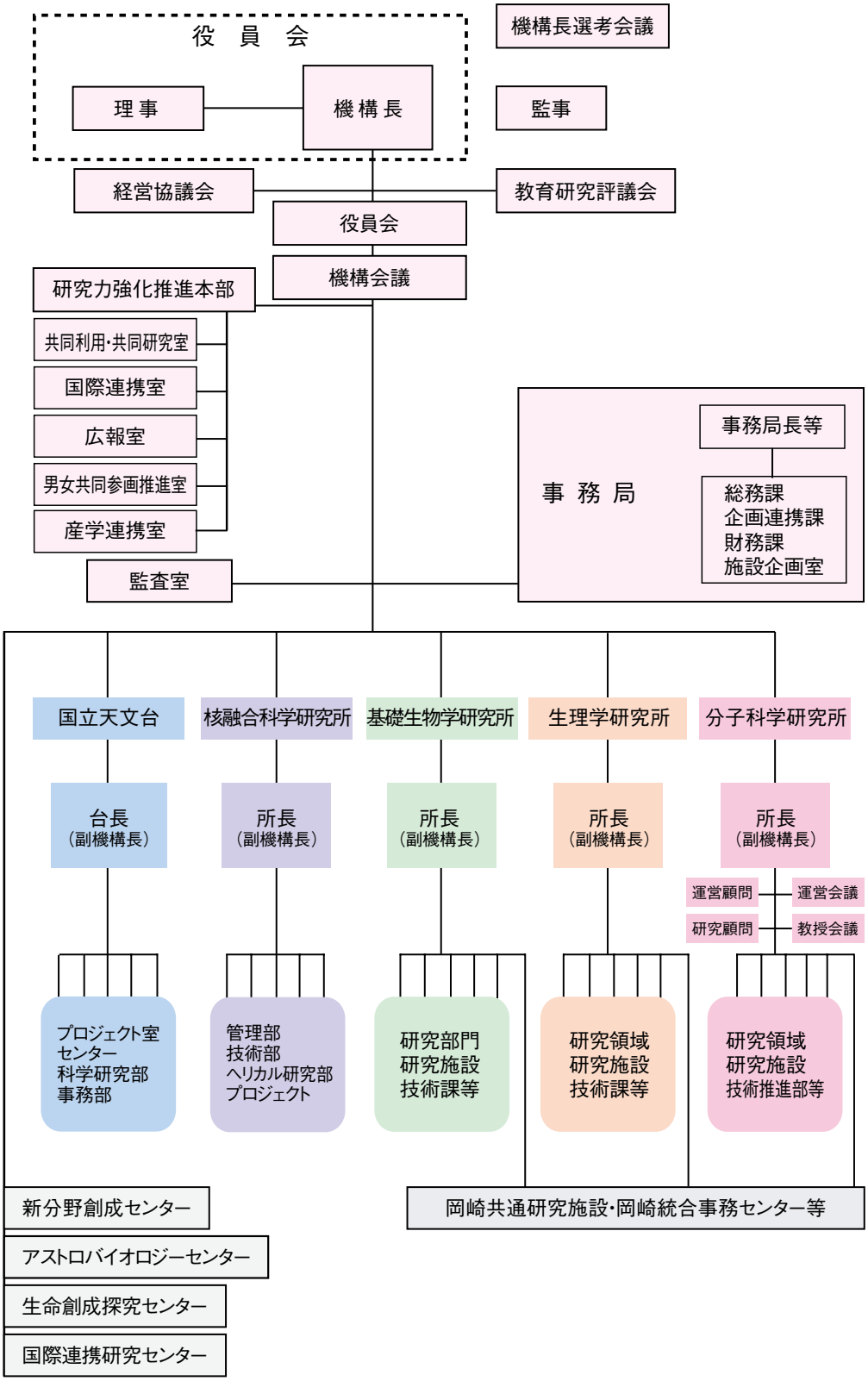
1965. 12.13　日本学術会議は，「分子科学研究所」（仮称）の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
1973. 10.31　学術審議会は,「分子科学研究所」（仮称）を緊急に設立することが適当である旨, 文部大臣に報告した。
1974.　4.11　文部大臣裁定により，東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室（室長：井口洋夫前東京大学物性研究所教授，定員３名）及び分子科学研究所創設準備会議（座長：山下次郎前東京大学物性研究所長，学識経験者 35 人により構成）が設置された。
1974.　7.　6　分子科学研究所創設準備会議において，研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
1975.　4.22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

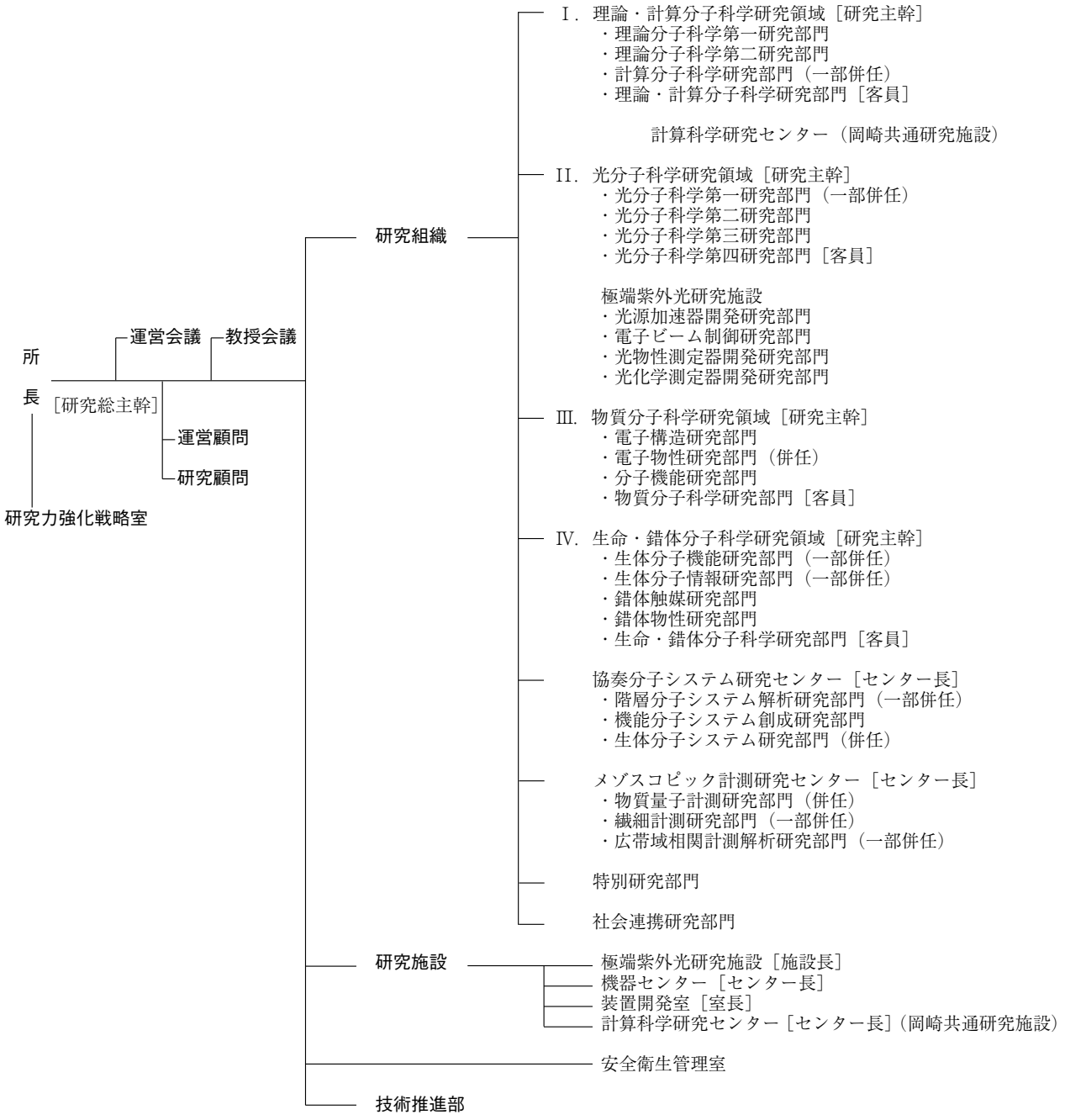
1979. 4. 1　分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され，管理局が総務部（庶務課，人事課，国際研究協力課），経理部（主計課，経理課，建築課，設備課），技術課に改組された。
1979. 11. 8　分子科学研究所創設披露式が挙行された。
1981. 4. 1　第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4.14　国立学校設置法の一部を改正する法律により，分子科学研究所と生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所, 生理学研究所）は総合化され, 岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され，管理局が岡崎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

2004. 3. 1　山手５号館（NMR）（664 m^2）が竣工した。
2004. 3. 8　山手３号館（統合バイオサイエンスセンターなど）（10,757 m^2）が竣工した。
2004. 4. 1　国立大学法人法により，国立天文台，核融合科学研究所，基礎生物学研究所，生理学研究所，分子科学研究所が統合再編され，大学共同利用機関法人自然科学研究機構が創設された。岡崎国立共同研究機構管理局が，大学共同利用機関法人自然科学研究機構岡崎統合事務センターとなり，総務部（総務課，国際研究協力課），財務部（財務課，調達課，施設課）に改組された。
2004. 4. 1　理論研究系が理論分子科学研究系に改組された。計算分子科学研究系（計算分子科学第一研究部門，計算分子科学第二研究部門，計算分子科学第三研究部門）が設置された。分子スケールナノサイエンスセンターに，先導分子科学研究部門が設置され，界面分子科学研究部門，分子クラスター研究部門が廃止された。極端紫外光実験施設が，極端紫外光研究施設に改組された。安全衛生管理室が設置された。
2004. 4. 1　第六代研究所長に中村宏樹分子科学研究所教授が任命された。
2005. 5.20　分子科学研究所創設 30 周年記念式典が挙行された。
2007. 4. 1　研究系及び錯体化学実験施設が廃止され，理論・計算分子科学研究領域（理論分子科学第一研究部門，理論分子科学第二研究部門，計算分子科学研究部門，理論・計算分子科学研究部門），光分子科学研究領域（光分子科学第一研究部門，光分子科学第二研究部門，光分子科学第三研究部門，光分子科学第四研究部門），物質分子科学研究領域（電子構造研究部門，電子物性研究部門，分子機能研究部門，物質分子科学研究部門），生命・錯体分子科学研究領域（生体分子機能研究部門，生体分子情報研究部門，錯体触媒研究部門，錯体物性研究部門，生命・錯体分子科学研究部門）の４つの研究領域が設置された。極端紫外光科学研究施設に，光加速器開発研究部門，電子ビーム制御研究部門，光物性測定器開発研究部門，光化学測定器開発研究部門が設置（名称変更）された。分子スケールナノサイエンスセンターに，ナノ分子科学研究部門，ナノ計測研究部門，ナノ構造研究部門が設置され，分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門，ナノ触媒・生命分子素子研究部門，ナノ光計測研究部門が廃止された。分子制御レーザー開発研究センターに，先端レーザー開発研究部門，超高速コヒーレント制御研究部門，極限精密光計測研究部門が設置された。機器センターが新たに設置された。広報室及び史料編纂室が設置された。
2010. 3.30　実験棟改修第１期工事（耐震及び全面改修）が竣工した。
2010. 4. 1　第七代研究所長に大峯巖京都大学福井謙一記念研究センターリサーチリーダーが任命された。
2011. 3.30　実験棟改修第２期工事（耐震及び全面改修）が竣工した。
2013. 4. 1　分子スケールナノサイエンスセンターが廃止され，協奏分子システム研究センター（階層分子システム解析研究部門，機能分子システム創成研究部門，生体分子システム研究部門）が設置された。
2013. 10. 1　広報室及び史料編纂室が廃止され，研究力強化戦略室が設置された。
2013. 12. 6　極端紫外光研究施設創設 30 周年記念式典が挙行された。
2016. 4. 1　第八代研究所長に川合眞紀東京大学大学院新領域創成科学研究科教授，理化学研究所理事長特別補佐が任命された。
2017. 4. 1　分子制御レーザー開発研究センターが廃止され，メゾスコピック計測研究センター（物質量子計測研究部門，繊細計測研究部門，広帯域相関計測解析研究部門）が設置された。
2018. 4. 1　岡崎統合バイオサイエンスセンターが廃止され，生命創成探究センターが設置された。特別研究部門が設置された。
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。
2021. 4. 1　技術課が技術推進部に改組された。

2-3　組　　織

大学共同利用機関法人自然科学研究機構





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

2-4 運　　営

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

2-4-1　運営顧問

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

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

運営顧問（2021 年度）

菊池　昇	株式会社コンポン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 CSO
瀧川　仁	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所協力研究員
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（2021 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は，国内外各１名で運用した。

研究顧問（2021 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（2020 年度に行われた共同利用機関の検証において，所内委員の割合を半数以下にするべきであるとの指摘がなされたため，2022 年度から所外委員 10 名，所内委員 10 名の組織とすることとなった)。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	北海道大学大学院理学研究院教授
◎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
石﨑　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，特任准教授（若手独立フェロー），主任研究員の選考に関しては専門委員を含む小委員会を，生命創成探究センター（分子研兼務）教授・准教授の選考に関しては専門委員を含む選考委員会を，人事選考部会の下に置いている。人事選考部会の審議結果は部会長より所長に答申され，所長は教授会議（後述）でその結果を報告し，可否の投票等によって了解を得たうえで，最終決定する。

専任の教授，准教授を任用する場合には，まず教授会議メンバーによる懇談会において当該研究分野及び募集方針の検討を行い，それに基づいて作成された公募文案を人事選考部会，教授会議で審議した後，公募に付する。助教から准教授，准教授から教授への内部昇任は原則として認められていない。助教は６年を目途に転出することを推奨されてはいるが，法制化された任期があるわけではない。なお，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）	石﨑　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）	斉藤　真司	（分子研教授）
唯　美津木	（名大院教授）	山本　浩史	（分子研教授）
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（2021 年度）

【所外委員】

（日本化学会推薦）

相田　美砂子	（広島大特任教授）	石谷　治	（東工大院教授）
辻　康之	（京都大名誉教授）		

（日本物理学会推薦）

関山　明	（大阪大院教授）	森　健彦	（東工大院教授）
吉村　一良	（京都大院教授）		

（日本放射光学会推薦）

中村　哲也	（東北大教授）(-2021.9)	熊坂　崇	（高輝度光科学研究センター 室長）(2021.10 -)

（錯体化学会推薦）

速水　真也	（熊本大院教授）

（分子科学会推薦）

岩田　耕一	（学習院大教授）	大島　康裕	（東工大院教授）
恩田　健	（九州大院教授）	佐藤　啓文	（京都大院教授）

（日本生物物理学会推薦）

小松崎　民樹	（北海道大教授）

【所内委員】

飯野　亮太	（分子研教授）	石﨑　章仁	（分子研教授）
岡本　裕巳	（分子研教授）	解良　聡	（分子研教授）
小林　玄器	（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（一部の議案については，特任教授，特任准教授，主任研究員も教授会議に参画する）。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所属の研究教育職員，技術推進部長，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。	取扱主任者 研究所の職員若干名（放射線発生装置所有グループ及びエックス線発生装置所有グループをそれぞれ１グループ以上含む） 総務部長 技術推進部長 安全衛生管理室長	放射線障害予防規則	2021.5.20（メール審議），2021.6.10（メール審議），2022.1.12，2022.2.25（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	2021.9.3，2022.3.2
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	2021.6.14
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 技術推進部長	委員会規則	2021.5.19，2021.12.2
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	2021.6.17，12.21（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 技術推進部長 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，技術推進部長が指名するユニット長１名	委員会規則	2021.4.2，6.4，8.6，10.1，12.3，2022.2.4，3.16（メール審議）

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，技術推進部長	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		2021.4.2, 5.7, 6.4, 7.2, 8.30–9.3（メール審議), 11.5, 12.3, 2022.1.7, 2.4
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	2021.4.20, 5.18, 6.15, 7.20, 9.21, 10.19, 11.16, 12.21, 2022.1.18, 2.15, 3.15
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	−
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	2021.5.25（メール審議), 2022.3.28
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	2021.5.18, 7.6, 7.7, 10.14, 10.21, 2022.3.1, 3.23 ※ 3.23 以外メール審議
岡崎共同利用研究支援施設運営委員会	岡崎コンファレンスセンター及び宿泊施設（ロッジ）の管理運営に関し必要な事項。	担当責任所長 教授又は准教授１ 国際研究協力課長	委員会規則	2021.7.21, 2022.2.9
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	2021.4.20, 5.18, 6.15, 7.20, 8.16, 9.21, 10.19, 11.15, 12.21, 2022.1.18, 2.15, 3.15, 臨時（8.30, 2.22） ※ 3.15, 臨時以外はメール審議

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（技術推進部長），高圧ガス保安員統括者	委員会規則	2021.6.4（メール審議），10.11（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	技術推進部長	委員会規則	2021.6.29，9.6，11.30，2022.2.22
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１	委員会規則	2021.9.1，2022.2.28
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	2021.7.19，8.3–11（メール審議），8.24–31（メール審議），12.14–21（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 技術推進部長が指名するユニット長１	委員会規則	2021.5.24，11.9–15（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	2021.6.30，9.24
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 技術推進部長	センター明大寺地区実験施設放射線障害予防規則	2021.6.9（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。	担当責任所長 教授３ 技術推進部長	協議会規則	2021.5.12，5.13–24（メール協議），7.14，9.8，11.10，11.23–30（メール協議），2022.3.9
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 技術推進部長	委員会規則	2021.10. 11，2022.2.3
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	2021.6.15，10.19，11.25–12.1（メール審議），2022.3.2–8（メール審議）
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	2021.11.26

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（客員）

研究目的　　量子相，励起状態，物質系における機能・物性解明に関する理論・計算科学的研究

研究課題　1，マテリアルズ・インフォマティクス
2，量子相の対称性とトポロジー
3，凝縮系の励起状態ダイナミクス

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，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，極低温リュ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

4，有限の厚さをもつ固液界面のオペランド分子科学研究

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構造および脂質膜との相互作用の解析

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し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 型分子性物質における新機能物性の開拓

生命・錯体分子科学研究領域

研究目的　　新規な光学的・磁気的・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　広義の錯体を対象とした触媒機能，反応性および構造の相関の解明，分子科学的手法を用いた生命機能の解明

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

繊細計測研究部門

研究目的　低摂動で繊細な分子計測法等，分子のありのままの姿を非破壊的に観測する計測手法を開発し，分子物質の機能を解明

研究課題　1, ナノ領域顕微分光法による原子・分子集合体の微細光学解析

2, 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）からのシンクロトロン光を国内の大学等の研究者に安定に供給して極端紫外光物性・光化学の共同利用研究を支援するとともに，極端紫外光源の高輝度化，加速器を利用した新しい光源に関する研究や新たな放射光分子科学の開拓的研究を国内外の研究者と共同して推進する。

機器センター

目　的　　機器センターは，新規物質開発を行う上で基盤設備となる汎用物性測定装置，汎用化学分析装置，及び汎用分光計測装置を集中管理し，さらに，先端機器の開発と冷媒の供給管理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，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，2022年度からは同事業運営機構横断領域（合成）担当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
桑島　邦博	名誉教授
小杉　信博	名誉教授
小林　速男	名誉教授
齋藤　修二	名誉教授
田中　晃二	名誉教授
永瀬　茂	名誉教授
西　信之	名誉教授
平田　文男	名誉教授
廣田　榮治	名誉教授
藥師　久彌	名誉教授
吉原　經太郎	名誉教授
渡辺　芳人	名誉教授

物故名誉教授
赤松　秀雄
伊藤　光男
井口　洋夫
茅　幸二
木村　克美
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）　斉藤　真司

理論分子科学第一研究部門

斉藤　真司	教授
南谷　英美	准教授
甲田　信一	助教
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）
松村　祥宏	学振特別研究員
KALATHINGAL, Mahroof	大学院生
ZHU, Zhe	大学院生

理論分子科学第二研究部門

石﨑　章仁	教授
坂本　想一	特任研究員
JO, Ju-Yeon	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）
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）
岡崎　圭一	准教授（兼）（計算科学研究センター）
伊藤　暁	助教
石田　干城	助教
ZHAO, Pei	特任研究員
谷本　勝一	特任研究員(IMS フェロー)
羽鳥　敦也	大学院生
宮澤　和久	大学院生
福原　大輝	大学院生
杉本　縁	事務支援員

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）
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）
BHARTI, Vineet	特任研究員
國見　昌哉	特任研究員
周　諭来	大学院生
TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh	大学院生
VILLELA ESCALANTE, Rene Alejandro	大学院生

川本　美奈子	技術支援員

光分子科学第三研究部門

解良　聡	教授
髙谷　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）
長坂　将成	助教
福谷　圭祐	助教
金沢　真伍	特別共同利用研究員
宮田　健史	特別共同利用研究員

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）
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
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）
杉本　敏樹	准教授
小板谷　貴典	助教
山本　航平	助教
櫻井　敦教	助教
斎藤　晃	特任研究員
鶴岡　和幸	特任専門員
高橋　翔太	特任専門員
佐藤　宏祐	大学院生
林　仲秋	大学院生
野口　直樹	大学院生

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
西村　勝之	准教授
小林　玄器	准教授
伊澤　誠一郎	助教
竹入　史隆	助教
宇都　祥子	研究員
LEE, Jihyun	大学院生
PALASSERY ITHIKKAL, Jaseela	大学院生
岡本　啓	大学院生
内村　祐	大学院生
泉　善貴	大学院生
久保田　亜紀子	技術支援員
今井　弓子	技術支援員
中村　由佳	事務支援員

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
志村　真希	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）
加藤　晃一	教授（兼）（生命創成探究センター）
飯野　亮太	教授
村木　則文	助教（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
大友　章裕	助教
KEYA, Jakia Jannat	特任研究員
HIRANYAKORN, Methanee	大学院生
関口　太一朗	大学院生
齋藤　泰輝	特別共同利用研究員
梅澤　芙美子	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
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）
倉持　光	准教授（併）
向山　厚	助教（併）
古池　美彦	助教（併）

錯体触媒研究部門

魚住　泰広	教授
椴山　儀恵	准教授
奥村　慎太郎	助教
大塚　尚哉	助教
藤波　武	特任研究員
田澤　文	研究員
新見　涼子	大学院生
ZHANG, Kaili	大学院生
高橋　輝気	大学院生
堀　達暁	大学院生
大石　峻也	大学院生
加藤　雅之	大学院生
小谷　駿輔	大学院生
鳥居　薫	技術支援員
西岡　雪奈	技術支援員
牛田　妃菜乃	事務支援員

錯体物性研究部門

草本　哲郎	准教授
瀬川　泰知	准教授
松岡　亮太	助教
杉山　晴紀	助教
長瀬　真依	大学院生
渡邊　幸佑	特別共同利用研究員
中貝　梢	技術支援員
中野　さち子	技術支援員

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）
渡邉　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	事務支援員
福富　幸代	事務支援員
谷分　麻由子	事務支援員
中根　香織 *	事務支援員
川口　律子 *	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
斉藤　真司	教授（併）
古賀　信康	准教授（兼）（生命創成探究センター）
倉持　光	准教授
小林　玄器	准教授（併）
向山　厚	助教
古池　美彦	助教
小杉　貴洋	助教
米田　勇祐	助教
OUYANG, Dongyan	特任研究員
南　慎太朗	特別協力研究員
SIMON, Damien Stephane	大学院生
三本　斉也	大学院生
海田　新悟	大学院生
和田　琴恵	技術支援員
杉坂　かな恵	技術支援員
鷲尾　みどり	技術支援員
高家　マリ	技術支援員

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
佐藤　拓朗	助教
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
MALATONG, Ruttapol	大学院生
URBAN, Adrian Joe	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)

繊細計測研究部門

岡本　裕巳	教授
江原　正博	教授(併)
成島　哲也	助教
吉澤　大智	助教
AHN, Hyo-Yong	特任助教(併)(新分野創成センター)
山西　絢介	学振特別研究員

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
西田　純	助教
野村　恵美子	事務支援員
伊藤　敦子 *	事務支援員

特別研究部門

藤田　誠	卓越教授(東大院工学系)
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)
髙谷　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)
三橋　隆章	特任助教(分子科学研究所特別研究員)
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
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
市井　智章	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
吉田　光宏	特別訪問研究員
角谷　利恵	特任専門員
佐野　雄二	特命専門員
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

極端紫外光研究施設

施設長(併)　解良　聡

光源加速器開発研究部門

加藤　政博	特任教授(クロスアポイントメント;広大 HiSOR)
藤本　將輝	助教(クロスアポイントメント;名大シンクロトロン光研究センター)
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
松井　文彦	主任研究員
大東　琢治	助教
杉田　健人	助教
松田　博之	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

光物性測定器開発研究部門

田中　清尚	准教授
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

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
堀米　利夫	技術支援員
石原　麻由美	事務支援員
加茂　恭子	事務支援員

機器センター　センター長（併）　横山　利彦

湊　丈俊	主任研究員
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
船木　弓子	特任専門員
伊木　志成子	特任専門員
長尾　春代	特任専門員
中本　圭一	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
内田　真理子	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
菅沼　光二	技術支援員
稲垣　いつ子	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

片㑹　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
間瀬　俊明	特命専門員
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
奥村　久士	准教授（兼）
岡崎　圭一	准教授
大野　人侍	准教授
石田　干城	助教（兼）
JAUNET USAGE JAUNET-LAHARY, Titouan Teddy	特任研究員
金澤　悠紀	研究員
宇野　明子	技術支援員
近藤　紀子	事務支援員
浦野　宏子	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
青野　重利	教授
奥村　久士	准教授
古賀　信康	准教授
矢木　真穂	助教
村木　則文	助教
谷中　冴子	助教（兼）
伊藤　暁	助教（兼）
小杉　貴洋	助教（兼）
古賀（巽）　理恵	特任研究員
NAM, Dayeon	特任研究員
東田　怜	特任研究員
中根　香織	事務支援員
川口　律子	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）

技術推進部　　部長　繁政　英治

原田　美幸	技師
内山　功一	主任技術員

光技術ユニット　ユニット長　林　憲志

中村　永研	主任技師
林　憲志	技師
岡野　泰彬	主任技術員
矢野　隆行	主任技術員
山崎　潤一郎	主任技術員
酒井　雅弘	主任技術員
湯澤　勇人	技術員
太田　紘志	技術員
手島　史綱	技術員
近藤　直範	技術員
水川　哲徳	技術支援員

装置開発ユニット　ユニット長　近藤　聖彦

近藤　聖彦	主任技師
豊田　朋範	技師
松尾　純一	主任技術員
木村　和典	技術員
菊地　拓郎	技術員
高田　紀子	技術員
木村　幸代	技術員
吉田　久史	技術支援員
水谷　伸雄	技術支援員

計算情報ユニット　ユニット長　岩橋　建輔

岩橋　建輔	主任技師
水谷　文保	技師
神谷　基司	主任技術員
内藤　茂樹	主任技術員
澤　昌孝	技術員
長屋　貴量	技術員
木下　敬正	技術員
矢﨑　稔子	技術支援員

機器ユニット　ユニット長　牧田　誠二

牧田　誠二	技師
髙山　敬史	技師
藤原　基靖	主任技術員
浅田　瑞枝	技術員
賣市　幹大	技術員
上田　正	技術員
岡野　芳則	技術員
宮島　瑞樹	技術員

朝倉　由希子	事務支援員
田中　景	事務支援員
鶴田　由美子	事務支援員
近藤　直子	事務支援員

整理日付は 2021 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。
派遣職員を含む。
＊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

2021 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	1[1,0]	1[1,0]	3[2,0]	4[1,0]	1	0
	主任研究員	0	0	0	0	0	0	0
	助　教	0	4	7	7	10	0	0
	特任助教	0	1	1	0	0	1	0
	研究員	1	4	2	1	3	0	5
	小計	2	12[3,0]	14[3,0]	14[3,0]	20[3,0]	3[0,1]	6
研究支援	技術職員	3	0*3					
	特任専門員*2	8	4*3					
	再雇用職員	0	1*3					
	技術支援員	1	11*3					
	事務支援員	8	15*3					
	小計	20	31					
合計		22	100					

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	2	2	16	(2/0)	[5,0]
	主任研究員	1	1	0	0	0	2	(0/0)	[0,0]
	助　教	4	0	0	0	2	34	(2/1)	[0,0]
	特任助教	0	0	0	0	0	3	(0/0)	[0,0]
	研究員	2	4	0	2	3	27	(8/11)	[0,0]
	小計	10	5	0	5	9	100	(13/12)	[12,1]
研究支援	技術職員	10	8	7	7	0	35		
	特任専門員*2	0	4	0	0	0	16		
	再雇用職員	1	0	2	1	0	5		
	技術支援員	2	1	2	1	0	18		
	事務支援員	2	3	1	2	0	31		
	小計	15	16	12	11	0	105		
合計		25	21	12	16	9	205		

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。派遣職員は含まない。

＊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，助教よび主任研究員）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（2021 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* 2021 年５月１日現在
年　度	2010 ～ 2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2016 ～ 2021 計	
教　授	6	1	0	0	2	1	1	5	18 (1/0)
准教授	8	2	0	2	3	3	1	11	16 (2/0)
主任研究員	0	0	0	1	0	1	0	2	2 (0/0)
助教	21	2	4	5	4	3	4	22	34 (2/1)
特任助教	7	1	1	1	2	3	0	8	3 (0/0)
研究員	134	14	18	15	23	10	8	88	27 (8/11)
計	176	20	23	24	34	21	14	136	100 (13/12)

＊ (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						
年度	2010 ～ 2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2016 ～ 2021 計
教　授	9	0	1	1	0	0	1	3
准教授	8	1	2	4	1	1	1	10
主任研究員	0	0	0	0	0	0	0	0
助教	29	5	4	5	9	5	4	32
特任助教	7	1	2	0	1	1	0	5
研究員	142	8	14	22	19	15	10	88
計	195	15	23	32	30	22	16	138

②　客員教員等

区分	職　名	創立～ 2021 年度	現員数 *2 2021 年 5 月 1 日現在
客員研究部門（国内）	教　授	164	7(1)
	准教授	176	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

（単位：千円）

項目＼年度		2016	2017	2018	2019	2020	2021
収入	運営費交付金	2,874,614	3,037,793	2,286,166	2,267,343	2,171,164	2,289,408
	施設整備費補助金	0	80,000	0	602,790	269,940	0
	補助金等収入　小計	71,366	73,080	67,920	60,973	93,974	37,177
	研究大学強化促進費補助金	48,400	46,800	45,800	38,300	36,833	33,366
	科学技術人材育成費補助金	22,966	26,280	22,120	22,673	0	0
	先端研究設備整備費補助金	0	0	0	0	49,973	0
	中小企業経営支援等対策費補助金	0	0	0	0	7,168	3,811
	国立大学財務・経営センター施設費交付金	0	0	0	0	0	0
	自己収入	11,890	29,470	28,753	25,055	25,626	43,046
	産学連携等研究収入及び寄附金収入等　小計	1,195,855	1,408,087	1,733,856	1,125,284	749,476	1,042,648
	産学連携等研究収入	1,102,004	1,306,087	1,613,501	1,001,996	642,247	938,897
	寄附金	26,844	30,440	44,333	51,976	49,487	47,331
	大学院教育経費収入	67,007	71,560	76,022	71,312	57,742	56,420
	目的積立金取崩額	0	0	0	0	0	0
	科学研究費助成事業（直接経費）	344,475	389,661	379,364	349,420	371,260	391,720
	収入合計	4,498,200	5,018,091	4,496,059	4,430,865	3,681,440	3,803,999
支出	人件費	972,649	981,592	946,412	907,535	965,954	1,010,976
	研究経費	545,845	550,286	532,908	531,766	607,004	561,273
	共同利用経費	551,128	653,901	636,962	849,783	505,535	727,023
	教育研究支援経費	0	0	0	0	0	0
	一般管理費	1,348	2,019	2,335	3,313	3,776	4,442
	施設整備費	0	80,000	0	602,790	269,940	0
	補助金等　小計	71,366	73,080	67,920	60,973	93,974	37,177
	研究大学強化促進費補助金	48,400	46,800	45,800	38,300	36,833	33,366
	科学技術人材育成費補助金	22,966	26,280	22,120	22,673	0	0
	先端研究設備整備費補助金	0	0	0	0	49,973	0
	中小企業経営支援等対策費補助金	0	0	0	0	7,168	3,811
	産学連携等研究経費及び寄附金事業費等　小計	1,167,117	1,243,105	1,692,623	1,087,798	722,209	1,019,172
	産学連携等研究費	1,086,050	1,161,348	1,595,398	989,107	633,151	927,079
	寄附金事業費	14,060	10,197	21,203	27,275	31,316	35,673
	大学院教育経費	67,007	71,560	76,022	71,416	57,742	56,420
	科学研究費助成事業（直接経費）	433,048	374,167	367,091	336,345	331,697	439,533
	支出合計	3,742,501	3,958,150	4,246,251	4,380,303	3,500,089	3,799,596

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			2016	2017	2018	2019	2020	2021
寄付金	分子科学研究所	件数（件）	12	15	17	20	24	16
		金額（千円）	15,920	25,021	25,483	37,505	37,224	31,394
	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	1	4	3	1	1
		金額（千円）	1,800	2,000	4,500	3,100	2,000	1,500
文部科学省科学研究費助成事業＊	分子科学研究所	件数（件）	66	83	97	81	76	74
		金額（千円）	407,450	389,662	492,319	453,118	479,779	508,495
	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）	12	15	16	15	20	19
		金額（千円）	55,700	78,700	50,439	104,130	80,331	73,515
共同研究＊	分子科学研究所	件数（件）	7	6	6	8	9	10
		金額（千円）	53,156	58,961	36,374	35,396	34,337	40,380
	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）	1	1	1	0	0	0
		金額（千円）	2,700	4,644	3,457	0	0	0
受託研究＊	分子科学研究所	件数（件）	20	24	25	25	21	25
		金額（千円）	977,162	1,205,634	1,523,539	914,065	563,906	859,124
	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）	4	3	2	1	2	3
		金額（千円）	26,960	23,260	28,660	16,250	14,560	17,810
合計金額（千円）			1,453,688	1,679,278	2,077,715	1,440,084	1,115,246	1,439,393

＊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	1	130,000	0	0	1	130,000
新学術領域研究	1	23,010	1	12,090	2	35,100
挑戦的研究（開拓）	1	18,590	0	0	1	18,590
挑戦的研究（萌芽）	4	11,310	1	3,250	5	14,560
若手研究	13	20,150	4	4,680	17	24,830
学術変革領域研究A	3	21,320	0	0	3	21,320
学術変革領域研究B	1	6,760	0	0	1	6,760
基盤研究（S）	1	36,140	0	0	1	36,140
基盤研究（A）	5	59,800	0	0	5	59,800
基盤研究（B）	11	65,260	1	6,630	12	71,890
基盤研究（C）	5	6,370	1	2,210	6	8,580
研究活動スタート支援	3	4,550	1	1,560	4	6,110
国際共同研究（帰国発展）	1	52,650	0	0	1	52,650
国際共同研究強化（B）	1	5,330	0	0	1	5,300
奨励研究	1	470	0	0	1	470
特別研究員奨励費	2	2,600	0	0	2	2,600
計	54	464,310	9	30,420	63	494,730

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	5,200	1	13,000	2	18,200
新学術領域研究	4	22,360	2	17,095	6	39,455
挑戦的研究（開拓）	1	390	0	0	1	390
挑戦的研究（萌芽）	1	780	0	0	1	780
学術変革領域研究A	1	975	1	2,600	2	3,575
学術変革領域研究B	1	260	0	0	1	260
基盤研究（S）	0	0	2	6,500	2	6,500
基盤研究（A）	2	5,590	1	1,040	3	6,630
基盤研究（B）	5	6,370	2	2,600	7	8,970
基盤研究（C）	2	260	1	260	3	520
計	18	42,185	10	43,095	28	85,280

間接経費を含む。

受託研究　内訳　　（単位：千円）

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	8 /0	123,045
		CREST	1 /1	12,740
	未来社会創造事業	大規模プロジェクト型	0 /1	113,516
		探索加速型	0 /1	2,600
	創発的創造研究推進事業		2 /0	11,700
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	300,557
		光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP	0 /3	131,576
		先端レーザーイノベーション拠点	0 /1	3,900
		元素戦略研究拠点	0 /1	13,000
		マテリアル先端リサーチインフラ（スポーク機関）	0 /1	109,858
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 /2	20,800
	NMR プラットフォーム		0 /1	2,041
国立研究開発法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	6,431
	マイクロチップレーザー適用長尺光ファイバ伝送 LIBS 分析技術に関する研究		1 /0	14,947
国立研究開発法人物質・材料研究機構	科学技術試験研究委託事業	マテリアル先端リサーチインフラ（スポーク機関）	0 /1	8,663
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			14 /14	876,934

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（2022.2）岡崎情報図書館は雑誌 1,521 種（和 291，洋 1,230），単行本 96,825 冊（和 13,309，洋 83,516）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 m^2，鉄筋コンクリート造２階建てで，大型スクリーン及びＡＶ機器等を備えた 200 余名が参加可能な大隅ホール，112 名の中会議室，100 名の小会議室などが設けられている。

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，装置開発室ユニット長，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，2021 年度は COVID-19 感染拡大の影響が長引いているせいか，ほぼ横ばいである。内容は，キラル金属電極，PET 分解酵素，有機 EL 素子，光学素子，ヒドリドイオン導電体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。

2020 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５件，2021 年度は，個人有０件，機構有３件であった（2022 年 3 月 23 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	2021	2016 ～ 2021 計
出願件数	32	67	14	25	14	12	13	14	92
国内	15	37	10	11	11	8	8	7	55
国外	2	30	4	14	3	4	5	7	37
取得件数	8	59	3	13	9	11	13	12	61
国内	4	37	2	8	3	6	3	8	30
国外	3	22	1	5	6	5	10	4	31
総保有件数	15	66	63	75	84	87	97	107	107
国内	10	44	40	48	51	55	55	61	61
国外	5	23	23	27	33	32	42	46	46
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	21,857	54,548

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（IMSIIP）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。

2021 年度は前年からのコロナ禍により，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。実際に他大学（大学院）から分子研（総合研究大学院大学・分子科学２専攻）への進学者の掘り起こしに資する研究所・大学院への体験入学は各研究室での随時訪問受入として実施し，また分子科学・アジア冬の学校も開催中止，15 名の受け入れが決まっていた国際インターンシップ（フランス７名，マレーシア３名，インド２名，タイ２名，台湾１名）も全てがキャンセルとなってしまった。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：所内および複数の所外研究機関に所属する数名の研究者により，特定の課題について行われる研究。最長３年にわたって継続することが可能。

①「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

②「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）。

①一般

②ナノテクノロジープラットフォーム事業（5-6 参照）

③ NMR プラットフォーム事業（5-8 参照）

(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。

①「分子研研究会（一般分）」国内の研究者が集まるもの

②「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

③「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

④「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

⑤「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：大学院生が主体的に企画する分子科学に関連する研究会や勉強会等。

(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)　施設利用

① 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。

②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。

③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。

④計算科学研究センター施設利用：計算科学研究センターに設置されたスーパーコンピュータを利用する研究。

3-1-2　2021 年度の実施状況

(1)　課題研究

課　題　名（通年）	提案代表者
溶液軟Ｘ線吸収分光法による檜山クロスカップリング反応機構の解明	九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所　藤川　茂紀

(2)　協力研究

課　題　名（通年）	提案代表者	
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 (II)	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
UVSOR BL6U の Momentum Microscope の高性能化とスピン計測に対する準備	大阪大学産業科学研究所	菅　　滋正
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
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 (II)	東京理科大学理工学部	中山　泰生
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	関西学院大学理工学部	村上　慧
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
糖アジドの還元にと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
モメンタムマイクロスコープによる高移動度有機半導体の伝導機構解明	筑波大学数理物質系	山田　洋一
超短パルスガンマ線誘起陽電子消滅分光法を用いた原子空孔型欠陥分析法の開発	山形大学理学部	北浦　守
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
赤外自由電子レーザーによるポリアラニン凝集解離過程の計算	群馬大学大学院保健学研究科	中村　和裕
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	柳井　毅
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
イリジウム単結晶薄膜上に化学気相成長したグラフェン膜の評価	青山学院大学理工学部	黄　晋二

課　題　名（前期）	提案代表者	
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
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
電荷再配置を伴う酸化還元挙動を示す異種金属 5 核錯体の電子移動過程の解明	産業技術総合研究所	伊豆　仁
TRP チャネル制御機構解明のための分子シミュレーション研究	産業医科大学医学部	森　誠之

課　題　名（後期）	提案代表者	
脊椎動物の季節適応を制御する分子の生化学的解析	名古屋大学大学院生命農学研究科	吉村　崇
小型集積レーザー技術による高平均出力テラヘルツパラメトリック光源の開発	名古屋大学大学院工学研究科	村手　宏輔
垂直磁気異方性を有する薄膜界面の作製と電子状態の精密計測への応用	東京大学大学院理学系研究科	岡林　潤
蓄積リング自由電子レーザの広帯域化とそれを用いたエネルギー可変準単色ガンマ線源開発	京都大学エネルギー理工学研究所	全　炳俊
ハロゲンドープによるペリレンカチオン形成過程における占有軌道のエネルギー準位シフト解析	東京農工大学大学院工学研究院	遠藤　理
トポロジカル物質におけるスピン偏極局所電子状態の解明	東北大学材料科学高等研究所	佐藤　宇史
安定化レクチンナノブロック超分子複合体の開発と解析	信州大学繊維学部	新井　亮一
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
マイクロチップレーザーを利用した微小液滴中への短寿命活性種の発生と高選択的化学反応	大阪大学大学院工学研究科	焼山　佑美
パルス ESR 法を用いた高 LET 放射線照射で生成するアラニンラジカルの局所的ラジカル分布の評価	東京都立産業技術センター	中川　清子
光制御タンパク質複合体の構造解析	大阪大学大学院理学研究科	石川　春人

(3)　研究会

課　題　名（前期）	提案代表者	
IMS-FHI Symposium “Emerging Techniques of Scanning Probe Microscopy”	分子科学研究所	熊谷　崇
森野ディスカッション	大阪大学大学院理学研究科	宗像　利明

課　題　名（後期）	提案代表者	
アト秒レーザー科学研究施設（ALFA）計画の現状と展望	東京大学大学院理学系研究科	山内　薫
エネルギー科学の最前線：階層横断的な理解に向けて	分子科学研究所	中村　敏和

(4)　若手研究活動支援

課　題　名（前期）	提案代表者	
第 60 回分子科学若手の会夏の学校	学習院大学大学院自然科学研究科	時田　司
キラル物質に特有なスピン輸送現象の探究	東京大学大学院理学系研究科	鈴木　裕太

(6) 施設利用

① UVSOR 施設利用

課　題　名（前期）	提案代表者
相変態に伴う結晶格子変化に及ぼす原子空孔密度の影響	日本原子力研究開発機構物質科学研究センター　諸岡　聡
円偏光ガンマ線を利用した電磁石の磁気ヒステリシス効果の測定	日本原子力研究開発機構原子力基礎工学研究センター　遠藤　駿典
フラット LCS ガンマ線ビームの発生とこれを用いた NRF 反応断面積の測定に関する研究	京都大学エネルギー理工学研究所　大垣　英明
バルク金属中の水素侵入動的挙動解明のための LCS ガンマ線入射－陽電子消滅測定	大阪府立大学大学院工学研究科　堀　史説
ガンマ線誘起陽電子消滅法による金属酸化物中の高温下における酸素欠陥挙動の解明	大阪産業技術研究所　道志　智
光電子円二色性の光エネルギー依存性の測定	広島大学大学院理学研究科　高口　博志
タンデムアンジュレータを用いた光電子波束干渉制御	佐賀県地域産業支援センター九州シンクロトロン光研究センター　金安　達夫
テラヘルツ／赤外分光によるマイクロ波化学反応促進機構の解明	京都大学化学研究所　高谷　光
BL1B の整備	大阪大学大学院生命機能研究科　木村　真一
XANES による MTB 活性 Mo/H-MFI 触媒上の Al 酸点による炭化 Mo 活性種形成効果の検討	埼玉工業大学工学部　有谷　博文
軟Ｘ線吸収分光法による有機太陽電池の高効率化を目指した金属酸化物層の電子状態解析	千葉大学大学院工学研究院　奥平　幸司
太陽フレアＸ線・集光撮像分光観測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
ハイドロキシアパタイトの焼結における異種元素添加の影響	大阪府立大学大学院工学研究科　村田　秀信
高速重イオン照射されたパイロクロア構造 $Gd_2Zr_2O_7$ 中のカチオン局所構造	九州大学大学院工学研究院　吉岡　聰
紫外光電子分光法による有機／金属酸化物ナノ粒子界面の膜構造及び電子状態評価	千葉大学大学院工学研究院　奥平　幸司
一定始状態光電子分光を用いたポリエチレンモデル化合物の NEA 電子構造の解明	千葉大学先進科学センター　石井　久夫
共鳴Ｘ線散乱による液晶性強誘電体における極性ゆらぎ構造の観測	理化学研究所　荒岡　史人
XAS による糖類分子とイオン液体－水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
金表面上における生体分子のＸ線吸収分光	横浜国立大学理工学部　大野　真也
脂質二重膜を構成するリン脂質分子の電子状態と分子配向	豊橋技術科学大学環境・生命工学系　手老　龍吾
共鳴軟Ｘ線散乱法によるソフトマターのメゾスコピック構造の解明	分子科学研究所　岩山　洋士
軟Ｘ線吸収分光法による溶液光励起ダイナミクスの解明	分子科学研究所　長坂　将成
ビームライン整備	分子科学研究所　長坂　将成
触媒反応中間体である有機ケイ素化合物の電子状態解析	分子科学研究所　奥村慎太郎
電気化学軟Ｘ線分光法によるメタン酸化触媒反応活性種の観測	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
軟Ｘ線分光によるマイクロ波による化学反応促進機構の解明	京都大学化学研究所　高谷　光
人工光合成をめざす半導体光触媒の水中XAFS測定:フィージビリティスタディ	神戸大学大学院理学研究科　大西　洋
水・アセトン２成分溶液系に見られる水の電子構造変化	広島大学大学院理学研究科　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
Microscopic Insights on Ice Nucleation of Organic Solutions	University of Gothenburg　KONG, Xiangrui
次世代中性 K 中間子稀崩壊実験に向けたシンチレーター類の単一光子計数法による蛍光寿命測定と素材評価	山形大学学士課程基盤教育機構　田島　靖久
バンド構造と結晶構造の包括的理解による赤色発光シンチレータの開発	東北大学未来科学技術共同研究センター　黒澤　俊介
深紫外発光アルミン酸亜鉛薄膜と基板界面の評価	静岡大学学術院工学領域　小南　裕子
ビームライン整備（自動測定・リモート測定に向けたシステム開発）	分子科学研究所　岩山　洋士
一硫化サマリウム SmS の電子状態・電荷ダイナミクスに対する元素置換効果	名古屋大学大学院工学研究科　横山　泰範
フルオロオレフィンの紫外光誘起分解反応の解明	大阪大学レーザー科学研究所　山ノ井航平
三元金属ハロゲン化物結晶中の Tl^+ センターの緩和励起状態の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科　河相　武利
アポトーシスのクロマチン凝集過程における DNA リン酸結合状態の可視化	東北大学多元物質科学研究所　江島　丈雄
STXM による溶液中での金属デンドライトの結晶成長メカニズムの解明	産業技術総合研究所　三石　雄悟
全固体リチウムイオン電池の界面近傍の元素分布および電子状態解析	産業技術総合研究所　細野　英司

星間有機物の宇宙環境曝露実験による物性変化の調査	東京大学大学院理学系研究科	左近　樹
STXM によるアポトーシスにおける核酸および核内タンパク質の分布動態解析	東海大学工学部	伊藤　敦
STXM を用いたポリマー中の薬品の分散及び化学状態解析	分子科学研究所	大東　琢治
ビームラインおよび STXM の整備	分子科学研究所	大東　琢治
「はやぶさ２」初期分析固体有機物チームによる，小惑星リュウグウ試料中酸不溶性有機物の C-, N-, OXANES 測定にむけた直前リハーサル	広島大学大学院理学研究科	薮田ひかる
Phase2 高知による「はやぶさ２」帰還試料の多機関連携分析	海洋研究開発機構高知コア研究所	伊藤　元雄
Internal and External Mixing States of Salt Particles and Dust over Mars Analogues Sites	University of Gothenburg	KONG, Xiangrui
STXM in Characterizing Lysosomal Storage Materials in Mouse Model and Human Disease Samples	University of Oulu	MINNA, Patanen
Redox Processes in Human Skin: Triggered Drug Release from Nanocarriers	Freie University Berlin	RUEHL, Eckart
In Situ Scanning Transmission X-Ray Microscopy of Cobalt and Reduced Graphene Oxide during Hydrogen Evolution Reaction	Tamkang University	PONG, Way-faung
Comprehensive Understanding of Solid–Solid Interface Ion Transfer Mechanism via $LiFePO_4$ and $LiMn_2O_4$ Primary Particle Investigated by In-Situ Operando STXM	Seoul National University	LIM, Jongwoo
多電子同時計測による多電子放出過程の研究	富山大学教養教育院	彦坂　泰正
反射率磁気円二色性測定でみる磁性体薄膜の立体構造	分子科学研究所	山本　航平
ビームライン整備（軟Ｘ線ラウンドロビンのための, 標準試料の網羅的測定）	分子科学研究所	岩山　洋士
カルコゲナイド系アモルファス薄膜の熱処理効果に関する研究	岐阜大学工学部	林　浩司
ディラック半金属を基軸としたトポロジカル量子相転移の探索	東北大学大学院理学研究科	佐藤　宇史
角度分解光電子分光によるカイラル磁性体およびカゴメ磁性体の研究	東京大学物性研究所	近藤　猛
表面キャリアドープによる新たなモット転移の開拓	東京大学物性研究所	堀尾　眞史
3d 遷移金属合金超薄膜のスピン分解・軌道分解光電子分光	東京大学大学院理学系研究科	岡林　潤
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 のスペクトル強度の温度変化	広島大学放射光科学研究センター	出田真一郎
磁性層状 RE-i-MAX 相化合物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
３次元立体構造シリコン表面からの光電子分光	奈良先端科学技術大学院大学	服部　賢
キャリアドープした価数揺動物質 SmS の三次元角度分解光電子分光	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
層状 misfit 化合物 $(BiSe)_{1+\delta}(NbSe_2)_m$ (m = 1,2,3) の空間分解角度分解光電子分光	岡山大学異分野基礎科学研究所	横谷　尚睦
ARPES Study of Electronic Compressibility in Electron Doped Cuprates	Westlake University	RUIHUA, He
合金を用いた多層膜反射鏡の特性調査	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉川　一朗
彗星大気観測に向けた光学フィルタの性能評価	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉岡　和夫
フェリ磁性遷移金属合金の磁気光学カー効果測定	東京大学物性研究所	松田　巌
水素吸収セルの吸収性能安定性評価	立教大学理学部	田口　真
飛翔体に搭載する紫外線吸収フィルタの性能評価	立教大学理学部	桑原　正輝
アニオンとカチオンの不均一分布を伴う希土類賦活蛍光体単粒子の光誘起赤外吸収顕微分光	山形大学理学部	北浦　守
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 (II)	東京理科大学理工学部	中山　泰生
テラヘルツ／赤外分光によるマイクロ波化学反応促進機構の解明	京都大学化学研究所	高谷　光
強相関半導体の電流誘起局在・非局在転移の電子状態	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	広島大学大学院理学研究科	薮田ひかる
低エネルギー ARPES で探る鉄カルコゲナイドの高温超伝導機構	東北大学大学院理学研究科	佐藤　宇史
角度分解光電子分光による高分子薄膜のギャップ内準位の解明	千葉大学先進科学センター	石井　久夫
高分解角度分解光電子分光によるトポロジカル絶縁体サンドイッチ構造の電子状態測定	東京工業大学理学院	平原　徹
層状化合物上の有機単層膜界面における新奇二次元電子構造の探査	分子科学研究所	解良　聡
BL7U 光電子エンドステーションの整備	分子科学研究所	田中　清尚
高エネルギー分解能 ARPES による三層系銅酸化物高温超伝導体 Bi2223 のスペクトル強度の温度変化	広島大学放射光科学研究センター	出田真一郎
軸配位型フタロシアニン分子系伝導体 $TPP[(FePc)(CN)_2]_2$ 単結晶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鉄系超伝導体 1111 系の incipient バンドの超伝導応答の研究	大阪大学大学院理学研究科	宮坂　茂樹
高速シンチレータ材料におけるエネルギー移動と内殻励起の寄与の定量的解析	東北大学大学院工学研究科	越水　正典
隕石と有機物の紫外反射スペクトル測定	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉川　一朗

真空紫外領域におけるパイロクロア型モリブデン酸化物の反射率測定	東京大学大学院工学系研究科	上田健太郎
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 II	福井大学学術研究院工学系部門	福井　一俊
減衰全反射型紫外分光法による有機半導体／イオン液体界面電子状態研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	田邉　一郎
ガンマ線照射処理により高効率化した深紫外検出器用光導電性材料の開発	大阪大学レーザー科学研究所	清水　俊彦
最小電離損失粒子に対する原子核乾板の感度評価	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
可視域発光観測による真空紫外光の偏光評価	佐賀県地域産業支援センター九州シンクロトロン光研究センター	金安　達夫
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
Ni-L 吸収端 XAS による N- ヘテロサイクリックカルベンを支持配位子にもつニッケル錯体の電子状態解析	大阪大学大学院工学研究科	植竹　裕太
β-SiAlON 蛍光体で観測される発光バンドの固有性・非固有性	山形大学理学部	北浦　　守
テーパー型高感度マイクロチャンネルプレートの検出効率測定	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	的場　史朗
rutile TiO_2(110) 上に担持した Cu ナノ粒子の CO 曝露による電子状態変化	立命館大学グローバル・イノベーション研究機構	光原　　圭
タンデムアンジュレータを用いた原子分子の量子状態制御	佐賀県地域産業支援センター九州シンクロトロン光研究センター	金安　達夫

課　題　名（後期）	提案代表者	
テラヘルツ／赤外分光によるマイクロ波化学反応促進機構の解明	京都大学化学研究所	高谷　　光
XANES による MTB 活性 Mo/H-MFI 触媒上の Al 酸点による炭化 Mo 活性種形成効果の検討	埼玉工業大学工学部	有谷　博文
軟X線吸収分光法による有機太陽電池の高効率化を目指した金属酸化物層の電子状態解析	千葉大学大学院工学研究院	奥平　幸司
太陽フレアX線・集光撮像分光観測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
ハイドロキシアパタイトの焼結における異種元素添加の影響	大阪府立大学大学院工学研究科	村田　秀信
紫外光電子分光法による有機／金属酸化物ナノ粒子界面の膜構造及び電子状態評価	千葉大学大学院工学研究院	奥平　幸司
次世代中性 K 中間子稀崩壊実験に向けたシンチレーター類の単一光子計数法による蛍光寿命測定と素材評価	山形大学学士課程基盤教育機構	田島　靖久
バンド構造と結晶構造の包括的理解による赤色発光シンチレータの開発	東北大学未来科学技術共同研究センター	黒澤　俊介
深紫外発光アルミン酸亜鉛薄膜と基板界面の評価	静岡大学学術院工学領域	小南　裕子
ビームライン整備（自動測定・リモート測定に向けたシステム開発）	分子科学研究所	岩山　洋士
フルオロオレフィンの紫外光誘起分解反応の解明	大阪大学レーザー科学研究所	山ノ井航平
三元金属ハロゲン化物結晶中の Tl^+ センターの緩和励起状態の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相　武利
多電子同時計測による多電子放出過程の研究	富山大学教養教育院	彦坂　泰正
反射率磁気円二色性測定でみる磁性体薄膜の立体構造	分子科学研究所	山本　航平
ビームライン整備（軟X線ラウンドロビンのための, 標準試料の網羅的測定）	分子科学研究所	岩山　洋士
カルコゲナイド系アモルファス薄膜の熱処理効果に関する研究	岐阜大学工学部	林　　浩司
合金を用いた多層膜反射鏡の特性調査	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉川　一朗
彗星大気観測に向けた光学フィルタの性能評価	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉岡　和夫
フェリ磁性遷移金属合金の磁気光学カー効果測定	東京大学物性研究所	松田　　巌
水素吸収セルの吸収性能安定性評価	立教大学理学部	田口　　真
飛翔体に搭載する紫外線吸収フィルタの性能評価	立教大学理学部	桑原　正輝
アニオンとカチオンの不均一分布を伴う希土類賦活蛍光体単粒子の光誘起赤外吸収顕微分光	山形大学理学部	北浦　　守
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 (II)	東京理科大学理工学部	中山　泰生
テラヘルツ／赤外分光によるマイクロ波化学反応促進機構の解明	京都大学化学研究所	高谷　　光
強相関半導体の電流誘起局在・非局在転移の電子状態	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	広島大学大学院理学研究科	薮田ひかる
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 II	福井大学学術研究院工学系部門	福井　一俊
減衰全反射型紫外分光法による有機半導体／イオン液体界面電子状態研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	田邉　一郎
ガンマ線照射処理により高効率化した深紫外検出器用光導電性材料の開発	大阪大学レーザー科学研究所	清水　俊彦

最小電離損失粒子に対する原子核乾板の感度評価	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
直線偏光ガンマ線を用いたピグミー E1 共鳴に関する研究	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	静間　俊行
相変態に伴う結晶格子変化に及ぼす原子空孔密度の影響	日本原子力研究開発機構物質科学研究センター	諸岡　聡
円偏光ガンマ線を利用した電磁石の偏極分解能のエネルギー依存性の測定	日本原子力研究開発機構原子力基礎工学研究センター	遠藤　駿典
ガンマ線誘起陽電子消滅分光法の整備	分子科学研究所	平　義隆
放射光の位相構造計測法の開発	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	高嶋　圭史
フラット LCS ガンマ線ビームの発生とこれを用いた NRF 反応断面積の測定に関する研究	京都大学エネルギー理工学研究所	大垣　英明
陽電子寿命その場計測法を用いた鉄系材料の水素脆化破壊過程での空孔形成・クラスター化に関する研究	京都大学複合原子力科学研究所	藪内　敦
バルク金属中の水素 - 欠陥相互作用の動的挙動解明のための LCS ガンマ線入射－陽電子消滅測定	大阪府立大学大学院工学研究科	堀　史説
ガンマ線誘起陽電子消滅法を用いた異なる形状を有する酸化セリウムの酸素欠陥評価	大阪産業技術研究所	道志　智
単一電子からの放射光の実験研究	広島大学放射光科学研究センター	加藤　政博
直列アンジュレータ放射特性の高速制御	広島大学放射光科学研究センター	加藤　政博
光電子円二色性の光エネルギー依存性の測定	広島大学大学院理学研究科	高口　博志
パイロクロア化合物不規則化の XAFS 構造解析	九州大学大学院工学研究院	吉岡　聰
角度分解光電子分光によるポリエチレンモデル化合物のエキソ電子放出現象の解明	千葉大学先進科学センター	石井　久夫
液相中一重項酸素の生成ダイナミクスの軟Ｘ線吸収分光法による研究	高エネルギー加速器研究機構物資構造科学研究所	足立　純一
液晶性強誘電体における協同的非対称構造の共鳴Ｘ線散乱による捕捉	理化学研究所	荒岡　史人
XAS によるセロビオースとスクロースの加水分解過程の研究	東京大学大学院新領域創成科学研究科	佐々木岳彦
金表面上における生体分子のＸ線吸収分光	横浜国立大学理工学部	大野　真也
脂質二重膜を構成するリン脂質分子の電子状態と分子配向	豊橋技術科学大学環境・生命工学系	手老　龍吾
共鳴軟Ｘ線散乱法における機器校正のための標準物質・標準計測法の開発	分子科学研究所	岩山　洋士
軟Ｘ線吸収分光法による生体試料の局所構造解析	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
電解生成型メタン酸化触媒活性種の軟Ｘ線分光法による直接観測	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およびらせん自発形成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
軟Ｘ線 XAFS による有機マグネシウムの構造研究	京都大学化学研究所	高谷　光
人工光合成をめざす半導体光触媒の水中 XAFS 測定	神戸大学大学院理学研究科	大西　洋
Zr 含有自己発光ヨウ化物の発光特性の調査	埼玉大学大学院理工学研究科	小玉　翔平
プラズマエッチングガスの解離過程の解明 (1)	名古屋大学低温プラズマ科学研究センタ	石川　健治
パイロクロア型酸化物中希土類イオンの存在位置の広がりが真空紫外域遷移スペクトル形状に与える影響の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野　正人
フィラー粒子間バウンドラバー構造における空間配置とその化学結合状態	東北大学多元物質科学研究所	江島　丈雄
レドックスフロー電池における炭素触媒のオペランド電子状態解析	産業技術総合研究所	朝倉　大輔
全固体リチウムイオン電池の活物質／固体電解質界面の劣化解析	産業技術総合研究所	細野　英司
環境制御走査型透過Ｘ線顕微鏡を用いたポリマーの化学状態変化	分子科学研究所	大東　琢治
ビームラインおよび STXM の整備	分子科学研究所	大東　琢治
グラフェン超薄膜を用いた高機能汎用型光学素子の開発	名古屋大学大学院理学研究科	三石　郁之
小惑星リュウグウが黒いのはなぜか？　～「はやぶさ２」初期分析固体有機物チームが STXM で解読する，揮発性物質の形成過程および初期地球への供給機構	広島大学大学院理学研究科	藪田ひかる
Mixing States of Sulfur and Alkali Components in Exhaust Particles from Biomass Thermal Conversion Reactors	University of Gothenburg	KONG, Xiangrui
Redox Processes in Human Skin: Triggered DrugRelease from Nanocarriers	Freie University Berlin	RUEHL, Eckart
In Situ Scanning Transmission X-Ray Microscopy of Cobalt and Reduced Graphene Oxide during Hydrogen Evolution Reaction	Tamkang University	PONG, Way-faung
Unraveling Anion Induced Degradation Mechanisms in Primary Li-Mn Rich Layered Oxide Particle via Ex-Situ STXM	Seoul National University	LIM, Jongwoo
原子分解能・電界電子放出顕微鏡の開発	東京大学物性研究所	柳沢　啓史
易損傷試料用光電子分光設備の設置へむけたビームラインおよびシステム評価	分子科学研究所	解良　聡
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
ディラック半金属を基軸としたトポロジカル量子相転移の探索	東北大学材料科学高等研究所	佐藤　宇史

遷移金属超薄膜量子井戸構造のスピン分解・軌道分解光電子分光	東京大学大学院理学系研究科	岡林　潤
遷移金属インターカレート NbS_2 における磁性ワイル半金属の検証	東京大学物性研究所	堀尾　眞史
角度分解光電子分光によるグラフェン層間化合物の多体効果の研究	東京工業大学理学院	一ノ倉　聖
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
狭ギャップ半導体・半金属における自発的励起子の探索	分子科学研究所	福谷　圭祐
層状 MAX 相化合物 Zr_2SnC および Zr_3SnC_2 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
３次元立体構造シリコン表面からの光電子分光	奈良先端科学技術大学院大学	服部　賢
価数揺動物質における原子吸着による表面価数転移	大阪大学大学院生命機能研究科	中村　拓人
$TiSe_2$ の 3D フェルミ表面の観察と CDW 転移による変調	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
$La(O,F)Bi_{1-x}M_xS_2$ (M = Pb, Sn) における Bi サイト置換効果	岡山大学異分野基礎科学研究所	横谷　尚睦
ARPES による銅酸化物高温超伝導相図の再考	広島大学放射光科学研究センター	出田真一郎
ARPES Study of Electronic Compressibility in Electron Doped Cuprates	Westlake University	RUIHUA, He
テーパー型高感度マイクロチャンネルプレートの光検出効率測定	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	的場　史朗
ミラーホルダー温度安定化による BL5B 出射光エネルギー安定化	京都大学エネルギー理工学研究所	全　炳俊
可視域発光観測による真空紫外光の偏光評価	佐賀県地域産業支援センター九州シンクロトロン光研究センター	金安　達夫
新奇カゴメ超伝導体の低エネルギー高分解能 ARPES	東北大学材料科学高等研究所	佐藤　宇史
角度分解光電子分光による a-IGZO 薄膜のギャップ準位の解明	千葉大学先進科学センター	石井　久夫
トポロジカル磁性体におけるフェルミ準位近傍の微細電子構造	東京大学物性研究所	近藤　猛
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	東京工業大学理学院	平原　徹
層状化合物上の有機単層膜界面における新奇二次元電子構造の探査 II	分子科学研究所	解良　聡
BL7U 光電子エンドステーションの整備	分子科学研究所	田中　清尚
軸配位型フタロシアニン分子系伝導体 $TPP[(MPc)(CN)_2]_2$ (M = Fe, Co) 単結晶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
単元素トポロジカル絶縁体における表面科学的手法による局所 p-n 接合の実現	大阪大学大学院生命機能研究科	中村　拓人
低エネルギー ARPES を用いた $ROBiS_2$ におけるフェルミ面形状の変化	岡山大学異分野基礎科学研究所	横谷　尚睦
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
STXM によるアポトーシスにおける核酸および核内タンパク質の分布動態解析	東海大学工学部	伊藤　敦
Phase2 高知による「はやぶさ２」帰還試料の多機関連携分析	海洋研究開発機構高知コア研究所	伊藤　元雄
光渦放射光の光子計数領域でのヤングの干渉実験	広島大学放射光科学研究センター	加藤　政博
電子ビーム軌道変動のビームライン分光性能への影響	広島大学放射光科学研究センター	加藤　政博
放射光赤外顕微鏡を用いたファイバー型生体材料の構造解析	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設	川崎　平康
紫外線反射率測定による宇宙風化作用の定量評価	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉岡　和夫
有機半導体薄膜の紫外 ATR 分光：偏光方向と ATR 入射角度依存性の解明	大阪大学大学院基礎工学研究科	田邉　一郎
光電子散乱画像観測装置の高度化	富山大学教養教育院	彦坂　泰正
バンド構造と結晶構造の包括的理解による赤色発光シンチレータの開発 II	東北大学未来科学技術共同研究センター	黒澤　俊介

④　計算科学研究センター施設利用

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
d 電子複合系の構造，電子状態，反応過程に関する理論的研究	京都大学触媒・電池元素戦略ユニット	榊　茂好
量子ダイナミクスによる動的物性量の理論的研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	中野　雅由
場の量子論に基づく局所物理量によるスピンダイナミクス解析	京都大学大学院工学研究科	瀬波　大土
金属蛋白質の電子構造制御に関する理論的研究	広島市立大学大学院情報科学研究科	鷹野　優
生体分子の構造と機能に関する理論的研究	広島大学大学院先進理工系科学研究科	赤瀬　大
歯車状両親媒性分子（GSA）の熱力学的安定性及び発光スペクトルに対する置換基効果の理論的研究	横浜市立大学	立川　仁典
複雑分子系におけるテラヘルツ帯から赤外領域におけるスペクトル解析	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永　圭介
量子力学（QM）／分子力学（MM）法と分子動力学計算によるハロ酸脱ハロゲン化酵素の反応機構解析	長浜バイオ大学バイオサイエンス学部	中村　卓
革新的量子科学と大規模シミュレーション科学の創造	量子化学研究協会研究所	中辻　博
色素増感光電極・光触媒等の計算化学的研究	産業技術総合研究所	草間　仁
生体分子複雑系の全原子・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
フラグメント電子状態理論を基とした大規模第一原理分子シミュレーションと電子状態インフォマティクスによる機能材料の熱力学・光物性の迅速設計	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
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と有機デバイスを指向した芳香族化合物の設計	東京大学大学院工学系研究科	野崎　京子
芳香族二量体クラスターのπ電子共鳴状態の赤外分光による構造研究	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
第一原理計算によるフロロカーボンプラズドライエッチングによる酸化膜表面の誘電性質の解明	横浜国立大学大学院工学研究院	Raebiger Hannes
分子動力学及び量子化学計算を用いた生体高分子および機能材料の構造と機能に関する研究	横浜国立大学大学院工学研究院	上田　一義
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
環化反応による炭化環式および複素環式化合物合成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
リン脂質フリップを誘起する膜貫通ペプチドの計算分子設計	北陸大学薬学部	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	東京大学大学院新領域創成科学研究科	岡崎　進
ナノ狭小空間における分子およびイオンの溶媒和と動態の解析	徳島大学大学院社会産業理工学研究部	吉田　健
モデル溶融塩を溶媒としたときの二原子溶質分子の溶媒和を記述する AAOZ 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
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
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
カメレオンモデルによるタンパク質構造転移の自由エネルギーランドスケープ解析	名古屋大学大学院工学研究科	寺田　智樹
生体分子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	岡山大学異分野基礎科学研究所	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	横浜市立大学大学院生命医科学研究科	森次　圭
発光性金属錯体および集合体の電子状態に関する計算化学的アプローチ	北海道大学大学院理学研究院	加藤　昌子
糖鎖結合による生体分子認識に関する理論的研究	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
エネルギー変換材料の計算科学	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	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
高精度な糖鎖力場の構築	東京大学先端科学技術センター	山下　雄史
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
全原子分子動力学シミュレーションで解明するソフトマテリアルの微視的構造	北里大学理学部	渡辺　豪
ナノマテリアル及び生体分子の機能・物性・反応性に関する理論的研究	早稲田大学先進理工学研究科	中井　浩巳
新型コロナウイルス感染阻害の分子機構の解明	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	茨城大学大学院理工学研究科	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
次世代 IT 社会及び次世代低炭素社会の基礎となる半導体／絶縁体界面の第一原理計算による研究	名古屋大学未来材料・システム研究所	白石　賢二
生体超分子の立体構造変化と機能	東京工業大学生命理工学院	北尾　彰朗
第一原理計算手法にもとづくナノ構造および原子層物質の形成と機能に関する研究	三重大学大学院工学研究科	秋山　亨
理論計算による触媒機能の解明	東邦大学薬学部	坂田　健
クラスターイオンの幾何構造，反応性および衝突断面積の計算	東北大学大学院理学研究科	大下慶次郎
蛋白質の機能発現と構造に関する理論的研究	京都府立大学大学院生命環境科学研究科	リントゥルオト正美
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
有機分子における光化学過程の理論的研究	弘前大学大学院理工学研究科	山崎　祥平
原子核の量子効果を考慮した理論計算手法による重水素同位体効果の解析	岐阜大学工学部	宇田川太郎
シグナル伝達を制御する巨大タンパク質複合体の分子動力学シミュレーションによる動的制御機構解明	近畿大学先端技術総合研究所	米澤　康滋

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水表面の自由 OH，水素結合 OH の振動緩和ダイナミクスの理論研究	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数物科学科	村岡　梓
有機分子固体中の金属ナノドットの帯電安定性：第一原理計算による研究	千葉大学大学院理学研究院	中山　隆史
触媒および機能性物質の機構解明と分子デザイン	慶應義塾大学理工学部	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２：イオンサイズ依存性	新潟大学理学部	大鳥　範和
ボウル型共役化合物の物性調査，および金属クラスター触媒の活性評価研究	大阪大学大学院工学研究科	櫻井　英博
ジヨードビアリールを用いた 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
ラジカルカチオン性有機金属分子ワイヤーとスイッチの開発	東京工業大学化学生命科学研究所	田中　裕也
多機能配位子をもつ金属錯体の構造および反応性に関する理論研究	理化学研究所	浅子　壮美
計算分子分光学：分子の構造および反応に関する計算化学	お茶の水女子大学理学部	平野　恒夫
質量分析法による生体分子の気相反応過程に関する研究	産業技術総合研究所	浅川　大樹
金属錯体の酸化還元電位に関するデータベース作成	筑波大学大学院数理物質系	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
タンパク質に結合する人工オリゴアミドのインシリコ設計	東京大学大学院工学系研究科	森本　淳平
CDFT 分子動力学計算による核変換溶融塩ターゲットの電子移動反応性評価	東北大学大学院工学研究科	宍戸　博紀
量子化学計算によるランタノイド／マイナーアクチノイド錯イオンの構造探索と赤外スペクトル計算	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遷移金属錯体に関する理論的研究	北里大学理学部	神谷　昌宏
量子化学計算による光化学系 II における水分解およびキノン還元反応の分子機構解析	名古屋大学大学院理学研究科	野口　巧
薬剤分子放出を志向した有機金属フタロシアニンの光反応開発	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	福田　良一
理論計算ならびに機械学習を利用した新規材料・触媒開発	相模中央化学研究所	花村　仁嗣
有機化学反応の反応メカニズム解明を目指した計算化学的解析	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
炭素・高分子複合材料における低波数ラマンを与える分子間振動モードの解析	北海道大学大学院工学研究院	島田　敏宏
分子動力学シミュレーションを用いた膜タンパク質－膜系の相互作用，機能，ダイナミクス解析	東京大学生物生産工学研究センター	篠田　恵子
曲げ変形に関する液晶安定性の分子動力学による研究	東京農工大学大学院工学研究院	坂本　道昭
シミュレーションに基づく分子モダリティの理解・制御・設計	東京大学大学院工学系研究科	黒田　大祐
DFT 計算によるガス分離膜及び燃料電池に応用する触媒の設計	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
第一原理計算を活用した構造中の歪を利用した高機能熱電変換材料の開発	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
ヒトにおいて高効率な紫外線損傷 DNA 修復を可能とする新たな分子系の創成	大阪大学大学院基礎工学研究科	山元　淳平
Multi-Scale Modeling of Interstellar Radical Species on Water Ice	北海道大学低温科学研究所	W. M. C. Sameera
分極効果を考慮した分子動力学計算による酸化物融体の表面緩和イオン配位構造のシミュレーションおよび構造形成エネルギーの評価	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熱力学状態依存性	九州大学大学院理学研究院	秋山　良
機械学習アプローチによる非対称コマ分子のレーザー誘起３次元整列の制御機構の予測	東北大学大学院理学研究科	大槻　幸義
新規合成反応，新機能の創出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
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
加水分解酵素を用いる速度論的光学分割の機構解明と合成化学的応用	大阪大学大学院薬学研究科	赤井　周司
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
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	星本　陽一
生体・高分子自己集合系の分子シミュレーション	岡山大学異分野基礎科学研究所	篠田　渉
機能性分子集合体の分子動力学研究：1–3 次元ナノチャネルがもつ水の輸送機構解析	兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科	石井　良樹
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２	神戸大学科学技術イノベーション研究科	天能精一郎

生体分子の微視的な水和構造に関する理論的研究	東京工業大学科学技術創成研究院	平田　圭祐
イオン性色素を含む新規π電子系の合成と配列制御	山形大学有機材料システム研究科	山門　陵平
分子動力学シミュレーションによる高分子液晶および異方的集合配向材料の熱伝導特性解析	東京工業大学物質理工学院	古屋　秀峰
気液相境界近傍における音波伝播の分子動力学シミュレーション	東京大学物性研究所	浅野　優太
積分方程式理論によるタンパク質の溶解度；ホフマイスター系列の再構築	九州産業大学理工学部	末松安由美
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
キラルな大環状化合物の励起状態構造の解明	岡山大学大学院自然科学研究科	高石　和人
Importance of T Cell Receptor Flexibility on T Cell Activation	大阪大学免疫学フロンティア研究センター	Floris van Eerden
ReaxFF を用いたトリチウムベータ崩壊の DNA テロメア構造への影響	核融合科学研究所	中村　浩章
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	田中　秀樹
金属酸化物ナノクラスターの精密設計と機能開拓	東京大学大学院工学系研究科	鈴木　康介
有機金属触媒を用いた反応機構に関する理論的研究	東京電機大学工学部	山本　哲也
酸化型ヒドロゲナーゼ活性中心の局所構造と電子状態の理論的決定	筑波大学計算科学研究センター	堀　　優太
新しい治療法の確立を目指した新規触媒の開発	東京大学大学院薬学系研究科	三ツ沼治信
生体分子で起こる化学反応と機能相関構造ダイナミクスの理論的解明	九州大学先導物質化学研究所	森　　俊文
界面活性剤凝集挙動の理論モデリング	岡山大学異分野基礎科学研究所	甲賀研一郎
高分子インフォマティクスのための分子動力学計算による高分子物性データベースの構築	統計数理研究所	林　　慶浩
SH_2 ドメインに対する特異的結合リン酸化ペプチドの開発	医薬基盤・健康・栄養研究所	河原　正浩
光活性化アデニル酸シクラーゼの分子シミュレーションによる機能解析	量子科学技術研究開発機構量子生命科学領域	田口　真彦
分子間電子移動でおこる化学反応メカニズムの分子軌道法による研究	神奈川大学総合理学研究所	田仲　二朗
水の分子間及び分子内振動モードに対する多次元振動分光の量子シミュレーション	京都大学大学院理学研究科	谷村　吉隆
水素結合型強誘電物質の第一原理研究	高エネルギー加速器研究機構	岩野　　薫
金属錯体に関する理論的研究	静岡理工科大学理工学部	関山　秀雄
遷移金属化合物の構造・反応・分子間相互作用に関する理論的研究	お茶の水女子大学基幹研究院自然科学系	鷹野　景子
分子クラスターの構造制御による化学反応の構造依存性の研究	北里大学理学部	水瀬　賢太
薬物と飲食物に含まれる生理活性物質との相互作用解析	福岡大学薬学部	池田　浩人
シッフ塩基金属錯体の電子構造と蛋白質へのドッキング探索	東京理科大学理学部	秋津　貴城
キラル超分子集合体の理論的検討	東京大学大学院工学系研究科	伊藤　喜光
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
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
液相糖類分子の挙動と 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
FixL 二量体の酸素センサー機構	名古屋大学大学院理学研究科	倭　　剛久
クラスター複合体の反応解明に向けて	豊田工業大学クラスター研究室	市橋　正彦
分子シミュレーションによる分子集合体の研究	名古屋文理大学	本多　一彦
アルブミンを用いる光学活性体の合成	明星大学理工学部	松本　一嗣
量子化学計算によるペプチド形成過程の解明	早稲田大学国際教養学部	稲葉　知士
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	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野　克彦
第一原理及び古典分子動力学計算による 2 次元ナノ物質の構造形成プロセスと電子物性の解明	産業技術総合研究所	森下　徹也
光化学反応の制御と応用に関する理論的研究	量子科学技術研究開発機構量子ビーム科学研究部門	黒崎　　譲
振電相互作用に関する理論的研究	京都大学福井謙一記念研究センター	佐藤　　徹
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
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
振動円二色性分光法の超分子キラリティへの応用	愛媛大学大学院理工学研究科	佐藤　久子
発光性金属錯体の励起状態の研究	日本工業大学基幹工学部	大澤　正久
歪んだ多環芳香族化合物の構造と性質	東邦大学理学部	渡邊総一郎
光機能性分子の電子励起状態ダイナミクスおよび構造の研究	室蘭工業大学工学研究科	飯森　俊文
新規な典型元素化合物の構造と反応の研究	学習院大学理学部	狩野　直和
新規なπ共役分子の電子状態	東京工業高等専門学校	井手　智仁
新規機能性π共役分子の合成と物性に関する研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	清水　章弘
高周期 14 族元素を含む化合物の構造物性理論計算	東京都立大学大学院都市環境科学研究科	瀬高　　渉
層状化合物の電子状態の第一原理計算	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
典型元素の特性を活用したπ共役分子の開発	茨城工業高等専門学校	江川　泰暢

ジチアシクロペンテン環を用いた近赤外光吸収材料の設計と固体中での隣接π共役間相互作用の解明	静岡大学学術院工学領域	植田　一正
典型元素の特性を活用した光機能性分子の開発	茨城大学工学部	吾郷　友宏
DFT 計算を用いた反応機構の解明による効率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
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	東京大学大学院工学系研究科	中山　　哲
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
非自明なスピン状態を経由する遷移金属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院	小島　正寛
グルタミド超分子ナノ構造体における機能性官能基の配向構造解析	熊本大学大学院先端科学研究部	桑原　　穣
凝縮系における緩和および反応ダイナミクスの理論研究	分子科学研究所	斉藤　真司
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	計算科学研究センター	江原　正博
タンパク質凝集と凝集阻害剤の分子動力学シミュレーション	生命創成探究センター	奥村　久士
分子動力学計算と量子化学計算による液体の分子間相互作用の研究	分子科学研究所	長坂　将成
計算機および生化学実験によるタンパク質分子デザイン	生命創成探究センター	古賀　信康
生体分子マシンにおけるマルチスケールな機能発現ダイナミクスのシミュレーション	計算科学研究センター	岡崎　圭一
分子シミュレーションによるイオン液体の研究	分子科学研究所	石田　干城
３次元共役構造をもつ分子集合体の創製	分子科学研究所	瀬川　泰知
ヒト微小管とタウの結合状態における微小管の構造安定性および C 末端天然変性領域の分子挙動解析	信州大学農学部	梅澤　公二
４次元 MRI による脳の機能及び構造解析	生理学研究所	福永　雅喜
機械学習を用いた脳機能画像解析	生理学研究所	近添　淳一
生体分子および溶媒の構造機能相関の解明	立命館大学生命科学部	髙橋　卓也
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	佐賀大学理工学部	海野　雅司
反応自動探索法の開発と応用	北海道大学	前田　　理
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
Vibsanin B の oxy-Cope 転位の遷移状態解析	香川大学農学部	柳田　　亮
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
配位重合における Bronsted 酸性中性ホウ素化合物の助触媒作用	広島大学大学院先進理工系科学研究科	田中　　亮
新しい発光性π共役系化合物の合成研究と光物性	北里大学理学部	長谷川真士
量子化学計算と統計力学的アプローチを駆使したポリオキソメタレートの理論的検討	東京大学大学院総合文化研究科	横川　大輔
空間的軌道相互作用に基づくπ共役に関する研究	大阪大学大学院工学研究科	雨夜　　徹
量子化学計算を用いた有機合成反応機構および物性の解明	慶應義塾大学薬学部	東林　修平
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
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
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
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
π共役拡張型有機材料の開発に関する分子計算	東京都立産業技術研究センター	小汲　佳祐
4d または 5d 金属を含む多核金属錯体の電子状態	岐阜大学工学部	海老原昌弘
合金触媒によるカーボンナノチューブの成長メカニズム解明へ向けた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
低分子非晶質有機半導体材料の固体膜中における配座分布に関する計算	山形大学大学院有機材料システム研究科	横山　大輔
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
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
抗体の分子内相互作用ネットワークと機能の連関の解明	分子科学研究所	谷中　冴子
短寿命種や界面化学種の振動スペクトル解析	筑波大学	石橋　孝章
新規機能性有機色素の開発	岐阜大学工学部	船曳　一正
触媒的骨格転位反応の反応機構解析	東北大学大学院理学研究科	中村　　達
新規双極性有機典型元素化合物の創成と P–O 結合に対する元素効果	北里大学理学部	内山　洋介
分子金属錯体および多核クラスターの精密制御と機能の解明	東北大学大学院理学研究科	長田　浩一
大環状多核金属錯体の構造制御と機能化	東京大学大学院理学系研究科	田代　省平
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
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（２）	北里大学理学部	石川　春樹
光・磁気・電気的特性を複合的に示す新規分子性物質の開発	大阪府立大学大学院理学系研究科	酒巻　大輔
アルケニルフルオリド同士のメタセシス反応実現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

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
金属元素を含まない機能性近赤外発光素子の開発	名古屋大学大学院理学研究科	村井　征史
光アップコンバージョンのための配位子保護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
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
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
パラフェニレン骨格とアミド架橋からなるベルト状パイ共役分子の合成	名古屋工業大学大学院工学研究科	高木　幸治
Development of Novel High Functional Asymmetric Catalysts	名古屋工業大学工学部	中村　修一
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
高反応性のジボラン (4)・Al-B 化合物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
典型元素を含む非平面多環芳香族炭化水素の構造と物性	早稲田大学理工学術院	加藤　健太
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	影山　莉沙
還元反応を起点とする多核金属錯体反応場の構築と機能	岡山大学学術研究院自然科学研究学域	黒木　尭
気相クラスターイオンの衝突速度に関する分子動力学的解析	金沢大学理工学域フロンティア工学類	玉舘　知也
有機ケイ素化合物の構造と性質	群馬大学大学院理工学府	久新荘一郎
新規超原子価ヨウ素触媒の開発	横浜国立大学大学院工学研究院	信田　尚毅
金属ナノクラスター中のヒドリドの挙動の解明	広島大学大学院先進理工系科学研究科	水田　勉
天然紫外線防御物質マイコスポリン様アミノ酸の光励起ダイナミクスと溶媒和構造に関する理論的研究	山口東京理科大学薬学部	畠山　允
ラジカルカチオン種のπダイマー形成を利用する導電性物質の開発	東京都立大学理学部	西長　亨
安定ラジカルを発生する平衡系に関する研究	東京工業大学物質理工学院	青木　大輔
量子化学計算によるエネルギー変換触媒の分子機構の解明	山口東京理科大学工学部	太田　雄大
リチウムイオン電池への応用を志向した結晶性多孔質ヘキサアザトリフェニレン誘導体	関西学院大学理学部	田中　大輔
異種金属多核錯体およびその集積体の電子構造の DFT 計算	岐阜大学工学部	植村　一広
有機化合物における置換基効果の微視的機構	鳥取大学工学部	早瀬　修一
機能性開殻分子材料の構造－物性—電子状態相関の解明	分子科学研究所	草本　哲郎
酸化還元活性なルテニウム - トロポロン錯体のキラル光学特性の評価	日本大学文理学部	吉田　純
電子励起イソシン酸フェニル誘導体の分子構造	日本大学工学部	奥山　克彦
Theoretical Studies of Light-Matter Interactions in Molecular Systems	京都大学大学院工学研究科	Nguyen Thanh Phuc
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
金属錯体触媒を用いた溶液中化学反応の理論的研究	大阪大学大学院工学研究科	小杉　健斗
新規生物活性物質の設計・合成・機能評価	九州大学大学院薬学研究院	平井　剛
クラスター・遷移金属錯体の反応機構と電子状態に関する理論研究と，量子コンピューティング技術を活用した古典シミュレーション研究	大阪大学量子情報･量子生命研究センター	吉田悠一郎
配位子保護金属クラスターの励起状態の解明	立教大学理学部	新堀　佳紀
第一原理分子動力学法による二次電池の濃厚電解液の研究	物質・材料研究機構エネルギー・環境材料研究拠点	小泉　健一
C–F 結合の新規活性化法における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
非ベンゼノイド系有機発光体の開発	茨城大学大学院理工学研究科	近藤　健
糖鎖 - タンパク質複合体における分子間相互作用	野口研究所	山田　一作
分子動力学を用いた人工核酸を含む核酸オリゴマーの安定性研究	医薬基盤・健康・栄養研究所	黒田　正孝
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
量子化学計算とインフォマティクスの融合研究	早稲田大学理工学術院	清野　淳司
量子化学計算による抗 COVID-19 薬剤候補に関する理論研究	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
有機典型元素を用いた合成化学，構造化学	広島大学大学院先進理工系科学研究科	吉田　拡人
塩基性陰イオンを含むイオン液体中での遷移金属イオンの溶媒和構造	佐賀大学理工学部	高椋　利幸
超低酸化数アニオン性コバルト錯体の調製を鍵とする不活性結合官能基化法の開発	京都大学大学院理学研究科	齊藤　颯
内包フラーレンおよびその誘導体の理論計算による研究	東北大学大学院理学研究科	岡田　洋史
ヘテロラジカルからなる新奇フォトクロミック分子の創製と機能探索	立命館大学生命科学部	小林　洋一
π電子系配位子を鍵とする開殻性典型元素錯体の開発	大阪大学大学院工学研究科	兒玉　拓也
キラル分子結晶の樹状成長における分子的メカニズム解明	筑波大学数理物質系	山岸　洋
理論計算による酸化物固定化キラル Tb 錯体の表面構造解明	名古屋大学大学院理学研究科	邨次　智
高圧溶液内で生起する化学反応機構と溶媒和構造の計算化学的解明	長崎大学大学院工学研究科	重光　保博
ペプチド型人工抗体の開発研究	中部大学応用生物学部	山本　敦

先端的コヒーレント振動分光による機能性複雑分子の超高速構造ダイナミクスの観測と解明	分子科学研究所	倉持　光
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
ブチルアミノ基で架橋した [3.3](3,9) ジカルバゾロファンの合成	大阪教育大学教育学部	種田　将嗣
有機電解反応の反応機構解析	岡山大学大学院自然科学研究科	光藤　耕一
蛋白質による DNA 加水分解における溶媒の役割	九州工業大学大学院情報工学研究院	入佐　正幸
溶媒極性と温度に応答するタンパク質疎水ポケットの動的構造変化の解明	東京理科大学先進工学部	梅澤　雅和
Electronic Trapping Sites and Polaron Formation in TiO_2 Nanostructures	東京工業大学理学院	Gergely Juhasz
反応自動探索法によるヘテロ元素を活用した新反応の創出と新材料の開発	北海道大学化学反応創成拠点	長田　裕也
拡張アンサンブル法を用いた糖鎖クラスタの構造ダイナミクス解析	医薬基盤・健康・栄養研究所	李　秀栄

（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	
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	北海道大学大学院理学研究院	武次　徹也
ナノ・バイオ分子における X 線誘起解離動力学の実時間イメージング理論	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	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
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	名古屋大学未来材料・システム研究所	押山　淳

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	第３期								
		年度	2016	2017	2018	2019	2020	2021			
								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	1	4
	(2) 協力研究 *1		82	73	45	37	51	20	27	47	166
		（ナノプラット）	75	56	77	61	48	30	36	66	179
		（NMR 事業）*2						2	1	3	6
研究会	(3) 研究会		7	10	10	7	4	2	2	4	767
	(4) 若手研究活動支援		1	2	1	2	1	2	0	2	108
	(5) 岡崎コンファレンス		3	1	1	2	0	0	0	0	0
	所長招へい *3		81	100	110	101	10	0	0	0	0
	UVSOR 研究会 *3		1	1	1	1	1	1	2	3	205
施設利用	(6) ① UVSOR		142	160	213	186	104	101	110	211	1,046
		（ナノプラット）	38	43	2	4	2	1	2	3	11
	(6) ②機器センター	（ナノプラット）	196	162	153	153	139	69	78	147	454
	(6) ③装置開発室		2	2	3	3	1	0	0	0	0
		（ナノプラット）		0	7	9	3	5	3	8	38
	(6) ④計算科学研究センター		221	224	248	268	269	278	0	278	1,192

*1 UVSOR 利用を含む（1999 年度後期より UVSOR 協力研究は，協力研究に一本化された）。
*2 NMR プラットフォーム事業による協力研究は 2021 年度から開始。
*3 公募以外の研究会。
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, (6) ④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】
IMS-FHI Symposium “Emerging Techniques of Scanning Probe Microscopy”
2021 年 7 月 12 日（月）～ 13 日（火）（オンライン）

(Day 1)

15:55(JST)	Takashi Kumagai “Opening remarks”
16:00-16:40(JST)	Borja Cirera (Fritz Haber Institute) “Characterization of Nanocarbon Materials Using STM/AFM/TERS”
16:40-17:20(JST)	Taketoshi Minato (Institute for Molecular Science) “Electrode/Electrolyte Interface Analyzed by Scanning Probe Microscopy”
17:20-18:00(JST)	Tomoko Shimizu (Keio University, Japan) “How to Bridge the ‘Materials Gap’ in High Resolution AFM/STM?”
18:00-18:30(JST)	Leonard Gura (Fritz Haber Institute) “High Speed STM: Implementation and Application of Spiral Scan Geometries”

(Day 2)

16:00-16:40(JST)	Akitoshi Shiotari (Fritz Haber Institute) “Control of Single-Molecule Reactions by High Spatial Resolution AFM”
16:40-17:20(JST)	Chi Chen (Research Center for Applied Sciences, Academia Sinica, Taiwan) “Near-Field Optics: From the Viewpoint of Scanning Probe Microscopy”
17:20-18:00(JST)	Jun Nishida (Institute for Molecular Science) “Ultrafast Nano-Imaging of Polaron Dynamics and Coupling in a Lead Halide Perovskite”

【分子研研究会】
第８回森野ディスカッション
2021 年 8 月 31 日（火）（オンライン）

１．2021 年度研究助成金贈呈式　　14 時 20 分～ 14 時 55 分

受賞者講演 A	羽田 真毅 准教授（筑波大学数理物質系） 「超高速時間分解電子線回折法を用いた凝縮系分子の構造ダイナミクス」
受賞者講演 B	奥野 将成 准教授（東京大学大学院総合文化研究科） 「新規非線形振動分光法の開発と凝縮相・界面の分子構造研究への応用」

２．森野ディスカッション　　15 時 10 分～ 17 時 25 分

講演 A	雲林院 宏 教授（北海道大学電子科学研究所） 「単一細胞エンドスコピー～生きた細胞内部を診て操作する新技術～」
講演 B	水谷 泰久 教授（大阪大学大学院理学研究科） 「機能を生み出すタンパク質構造の稠密性」

【分子研研究会】
エネルギー科学の最前線：階層横断的な理解に向けて
2022 年 2 月 28 日（月）～ 3 月 1 日（火）（オンライン）

2 月 28 日（月）

13:15 ～ 13:20	川合眞紀　分子研所長挨拶
13:20 ～ 13:30	岡本裕巳　分子研総主幹挨拶＆事務連絡
13:30 ～ 14:00	大谷義近（東大物性研） 「機能的スピン変換現象」
14:00 ～ 14:30	平等拓範（分子研） 「マイクロ固体フォトニクスによるスマートエネルギー変換」
15:00 ～ 15:30	宮坂 等（東北大金研） 「多孔性錯体格子材料と物性科学」
15:30 ～ 16:00	中村優男（理研創発物性科学研究センター） 「量子位相に駆動される低散逸で高速応答のシフト電流光電変換」

16:00 〜 16:30　若宮淳志（京大化研）
「材料化学で挑むペロブスカイト太陽電池の高性能化と社会実装」
16:30 〜 16:40　初日コメント

3 月 1 日（火）
13:30 〜 14:00　伊澤誠一郎（分子研）
「有機半導体界面を利用した光アップコンバージョン」
1:00 〜 14:30　塚崎 敦（東北大金研）
「トポロジカル物質群の薄膜素子活用に向けて」
14:30 〜 15:00　佐藤弘志（理研創発物性科学研究センター）
「刺激に応答する多孔性結晶」

15:30 〜 16:00　福島鉄也（東大物性研）
「スーパーコンピュータ「富岳」を用いた磁性材料の探索」
16:00 〜 16:30　島川祐一（京大化研）
「新規遷移金属酸化物の電荷転移と熱制御応用」
16:30 〜 16:40　まとめ

【学協会連携分子研研究会（連携先：日本学術会議化学委員会)】
アト秒レーザー科学研究施設（ALFA）計画の現状と展望
2022 年 3 月 8 日（火）（オンライン）

13:00　「ご挨拶」
川合　眞紀（日本学術会議連携会員，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所長）
13:05　「ご挨拶」
石川　哲也（国立研究開発法人理化学研究所放射光科学研究センター長）
13:10　「ALFA 計画について」
山内　薫（日本学術会議連携会員，東京大学大学院理学系研究科化学専攻教授）
13:30　「ALFA ビームライン A，B，C について」
岩崎　純史（東京大学大学院理学系研究科超高速強光子場科学研究センター教授）
13:50　「ALFA ビームライン D について」
吉田　光宏（大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構准教授）
14:10　「XUV 域自由電子レーザーについて」
矢橋　牧名（国立研究開発法人理化学研究所放射光科学研究センターグループディレクター）
14:30　「XUV 域自由電子レーザーによるアト秒パルスの発生」
田中　隆次（国立研究開発法人理化学研究所放射光科学研究センターグループディレクター）

『話題提供』（様々な研究分野から）
15:00　山口　誠哉（大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構教授）
15:15　緑川　克美（国立研究開発法人理化学研究所光量子工学研究センター長）
15:30　板谷　治郎（東京大学物性研究所極限コヒーレント光科学研究センター准教授）
15:45　佐野　雄二（（株）LAcubed 代表取締役研究開発部長，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プログラムマネージャー）
16:00　岡本　裕巳（日本学術会議第三部会員，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教授）
16:15　山内　美穂（日本学術会議連携会員，九州大学先導物質化学研究所教授）
16:30　飯野　亮太（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教授）
16:45　森　初果（日本学術会議第三部会員，東京大学物性研究所長）

17:10　「全体討議――ALFA への期待，要望」
17:50　「おわりに」
栗原　和枝（日本学術会議連携会員，東北大学未来科学技術共同研究センター教授）
18:00　閉会

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
マックス - プランク協会フリッツ - ハーバー研究所（物理化学領域）	ドイツ	分子科学研究所とマックス - プランク協会フリッツ - ハーバー研究所（物理化学領域）との協定	学術交流及び共同研究等の実施	2021. 5.10	2024. 5. 9
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	分子科学及び物質物理学の学術連携及び共同研究等の実施	2021. 5.10	2024. 5. 9
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
中央研究院原子與分子科学研究所	台湾	分子科学研究所と中央研究院原子與分子科学研究所との間の分子科学における協力に関する覚書	共同研究（物質関連分子科学，原子，分子との光科学，理論と計算の分子科学）	2020. 1.12	2023. 1.11
国立陽明交通大学	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ール校	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ー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	2021	計
外国人研究職員（客員）		0	2	0	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	0	4
日本学術振興会外国人特別研究員		0	0	0	0	0	0	0
国際協力研究員	長期	36	29	27	21	7	2	122
	短期	44	63	52	39	0	0	198
研究会参加者（オンライン参加者含）		50	9	34	39	61	122	315
招へい研究員等		35	27	34	36	2	0	134
合　計		166	131	148	136	70	124	775

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	2021	計
フランス	23	19	24	20	0	0	86
ドイツ	27	20	20	40	1	0	108
イギリス	2	5	1	2	0	1	11
スウェーデン	9	5	0	5	0	0	19
フィンランド	5	8	6	5	1	0	25
アメリカ	15	12	12	5	0	0	44
中国	11	25	9	15	2	0	62
韓国	20	14	21	27	1	0	83
台湾	27	17	25	29	2	0	100
タイ	17	11	26	16	5	2	77
インド	3	6	6	2	0	0	17
マレーシア	0	3	6	3	1	0	13
その他 *	20	25	24	21	0	1	91
合　計	179	170	180	190	13	4	736

* 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ところとなり，大学共同利用機関として行う公募型の「岡崎コンファレンス」は，予算的には新しく認定されるようになった COE 各機関がそれぞれ行う独自企画の中規模の国際シンポジウムの予算に切り替わった。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 年以降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，2020–2021 年度には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や産学連携研究集会が開催されており，分子研研究会の新たな可能性を切り拓きつつある。2022 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」を始めとする分子研研究会の有効な実施方法を試行しつつ新たな活性化を目指したい。

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 2023 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

（2022 年 3 月 31 日現在）

中期計画区分	第１期以前	第２期	第３期							計
年度	1977 ～ 2009	2010 ～ 2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2016 ～ 2021 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						1	1	7
東京大学	40	5		1	3	8	6	3	21	66
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	10	60	218
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						1	1	39

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	5	24	72
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	2	2
岡山理科大学	1	0								1
海外機関	4	28	1	2	2	3	1		9	41
計	684	151	17	16	27	24	27	21	132	967

3-3-2　総合研究大学院大学二専攻

総合研究大学院大学は，1988年10月1日に発足した。分子科学研究所は，同大学院大学に参加し，構造分子科学専攻及び機能分子科学専攻を受け持ち，1991年3月には6名の第一回博士課程後期修了者を誕生させた。なお，所属研究科は2004年4月より数物科学研究科から物理科学研究科に再編された。

その専攻の概要は次のとおりである。

構造分子科学専攻

詳細な構造解析から導かれる分子および分子集合体の実像から物質の静的・動的性質を明らかにすることを目的として教育・研究を一体的に行う。従来の分光学的および理論的な種々の構造解析法に加え，新しい動的構造の検出法や解析法を用いる総合的構造分子科学の教育・研究指導を積極的に推進する。

機能分子科学専攻

物質の持つ多種多様な機能に関して，主として原子・分子のレベルでその発現機構を明らかにし，さらに分子及び分子集合体の新しい機能の設計，創製を行うことを目的として教育・研究を一体的に行う。新規な機能測定法や理論的解析法の開発を含む機能分子科学の教育・研究指導を積極的に推進する。

大学開設以来の分子科学２専攻の入学者数，学位取得状況等及び各年度における入学者の出身大学の分布等を以下に示す。

担当教員と在籍学生数　単位：人　　（2021 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	7		7	
	助　教	14		20	
	計	28		35	
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〉
	2021	1	1	2(1)	1
	2020	2	5(2)	2(1)	2(1)
	2019	0	2	3(1)	2(2)
	2018	4	0	2	2(2)
	2017	1	0	1	1
	2016	0	0	1(1)	1(1)
	2015	0	1	0	0
	計	8	9(2)	11(4)	9(6)

（　）は留学生数で内数。
フランス１名，ドイツ１名，エルサルバドル１名，中国３名，韓国１名，タイ２名，インド３名，二専攻合計で 12 名。

入学と学位取得の状況　単位：人　　（2022 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	2021	2016 ～ 2021 計	
入学者数	構造分子科学	５年一貫	6	15	5	4	9	0	2	1	21	42
		博士後期	143	20	1	1	1	3	5	1	12	175
	機能分子科学	５年一貫	5	10	5	5	4	4	3	2	23	38
		博士後期	114	18	3	3	2	2	3	1	14	146
	計		268	63	14	13	16	9	13	5	70	401
学位取得者数	構造分子科学	課程博士	112	20	4	6	3	2	4	3	22	154
		論文博士	12	0	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	4	16	122
		論文博士	14	3	0	0	1	0	0	0	1	18
	計		225	42	8	8	4	5	7	7	39	306

外国人留学生数（国別入学者数）　単位：人　　（2022 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
年度	1989 ～ 2009	2010 ～ 2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2016 ～ 2021 計	
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
エルサルバドル								0, 1	0, 1	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	0, 1	4, 15	97

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　　（2022年3月31日現在）

専攻	構造分子科学				機能分子科学				総計
中期計画区分	第１期以前	第２期	第３期	計	第１期以前	第２期	第３期	計	
年度	1989～2009	2010～2015	2016～2021		1989～2009	2010～2015	2016～2021		
北海道大学	2		3(3)	5(3)	2			2	7
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		1(1)	4(1)	7
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)	6(5)	11(8)	5	2	4(3)	11(3)	22
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	2(1)	19(1)	36
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)			2(1)	2(1)	6

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)	33(21)	170(39)	81(1)	28(10)	37(23)	146(34)	316

（ ）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）。

修了生の進路　単位：人　　（2021 年 12 月現在）

		2010 ～ 2020 年度修了生の修了直後の進路状況			1991 ～ 2020 年度修了生の現在の状況		
専攻		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	24	19	43
	准教授	1	0	1	17	13	30
	講　師	0	0	0	4	2	6
	助　教	0	0	0	16	10	26
	研究職	26	15	41	−	−	−
	小計	27	15	42	−	−	−
進学				0	−	−	−
民間企業（研究職含む）		2	8	10	−	−	−
その他		8	5	13	−	−	−
合計		37	28	65	−	−	−

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

2021 年６月５日（土）に分子研オープンキャンパスを開催した。新型コロナウイルス感染症対策のため，昨年度と同様に Zoom を用いたオンライン形式での実施となった。当日の参加人数は昨年度の 21 人から微増して 29 名となり，その内訳は学部生 22 名，大学院生４名，高専生１名，社会人２名，キャンセル 11 名であった。本イベントは 10 時から開始し，川合所長による分子研の紹介，担当教員による総研大・入試の説明後に，各研究室の概要紹介と体験入学の制度説明を行った。午後からは４つの Zoom セッションを設けて参加者と教員の 30 分間の意見交換の場を設けた。参加申込み時の希望研究室が必ずしも当日の参加セッションと一致しなかったという昨年度の経験に基づき，今年度は，参加者が午前中の研究室紹介を聞いた上で意見交換のセッションを選択できるような形式にした。アンケートの結果からは，参加者の大半から大学院進学や分子研に関する有益な情報が得られ満足したとの回答が得られた一方で，もう少し教員と個別に話す時間が欲しかったとの指摘もあった。各研究室のより詳細な情報を知りたいという参加者にオープンキャンパス後に体験入学や研究室見学を促すという目的で体験入学の制度説明を組み合わせたが，主旨が

十分に伝わっていなかった可能性がある。また，全体的に気軽に参加できるオンライン形式は好評であったが，同時にキャンセルが 11 名出たことも受け止めなければならない事実であり，来年度以降は何らかの改善が必要であろう。なお，オープンキャンパスの参加者のうち９名（学部生７名，大学院生２名。）は，その後見学や体験入学で来所した。

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。本年度も昨年度と同様，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 34 名の学生（学部学生 24 名，大学院生 10 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５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７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	訪問先	受入期間
1	広島大学	大学院生	杉本 G	4 月 15 日～ 17 日 8 月 4 日～ 7 日
2	早稲田大学	大学院生	杉本 G	7 月 8 日～ 10 日
3	名城大学	大学院生	瀬川 G	6 月 9 日
4	山梨大学	大学院生	瀬川 G	7 月 2 日
5	九州大学	学部生	飯野 G	6 月 29 日～ 7 月 1 日
6	名古屋大学	学部生	岡崎 G	8 月 2 日
7	近畿大学	大学院生	奥村 G	6 月 30 日～ 7 月 1 日
8	京都大学	学部生	杉本 G	8 月 4 日～ 6 日
9	大阪工業大学	学部生	小林 G	7 月 14 日～ 15 日
10	慶應義塾大学	学部生	古賀 G	7 月 29 日～ 30 日
11	北里大学	学部生	椴山 G	オンライン参加
12	名古屋大学	学部生	瀬川 G	8 月 5 日
13	名古屋大学	学部生	瀬川 G	8 月 3 日
14	名古屋大学	学部生	瀬川 G	8 月 5 日
15	岐阜大学	学部生	小林 G	7 月 26 日～ 29 日
16	名古屋大学	学部生	瀬川 G	8 月 4 日

17	名古屋大学	学部生	瀬川 G	8 月 4 日
18	名古屋工業大学	大学院生	瀬川 G	11 月 5 日
19	名古屋市立大学	学部生	加藤 G	11 月 30 日
20	名古屋市立大学	学部生	加藤 G	11 月 30 日
21	京都大学	大学院生	瀬川 G	11 月 4 日
22	名古屋大学	大学院生	瀬川 G	11 月 30 日
23	名古屋大学	大学院生	瀬川 G	11 月 30 日
24	名古屋大学	大学院生	瀬川 G	11 月 30 日
25	名古屋大学	学部生	瀬川 G	11 月 30 日
26	名古屋大学	学部生	瀬川 G	11 月 30 日
27	京都大学	学部生	杉本 G	3 月 23 日～ 25 日
28	九州大学	学部生	杉本 G	3 月 23 日～ 26 日
29	京都大学	学部生	杉本 G	3 月 23 日～ 25 日
30	近畿大学	学部生	大森 G	2 月 20 日～ 25 日
31	近畿大学	学部生	大森 G	2 月 20 日～ 25 日
32	名城大学	学部生	草本・瀬川・椴山 G	3 月 8 日～ 11 日
33	名城大学	学部生	草本・瀬川・椴山 G	3 月 8 日～ 11 日
34	名古屋市立大学	学部生	瀬川 G	3 月 22 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，昨年度に引き続き 2021 年度も総研大アジア冬の学校は中止を決定した。

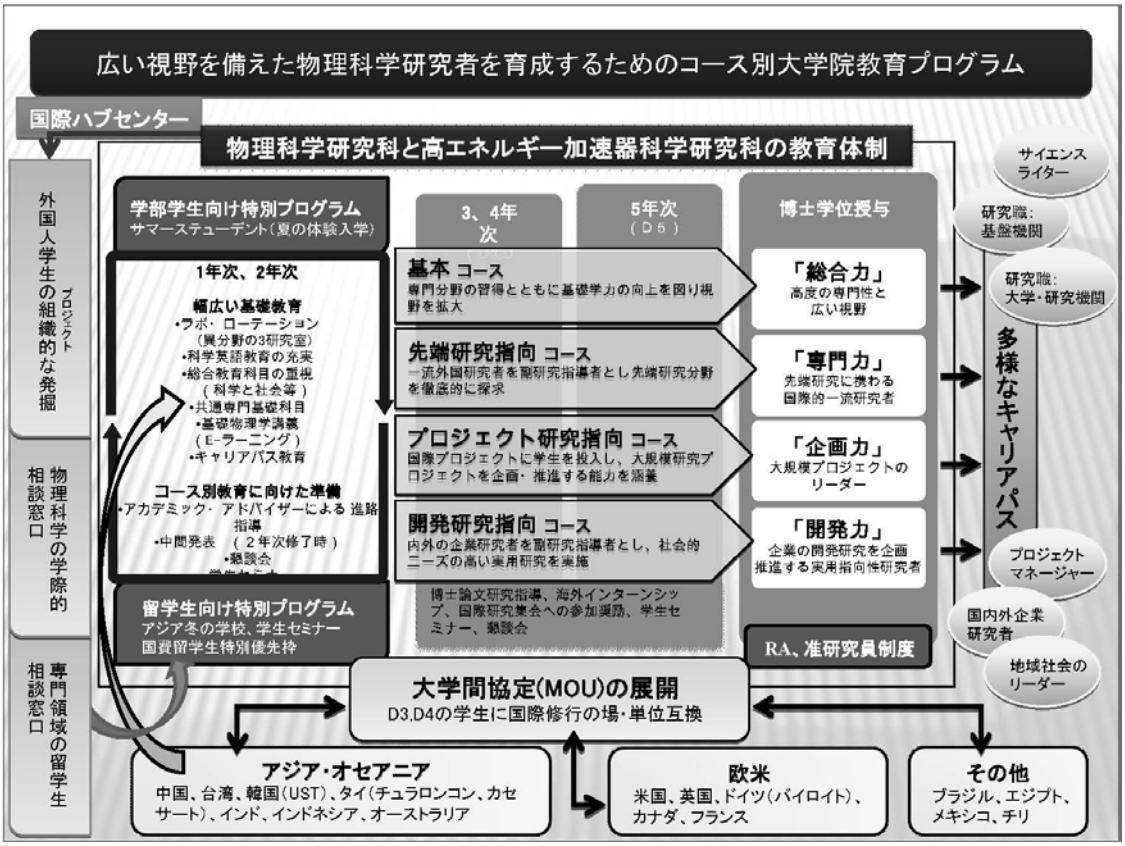
3-3-6　広い視野を備えた物理科学研究者を育成するためのコース別教育プログラム

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。物理科学コース別教育プログラムは 2022 年３月末をもって新規募集を終了した。2022 年度入学者は 2022 年度開講のコース別プログラム科目の履修は可能だが，コース選択・修了はできない。



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，Zoom（Web 会議システム）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分子細胞生物学 II，③バイオインフォマティクス演習，④発生生物学 IV，⑤生体分子シミュレーション入門（中止），⑥基礎生体分子科学，⑦構造生体分子科学，⑧統合進化学）が実施された。昨年度に引き続きコロナ禍においての実施となり，講義方法（講義室及び Zoom の併用／ Zoom のみ）を検討しなければならない状況が幾度となくあったが，先生方の入念な準備により実施することができた。来年度も厳しい状況が予想されるが，今年度の経験を活かし臨機応変に対応していきたい。

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 955 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。

2021 年度は昨年に引き続き, (i) 領域推薦枠の導入, (ii) ４月から３月までの通年開催, の２つの開催要領を検討した。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。これらの開催方針は次年度にも引き継がれることとなった。

昨年度に，コロナ禍における新しいコロキウムの開催方法として，オンラインによる開催，あるいはオンラインとオンサイトを併用したハイブリッド開催が整備された。今年度も，時々刻々と状況が変化する新型コロナウイルス感染症の感染拡大状況に応じて，コロキウムをオンライン開催あるいはオンライン・オンサイトのハイブリッド開催とするよう柔軟に対応した。また，新型コロナウイルス感染症が流行する以前は，研究者間の交流を目的とするワイン会や懇親会が例年行われてきたが，本年度はこれらを開催せず，代わりにコロキウム後に意見交換会を設けるなどの代替案を採用した。

本年度に開催されたコロキウムはすべてオンライン上で所外公開された。所外公開に伴い参加者は大幅に増え，100 人以上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，所外公開のオンラインのコロキウムでは，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。これは本コロキウムに限らずオンラインで開催される講演会・研究会全般にあてはまる検討事項であろう。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「ブレーンストーミング」の場となることを期待したい。

以下に，2021 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
950	2021．5．6 （オンライン）	Organic Light Emitting Diode—A review	Prof. Ching Wan Tang (The Hong Kong University of Science and Technology)	67
951	2021．5.20 （オンライン）	Singlet Fission for Photovoltaics: Search for New Materials	Prof. Josef Michl (University of Colorado Boulder)	75
952	2021．7．9 （オンライン）	キラリティが結ぶ弾性・磁気・電気・光の物理 Chirality-Induced Dynamics of Phonon, Spin and Photon	岸根順一郎 （放送大学教授）	101

953	2021. 8.17 （オンライン）	ファンデルワールス積層による原子層の自在配列と量子輸送現象 Quantum Transport in van der Waals Junctions of Atomic Layers	町田友樹 （東京大学生産技術研究所教授）	46
954	2021.12. 9 （オンライン・オンサイト併用）	非平面π共役分子がもたらす特異な光物性 Non-Planar π-Conjugated Molecules Featuring Unique Photophysical Properties	宮島大吾 （理化学研究所創発物性科学研究センターユニットリーダー）	49
955	2022. 1.18 （オンライン）	特異な電子構造と安定性をあわせもつ新奇π電子系の創成 Exploring Novel π-Electron Systems toward Unusual Yet Stable Functional Materials	深澤愛子 （京都大学高等研究院物質－細胞統合システム拠点（iCeMS）教授）	94

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，主に技術職員が担当・支援しているものである。特に法人となってからは，全国の分子科学コミュニティの連帯を強めるために研究支援部門を強化してきた。法人化後に新設された部門には，「安全衛生管理室」，「 広報室 」，「史料編纂室」があり，引き続き活発な活動を行っている。また，2013 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。2021 年度より，技術課は技術推進部に改組されたが，引き続き技術推進部と戦略室が連携して研究支援業務を進めている。

技術推進部は，研究支援組織の中核になる大きな集団を構成している。分子科学研究所では，法人化後，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。2007 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，2013 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。更に，2021 年度よりスタッフ制による所長直属の技術者組織，技術推進部に改組し，各附属施設をユニット化した上で，マネジメント役のユニット長を配置している。これにより，各個人のもつ高い専門的技術をより効率的に発揮し，研究者が研究に専念できるように技術支援する体制を構築している（「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，2002 年３月に廃止した研究施設の「化学試料室」の機能も有している。担当職員は安全衛生を維持するのに必要な資格を全て取得し任務にあたっている。

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

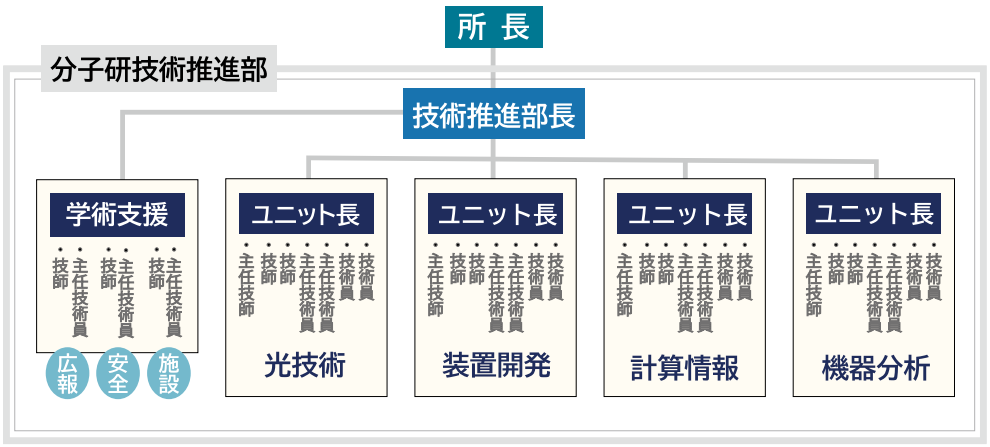
史料編纂室は，法人化後に設置された支援組織としては一番新しい。法人化後まもなく迎えた創立 30 周年記念行事の中で分子研設立の経緯を残すことの重要性が認識された。このため，総研大葉山高等研究センターを中心に発足した「大学共同利用機関の歴史」研究プロジェクトに参加する形で史料編纂室を発足させた。分子研設立の経緯と共に，過去に所員が行ってきた研究，分子科学コミュニティの形成過程などの歴史を整理・記録してきた。広報資料や研究活動等評価資料（ IR 資料）という観点で，研究力強化戦略室の中に位置付けることとなる。

4-1　技術推進部

分子科学研究所技術課は，2021 年 4 月 1 日より，技術推進部に改組された。1975 年の研究所設立と同時に，技術分野での研究支援を目的として，文部省教室系技官が全国で初めて組織化された分子研技術課であるが，時代と共に，高い専門性を持つ職員が増えてきたことに伴い，事務組織と同じライン制での組織運営が馴染まなくなっていた。そこで，スタッフ制による所長直属の技術者組織に改組し，各附属施設をユニット化した上で，マネジメント役のユニット長を配置することにより，各個人のもつ高い専門的技術をより効率的に発揮し，研究者が研究しやすい環境を整備すると共に，研究に専念できるように技術支援する体制を構築し，再出発することとなった。

技術推進部は，以前の技術課と同様に所長直属の組織であり，技術職員を統轄する技術推進部長の下，光技術ユニット，装置開発ユニット，計算情報ユニット，機器分析ユニットの 4 つのユニット，及び学術支援担当職員により構成される。構成員は 2021 年 4 月 1 日現在で 34 名である。技術職員は，主に研究施設に配属され，それぞれの持つ高い専門技術で研究教育職員と協力し，先端的かつ独創的な研究を技術面から支え，大学共同利用機関の使命を果たすために努力している。各施設に配属された技術職員の対応する技術分野は広範囲にわたっている。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推進部の業務として行っている。安全衛生管理では，研究所の性質から毒物・劇物・危険物など薬品知識や低温寒剤等高圧ガスの知識，放射線管理，その他技術的な側面から毎週職場巡視を行い，分子研の安全衛生管理に寄与している。

技術職員が組織化されたのは，1975 年に創設された分子科学研究所技術課が日本で最初である。技術職員が組織化され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推進部が協力して最良の研究環境を研究者に提供することを目標に業務を推進している。しかし，事務組織とは違って分子研の技術職員は流動性に乏しいので，組織と個人の活性化を図るために積極的に次のような事項を推進している。



4-1-1　技術研究会

施設系技術職員が他の大学，研究所の技術職員と技術的交流を行うことにより，技術職員相互の技術向上に繋がることを期待し，1975 年度，分子研技術課が他の大学，研究所の技術職員を招き，第 1 回技術研究会を開催した。内容は日常業務の中で生じたいろいろな技術的問題や失敗，仕事の成果を発表し，互いに意見交換を行うものである。その後，毎年分子研でこの研究会を開催してきたが，参加機関が全国的規模に広がり，参加人員も 300 人を超えるようになった。そこで，1982 年度より同じ大学共同利用機関の高エネルギー物理学研究所（現，高エネルギー加速器研究機構），名古屋大学プラズマ研究所（現，核融合科学研究所）で持ち回り開催を始めた。その後さらに全国の大学及び研究機関に所属する技官（現，技術職員）に呼びかけ新たな技術分野として機器分析技術研究会も発足させた。現在ではさらに多くの分科会で構成された総合技術研究会が大学で開催され，さらなる発展を遂げつつある。表 1 に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（中期計画第 3 期）

年度	開催機関	開催日	分科会	備考
2016	名古屋大学	2016 年 9 月 8–9 日	機器・分析	
	東京大学	2017 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	
2017	長岡科学技術大学	2017 年 8 月 29–30 日	機器・分析	
	分子科学研究所	2017 年 2 月 8–9 日	電子回路，リソグラフィー，機械工作	
	核融合科学研究所	2018 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	
2018	秋田大学	2018 年 9 月 6–7 日	機器・分析	
	分子科学研究所	2019 年 2 月 7–8 日	エレクトロニクス技術，機械工作	
	九州大学	2019 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	
2019	分子科学研究所	2019 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）	2020 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	2020 年 3 月 18–20 日	実験・実習，地域貢献，安全衛生	開催中止
2020	奈良先端科学技術大学院大学	2020 年 9 月 10–11 日	機器・分析	オンライン開催
	東北大学	2021 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
2021	山口大学	2021 年 9 月 9–10 日	機器・分析，危機管理	オンライン開催
	東京工業大学	2022 年 3 月 3–4 日	加工・開発，電子回路・測定・実験，分析・評価・観測，バイオ・バイオ科学，情報・ネットワーク，安全・放射線保守管理，建築・土木，社会貢献・組織運営，実験・実習技術，環境整備・コロナウイルス対策	オンライン開催
	核融合科学研究所	2022 年 3 月 10–11 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	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」を行ってきた。技術推進部に改組後も，様々な技術分野のトピックを中心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 年度は新型コロナウイルス感染症の感染拡大の影響により実施できなかった。

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（中期計画第３期）

年　度	受　入　人　数（延）
2016	7
2017	20
2018	14
2019	13
2020	0
2021	4

表３　2021 年度技術研修受入状況（2021.4.1 ～ 2022.3.31）

氏　　名	所　　属	受入期間	備　　考
千葉　　寿	岩手大学	2021.12.21 ～ 12.23	WAN-WAN 利用者シンポジウム
藤崎　聡美	岩手大学	2021.12.21 ～ 12.23	WAN-WAN 利用者シンポジウム
須恵　耕二	熊本大学	2021.12.22 ～ 12.23	WAN-WAN 利用者シンポジウム
玉木　俊明	東北大学	2021.12.22 ～ 12.23	WAN-WAN 利用者シンポジウム

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ベテラン層に見られ，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。これらを踏まえスタッフ制に改組した。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

高度で専門的な技術支援業務を通じて，分子科学研究の発展や研究成果の創出に顕著な貢献を行った技術職員に対して，その功績を讃えるために，日本化学会を始めとする学協会等が表彰制度を創設している。分子研創設以来の技術職員の受賞は，日本化学会化学技術有功賞 14 件，低温工学協会功労賞 1 件，日本放射光学会功労報償 1 件，ナノテクノロジープラットフォーム技術支援貢献賞 1 件である。今年度の受賞は以下の通りである。

中村永研　　文部科学大臣表彰研究支援賞（2021）

豊田朋範　　日本化学会化学技術有功賞（2022）

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。雇い入れ時の安全衛生教育は年度初旬に定例として行うほか，講習テキストと講習会 DVD を用意し，年度途中の採用者に対しても，随時安全衛生教育が可能となるよう配慮している。

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

今年度，新型コロナウイルス感染症対策として，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。入構者の防疫管理手順については，これまでの運用状況や他機関からの情報も踏まえ，技術推進部，共同利用推進室，および所内受付チームらと協力してアップデートを続けた。防災対策として，各部門の「災害時･点呼リスト」の更新を，年一回の実施から，所属メンバーの変更時に実施するよう改めた。レーザー管理部門では，高出力レーザー開発研究に対応した「管理区域／装置設置届」の様式を新たに策定した。放射線管理部門では，他機関の放射線業務従事者申請手続きのペーパーレス化に対応して，所内手続きを改訂した。安全衛生教育に関しては，安全ガイド（英語版）の更新を行った。

4-3　研究力強化戦略室

研究大学強化促進事業（5-11 に記載）においては，各研究機関にリサーチ・アドミニストレーター（University Research Administrator, URA）を置き，研究活動の企画・マネジメント，研究力の強化，また研究成果の活用，そのための広報等を担当することが求められている。自然科学研究機構では，機構本部に研究力強化推進本部を置くほか，各機関に研究力強化戦略室が設置され，それぞれに URA 等のマネジメント人材，支援スタッフを置く形となっている。分子科学研究所の研究力強化戦略室では，室長を研究総主幹が務め，現場の運営を担うスタッフとして，2021 年度現在で URA 職員４名，助手１名，特任及び特命専門員３名，事務及び技術支援員５名の体制で運用している。また室員として，室長の他に所内教授４名と技術推進部長を指名し，随時，研究力を維持・強化に向けた方策に関する議論をする会議の場を設けている。この会議には，所長，及び必要に応じて URA 職員も同席する。また研究力強化戦略室の内部組織として共同利用推進室を設置し機器センターチームリーダーが中心となり，所外の共同利用の推進のための諸業務を担うこととなった。それには，「大学連携研究設備ネットワーク」や「ナノテクノロジープラットフォーム」「マテリアル先端リサーチインフラ」等の事業に関わる業務も一部含まれる。

研究力強化戦略室が現在になっている主な業務は，評価・IR，企画・概算要求，支援スタッフ等の人事管理，広報・アウトリーチ，国内及び国際共同研究推進，研究者支援，施設管理等があげられる。これらの業務を，必要に応じて各部門や施設，事務センター，機構本部等と連携して進め，研究者と事務組織の間を繋ぐ役割を担っている。

4-4　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。

4-4-1　一般公開

2021 年 10 月 23 日（土）に分子科学研究所一般公開 2021「見えない世界見放題 !!　分子研プライムで生配信」をオンラインで開催した。一般公開では初のオンライン開催である。岡崎コンファレンスセンター中会議室にスタジオを設営し，10 時から 16 時の６時間，ノンストップでライブ配信を行った。事前に作成した動画を流し，YouTube とニコニコ動画のチャットの質問に答えていく形式とした。その他，講演会，若手研究者座談会，プチサイエンスショーをライブで行った。リハーサルを入念に行ったため，ほぼトラブルなく時間通りに進み，無事配信を終えることが出来た。また，２チャンネルで配信したため，総視聴者数は約 30,000 人と多くの方にご視聴いただき，全国へアピールすることが出来たのではないかと思う。その後，分子研公式 YouTube にアーカイブ動画をアップしているが，SNS 等での告知効果もあり再生回数が一般公開当日の 2 倍（2021 年 12 月 1 日時点）となっている。



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
第 16 回	2021.10.23	YouTube 再生回数；2618 回 ニコニコ動画来場者数；26,964 人 （10/23 一般公開終了時点）

4-4-2　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。COVID-19感染拡大後はオンライン開催に切り替えたが，開催時間，広報活動をターゲットに合わせ変更した結果，全国の社会人，大学生，高校生に参加いただけるようになり，参加人数もリアル開催よりオンライン開催の方が多い結果となった。

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
128	2021. 6.11	宇宙における分子の進化と氷微粒子の役割	渡部　直樹 （北海道大学教授）	約 430 名 （累計 1,257 名）
129*	2021.10.23	宇宙の中のミクロ，ミクロの中の宇宙～はやぶさ２帰還試料のナノ有機物分析～	大東　琢治 （分子科学研究所助教）	約 240 名
130	2021.12. 3	人工光合成への挑戦～空気や水から価値ある分子を～	正岡　重行 （大阪大学大学院栄誉教授）	約 340 名 （累計 1,174 名）
131	2022. 1.28	ウエルビーイング経営の本質～データが明かす新たな人・組織・社会と幸せ～	矢野　和男 （(株) 日立製作所フェロー，(株) ハピネスプラネット代表取締役 CEO）	約 250 名 （累計 1,148 名）

＊一般公開と同時開催

4-4-3　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 33 回開催されている。

本シンポジウムに対する分子科学研究所の関与は次の通りである。第１回において，「21 世紀はイメージング・サイエンスの時代」と銘打ったパネルディスカッション中で，岡本裕巳教授が「ナノの世界まで光で見えてしまう近接場光学」というタイトルで講演を行った。第２回目は，講演会全体の企画を分子科学研究所が中心となって行った（詳細は「分子研リポート 2006」を参照)。第７回では，加藤晃一教授が自らの体験に基づいて「研究の醍醐味とは何か」を伝える講演を行った。第 11 回では，大峯巖所長（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。2021 年度の第 33 回では，古賀信康准教授が「創って理解する　生命現象をつかさどる分子「タンパク質」」と題したオンライン講演を行った。

また，講演会の開催と併せて，展示コーナーを設けてビデオやパネルを用いた説明を行ってきている。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。

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
32	2021. 8.21	生命科学とプラズマ工学がつくる未来	オンライン開催
33	2022. 3.13	宇宙と，分子と，私たち	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ーによるシミュレーション CG（第３回～第９回），および各種の大型分子模型（第４回～第 10 回），研究者トーク（第６回～第９回）等を通じて研究活動に関する詳しい説明を行った。2021 年度も前年に引き続きオンライン開催となり，分子科学研究所は研究所紹介 CM 動画を配信し，またシンポジウム特設サイト内に分子研紹介ページを掲載した。

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
12	2021.10.24	宇宙・物質・エネルギー・生命・情報・人間文化 フロントの知を楽しもう	オンライン開催

4-4-4 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，研究力強化戦略室が中心となってその対応にあたっている。2010 年５月に展示室を開設し，個人の見学受け入れを開始した。年間およそ 300 名が来訪している。2021 年度は少人数で強い希望があり，感染状況が落ち着いていることを条件として受け入れた。

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 東国大学付属女子高等学校（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） 浜松南高等高校　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
2021	3	65	大阪府立富田林高等学校（オンライン），岡崎市立三島小学校，岡崎市立北中学校（職場訪問）	0	65

4-4-5　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。

(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

4-5　理科教育への協力

分子科学研究所は，愛知県や岡崎市という地域性を重視して，小学校から高等学校までの様々なレベルで理科教育への協力を行ってきている。岡崎市内の高等学校には，文部科学省に応募して採択されたスーパーサイエンスハイスクール（以下 SSH と略す）研究指定校，愛知県教育委員会より指定を受けた愛知スーパーハイスクール研究校や，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。

4-5-1　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。

4-5-2　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	椴山　儀恵　准教授	－
2017. 7. 7	椴山　儀恵　准教授	キラル分子の建築家を目指して
2018. 7. 6	椴山　儀恵　准教授	キラル分子の建築家を目指して

2019. 7. 5	椴山　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	椴山　儀恵　准教授	－
2021. 7. 2	加藤　晃一　教　授	第３の生命鎖＝糖鎖の話
2021.12. 6	古池　美彦　助　教	わたしの仕事　科学研究と進路の悩み（進路講演会）
2021.12.17	Sylvain de Léséleuc 助教	Catching Single Atoms to Explore the Quantum World（Science English）
2022. 1.21	杉本　敏樹　准教授	分子研授業：高校の勉強の先に何があるのか？

4-5-3　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 13 回（2021 年 12 月 24 日）は YouTube を利用してオンライン開催された。YouTube にアップされた発表動画に対して，各研究所 1 名ずつの講師が，コメント欄による指導・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
13	2021.12.24	オンライン開催	567

4-5-4　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
131	2021. 7.28	エネルギー問題と太陽電池	平本　昌宏　教　授

4-5-5　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
2021.11.12	縁の下の力持ち : 低温――低温の世界と不思議に触れてみよう――	豊田　朋範　技　師 原田　美幸　技　師 片柳　英樹　助　手	新香山中学校	33
2021.12.17	超伝導って何？　最先端研究施設から出張実験	松井　文彦　教　授 片柳　英樹　助　手	甲山中学校	33
2022. 1.13	超伝導って何？　最先端研究施設から出張実験	松井　文彦　教　授 片柳　英樹　助　手 浅田　瑞枝　技術員	福岡中学校	149
2022. 1.21	レーザーと「単位」を味方につけよう――ちょっと手ごわい？　けど，仲間になろう――	片柳　英樹　助　手 上田　　正　主任技術員	竜南中学校	130

4-5-6　職場体験学習

岡崎市内及び近隣の中学校及び高等学校の要請により，職職場体験学習として中・高生の受け入れに協力している。2018 年度より，研究グループによる受け入れを開始した。2021 年度も COVID19 感染拡大の影響により実施されなかった。

4-5-7　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。2021 年は岡崎市総合学習センターでのオンサイト開催となった。分子科学研究所からは，分子研一般公開についてご案内する無人ブースを出展し，作品展ご来場の方々にご覧いただいた。

(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。2021 年度は，作品展前日に開催された選考会により，小学生６名，中学生４名の計 10 名

の受賞を決定した。新型コロナウイルス感染症の感染拡大防止の観点から分子科学研究所の一般公開がオンライン開催となったため，一般公開日の表彰は行わず，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。2021 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。

4-6　情報発信

2021 年 4 月～ 2022 年 3 月は，日本語プレスリリース 22 件，英語プレスリリース 14 件，新聞報道 66 件，その他報道２件であった。

研究成果プレスリリース（共同発表を含む）　（2021 年度）

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
2021. 4.14	ヘム濃度センサータンパク質の作動機序を原子レベルで解明～病原菌が毒を回避する生存戦略～	Communications Biology	生命･錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	兵庫県立大学 理化学研究所 東京大学	2101
2021. 4.21	細胞のタンパク質品質管理機構に関する新たな知見～ジスルフィド結合の形成・開裂に関わる酵素の新たな二量体形成モチーフの発見と機能制御機構の解明～	Structure, USA	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	東北大学 関西学院大学 徳島大学 韓国基礎科学支援研究院	2102
2021. 5. 7	原子点接触の形成による巨大なラマン応答の発見	Nano Letters	メゾスコピック計測研究センター 広帯域相関計測解析研究部門	フリッツ-ハーバー研究所	2103*
2021. 6. 3	H^- イオンの低温高速伝導を実現	Science Advances	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門	京都大学 大阪大学 ファインセラミックスセンター 高エネルギー加速器研究機構	2104
2021. 6.17	大型放射光施設 SPring-8 での「はやぶさ 2」サンプルカプセル内の粒子の Phase2 キュレーション高知チームによる分析開始について	－	極端紫外光研究施設	海洋研究開発機構 立命館大学 高輝度光科学研究センター 国立極地研究所 他	2105
2021. 6.24	主鎖構造「歪み」を考慮したタンパク質構造の人工設計	Nature Communications	生命創成探究センター 生命分子創成研究グループ／ 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	ワシントン大学 Nexomics Biosciences, Inc. レンセラー工科大学	2106*
2021. 7. 1	プラスチック分解酵素の熱安定性と活性を向上させ，熱安定性向上の構造的基盤と活性向上の機能を解明	ACS Catalysis	生命･錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門， 生命創成探究センター 生命分子創成研究グループ／ 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	静岡大学	2107*
2021. 7. 2	単一分子の精密ナノ分光 ―観察しているナノ物質の性質を正確に評価する手法の確立―	Science	理論・計算分子科学研究領 理論分子科学第一研究部門	理化学研究所 大阪府立大学 北海道大学	2108
2021. 7.14	超小型レーザーを使用した最先端のレーザーピーニングを「Society5.0 科学博」へ出展	Metals	社会連携研究部門	大阪大学 (株) ユニタック (株) LAcubed	2109*
2021. 8. 3	新型コロナウイルスの遺伝子を複製するタンパク質にレムデシビル，アビガンが取り込まれる過程を解明	Biophysical Jornal	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		2110
2021.11. 4	“地上最強生物” クマムシの乾燥耐性の仕組みの解明に挑む―水分消失に伴って細胞の中のタンパク質が集まってファイバーをつくることを発見	Scientific Reports	生命創成探究センター 生命分子動秩序創発研究グループ／ 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 生理学研究所 名古屋大学	2111

2021.11.18	120 年の歴史を塗り替える：ペースト状グリニャール試薬の合成に成功～有機溶媒の使用量を劇的に低減する新しい物質生産プロセスの構築へ	Nature Communications	特別研究部門	北海道大学	2112
2021.11.19	目に見えない近赤外光を高効率に可視光に変換する新技術を発明	Nature Photonics	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門		2113*
2021.12.24	秩序と乱れが共存した高性能な液晶性有機半導体を開発―電子回折により液晶が凍結した分子配列構造を確認―	Chemistry of Materials	生命･錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門	東京大学 理化学研究所 東北大学	2114
2022. 1. 7	世界最小電圧の乾電池１本で発光する有機 EL を開発	Advanced Optical Materials	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門	富山大学	2115*
2022. 1.20	アジアで初めて米国化学会「歴史的化学論文大賞（Citation for Chemical Breakthrough Awards）」を受賞	－	分子科学研究所	名古屋大学 京都大学 高砂香料工業(株)	2116
2022. 1.14	ヒドリド超イオン導電体の発見	Nature Materials	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門	東京工業大学 高エネルギー加速器研究機構 ヘルムホルツ研究所 フランス原子力・代替エネルギー庁　他	2117*
2022. 1.18	“酵素でペットボトルをリサイクル” PET 分解酵素の産業応用に向けた共同研究を開始～環境負荷の低いリサイクルを促進する技術～	－	生命･錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門, 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	キリンホールディングス(株) 静岡大学	2118
2022. 2.17	～オープンイノベーション型ライフサイエンス研究のロールモデルづくり～ 東京大学藤田誠卓越教授ら新研究拠点「FS CREATION」を「三井リンクラボ柏の葉１」に開設	－	特別研究部門	東京大学 三井不動産（株） （株）島津製作所 日本電子（株） 他	2119
2022. 3.10	巨大タンパク質複合体による概日リズム制御―小角散乱と計算科学の統合アプローチ―	Communications Biology	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／ 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 名古屋市立大学 量子科学技術研究開発機構 ラウエ・ランジュバン研究所 他	2120
2022. 3.25	抗原は抗体の構造変化を介して免疫機能を制御する―抗体が免疫機能を誘導するメカニズムの解明に貢献―	mAbs	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／ 生命･錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	大阪大学	2121
2022. 3.31	単一分子光電流計測法の開発―単一分子で生じる光電エネルギー変換の観測に成功―	Nature	理論・計算分子科学研究領 理論分子科学第二研究部門	理化学研究所	2122

* 分子科学研究所主体

研究成果英語プレスリリース（共同発表を含む）　（2021 年度）

EurekAlert! 公開日	タイトル	日本語版 整理番号
2021. 5. 7	Discovery of Huge Raman Scattering at Atomic Point Contact	2103
2021. 6. 2	Bringing Order to Hydrogen Energy Devices	2104
2021. 6.24	Researchers Solve a Puzzle to Design Larger Proteins	2106
2021. 7. 1*	Returned Asteroid Samples Imaged at Ultra-High-Resolution by the Phase 2 Curation “Team Kochi” at SPring-8: One of the World's Most Powerful Synchrotron Radiation Facilities	–

2021. 7. 7	Engineered Protein Inspired by Nature May Help Plastic Plague	2107
2021. 7.31	“Bucket brigade” Using Lysine Residues in RNA-Dependent RNA Polymerase of SARS-CoV-2	2110
2021.11. 1	Gather before Dry Up! Tardigrade Protein Self-Assembles into Fibrous Condensates under Desiccation Condition	2111
2021.11.18	120-Year-Old Reaction Turned on Its Head with Environment-Friendly, Paste-Based Method	2112
2021.11.18	Efficient Photon Upconversion at an Organic Semiconductor Interface	2113
2021.12.24*	A Novel “Frozen Liquid Crystal” Material Is Synthesized and Characterized by Electron Crystallography and Shows the Potential for a Flexible, Printable Organic Semiconductor	2114
2022. 1. 6	Organic Light Emitting Diodes Operated by 1.5 V Battery	2115
2022. 1.18*	Joint Research Begins on PET-degrading Enzymes for Sustainable Recycling	2118
2022. 1.26	First Hydride Superionic Conductor Developed, Implications for Sustainable Energy	2117
2021. 2.17*	= Creating a Role Model for Open Innovation-Type Life Science Research = New Research Base FS CREATION Opened by The University of Tokyo Distinguished Professor Makoto Fujita and Others at MITSUI LINK-Lab KASHIWANOHA 1	2119

*EurekAlert! 未公開のためホームページ公開日

新聞報道　（2021 年度）

報道日	記事内容	新聞名	該当研究部門
2021. 5. 4	“分子の仕事人”新たな一歩	日刊工業	特別研究部門
2021. 6. 1	ビール苦み　ウマく制御　キリン，成分 13 種類特定	日刊工業	特別研究部門
2021. 6. 4	原子点接触の形成で巨大ラマン応答得る 分子研など「常識覆す新分光原理」	科学	メゾスコピック計測研究センター 広帯域相関計測解析研究部門
2021. 7.23	プラスチック分解酵素　熱安定性と活性を向上	科学	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門， 生命創成探究センター 生命分子創成研究グループ
2021. 8. 3	分子の「鋳型」で分析容易に	日本経済	特別研究部門
2021. 9. 1	はやぶさ２が採取　岩石試料分析開始	中日	極端紫外光研究施設
2021. 9. 3	東大・藤田教授，開発に「近道」	日経産業	特別研究部門
2021. 9. 3	基礎研究は必ず役に立つ	日経産業	特別研究部門
2021. 9. 5	リュウグウの有機物は？	東海愛知	極端紫外光研究施設
2021. 9. 8	分子研一般公開オンライン実施	東海愛知	分子科学研究所
2021. 9.28	世界をリードする卓越研究者　結晶スポンジ法分子構造解析	日刊工業	特別研究部門
2021. 9.28	ノーベル賞　今年は誰に	朝日	特別研究部門
2021.10. 3	２年ぶり日本人受賞なるか	日本経済	特別研究部門
2021.10. 3	コロナワクチン基盤技術に注目	読売	特別研究部門
2021. 10. 4	ノーベル賞　きょうから発表　中部に有力候補	中日	特別研究部門
2021.10. 7	化学賞基礎研究に光	読売	所長

2021.10.13	一般公開通じ分子研知ろう　23 日オンラインで	中日	分子科学研究所
2021.10.26	長嶋茂雄氏ら 9 人に文化勲章　文化功労者	日経産業	所長
2021.10.26	文化功労者	中日	所長
2021.10.27	文化功労者	中日	所長
2021.10.27	文化功労者　触媒の機構解明に貢献	中日	所長
2021.10.27	文化功労者	読売	所長
2021.10.27	文化功労者	日本経済	所長
2021.10.27	文化功労者	日刊工業	所長
2021.11. 2	紫綬褒章	朝日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2021.11. 2	紫綬褒章　秋の褒章県内 43 人	読売	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2021.11. 2	紫綬褒章　秋の褒章 808 人 22 団体	読売	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2021.11. 2	紫綬褒章	中日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2021.11. 2	紫綬褒章	日本経済	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2021.11. 2	紫綬褒章	日刊工業	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2021.11. 2	紫綬褒章	毎日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2021.11. 5	紫綬褒章	科学	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2021.11. 8	文化功労者顕彰　青柳元文化庁長官ら栄誉	文教ニュース	所長
2021.11. 8	秋の褒章　東京五輪。パラ金メダリストら 104 名受章	文教ニュース	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2021.11. 8	とらのもん往来	文教ニュース	所長
2021.11.19	近赤外光 → 黄色い可視光に　分子研有機半導体膜　界面で変換	日刊工業	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門
2021.11.25	ナノテク基盤　高水準の研究支える	日刊工業	分子科学研究所
2021.12. 1	分子研所長に渡辺さん内定	中日	新所長
2021.12.14	学士院新会員に矢野氏ら	中日	所長
2021.12.14	学士院新会員　矢野氏ら 5 人	毎日	所長
2021.12.14	学士院の新会員　中西さんら 5 人	朝日	所長
2021.12.14	学士院新会員　川合さんら 5 人	読売	所長
2021.12.17	新所長に渡辺氏	東海愛知	新所長
2021.12.17	学士院新会員　川合眞紀氏ら 5 人	科学	所長
2021.12.23	誰も思いつかない発明を	日刊工業	特別研究部門
2022. 1.11	有機 EL，電池 1 本で光る　分子研・富山大　ディスプレー省エネ化	日刊工業	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門

2022. 1.13	経営に「幸せ」の視点　講座を通じて考えて	中日	分子科学研究所
2022. 1.19	超イオン導電体ヒドリド拡散　分子研	日刊工業	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門
2022. 1.19	富山大など，電池１本で有機 EL 発光	日経産業	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門
2022. 1.20	酵素でペットボトル再生　キリン・静岡大など共同研究	日刊工業	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門， 生命創成探究センター 生命分子創成研究グループ
2022. 1.21	ノーベル賞２氏　歴史的化学論文大賞　野依・故　福井氏	日刊工業	分子科学研究所
2022. 1.21	歴史的化学論文大賞に野依・福井両氏	毎日	分子科学研究所
2022. 1.21	ノーベル野依さんら論文が「歴史的大賞」	中日	分子科学研究所
2022. 1.25	経営にデータ活用　28 日分子研がオンライン講座	東海愛知	分子科学研究所
2022. 1.28	「世界最小電圧」乾電池１本で発光　分子研と富山大　有機 EL 開発	科学	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門
2022. 2. 2	野依氏論文に米化学会大賞	日経産業	分子科学研究所
2022. 2.11	紫綬褒章記念講演	中日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2022. 2.17	「熊」みたいな虫？クマムシって？	毎日	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
2022. 2.18	東大･三井不　オープンイノベ拠点開設　千葉･柏市民間研究施設　産学官で新産業創出	日刊工業	特別研究部門
2022. 2.18	東大・藤田誠卓越教授　オープンイノベ拠点開設　分子構造解析で初	日刊工業	特別研究部門
2022. 2.25	あの人に迫る　量子技術の進歩　未来変えられる	中日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2022. 2.28	大森賢治教授・大型インタヴュー「あの人に迫る」･「量子技術の進歩，未来変えられる」	東京	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2022. 3. 3	膨大な問題　量子なら一瞬で答え　分子研・大森賢治教授インタビュー上	中日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2022. 3. 4	同じことをやりたくない　分子研・大森賢治教授インタビュー中	中日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2022. 3. 5	量子の世界　もろ刃の剣　分子研・大森賢治教授インタビュー下	中日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2022. 3.16	財団賞 14 件，奨励金 18 件　永井科技財団　研究助成決まる	日刊工業	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門

その他　（2021 年度）

発行日等	記事等内容	掲載誌等名	該当研究部門
2022. 3. 1	からだの中がゲルになる !?　クマムシだけが持つタンパク質の役割	Someone, 2022. 春号 , Vol. 58. リバネス出版（株式会社リバネス）	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
2022. 3. 3	次世代の産学連携拠点「三井リンクラボ柏の葉」を訪問しました！	Chem-Station（ケムステ）	特別研究部門

5．各種事業

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

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

（1）『先端的な研究を推進する拠点事業』の UVSOR 共同利用事業（放射光分子科学），エクストリームフォトニクス連携事業（レーザー分子科学）に関連するものとして，光創成ネットワーク研究拠点プログラム（分子科学研究所は分担）を 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。この事業は 2021 年度で終了し，後継事業として文科省「マテリアル先端リサーチインフラ」が 2021 年度から開始することとなり，分子科学研究所はそのスポーク機関として参画する。2022 年度からこの事業が本格稼働することになる。前者の大学連携研究設備ネットワーク事業については，当初の３つの目的，全国的設備相互利用，設備復活再生，最先端設備重点配置のうち，第２期中期計画期間では，最初のものだけが生き残り実施されることになったが，2015 年度には 2016 年度以降（第３期中期計画期間）の事業の方向性を見直した。一方，後者については，共同利用設備の安定的な運営を勘案し，旧分子スケールナノ

サイエンスセンターの共同利用設備をすべて機器センターに集約し，予算面では「ナノテクノロジープラットフォーム」事業予算（外部資金）を財源とし，運営費交付金一般経費も用いて運用している。

（3）『研究者の国際ネットワーク構築に関する事業』としては，個人ベースの萌芽的な取り組みと組織ベースの国際共同研究拠点の形成がある。従来からの外国人顧問制度，客員外国人制度，招へい外国人制度，国際研究集会（岡崎コンファレンスなど）を実施すると同時に，第１期中期計画期間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 5-11 を参照のこと。

5-1　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到なものに焦点を当て，新分野としての萌芽を探索し，展開を図る」ことを目的として，活動を行う。

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

このような体制を構築した上で，新たな分野融合的発想に基づく光技術の適用法や新技術開発につながる先駆的・挑戦的な萌芽研究を開拓・推進する「共同研究」，およびそれらを探索する「研究会」のプロジェクト提案を広く機構内外から公募し，教授会議での審査を経て，採択課題を推進することとなった。2021 年度は，10 件の共同研究を採択し（うち５件が機構外からの応募），研究活動を支援している。また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。2021 年度は，日本学術会議と分子科学研究所で共同主催で開催された「アト秒レーザー科学研究施設（ALFA）計画の現状と展望」に共催として加わる形とした。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。

5-2　シミュレーションによる「自然科学における階層と全体」に関する新たな学術分野の開拓（自然科学研究機構）

自然界の事象はミクロからマクロまでの多数の階層で構成され，それぞれの階層に固有の運動法則に支配されている。さらに全体としては階層間で相互作用しながら時間発展し，その結果全体として大変複雑な様相を示す。本プロジェクトでは国立天文台，核融合科学研究所，分子科学研究所が連携して，自然科学における階層性，構造形成等の階層横断現象の解明を目指すとともに，関連研究機関との連携を推進することにより，学際領域としてのシミュレーション科学を通じての異分野の融合の推進を目指している。本プロジェクトにおける連携研究活動として，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」，階層的構造の物理を結びつける「連結階層シミュレーション」，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」，地球外知的生命探査計画「SETI（Search for Extra-Terrestrial Intelligence）」，「表面･界面での反応や分光」，「プラズマと中性ガス，液体，固体との相互作用」，「データ科学におけるシミュレーション」，「シミュレーション未来学」，基礎科学における「階層性」等の学際的な研究テーマで連携シンポジウムを2022年１月６，７日にオンラインおよびオンサイトでのハイブリッド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。

5-3　光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP（文部科学省）

量子コンピュータ・量子シミュレータ・量子センサなど，近年開発競争が激化している量子科学技術は，電子や原子の「波の性質」を活かした質的に新しいテクノロジーである。スパコンでさえ 10 の何百乗年もかかるような計算を 1 秒以内で終わらせることができ，機能性材料･薬剤･情報セキュリティー･人工知能などに革命を起こし得るため，世界主要各国の科学技術政策において莫大な投資が行われている。例えば米国では，国防省や国立科学財団（NSF）等により毎年約 200 億円オーダーの投資が行われている他，NSF およびエネルギー省（DOE）において 2019 年より新たな量子科学技術プロジェクトが始まった。EU では 2018 年から総額約 1300 億円規模を投資する 10 年プロジェクト「Quantum Technology Flagship」が進行中だ。英国では 2014 年から 5 年間で約 500 億円を投入した「The UK National Quantum Technologies Programme」の第 2 期が始まった。中国政府は，「科学技術イノベーション第 13 次五カ年計画（2016 年）」の重点分野として，量子通信と量子コンピュータを重大科学技術プロジェクト，量子制御と量子情報を基礎研究の強化に位置づけている他，1000 億円以上を投資して量子情報科学の国立研究所を合肥に建設中である。民間企業でも，Google，IBM，Microsoft，Intel 等の IT ジャイアントが 2000 年代半ば以降，量子情報技術に莫大な投資を進めている。これらの国際動向を受けて，日本でも，文部科学省の科学技術・学術審議会において，量子科学技術に関する政策課題を議論する「量子科学技術委員会」が 2015 年 6 月に発足し，ここでの議論を踏まえ 2018 年に新たな国家事業「光･量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP」（2018 ～ 2027 年度；2018 年度予算総額 22 億円）がスタートした。本事業は，経済・社会的な重要課題に対し，量子科学技術を駆使して，非連続的な解決（Quantum leap）を目指す研究開発プログラムである（https://www.jst.go.jp/stpp/q-leap/index.html）。（1）「量子情報処理（主に量子シミュレータ・量子コンピュータ）」（2）「量子計測・センシング」（3）「次世代レーザー」の 3 つの技術領域から成り立っている。

分子科学研究所では，光分子科学研究領域の大森賢治教授が量子科学技術委員会の専門委員・副主査として，我が国の量子科学技術に関する政策課題・将来展望の議論を先導する立場を果たしてきた。また，大森教授が研究代表者を務める新たな研究プロジェクト「アト秒ナノメートル領域の時空間光制御に基づく冷却原子量子シミュレータの開発と量子計算への応用」が Q-LEAP「量子情報処理」領域の大規模・基礎基盤研究に採択され進行中である。共同研究機関である浜松ホトニクス中央研究所・京都大学・岡山大学・近畿大学・オックスフォード大学・ハイデルベルグ大学・ストラスブール大学・インスブルック大学らと緊密に連携して，卓越したコアコンピタンスを有し，量子力学の根源的な問題に深く鋭く切り込む全く新しい量子シミュレータ・量子コンピュータの開発を目指す。この他，同事業の採択課題「Flagship プロジェクト：先端レーザーイノベーション拠点」（研究代表者：藤井輝夫（東京大学））の「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」部門には平等拓範特任教授が，「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」（研究代表者：馬場嘉信（量子科学技術研究開発機構））および「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」（研究代表者：清水亮介（電気通信大学））には石﨑章仁教授が，分担者として加わっており，同事業に寄与している。

5-4　実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点 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た。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リポートに報告して以降の研究拠点の活動を概括する。

本プロジェクトでは，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，主な研究課題として推進してきた。

最終年度の外部向け事業としては，2021 年 11 月 15 日に第 18 回，2022 年 3 月 8 日に第 19 回公開シンポジウム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して公開で開催している「次世代 ESICB セミナー」も，継続して実施しており，19 回となった。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，研究開発を推進した。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た。さらに ESICB コロキウムとして，この分野における内外の著名な研究者を招へいした講演会も随時開催してきた。

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た「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できなかったが，「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た。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た。最終年度において，元素戦略研究の成果のまとめ，特に学理構築について議論を重ねた。

このようにプロジェクト内外の研究交流を積極的に行い，本プロジェクトでは実験と理論の協働は成功したと言える。特に，最近では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，という本プロジェクトの目的を果たせたと考えており，プロジェクト完了後も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くるものと考えている。

5-5　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，本事業では国立大学ばかりでなく公立大学や高等専門学校を含む 77 機関が参画して機器共用を実施し，利用機関数は私立大学や企業も含めて 500 以上に上っている。参画機関の外部公開機器の登録台数は，1,075 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 3,200 台以上であり，登録ユーザー数は約 15,000 名に達している（数値は 2022 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３期中期計画に合わせて５年計画で事業を展開してきた。最終年度にあたる 2021 年度においても，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，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）。これらの講習会・研修会の事業の実施においては，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。さらに，各大学のホームページ上での研究機器情報を収集した新たなポータルサイトを構築した。各研究機関の有する設備情報等を広く共有することで，共用事業の推進をさらに加速することがその目的である。完成した初期バージョンを公開し，ユーザーをはじめとする各方面からのご指導をいただきながら，継続して改善を図る予定である。

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。

2022 年度以降の活動については，ネットワーク協議会参画機関で議論を行った結果，本事業を継続し大学研究設備の共用促進活動を継続していくべきということで合意が得られた。全体の運営方法や課題についても議論を行い，協議会規約等の見直しも行ったところである。今後も，①予約・課金システムやポータルサイトの安定運用と改善，②研究設備の共用加速事業の実施，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，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
2021	169,617	1,053	738	1,282	3,073

表２　2021 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	桝　飛雄真	准教授	溶液 NMR の総合メンテナンス
	千葉大学	共用機器センター	桝　飛雄真	准教授	設備 NW システムにおけるデータ連携機能の整備とセミリモート研究支援システムの強化
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	MALDI-TOF 質量分析計のレーザー及び検出器交換による装置性能の復活
	山梨大学	機器分析センター	山中　淳二	准教授	FIB 鏡筒整備とイオンソース交換事業
中国	広島大学	自然科学研究支援開発センター	網本　智子	契約専門職員	高性能ガスクロマトグラフ飛行時間質量分析計の点検・調整
	広島大学	自然科学研究支援開発センター	前田　　誠	技術主任	FE チップ交換による電界放射型走査電子顕微鏡の機能復活
	広島大学	自然科学研究支援開発センター	前田　　誠	技術主任	フィラメント交換ならびにロータリーポンプ交換による透過型電子顕微鏡の機能復活
	鳥取大学	研究推進機構研究基盤センター	足立　香織	助教	バイオアナライザの更新による研究基盤整備と相互利用促進
	鳥取大学	研究推進機構研究基盤センター	中山　祐二	助教	大学内２キャンパス間でのフローサイトメトリー研究・解析環境の最適化
	岡山大学	大学院自然科学研究科	大橋　一仁	教授	３次元表面構造解析装置のデータセキュリティ性能の強化と精度点検保証による利用促進
四国	高知大学	総合研究センター実験実習機器施設	坂本　修士	准教授	オールインワン蛍光顕微鏡の「機能拡張」と「遠隔操作化」による共用化促進事業
	愛媛大学	学術支援センター物質科学部門	谷　　弘幸	准教授	単結晶Ｘ線構造解析装置の相互利用促進事業

九州	長崎大学	産学官連携戦略本部	真木　俊英	准教授	光電子分析装置 MCP および導入ロッド更新事業
	長崎大学	産学官連携戦略本部	真木　俊英	准教授	安定同位体質量分析装置ターボ分子ポンプ更新事業
	鹿児島大学	研究推進機構 研究支援センター	澤田　　剛	准教授	共用研究設備における外部接続ポンプ類の更新事業
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　2021 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	開催地	参加数
技術者英語研修 （一括申請）	三宅　亜紀（静岡大）	2021 年　6 月 14 日 7 月 13/14 日 8 月 24 日 9 月 27/28 日 10 月 27–29 日 2022 年　2 月 24 日 3 月　9 日	WEB	99
NMR 構造解析講習会 （一括申請）	水田　敏史（鳥取大）	2021 年　5 月 14 日 6 月 24 日 8 月 20 日 10 月　8 日 2022 年　1 月 21 日	WEB	146
固体 NMR 測定研修会	水田　敏史（鳥取大）	2022 年　1 月　7 日	鳥取大 WEB	5 9
第 1 回質量分析技術研修会	三宅　里佳（大阪大）	2021 年　5 月 28 日	WEB	88
第 2 回質量分析技術研修会	西川　嘉子（奈良先端大）	2021 年　6 月 16 日	WEB	60
第 3 回質量分析技術研修会	横野　瑞希（鳥取大学）	2021 年　7 月 21 日	WEB	40
第 4 回質量分析技術研修会	三宅　里佳（大阪大）	2021 年　9 月　1 日	WEB	60
質量分析個別研修会	小田あゆみ（信州大学）	2021 年 11 月 10 日	信州大学 WEB	3 11
第 5 回質量分析技術研修会	横野　瑞希（鳥取大）	2021 年 12 月 10 日	WEB	44
第 6 回質量分析技術研修会	三宅　里佳（大阪大）	2022 年　2 月 25 日	武庫川女子大 WEB	26

5-6　ナノテクノロジープラットフォーム事業「分子・物質合成プラットフォーム」（文部科学省）

文部科学省「ナノテクノロジープラットフォーム」事業（2012 年 7 月～ 2022 年 3 月（予定））は, ナノテクノロジーに関する最先端の研究設備とその活用のノウハウを有する機関が緊密に連携して，全国的な設備の共用体制を共同で構築するものであり，産学官の多様な利用者による設備の共同利用を促進し，産業界や研究現場が有する技術的課題の解決へのアプローチを提供するとともに，産学官連携や異分野融合を推進することを目的としている。本プラットフォームは，ナノテクノロジー関連科学技術において基本となる 3 つの技術領域，微細構造解析，微細加工，分子・物質合成から成っており，分子科学研究所は，分子・物質合成プラットフォームの代表機関・実施機関として本事業に参画しており, 2013 年度以降は機器センターが事業の運営母体である共用設備運用組織としての役割を担っている。

分子・物質合成プラットフォームの参加機関は，千歳科学技術大学，物質・材料研究機構，北陸先端科学技術大学院大学，信州大学，名古屋大学，名古屋工業大学，大阪大学，奈良先端科学技術大学院大学，九州大学と自然科学研究機構分子科学研究所である。本プラットフォームは，産官学の研究者を問わず，ナノテクノロジー関連の分子・物質合成，化学・物理・生物の広い範囲にわたる先端機器群の共用設備供給，有機・無機機能材料合成に関するノウハウの提供，測定データの解析・解釈等も含めた総合的な支援を実施している。利用者の成果が新しい利用者を呼び，全国から多くの先端研究者が自ら集う先端ナノテク分子・物質合成拠点を形成し，支援者と利用者双方の若手を育成できる環境を構築することを目標に掲げている。

表 1 には 2021 年度の支援装置・プログラム一覧，表 2 には 2021 年度の採択課題一覧，表 3 には 2021 年度採択・実施件数日数（2021 年 4 月 1 日～ 2022 年 3 月 31 日実施分）を示した。

表 1　2021 年度支援装置・プログラム一覧（分子科学研究所担当分）

支援装置・プログラム	装置・プログラムの概要	支援責任者	所属
X 線磁気円二色性分光（XMCD）	XMCD は，UVSOR BL4B を用いた極低温高磁場 X 線磁気円二色性測定システム。薄膜作製用試料準備槽つき。利用エネルギー 200–1000 eV，試料温度 5–60 K，磁場 ±5 T（±7 T まで一応可能）。作成した薄膜等を大気に曝すことなくそのまま元素選択磁性測定したい場合に有効。 ［UVSOR-III BL4B（100–1000 eV 円偏光），超伝導磁石；JANIS 社製 7THM-SOM-UHV（±7 T, 5 K），試料作製槽 LEED/AES，蒸着などを装備］	解良 聡施設長 横山利彦教授 小板谷貴典助教 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 1μm の描画が可能。段差計は，150 mm までの領域でステッチングなしで測定可能。その他にも，精密温湿度調整付きのイエロークリーンブースは，フォトリソグラフィーに関する一連の作業（基板洗浄，各種レジスト塗布，露光，現像，アッシング，エッチング）に利用可能。 ［マスクレス露光装置（ナノシステムソリューションズ DL-1000/IMC），段差計（KLA Tencor　P7），精密温度調整機能付クリーンブース，マスクアライナー（ミカサ社製 MA-10），スピンコーター（ミカサ社製 MS-A100）］	山本浩史室長 近藤聖彦主任技師 高田紀子技術員 木村幸代技術員 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 装置開発室

	３次元光学プロファイラーシステム（Nexview） ３次元光学プロファイラーシステム（ZYGO Nexview）は，非接触で表面の３次元形状測定，表面粗さ測定を行う装置。つなぎ合わせ機能により□ 46.5 mm 範囲の３次元形状測定や，Ra0.1 nm 以下の超精密研磨面の測定，透明膜の厚さ測定（1μm 以上）などが可能。X-Y ステージ可動範囲 200 mm×200 mm。Z 軸可動範囲 100 mm ［精密温度調整機能付クリーンブース］	山本浩史室長 近藤聖彦主任技師 菊地拓郎技術員 木村幸代技術員 水谷伸雄技術支援員	装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室
装置開発	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。 ［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。］	山本浩史室長 近藤聖彦主任技師 豊田朋範技師 松尾純一技術員	装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室
電解放出形走査電子顕微鏡	走査電子顕微鏡を提供。主に施設利用に対応。 ［JEOL JSM-6700F(1)（試料 2 インチまで）］	横山利彦センター長 石山 修特任研究員 外山亜矢技術支援員	機器センター 機器センター 機器センター
低真空分析走査電子顕微鏡	幅広い試料に対する，SEM 観察と EDS 元素分析の環境を提供。SEM 本体は，日立ハイテクノロジー社製 SU6600。10 ～ 300Pa の低真空観察に対応し，絶縁性試料を導電処理なしで観察可能。分解能は，高真空 1.2 nm (30 kV)，低真空 3.0 nm (30 kV)。EDS 分析装置は，BrukerAXS 社製 XFlash5060FQ 及び XFlash6|10。表面凹凸の影ができにくく高感度な EDS 検出器を搭載。温度を –20 ～ 50℃程度で変えられるステージも利用可能。 ［日立ハイテクノロジーズ _SU6600，BrukerAXS_QUANTAX XFlash 5060FQ+XFlash6|10 コンバインシステム］	横山利彦センター長 石山 修特任研究員 上田 正技術員 外山亜矢技術支援員	機器センター 機器センター 機器センター 機器センター
電界放出形透過電子顕微鏡	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。 ［JEOL_JSM-2100F（試料 3 mm φ以内）］	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	機器センター 機器センター 機器センター 機器センター
走査プローブ顕微鏡	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。 ［Bruker Dimension XR Icon　NanoElectrical］ 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。 ［Bruker Dimension XR Icon　NanoElectochemical］	横山利彦センター長 湊 丈俊主任研究員 上田 正技術員 杉本敏樹准教授	機器センター 機器センター 機器センター 物質分子科学
単結晶Ｘ線回折	単結晶試料にＸ線を入射すると，結晶構造を反映した回折点が得られる。この回折点の位置および強度から，結晶構造解析が行われる。構造解析により，原子の三次元座標（立体構造）や原子間距離・結合距離，三次元の電子密度などの情報が得られる。数十～数百 mm サイズの単結晶試料が作成出来れば，３時間程度で測定～解析が可能。 ［Rigaku_MERCURY CCD-1・R-AXIS IV，MERCURY CCD-2］	横山利彦センター長 岡野芳則技術員	機器センター 機器センター

単結晶X線回折（微小結晶用）	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φ 0.1～0.2 mm で，コリメータはバックグラウンド低減のためビーム径よりやや大きめの 0.3mm のものが取付。 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 藤原基靖主任技術員 宮島瑞樹技術員	機器センター 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･空孔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 藤原基靖主任技術員 宮島瑞樹技術員	機器センター 物質分子科学 物質分子科学 機器センター 機器センター
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	光分子科学 UVSOR
X線光電子分光	汎用性も高いハイスペックX線光電子分光システム Scienta 光電子分光装置（光電子分析器 R4000L1，Al-Kα 単色X線源 MX-650, 真空紫外光源 VUV5k, 中和電子銃, グローブボックス） 光電子分析器；エネルギー分解能 1.8meV 以下，スポットサイズ 1×3mm^2 単色X線源；エネルギー幅 300 meV	横山利彦センター長 小板谷貴典助教 山本航平助教 石山 修特任研究員	機器センター 物質分子科学 物質分子科学 機器センター

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 浅田瑞枝技術員 上田 正技術員 藤原基靖主任技術員 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 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 浅田瑞枝技術員 上田 正技術員 藤原基靖主任技術員 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 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 浅田瑞枝技術員 藤原基靖主任技術員 宮島瑞樹技術員 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 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 賣市幹大技術員 長尾春代特任専門員	機器センター 機器センター 機器センター
等温滴定型カロリメーター（溶液）	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 賣市幹大技術員 長尾春代特任専門員	機器センター 機器センター 機器センター
熱分析装置（固体，粉末）	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 藤原基靖主任技術員 宮島瑞樹技術員	機器センター 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 賣市幹大技術員 藤川清江技術支援員	機器センター 機器センター 機器センター

顕微ラマン分光	顕微ラマン分光システムによる分子構造，局所結晶構造解析を支援。コンフォーカル光学系＋冷却 CCD による高空間分解能，高感度観測。488 nm から 785 nm までの励起波長選択，ヘリウム温度までの試料冷却が可能。 ［RENISHAW_inVia Reflex］	横山利彦センター長 賣市幹大技術員	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エ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 Quantaurus-QY C11347-01］	横山利彦センター長 上田 正技術員	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Δ A（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，Δ A が小さいとθ = 33 × Δ 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 賣市幹大技術員 藤川清江技術支援員	機器センター 機器センター 機器センター

ピコ秒レーザー	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 賣市幹大技術員 長尾春代特任専門員	機器センター 機器センター 機器センター
機能性分子システム創製（太陽電池）	有機半導体を用いた有機薄膜太陽電池の作製・評価，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・スピン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 佐藤拓朗助教	協奏分子センター 協奏分子センター 協奏分子センター
機能性分子システム創製（有機合成）	不斉分子触媒の配位子，不斉有機分子触媒などの合成，有機小分子の合成を支援。また，有機分子の光学異性体の光学純度の測定，ならびに，キラルセミ分取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］	椴山儀恵准教授 鈴木敏泰チームリーター 大塚尚哉助教 藤波 武特任研究員	生命･錯体分子科学 機器センター 生命･錯体分子科学 生命･錯体分子科学
機能性分子システム創製（大規模量子化学計算）	機能性ナノ分子の励起状態やナノ微粒子触媒の反応機構に関する電子状態計算。 ［高精度ナノ構造電子状態計算］	江原正博教授	理論･計算分子科学

機能性分子システム創製（磁性薄膜作製評価）	超高真空中で磁性薄膜等を作成し，in situ 磁気光学 Kerr 効果による評価，ならびに，紫外レーザー磁気円二色性光電子顕微鏡（UV MCD PEEM）によるナノ磁気構造評価を実施。［超高真空下での磁性薄膜作成・磁気光学 Kerr 効果によるその場観察評価。紫外レーザー磁気円二色性光電子顕微鏡も利用可］	横山利彦教授 小板谷貴典助教 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。超高圧装置を利用した高温・高圧下での物質合成，X線回折による結晶構造解析，温度・雰囲気制御下での電気化学的物性評価が可能。［無機材料の設計・合成・各種評価］	小林玄器准教授 竹入史隆助教	物質分子科学 物質分子科学
機能性分子システム創製（生体分子システム）	タンパク質分子をはじめとする生体分子システムの調製や，それらの構造・動態評価を支援。X線溶液散乱計測システムを含む包括的な支援が可能。［生体分子システムの調製，構造・動態評価］	秋山修志教授 向山 厚助教 古池美彦助教	協奏分子センター 協奏分子センター 協奏分子センター
機能性分子システム創製（機器センター長協力研究）	機器センター以外の分子研施設利用を実施する際に，機器センター機器（所内専用機器を含む）を補助的に利用するための区分	横山利彦センター長	機器センター

表２　2021 年度（令和３年度）採択課題一覧　分子科学研究所担当分（2022 年３月 31 日現在）

(1)　協力研究

課　題　名	支援機器等	代　表　者
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
ペプチドが作り出す環状ヘテロ金属配列場を用いた金属中心の物性制御	金属錯体	お茶の水女子大学基幹研究院　三宅　亮介
電界／磁界分離型マイクロ波装置を用いて合成したグラフェン類の構造・物性測定	走査プローブ顕微鏡	京都大学化学研究所　高谷　光
有機ディラック半金属におけるカイラル量子異常	有機 FET	東邦大学理学部　田嶋　尚也
有機ディラック半金属をチャネルとした電界効果トランジスタの表面評価	装置開発	東邦大学理学部　田嶋　尚也
濃厚電解液が形成する電極被膜構造の in-situ 解析	走査プローブ顕微鏡	名古屋工業大学大学院工学研究科　本林　健太
石英ガラス上に形成するナノ水滴の粘弾性計測	走査プローブ顕微鏡	立命館大学理工学部　荒木　優希
巨大自己集合空孔錯体の新規機能創出を指向した NMR 構造解析	800NMR 溶液	東京大学大学院工学系研究科　堂本　悠也
有機結晶表面に作成した電解質トランジスタの動作機構解明と新奇物性探索	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 (IV)	太陽電池	東京理科大学理工学部　中山　泰生
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科　矢木　宏和
六方晶格子を持つ水素化物ハライド Ba_2H_3X (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
マイクロ波焼結における酸素放出促進効果の解明	走査プローブ顕微鏡	中部大学工学部　樫村京一郎
有機半導体単結晶の表面科学	走査プローブ顕微鏡	筑波大学数理物質系　山田　洋一
極低温合成により作製したナノ粒子の高温安定性評価	オペランド	名古屋工業大学大学院工学研究科　宮崎　秀俊
有機半導体の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
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	大阪府立大学工学研究科　戸川　欣彦
特異な三次元構造を有する含硫黄カチオン性π共役分子の合成	有機合成	横浜国立大学大学院環境情報研究院　星野雄二郎
ピークフォースタッピング方式の原子間力顕微鏡を用いた潤滑油添加剤層のヤング率計測	走査プローブ顕微鏡	神戸大学大学院理学研究科　大西　洋
機械的曲げ特性と熱跳躍特性を併せもつ錯体分子結晶の結晶表面状態の観察と機械特性の定量化	走査プローブ顕微鏡	岐阜大学教育学部　萩原　宏明
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

Catalytic Oxidation of Benzyl Alcohol to Benzaldehyde on Gold and Gold/Palladium Clusters:A DFT Study on the Reaction Mechanism	量子計算	Rajamangala University of Technology Thanyaburi,Thailand	Karan Bobuatong
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
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
ガレクチンの酸化還元依存的な構造変化	SAXS	関西学院大学理学部	金村　進吾
カブトムシの角の機械的性質の測定	走査プローブ顕微鏡	基礎生物学研究所	森田　慎一
光に応答して溶解するハイドロゲルの開発	有機合成	東京大学大学院工学系研究科	榎本　孝文
有機 EL デバイスの結晶性評価および高性能化	太陽電池	富山大学工学部	森本　勝大
誘導型オリゴマー形成蛋白質の溶液構造解析	生体分子	富山大学学術研究部	伊野部智由
フッ素化赤外吸収色素を用いた有機太陽電池	太陽電池	岐阜大学工学部	船曳　一正
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
クマムシ由来のタンパク質 SAHS の固体 NMR を用いた構造解析	600NMR 固体	名古屋市立大学大学院薬学研究科	矢木　宏和
有機ホウ素化合物による非フラーレン n 型半導体の開発と太陽電池の作製評価	太陽電池	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野　克彦
立体 π 共役分子をもちいた分子性ハニカム格子の電子構造と分子配列	ARUPS	名古屋大学大学院理学研究科	水津　理恵
光励起三重項の電子スピン特性評価	E680	九州大学大学院工学研究院	楊井　伸浩
コラニュレン骨格を有するターアリーレンのフォトクロミック反応に関する量子化学計算	量子計算	奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学領域	山田美穂子
光応答性分子の分子シミュレーション解析による光反応性の解明	量子計算	新居浜工業高等専門学校	高見　静香
軸不斉発光分子の励起状態計算	量子計算	奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	辻　雄伍
結晶スポンジ法による新規海産アルカロイドの構造解析	結晶スポンジ法	名古屋大学大学院生命農学研究科	日置　裕介
Title Theoretical Investigations on Structures, Stabilities, and Chemical Bonding of 20-Electron Transition Metal Complexes	量子計算	Xi'an Jiaotong University	Tao Yang

(2)　施設利用

課　題　名	支援機器等	代　表　者	
蒸発拡散法によるニオブスズ超伝導 RF 空洞サンプルの臨界磁場測定と表面観察	低 SEM MS-7 XL-7	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設	許斐　太郎
ニトロゲナーゼパラログ酵素 CfbD の EPR 測定による活性部位の金属補因子の性状解析	EMX E500	埼玉大学大学院理工学研究科	藤城　貴史
金属ドープ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 MS-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
有機分子の自己組織化に基づく新規有機・無機ハイブリッドナノ構造の構築	TEM ラマン FT 円二色性	関西学院大学理工学部	山内　光陽
抗体の抗原結合能と安定性の熱力学的解析	iTC200 円二色性 PEAQ-ITC	京都府立大学大学院生命環境科学研究科	織田　昌幸
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
種々の三元系合金を用いた内部補強 Nb_3Sn 超伝導線材における磁化特性評価	MS-7 XL-7	核融合科学研究所	菱沼　良光
ポリオキソメタレートの酸化還元反応メカニズムの定量的解析	EMX E500 600NMR 溶液	高知大学教育研究部	上田　忠治
金属酵素モデル錯体の電子構造の研究	EMX E500 紫外・可視・近赤外 600NMR 溶液	奈良女子大学研究院自然科学系	藤井　　浩
新しいメソ多孔性炭素の開発	SEM 低 SEM TEM 熱解析	愛知教育大学教育学部	日野　和之

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 600NMR 溶液	愛知工業大学工学部	梶田　裕二
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 XL-7	産業技術総合研究所	山口　英俊
超伝導体／磁性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
単一分子性ディラック電子系 $[Ni(dmdt)_2]$ の合成と物性研究	MS-7 XL-7	日本大学文理学部	周　　彪
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
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
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 オペランド MS-7 XL-7 熱解析	岐阜大学教育学部	萩原　宏明
Keggin 型ポリ金属酸コバルト (II) 錯体の遅い磁気緩和現象の解明	MS-7 XL-7	日本大学文理学部	石崎　聡晴
分子不斉の構築と動的挙動の制御による不斉信号の拡大・可視化	蛍光分光 円二色性 絶対 PL	福井大学学術研究院工学系部門	徳永　雄次
マンガン－ニクトゲン系反強磁性体におけるネールベクトルの熱・磁場アシスト電流制御の可能性探索	微小結晶 MS-7 XL-7	名古屋大学大学院工学研究科	浦田　隆広
ロジウム二核錯体による選択的ベイポクロミズム特性の発現	CCD-1 CCD-2 微小結晶 オペランド MS-7 XL-7 熱解析	島根大学総合理工学部	矢野なつみ
キラリティーを有する有機無機複合磁性体での磁気構造の探求	EMX E500 MS-7 XL-7	広島大学大学院先進理工系	井上　克也
多元化合物半導体ナノ粒子の光学特性評価と精密構造解析	ラマン 蛍光分光 紫外・可視・近赤外 オペランド	名古屋工業大学大学院物理工学専攻	濱中　　泰
２種類の多核金属錯体からなる集積体の結晶構造と磁気特性の評価	CCD-1 CCD-2 微小結晶 MS-7 XL-7 EMX E500	岐阜大学工学部	植村　一広
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
Sn/Co 多層膜の電気伝導特性，Mn-ZnO ナノロッドの磁気的性質の解明	MS-7 XL-7	岐阜大学工学部	嶋　　睦宏
公共用水域におけるアニオン未知物質の同定とその挙動についての考察	EMX 600NMR 溶液	愛知県環境局環境調査センター	野田　一平

ラマン分光法を用いたヒルシュスプルング病における無神経節腸管の可視化	ラマン	大分大学医学部	小川　雄大
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	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	盛田　雅人
様々な形状のアルキル基を置換したトライマー誘導体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	静岡大学学術院工学領域	植田　一正
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
InP 系コアシェル型ナノ結晶の界面ポテンシャルが及ぼす励起子ダイナミクスの調査	TEM 粉末X線 ラマン 絶対 PL 紫外・可視・近赤外	関西学院大学理工学部	江口　大地
光機構性金属錯体の励起状態の時間分解 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
機能性マイクロナノ構造体の構造解析および物性研究	微小結晶 EMX E500 MS-7 XL-7 熱解析 MALDI 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
アザアセン－ TTF ハイブリッド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
ラマン分光法による生体深部センシングのためのファントム計測	ラマン	富山大学学術研究部工学系	大嶋　佑介
複核金属内包フラーレンアニオンの磁性およびスピン状態の解明	E680 EMX E500 MS-7 XL-7	神奈川工科大学基礎・教養教育センター	兒玉　健
有機ラジカル磁性体の低温構造と量子磁気状態の解明	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
逆ペロブスカイト型マンガン窒化物における特異な磁気特性の解明	MS-7 XL-7	静岡大学学術院工学領域	川口　昂彦
ナノ磁性微粒子を用いた新規マルチフェロイック材料及び磁気光学材料の磁気的性質	MS-7 XL-7	静岡大学工学部	中嶋　聖介
フラビンタンパク質の光誘起ラジカルペア生成に関する人工システムの構築	E680 蛍光分光 紫外・可視・近赤外 ピコ秒	大分大学全学研究推進機構	岡　芳美
$ZnFe_{2-x}M_xO_4$(M: Fe, Co 等) フェライト薄膜の強磁性に関する研究	E500 MS-7 XL-7	名古屋工業大学先進セラミックス研究センター	安達　信泰
無脊椎動物の生殖腺刺激ペプチドホルモンの探索と解析	MALDI-TOF	基礎生物学研究所	大野　薫

新規遷移金属水酸化物および圧電性配位高分子錯体の合成と物性評価	CCD-1 CCD-2 微小結晶 MS-7 XL-7 熱解析	成蹊大学理工学部	藤田　渉
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
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
Bilayer 型金属ジチオレン錯体の電子スピン共鳴	E680 EMX E500 CCD-1 CCD-2 微小結晶	理化学研究所	大島　勇吾
新規分散ナノカーボンの形態及び分光分析	TEM 蛍光分光 紫外・可視・近赤外	名古屋大学未来材料・システム研究所	大島　久純
組織粉砕溶液ならびに組織切片が発する自家蛍光機序解明に関する分光学的アプローチ	蛍光分光 紫外・可視・近赤外	長岡技術科学大学大学院工学研究科	小松　啓志
Interaction of Proteins with Polymers	iTC200 PEAQ-ITC	北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	Robin Rajan
新規な有機伝導体 TMTTF 系の開発・構造決定・物性解明	EMX E500 MS-7 XL-7	名古屋大学大学院工学研究科	澤　博
自己組織化を用いたカーボンナノチューブのパターニングに関する研究	低 SEM ラマン	早稲田大学理工学術院	松田　佑
開裂活性分子の加熱によるスピン生成にかかる結晶構造の寄与	EMX	大阪大学大学院工学研究科	焼山　佑美
金属錯体を用いた小分子捕捉・活性化に関する研究	600NMR 溶液	名古屋工業大学大学院工学研究科	小澤　智宏
多元系酸フッ化物の磁性 II	MS-7	京都大学大学院人間・環境学研究科	高見　剛
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	E500	東北大学大学院理学研究科	田中　桐葉
マイクロ波を用いて調製したカーボン系材料の顕微ラマン分光解析	ラマン	京都大学化学研究所	高谷　光
NdF_3 薄膜紫外センサの真空アニールによる性能改善	ESCA	名古屋工業大学大学院工学系研究科	小野　晋吾
光エネルギー変換物質の励起状態の研究	E680 蛍光分光 量子収率 ピコ秒	大阪市立大学大学院理学研究科	松岡　秀人
有機配位子を修飾した複合酸化物触媒の表面構造解析	TEM ESCA 熱解析 ラマン	名古屋大学大学院理学研究科	邨次　智
光電子分光法によるボリルロジウム中間体の電子状態評価	ESCA	大阪大学大学院工学研究科	植竹　裕太
プラズマ誘起活性物質の解析	EMX E500	名古屋大学大学院工学研究科	石川　健治
N 原子を含んだカーボン固定化 Pt 合金系ナノ粒子電極触媒の構造解析	TEM ESCA	名古屋大学大学院理学研究科	サミエスケガ　ボー
多段階電子遷移による高効率光電変換実現に向けたギャップ中電子状態の解明	ラマン	京都工芸繊維大学電気電子工学系	今田　早紀
KI 結晶中 AgI ナノ結晶の光学応答のサイズ依存性の研究	TEM 蛍光分光 紫外・可視・近赤外	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相　武利
鉄含有ペロブスカイト関連酸化物固溶体の酸素放出挙動の熱力学的・結晶化学的調査	オペランド 熱解析	高知大学教育研究部	藤代　史
^{183}W NMR を用いるタングステン錯体触媒系の解析	600NMR 溶液	岡山大学大学院自然科学研究科	押木　俊之
生体に含まれる脂質分析のための脂肪酸 NMR 情報の収集	600NMR 溶液	生理学研究所	福永　雅喜
セメント上に形成したセラミックス蛍光コーティングに関する青色残光蛍光の蛍光寿命の算出の再現性と精度検証	ピコ秒 蛍光分光	長岡技術科学大学大学院工学研究科	小松　啓志
ドライエッチング後の Si 基板の構造評価	紫外・可視・近赤外 低 SEM	(株) NANORUS	宇理須恒雄

ナノサイズ発光バイオマーカーの新規開発	SEM 低 SEM	名城大学理工学部	西山　桂
双性イオン構造を有する新規純有機中性ラジカル伝導体の磁気的性質の解明 -II	MS-7 XL-7	熊本大学大学院先端科学研究部	上田　顕
電子スピン共鳴法による酵素の構造学的研究	E680 EMX E500	佐賀大学農学部	堀谷　正樹
層状遷移金属インタカレーション化合物 Cu_xTiS_2 系の磁性解明	E500 MS-7 XL-7	名古屋大学大学院工学研究科	澤　博
熱誘起構造転移を示すスピンクロスオーバー錯体のメカニズム解明	オペランド	神戸大学大学院理学研究科	高橋　一志
二酸化炭素還元を指向した金属錯体の合成と構造解析	CCD-1 CCD-2 微小結晶	名城大学理工学部	永田　央
アドバンスド ESR 法による米糠による環境計測	E680 EMX E500	新潟大学研究推進機構	古川　貢
３重耐性を示す光合成細菌の耐熱化機構の解明	VP-DSC iTC200	神戸大学大学院農学研究科	木村　行宏
人工光合成をめざすチタン酸ストロンチウム光触媒の水中 ESR 測定：フィージビリティスタディ	E680 EMX E500	神戸大学大学院理学研究科	大西　洋
超分子中空錯体に包接したタンパク質の同定と構造・機能評価	VP-DSC 円二色性	東京大学大学院工学系研究科	中間　貴寛
アニオンのコンフォメーションと非対称性に起因するイオン液体の相挙動	ラマン	防衛大学校機能材料工学科	阿部　洋
1,2,3- トリアゾリウム－リン酸塩単結晶の高温Ｘ線構造解析によるプロトン互変異性の直接観測	CCD-1 CCD-2	東京大学物性研究所	出倉　駿
ディラック電子系の磁気的性質	EMX E500 MS-7 XL-7	愛媛大学大学院理工学研究科	内藤　俊雄
新規外場応答性金属錯体の極低温構造解析	微小結晶	九州大学先導物質化学研究所	中西　匠
ランタン型ルテニウム (II,III) 二核錯体のスピン状態に及ぼす架橋配位子および軸配位子の影響	MS-7 XL-7	島根大学大学院総合理工学研究科	半田　真
木材リグニンの遠赤外分光解析	FT	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設	川崎　平康
含窒素有機ラジカルの磁気物性に関する研究	微小結晶 EMX E500 MS-7 XL-7	三重大学大学院工学研究科	伊藤　彰浩
カーボンナノチューブ作製用触媒粒子への担持材の影響	TEM	名城大学理工学部	丸山　隆浩
電子吸引性置換基を有するフェノールやチオールを配位させた非平面ポルフィリン鉄 (III) 錯体の磁気的性質	E500 MS-7 XL-7	島根大学大学院総合理工学研究科	池上　崇久
有機半導体の表面欠陥状態が超分子光触媒と複合化した光触媒性能に及ぼす影響の解明	EMX	東京工業大学理学院	榊原　教貴
磁性下地基板と弱く磁気結合したナノ構造体の電子・磁気状態	XMCD	名古屋大学未来材料・システム研究所	宮町　俊生
強磁性金属／重金属ヘテロ薄膜構造のスキルミオン磁気状態の観測	XMCD	名古屋大学未来材料・システム研究所	宮町　俊生
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
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
培養型プレナーパッチクランプ装置の部品微細加工	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
分裂酵母の並列ライブイメージングと選択的回収を可能とするマイクロ流体デバイスの開発	マスクレス ３次元	生命創成探究センター	杉山　博紀

(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。2021 年度は３次元　１件，ESR EMX　２件，MALDI-TOF　１件，蛍光分光　１件，紫外・可視・近赤外　２件, 微小結晶　１件, 600MHz 溶液　１件, 走査プローブ顕微鏡　１件が採択された。業種別内訳は大企業９件であった。

表３　2021 年度（令和３年度）利用件数一覧（2021 年４月～ 2022 年３月）

	協力研究	施設利用	非公開利用
採択件数	39	98	9
実施件数	35	90	9
実施日数	1644	1325	38

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。

5-7　マテリアル先端リサーチインフラ（文部科学省）

2021 年度から文部科学省受託研究マテリアル先端リサーチインフラ（Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology in Japan, ARIM）プログラムが始動した。分子科学研究所は ARIM の掲げる７つの重要技術領域のうち「マテリアルの高度循環のための技術」領域のスポーク機関と, 2022 年度からは同事業運営機構横断領域（合成）担当機関として受託業務を遂行することとなった。分子科学研究所では，機器センターが本事業の運営母体となり，計算科学研究センターに主として DX 関連業務を分担してもらう運営体制を構築した。

「マテリアル高度循環」領域はハブ機関・物質材料研究機構のもと，名古屋工業大学，電気通信大学とチームを構成し，４機関が有する種々の先端機器の共用を通じて，代替材料や再生材料由来の物質合成，材料削減に資する触媒反応の可視化などマテリアル循環に関わる支援をするとともに，創出されたデータを効率よく収集・蓄積・構造化し，その利活用を図ることで，サステイナブルなマテリアルのデータ駆動型研究開発に貢献するものである。これまでナノテクノロジープラットフォーム事業（2012 年度～ 2021 年度）などの下で構築してきた基盤研究インフラ（最先端機器共用と高度専門技術支援）とものづくり支援の経験を活かし，分子科学研究所機器センター等の先端機器共用を継続的に実施し，計算科学研究センターとの連携を通して機器共用から創出されたマテリアルデータを収集し利活用を行う計画である。

2021 年度は準備期間に位置付けられたが，本事業 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ならびにデータ蓄積サーバー正副２機の導入がなされ，さらには 2021 年度補正予算により超伝導量子干渉型磁束計（SQUID）の更新が予定されている。

2021 年度は，業務主任者･横山利彦機器センター長，中村敏和チームリーダー，江原正博計算科学研究センター長，中本圭一マネージャーらの小規模な運営業務であったが，2022 年度からは，ナノプラットフォーム実施機関の大部分が本事業に移行し実施担当者 50 名規模に加え, 運営機構横断領域（合成）担当としても数名の参画が予定されている。

5-8　NMR プラットフォーム（文部科学省）

文部科学省「先端研究基盤共用促進事業（先端研究設備プラットフォームプログラム）」は，国内有数の先端的な研究施設・設備について，その整備・運用を含めた研究施設・設備間のネットワーク構築するものである。全ての研究者への高度な利用支援体制を有する全国的なプラットフォームを形成することで，我が国の研究開発基盤の持続的な維持・発展に貢献することを目的としている。その中で，NMR プラットフォームは，産学官が共用可能な先端的 NMR 研究基盤のネットワークを基盤としている。先端人材が育んだ技術・知恵・職人芸（暗黙知）を形式知化し，先端機器とあわせて有機的に連携させ，様々な地域・分野の課題解決を提供する研究基盤を全国的に展開することを目的とする。さらに，我が国全域の研究開発の促進･イノベーション創出に貢献する体制を構築することを目的とする。地理的な制約を受けず，必要に応じて最適な先端人材の支援を受けながら，最適な技術・機器・手法・知恵等を活用して，安全･安心にデータ取得･解析して課題解決できる，新時代に相応しい共用体制の模範となる技術プラットフォームとなることを目指すものである。

NMR プラットフォームは，代表機関である国立研究開発法人理化学研究所をはじめ，先端的な NMR 設備と関連技術を産学官に共用する先端的 NMR 研究基盤を有する実施機関として，国立大学法人北海道大学，国立大学法人東北大学，国立大学法人東京大学，国立研究開発法人理化学研究所，公立大学法人横浜市立大学，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，国立大学法人大阪大学，国立大学法人広島大学の８機関，ならびに NMR 装置や関連技術・製品のメーカー４社（株式会社 JEOL RESONANCE，ブルカージャパン株式会社，株式会社シゲミ，大陽日酸株式会社）で形成されている。

分子科学研究所は，実施機関として 2021 年より本事業に参画を開始し，800 MHz 溶液 NMR を共用施設・機器として産業界や学術分野における幅広い利用に供することで，科学技術活動全般の高度化を図るとともに，NMR 装置を活用した共用事業を通して，全国の大学や研究所等の様々な分野の研究者を支援するための取組みを展開する。なお，本事業は 2022 年４月より，生命創成探究センターが実施機関として参画する。

2021 年度実施状況

協力研究（NMR プラットフォーム）

課　題　名（前期）	提案代表者	
NMR 法を用いたヒト免疫グロブリン G1 の Fc 領域の糖鎖構造の解析	東北医科薬科大学薬学部	山口　芳樹
クマムシ由来のタンパク質 CAHS および SAHS の NMR 構造解析	名古屋市立大学大学院薬学研究科	矢木　宏和

課　題　名（後期）	提案代表者	
極限環境微生物の糖鎖構造解析	京都大学大学院農学研究科	中川　　聡

5-9　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ろう。

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）。

5-9-1　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（5-10参照）。

【国際ネットワーク型研究加速】

シミュレーション技術や新しい計測技術の開発を生かし，複数の海外機関との連携・ネットワーク化により，創造的研究活動を推進する拠点形成を目指すもの

分子科学研究所として「分子観察による物質・生命の階層横断的な理解（2016–2021）」が採択。

欧米との国際共同研究と，アジアを相手とする IMS-IIPA（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。

5-9-2 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。新型コロナウイルスの感染拡大により，2020 年度は 25 名，2021 年度はタイより２名にとどまっている。

5-9-3　分子研アジア国際インターンシッププログラム（IMS-IIPA）

外務省の JENESYS 事業, 分子研の EXODASS 事業を引き継ぐ形で 2015 年度より IMS-IIPA 事業として運用している。JENESYS 事業，EXODASS 事業の各種制限を解消し，欧米を相手に実績のある IMS-IIP 事業と同じ基準で実施するようになったので自由度が増した。今ではアジアと欧米を分ける意味もなくなり IMS-IIP 事業として一括して扱っている。ただし，財源的には未だに区別が残っている。分子研はアジア地区で重点大学・拠点研究機関（タイのチュラロンコン大学・カセサート大学・NANOTEC・VISTEC，マレーシアのマラヤ大学，中国のアモイ大学，インドの IIT Kanpur，韓国科学技術院自然科学部，台湾の国立交通大学･中央研究院原子分子科学研究所等）を選び，MOU を直接，あるいは，総合研究大学院大学物理科学研究科を通して，締結しており，大学院生や若手研究者を一定期間招聘している。提携先拠点研究機関については，共同研究の有無なども考慮しながら随時入れ換えを行っていく。大学院生の場合は原則として５～６ヶ月，若手研究者の場合は１～６ヶ月滞在し，ホスト研究室に所属して国際共同研究を担ってもらう。分子研での研究を体験して，総研大への入学を希望する学生が毎年数名いるほか，分子研にポスドクとして戻ってくる学生もおり，分子研・総研大の研究力強化と国際化に寄与している。今後はダブルディグリー制度などとの組み合わせによって，さらに魅力的な制度となるよう改良していく予定である。

5-9-4　短期外国人研究者招へいプログラム

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

一方，国際協力研究については，海外からの直接申請ではなく，研究所内の教員による国際共同研究の提案を受け，所内委員による審査を経て①海外の教授，准教授クラスの研究者の短期招へい，②若手外国人研究者の短期招へいなどが「分子科学国際共同研究拠点の形成」の主要プログラムとして実施されていた。その実績は 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 件にとどまった。また 2021 年度は日本への入国が制限され，短期外国人研究者招へいプログラムによる国際共同研究は 0 件であった。一方，リモートによる研究打合せ，実験等が加速し 2021 年度のリモートによる国際共同研究は 105 件となっている。

リモートによる国際共同研究

国名	ドイツ	アメリカ	中国	フランス	イギリス	台湾	韓国	タイ	オーストラリア	ポーランド	インド	フィンランド	スイス	その他	合計
件数	27	11	10	8	8	7	7	6	4	3	3	2	2	7	105

その他：イスラエル，オランダ，カナダ，スウェーデン，ロシア，イタリア，インドネシア　　（2020.10–2022.3）

5-10　ネットワーク型研究加速事業（自然科学研究機構）

第３期中期計画期間に入り，自然科学研究機構の研究費（運営費）の一部が，機構で統括し，機構長の裁量で各機関に配分する形をとることとなり，自然科学研究機構では 2016 年度に「自然科学研究における機関間連携ネットワークによる拠点形成事業」（2017 年度からは「ネットワーク型研究加速事業」に名称変更して継承）として機構内で公募して選考することとなった。これは，自然科学分野における国内外の大学や研究機関との連携による共同研究を推進し，新たな学問分野の開拓も視野に入れて自然現象シミュレーションや新計測技術の開発を生かした創造的研究活動を推進する，国際的にも評価される機関間連携ネットワークの構築による国際的共同利用・共同研究拠点を形成することを目的としている。分子科学研究所においては，この機構内公募に対して「分子観察による物質・生命の階層横断的な理解」という６年（2016 年～ 2021 年度）計画の事業を申請し，採択された。その内容の概略は，以下の通りである。

従前の分子観測と分子理論は，分子そのものの特性を描き出すことで分子の多様な構造と機能を解明することに大きく寄与したが，ミクロとマクロの間で起こる分子システムに特徴的な挙動を観察し，それを解釈しようという視点が重要になりつつある。従来の分子観測法・理論から一歩踏み出した，新しい発想の計測実験手法，有意な情報を取り出すデータ解析手法，及び実験結果をシミュレーションし，解析する理論的枠組みを開拓することが必要となっている。それによって，さらに新たな物質機能の開拓，生命活動の根源を探るための新たな方法論を提供することも期待される。本事業ではこの観点に立ち，分子科学研究所で実績のある分子計測法と分子理論の蓄積を元に，先端的な分子観察法と解析手法，理論・シミュレーション技法を一体的に開発する。分子観察法の開発で実績ある国内外主要研究機関との共同研究（国内外の関連研究機関からのインターンシップ受入れ等を含む）を行い，また物質科学と生命科学への利用の観点から連携ネットワークを創出し，分子観察による階層横断的な自然の理解を加速することを目的とする。

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，2021 年度６件開催した（2020 年度及び 2021 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り，2021 年度もほぼ同様の状況だが，一部で受入れを再開しつつある）。

5-11　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，⑤ IR（Institutional Research）の機能を事業に含めて運営することとなっている。戦略室の中に広報機能が入ることになったため，分子研では広報室は戦略室に一本化した。また，これまでの史料編纂室機能は研究評価・研究企画に利用すべく IR 資料室的機能を持たせて戦略室に含め，⑤ IR 機能，及び評価・企画を含めて統合的に運用することにした。所長は，戦略室の支援によって，より広い見地からの研究力強化の戦略を立てる。

2021 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　　2021 年 4 月 26 日 –28 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（2021 年度は COVID-19 感染拡大の影響で，2020 年度に来日した，MOU によるものではないタイからのインターンシップ生 2 名の継続のみで，新規受入れはなかった）。

・ 研究所ホームページをリニューアルし，とくに英文の強化を継続して行った。

・ 海外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，2021 年度は COVID-19 感染拡大の影響で実施実績はなかった。

5-12　URA による研究 DX を推進するデータの整備・構築　MIRAI-DX プロジェクト（文部科学省）

研究大学コンソーシアムに参画する国立大学等 36 機関では，自然科学研究機構が事務局となり，研究大学強化促進事業 2020 年度補正予算により URA（ユニバーシティ・リサーチ・アドミニストレーター）の活動に資するデジタルトランスフォーメーション（DX）プラットフォームの構築を行った。URA の研究支援活動の一部を DX 化することで共同研究ネットワークの構築を推進し異分野人材交流を活発化することが狙いである。

これからの科学研究のあり方の一つとして，研究者個人の意思や能力だけに頼るのではなく，個々の研究者の強み・特徴をデータベース化することで大学・研究機関の組織に研究力情報を集約し，データベース情報に基づいて，個々の研究者では案出し得ないような共同研究モデルを創出することが考えられる。研究者個人や研究機関単独の取り組みでは研究グループの組織編成･分野交流に限界があったところを，本事業プロジェクトでは全国大学の URA が仲介･伴走することで，組織の枠を越え異分野融合・産学連携をなし，急激な世界の研究進展の潮流に乗り社会課題の迅速な解決に貢献することを目指す。構築された研究者データの DX プラットフォームを活用し参加機関の URA が協働することで，国内の科学研究を縦横無尽に分野・機関を越えてつなぎ，共同研究を推進することを期待した取り組みである。

2021 年度は DX プラットフォーム完成前のため，URA による共同研究ネットワーク構築の人的試行を実施した。「ポストコロナ」をトップダウン研究テーマとして当該コンソーシアム参画機関からエントリー研究者を募り，共同研究マッチング活動を全国規模で展開した。

分子研からは３名の研究者に URA が伴走して共同研究マッチング活動に参加した。他機関研究者に伴走する 13 名の URA と連絡調整し，研究興味の一致しそうな研究者同士をつないだ。オンラインワークショップ，オンラインの個別研究打ち合わせ，さらにサイトビジットを開催し，共同研究の芽を探索した。共同研究の進展具合としては，資料･試料の授受による試算・試行実験を実施し，秘密保持覚書の研究者間取り交わしや研究費獲得のための申請準備開始に繋がった。

2022 年度には，完成した DX プラットフォームを活用し，人的試行で得られたノウハウを組み合わせた共同研究マッチングをパイロットフェーズとして行う予定である。

5-13　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，2021 年度は，「広がる化学系博士人材の未来」というタイトルで，2020 年度に引き続き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 4 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，2021 年度は 2020 年度に引き続き，COVID-19 感染の深刻な情況に鑑み，WEB による公開シンポジウムとして開催したところ，全国から約 200 名の参加者があった。

開催テーマ：「広がる化学系博士人材の未来」

開催日時：2021 年 6 月 8 日　13:20 ～ 17:00

プログラム：

開会挨拶　川合眞紀（分子科学研究所 所長）

報告，趣旨説明　茶谷直人（大阪大学 教授）

講演

「博士課程学生への支援の充実について」
奥野 真（文部科学省科学技術・学術政策局人材政策課長）

「化学分野における博士課程修了者の就職実績の内実」
西村君平（東北大学 特任講師）

「私の見た博士人材」
辻村達哉（共同通信社）

「博士が起業するという事――複合的な研究への取り組みを経て」
大田一男（コンフレックス（株））

総合討論　司会：北川尚美（東北大学 教授）

主催：日本学術会議化学委員会，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，公益社団法人 日本化学会戦略企画委員会

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」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による研究，分子研の共同利用の施設や設備の高度な利用を目指す，クロスアポイントメントによる研究人事，さらに，各研究領域の研究を発展的に展開することを目指すクロスアポイントメントによる研究を開始した。「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 36 機関の会員とともに研究を推進している。

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
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
2020.9. 〜 2021.9.	2021	271	52

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

このような新しい分子計測制御法を開発・利用していくためのセンターとして，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した。

以上のような方針で分子システムの計測解析に関する研究を遂行すること，及びそれを通じて我が国の関連研究コミュニティにおける人材育成に寄与することが本センターの主なミッションであるが，同時にここで開発された新しいメゾスコピック計測手法を共同研究に供することも重要な機能の一つである。各研究グループの協力研究やその他のチャネルの共同研究を通じてそれを実施するほか，適宜醸成された計測手法・技術に関するセミナー等を開催する。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。

繊細計測研究部門

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。また更に感度を向上させる試み，波長範囲を拡張する試みを行っている。

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た。その起源を解析する中で，光トラッピングに関する従来知られている機構では説明困難な部分が見いだされ，理論解析を進めている。

B-1) 学術論文

S. MATOBA, C. KANZAKI, K. YAMASHITA, T. KUSUKAWA, G. FUKUHARA, T. OKADA, T. NARUSHIMA, H. OKAMOTO and M. NUMATA, "Directional Supramolecular Polymerization in a Dynamic Microsolution: A Linearly Moving Polymer's End Striking Monomers," *J. Am. Chem. Soc.* **143(23)**, 8731–8746 (2021). DOI: 10.1021/jacs.1c02644

B-2) 国際会議のプロシーディングス

J. YAMANISHI, H.-Y. AHN, S. HASHIYADA and H. OKAMOTO, "Optical Gradient Force on Chiral Nanoparticles," *Proceedings of SPIE—The International Society for Optical Engineering* **11522**, 115220E (2020). DOI: 10.1117/12.2573513

J. YAMANISHI, H.-Y. AHN, S. HASHIYADA, K. T. NAM and H. OKAMOTO, "Optical Gradient Force on Gold Chiral Nanoparticles," *Proceedings of SPIE—The International Society for Optical Engineering* **11926**, 119260K (2021). DOI: 10.1117/12.2616111

H. OKAMOTO, "Chemical and Mechanical Dissymmetries in Chiral Plasmonic Interactions," *2021 IEEE Research and Applications of Photonics in Defense Conference (RAPID)*, **2021**, WE4.3 (2021). DOI: 10.1109/RAPID51799.2021.9521413

B-3) 総説，著書

岡本裕巳,「キラル光学効果（光学活性）の常識と常識はずれ　初心者による，初心者のための（Conventional and Unconventional View of Chiro-Optical Effects (Optical Activity)—for beginners, by a beginner）」, *Mol. Sci.* **15**, A0119 (2021). DOI: 10.3175/molsci.15.A0119 (in Japanese)

Y. CHEN, W. DU, Q. ZHANG, O. ÁVALOS-OVANDO, J. WU, Q.-H. XU, N. LIU, H. OKAMOTO, A. O. GOVOROV, Q. XIONG and C.-W. QIU, "Multidimensional Nanoscopic Chiroptics," *Nat. Rev. Phys.* **4**, 113–124 (2021). DOI: 10.1038/s42254-021-00391-6

岡本裕巳,「光圧における非線形光学現象」,「光圧　物質制御のための新しい光利用」, 石原　一, 芦田昌明　編, 朝倉書店, 138–146 (2021). ISBN: 978-4-254-13139-0

B-4) 招待講演（* 基調講演）

H. OKAMOTO, "Chiral Near-Field Properties of Plasmonic Nanomaterials: Imaging and Functions," The 11th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META 2021), Warsaw (Poland) (online), September 2021.*

H. OKAMOTO, "Chemical and Mechanical Dissymmetries in Chiral Plasmonic Interactions," The 2021 IEEE Research and Applications of Photonics in Defense Conference (RAPID), Florida (USA) (online), August 2021.

H. OKAMOTO, "Chemical and Mechanical Dissymmetries in Chiral Interaction of Plasmonic Materials," 11th Asian Photochemistry Conference (APC2021), Daejeon (Korea) (online), November 2021.

岡本裕巳,「キラルな光－物質相互作用の計測，化学効果，力学効果」, Molecular Chirality 2021, 東広島, 2021年11月.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA, K. Q. LE and T. NARUSHIMA, "Imaging chiral plasmons and chiral near-field interactions," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Honolulu (USA) (online), December 2021.

H. OKAMOTO, J. YAMANISHI, H.-Y. AHN, S. HASHIYADA and K. T. NAM, "Chiral field effects in optical manipulation," Pacifichem 2021, Honolulu (USA) (online), December 2021.

B-5) 特許出願

国際出願

2021-029181,「円偏光照射器，分析装置及び顕微鏡」, 岡本裕巳，成島哲也（自然科学研究機構）, 2022年.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

プラズモニック化学研究会副会長 (2020–).

学会の組織委員等

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

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

日本学術会議会員 (2020–)，同化学委員会幹事 (2020–)，同化学委員会物理化学・生物物理化学分科会委員長 (2020–)，同化学委員会分析化学分科会世話人 (2020–).

その他

自然科学研究機構教育研究評議員 (2016–).

日本表面真空学会出版委員 (2014–).（成島哲也）

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–2022年).

科研費基盤研究(A),「高精度円偏光二色性イメージングによるキラリティ時空間構造の可視化」, 岡本裕巳 (2021年–).

科研費挑戦的研究（萌芽),「キラルな光によるプラズモン物質の不斉誘起」，岡本裕巳 (2021年–).

新分野創成センター先端光科学研究分野共同研究プロジェクト,「キラル物質が示す円二色性のイメージング分析と微視的な起源構造解析」, 成島哲也 (2021年).

新分野創成センター先端光科学研究分野共同研究プロジェクト,「光誘起力顕微鏡によるナノスケールでの光学キラリティの観測」, 山西絢介 (2021年).

アストロバイオロジーセンタープロジェクト研究,「星間塵ナノ微粒子のナノ光科学に基づくホモキラリティ発現に関する研究」, 成島哲也 (2020年–2021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,「ナノスケールでの局所光学キラリティ顕微技術の確立と生体分子のキラリティ構造解析」, 山西絢介 (2021年).

科研費基盤研究(B),「スピン流駆動型アインシュタイン･ドハース効果の理論構築と実証実験研究」（代表;松尾　衛), 成島哲也（研究分担者）(2010年–2022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。円二色性顕微鏡の開発で企業との協力も視野に入れている。また物質および光のキラリティは磁性との相関においても興味が持たれ，ナノ光学の観点からこの方向への研究展開について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，まもなく成果を公表する予定である。

広帯域相関計測解析研究部門

熊　谷　　崇（准教授）（2021 年 4 月 1 日着任）

西田　純（助教）
伊藤　敦子（事務支援員）

A-1) 専門領域：物理化学，表面科学，近接場分光

A-2) 研究課題：超短光パルスの研究

a) 低温フォトン走査トンネル顕微鏡を応用したプラズモニックナノ接合における物理化学現象の素過程解明

b) 低温フォトン走査トンネル顕微鏡を応用した原子スケールの時空間極限における分光の開発

c) 超高速・超広帯域近接場光顕微鏡を応用した多次元・多変数ナノスケール分光の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) プラズモニックナノ接合では局在表面プラズモン共鳴の励起を介して強く局在化したナノスケールの光を発生させることができる。この強く局在化した光の性質とそれによって引き起こされる現象の微視的機構について低温フォトン走査トンネル顕微鏡を応用した極微分光によって調べている。

b) 低温フォトン走査トンネル顕微鏡のプラズモニック接合に発生する強く局在化した光を原子スケールで操る技術を開発し，極限空間における極微分光についての研究を行っている。さらに超短パルスレーザーと組み合わせることにより時空間極限における究極的な分光の開発を目指している。現在は低次元物質におけるフォノンダイナミクスを原子スケールで直接観測する研究に取り組んでいる。この研究課題は科研費帰国発展研究に採択されている内容である。

c) 原子間力顕微鏡に基づいた非開口型近接場光顕微分光を超高速・超広帯域のパルスレーザーと組み合わせた多次元・多変数ナノスケール分光の開発を行っている。この新しい先端計測によって重要な電子・光学材料の構造，物性そして機能を解明する研究へと展開していくことを目指している。これは分子科学研究所への着任に伴い新しく開始した研究課題であり，JST 創発的研究支援事業に採択されている内容である。

B-1) 学術論文

S. LIU, A. HAMMUD, M. WOLF and T. KUMAGAI, “Anti-Stokes Light Scattering Mediated by Electron Transfer Across a Biased Plasmonic Nanojunction,” *ACS Photonics* **8(9)**, 2610–2617 (2021). DOI: 10.1021/acsphotonics.1c00402.

S. LIU, A. HAMMUD, M. WOLF and T. KUMAGAI, “Atomic Point Contact Raman Spectroscopy of a Si(111)-7×7 Surface,” *Nano Lett.* **21(9)**, 4057–4061 (2021). DOI: 10.1021/acs.nanolett.1c00998

B. CIRERA, Y. LITMAN, C. LIN, A. AKKOUSH, A. HAMMUD, M. WOLF, M. ROSSI and T. KUMAGAI, “Charge Transfer-Mediated Dramatic Enhancement of Raman Scattering upon Molecular Point Contact Formation,” *Nano Lett.* **22(6)**, 2170–2176 (2022). DOI: 10.1021/acs.nanolett.1c02626

B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. MÜLLER, N. MARTÍN SABANÉS, F. SCHULZ, F. KRECINIC, T. KUMAGAI, T. KAMPFRATH and M. WOLF, "Quantitative Sampling of Femtosecond THz Voltage Pulses and Hot Electron Dynamics in an STM Junction," *CLEO: QELS–Fundamental Science*, FTh4L.4 (2021). DOI: 10.1364/CLEO_QELS.2021.FTh4L.4

B-4) 招待講演

熊谷　崇,「原子スケールの光による分光に向けて」, ナノプローブテクノロジー第 167 委員会第 97 回研究会, オンライン開催, 2021 年 4 月.

熊谷　崇, "Direct observation of plasmon-enhanced single-molecule tautomerization Session: Electron- and Photon-Driven Chemical Reactions at Surfaces," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Honolulu (U. S. A.) (online), 2021 年 12 月.

熊谷　崇, "Atomic-Scale Optical Spectroscopy in Plasmonic Scanning Tunneling Microscope Junctions," The 9th International Symposium on Surface Science (ISSS-9), オンライン開催, 2021 年 12 月.

熊谷　崇,「原子スケールの極微分光」, 第 15 回日本化学連合シンポジウム「持続可能な社会構築のための見分ける化学，分ける化学」, オンライン開催, 2022 年 3 月.

熊谷　崇,「原子スケールの極微分光」, 物性研究所短期研究会「機能的走査プローブ顕微鏡の新展開」, オンライン開催, 2022 年 3 月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

1st IMS-FHI Symposium（オンライン開催）(2021/7/12-13)「Emerging Techniques of Scanning Probe Microscopy」, Organizer (Chair) (2021).

B-8) 大学での講義，客員

北海道大学, 客員准教授, 2020 年 4 月– .

B-10) 競争的資金

科研費国際共同研究加速基金（帰国発展研究),「時間分解探針増強ラマン分光による時空間極限における原子層物質のフォノン計測」, 熊谷　崇 (2021 年–2023 年).

科学技術振興機構創発的研究支援事業,「時空間極限における革新的光科学の創出」, 熊谷　崇 (2021 年–2027 年).

C) 研究活動の課題と展望

分子科学研究所の着任に伴い新しく開始した研究課題，「低温フォトン走査トンネル顕微鏡を応用した原子スケールの時空間極限における分光の開発」および「超高速・超広帯域近接場原子間力顕微鏡を応用した多次元・多変数ナノスケール分光の開発」を推進していく。これらの研究課題は科研費帰国発展研究および JST 創発的研究支援事業に採択されており，加速的に研究を進められると期待している。走査プローブ顕微鏡を基軸とした極限計測技術を研

究室の柱として物理化学，分子科学，そしてナノ科学にまたがる学際領域の形成，革新的な光科学・光技術の創出を目指した基礎研究を展開していきたいと考えている。また，マックス・プランク協会フリッツ・ハーバー研究所（ベルリン，ドイツ）と 2021 年に締結した研究協力協定に基づいた国際的な共同研究や学術交流についても積極的に推進していきたいと考えている。

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），併任ＰＩが６名（斉藤教授，青野教授，加藤教授，飯野教授，古賀准教授，小林准教授）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。

2021 年度の特筆すべき研究成果として，ヘテロヘリセン誘導体のキラリティーと電子的性質に関する共同研究（山本グループ）が科学雑誌「*Journal of Physical Chemistry Letters*」誌に掲載された。その他，階層分子システム解析研究部門からは，概細胞のタンパク質品質管理機構に関する共同研究成果が「*Structure*」誌に（秋山グループ），主鎖構造「歪み」を考慮したタンパク質構造の人工設計に関する共同研究成果が「*Nature Communications*」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だすことが求められる。既に一部のグループ間で共同研究が進行中であるが，より多くのセンター構成員で共有できる新しい研究プロジェクトを練り上げていく必要がある。専門から少し離れた分野でのプロジェクト立案には人的交流が何よりも重要であるため，研究グループの居室を南実験棟の３階の１フロアに集中させ，一部をオープンスペースとして運用しつつ，科学的な議論や交流を活発に進めている。

その他，CIMoS セミナー，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）
鷲尾　みどり（技術支援員）
高家　マリ（技術支援員（派遣））
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) シアノバクテリアをモデル系とした概日時計研究に取り組み，独自性の高い数々の研究（Furuike *et al*., *bioRxiv* doi: 10.1101/2021.08.30.457330, Furuike *et al., bioRxiv* doi: 10.1101/2021.08.20.457041, Ito-miwa *et al., Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **117**, 20926–20931 (2020); Mukaiyama *et al., Sci. Rep.* **8**, 8803 (2018); Abe *et al,. Science* **349**, 312–316 (2015); Murayama *et al., EMBO J.* **30**, 68–78 (2011); Akiyama *et al., Mol. Cell* **29**, 703–716 (2008)）や国際基調講演（ELSI Symposium 2020; V-WCC 2019）をとおして，「概日時計システムの周波数特性が，ごく限られた種類の構成因子にエンコードされている」という新概念を提示した（日本学術振興会賞 (2016)；文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2008)；日本生物物理学会若手奨励賞 (2007)；2006 SAS Young Scientist Prize from IUCr）。

その間, 複数の研究プロジェクト（さきがけ研究［2005 ～ 2008 年度], 若手研究 (A)［2010 ～ 2012 年度], 基盤研究 (B)［2013 ～ 2015 年度］，基盤研究 (S)［2017 ～ 2021］等）で代表者を務め，国内外の研究コミュニティの拡大に尽力するとともに（S. Akiyama, Circadian Rhythms in Bacteria and Microbiomes, 137–145 (2021); S. Akiyama, *Biophys. Rev.* **12**, 237–243 (2020); Mukaiayma *et al*., *Biol. Rhythms* 29–34 (2019); Akiyama *et al*., *Biol. Clocks*, 73–77 (2017); S. Akiyama, *Cell. Mol. Life. Sci.* **69**, 2147–2160 (2012)），直近では以下に詳述する波及効果の高い成果（４件）を輩出してきた。

一つ目は，KaiC に隠されたアロステリック制御の解明である（Furuike *et al*., *bioRxiv* doi: 10.1101/2021.08.30.457330）。複雑多様なアロステリック制御は細胞機能に振動現象をもたらす非線形性の源であるため，時計タンパク質のアロステリック構造転移を解明するための努力が続けられてきた。しかし，これまでに報告されている KaiC の全構造は，リン酸化修飾の有無に依らず構造が同一であり, 概日リズムを駆動するアロステリーについては理解が進んでいなかった。我々は，S431 と T432 のリン酸化修飾サイクルを網羅する４つの異なる状態の KaiC を結晶化し，検出された複雑多様なアロステリーを詳細に分析することで，KaiC の振動性に必須となる最小単位のアロステリーを特定した。

二つ目は，KaiC の温度補償性に関する成果である（Furuike *et al.*, *bioRxiv* doi: 10.1101/2021.08.20.457041）。時計タンパク質は，酵素活性を生理的な温度範囲で一定に保つ温度補償能を有する。他方，酵素を構成するアミノ酸は高温でより頻繁に揺らぎ，それに伴って酵素活性が上昇する傾向が一般的にみられる。よって，温度補償能を有する概日時計タンパク質のダイナミクスが特殊な制御を受けている可能性があるが，それを実験的に証明した例は皆無である。我々は, 温度補償型 ATPase である KaiC のダイナミクスに及ぼす温度の影響を中性子準弾性散乱法で精査した。その結果，KaiC が揺らぎを利用しつつ，高温下で C1-ATPase 活性が上昇しないように自律制御していることが明らかとなった。酵素が自らの活性を高めるためだけでなく，恒常性を実現する自律的手段として揺らぎを積極的に利用していることを示す独自性の高い研究成果である。

三つ目は, 超短周期（0.6 d = 15 h）から超長周期（6.6 d = 158 h）にわたる多様なリズムを表出せしめる同一サイト（Y402）点変異群の発見である（Ito-miwa *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **117**, 20926–20931 (2020)）。温度補償された 600% に及ぶ周期長変化を説明する発振モデルは皆無であり，本発見を機に，既存モデルの根本的な書き換えを迫られるであろう。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ている。

四つ目は，概日時計の絶対的な遅さの起源解明である（Abe *et al,. Science* **349**, 312–316 (2015)）。概日時計は，ゆっくりとした秩序ある細胞ダイナミクスを生み出すが，高速で動く生体高分子で構成されているため，全体としての遅さの原因は不明であった。我々は，周期を規定する C1-ATPase の遅さが，加水分解に用いられる水分子の隔離や，高い活性化エネルギーを有するペプチド異性化に起因していることを解明した。本成果は国内外の化学誌（ChemistryWorld June 2015, 現代化学 2015）, 専門家評価コメント（http://smc-japan.org/?p=4072）, 国内の新聞記事（毎日新聞，日本経済新聞）等で取り上げられ，学術的な新規性が世界的に高く評価されている。

それ以外にも，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）との連携活動として，同大学農学部の吉村崇教授らとの共同研究を実施して成果を取りまとめた（Maruyama *et al*., *bioRxiv* doi: 10.1101/2021.09.15.460533）。

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（M. Okumura *et al. Structure*）。

B-1) 学術論文

M. OKUMURA, S. KANEMURA, M. MATSUSAKI, M. KINOSHITA, T. SAIO, D. ITO, C. HIRAYAMA, H. KUMETA, M. WATABE, Y. AMAGAI, Y.-H. LEE, S. AKIYAMA and K. INABA, "A Unique Leucine-Valine Adhesive Motif Supports Structure and Function of Protein Disulfide Isomerase P5 via Dimerization," *Structure* **29(12)**, 1357–1370.e6 (2021). DOI: 10.1016/j.str.2021.03.016

M. MARUYAMA, Y. FURUKAWA, M. KINOSHITA, A. MUKAIYAMA, S. AKIYAMA and T. YOSHIMURA, "Adenylate Kinase 1 Overexpression Increases Locomotor Activity in Medaka Fish," *PLoS One* **17(1)**, e0257967 (10 pages) (2022). DOI: 10.1371/journal.pone.0257967

B-3) 総説，著書

S. AKIYAMA and H. KAMIKUBO, “Beyond Multi-Disciplinary and Cross-Scale Analyses of the Cyanobacterial Circadian Clock System,” *Biophysics and Physicobiology* **18**, 267–268 (2021). DOI: 10.2142/biophysico.bppb-v18.031

S. AKIYAMA, “Reasons for Seeking Information on the Molecular Structure and Dynamics of Circadian Clock Components in Cyanobacteria,” in *Circadian Rhythms in Bacteria and Microbiomes*, 137–145 (2021). DOI: 10.1007/978-3-030-72158-9_8

B-4) 招待講演（* 基調講演）

秋山修志,「KaiC 反応サイクルの複雑多様性と単純化」, 2021 年度 iBIX-JAXA-KEK 物構研 -QST 合同タンパク質研究会, オンライン開催, 2022 年 2 月.

S. AKIYAMA, “Screening and Characterization of Temperature-dependent Circadian Clock Mutants in Cyanobacteria,” 5th Asian Forum on Chronobiology, Kaifeng (China) (online/hybrid), July 2021.*

秋山修志,「Cyanobacterial circadian clock system through the chemistry of rhythm, structure, and evolutionary diversity」, バイオ単分子研究会, オンライン開催, March 2021.*

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 (2019–2021.6).

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–).

学会誌編集委員

Biophysics and Physicobiology, Editorial Board Members (2021–).

B-10) 競争的資金

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　慎太朗（特別協力研究員）
三本　斉也（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) αβ 型タンパク質構造のデザイン；これまでに２次構造パターンと３次構造モチーフの整合性に関するルールを発見し，これらのルールを用いることで 100 残基以下の様々な形状の αβ 型タンパク質構造のデザインに成功してきた。これらのルールがより大きなサイズのタンパク質デザインにも適用可能かどうか検証するため，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 αβ 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) 回転対称多量体タンパク質のデザイン；多くのタンパク質は３次構造を形成した後に４次構造を形成することで機能を発現する。これまでにデザイン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ることで，多様な形状の新規回転対称多量体をデザインする技術を開発する。これまでに開発した技術を用いてデザインしたタンパク質のひとつが，6 量体を形成していることを示唆する結果を得ている。

c) ヘム結合タンパク質のデザイン；これまでにデザイン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う。特に，ヘム結合タンパク質を例として研究を行っている。これまでにデザインしたタンパク質を，3 量体のコイルドコイルを形成する α ヘリックスの NC 末端それぞれに連結させることで，連結したドメイン間に小分子結合サイトが形成されるか計算機シミュレーションを行い調べている。

d) ATP 結合タンパク質のゼロからのデザイン；自然界には ATP を加水分解して動的機能を発現するタンパク質が存在

する。タンパク質が ATP を加水分解するためのミニマムな装置を明らかにすることを目的とし，まず ATP を結合するタンパク質のゼロからのデザインを行った。これまでに発見した３つのルールとヌクレオチド結合に重要とされる P-loop モチーフを用いることで，計算機上で ATP 結合タンパク質のデザインを行った。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) 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た。また，V-ATPase の非触媒活性部位に，ヌクレオチド結合サイトを設計することで，V-ATPase に新規アロステリック機構を付与し，V-ATPase の回転を加速することに成功した。

f) 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, 重要な創薬ターゲットである GPCR のうちアデノシン A_{2A} 受容体について，状態選択的に安定化することに成功した。また，PET 製品のバイオリサイクルに重要な PET 分解酵素の安定化に成功した。

g) α ヘリカルタンパク質構造のゼロからのデザイン；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し，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 18 種を明らかにした。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。これらのうち５つの異なる形状の α ヘリカルタンパク質をデザインしたところ，NMR で決定された構造は計算機モデルとよく一致していた。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 300 種類，配列 7350 種類の大量のデザイン配列を作り出した。

h) 自然界に存在しないトポロジーのデザイン；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を形成することが困難なために存在していないのか，それとも偶然生物が見つけ出していないだけなのか，これらの謎に迫った。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。次に，これら新規トポロジーを持つタンパク質のデザインを行ったところ，8 個全てのトポロジーについてデザインに成功した。これらの結果は，8 個の新規トポロジーは偶然生物が見つけ出していなかったことを示す。

B-1) 学術論文

N. KOGA, R. KOGA, G. LIU, J. CASTELLANOS, G. T. MONTELIONE and D. BAKER, “Role of Backbone Strain in De Novo Design of Complex α/β Protein Structures,” *Nat. Commun.* **12(1)**, 3921 (12 pages) (2021). DOI: 10.1038/s41467-021-24050-7

A. NAKAMURA, N. KOBAYASHI, N. KOGA and R. IINO, “Positive Charge Introduction on the Surface of Thermostabilized PET Hydrolase Facilitates PET Binding and Degradation,” *ACS Catal.* **11(14)**, 8550–8564 (2021). DOI: 10.1021/acscatal.1c01204

K. SAKUMA, N. KOBAYASHI, T. SUGIKI, T. NAGASHIMA, T. FUJIWARA, K. SUZUKI, N. KOBAYASHI, T. MURATA, T. KOSUGI, R. KOGA and N. KOGA, "Design of Complicated All-α Protein Structures," *bioRxiv* 2021.07.14.449347 (2021). DOI: 10.1101/2021.07.14.449347

S. MINAMI, N. KOBAYASHI, T. SUGIKI, T. NAGASHIMA, T. FUJIWARA, R. KOGA, G. CHIKENJI and N. KOGA, "Exploration of Novel αβ-Protein Folds through De Novo Design," *bioRxiv* 2021.08.06.455475 (2021). DOI: 10.1101/2021.08.06.455475

H. MURATA, H. IMAKAWA, N. KOGA and G. CHIKENJI, "The Register Shift Rules for βαβ-Motifs for De Novo Protein Design," *PloS One* **16(8)**, e0256895 (24 pages) (2021). DOI: 10.1371/journal.pone.0256895

M. MITSUMOTO, K. SUGAYA, K. KAZAMA, R. NAKANO, T. KOSUGI, T. MURATA and N. KOGA, "State-Targeting Stabilization of Adenosine A_{2A} Receptor by Fusing a Custom-Made De Novo Designed α-Helical Protein," *Int. J. Mol. Sci.* **22(23)**, 12906 (13 pages) (2021). DOI: 10.3390/ijms222312906

B-3) 総説，著書

古賀理恵，古賀信康,「タンパク質の合理設計技術開発」, *化学と工業*, **74(8)**, 576–587 (2021).

B-4) 招待講演

古賀信康,「合理設計による新規タンパク質配列空間の探索」, Cell Biology Center Colloquium, 東京工業大学, オンライン開催, 2021年10月.

古賀信康,「Exploration of novel protein structures by de novo design」, OIST Mini Symposium "New Protein by Evolution and Engineering," オンライン開催, 2021年11月.

古賀信康,「自然に観測されないトポロジーを持つタンパク質の人工設計」, 第4回ExCELLS シンポジウム, オンライン開催, 2021年12月.

古賀信康,「整合性原理と新規タンパク質デザイン」, 自然科学研究機構計算科学研究センタースーパーコンピュータワークショップ2021「生体分子の構造・機能・デザインの計算科学」, オンライン開催, 2022年1月.

古賀信康,「創って理解する　生命現象をつかさどる分子「タンパク質」」, 第33回自然科学研究機構シンポジウム「宇宙と，分子と，私たち」, オンライン開催, 2022年3月.

B-6) 受賞，表彰

小杉貴洋, 日本蛋白質科学会若手奨励賞優秀賞 (2021).

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 (2015–2022).

学会誌編集委員

生物物理学会誌2022年度編集委員 (2022–).

B-8) 大学での講義，客員

東京大学大学院, 集中講義「タンパク質分子の基礎から合理設計まで」, 2021年10月25日–26日.

B-9) 学位授与

三本斉也,「State-selective stabilization of adenosine A2A receptor by de novo design of protein structures」, 2022年3月, 博士（理学）.

B-10) 競争的資金

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,「人工設計タンパク質を多量体化することでヘム結合部位を創る」, 小杉貴洋 (2021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,「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).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト,「タンパク質機能制御技術を用いた細胞生物学の創出」, 小杉貴洋 (2021年–2022年).

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).

B-11) 産学連携

キリンホールディングス（株),「PET分解酵素の開発」, 古賀信康，飯野亮太，中村彰彦 (2022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，これらの技術を用いて機能タンパク質を設計するとともに，設計したタンパク質構造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。

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) 超高速ラマン分光による機能性複雑分子の構造・ダイナミクスの研究

b) 極限時間分解分光計測のための先端光源開発

c) 電子状態間遷移を生き残る振動コヒーレンスの起源の解明

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こと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。今年度は蛍光タンパク質の発光特性を決定づけるフェムト秒構造ダイナミクスについて報告した。LSSmOrange はオレンジ色の蛍光を発する，マルチカラーバイオイメージングに広く用いられる蛍光タンパク質である。LSSmOrange の蛍光は発色団が励起状態で起こす超高速プロトン移動反応に由来するが，そのダイナミクスは複数の時定数を含むなど極めて複雑であり，より高い機能を有する蛍光タンパク質創製のためにその機構の解明が望まれていた。我々は時間分解インパルシブ誘導ラマン分光法を用いフェムト秒スケールで起こる構造変化を追跡し，この複数の時定数が *trans* と *cis*，２つの異なる発色団の異性体に由来することを突き止め，この構造異性によってプロトン移動の速度が一桁も異なることを明らかにした。得られた知見はより明るい蛍光タンパク質のデザインに重要な指針を与えると期待される。

b) 化学反応の本質的な理解には，反応に伴う分子の電子状態や構造の変化を可能な限り高い時間分解能をもって時々刻々観測することが必要とされる。我々は独自の極短パルス光源を開発し，これに基づく先端的な超高速分光・非線形分光法を駆使することで，従来の方法論では得られない化学反応の描像に迫ろうとしている。本年度は，極限的な時間分解能による超高速分光・非線形分光計測を実現するための，広帯域波長可変極短パルス光源の開発に取り組んだ。Yb レーザー再生増幅器をベースとし，自己位相変調，光パラメトリック増幅など，様々な非線形光学過程を用いる事で紫外～近赤外領域（300–1400 nm）において波長可変なサブ 10 fs パルス光の発生に成功した。また，最短パルスとして近紫外－近赤外領域に渡るサブ 2 サイクル（~4.5 fs）パルスを得た。今回開発した広帯域波長可変極短パルス光源を用いることで，今後多様な分子系の超高速ダイナミクスやコヒーレント現象の観測と解明が可能になると期待される。

c) 近年，視覚の初期過程をはじめとする様々な超高速光化学過程が，その前後で特定の分子振動の位相が保たれるコヒーレントな過程であることが提案されている。これら電子状態間遷移を生き残る振動コヒーレンスは，円錐公差を形成する振動モードなどに関する重要な知見を与えうることから大きな注目を集めるが，その真偽は明らかではない。我々は，振動コヒーレントな過程であると提案されている一重項励起子分裂過程に着目し，その実験的な検証に取り組んだ。TIPS-pentacene 薄膜の 10 fs 時間分解ポンプ－プローブ測定を行ったところ，80 fs で起こる一重項励起子分裂，さらに一重項励起子分裂により生じる三重項状態に由来すると思われる振動コヒーレンスが観測され，一重

項励起子分裂過程が振動コヒーレントな過程であることが示唆された。この観測をより詳細に検証すべく，三重項状態生成過程を選択的に追跡するフェムト秒時間分解振動分光測定を進めている。

B-1) 学術論文

P. KUMAR, E. FRON, H. HOSOI, H. KURAMOCHI, S. TAKEUCHI, H. MIZUNO and T. TAHARA, "Excited-State Proton Transfer Dynamics in LSSmOrange Studied by Time-Resolved Impulsive Stimulated Raman Spectroscopy," *J. Phys. Chem. Lett.* **12(31)**, 7466–7473 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpclett.1c01653

W. KIM, S. TAHARA, H. KURAMOCHI, S. TAKEUCHI, T. KIM, T. TAHARA and D. KIM, "Mode-Specific Vibrational Analysis of Exciton Delocalization and Structural Dynamics in Conjugated Oligomers," *Angew. Chem., Int. Ed.* **60(31)**, 16999–17008 (2021). DOI: 10.1002/anie.202102168

H. KURAMOCHI, S. TAKEUCHI, H. KAMIKUBO, M. KATAOKA and T. TAHARA, "Skeletal Structure of the Chromophore of Photoactive Yellow Protein in the Excited State Investigated by Ultraviolet Femtosecond Stimulated Raman Spectroscopy," *J. Phys. Chem. B* **125(23)**, 6154–6161 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcb.1c02828

C.-F. CHANG, H. KURAMOCHI, M. SINGH, R. ABE-YOSHIZUMI, T. TSUKUDA, H. KANDORI and T. TAHARA, "A Unified View on Varied Ultrafast Dynamics of the Primary Process in Microbial Rhodopsins," *Angew. Chem., Int. Ed.* **61(2)**, e202111930 (9 pages) (2022). DOI: 10.1002/anie.202111930

B-3) 総説，著書

H. KURAMOCHI and T. TAHARA, "Tracking Ultrafast Structural Dynamics by Time-Domain Raman Spectroscopy," *J. Am. Chem. Soc.* **143(26)**, 9699–9717 (2021). DOI: 10.1021/jacs.1c02545

倉持　光,「数サイクルパルスを用いた極限分光計測による複雑分子系のフェムト秒構造化学研究」, *Mol. Sci.* **15**, A0117 (12 pages) (2021).

倉持　光，竹内佐年，岩村宗高，田原太平,「フェムト秒時間分解インパルシブ誘導ラマン分光による光誘起結合生成ダイナミクスの実時間構造追跡」, *光学*, **51(1)**, 8–14 (2022).

B-4) 招待講演

倉持　光,「数サイクルパルスで観る機能性複雑分子の超高速電子・構造ダイナミクス」, 応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス（M&BE）分科会新分野開拓研究会 2021「有機材料・デバイス中のダイナミクスを探る計測技術の最前線」, オンライン開催, 2021年9月.

倉持　光,「数サイクルパルスを用いた極限分光計測による複雑分子系のフェムト秒構造化学研究」, 第15回分子科学討論会, オンライン開催, 2021年9月.

倉持　光,「Mapping Structural Dynamics in Photochemistry with Ultrafast Nonlinear Spectroscopy」, 日本化学会第102春季年会（2022）Asian International Symposium—Photochemistry—, オンライン開催, 2022年3月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第８回アジア分光学国際会議（8th Asian Spectroscopy Conference, ASC2022）運営委員 (2020–2022).

B-8) 大学での講義，客員

城西大学化学科,「化学科コロキウム」, 2021年7月28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).

科学技術振興機構創発的研究支援事業,「室温・溶液中における単一分子の極限時間分解分光」, 倉持　光 (2021年–2028年).

科研費基盤研究(B),「先端的コヒーレント振動分光による反応性ポテンシャルエネルギー曲面形状の実験的探究」, 倉持　光 (2021年–2024年).

科研費挑戦的研究（開拓),「揺らぐ単一光応答性タンパク質の超高速分光」, 倉持　光 (2021年–2024年).

科研費研究活動スタート支援,「過渡２次元赤外分光による光合成励起・電子移動経路マッピング」, 米田勇祐 (2021年–2023年).

C)　研究活動の課題と展望

凝縮相において分子の置かれる環境やその構造は熱的に揺らいでおり，それは個々の分子の性質・反応性に多大な影響を与えている。こうした揺動する分子の一つ一つの個性を反映した，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。これに対し，我々は単一分子検出感度を有する新しい超高速分光法と，それを実現するための新規極短パルス光源の開発に取り組んでおり，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を目指している。特に，タンパク質などの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）

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）
相澤　洋紀（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）
石川　裕子（事務支援員）

A-1) 専門領域：分子物性科学

A-2) 研究課題：

a) キラル有機超伝導体を用いたスピントロニクス
b) キラル分子によるスピン偏極の理論構築
c) 無機キ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) 有機キラル超伝導体である κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu(NCS)$_2$ 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。その結果，超伝導転移点付近で交流による励起を行うと，磁性電極上に偏極スピンが蓄積することが見出された。これは超伝導結晶のキラルな空間群に基づくスピン流生成が原因であると考えられるが，その大きさを見積もると，有機超伝導体が有するスピン軌道相互作用エネルギーから得られるスピン偏極の 1000 倍以上に達する巨大なスピン蓄積が生じていることが明らかとなった。（BEDT-TTF = Bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene）
b) CISS（Chirality-Induced Spin Selectivity）効果はキ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，分子振動と電子の運動との強い結合によって生み出されるのではないかと考え，動的ヤーンテラー効果による理論的説明を試みた。その結果，スピン軌道相互作用が十分弱い場合においても，核と電子の並進・回転運動が同時に量子化されることによって，キラル分子を通過する電子に高いスピン偏極率が生み出される仕組みを提案することに成功した。
c) CISS 効果は有機分子に限定されるものではなく，キ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。我々はこれまで一軸性のキラル金属である $CrNb_3S_6$ 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。本年度は $TaSi_2$ や $NbSi_2$ などの新たな無機キラル材料を，微細加工でマイクロストリッ

プに加工した上でタングステン電極を貼り付け，このサンプルに電流を通じることによって CISS 効果の発現を試みた。その結果，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，スピン励起用電極とスピン検出用電極を空間的に分離することによって非局所測定を行い，CISS 効果によるスピン伝達距離が非常に長いことを見出した。

B-1) 学術論文

Y. KAWASUGI, H. MASUDA, M. UEBE, H. M. YAMAMOTO, R. KATO, Y. NISHIO and N. TAJIMA, "Pressure-Induced Phase Switching of Shubnikov-de Haas Oscillations in the Molecular Dirac Fermion System α-$(BETS)_2I_3$," *Phys. Rev. B* **103(20)**, 205140 (6 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.103.205140

Y. KAWASUGI, H. MASUDA, J. PU, T. TAKENOBU, H. M. YAMAMOTO, R. KATO and N. TAJIMA, "Electric Double Layer Doping of Charge-Ordered Insulators α-$(BEDT\text{-}TTF)_2I_3$ and α-$(BETS)_2I_3$," *Crystals* **11(7)**, 791 (10 pages) (2021). DOI: 10.3390/cryst11070791

F. POP, C. MEZIERE, M. ALLAIN, P. AUBAN-SENZIER, N. TAJIMA, D. HIROBE, H. M. YAMAMOTO, E. CANADELL and N. AVARVARI, "Unusual Stoichiometry, Band Structure and Band Filling in Conducting Enantiopure Radical Cation Salts of TM-BEDT-TTF Showing Helical Packing of the Donors," *J. Mater. Chem. C* **9(33)**, 10777–10786 (2021). DOI: 10.1039/D1TC01112J

D. SAKAMAKI, S. TANAKA, K. TANAKA, M. TAKINO, M. GON, K. TANAKA, T. HIROSE, D. HIROBE, H. M. YAMAMOTO and H. FUJIWARA, "Double Heterohelicenes Composed of Benzo[*b*]- And Dibenzo[*b*,*i*]phenoxazine: A Comprehensive Comparison of Their Electronic and Chiroptical Properties," *J. Phys. Chem. Lett.* **12(38)**, 9283–9292 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpclett.1c02896

K. SHIOTA, A. INUI, Y. HOSAKA, R. AMANO, Y. ONUKI, M. HEDO, T. NAKAMA, D. HIROBE, J. OHE, J. KISHINE, H. M. YAMAMOTO, H. SHISHIDO and Y. TOGAWA, "Chirality-Induced Spin Polarization over Macroscopic Distances in Chiral Disilicide Crystals," *Phys. Rev. Lett.* **127(12)**, 126602 (5 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevLett.127.126602

B-3) 総説，著書

須田理行，山本浩史,「光応答性キラル分子モーターを利用したスピンフィルター」, *日本磁気学会誌まぐね* **16(2)**, 81–85 (2021).

Y. KAWASUGI and H. M. YAMAMOTO, "Simultaneous Control of Bandfilling and Bandwidth in Electric Double-Layer Transistor Based on Organic Mott Insulator κ-$(BEDT\text{-}TTF)_2Cu[N(CN)_2]Cl$," *Crystals* **12(1)**, 42 (15 pages) (2022). DOI: 10.3390/cryst12010042

H. M. YAMAMOTO, "Phase-Transition Devices Based on Organic Mott Insulators," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **94(10)**, 2505–2539 (2021). DOI: 10.1246/bcsj.20210256

山本浩史,「『本当の』有機超伝導トランジスタができるまで」, *化学と工業*, **74(5)**, 364 (2021).

B-4) 招待講演（* 基調講演）

H. M. YAMAMOTO, "Flexible Electronics for Organic Strongly Correlated Electron Systems," MRM2021, Yokohama (Japan), December 2021.* (**Keynote Speech**)

H. M. YAMAMOTO, “Spin Selectivity in Chiral Materials,” SECRETS kickoff meeting, Angers (France), October 2021.

山本浩史,「有機超伝導トランジスタとモット転移」, WPI-MANA Virtual City of Workshops, Online, November 2021.

B-5) 特許出願

特願 2021-083466,「スピン偏極電流を生成する導電性構造体，それを用いた電極及び方法」, 須田理行，山本浩史（自然科学研究機構）, 2021年.

B-6) 受賞，表彰

廣部大地，山本浩史（実施機関担当者）, 文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム令和３年度「秀でた利用成果」優秀賞（ユーザー氏名:乾　皓人，青木瑠也，塩田航平，高阪勇輔，宍戸寛明，大江純一郎，岸根順一郎，戸川欣彦）(2022).

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 (2018–)，幹事 (2020–)，顕彰委員長 (2020–).

学会の組織委員等

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

日本学術振興会世界トップレベル研究拠点プログラムメールレビュア (2021).

その他

凝縮系科学賞審査委員 (2019–).

森野基金推薦委員 (2021–).

B-8) 大学での講義，客員

神戸大学理学研究科,「無機化学特論A」, 2021年 8月.

B-10) 競争的資金

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「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).

科研費基盤研究(B),「電流駆動された磁気スキルミオン系における新奇非平衡相の開拓」, 佐藤拓朗 (2020年–2022年).

大幸財団 2021年度第 31回自然科学系学術研究助成,「精密電流揺らぎ測定を用いたキラル有機分子における巨大スピン偏極伝導機構の微視的理解と制御」, 佐藤拓朗 (2021年–2023年).

科研費基盤研究(B),「カイラリティが誘導するフォノン・スピン・フォトン交差結合の理論」（代表；岸根順一郎), 山本浩史（研究分担者）(2021年–2024年).

B-11) 産学連携

（株）島津製作所,「小型検出器に関わる要求仕様の確認と，試作機による評価」, 山本浩史 (2022 年).

C) 研究活動の課題と展望

キラリティによるスピン流生成は，近年益々注目されるようになっている。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，スピン軌道相互作用の小さい有機分子においても何らかの増強作用が働くことによって，巨大なスピン偏極応答が生じうるということが明らかとなってきた。このようなCISS 効果特有のメカニズム解明を進めると同時に，様々な外場によるスピン流の制御に取り組むなど，より広い視点での展開を実現していきたい。

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

斉　藤　真　司（教授）（2005 年 10 月 1 日着任）

甲田　信一（助教）
松村　祥宏（学振特別研究員）
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) 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
b) 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
c) 凝縮系反応に関する理論研究：遅い揺らぎの中で進む構造変化・反応の一分子解析
d) 凝縮系動力学に関する理論研究：水の構造変化ダイナミクス

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 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。周期決定に重要な KaiB-KaiC 複合体形成は，ATP 加水分解により生じる ADP の C1 ドメインへの結合により起き，逆反応である ADP/ATP 交換の阻害により複合体形成が促進されることが知られている。KaiC の 6 量体構造に関連し，6 つの KaiB モノマーが協調的に C1 に結合し，C1 が 6 個の ADP を結合した時に C1 の結合可能構造がとくに安定化するモデルを提案した。
b) 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，LHCII 中の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。溶液中のクロロフィルの励起エネルギーを適切に記述する電子状態計算に基づき，分子動力学計算に用いる LHCII 中のクロロフィル分子の基底状態の分子パラメータを決定した。現在，LHCII 中のクロロフィル分子の励起状態に対する分子パラメータの開発を進めている。
c) 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し，水溶液中の BPTI タンパク質の超長時間の分子動力学データを利用し，構造変化速度の揺らぎを解析した。
d) 凝縮系の反応・構造変化に関して，過冷却水の構造変化ダイナミクスの解析も進めている。その結果，過冷却水において，再生過程で記述されるジャンプ運動的な局所的構造変化が稀に起こることを見出した。さらに，構造変化の起源を解析し，構造変化の起こる遥か前から周囲の構造が変化し始めていることも明らかにした。

B-1) 学術論文

H. NAKAMURA, H. MIYANISHI, T. YASUNAGA, S. FUJIWARA, T. MIZUGUCHI, A. NAKATA, T. MIYAZAKI, T. OTSUKA, T. KENMOTSU, Y. HATANO and S. SAITO, "Molecular Dynamics Study on DNA Damage by Tritium Disintegration," *Jpn. J. Appl. Phys.* **59**, SAAE01 (5 pages) (2020). DOI: 10.7567/1347-4065/ab460d

M. MAURYA, A. K. METYA, J. K. SINGH and S. SAITO, "Effects of Interfaces on Structure and Dynamics of Water Droplets on a Graphene Surface: A Molecular Dynamics Study," *J. Chem. Phys.* **154**, 164704 (12 pages) (2021). DOI: 10.1063/5.0046817

Y. MATSUMURA and S. SAITO, "Microscopic Insights into Dynamic Disorder in the Isomerization Dynamics of the Protein BPTI," *J. Chem. Phys.* **154**, 224113 (11 pages) (2021). DOI: 10.1063/5.0055152

H. LI, S. FUJIWARA, H. NAKAMURA, T. MIZUGUCHI, A. NAKATA, T. MIYAZAKI and S. SAITO, "Structural Change of Damaged Polyethylene by Beta-Decay of Substituted Tritium Using Reactive Force Field," *Jpn. J. Appl. Phys.* **60**, SAAB06 (7 pages) (2021). DOI: 10.35848/1347-4065/abbdc8

S.-I. KODA and S. SAITO, "Multimeric Structure Enables the Acceleration of KaiB-KaiC Complex Formation Induced by ADP/ATP Exchange Inhibition," *PLoS Comput. Biol.* **18**, e1009243 (24 pages) (2022). DOI: 10.1371/journal.pcbi.1009243

Y.-W. KUO, P.-H. TANG, H. WANG, T.-M. WU and S. SAITO, "Tetrahedral Structure of Supercooled Water at Ambient Pressure and Its Influence on Dynamic Relaxation: Comparative Study of Water Models," *J. Mol. Liq.* **341**, 117269 (2021). DOI: 10.1016/j.molliq.2021.117269

M. KALATHINGAL, T. SUMIKAMA, S. OIKI and S. SAITO, "Vectorial Insertion of a β-Helical Peptide into Membrane: A Theoretical Study on Polytheonamide B," *Biophys. J.* **120**, 4786–4797 (2021). DOI: 10.1016/j.bpj.2021.09.028

T. INAGAKI and S. SAITO, "Hybrid Monte Carlo Method with Potential Scaling for Sampling from the Canonical Multimodal Distribution and Imitating the Relaxation Process," *J. Chem. Phys.* **156**, 104111 (12 pages) (2022). DOI: 10.1063/5.0082378

Z. ZHU, M. HIGASHI and S. SAITO, "Excited States of Chlorophyll *a* and *b* in Solution by Time-Dependent Density Functional Theory," *J. Chem. Phys.* **156**, 124111 (13 pages) (2022). DOI: 10.1063/5.0083395

B-3) 総説，著書

I. OHMINE and S. SAITO, "Dynamical Behavior of Water; Fluctuation, Reactions and Phase Transitions," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **94**, 2575–2601 (2021). DOI: 10.1246/bcsj.20210269

B-4) 招待講演

斉藤真司,「サイト依存ゆらぎによるFMOタンパク質の率的励起エネルギー移動」, 名古屋大学, 名古屋, October 2021.

S. SAITO, "Excitation energy transfer in the Fenna-Matthews-Olson protein optimized by site-dependent fluctuations," Symposium on Frontiers in quantum and classical molecular dynamics for complex systems, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

S. SAITO, "Molecular mechanism of acceleration and retardation of collective orientation relaxation of water molecules in aqueous solutions," Symposium on Structure and function of complex molecular clusters—challenges in theory and experiment, Pacifichem 2021, Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

S. SAITO, "Supercooled water: Structure, dynamics, thermodynamics, and glass transition," Symposium on Exploring complex and real systems using large-scale molecular dynamics calculations, Pacifichem 2021, Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

斉藤真司,「シミュレーションによる水の不思議の解明」, 階層と全体シンポジウム , 自然科学研究機構 , January 2022.

S. SAITO, "Structure, dynamics, and thermodynamics of supercooled water," SNU Leaders in Chemistry Symposium on Quantum and statistical fluctuations in molecular materials, Seoul National University, Seoul (Korea) (online), February 2022.

B-6) 受賞，表彰

斉藤真司, 第６回分子科学国際学術賞 (2021).

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, 2022–2026).

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).

Pacifichem2021 国内実行委員（Computational and Theoretical 分野） (2017–2022).

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

Department of Physics, Stockholm University, "Structure, dynamics, and thermodynamics of supercooled water," Stockholm (Sweden), 2022年3月18日.

名古屋大学学院大学理学研究科 ,「化学特別講義３」, 2021 年 10 月 26 日 –27 日

総合研究大学院大学物理科学研究科 ,「基礎物理化学 I」, 2021 年 7 月 6 日 –8 日 .

Indian Institute of Technology Kanpur, 客員教授 , 2020 年 4 月 –2024 年 3 月 .

B-9) 学位授与

KALATHINGAL, Mahroof,「Theoretical Studies on Structure, Dynamics, and Membrane Insertion of Polytheonamide B」, 2021 年 9 月 , 博士（理学）.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「高等植物の光捕集アンテナタンパク質における効率的励起エネルギー移動の理論研究」, 斉藤真司 (2021年度–2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

我々は，生体分子系の機能および凝縮系のダイナミクスに関する理論研究を進めている。生体分子系の機能に関する研究の１つとして，時計タンパク質KaiC の概日リズムの分子機構の解明に向け，微視的･巨視的解析を行っている。とくに，周期の決定に重要なKaiB とKaiC の複合体形成について数理モデルや分子動力学シミュレーションに基づく研究を進める。これらの結果をもとに，概日リズムに対する包括的な数理モデルを構築したい。また，生体分子系の機能に関する２つ目の研究として，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を目指している。とくに，現在，LHCII 中の色素の電子状態を適切に再現するパラメータの決定を進めている。今後，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していきたい。さらに，凝縮系のダイナミクスに関する研究として，生体分子や水を例に，構造変化がいかに起こるのかについて解析を進めている。生体分子に関しては，これまで進めてきた遅い構造変化ダイナミクス（動的乱れ）から機能の解析へと展開していく。また，水のダイナミクスに関しては，過冷却水の動力学過程の分子機構の解明を進める。

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））
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

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。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た。それをバルク Si に適応し，高電界下でのドリフト速度の飽和を再現するだけでなく，電子キャリアとホールキャリアのジュール熱発生に寄与するフォノンモードが異なることを明らかにした。固体の熱物性については，アモルファス材料における研究を進めている。アモルファスの構造の特徴と熱伝導率を結びつけるために，パーシステントホモロジー群を用いて，トポロジカルな特徴を定量的に抽出し，それと熱伝導率を結びつける回帰モデルが作成できることを示した。

b) 分子吸着が表面物性に様々な影響を与えることは，表面科学の分野では広く知られている。我々はこれまで，磁性を持った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，最もシンプルな磁性を持つ分子である NO が Au(110)-1×2 再構成表面に吸着した場合に生じる近藤効果について，実験グループとの共同研究を進めた。この系では bridge（安定）／ ontop（準安定）サイトに吸着した NO モノマー分子，３つの NO 分子が bridge-ontop-bridge サイトに吸着したトライマー構造や，その繰り返しからなる鎖状の構造が生じる。興味深いことに，ontop に吸着した NO 分子でのみ，局在スピンに由来した近藤効果によって生じていると考えられる微分コンダクタンス中のスペクトル構造が現れる。さらに，同じ ontop サイトに吸着した NO 分子でも，モノマーとトライマー内部の分子では，微分コンダクタンスのスペクトル形状が大きく異なる（前者ではディップ形状が現れるが，後者ではピーク形状が現れる）。密度汎関数理論による電子状態計算と数値くりこみ群による理論解析から，Au(110)-2×1 再構成表面上の NO 分子では２つの π^* 軌道の占有状態が吸着構造に対して非常に鋭敏に反応することがこれらのスペクトル形状の違いを生じていることが明らかになった。

B-1) 学術論文

T. ICHIKAWA, E. MINAMITANI, Y. SHIGESATO, M. KASHIWAGI and T. SHIGA, "How Mass Disorder Affects Heat Conduction in Ternary Amorphous Alloys," *AIP Adv.* **11(6)**, 65026 (7 pages) (2021). DOI: 10.1063/5.0051285

H. KOSHIDA, H. OKUYAMA, S. HATTA, T. ARUGA and E. MINAMITANI, "Effect of Local Geometry on Magnetic Property of Nitric Oxide on Au(110)-(1×2)," *Phys. Rev. B* **103(15)**, 155412 (8 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.103.155412

K. SHIMIZU, E. F. ARGUELLES, W. LI, Y. ANDO, E. MINAMITANI and S. WATANABE, "Phase Stability of Au-Li Binary Systems Studied Using Neural Network Potential," *Phys. Rev. B* **103(9)**, 94112 (10 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.103.094112

A. SHITADE and Y. ARAKI, "Magnetization Energy Current in the Axial Magnetic Effect," *Phys. Rev. B* **103(15)**, 155202 (8 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.103.155202

H. IMADA, M. IMAI-IMADA, K. MIWA, H. YAMANE, T. IWASA, Y. TANAKA, N. TORIUMI, K. KIMURA, N. YOKOSHI, A. MURANAKA, M. UCHIYAMA, T. TAKETSUGU, Y. K. KATO, H. ISHIHARA and Y. KIM, "Single-Molecule Laser Nanospectroscopy with Micro-Electron Volt Energy Resolution," *Science* **373(6550)**, 95–98 (2021). DOI: 10.1126/science.abg8790

E. MINAMITANI, "Ab Initio Analysis for the Initial Process of Joule Heating in Semiconductor," *Phys. Rev. B* **104**, 85202 (9 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.104.085202

B-3) 総説，著書

南谷英美,「電子フォノン相互作用の第一原理シミュレーション」,「マイクロ・熱工学の進展」, 第 1 編第 4 章第 2 節（部分を執筆）,（株）エヌ・ティー・エス (2021). ISBN: 978-4-86043-722-0 C3042

B-4) 招待講演

南谷英美,「ナノスケール磁性およびフォノンの計算物質科学」, ISSP Women's week 2021, オンライン開催, 2021 年 8 月.

南谷英美,「電子フォノン相互作用と発熱の理論」, 表面界面スペクトロスコピー 2021, オンライン開催, 2021 年 12 月.

E. MINAMITANI, "Atomic scale simulation of thermal transport and heat generation in semiconducting materials," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

E. MINAMITANI, "Ab-initio predictions of superconductivity in layered materials," Pacifichem 2021, Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

南谷英美,「ナノスケール磁性およびフォノンの計算物質科学研究」, 日本物理学会第 77 回年次大会, オンライン開催, 2022 年 3 月.（米沢賞受賞記念講演）

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ー推進委員会委員 (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 Vacuum Congress, Program subcommittee in Surface Science division (2021).

B-10) 競争的資金

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). (* 補助事業期間延長承認申請書提出済)

科研費基盤研究(B),「データサイエンス技術を活用した二次元アモルファス材料における熱物性の理論研究」, 南谷英美 (2021年度–2024年度).

科研費若手研究,「単一分子接合系における光・電子・スピンの超高速ダイナミクスに関する理論的研究」, 三輪邦之 (2021年度–2024年度).

科学技術振興機構さきがけ研究,「構造トポロジー情報を応用した靭やかな機械学習力場の構築」, 南谷英美 (2021年度–2024年度).

科研費基盤研究(B),「層状物質とその局所構造におけるフォノン関連物性の理論解析」(代表：渡邉　聡), 南谷英美(研究分担者) (2019年度–2022年度).

C)　研究活動の課題と展望

トポロジカルデータ解析を用いた, 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ている。実際に, パーシステントホモロジーの情報が物理量と相関を持つことが見えてきており, 乱れた複雑な系での物理現象に取り組む有望なテクニックであるという手応えを感じている。これまでは熱物性を主な対象としてきたが, 剛性率といった力学特性に対しても応用を広げていきたい。さらに, 機械学習ポテンシャルなどにこの技術を応用するためには, 異なった構造におけるパーシステントホモロジーのあいだの距離をどのように定義するか, その距離を用いて損失関数をどう設計するかの部分に工夫が必要である。近年, 画像認識の分野ではこの課題に対して最適輸送理論やWasserstein距離を用いた事例が報告されている。先行している分野での進展をキャッチアップして物性科学に応用していきたい。

理論分子科学第二研究部門

石　﨑　章　仁（教授）（2016 年 4 月 1 日着任）

三輪　邦之（助教）
藤橋　裕太（特任研究員）
坂本　想一（特任研究員）
JO, Ju-Yeon（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。

特に我々は，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的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。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，上記の理論で得られる分光信号の表式に現れる位相整合関数のスペクトル分布が信号解析の分野における sinc フィルタと同様の周波数フィルタとして機能することに着目し，高い時間分解能を維持しつつ周波数領域における高い選択性を得られることを明らかにした。

B-1) 学術論文

Y. FUJIHASHI and A. ISHIZAKI, “Achieving Two-Dimensional Optical Spectroscopy with Temporal and Spectral Resolution Using Quantum Entangled Three Photons,” *J. Chem. Phys.* **155(4)**, 44101 (13 pages) (2021). DOI: 10.1063/5.0056808

A. ISHIZAKI and G. R. FLEMING, “Insights into Photosynthetic Energy Transfer Gained from Free-Energy Structure: Coherent Transport, Incoherent Hopping, and Vibrational Assistance Revisited,” *J. Phys. Chem. B* **125**, 3286–3295 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcb.0c09847

B-4) 招待講演

A. ISHIZAKI, “Generation of pseudo-sunlight via quantum entangled photons and interaction with molecules,” #210 Quantum Coherence in Energy Transfer, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

A. ISHIZAKI, “Probing exciton dynamics with quantum entangled photons,” #201 Modeling exciton and charge dynamics in molecules and clusters toward optoelectronic applications, Pacifichem 2021, Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

石﨑章仁,「量子散逸系として見る光捕集系におけるダイナミクス」, 東京大学物性研究所短期研究会「分子性固体研究の拡がり：新物質と新現象」, 東京大学物性研究所, 柏, 2021年12月.

A. ISHIZAKI, “Probing excited-state dynamics with quantum entangled photons: Correspondence to coherent multidimensional spectroscopy,” 11th Asian Photochemistry Conference (APC2021), online, November 2021.

A. ISHIZAKI, “Investigating excited-state dynamics in molecules with quantum light,” Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (ASOMEA-X 2021), online, October 2021.

石﨑章仁,「量子科学で挑んだ光合成初期過程研究 2008年～ 2021年」, 量子生命科学会第３回大会受賞者特別講演, オンライン開催, 2021年9月.

A. ISHIZAKI, “Probing excited-state dynamics with quantum entangled photons: Correspondence to coherent multidimensional spectroscopy,” Telluride workshop, “Spatio-Temporal Dynamics of Exitons: Bridging the Gap Between Quantum Mechanics and Applications,” online, June 2021.

石﨑章仁,「量子科学の観点からみる複雑分子系におけるダイナミクス」, お茶の水女子大学2021年度第１回物理教室談話会, オンライン開催, 2021年5月.

石﨑章仁,「量子科学の観点からみる複雑分子系におけるダイナミクス」, 第８回分子性固体オンラインセミナー , オンライン開催, 2021年5月.

藤橋裕太,「量子科学技術に基づく複雑分子系における動的過程の理論的研究」, 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

石﨑章仁, 第１回量子生命科学会研究奨励賞 (2021).

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 学術委員会委員 (2019–2023).

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-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「量子分子計測と動力学解析の理論基盤」, 石﨑章仁 (2021年–2025年).

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).

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・電荷ダイナミッ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）
羽鳥　敦也（大学院生）
杉本　縁（事務支援員（派遣））

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) 白金錯体の結晶状態における凝集誘起リン光発光とその熱耐性の起源
b) 凝縮相銀ナノクラスターにおける近赤外リン光発光とその高い発光量子収率の起源
c) CAu_6 クラスターの単座配位子による非対称性導入：キラル構造の安定性および円二色性の理論解析
d) 強相関電子系の電子共鳴状態に関する理論解析
e) グラフェンに担持した白金サブナノクラスターの構造および酸素還元反応活性に関する理論解析
f) 酸化チタンによる NO の NH_3-SCR 光触媒反応の表面依存性

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 金属錯体結晶の凝集誘起発光（AIE）の起源を明らかにすることは，様々な光機能性材料を開発する上で重要な課題である。これまで数十年にわたり，AIE の発光機構および消光機構が研究されてきたが，未だ完全には解明されていない。本研究では，AIE 活性である白金錯体の結晶状態におけるリン光発光と消光の電子過程を，理論と実験に基づいて研究した。これらの錯体は，結晶状態で金属－リガンド間の電荷移動励起状態からのリン光発光を示すが，構造によって発光の熱耐性が異なる。結晶構造による構造緩和の制限から AIE 発現の機構を解明した。また熱耐性の特性が，S_0 状態と T_1 状態の最小エネルギー交差点（MECP）の位置と極めて良く相関することを示した。さらに，２つの理論モデルの結果を比較することで，AIE における Pt–Pt 相互作用の役割を明らかにした。
b) 銀ナノクラスターのピリジン溶液を光照射することにより，近赤外領域（770 nm）に強いリン光発光を示すことが実験で見出された。この近赤外領域の発光量子収率は 33% であり，金をドープした合金ナノクラスターでは 800 nm に発光がシフトし，その発光量子収率は 45% 以上を示す。これは金属ナノクラスターでは極めて大きな発光量子収率と言える。理論計算によって，銀ナノクラスターとピリジンの配位構造および電子状態を解析し，この発光には励起三重項状態が関与すること，光照射によってナノクラスターの電荷局在状態が誘起され，近赤外発光サイトが形成されることを明らかにした。
c) 配位子による金属クラスターの非対称性導入は，キラル転写の機構や構造安定性の観点で興味深い。CAu_6 クラスターは，炭素中心を金原子が囲む８面体の構造を有するが，本研究では，*N*- ヘテロカルベンの単座配位子によって，捻じれた構造のクラスターを生成し，キラル転写に初めて成功した。さらに，キラル分割を行い，溶液中でも安定であることを示し，X線構造解析を行った。理論解析では，キラル構造の安定性や，非対称な C–Au 結合および Au–Au 結合に関して詳細な解析を実施した。さらに，吸収スペクトルや円二色性スペクトルの解析を行い，高エネルギー

領域まで定量的な帰属を行った。

d) 共鳴状態は準安定状態であり，電子状態では準安定アニオン，多価イオン，内殻ホール状態などがある。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，強相関電子系である Be_3^- および Mg_3^- の過渡的アニオン状態を，CCSD(T)，SAC-CI，NEVPT2 法に基づく解析接続結合理論，および射影型 CAP/XMS-CASPT2 法によって解析した。これら２種類のクラスターの４つの電子共鳴状態を解析し，p–σ および p–π 状態であることを示した。共鳴幅は 1.0–1.5 eV と狭く，電子共鳴状態として十分観測できることを示した。さらに水分子との相互作用で過渡的アニオン状態の寿命が２オーダー長寿命になることを示した。

e) 燃料電池の負極には白金電極が用いられているが，酸素還元反応は Pt をナノ粒子化することにより活性化される。しかし，サイズ依存性や活性サイトに関する分子論的理解は十分ではない。本研究では，ガラス状炭素に担持した Pt サブナノクラスター（Pt_n, n = 3–9）が，汎用の Pt/C 電極よりも質量比活性が極めて高いことを見出し，理論解析を実施した。理論解析では，グラフェン上の Pt クラスター（Pt_n, n = 4–8）の安定構造を数種類提示し，XAFS スペクトルと比較することによって, Pt クラスターの吸着安定構造を決定した。さらに反応の活性点を部分状態密度から理論的に特定し，酸素還元反応のエネルギー・プロファイルを計算することによって，過電圧（overpotential）を理論的に明らかにした。

f) 最近，酸化チタンにおける NO の NH_3-SCR では，触媒性能に表面依存性があることが見出された。本研究では，酸化チタン (001) および (101) 表面における NO の NH_3-SCR 反応を，(001) 表面の高い性能の要因に焦点を当て，スラブモデル密度汎関数理論を用いて系統的に調査した。その結果，(001) 面では表面酸素の活性サイトが反応で重要な役割を果すことが示され，表面酸素が利用される Mars van Krevelen 機構が支持された。最も有利な経路では，(001) 面ではエネルギーバリアが 61 kJ/mol と低く，NH_3 の解離が律速段階となるが，(101) 面ではバリアは 156 kJ/mol と高く，NH_2NO の分解が律速となる。本結果は，(001) 面を持つ TiO_2 ナノシートが，(101) 面を持つ TiO_2 ナノ粒子よりも優れた触媒性能を示す実験結果に対応しており，その要因を明らかにした。

B-1) 学術論文

X.-L. PEI, P. ZHAO, H. UBE, Z. LEI, K. NAGATA, M. EHARA and M. SHIONOYA, “Asymmetric Twisting of C-Centered Octahedral Gold(I) Clusters by Chiral N-Heterocyclic Carbene Ligation,” *J. Am. Chem. Soc.* **144**, 2156–2163 (2022). DOI: 10.1021/jacs.1c10450

A. OHNUMA, K. TAKAHASHI, H. TSUNOYAMA, T. INOUE, P. ZHAO, A. VELLOTH, M. EHARA, N. ICHIKUNI, M. TABUCHI and A. NAKAJIMA, “Enhanced Oxygen Reduction Activity of Size-Selected Platinum Subnanocluster Catalysts: Pt_n (n = 3–9),” *Catal. Sci. Technol.* **12**, 1400–1407 (2022). (Back Cover). DOI: 10.1039/D1CY00573A

Y.-L. SHEN, P. ZHAO, J. JIN, J. HAN, C. LIU, Z. LIU, M. EHARA, Y.-P. XIE and X. LU, “A Comparative Study of $[Ag_{11}(iPrS)_9(dppb)_3]^{2+}$ and $[Ag_{15}S(^sBuS)_{12}(dppb)_3]^+$: Templating Effect on Structure and Photoluminescence,” *Dalton Trans.* **50**, 10561–10566 (2021).

P. ZHAO, M. EHARA, A. SATSUMA and S. SAKAKI, “Theoretical Study of the Propene Combustion Catalysis of Chromite Spinels: Reaction Mechanism and Relation between the Activity and Electronic Structure of Spinels,” *J. Phys. Chem. C* **125**, 25983–26002 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c06760

R. INOUE, T. NAOTA and M. EHARA, “Origin of the Aggregation-Induced Phosphorescence of Platinum(II) Complexes: The Role of the Metal–Metal Interactions on Emission Decay in the Crystalline State,” *Chem. –Asian J.* **16**, 3129–3140 (2021). (Front Cover) DOI: 10.1002/asia.202100887

M. LI, Y. ZHAO, K. YUAN, Y. HAN, J. ZHANG, Y. WU, M. EHARA, S. NAGASE and X. ZHAO, "Lithium-Bromine Exchange Reaction on C_{60}: First Theoretical Proposal of Stable Singlet Fullerene Carbene without Heteroatom," *Org. Chem. Front.* **8**, 1551–1562 (2021). DOI: 10.1039/D0QO01589J

J. U. DAVIS, JR., Q. M. PHUNG, T. YANAI, M. EHARA and T. SOMMERFELD, "Lifetimes of Be_3^{2-} and Mg_3^{2-} Cluster Dianions," *J. Phys. Chem. A* **125**, 3579–3588 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpca.1c00770

J. KODCHASEE, C. CHANLOI, P. KHEMTHONG, B. UAPIPATANAKUL, M. EHARA and K. BOBUATONG, "Catalytic Oxidation of Benzyl Alcohol to Benzaldehyde on Au_8 and Au_6Pd_2 Clusters: A DFT Study on the Reaction Mechanism," *Catalysts* **11**, 720 (14 pages) (2021). DOI: 10.3390/catal11060720

W. ISHII, S. KATAO, Y. NISHIKAWA, Y. OKAJIMA, A. HATORI, M. EHARA, T. KAWAI and T. NAKASHIMA, "The Emergence of Intense Near-Infrared Photoluminescence by Photoactivation of Silver Nanoclusters," *Chem. Commun.* **57**, 6483–6486 (2021). DOI: 10.1039/D1CC02119B

Y. MORISAWA, E. TANIMURA, M. EHARA and H. SATO, "Attenuated Total Reflection-Far-Ultraviolet Spectroscopy and Quantum Chemical Calculations of the Electronic Structure of the Top Surface and Bulk of Polyethylenes with Different Crystallinities," *Appl. Spectrosc.* **75**, 971–979 (2021). DOI: 10.1177/00037028211013425

A. JUNKAEW, M. EHARA, L. HUANG and S. NAMUANGRUK, "Facet-Dependent Catalytic Activity of Anatase TiO_2 for the Selective Catalytic Reduction of NO with NH_3: A Dispersion-Corrected Density Functional Theory Study," *Appl. Catal., A* **623**, 118250 (2021). DOI: 10.1016/j.apcata.2021.118250

B-3) 総説，著書

江原正博,「分光学的性質（17.4.2）」, 化学便覧基礎編改訂 6版, 第 17章 理論化学，計算化学，情報化学 (2021).

B-4) 招待講演（* 基調講演）

M. EHARA, "Theoretical Chemistry for Complex Systems: Nanocluster and Heterogeneous Catalysts," The 2nd IMS-SKKU-UJN symposium on Molecular Science, Okazaki (Japan) (online), October 2021.

M. EHARA, "Theoretical Studies on Heterogeneous and Nanocluster Catalysts: Collaborations with Experiment," The 8th International Symposium of Institute for Catalysis: Novel Approaches for Next Generation Catalysis, Sapporo (Japan) (online), August 2021.* (Keynote Talk)

M. EHARA, "Theoretical Chemistry for Complex Systems: Pd-Au Nanocluster and Heterogeneous Catalysts," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Symposium (#393) Triangle of Heterogeneous Catalysis, Surface Science, and Theory, Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

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–).

理論化学会副会長（広報・会誌・懸賞担当）(2021–2023)，理論化学会幹事 (2019–2023)，幹事選出委員会委員長 (2019–2021)，選挙管理委員会委員 (2021)，企画委員 (2019–)，懸賞委員 (2020–2021).

学会の組織委員等

Pacifichem 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), Norway-Japan symposium on theoretical and experimental chemistry of complex systems, Hylleraas Centre for Quantum Molecular Sciences (Online), Organization Committee (2021–2022).

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 (2016–2021).

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–)，2021 年度担当委員 (2021).

計算物質科学連絡会議委員 (2019–).

計算物質科学協議会運営委員会委員 (2020–)，副代表 (2021).

東京大学物性科学研究所 CCMS 運営委員会委員 (2020–).

東北大学金属材料研究所計算材料学センター共同利用委員会委員 (2021–).

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 (2016–2021).

総合研究大学院大学物質機能の解明・開拓先端研究統合教育プログラム WG 委員 (2016– 2021).

総合研究大学院大学特別教育プログラム等 WG 委員 (2021–2022).

B-8) 大学での講義，客員

総合研究院大学院大学物理科学研究科，「基礎物理化学 I」, 2021 年 6 月 29 日–30 日.

大阪大学大学院工学研究科, 非常勤講師, 2008 年–2021 年，集中講義「計算機化学」, 2021 年 4 月 22 日–23 日.

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

北海道大学触媒研究所, 招聘教員, 2021年4月–2022年3月.

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).

B-11) 産学連携

JSR（株),「SAC-CI 法を用いた色素の計算」, 江原正博 (2021年4月–2022年3月).

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は令和３年度で最終年度となった。自動車排ガス浄化触媒の学理構築および材料開発について総括し，京都大学・触媒・電池ユニット拠点における不均一系触媒の研究を発展させる。

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））
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 Aβ アミロイド線維が破壊される際の水分子の役割の解明
b) レプリカ置換ソルートテンパリング法の開発とアミロイド β フラグメントへの応用
c) 新型コロナウイルスの RNA 依存性 RNA ポリメラーゼに対する薬剤の作用機構
d) 新型コロナウイルスと重症急性呼吸器症候群ウイルスの RNA 依存性 RNA ポリメラーゼの活性差を引き起こす機構
e) クマムシの乾眠に関わるタンパク質の動的性質の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) アルツハイマー病はアミロイド β（Aβ）ペプチドが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。我々は赤外線レーザーを照射して Aβ 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い，水分子がアミロイド線維を破壊する新たな機構を発見した。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後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，そこが欠陥となり，分子間 β シートの全ての水素結合が切断されるのである。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) 生体分子など複雑な自由エネルギー地形を持つ系の構造サンプリングを効率的に行うため，レプリカ交換法などの拡張アンサンブル分子動力学法がよく用いられている。我々はレプリカ交換法よりも効率の良い手法であるレプリカ置換法を最近開発した。この方法では複数の系のコピー（レプリカ）を用意し，それぞれのレプリカに異なる温度を割り当て，シミュレーション途中に３つ以上のレプリカの間で温度を置換する。こうすることで各レプリカの温度を上下させ，自由エネルギー極小状態から各系を脱出させる。この方法は２つのレプリカの間で温度を交換するレプリカ交換法よりも強力な方法である。一方，最近注目されている拡張アンサンブル法の一つにレプリカ交換ソルートテンパリング法がある。この方法では溶質に関わるポテンシャルエネルギーにパラメータを導入し，そのパラメータをレプリカ間で交換する。実質的に溶質のみの温度を交換することになるため，計算コストを大幅に減らすことができる。そこで我々はレプリカ置換法とレプリカ交換ソルートテンパリング法を基に計算コストを大幅に減らすことのできるレプリカ置換ソルートテンパリング法を開発した。さらにこの手法を用いてアミロイド β フラグメントの凝集に伴う構造変化を明らかにした。
c) 新型コロナウイルス感染症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。これらは新型コロナウイルスの RNA 依存性 RNA ポリメラーゼに対する RNA 複製阻害剤として機能する

と期待されている。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 の複製を阻害すると考えられている。我々は分子動力学シミュレーションを実行し，これらの薬剤や ATP の持つ三リン酸の負電荷が RNA ポリメラーゼの結合サイトにある Mg^{2+} イオンに静電相互作用により引き寄せられて結合することを解明した。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一列に並んでおり，このリジンの正電荷が「バケツリレー」のように薬剤や ATP を結合サイトに輸送して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 や各種インターネットニュースで報道された。特にマイナビニュースでは医療・バイオ分野の週間ニュースランキングで２位になった（2021 年８月）。

d) 新型コロナウイルス（SARS-CoV-2）の RNA ポリメラーゼと重症急性呼吸器症候群ウイルス（SARS-CoV）の RNA ポリメラーゼのアミノ酸配列および立体構造はほぼ同じである。しかし，SARS-CoV の RNA ポリメラーゼは SARS-CoV-2 の RNA ポリメラーゼよりも RNA 合成活性の高いことが知られている。我々は分子動力学シミュレーションを行い，両者の動的特性に違いがあることを発見した。具体的には SARS-CoV の RNA ポリメラーゼでは活性部位を形成するモチーフ A–G が最大 63% 接近していること，また SARS-CoV の RNA ポリメラーゼではドメイン間の協調的な動きを示すことを発見した。このような動的な性質の違いが２つの RNA ポリメラーゼの活性差の原因と考えられる。

e) SAHS タンパク質は，クマムシ特有の熱可溶性タンパク質であり，クマムシの乾眠に必須の役割を果たしていると考えられている。SAHS タンパク質の分子動力学 MD シミュレーションを行い，その動的特性を明らかにした。具体的には① SAHS タンパク質の入口領域はヒトの L 型脂肪酸結合タンパク質に比べて柔軟性があること，② N 末側の天然変性領域は大きく変動し，両親媒性の α ヘリックス構造を形成することがあること，③脱水に伴って入口領域のサイズは小さくなるものの，β バレル構造は維持されることを明らかにした。本研究はクマムシの乾眠機構に関わるタンパク質のダイナミクスを初めて明らかにしたものであり，今後，乾眠機構の解明に貢献すると考えられる。

B-1) 学術論文

K. MIYAZAWA, S. G. ITOH, H. WATANABE, T. UCHIHASHI, S. YANAKA, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO, K. ARAKAWA and H. OKUMURA, “Tardigrade Secretory-Abundant Heat-Soluble Protein Has a Flexible β-Barrel Structure in Solution and Keeps This Structure in Dehydration,” *J. Phys. Chem. B* **125(32)**, 9145–9154 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcb.1c04850

S. G. ITOH, S. TANIMOTO and H. OKUMURA, “Dynamic Properties of SARS-CoV and SARS-CoV-2 RNA-Dependent RNA Polymerases Studied by Molecular Dynamics Simulations,” *Chem. Phys. Lett.* **778**, 1388819 (8 pages) (2021). DOI: 10.1016/j.cplett.2021.138819

H. OKUMURA, S. G. ITOH, K. NAKAMURA and T. KAWASAKI, “Role of Water Molecules in the Laser-Induced Disruption of Amyloid Fibrils Observed by Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulations,” *J. Phys. Chem. B* **125(19)**, 4964–4976 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcb.0c11491

S. TANIMOTO, S. G. ITOH and H. OKUMURA, “‘Bucket Brigade’ Using Lysine Residues in RNA-Dependent RNA Polymerase of SARS-CoV-2,” *Biophys. J.* **120(17)**, 3615–3627 (2021). DOI: 10.1016/j.bpj.2021.07.026

D. FUKUHARA, S.G. ITOH and H. OKUMURA, "Replica Permutation with Solute Tempering for Molecular Dynamics Simulation and Its Application to the Dimerization of Amyloid-β Fragments," *J. Chem. Phys.* **156(8)**, 84109 (12 pages) (2022). DOI: 10.1063/5.0081686

K. MIYAZAWA, S. G. ITOH, Y. YOSHIDA, K. ARAKAWA and H. OKUMURA, "Tardigrade Secretory-Abundant Heat-Soluble Protein Varies Entrance Propensity Depending on the Amino-Acid Sequence," *J. Phys. Chem. B* **126(12)**, 2361–2368 (2022). DOI: 10.1021/acs.jpcb.1c10788

M. YAMAUCHI, G. LA PENNA, S. G. ITOH and H. OKUMURA, "Implementations of Replica-Permutation and Replica Sub-Permutation Methods into LAMMPS," *Comput. Phys. Commun.* **276**, 108362 (12 pages) (2022). DOI: 10.1016/j.cpc.2022.108362

B-3) 総説，著書

多知裕平，奥村久士,「糖鎖クラスターとの結合によるアミロイドβの構造変化」, *生物物理*, **61**, 186–188 (2021). DOI: 10.2142/biophys.61.186

S. G. ITOH and H. OKUMURA, "All-Atom Molecular Dynamics Simulation Methods for the Aggregation of Protein and Peptides: Replica Exchange/Permutation and Nonequilibrium Simulations," in *Computer Simulations of Aggregation of Proteins and Peptides*, M. S. Li, A. Kloczkowski, M. Cieplak and M. Kouza, Eds., Humana; New York, NY, Chap. 10, pp. 197–220 (2022). DOI: 10.1007/978-1-0716-1546-1_10

B-4) 招待講演

H. OKUMURA, "Molecular dynamics simulation of disease-related biomolecules," 2nd International Conference on Materials Research and Innovation, online, December 2021.

H. OKUMURA, "Role of water molecules and helix-structure stabilization in the laser-induced disruption of amyloid fibrils observed by nonequilibrium molecular dynamics simulations," Skype seminar, online, May 2021.

奥村久士,「病気に関係する生体分子の分子動力学シミュレーション」, 生理学研究所ネットワーク型研究加速事業報告会, オンライン開催, 2022年3月.

奥村久士,「新型コロナウイルスの増殖とアルツハイマー病の発症に関するタンパク質の分子動力学シミュレーション」, スーパーコンピュータワークショップ2021, オンライン開催, 2022年1月.

奥村久士,「分子動力学シミュレーションで見る赤外自由電子レーザーによるアミロイド線維の破壊」, 第35回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム企画講演：赤外自由電子レーザーによる物質研究の現状と未来展望, オンライン開催, 2022年1月.

奥村久士,「病気に関連するタンパク質に計算物理学で迫る」, 日本物理学会名古屋支部公開講演会「計算物理学への誘い」, オンライン開催, 2021年11月.

奥村久士,「Molecular Dynamics Simulations for Aggregation and Disaggregation of Amyloid-β Peptides ／アミロイドβペプチドの凝集と解離の分子動力学シミュレーション」, 第59回日本生物物理学会年会シンポジウム「Peptide–Membrane Biophysics: Current Biophysical Studies of Membrane-bound Antimicrobial Peptides and Amyloid Peptides ／ペプチド－膜生物物理学：膜結合抗菌ペプチドおよびアミロイドペプチドの最新生物物理研究」, オンライン開催, 2021年11月.

奥村久士,「各種統計アンサンブルの生成法」, 第15回分子シミュレーションスクール, オンライン開催, 2021年9月.

奥村久士,「新型コロナウイルス感染症に対する治療薬および赤外自由電子レーザーによるアミロイド線維破壊の分子動力学シミュレーション」, 分子科学研究所平等グループセミナー , 岡崎, 2021 年 8 月.

伊藤 暁,「Oligomer formation of proteins studied by generalized-ensemble algorithms」, 第 59 回日本生物物理学会年会シンポジウム「蛋白質系の分子シミュレーションのサンプリング手法の発展／ Advances in enhanced sampling methods for molecular simulations of protein systems」, オンライン開催, 2021 年 11 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–).

学会の組織委員等

日本蛋白質科学会年会若手奨励賞審査委員 (2016–).

日本生物物理学会第 59 回年会シンポジウムオーガナイザー (2021).

XXXIV IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2023), Steering Committee member（実行委員）(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」, 2021 年 12 月.

名古屋市立大学大学院薬学研究科, 創薬生命科学特別講義「分子動力学シミュレーションで見る病気関連生体分子」, 2021 年 5 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

宮澤和久,「クマムシ特有の分泌型熱安定性タンパク質の分子動力学シミュレーション」, 2022 年 3 月, 博士（理学）.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究 (C),「レーザー照射によるアミロイド線維の破壊機構を分子動力学シミュレーションで解明する」, 奥村久士 (2021 年–2024 年).

科研費基盤研究 (C),「計算機シミュレーションによる脂質膜上でのアミロイドベータペプチドの凝集過程の解明」, 伊藤　暁 (2021 年–2024 年).

科研費基盤研究 (C),「アルギニンによるポリグルタミンタンパク質の凝集阻害過程の理論研究」, 谷本勝一 (2021 年–2024 年).

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線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 Aβ アミロ

イド線維の場合と比較，議論する。

b) ポリフェノールにはAβペプチドの凝集を阻害する効果がある。そこでポリフェノールと複数本のAβ(16-22)ペプチドのシミュレーションを行い，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。我々が最近開発したレプリカ置換ソルートテンパリング法を用いて効率的にこれを実行する。

c) 全長のAβ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Aβ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→二量体→三量体→四量体と凝集していく過程での構造変化を調べる。特にどのアミノ酸残基が凝集に重要な役割を果たしているのか見つけ出す。

d) αシヌクレインの凝集には細胞膜との結合が重要である。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（准教授）(2020 年 12 月 1 日着任)

大貫　隼（助教）
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方向性運動メカニズムの解明
b) トランスポーターの輸送メカニズムの解明
c) タンパク質が引き起こす細胞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，１分子観察データから，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。さらに，微小管上のキネシンの１方向性運動への応用を目指している。
b) シュウ酸は多量に摂取すると，体内で尿管結石等の症状を引き起こす。このシュウ酸は腸内細菌により分解され制御されているが，その際にシュウ酸を細菌内に輸送するのがシュウ酸トランスポーターである。このシュウ酸トランスポーターの原子レベル構造が岡山大・山下教授のグループで解かれた。我々は，山下教授のグループとの共同研究により，シュウ酸トランスポーターによる基質輸送の際の基質結合やトランスポーター構造ダイナミクスを量子化学・分子動力学計算を用いて取り組んだ。まず，基質結合サイトの量子化学計算により結合したシュウ酸がねじれた構造をしていることを明らかにした。次に，トランスポーターの全原子分子動力学シミュレーションにより，閉塞状態から外向き開状態へ構造遷移する際に基質結合に関わる特定のアミノ酸残基とゲートの役割をしているアミノ酸残基の動きが重要でスイッチになっていることを同定した。
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揺らぎが記述できない。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 Gō-MARTINI モデルの開発を行った。その結果，粗視化 Gō-MARTINI シミュレーションにより，詳細な全原子シミュレーションにおける構造揺らぎが再現できることを示した。

B-3) 総説，著書

岡崎圭一,「生体分子マシンにおける構造遷移ダイナミクスの解明と機能制御」, アンサンブル , **23(2)**, 127–132 (2021).

B-4) 招待講演

K. OKAZAKI, “Multiscale simulations of conformational dynamics of transporter and membrane-remodeling proteins in function,” Symposium on Computer Simulations and Cryo-ET/EM of Complex Biomolecular Systems, Online, 2021年11月.

岡崎圭一,「分子モーターの化学力学共役モデルのベイズ推定」, 第 59回日本生物物理学会年会 , オンライン開催 , 2021年 11月 .

K. OKAZAKI, “Mechanism of the sodium/proton antiporter PaNhaP from transition-path simulations,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Honolulu (U. S. A.) (online), 2021年12月.

K. OKAZAKI, “Molecular Simulation and Statistical Inference of Functional Motions of Biomolecular Machines,” The 5th China-Japan-Korea Workshop on Theoretical and Computational Chemistry, Online, 2022年1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 (2016–2021).

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-8) 大学での講義，客員

九州大学先導物質化学研究所 , 非常勤講師 ,「分子シミュレーションによる生体分子マシンの機能発現ダイナミクス解明」, オンライン , 2022年 2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 ,「分子シミュレーションを用いた生理機能センサーの合理設計法の開発及び酸性オルガネラ内の機能イメージングへの応用」（代表：永井健治）, 岡崎圭一（研究分担者）(2021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。分子モーターの１方向性運動モデル推定手法を確立させたので，様々な分子モーターへの応用や分子シミュレーションとの連携などさらなる展開を目指す。シュウ酸トランスポーターについては，全輸送サイクルを解明するためには未知の内向き開構造を明らかにする必要があるが，分子シミュレーションによる予測を目指したい。細胞膜変形については，タンパク質・細胞膜系のGō-MARTINI 粗視化モデルを改良することができたので，細胞膜切断に関わるダイナミンなどへの展開を考えている。その他，分子シミュレーションを用いたバイオセンサーの合理設計を目指している。

石　田　干　城（助教）（2004 年 11 月 1 日着任）

神谷　美穂（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シミュレーション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) 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。分子動力学シミュレーションを用いて，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，具体的には，400 K でのセルロースの溶解・分解過程を解析した。結果から，陰イオンは分子内水素結合を分断することで高分子セルロース中へと侵入し，一方，陽イオンは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が明らかになった。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，熱的に安定で 373 K（100 ℃）以下でも高分子セルロースの溶解・分解を促進するイオン液体に注目した研究を進めている。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（リン酸アニオン含有イオン液体）を選定し，量子化学計算を用いてイオン液体の力場パラメーターの決定をした。続けて，新たに決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，373 K ではセルロースファイバーの溶解・分解に用いるイオン液体として，リン酸アニオン含有イオン液体は，熱的に不安定なアセテートイオン液体の代替になることが示された。またアセテートイオン液体と比べて，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。この違いは主にリン酸アニオンの酸素サイト上の電荷がアセテートアニオンに比べて大きいことに起因していることが明らかになった。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。現在，この研究に関する結果を学術論文としてまと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-2) 国際会議のプロシーディングス

M. ANDO, K. OHTA, T. ISHIDA, K. TOMINAGA and H. SHIROTA, “Low-Frequency Spectra of Posphonium-Based Ionic Liquids Having Pentyl, Ethoxyethyl, Or 2-(Ethylthio)Ethyl Group,” *Proceedings of Trombay Symposium on Radiation & Photochemistry 2022 (TSRP-2022)*, 12-15 January (2022).

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））
BHARTI, Vineet（特任研究員）
國見　昌哉（特任研究員）
CHEW, Yeelai（大学院生）
TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh（大学院生）
VILLELA ESCALANTE, Rene Alejandro（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ーの開発を行なった。ここでは，フェムト秒光パルス対によって分子内に生成した２個の波束間の量子位相差をアト秒精度で操作し，これらの干渉の結果生成した第３の波束を構成する各振動固有状態のポピュレーションを観測することによって，光子場の振幅情報が高精度で分子内に転写されていることを証明することができた。また，フェムト秒光パルス対の時間間隔をアト秒精度で変化させることによって波束内の固有状態のポピュレーションの比率を操作できることを実証した。さらに，固体パラ水素中の振動量子状態（vibron）の位相情報の２次元分布を操作し可視化することによって，固体２次元位相メモリーの可能性を実証することに成功した。

d) 分子メモリーを量子コンピュータに発展させるためには，c) で行ったポピュレーション測定だけでなく，位相の測定を行う必要がある。そこで我々は，c) の第３の波束の時間発展を別のフェムト秒パルスを用いて実時間観測した。これによって，ポピュレーション情報と位相情報の両方を分子に書き込んで保存し，読み出すことが可能であることを実証した。振動固有状態の組を量子ビットとして用いる量子コンピュータの可能性が示された。さらに，分子波束を用いた量子フーリエ変換を開発した。

e) 分子の振動波束を構成する振動固有状態の振幅と位相を強レーザー場で制御することに成功した。

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

g) ほぼ絶対零度（~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

素川靖司，富田隆文，Sylvain de LÉSÉLEUC，安藤太郎，武井宣幸，大森賢治,「アト秒精度の極低温・超高速量子シミュレータ」, *固体物理* , **56**, 243–256 (2021).（招待論文・表紙）

Y. OHTSUKI, T. NAMBA, H. KATSUKI and K. OHMORI, “Optimal Control for Suppressing Wave Packet Spreading with Strong Non-Resonant Laser Pulses,” *Phys. Rev. A* **104**, 033107 (12 pages) (2021).

H. KATSUKI, Y. OHTSUKI, T. AJIKI, H. GOTO and K. OHMORI, “Engineering Quantum Wave-Packet Dispersion with a Strong Non-Resonant Femtosecond Laser Pulse,” *Phys. Rev. Res.* **3**, 043021 (9 pages) (2021).

Y. CHEW, T. TOMITA, T. P. MAHESH, S. SUGAWA, S. de LÉSÉLEUC and K. OHMORI, “Ultrafast Energy Exchange between Two Single Rydberg Atoms on the Nanosecond Timescale,” *arXiv*:2111.12314 (2021).

V. BHARTI, S. SUGAWA, M. MIZOGUCHI, M. KUNIMI, Y. ZHANG, S. de LÉSÉLEUC, T. TOMITA, T. FRANZ, M. WEIDEMÜLLER and K. OHMORI, “Ultrafast Many-Body Dynamics in an Ultracold Rydberg-Excited Atomic Mott Insulator,” *arXiv*:2201.09590 (2021).

A. R. PERRY, S. SUGAWA, F. SALCES-CARCOBA, Y. YUE and I. B. SPIELMAN, "Multiple-Camera Defocus Imaging of Ultracold Atomic Gases," *Opt. Express* **29**, 17029–17041 (2021).

S. SUGAWA, F. SALCES-CARCOBA, Y. YUE, A. PUTRA and I. B. SPIELMAN, "Wilson Loop and Wilczek-Zee Phase from a Non-Abelian Gauge Field," *npj Quantum Inf.* **7**, 144 (9 pages) (2021).

M. KUNIMI and I. DANSHITA, "Nonergodic Dynamics of the One-Dimensional Bose-Hubbard Model with a Trapping Potential," *Phys. Rev. A* **104**, 043322 (9 pages) (2021).

M. KUNIMI, K. NAGAO, S. GOTO and I. DANSHITA, "Performance Evaluation of the Discrete Truncated Wigner Approximation for Quench Dynamics of Quantum Spin Systems with Long-Range Interactions," *Phys. Rev. Res.* **3**, 013060 (15 pages) (2021).

B-4) 招待講演

大森賢治,「アト秒精度の超高速・極低温量子シミュレータ・量子コンピュータ」,(一社)日本光学会 光エレクトロニクス産学連携専門委員会 第 328回研究会「光の日」公開シンポジウム , オンライン開催, 2022年 3月 .

大森賢治, 紫綬褒章受章記念講演(文部科学省主催)「アト秒精度の極限コヒーレント制御――量子制御から量子情報処理へ――」, 光・量子飛躍フラッグシッププログラム(Q-LEAP)第 4回シンポジウム , 文部科学省 , オンライン開催, 2022年 2月 .

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」, ソニーグループ(株)社内セミナー , ソニーグループ(株), オンライン開催, 2022年 1月 .

K. OHMORI, "Ultrafast and ultracold quantum simulator/computer with attosecond precision," Quantum Simulations and Computations with Cold Atoms-2022 (QSCCA 2021), TCG CREST/IISER PUNE, India (Online), January 2022.

K. OHMORI, "Japan's quantum-technology testbeds," The International Symposium on Quantum Science, US DOE Office of Science (SC) Workshop on the International Quantum Computing Testbeds, Quantum Computing Testbeds Stakeholder Workshop, US DOE Office of Science (SC), USA (Online), December 2021. (Invited Talk/Panel Discussion)

K. OHMORI, "Ultrafast and ultracold quantum simulator/computer with attosecond precision," The International Symposium on Quantum Science, Technology and Innovation (QUANTUM INNOVATION 2021), RIKEN, Japan (Online), December 2021.

K. OHMORI, "Ultrafast and ultracold quantum simulator with attosecond precision," 5th International Workshop on Rydberg Atoms and Molecules, Wuhan University, China (Online), October 2021.

K. OHMORI, "Ultrafast and ultracold quantum simulator with attosecond precision," IAS Center for Quantum Technologies Inaugural Workshop, The Hongkong University of Science and Technology (HKUST), China (Online), August 2021.

K. OHMORI, "Ultrafast and ultracold quantum simulator/computer with attosecond precision," U.S.-Japan Quantum Cooperation Workshop, 米国・Hudson Institute／日本・内閣府, Online, July 2021. (Invited Talk/Panel Discussion)

K. OHMORI, "Ultrafast and ultracold quantum simulator with attosecond precision," DAMOP 2021 (52nd Annual Meeting of the American Physical Society's Division of Atomic, Molecular and Optical Physics), Online, June 2021.

大森賢治(コメンテータ), 第 13回理研・未来戦略フォーラム「生命科学の未来」, 理研 , オンライン開催, 2021年 5月 .

素川靖司,「光格子を用いたアト秒精度の極低温・超高速多体量子シミュレータの開発」, 第 1回Q-LEAP 次世代レーザー領域シンポジウム , オンライン開催, 2021年 8月 .

S. de LÉSÉLEUC, “Ultrafast energy exchange between two single Rydberg atoms on the nanosecond timescale,” GiRyd 2022 workshop, Mainz (Germany), March 2022.

B-5) 特許出願

特許取得第 6875680 号,「量子シミュレーターおよび量子シミュレーション方法」, 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 2021 年 4 月 27 日）.

B-6) 受賞，表彰

大森賢治, 令和３年秋紫綬褒章（量子物理学研究功績）(2021).

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

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

iSAP HAMAMATSU (International Symposium on Advanced Photonics) 組織委員 (2016–).

ゴードン研究会議（Gordon Research Conference: GRC）“Quantum Control of Light and Matter,” 2021 議長（Covid-19 パンデミックのため 2023 年に延期），2019 副議長 (2017–).

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

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

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 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, UK, Editorial Board (2018–2021), Executive Editorial Board (2021–) and Section Editor for Quantum Technologies (2019–).

その他

米国エネルギー省（DOE）および EU からの招待を受け，DOE が主催する量子コンピューティングに関する米欧政府間会議（Quantum Computing Testbeds Stakeholder Workshop, 2021 年 12 月 17 日）に主要メンバーかつ唯一の米欧以外からの講演者・パネリストとして出席し，日本政府代表として大森自身の量子コンピュータ開発と日本の量子技術開発の現状に関する招待講演を行うとともに，今後の日米欧協力と量子コンピュータ開発の今後の展望に関する議論を先導することによって，日米欧の政府および科学技術コミュニティーに対する分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

内閣府からの依頼で，内閣府とHudson研究所（米国の政府系シンクタンク）が主催する量子技術に関する日米政府間会議（2021年7月1日）で招待講演およびパネルディスカッションを行うことで日米政府に対する分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

文部科学省からの依頼で，文部科学省と欧州共同体（EC）が主催する量子技術に関する日欧政府間会議（2021年7月6日，2021年9月13日；文科省・内閣府・経産省・総務省・JSTが出席）に主要メンバーかつ唯一の研究者（他は政府官僚が主体）として出席し，日欧協力政策に関する議論を先導することによって，日欧政府に対する分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

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（2015– ）として，量子テクノロジー開発および分子研UVSORを含む量子ビーム（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大きく貢献．

世界最高レベルの学術会議である米国ゴードン研究会議（Gordon Research Conference: GRC）の評議会メンバー（2019– ）としてGRCの運営に貢献することによって，科学技術分野全般における分子研の国際的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

量子科学技術分野における世界最高レベルの学術会議であるゴードン研究会議（Gordon Research Conference: GRC）“Quantum Control of Light and Matter” の2021年会議 議長（Covid-19パンデミックのため2023年に延期），および2019年会議 副議長として2017年から2023年の長期に渡り，GRCの運営に貢献することによって，量子科学技術分野における分子研の国際的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

日本を代表するベンダー企業に向けた社内セミナーで，分子研･大森グループ･量子シミュレータ／量子コンピュータラボの研究開発状況をレクチャーし，日本の産業界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

ソニーグループ（株）社内セミナー（2022年1月25日）で，分子研･大森グループ･量子シミュレータ／量子コンピュータラボの研究開発状況をレクチャーし，日本の産業界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

米国を代表する量子テクノロジー企業と研究交流を進めることによって米国の産業界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

日本を代表する商社からの要望で，量子テクノロジーに関するレクチャーを行うことによって，日本の投資業界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

ごく最近（2022年3月– ），民間金融機関から，戦略的提携関係にある米国ベンチャーキャピタルの活用に関して，分子研 戦略室の産学連携担当を通じて，分子研・大森グループ・量子シミュレータ／量子コンピュータラボへの引き合いがあり，協議を進めている。これによって，日米における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

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・量子コンピュータラボの研究開発状況をレクチャー（2021年8月24日）することによって日本政府に対する分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

文部科学省 文部科学戦略官（兼）科学技術・学術政策局 研究開発戦略課 戦略研究推進室のメンバーに対して，大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー（2021年11月26日）を行うことによって，日本政府に対する分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

B-8) 大学での講義，客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 集中講義「量子動力学」, 2021年2月3日, 5日, 8日, 10日.

Heidelberg University, 客員教授（フンボルト賞受賞者）, 2012年– .（2020年度後期および2021年度はcovid-19パンデミックに起因する渡航規制のため,Heidelberg大学物理学科の教員および大学院生とオンライン（Zoom）で議論･指導を進めた）

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).

内閣府官民研究開発投資拡大プログラム（PRSIM）,「超高速・高機能な冷却原子型量子シミュレータ・コンピュータの高度化」, 大森賢治 (2021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).

科研費基盤研究(B),「強相関リュードベリ原子を用いた非平衡量子開放系の量子シミュレーション」, 素川靖司 (2021年–2025年).

科研費研究活動スタート支援,「Rydberg atoms at sub-micron distance with overlapping electronic clouds」, Sylvain de LÉSÉLEUC (2019年–2022年).

科研費研究活動スタート支援,「冷却原子の個別観測と事後選択的統計処理に基づく開放量子多体系の研究」, 富田隆文(2019年–2022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–).（上記B-10) 競争的資金に記載した「科研費・特別推進研究」の共同研究機関,「Q-LEAP」および「PRISM」の協力研究機関として参画）

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５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）

福谷　圭祐（助教）
金沢　真伍（特別共同利用研究員）
宮田　健史（特別共同利用研究員）
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準位接合機構の研究
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
h) 低次元電子相関物質の物性機構解明

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する二光子光電子分光装置を構築し，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角度分解光電子分光（ARPES）による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（PMM）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 PMM 装置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。極めて高効率に光電子を捕捉し評価可能な高感度紫外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。また低エネルギー逆光電子分光装置の導入により，伝導帯構造を合わせて評価することが可能となり，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。

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（SPALEED），準安定励起原子電子分光（MAES），X線定在波法（XSW），軟X線吸収分光（NEXAFS）等を用い，基板界面における単分子膜成長から結晶膜成長までの多様な集合状態について構造（分子配向）と成長を観察している。

h) 電子が物質中の様々な準粒子と相互作用することにより発現する特異物性はその複雑性・多様性から根本起源が未解明であるものが多い。二次元 ARPES や PMM 法などの電子と準粒子の直接観測を可能とする分光法を用いて，主に励起子絶縁体や電荷密度波物質の電子物性の解明・制御を目指した研究プロジェクトの立ち上げを行なっている。

B-1) 学術論文

J. YANG, H. SATO, H. ORIO, X. LIU, M. FAHLMAN, N. UENO, H. YOSHIDA, T. YAMADA and S. KERA, “Accessing the Conduction Band Dispersion in $CH_3NH_3PbI_3$ Single Crystals,” *J. Phys. Chem. Lett.* **12(15)**, 3773–3778 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpclett.1c00530

S. MAKITA, H. MATSUDA, Y. OKANO, T. YANO, E. NAKAMURA, Y. HASEGAWA, S. KERA, S. SUGA and F. MATSUI, “Contrast Inversion of Photoelectron Spectro-Microscopy Image,” *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **19**, 42–47 (2021). DOI: 10.1380/ejssnt.2021.42

S. PARK, H. WANG, T. SCHULTZ, D. SHIN, R. OVSYANNIKOV, M. ZACHARIAS, D. MAKSIMOV, M. MEISSNER, Y. HASEGAWA, T. YAMAGUCHI, S. KERA, A. ALJARB, A. HAN, L.-J. LI, V. C. TUNG, P. AMSALEM, M. ROSSI and N. KOCH, “Temperature-Dependent Ground State Charge Transfer in van der Waals Heterostructures,” *Adv. Mater.* **33(29)**, 2008677 (9 pages) (2021). DOI: 10.1002/adma.202008677

M. NOZAKI, M. HANIUDA, K. NIKI, T. FUJIKAWA and S. KERA, “Many-Body Photoemission Theory for Organic Molecular Crystals,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **249**, 147071 (9 pages) (2021). DOI: 10.1016/j.elspec.2021.147071

R. NEMOTO, P. KRUEGER, T. HOSOKAI, M. HORIE, S. KERA and T. YAMADA, "Room-Temperature Deposition of Cobalt Monolayer on (7×4) Crown-Ether Ring Molecular Array: Ultra-High Vacuum Scanning Tunneling Microscopy Study," *Vac. Surf. Sci.* **63(9)**, 465–469 (2020). DOI: 10.1380/vss.63.465 (in Japanese)

F. MATSUI, S. MAKITA, H. MATSUDA, E. NAKAMURA, Y. OKANO, T. YANO, S. KERA and S. SUGA, "Valence Band Dispersion Embedded in Resonant Auger Electrons," *J. Phys. Soc. Jpn.* **90(12)**, 124710 (9 pages) (2021). DOI: 10.7566/JPSJ.90.124710

J.-P. YANG, M.-F. YANG, G.-B. TANG and S. KERA, "Density of Gap States in $CH_3NH_3PbI_3$ Single Crystals Probed with Ultrahigh-Sensitivity Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy," *J. Phys. Condens. Matter* **33(47)**, 475001 (5 pages) (2021). DOI: 10.1088/1361-648X/ac22da

J. HAGENLOCHER, N. SCHEFFCZYK, K. BROCH, G. DUVA, N. RUßEGGER, L. EGENBERGER, R. BANERJEE, S. KERA, F. SCHREIBER and A. HINDERHOFER, "On the Origin of Gap States in Molecular Semiconductors—A Combined UPS, AFM, and X-Ray Diffraction Study," *J. Phys. Chem. C* **125(32)**, 17929–17938 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c03096

J. HAGENLOCHER, K. BROCH, M. ZWADLO, D. LEPPLE, J. RAWLE, F. CARLA, S. KERA, F. SCHREIBER and A. HINDERHOFER, "Thickness-Dependent Energy-Level Alignment at the Organic–Organic Interface Induced by Templated Gap States," *Adv. Mater. Interfaces* **9(3)**, 2101382 (7 pages) (2021). DOI: 10.1002/admi.202101382

Y. NAKAYAMA, K. SUDO, N. OHASHI, S. KERA and Y. WATANABE, "Interface Electronic Structure and Valence Band Dispersion of Bis(1,2,5-thiadiazolo)-*p*-quinobis(1,3-dithiole) on Polycrystalline Au Electrodes," *Electron. Struct.* **3(2)**, 24006 (2021). DOI: 10.1088/2516-1075/ac0124

K. FUKUTANI, R. STANIA, C. IL KWON, J .S. KIM, K. J. KONG, J. KIM and H. W. YEOM, "Detecting Photoelectrons from Spontaneously Formed Excitons," *Nat. Phys.* **17(9)**, 1024–1030 (2021). DOI: 10.1038/s41567-021-01289-x

B-3) 総説，著書

F. MATSUI, S. MAKITA, Y. OKANO, H. MATSUDA and S. KERA, "Photoelectron Momentum Microscope: Development at UVSOR Synchrotron Facility," *Vac. Surf. Sci.*, **64(6)**, 262–268 (2021). DOI: 10.1380/vss.64.262 (in Japanese)

S. KERA, "Development of Photoelectron Momentum Microscope to Molecular Science," *Vac. Surf. Sci.*, **64(6)**, 254–261 (2021). DOI: 10.1380/vss.64.254 (in Japanese)

B-4) 招待講演

K. FUKUTANI and S. KERA, "Anisotropic charge localization upon strong phonon and vibronic couplings," 734th WE-Heraeus-Seminar, Photoemission Tomography: Applications and Future Developments, Germany (online/hybrid), October 2021.

S. KERA and F. MATSUI, "Present status of UVSOR photoelectron momentum microscope: A case study for molecular film," 2022 Taiwan-AVS symposium: Exploring the emergent properties of advanced materials with synchrotron-based techniques, Taiwan (online), January 2022.

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–).

AOF（Asia Oceania Forum for Synchrotron Radiation Research）アジア・オセアニア放射光研究評議会庶務委員 (2021–).

日本放射光学会評議員 (2020–).

学会の組織委員等

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 組織委員会委員 (2021).

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

KEK 加速器・共通基盤研究施設運営会議委員 (2021–).

KEK 物質構造科学研究所運営会議委員 (2021–).

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–).

NINS-DAAD 国際研究者交流事業, Advanced Spectroscopy of Epitaxial Organic Films Grown on Modern 2D Material, 解良 聡 (2021年–).

科研費研究活動スタート支援,「励起子絶縁体における自発的励起子生成メカニズムの解明」, 福谷圭祐 (2021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，様々な放射

光利用先端分光法や独自に開発した分光装置群を駆使して多角的に研究を進めている。2021年度より助教が着任し，低次元物性と精密計測に関する研究力を強化した。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，PMM 装置を導入した。松井教授らと共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，2022年度冒頭にスピン検出機能追加による装置更新作業を予定しており，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。グループの寄与としては分子固体系のオールジャパン体制（実験班，理論班）を構築し，戦略的に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，優位性を確実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 計画の具体化作業を開始した。国内外施設およびコミュニティの情報収集に邁進している。

長　坂　将　成（助教）（2007 年 4 月 1 日着任）

萩原　久代（事務支援員）
石川　裕子（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溶液の局所構造解析

b) 溶液の軟Ｘ線吸収分光法の低エネルギー領域への開拓

c) 軟Ｘ線吸収分光法の生命科学への展開

d) 超高速軟Ｘ線吸収分光法による金属錯体溶液の光励起過程の解明

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，軟Ｘ線吸収分光（XAS）法は溶液の局所構造を元素選択的に調べることができる有用な手法である。我々は液体層の精密厚さ制御法（20 ~ 2000 nm）を独自に開発することで，溶液の 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，異なる元素ごとに溶液中の分子間相互作用を調べる手法を確立した。最近では，異なる濃度のエタノール水溶液の C-K 吸収端 XAS 測定から，中間の濃度領域でエタノール分子が疎水性相互作用によりクラスター形成することを見出した。

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，目的の一次回折光の透過率が極端に小さくて，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。軟Ｘ線透過率の計算から，液体セルを満たすアルゴンの光路長を 2.6 mm にすれば，XAS 測定が行えることが分かった。そこで，アルゴン光路長を 2.6 mm にする超薄型液体セルを開発した。

c) XAS の生命科学への展開を目指して，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 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，PSII の Mn_4CaO_5 クラスターの O-K 吸収端 XAS スペクトルを得ることができた。今後は，PSII タンパク質の担持量を増やすことで，Mn-L，Ca-L 吸収端 XAS 測定の実現を目指しているところである。

d) 金属錯体溶液の光励起過程を調べるために, 70 ps の時間分解能の超高速 XAS 法の開発を行った。軟Ｘ線 XAS 法は，鉄錯体における中心金属（Fe-L）と配位子（C, N-K）の両方の電子状態を調べることができる特長があり，我々もヘミン水溶液において，Fe-L，N-K 吸収端 XAS 測定に成功している。現在，鉄フェナントロリン水溶液の超高速 XAS 測定を行っていて，N-K 吸収端から配位子の構造変化を示唆するスペクトル変化を得た。今後は，レーザーと軟Ｘ線のポンプ－プローブ測定を異なる遅延時間で行うことで, 金属錯体溶液の光励起過程における中心金属（Fe-L）と配位子（N-K）の電子状態の時間変化を得ることを目指している。

B-1) 学術論文

S. TSURU, B. SHARMA, M. NAGASAKA and C. HÄTTIG, "Solvent Effects in the Ultraviolet and X-Ray Absorption Spectra of Pyridazine in Aqueous Solution," *J. Phys. Chem. A* **125(33)**, 7198–7206 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpca.1c05183

D. AKAZAWA, T. SASAKI, M. NAGASAKA and M. SHIGA, "X-Ray Absorption Spectra of Aqueous Cellobiose: Experiment and Theory," *J. Chem. Phys.* **156**, 044202 (7 pages) (2022). DOI: 10.1063/5.0078963

B-3) 総説，著書

M. NAGASAKA and N. KOSUGI, "Soft X-Ray Absorption Spectroscopy for Observing Element-Specific Intermolecular Interaction in Solution Chemistry," *Chem. Lett.* **50(5)**, 956–964 (2021). DOI: 10.1246/cl.200938

B-4) 招待講演

長坂将成,「軟Ｘ線吸収分光法による溶液反応のオペランド観測」, 日本学術振興会 69 委員会第２分科会（新素材関連技術）第 74 回研究会「機能材料開発を支えるその場（In-situ）・動作環境下（Operando）計測技術の最近の進展」, オンライン開催, 2021 年 7 月.

長坂将成,「SX 吸収散乱の現状と展開」, UVSOR 第４回次期施設建設検討会, オンライン開催, 2021 年 11 月.

M. NAGASAKA, "Soft X-ray absorption spectroscopy of liquids for understanding chemical processes in solution," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021) "Frontiers of Higher Energy UV Spectroscopy," Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

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).

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濃度依存性の解明」, 長坂将成 (2021 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).

科研費基盤研究(B),「励起キャリア移動の指向性制御による高効率光触媒表面の構築」（代表；吉田真明), 長坂将成（研究分担者）(2021 年–2023 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　將輝（助教）(クロスアポイントメント；名古屋大学シンクロトロン光研究センター）
稲垣　いつ子（事務支援員）
石原　麻由美（事務支援員）
加茂　恭子（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) 自由電子レーザーや関連技術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た。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。放射光の時間構造や干渉性の実験的検証を進め，全く新しい放射光利用法の開拓を進めている。

B-1) 学術論文

Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA and M. KATOH, "Reply to 'Comment on "Coherent Control in the Extreme Ultraviolet and Attosecond Regime by Synchrotron Radiation"'," *Nat. Commun.* **12(1)**, 3782 (3 pages) (2021). DOI: 10.1038/s41467-021-24029-4

K. ALI, H. ZEN, H. OHGAKI, T. KII, T. HAYAKAWA, T. SHIZUMA, H. TOYOKAWA, M. FUJIMOTO, Y. TAIRA and M. KATOH, "Three-Dimensional Nondestructive Isotope-Selective Tomographic Imaging of ^{208}Pb Distribution via Nuclear Resonance Fluorescence," *Appl. Sci. (Switzerland)* **11(8)**, 3415 (14 pages) (2021). DOI: 10.3390/app11083415

E. SALEHI and M. KATOH, "Spatial Structure and Angular Momentum of Electro-Magnetic Wave Radiated from a Relativistic Electron Moving on a Spiral Orbit," *J. Adv. Simulat. Sci. Eng.* **8(1)**, 87–97 (2021). DOI: 10.15748/jasse.8.870

K. ALI*, H. ZEN, H. OHGAKI, T. KII, T. HAYAKAWA, T. SHIZUMA, M. KATOH, Y. TAIRA, M. FUJIMOTO and H. TOYOKAWA, "Fusion Visualization Technique to Improve a Three-Dimensional Isotope-Selective CT Image Based on Nuclear Resonance Fluorescence with a Gamma-CT Image," *Appl. Sci. (Switzerland)* **11(24)**, 11866 (17 pages) (2021). DOI: 10.3390/app112411866

B-4) 招待講演

M. KATOH, "Structured high energy photons radiated from relativistic electrons," 3rd International Conference on Nuclear Photonics, Online, June 2021.

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, 2019–2021).

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教育研究評議会評議員 (2021–).

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–).

その他

あいちシンクロトロン光センター運営委員 (2013–).

B-8) 大学での講義，客員

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

高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設, 客員教授, 2018年4月– .

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「放射光の位相構造制御法の開発」, 加藤政博 (2020年–2022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，回折限界を目指す全く新しい加速器の建設についても検討を進める。

高エネルギー自由電子を用いた光発生として，自由電子レーザーやレーザーコンプトン散乱ガンマ線，コヒーレントシンクロトロン放射の発生法の開発や高度化，それらの利用法の開拓に取り組んできた。最近では光子の時空間構造やその干渉性の実験的検証やその利用法の開拓に挑戦している。放射光による光渦の生成，さらに放射光光渦同士の合成によるベクトルビーム発生など, UVSOR の研究環境を活用して世界に先駆けた研究ができた。また, 二連アンジュレータから放射される光子の時間構造を利用した量子状態制御について先駆的な成果が出ている。相対論的自由電子からの電磁放射の時空間構造の制御とその応用というこれまで全く着目されていなかった領域を切り拓きつつあり，今後はさらに基礎研究を進めるとともに幅広く応用展開の可能性を探っていきたい。

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）

杉田　健人（助教）
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）
田部　圭梧（特別共同利用研究員）
後藤　啓太（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）
加茂　恭子（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 の独自技術である超短パルスガンマ線を用いた陽電子消滅分光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。超短パルスガンマ線は，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発生し，そのパルス幅はサブピコ秒からピコ秒オーダーである。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，陽電子消滅分光法による材料中の欠陥分析をユーザーに提供している。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に厚さ数 cm のバルク材料の欠陥分析を行うことが可能である。2021 年度は，新しいレーザー導入チャンバーを電子蓄積リングに導入し，ガンマ線の強度が 40 倍になったことを確認した。陽電子の寿命測定に加えて，寿命運動量相関測定法の開発も開始しており，分析技術の拡充を目指す。また，パルスではない連続ガンマ線を用いたユーザー利用も行っており，ユーザー執筆の論文が発表された。陽電子消滅分光法とガンマ線の施設利用及び協力研究と有償利用（民間企業）の全申請件数は，2020 年度が 8 件，2021 年度 15 件と順調に伸びており，今後の成果発表が期待される。

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おり，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。また，UVSOR においても非線形逆トムソン

散乱実験を行うため，パルスエネルギー 50 mJ のレーザー装置の立ち上げを現在行っている。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. ALI, H. ZEN, H. OHGAKI, T. KII, T. HAYAKAWA, T. SHIZUMA, H. TOYOKAWA, M. FUJIMOTO, Y. TAIRA and M. KATOH, "Three-Dimensional Nondestructive Isotope-Selective Tomographic Imaging of ^{208}Pb Distribution via Nuclear Resonance Fluorescence," *Appl. Sci. (Switzerland)* **11(8)**, 3415 (14 pages) (2021). DOI: 10.3390/app11083415

K. ALI, H. OHGAKI, H. ZEN, T. KII, T. HAYAKAWA, T. SHIZUMA, H. TOYOKAWA, Y. TAIRA, V. IANCU, G. TURTURICA, C. A. UR, M. FUJIMOTO and M. KATOH, "Selective Isotope CT Imaging Based on Nuclear Resonance Fluorescence Transmission Method," *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **67(8)**, 1976–1984 (2020). DOI: 10.1109/TNS.2020.3004565

E. SALEHI and M. KATOH, "Spatial Structure and Angular Momentum of Electro-Magnetic Wave Radiated from a Relativistic Electron Moving on a Spiral Orbit," *J. Adv. Simulat. Sci. Eng.* **8(1)**, 87–97 (2021). DOI: 10.15748/jasse.8.870

K. ALI, H. ZEN, H. OHGAKI, T. KII, T. HAYAKAWA, T. SHIZUMA, M. KATOH, Y. TAIRA, M. FUJIMOTO and H. TOYOKAWA, "Fusion Visualization Technique to Improve a Three-Dimensional Isotope-Selective CT Image Based on Nuclear Resonance Fluorescence with a Gamma-CT Image," *Appl. Sci. (Switzerland)* **11(24)**, 11866 (17 pages) (2021). DOI: 10.3390/app112411866

B-4) 招待講演

平　義隆,「高エネルギー電子ビームを用いた新規ガンマ線源開発と利用研究」, 電気学会調査専門委員会「放射線技術を利用した微量分析およびイメージング技術」, オンライン開催, 2021 年 12 月.

B-6) 受賞，表彰

平　義隆, 第 64 回放射線化学討論会優秀賞（一般）(2021).

山本涼平, 2021 年度ビーム物理研究会若手の会若手発表賞 (2021).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

ビーム物理研究会 若手の会 幹事 (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).

日本加速器学会第 19 回年会組織委員 (2021–2022).

日本加速器学会第 19 回年会プログラム委員 (2022).

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),「超短パルスガンマ線を用いた陽電子寿命運動量相関測定法の開発と利用研究の推進」, 平　義隆 (2021年–2024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–2023年).

C)　研究活動の課題と展望

陽電子消滅分光法に関しては，陽電子寿命測定法と寿命運動量相関測定法に加えて，同時計数ドップラー拡がり法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。計算上はパルス幅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，らせん波面を形成するガンマ線渦が発生していることを実験的に実証する。

大　東　琢　治（助教）（2011 年 8 月 1 日～ 2022 年 1 月 31 日）*）
（准教授）（2022 年 2 月 1 日着任）
（クロスアポイントメント；KEK 物質構造科学研究所）

稲垣　いつ子（事務支援員）
石原　麻由美（事務支援員）
加茂　恭子（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解能 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

H. SUGA, K. SUZUKI, T. USUI, A. YAMAGUCHI, O. SEKIZAWA, K. NITTA, Y. TAKEICHI, T. OHIGASHI and Y. TAKAHASHI, “A New Constraint on the Physicochemical Condition of Mars Surface during the Amazonian Epoch Based on Chemical Speciation for Secondary Minerals in Martian Nakhlites,” *Minerals* **11(5)**, 514 (25 pages) (2021). DOI: 10.3390/min11050514

G. GERMER, T. OHIGASHI, H. YUZAWA, N. KOSUGI, R. FLESCH, F. RANCAN, A. VOGT and E. RÜHL, “Improved Skin Permeability after Topical Treatment with Serine Protease: Probing the Penetration of Rapamycin by Scanning Transmission X-Ray Microscopy,” *ACS Omega* **6(18)**, 12213–12222 (2021). DOI: 10.1021/acsomega.1c01058

N. SHIRAI, Y. KAROUJI, K. KUMAGAI, M. UESUGI, K. HIRAHARA, M. ITO, N. TOMIOKA, K. UESUGI, A. YAMAGUCHI, N. IMAE, T. OHIGASHI, T. YADA and M. ABE, “The Effects of Possible Contamination by Sample Holders on Samples to Be Returned by Hayabusa2,” *Meteorit. Planet. Sci.* **55(79)**, 1665–1680 (2020). DOI: 10.1111/maps.13480

T. HARANO, Y. TAKEICHI, T. OHIGASHI, D. SHINDO, E. NEMOTO, D. WAKABAYASHI, S. YAMASHITA, R. MURAO and M. KIMURA, “Azimuthal-Rotation Sample Holder for Molecular Orientation Analysis,” *J. Synchrotron Radiat.* **27**, 1167–1171 (2020). DOI: 10.1107/S160057752000990X

J.-J. V. VÉLEZ, Y.-Y. CHIN, M.-H. TSAI, O. J. BURTON, R. WANG, S. HOFMANN, W.-H. HSU, T. OHIGASHI, W.-F. PONG and C.-H. CHUANG, "Evidence of Synergistic Electrocatalysis at a Cobalt Oxide–Graphene Interface through Nanochemical Mapping of Scanning Transmission X-Ray Microscopy," *Chin. J. Phys.* **76**, 135–144 (2022). DOI: 10.1016/j.cjph.2021.09.018

Y.-A. CHEN, H.-W. SHIU, Y.-J. HSU, L. E. MUNDT, W.-T. HUNG, T. OHIGASHI, M.-H. LI and P. CHEN, "Effect of the Large-Size A-Site Cation on the Crystal Growth and Phase Distribution of 2D/3D Mixed Perovskite Films via a Low-Pressure Vapor-Assisted Solution Process," *J. Phys. Chem. C* **125(48)**, 26601–26612 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c07795

J. S. D. RODRIGUEZ, T. OHIGASHI, C.-C. LEE, M.-H. TSAI, C.-C. YANG, C.-H. WANG, C. CHEN, W.-F. PONG, H.-C. CHIU and C.-H. CHUANG, "Modulating Chemical Composition and Work Function of Suspended Reduced Graphene Oxide Membranes through Electrochemical Reduction," *Carbon* **185**, 410–418 (2021). DOI: 10.1016/j.carbon.2021.09.015

S. MITSUNOBU, Y. OHASHI, H. MAKITA, Y. SUZUKI, T. NOZAKI, T. OHIGASHI, T. INA and Y. TAKAKI, "One-Year In Situ Incubation of Pyrite at the Deep Seafloor and Its Microbiological and Biogeochemical Characterizations," *Appl. Environ. Microbiol.* **87(23)**, e0097721 (2021). DOI: 10.1128/AEM.00977-21

H.-T. WANG, J.-W. CHIOU, K.-H. CHEN, A. R. SHELKE, C.-L. DONG, C.-H. LAI, P.-H. YEH, C.-H. DU, C.-Y. LAI, K. ASOKAN, S.-H. HSIEH, H.-W. SHIU, C.-W. PAO, H.-M. TSAI, J.-S. YANG, J.-J. WU, T. OHIGASHI and W.-F. PONG, "Role of Interfacial Defects in Photoelectrochemical Properties of $BiVO_4$Coated on ZnO Nanodendrites: X-Ray Spectroscopic and Microscopic Investigation," *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13(35)**, 41524–41536 (2021). DOI: 10.1021/acsami.1c08522

M. ITO, Y. TAKANO, Y. KEBUKAWA, T. OHIGASHI, M. MATSUOKA, K. KIRYU, M. UESUGI, T. NAKAMURA, H. YUZAWA, K. YAMADA, H. NARAOKA, T. YADA, M. ABE, M. HAYAKAWA, T. SAIKI, S. TACHIBANA and HAYABUSA2 PROJECT TEAM, "Assessing the Debris Generated by the Small Carry-On Impactor Operated from the Hayabusa2 Mission," *Geochem. J.* **5(4)**, 223–239 (2021). DOI: 10.2343/geochemj.2.0632

M. YOSHIDA, M. MIYAHARA, H. SUGA, A. YAMAGUCHI, N. TOMIOKA, T. SAKAI, H. OHFUJI, F. MAEDA, I. OHIRA, E. OHTANI, S. KAMADA, T. OHIGASHI, Y. INAGAKI, Y. KODAMA and N. HIRAO, "Elucidation of Impact Event Recorded in the Lherzolitic Shergottite NWA 7397," *Meteorit. Planet. Sci.* **56(9)**, 1729–1743 (2021). DOI: 10.1111/maps.13735

Y. KEBUKAWA, M. E. ZOLENSKY, C. A. GOODRICH, M. ITO, N. O. OGAWA, Y. TAKANO, N. OHKOUCHI, K. KIRYU, M. IGISU, T. SHIBUYA, M. A. MARCUS, T. OHIGASHI, J. MARTINEZ, Y. KODAMA, M. H. SHADDAD and P. JENNISKENS, "Organic Matter in Carbonaceous Chondrite Lithologies of Almahata Sitta: Incorporation of Previously Unsampled Carbonaceous Chondrite Lithologies into Ureilitic Regolith," *Meteorit. Planet. Sci.* **56(7)**, 1311–1327 (2021). DOI: 10.1111/maps.13713

B-4) 招待講演

大東琢治,「はやぶさ２帰還試料の顕微有機物分析とアウトリーチ活動」, ビーム物理若手の会, online, 2021年5月.

大東琢治,「走査型透過X線顕微鏡による分光イメージングの最前線」, SR セミナー , 立命館大学SR センター , 草津, 2021年7月.

大東琢治,「はやぶさ２帰還試料の顕微有機物分析」, ILC 技術セミナー & 岩手大学加速器科学連続セミナー , online, 2021年 8月.

大東琢治,「走査型透過Ｘ線顕微鏡による有機物分光イメージングの現状」, 高分子学会, online, 2021年 9月.

大東琢治,「走査型透過Ｘ線顕微鏡による顕微分析の先端研究――はやぶさ２，ドラッグデリバリー，アポトーシス――」, 日本分析化学会, online, 2021年 9月.

大東琢治,「走査型透過軟Ｘ線顕微鏡による高分解能化学状態解析」, 格子欠陥フォーラム, online, 2021年 9月.

大東琢治,「宇宙の中のミクロ，ミクロの中の宇宙 はやぶさ２帰還試料のナノ有機物分析」, 分子科学研究所一般公開, online, 2021年 10月.

大東琢治,「UVSOR におけるはやぶさ２帰還試料の有機物分析」, OPJ2021, online, 2021年 10月.

大東琢治,「走査型透過Ｘ線顕微鏡による分光イメージングの最前線」, あいちSR 講演会, あいちシンクロトロン光センター , 瀬戸, 2021年 12月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

SpectroNanoscopy Workshop, Organizing Committee (2014–).

Ｘ線結像光学研究会幹事 (2015–).

第 35回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム座長 (2022).

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 (2017–2021).

その他

とよた科学体験館「Ｘ線で見るとても小さな物質の宇宙～ドラッグデリバリーからはやぶさ２まで～」講演 (2021).

中日文化センター「はやぶさ２で帰還した石の有機物分析」講演 (2022).

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).

C) 研究活動の課題と展望

ナノバブルは直径 180 nm 程度の泡であり，気圧より高いとされる内部圧力や，表面電荷を有しているなど，独特の物性を持つ。すでに半導体の洗浄などの応用利用がされてはいるものの，サイズが小さい上に，内部が気体の泡であることによる測定の難しさから，それらの物性やメカニズムは未解明の部分が多い。そこで軟Ｘ線領域において，エネルギーに対する変化は吸収より屈折の方が大きいことに着目し，STXM を用いてＸ線微分位相差顕微光学系の構築を行う。これにより得られる情報は，試料の２次元微分位相分布である。これをエネルギーを走引して測定を

行うことにより，スペクトロスコピーに応用したDiffraction Anomalous Fine Structure（DAFS）測定を行う。DAFS はKramers-Kronig の関係より吸収スペクトルへと変換されるので，化学的解釈が可能である。特に軟Ｘ線領域においては，適切な測定手法がこれまでなかったことから，報告例は著者の知識の限りでは未だ存在ない。今後の主題として，Ｘ線位微分相差顕微光学系の構築に伴う位相分布測定手法の確立を行う。またこの手法を応用して，ナノバブルの物性解明を行なっていく予定である。

＊）2022 年 2 月 1 日高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所准教授

光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

松　井　文　彦（主任研究員）（2018 年 4 月 1 日～ 2021 年 11 月 15 日）
（教授）(2021 年 11 月 16 日昇任）

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）
加茂　恭子（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・多次元スピン分析器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・プレスリリースを通じて成果発信を続けている。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 $Å^{-1}$ 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。
b) 物性評価に適した光波長帯の連続的なエネルギー可変性がUVSOR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る。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た k_z 分散測定による全 Brillouin 域価電子帯分散マッピングや偏光特性を活かした原子軌道波動関数解析技術は BL6U での共同研究推進の基盤であるが，さらに精緻な測定を行い，表面特有の電子状態や現象の情報を引き出す研究展開を進めている。
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 $TiSe_2$ 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 and H. MATSUDA, "Projection-Type Electron Spectroscopy Collimator Analyzer for Charged Particles and X-Ray Detections," *Rev. Sci. Instrum.* **92(7)**, 73301 (7 pages) (2021). DOI: 10.1063/5.0051114

O. ENDO, F. MATSUI, W.-J. CHUN, M. NAKAMURA, K. AMEMIYA and H. OZAKI, "Nanographene Growth from Benzene on Pt(111)," *Surf. Sci.* **711**, 121874 (2021). DOI: 10.1016/j.susc.2021.121874

K. SAKAMOTO, H. ISHIKAWA, T. WAKE, C. ISHIMOTO, J. FUJII, H. BENTMANN, M. OHTAKA, K. KURODA, N. INOUE, T. HATTORI, T. MIYAMACHI, F. KOMORI, I. YAMAMOTO, C. FAN, P. KRÜGER, H. OTA, F. MATSUI, F. REINERT, J. AVILA and M. C. ASENSIO, "Spatial Control of Charge Doping in n-Type Topological Insulators," *Nano Lett.* **21(10)**, 4415–4422 (2021). DOI: 10.1021/acs.nanolett.1c01100

S. MAKITA, H. MATSUDA, Y. OKANO, T. YANO, E. NAKAMURA, Y. HASEGAWA, S. KERA, S. SUGA and F. MATSUI, "Contrast Inversion of Photoelectron Spectro-Microscopy Imag," *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **19**, 42–47 (2021). DOI: 10.1380/EJSSNT.2021.42

F. MATSUI, S. MAKITA, H. MATSUDA, E. NAKAMURA, Y. OKANO, T. YANO, S. KERA and S. SUGA, "Valence Band Dispersion Embedded in Resonant Auger Electrons," *J. Phys. Soc. Jpn.* **90(12)**, 124710 (9 pages) (2021). DOI: s10.7566/JPSJ.90.124710

B-3) 総説, 著書

F. MATSUI, S. MAKITA, Y. OKANO, H. MATSUDA and S. KERA, "Photoelectron Momentum Microscope: Development at UVSOR Synchrotron Facility," *Vac. Surf. Sci.*, **64(6)**, 262–268 (2021). DOI: 10.1380/vss.64.262 (in Japanese)

松井文彦（編集者・分担著者）,「図説表面分析ハンドブック」, 朝倉書店 (2021). ISBN: 978-4-254-20170-3

B-4) 招待講演

松井文彦,「顕微光電子分光の技術的な展開と課題～放射光と光電子運動量顕微鏡～」, R026先端計測技術の将来設計委員会第４回研究会, オンライン開催, 2021年４月.

F. MATSUI, "Soft X-ray Photoelectron Momentum Microscopy: Resonating valence band element-selectively," FHI-IMS Joint Seminar, online, June 2021.

F. MATSUI, "Introduction to the contrarian usage of two-dimensional photoelectron spectroscopy," HiSOR セミナー , 広島大学, オンライン開催, 2021年６月.

F. MATSUI, "Toward comprehensive analysis of electronic and spin structure by UVSOR Photoelectron Momentum Microscope," Advanced Light Source Users meeting 2021, online, August 2021.

松井文彦,「光電子運動量顕微鏡の拠点構築と展開」, 日本物理学会 2021秋季大会, オンライン開催, 2021年９月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

表面真空学会理事 (2021.5–).

日本放射光学会庶務幹事 (2021.9–).

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–).

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」岡崎市立甲山中学校 (2021).

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 (2022).

B-10) 競争的資金

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).

科研費挑戦的研究（開拓),「ドーパントの価数ごとの立体原子配列を観測する小型測定装置の研究」（代表;松下智裕), 松井文彦（研究分担者）(2021年–2025年).

C)　研究活動の課題と展望

UVSOR 型Momentum Microscope（MM）利用研究を推進する。顕微角度分解光電子分光，共鳴光電子分光，3D 波数空間分解光電子分光法を協力研究に供するとともに自身の表面物性科学研究を進める。軟Ｘ線ビームラインとVUVビームライン両方を同時にMMに導くtwo-beam MM実験ステーションをデザインした。2020年度は片方（BL6U）での運用が始まった。2021年度以降２本目のビームラインに接続，2022年度以降のMM の将来の拡張として２次元スピン検出器を用いたスピン分解光電子分光によるスピン物性研究の展開を計画しているが，その基礎研究として磁性薄膜・キラル分子膜の電子状態・原子構造研究を進める。

MM 開発の先駆者がいるForschungszentrum Jülich（FZJ）の電子物性部門（PGI-6）と学術協定を結び，表面電子物性の共同研究を進めてきたおかげで, UVSOR でもMM が順調に立ち上がった。時間分解型のMM 開発を進めるドイツ・DESY のM. Hoesch らとも共同研究を密にし，こちらからスピン研究に関して相手から時間分解測定法に関して経験技術交流を進める。本装置を活かした実験を積極的に進めるユーザーコミュニティ構築のための第１回（2019）・第２回（2020.10）国際ワークショップに続き，東アジア圏でのMM 開発グループの萌芽のネットワークづくりに取り掛かり，またFHI・HiSOR・ALS 各機関との合同セミナーで招待講演を行った。UVSOR の国内外からのビジビリティを高めるとともに，他のビームラインにも先端拠点を目指す機運と風土の定着を活動指針として進めている。

田　中　清　尚（准教授）（2014 年 4 月 1 日着任）

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）
杉本　卓史（特別共同利用研究員）
保科　拓海（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）
加茂　恭子（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。

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ター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することは困難であることが判明した。そこで，2021 年度は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，スピンターゲットの磁化操作を不要とすることに成功したが，スピンマニピュレータのパラメータ整備が必要となっている。2022 年度にパラメータの整備を完了してユーザー利用開始を目指す予定である。

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

T. FUKASAWA, S. KUSAKA, K. SUMIDA, M. HASHIZUME, S. ICHINOKURA, Y. TAKEDA, S. IDETA, K. TANAKA, R. SHIMIZU, T. HITOSUGI and T. HIRAHARA, “Absence of Ferromagnetism in $MnBi_2Te_4/Bi_2Te_3$ down to 6 K,” *Phys. Rev. B* **103(20)**, 205405 (6 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.103.205405

J. OKABAYASHI, S. LI, S. SAKAI, Y. KOBAYASHI, T. MITSUI, K. TANAKA, Y. MIURA and S. MITANI, "Perpendicular Magnetic Anisotropy at the Fe/Au(111) Interface Studied by Mössbauer, X-Ray Absorption, and Photoemission Spectroscopies," *Phys. Rev. B* **103(10)**, 104435 (8 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.103.104435

T. HIRAHARA, M. M. OTROKOV, T. T. SASAKI, K. SUMIDA, Y. TOMOHIRO, S. KUSAKA, Y. OKUYAMA, S. ICHINOKURA, M. KOBAYASHI, Y. TAKEDA, K. AMEMIYA, T. SHIRASAWA, S. IDETA, K. MIYAMOTO, K. TANAKA, S. KURODA, T. OKUDA, K. HONO, S. V. EREMEEV and E. V. CHULKOV, "Fabrication of a Novel Magnetic Topological Heterostructure and Temperature Evolution of Its Massive Dirac Cone," *Nat. Commun.* **11(1)**, 4821 (8 pages) (2020). DOI: 10.1038/s41467-020-18645-9

I. SUZUKI, Z. LIN, S. KAWANISHI, K. TANAKA, Y. NOSE, T. OMATA and S. TANAKA, "Direct Evaluation of Hole Effective Mass of SnS–SnSe Solid Solutions with ARPES Measurement," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24(2)**, 634–638 (2022). DOI: 10.1039/D1CP04553A

K. HAGIWARA, M. ISHIKADO, M. HORIO, K. KOSHIISHI, S. NAKATA, S. IDETA, K. TANAKA, K. HORIBA, K. ONO, H. KUMIGASHIRA, T. YOSHIDA, S. ISHIDA, H. EISAKI, S. SHAMOTO and A. FUJIMORI, "Superconducting Gap and Pseudogap in the Surface States of the Iron-Based Superconductor $PrFeAsO_{1-y}$ Studied by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy," *Phys. Rev. Res.* **3(4)**, 43151 (5 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.3.043151

D. TAKANE, Y. KUBOTA, K. NAKAYAMA, T. KAWAKAMI, K. YAMAUCHI, S. SOUMA, T. KATO, K. SUGAWARA, S. IDETA, K. TANAKA, M. KITAMURA, K. HORIBA, H. KUMIGASHIRA, T. OGUCHI, T. TAKAHASHI, K. SEGAWA and T. SATO, "Dirac Semimetal Phase and Switching of Band Inversion in $X Mg_2Bi_2$ (X = Ba and Sr)," *Sci. Rep.* **11(1)**, 21937 (9 pages) (2021). DOI: 10.1038/s41598-021-01333-z

S. NAKATA, M. HORIO, K. KOSHIISHI, K. HAGIWARA, C. LIN, M. SUZUKI, S. IDETA, K. TANAKA, D. SONG, Y. YOSHIDA, H. EISAKI and A. FUJIMORI, "Nematicity in a Cuprate Superconductor Revealed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy under Uniaxial Strain," *npj Quantum Mater.* **6(1)**, 86 (6 pages) (2021). DOI: 10.1038/s41535-021-00390-x

S. IDETA, S. JOHNSTON, T. YOSHIDA, K. TANAKA, M. MORI, H. ANZAI, A. INO, M. ARITA, H. NAMATAME, M. TANIGUCHI, S. ISHIDA, K. TAKASHIMA, K. M. KOJIMA, T. P. DEVEREAUX, S. UCHIDA and A. FUJIMORI, "Hybridization of Bogoliubov Quasiparticles between Adjacent CuO_2 Layers in the Triple-Layer Cuprate $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\delta}$ Studied by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy," *Phys. Rev. Lett.* **127(21)**, 217004 (6 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevLett.127.217004

T. YAMAMOTO, D. HIRAGA, I. ARASHI, K. TAKASUGI, T. NAITO, M. URUICHI, F. TESHIMA, K. TANAKA, M. NOMURA and R. KATO, "Coexistence of Interchanged and Normal Orbital Levels in a Molecular Conductor Consisting of a Metal-Dithiolene Complex," *J. Phys. Soc. Jpn.* **90(11)**, 114704 (10 pages) (2021). DOI: 10.7566/JPSJ.90.114704

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/EJSSNT.2020.18

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, 2021).

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ター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することは困難であることが判明した。そこで，2021年度は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，スピンターゲットの磁化操作を不要とすることに成功したが，スピンマニピュレータのパラメータ整備が必要となっている。2022年度にパラメータの整備を完了してユーザー利用開始を目指す予定である。新助教が10月に着任予定なので新しい体制で研究を推進する。

光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

岩　山　洋　士（助教）（2010 年 4 月 1 日着任）

稲垣　いつ子（事務支援員）
石原　麻由美（事務支援員）
加茂　恭子（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) 軟Ｘ線共鳴散乱法によるソフトマターのメゾスコピック構造解析

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) ソフトマターは分子が凝集し集団となることで特徴的な粘弾性や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。特にソフトマター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。また，元素選択性を有し，特定の官能基などの構造解析が可能である。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，液晶分子などのソフトマター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 殻吸収端は光エネルギー 1 keV 以下の軟Ｘ線領域であるため，軟Ｘ線を用いる必要がある。本グループでは 2020 年度より軟Ｘ線共鳴散乱法を実現すべく，散乱観測のための装置開発を行っている。装置の立ち上げでは，液晶分野を専門とする共同研究者らと共にキラルスメクチック液晶を用いて，従来のＸ線小角散乱法では観測できなかった，強誘電体，反強誘電体およびその副次相による数 nm から 10 nm 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。また，さらなる装置開発により，測定範囲を数 nm から 10 nm 程度であったものを，最大 100 nm 程度まで測定可能にし，屈曲型液晶分子がおおよそ 60 nm の周期でらせん構造を有するナノヘリカルフィラメント構造であることを確認した。

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・プローブ法によるフェムト秒時間分解・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。また，高強度のポンプ光では，メンブレンが破損するため，メンブレンを用いないマイクロ流路を用いた

液厚 20 〜 1000 nm の超薄膜フラットジェット法の開発を行った。現在，超薄膜フラットジェットの厚みを評価するための，干渉計を準備しており，2022 年度より稼働する予定である。今後，液体セル法またはフラットジェット法と同期光学レーザーと組み合わせることで，ポンプ・プローブ法によるフェムト秒時間分解軟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

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA and M. KATOH, "Electron Wave Packet Interference in Atomic Inner-Shell Excitation," *Phys. Rev. Lett.* **126(11)**, 113202 (6 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevLett.126.113202

J. KESKINEN, K. JANKALA, S. M. HUTTULA, T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, E. SHIGEMASA, H. IWAYAMA, K. SOEJIMA, K. ITO, L, ANDRIC, M. A. KHALAL, J. PALAUDOUX, F. PENENT and P. LABLANQUIE, "Auger Decay of the 3d Hole in the Isoelectronic Series of Br, Kr^{+}, and Rb^{2+}," *Phys. Rev. A* **103(3)**, 032828 (8 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevA.103.032828

Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA and M. KATOH, "Reply to 'Comment on "Coherent Control in the Extreme Ultraviolet and Attosecond Regime by Synchrotron Radiation"'," *Nat. Commun.* **12(1)**, 3782 (3 pages) (2021). DOI: 10.1038/s41467-021-24029-4

F. ALLUM, N. ANDERS, M. BROUARD, P. BUCKSBAUM, M. BURT, B. DOWNES-WARD, S. GRUNDMANN, J. HARRIES, Y. ISHIMURA, H. IWAYAMA, L. KAISER, E. KUKK, J. LEE, X. LIU, R. S. MINNS, K. NAGAYA, A. NIOZU, J. NISKANEN, J. O'NEAL, S. OWADA, J. PICKERING, D. ROLLES, A. RUDENKO, S. SAITO, K. UEDA, C. VALLANCE, N. WERBY, J. WOODHOUSE, D. YOU, F. ZIAEE, T. DRIVER and R. FORBES, "Multi-Channel Photodissociation and XUV-Induced Charge Transfer Dynamics in Strong-Field-Ionized Methyl Iodide Studied with Time-Resolved Recoil-Frame Covariance Imaging," *Faraday Discuss.* **228**, 571–596 (2021). DOI: 10.1039/d0fd00115e

B-7) 学会および社会的活動

学会誌編集委員

原子衝突学会学会誌編集員 (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）

小板谷　貴典（助教）
山本　航平（助教）
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不均一触媒その場観察への応用

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。2021 年前半には，PEFC Pt 合金電極の能劣化試験後の硫黄被毒状態に関する雰囲気制御型硬Ｘ線光電子分光法を論文として発表した。NEDO 事業が終了し，より一般的な不均一触媒等について対象を拡げて研究を遂行しているところである。

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。また，磁性薄膜の原子層毎の磁性を解析するべく軟Ｘ線反射率測定技術開発を行っている。

B-1) 学術論文

A. KOIDE, Y. UEMURA, D. KIDO, Y. WAKISAKA, S. TAKAKUSAGI, B. OHTANI, Y. NIWA, S. NOZAWA, K. ICHIYANAGI, R. FUKAYA, S.-I. ADACHI, T. KATAYAMA, T. TOGASHI, S. OWADA, M. YABASHI, Y. YAMAMOTO, M. KATAYAMA, K. HATADA, T. YOKOYAMA and K. ASAKURA, "Photoinduced Anisotropic Distortion as the Electron Trapping Site of Tungsten Trioxide by Ultrafast W L1-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy with Full Potential Multiple Scattering Calculations," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22(5)**, 2615–2621 (2020). DOI: 10.1039/c9cp01332f

Y. UEMURA, A. S. M. ISMAIL, S. H. PARK, S. KWON, M. KIM, Y. NIWA, H. WADATI, H. ELNAGGAR, F. FRATI, T. HAARMAN, N. HÖPPEL, N. HUSE, Y. HIRATA, Y. ZHANG, K. YAMAGAMI, S. YAMAMOTO, I. MATSUDA, T. KATAYAMA, T. TOGASHI, S. OWADA, M. YABASHI, U. HALISDEMIR, G. KOSTER, T. YOKOYAMA, B. M. WECKHUYSEN and F. M. F. DE GROOT, "Femtosecond Charge Density Modulations in Photoexcited $CuWO_4$," *J. Phys. Chem. C* **125(13)**, 7329–7336 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c10525

S. IKEMOTO, S. MURATSUGU, T. KOITAYA and M. TADA, "Chromium Oxides as Structural Modulators of Rhodium Dispersion on Ceria to Generate Active Sites for NO Reduction," *ACS Catal.* **12**, 431–441 (2022). DOI: 10.1021/acscatal.1c03807

T. SUZUKI, Y. KUBOTA, A. NAKAMURA, T. SHIMOJIMA, K. TAKUBO, S. ITO, K. YAMAMOTO, S. MICHIMAE, H. SATO, H. HIRAMATSU, H. HOSONO, T. TOGASHI, M. YABASHI, H. WADATI, I. MATSUDA, S. SHIN and K. OKAZAKI, "Ultrafast Optical Stress on $BaFe_2As_2$," *Phys. Rev. Res.* **3**, 033222 (12 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.3.033222.

K. TAKUBO, H. MAN, S. NAKATSUJI, K. YAMAMOTO, Y. ZHANG, Y. HIRATA, H. WADATI, A. YASUI, T. MIZOKAWA and D. I. KHOMSKII, "Spin-Orbital Liquid in $Ba_3CuSb_2O_9$ Stabilized by Oxygen Holes," *Phys. Rev. Mater.* **5**, 075002 (7 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.5.075002

B-3) 総説，著書

T. YOKOYAMA, "Thermal Expansion of FeNi Invar and Zinc-Blende CdTe from the View Point of Local Structure," *Microstructures* **1(1)**, 2021003 (22 pages) (2021). DOI: 10.20517/microstructures.2021.001

B-4) 招待講演

横山利彦,「分子・物質合成プラットフォーム 10年間の成果」, 第 20回ナノテクノロジー総合シンポジウム , 東京ビッグサイト , 2022年 1月 .

T. YOKOYAMA, "Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy on Polymer Electrolyte Fuel Cells under Working Conditions," MRM2021, Yokohama (Japan) (online), December 2021.

T. YOKOYAMA, "*Operando* observation of working polymer electrolyte fuel cell studied by ambient pressure hard X-ray photoelectron spectroscopy," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

T. YOKOYAMA, "Precise EXAFS approaches to invar alloys and negative thermal expansions," Global XAS Journal Club Europe and Asia-Oceania, The International X-ray Absorption Society, online, June 2021.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会会長 (2021.10–2023.9).

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 (1998–2021).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

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).

文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ「マテリアルの高度循環のための技術　スポーク機関」業務主任者 (2021–2030).

文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ「運営機構横断領域（物質・材料合成）」業務主任者 (2022–2030).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究 (A), 「液体を反応場とした動的オペランド硬Ｘ線光電子分光システムの開発」（代表：横山利彦), 小板谷貴典（研究分担者), 山本航平（研究分担者) (2021年–2023年).

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」, 小板谷貴典 (2017年–2021年).

科研費若手研究, 「共鳴Ｘ線磁気反射率測定による磁性体多層膜の内部構造の解明」, 山本航平 (2021年–2024年).

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–2021年).

C)　研究活動の課題と展望

2002年１月着任以降，磁性薄膜の表面分子科学的制御と新しい磁気光学分光法の開発を主テーマとして，高磁場極低温Ｘ線磁気円二色性（UVSOR）や紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の発明，広域Ｘ線吸収微細構造（EXAFS）法と経路積分法によるインバー等磁性合金の熱膨張等などで成果を上げてきた。2011年度から，SPring-8 の超高輝度硬Ｘ線を利用した燃料電池の in situ 雰囲気制御型硬Ｘ線光電子分光の開発を行い，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月に小板谷貴典助教が着任し，雰囲気制御光電子分光等を用いた表面化学反応機構解明を目標とした研究への展開，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ダ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（特任研究員）
鶴岡　和幸（特任研究員）
市井　智章（特任研究員）
高橋　翔太（特任専門員）
佐藤　宏祐（大学院生）
林　仲秋（大学院生）
野口　直樹（大学院生）
望月　達人（特別共同利用研究員）
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，表面界面科学

A-2) 研究課題：

a) 電子非共鳴・表面プラズモン非共鳴条件における分子吸着系の三次非線形振動分光
b) 空間反転対称性の破れた埋没界面系の観測を拓く四次非線形振動分光への展開
c) メタンカップリング光触媒反応における吸着水の触媒的作用
d) 水素感度と高空間分解能を有する二次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) 電子共鳴あるいはプラズモン共鳴を用いて信号増大させることができない表面吸着分子系についても汎用的に観測可能なラマン分光法の確立を目指し，二つの光の差周波の唸りで分子振動を共鳴励起（強制振動）させる三次のコヒーレント反ストークスラマン分光法（CARS）に着目し，表面分光測定装置の構築を行ってきた。現在，平坦な Pt(111) 基板表面に蒸着させた透明絶縁体の氷薄膜及び等核二原子分子の H_2，D_2 ガスに対して CARS 測定に成功した。さらに，昇温脱離法（TPD）と組み合わせた測定により，分子の吸着・脱離プロセスをその場観測することにも成功した。さらに，この TPD-CARS 法を用いることで，結晶氷薄膜の振動励起子の広がりサイズが 100 K から 150 K にかけて温度と共に急速に減少することを明らかにすると共に，アモルファス氷薄膜については結晶化相転移温度のサイズ効果を観測することに成功した。[論文準備中]
b) 和周波発生振動分光法に代表される二次非線形分光法は空間反転対称性が破れたドメインに選択的な計測手法であり，表面界面観測に広く用いられている。しかし，振動励起のために赤外光を用いるため，赤外光が透過しない“物質に埋没した界面”の観測には適用できない。これを克服するため，物質中を透過する二つの光の差周波の唸りで分子振動を共鳴励起（強制振動）させ，それを第二高調波でコヒーレントにアップコンバージョンさせる四次非線形光学過程に基づく振動分光を展開し始めている。この手法を用いて，空間反転対称性が無い水晶薄膜の観測に透過配置と反射配置でそれぞれ成功し，その強度比から，その信号光が二次と三次のカスケード過程に由来するものでは無く，四次非線形光学過程に由来するものであることの確証を得た。[論文準備中]
c) 天然ガス中に豊富に含まれる資源であるメタンを光により活性化させ，化学的により付加価値が高い分子に変換させる

光触媒技術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。一般に，光触媒表面に水分子が吸着している場合には，メタンは完全酸化され二酸化炭素に変換されることが知られている（$CH_4 + H_2O \rightarrow CO_2 + 4H_2$）。ところが，水蒸気圧力を制御して水分子の吸着量を第一層吸着から多層吸着（10 層程度）まで系統的に変化させながら光触媒によるメタン転換反応を調べてみると，水分子吸着相が二層程度の時に，メタンの非酸化カップリング（$2CH_4 \rightarrow C_2H_6 + H_2$）によるエタン生成効率が顕著に増大することを見出だした。この反応式には水分子が露わには関与しないため，この現象の分子起源を探るべく，水分子同位体（D_2O）を用いたメタン転換光触媒過程のオペランド赤外分光測定を行った。その結果，吸着水分子は光触媒反応中に水酸基ラジカルとなり，それがメタンから水素をバリアレスに引き抜き（$CH_4 + {}^{\bullet}OD \rightarrow {}^{\bullet}CH_3 + HDO$）メチルラジカルを効率的に生成させ，そのメチルラジカル同士のカップリングによりエタン生成反応が誘起されている事が明らかになった（$2({}^{\bullet}CH_3) \rightarrow C_2H_6$）。［論文投稿中］

d) 走査トンネル顕微鏡と和周波発生振動分光法を組み合わせ，水分子吸着系の水素結合ネットワークにおいて機能発現のカギを握る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）”を高い空間分解能で観測する二次非線形顕微分光法（探針増強和周波発生振動分光法）の開発に世界に先駆けて取り組んでいる。その要素技術である Au ナノ探針を再現性高く作成することに成功するとともに，その探針を用いて STM 発光スペクトルのマッピングや探針増強ラマン分光法に成功するに至っている。現在，MHz 高繰り返しレーザー光源を用いた OPA システムの構築も概ね完了しており，ロックイン検出も併用して探針増強和周波発生振動分光に現在取り組んでいる。水分子吸着系は吸着エネルギーがそれほど高くなく脆いため，本手法を本格展開させるために，先ずは表面に強固に吸着することが知られているアルカンチオール分子系の自己組織化膜を用いて原理実証実験に取り組んでいる。

B-1) 学術論文

F. AMANO, H. MUKOHARA, H. SATO, C. TATEISHI, H. SATO and T. SUGIMOTO, “Vapor-Fed Photoelectrolysis of Water at 0.3 V Using Gas-Diffusion Photoanodes of $SrTiO_3$ Layers,” *Sustainable Energy Fuels* **4(3)**, 1443–1453 (2020). DOI: 10.1039/c9se01068h

B-3) 総説，著書

T. SUGIMOTO, “Ferroelectric Ice Films Grown on Metal Surfaces: Orientational Structure and Peculiar Physical Properties of Adsorbed Water Molecules Unveiled by Nonlinear Spectroscopy,” *Chemistry and Chemical Industry*, **74(5)**, 354–356 (2021). (in Japanese)

T. SUGIMOTO, “New Development of Active Species Observation by Operand Spectroscopy,” *LPM Lett.*, **25**, 16–19 (2021). (in Japanese)

B-4) 招待講演

杉本敏樹,「水分解光触媒ナノ粒子の高活性化に向けた表面エンジニアリングの学理構築」, ナノ学会第 19 回大会, オンライン開催, 2021 年 5 月.

杉本敏樹,「固体表面における水分子の特異な水素結合構造」, 第 15 回分子科学討論会 2021, オンライン開催, 2021 年 9 月.

杉本敏樹,「分光計測の挑戦：ナノ粒子光触媒の高活性化表面エンジニアリングにむけて」, 2021 年度日本表面真空学会中部支部研究会, オンライン開催, 2021 年 11 月.

杉本敏樹,「固体表面における分子吸着種のコヒーレント非線形分光」, 第 13回放射光学会若手研究会, オンライン開催, 2021年 12月.

T. SUGIMOTO, "Nuclear-spin conversion of molecular hydrogen physisorbed on cryogenic surface," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

杉本敏樹,「モデル星間氷のレーザー分子分光で拓く星間塵の新奇物性と機能」,「自然科学における階層と全体」シンポジウム, オンライン開催, 2022年 1月.

杉本敏樹,「物質表面吸着水の水素配置・配向特性に迫る和周波発生(SFG)振動分光研究」, レーザー学会学術講演会第 42回年次大会, オンライン開催, 2022年 1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 2023, Conference vice Chair (2019–2023).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

広島大学 放射光科学研究センター協議会委員 (2020–).

文部科学省学術調査官 (2021–2023).

学会誌編集委員

e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, Guest editor (2021).

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–).

第8回森野ディスカッション／分子研研究会 分子科学研究所対応者 (2021.8).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「基礎光科学」, 2021年度.

理化学研究所(SPring-8), 客員研究員, 2021年 4月– .

B-10) 競争的資金

科研費挑戦的研究(萌芽),「高感度非線形ラマン分光法による物理吸着水素分子の極低温量子ダイナミクスの直接観察」, 杉本敏樹 (2021年度–2022年度).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト,「コヒーレントラマン分光法による星間ダストモデル表面上の水素の *in-situ* オルト／パラ状態計測とマクロシミュレーションが拓く星形成・物質進化ダイナミクス研究」, 杉本敏樹 (2021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).

自然科学研究機構分野融合共同研究,「水を不斉反応場とする精密アミノ酸合成法の開拓」(代表:山内美穂), 杉本敏樹(研究分担者) (2021年度).

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・マイクロフォトニクスによる高出力極限固体レーザ」(代表:平等拓範), 杉本敏樹(研究分担者) (2020年度–2024年度).

科研費特別推進研究,「星間塵表面における分子進化の解明:素過程からのアプローチ」(代表:渡部直樹), 杉本敏樹(研究分担者) (2017年度–2021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）
宇都　祥子（研究員（派遣））
足立　和宏（研究員（派遣））
LEE, Jihyun（大学院生）
PALASSERY ITHIKKAL, Jaseela（大学院生）
中村　由佳（事務支援員（派遣））
小倉　康子（事務支援員（派遣））

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) ドナー／アクセプター接合を利用したフォトンアップコンバージョンと低電圧駆動有機 EL

b) タンデム水平接合有機太陽電池

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) フォトンアップコンバージョン（UC）は長波長の光を短波長に変換する技術で，低エネルギー光の有効利用や近赤外イメージングなどへの応用が期待されている。今回，有機半導体ドナー（D）／アクセプター（A）界面で有機太陽電池の電荷分離・再結合原理を応用した新原理の UC を実現した。発光体としては三重項消滅材料として知られるルブレン，感光体としては近赤外光を吸収するノンフラーレンアクセプタを用い，積層して D/A 界面をもつ２層膜を形成した。目に見えない近赤外 LED 光（太陽光強度の 1/10 程度）を，2% 程度の量子効率で，目視可能な黄色の高輝度発光に変換するフレキシブル薄膜を実現できた。原理は，まず吸収した近赤外光を D/A 界面で HOMO オフセットを利用し電荷分離して，スピンがランダムな自由電荷を生成する。それらが再結合する際に界面で電荷移動（CT）状態を経て，三重項励起子を生成する。その後，三重項消滅を経てルブレンからの S1 発光が観測される。本手法は，全固体であり，重原子効果による項間交差が必要ないため希少金属，有害元素が不必要，という利点を持つ。

   さらに，このアップコンバージョン過程を有機 EL に応用し，その効率を向上させた結果，乾電池１本分の電圧でディスプレイ並みの明るさで発光できる，世界最小電圧で駆動する有機 EL の開発に成功した。

b) 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「水平交互接合」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 cm^2/Vs）と PTCDI-C8（電子移動度:1.7 cm^2/Vs）を積層した２層セルを作製し，1.8 cm という驚異的な水平接合距離で太陽電池動作できた。トラップが無輻射再結合を引き起こすことによって，可能な水平距離を決めていることが分かった。さらに，水平接合ではマルチタンデム化によって光電流が増大していくことを実証し，タンデム水平セルによって入射光全てを吸収利用できることを証明した。また，ドーピングによるセル特性の向上にも成功した。

B-1) 学術論文

M. SERA, M. YAMAMOTO, K. TOMITA, Y. YABARA, S. IZAWA, M. HIRAMOTO, T. NAKANISHI, K. YOSHIDA and K. NISHIYAMA, "Morphology Control and Synthesis of Afterglow Materials with an $SrAl_2O_4$ Framework Synthesized by Surfactant-Template and Hydrothermal Method," *Chem. Phys. Lett.* **780**, 138916 (6 pages) (2021). DOI: 10.1016/j.cplett.2021.138916

J. PALASSERY ITHIKKAL, A. GIRAULT, M. KIKUCHI, Y. YABARA, S. IZAWA and M. HIRAMOTO, "Photovoltaic Behavior of Centimeter-Long Lateral Organic Junctions," *Appl. Phys. Express* **14**, 094001 (6 pages) (2021). DOI: 10.35848/1882-0786/ac17d2

S. IZAWA, K. UCHIDA, M. NAKAMURA, K. FUJIMOTO, J. ROUDIN, J. LEE, T. INUZUKA, K. SANADA, M. SAKAMOTO, Y. NAKAMURA, M. HIRAMOTO and M. TAKAHASHI, "Influence of N-Substituents on Photovoltaic Properties of Singly Bay-Linked Dimeric Perylene Diimides," *Chem. –Eur. J.* **27(56)**, 14081–14091 (2021). DOI: 10.1002/chem.202102318

S. IZAWA and M. HIRAMOTO, "Efficient Solid-State Photon Upconversion by Spin Inversion at Organic Semiconductor Interface," *Nat. Photonics* **15(12)**, 895–900 (2021). DOI: 10.1038/s41566-021-00904-w

J. PALASSERY ITHIKKAL, Y. YABARA, S. UTO, S. IZAWA and M. HIRAMOTO, "Lateral-Tandem Organic Photovoltaic Cells With Carrier Transport and Generation Layers," *Appl. Phys. Express* **14(10)**, 101003 (4 pages) (2021). DOI: 10.35848/1882-0786/ac28e6

S. IZAWA, M. MORIMOTO, S. NAKA and M. HIRAMOITO, "Efficient Interfacial Upconversion Enabling Bright Emission with Extremely Low Driving Voltage in Organic Light-Emitting Diodes," *Adv. Opt. Mater.* **10**, 2101710 (8 pages) (2022). DOI: 10.1002/adom.202101710

K. TAKAHASHI, S. IZAWA, N. OHTSUKA, A. IZUMISEKI, R. TSURUTA, R. TAKEUCHI, Y. GUNJO, Y. NAKANISHI, K. MASE, T. KOGANEZAWA, N. MOMIYAMA, M. HIRAMOTO and Y. NAKAYAMA, "Quasi-Homoepitaxial Junction of Organic Semiconductors: A Structurally Seamless but Electronically Abrupt Interface between Rubrene and Bis(trifluoromethyl) dimethylrubrene," *J. Phys. Chem. Lett.* **12(46)**, 11430–11437 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpclett.1c03094

J. LEE, M. HIRAMOTO and S. IZAWA, "Simultaneous Measurement of Photocurrent and Recombination Emission in Organic Solar Cell," *Jpn. J. Appl. Phys.* **61**, 011001 (7 pages) (2022). DOI: 10.35848/1347-4065/ac4051

B-3) 総説，著書

平本昌宏,「一人の科学者の研究人生」, *Molecular Electronics & Bioelectronics*, **32(4)**, 180–187 (2021).（M&BE 業績賞受賞記念寄稿）

B-4) 招待講演

平本昌宏,「M&BE の仲間と出会った頃――30年前」, 第 82回応用物理学会秋季学術講演会「有機分子・バイオエレクトロニクス分科会業績賞受賞記念講演」, オンライン開催, 2021年 9月.

平本昌宏,「KFM によるドーピングルブレン単結晶のフェルミレベル測定」, 分子研機器センター・ブルカージャパンナノ表面計測事業部共催 AFM オンラインセミナー（第 1 回）, オンライン開催, 2021年 12月.

S. IZAWA, “Photon upconversion at organic semiconductor interface,” The 38th International Conference of Photopolymer Science and Technology, Organic and Hybrid Solar Cells–Materials, Device Physics, and Processes, Online, June 2021.

伊澤誠一郎,「有機半導体界面の光電変換機能の開拓～有機太陽電池からフォトンアップコンバージョンまで～」, “光” 機到来！　Q コロキウム , オンライン開催 , 2021年 6月 .

S. IZAWA, “Upconversion emission at organic semiconductor interface,” Asian Conference on Organic Electronics 2021, Online, September 2021.

伊澤誠一郎,「有機半導体界面での新原理アップコンバージョン発光」, 高分子学会有機エレクトロニクス研究会「発光材料・デバイスの新展開」, オンライン開催 , 2021年 10月 .

伊澤誠一郎,「有機半導体界面での光エネルギー変換」, 応用物理学会新領域エネルギーハーベスティング研究グループ研究会「環境発電関連技術の最先端」, オンライン開催 , 2021年 11月 .

伊澤誠一郎,「動的エキシトンを利用した光アップコンバージョン」, 第７回動的エキシトン若手セミナー , オンライン開催 , 2021年 12月 .

伊澤誠一郎,「有機半導体界面での光波長・エネルギー変換」, 表面真空学会九州支部セミナー「表面・界面での変換」, オンライン開催 , 2022年 2月 .

伊澤誠一郎,「有機半導体界面を利用した光アップコンバージョン」, 物性科学連携研究体研究会「エネルギー科学の最前線：階層横断的な理解に向けて」, オンライン開催 , 2022年 3月 .

伊澤誠一郎,「有機半導体界面を利用した光エネルギー変換」, 神戸大学開拓プロジェクトシンポジウム , オンライン開催 , 2022年 3月 .

B-5) 特許出願

特願 2021-062767,「有機EL 素子」, 伊澤誠一郎，平本昌宏，森本勝大，中　茂樹（自然科学研究機構，富山大学）, 2021年 .

B-6) 受賞，表彰

平本昌宏, 応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会業績賞 (2021).

伊澤誠一郎, 有機EL 討論会第 31回例会講演奨励賞 (2021).

伊澤誠一郎, 2021年度エヌエフ基金研究開発奨励賞優秀賞 (2021).

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–).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

科研費学術変革領域研究(A)（公募研究）専門委員会委員 (2021.6–9).

学会誌編集委員

応用物理学会若手チャプター幹事 (2018–).（伊澤誠一郎）

競争的資金等の領域長等

NEDO 先導研究プログラム／エネルギー・環境新技術先導研究プロブラム「高効率シースルー有機薄膜太陽電池を用いた革新的発電窓の研究開発」研究開発推進委員会委員長 (2021.4–).

NEDO グリーンイノベーション基金事業／次世代型太陽電池の開発, 採択審査委員会委員長 (2021.11–2022.1).

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, 講師（非常勤), 2020年4月1日–2022年2月24日.

B-9) 学位授与

LEE, Ji-Hyun,「有機太陽電池における電荷再結合の研究」, 2021年9月, 博士（理学）.

B-10) 競争的資金

科研費挑戦的研究（萌芽),「ドーピング有機単結晶ウェハーを用いた新原理太陽電池」, 平本昌宏 (2019年–2021年).

科研費若手研究,「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–2021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).

科研費学術変革領域研究(A)（公募研究),「動的エキシトンを利用した新原理フォトンアップコンバージョン」, 伊澤誠一郎 (2021年–2023年).

科学技術振興機構さきがけ研究,「界面アップコンバージョンが可能とする革新的光変換」, 伊澤誠一郎 (2021年–2025年).

科研費基盤研究(C)（一般),「優れたn型半導体特性を実現するフレキシブルグラフェンナノリボンの開発」（代表；高橋雅樹), 平本昌宏（研究分担者）(2021年–2023年).

科研費基盤研究(C)（一般),「優れたn型半導体特性を実現するフレキシブルグラフェンナノリボンの開発」（代表；高橋雅樹), 伊澤誠一郎（研究分担者）(2021年–2023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（Jaseela P. I.（M2），2019.10入学）を指導し，「有機単結晶エレクトロニクス」,「水平接合有機太陽電池の開発」の研究を推進している。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と低電圧駆動有機EL デバイスに関する研究」を推進し，学生1名（Ji-Hyun Lee（D3），2018.10入学）を指導し，研究室の柱になっている。静岡大，富山大，東京理科大，等と共同研究し，多くの論文が掲載されている。多数の受賞，JST さきがけ研究者への選出，*Nature Photonics* への論文掲載など，着実に独立した研究者への道を歩んでおり，次のポジションを得るため，公募への応

募を積極的に行っている。

2021年９月に，Ji-Hyun Lee は博士（理学）学位を，Jaseela, P. I. は修士（理学）学位を取得した。その際，Ji-Hyun Lee 博士は，SOKENDAI 賞を授与された。なお，Jaseela, P. I. は，2022年４月より解良グループ（構造分子科学専攻）に転専攻する。

パンデミックにより，外国人研究者，学生の来日がストップし，これまでに５名の来日を断念した。来年度は，少数精鋭で成果，論文を出し続ける努力が必要不可欠である。なお，平本は，来年度末で定年となるので，研究室の装置類の譲渡，廃棄をすでに行っており，研究室終了の準備の目処がつきつつある。

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) 安定同位体非標識脂質分子の ^{13}C 信号帰属に資する新規固体 NMR 測定法の開発

b) 固体 NMR を用いたプリオンフラグメントと脂質膜の特異的相互作用の解析

c) 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

d) 独自固体 NMR プローブのための要素技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 脂質二重膜の構成脂質分子に関して天然存在比安定同位体 ^{13}C を観測して，高い分子運動性を示す液晶相でにおける脂質分子の ^{13}C 信号帰属に資する新規固体 NMR 測定法の開発を試みた。脂質分子と同様な運動性を有する有機低分子を参照試料として同測定法を適用し，有効性を確認した。

b) ヒトプリオン病は，生体中に存在する正常型のプリオンタンパク質（PrPc）の高次構造がβシートリッチな感染型（PrPSc）に変換され，不溶性アミロイド線維が形成され発症すると考えられている。本研究では同タンパク質の構造転移機構の解明を最終目的としている。全長ヒトプリオンと同様な脂質結合活性を有し，細胞毒性が報告されている 106 から 126 残基に相当する PrP(106-126) が，PrP の構造転移が示唆されている細胞膜表面のカベオラの主要脂質成分を単純化した GM1 含有リポソームに結合したプロテオリポソームに関して，^{13}C 固体 NMR による解析を行った。上記の新規測定法を適用して，既報の信号帰属の検証を行うと共に GM1 分子の PrP(106-126) 特異的結合部位の特定を試みている。本研究は国立感染症研究所の谷生道一博士との共同研究である。

c) 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-abudant 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，矢木宏和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。特定残基のみ ^{13}C，^{15}N 全安定同位体標識した SAHS，および CAHS タンパク質試料等を調製し局所構造解析を試みた。２次元 ^{13}C 同種核間相関固体 NMR 測定法などを適用し，SAHS に関して 6 種の信号，CAHS に関して 3 種の信号を観測した。現在，改良された試料調製法により調製された SAHS 試料で再測定を行い。同タンパク質の構造均一性の検証を行うと共に，変異タンパク質を用いて信号帰属を試みている。

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。本プローブでは，試料管回転モジュール，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た。全ての部品を独自モジュールに置き換えるため，スピニングモジュール，および回転検出用の光電圧変換モジュールの開発を行っている。前者は昨年度から開発を始め，本年度同社市販品と同一の最高回転周波数を達成した。更なる性能向上を目指して改良を行っている。後者は今年度から，装置開発室の豊田氏の援助を受けて開発を行っている途中である。

B-3) 総説，著書

K. NISHIMURA and M. TANIO, “Functional and Structural Characterization of Membrane Binding Proteins,” in *Annual Reports in NMR spectroscopy*, G. A. Webb, Ed., **105**, 47–131 (2022). DOI: 10:1016/bs.arnmr.2021.06.001

西村勝之,「固体NMR による膜タンパク質の構造解析」,「創薬研究者がこれだけは知っておきたい最新のウイルス学」, 技術情報協会, 180–190 (2021). ISBN: 978-4-86104-855-5

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回電子スピンサイエンス学会（SEST2021）合同会議組織委員 (2020–2021).

B-8) 大学での講義，客員

総合研究大学院大学統合生命科学教育プログラム,「Introduction of solid state NMR and its application to structural characterization of biomolecules（機能生体分子化学）」, 2021年 1月 7日, 14日.

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).

C) 研究活動の課題と展望

独自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。昨年度から最難関のスピニングモジュールの開発を行っており，年度末にようやく市販品と同じ最高回転周波数を達成した。2021年度前半は，５月から９月までNMR 室の複数の空調の寿命による入れ替え, 分光器温度コントローラーの故障などに見舞われ，長期間NMR 実験が進まなかった。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渇望している。

小　林　玄　器（准教授）（2018 年 4 月 1 日着任）

竹入　史隆（助教）
AYU, Nur Ika Puji（大学院生）
内村　祐（大学院生）
岡本　啓（大学院生）
泉　善貴（大学院生）
今井　弓子（技術支援員）
久保田　亜紀子（技術支援員）
鈴木　愛（事務支援員）
神谷　美穂（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^- 導電性化合物のイオン導電機構解析

c) H^- のイオン導電現象を利用した新規イオニクスデバイスの創成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) H^- 導電体の物質探索では，これまで主な探索対象としていた酸水素化物から，酸素を含まない複合アニオン水素化物や金属水素化物へと探索対象を拡げた。新たに発見した水素化硫化物 $LaAH_3S$ (A = Ba, Sr) は，400 ℃ で 1 mS/cm に達するイオン導電率を示すだけでなく，大気下での化学安定性を獲得した。蛍石構造をとる金属水素化物では，独自の合成指針によって電子伝導性の抑制に成功し，室温～ 100 °C において非常に高い導電率を達成した。また，電極への応用を見据えた水素・電子混合導電体の物質探索では，メカノケミカル法を用いた直接合成によって，遷移金属酸水素化物 $BaTiO_{3-x}H_x$ を非加熱で合成することに成功し，その水素透過電極としての機能を初めて実証した。また，スパッタ法により，同物質の多結晶膜の直接成膜にも成功した。

b) 当グループで発見した AE_2LiH_3O (AE = Sr, Ba) は，相転移に伴って高温で H^- 超イオン導電性を示し，元素置換を施すことで 300 ℃ 以下で高温相を安定化できる。本系の重水素体を用いた高温中性子回折実験を実施し，核密度分布解析（MEM）によって水素の分布を調べたところ，想定していたアニオンサイトとは異なる格子間位置において優位な存在確率が示唆された。これは水素の拡散が単純なサイトホッピング機構とは異なることを意味しており，当該物質の超イオン導電性を支持する結果である。

c) 300 °C 以上で超イオン導電性を示す $Ba_{1.75}LiH_{2.7}O_{0.9}$ を固体電解質として用いた電気化学デバイスの開発をおこなっている。これまで，その焼結密度の低さ（~70%）が課題のひとつであったが，新たに導入したホットプレスを用いることで，密度が 90% 超の焼結体の作成が可能となった。これによって，水素ガスリークが抑制できる。また，産学連携によって表面研磨技術を適用することで，ペレット表面の凹凸を大幅に低減することにも成功し，電解質・電極界面の制御へ向けた技術的課題を克服した。

B-1) 学術論文

H. UBUKATA, F. TAKEIRI, K. SHITARA, C. TASSEL, T. SAITO, T. KAMIYAMA, T. BROUX, A. KUWABARA, G. KOBAYASHI and H. KAGEYAMA, "Anion Ordering Enables Fast H^- Conduction at Low Temperatures," *Sci. Adv.* **7(23)**, eabf7883 (7 pages) (2021). DOI: 10.1126/sciadv.abf7883

T. UCHIMURA, F. TAKEIRI, K. OKAMOTO, T. SAITO, T. KAMIYAMA and G. KOBAYASHI, "Direct Synthesis of Barium Titanium Oxyhydride for Use as a Hydrogen Permeable Electrode," *J. Mater. Chem. A* **9(36)**, 20371–20374 (2021). DOI: 10.1039/D1TA05783A

A. KUWABARA, F. TAKEIRI, H. NAWAZ and G. KOBAYASHI, "First-Principles Calculations of Point Defect Formation and Anion Diffusion Mechanisms in the Oxyhydride Ba_2ScHO_3," *ChemRxiv* 10.26434/chemrxiv.12121254.v2 (2020). DOI: 10.26434/chemrxiv.12121254.v2

S. DEKURA, Y. SUNAIRI, K. OKAMOTO, F. TAKEIRI, G. KOBAYASHI, Y. HORI, Y. SHIGETA and H. MORI, "Effects of Mechanical Grinding on the Phase Behavior and Anhydrous Proton Conductivity of Imidazolium Hydrogen Succinate," *Solid State Ionics* **372**, 115775 (2021). DOI: 10.1016/j.ssi.2021.115775

F. TAKEIRI, A. WATANABE, K. OKAMOTO, D. BRESSER, S. LYONNARD, B. FRICK, A. ALI, Y. IMAI, M. NISHIKAWA, M. YONEMURA, T. SAITO, K. IKEDA, T. OTOMO, T. KAMIYAMA, R. KANNO and G. KOBAYASHI, "Hydride-Ion-Conducting K_2NiF_4-Type Ba–Li Oxyhydride Solid Electrolyte," *Nat. Mater.* **21**, 325–330 (2022). DOI: 10.1038/s41563-021-01175-0

B-3) 総説，著書

竹入史隆，小林玄器,「H^- 導電性酸水素化物の合成法」, *セラミックス*, **56**, 536–539 (2021).

竹入史隆，小林玄器,「層状ペロブスカイト酸水素化物のサイト選択性と H^- 導電」, *結晶学会誌*, **63(2)**, 73–74 (2021).

小林玄器,「H^- 導電体：物質開発の現状と応用可能性」, *水素エネルギーシステム（J. Hydro. Energy Sys. Soc. Japan）*, **46(1)**, 12–17 (2021).

K. MAEDA, F. TAKEIRI, G. KOBAYASHI, S. MATSUISHI, H. OGINO, S. IDA, T. MORI, Y. UCHIMOTO, S. TANABE, T. HASEGAWA, N. IMANAKA and H. KAGEYAMA, "Recent Progress on Mixed-Anion Materials for Energy Applications," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **95**, 26–37 (2022).

竹入史隆，陰山　洋,「複合アニオン化合物の化学」,「複合アニオン化合物の科学」, 丸善出版, pp. 1–20 (2021).

小林玄器，飯村壮史，細野秀雄,「中温域高速ヒドリドイオン伝導体」,「"水素" を使いこなすためのサイエンス ハイドロジェノミクス」, 共立出版, pp. 67–78 (2022).

B-4) 招待講演

小林玄器,「H^- 導電体の物質開拓」, ポリマーフロンティア 21（高分子学会）, オンライン開催, 2021年6月.

B-6) 受賞，表彰

小林玄器, 永井科学技術財団学術賞 (2022).

岡本　啓, 電気化学会第88会大会優秀学生講演賞 (2021).

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

AYU, Nur Ika Puji,「Synthesis and Structural Studies on $(Ba,Sr)_3Ga(H,D)O_4$ and Ba_2LiD_3O Oxyhydrides」, 2021 年 9 月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構創発的研究支援事業,「ヒドリドイオン導電性材料の開拓と新規イオニクスデバイスの創製」, 小林玄器 (2021 年–2028 年).

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).

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–2023 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

当グループが特に注力している H^- 超イオン導電体 $Ba_{1.75}LiH_{2.7}O_{0.9}$ (BLHO)に関する成果は,*Nature Materials* 誌に掲載され,知財も特許登録に向けて審議が進んでいる。BLHO への元素置換による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結果については,現在論文投稿中である。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に続き,電気化学会第 88 回大会の優秀学生講演賞(2021)の受賞や分子研 SRA 採択(2021 年 10 月～)など,高い評価を得ている。BLHO の構造相転移および超イオン導電相についての固体化学的探求は,最大エントロピー法(MEM 法)で示された格子間位置の水素によって新たな展開を迎えた。金属における侵入型固溶の例からも明らかなように,水素は特異的に格子間位置を占めやすい元素であるが,それがアニオン種としての H^- 超イオン導電においても実現するとなれば画期的な知見となる。現在,中性子全散乱を用いた局所構造解析(PDF 解析)を計画しているほか,共同研究による大規模な分子動力学(MD)計算など,多角的なアプローチによってその現象解明を目指している。

BLHO を固体電解質として用いた電気化学デバイスの開発は，以前にも検討を実施していたが，ガスリーク問題や電極／電解質界面の不安定さなどの課題により，中断を余儀なくされていた。しかし，焼結密度の大幅向上（70% 台 → 90% 台）を達成したほか，新たなデバイス試験セルを装置開発室と共同設計したことで（現在作成中），ガスリークの問題には一定の目処がついた。界面についても，以前はBLHO とパラジウム電極との界面不安定性の問題があったが，$BaTiO_{3-x}H_x$ が安定な水素透過電極としてはたらくこと，および，その直接成膜が可能になったことで，デバイス開発に再度挑戦できる状況にある。電解質BLHO と電極$BaTiO_{3-x}H_x$ からなる対称セルを作成し，外部電場による H^- の反応場への安定供給，ひいてはNH_3 合成やCO_2 還元といった水素化反応の促進を目指す。

酸水素化物以外のH^- 導電体の合成についても水素化ハロゲン化物，水素化硫化物，あるいは金属水素化物といった様々な方向性が見つかっている。また，導電率のみならず，化学安定性や電圧に対する安定性（電位窓の広さ）などの点において，アニオン格子ごとに異なる特徴が引き出されることも明らかになってきた。引き続き物質探索を推し進めるとともに，高い導電率や安定性の起源を結合状態や電子状態から探ることで，将来的な材料設計指針につながる包括的な議論をおこなう必要がある。

H^- を含む化合物の探索は国際的にもイオン交換反応や高圧合成などの特殊手法に依存していたが，簡便なメカノケミカル法による合成を実現できたことには大きな意義がある。$BaTiO_{3-x}H_x$ は既知物質だが，合成条件の最適化によってその水素固溶量が増加できる兆候を見出しているほか，他の遷移金属を含む新規酸水素化物も得られている。特に前期遷移金属を含む系との相性のよさが見られていることから，新たな電極材料の探索という位置付けでの検討を継続していく。

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）
NAM, Dayeon（特任研究員）
東田　怜（特任研究員）
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) ヒドロゲナーゼ生合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合成における，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 N^{10}-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

M. NISHINAGA, H. SUGIMOTO, Y. NISHITANI, S. NAGAI, S. NAGATOISHI, N. MURAKI, T. TOSHA, K. TSUMOTO, S. AONO, Y. SHIRO and H. SAWAI, “Heme Controls the Structural Rearrangement of Its Sensor Protein Mediating the Hemolytic Bacterial Survival,” *Commun. Biol.* **4(1)**, 467 (12 pages) (2021). DOI: 10.1038/s42003-021-01987-5

Y. IKENOUE, Y. O. TAHARA, M. MIYATA, T. NISHIOKA, S. AONO and H. NAKAJIMA, “Use of a Ferritin L134P Mutant for the Facile Conjugation of Prussian Blue in the Apoferritin Cavity,” *Inorg. Chem.* **60(7)**, 4693–4704 (2021). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.0c03660

N. MURAKI, K. TAKEDA, D. NAM, M. MURAKI and S. AONO, “Structural Characterization of Y29F Mutant of Thermoglobin from a Hyperthermophilic Bacterium Aquifex aeolicus,” *Chem. Lett.* **50(4)**, 603–606 (2021). DOI: 10.1246/CL.200879

B-4) 招待講演

S. AONO, “Crystal structure of HypX responsible for CO biosynthesis for the assembly of the active site in NiFe-hydrogenase,” The International Chemistry Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

N. MURAKI, “Structural basis for the heme transfer reaction in the novel bacterial heme uptake system,” Pacifichem 2021, Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

B-7) 学会および社会的活動

学会誌編集委員

Chemistry Letters, Section Editor (2013–2021).

その他

総合研究大学院大学物理科学研究科副研究科長 (2020–2022).

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).

科研費研究活動スタート支援, 「酸素ガスをシグナル分子とする走化性シグナル伝達系の構造基盤」, 東田　怜 (2021年–2023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).

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）
西　栄美子（研究員）
HIRANYAKORN, Methanee（大学院生）
関口　太一郎（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）
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）
西村　誠司（特別共同利用研究員）
沈　佳娜（特別共同利用研究員）
磯野　裕貴子（特任専門員）
平峰　里菜（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) 生体分子，特に糖鎖や糖タンパク質の動的構造と相互作用を調べる手法を大きく進歩させた。糖鎖はさまざまな生物学的システムにおいて多様な役割を果たしているが，内部運動の自由度が非常に高いため，構造的な観点から特性を明らかにすることが難しい。糖鎖の動的構造を明らかにする目的で分子動力学シミュレーションが広く用いられているが，得られた糖鎖のコンフォメーションアンサンブルを包括的に評価する方法は，これまでほとんど存在しなかった。我々は，再生核ヒルベルト空間を介することで，自由エネルギー地形にコンフォーマーを割り当てる理論的アプローチを開発した。この方法は，糖鎖のコンフォーメーション空間，さらには高い運動自由度を持つ分子のコンフォーメーション空間探索の可能性を広げるものである。さらに，免疫系で機能する糖タンパク質である免疫グロブリン G（IgG）と補体第 1 成分を対象に高速原子間力顕微鏡を用いた相互作用解析を行い，分子の構造の柔軟性が相互作用に及ぼす効果を定量的に可視化することができた。また，逆コントラストマッチング法による中性子小角散乱計測とサイズ排除クロマトグラフィーを組み合わせることで，分子複合体中の IgG の構造を選択的に観測することに成功した。さらに，こうした方法と分子シミュレーションを統合して，時計タンパク質 KaiA-KaiB-KaiC 複合体の構造ダイナミクスの解析に応用した。

b) 統合的なアプローチを用いて，さまざまな生体分子集合体の特性を明らかにした。低温大気圧プラズマ（CAP）は，バイオテクノロジーや医療の分野で注目されている。そこで我々は，アミロイドβ（Aβ）に CAP を照射したときの

影響を，NMR，質量分析，速度論解析により調べ，CAP 照射によって Aβ の 35 位のメチオニン残基が選択的に酸化され，アミロイド線維の形成が抑制されることを明らかとした。また，高速原子間力顕微鏡，電子顕微鏡，NMR といった様々な先端計測技術を駆使して，クマムシの細胞内に豊富に存在するタンパク質 CAHS1（cytosolic-abundant heat-soluble protein 1）の性質を調べた。その結果，乾燥を模倣した条件下では，このタンパク質同士が自然に集まってファイバーをつくることが明らかとなった。細胞に脱水ストレスがかかるとこのタンパク質のファイバーがゲルのような集合体をつくり，ストレスがなくなるとタンパク質の集合体は消失して元に戻る様子を捉えることに成功した。一方，プロテアソームの α7 サブユニットが自己組織化して形成された七員環が 2 層になったホモ 14 量体の構造を低温電子顕微鏡で観察した。その結果，α7 の二重リング構造は，これまでに報告されている結晶学的モデルとは大きく異なり，溶液中で大きく揺らいでいることが示された。さらに，球状の自己組織化錯体に酵素を内包して安定化することで有機溶媒中においても酵素活性を保持できることを見出し（東京大学／分子研 藤田 誠博士との共同研究），配位結合を介して集合する人工脂質の膜表面における相分離挙動を捉える（九州大学 大谷 亮博士との共同研究）など，超分子化学と生命分子科学の融合研究を展開した。

B-1) 学術論文

S. YANAKA, Y. YAMAGUCHI, T. TAKIZAWA, Y. MIYANOIRI, R. YOGO, I. SHIMADA and K. KATO, “NMR Assignments of the N-Glycans of the Fc Fragment of Mouse Immunoglobulin G_2b Glycoprotein,” *Biomol. NMR Assignments* **15(1)**, 187–192 (2021). DOI: 10.1007/s12104-020-10004-5

N. SATO, R. YOGO, S. YANAKA, A. MARTEL, L. PORCAR, K. MORISHIMA, R. INOUE, T. TOMINAGA, T. ARIMORI, J. TAKAGI, M. SUGIYAMA and K. KATO, “A Feasibility Study of Inverse Contrast-Matching Small-Angle Neutron Scattering Method Combined with Size Exclusion Chromatography Using Antibody Interactions as Model Systems,” *J. Biochem.* **169(6)**, 701–708 (2021). DOI: 10.1093/jb/mvab012

R. OHTANI, Y. ANEGAWA, H. WATANABE, Y. TAJIMA, M. KINOSHITA, N. MATSUMORI, K. KAWANO, S. YANAKA, K. KATO, M. NAKAMURA, M. OHBA and S. HAYAMI, “Metal Complex Lipids for Fluid–Fluid Phase Separation in Coassembled Phospholipid Membranes,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **60(24)**, 13603–13608 (2021). DOI: 10.1002/anie.202102774

C. SONG, T. SATOH, T. SEKIGUCHI, K. KATO and K. MURATA, “Structural Fluctuations of the Human Proteasome α7 Homo-Tetradecamer Double Ring Imply the Proteasomal α-Ring Assembly Mechanism,” *Int. J. Mol. Sci.* **22(9)**, 4519 (9 pages) (2021). DOI: 10.3390/ijms22094519

T. WATANABE, H. YAGI, S. YANAKA, T. YAMAGUCHI and K. KATO, “Comprehensive Characterization of Oligosaccharide Conformational Ensembles with Conformer Classification by Free-Energy Landscape via Reproductive Kernel Hilbert Space,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23(16)**, 9753–9760 (2021). DOI: 10.1039/d0cp06448c

K. MIYAZAWA, S. G. ITOH, H. WATANABE, T. UCHIHASHI, S. YANAKA, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO, K. ARAKAWA and H. OKUMURA, “Tardigrade Secretory-Abundant Heat-Soluble Protein Has a Flexible β-Barrel Structure in Solution and Keeps This Structure in Dehydration,” *J. Phys. Chem. B* **125(32)**, 9145–9154 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcb.1c04850

M. YAGI-UTSUMI, K. AOKI, H. WATANABE, C. SONG, S. NISHIMURA, T. SATOH, S. YANAKA, C. GANSER, S. TANAKA, V. SCHNAPKA, E. W. GOH, Y. FURUTANI, K. MURATA, T. UCHIHASHI, K. ARAKAWA and K. KATO, "Desiccation-Induced Fibrous Condensation of CAHS Protein from an Anhydrobiotic Tardigrade," *Sci. Rep.* **11(1)**, 21328 (9 pages) (2021). DOI: 10.1038/s41598-021-00724-6

S. RATANABUNYONG, S. SEETAHA, S. HANNONGBUA, S. YANAKA, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO, A. PAEMANEE and K. CHOOWONGKOMON, "Biophysical Characterization of Novel DNA Aptamers against K103N/Y181C Double Mutant HIV-1 Reverse Transcriptase," *Molecules* **27(1)**, 285 (14 pages) (2022). DOI: 10.3390/molecules27010285

S. YANAKA, H. YAGI, R. YOGO, M. ONITSUKA and K. KATO, "Glutamine-Free Mammalian Expression of Recombinant Glycoproteins with Uniform Isotope Labeling: An Application for NMR Analysis of Pharmaceutically Relevant Fc Glycoforms of Human Immunoglobulin G1," *J. Biomol. NMR* **76**, 17–22 (2022). DOI: 10.1007/s10858-021-00387-5

Y. MURAI, M. YAGI-UTSUMI, M. FUJIWARA, S. TANAKA, M. TOMITA, K. KATO and K. ARAKAWA, "Multiomics Study of a Heterotardigrade, *Echinisicus testudo*, Suggests the Possibility of Convergent Evolution of Abundant Heat-Soluble Proteins in Tardigrada," *BMC Genomics* **22(1)**, 813 (14 pages) (2021). DOI: 10.1186/s12864-021-08131-x

F. YAMASAKI, F. UMEZAWA, T. SENSUI, M. ANZO, H. ABO, C.-W. KUO, K.-H. KHOO, K. KATO, H. YAGI and H. KAWASHIMA, "Establishment of a Novel Monoclonal Antibody against Truncated Glycoforms of α-Dystroglycan Lacking Matriglycans," *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **579**, 8–14 (2021). DOI: 10.1016/j.bbrc.2021.09.043

G. GEORGE, S. NINAGAWA, H. YAGI, J.-I. FURUKAWA, N. HASHII, A. ISHII-WATABE, Y. DENG, K. MATSUSHITA, T. ISHIKAWA, Y.P. MAMAHIT, Y. MAKI, Y. KAJIHARA, K. KATO, T. OKADA and K. MORI, "Purified EDEM3 or EDEM1 alone Produces Determinant Oligosaccharide Structures from M8B in Mammalian Glycoprotein ERAD," *eLife* **10**, 1–39 (2021). DOI: 10.7554/eLife.70357

D. FUJITA, R. SUZUKI, Y. FUJII, M. YAMADA, T. NAKAMA, A. MATSUGAMI, F. HAYASHI, J.-K. WENG, M. YAGI-UTSUMI and M. FUJITA, "Protein Stabilization and Refolding in a Gigantic Self-Assembled Cage," *Chem* **7**, 2672–2683 (2021). DOI: 10.1016/j.chempr.2021.08.005

S. YANAKA, S. NISHIGUCHI, R. YOGO, H. WATANABE, J. SHEN, H. YAGI, T. UCHIHASHI and K. KATO, "Quantitative Visualization of the Interaction between Complement Component C1 and Immunoglobulin G: The Effect of C_H1 Domain Deletion," *Int. J. Mol. Sci.* **23**, 2090 (10 pages) (2022). DOI: 10.3390/ijms23042090

Y. YUNOKI, A. MATSUMOTO, K. MORISHIMA, A. MARTEL, L. PORCAR, N. SATO, R. YOGO, T. TOMINAGA, R. INOUE, M. YAGI-UTSUMI, A. OKUDA, M. SHIMIZU, R. URADE, K. TERAUCHI, H. KONO, H. YAGI, K. KATO and M. SUGIYAMA, "Overall Structure of Fully Assembled Cyanobacterial KaiABC Circadian Clock Complex by an Integrated Experimental-Computational Approach," *Commun. Biol.* **5**, 184 (12 pages) (2022). DOI: 10.1038/s42003-022-03143-z

B-3) 総説，著書

H. YAGI, S. YANAKA and K. KATO, "Structural and Functional Roles of the N-Glycans in Therapeutic Antibodies," in *Comprehensive Glycoscience, 2nd edition*, J. BARCHI, Ed., Elsevier; Oxford, **vol. 5**, pp. 534–542 (2021). DOI: 10.1016/B978-0-12-819475-1.00044-4

矢木真穂，加藤晃一,「膜環境におけるアミロイドβの分子集合に関する構造的知見」, *膜*, **46(1)**, 2–6 (2021). DOI: 10.5360/membrane.46.2

矢木宏和，加藤晃一,「糖タンパク質の小胞体からゴルジ体への輸送効率を高めるペプチド配列の発見と応用」, *バイオサイエンスとバイオインダストリー* , **79**, 472–476 (2021).

K. KATO, T. YAMAGUCHI and M. YAGI-UTSUMI, "Experimental and Computational Characterization of Dynamic Biomolecular Interaction Systems Involving Glycolipid Glycans," *Glycoconj. J.* **39**, 219–228 (2022). DOI: 10.1007/s10719-022-10056-w

B-4) 招待講演

K. KATO, S. YANAKA, T. WATANABE, T. SUZUKI, R. YOGO, T. SATOH, T. YAMAGUCHI and H. YAGI, "Dynamic Views of Oligosaccharides and Glycoproteins Provided by Experimental and Computational Observations," 3rd Australasian Glycoscience Symposium (3rd AGS), online, 2021年6月.

S. YANAKA, R. YOGO, H. YAGI and K. KATO, "Stable isotope-assisted NMR analysis of dynamics and interactions of the Fc region of immunoglobulin G as glycoprotein," ISMAR-APNMR-NMRSJ-SEST 2021, online, 2021年8月.

K. KATO, T. SUZUKI, M. HIRANYAKORN, S. YANAKA, T. SATOH, T. YAMAGUCHI, H. YAGI and M. YAGI-UTSUMI, "NMR characterization of conformational dynamics of carbohydrate and ubiquitin chains as post-translational protein modifiers," ISMAR-APNMR-NMRSJ-SEST 2021, online, 2021年8月.

谷中冴子,「抗体の３次元構造ダイナミクスと相互作用のダイナミクスをみる」, PPF2020/2021第 18回次世代を担う若手のためのフィジカル・ファーマフォーラム , オンライン開催 , 2021年 9月 .

谷中冴子,「真核生物における安定同位体標識法」, 第 21回若手NMR 研究会 , オンライン開催 , 2021年 9月 .

M. YAGI-UTSUMI, "Cold atmospheric plasma modification of amyloid β," The 30th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research, online, 2021年11月.

M. YAGI-UTSUMI,「Molecular assembly of amyloid-β in membrane environments」, 第 59回日本生物物理学会年会 , オンライン開催 , 2021年 11月 .

加藤晃一,「糖鎖生合成アトラスの編纂に向けて：生命創成探究センターにおける糖鎖研究の取り組み」, ヒューマングライコームプロジェクト特別シンポジウム 2021, 名古屋大学（名古屋）, 2021年 12月 .

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 in solution," The 3rd International Conference on Materials Research and Innovation (3rd ICMARI), online, 2021年12月.

M. YAGI-UTSUMI, M. HIRANYAKORN, S. YANAKA, T. SATOH and K. KATO, "Quantitative characterization of conformational interconversions of Lys48-linked ubiquitin chains in solution," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Honolulu (U. S. A.) (online), 2021年12月.

K. KATO, "NMR characterization of conformational dynamics of oligosaccharides and glycoproteins for improving their functionality," Pacifichem 2021, Honolulu (U. S. A.) (online), 2021年12月.

B-6) 受賞，表彰

矢木真穂, 自然科学研究機構若手研究者賞 (2021).

山田梨乃, 令和３年度日本生化学会中部支部支部長賞 (2022).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本バイオイメージング学会評議員 (1995–), 理事 (2012–), 副会長 (2021–) .

日本生化学学会評議員 (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–).

Advisory Board of the Universal Scientific Education and Research Network (USERN) (2021–).

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–).

その他

出前授業「第３の生命鎖＝糖鎖の話」愛知県立岡崎北高等学校コスモサイエンスコース (2021).

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Ⅱ」, 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-9) 学位授与

HIRANYAKORN, Methanee,「Characterization of Conformational Dynamics of Lys48-Linked Ubiquitin Chains as Design Frameworks for Creating Allosterically Controllable Multidomain Proteins」, 2021年9月, 博士（理学）.

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連関機構の解明」, 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).

AMED 次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発事業,「国際競争力のある次世代抗体医薬品製造技術開発／革新的な次世代抗体医薬品製造基盤技術の開発（分子中に秘められた新規相互作用部位の探査と改変を通じた次世代抗体創成の基盤構築）」, 谷中冴子 (2021年–2025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事業,「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).

AMED 次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発事業,「国際競争力のある次世代抗体医薬品製造技術開発／次世代抗体医薬品の実用化に向けた物性・品質評価及び管理手法に関する技術的研究（次世代抗体医薬品の実用化に向けた品質評価及び管理手法に関する技術的研究）」（代表:石井明子), 加藤晃一（研究分担者） (2021年–2025年).

AMED 次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発事業,「国際競争力のある次世代抗体医薬品製造技術開発／革新的な次世代抗体医薬品製造基盤技術の開発（分子中に秘められた新規相互作用部位の探査と改変を通じた次世代抗体創成の基盤構築）」（代表；谷中冴子), 加藤晃一（研究分担者） (2021年–2025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）
VISOOTSAT, Akasit（特任研究員）
KEYA, Jakia Jannat（特任研究員）
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) V-ATPase のエネルギーカップリング機構の高速高精度１分子計測
b) 生体・人工ハイブリッドキネシンの創成と高速高精度１分子計測による特性解析
c) PET 分解酵素の熱安定性および PET 分解活性の向上と機構解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) V-ATPase（V_oV_1）は，ATP の化学エネルギーを利用して細胞膜を介するイオンの能動輸送を行う分子ポンプであり，ATP 加水分解反応を触媒する V_1 とイオン輸送を担う V_o の２つの回転分子モーターの複合体である。我々は，独自に開発した高速高精度１分子計測を用い，イオン輸送時の V_oV_1 複合体の回転運動の素過程を可視化することに初めて成功した。その結果，V_o は 10 回対称，V_1 は 3 回対称という構造対称性の不一致（10/3 = 3.3）を持つにも関わらず，両モーター間の結合は“硬く”，繋がった V_oV_1 の回転子や固定子サブユニットが大きく捩じれることなく，スムーズに回転できることを明らかにした（論文投稿中）。
b) ２本足で歩く分子モーターキネシン - １は，後足が前足を常に追い越すいわゆるハンドオーバーハンド機構で，レールである微小管上を直進運動する。微小管上にはキネシン結合部位が前後左右に多数存在するにも関わらず，後足が前足を追い越して常に前方に結合する機構は不明である。我々は，人工分子ポリエチレングリコール（PEG）でキネシンの２つの足を繋いだ生体－人工ハイブリッドキネシンを創成し，高速高精度１分子計測でその運動素過程を解析した。その結果，柔らかい PEG リンカーで繋いだ場合にも，天然型と同様のハンドオーバーハンド機構で正確に直進運動し，２つの足を繋ぐリンカーの剛直性は不要であることを明らかにした（論文準備中）。
c) プラスチックの完全リサイクルやプラスチックによる環境汚染の解決策としてプラスチック分解酵素が注目されている。我々は，ポリエチレンテレフタレート（PET）分解酵素を改変することにより熱安定性および PET 分解活性を大幅に向上させ，X 線結晶構造解析を用いて熱安定性向上の構造的基盤を明らかにするとともに，１分子蛍光イメージングを用いて PET 分解活性向上のメカニズムを明らかにした（*ACS Catalysis* 2021; 特願 2021-168388）。本成果に基づき，2022 年１月から自然科学研究機構，キリンホールディング，静岡大学の３者で共同研究契約を結び，PET 分解酵素を用いた PET リサイクルの実用化に向けた共同研究を推進している。

B-1) 学術論文

J. ANDO, H. KAWAGOE, A. NAKAMURA, R. IINO and K. FUJITA, "Label-Free Monitoring of Crystalline Chitin Hydrolysis by Chitinase Based on Raman Spectroscopy," *Analyst* **146(12)**, 4087–4094 (2021). DOI: 10.1039/d1an00581b

A. NAKAMURA, N. KOBAYASHI, N. KOGA and R. IINO, "Positive Charge Introduction on the Surface of Thermostabilized PET Hydrolase Facilitates PET Binding and Degradation," *ACS Catal.* **11(14)**, 8550–8564 (2021). DOI: 10.1021/acscatal.1c01204

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

T. UMAKOSHI, S. FUKUDA, R. IINO, T. UCHIHASHI and T. ANDO, "High-Speed Near-Field Fluorescence Microscopy Combined with High-Speed Atomic Force Microscopy for Biological Studies," *Biochim. Biophys. Acta, Gen. Subj.* **1864(2)**, 129325 (2020). DOI: 10.1016/j.bbagen.2019.03.011

T. URUI, M. MIZUNO, A. OTOMO, H. KANDORI and Y. MIZUTANI, "Resonance Raman Determination of Chromophore Structures of Heliorhodopsin Photointermediates," *J. Phys. Chem. B* **125(26)**, 7155–7162 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcb.1c04010

B-3) 総説，著書

飯野亮太,「はたらく分子マシン 10：生体分子モーターの予想外の動きを観る」, *現代化学*, 7月号, 19–23 (2021).

金原　数, 飯野亮太, 竹内正之, 前多裕介,「はたらく分子マシン:ナノの世界のエネルギー変換へ」, *現代化学*, 3月号, 46–50 (2022).

J. J. KEYA, A. KUZUYA and A. KAKUGO, "Molecular Swarm Robot Realized by the Intelligence of a Biomolecular Motor System and DNA," *生物物理（SEIBUTSU BUTSURI）*, **61(5)**, 330–331 (2021).

B-4) 招待講演（* 基調講演）

R. IINO, "Watching dynamic motions of individual protein motors," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), "Molecular engines based on energy conversion: From design to autonomous functions," Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

R. IINO, "Engineering linear molecular motor kinesin-1," 3rd Conference on Biomotors, Virus Assembly, and Nanobiotechnology Applications, Ohio (USA) (Online), December 2021.

J. J. KEYA, A. VISOOTSAT, A. OTOMO, S. HAN, K. KINBARA and R. IINO, "Engineering of hybrid kinesin-1 dimer with synthetic linker by tuning the neck linker length," Japan-US symposium on cytoskeletal motor proteins and their associated proteins, the 59th annual meeting of the Biophysical Society of Japan, Sendai (Japan) (Online), November 2021.

R. IINO, "Visualization and Engineering of the Motions of Protein Molecular Motors," Seminar at Mechanobiology Institute, National University of Singapore, Singapore (Online), July 2021.

R. IINO, "Watching dynamic motions of natural and engineered molecular motor proteins," Workshop on single-molecule biophysics, the School of Pharmacy, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan (China) (Online), September 2021.

飯野亮太,「話題提供：生命科学の立場から」, 公開シンポジウム：アト秒レーザー科学研究施設（ALFA）計画の現状と展望, 分子研, オンライン開催, 2022年3月.

飯野亮太,「マクロな機械とナノサイズの分子機械に共通な仕組みはあるか」, ソフトロボット×発動分子科学ジョイントシンポジウム, 東工大, オンライン開催, 2022年2月.

飯野亮太,「レーザー暗視野顕微鏡を用いた高速高精度生体1分子イメージング」, レーザー学会学術講演会第42回年次大会, 神戸(オンライン開催), 2022年1月.

飯野亮太,「タンパク質分子モーターを観る，壊す，創る」, 第5回分子ロボティクス年次大会, 仙台(オンライン開催), 2021年11月.*

大友章裕,「1分子計測法で明らかにする回転型V-ATPaseのイオン輸送と共役した回転機構」, 名古屋工業大学生命・応用化学専攻神取研究室外部招聘セミナー, 名古屋, 2021年5月.

飯野亮太,「生体分子モーターを観る，壊す，創る」, 新学術「生命金属科学」領域会議, ウインクあいち, 名古屋, 2021年4月.

B-5) 特許出願

US10809257B2, "Method for detecting target molecule," H. NOJI, R. IINO and S. ARAKI (NINS), United States (Granted on October 20, 2020).

特願2021-168388,「蛋白質，ポリヌクレオチド，組換えベクター，形質転換体，ポリエチレンテレフタレート分解用組成物，及びリサイクル品の製造方法」, 中村彰彦，飯野亮太(自然科学研究機構), 2021年.

B-6) 受賞，表彰

大友章裕, 日本生物物理学会中部支部令和2年度講演会最優秀発表賞 (2021).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会ウエブサイト編集委員長 (2021–2022).

日本生物物理学会理事 (2019.6–2023.5).

日本生物物理学会中部支部長 (2019.5–2021.4).

学会誌編集委員

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

その他

岡崎市小中学校理科作品展「未来の科学者賞」選考委員 (2021).（大友章裕）

B-10) 競争的資金

科研費若手研究,「一分子計測法で明らかにするV-ATPaseの機能と構造の相関」, 大友章裕 (2021年–2024年).

科研費基盤研究(B),「バクテリアべん毛モーター固定子複合体の「回転モデル」を1分子計測で実証する」, 飯野亮太 (2021年–2023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).

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,「ナトリウムイオン輸送型EhV-ATPaseの動的分子機構の解明」（代表；Song Chihong), 大友章裕（研究分担者）(2020年–2022年).

新分野創成センター先端光科学研究分野共同研究プロジェクト,「超高速・超広帯域近接場光顕微鏡による機能性材料および生体材料の先端的ナノスケール顕微分光」（代表；西田　純), 大友章裕（研究分担者）(2021年–2022年).

自然科学研究機構分野融合型共同研究事業,「生体機能を凌駕するサイボーグ型分子機械の構築」（代表；金原　数), 飯野亮太（研究分担者）(2020年–2021年).

B-11) 産学連携

共同研究, キリンホールディングス（株),「PET分解酵素の開発」, 飯野亮太 (2022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，ブラウン運動の克服や活用等，全く異なる作動原理で働く。今後は，天然の分子モーターを計測して機構を調べるだけでなく，天然に存在しない分子モーターを積極的につくることで，その作動原理と設計原理をさらに深く理解する。例えば，これまでに作製した非天然型キネシンに，我々が開発した高速高精度マルチカラー１分子計測を適用し，２本の足の動きを同時に可視化してその歩行運動の仕組みをさらに深く理解する。また，改変体の高速高精度１分子計測を進めることで，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の理解を深める。さらに，天然型のV-ATPaseだけでなく，異種のイオンを輸送するV-ATPaseや，１回転で２倍のイオンを輸送するV-ATPaseをつくることで，そのエネルギー変換機構の設計原理を理解する。

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）
田澤　文（研究員（派遣））
新見　涼子（大学院生）
ZHANG, Kaili（大学院生）
高橋　輝気（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) 光触媒を利用した分子変換反応の開発
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) 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。
c) 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。
d) 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。
e) 遷移金属錯体を用いた光触媒反応による新しいカルボニル化合物の活性化と，それに立脚した分子変換反応の開発を遂行しつつある。特に光触媒によるカルボニル基の極性転換に成果を上げつつある。

B-1) 学術論文

H. BAEK, T. SATO, Y. UOZUMI and Y. M. A. YAMADA, “Highly Reusable and Active Nanometal–Silicon-Nanowire Array Hybrid Catalysts for Hydrogenation,” *Eur. J. Inorg. Chem.* **2021(8)**, 708–712 (2021). DOI: 10.1002/ejic.202001006

S. KOSHINO, S. HATTORI, S. HASEGAWA, N. HARAGUCHI, T. YAMAMOTO, M. SUGINOME, Y. UOZUMI and Y. HAYASHI, “Amphiphilic Immobilized Diphenylprolinol Alkyl Ether Catalyst on PS-PEG Resin,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **94(3)**, 790–797 (2021). DOI: 10.1246/BCSJ.20200355

T. SUZUKA, R. NIIMI and Y. UOZUMI, "Cyanide-Free Cyanation of Aryl Iodides with Nitromethane by Using an Amphiphilic Polymer-Supported Palladium Catalyst," *Synlett* **33(1)**, 40–44 (2022). DOI: 10.1055/a-1675-0018

M. KAWASE, K. MATSUOKA, T. SHINAGAWA, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI, O. SHIMOMURA and A. OHTAKA, "Suzuki-Miyaura Cross-Coupling Reaction with Potassium Aryltrifluoroborate in Pure Water Using Recyclable Nanoparticle Catalyst," *Synlett* **33(1)**, 57–61 (2022). DOI: 10.1055/a-1661-3152

S. HIRATA, T. OSAKO and Y. UOZUMI, "Palladium-Catalyzed Aminocarbonylation of Aryl Halides with *N*,*N*-Dialkylformamide Acetals," *Helv. Chim. Acta* **104(11)**, e2100162 (6 pages) (2021). DOI: 10.1002/hlca.202100162

S. OKUMURA and Y. UOZUMI, "Photocatalytic Carbinol Cation/Anion Umpolung: Direct Addition of Aromatic Aldehydes and Ketones to Carbon Dioxide," *Org. Lett.* **23(18)**, 7194–7198 (2021). DOI: 10.1021/acs.orglett.1c02592

B-4) 招待講演

Y. UOZUMI, "Polymer-supported transition metal catalysts: Design, preparation, and their use under aqueous conditions," Symposium on Development of New Reactions and Technologies Adaptable to Process Chemistry, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

B-6) 受賞，表彰

奥村慎太郎, 有機合成化学協会　富士フィルム研究企画賞 (2022).

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 (1998–2021).

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–).

B-9) 学位授与

新見涼子,「両親媒性ポリマー担持銀，パラジウム触媒を用いた環境調和性の高い水中有機分子変換反応の開発：カルボニル選択的水素化反応，Cyanide-free シアノ化反応，ニトリルの水和反応」, 2022 年 3 月, 博士（理学）.

B-10) 競争的資金

科研費挑戦的研究（萌芽),「カルボニル化合物を求核剤とした分子変換反応の開拓」, 魚住泰広 (2021 年–2023 年).

C)　研究活動の課題と展望

2000年にゼロからのスタートを切った精密有機分子変換反応のaqueous-switching，heterogeneous-switchingの試みも十分な成果と蓄積を得てきた。理想の有機分子変換を標榜した当研究室の歩みの中で多くの水中機能性固定化錯体触媒，水中機能性固定化ナノ金属触媒を開発し，その幾つかは汎用性ある触媒として市販されるに至っている。これらの研究は科学研究費補助金（基盤研究, 新学術研究など）にくわえ, 多くの競争的外部研究費を得て推進してきた。即ちこれまでに水中機能性固定化触媒に関する「グリーンナノ触媒」CREST研究（2002年10月－2008年3月），続いてその成果を実践的に発展させるMETI-NEDOプロジェクト（2008年9月－2012年2月），稀少元素の元素循環・元素減量・元素代替に焦点を当てた「元素戦略」CREST研究（2011年10月－2017年3月）を展開してきた。さらに2014年12月からACCEL研究（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。なかでも最近は未開拓元素群の触媒反応性（とくにCu，Fe，Ag）の探索と確立，さらには分子の自己集積化に立脚した触媒機能の自発的獲得など目指した研究開発を推進しつつある。また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。また特に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を推進し，従来にないカルビノール基の極性転換反応を開発･展開しつつある。本課題は今後の魚住グループの大きな潮流となる。

椴　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）
加藤　雅之（大学院生）
小谷　駿輔（大学院生）
西岡　雪奈（技術支援員（派遣））
牛田　妃菜乃（事務支援員（派遣））

A-1) 専門領域：有機合成化学

A-2) 研究課題：

a) キラルなプロトンを開始剤とする触媒的不斉連鎖反応の開発
b) ペルフルオロハロゲン化ベンゼンを基盤とする触媒機能の体系化
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
f) 全データ駆動型反応開発システムの構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 触媒量のキラルブレンステッド酸を開始剤として用い，触媒的不斉連鎖反応に成功した。エナンチオ選択性の発現機構を計算化学的に検証するため，鈴木敏泰チームリーダーと共同研究を実施した。その結果，本触媒反応におけるエナンチオ選択性が，キラルブレンステッド酸触媒の対アニオンと反応系中で発生したカチオン種との非共有結合性相互作用により制御されていることを見出した。本研究は，キラルな有機アニオンによる選択性制御機構の詳細に言及する世界初の例となる。さらに，得られた生成物を β- アミノ酸誘導体へと変換して，本触媒反応の有用性を示した。これらの研究成果を学術論文としてまとめ学術誌に投稿し，編集長から論文改訂依頼を受けた。追加実験および追加計算，論文改訂作業を概ね完了し，現在，改訂論文の投稿の段階に進んでいる。
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た。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，鈴木敏泰チームリーダー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示すことに成功した。現在，ペルフルオロハロゲン化ベンゼンを基盤とする触媒機能の体系化を試みている。次年度内の掲載決定に向け，追加実験をもとに論文改訂作業を進めている。
c) ハロゲン結合供与部位を有する高分子と 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。共同研究の成果について，現在，論文を執筆中である。さらに，

反応操作を見直すことにより，本触媒反応システムは，ppm レベルの触媒反応へと展開することに成功した。岐阜医療科学大学の萬代准教授と共同研究において ppm レベルでの不斉触媒化に挑戦し，開発した不斉高分子触媒がエナンチオ選択性の発現に有効であることを明らかにした。

d) エチニルビスピリジンを配位子とするヨードニウム錯体やジアリールヨードニウムトリヨージドの合成と単結晶X線回折に成功した。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，極め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。追加実験および追加計算, 論文改訂作業が概ね完了し, 現在, 改訂論文の投稿直前の段階に進んでいる。

e) 全フッ素ハロゲン化ベンゼンでは達成できない新規機能の探究を目的として，全フッ素ハロゲン化ペリレン化合物の精密合成を実施した。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 $Mg(TMP)_2{\cdot}2LiBr$ 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。本成果についても，論文を執筆予定である。

f) 化学反応の開発は，新規有機分子の精密合成を実現するうえで重要な鍵となる。合成研究から機能創成研究への展開の迅速化を目的として，これまで取り組んできた新規有機分子の合成と機能開拓に，情報科学手法を活用する開発システムの構築に着手した。具体的には，静岡大武田准教授，山手機器センター鈴木敏泰チームリーダーと共同研究を実施し，全フッ素ハロゲン化ペリレン化合物の合成に，機械学習と量子化学計算の融合による反応開発を行った。その結果, 定量的な解析にもとづく反応条件の最適化が可能になり, 反応収率の飛躍的な向上に成功した。また, 開発したハロニウム錯体触媒の適用範囲の拡充に向けて，マテリアルインフォマティクス企業との共同研究に着手した。構築したモデルにより Mayr の求核性パラメータ N 値を予測することが可能になった。現在，触媒化学空間の可視化にもとづき，求核剤の拡充を進めている。

B-1) 学術論文

N. MOMIYAMA, Y. HONDA, T. SUZUKI and C. JONGWOHAN, “Computational Studies on Reaction Mechanisms and Origin of Stereoselectivity in the [1,3]-Rearrangement of Ene-Aldimines,” *Asian J. Org. Chem.* **10**, 2205–2212 (2021). [Special Collection on the Topic of Organocatalysis, invitation only] DOI: 10.1002/ajoc.202100302

N. MOMIYAMA, A. IZUMISEKI, N. OHTSUKA and T. SUZUKI, “Correlations between Substituent Effects and Catalytic Activities: A Quantitative Approach for the Development of Halogen-Bonding-Driven Anion-Binding Catalysts,” *ChemPlusChem* **86**, 913–919 (2021). [Special Issue for ISXB-4, invitation only] DOI: 10.1002/cplu.202100147

K. TAKAHASHI, S. IZAWA, N. OHTSUKA, A. IZUMISEKI, R. TSURUTA, R. TAKEUCHI, Y. GUNJO, Y. NAKANISHI, K. MASE, T. KOGANEZAWA, N. MOMIYAMA, M. HIRAMOTO and Y. NAKAYAMA, "Quasi-Homoepitaxial Junction of Organic Semiconductors: A Structurally Seamless but Electronically Abrupt Interface between Rubrene and Bis(trifluoromethyl) dimethylrubrene," *J. Phys. Chem. Lett.* **12(46)**, 11430–11437 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpclett.1c03094

K. TANAKA, M. KISHIMOTO, Y. TANAKA, Y. KAMIYAMA, Y. ASADA, M. SUKEGAWA, N. OHTSUKA, T. SUZUKI, N. MOMIYAMA, K. HONDA and Y. HOSHINO, "Moderately Oxidizing Thioxanthylium Organophotoredox Catalysts for Radical-Cation Diels–Alder Reactions," *J. Org. Chem.* **87**, 3319–3328 (2022). DOI: 10.1021/acs.orglett.1c02972

B-6) 受賞，表彰

加藤雅之, 第 24 回ヨウ素学会シンポジウム優秀ポスター賞 (2021).

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常任幹事 (2021).

有機合成化学協会将来計画検討ワーキンググループ (2021).

学会の組織委員等

日本プロセス化学会東海地区フォーラム幹事 (2021).

学会誌編集委員

有機合成化学協会編集協力委員 (2020, 2021).

B-10) 競争的資金

科研費学術変革領域研究(A)（計画研究),「精密合成を迅速に実現する全データ駆動型反応開発システムの構築」, 椴山儀恵 (2021 年–2025 年).

科研費学術変革領域研究(A),「デジタル化による高度精密有機合成の新展開」総括班（代表；大嶋孝志), 椴山儀恵（研究支援）(2021 年–2025 年).

C) 研究活動の課題と展望

当グループでは，精密合成化学を基盤として，有機機能性分子の設計･合成･機能化を進めている。これまでに，種々の新規ハロゲン分子の精密合成に取り組み，これらの分子が，触媒分子として機能す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開発した触媒の機能発現に重要な役割を果たしていることを実証している。2020 年度後期から 2021 年度前期にかけて，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２報が学術誌に掲載された。また，2021 年度後期は，所内外研究者との共同研究成果がまとまり，学術誌２報に掲載された。引き続き, 修正および追加実験を依頼されている論文４報の改訂作業を行い, 2022 年度中の論文掲載を目指す。さらに，これら従来法による反応および触媒の開発に加え，インフォマティクスを活用した次世代精密有機合成システムの構築に尽力し，有機ハロゲン分子の精密合成から機能創成への研究展開を加速する。

今後は，有機合成のデジタル化を推進しながら，新たな分子性触媒・分子変換反応を開発する。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，有機フッ素ハロゲン分子建築の学理を確立する。近い将来，本研究の成果が，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）
水野　麻人（特任研究員）
壬生　託人（特任専門員）
中貝　梢（技術支援員（派遣））
増田　道子（事務支援員）
川口　律子（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（magneto-luminescence）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⇔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

R. MATSUOKA, S. KIMURA and T. KUSAMOTO, “Solid-State Room-Temperature Near-Infrared Photoluminescence of a Stable Organic Radical,” *ChemPhotoChem* **5(7)**, 669–673 (2021). DOI: 10.1002/cptc.202100023

Y. HATTORI, S. TSUBAKI, R. MATSUOKA, T. KUSAMOTO and H. NISHIHARA and K. UCHIDA, “Expansion of Photostable Luminescent Radicals by Meta-Substitution,” *Chem. –Asian J.* **16(17)**, 2538–2544 (2021). DOI: 10.1002/asia.202100612

S. KIMURA, R. MATSUOKA, S. KIMURA, H. NISHIHARA and T. KUSAMOTO, “Radical-Based Coordination Polymers as a Platform for Magnetoluminescence,” *J. Am. Chem. Soc.* **143(15)**, 5610–5615 (2021). DOI: 10.1021/jacs.1c00661

S. MATTIELLO, F. CORSINI, S. MECCA, M. SASSI, R. RUFFO, G. MATTIOLI, Y. HATTORI, T. KUSAMOTO, G. GRIFFINI and L. BEVERINA, “First Demonstration of the Use of Open-Shell Derivatives as Organic Luminophores for Transparent Luminescent Solar Concentrators,” *Mater. Adv.* **2(22)**, 7369–7378 (2021). DOI: 10.1039/d1ma00659b

R. MATSUOKA, T. YOSHIMOTO, Y. KITAGAWA and T. KUSAMOTO, “Structural and Magnetic Studies on Nickel(II) and Cobalt(II) Complexes with Polychlorinated Diphenyl(4-pyridyl)methyl Radical Ligands,” *Molecules* **26(18)**, 5596 (8 pages) (2021). DOI: 10.3390/molecules26185596

Y. HATTORI, R. KITAJIMA, R. MATSUOKA, T. KUSAMOTO, H. NISHIHARA and K. UCHIDA, “Amplification of Luminescence of Stable Radicals by Coordination to NHC–Gold(i) Complex,” *Chem. Commun.* **58**, 2560–2563 (2022). DOI: 10.1039/D1CC06555F

T. KUSAMOTO, C. OHDE, S. SUGIURA, S. YAMASHITA, R. MATSUOKA, T. TERASHIMA, Y. NAKAZAWA, H. NISHIHARA and S. UJI, “An Organic Quantum Spin Liquid with Triangular Lattice: Spinon Fermi Surface and Scaling Behavior,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **95(2)**, 306–313 (2022). DOI: 10.1246/bcsj.20210411

B-3) 総説，著書

T. KUSAMOTO and S. KIMURA, “Photostable Luminescent Triarylmethyl Radicals and Their Metal Complexes: Photofunctions Unique to Open-Shell Electronic States,” *Chem. Lett.* **50(7)**, 1445–1459 (2021). DOI: 10.1246/cl.210201

B-4) 招待講演

草本哲郎,「開殻電子系分子の開発を基とする発光・磁気機能創出」, 第６回分子性固体オンラインセミナー , オンライン開催, 2021年４月.

草本哲郎,「発光性有機ラジカルに基づく磁気・光機能開拓」, 日本磁気科学会令和３年物理化学分科会「電子スピンの検出と応用――磁場効果現象における物理化学と学際的磁気科学」, オンライン開催, 2021年10月.

草本哲郎,「有機ラジカルが示す発光特性の磁場効果」, 強磁場オンライン研究会 2021, オンライン開催, 2021年11月.

草本哲郎,「有機ラジカルで挑むトポロジカル物質開拓と光機能創出」, さきがけ・CREST トポロジー合同第１回インフォーマルミーティング「高分子が拓くトポロジカル科学」, オンライン開催, 2021年12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長 (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 (2017–2019).

学会の組織委員等

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).

その他

錯体化学若手の会第 10回ウェブ勉強会主催 (2021).

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」, 2021 年 9 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－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).

C) 研究活動の課題と展望

有機ラジカルや磁性金属錯体に代表される開殻電子系分子は，不対電子に基づき，通常の閉殻分子とも無機物質とも異なる物性を発現する。我々の研究グループでは，開殻電子系分子を用いてユニークな光・電気・磁気相関物性を創製・解明することで，物性科学に新概念と革新をもたらすことを目指して研究を進めている。今年度は，(a) スピン－発光相関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，低温・磁場下における発光測定が可能な測定系を用いて，これまで開発してきた発光開殻分子の magnetoluminescence における普遍性と非普遍性，ならびに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，これまでにない光相関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）
長瀬　真依（大学院生）
渡邊　幸佑（特別共同利用研究員）
中野　さち子（技術支援員（派遣））
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) 湾曲構造をもったπ共役有機分子の合成と構造解析を行った。大環状にπ共役がつながった分子「シクロパラフェニレン」について，初の全置換体である「パーフルオロシクロパラフェニレン」の合成・構造・光物性研究についてのプレプリントを公開した（*ChemRxiv* 2021, DOI: 10.33774/chemrxiv-2021-7kd63）。また，負の曲率をもつ芳香族炭化水素「ワープドナノグラフェン」について，1 ～ 3 電子還元体の単離および構造決定を行い，電荷と構造の関係を明らかにした。（学術論文リスト 1）
b) メビウスの輪のトポロジーをもつ分子の合成と性質解明研究についてプレプリントを公開した（*ChemRxiv*, DOI: 10.26434/chemrxiv-2021-w09lc）。またベルト状に共役した含窒素芳香族分子の合成および酸化反応挙動を解明し，プレプリントを公開した（*ChemRxiv*, DOI: 10.26434/chemrxiv-2022-jqvv2）。
c) [1] ベンゾチエノ [3,2-*b*][1] ベンゾチオフェン（BTBT）を２つの異なる置換基，すなわちフェニルエチニル（PE）とアルキルとで非対称化することに基づく独自の溶液処理可能な有機半導体を開発した。スメクチック液晶相に類似した特徴的な層状液晶相が置換基の長さがほぼ同じである $n = 6$ の PE-BTBT-Cn で得られた。BTBT 部分は，剛体の層状ヘリンボーン（LHB）パッキングを維持するが，分子の長軸は完全な配向の乱れを示した。その独特の形状は，微結晶電子回折（MicroED）によって解析に成功し，分子間コア間相互作用は d-LHB パッキングを安定させ，約 3 $cm^2\ V^{-1}\ s^{-1}$ の比較的高い電界効果移動度を可能にした。（学術論文リスト 2）

B-1) 学術論文

S. N. SPISAK, Z. ZHOU, S. LIU, Q. XU, Z. WEI, K. KATO, Y. SEGAWA, K. ITAMI, A. Y. ROGACHEV and M. A. PETRUKHINA, “Stepwise Generation of Mono-, Di-, and Triply-Reduced Warped Nanographenes: Charge-Dependent Aromaticity, Surface Nonequivalence, Swing Distortion, and Metal Binding Sites,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **60(48)**, 25445–25453 (2021). DOI: 10.1002/anie.202110748

S. INOUE, K. NIKAIDO, T. HIGASHINO, S. ARAI, M. TANAKA, R. KUMAI, S. TSUZUKI, S. HORIUCHI, H. SUGIYAMA, Y. SEGAWA, K. TAKABA, S. MAKI-YONEKURA, K. YONEKURA and T. HASEGAWA, "Emerging Disordered Layered-Herringbone Phase in Organic Semiconductors Unveiled by Electron Crystallography," *Chem. Mater.* **34(1)**, 72–83 (2021). DOI: 10.1021/acs.chemmater.1c02793

B-4) 招待講演

瀬川泰知,「曲がったsp^2炭素の有機合成化学」, 第 33 回万有札幌シンポジウム , オンライン開催, 2021 年 6 月 .

瀬川泰知,「曲がったパイの盛り合わせセットで」, 第 11 回 CSJ 化学フェスタ , オンライン開催, 2021 年 10 月 .

瀬川泰知,「湾曲した芳香族炭化水素にトポロジーを」, 令和３年度東北地区先端高分子セミナー , オンライン開催, 2022 年 3 月 .

B-6) 受賞，表彰

瀬川泰知, Thieme Chemistry Journals Award (2022).

瀬川泰知, Chemist Award BCA (2021).

B-10) 競争的資金

三菱財団自然科学研究助成,「等方的キャリア輸送を実現するユニバーサル有機半導体材料の開発」, 瀬川泰知 (2021 年度 –2022 年度).

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 (2021 年度 –2022 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).

C) 研究活動の課題と展望

本年は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研究を行った。パーフルオロシクロパラフェニレンの合成，含窒素ベルト状芳香族化合物の合成，特異なトポロジーをもつ芳香族炭化水素メビウスカーボンナノベルトの合成を発表した。また東京大学や理化学研究所らとの共同研究によって，電子回折を利用した有機半導体薄膜の構造解析に成功した。これは電子回折結晶構造解析が有機機能性材料開発を今後強力に推進できる新技術であることを示している。今後は複雑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および機能開拓を行い，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））
CHEN, Jiazhuo（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）
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) 結晶スポンジ法の高度化とその応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 結晶スポンジ法とは，解析対象物そのものを単結晶化することなく結晶構造解析を行うことができる手法である。本手法は，我々が 2013 年に報告したものであるが，化合物の構造決定を必要とする全ての研究開発を大きく加速する可能性を秘めた技術であることから，本手法の高性能化に取り組んでいる。その結果，現在の結晶スポンジ法は，2013 年の発表当初よりも，より広範な化合物に対して適用可能な技術となった。また，結晶スポンジ法の応用にも取り組んでおり，特に，生物の二次代謝に関わる酵素の研究に結晶スポンジ法を応用している。二次代謝関連酵素はお互いに類似のアミノ酸配列を持ったもの同士であっても，大きく異なる構造を持った化合物を酵素産物として与えることがしばしばあり，この酵素産物の構造決定に従来，多くの労力が割かれていたが，結晶スポンジ法によって，このボトルネックを解消することができた。

B-1) 学術論文

H. SUNOHARA, K. KOYAMADA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, “An Ir_3L_2 Complex with Anion Binding Pockets: Photocatalytic *E–Z* Isomerization via Molecular Recognition,” *Chem. Commun.* **57(73)**, 9300–9302 (2021). DOI: 10.1039/d1cc03620c

Y. DOMOTO, M. ABE and M. FUJITA, “A Highly Entangled $(M_3L_2)_8$ Truncated Cube from the Anion-Controlled Oligomerization of a π-Coordinated M_3L_2 Subunit,” *J. Am. Chem. Soc.* **143(23)**, 8578–8582 (2021). DOI: 10.1021/jacs.1c03208

R. DUBEY, K. YAN, T. KIKUCHI, S. SAIRENJI, A. ROSSEN, S. S. GOH, B. L. FERINGA and M. FUJITA, “Absolute Configuration Determination from Low ee Compounds by the Crystalline Sponge Method. Unusual Conglomerate Formation in a Pre-Determined Crystalline Lattice,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **60(21)**, 11809–11813 (2021). DOI: 10.1002/anie.202102559

N. R. ARIEFTA, M. AZIM, T. ABOSHI, T. KOSEKI, Y. TANIGUCHI, M. FUJITA and Y. SHIONO, “Colletofurans A-E, 1-Octyl-1,3-dihydroisobenzofuran Derivatives from Colletotrichum boninense AM-12-2,” *Org. Lett.* **22(8)**, 3161–3165 (2020). DOI: 10.1021/acs.orglett.0c00925

T. SAWADA, W. IWASAKI, M. YAMAGAMI and M. FUJITA, "Parallel and Antiparallel Peptide Double β-Helices Controlled by Metal-Induced Folding and Assembly," *Nat. Sci.* **1**, e10008 (7 pages) (2021). DOI: 10.1002/ntls.10008

J. CHEN, T. KIKUCHI, K. TAKAGI, H. KIYOTA, K. ADACHI, T. MITSUHASHI and M. FUJITA, "Structure Analysis of Polyhalogenated Persistent Organic Pollutants by the Crystalline Sponge Method," *Chem. Lett.* **51(1)**, 85–87 (2022). DOI: 10.1246/cl.210613

N. WADA, K. KAGEYAMA, Y. JUNG, T. MITSUHASHI and M. FUJITA, "Solvent Effects in the Crystalline Sponge Method: Importance of Co-Solvents for Ordering Absorbed Guests," *Org. Lett.* **23(23)**, 9288–9291 (2021). DOI: 10.1021/acs.orglett.1c03660

Y. INOMATA, T. SAWADA and M. FUJITA, "Metal-Peptide Nonafoil Knots and Decafoil Supercoils," *J. Am. Chem. Soc.* **143(40)**, 16734–16739 (2021). DOI: 10.1021/jacs.1c08094

Y. TANIGUCHI, T. KIKUCHI, S. SATO and M. FUJITA, "Comprehensive Structural Analysis of the Bitter Components in Beer by the HPLC-Assisted Crystalline Sponge Method," *Chem. –Eur. J.* **28(2)**, e202103339 (5 pages) (2022). DOI: 10.1002/chem.202103339

D. FUJITA, R. SUZUKI, Y. FUJII, M. YAMADA, T. NAKAMA, A. MATSUGAMI, F. HAYASHI, J.-K. WENG, M. YAGI-UTSUMI and M. FUJITA, "Protein Stabilization and Refolding in a Gigantic Self-Assembled Cage," *Chem* **7**, 2672–2683 (2021). DOI: 10.1016/j.chempr.2021.08.005

B-3) 総説，著書

H. TAKEZAWA and M. FUJITA, "Molecular Confinement Effects by Self-Assembled Coordination Cages," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **94(10)**, 2351–2369 (2021). DOI: 10.1246/bcsj.20210273

T. SAWADA and M. FUJITA, "Orderly Entangled Nanostructures of Metalpeptide Strands," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **94(10)**, 2342–2350 (2021). DOI: 10.1246/bcsj.20210218

N. ZIGON, V. DUPLAN, N. WADA and M. FUJITA, "Crystalline Sponge Method: X-Ray Structure Analysis of Small Molecules by Post-Orientation within Porous Crystals—Principle and Proof-of-Concept Studies," *Angew. Chem., Int. Ed.* **60(48)**, 25204–25222 (2021). DOI: 10.1002/anie.202106265

B-4) 招待講演

藤田　誠,「結晶スポンジ法：天然物化学，創薬研究への応用」, 日本結晶学会創立 70 周年記念シンポジウム , 札幌（オンライン・ハイブリット開催）, 2021 年 11 月 .

藤田　誠,「革新分子構造解析「結晶スポンジ法」: 基礎研究が羽ばたくまで」, 第２回 MIRC フォーラム , オンライン開催 , 2021 年 11 月 .

藤田　誠,「結晶スポンジ法：有機合成，天然物化学，創薬研究への応用」, 第 37 回有機合成化学セミナー , オンライン開催 , 2021 年 9 月 .

M. FUJITA, "Crystalline Sponge Method: Recent Updates and Applications," 25th Congress of the International Union of Crystallography, Prague (Czech Republic) (online/hybrid), August 2021.

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

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

今後，結晶スポンジ法による二次代謝関連酵素の解析をさらに発展させたい。特に，従来の二次代謝酵素解析スキーム中の構造決定部分に対し単に結晶スポンジ法を用いることにとどまらない展開を志向している。すなわち，結晶スポンジ法には，ごく微量の試料があれば構造解析を行うことができるという特徴があることから，結晶スポンジ法の使用を前提とすることで，二次代謝酵素の解析スキーム全体を小スケール化･迅速化することができると考えており，これを実証したい。

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性が現れる固体・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

S. KIMURA, T. KAWABATA, H. MATSUMOTO, Y. OHTA, A. YOSHIZUMI, Y. YOSHIDA, T. YAMASHITA, H. WATANABE, Y. OHTSUBO, N. YAMAMOTO and X. JIN, “Bulk-Sensitive Spin-Resolved Resonant Electron Energy-Loss Spectroscopy (SR-rEELS): Observation of Element- and Spin-Selective Bulk Plasmons,” *Rev. Sci. Instrum.* **92**, 093103 (8 pages) (2021). DOI: 10.1063/5.0055435

W. J. CHOI, Y. I. SEO, S. KIMURA and Y. S. KWON, “Optical Properties in the Hole-Doped $Ca_{8.5}Na_{1.5}(Pt_3As_8)(Fe_2As_2)_5$ Single Crystal,” *Results Phys.* **27**, 104468 (9 pages) (2021). DOI: 10.1016/j.rinp.2021.104468

S. KIMURA, Y. S. KWON, C. KRELLNER and J. SICHELSCHMIDT, “Optical Evidence of Local and Itinerant States in Ce- and Yb-Heavy-Fermion Compounds,” *Electron. Struct.* **3**, 024007 (8 pages) (2021). DOI: 10.1088/2516-1075/abffe2

S. KIMURA, J. SICHELSCHMIDT and S. KHIM, “Optical Study of the Electronic Structure of Locally Noncentrosymmetric $CeRh_2As_2$,” *Phys. Rev. B* **104**, 245116 (7 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.104.245116

B-4) 招待講演

S. KIMURA, “Photo-Induced Valence Transition of SmS: Similarity to the Pressure-Induced Black-To-Golden Phase Transition,” 10th Asian Conference on High Pressure Research, Online, November 2021.

S. KIMURA, “Photo-Induced Valence Transition of SmS,” Global Summit on Condensed Matter Physics (CONMAT2021), Valencia (Spain) (online/hybrid), October 2021.

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, 2021.9–2023.9).

日本物理学会領域５副代表 (2021.4–2022.3).

UVSOR 利用者懇談会会長 (2014.4–2016.3, 2018.4–2020.3, 2020.4–2022.3).

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).

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–

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, 2020.4–2024.3).

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, 2020.4–2024.3).

SPring-8/SACLA 成果審査委員会「査読者」(2016.4–2018.3, 2018.4–2020.3, 2020.4–2024.3).

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 (2019.4–2023.3).

B-8) 大学での講義，客員

大阪大学理学部,「光物理学」, 2021年4月9日–8月6日.

大阪大学大学院理学研究科,「光物性物理学／ Optical Properties of Matter」, 2021年4月9日–8月6日.

大阪大学大学院生命機能研究科,「Introduction to Biophysical Dynamics III」, 2021年10月26日, 28日.

大阪大学大学院生命機能研究科,「基礎物理学実習」, 2021年7月12日–16日.

大阪大学全学共通科目,「力学詳論II」, 2021年10月1日–2022年2月4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).

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。

大　西　　洋（教授）（2021 年 11 月 1 日着任）
（クロスアポイントメント；神戸大学大学院理学研究科）

石川　あずさ（事務支援員）

A-1) 専門領域：界面分子科学，触媒科学

A-2) 研究課題：

a) 有限厚さをもつ固液界面のオペランド計測：創／省エネルギーを支えるサイエンスの構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 創エネルギーと省エネルギーという社会ニーズに応えるために，高収率の半導体光触媒と低摩擦の潤滑油が最近 20 年のあいだに次々と開発されてきた。これら新材料をオペランド計測する手法に工夫をこらして有限の厚さ（1 μm–1 nm）をもつ液体－固体界面が機能を発現するしくみを理解する。分子論的な界面（液体分子と固体分子が接触する場所）でおきる現象と，分子論的な界面へ物質とエネルギーを入出力する場所でおきる現象を同時に計測し一体として理解することの重要性を光触媒（物質変換）と潤滑油（力学的エネルギー散逸）というケーススタディをとおして世界へ発信することを目的とする。①電子励起状態にある光触媒の軟エックス線分光と全反射光学分光の手法開発②潤滑油界面のナノ力学計測と単一分子蛍光追跡の手法開発が本年度の成果である。

B-4) 招待講演

大西　洋,「半導体光触媒による水の全分解反応：マイクロ電極による生成酸素の時間分解検出」, 電気化学会第 89 回大会, オンライン開催, March 2022.

H. Onishi, “An ATR-IR Scheme for Operando Characterization of Semiconductor Photocatalysts,” International Iwasawa Conference 2022, online, March 2022.

大西　洋,「半導体光触媒のオペランド計測：赤外分光とマイクロ電気化学」, 触媒学会西日本支部キャラクタリゼーション講習会, Kumamoto (Japan), January 2022.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面真空学会論文賞等選定委員 (2018–).

（社）応用物理学会薄膜・表面物理分科会幹事 (2006–).

学会の組織委員等

9th International Symposium on Surface Science (ISSS-9) 会場委員長兼プログラム委員 (2018–2021).

International Colloquium on Scanning Probe Microscopy（ICSPM）, program committee chair (2019–).

The 22nd International Vacuum Congress (IVC-22), program committee co-chair (2020–).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会ナノプローブテクノロジー第 167 委員会委員 (2016–).

北海道大学触媒科学研究所共同利用・共同研究拠点課題等審査専門委員会委員長 (2016–).

学会誌編集委員

日本表面真空科学会電子ジャーナル委員 (2002–).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「半導体光触媒による水の 4 電子酸化反応：高効率な逐次物質変換のメカニズム」, 大西　洋 (2019年–2021年).

科研費国際共同研究加速基金（国際共同研究強化(B)),「人工光合成の学理：タンタル酸ナトリウム光触媒をプラットフォームとする多国間協働」, 大西　洋 (2018年–2021年).

科研費挑戦的研究（萌芽),「固体に挟まれた潤滑油分子の並進運動計測：単一蛍光分子追跡」, 大西　洋 (2021年–2023年).

大阪市立大学人工光合成共同研究拠点共同研究,「人工光合成をめざす半導体光触媒の水中での赤外吸収分光」, 大西　洋 (2021年).

科研費基盤研究(A),「電子スピン分極の三次元映像化で解く多重励起子・電荷分離立体構造の分子運動効果」（代表; 小堀康博), 大西　洋（研究分担者） (2019年–2022年).

B-11) 産学連携

（株)島津製作所,「潤滑油界面のナノ力学計測」, 大西　洋 (2021年).

C)　研究活動の課題と展望

【光触媒】水－光触媒界面ですすむ物質変換に焦点を絞った研究を展開していく。従来の光触媒ダイナミクス研究はフェムト秒からマイクロ秒で進む電子のうごき（電子励起と電荷分離）に注目してきた。有限厚の水－光触媒界面で物質輸送を含むミリ秒の反応化学の解明をめざす。

【潤滑油】潤滑油－固体界面におけるエネルギー散逸の鍵となる分子運動性を定量評価するために原子間力顕微鏡を駆使したナノ力学計測と, 生体膜研究に常用される単一蛍光分子追跡を潤滑油界面計測に転用する研究を進めていく。

高　谷　　光（准教授）（2019 年 12 月 1 日～ 2022 年 2 月 28 日）
（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，常磁性の触媒活性種や高活性で不安定な活性種の「その場観 XAFS」の開発を目的とした研究を推進してきた。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不安定な反応活性種の溶液軟Ｘ線吸収分光法の開発に成功した。具体的には，鉄触媒クロスカップリング反応の触媒活性種であるアリール鉄錯体や Grignard 反応剤の溶液 XAFS 測定を行うために，各種有機溶媒に高い耐性を有するピーク樹脂製フローセルを開発した。このセルでは，金蒸着された SiN 薄膜を窓材として用いており，金線で窓材をアースすることによって有機溶媒の送液によって発生・蓄積する静電気を除去できる。そのため，従来型フローセルで問題となっていた静電気によるノイズやベースラインのドリフトを抑え，長時間安定して溶液 XAFS 測定を行える。また，上記フローセルを用いる XAFS 測定では，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できる。さらに，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，系中に生成する反応／触媒活性種の「その場観察」が可能であるという特徴を有する。2021 年度では，不安定な Fe/Ni 触媒種の Fe-L/Ni-L 端および有機マグネシウム反応剤（Grignard 試薬）の C-K/O-K 端の溶液 XAFS 測定に成功した。2022 年度では，有機化学における未解決の反応機構・活性種問題を解決するために，触媒種／反応種を拡張し，さらにフローリアクタを用いて反応過程の XAFS 観察を行いたい。

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。2021 年度は，UVSOR の赤外／ THz ビームライン（BL1B）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，マイクロ波照射下でのテラヘルツ測定に成功した。2022 年度では，マイクロ波効果のプローブ分子として知られるニトロベンゼン類を用い，テラヘルツ分光によるマイクロ波特異的効果の直接検出に取り組みたい。

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。2022 年度では，分子動力学計算および ITC によるリグニン認識機構の解明に取組むとともに，マイクロ波／ボールミルによる木質バイオマスの高効率／高選択的な分解反応の開拓を行う。

B-1) 学術論文

T. MATSUYAMA, S. KIKKAWA, Y. FUJIKI, M. TSUKADA, H. TAKAYA, N. YASUDA, K. NITTA, N. NAKATANI, Y. NEGISHI and S. YAMAZOE, "Thermal Stability of Crown-Motif $[Au_9(PPh_3)_8]^{3+}$ and $[MAu_8(PPh_3)_8]^{2+}$ (M = Pd, Pt) Clusters: Effects of Gas Composition, Single-Atom Doping, and Counter Anions," *J. Chem. Phys.* **155(4)**, 044307 (8 pages) (2021). DOI: 10.1063/5.0059690

L. ADAK, M. JIN, S. SAITO, T. KAWABATA, T. ITOH, S. ITO, A. K. SHARMA, N. J. GOWER, P. COGSWELL, J. GELDSETZER, H. TAKAYA, K. ISOZAKI and M. NAKAMURA, "Iron-Catalysed Enantioselective Carbometalation of Azabicycloalkenes," *Chem. Commun.* **57**, 6975–6978 (2021). DOI: 10.1039/d1cc02387j

H. KOBAYASHI, K. OKADA, S. TOKUDA, E. KANAO, Y. MASUDA, T. NAITO, H. TAKAYA, M. YAN, T. KUBO and K. OTSUKA, "Separation of Saccharides Using Fullerene-Bonded Silica Monolithic Columns via π Interactions in Liquid Chromatography," *Sci. Rep.* **10**, 13850 (9 pages) (2020). DOI: 10.1038/s41598-020-70904-3

T. IWASAKI,* Y. HIROOKA, H. TAKAYA, T. HONMA and K. NOZAKI,* "Lithium Hexaphenylrhodate(III) and -Iridate(III): Structure in the Solid State and in Solution," *Organometallics* **40(15)**, 2489–2495 (2021). DOI: 10.1021/acs.organomet.1c00248

Y. YAMADA,* K. MORITA, T. SUGIURA, Y. TOYODA, N. MIHARA, M. NAGASAKA, H. TAKAYA, K. TANAKA, T. KOITAYA, N. NAKATANI, H. ARIGA-MIWA, S. TAKAKUSAGI, Y. HITOMI, T. KUDO, Y. TSUJI, K. YOSHIZAWA and K. TANAKA, "Close-Stacking of Iron-Oxo-Based Double-Decker Complex on Graphite Surface Achieved High Catalytic CH_4 Oxidation Activity Comparable to that of Methane Monooxygenases," *ChemRxiv* chemrxiv.14728860.v1 (2021). DOI: 10.26434/chemrxiv.14728860.v1

R. TAKAHASHI, A. HU, P. GAO, Y. GAO, Y. PANG, T. SEO, J. JIANG, S. MAEDA, H. TAKAYA, K. KUBOTA and H. ITO, "Mechanochemical Synthesis of Magnesium-Based Carbon Nucleophiles in Air and Their Use in Organic Synthesis," *Nat. Commun.* **12(1)**, 6691 (10 pages) (2021). DOI: 10.1038/s41467-021-26962-w

S. TAJIMA, A. MURANAKA, M. NAITO, N. TANIGUCH, M. HARADA, S. MIYAGAWA, M. UEDA, H. TAKAYA, N. KOBAYASHI, M. UCHIYAMA and Y. TOKUNAGA, "Synthesis of a Mechanically Planar Chiral and Axially Chiral [2]Rotaxane," *Org. Lett.* **23(22)**, 8678–8682 (2021). DOI: 10.1021/acs.orglett.1c02983

K. ISOZAKI, R. UENO, K. ISHIBASHI, G. NAKANO, H. YIN, K. ISERI, M. SAKAMOTO, H. TAKAYA, T. TERANISHI and M. NAKAMURA, "Gold Nanocluster Functionalized with Peptide Dendron Thiolates: Acceleration of the Photocatalytic Oxidation of an Amino Alcohol in a Supramolecular Reaction Field," *ACS Catal.* **11(21)**, 13180–13187 (2021). DOI: 10.1021/acscatal.1c03394

B. WATANABE, K. MAKINO, M. MIZUTANI and H. TAKAYA, "Synthesis and Structural Confirmation of Calibagenin and Saxosterol," *Tetrahedron* **91**, 132194 (2021). DOI: 10.1016/j.tet.2021.132194

Y. MATSUKAWA, A. MURANAKA, T. MURAYAMA, M. UCHIYAMA, H. TAKAYA and Y. M. A. YAMADA, "Microwave-Assisted Photooxidation of Sulfoxides," *Sci. Rep.* **11(1)**, 20505 (7 pages) (2021). DOI: 10.1038/s41598-021-99322-9

M. UEDA, M. KIMURA, S. MIYAGAWA, M. NAITO, H. TAKAYA and Y. TOKUNAGA, "Two- and Four-Armed Hetero Porphyrin Dimers: Influence of the Number of Arms on the Stability and Specific Recognition Behaviour," *Org. Biomol. Chem.* **20(2)**, 387–395 (2022). DOI: 10.1039/D1OB01694F

B-4) 招待講演

H. TAKAYA, "Microwave-Assisted Ni-Catalyzed Coupling Reactions," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

高谷　光,「マイクロ波による有機合成反応制御」, 第 52回中部化学関係学協会支部連合秋季大会, オンライン開催, 2021年 10月.

高谷　光,「X線吸収分光による均一系触媒反応機構の解明」, 日本化学会第 11回CSJ 化学フェスタ「大型研究施設を用いた化学研究・材料開発」, オンライン開催, 2021年 10月.

高谷　光,「X線吸収分光による均一系触媒反応機構の解明」, 第 128回触媒討論会, 香川大学, オンライン開催, 2021年 9月.

B-5) 特許出願

特許第 6544595号,「フェノール誘導体の製造方法」, 渡辺 隆司, 中村正治, 高谷　光, 福田健治, 下平晴記（京都大学, 太陽日酸（株））（登録日 2019年 6月 28日）.

特許第 6544596号,「フェノール誘導体の製造方法」, 渡辺隆司, 中村正治, 高谷　光（20%）, 福田健治, 勝山　勇（京都大学, 太陽日酸（株））（登録日 2019年 6月 28日）.

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).

京都大学量子ビーム分析アライアンス講師, X線吸収分光担当 (2021).

学会の組織委員等

日本化学会春季年会CIP 企画委員 (2015–2021).

第5回SPring-8先端放射光技術による化学イノベーション研究会／第 62回SPring-8先端利用技術ワークショップ「先端放射光分析が拓く低炭素社会実現のための化学イノベーション」, TKP 京都四条烏丸カンファレンスセンター (2021.7.9).

日本化学会第 102春季年会ATP 企画T1C「インフォマティクスの基礎」幹事 (2022).

日本化学会第 102春季年会特別企画「化学者のための放射光ことはじめ――XAFS の基礎と応用」代表幹事 (2022).

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).

高輝度放射光研究センター SPring-8課題審査委員（学術審査：回折・散乱）(2021–).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2021).

科学技術振興機構（JST）創発的研究支援事業書類審査委員 (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 (2019–2022).

その他

国際化学オリンピックIChO 2021（幹事国日本）「バーチャルツアー in SPring-8」企画製作責任者（https://www.icho2021.org/jp/icho2021/）(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」, 2022年1月.

京都大学工学部工業化学科,「有機分光学」, 2021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」, 2021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」, 2021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).

科研費基盤研究(C),「植物バイオマス循環資源化のためのメタル化ペプチド人工酵素の創製」, 高谷　光 (2021年–2023年).

岩谷直治記念財団岩谷科学技術研究助成,「マイクロ波－光創発による木質バイオマスの循環資源化」, 高谷　光 (2021年).

日本ベーリンガーインゲルハイム『エクソソームの医療応用への挑戦：新たな治療薬を患者さんへ届けるために』研究助成,「Large-scale and convenient exosome production by high-purity microwave-induced cellular secretion」, 高谷　光 (2021年).

科学技術振興機構研究開発最適展開支援プログラムA-STEP 産学共同（本格型）：with/post コロナにおける社会変革への寄与が期待される研究開発, 第４分野（アグリ・バイオ),「糖鎖認識PEG 誘導体を用いた糖たんぱく質の糖鎖に基づく精密分離技術の開発」（代表：久保拓也), 高谷　光（分担者) (2021年–2023年).

科学技術振興機構CREST 研究「新たな生産プロセス構築のための電子やイオン等の能動的制御による革新的反応技術の創出」領域,「レドックスメカノケミストリーによる固体有機合成化学」（代表：伊藤　肇), 高谷　光（共同研究者）(2021年–2023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 (2021年–2022年).

共同研究, ENEOS（株),「潤滑油成分の物性・構造解析」, 高谷　光 (2019年–2021年).

共同研究, 四国化成工業（株),「硫黄化合物の高度分析」, 高谷　光 (2021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–2021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）
鈴木　昌世（特任研究員）
市井　智章（特任研究員）
角谷　利恵（特任専門員）
殖栗　敦（特任専門員）
川瀬　晃道（特別訪問教授）
吉田　光宏（特別訪問准教授）
石月　秀貴（特別訪問研究員）
佐藤　庸一（特別訪問研究員）
辻　明宏（特別訪問研究員）
吉岡　孝史（特別訪問研究員）
松田　美帆（技術支援員（派遣））
小林　純（技術支援員（派遣））
水嶋　一彦（技術支援員（派遣））
伊吹　剛（技術支援員（派遣））
鄭　稀燮（技術支援員（派遣（理研）））
小野　陽子（事務支援員）
稲垣　弥生（事務支援員（派遣））
奥原　紀恵（事務支援員（派遣（理研）））

A-1) 専門領域：量子エレクトロニクス，光エレクトロニクス，レーザー物理，非線形光学

A-2) 研究課題：

a) マイクロドメイン構造制御に関する研究
b) マイクロドメイン光制御に関する研究
c) マイクロ固体フォトニクスの展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

分子科学に関連して重要な波長域にレーザーの高輝度光を展開する為の固体レーザー，非線形波長変換法につき包括的な研究を進めている。特には近年のマイクロ固体フォトニクス［マイクロチップ Nd:YVO_4 レーザー（1990 年），Yb:YAG レーザー（1993 年），セラミックレーザー（1997 年），バルク擬似位相整合（QPM）素子：大口径周期分極反転 MgO:$LiNbO_3$（PPMgLN）（3mm 厚 2003 年，5mm 厚 2005 年，10mm 厚 2012 年）］を先導すると共に，共同研究を通し赤外域分子分光などにその展開を図っている。国際誌の雑誌編集，特集号企画から国際シンポジウム・会

議の企画提案，開催に積極的に参加する事でその成果を内外に発信している。

a) マイクロドメイン構造，界面（粒界面，結晶界面，さらには自発分極界面）を微細に制御する固相反応制御法の研究として，レーザーセラミックス，レーザー素子，分極反転素子の作製プロセスの高度化を図っている。特に，固体レーザーの発光中心である希土類イオンの軌道角運動量を利用したマイクロドメインの配向制御は，これまで不可能だった異方性セラミックスによるレーザー発振を成功させただけでなく原理的にはイオンレベルでの複合構造を可能とする。さらに最近，表面活性接合による異種材料接合に成功し，Distributed Face Cooling（DFC）構造による Tiny Integrated Laser（TILA）なる次世代の高性能な高集積小型レーザーに関するコンセプトが検証された。これより，新たなフォトニクスを創出できるものと期待している。

b) 光の発生，増幅，変換の高度制御を可能とする為の研究として，希土類イオンの発光･緩和機構の解明，固体中の光，エネルギー伝搬，さらにはマイクロドメイン構造と光子及び音子の相互作用機構解明，非線形光学過程の解明，モデル化を進めている。Yb レーザーの機構解明，Nd レーザーの直接励起可能性，希土類レーザーの励起光飽和特性，YVO_4 の高熱伝導率特性の発見，実証に繋がったばかりでなく，マイクロ共振器の高輝度効果，レーザー利得と非線形光学過程の量子相関などの興味深い展開も見せている。特にレーザー科学発展の中で生じたパルスギャップ領域であるサブナノ秒からピコ秒の便利な光源開拓に関する貢献，パルスギャップレーザーによる新現象の解明などが期待できる。

c) 開発した光素子を用いた新規レーザー，波長変換システムの開発と展開を図っている。これまでにもエッジ励起セラミック Yb:YAG マイクロチップレーザーによる高平均出力動作，手のひらサイズジャイアントパルスマイクロチップレーザーからの高輝度温度光発生，マイクロチップレーザーからの UV 光（波長:266 nm）からテラヘルツ波（波長:100 ~ 300 μm），さらには高効率・高出力のナノ秒光パラメトリック発生（出力エネルギー約 1 J，効率約 80%），波長 5~12 μm に至る広帯域波長可変中赤外光発生，1.5 サイクル中赤外光からのコヒーレント軟X線（波長：~5 nm）・アト秒（200 ~ 300 as）発生などをマイクロ固体フォトニクスで実証した。アト秒発生に重要な中赤外 OPCPA では，LA-PPMgLN を用い波長 2.1 μm にてパルス幅 15 fs を平均出力 10 W と，この領域で世界最大出力を達成した。特にマイクロチップレーザーでは，パルスギャップであるサブナノ秒での高輝度光発生が望め，光イオン化過程に有利なため極めて低いエネルギーで効率的なエンジン点火が可能となる。すでに世界ではじめての自動車エンジン搭載，走行実験にも成功している。また，この高輝度光は光パラメトリック過程によるテラヘルツ（THz）波発生にも有利である。また，LA-PPMgLN を用いてピコ秒領域で mJ に至る狭線幅 THz 波発生も可能となった。マンレー・ローによる量子限界を超える効率である。今後，分子の振動状態についてのより詳細な分光学的情報を得ることから，THz 波による電子加速までと幅広い展開が期待される。

B-1) 学術論文

K. TAMURA, H. OHBA, M. SAEKI, T. TAGUCHI, H. H. LIM, T. TAIRA and I. WAKAIDA, “Radiation Dose Rate Effects on the Properties of a Laser-Induced Breakdown Spectroscopy System Developed Using a Ceramics Micro-Laser for Fiber-Optic Remote Analysis,” *J. Nucl. Sci. Technol.* **58(4)**, 405–415 (2020). DOI: 10.1080/00223131.2020.1854880

Y. SANO, K. MASAKI, Y. MIZUTA, S. TAMAKI, T. HOSOKAI and T. TAIRA, “Effects of Laser Peening with a Pulse Energy of 1.7 mJ on the Residual Stress and Fatigue Properties of A7075 Aluminum Alloy,” *Metals* **11(11)**, 1716 (9 pages) (2021). DOI: 10.3390/met11111716

Y. SANO, “Impact: Innovation in Manufacturing with Palmtop High-Power Pulsed Lasers [ImPACT:掌サイズの高出力パルスレーザによるものづくりの革新],” *Yosetsu Gakkai Shi/Journal of the Japan Welding Society*, **89(1)**, 16–20 (2020). DOI: 10.2207/jjws.89.16

H. TOMITA, K. HASHIMOTO, K. TAKEYA and S. R. TRIPATHI, “Development of a Terahertz Wave Circular Polarizer Using a 2D Array of Metallic Helix Metamaterial,” *Opt. Lett.* **46(9)**, 2232–2235 (2021). DOI: 10.1364/OL.422025

H. H. LIM and T. TAIRA, “>50 MW Peak Power, High Brightness Nd:YAG/Cr^{4+}:YAG Microchip Laser with Unstable Resonator,” *Opt. Express* **30**, 5151–5158 (2022). DOI: 10.1364/OE.450335

Y. SATO and T. TAIRA, “Comparative Study on the Linear Thermal Expansion Coefficient of Laser Host Crystals by First Principles Calculations,” *Opt. Mater. Express* **12**, 1397–1407 (2022). DOI: 10.1364/OME.450163

B-2) 国際会議のプロシーディングス

A. KAUSAS, V. YAHIA, A. TSUJI, R. ZHANG, X. ZHOU, Y. HONDA , M. YOSHIDA and T. TAIRA, “Tailor-Made Laser Chip by Bonding for High Energy Laser System,” *2021 7th International Workshop on Low Temperature Bonding for 3D Integration (LTB-3D 2021)* (2021). DOI: 10.1109/LTB-3D53950.2021.9598355

Y. SATO and T. TAIRA, “Thermal Expansion Coefficient of Garnet and Bixbyite Laser Crystals Evaluated by First Principles Calculation,” *2021 Conference on Lasers and Electro-Optics Europe and European Quantum Electronics Conference (CLEO/Europe-EQEC 2021)* (2021). DOI: 10.1109/CLEO/Europe-EQEC52157.2021.9542669

Y. SATO and T. TAIRA, “Evaluation of Thermal Expansion Coefficients of Laser Gain Media by First Principles Calculation,” *The 10th Advanced Lasers and Photon Sources Conference (ALPS2021), OPIC2021*, April 19–22, ALPS-15-02 (2021). (online)

K. YOSHII, N. ARAI, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “12 kW Peak Power at 266-nm Generation by QPM Quartz Device,” *The 10th Advanced Lasers and Photon Sources Conference (ALPS2021), OPIC2021*, April 19–22, ALPS-19-05 (2021). (online)

H. H. LIM and T. TAIRA, “37 MW Peak Power Unstable Resonator Microchip Laser,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid State Lasers (ASSL), OSA Laser Congress 2021*, October 3–7, JTu1A.21 (2021). (poster) (online)

A. KAUSAS, V. YAHIA, A. TSUJI, R. ZHANG, X. ZHOU, Y. HONDA, M. YOSHIDA and T. TAIRA, “Smart Gain Medium of DFC Chip for >2J Micro-Laser Amplifier under Room Temperature,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid State Lasers (ASSL), OSA Laser Congress 2021*, JTu1A.27 (2021). (poster) (online)

Y. SATO and T. TAIRA, “Thermal Expansion Coefficient of Materials for Laser Ceramics Evaluated by the First Principles Calculation,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid State Lasers (ASSL), OSA Laser Congress 2021*, October 3–7, AW1A.7 (2021). (online)

Y. SANO, T. TAIRA, K. YOKOFUJITA, Y. MIZUTA, S. TAMAKI, T. HOSOKAI, K. MASAKI, T. KATO and Y. SAKINO, “Development of Laser Peening Device to Prolong Fatigue Life of Metallic Infrastructure,” *Extended Abstract, The 10th Australasian Congress on Applied Mechanics (ACAM10)*, November 29–December 1, 168 (2021). ISBN: 978-1-925627-59-6 (online)

H. T. OLGUM, M. PERGAMENT, T. TAIRA, H. ISHIZUKI, F. X. KAERTNER and N. MATLIS, “Large-Aperture, Manually Poled $LiNbO_3$ and KTP for High-Energy, Narrowband THz Generation,” *LASE, SPIE Photonics West 2022*, 11985-29 (2022).

H. H. LIM and T. TAIRA, “>40 MW Peak Power Nd:YAG/Cr^{4+}:YAG Unstable Resonator Microchip Laser,” *LASE, SPIE Photonics West 2022 On Demand*, 11980-48 (2022). (poster) (online)

B-3) 総説，著書

Y. SANO, K. MASAKI, K. AKITA, K. KAJIWARA and T. SANO, "Effect of Laser Peening on the Mechanical Properties of Aluminum Alloys Probed by Synchrotron Radiation and X-Ray Free Electron Laser," *Metals* **10(11)**, 1490 (19 pages) (2020). DOI: 10.3390/met10111490

H. OHBA, I. WAKAIADA and T. TAIRA, "Remote Laser Analysis Technique for Decommissioning of Nuclear Power Station," *J. Inst. Electr. Eng. Jpn.* **142**, 77–80 (2022). DOI: 10.1541/ieejjournal.142.77 (in Japanese)

B-4) 招待講演（* 基調講演）

平等拓範,「擬似位相整合（QPM）素子による短パルス光制御」, Q-LEAP 第７回ATTO 懇談会, オンライン開催, 2021年4月.

平等拓範,「新発想のレーザー技術で狭帯域の高エネルギーテラヘルツ波を発生」, オプトロニクスWEB セミナー「6G通信，次世代計測を拓くテラヘルツデバイスの現状と将来～発信器，検出・受信機，制御素子～」, オンライン開催, 2021年 4月.

平等拓範,「マイクロフォトニクスによる先進的小型集積レーザー（Micro-photonics for Advanced Tiny Integrated Lasers）」, 第 17回原子・分子・光科学（AMO）討論会, オンライン開催, 2021年 6月.

平等拓範,「室温動作 2J × 100Hz DFC チップレーザーの開発」, JST 未来社会創造事業「レーザー駆動による量子ビーム加速器の開発と実証」シンポジウム, オンライン開催, 2021年 6月.

平等拓範,「レーザの開発と加工への応用展開」, 天田財団第４回レーザプロセッシング助成研究成果発表会, 横浜（オンライン・ハイブリッド開催）, 2021年 6月.*

佐藤庸一，平等拓範,「配向制御異方性レーザーセラミックス研究開発」, 日本光学会年次学術講演会「Optics & Photonics Japan 2021」, 東京, 2021年 10月.

平等拓範,「オプトセラミックスの未来：クロージングリマークス」, 日本光学会年次学術講演会「Optics & Photonics Japan 2021」, 東京, 2021年 10月.

平等拓範,「国際会議OSA Laser Congress 2021報告」, 光産業技術振興協会第３回光材料・応用技術研究会, オンライン開催, 2021年 11月.

平等拓範,「マイクロチップレーザーの開発」, 第 112回中部レーザ応用技術研究会, オンライン開催, 2021年 11月.

平等拓範,「高エネルギー密度室温動作DFC チップレーザーの開発」, レーザー学会学術講演会第 42回年次大会, オンライン開催, 2022年 1月.

平等拓範,「マイクロ固体フォトニクスによるスマートエネルギー変換」, 分子研研究会「エネルギー科学の最前線：階層横断的な理解に向けて」, オンライン開催, 2022年 2月.

B-5) 特許出願

特願 2021-107782,「皮膚レーザ治療器」, 高橋　勉，高橋一哲，平等拓範（ユニタック，自然科学研究機構）, 2021年.

特願 2021-180007,「光学素子，レーザ装置および光学素子の製造方法」, 平等拓範，カウシャス　アルヴィダス，吉田光宏（自然科学研究機構）, 2021年.

特願 2021-181857,「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.

特願 2021-520629,「光学素子の製造方法及び光学素子」, 平等拓範，カウシャス　アルヴィダス，鄭麗和（自然科学研究機構）, 2021年.

特願 2021-546950,「レーザ装置及びパルス幅変更方法」, 平等拓範，川崎泰介，ヤヒア　ヴァンサン（自然科学研究機構）, 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–).

光産業技術振興協会多元技術融合光プロセス研究会幹事 (2009–).

レーザー学会諮問員 (2012.4–2022.5).

日本光学会レーザーディスプレイ技術研究グループ実行委員 (2015–).

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–).

米国電気電子学会The Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE) フェロー (2014–).

The International Academy of Photonics and Laser Engineering (IAPLE) フェロー (2018–).

OPTICA(Formerly OSA), OPTICA Fellow Members Committee 委員 (2021–2022).

SPIE Maiman Laser Award Subcommittee 委員 (2020–2022).

日本光学会光エレクトロニクス産学連携専門委員会学会委員及び主査 (2020.4–).

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）(2019–2023).

CLEO/Europe 2021, Solid-State Lasers, 国際会議分科委員（ドイツ，ミュンヘン）(2020–2021).

The 4th International Conference on Optics, Photonics and Lasers (OPAL'2021), 国際会議国際プログラム委員会委員 (2021).

Mid-Infrared Coherent Sources (MICS) 2022, テクニカル・プログラム委員会委員 (2021–2022).

Advanced Solid State Laser Conference (ASSL'21), 国際会議プログラム委員会委員（Materials Program Committee）(2021).

OPTICS & PHOTONICS International Congress 2022 (OPIC2022), 国際会議組織委員会委員 (2021–2022).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）事前書面審査 (2013–2024.3).

日本学術振興会生体ひかりイメージング技術と応用第185委員会委員 (2011–2022.3).

科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 ACT-X 研究領域「リアル空間を強靭にするハードウェアの未来」, 領域アドバイザー (2021).

学会誌編集委員

Applied Sciences (https://www.mdpi.com/journal/applsci, ISSN 2076-3417), MDPI, 編集委員会委員 (2021–2023).

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教孝(2017年–2020年), 自然科学研究機構佐野雄二(2021年–2026年)), 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・マイクロフォトニクスによる高出力極限固体レーザ」, 平等拓範 (2020年–2024年).

安全保障技術研究推進制度,「超小型ロバストテラヘルツ波イメージング装置の研究開発」（代表；南出泰亜), 平等拓範（研究分担者）(2020年–2024年).

B-11) 産学連携

（株）コンポン研究所,「マイクロ固体フォトニクスの基礎研究」, 平等拓範 (2021年).

（株）村田製作所,「水晶波長変換デバイスの研究」, 平等拓範 (2021年).

東海光学（株),「高出力密度レーザ材料に適した表面処理法の開発」, 平等拓範 (2021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 (2021年).

トヨタ自動車（株),「小型集積レーザー（TILA）による窒化の研究」, 平等拓範 (2021年).

日本原子力研究開発機構,「マイクロチップレーザー適用長尺光ファイバ伝送LIBS 分析技術に関する研究」, 平等拓範 (2021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　　丈　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) 不活性雰囲気での電気化学反応下において，原子／ナノレベルで物性を解析する走査プローブ顕微鏡システムを構築し，液体中で固体試料の電位を制御し，固体と液体の間に生成する特殊な界面層をフォースカーブ測定にて検出した。また，走査プローブ顕微鏡の測定系の湿度を定量的に制御することで生成させたナノサイズ機械特性を凝着力測定から発見した。さらに，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的特徴を認識し，物性を抽出する方法を構築している。この技術を用いて，これまで不明であった固体表面での電子的相互作用を初めて明らかにすることに成功した。

b) 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ことを目的としている。本年度は，リチウムイオン電池の電解液の構成成分が作る界面層の粘性や弾性率を，走査プローブ顕微鏡のプローブの振動振幅や減衰信号などから解析した。また，電極電位を制御する時に起きる，界面層の物性変化を解析し，分光学的な測定結果と合わせて考察する事で，界面で起きる化学反応を明らかにした。

c) 東日本大震災によって 2011 年に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）として進めている。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，調製条件やイオン交換反応によって変化する様子を測定し，さらにデータの特徴解析などを用いて解明した。また，金属酸化物の単粒子の機械特性，電子状態などを走査プローブ顕微鏡で解析し，粒子内分布を検出することに成功している。

B-1) 学術論文

K. SHIMODA, T. MINATO, H. KONISHI, G. KANO, T. NAKATANI, S. FUJINAMI, A. CELIK KUCUK, S. KAWAGUCHI, Z. OGUMI and T. ABE, "Defluorination/Fluorination Mechanism of $Bi_{0.8}Ba_{0.2}F_{2.8}$ as a Fluoride Shuttle Battery Positive Electrode," *J. Electroanal. Chem.* **895(15)**, 115508 (7 pages) (2021). DOI: 10.1016/j.jelechem.2021.115508

H. KONISHI, T. MINATO, T. ABE and Z. OGUMI, "Reversible Electrochemical Reaction of a Fluoride Shuttle Battery with a Bismuth(III) Fluoride Electrode and Electrolyte Containing Triphenylboroxine as an Anion Acceptor," *ChemistrySelect* **5(21)**, 6237–6241 (2020). DOI: 10.1002/slct.202001163

B-3) 総説，著書

T. MINATO, K. UMEDA, K. KOBAYASHI, Y. ARAKI, H. KONISHI, Z. OGUMI, T. ABE, H. ONISHI and H. YAMADA, "Atomic-Level Nature of Solid/Liquid Interface for Energy Conversion Revealed by Frequency Modulation Atomic Force Microscopy," *Jpn. J. Appl. Phys.* **60**, SE0806 (8 pages) (2021). DOI: 10.35848/1347-4065/abffa2

B-4) 招待講演

湊　丈俊,「蓄電池の電極／電解液界面の解析」, 2021年日本表面真空学会学術講演会実用新技術セミナー , オンライン開催, 2021年 11月.

T. MINATO, "Electrode/Electrolyte Interface Analyzed by Scanning Probe Microscopy," 1st IMS-FHI Symposium, online, July 2021.

B-6) 受賞，表彰

湊　丈俊, RIEC Award 本賞（東北大学電気通信研究所）(2022).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

29th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy, Program Committee (2021).

International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices, Program Committee (2021–2022).

その他

大阪府立富田林高校の分子研訪問（オンライン）対応 (2021).

青森県三戸町ふるさと応援大使 (2021).

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).

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,「局所キラリティ顕微技術の確立とそれによるアミロイドβ単一分子構造解析」（代表：山西絢介), 湊　丈俊（連携研究者）(2021年–2022年).

中　村　敏　和（チームリーダー）

B-1) 学術論文

T. NAKAMURA, L. ZHANG, S. KITOU and H. SAWA, "Tetramethyltetrathiafulvalene $[(NbOF_4)^-]_\infty$: One-Dimensional Charge Transfer Salt with an Infinite Anion Chain," *Inorg. Chem.* **60(7)**, 5206–5211 (2021). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.1c00208

S. KITOU, L. ZHANG, T. NAKAMURA and H. SAWA, "Complex Changes in Structural Parameters Hidden in the Universal Phase Diagram of the Quasi-One-Dimensional Organic Conductors $(TMTTF)_2X$ (X = NbF_6, AsF_6, PF_6, and Br)," *Phys. Rev. B* **103(18)**, 184112 (6 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.103.184112

T. SAIO, S. HIRAMATSU, M. ASADA, H. NAKAGAWA, K. SHIMIZU, H. KUMETA, T. NAKAMURA and K. ISHIMORI, "Conformational Ensemble of a Multidomain Protein 1 Explored by Gd^{3+} Electron Paramagnetic Resonance," *Biophys. J.* **120**, 2943–2951 (2021). DOI: 10.1016/j.bpj.2021.06.033

K. ASADA, T. MIYAMOTO, H. YAMAKAWA, J. HIRATA, N. TAKAMURA, T. MORIMOTO, K. SUZUKI, T. OTAKI, N. KIDA, T. NAKAMURA and H. OKAMOTO, "Ultrafast Control of Electronic States by a Terahertz Electric Field Pulse in the Quasi-One-Dimensional Organic Ferroelectric $(TMTTF)_2PF_6$," *Phys. Rev. B* **104(19)**, 195148 (15 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.104.195148

B-3) 総説，著書

中村敏和,「研究室紹介　分子科学研究所 機器センター 分析チーム（凝縮分子系の電子物性）」, *高圧力の科学と技術*, **31(3)**, pp. 172–173 (2021). DOI: 10.4131/jshpreview.31.172

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

電子スピンサイエンス学会代議員 (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 (2021).

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用・共同研究運営協議会委員 (2018–).

鈴　木　敏　泰（チームリーダー）

B-1) 学術論文

N. MOMIYAMA, Y. HONDA, T. SUZUKI and C. JONGWOHAN, “Computational Studies on Reaction Mechanisms and Origin of Stereoselectivity in the [1,3]-Rearrangement of Ene-Aldimines,” *Asian J. Org. Chem.* **10(8)**, 2205–2212 (2021). DOI: 10.1002/ajoc.202100302

N. MOMIYAMA, A. IZUMISEKI, N. OHTSUKA and T. SUZUKI, “Correlations between Substituent Effects and Catalytic Activities: A Quantitative Approach for the Development of Halogen-Bonding-Driven Anion-Binding Catalysts,” *Chempluschem* **86(6)**, 913–919 (2021). DOI: 10.1002/cplu.202100147

B-10) 競争的資金

科研費学術変革領域研究(A),「デジタル化による高度精密有機合成の新展開」（代表：大嶋孝志), 鈴木敏泰（研究分担者）(2021年–2025年).

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) 2022 年度当初から運用を開始する次期 ORION（Okazaki Research Institutes Organization Network）である ORION2022 において，Google Workspace 等のクラウドサービス利用を前提とした統合的なハイブリッドシステムの開発を行っている。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為に, 現在の主認証システムを拡張し多要素認証（MFA）を前提とした統合認証システム（IdP）を構築した。これにより情報セキュリティ対策として最重要である認証と認可をネットワーク接続，VPN 利用及び Google WorkSpace 利用時に各自に実施すると共に統一環境を提供する基盤提供が行えることとなった。また，情報を処理する端末の健全性もまた重要であり，これらの自動的な監視及び検証を行うシステム開発について引き続き取り組んでいる。現在は，ORION2022 システムに合わせ，現行システム（例えば外部利用者向け VPN アカウント管理システムなど）で提供しているサービスのハイブリッド化を行っている。

b) ORION2022 ではネットワーク接続やサービスの認証に IdP を前提とした MFA を導入するとともに端末セキュリティソフトウェア及びクラウドサービス等からログを取得し，それらを用いて自動的に異常検知や最適化及び定型業務フローの自動化が行える基盤構築を行った。今後具体的なシステム構築を行っていく。

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 は，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，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として設計，仕様化し調達を行った。今後，ORION2022 で構築したシステム基盤を用い各システムの構築と運用を行っていく。

技術推進部及び安全衛生管理室

B-1) 学術論文

M. MIYAJIMA, F. ASTUTI, T. FUKUDA, M. KODANI, S. IIDA, S. ASAI, A. MATSUO, T. MASUDA, K. KINDO, T. HASEGAWA, T. C. KOBAYASHI, T. NAKANO, I. WATANABE and T. KAMBE, "Spin-Gap Formation due to Spin-Peierls Instability in π-Orbital-Ordered NaO_2," *Phys. Rev. B* **104**, L140402 (5 pages) (2021).

J. KESKINEN, K. JANKALA, S.-M. HUTTULA, T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, E. SHIGEMASA, H. IWAYAMA, K. SOEJIMA, K. ITO, L. ANDRIC, M. A. KHALAL, J. PALAUDOUX, F. PENENT and P. LABLANQUIE, "Auger Decay of the 3d Hole in the Isoelectronic Series of Br, Kr^+, and Rb^{2+}," *Phys. Rev. A* **103**, 032828 (8 pages) (2021).

S. MAKITA, H. MATSUDA, Y. OKANO, T. YANO, E. NAKAMURA, Y. HASEGAWA, S. KERA, S. SUGA and F. MATSUI, "Contrast Inversion of Photoelectron Spectro-Microscopy Image," *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **19**, 42–47 (2021).

F. MATSUI, S. MAKITA, H. MATSUDA, E. NAKAMURA, Y. OKANO, T. YANO, S. KERA and S. SUGA, "Valence Band Dispersion Embedded in Resonant Auger Electrons," *J. Phys. Soc. Jpn.* **90**, 124710 (9 pages) (2021).

M. ITO, Y. TAKANO, Y. KEBUKAWA, T. OHIGASHI, M. MATSUOKA, K. KIRYU, M. UESUGI, T. NAKAMURA, H. YUZAWA, K. YAMADA, H. NARAOKA, T. YADA, M. ABE, M. HAYAKAWA, T. SAIKI and S. TACHIBANA, "Assessing the Debris Generated by the Small Carry-On Impactor Operated from the Hayabusa2 Mission," *Geochem. J.* **55**, 223–239 (2021).

G. MICHAILOUDI, 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).

G. GERMER, T. OHIGASHI, H. YUZAWA, N. KOSUGI, R. FLESCH, F. RANCAN, A. VOGT and E. RÜHL, "Improved Skin Permeability after Topical Treatment with Serine Protease: Probing the Penetration of Rapamycin by Scanning Transmission X-Ray Microscopy," *ACS Omega* **6**, 12213–12222 (2021).

D. CÉOLIN, H. YUZAWA, T. SAISOPA, K. KLAIPHET, J. BORSUP, P. SONGSIRIRITTHIGUL and N. KOSUGI, "Substituent Effects in Aqueous Solutions of Carboxylate Salts Studied by X-Ray Absorption Spectroscopy at the Oxygen K-Edge," *J. Chem. Phys.* **155**, 014306 (6 pages) (2021).

A. FERTÉ, F. PENENT, J. PALAUDOUX, H. IWAYAMA, E. SHIGEMASA, Y. HIKOSAKA, K. SOEJIMA, P. LABLANQUIE, R. TAÏEB and S. CARNIATO, "Specific Chemical Bond Relaxation Unraveled by Analysis of Shake-Up Satellites in the Oxygen Single Site Double Core Hole Spectrum of CO_2," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24**, 1131–1146 (2022).

B-5) 特許出願

特許第 6954530 号（P6954530）,「警報連動型防災システム」, 千葉　寿，豊田朋範，古舘守通，藤崎聡美（岩手大学，自然科学研究機構）（登録日 2021 年 10 月 4 日）.

B-6) 受賞，表彰

中村永研, 文部科学大臣表彰研究支援賞 (2021).

豊田朋範, 日本化学会化学技術有功賞 (2022).

B-8) 大学での講義，客員

岡野泰彬, 中部大学非常勤講師,「力学」, 2021年度春学期,「基礎電磁気学」, 2021年度秋学期.

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。

2021 年 5 月には，米国コロラド大学ボールダー校 Josef Michi 教授より理論・計算分子科学研究領域を中心にヒアリングが実施され，計算科学研究センターの活動も含めてグループの研究内容の評価をいただいた。同じく 2021 年 5 月に，香港科学技術大学 Ching Wan Tang 教授より物質分子科学研究領域を中心にヒアリングが実施され，極端紫外光研究施設（UVSOR）を含めてグループの研究内容及び将来計画の評価をいただいた。

2021 年 10 月に開催された運営顧問会議では，次期中期計画に向けての活動方針（次期所長への申し送り事項）を確認いただいた。

（川合眞紀）

7-1　運営顧問による点検評価

第３期中期計画期間の分子科学研究所活動状況の上で，運営顧問から第４期中期計画期間での運営方針のためのアドバイスをいただくことを目的として，４名の運営顧問を招いて運営顧問会議を開催した。

分子科学研究所の第３期中期計画期間の活動については，2019 年 12 月から 2021 年 7 月にかけて機関の点検・評価が行われた。その結果については，分子研リポート 2019 において，7-1 国際諮問委員会による点検評価，また分子研リポート 2020 において，7-1 大学共同利用機関の教育研究等の検証，7-2 国際諮問委員会の答申リポートとして公開されている。これらを踏まえ，分子科学研究所の抱える課題とそれらへの対応状況を，川合所長から運営顧問に説明した。会議当日には，第４期中期計画期間での研究所機能強化に向けた機関運営方針の提案・検討事項について運営顧問から意見をいただき，分子研側出席者を交えて議論した。会議は所内公開で行い，当日陪席者は 26 名（出席・陪席者総計 45 名）であった。議論された内容は，川合所長より渡辺芳人次期所長に申し送られた。

１．日　時：　2021 年 10 月 21 日（木）10:00 ～ 12:00
２．方　式：　オンライン開催（zoom 会議）
３．出席者：

運営顧問

菊池 昇	（株式会社コンポン研究所 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 CSO）
瀧川 仁	（高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 協力研究員）
松本 吉泰	（公益財団法人豊田理化学研究所 フェロー）

分子科学研究所

川合 眞紀 所長	
岡本 裕巳 教授	（研究総主幹，メゾスコピック計測研究センター長）
斉藤 真司 教授	（理論・計算分子科学研究領域主幹）
大森 賢治 教授	（光分子科学研究領域主幹）
横山 利彦 教授	（物質分子科学研究領域主幹，機器センター長）
飯野 亮太 教授	（生命・錯体分子科学研究領域主幹）
江原 正博 教授	（計算科学研究センター長）
解良 聡 教授	（極端紫外光研究施設長）
山本 浩史 教授	（装置開発室長）
秋山 修志 教授	（協奏分子システム研究センター長）
石﨑 章仁 教授	（理論・計算分子科学研究領域）
繁政 英治 技術推進部長	
中村 敏和 チームリーダー	（機器センター）
福井 豊 URA	（研究力強化戦略室）
亀髙 愛 URA	（研究力強化戦略室）

４．議論内容：

国際諮問委員会（2019 年 12 月）での指摘課題

１．極端紫外光研究施設の中長期計画

２．研究領域の再編

３．外国籍研究者の積極的雇用

４．研究所運営業務と教育・研究業務の分離

その他．自己検証での 7 つの指標

現所長からの提案（内容詳細については，参考資料として第 9 章に添付する）

目標 1) 研究所の Visibility の向上

目標 2) 研究所運営業務の効率化

目標 3) 社会との共生

7-2　理論・計算分子科学研究領域の評価

7-2-1　Josef Michl 外国人運営顧問

Report of external review of the Department of Theoretical and Computational Molecular Science at the Institute for Molecular Science, National Institutes of Natural Sciences, Okazaki, Japan

by

Josef Michl, Segur Endowed Chair, Department of Chemistry, University of Colorado Boulder, CO 80309-0215, U.S.A.

May 29, 2021

Overview

Professor Shinji Saito invited me to perform an evaluation of research at the Department of Theoretical and Computational Molecular Science at the Institute for Molecular Science. Because of the Covid-19 pandemic, this was done on-line in the evenings of 17–20 May, 2021 (Mountain Standard Time). I was familiar with the high level of science at the IMS from my previous visits and felt honored to be asked to serve as a Foreign Councilor.

I had very high expectations of scientific quality beforehand and was impressed to find that they were actually exceeded once the review started. I enjoyed an excellent introduction by the director, Professor Maki Kawai, and then a series of uniformly first-class presentations characterized by clarity and enthusiasm. I will provide additional comments on those below. My overall conclusion from the visit is that under the highly competent leadership of Professor Saito, the level of scientific work and accomplishment in the Department is competitive with what is found in the best institutions anywhere in the world. The subjects under investigation are at the frontier of modern condensed phase molecular science and include both advanced nanoscale materials and complex biomolecular systems, encompassing both the latest electronic structure theory at the correlated electron level and powerful molecular dynamics. The work is at the cutting edge of the discipline and has a good balance of method development and highly relevant applications. I found strong collaborative connections to experiments, both within the IMS and nation-wide. The very successful computer center, directed by Professor Ehara, has state-of-theart facilities and represents the focal point of an additional very essential nation-wide network. Importantly, the Department is also strongly networked with global science.

It was heart warming to see that the historic gender imbalance has now started to be addressed. It was also very satisfying to see how many young scientists educated in the Department have been able to secure good appointments elsewhere. The Department is clearly very successful not only in performing world-class theoretical work in molecular science and integrating theory with experiment, but also in its important role of nurturing young talent. This is particularly significant in view of the apparent gradually developing nation-wide shortage of gifted young people interested in a career in theoretical molecular science. It would be beneficial if the supply of first-class domestic and international graduate students at the IMS could be increased and the individual research groups enlarged. Perhaps this could be promoted by setting up prestigious fellowships named for famous Japanese theoreticians, especially those whose names are associated with the IMS, such as Keiji Morokuma. I also wonder whether it would be possible to engage the JSPS in a common international endeavor to attract an increased number of outstanding graduate students. This might compensate to some

degree for the handicap of not educating undergraduate students at the IMS itself and therefore not having a natural stream of talent for the graduate school.

The only regrettable aspect of my experience was that the Covid pandemic made it impossible for me to be physically present and to enjoy face-to-face contacts and the traditional Japanese hospitality and culture in person.

Individual research faculty members

Professor Shinji Saito:

The work in this group is first-class and addresses new challenges at the frontier of molecular dynamics. I found the results obtained for the role of fluctuations in excitation energy transfer in the photosynthetic center particularly interesting and the results for water at a wide range of temperatures especially intriguing.

Professor Masahiro Ehara:

The work of this group is characterized by absolutely fearless application of advanced electronic structure methods to most complicated problems, both in photochemistry and photophysics, and in catalysis by metallic nanoclusters, something that very few groups in the world would dare tackle at this level of accuracy. Perhaps because of my own research interests, I was particularly intrigued by the highly original work on inverse design of chiral and other photophysical functional molecular systems. The nation-wide importance of the IMS computer facility operated by Professor Ehara has already been mentioned above.

Professor Akihito Ishizaki:

This research group works at the cutting edge of quantum dynamics in molecules and materials. Its exploration of decoherence and particularly its work on charge separation in photovoltaic devices provided deep insight. The exploration of the combination of quantum optics with molecular photophysics and quantum chemistry is a unique strength and I will be eagerly awaiting further advances in the use of entangled photons in molecular spectroscopy.

Associate Professor Emi Minamitani:

Electron–phonon interactions, with applications ranging from superconductivity, with particular attention to two-dimensional materials, to thermoelectricity, with clever use of neural networks, are the specialty of this high-level research group. Its focus lies deep in solid state physics, with which I unfortunately have too little first-hand experience to be able to make additional comments.

Associate Professor Kei-ichi Okazaki:

The focus of this group is the dynamics of biomolecular machinery operating in living cells and is done in collaboration with experimentalists. This work is at the frontier of what is possible in molecular dynamics since it requires dealing with rare events in very large proteins, using coarse-grained simulations. It addresses the remodeling of membranes and the intriguing issue of unidirectional motion. I find the application to the design of biosensors especially outstanding.

Associate Professor Hisashi Okumura:

This high-quality group performs demanding molecular dynamics simulations of the misfolding and aggregation of proteins responsible for human diseases such as Alzheimer's and Parkinson's, and their possible segregation by ultrasound or infrared laser radiation. It benefits from collaboration with experimentalists both within the IMS and outside. The excellent computational results have allowed it to propose detailed mechanisms and make predictions that were subsequently verified by experiments.

Josef Michl
Segur Chair Professor of Chemistry
University of Colorado at Boulder
Boulder, Colorado 80309-0215
USA

7-3　物質分子科学研究領域の評価

7-3-1　Ching W. Tang 外国人運営顧問

June 16, 2021

Evaluation report by Ching W. Tang

With introduction through Professor Masahiro Hiramoto more than a year ago, I was invited by Director General Maki Kawai to visit with IMS and to serve as its Foreign Council Member. The actual visit, planned for the same year, did not happen due to the COVID-19 pandemic. Instead, we held a virtual meeting—through Zoom on May 6 and 7, 2021—in which I heard a series of presentations by the faculty of the Department of Materials Molecular Science on their ongoing research programs, followed with discussions. I was also given an overview of the status of UVSOR—the synchrotron radiation facility at IMS. Professor Maki began the two-day meeting with a general review of IMS.

As a task for Foreign Council Member, I was asked to provide an assessment of the research activities in the Department of Materials Molecular Science and advice on its future directions. I must admit it is a difficult assignment for a single individual given the very wide range of research disciplines undertaken by the Department's principal investigators and their associates, and the lack of expert knowledge on my part in some of these disciplines. Below I will attempt to evaluate as objectively as possible the research activities of individual principal investigators from what I learned in our meetings and their published materials. Understandably, in disciplines outside of my own expertise I can only provide a general impression, which may not necessarily reflect an accurate assessment of the PI's work or accomplishments. Where possible, I will make recommendations on future directions.

Remarks on Individual PI's research activities:

Yokoyama, Toshihiko

Research field: Spectroscopic methods for material and surface science.

Recent focus: X-ray magnetic circular dichroism (XMCD); ambient pressure hard x-ray photoelectron spectroscopy (HAXPES); time-resolved spectroscopic measurements using x-ray.

Remarks: I was truly impressed by Yokoyama's work on applying HAXPES for in situ analysis of chemical reactions in PEFCs during operation, and on understanding of the oxidation and reduction processes of the Pt electrodes and the PEFC degradation involving the poisoning of the Pt nanoparticles due to specifically the adsorption of the S anionic species. This work demonstrated that highly sophisticated scientific tools such as HAXPES are not only essential in broadening the fundamental knowledge in surface sciences, but also can provide specific information to help advance practical applications such as PEFCs.

Sugimoto, Toshiki

Research field: Surface and Interface Science.

Recent focus: Study of the physics of interfacial water using nonlinear optics; Surface engineering of photocatalytic water activation.

Remarks: Sugimoto's group studied, with SFG—a nonlinear optics technique, the orientation ordering of water molecules of ice films on Pt(111) and Rh(111). The water molecules were found ordered at the Pt(111) interface but disordered at the Rh(111) interface, which induced epitaxial growth of ice films on Pt and disordered growth on Rh. The finding is no doubt scientifically interesting and has provided a deeper understanding of the physicochemical property of water/solid interfaces. The group also published work

on photocatalysis of water for hydrogen generation. However, currently there seems to be a lack of correlation between the fundamental study in understanding the water/solid interfaces and their relevance in making use of such findings to advance practical systems such as photocatalysis.

Hiramoto, Masahiro

Research field: Organic semiconductor materials and devices.

Recent focus: Organic solar cells, up-conversion devices, doping in organic semiconductors.

Remarks: The 2019 APL paper from Hiramoto's group on organic photovoltaic cells (OPVs) is noteworthy. It shows that the open-circuit voltage (V_{oc}) and fill factor (FF) in planar heterojunction OPVs can be remarkably improved with the use of highly crystalline organic semiconductors as both donor and acceptor. The V_{oc} and FF values are among the highest of photovoltaic devices based on either organic or inorganic semiconductors! Furthermore, the paper suggested the charge carrier recombination is via direct interband transition rather than through deep traps, the reason underlying the high V_{oc} and FF values. However, the short-circuit current is low and the overall power conversion efficiency of these crystalline OPVs is inferior compared to what has been achieved in the more conventional bulk heterojunction OPVs. This problem—due to the limitation of exciton diffusion length in organic semiconductors—has been an outstanding issue related the geometry of the planar heterojunction OPVs. Clearly, further works will need to be done to further improve the exciton diffusion length, via perhaps further increase in the carrier mobilities in the crystalline organic semiconductors.

The field of OPV, however, has been largely overshadowed by the emergence of perovskite-based solar cells in the last decade, even as the various PV technologies have matured, and the PV market has grown rapidly in recent years with 100+ gigawatts installation annually. It calls into question whether OPV devices, even if successfully developed, will ever compete with Si-based or other more developed PV technologies for electrical power generation in a significant scale.

Recent work from Hiramoto's group on up-conversion devices represents a need to develop novel organic electronic devices of practical functionality.

Nishimura, Katsuyuki

Research field: Solid-state NMR.

Recent focus: Development of solid-state NMR probe; structural characterization of super-molecular and bio-molecular materials.

Remarks: Since I have little knowledge of solid-state NMR, it would be inappropriate for me to make specific comment on Nishimura's work. From his presentation and the list of his publications, I gathered that he collaborated successfully with researchers outside of IMS to use solid-state NMR as a tool to elucidate molecular structures of a range of materials. An example he described in detail is the characterization of some insoluble fibrils in Amyloid β protein and of the pathways of their formation, which are important in understanding the origin of Alzheimer's disease, and I found it quite fascinating.

Kobayashi, Genki

Research field: Ion conductive materials, energy storage/conversion devices.

Recent focus: Characterization and application of H^- conductive oxyhydrides.

Remarks: Kobayashi group's research involved synthesis of novel metal oxyhydrides with an aim of achieving high H^- conductivity.

Superionic H^- conductors with a conductivity of ~10^{-1} S/cm has been obtained with BLHO class of materials at high temperatures. Potential applications include hydrogen storage, fuel cells, *etc*. A future work is aimed at achieving high conductivity at low temperature. Kobayashi is taking a non-conventional path to develop ionic materials for electrochemical devices with a strategy that is based on a deep understanding of structure–property relationship of a range of H^- compounds. Although the odds of a practical breakthrough remain high, the scientific undertaking is rational and methodical.

Yamamoto, Hiroshi

Research field: Organic electronics, OFET, spintronics

Recent focus: Mott transitions in organic crystals and related superconducting transistors

Remarks: Yamamoto group's research was focused on FETs (or OTFTs) based on insulator-to-metal Mott transition, where the FET switching is controlled by the insulator-to-metal phase transition either with light, electric field, or mechanical strain. The organic material of interest is $(BEDT\text{-}TTF)_2Cu[N(CN)_2]Br$ (κ-Br), a prototypical organic crystal well known for its superconductivity. The observed FET phenomena are interesting from the standpoint of basic molecular science, but as switching devices, the κ-Br Mott-transition type FETs are unlikely to be of practical use due to 1) performance limitation and insufficient differentiation over conventional FETs, 2) scalability of the organic crystal size in general, 3) operability only at super low temperatures, and 4) uncharted demand for all organic-based FETs. However, I believe it is certainly useful to adopt various device structures, such as FETs, as a tool for probing the fundamental properties of molecular materials with an aim for future applications—such as quantum devices as proposed by this group.

Kera, Satoshi

Research field: Surface science; Angle resolved ultraviolet photoelectron spectroscopy

Recent focus: Electronic states of functional organic materials

Remarks: Kera's presentation "Impacts of Low Dimensionality on Electronic States of functional Materials" detailed the progress and challenges of assessing the electronic states of organic-based, soft materials using synchrotron-light-source based photoelectron spectroscopy. While there is no doubt about the rich functionality found in organic materials, but fully understanding the electronic states and correlating them to observed electronic properties in organic-based devices such as OLED and OTFT are still work in progress after decades of investigation, as Kera pointed out. I am very impressed by his work on probing the electron–phonon coupling in rubrene crystals using ARUPS and the finding that the e–ph coupling has direct impact the hole mass and its transport in rubrene. His future research aiming at investigating the electronic states beyond the energy space to momentum space and from spectroscopy to imaging represents a huge leap in scientific scope and depth. It also raises the question of impact—how important is the probe into the fine features of electronic states of "soft" matters for further enhancement of their functionalities and device applications? As is the case for most fundamental scientific investigations, relevance is a tough call at a particular moment of time.

Matsui, Fumihiko

Research field: Synchrotron-radiation photoelectron spectroscopy and imaging

Recent focus: Photoelectron momentum spectroscopy

Remarks: Matsui's group is charged with the development of new photoelectron instrumentation that will "Open up a new trend of

electron spectroscopy at IMS" in conjunction with the BL6U beamline of the UVSOR facility. From his presentation, which I must admit I could barely comprehend, I understood that he is on track to develop one of the world's most sophisticated photoelectron momentum microscope at IMS and ready to undertake a range of exciting experiments with the new tool. It seems to me the work of Matsui and Kera are highly complementary, an attribute to the strength of IMS in the development of photoelectron instrumentation with an inhouse UVSOR facility, and its utilization particularly in material characterization.

UVSOR III

Synchrotron radiation facility at IMS

Remarks: Director Kera gave an overview of the UVSOR—a synchrotron radiation (SR) facility, including a brief history, the current capabilities and operation, and a vision for the future. There is no doubt UVSOR in its various versions, has served the need of IMS and the research communities in Japan and around the world since its installation 37 years ago. Although it is one of the oldest among the more than 10 SR facilities in Japan, it appears that its upgraded version, UVSOR III, remains one of the best SR in providing VUV and soft X-ray beams with the highest resolution, making it particularly useful for chemical analysis—thus the realization of the "Chemical Machine" coined by the renowned former Director General H. Inokuchi. The highly accomplished work of Yokoyama, Kera, Matsui and many others from IMS would not have been possible without UVSOR. Charting the future of UVSOR may be more difficult, given the availability of newer and more modern SR facilities in Japan and elsewhere, and the usual constraint of funding in running a large dedicated capital-intensive facility. With continuous innovations in analytical capabilities for a wide range of research disciplines as demonstrated by the UVSOR team, and serving both academic and industrial laboratories, particularly in materials science, I believe UVSOR can carved out an area of excellence among the SR facilities and remain a vital and innovative scientific center for many more years to come.

Department of Materials Molecular Science

Remarks: The Department is relatively small in faculty size, as is the case for all IMS Departments. Yet, with 5 full-time faculty and a few others with cross appointments, the research disciplines are rather diverse with focus tilted more towards fundamental than applied research and emphasis on analytical and structural characterization of materials or material systems. Noticeably absent is material synthesis with exception of Kobayashi's activities on the development of oxy-hydride materials for ionic transport. Centered on electronic devices are activities from Hiramoto and Yamamoto's groups, with the former focused on developing efficient organic photoelectronic devices, including solar cells, and the latter on devices exhibiting unusual behaviors, such as superconductive FETs. It appears that the Department, as is, does not have the critical mass in each of these disciplines to achieve the desired impact. Increasing research staff is an option, but it may also be necessary to realign research disciplines within the Department through cross-appointments within IMS or external institutions to achieve a more cohesive thematic platform with well defined missions.

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はなく，共同利用支援業務を滞りなく行うために技術職員を配置した。高度な研究を進めるためには研究開発が不可欠であり，研究職員との密な連携が必須である。

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は，研究職員が流動していくシステムそのものを支援する意味もあり，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。2021 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大西　洋教授（神戸大学大学院理学研究科教授）が着任され，化学マシンとしての UVSOR の運用強化および機器センターのプローブ顕微鏡の利用促進などを中心に尽力している。

（川合眞紀）

8-1　極端紫外光研究施設（UVSOR）

8-1-1　はじめに

UVSOR 施設は 1983 年 11 月 10 日に「初点」を発してから 38 年が経過した。その間，新規光源開発と先端計測の専門家のコラボレーションにより，UVSOR では２度の光源加速器高度化に成功し，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（TOP-UP 運転，挿入光源追加，エミッタンス 27→17 nm rad）を実現した。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。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９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的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。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進められている次世代放射光（NanoTerasu）* 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。

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強化や未利用分野への拡張が重要であり，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，UVSOR が目指すべき方向性に合致する。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り，2018 年度より具体的な検討を進めている。将来計画の経緯は過去リポート 2018 ～ 2020 もご参照いただきたい。2021 年度はユーザーコミュニティに広くアンケートを実施し，次期施設に対する技術的要望や施設の考え方について意見を聴取した。またシンポジウム（第三回検討会：光源加速器技術，第四回検討会：次期計画概要）を開催し，次期施設の目指すべき形態について概要をまとめた。詳細は本レポートにて後述するが，本施設規模（小型リング型放射光施設）の光源加速器技術と性能は，UVSOR-III にて実証されたように既に概ね極限化されている。そこで現状のリング型光源加速器性能を基本骨格とし，光源として放射光のみならずレーザー光源を多彩に活用できる実験設備を提供することで，未踏の学術を広く開拓する「分子機能・材料物性計測拠点」としての先端光源施設と位置付けた。また今後の技術的成熟に応じて，高出力小型レーザー光を新規加速器として用いる計画も検討した。これにより VUV 波長帯における自由電子レーザーの併用など，時間・空間軸で極限化されたコヒーレント光源を利用した未踏の新規計測による学術開拓の場としての展開も視野に入る。前者は爆発的にコミュニティ拡大に繋がるような放射光利用実験のロールモデルが不可欠であり，分子研の各センターとも連携した多面的な支援による自由度の高い「高度研究支援環境パッケージ」を提供するための組織設計が重要であろう。後者は高出力かつ安定なレーザー光源技術の進展のみならず，加速器応用のための技術開発が求められ，国内外の多くの専門家との協力体制が必要である。いずれにせよ，現状の UVSOR-III は次施設建設まで

* 編集時にニックネームが発表された

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) 国際的に希少な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

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，経年劣化から数年以内に更新時期を迎える設備が複数箇所想定され，特に建設当初 1983 年来，未更新の基本設備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け，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ているが，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 2019 年度に決定し順次作業を進めている。このように，大型設備の持続性担保の観点で，更新にかかる巨額資金の恒常的確保は根本的な課題である。さらに中長期的には 10 年後を目途に，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る。また付帯する空調設備，冷却設備や放射線管理設備の更新経費は高額で，UVSOR 施設棟の改修工事のタイミングを含めた検討が必要であろう。施設棟の建屋は 1983 年の建設であり耐久年数から改修時期が迫っている。次期施設の建設計画実現とそのタイミングが極めて重要である。緊急性の観点で当面の設備トラブルへの対処としては，予定した更新作業でほぼ十分と判断したところであった。しかし今年度夏，BL7U の光源出射部の四象限スリット冷却パイプからの水漏れにより，蓄積リング全周にわたる真空破壊事故が発生した。復旧には５週間を要し，ユーザー利用週数としては４週分をキャンセルとした。一部は後期実施で対応できたものの，実験を実施できないグループが複数出てしまい，ご迷惑をおかけしたことをお詫び申し上げたい。

一方，開発研究の視点で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されている。2020 年度に，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している。ガンマ線利用実験が通常のビームタイムで実施できるように，蓄積リングの電子バンチ軌道を新たに設計した。2022 年春のシャットダウン中に軌道調整を行い，2022 年度は新軌道で定常運転する予定である。また BL1U のタンデムアンジュレータの特性を活用した斬新な光干渉実験等が行われ，新たな分光学的展開が期待されている。これらの実験は，通常の放射光利用と大きくパラメータが異なるために，他ユーザーの影響がない週末に限定して実施している。現在，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いているが，2022 年３月に藤本助教が名古屋大学へ転出し，助教１名の休職により加速器関連のスタッフ不足に陥っている。関連するパワーユーザーの協力による臨時的な運用体制を検討している。安定な加速器運転は全ての放射光利用研究に関わるため，中長期的な持続性担保のために早急にスタッフ補強のための人事を進めたい。

8-1-3　ビームラインと観測系利用状況

ビームライン実験設備については，10 年程度の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た設備の順次高度化が必要で，分子研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 基が稼働しており, 海外からの第一線の研究者が利用に来るような競争力のあるアンジュレータビームライン６基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。開発が終了したビームラインから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国際的に認知度の高い施設地位を獲得していく方針である。

軟Ｘ線 BL6U では，立ち上げ中の光電子運動量顕微鏡の調整を進めつつ，デモンストレーション実験を協力研究により推進している。低エネルギー VUV の BL7U では，光電子アナライザーの電子捕集レンズ部をディフレクタ機能の追加により更新し，高効率角度分解光電子計測装置への改良に成功した。BL5U ではスピンマニピュレータ機能の導入により，高効率スピン分解光電子計測装置への改良を行いレンズパラメータの調整を進めている。

また汎用設備であるベンディングラインにおいても，国際的に唯一無二の波長帯をカバーする光反射・吸収測定設備を提供しており，貴重な材料物性評価の成果が発信され続けている。ベンディングラインは設備の希少性と稼働率を鑑みて将来計画を立て，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。2021 年度は，易光損傷試料系における需要を鑑み，BL4B における分子固体用角度分解光電子分光エンドステーションについて評価テストを開始した。

一方，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の大きな見直しが起こっている。海外ユーザーの来所は依然として難しく代行測定を進めている。国内のユーザーには with コロナ対応を進め，少人数での来所で実験活動推進を工夫していただいた。特に移動制限から 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ている。VUV- 軟Ｘ線領域では「真空」の技術的制約により自動化導入の難易度は高いが，国内施設間の情報共有など連携強化を進め，ベンディングビームラインにて自動化・遠隔化測定に向けた準備を開始した。

また課題として運営スタッフの充実化と技術の伝承があげられる。近年教員の転出や技術職員の定年退職などが相次いでおり，組織規模に比して極めて少人数で運営している UVSOR では，過渡的な人員増減の影響が大きい。2021 年４月，出田助教が HiSOR に，2022 年２月，大東助教が KEK にそれぞれ准教授として転出した。BL4U は依然として国際先端性の高い成果を発信している設備であるため，大東氏にクロアポとして運営をご協力いただくと共に，新たに主任研究員の人事公募により転出の影響を最小限に抑え，研究活動を維持する。また次年度は２名の技術職員の退職が予定されている。UVSOR では，火曜日から金曜日日中の 48 時間（12 時間× 4 日間）に加え，木曜夜間の 12 時間にも運転を実施し 36 時間連続したトップアップ運転を実現している。ただし夜間のマシングループの人員を恒常的に配置する余裕がないため「木曜夜間の 12 時間中にトラブルがあっても補償しない」という運用方針ものと供給を行っている。技術職員の負担軽減のため，2021 年１月から教員の深夜勤務，準夜勤務を開始した。また次期施設建設計画など，中長期的な運営体制の強化のために，2021 年度施設教授人事公募を行い２名の最終候補者を決定した。主任研究員の松井が教授に昇任し，今後はグループを率いて国際研究を推進しつつ次世代への人材育成に資する。もう１名は残念ながら着任が困難となり，別形式での協力関係の構築を模索している。スタッフの余力が不十分な状態は解消されておらず，転出等による突発的な業務エフォートの変化に対応することが困難であり，引き続き UVSOR 運営スタッフとして適任者が見つかれば，採用枠を確保しスタッフとして迎えたい。

8-1-4　次期施設計画

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基本要素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基に，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。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を進めているが，2021 度は，光源加速器と実験設備等に関する具体的な議論を行った。

８月に行われた第三回次期施設建設検討会においては，次世代の電子加速技術と光源技術に焦点をあて，HiSOR や KEK の専門家を招き 40 名程度の参加者で活発な議論を行った。放射光を利用するためには，蓄積リングで電子ビームを周回し，偏向電磁石や周期磁石列（アンジュレータ）を用いて放射光を発生するのが一般的である。装置全体は，電子蓄積リングの他に，それに電子ビームを入射する入射器と呼ばれる加速器も含めて構成される。従来の入射器では，高周波電場により電子を加速する事が行われているが，はるかに短い距離で同等の電子エネルギーまで加速できるレーザー航跡場加速や誘電体加速の開発が行われている。レーザー航跡場加速は，世界中複数のグループで開発が行われており，エネルギーや電荷量など独立に開発されている内の個々の最良値は，高周波加速と同等の性能が出ている。この要素技術の一端として，ハイパワー小型レーザー光源の開発は分子研社会連携研究部門の平等グループが主導している。５件の講演では最新の開発状況が紹介され，将来蓄積リングへの入射器をレーザー航跡場加速や誘電体加速に置き換える技術が提案された。今後も密に情報交換を行い，実用水準への到達に合わせ最良の光源技術導入を進めたい。

次期施設の電子蓄積リングの現状の設計に関しては，最新技術を取り入れることで電子エネルギー 1 GeV のリングにより真空紫外域で回折限界に迫る性能を達成でき，アンジュレータ放射の輝度を現状より 1 桁向上する事が可能であることが示された。また，偏光変調型紫外光・軟Ｘ線を発生できる分割型アンジュレータに関する講演では，偏光放射光利用の幅広い可能性が示され，次期計画においてその導入を積極的に検討する必要性がある。次期放射光施設では，実験光源として放射光に加えてレーザー光源もユーザーに供給し，利用目的に合わせて最適な光源を選択し利用できるよう整備し，利便性と多様性を重視した高度研究環境をユーザーに提供できる施設の建設を目指している。

11 月に行われた第四回検討会は，コロナ禍により ZOOM ウェビナーでオンライン開催した。冒頭に文科省研究振興局基礎基盤研究課長の渡邊 淳氏よりご挨拶を戴いた。次期施設における実験設備を検討するため，各ビームラインの現状と将来展望について，主として UVSOR スタッフから現状と展望を紹介し，対応する実験設備についての外部専門家から未来展望を述べてもらった。参加者は 70 名弱であった。軟Ｘ線オペランド吸収分光，放射光赤外分光，量子ビーム照射研究，真空紫外吸収・発光分光，スピン分解光電子分光，光電子イメージング，Ｘ線イメージング，光源加速器仕様の各テーマで活発な議論が行われた。

１）軟Ｘ線分光として，長坂助教から BL3U の液体に対する吸収分光と，液晶に対する散乱分光の紹介があった。液体は計測が難しく未踏の研究領域であったが，継続的な開発研究により多くの技術的課題を克服し実現した。宮脇研究員（QST）から高分解能非弾性散乱分光（RIXS）の技術開発の最新の状況について，世界動向を踏まえて紹介された。UVSOR での展開が期待される低エネルギー帯（極端紫外光領域）では高エネルギー帯に対して高分解能

化に要請される技術条件が緩和されるなど，その優位性と希少性が指摘され，オペランド計測など試料環境の優位性を生かした研究が有効であるとコメントされた。

2）放射光赤外分光について，池本研究員（JASRI）から SPring8 の例やレーザー利用，国際的な動向について紹介された。末端装置のユーザー自由度の確保，多様な試料への対応，複合測定の展開が重要であることが示された。将来的に SPring8 における利用が停止される予定であり，東北次世代放射光施設でも利用計画がなく，我が国におけるアクティビティ維持について総合的に考える必要があるとの指摘があった。

3）ビーム照射ついて，平准教授から BL1U の開発例が紹介された。独自性の高い手法の意義と共に，次期施設におけるパルスガンマ線のビームの質の向上に向けた技術展開が提案され，マルチバンチ運転における特定バンチの充填などの手法が議論された。副派生ビームである陽電子の利用も議論された。松田教授（東大物性研）から，４重連アンジュレータによる位相検波計測の有効性が述べられ，レーザー光と放射光の融合の意義と，時間コヒーレンスを利用した各種時間分解計測の未来への期待が述べられた。今後は「顕微×分光×偏光×時間」の多角的計測環境の実現が切望される。レーザー光源の視点から（慣れ親しんだ）放射光利用を如何にして総合的に考えられるかが融合利用に重要な点であると述べられた。物性科学の発展のために，高度技術の開発だけでなく，それを利用した実証実験と，積極的な広報とコンサルタントが重要であることが指摘された。

4）真空紫外吸収･発光分光として，北浦教授（山形大）から，BL3B，BL5B および BL7B のこれまでの経緯と現状，海外施設との比較が紹介された。ユーザー利用は基礎研究から実用化を想定した応用研究にシフトしつつあり，兼務されている NIMS での研究体制の例を挙げ，材料開発のスピード感をふまえたうえで，次期施設においては，ミニラボなどの適切な実験環境の提供による合理的測定が検討軸に挙げられると指摘された。

5）次世代光電子運動量顕微鏡について，松井主任研究員から，BL6U における開発状況とスピン多次元イメージングへの展開について説明があった。職人芸に頼るところの大きい複雑な電子レンズ調整作業について，AI 制御による汎用化の方向性が議論された。矢治研究員（NIMS）から，レーザーを光源とした新たに導入された類似装置による研究展開が説明された。多元系物質の材料開発において，探査効率の向上に向けた AI による測定支援やビッグデータにおけるデータ科学の推進において，人材確保とチーム力の重要性が指摘された。

6）先端光電子分光について，田中准教授から BL5U および 7U の現状と開発経緯について紹介された。スピンマニピュレータ３次元操作の新機構の開発状況が議論され，次期施設における光源の高輝度化やサブマイクロフォーカス化の必要性が述べられた。黒田准教授（広大）より，スピン分解角度分解光電子分光による物性研究の一端として光スピントロニクスの提案があった。手法の普及に向けては，若い力の活性化と，多様性への対応が肝要であることが指摘され，そのためのソフトウェア開発や，実験手法の開発テーマの設定の重要性が述べられた。

7）Ｘ線イメージングについて，大東助教から BL4U の STXM 開発の経緯と利用状況について説明があった。国際的にみて極めて安定な実験装置環境である利点がユーザー獲得につながっていることが指摘された。今後の高空間分解能化や試料損傷回避のための技術開発が重要である点が指摘された。高橋教授（東北大）から，先端コヒーレントイメージングの技術開発とその利用について紹介があった。タイコグラフィーとＸ線吸収分光を組み合わせたビッグデータに対し機械学習を導入した解析例が示された。放射光を単に分析ツールとしての利用にとどめることにせず，計測深堀とデータ科学の融合が重要であると指摘された。

8）次期施設の光源加速器仕様について，加藤教授から 1 GeV リングのデザイン概要が紹介された。これまで UVSOR では現施設形状を維持したままの２度の高度化を行ってきたが，更なる光源性能向上においては，新地において小型リングを刷新する方向性が必須である点が述べられた。0.75 GeV と 1 GeV 運転での光源性能の差，多極

ウィグラー装置 MPW の導入効果や，真空槽の小型化のメリット・デメリットが述べられた。100 eV 程度の波長帯ではレーザー光源と同等の空間コヒーレンス性能が達成できる可能性がある事が示された。

最後にパネルディスカッションを行い，ユーザー代表として UVSOR 利用者懇談会のメンバー（岡林教授（東大），北浦教授（山形大），木村教授（阪大），彦坂教授（富山大），山根研究員（PhoSIC））からパネラーに就いていただき聴衆と議論した。事前アンケートにて UVSOR 利用者や他放射光施設関係者などから寄せていただいた声を基に，光源仕様について利用者側の視点からの意見交換があった。先端技術である挿入光源ビームラインだけでなく，幅広い実験テーマの需要を満たすためベンディングビームラインの堅持を要望する声や，長期的な需要展望を見定めることが重要であるという指摘などがあった。また利用形態や運営体制についての意見交換も行い，建設計画実現に向けた戦略的な活動を求める声を多視点においていただいた。今後は具体的なビームライン設備を念頭に，各要素技術のデザインレポートをまとめていく作業が不可欠であり，各種研究会を開催し議論を深めていく予定である。

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（Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology in Japan, ARIM）のスポーク機関，2022 年度からは同事業運営機構横断領域（合成）担当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。

2021 年度の人員は以下のようである。まず，センター長・横山利彦（2018~，併任），分析チームリーダー・中村敏和（2019~），合成チームリーダー・鈴木敏泰（2019~），主任研究員・湊丈俊（2020~）の３名が先端的な共同利用を推進している。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ゼンターの運営，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，宮島瑞樹が 2021 年度に技術員として着任し，高山敬史技師，藤原基靖主任技術員，上田正主任技術員，岡野芳則技術員，賣市幹大技術員，浅田瑞枝技術員の７名とユニット長として繁政英治技術推進部長が兼任する体制となっている。また，技術系特任専門員２名（伊木志成子，長尾春代），技術支援員１名（藤川清江），事務支援員１名（兵藤由美子）が配置されている。これに加えて，前述３事業において，運営マネージャー３名（大原三佳（~2021.6），石山修，中本圭一），技術系派遣職員１名（外山亜矢（~2022.2）），事務系特任専門員１名（船木弓子），事務支援員２名（内田真理子，石川あずさ）を配置している。

研究所全体として大規模装置を効率的に運用する必要性の高まりを受けて，機器センター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，ARIM 事業 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なされ次年度以降の新展開が期待できる。さらに，ARIM 事業 2021 年度補正予算により超伝導量子干渉型磁束計（SQUID）ならびに 2022 年度概算要求によりヘリウム液化機の更新が予定されている。一方，これまで機器センター（ナノプラットフォーム）で運用されてきた 800 MHz クライオプローブ NMR は 2022 年度より生命創成探究センター EXCELLS に移管されて運用されることとなった。

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んでいる。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し，概算要求のみならず外部資金を積極的に獲得することに努めた結果，電子スピン共鳴，超伝導量子干渉型磁束計，ヘリウム液化機の更新が行える状況である。今後さらに中長期的にどのような機器ラインアップを維持するかの検討については，次の３つのタイプに階層化することを想定する。

1) 比較的多数のグループ（特に研究所内）が研究を遂行していく上で不可欠な共通基盤的機器。これらの維持は，特に人事流動の活発な分子研において，各グループが類似の装置をそれぞれ新たに用意する必要がない環境作りの面で最重要である。一方，使用頻度や維持経費の点で負担が大きいと判断されたものは見直しの対象とし，所内特定グループや他機関へも含めた移設などにより有効に利用してもらうことも検討する。
2) 当機器センターとしての特色ある測定機器。汎用機器をベースとしつつ改良を加えることによってオリジナル性の高いシステムを開発し，それを共同利用に供する取り組みを強化する。分子科学研究所の特色として「低温」「オペランド」を柱とした分野強化を進める。その際，技術職員が積極的に関与して技術力を高めることが重要であり，主任研究員制度の適用も視野に含める。所外の研究者の要請・提案を取り込みつつ連携して進めるとともに，所内研究者の積極的な関与も求める。当センター内のみならず，UVSOR をはじめとする所内センター等と共同して取り組むことも効果的である。所内技術職員の連携協力が技術を支えるのに不可欠であるが，コミュニティ全体から提案を求める体制づくりも必要となろう。
3) 国際的な水準での先端的機器。分子科学の発展・深化を強力に推進する研究拠点としての分子研の役割を体現する施設として，UVSOR や計算科学研究センターと同様に，機器センターも機能する必要がある。高磁場 NMR 装置や ESR 装置は，国際的な競争力を有する先端的機器群であり，研究所全体として明確に位置付けを行い，利用・運

営体制を整備することによって，このミッションに対応すべきである。国外からの利用にも対応するため，技術職員には国際性が求められる。2) と同様に，所外コミュニティからの要請・提案と，所内研究者の積極的関与が不可欠である。特に，新規ユーザーの開拓は，分子科学の新領域形成へと繋がると期待されるものであり，これまで分子研との繋がりがあまり深くはなかった研究者層・学協会との積極的な連携を模索することにも取り組む。先端的機器は不断の性能更新が宿命であるが，全ての面でトップたることは不可能であるので，意識して差別化を行い，分子研ならではの機器集合体を構成することに留意する。

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 ARIM プログラムが始動し，分子科学研究所はスポーク機関と運営機構横断領域（合成）担当としてマテリアル 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である。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 400 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。

2021 年度より新たに有償利用制度を設けることで，分子研外部からの製作・開発依頼受付を持続可能なシステムとして運用開始し，海外からの依頼も含めて対応できる体制を整えつつある。また従来からある施設利用については，他の施設と同様の形で継続している。

装置開発室は大きく機械工作を担当するメカトロニクスセクションと電子回路工作を担当するエレクトロニクスセクションに分かれている。メカトロニクスセクションでは従来の機械加工技術の超精密化に向けた取り組みに加え，近年では，リソグラフィなど非機械加工による超微細加工技術の習得に取り組んでいる。エレクトロニクスセクションでは，高速化や多機能化が進む電子回路の需要にこたえるために，プログラマブル論理回路素子を用いたカスタム IC の開発等に取り組んでいる。これに加えて，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ー装置の導入を行った。2020 年度は，附属３棟の改修により，工作環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。2021 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。

2022 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うるための汎用性があるばかりでなく，ユーザーサイドの PC クラスタでは不可能な大規模計算を実行できる性能を有する。

高性能分子シミュレータは，主として日本電気製の LX シリーズで構成される 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，2021 年度は 278 研究グループにより，総数 1,187 名（2022 年２月現在）におよぶ利用者がこれらのシステムを日常的に利用している。近年，共同利用における利用者数が増加傾向にあり，このことは計算科学研究センターが分子科学分野，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。また最近は，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，2021 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

ワークショップ「生体分子の構造･機能･デザインの計算科学」と２つのスクール「第 11 回量子化学スクール」と「第 15 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。

2021 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。2021 年度も前年度に引き続き，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。また，2022 年３月には「生命システム理解に向けたネオ生命体創成を可能とする染色体工学技術の開発」を目指す新たな連携研究グループ「染色体工学研究グループ」を新規に立ち上げた。

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，物質－生命境界領域研究グループが活動している。2021 年度は，超高解像度クライオ電子顕微鏡を導入し，運用を開始した。

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。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，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た。

さらに，2021 年度は，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，機構外からの意見を反映させ，センターの改善・強化することを目的とし，外部評価を実施した。

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　眞紀（2016.4.1 ～ 2022.3.31）

9-2　運営顧問（2004 ～）

2004 年度以前は評議員による諮問を行った。

（https://www.ims.ac.jp/publications/report2020/920.pdf）

（https://www.ims.ac.jp/publications/report2020/930.pdf）

加藤　伸一（豊田中央研究所代表取締役）'04.5.19 ～ '10.3.31

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）'04.5.19 ～ '06.3.31

土屋　荘次（（台湾）国立交通大学講座教授，東京大学名誉教授）'04.5.19 ～ '10.3.31

益田　隆司（電気通信大学長）'04.5.19 ～ '06.3.31

江崎　信芳（京都大学化学研究所長）'06.4.1 ～ '08.3.31

野口　宏（中日新聞編集局文化部長）'06.4.1 ～ '08.7.31

時任　宣博（京都大学化学研究所長）'08.4.1 ～ '10.3.31

田中　宏明（中日新聞編集局文化部長）'08.8.1 ～ '10.3.31

齊藤　軍治（名城大学教授）'13.4.1 ～ '16.3.31

廣田　襄（京都大学名誉教授）'13.4.1 ～ '16.3.31

増原　宏（（台湾）国立交通大学講座教授）'13.4.1 ～ '16.3.31

菊池　昇（豊田中央研究所代表取締役所長）'16.4.1 ～ '22.3.31

晝間　明（浜松ホトニクス代表取締役社長）'16.4.1 ～ '20.3.31

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）'16.4.1 ～ '22.3.31

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）'16.4.1 ～ '22.3.31

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）'20.4.1 ～ '22.3.31

9-3　外国人運営顧問（2004 ～）

2004 年度以前は外国人評議員による諮問を行った。

（https://www.ims.ac.jp/publications/report2020/950.pdf）

FLEMING, Graham R.（米国カリフォルニア大学バークレー校教授）'04.5.19 ～ '05.3.31

JORTNER, Joshua（イスラエルテルアビブ大学教授）'04.5.19 ～ '05.3.31

NORDGREN, Joseph（スウェーデンウプサラ大学教授）'05.4.1 ～ '07.3.31

CASTLEMAN, A. Worford Jr.（米国ペンシルバニア州立大学教授）'05.4.1 ～ '07.3.31

MILLER, William H.（米国カリフォルニア大学バークレー校教授）'07.4.1 ～ '09.3.31

LAUBEREAU, Alfred（ドイツミュンヘン工科大学教授）'07.4.1 ～ '09.3.31

STACE, Anthony John（英国ノッティンガム大学教授）'09.4.1 ～ '11.3.31

SAUVAGE, Jean-Pierre（フランスストラスブール大学教授）'09.4.1 ～ '11.3.31

WOLYNES, Peter（米国ライス大学教授）'11.4.1 ～ '13.3.31

BERRY, Rechard Stephen（米国シカゴ大学名誉教授）'11.4.1 ～ '12.3.31

WALMSLEY, Ian A.（英国オックスフォード大学副学長）'12.4.1 ～ '15.3.31

O'HALLORAN, Thomas V.（米国ノースウェスタン大学教授）'13.4.1 ～ '15.3.31

NAAMAN, Ron（イスラエルワイツマン科学研究所教授）'15.4.1 ～ '17.3.31

ROSSKY, Peter J.（米国ライス大学自然科学研究部部長・教授）'15.4.1 ～ '17.3.31

UMBACH, Eberhard（ドイツミュンヘン国立科学アカデミー理事，カールスルーエ工科大学教授）'17.4.1 ～ '20.3.31

LIST, Benjamin（ドイツマックス・プランク石炭研究所所長）'17.4.1 ～ '20.3.31

MICHL, Josef（米国コロラド大学ボルダー校教授）'20.4.1 ～

TANG, Ching Wan（香港科技大学教授）'20.4.1 ～

9-4　運営会議委員（2004 ～）

1975 ～ 1981 年は運営に関する委員会委員

(https://www.ims.ac.jp/publications/report2020/970.pdf)

1981 ～ 2004 年は運営協議員による諮問を行った。

(https://www.ims.ac.jp/publications/report2020/980.pdf)

◎　議長　　人－人事選考部会に属する委員
（副）　副議長　　共－共同研究専門委員会に属する委員

氏名・所属（当時）		第 1 期	第 2 期	第 3 期	第 4 期	第 5 期	第 6 期	第 7 期	第 8 期	第 9 期
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
藥師　久彌	分子研教授	○人	◎共 '07.4.1~	○共						
斉藤　真司	分子研教授				○人	○人	○人	○共	◎共	○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	○	○

氏名・所属（当時）		第１期	第２期	第３期	第４期	第５期	第６期	第７期	第８期	第９期
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					
冨宅　喜代一	神戸大院理名誉教授			○(副)人	○(副)人					
山下　正廣	東北大院理教授			○人	○人					
渡辺　芳人	名大副総長，教授			○	○					
山縣　ゆり子	熊本大院薬教授				○	○				
上村　大輔	神奈川大理教授				○	○				
山内　薫	東大院理教授				○	○				
森　健彦	東工大院理工教授				○人	○人				
佃　達哉	東大院理教授				○人	○人				
朝倉　清高	北大触媒セ教授				○	○	○			
神取　秀樹	名工大院工教授				○	○(副)人	○(副)人			
河野　裕彦	東北大院理教授				○	○共	○			
寺嵜　　亨	九大院理教授				○人	○人	○人			
水谷　泰久	阪大院理教授				○人	○人	○人			
大西　洋	神戸大院理教授						○共	○共		
鈴木　啓介	東工大院理工教授						○	○		
高田　彰二	京大院理教授						○	○		
田原　太平	理研主任研究員						○人	○人		
森　初果	東大物性研教授						○人	○人		
有賀　哲也	京大院理教授							○(副)人	○人	
米田　忠弘	東北大多元研教授							○	○(副)	
高原　淳	九大先導研教授							○	○	
西原　寛	東大院理教授							○人	○人	
山口　茂弘	名大トランス研教授							○人	○人	
解良　聡	分子研教授							○人	○人	○人
鹿野田一司	東大院工教授								○人	○人
袖岡　幹子	理研主任研究員								○	○
谷村　吉隆	京大院理教授								○	○
中井　浩巳	早稲田大理工教授								○人	○人
藤井　正明	東工大科技創成院教授								○共	○共
江原　正博	分子研教授								○人	○人
秋吉　一成	京大院工教授									○人
忍久保　洋	名大院工教授									○人
芳賀　正明	中央大理工名誉教授									○

氏名・所属（当時）		第１期	第２期	第３期	第４期	第５期	第６期	第７期	第８期	第９期
福井　賢一	阪大院基礎工教授									○人
村越　敬	北大院理教授									○(副)
飯野　亮太	分子研教授									○人
石崎　章仁	分子研教授									○人

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

9-5　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，生物現象の基本原理に関する統合的理解を深め，国内生物学コミュニティを先導し，基礎生物学分野の発展に寄与する。

生理学分野では，分子から細胞，組織，システム，個体にわたる各レベルにおいて先導的な研究をするとともに，各レベルを有機的に統合し，ヒトの機能とその仕組み，更にその病態の解明に寄与する。

分子科学分野では，物質・材料の基本となる分子及び分子集合体の構造，機能，反応に関して，原子・分子及び電子のレベルにおいて究明することにより，化学現象の一般的法則を構築し，新たな現象や機能を予測，実現する。

（２）　研究実施体制等に関する目標

国際的かつ先端的な学術研究を持続的に推進するため，十分な研究体制を確保する。

２　共同利用・共同研究に関する目標

（１）　共同利用・共同研究の内容・水準に関する目標

本機構は，各専門分野を先導する国際的学術拠点として，国内外の研究者との共同利用・共同研究を抜本的に強化し，優れた研究成果を上げる。

（２）　共同利用・共同研究の実施体制等に関する目標

共同利用・共同研究機能の強化のため，研究者コミュニティ及び各大学等の要請に対応し得る柔軟な体制を構築する。

３　教育に関する目標

（１）　大学院等への教育協力に関する目標

自然科学分野において国際的に通用する高度な研究的資質を持ち，広い視野を備えた研究者を育成するため，総合研究大学院大学（以下「総研大」という。）との一体的連係及びその他の大学との多様な連携によって，本機構の高度の人材・研究環境を活かして，特色ある大学院教育を実施する。

（２）　人材育成に関する目標

自然科学分野において優れた研究成果を生み出せる大学院生を含む若手研究者の養成を行う。特に，総研大との一体的連係及びその他の大学との多様な連携による大学院教育によって，新しい学術的分野の問題を発掘及び解決できる人材の育成を行い，社会の要請に応える。

4　社会との連携及び社会貢献に関する目標
国民の科学に対する関心を高めるとともに，最先端の研究成果を社会に還元する。

5　その他の目標
（1）　グローバル化に関する目標
我が国の代表的な自然科学分野の国際的頭脳循環のハブとして，人材交流を含む国際間の多様な研究交流を推進する。
（2）　大学共同利用機関法人間の連携に関する目標
４大学共同利用機関法人は，互いの適切な連携により，より高度な法人運営を推進する。

II　業務運営の改善及び効率化に関する目標
1　組織運営の改善に関する目標
機構長のリーダーシップの下で，機構本部及び各機関間の連携により，機構として戦略的かつ一体的な運営を推進する。

2　教育研究組織の見直しに関する目標
新たな学問分野の創出，共同利用・共同研究機能の向上の観点から，各機関等の研究組織を見直し，必要な体制整備，組織再編等を行う。

3　事務等の効率化・合理化に関する目標
機構における事務組織について，事務局機能の強化を図るとともに，事務局と各機関間の一層の連携強化により，効率的な体制を構築する。

III　財務内容の改善に関する目標
1　外部研究資金，寄附金その他の自己収入の増加に関する目標
外部研究資金その他の自己収入の効果的な確保と増加を図るための基盤を強化する。

2　経費の抑制に関する目標
適切な財政基盤の確立の観点から，業務・管理運営等の見直しを行い，効率的かつ効果的な予算執行を行う。

3　資産の運用管理の改善に関する目標
資産の効率的かつ効果的な運用管理を行う。

IV　自己点検・評価及び当該状況に係る情報の提供に関する目標
1　評価の充実に関する目標
国際的に優れた研究成果を上げるため，研究体制，共同利用・共同研究体制や業務運営体制について，様々な機構外の者の意見を反映させ，適宜，見直し，改善・強化するために自己点検，外部評価等を充実する。

2　情報公開や情報発信等の推進に関する目標
本機構の実情や果たしている機能，運営内容や研究活動について，広く国内外に分かりやすい形で示すように適切かつ積極的に情報公開や情報発信を行う。

V　その他業務運営に関する重要目標
1　施設設備の整備・活用等に関する目標
本機構の施設設備に係る基本方針及び長期的な構想に基づき，キャンパスマスタープランの充実を図り，既存施設の有効活用や計画的な維持管理を含めた効率的かつ効果的な施設マネジメントを行う。

2　安全管理に関する目標
事故及び災害を未然に防止するため，広く安全管理・危機管理体制の強化を図り，役職員の意識向上を通じた安全文化の醸成に取り組む。また，職員の健康を増進することにより，快適な職場環境創りに積極的に取り組むとともに，情報セキュリティポリシーに基づき，適切な情報セキュリティ対策を行う。

3　法令遵守等に関する目標
研究不正の防止，研究費不正の防止に係る管理責任体制の整備を図るとともに，研究者倫理に関する研修等の充実により，法令遵守を徹底する。

9-6　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）

計画内容については分子研リポート 2020web 版を参照。

https://www.ims.ac.jp/publications/report2020/9140.pdf

9-7　大学共同利用機関法人自然科学研究機構第４期中期目標

（前文）法人の基本的な目標

学術研究は，真理の探究と文化の創造を目指して行われる知的創造活動であり，科学技術や産業，経済，教育，社会などの発展の基盤となるものである。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中核的研究機関（大学共同利用機関，以下「機関」という）を設置・運営することにより，自ら国際的・先導的な学術研究を進めるとともに，保有する最先端設備の共同利用や先導的共同研究の場を全国の大学･研究機関（以下「大学等」という）の研究者に提供し，我が国の大学等の自然科学分野を中心とした学術研究の発展に貢献する。

具体的には，本機構が分野の異なる機関を複数持つ強みを活かし，各々の分野を超えて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となる新しい学問分野の創出とその発展を図るとともに，これらをリードする若手研究者を育成する。また，最先端研究の現場を大学院教育にも広く開放し，次世代の学術研究を担う人材を育成する。加えて，自然科学研究が明らかにした自然が持つ多彩かつ深遠な世界を社会に向けて発信し，市民の広い関心と学術研究への理解を得る。さらに，若い世代の理科への関心を促す出前授業を行うなど，社会的な貢献も積極的に実施する。

本機構は以上を基本的なミッションとし，機構長のリーダーシップの下，急速に進む世界の研究状況下にあって先導的な役割を果たすべく，不断の組織改革や DX による研究システム改革等を通じて，新しい時代に向けた共同利用・共同研究機能強化を図る。

特に，第４期中期目標期間においては，国内外における異分野連携活動の促進，これらを支える研究者の多様性の確保，大学との組織的連携ネットワークを通じた大学研究力強化への貢献，IR による共同利用・共同研究の戦略的推進，研究データの集約化によるデータ駆動型サイエンスへの展開，等を重点的に進める。

これらを推進する体制整備のひとつとして，新分野創成センターの役割を見直し，各機関の枠を超えた異分野連携による新分野の創成に加え，基礎研究から生まれた新たな「知」の持つ社会貢献への可能性を追求する。また，異分野連携研究を国際的に展開するため，国際連携研究センターの活動を更に推進するとともに，機関に研究者が互いに触発する交流空間を形成する。

さらに，本機構は，他の３つの大学共同利用機関法人及び国立大学法人総合研究大学院大学とともに「一般社団法人 大学共同利用研究教育アライアンス」（以下「アライアンス」という。）を設立し，同アライアンスが企画する取組に参画することにより，異分野融合による研究力の強化や人材育成の充実，運営の効率化などの課題に対して，法人の枠組みを超えた取組を一層推進する。

◆　中期目標の期間

中期目標の期間は，令和４年４月１日から令和 10 年３月 31 日までの６年間とする。

Ⅰ　教育研究の質の向上に関する事項

１　研究

（１）各分野の学術研究を先導する中核拠点として，国際的な研究競争の激化や国際協力の進展等の動向を踏まえながら，大規模プロジェクトをはじめとした世界最先端の学術研究プロジェクト等の推進を図り，世界最高水準の研究成果を創出して，当該分野における我が国のプレゼンスを高める。①

（２）各分野の特性を踏まえつつ，学術的又は社会的な要請を踏まえた学術研究を戦略的に推進し，その卓越性を強化する。時代の変化にかかわらず，継承・発展すべき学問分野に対して必要な資源を確保する。②

（３）若手，女性，外国人など研究者の多様性を高めることで，知の集積拠点として，また各分野の研究者コミュニティの中核として，持続的に新たな価値を創出し，発展し続けるための基盤を構築する。⑤

２　共同利用・共同研究

（４）実験施設，研究設備，情報インフラ・データ基盤等の研究基盤について，ユーザーのニーズを的確に把握し，かつ，関係機関との連携・分担等を考慮した上で，高度化，利用の利便性向上，研究の DX への対応等を適切に進め，共同利用機能の充実を図る。⑥

（５）文献，標本，バイオリソース等をはじめとした学術資料について，学術的価値を踏まえた適切な保存・維持管理を行うとともに，関係機関との連携・分担を考慮しつつ，強みを持つ分野の資料，利用ニーズの高い資料等の収集・整備を戦略的に進めるなど，共同利用機能の充実を図る。

各分野における共同利用・共同研究体制の中核機関として，データ駆動型サイエンス・オープンサイエンスの基盤となるデータの収集，公開・提供，利活用等への対応について，方針を明確化し，戦略的な対応を図る。⑦

（６）各分野における研究コミュニティの中核として，新たな課題に対応するための研究者グループの組織化等を支援・促進するとともに，組織的連携の拡充，クロスアポイントメントによる人的交流の拡大など，大学等との組織間ネットワークの強化を図る。さらに，これらのネットワークを活用し，本機構が包含する自然科学分野における大学の研究力強化にも貢献する。また，競争力の高い海外の研究機関等との連携構築を戦略的に推進し，これら機関との研究者交流等を促進する。

異分野融合の促進等をも視野に入れ，大学の共同利用・共同研究拠点との連携による共同利用・共同研究機能のネットワーク化を推進する。⑩

３　教育・人材育成

（７）総合研究大学院大学との緊密な連係･協力による大学院教育について，大学共同利用機関が有する優れた研究環境を活用し，他大学の大学院教育との差別化，個々の学生のニーズへのきめ細かな対応等により，その強みを伸ばし，優秀な学生の獲得につなげる。連携大学院制度，特別共同利用研究員制度等による大学院教育への協力について，受入れ学生に対し，先端的・国際的な共同研究への参加機会を積極的に提供するなど，各大学共同利用機関の特色を活かした教育の充実を図る。⑫

（８）ポストドクター等の若手研究人材について，その育成方針を明確化し，多様な経験機会を付与しつつ実践的な研究指導を行うなど，大学共同利用機関の研究環境を活かした人材育成の充実を図る。また，最先端の研究活動を支援する URA など高度専門人材の育成を図る。これら人材の研究者としてのキャリアパス形成を支援する。⑬

４　社会との共創

（９）産業界との連携による研究開発の推進について，研究者個人ベースでの受託研究・共同研究等に留まらず，組織対組織の連携の強化，オープンイノベーションの推進等に向けた取組を進める。特許等の知的財産の戦略的活用も視野に入れつつ，研究成果を活用する事業者への技術移転等の取組を進める。⑭

５　その他教育研究の質の向上に関する重要事項

（10）社会が大きく変化する中，機関等の垣根を超えた組織体制の見直しを不断に行い，柔軟かつ機動的な組織の改編・整備を推進する。異分野融合による研究力強化や人材育成の充実，運営の効率化などの課題に対し，法人の枠組みを超えた対応を進める。⑯

II　業務運営の改善及び効率化に関する事項

(11) 内部統制機能を実質化させるための措置や外部の知見を法人経営に生かすための仕組みの構築，機構内外の専門的知見を有する者の法人経営への参画の推進等により，機構長のリーダーシップのもとで，強靭なガバナンス体制を構築する。⑰

(12) 大学共同利用機関の運営について，研究者コミュニティの意見を効果的に取り入れるとともに，その運営状況について積極的な情報発信を行うなど，開かれた運営の推進を図る。⑱

(13) 大学共同利用機関等の機能を最大限発揮するための基盤となる施設及び設備について，保有資産を最大限活用するとともに，法人全体のマネジメントによるスペース配分や設備の整備・共用等を戦略的に進めるなど，効率的な整備・運用の推進を図る。⑲

III　財務内容の改善に関する事項

(14) 公的資金のほか，寄附金や産業界からの資金等の受入れを進めるとともに，適切なリスク管理のもとでの効率的な資産運用や，保有資産の積極的な活用，研究成果の活用促進のための出資等を通じて，財源の多元化を進め，安定的な財務基盤の確立を目指す。併せて，目指す機能強化の方向性を見据え，その機能を最大限発揮するため，法人内及び機関内の資源配分の最適化を進める。⑳

IV　教育及び研究並びに組織及び運営の状況について自ら行う点検及び評価並びに当該状況に係る情報の提供に関する事項

(15) 外部の意見を取り入れつつ，客観的なデータに基づいて，自己点検等の活動に取り組み，自らの強み・特色と課題等を可視化するとともに，それを用いたエビデンスベースの法人経営を実現する。併せて，経営方針や計画，その進捗状況等に留まらず，研究教育の成果と社会発展への貢献等を含めて，ステークホルダーに積極的に情報発信を行うとともに，双方向の対話等を通じて法人経営に対する理解・支持を獲得する。また，市民に対するアウトリーチ活動を通じ，科学的リテラシーの涵養を図るとともに我が国の知的基盤の向上を推進する。㉑

V　その他業務運営に関する重要事項

(16) 多様なデジタル技術の適切な活用や，マイナンバーカードの活用等により，業務全般の継続性の確保と併せて，機能を高度化するとともに，事務システムの効率化や情報セキュリティ確保の観点を含め，必要な業務運営体制を整備し，デジタル化を推進する。㉒

9-8　大学共同利用機関法人自然科学研究機構第４期中期計画
（Ⅵ以降を省略）

Ⅰ　教育研究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］自然科学分野の学術研究を先導する中核拠点として，世界最先端の学術研究を推進し，世界最高水準の研究成果を創出して，当該分野における我が国のプレゼンスを高める。

評価指標	［1-1］第４期中期目標期間中に 9,000 編以上の論文を発表する。 ［1-2］Top10% 論文の割合 12% 以上を維持する。 ［1-3］国際共著論文の割合 57.4% 以上。

［２］天文学分野では，宇宙の構造の進化と元素の起源を解明するため，ハワイ島マウナケア山頂に設置した口径 8.2m の大型光学赤外線望遠鏡「すばる」を安定して運用しつつ，機能強化を段階的に行う（「すばる２」計画）。超広視野多天体分光器（PFS）を用いた本格観測を開始し，超広視野撮像及び多天体分光による大規模サーベイ観測を中心に国際共同利用研究を推進し，高品質なデータを供する。口径 8m 以上の望遠鏡の中で最も広い視野を持つ強みを活かし，世界最先端の衛星プロジェクトや地上望遠鏡プロジェクトと連携し，宇宙の大規模構造の進化や元素の起源について他の追随を許さない研究を展開する。

評価指標	［2-1］すばる望遠鏡全体の高い論文生産性（年平均 145 編以上）を維持するとともに，第３期中期目標期間以上の高いインパクト（Top10% 論文の割合 16% 以上）を目指す。 ［2-2］超広視野多天体分光器（PFS）をすばる望遠鏡に搭載して，科学観測を開始し（令和５年度），データ解析用ソフトウェアを公開する。第４期中期目標期間終了までに，PFS を用いた大規模サーベイ及び共同利用観測を総計 240 夜以上実施する。 ［2-3］超広視野主焦点カメラ（HSC）を用いた大規模銀河探査データより，宇宙における暗黒物質の３次元地図をこれまでの約８倍以上に拡大し，宇宙論パラメータをより高い精度（推定誤差 2% 以下）で求める。 ［2-4］重力波イベントを含む突発現象を迅速に追跡観測できるように，観測課題の動的割付（キュー観測）システムを拡張し，HSC の共同利用観測時間の 1/2 以上（これまでは 1/4 以下）に適用して運用する。

［３］天文学分野では国際共同事業として以下を進める。

・惑星誕生の現場と生命素材を含む宇宙における物質の進化を解明するため，日米欧共同で南米チリに設置したアタカマ大型ミリ波サブミリ波干渉計（アルマ望遠鏡）の国際共同運用を継続し，科学観測を推進する。東アジア地域の中核機関として最大限の観測時間を利用可能とし，高品質なデータを供する。並行して，アルマ望遠鏡の機能強化を段階的に行う。

・太陽系外の地球型惑星における生命の存在や宇宙で最初の天体の形成など，天文学における人類のフロンティアを開拓するため，既存の望遠鏡を凌駕する解像力と感度をもつ口径 30m の超大型光学赤外線望遠鏡（TMT）の建設事業を，日本・米国・カナダ・インド・中国の５ヶ国と共同で推進する。日本が分担する研究開発部分について，本格的製造・製作に向けた準備を行い，製造・製作を推進するとともに，運用期に向けた共同利用・共同研究の準備を行う。

評価指標	［3-1］アルマ望遠鏡の運用を継続し，その貢献割合に応じた観測時間割合を東アジアの科学者コミュニティに確保することで，アルマ全体（年平均 300 編以上）及び東アジア（年平均 60 編以上）の論文生産性を維持する。 ［3-2］アルマ望遠鏡の最も低い周波数帯域を観測するバンド１受信機（66 台）を国際協力によりアルマ望遠鏡へ搭載し，令和５年度までに試験観測を実施，令和６年度までに共同利用の募集を開始し，令和７年度までに共同利用観測を開始する。 ［3-3］アルマ望遠鏡について，現在より約２倍高い解像度（約 5 ミリ秒角）を達成する。 ［3-4］日本が研究開発を分担する TMT の望遠鏡本体構造，主鏡分割鏡，第一期観測装置の３つ全てについて，製造・加工に着手するために必要となる「製造前審査」に第４期中期目標期間中に合格する。 ［3-5］ 2030 年代の TMT 完成後の科学運用期に向けて，第４期中期目標期間中に以下を実施する。すばる望遠鏡との一体的運用のあり方を含めた，国立天文台としての TMT の科学運用・観測装置計画について，国立天文台 TMT 科学諮問委員会における審議を踏まえて計画書として取りまとめ，公表する。さらに同計画書の内容を，共同利用運用体制の構築，観測装置の基礎技術開発，データ解析・アーカイブシステムの開発に反映させる。

［４］核融合科学分野では，高温プラズマの中心的な課題（プラズマ中の乱流・構造形成，電磁流体不安定性，高エネルギー粒子の振る舞い，プラズマとその対向材料との相互作用等）について，特に磁場構造の対称性や３次元性に注目して，実験と理論シミュレーションの連携と国内外の研究機関との共同研究により，それらの物理機構の解明を行う。研究者コミュニティの合意形成及び核融合研究の学際化に向け主導的な役割を担い，実験装置，超高速計算機，統合解析システム，シミュレーションコード等を活用・整備・拡張し，世界最先端の学術研究を多角的に推進する。

評価指標	［4-1］核融合科学に関する共同研究・共同利用に基づく学術論文の発表件数を第４期中期目標期間中に年間 200 編以上に，及びジャーナルの種類を第４期中期目標期間中に年間 40 種類以上に増加させる。

［１］自然科学分野の学術研究を先導する中核拠点として，世界最先端の学術研究を推進し，世界最高水準の研究成果を創出して，当該分野における我が国のプレゼンスを高める。（再掲）

評価指標	［1-1］第４期中期目標期間中に 9,000 編以上の論文を発表する。 ［1-2］Top10% 論文の割合 12% 以上を維持する。 ［1-3］国際共著論文の割合 57.4% 以上。

［５］本機構がカバーする各分野の特性を踏まえつつ，学術的又は社会的な要請を踏まえた学術研究を戦略的に推進するため，機構直轄センターにおいて，各機関も交え，異分野融合・新分野創成を目指した国際的共同研究を推進する。

評価指標	［5-1］機構直轄センターにおける異分野融合共同研究件数が第３期中期目標期間の実績数（参考：令和２年度までの延べ数 367 件）を上回ること。

［6］天文学の研究を推進するため，中小型望遠鏡，次世代観測装置，超高速計算機等の開発研究，整備及び運用を行う。プロジェクト間の連携も含めた柔軟な組織運営を推進するとともに，研究者コミュニティの合意形成に向けたコーディネート機能を担う。また，宇宙航空研究開発機構（JAXA）宇宙科学研究所主導のもと，日本の科学衛星・探査機の運用を継続するほか，将来の科学衛星や飛翔体に搭載する高度な観測装置の開発，そ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。

評価指標	［6-1］天文学専用の共同利用計算機システムの性能向上と定常的かつ安定な運用を行い，論文数 100 編／年を超える水準を維持する。 ［6-2］大型低温重力波望遠鏡 KAGRA の感度向上を進めつつ，国際共同観測に参加し，重力波を検出する。 ［6-3］JAXA 火星衛星探査計画（MMX）において，「測地チーム」を統率し，測地プロダクト（形状モデル等）獲得のための科学観測運用シミュレーションを，高・低高度について各１回以上，衛星打上げ前に実施する。取得データの分析から，火星衛星の内部構造探査に貢献する。

［7］国立天文台において，日の出・日の入りなど市民生活に直結した暦などの天文情報を提供する。また，天文観測に適した環境を保護するための活動を行う。

評価指標	［7-1］暦を計算し編纂する，すなわち「暦要項」，「暦象年表」を毎年着実に作成・公表する。ウェブページ等を通じて暦に関する情報を提供する。 ［7-2］天文観測環境を保護する「周波数資源保護」業務の着実な実施と，本業務の社会への発信状況。（第３期中期目標期間では周波数資源保護業務を開始し，ウェブページで随時活動を報告。第４期中期目標期間においてはさらに，本業務に対する社会からのフィードバックを集めるフォームを構築し，受け付けた意見を業務へ反映，社会へ発信する双方向性の流れを作る。）

［8］核融合科学分野において，高度な極限技術の複合系である核融合システムの実現に向けた課題について学際化に取り組み，技術の普遍化を図る。そのために，特に，大型高磁場超伝導マグネット，超高熱流プラズマ対向機器，中性粒子ビーム入射加熱等に関わる核融合科学研究所が有する先端的中核試験設備の高度化を進め，国内外の研究機関との共同研究を推進する。これにより，高効率核融合炉の設計に資するとともに，関連研究分野との連携を強化し，広く科学技術の基盤醸成に貢献する。

評価指標	［8-1］核融合科学研究所が有する核融合工学分野の先端的中核試験設備を用いた研究を基にした，核融合科学研究所による論文の発表数について，第４期中期目標期間中における論文数を累計 60 編以上（年間 10 編程度），国際共著論文，累計６編以上，Top10% 論文，累計６編以上に増加させる。 ［8-2］超高熱流プラズマ対向機器の技術開発を推進し，１平方メートルあたり３万キロワット以上の定常（10 分以上）熱負荷に耐える高熱流束機器を設計・製作する。また，製作した機器の性能を検証することで，先進材料の極限性能を解明する。

［9］核融合科学分野において，発電のみならず，大規模・安定な水素製造も可能とする核融合炉の概念の構築とそれに必要な技術の高度化を進めるとともに，水素の効率的利用に関連する学術研究を推進するなど，エネルギーの高効率利用に核融合極限技術を適用し，広くエネルギー科学研究を展開することにより，水素エネルギー社会・カーボンフリー社会の実現に貢献する。

評価指標	［9-1］定常核融合炉設計や水素がキーワードとなる研究を基に，核融合科学研究所による論文の発表数について，第４期中期目標期間中に年間６編以上に増加させる。 ［9-2］液体水素を用いた高温超伝導システムの安定な冷却の原理検証のため，マグネットの過渡的熱負荷増大に対する液体水素の冷却応答特性を詳細に調べ，超伝導技術の高度化を進める。

［10］基礎生物学研究分野において，生命現象の基本原理を解明するために，細胞の構造・機能・組織化・相互作用・情報伝達，発生・分化・再生，神経系の働きや行動の制御，環境適応，多様性，共生，進化等の機構を研究し，基礎生物学のフロンティアを開拓する。

評価指標	［10-1］第４期中期目標期間中に，第３期中期目標期間を上回る 780 本以上の論文を発表する。

［11］基礎生物学研究分野において，遺伝子やタンパク質解析技術，ゲノム編集技術，シングルセル解析技術，多様な先端顕微鏡によるバイオイメージング技術等の最先端技術の開発導入や新規モデル生物の開発を進めるとともに，AI やビッグデータを活用した人と機械の協働作業による新しい発見，思考を行うプラットフォームを確立する。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超階層生物学センターへ改組し，遺伝子から個体群に至る様々な階層を超えた統合的な解析による「超階層生物学」を推進し，世界を先導する独創的な生物学研究を行う。

評価指標	［11-1］生物機能解析センター，モデル生物研究センター，及び新規モデル生物開発センターを改組し，超階層生物学センターを設立する。 ［11-2］研究費を支給する超階層生物学共同利用研究を新設して公募し，毎年３件実施する。 ［11-3］超階層生物学に関する研究会とトレーニングコースをそれぞれ年１回開催する。

［12］生理学分野の，分子・細胞・細胞群・器官・システム・個体間の各階層において，機能メカニズム及び構造機能連関に関する研究を推進する。また，階層間の連結，器官間の機能協関，さらには神経系と免疫系など異なる機能システム間の連関を追求することにより，生命機能の成り立ちと恒常性の維持に関する理解を促進する。さらに，基礎生理科学・神経科学の確固たる知見の提供により，臨床医学との架け橋研究の基盤形成に貢献する。

評価指標	［12-1］「生体の各階層における生命現象の機能メカニズム」，「生体の階層間・臓器間・機能システム間の連関に基づく生体恒常性維持のメカニズム」，「生体の機能メカニズムの破綻による病態現象」の３つの範疇において，新知見を論文として発表し，第４期中期目標期間全体における全当該論文中の Top10% 論文の割合を 12.8% 以上に，国際共著論文の割合を 36.8% 以上に維持する。

［13］生理学分野において，時系列細胞現象計測等の専門性の高い重要な方法論を継承するとともに，分野間連携等により機能生命科学の新展開を図る。すなわち，理工系分野等との連携により，研究の推進・変革に寄与しうる現象計測・機能操作技術の新しい方法論や研究ツール等を開発し，生命科学研究に適用する。他機関との協力により MRI 脳画像等のデータベース構築の基盤技術を開発する。文理融合を推進すること等により，ヒト及び非ヒト霊長類動物の高次脳機能の理解を促進する。

評価指標	［13-1］「時系列細胞現象解析の専門技術を継承する室の運営と，その技術の共同利用研究への提供」に関して，時系列細胞現象解析室の研究教育職員が貢献した共同利用研究の年平均実施件数３件を達成する。 ［13-2］「分野間連携に基づいた，新たな計測技術や機能操作技術等の開発」に関して，第４期中期目標期間中に当該技術の原理や方法論に関する論文３報以上を発表する。 ［13-3］「MRI 脳画像等のデータベース構築の基盤技術に関する開発」に関して，開発の達成を示す構築したデータベースの設計図，管理システム，及び全体像の概略を提示する。 ［13-4］「ヒト及び非ヒト霊長類動物の高次脳機能のメカニズムやその種間比較等」の新知見を論文として発表し，第４期中期目標期間全体における当該論文中の Top10% 論文の割合を 12.8% 以上に，国際共著論文の割合を 36.8% 以上に維持する。

［14］分子科学分野では，計算科学手法の開発と活用，光を用いた先端的な研究手法や光源の開発，そして新規分子・物質の設計やそれらの高度集積化を通して，原子・分子・生命システムが示す多様な構造，物性，反応性，触媒能，エネルギー変換などの高次機能や動的構造を解明するとともに，新たな現象や有用な機能の設計と制御に取り組む。

評価指標	［14-1］先端的学術研究を次の５項目にわたって戦略的に推進し，うち３項目以上において，原著論文や総説を項目あたり 130 本以上公表する。 ・機能性材料の物性評価と高度な電子状態理論による解析 ・新規物性観測設備と先端的光源・分光法の開発 ・凝縮相原子・分子系が示す量子動力学現象，反応，物性及び秩序形成ダイナミクスの解明 ・有機分子を基盤とした新しい反応システムや機能性デバイスの開拓 ・分子システムの高次機能発現，作動原理，設計原理の探究

［15］アストロバイオロジーセンターでは，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研究を推進し，アストロバイオロジー分野の国際的研究拠点を形成し，ハビタブル系外惑星の発見及び特徴づけなどで世界的成果を上げるとともに，生物系との分野融合的研究を推進し，当該研究拠点の国際化を進める。

評価指標	［15-1］観測遂行夜数を毎年 100 夜以上とする。 ［15-2］第４期中期目標期間末までに地球型惑星の発見確認数を 10 個以上とする。 ［15-3］外国人研究者割合 20% 以上を維持する。 ［15-4］第４期中期目標期間末までに生物系研究者割合を 35% 以上とする。 ［15-5］大学共同利用件数，若手研究者派遣数を毎年それぞれ 30 件以上とする。 ［15-6］アストロバイオロジーセンターにおける Top10% 論文の割合 12% 以上。

［16］生命創成探究センターでは，「みる・よむ・つくる」の３つ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，生命の本質に迫る研究を展開する。

評価指標	［16-1］多様な分野の研究者や若手研究者とともに，物質と生命の境界探査，細胞アトラスの編纂，生命体のシミュレーション，ネオ生命体の創成等を目指した研究プロジェクトを４課題以上推進する。また，大学の共同利用・共同研究拠点等との連携による分野融合研究を４課題以上実施する。これらの成果として論文・総説・国際学会招待講演の総数 120 件以上。

［17］若手研究者比率を維持するとともに，女性研究者･外国人研究者の一層の雇用と研究者の流動性を高めるため，これまで行ってきた研究環境整備を一層進めるとともに，十分に活用する。女性研究者の活躍を推進するため，男女共同参画推進に関するアクションプランを着実に実行する，女性研究者限定公募を実施するなどにより，女性研究者の割合を引上げる。

評価指標	［17-1］若手研究者比率 35% 以上を維持する。 ［17-2］外国人研究者比率を第４期中期目標期間末までに 12% 以上とする。 ［17-3］女性研究者の割合を第４期中期目標期間末までに 17% に引上げる。

［18］国内外の大学・研究機関と連携し，国際的に卓越した若手研究者を育成するための支援を強化する。さらに，若手研究者が分野を超えた研究を推進するための事業を実施する。また，現在実施している「自然科学研究機構若手研究者賞」について，対象を共同研究者にも拡大する。

評価指標	［18-1］若手研究者による分野を超えた共同研究を第４期中期目標期間中に 60 件以上実施する。 ［18-2］第４期中期目標期間において，若手研究者を国内外の研究機関へ計 30 名以上派遣する。 ［18-3］若手研究者賞の対象枠を広げ，毎年最大５名の受賞者を顕彰する。

２　共同利用・共同研究に関する目標を達成するための措置

［19］研究設備等の利用の利便性向上のため，大学連携研究設備ネットワーク事業を継続的に実施するとともに，対象とする分野の拡大に向け事業を推進する。さらに，技術職員の育成に向けた研修等を通して，機関の枠を超えた技術者支援を実施し，大学も併せた研究基盤の強化を図る。

評価指標	［19-1］登録数 3,000 件以上を維持する。 ［19-2］第４期中期目標期間において，計 60 回以上の技術講習会（研修動画の活用を含む）を開催する。

［20］各機関・センターにおいて，ユーザーのニーズを把握しつつ，研究設備の高度化，利用の利便性の向上を図ることによって，共同利用・共同研究機能を強化し，優れた研究成果を上げる。

評価指標	［20-1］本機構において年間２設備以上を高度化する（遠隔化，自動化など）。

［21］生命科学における重要なツールである電子顕微鏡（Cryo-EM・3D-SEM），光学顕微鏡（二光子・超解像），MRI（7T・Dual）について，アップデートした機器の提供，国内外ネットワークとの連携による協力，関連機器の複合的利用の促進等により，ユーザーの利便性を高め，分子・細胞レベルから神経回路・個体レベルまでの多階層を総体としてシームレスにカバーするイメージング共同研究を推進する。
また，動物資源共同利用研究センターについて，動物の飼育に留まらず，多階層生理機能の解析のための場所，装置，技術，及びバイオリソースの提供を行うことによりユーザーの利便性を高め，共同利用研究を新たに実施する。

評価指標	［21-1］7T-MRI の共同利用率の年平均値 75% を維持する。 ［21-2］3D-SEM をアップデートし，第４期中期目標期間中早期にユーザーの利用に供することにより，共同利用研究件数の年平均値 15 件を維持する。 ［21-3］位相差を含む低温電子顕微鏡を用いた共同利用研究の実施件数の年平均値６件以上を達成する。 ［21-4］動物資源共同利用研究センターを利用した共同利用研究を開始し，初年度の年間実施件数を基準として，第４期中期目標期間の６年間で 20% 以上の増加を達成する。

［22］幅広いアプローチ（BA）活動等の国家事業において整備されつつある，時代の先端を行く高度な大型機器を，大学と共同利用することにより，世界最先端の研究を実施するとともに，上記国家事業の成就に貢献する。

評価指標	［22-1］共同研究の拡充等による，BA 活動等の国家事業に関する共同研究の実施課題数と参加大学数を，第４期中期目標期間中に第３期中期目標期間末（令和３年度実績７課題・９大学）と比べて 1.5 倍以上とする。 ［22-2］共同研究により大学及び核融合科学研究所から BA 活動等の国家事業への貢献を明記した論文の発表数を，第４期中期目標期間中に第３期中期目標期間末（参考：令和２年度実績５編）と比べて 1.5 倍以上とする。

［23］共同利用率の高い UVSOR の計測機器や各分野において世界トップクラスの性能を持つ当該分野専用のスーパーコンピュータ等の高度化を通して，共同利用機能の更なる充実を図るとともに大学の研究力強化に資する。

評価指標	［23-1］UVSOR については，世界トップクラスの光電子運動量顕微鏡（スピン状態イメージングを可能とする実機）を開発し，第４期中期目標期間終了時までに国際的な協力研究を３件以上行う。 ［23-2］分野に特化した専用のスーパーコンピュータについては，第４期中期目標期間前半に更新を行い，実アプリケーション実行性能を２倍以上とする。 ［23-3］スーパーコンピュータの計算資源の共同利用率を第３期中期目標期間と同じ高水準（100%）に維持する。

［24］機構内各分野において共同利用・共同研究で得られたデータを収集・保有・維持する方針を決定・運用する。運用に当たっては大学共同利用研究教育アライアンスを通じて情報システム研究機構のデータサイエンス共同利用基盤施設等との連携を図り，分野の特徴にあったデータ解析手法の開発を進める。共同利用・共同研究で得られたデータをもとに，その学術的価値と研究データ管理等を鑑みた保管や公開・提供，利活用等について検討を行い，データ駆動型サイエンスやオープンサイエンスへの活用も含めた運用や体制を整える。

評価指標	［24-1］令和５年度末をめどに機構内各分野において共同利用・共同研究で得られたデータを収集・保有・維持する方針を決定し，収集を開始する。第４期中期目標期間終了時までにデータマイニング等による新たな知見を獲得する。

［25］貴重な生物資源の保存活動として大学連携バイオバックアッププロジェクト（IBBP）を運営し，国内外の研究者コミュニティに持続的かつ発展的に共同利用・共同研究の機会を提供する。また，研究者コミュニティの要望に応え，ナショナルバイオリソースプロジェクトを適切に受け入れる。さらに，バイオイメージング技術や次世代シーケンス等より生み出される膨大なデータを格納するサーバーとネットワーク環境等の整備を行い，共同利用・共同研究を推進する。

評価指標	［25-1］IBBP は毎年 80 件の取扱件数を維持する。 ［25-2］ナショナルバイオリソースプロジェクトを毎年４件受け入れる。

［26］高温核融合プラズマから低温応用プラズマ，天体プラズマ等のあらゆるプラズマ現象の共通基礎過程である原子分子素過程を記述する基礎的な原子分子データを基礎研究による生産と検証によって整備・充実させ，データ登録数が世界トップクラスである衝突断面積等数値データベースを強化する。これらを活用した学際的なプラズマ研究，異分野融合研究を国内・国際的共同研究として展開，推進する。

評価指標	［26-1］原子分子データベースに登録されているデータ件数を，第４期中期目標期間中に第３期中期目標期間末（参考：令和２年度実績 822,961 件）と比べて 10% 以上増加させる。また，データベースへのアクセス数を，第３期中期目標期間の水準（年間平均アクセス数 2,345 回）以上とする。 ［26-2］原子分子データに関連する共同研究課題数及び共同研究による共著論文数を，第４期中期目標期間中に第３期中期目標期間実績から 5% 以上増加させる。

［27］研究コミュニティの中核として，新たな課題に対応するための研究者グループの組織化等を支援･促進するため，DX プラットフォームを活用したエビデンス（IR）に基づくマッチング方式を導入し，特に，大学との協働による機関・分野を超えた異分野融合･新分野創成研究，他分野との協働による他分野の手法を取り入れた従来にない先端研究を促進する。実施に当たってはオープンラボ，分野融合型共同研究事業等を活用する。

評価指標	［27-1］DX プラットフォームを活用したマッチング方式を導入し，第４期中期目標期間中に 20 件のグループを形成する。 ［27-2］同方式により形成されたグループの共同研究を第４期中期目標期間中に 10 テーマ以上採択する。

［28］組織的連携の拡充，クロスアポイントメント・サバティカル・在籍出向等による人的交流の拡大等により，大学等との組織間ネットワークを発展させる。特に「自然科学大学間連携推進機構（NICA）」についてはアライアンスのもとで展開し，参画大学数を拡大させる。NICA を含む国内外のネットワーク事業は，各機関において既に形成されたものをベースにその拡充を図る。特にマルチメッセンジャー天文学やバイオイメージングにおいて海外との連携を一層強化する。

評価指標	［28-1］クロスアポイントメント実施件数を第３期中期目標期間実績（令和３年度実績 18 名）の 1.2 倍以上とする。 ［28-2］現存の国内外のネットワーク事業９件について，その参画機関数を第３期中期目標期間以上に増加させる。 ［28-3］ネットワーク形成に向けた勉強会・ワークショップを第４期中期目標期間中に 30 回以上実施する。

［29］異分野融合の促進，強みのある分野の更なる強化等をも視野に入れ，共同利用・共同研究拠点との連携による共同利用・共同研究機能のネットワーク化を推進する。

評価指標	［29-1］現在は構築されていない，共同利用・共同研究拠点との連携による共同利用・共同研究機能のネットワーク化を，第４期中期目標期間中に２件以上実施する。

［30］国際交流協定等に基づき，国際的な研究者交流事業や共同研究事業を推進するとともに，特に競争力の高い海外の研究機関との連携構築を戦略的に推進している国際連携研究センター（IRCC）において，世界的戦略事業を促進する。海外の研究機関との連携構築の一環として実施しているドイツ学術交流会を介した研究者交流事業を継続し，国際共同研究を支援する。

評価指標	［30-1］国際共著論文の割合 57.4% 以上。 ［30-2］第４期中期目標期間最終年度における国際共同研究実施件数について，第３期中期目標期間末（参考：令和２年度実績 248 件）での実績を上回る。 ［30-3］第４期中期目標期間における国際協定数について，第３期中期目標期間での実績（参考：令和２年度実績 105 件）を上回る。

３　教育・人材育成に関する目標を達成するための措置

［31］大学共同利用機関が保有する，大学にはない最先端の大型機器やスーパーコンピュータ等，大学共同利用機関でしか供することのできない研究設備・資料，大学では不可能な複数の指導教員，非常に頻繁に行われている国際共同研究・各種の国際研究集会・国際人材交流等，大学にはない優れた研究環境を総合研究大学院大学（総研大）の教育に提供して，総研大の特色ある学位プログラムの遂行を支援し，世界の第一線で活躍できる自立した研究者を育成する。受入れ学生に対し，国際的な研究集会に派遣することなどを実践し，幅広い国際的な視野を持つ人材の育成を図るとともに，リサーチアシスタント制度等により支援する。また，これらの施策について社会に分かりやすく発信し，優秀な総研大生の獲得につなげる。

評価指標	［31-1］本機構所属総研大院生に対し，全ての学生が在籍中に１回以上国際会議・ワークショップ等へ派遣されることを支援する。 ［31-2］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。

［32］大学院教育の充実に貢献するため，特別共同利用研究員制度，連携大学院制度，インターンシップ制度等により，国内外の学生等を積極的に受け入れる。また，総研大生に独自に供しているものと同じ研究環境のもとで教育研究を実施し，世界の第一線で活躍できる若手研究者を育成する。

評価指標	［32-1］以下の項目に関し，いずれも第４期中期目標期間最終年度において，第３期中期目標期間末での実績を上回ること。 ・特別共同利用研究員制度，連携大学院制度等による受入学生数（令和３年度実績 90 人） ・国外インターンの受入数（参考：令和２年度実績６人）

［33］ポストドクター等の若手研究人材の育成の一環として，分野を超えた研究を促進するための支援を行う。機構のコアコンピタンスとなる優秀な研究者を育てるとともに，PI として大学へ輩出することを推奨することで流動化を促進し，大学の研究力強化にも貢献する。また，研究活動を支援する URA など高度専門人材を育成するための研修を行う。

評価指標	［33-1］若手研究者を PI とした分野を超えた共同研究を第４期中期目標期間中に 60 件以上実施する。 ［33-2］URA など高度専門人材向け研修を第４期中期目標期間中に６回以上実施する。

４　社会との共創に関する目標を達成するための措置

［34］本機構の研究シーズの発信等や産業界等との交流の場を設けることにより，産業界の理解を深めるとともに，産業界との連携を強化する。民間企業等との組織対組織の包括的な協定を締結し，その協定のもとで連携して共同研究及び人材育成を実施する。また，知的財産の戦略的活用を鑑み，研究者に対する産学連携研修を実施する。

評価指標	［34-1］産業界等との交流の場を第４期中期目標期間中に 12 回以上実施する。 ［34-2］機構の有する研究成果を活用し，社会実装につなげるため，第４期中期目標期間終了までに，民間企業等との組織対組織の包括的な協定を１件以上締結し共同研究を行う。 ［34-3］第４期中期目標期間において，新たに研究者に対する産学連携研修を実施する（１回以上／年）。

５　その他教育研究の質の向上に関する重要事項に関する目標を達成するための措置

［35］研究活動をグローバル・アジェンダに結びつけるため，学術研究の進化に加え，社会的ニーズや地球規模の課題解決に向けた基礎研究の可能性を強く展開する必要がある。そのため，従来の研究領域の枠組みを越えて新たな研究領域を開拓する新分野創成に加え，共同利用・共同研究で得られたデータの分析等を「知る」から「利活用」へと進化させ，研究課題や社会課題へ対応する基盤の創出，次世代研究への発展に向けた分野融合総合知の検討等を集結することにより，新分野創成センターを改組し，研究の進化展開を推進する。

評価指標	［35-1］令和４年度に新分野創成センターを再構築し，「知の共創センター（仮称）」として新たな体制を整備する。令和５年度までに，「知の共創センター（仮称）」に「Research Commons 部門（仮称）」を設置し，共通基盤手法の検討を開始する。第４期中期目標期間終了までに，検討・開発を行った共通基盤手法について検証・評価を行う。

［36］４大学共同利用機関法人と総合研究大学院大学が設立する一般社団法人「大学共同利用研究教育アライアンス」を活用し，大学執行部との対話，異分野融合研究促進，共同利用・共同研究成果の活用，各種研修の共通化，等について取り組む。

評価指標	［36-1］「大学共同利用研究教育アライアンス」において以下の活動成果を上げること。 ・現在の NICA の事業をアライアンスの「大学連携プラットフォーム」を通じて展開し，参画大学数を 13 機関から拡大する。 ・異なる分野の研究者の交流の場を年１回企画・実施する。 ・全国の大学の研究者を対象とした「分野融合型共同研究」を実施し，年間 10 件程度の課題を採択し支援する。 ・機構の共同利用・共同研究で得られた成果等のデータを IR 用としてアライアンスに提供し，その結果をステークホルダーである大学に発信する。 ・４機構で共通する課題に対する研修をアライアンスのもとで連携して行い業務の効率化を図る。

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

［37］内部統制の機能の実質化を図るため，研究力強化推進本部の体制を充実させ，機構全体として施策の統制された円滑な実施を図る。また，機構内広報誌「NINSBulletin」を充実させ，機構内の情勢の他，機構を取り巻く情勢，機構・機関執行部の方針等を，機構全体に正確に伝達する。常設されている機構長選考・監察会議については，外部の知見を法人経営に生かすための仕組みとする。さらに，学界以外からの人材を法人経営に参画させる。これらにより，機構長のリーダーシップのもとで，内部統制のとれた強靭なガバナンス体制を構築する。

評価指標	［37-1］機構の研究力強化における機構長のガバナンスを強化するため，機構長が本部長を務める研究力強化推進本部において以下の改変を行う。 ・機構全体の研究の方向性を決定する「企画戦略室」を令和４年度に新たに設置する。 ・同室の下に URA をリーダーとする６つの戦略チーム（共同利用・共同研究，研究・経営戦略分析，ダイバシティー推進，アウトリーチ，外部連携，国際連携）を配置する。（令和５年度までに完了） ・６つの戦略チームは横断的に各機関の戦略室と連携し，機関内の研究戦略に反映，これを支援する。 ［37-2］第４期中期目標期間中に研究者コミュニティに属していない民間企業経験者による外部理事を１名登用する。 ［37-3］機構内広報誌「NINS Bulletin」を第４期中期目標期間中に 24 回以上発行する。 ［37-4］機構長選考・監察会議の委員は，全員を外部委員とする。

［38］各機関，機構本部が開催する，運営会議，経営協議会，教育研究評議会は，各分野の研究者コミュニティを代表する委員が選出されていることから，これらの会議で，研究者コミュニティの意見を聞き，運営にフィードバックさせる。また，各機関は，関連する学会・主催する研究会等を利用して，研究者コミュニティの各層の意見を聞き，運営に活かす。運営会議，経営協議会，教育研究評議会の活性化に取り組み，これらの議事録を公開する。また，ホームページ，各種パンフレット，市民との対話等を活用して，積極的に運営状況の情報発信を行い，開かれた運営の推進を図る。

評価指標	［38-1］運営会議等の所内委員割合が 1/2 以下であること。 ［38-2］運営会議，経営協議会，教育研究評議会の議事録を確定後 30 日以内に機構ホームページにて公開する。 ［38-3］経営協議会，教育研究評議会及び機構長選考 ・監察会議の外部委員からの指摘事項等への対応を毎年度５件以上行う。 ［38-4］機構ホームページの閲覧数が第３期中期目標期間の実績を上回ること。

［39］施設・設備の安全性・信頼性を確保し，所要の機能を長期間最大限発揮するため，インフラ長寿命化計画を核とした計画的な維持・保全・整備を行う。また，機構の施設マネジメント・ポリシーに基づき，使用状況・使用状態を把握・評価し，戦略的に，効率的かつ効果的なスペースの確保・運用・再配分を実現する。

評価指標	［39-1］主要キャンパスの利用状況調査を年１回以上実施し，第４期中期目標期間終了までに共同利用スペースを保有面積の 30% 以上とする。 ［39-2］インフラ長寿命化計画（個別施設計画）に基づき維持・保全・整備が実施されていること。

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

［40］大きな社会情勢の変化を迎えたポスト・コロナ時代における新たな共同利用・共同研究体制の確立に向け，研究環境のリモート化，DX 化を早急に進める。このための財源確保を目指し，機構本部，機関，研究者共に，新たな公的研究資金の提供に積極的に応募し，施設・設備の充実に努めるとともに，研究者の研究資金を確保する。公的資金のほか，産業界からの資金等の受入れを進めるとともに，専任の担当者を配置して，マーケティング調査等を実施し，寄附金の受け入れを促進する。また，効率的な資産運用や研究成果の活用促進のための出資等を通じて，財源の多元化を試み，自主的かつ安定的な資金の確保を目指す。併せて，研究の将来性を見据え，機能強化を図り研究成果を最大化するため，研究基盤戦略会議で策定した方針に従って，法人内及び機関内の資源配分の最適化を進める。

評価指標	［40-1］令和２年度に立ち上げた基金を活用し，寄附金の獲得に関する専任担当者を配置して戦略的な寄附獲得方針を検討する。第４期中期目標期間終了までに，検討した方針に基づき新たな寄附金（基金創設に伴って可能となる現物寄附や遺贈等）を獲得する。これらにより，第４期中期目標期間中に，第３期中期目標期間実績（参考：令和２年度までの５年平均 412,500,601 円）を上回る寄附金収入を獲得する。 ［40-2］土地・建物の使用料収入及び寄附金等余裕金を活用した利息収入を第３期中期目標期間比（参考：令和２年度までの５年平均 68,917 千円）で 10% 拡大させる。 ［40-3］機構長裁量経費を令和３年度比（令和３年度実績 1,375,975 千円）で 10% 拡大させる。 ［40-4］コンベンション施設等の保有施設の貸出件数を令和３年度比（参考：令和２年度実績 17,756 件）で 10% 拡大させる。

Ⅳ　教育及び研究並びに組織及び運営の状況について自ら行う点検及び評価並びに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

［41］各機関においては，第４期中期目標期間における事業等について，毎年自己点検を実施し，それを受けて国際的な外部評価を実施する。また，機構全体については，毎年中期目標・中期計画の自己点検評価を実施するとともにこれを公表する。さらに，令和７年度には４年間の総合外部評価を実施する。これらの評価により機構・機関の活動状況を可視化するとともに，外部の意見を取り入れ，評価結果等をエビデンスとして機構全体及び各機関の運営に反映させる。

評価指標	［41-1］各機関において毎年自己点検を実施し，その結果を公表。また，第４期中期目標期間中に，各機関それぞれ１回以上，国際的な外部評価を実施する。 ［41-2］機構では毎年中期目標・中期計画の自己点検評価を実施し，その結果を公表。また，令和７年度に外部委員のみで構成された外部評価委員会にて４年間の総合外部評価を実施し，その結果を公表する。 ［41-3］評価結果等をエビデンスとした運営の改善・反映がされていること。

［42］経営・運営方針や計画，その進捗状況，研究教育の成果と社会発展への貢献等は，ホームページや SNS 等のウェブコンテンツを活用することでより積極的に情報を配信する。また，大学・研究所等向け，一般市民向け，共同研究者向け，産業界向け等，各ステークホルダーに応じた情報の発信を行う。海外の研究者には，「EurekAlert!」を活用した海外プレス機関への情報配信を中心に，また，研究者に加えて，海外の市民にはホームページなどのウェブコンテンツ内の英語情報を充実させることで，機構への理解獲得に努める。マスコミへの情報発信は，発表機関が主催するプレス記者会見に加え，機構本部による統括の下，テレビ会議システムを活用したプレス記者会見の配信と，機構長プレス懇談会において最新の研究成果解説とプレス記者との密な質疑の場を設ける。特に社会的影響が大きい研究成果については，機関でのプレス発表後に詳細な成果の内容や，関連した研究成果を説明する講演・解説を実施する。

評価指標	［42-1］以下の項目において，いずれも第３期中期目標期間での実績（平均値）を上回ること。 ・EurekAlert! 国際プレスリリース数（参考：令和２年度までの５年平均 82 件） ・EurekAlert! 上の総閲覧数（PageView）（参考：令和２年度までの５年平均 174,219 件） ・ウェブコンテンツの英語ページへのアクセス数（参考：令和２年度までの５年平均 12,645 アクセス） ・機構長プレス懇談会の参加記者数（参考：令和２年度までの５年平均 11 人）

［43］近隣の科学館等で，市民との対話の会や講演会等を定期的に実施し，法人経営に対する理解・支持を獲得する。また，各機関の出前授業，施設公開等のイベントについても，機構本部が積極的に支援を行い，オンラインの活用などにより，各機関が協力・連携した情報発信を行うことができる体制を構築する。これにより，機構全体で理科教育を推進し，ひいては，市民の機構に対する理解・支持を獲得する。

評価指標	［43-1］以下の項目において，いずれも第３期中期目標期間での実績（延べ数）を上回ること。 ・自然科学研究機構シンポジウム等機構が主催する講演会における参加者数（参考：令和２年度までの延べ数 1,305 人） ・オンライン開催のイベントにおけるオンライン視聴者数（参考：令和２年度までの延べ数 10,433 人） ・機構で公開しているアーカイブ動画の閲覧数（参考：令和３年 10 月時点の延べ数 3,980 回）

Ⅴ　その他業務運営に関する重要事項に関する目標を達成するためにとるべき措置

［44］これまで各機関が独自に進めてきた事務システムの効率化を，機関の枠を超え機構全体として一層推進する。この目標の達成のために，デジタル技術を活用して機構構成員の認証基盤を構築する。この認証基盤を背景に，クラウドソリューション等を用いて業務アプリケーションを機構全体で共通基盤化し，機構本部及び各機関がデジタル化に必要な業務運営体制を整備してアプリケーションの活用を進めることで，一層の事務処理の効率化とセキュリティリスクの低減を図る。

評価指標	［44-1］既に機構全体で共用されている人事給与，財務会計システムに加え，現在は機関ごとに構築されている決裁，勤怠管理，法人文書管理などの業務システムが，令和６年度までに機構全体で共用できるものに統一化されていること。

9-9　自然科学研究機構分子科学研究所規則リンク集

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

https://www.ims.ac.jp/rules/rule-013.pdf

自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

https://www.ims.ac.jp/rules/rule-003.pdf

自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則

https://www.ims.ac.jp/rules/rule-004.pdf

9-10　分子科学研究所運営顧問会議議事要旨抜粋

分子科学研究所の機能強化についての提案

第８代所長　川合眞紀

強み

若手 PI 育成機能：スタートアップ支援，若手を准教授に採用して自立した研究環境を提供.
共同利用機能：機器センター，UVSOR，計算科学研究センター

弱み

存在感が薄い（国内外から見た印象）：多くの小さい研究グループが散在していて，集団としての強みが見えない
看板研究者が見えない（若手中心の研究所の宿命）
PI のダイバーシティー：女性准教授は 2 名になったが，外国人 PI は歴史的にも 1 名のみ.

分子科学研究所のミッションの三つの柱はこれまで通り，最高の科学研究を創出すること，分子科学分野の人材を育成すること，そして分子科学分野の研究を支援すること.
大学共同利用機関の最大のステークホールダーは「大学」そして「研究者」である.

目標１）分子科学研究所の Visibility を上げる

私が所長に着任した当時と同じ目標
特別研究部門を開設し，卓越教授（知名人の誘致）とクロスアポイントメント教員（関連分野から所の活動を広げる人材を招いた）を採用し，１研究所に閉じることなく，開かれた人用を開始.

国際的な人事還流の要となる：学生や博士研究員を世界各国から誘致することで，研究活性化に寄与する

- 研究室主宰者に外国人を 1−2 名リクルートする：関係各国からの visibility 向上に大きく貢献することが期待できる.
- 分子研の教育研究職員が積極的にサバティカル制度を利用して，海外へ出ばる．長期滞在により絆を深めて，関係する若手などへ研究所の存在を周知.

組織再編成についての私見

- 次次期第５期中期計画の策定に向けて検討すべきこと
  - 准教授研究グループは，現在の規模で継続：優れた若手 PI 育成機能は残すべき
  - 教授ポストの一部について，2−3 ポストを束ねてグループを作ることを提案（大規模研究室構想）所外からのリクルートが基本．２ポスト統合すると，教授１准教授１助教２の構成が可能．人事の成功確率は世界的な基準に照らして３割程度なので，最低でも３研究室を設置する覚悟は必要．（現在分子研には教授 13＋クロアポ教授 2＋卓越教授１＋特任教授２）
  - 現在の卓越教授のように，自ら用意する財源で研究グループの維持管理が可能な人材の誘致（場所は豊富にあり，研究グループ数を増やすことは活性化につながる）
  - 一方，卓越教授については，専門分野の異なるシニア人材を確保することも重要（人件費を分子研から手当できるかの検討は有意義．（年間２千万円程度を想定）

目標２）研究所運営業務の効率を上げる

教育研究業務と研究所運営業務の分離
戦略室の強化：今期で進めた方向をより強化すること
所としての研究事業費の競争的資金への応募にかかる作業などを，URA 中心に進める
その他
事務効率化
旅費の地域ごと定額支給：旅費申請作業の効率化（機構とともに働くべき項目）
勤怠管理のより効率的な運用（システムのブラシアップを事務センターと協力して進める）

ペーパーレス化を真剣に貫徹する

目標３）社会との共生

今後注意しておくべき項目．

産業界だけでなく，地域社会や初等中等教育などへの貢献も社会との連携の対象となりつつある．
GIGA スクール構想では，生徒一人一台端末が実行に移され，小中学校現場では教師が対応できていないとの声も聞く．急に ICT が教育現場に入り，有効活用が（きっと）数年間の大きな課題になる．

分子研リポート 2021

現状・評価・将来計画

2022 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　眞紀
編集責任者　解良　聡

