



分子研リポート2022

現状・評価・将来計画

「分子研リポート 2022」 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 産学連携研究アドバイザー.....	9
2-4-4 運営会議.....	9
2-4-5 運営会議人事選考部会.....	10
2-4-6 運営会議共同研究専門委員会.....	10
2-4-7 学会等連絡会議.....	11
2-4-8 教授会議.....	11
2-4-9 主幹・施設長会議.....	12
2-4-10 各種委員会等.....	12
2-5 研究領域.....	16
2-6 研究施設.....	22
2-7 研究部門等.....	24
2-8 構成員.....	25
2-8-1 構成員.....	25
2-8-2 現 員.....	31
2-8-3 人事異動状況.....	32
2-9 財 政.....	34
2-10 岡崎共通施設.....	38
2-10-1 岡崎情報図書館.....	38
2-10-2 岡崎コンファレンスセンター.....	38
2-10-3 岡崎共同利用研究者宿泊施設.....	38
2-10-4 職員会館.....	38
2-11 知的財産.....	39
3. 共同研究と大学院教育.....	41
3-1 共同利用研究.....	42
3-1-1 共同利用研究の概要.....	42
3-1-2 2022 年度の実施状況.....	42
3-1-3 共同利用研究実施件数一覧.....	55
3-1-4 分子研研究会プログラム.....	56
3-2 国際交流と国際共同研究.....	59
3-2-1 外国人客員部門等及び国際交流.....	59
3-2-2 岡崎コンファレンス.....	62
3-2-3 日韓共同研究.....	62

3-3	大学院教育	64
3-3-1	特別共同利用研究員	64
3-3-2	総合研究大学院大学二専攻	65
3-3-3	オープンキャンパス	69
3-3-4	体験入学	70
3-3-5	総研大アジア冬の学校	71
3-3-6	統合生命科学教育コース群	72
3-4	その他	73
3-4-1	分子研コロキウム	73
4.	研究支援等	75
4-1	技術推進部	76
4-1-1	技術研究会	77
4-1-2	技術研修	77
4-1-3	人事	78
4-1-4	受賞	78
4-2	安全衛生管理室	79
4-3	研究力強化戦略室	80
4-4	社会との交流	81
4-4-1	一般公開	81
4-4-2	分子科学フォーラム	81
4-4-3	市民向けシンポジウム	82
4-4-4	見学者受け入れ	84
4-4-5	その他	84
4-5	理科教育への協力	85
4-5-1	スーパーサイエンスハイスクール	85
4-5-2	コスモサイエンスコース	85
4-5-3	あいち科学技術教育推進協議会	86
4-5-4	国研セミナー	86
4-5-5	小中学校での出前授業	86
4-5-6	職場体験学習	87
4-5-7	その他	87
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	光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP（文部科学省）	98
5-3	ムーンショット型研究開発事業（内閣府／科学技術振興機構）	99
5-4	大学連携研究設備ネットワークによる研究設備共用促進事業	100
5-5	マテリアル先端リサーチインフラ ARIM（文部科学省）	103
5-6	分子科学国際共同研究拠点の形成	118
5-6-1	国際共同研究事業の財源	118
5-6-2	分子研国際インターンシッププログラム（IMS-IIP）	119
5-6-3	分子研アジア国際インターンシッププログラム（IMS-IIPA）	120
5-6-4	短期外国人研究者招へいプログラム	120
5-7	ネットワーク型研究加速事業（自然科学研究機構）	121

5-8	研究大学強化促進事業（文部科学省）	122
5-9	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）	123
5-10	分子科学研究所所長招聘会議	124
6.	研究活動の現状	125
6-1	論文発表状況	126
6-2	メゾスコピック計測研究センター	127
	繊細計測研究部門	129
	広帯域相関計測解析研究部門	133
6-3	協奏分子システム研究センター	136
	階層分子システム解析研究部門	137
	機能分子システム創成研究部門	148
6-4	理論・計算分子科学研究領域	152
	理論分子科学第一研究部門	152
	理論分子科学第二研究部門	158
	計算分子科学研究部門	161
6-5	光分子科学研究領域	174
	光分子科学第二研究部門	174
	光分子科学第三研究部門	182
	光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）	189
	電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）	192
	光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）	199
	光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）	205
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	226
	生体分子機能研究部門	226
	錯体触媒研究部門	239
	錯体物性研究部門	246
6-8	特別研究部門	252
6-9	社会連携研究部門	266
6-10	研究施設等	274
	機器センター	274
	計算科学研究センター（ネットワーク担当）	277
	技術推進部及び安全衛生管理室	278
7.	点検評価と課題	281
7-1	運営顧問による点検評価	282
7-2	光分子科学研究領域の評価	283
	7-2-1 Matthias Weidemüller 外国人運営顧問	283
7-3	生命・錯体分子科学研究領域の評価	289
	7-3-1 David A. Leigh 外国人運営顧問	289

8. 研究施設の現状と将来計画	297
8-1 極端紫外光研究施設 (UVSOR)	298
8-2 機器センター	303
8-3 装置開発室	306
8-4 計算科学研究センター	307
8-5 生命創成探究センター	309
9. 資 料	311
9-1 歴代所長	311
9-2 運営顧問 (2004 ~)	312
9-3 外国人運営顧問 (2004 ~)	313
9-4 運営会議委員 (2004 ~)	314
9-5 大学共同利用機関法人自然科学研究機構第三期中期目標期間実績報告書	317
9-6 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	365
9-7 大学共同利用機関法人自然科学研究機構第4期中期計画	367
9-8 自然科学研究機構分子科学研究所規則リンク集	374

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、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、反応、機能についての先鋭的な基礎研究を進め、分子の新たな可能性を探っています。また、分子研独自の産学協同研究を推進することを目的に、2019年度には「社会連携研究部門」を設置しました。2018年度から、新たな試みとして分子科学分野を世界的に牽引することが期待される卓越教授、および、施設の高度化などを担う人材として主任研究員の2つの新しい人事システムが始まりました。2019年度からは、分子研の共同利用の施設や設備の高度な利用を目指して、所外の研究機関との協定に基づき、クロスアポイントメントによる研究人事を開始しました。これまでの人事制度と併せて、分子研を支える重要な人材を所に迎えることで、研究所のさらなる活性化が期待されます。

このレポートには、2022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)「マテリアル先端リサーチインフラ」、(3)ムーンショット目標6研究開発プロジェクト「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」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、2022年度も多くの人事異動がありました。8月1日付で中村彰彦准教授（静岡大学農学部応用生命学科准教授）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。一方、5月31日付で物質分子科学研究領域の小林玄器准教授が、8月31日付で理論・計算分子科学研究領域の南谷英美准教授が、9月30日付で協奏分子システム研究センターの古賀信康准教授が、3月31日付で生命・錯体分子科学研究領域の草本哲郎准教授が転出されました。ここでは、研究室の主宰者のお名前のみを書かせていただきましたが、多くの助教・主任研究員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、北川 進京都大学物質-細胞統合システム拠点拠点長と James M. Lisy イリノイ大学教授、産学連携研究アドバイザーをお願いしている菊池 昇、株式会社コンボン研究所代表取締役所長と福田 伸、三井化学株式会社研究開発本部参与には、2022年5月9日～11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 2022 年度の研究計画の発表会に参加頂き、その活動への提言をいただきました。外国人運営顧問の David A. Leigh マンチェスター大学教授には、2023 年 3 月 6 – 8 日に生命・錯体分子科学領域の、Matthias Weidemüller ハイデルベルグ大学副学長には、2023 年 3 月 22 日 – 27 日に光分子科学研究領域の研究活動評価を実施していただきました。

2022 年度も COVID-19 が猛威をふるい、国内外で人の移動が厳しく制限された 1 年でしたが、2022 年の秋から入国制限が徐々に緩和されたことに伴い、教員・学生の国際会議出席のための海外出張などが再開され、海外からの研究者の訪問も始まりました。しかしながら、研究会やシンポジウムは一部を除き会場参加とオンラインを併用するハイブリッドなどで開催されました。幸い、2022 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。

2023 年 3 月
自然科学研究機構
分子科学研究所 所長
渡辺 芳人

2. 分子科学研究所の概要

2-1 研究所の目的

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

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

2-2 沿革

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

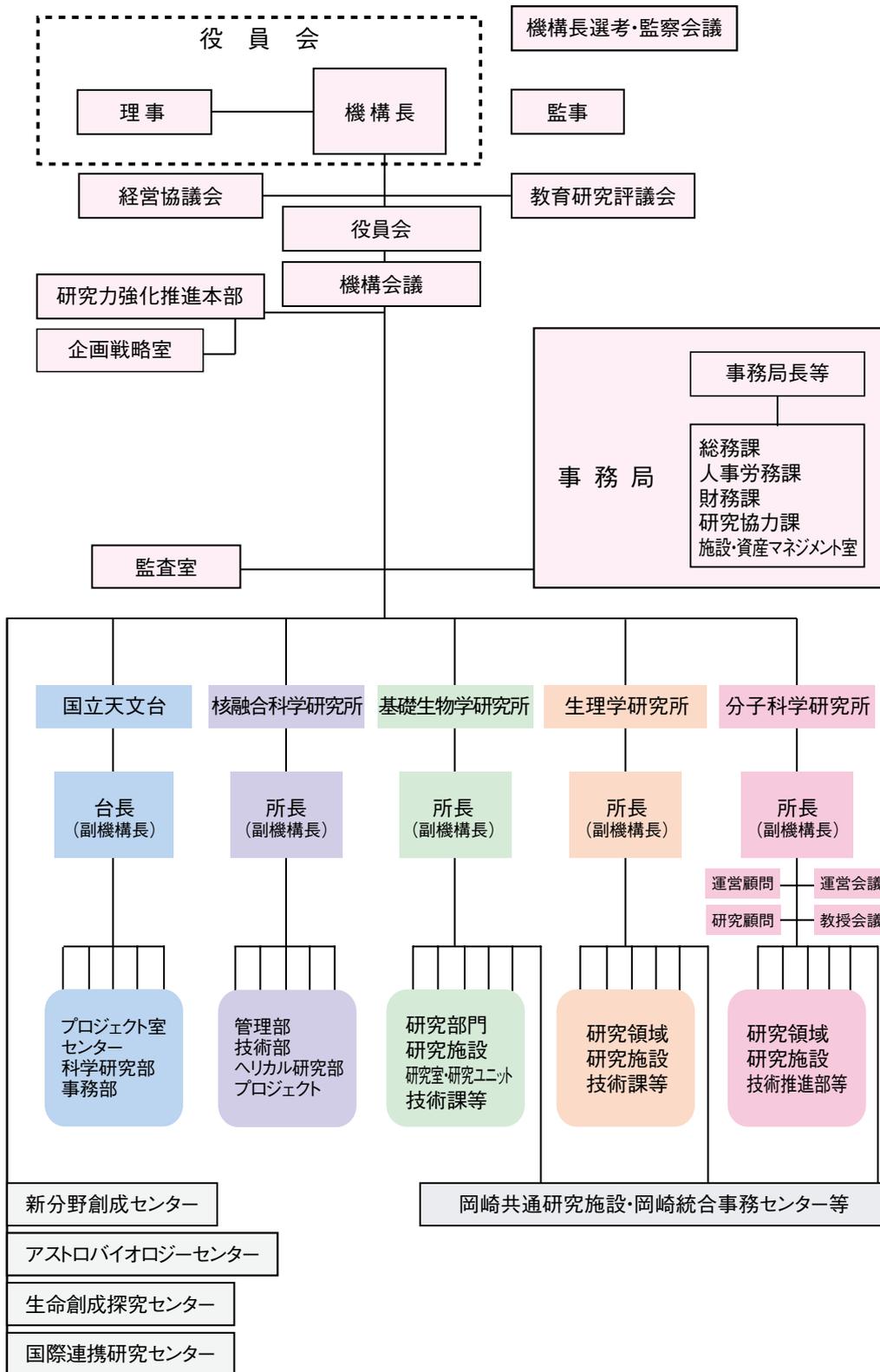
1965. 12.13 日本学術会議は、「分子科学研究所」(仮称)の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
1973. 10.31 学術審議会は、「分子科学研究所」(仮称)を緊急に設立することが適当である旨、文部大臣に報告した。
1974. 4.11 文部大臣裁定により、東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室(室長：井口洋夫前東京大学物性研究所教授、定員3名)及び分子科学研究所創設準備会議(座長：山下次郎前東京大学物性研究所長、学識経験者35人により構成)が設置された。
1974. 7. 6 分子科学研究所創設準備会議において、研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
1975. 4.22 国立学校設置法の一部を改正する法律(昭50年法律第27号)により「分子科学研究所」が創設され、初代所長に赤松秀雄前横浜国立大学工学部長が任命された。同時に、分子構造研究系(分子構造学第一研究部門、同第二研究部門)、電子構造研究系(基礎電子化学研究部門)、分子集団研究系(物性化学研究部門、分子集団研究部門)、機器センター、装置開発室、管理部(庶務課、会計課、施設課、技術課)が設置された。
1975. 12.22 外国人評議員の設置が制度化された。
1976. 5.10 理論研究系(分子基礎理論第一研究部門、同第二研究部門)、相關領域研究系(相關分子科学研究部門)、化学試料室が設置された。
1976. 11.30 実験棟第1期工事(5,115 m²)が竣工した。
1977. 4.18 相關領域研究系相關分子科学研究部門が廃止され、相關領域研究系(相關分子科学第一研究部門、同第二研究部門)、電子計算機センター、極低温センターが設置された。
1977. 4. 大学院特別研究学生の受入れが始まる。
1977. 5. 2 国立学校設置法の一部を改正する法律により生物科学総合研究機構(基礎生物学研究所、生理学研究所)が設置されたことに伴い、管理部を改組して分子科学研究所管理局とし、生物科学総合研究機構の事務を併せ処理することとなった。管理局に庶務課、人事課、主計課、経理課、建築課、設備課、技術課が置かれた。
1978. 3. 7 分子科学研究所研究棟(2,752 m²)が竣工した。
1978. 3.11 装置開発棟(1,260 m²)、機器センター棟(1,053 m²)、化学試料棟(1,063 m²)が竣工した。
1978. 4. 1 電子構造研究系に電子状態動力学研究部門、電子構造研究部門が、分子集団研究系に基礎光化学研究部門が設置された。
1979. 3. 1 電子計算機センター棟(1,429 m²)が竣工した。
1979. 3.24 実験棟第2期工事(3,742 m²)、極低温センター棟(1,444 m²)が竣工した。

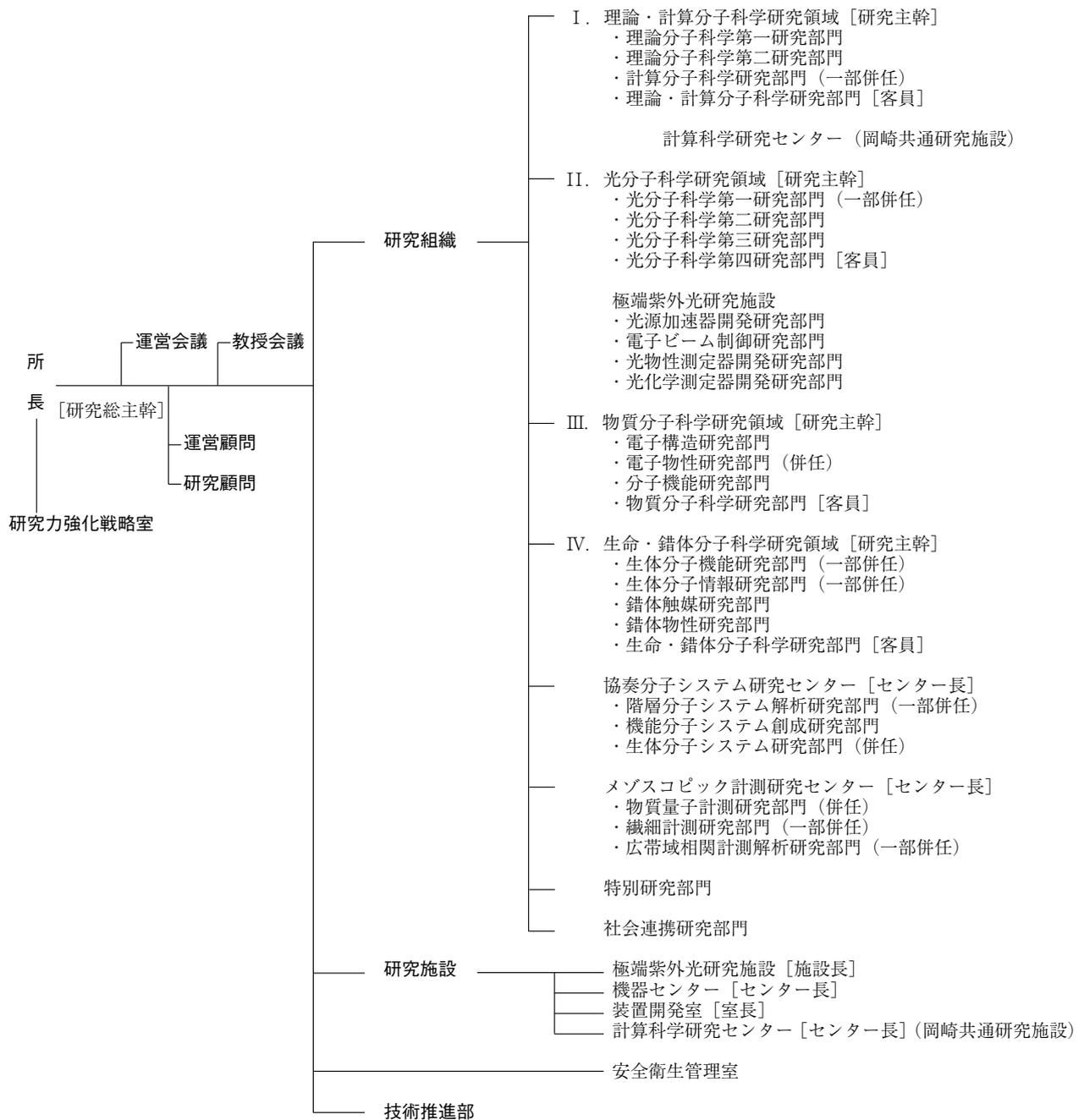
1979. 4. 1 分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され、管理局が総務部（庶務課，人事課，国際研究協力課），経理部（主計課，経理課，建築課，設備課），技術課に改組された。
1979. 11. 8 分子科学研究所創設披露式が挙行された。
1981. 4. 1 第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4. 14 国立学校設置法の一部を改正する法律により，分子科学研究所と生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所，生理学研究所）は総合化され，岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され，管理局が岡崎国立共同研究機構管理局となり，技術課が研究所所属となった。
1982. 4. 1 研究施設として極端紫外光実験施設（UVSOR）が設置された。
1982. 6. 30 極端紫外光実験棟第1期工事（1,281 m²）が竣工した。
1983. 3. 30 極端紫外光実験棟第2期工事（1,463 m²）が竣工した。
1983. 4. 1 電子構造研究系に分子エネルギー変換研究部門が，分子集団研究系に分子集団動力学研究部門，極端紫外光研究部門が設置された。
1983. 11. 10 極端紫外光実験施設ストレージリング装置に電子貯蔵が成功した。
1984. 2. 28 極端紫外光実験施設の披露が行われた。
1984. 4. 11 研究施設として，錯体化学実験施設（錯体合成研究部門，錯体触媒研究部門）が設置された。流動研究部門制度が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 m²）が竣工した。
1989. 5. 28 分子集団研究系に界面分子科学研究部門が，関連領域研究系に有機構造活性研究部門（共に流動研究部門）が設置された。
1991. 3. 27 極端紫外光実験棟（増築）（283 m²）が竣工した。
1991. 4. 11 極端紫外光科学研究系（反応動力学研究部門）が設置された。基礎光科学，界面分子科学，極端紫外光の各研究部門は分子集団研究系から極端紫外光科学研究系へ振替された。
1993. 4. 1 第四代研究所長に伊藤光男東北大学教授が任命された。
1993. 12. 3 極端紫外光実験施設創設10周年記念式典が挙行された。
1994. 1. 31 電子計算機センター棟（増築）（951 m²）が竣工した。
1995. 3. 31 関連領域研究系有機構造活性研究部門（流動）が廃止された。
1995. 4. 1 理論研究系に分子基礎理論第四研究部門が設置された。
1995. 5. 12 分子科学研究所創設20周年記念式典が挙行された。
1996. 5. 11 関連領域研究系に分子クラスター研究部門（流動）が設置された。
1997. 4. 1 機器センター，極低温センター，化学試料室が廃止され，分子制御レーザー開発研究センター，分子物質開発研究センターが設置された。
1999. 4. 1 第五代研究所長に茅幸二慶應義塾大学教授が任命された。
2000. 4. 1 電子計算機センター，錯体化学実験施設錯体合成研究部門が廃止され，電子計算機室が設置された。共通研究施設として，統合バイオサイエンスセンター，計算科学研究センター，動物実験センター，アイソトープ実験センターが設置された。
2002. 2. 28 山手2号館（統合バイオサイエンスセンター，計算科学研究センター）（5,149 m²）が竣工した。
2002. 3. 11 山手1号館A（動物実験センター，アイソトープ実験センター）（4,674 m²）が竣工した。
2002. 4. 1 関連領域研究系分子クラスター研究部門（流動），極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門（流動），分子物質開発研究センターが廃止され，分子スケールナノサイエンスセンター（分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門，ナノ触媒・生命分子素子研究部門，ナノ光計測研究部門，界面分子科学研究部門（流動），分子クラスター研究部門（流動））が設置された。
2003. 8. 20 山手4号館（分子科学研究所分子スケールナノサイエンスセンター）（3,813 m²）が竣工した。
2003. 12. 2 極端紫外光実験施設創設20周年記念式典が挙行された。

2004. 3. 1 山手5号館 (NMR) (664 m²) が竣工した。
2004. 3. 8 山手3号館 (統合バイオサイエンスセンターなど) (10,757 m²) が竣工した。
2004. 4. 1 国立大学法人法により、国立天文台、核融合科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所、分子科学研究所が統合再編され、大学共同利用機関法人自然科学研究機構が創設された。岡崎国立共同研究機構管理局が、大学共同利用機関法人自然科学研究機構岡崎統合事務センターとなり、総務部 (総務課、国際研究協力課)、財務部 (財務課、調達課、施設課) に改組された。
2004. 4. 1 理論研究系が理論分子科学研究系に改組された。計算分子科学研究系 (計算分子科学第一研究部門、計算分子科学第二研究部門、計算分子科学第三研究部門) が設置された。分子スケールナノサイエンスセンターに、先端分子科学研究部門が設置され、界面分子科学研究部門、分子クラスター研究部門が廃止された。極端紫外光実験施設が、極端紫外光研究施設に改組された。安全衛生管理室が設置された。
2004. 4. 1 第六代研究所長に中村宏樹分子科学研究所教授が任命された。
2005. 5.20 分子科学研究所創設30周年記念式典が挙行された。
2007. 4. 1 研究系及び錯体化学実験施設が廃止され、理論・計算分子科学研究領域 (理論分子科学第一研究部門、理論分子科学第二研究部門、計算分子科学研究部門、理論・計算分子科学研究部門)、光分子科学研究領域 (光分子科学第一研究部門、光分子科学第二研究部門、光分子科学第三研究部門、光分子科学第四研究部門)、物質分子科学研究領域 (電子構造研究部門、電子物性研究部門、分子機能研究部門、物質分子科学研究部門)、生命・錯体分子科学研究領域 (生体分子機能研究部門、生体分子情報研究部門、錯体触媒研究部門、錯体物性研究部門、生命・錯体分子科学研究部門) の4つの研究領域が設置された。極端紫外光科学研究施設に、光加速器開発研究部門、電子ビーム制御研究部門、光物性測定器開発研究部門、光化学測定器開発研究部門が設置 (名称変更) された。分子スケールナノサイエンスセンターに、ナノ分子科学研究部門、ナノ計測研究部門、ナノ構造研究部門が設置され、分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門、ナノ触媒・生命分子素子研究部門、ナノ光計測研究部門が廃止された。分子制御レーザー開発研究センターに、先端レーザー開発研究部門、超高速コヒーレント制御研究部門、極限精密光計測研究部門が設置された。機器センターが新たに設置された。広報室及び史料編纂室が設置された。
2010. 3.30 実験棟改修第1期工事 (耐震及び全面改修) が竣工した。
2010. 4. 1 第七代研究所長に大峯巖京都大学福井謙一記念研究センターリサーチリーダーが任命された。
2011. 3.30 実験棟改修第2期工事 (耐震及び全面改修) が竣工した。
2013. 4. 1 分子スケールナノサイエンスセンターが廃止され、協奏分子システム研究センター (階層分子システム解析研究部門、機能分子システム創成研究部門、生体分子システム研究部門) が設置された。
2013. 10. 1 広報室及び史料編纂室が廃止され、研究力強化戦略室が設置された。
2013. 12. 6 極端紫外光研究施設創設30周年記念式典が挙行された。
2016. 4. 1 第八代研究所長に川合眞紀東京大学大学院新領域創成科学研究科教授、理化学研究所理事長特別補佐が任命された。
2017. 4. 1 分子制御レーザー開発研究センターが廃止され、メゾスコピック計測研究センター (物質量子計測研究部門、繊細計測研究部門、広帯域相関計測解析研究部門) が設置された。
2018. 4. 1 岡崎統合バイオサイエンスセンターが廃止され、生命創成探究センターが設置された。特別研究部門が設置された。
2019. 4. 1 社会連携研究部門が設置された。
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。
2022. 4. 1 第九代研究所長に渡辺芳人総合研究大学院大学理事が任命された。

2-3 組織

大学共同利用機関法人自然科学研究機構





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

2-4 運 営

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

2-4-1 運営顧問

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

自然科学研究機構では創設準備の段階から各研究所の自律性を保つことを基本原則として，機構憲章を作成した。その精神に基づき，上記①，②の機能は法律上の組織だけに任せるのではなく，各研究所別に適切な内部組織を置くことになった。ただし，機能①については，所長の諮問組織で審議するのは不適當なため，形式的には機構長の諮問組織的な位置付けで，その都度，各研究所別に大学共同利用機関長選考委員会を設置することにした。その委員は教育研究評議会と経営協議会の機構外委員も候補に加えて，機構外から機構長によって選ばれる。一方，機能②については必要に応じて各研究所で適当な内部組織（所長の諮問組織）を構成することになった。その結果，分子科学研究所では運営顧問制度（外国人評議員に代わる外国人運営顧問も含む）を発足させた。第一期中期計画期間（2004年度～2009年度）の6年間の運営顧問は国内4名，海外2名で運用，第二期中期計画期間（2010年度～2015年度）は，海外2名，国内3名で運用，第三期中期計画期間（2016年度～2021年度）は国内4名と海外2名で運用した。第四期中期計画期間（2022～2027年度）に入り，国内3名，海外2名の他に産学連携アドバイザーを2名追加した。

運営顧問（2022年度）

菊池 昇	株式会社コンボ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

外国人運営顧問（2022年度）

WEIDEMÜLLER, Matthias	Vice-Rector, Ruprecht-Karl University Heidelberg
LEIGH, David A.	Royal Society Research Professor & Sir Samuel Hall Chair of Chemistry, The University of Manchester

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から国内外各1名で運用している。

研究顧問 (2022 年度)

北川 進

京都大学物質-細胞統合システム拠点拠点長, 特別教授

LISY, James M.

Research Professor, University of Illinois Urbana-Champaign

2-4-3 産学連携研究アドバイザー

第四期中期計画期間 (2022 年度～ 2027 年度) より, 分子科学の分野において特に優れた研究業績を有する者又は産学連携関係に特に精通した者に, 研究所の産学連携研究に関する指導, 助言等をお願いする「産学連携研究アドバイザー」を新たに設けた。産業界で研究所長などの責を担っているアドバイザーから見て, 基礎研究が中心となっている分子科学研究所の個々の研究者の研究課題や成果がどのように受け止められるのかをフィードバックして頂くための制度である。また, アドバイザーが有するネットワークを通じて, 分子科学研究所の研究が産業界に広く知られることも期待するものである。

産学連携研究アドバイザー (2022 年度)

菊池 昇

株式会社コンボン研究所代表取締役所長

福田 伸

三井化学株式会社研究開発本部参与

2-4-4 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 10 名の合計 20 名の組織である。所外委員は, 分子科学研究者コミュニティである関連学会から派遣される委員会組織の学会等連絡会議で候補が選出され, 所長が決定する。所内委員は, 研究主幹, 研究施設・センター長を中心として, 所長が決定する。運営会議は教授会議と連携をとりながら所長候補, 研究教育職員人事, 共同研究, その他の重要事項について審議, 検討する。所長候補者の検討は, 大学共同利用機関長選考委員会から依頼を受けて運営会議で行われる。研究教育職員人事については, 運営会議の中から選ばれた所外委員 5 名, 所内委員 5 名で構成される人事選考部会の審議を運営会議の審議と見なす。一方, 共同研究については, まず, 運営会議の下に置かれた共同研究専門委員会で原案を作成して, それについて運営会議で審議するという方式をとってきた。2023 年度からは, より審査の迅速化を図るため, 専門委員会を廃止すると同時に, 所外 6 名, 所内 6 名からなる共同利用研究部会を設置して, 随時申請などへの対応を柔軟に行える体制を整えることとなっている。

運営会議委員 (任期 2022.4-2024.3) (◎: 議長 ○: 副議長)

秋吉 一成	京都大学大学院工学研究科教授
岩佐 義宏	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
高橋 聡	東北大学多元物質科学研究所教授
唯 美津木	名古屋大学物質科学国際研究センター教授
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
真船 文隆	東京大学大学院総合文化研究科教授
○村越 敬	北海道大学大学院理学研究院教授
吉澤 一成	九州大学先端物質化学研究所教授
◎秋山 修志	協奏分子システム研究センター教授
飯野 亮太	生命・錯体分子科学研究領域教授
石崎 章仁	理論・計算分子科学研究領域教授

魚住 泰広	生命・錯体分子科学研究領域教授
江原 正博	理論・計算分子科学研究領域教授
岡本 裕巳	メゾスコピック計測研究センター教授
解良 聡	光分子科学研究領域教授
齊藤 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

2-4-5 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（2022，2023年度）（○：部会長）

秋吉 一成	（京大院教授）	秋山 修志	（分子研教授）
忍久保 洋	（名大院教授）	飯野 亮太	（分子研教授）
芳賀 正明	（中央大名誉教授）	○石崎 章仁	（分子研教授）
福井 賢一	（阪大院教授）	岡本 裕巳	（分子研教授）
吉澤 一成	（九大教授）	山本 浩史	（分子研教授）

2-4-6 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（2022, 2023 年度）（○：委員長）

大内 幸雄	（東工大院教授）	○魚住 泰広	（分子研教授）
須藤 雄気	（岡山大院教授）	齊藤 真司	（分子研教授）
高橋 聡	（東北大教授）	横山 利彦	（分子研教授）
唯 美津木	（名大教授）	岡崎 圭一	（分子研准教授）
深澤 愛子	（京大院教授）	古賀 信康	（分子研准教授）
村越 敬	（北大院教授）	榎山 儀恵	（分子研准教授）

2-4-7 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（2022 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	（京大院教授）		

（日本放射光学会推薦）

熊坂 崇（高輝度光科学研究センター 室長）

（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）	石崎 章仁	（分子研教授）
岡本 裕巳	（分子研教授）	解良 聡	（分子研教授）
小林 玄器	（分子研准教授）		

2-4-8 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・准教授および主任研究員で構成され、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。

2-4-9 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。

2-4-10 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	—
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	2022.8.19, 2023.3.2
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	2022.7.4
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	2022.11.28
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	委員会規則 管理規則	2022.6.30, 12.15
図書委員会	購入図書の選定。他	施設から必要数		—
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	2022.4.1, 4.15, 6.3, 8.5, 10.7, 12.8, 2023.2.3
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	2023.1.30
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		2022.4.8, 5.6, 6.3, 7.1, 10.7, 12.2, 2023.1.6, 3.3
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	2022.4.19, 5.26, 6.21, 7.19, 9.20, 10.18, 11.15, 12.20, 2023.1.17, 2.21, 3.28
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	2022.7.12
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な事項。	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	2023.3.22
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	(メール審議) 2022.4.14, 5.11, 7.11, 8.5, 9.8, 9.13, 12.16, 2023.2.9, 2.22 (Web会議) 2022.10.28, 2023.1.23, 3.22

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	2023.1.23
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	2022.4.19, 5.17, 6.21, 7.19, 8.16, 9.20, 10.18, 11.15, 12.20, 2023.1.17, 2.21, 3.28 ※ 2023. 3.28 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	2022.6.21- 7.15 (メール 審議), 8.19-26 (メール審議), 9.20, 12.20, 2023.1.23- 2.8 (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	2022.6.28, 11.29, 2023.2.22
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	2022.8.29, 2023.3.13
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	2022.4.6-13 (メール審議), 6.13-20 (メール審議), 7.5, 8.19-26 (メール審議), 10.19-25 (メール審議), 12.12-16 (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	2022.6.2, 9.22-28 (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	2022.5.18, 7.15, 2023.3.23
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	-
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 2 技術推進部長	協議会規則	2022.5.2, 7.6, 9.7, 11.2, 2023.1.4, 3.1

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	2023.2.3
岡崎情報公開委員会	「独立行政法人等の保有する情報の公開に関する法律」を円滑に実施するため。	所長又は研究総主幹 教授1	委員会規則	-
生命倫理審査委員会	機構におけるヒトゲノム・遺伝子解析研究を, 倫理的配慮のもとに適正に推進するため。	教授又は准教授2	委員会規則	2023.1.4

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 凝縮化学系，複雑分子系，複雑流体系における機能・物性解明の理論・計算科学的研究

研究課題 1, 凝縮化学系における化学反応・化学過程の分子理論
2, 複雑分子系の溶媒和統計力学理論の構築と応用
3, 曲率誘導タンパク質による生体膜の形状制御
4, 複雑流体のダイナミクス

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で、物性や反応を光で制御すること、及びそれに必要となる高度な光源を開発することを目的とする

光分子科学第一研究部門

研究目的 主としてレーザー光源を用いた先端的分光法、顕微鏡法等を用いて、分子とその集合体の高精度・高精細な構造を明らかにすると同時に、新たな光機能の開拓や物質特性の光制御を目指した研究を行う

研究課題 1, 極めて高い空間分解能を持つ先端的分光法による、分子集団、微粒子系における励起状態と増強電場の研究、およびナノ・マイクロ物質のキラリティとキラル光学効果に関する研究

光分子科学第二研究部門

研究目的 物質の量子力学的な性質を、デザインされた光電場で詳細に観察し制御するための新しい方法論と、それを支える高度な光源の開発を目指した研究を行う

研究課題 1, 高度にデザインされたレーザー場を用いて、原子・分子及びその集合体の量子ダイナミクスを精密に観測・制御するための研究、および超高速量子シミュレータ・量子コンピュータの研究開発

光分子科学第三研究部門

研究目的 新奇な分子機能の開拓と、それに関する動的プロセスの解明及び制御のための新しい方法論の開発を目指した研究を行う

研究課題 1, 真空紫外光・軟X線分光による分子あるいは低次元物質の表面・界面における物性研究

光分子科学第四研究部門（客員）

研究目的 原子や比較的簡単な分子から、それらの集合体、固体表面に吸着した原子・分子やナノ構造体、さらに生体分子までを広く対象とし、高度な周波数・時間・空間分解分光法、極端紫外光や特殊波長レーザー等を用いた光学測定等によりそれらの性質を明らかにする

研究課題 1, 電気化学反応や触媒反応の変換場における局所構造と電子状態の研究
2, 極低温リユードベリ原子を用いた超高速量子シミュレータ・量子コンピュータの開発

光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的 シンクロトロン光源用電子加速器に関する開発研究を行う

研究課題 1, 先進的な光源加速器の設計開発研究
2, 相対論的電子ビームを用いた新しい光発生法とその利用に関する研究

電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的 光源の高性能化あるいは高度利用のための開発研究を行う

- 研究課題
- 1, 電子または光ビーム計測・制御技術に関する開発
 - 2, 放射光を用いた新規分析法の開発研究

光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的 固体の新奇物性に関わる電子状態を放射光赤外・テラヘルツ分光及び高分解能角度分解光電子分光により明らかにする

- 研究課題
- 1, 放射光を用いた固体分光用の観測システムの開発
 - 2, 固体物質の局在から遍歴に至る電子状態の分光研究

光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的 放射光軟X線を利用した新しい分子分光法の開発研究を行う

- 研究課題
- 1, 放射光を用いた光化学実験用の観測システムの開発
 - 2, 分子固体・液体の化学状態の分光研究

物質分子科学研究領域

研究目的 分子及びその集合体を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, 新しい原理に基づく有機太陽電池とフォトンアップコンバージョンの研究
 - 2, 固体NMRを用いたタンパク質の構造解析とハードウェア開発
 - 3, 次世代電気化学デバイスの創出に向けた機能性無機材料の探索

物質分子科学研究部門（客員）

- 研究目的 物質分子科学のコミュニティ交流を通じた新しい先端的研究分野の開拓
- 研究課題 1, 固体物質からの高次高調波発生
2, 有機薄膜太陽電池の高効率化に向けた新規半導体ポリマーの開発
3, バレー自由度をもつ光注入キャリアの磁場下マイクロ波共鳴によるダイナミクス研究

生命・錯体分子科学研究領域

- 研究目的 新規な光学的・磁氣的・電氣的特性や高効率な物質変換・エネルギー変換を目的とした新たな分子や分子集合体，化学反応系の設計・開発を行うとともに，多様な計測法を駆使して錯体，キラル分子，開殻電子系分子，共役系分子，生体分子およびそれらの集合体が示す高次機能や協同現象に対する分子レベルの機構解明に関する研究を行う

生体分子機能研究部門

- 研究目的 タンパク質や複合糖質等の生体分子が示す多彩な機能発現の分子機構を明らかにするとともに，生体分子の設計・創成を行う
- 研究課題 1, 新規な機能を有する金属タンパク質の構造機能相関解明
2, 複合糖質およびタンパク質の構造・ダイナミクス・相互作用に関する研究
3, 生体分子モーターのエネルギー変換機構の解明，新規設計と実証

生体分子情報研究部門

- 研究目的 先端計測技術により，生体分子や凝縮相分子の分子機構を解明する
- 研究課題 1, 溶液散乱と結晶構造解析を相補的に駆使した動的構造解析
2, 先端的分光法による凝縮相分子の機能・構造・ダイナミクスの解明

錯体触媒研究部門

- 研究目的 分子間の共同作用的相互作用に立脚した化学反応の駆動，化学反応システムの構築
- 研究課題 1, 水素結合・疎水性相互作用・静電的相互作用といった非共有結合性相互作用による有機分子変換触媒システム構築
2, 分子集合挙動に基づく超分子触媒，高次構造触媒の設計と創製

錯体物性研究部門

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

生命・錯体分子科学研究部門（客員）

研究目的 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, 非天然型核酸の合成と機能・構造解析

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

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，マイ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、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事業の「マテリアルの高度循環のための技術」領域スポーク機関、2022年度からは同事業運営機構横断領域・物質・材料合成プロセス技術分野の責任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、データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクトの2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
- 主に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

渡辺 芳人	岡本 裕巳	所長 研究総主幹(併)
大峯 巖	中村 宏樹	特別顧問, 名誉教授
岩田 末廣	岩村 秀	特別顧問, 名誉教授
宇理須 恆雄	岡崎 進	名誉教授
北川 禎三	桑島 邦博	名誉教授
小杉 信博	小林 速男	名誉教授
齋藤 修二	田中 晃二	名誉教授
永瀬 茂	西 信之	名誉教授
平田 文男	廣田 榮治	名誉教授
薬師 久彌	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) 石崎 章仁

理論分子科学第一研究部門

齊藤 真司	教授
南谷 英美	准教授
甲田 信一	助教
下出 敦夫	助教
TANG, Zhiye	助教
CHANDRA, Amalendu	学振外国人招へい研究者
小泉 愛	特任研究員
ZHU, Zhe	大学院生

理論分子科学第二研究部門

石崎 章仁	教授
三輪 邦之	助教
坂本 想一	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
大貫 隼	助教
福原 大輝	大学院生
大多和 克紀	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)

佐藤 啓文	客員教授(京大院工)
吉田 紀生	客員教授(名大院情報)
野口 博司	客員准教授(東大物性研)

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
CHAUHAN, Vikas Singh	特任研究員
周 鳥居 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
 長坂 将成 助教
 福谷 圭祐 助教
 PALASSERY ITHIKKAL, Jaseela 大学院生
 西野 史 大学院生
 瀬間 亮太 特別共同利用研究員
 山内 早希 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)

間瀬 一彦 客員教授(高エネ研物構)
 福原 武 客員准教授(理研量子コンピュータ研)
 中山 泰生 客員准教授(東理大理工)
 神谷 美穂* 事務支援員
 石川 裕子* 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)
 大西 洋 教授(クロスアポイントメント;神戸大院理)(特別研究部門)
 杉本 敏樹 准教授
 小坂谷 貴典 助教
 山本 航平 助教
 櫻井 敦教 助教
 斎藤 晃 学振特別研究員
 高橋 翔太 学振特別研究員
 市井 智章 特別訪問研究員
 鶴岡 和幸 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 大学院生
 吉澤 龍 大学院生
 金 成翔 大学院生
 小林 明斗 特別共同利用研究員

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
 足立 和宏 研究員
 岡本 啓 大学院生
 内村 祐 大学院生
 泉 善貴 大学院生
 楠本 恵子 大学院生
 久保田 亜紀子 技術支援員
 今井 弓子 技術支援員
 小倉 康子 事務支援員

物質分子科学研究部門 (客員研究部門)

尾坂 格 客員教授(広大院先進理工)
 田中 耕一郎 客員教授(京大院理)
 秋元 郁子 客員准教授(和歌山システム工)

横田 光代* 事務支援員
 石川 あずさ* 事務支援員
 志村 真希 事務支援員
 神谷 美穂 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
 矢木 真穂 准教授(兼)(名市大薬)
 村木 則文 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
 YU, Yan 学振外国人招へい研究者
 原島 崇徳 特任研究員(IMSフェロー)
 KEYA, Jakia Jannat 特任研究員
 松本 浩輔 特任研究員
 磯野 裕貴子 特任専門員
 関口 太一郎 大学院生
 齋藤 泰輝 特別共同利用研究員
 梅澤 美美子 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
 山本 栞 特別共同利用研究員
 大國 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
 檜山 儀恵 准教授
 奥村 慎太郎 助教
 大塚 尚哉 助教
 田澤 文 研究員
 ZHANG, Kaili 大学院生
 高橋 輝気 大学院生
 服部 修佑 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
 鳥居 薫 技術支援員
 新見 涼子 技術支援員
 西岡 雪奈 技術支援員
 原田 晋子 技術支援員
 柿沼 秀哉 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
 水野 麻人 学振特別研究員
 壬生 託人 特任専門員
 長瀬 真依 大学院生
 廣田 宗士 大学院生
 渡邊 幸佑 大学院生
 吉田 瑠 大学院生
 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)
 上田 顕 客員准教授 (熊本大院
 先端科学)
 神谷 由紀子 客員准教授 (名大院工)
 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
 齊藤 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
 南 慎太郎 特別協力研究員
 SIMON, Damien Stephane 大学院生
 杉坂 かな恵 技術支援員
 鷲尾 みどり 技術支援員
 鈴木 規子 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
 AVARVARI, Narcis 外国人研究職員
 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
 石川 裕子 事務支援員

メゾスコピック計測研究センター

センター長(併) 岡本 裕巳

物質量子計測研究部門

大森 賢治 教授(併)
 杉本 敏樹 准教授(併)
 南谷 英美 准教授(併)

織細計測研究部門

岡本 裕巳 教授
 江原 正博 教授(併)
 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
 成島 哲也 特別訪問研究員

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
 LIU, Shuyi 学振外国人特別研究員
 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)
 大西 洋 教授(クロスアポイント
 メント;神戸大院理)(電
 子構造研究部門)
 高谷 光 教授(兼)(帝京科学大
 生命環境)
 三橋 隆章 特任助教(分子科学研究
 所特別研究員)
 陳 佳卓 特任専門員
 増田 道子 事務支援員
 神谷 美穂* 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
 鈴木 昌世 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
 村手 宏輔 特別訪問研究員
 瀧上 浩幸 特別訪問研究員
 角谷 利恵 特任専門員
 殖粟 敦 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
 伊吹 剛 技術支援員
 鄭 稀燮 技術支援員
 小野 陽子 事務支援員
 稲垣 弥生 事務支援員
 奥原 紀恵 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(兼)(名大シンクロ
 トロン光研究センター)

電子ビーム制御研究部門

平 義隆 准教授
 大東 琢治 准教授(クロスアポ
 イントメント;高エネ研)
 杉田 健人 助教
 松田 博之 特任研究員
 SALEHI DERAKHTANJANI, Elham 特任研究員
 後藤 啓太 特別共同利用研究員
 田部 圭悟 特別共同利用研究員

光物性測定器開発研究部門

松井 文彦 教授
 田中 清尚 准教授
 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

光化学測定器開発研究部門

岩山 洋士 助教
 枚本 泰伸 特任専門員
 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
石山 修	特任研究員
中本 圭一	特任研究員
太田 康仁	特任研究員
賀来 美恵	特任研究員
伊木 志成子	特任専門員
長尾 春代	特任専門員
大原 三佳	特別協力研究員
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
船木 弓子	事務支援員
栗田 佳子	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
片柳 英樹	助手
藤田 浩正	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
横田 光代	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
大貫 隼	助教(兼)
石田 干城	助手
小林 稜平	学振特別研究員
稲井 直人	特任研究員
金澤 悠紀	特任研究員
MAHMOOD, Md Iqbal	特任研究員
ZHAO, Pei	特任研究員
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)	
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	准教授(兼) (名市大薬)
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)
谷本 勝一	学振特別研究員
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
西 栄美子	研究員
平峰 里菜	技術支援員
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	准教授(兼) (名市大薬)

技術推進部	部長 繁政 英治	計算情報ユニット	ユニット長 岩橋 建輔
原田 美幸	技師	岩橋 建輔	主任技師
内山 功一	主任技術員	水谷 文保	技師
光技術ユニット	ユニット長 林 憲志	神谷 基司	主任技術員
中村 永研	主任技師	内藤 茂樹	主任技術員
林 憲志	技師	澤 昌孝	技術員
牧田 誠二	技師	長屋 貴量	技術員
岡野 泰彬	主任技術員	木下 敬正	技術員
矢野 隆行	主任技術員	矢崎 稔子	技術支援員
山崎 潤一郎	主任技術員	機器ユニット	ユニット長 繁政 英治
酒井 雅弘	主任技術員	高山 敬史	技師
近藤 直範	主任技術員	藤原 基靖	主任技術員
手島 史綱	主任技術員	上田 正	主任技術員
湯澤 勇人	技術員	浅田 瑞枝	技術員
太田 紘志	技術員	賣市 幹大	技術員
水川 哲徳	技術支援員	岡野 芳則	技術員
装置開発ユニット	ユニット長 近藤 聖彦	宮島 瑞樹	技術員
近藤 聖彦	主任技師	朝倉 由希子	事務支援員
豊田 朋範	技師	田中 景	事務支援員
松尾 純一	主任技術員	鶴田 由美子	事務支援員
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		
水谷 伸雄	技術支援員		

整理日付は 2022 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

2022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[1,0]	3[2,0]	3[1,0]	2[1,1]	1
	准教授	0	1[1,0]	1[2,0]	3[1,0]	4[2,1]	0	0
	主任研究員	0	0	0	0	0	0	0
	助 教	0	6	6	6	10	0	0
	特任助教	0	0	0	0	0	1	0
	研究員	1	2	3	2	3	0	5
	小計	2	11[3,0]	13[3,0]	14[3,0]	20[3,1]	3[1,1]	6
研究 支援	技術職員	3	0*3					
	特任専門員*2	8	7*3					
	再雇用職員	0	1*3					
	技術支援員	1	11*3					
	事務支援員	7	14*3					
	小計	19	33					
合計		21	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	2	0	0	1	2	20 (0/0)	[7,1]
	准教授	3	0	0	2	2	16 (2/0)	[6,1]
	主任研究員	0	1	0	0	0	1 (0/0)	[0,0]
	助 教	2[0,1]	0	0	0	1	31 (1/2)	[0,1]
	特任助教	0	0	0	0	0	1 (0/0)	[0,0]
	研究員	2	6	0	4	3	31 (8/10)	[0,0]
	小計	9[0,1]	7	0	7	8	100 (11/12)	[13,3]
研究 支援	技術職員	11	7	7	7	0	35	
	特任専門員*2	1	2	0	1	0	19	
	再雇用職員	1	0	1	1	0	4	
	技術支援員	2	1	2	1	0	18	
	事務支援員	2	5	1	2	0	31	
	小計	17	15	11	12	0	107	
合計		26	22	11	19	8	207	

所内職員は1の実数として表に現す、併任は数えない。女性(A)と外国人(B)研究者人数は、右端合計列に(A/B)で内数を記す。機構外本務の客員数(C)と兼務者数(D)は、[C,D]で外数で数える。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、助教および主任研究員）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（2022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3期							第4期	現員数* 2022年5月1日現在
	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2016～ 2021 計	2022	
教授	1	0	0	2	1	1	5	1	20 (0/0)
准教授	2	0	2	3	3	1	11	1	16 (2/0)
主任研究員	0	0	1	0	1	0	2	1	1 (0/0)
助教	2	4	5	4	3	4	22	2	31 (1/2)
特任助教	1	1	1	2	3	0	8	3	1 (0/0)
研究員	14	18	15	23	10	8	88	11	31 (8/10)
計	20	23	24	34	21	14	136	19	100 (11/12)

* (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3期							第4期
	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2016～ 2021 計	2022
教授	0	1	1	0	0	1	3	0
准教授	1	2	4	1	1	1	10	5
主任研究員	0	0	0	0	0	0	0	0
助教	5	4	5	9	5	4	32	12
特任助教	1	2	0	1	1	0	5	0
研究員	8	14	22	19	15	10	88	9
計	15	23	32	30	22	16	138	26

② 客員教員等

区分	職名	創立～2022年度	現員数 ^{*2}
			2022年5月1日現在
客員研究部門（国内）	教授	169	7(1)
	准教授	181	6(2)
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					
		2017	2018	2019	2020	2021	2022
収 入	運営費交付金	3,037,793	2,286,166	2,267,343	2,171,164	2,289,408	2,503,417
	施設整備費補助金	80,000	0	602,790	269,940	0	0
	補助金等収入 小計	73,080	67,920	60,973	93,974	37,177	29,184
	研究大学強化促進費補助金	46,800	45,800	38,300	36,833	33,366	27,283
	科学技術人材育成費補助金	26,280	22,120	22,673	0	0	0
	先端研究設備整備費補助金	0	0	0	49,973	0	0
	中小企業経営支援等対策費補助金	0	0	0	7,168	3,811	1,901
	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	29,470	28,753	25,055	25,626	43,046	53,355
	産学連携等研究収入及び寄附金収入等 小計	1,408,087	1,733,856	1,125,284	749,476	1,042,648	1,068,661
	産学連携等研究収入	1,306,087	1,613,501	1,001,996	642,247	938,897	970,376
	寄附金	30,440	44,333	51,976	49,487	47,331	32,230
	大学院教育経費収入	71,560	76,022	71,312	57,742	56,420	66,055
	目的積立金取崩額	0	0	0	0	0	28,740
科学研究費助成事業（直接経費）	389,661	379,364	349,420	371,260	391,720	349,661	
収入合計	5,018,091	4,496,059	4,430,865	3,681,440	3,803,999	4,033,018	
支 出	人件費	981,592	946,412	907,535	965,954	1,010,976	1,010,782
	研究経費	550,286	532,908	531,766	607,004	561,273	413,771
	共同利用経費	653,901	636,962	849,783	505,535	727,023	590,703
	教育研究支援経費	0	0	0	0	0	0
	一般管理費	2,019	2,335	3,313	3,776	4,442	5,270
	施設整備費	80,000	0	602,790	269,940	0	0
	補助金等 小計	73,080	67,920	60,973	93,974	37,177	29,184
	研究大学強化促進費補助金	46,800	45,800	38,300	36,833	33,366	27,283
	科学技術人材育成費補助金	26,280	22,120	22,673	0	0	0
	先端研究設備整備費補助金	0	0	0	49,973	0	0
	中小企業経営支援等対策費補助金	0	0	0	7,168	3,811	1,901
	産学連携等研究経費及び寄附金事業費等 小計	1,243,105	1,692,623	1,087,798	722,209	1,019,172	930,818
	産学連携等研究費	1,161,348	1,595,398	989,107	633,151	927,079	843,306
	寄附金事業費	10,197	21,203	27,275	31,316	35,673	21,457
大学院教育経費	71,560	76,022	71,416	57,742	56,420	66,055	
科学研究費助成事業（直接経費）	374,167	367,091	336,345	331,697	439,533	338,817	
支出合計	3,958,150	4,246,251	4,380,303	3,500,089	3,799,596	3,319,345	

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		2017	2018	2019	2020	2021	2022
		件数 (件)	金額 (千円)						
寄付金	分子科学研究所	件数 (件)		15	17	20	24	16	9
		金額 (千円)		25,021	25,483	37,505	37,224	31,394	18,203
	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	4	3	1	1	1
		金額 (千円)		2,000	4,500	3,100	2,000	1,500	610
文部科学省 科学研究費 助成事業 *	分子科学研究所	件数 (件)		83	97	81	76	74	87
		金額 (千円)		389,662	492,319	453,118	479,779	508,495	453,450
	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)		15	16	15	20	19	24
		金額 (千円)		78,700	50,439	104,130	80,331	73,515	94,026
共同研究 *	分子科学研究所	件数 (件)		6	6	8	9	10	12
		金額 (千円)		58,961	36,374	35,396	34,337	40,380	21,761
	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	0	0	0	0
		金額 (千円)		4,644	3,457	0	0	0	0
受託研究 *	分子科学研究所	件数 (件)		24	25	25	21	25	27
		金額 (千円)		1,205,634	1,523,539	914,065	563,906	859,124	910,486
	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	2	1	2	3	6
		金額 (千円)		23,260	28,660	16,250	14,560	17,810	56,861
合計金額 (千円)				1,679,278	2,077,715	1,440,084	1,115,246	1,439,393	1,403,900

* 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	117,000	0	0	1	117,000
新学術領域研究	2	26,910	1	12,610	3	39,520
挑戦的研究（開拓）	1	5,330	0	0	1	5,330
挑戦的研究（萌芽）	6	14,950	1	5,070	7	20,020
若手研究	14	29,250	2	3,351	16	32,601
学術変革領域研究A	5	54,080	1	7,150	6	61,230
学術変革領域研究B	1	6,760	0	0	1	6,760
基盤研究（S）	1	23,140	0	0	1	23,140
基盤研究（A）	5	65,260	0	0	5	65,260
基盤研究（B）	12	53,430	3	16,380	15	69,810
基盤研究（C）	7	10,790	3	2,470	10	13,260
研究活動スタート支援	3	3,817	1	1,560	4	5,377
国際共同研究（帰国発展）	1	1,820	0	0	1	1,820
国際共同研究強化（B）	1	5,330	0	0	1	5,300
特別研究員奨励費	4	5,070	2	3,120	6	8,190
計	64	422,937	14	51,711	78	474,648

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	0	0	1	13,000	1	13,000
新学術領域研究	2	10,173	2	18,915	4	29,088
挑戦的研究（開拓）	2	1,690	0	0	2	1,690
学術変革領域研究A	2	2,080	2	4,160	4	6,240
学術変革領域研究B	1	260	0	0	1	260
基盤研究（S）	0	0	1	3,900	1	3,900
基盤研究（A）	3	6,890	1	1,040	4	7,930
基盤研究（B）	7	5,460	1	390	8	5,850
基盤研究（C）	2	260	2	910	4	1,170
計	19	26,813	10	29,315	29	69,128

間接経費を含む。

事業体	事業名		実施課題数 (代表者／分担者)	交付金額
文部科学省	科学技術試験研究委託事業	光・量子飛躍フラッグシップ プログラム Q-LEAP	0 /4	150,756
		NMR プラットフォーム	0 /1	2,041
環境省	令和4年度地域資源循環を通じた脱炭素化に向けた 革新的触媒技術の開発・実証事業		0 /1	23,460
防衛装備庁	令和2年度安全保障技術研究推進制度における委託事業		0 /1	175,284
国立研究開発法人 科学技術振興機構	ムーンショット型研究開発事業		1 /2	180,375
	戦略的創造研究推進事業	さきがけ	6 /0	43,759
		CREST	0 /4	44,460
	未来社会創造事業	大規模プロジェクト型	0 /1	89,825
	創発的創造研究推進事業		4 /0	55,349
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	290,860
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	6,513
	廃炉・汚染水対策事業費補助金（燃料デブリの分析精度 の向上、熱挙動の推定及び簡易分析のための技術開発）		1 /0	2,003
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 /2	156,603
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
株式会社コンボン研究所	物質、生命、コンピュータ科学の融合領域における 光科学視点の調査研究		1 /0	5,500
計			14 /19	967,348

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（2023.3）岡崎情報図書館は雑誌1,521種（和291,洋1,230）、単行本96,903冊（和13,322,洋83,581）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図書館システムを利用して、図書の貸出しや返却の処理、単行本並びに雑誌の検索等のサービスを行っている。このほかSciFinder、Reaxys等のデータベース検索や学術文献検索システムによるオンライン情報検索のサービスも行っている。また、ライブラリーカードを兼ね備えた職員証・入構証を使用することによって、岡崎情報図書館は24時間利用できる体制になっている。

2-10-2 岡崎コンファレンスセンター

岡崎コンファレンスセンターは、国内外の学術会議はもとより研究教育活動にかかる各種行事に利用できる岡崎3機関の共通施設として1997年2月に竣工した。センターは共同利用研究者の宿泊施設である三島ロッジに隣接して建てられている。

岡崎3機関内の公募によって「岡崎コンファレンスセンター」と命名された建物は、延べ床面積2,863 m²、鉄筋コンクリート造2階建てで、大型スクリーン及びAV機器等を備えた200余名が参加可能な大隅ホール、112名の中会議室、100名の小会議室などが設けられている。

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 工事中

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され、知的財産権の保有に対する評価が根付いてきたため、研究所における特許保有件数は着実に増加している。内容は、ゲルマクレンおよび香料組成物、光誘起力測定装置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。一部の成果は実用化され、2020年度以降は、特許収入の増加につながっている。

2021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3件、2022年度は、個人有0件、機構有4件であった（2023年3月31日現在）。

特許登録数と特許料収入

中期計画区分	第2期	第3期	第4期
年度	2010～ 2015	2016～ 2021	2022
出願件数	67	92	4
国内	37	55	2
国外	30	37	2
登録件数	59	61	8
国内	37	30	6
国外	22	31	2
総保有件数	66	107	108
国内	44	61	63
国外	23	46	45
特許料収入（千円） 国内外合計	1,670	54,548	24,330

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。国際交流協定に関しては3-2-1項に、東アジアやASEAN諸国との国際交流や国際インターンシッププログラムに関しては5-6項に詳述する。

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。2023年度には分子科学2専攻は総研大の改組によって分子科学コースとして統合されるが、教育面で本質的に大きな変更はない。

2020-2022年度の3年間はコロナ禍により、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。コロナ禍が収束を迎えつつある現状では研究会や国際共同研究、国際インターンシップに関しては少しづつ従来の活力を取り戻しつつある。一方で大学院への留学進学者は3年に亘ってほぼシャットダウンしており、人材の掘り起こしは急務であろう。

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。分子科学研究所はポスト・コロナにおいてますます、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マテリアル先端リサーチインフラ事業(5-5参照)

(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 2022年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名 (通年)		提案代表者
CO ₂ の水中電気還元 to 有効な金属錯体-炭素電極の高耐久性を目指した不活性化機構の解析と解明	名古屋大学	斎藤 進
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	藤川 茂紀

(2) 協力研究

課 題 名 (通年)		提案代表者
高分解能モメンタムマイクロスコブによる実用有機半導体材料の軌道トモグラフィ	筑波大学	山田 洋一
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	西山 桂
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	田中 悟

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	佐藤 宇史
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	岡林 潤
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	吉村 崇
単結晶有機半導体「準ホモエピタキシャル」接合の太陽電池応用への試み	東京理科大学	中山 泰生
超低電圧駆動有機 EL デバイスの開発および性能評価	富山大学	森本 勝大
有機ホウ素化合物による非フラレン n 型半導体の開発と太陽電池の作製評価	名古屋工業大学	小野 克彦
Momentum Microscopy 装置による 3D フェルミ面計測手法の確立とその応用	大阪大学	田中慎一郎
超薄膜グラフェンを用いた独自の高効率電子収量用液体セルの開発	名古屋大学	三石 郁之
ジスルフィド (S-S) 結合の触媒的開裂と再構築による非対称ジスルフィドの合成	山形大学	皆川 真規
高次非線形分光計算による界面水物性の分子論的解析	慶應義塾大学	稲垣 泰一
ポリグルタミン病原遺伝子のリピート関連性非 ATG 依存性翻訳産物へのレーザー照射後の凝集解離の分子シミュレーション	群馬大学	中村 和裕
シュタウディングーライゲーション法を用いた N 結合型糖鎖構造構築反応の開発	青森大学	鈴木 達哉
BL6U の Momentum Microscope でのスピン物性科学の展開	大阪大学	菅 滋正
六方晶格子を持つ水素化物ハライド Ba ₂ H ₃ X (X = Cl, Br, I) のヒドリド導電特性	京都大学	生方 宏樹

課 題 名 (前期)

提案代表者

Chirality-Induced Spin Selectivity の基礎理論研究	放送大学	岸根順一郎
PyBTM 及び F ₂ PyBTM 安定発光性ラジカルのパラ置換体の開発	龍谷大学	服部 陽平
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	黄 晋二
分子動力学計算を用いた準安定な超分子構造体のダイナミクス解析	京都府立大学	沼田 宗典
光機能性分子材料の電子と振動の自由度が協奏する光化学初期過程の測定	九州大学	宮田 潔志

課 題 名 (後期)

提案代表者

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	黄 晋二
光電子運動量顕微鏡による MXenes 単結晶の電子状態の研究	名古屋大学	伊藤 孝寛
蓄積リング自由電子レーザー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	全 炳俊
高い時間コヒーレンスを持つ高輝度 EUV 光を実現するコヒーレント高調波発生とその特性評価	秋田工業高等専門学校	坂本 文人
電子不足高原子価イリジウム触媒の開発と C-H 官能基化反応への応用	北海道大学	吉野 達彦
チェレンコフ位相整合高出力テラヘルツ波光源の開発	名古屋大学	村手 宏輔
広帯域 2 光子光電子分光による内包フラレン超原子集積体の電子ダイナミクス計測	大阪公立大学	渋谷 昌弘
クーロン相互作用で不斉反応場を構築した金属酸化物クラスター触媒の新合成と評価	東京都立大学	山添 誠司

(3) 研究会

課 題 名 (前期)

提案代表者

森野ディスカッション	公益信託分子科学奨励森野基金	宗像 利明
イオン液体の構造と物性予測のデータ解析技術	防衛大学校	阿部 洋
金属酸化物表面と薄膜の構造化学	神戸大学	大西 洋

課 題 名 (後期)

提案代表者

UVSOR-III における多様な量子ビームの発生と先端利用に関する研究会	分子科学研究所	平 義隆
軟 X 線共鳴散乱・反射率	Diamond Light Source	荒木 暢
ソフトマテリアル・ソフトマターのナノ～メソスケール構造解析		
生体分子材料を探る：発動分子のさらなる理解と設計に向けて	東京工業大学	上野 隆史

(4) 若手研究活動支援

課 題 名 (前期)

提案代表者

第 20 回 ESR 夏の学校：ESR 装置の基礎と原理・生体応用	神奈川大学	平野 弘樹
-----------------------------------	-------	-------

(6) 施設利用

① UVSOR 施設利用

課 題 名 (前期)	提案代表者
ドーパント周囲に潜む空隙型欠陥の検出を目指した可視光ガンマ線同時照射陽電子消滅寿命分光の開発	山形大学 北浦 守
透過型 NRF を用いた非破壊核種分析における温度の影響に関する研究	日本原子力研究開発機構 小泉 光生
γ線偏光検出用コンプトンカメラの基礎研究	東京大学 島添 健次
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
BL1U アンジュレータを用いた Flat-LCS ガンマ線の特性と NRF 反応断面積絶対値測定に関する研究	京都大学 大垣 英明
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	大阪公立大学 堀 史説
温度およびガス雰囲気を制御したガンマ線誘起陽電子消滅寿命測定法の開発	大阪産業技術研究所 道志 智
単一電子蓄積を利用した放射光の時空間特性の研究	広島大学 加藤 政博
放射光の時間干渉性を利用した新奇な放射光利用法の開拓	広島大学 加藤 政博
イオン化終状態を分離した高分解能光電子円二色性の測定	広島大学 高口 博志
軟X線ダブルパルスによる多電子波束の量子干渉	九州シンクロトロン光研究センター 金安 達夫
軟X線吸収分光法による高効率有機太陽電池のための金属ドーピング金属酸化物の伝導帯電子構造解析	千葉大学 奥平 幸司
H-MFI ゼオライト上の炭化モリブデン活性種の XANES による MTB 触媒反応時の炭化進行の構造解析	埼玉工業大学 有谷 博文
X線吸収分光による金属原子を内包した0次元シリコンケージ構造体のシリコン原子の構造解析	慶應義塾大学 中嶋 敦
日米共同・太陽フレアX線集光撮像分光観測ロケット実験 FOXSI-4 搭載装置の開発と評価	国立天文台 成影 典之
希土類元素含有複合酸化物の局所構造と M-edge XANES スペクトルに関する基礎的研究	京都大学 朝倉 博行
共添加二酸化チタンにおける添加元素の局所環境解析	大阪公立大学 村田 秀信
ダブルスピネル構造中カチオンの局所構造	九州大学 吉岡 聰
NEXAFS 分光用試料搬送装置を用いた電池材料の大気非暴露分析	九州シンクロトロン光研究センター 小林 英一
紫外光電子分光法による金属をドーピングした金属酸化物ナノ粒子/有機薄膜界面の電子状態評価	千葉大学 奥平 幸司
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 II	高エネルギー加速器研究機構 足立 純一
軟X線散乱によるネマチック液晶におけるナノクラスター構造と強誘電性の相関探索	理化学研究所 荒岡 史人
金属カルボニル化合物液体試料についての XAS 測定	東京大学 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 大野 真也
水中での脂質二重膜の電子状態とイオン配位構造	豊橋技術科学大学 手老 龍吾
溶液光化学反応の軟X線吸収分光測定	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
共鳴軟X線散乱法によるポリマーの構造解析	分子科学研究所 岩山 洋士
【審査免除】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 山田 泰之
軟X線共鳴散乱による自発形成長周期構造液晶の精密構造解析	京都大学 高西 陽一
軟X線共鳴散乱による機能性フッ素ポリマーの構造分析	大阪大学 山ノ井 航平
CK 端 XAS 計測によるスマネンの溶液中でのスタッキング挙動の観測	大阪大学 植竹 裕太
人工光合成をめざす半導体光触媒の水中 XAFS 測定：金属カチオン外殻電子遷移の計測	神戸大学 大西 洋
水・DMSO 2成分溶液系における水の電子構造変化	広島大学 岡田 和正
オペランド軟X線 XAFS 観測による炭酸 Co-Ni 水分解触媒の活性化メカニズムの解明	山口大学 吉田 真明
Temperature Dependence of the Interaction of Calcium Dication with Water Probed by X-Ray Absorption Spectroscopy	Synchrotron SOLEIL CEOLIN, Denis
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による詳細評価	山形大学 田島 靖久
バンド構造・発光起源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創成	東北大学 黒澤 俊介
自己発光ハロゲン化物シンチレータにおける電荷遷移移動発光の調査	埼玉大学 小玉 翔平
深紫外発光アルミン酸亜鉛薄膜の成長方位と結晶性の評価	静岡大学 小南 裕子
整備課題 (リモート測定にむけた整備)	分子科学研究所 岩山 洋士
プラズマエッチングガスの解離過程の解明	名古屋大学 石川 健治
強相関半導体の電流誘起金属化の電子状態	大阪大学 木村 真一
三元化合物・アルカリ銀ハライド結晶の光学特性の研究	大阪公立大学 河相 武利

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真空紫外・紫外・可視域遷移スペクトル形状に与える影響の解析	名古屋大学	吉野 正人
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	江島 丈雄
レドックスフロー電池の窒素ドーパカーボン触媒のオペランド電子状態解析	産業技術総合研究所	細野 英司
高電位型 Li-Fe-Mn-Co 系ポリアニオン正極材料の酸化還元反応分布の観測	産業技術総合研究所	朝倉 大輔
STXM による細胞核内の核酸およびタンパク質分布解析の高精度化	東海大学	伊藤 敦
走査型透過 X 線顕微鏡を用いたポリマーの湿度制御下における化学状態変化	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	三石 郁之
小惑星リュウグウに記録される分子多様性に記録される真の地球外有機物進化の決定 ～「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	藪田ひかる
多機関連携分析を駆使したリュウグウ試料に含まれる有機物の全容解明への挑戦	海洋研究開発機構	伊藤 元雄
Hunting for Organosulfur and Organonitrogen Content in Aged Dust Aerosol Particles Transported by Extreme Dust Storms	University of Gothenburg	KONG, Xiangrui
STXM in Characterizing Lysosomal Storage Materials in Salla Disease Mouse Model	University of Oulu	MINNA, Patanen
Probing, of Drugs and Nanocarriers in the Viable Parts of Human Skin	Freie Universität Berlin	RÜHL, Eckart
Understanding Interface Kinetics between Primary Battery Particles (LiCoO ₂) and Solid Electrolyte via Operando STXM	Seoul National University	LIM, Jongwoo
Interfacial Engineered Nanostructural Photoelectrodes for Efficient Water Decomposition	Tamkang University	PONG, Way-faung
有機-無機界面磁気結合を利用した原子層物質の磁気状態制御	名古屋大学	宮町 俊生
XMCD を用いた β -Mn 型カイラル磁性体 Fe _{2-x} Pd _x Mo ₃ N および Co _{2-x} Pd _x Mo ₃ N エピタキシャル薄膜における磁気状態の研究	名古屋大学	伊藤 孝寛
原子分解能・電界電子放出顕微鏡の開発	東京大学	柳沢 啓史
磁気ボトル型電子分析器を用いた電子同時計測	富山大学	彦坂 泰正
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 II	分子科学研究所	解良 聡
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
整備課題（高精度標準計測のための整備）	分子科学研究所	岩山 洋士
アモルファス半導体薄膜の光照射及び熱処理効果に関する研究	岐阜大学	林 浩司
グラフェン超薄膜の紫外・X線透過率測定	名古屋大学	三石 郁之
高効率水分解水素生成光電極設計に向けた高濃度 3d 遷移金属添加 AlN の光照射下の電子構造解明	京都工芸繊維大学	今田 早紀
白色発光特性を有する炭素含有多孔質シリカ中の炭素の局所構造の解明	大阪産業技術研究所	道志 智
軟 X 線内殻吸収分光で明らかにするスピントロニクスオーバー現象に関連する鉄配位高分子の配位子場効果	沖縄科学技術大学院大学	山神 光平
高分解能 ARPES で探る新奇カゴメ超伝導体への元素置換効果	東北大学	佐藤 宇史
高分解能角度分解光電子分光法による二次元単層ホウ化銅の電子状態の研究	東京大学	堀尾 眞史
垂直磁気異方性を示す Mn 合金のスピン分解・軌道分解光電子分光	東京大学	岡林 潤
角度分解光電子分光によるグラフェン層間化合物の界面効果の研究	東京工業大学	一ノ倉 聖
BL5U 光電子エンドステーションの整備と開発	分子科学研究所	田中 清尚
【審査免除】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
偏光依存角度分解光電子分光による Zr ₃ SnC ₂ の表面電子状態の研究	名古屋大学	伊藤 孝寛
原子制御した 3 次元立体構造シリコン (111) ファセット表面上に作製した超薄膜からの光電子分光	奈良先端科学技術大学院大学	服部 賢
層状希土類化合物における電荷密度波転移	大阪大学	中村 拓人
角度分解光電子分光による新奇トポロジカル相の開拓	岡山大学	横谷 尚睦
ARPES による銅酸化物高温超伝導相図の再考 II	広島大学	出田真一郎
合金を用いた多層膜反射鏡の特性調査	東京大学	吉川 一朗
探査機搭載用光学フィルタの性能評価	東京大学	吉岡 和夫
惑星探査に向けた紫外線吸収フィルタの性能評価	立教大学	桑原 正輝
可視域発光観測による真空紫外光の偏光評価 II	九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫
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 (III)	東京理科大学	中山 泰生
時間分解遠赤外分光による光電変換物質の電子-格子相互作用とポーラロンダイナミクスの解明	分子科学研究所	西田 純
強相関半導体の光誘起局在・非局在転移の空間分布の観測	大阪大学	木村 真一
放射光顕微赤外分光法を用いた難分解性有機化合物の構造解析	高エネルギー加速器研究機構	川崎 平康

低エネルギー高分解能 ARPES による強誘電ワイル半金属の探索	東北大学	佐藤 宇史
T* 型銅酸化物高温超伝導体の擬ギャップの特性解明	東京大学	堀尾 眞史
高分解角度分解光電子分光による磁性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	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 III	分子科学研究所	解良 聡
BL7U 光電子エンドステーションの整備と開発	分子科学研究所	田中 清尚
固体電解質 $\text{La}_{(1-x)/3}\text{Li}_x\text{NbO}_3$ ($x = 0, 0.08$) および $\text{Li}_{3x}\text{La}_{2/3-x}\text{TiO}_3$ バルク単結晶の角度分解光電子分光	名古屋大学	伊藤 孝寛
低次元トポロジカル物質における Lifshitz 転移へのドーピング効果	大阪大学	中村 拓人
層状窒化塩化物超伝導体の電子構造の直接観測	岡山大学	横谷 尚睦
高分解能角度分解光電子分光による三層系銅酸化物高温超伝導体の電子構造研究	広島大学	出田真一郎
多角入射減衰全反射型紫外分光法による有機半導体/イオン液体界面の電子状態深さ分解研究	大阪大学	田邊 一郎
高速シンチレータ材料におけるエネルギー移動と内殻励起の寄与の定量的解析	東北大学	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	吉川 一朗
隕石および黒色サンプルにおける紫外線反射率の定量評価	東京大学	吉岡 和夫
ワイドバンドギャップ半導体の可視-真空紫外複素屈折率スペクトル	福井大学	福井 一俊
深紫外分光的手法による資源探索のための鉱物分析	大阪大学	清水 俊彦
最小電離損失粒子を用いた原子核乾板の感度評価	名古屋大学	中村 光廣

課 題 名 (後期)

提案代表者

可視光ガンマ線同時照射陽電子消滅寿命分光による共賦活不純物の光誘起価数転移の観測	山形大学	北浦 守
その場陽電子消滅測定による鉄試料における加工誘起空孔形成	千葉大学	藤浪 眞紀
γ 線偏光検出用コンプトンカメラの基礎研究	東京大学	鳥添 健次
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
真空紫外域円偏光照射によるアミノ酸分子のキラリティ発現に関する研究	核融合科学研究所	小林 政弘
BL1U アンジュレータを用いた Flat-LCS ガンマ線の特性と NRF 反応断面積絶対値測定に関する研究	京都大学	大垣 英明
電解水素チャージで純鉄中に形成される原子空孔のガンマ線誘起陽電子寿命法を用いたその場計測	京都大学	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	大阪公立大学	堀 史説
新規キラル化合物の孤立系光電子円二色性の研究	広島大学	高口 博志
【審査免除】 軟X線ダブルパルスによる多電子波束の量子干渉	九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫
単一電子からのアンジュレータ放射の観測	広島大学	加藤 政博
軟X線吸収分光法による高効率有機太陽電池のための金属ドーピング金属酸化物の伝導帯電子構造解析	千葉大学	奥平 幸司
H-MFI ゼオライト上の炭化モリブデン活性種の XANES による MTB 触媒反応時の炭化進行の構造解析	埼玉工業大学	有谷 博文
X線吸収分光による金属原子を内包した0次元シリコンケージ構造体のシリコン原子の構造解析	慶應義塾大学	中嶋 敦
日米共同・太陽フレアX線集光撮像分光観測ロケット実験 FOXSI-4 搭載装置の開発と評価	国立天文台	成影 典之
希土類元素含有複合酸化物の局所構造と M-edge XANES スペクトルに関する基礎的研究	京都大学	朝倉 博行
共添加二酸化チタンにおける添加元素の局所環境解析	大阪公立大学	村田 秀信
ダブルスピネル構造中カチオンの局所構造	九州大学	吉岡 聡
NEXAFS 分光法による試料搬送装置を用いた固体電解質の分析	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
紫外光電子分光法による金属をドーブした金属酸化物ナノ粒子/有機薄膜界面の電子状態評価	千葉大学	奥平 幸司
各種共鳴状態を利用した軟X線散乱によるソフトマター超分子構造の探索	理化学研究所	荒岡 史人
金属カルボニル化合物液体試料についての XAS 測定	東京大学	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	大野 真也
水中での脂質二重膜の電子状態とイオン配位構造	豊橋技術科学大学	手老 龍吾
溶液光化学反応の軟X線吸収分光測定	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
整備課題 (共鳴軟X線散乱測定)	分子科学研究所	岩山 洋士
軟X線分光法を利用した電解生成型メタン酸化触媒活性種の電子状態解析	名古屋大学	山田 泰之
軟X線共鳴散乱による自発形成長周期構造液晶の精密構造解析 (II)	京都大学	高西 陽一

人工光合成をめざすチタン酸ストロンチウム (SrTiO ₃) 光触媒の水中 XAFS 測定 水・DMSO 2 成分溶液系における水の電子構造変化 Understanding the Inter-Ion Interactions in Natural Salt Brines from a Martian Analogue Site	神戸大学 広島大学 University of Gothenburg	大西 洋 岡田 和正 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 寿命測定による詳細評価 バンド構造・発光起源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創成 自己発光ハロゲン化物シンチレータにおける電荷遷移移動発光の調査 深紫外発光アルミン酸亜鉛薄膜の成長方位と結晶性の評価 整備課題 (リモート測定にむけた整備) プラズマエッチングガスの解離過程の解明 強相関半導体の電流誘起金属化の電子状態 三元化合物・アルカリ銀ハライド結晶の光学特性の研究 六方晶窒化ホウ素膜の紫外から軟 X 線に至る広エネルギー帯域における発光収量の評価 暗黒物質探索実験に向けたダイヤモンドシンチレータの発光特性評価 ファイラー粒子間バウンドラバー構造の化学結合状態 走査型透過 X 線顕微鏡を用いたポリマーの劣化による化学状態変化 ビームラインおよび STXM の整備 レドックスフロー電池のカーボン触媒のオペランド電子状態解析 【審査免除】 STXM による細胞核内の核酸およびタンパク質分布解析の高精度化 彗星有機物の初期水質変成条件を STXM で決定する試み 【審査免除】 他機関連携分析を駆使したリュウグウ試料に含まれる有機物の全容解明への 挑戦 【審査免除】 Probing of Drugs and Nanocarriers in the Viable Parts of Human Skin	山形大学 東北大学 埼玉大学 静岡大学 分子科学研究所 名古屋大学 大阪大学 大阪公立大学 山形大学 筑波大学 東北大学 高エネルギー加速器研究機構 高エネルギー加速器研究機構 産業技術総合研究所 東海大学 広島大学 海洋研究開発機構	田島 靖久 黒澤 俊介 小玉 翔平 小南 裕子 岩山 洋士 石川 健治 木村 真一 河相 武利 北浦 守 梅本 篤宏 江島 丈雄 大東 琢治 大東 琢治 細野 英司 伊藤 敦 藪田 ひかる 伊藤 元雄
【審査免除】 Interfacial Engineered Nanostructural Photoelectrodes for Efficient Water Decomposition The Investigation of Concentration and Chemical Composition of Ice-Nucleating Particles from Biomass Burning Emissions レドックスフロー電池電解液のオペランド電子状態解析 有機-無機界面磁気結合を利用した原子層物質の磁気状態制御 XMCD を用いた β -Mn 型カイラル磁性体 Fe _{2-x} Pd _x Mo ₃ N および Co _{2-x} Pd _x Mo ₃ N エピタキシャ ル薄膜における磁気状態の研究 磁性ヘテロ薄膜構造の磁化方向制御に関する研究 原子分解能・電界電子放出顕微鏡の開発 磁気ボトル型電子分析器を用いた電子同時計測 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 II 反射率磁気円二色性測定でみる磁性体薄膜の立体構造 整備課題 (高精度標準計測のための整備) グラフェン超薄膜の紫外・X 線透過率測定 六方晶窒化ホウ素膜の紫外から軟 X 線に至る広エネルギー帯域における発光収量の評価 軟 X 線吸収分光法による遷移金属酸化物ナノ粒子の表面電子状態解析 高収率で水を 4 電子酸化する半導体光触媒の軟 X 線吸収分光 【審査免除】 高分解能 ARPES で探る新奇カゴメ超伝導体への元素置換効果 T' 型銅酸化物高温超伝導体の本質的な電子ドーピング効果の検証 垂直磁気異方性を示す Mn-Co 合金のスピン分解・軌道分解光電子分光 角度分解光電子分光による π 電子と d 電子の相互作用の研究 遷移金属リニ化合物薄膜の電子状態および化学状態観察 BLSU 光電子エンドステーションの整備と開発 磁性 i-MAX 相化合物 (Mo _{1/3} RE _{2/3}) ₂ AIC の終端面ドメイン選択角度分解光電子分光 熱電特性と電子構造の関係に関する光電子分光研究 原子制御した 3 次元立体構造シリコン (111) ファセット表面上に作製した超薄膜からの光 電子分光 TiSe ₂ の 3D フェルミ面の CDW 転移による形態変化 原子層強相関物質の角度分解光電子分光 ノーダルライン半金属 LaTe _{1+x} Sb _{1-x} の角度分解光電子分光 過剰ドーピング Bi2201 における電子状態の三次元性とフェルミ面対称性の破れの観測 合金を用いた多層膜反射鏡の特性調査	Freie Universität Berlin Tamkang University University of Gothenburg 産業技術総合研究所 名古屋大学 名古屋大学 名古屋大学 東京大学 富山大学 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 名古屋大学 山形大学 千葉大学 大阪公立大学 東北大学 東京大学 東京大学 東京工業大学 立教大学 分子科学研究所 名古屋大学 豊田工業大学 奈良先端科学技術大学院大学 大阪大学 大阪大学 岡山大学 広島大学 東京大学	RUEHL, Eckart PONG, Way-faung KONG, Xiangrui 朝倉 大輔 宮町 俊生 伊藤 孝寛 宮町 俊生 柳沢 啓史 彦坂 泰正 解良 聡 山本 航平 岩山 洋士 三石 郁之 北浦 守 奥平 幸司 吉田 朋子 佐藤 宇史 堀尾 真史 岡林 潤 一ノ倉 聖 前島 尚行 田中 清尚 伊藤 孝寛 松波 雅治 服部 賢 田中慎一郎 中村 拓人 横谷 尚陸 出田真一郎 吉川 一朗

探査機搭載用光学フィルタの性能評価	東京大学	吉岡 和夫
惑星探査に向けた紫外線吸収フィルタの性能評価	立教大学	桑原 正輝
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	の場 史朗
グラフェン超薄膜の紫外・X線透過率測定	名古屋大学	三石 郁之
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 (III)	東京理科大学	中山 泰生
時間分解遠赤外分光による光電変換物質の電子-格子相互作用とポーラロンダイナミクスの解明	分子科学研究所	西田 純
強相関半導体の光誘起局在・非局在転移の空間分布の観測	大阪大学	木村 真一
放射光顕微赤外分光法を用いた難分解性有機化合物の構造解析	高エネルギー加速器研究機構	川崎 平康
地球外有機物の3次元分布観察を目指した高輝度赤外分光マイクロトモグラフィ開発	広島大学	藪田ひかる
低エネルギー高分解能 ARPES による強磁性原子層薄膜の研究	東北大学	佐藤 宇史
光電子分光によるアモルファス p 型透明酸化半導体の電子構造探索	千葉大学	石井 久夫
【審査免除】 高分解角度分解光電子分光による磁性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	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 IV	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と開発	分子科学研究所	田中 清尚
角度分解光電子分光によるリチウム固体電解質バルク単結晶における光照射スペクトル変調効果のイオン伝導度依存性	名古屋大学	伊藤 孝寛
TiSe ₂ における低エネルギー領域での ARPES の励起光波長依存性の研究	大阪大学	田中慎一郎
極低キャリア CDW 物質における偏光依存 ARPES	大阪大学	中村 拓人
銅酸化物高温超伝導体におけるコヒーレンスピークのスペクトル強度の波数依存性	広島大学	出田真一郎
多角入射減衰全反射型紫外分光法による有機半導体/イオン液体界面の電子状態深さ分解研究	立教大学	田邊 一郎
高速シンチレ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	静岡大学	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	吉川 一朗
隕石および黒色サンプルにおける紫外線反射率の定量評価	東京大学	吉岡 和夫
ワイドバンドギャップ半導体の可視-真空紫外複素屈折率スペクトル	福井大学	福井 一俊
深紫外分光学的手法による資源探索のための鉱物分析	大阪大学	清水 俊彦
Yb を含む準結晶の UV-VUV 反射スペクトルと電子状態	徳島大学	岡村 英一
新規キラル化合物の円偏光特性評価のための高分解能光電子スペクトル測定	広島大学	高口 博志
放射光源を用いた光電離による核融合プラズマ、星間プラズマの模擬実験	核融合科学研究所	小林 政弘
多角入射 ATR 紫外分光法による有機半導体/イオン液体界面の電子状態研究: イオン液体依存性	立教大学	田邊 一郎
最小電離損失粒子を用いた原子核乾板の感度評価	名古屋大学	中村 光廣

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	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	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	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	北河 康隆
局所物理量を用いたイオンとスピンのダイナミクス解析	京都大学	瀬波 大土
高反応性のジボラン (4) と AI アニオンの性質の解明およびメタンの C-H 結合活性化へ向けた均一系触媒設計	名古屋大学	山下 誠
金属蛋白質の電子構造制御に関する理論的研究	広島市立大学	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	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溶液効果の理論的研究	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紫外領域におけるスペクトル解析	神戸大学	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	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
人工光合成に関する計算化学的研究	産業技術総合研究所	草間 仁
生体分子複雑系の全原子・粗視化シミュレーション研究	神戸大学	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	森 寛敏
溶液界面の構造と機能の計算化学	東北大学	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	野崎 京子
多環芳香族分子 (PAHs) の水和構造の赤外分光による研究	お茶の水女子大学	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	武次 徹也
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	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	佐藤 啓文
ヘロナミド類の抗真菌作用メカニズムの解明のための計算分子設計技術の開発	北陸大学	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	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	岡崎 進
ナノ制限空間における溶媒和と動態の解析	徳島大学	吉田 健
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	山口 兆
三次元バイ共役分子の構造と物性	大阪府立大学	津留崎陽大
ナノ炭素・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	山北 佳宏
三脚巴状分子の凝集誘起発光についての理論的研究	千葉工業大学	山本 典史
カメレオンモデルによるタンパク質構造転移をとまなう機能発現機構の自由エネルギーランドスケープ解析	名古屋大学	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	林 重彦
蛋白質による DNA 加水分解における溶媒の役割	九州工業大学	入佐 正幸
水, 氷, クラスレート・ハイドレート構造相転移の理論研究	岡山大学	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	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	関西学院大学	加藤 昌子
細菌感染の付着因子の糖鎖認識に関する理論研究	北里大学	能登 香
軟X線光科学に関する理論的研究	広島大学	高橋 修
エネルギー変換材料の計算科学	京都大学	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	大和田智彦
部位選択的熱流解析によるタンパク質分子機能の探索	名古屋大学	倭 剛久
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	鳥居 肇
機能性ソフトマテリアルの全原子分子動力学シミュレーション	北里大学	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	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	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	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	三重大学	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	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	波田 雅彦
次世代カーボンニュートラル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	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	北尾 彰朗
第一原理計算手法による半導体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	秋山 亨
理論計算による触媒機能の解明	東邦大学	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	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	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	中野 義明
ソフトマター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	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	山崎 祥平
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	米澤 康滋
金属クラスターの構造とその反応性	東京大学	小安喜一郎
天然紫外線防御物質マイコスポリン様アミノ酸の高速脱励起機構に関する理論的研究	山陽小野田市立山口東京理科大学	畠山 允
第一原理分子動力学シミュレーションによる水の変角振動緩和ダイナミクスの理論研究	富山大学	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	村岡 梓
振電相互作用に関する理論的研究	京都大学	佐藤 徹
不均一界面系における静的および動的物性の理論的研究	慶應義塾大学	畑中 美穂

水の輸送係数に対する構造規則性の寄与と相互作用モデルの関係	新潟大学	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	櫻井 英博
新奇ナノカーボン・共役ラダー分子群創出に向けた合理的な分子・反応・機能デザイン	名古屋大学	伊藤 英人
Electronic Trapping and Surface Protonation in TiO ₂ Nanostructures	東京工業大学	JUHASZ, Gergely
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	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	平野 恒夫
気相イオンの温度計測に関する研究	産業技術総合研究所	浅川 大樹
フラグメント分子軌道法による FIV プロテアーゼと HIV-1 プロテアーゼ阻害剤の相互作用解析	筑波大学	松井 亨
液体の統計力学理論による生体分子の機能解析	九州大学	吉田 紀生
荷電π電子系の設計・合成を基軸とした超分子集合体の創製	立命館大学	前田 大光
学際的研究のための気相中原子・分子電子励起状態精密量子化学計算	東洋大学	田代 基慶
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	森本 淳平
DFT 分子動力学計算を用いた溶融塩中の放射性廃棄物の溶解度評価	東北大学	穴戸 博紀
単層カーボンナノチューブの構造制御合成に向けた分子動力学シミュレーション	東京大学	丸山 茂夫
ジグリコールアミド系有機配位子によるランタノイド/マイナーアクチノイドイオンの選択的抽出に関する理論的研究	広島大学	井口 佳哉
キノリン骨格ピンス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	神谷 昌宏
量子化学計算による光化学系 II の構造・反応機構解析	名古屋大学	野口 巧
有機イリジウムポルフィリン錯体による赤色光アンケーシング反応の開発	東京大学	村田 慧
理論計算を利用した有機半導体材料の開発	相模中央化学研究所	花村 仁嗣
計算化学を用いた触媒の理論設計および有機材料の発光物性と分子運動の解析	北海道大学	伊藤 肇
分子動力学と第一原理計算を用いた有機結晶および液体の熱物性および熱電効果の計算科学的な研究	北海道大学	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の構造, 機能, ダイナミクス解析	東京大学	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	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	黒田 大祐
反応自動探索法の開発と応用	北海道大学	前田 理
3d 遷移金属からなる均一系及び不均一系触媒による CO ₂ 還元反応機構の調査	九州大学	伊勢川 美德
実験と計算による有機反応機構解析	東京大学	滝田 良
光回復酵素による光応答機構の解明	大阪大学	山元 淳平
新規高機能性の不斉触媒研究とベイズ最適化・機械学習への適用	名古屋工業大学	中村 修一
酸化物結晶および融体における構造緩和を駆動力とした不規則錯体構造の自発的形成過程の解析	大阪大学	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	鈴木 淳巨
Computational Investigation of Colossal Dielectric Permittivity Materials and Chemical Bonding Features of Transition Metal Dioxides	名古屋大学	VARADWAJ, Pradeep Risikrishna
五核鉄クラスターの電子状態と反応性の理論解析	名古屋大学	柳井 毅
粘度の基本セルサイズ効果をも踏まえた分子動力学シミュレーションによる巨大分子の流体力学半径と水和の関係	九州大学	秋山 良
分子金属錯体および多核クラスターの精密制御と電子状態の解明	東北大学	長田 浩一
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	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	(財)高度情報科学技術研究機構	手島 正吾
含ヘテロ非平面多環芳香族炭化水素の構造および性質	早稲田大学	加藤 健太
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	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	星本 陽一
生体分子自己集合系の分子シミュレーション	岡山大学	篠田 渉
機能性分子集合体の分子動力学研究: 親水性界面における水分子の機能解析	兵庫県立大学	石井 良樹
イオン(分子)認識における微視的水和効果と温度効果の解明	東京工業大学	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	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配向樹脂材料の熱伝導特性解析	東京工業大学	古屋 秀峰
2次元と3次元シミュレーションから明らかにするタンパク質の凝集	九州産業大学	末松安由美
染色体の新規モデル開発と種々の分子の原子間力顕微鏡像の理論計算	金沢大学	炭竈 享司
キラルナフタレン四量体色素の励起状態構造	岡山大学	高石 和人

Disruption Mechanism of the *Toxoplasma gondii* Parasitophorous Vacuole by IRGB6

放射性壊変や電磁波相互作用による生体分子の構造変化
 Ag 置換ゼオライト X におけるプロパン／プロピレン分離メカニズムの解明
 金属酸化物クラスターを利用した分子状複合体の設計と機能開拓
 SH₂ ドメインとリン酸化ペプチドの結合自由エネルギー解析
 低分子を認識・活性化する新規錯体に関する研究
 高電位鉄硫黄タンパク質の活性中心の構造と電子状態についての理論的解析
 溶液内および生体分子内で起こる化学反応と構造ダイナミクスの理論的解明
 界面活性剤凝集挙動の理論モデリング
 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と高機能性高分子の探索
 マルチドメインタンパク質の分子シミュレーションによる機能解析
 量子化学計算による有機分子触媒の精密設計
 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光機能分子の励起状態探索
 人工力誘起反応法を活用したヘテロ元素含有新反応剤と新規円偏光発光材料の開発
 電気化学的に発生させた活性種の反応における反応機構と反応選択性の理論化学的考察
 分子の構造, ESR スペクトルの計算
 イオンチャネルのイオン選択性機構の解析のための分子動力学シミュレーション
 両親媒性分子集合体への物質輸送機構の解明
 高分子破壊に関する分子シミュレーション
 CNT へのアルカン混合溶媒からの長鎖選択的吸蔵とその理解
 Antibody-Antigen Complex Prediction Optimized by Alpha Fold
 分子間電子移動を伴う化学反応と分子間相互作用の研究
 クロコン酸結晶における中赤外光による強誘電分極増強の理論的解明
 金属錯体に関する理論的研究
 薬物あるいは生理活性物質と大環状化合物との相互作用解析
 低分子非晶質有機半導体薄膜中の官能基配向評価に関する計算
 第一原理計算によるプラズマドライエッチングの局所的環境変化によるフロロカーボン膜の誘電膜における性質変化の予測
 円偏光発光を示す π 共役系化合物の開発
 金属カルボニル化合物の XAS スペクトルシミュレーション
 クラスター複合体の構造と反応性
 天然由来のリード化合物の構造と反応に関する量子化学的研究
 分子シミュレーションによる分子集合体の研究
 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
 光化学反応の制御と応用に関する理論的研究
 生体分子および溶媒の構造機能相関の解明
 フッ素化ポラタアントラアセンアニオンの電子的特性が配位重合に及ぼす影響
 半導体 MOF 開発のための含硫黄配位子設計
 新奇機能性分子材料の構造-物性相関に関する理論研究
 振動円二色性分光法の超分子キラリティへの応用
 発光性金属錯体の励起状態の研究
 歪んだ多環芳香族化合物の構造と性質
 新規な典型元素化合物の構造と反応性に関する研究
 新奇な π 共役構造の電子状態
 新規機能性 π 共役分子の合成と物性に関する研究
 細胞内における超硫黄分子の振動解析
 高周期 14 族元素を含む化合物の構造物性理論計算
 第一原理計算による層状物質の角度分解光電子分光の解析
 計算科学を用いた希薄溶液中で近赤外光を吸収する π 共役部位の開発
 典型元素の特性を活用した発光体および光触媒の開発
 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
 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
 アルキルシラン化合物を受容体とした二水素結合クラスターの構造解明
 高周期元素を基盤とするレドックス活性有機触媒の探索
 高性能電極メディアータ開発における計算化学の援用

大阪大学 van EERDEN, Floris
 核融合科学研究所 中村 浩章
 信州大学 田中 秀樹
 東京大学 鈴木 康介
 医薬基盤・健康・栄養研究所 李 秀榮
 東京電機大学 山本 哲也
 筑波大学 堀 優太
 九州大学 森 俊文
 岡山大学 甲賀研一郎
 統計数理研究所 林 慶浩
 量子科学技術研究開発機構 田口 真彦
 東北大学 寺田 眞浩
 立命館大学 小林 洋一
 北海道大学 長田 裕也
 岡山大学 光藤 耕一
 東北大学 奥津 賢一
 和歌山県立医科大学 入江 克雅
 京都工芸繊維大学 水口 朋子
 名古屋大学 藤本 和士
 慶應義塾大学 千葉 文野
 大阪大学 徐 子暢
 神奈川大学 田仲 二郎
 高エネルギー加速器研究機構 岩野 薫
 静岡理工科大学 関山 秀雄
 福岡大学 池田 浩人
 山形大学 横山 大輔
 横浜国立大学 RAEBIGER, Hannes
 北里大学 長谷川真士
 東京大学 佐々木岳彦
 豊田工業大学 市橋 正彦
 埼玉医科大学 土田 敦子
 名古屋文理大学 本多 一彦
 名古屋工業大学 小野 克彦
 量子科学技術研究開発機構 黒崎 讓
 立命館大学 高橋 卓也
 広島大学 田中 亮
 関西学院大学 田中 大輔
 大阪大学 谷 洋介
 愛媛大学 佐藤 久子
 日本工業大学 大澤 正久
 東邦大学 渡邊総一郎
 学習院大学 狩野 直和
 東京工業高等専門学校 井手 智仁
 大阪大学 清水 章弘
 東北大学 影山 莉沙
 東京都立大学 瀬高 渉
 大阪大学 田中慎一郎
 静岡大学 植田 一正
 茨城大学 吾郷 友宏
 奈良教育大学 山崎 祥子
 東京大学 中山 哲
 静岡大学 松本 剛昭
 名古屋工業大学 高木 幸治
 横浜国立大学 信田 尚毅

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 Theoretical Studies of Light-Matter Interactions in Molecular Systems	京都府立大学 京都大学	沼田 宗典 NGUYEN, Thanh Phuc
第一列遷移金属触媒の光応答に関する理論化学的検証 グルタミド超分子ナノ構造体の機能発現における官能基配向構造の解析 空間的軌道相互作用に基づく π 共役に関する研究 大環状多核金属錯体の動的特性と触媒活性の探索 遷移金属錯体等の分子の電子状態に関する理論的研究および量子計算の古典シミュレーション研究 新規キノイド系分子の合成と応用 イオン液体-分子性液体溶液中で働く相互作用と混合状態の解明 第一原理計算を用いた物質表面及び界面の研究 アレーン類のアダマンタン縮環反応の反応機構解明および新奇 π 共役系分子の構造物性解明 半合理的手法により構築された主鎖構造による人工タンパク質設計 マイナーアクチノイド回収用抽出剤 HONTA の電子構造及び電荷移動に係る研究 超短寿命核種アスタチン化合物に関する量子化学計算 凝縮系における緩和および反応ダイナミクスの理論研究 複雑系の量子状態理論の開発と不均一系触媒および光機能システム系への応用 分子動力学シミュレーションによるタンパク質の凝集と凝集阻害 分子動力学計算と量子化学計算による液体の分子間相互作用の研究 計算機および生化学実験によるタンパク質分子デザイン 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分子シミュレーション 分子系・凝縮系における磁性およびフォノン物性の第一原理計算 機能性開殻分子材料の構造-物性-電子状態相関の解明 3次元 π 共役構造体の創製 新規高分子担持光酸化還元触媒の創製 α チューブリン C 末端領域の翻訳後修飾が微小管構造集団に与える影響の分子ダイナミクス解析 4次元 MRI による脳の機能及び構造解析 機械学習を用いた脳機能画像解析 拡張アンサンブル法による分子シミュレーション 選択的反応における溶媒効果と反応機構に関する理論研究 イオン種に対する高分解能振動回転分光による分子間相互作用の研究 外場からの摂動下にある分子およびその集合体の計算化学的検討 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 還元反応によるカルボアニオン種の発生法の開拓と金属-炭素結合種の構造解明 計算化学による有機触媒及び有機金属触媒を用いた新規反応の機構解明 炭素-ヘテロ原子結合の切断および形成を伴う骨格転位反応の計算化学による機構解明 長波長領域での蛍光発現を可能とする電子受容体の設計 質量分析におけるイオン化条件及び観測イオンの安定構造に関する理論的検討 モデル溶融塩からなる溶媒の相関関数を正確に求める方法論の開発 π クラスター分子の電子物性の解明 キノイド分子の電子励起状態エネルギーレベルおよび構造の量子化学計算 新規機能性有機色素の開発 量子化学計算による反応機構の解明 熱活性化遅延蛍光材料の仮想スクリーニング 4d または 5d 金属を含む多核金属錯体の電子状態 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 新規双極性有機典型元素化合物の創成と双極子付加反応 アミノ酸シッフ塩基金属錯体の立体構造と電子構造 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 有機分子光触媒の理論的分子設計法に関する研究 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 短寿命種や界面化学種の振動スペクトル解析 DFT 計算による複数の金属種からなる多核金属錯体の電子構造の解明 抗生物質耐性分子メカニズムの理論的研究	北海道大学 熊本大学 名古屋市立大学 東京大学 大阪大学 茨城大学 佐賀大学 九州工業大学 名古屋大学 名古屋大学 日本原子力研究開発機構 大阪大学 分子科学研究所 計算科学研究センター 生命創成探究センター 分子科学研究所 生命創成探究センター 計算科学研究センター 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 信州大学 生理学研究所 生理学研究所 名古屋大学 高知大学 北里大学 東京大学 佐賀大学 京都大学 岡山大学 大阪大学 名古屋大学 東邦大学 愛媛大学 大阪大学 室蘭工業大学 岐阜大学 産業技術総合研究所 大阪大学 岐阜大学 和歌山大学 北里大学 東京理科大学 大阪大学 日本工業大学 奈良女子大学 筑波大学 岐阜大学 城西国際大学	小島 正寛 桑原 穰 雨夜 徹 田代 省平 吉田悠一郎 近藤 健 高椋 利幸 河野 翔也 八木亜樹子 佐久間航也 宮崎 康典 寺本 高啓 斉藤 真司 江原 正博 奥村 久士 長坂 将成 古賀 信康 岡崎 圭一 南谷 英美 草本 哲郎 瀬川 泰知 奥村慎太郎 梅澤 公二 福永 雅喜 近添 淳一 岡本 祐幸 金野 大助 水瀬 賢太 伊藤 喜光 海野 雅司 黒木 堯 山崎 賢 鹿又 喬平 村井 征史 岡 真悠子 宮田 竜彦 西内 智彦 飯森 俊文 船曳 一正 栢沼 愛 相澤 直矢 海老原昌弘 林 聡子 内山 洋介 秋津 貴城 山下 健一 小池 隆司 浦 康之 石橋 孝章 植村 一広 額賀 路嘉

統計的手法による超原子価ヨウ素試薬の置換基効果の解明	大阪大学	西本 能弘
原子核の量子効果を考慮した理論計算手法による水素結合系の解析	岐阜大学	宇田川太郎
イオン・原子及びイオン・分子衝突の理論的研究	宮崎大学	五十嵐明則
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	稲葉 知士
新規生物活性物質の設計・合成・機能評価	九州大学	平井 剛
イソシアニドの挿入数制御に基づくロジウム触媒による含窒素複素環化合物の多様性志向型合成反応の機構研究	京都大学	新林 卓也
配位子保護貴金属クラスターの三重項性に関する計算科学的研究	立教大学	三井 正明
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	東林 修平
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	大阪公立大学	酒巻 大輔
遷移系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	和佐田裕昭
機能性有機材料の開発のための量子化学計算	東京都立産業技術研究センター	小汲 佳祐
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	三ツ沼治信
分子動力学計算による抗体の分子内ネットワークの探索	分子科学研究所	谷中 冴子
新規キラル分子のキロプティカル特性の理論計算	大阪大学	石割 文崇
固定化分子触媒による新規触媒作用の理論的解明	横浜国立大学	長谷川慎吾
新規金属クラスターの電子状態の解明	東京理科大学	新堀 佳紀
光反応中間体のエネルギー解析	大阪大学	大久保 敬
大環状系のラジカルカチオン π ダイマーの芳香族性	東京都立大学	西長 亨
有機ケイ素化合物の構造と性質	群馬大学	久新莊一郎
DFT 計算を用いた新規 C-H 活性化反応の機構研究	名古屋大学	平子 直洋
第一原理計算による LPSO 型 Mg 合金における局所クラスターと相安定性に関する研究	名古屋工業大学	宮崎 秀俊
有機典型元素を用いた合成化学, 構造化学	広島大学	吉田 拓人
量子化学に基づく生体分子の機能に関する計算科学研究	法政大学	数納 広哉
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	清野 淳司
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	影島 博之
金属錯体を基盤とした人工光合成反応の開発に向けた理論的研究	大阪大学	小杉 健斗
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	岩本 啓
特異な構造を有する複素芳香族化合物の理論研究	就実大学	山本 浩司
Benzene-CH ₄ van der Waals 錯体における 6 次元モデルポテンシャル計算と分子間振動波束観測	東京工業大学	中村 雅明
有機半導体分子 TIPS-ペンタセンのガウシアンによる振動解析	兵庫県立大学	相賀 則宏
分子内芳香族ラジカルカチオンクロスカップリング反応の機構解析	横浜国立大学	岡本 一央
新規熱活性化遅延蛍光分子の構造ならびに励起状態の理論計算	大阪大学	武田 洋平
14 族元素を配位原子とする多座配位子・クラスターが結合した遷移金属錯体に関する理論的研究	東北大学	小室 貴士
Search for Saddlepoints in the syn-/antiperiplanar Isomerism of 5,10,15-Triaryl-19-arylbilatrien-abc-onato Nickel (II)	分子科学研究所	ウルバン アドリアンジョー
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
理論計算を利用したラジカルメカノフォアの解析および新規分子骨格の開発	東京工業大学	杉田 一
深層学習によるキラルらせん構造の左右カウント	分子科学研究所	山本 浩史
水和フェノールカチオンにおける微視的水素結合構造: 複環構造の探索	北里大学	石川 春樹
DTE 結合型プレンステッド酸触媒の光照射による pKa 調節機能解明	北海道大学	中村 顕斗
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
エネルギー変換分子触媒の分子構造・電子状態と反応性の相関の解明	山陽小野田市立山口東京理科大学	太田 雄大
理論計算による酸化固定化キラル Tb 錯体の表面構造解明	名古屋大学	邨次 智
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	中野 幸司
3次元粉体ポアズイユ流の連続体解析と数値計算	大阪大学	吉井 究
トランの電子状態	日本大学	奥山 克彦
アルツハイマー病の治療薬を目的としたアミロイド β 分解活性を有するペプチドの特性評価と投与方法に関する研究	東北大学	幡川 祐資
円偏光発光特性を有するヘリセン分子の設計と合成	大阪大学	佐古 真
不斉増幅を伴う光学活性含窒素 8 員環の合成研究	大阪大学	滝澤 忍
Al ₂ O ₃ 表面上における炭素膜の成長過程に関する研究	岡山大学	QIANG, Yue
含金属共役高分子の設計	関西大学	三田 文雄

光増感剤利用に向けた発光性セリウム錯体の開発	東京理科大学	倉持 悠輔
フラットバンドを有する有機分子-金属ハイブリッド系における高温超伝導の理論	新潟大学	関川 卓也
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	中村 栄一
光と化学的な添加剤を用いた協働的な Si-C 結合開裂反応の反応機構探索	東京大学	正井 宏
ホスフィン保護 Au ₁₁ クラスタのキャリアダイナミクスに与える配位子効果	関西学院大学	江口 大地
新規 π 共役系の物性化学研究	京都大学	関 修平
量子化学計算を用いた環状金属イオン配列における分子間相互作用およびキラリテイの評価	お茶の水女子大学	三宅 亮介
金属表面上の生体分子の構造と電子状態	横浜国立大学	大野 真也
クロス β 構造における量子化学計算を用いた Steric zipper の相互作用エネルギーの算出	東京大学	恒川 英介
古典および量子シミュレータを用いた量子化学計算	東京大学	山崎 雅人
ゲスト包接能を有するカラムナー液晶の開発	日本大学	吉田 純
C1 カルベノイド化学種の理論および実験に基づく計算化学的解明	北海道大学	岡本 和紘
アニリン分子の分光特性に対する溶媒効果の研究	九州大学	大橋 和彦
エネルギー材料の分子シミュレーション	産業技術総合研究所	崔 隆基
非極性水中の弱い相互作用 I : CO, CO ₂ 氷上の H 原子の挙動	東京大学	相川 祐理
タンパク質-RNA 複合体系の全原子分子シミュレーション研究	早稲田大学	浜田 道昭
遷移金属触媒および有機触媒を用いた不飽和結合への付加反応における位置および立体選択性の解明	大阪大学	兒玉 拓也

(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

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	館山 佳尚
革新的光触媒材料の第一原理設計	神戸大学	天能精一郎
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	押山 淳
バイオ分子における X 線誘起非断熱反応動力学の実時間イメージング理論	理化学研究所	山崎 馨
大規模電子状態計算ベースとした有機光デバイス材料の励起子ダイナミクス解析	量子科学技術研究開発機構	藤田 貴敏

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4期			
		年度	2022			
			前期	後期	計	登録者数
共同研究	(1) 課題研究		2	2	2	18
	(2) 協力研究 ^{*1}		22	25	47	175
	(マテリアル) ^{*2}		15	25	40	112
研究会	(3) 研究会		3	3	6	482
	(4) 若手研究活動支援		1	0	1	70
	(5) 岡崎コンファレンス		0	0	0	0
	所長招へい ^{*3}		5	0	5	5
	UVSOR 研究会 ^{*3}		1	0	1	14
施設利用	(6) ① UVSOR		104	105	209	1,010
	(マテリアル) ^{*2}		2	3	5	35
	(6) ② 機器センター	(マテリアル) ^{*2}	61	75	136	397
	(6) ③ 装置開発室	(マテリアル) ^{*2}	0	0	0	0
	(マテリアル) ^{*2}		5	7	12	52
	(6) ④ 計算科学研究センター		298	0	298	1,252

*1 一部課題では UVSOR 利用あり (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 マテリアル先端リサーチインフラ事業は 2022 年度から開始。それ以前はナノテクノロジープラットフォーム事業。

*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

【学協会連携分子研研究会】

森野ディスカッション

2022年8月31日（水）（オンライン開催）

1. 2022年度研究助成金贈呈式

- 14:35 伊澤誠一郎（分子研）講演 10分
「有機半導体界面での光電変換特性の解明と新機能開拓」
- 14:50 近藤 徹（東工大）講演 10分
「分子分光法を用いた光合成タンパク質の動的な光反応制御機構および機能的なロバスト性の解明」

2. 森野ディスカッション

- 15:30 講演 A 池田勝佳（名工大）講演 35分
「表面増強分光で探る帯電界面の構造とダイナミクス」
- 16:25 講演 B 岡本裕巳（分子研）講演 35分
「光学遷移の選択律を破るナノ分光」

【分子研研究会】

金属酸化物：表面と薄膜の構造化学

2022年9月26日（月） 分子科学研究所研究棟 301号室（ハイブリッド開催）

- 15:00-16:00 “Surface Structures Drive the Growth of Perovskite Oxide Films”
Michele Riva (TU Wien) ※オンライン
- 16:00-17:00 “Physical Properties of Defects on Metal Oxide Surfaces Analyzed by Scanning Probe Microscopy”
Taketoshi Minato (Institute for Molecular Science)
- 17:00-18:00 “Pulsed Laser Deposition of Compositionally Graded Sr-Doped NaTaO₃ Thin Films and Their Photoexcited Carrier Dynamics”
Shingo Maruyama (Tohoku University)
- 18:00-19:00 “Toward Excited-State Molecular Dynamics Analyses of Metaloxide Photocatalysts: Computational Method Developments and Applications”
Hiroki Uratani (Waseda University)

【分子研研究会】

イオン液体の構造と物性予測のデータ解析技術

2022年9月28日（水）～29日（木） 岡崎コンファレンスセンター中会議室（ハイブリッド開催）

9月28日（水）

- 13:30-13:45 「はじめに」
阿部 洋（防衛大）
- 13:45-14:45 「イオン液体の更なる機能開拓に必要な理論化学的手法の拡張」
森 寛敏（中央大）
- 15:00-16:00 「情報化学によるガス分離吸収性イオン液体の迅速探索と実験検証」
黒木 菜保子（中央大）
- 16:00-17:00 「実験データ駆動型の情報科学に基づく有機イオン伝導体の物性予測」
畠山 歆（早稲田大）
- 17:00-17:30 全体討議

9月29日（木）

- 09:00-10:00 「イオン液体の低融点を理解する」【ZOOM】
遠藤太佳嗣（同志社大）
- 10:15-11:15 「情報科学を用いた物性評価の自動化」
小野寛太（大阪大）
- 11:15-12:00 全体討議
- 12:00-12:05 閉会の挨拶
解良 聡（分子研）

【分子研研究会】

軟X線共鳴散乱・反射率

ソフトマテリアル・ソフトマターのナノ～メソスケール構造解析

2022年11月8日（火）（オンライン開催）

- 10:00-10:10 Welcome & Introduction
荒木 暢 (Diamond Light Source)
- 10:10-11:00 *Keynote Lecture*
Probing Morphology and Chemistry in Complex Soft Materials with In Situ Resonant Soft X-Ray Scattering
Cheng Wang (Advanced Light Source)
- 11:15-11:40 ニューズバルにおけるフォトレジストの軟X線共鳴散乱／反射率測定
原田哲男 (兵庫県立大学)
- 11:40-12:05 UVSOR および Photon Factory における共鳴軟X線散乱装置の開発
岩山洋士 (分子科学研究所)
- 12:05-12:30 軟X線反射率／吸収分光による wet 環境対応薄膜解析装置の検討
～中性子や陽電子を組み合わせたマルチプローブ解析を目指して
山田悟史 (高エネルギー加速器研究機構)
- 13:30-13:55 Tender X-Ray 領域での合金の ASAXS 測定
奥田浩司 (京都大学)
- 13:55-14:25 BL15A2 におけるテンダーX線による散乱・反射率法による高分子構造解析
山本勝宏 (名古屋工業大学)
- 14:25-14:50 中性子を用いた固体高分子形燃料電池の解析
原田雅史 (豊田中央研究所)
- 15:05-15:30 共鳴軟X線散乱による液晶相精密構造解析への試み
高西陽一 (京都大学)
- 15:30-15:55 屈曲液晶における超分子カイラル多型ナノ構造
荒岡史人 (理化学研究所)
- 15:55-16:20 DDS ナノ粒子の構造解析
櫻井和朗 (北九州市立大学)
- 16:30-17:10 Discussion
- 17:10-17:15 Closing
解良 聡 (分子科学研究所)

【分子研研究会】

UVSOR-III における多様な量子ビームの発生と先端利用に関する研究会

2022年11月28日（月） 岡崎コンファレンスセンター（ハイブリッド開催）

- 08:50 ~ 09:00 趣旨説明
(分子研：平義隆)
- 09:00 ~ 09:30 UVSOR 光源開発ビームラインの歴史
(広島大学／分子研：加藤政博)
- 09:30 ~ 10:00 自由電子レーザーの開発と利用・今後の展開
(京都大学：全炳俊)
- 10:00 ~ 10:30 UVSOR でのコヒーレント高次高調波光源の開発
(秋田高専：坂本文人)
- 10:40 ~ 11:10 タンデムアンジュレータによるアト秒制御ダブルパルスの発生と原子分子実験への応用
(SAGA-LS：金安達夫)
- 11:10 ~ 11:40 放射光の時空間構造の制御とその利用の可能性
(広島大学／分子研：加藤政博)
- 11:40 ~ 12:10 紫外円偏光照射による有機物分子のキラリティの発現に関する研究
(核融合研：小林政弘)
- 13:30 ~ 14:00 UVSOR-III におけるガンマ線源の開発と利用及び今後の展開
(分子研：平義隆)
- 14:00 ~ 14:30 ニューズバル γ 線ビームライン BL01 の現状
(兵庫県立大学：橋本 智)
- 14:30 ~ 15:00 ガンマ線を用いた原子核物理実験とその応用
(京都大学：大垣英明)
- 15:10 ~ 15:40 偏光検出コンプトンカメラの開発と応用
(東京大学：島添健次)
- 15:40 ~ 16:10 陽電子消滅法の基礎とパルス γ 線誘起陽電子発生装置への期待
(千葉大学：藤浪真紀)
- 16:10 ~ 16:40 原子空孔を見て発光材料への不純物添加効果を探る
(山形大学：北浦守)

【分子研研究会】

生体分子材料を探る：発動分子のさらなる理解と設計に向けて
2023年3月29日（水）～30日（木） 分子科学研究所山手3号館大会議室

3月29日（水）

(1) 生体分子材料と人工分子材料の境界を探る手法_01

- 13:00-13:10 挨拶
(東工大：上野隆史)
- 13:10-13:40 生体の分子機構を利用してつくる機能性材料
(東工大：芹澤 武)
- 13:40-14:10 金属連結ペプチド鎖が創り出すナノトポロジー
(東工大：澤田知久)
- 14:20-14:50 **de novo** 設計膜ペプチドを基盤とした人工イオンチャネルの創出
(理研：新津 藍)
- 14:50-15:20 無機ナノシートの集合構造制御による機能性ソフトマテリアル
(信州大：佐野航季)

(2) 生体分子材料と情報・理論をつなぐ手法

- 15:30-15:45 植物の構造と機能に学ぶバイオメテックス
(秋田県立大：津川 暁)
- 15:45-16:00 ロボット機構学によるタンパク質の理解
(神奈川工大：有川敬輔)
- 16:00-17:00 ポスター発表
- 17:00-18:00 総合討論 01

3月30日（木）

(1) 生体分子材料と人工分子材料の境界を探る手法_02

- 9:30- 9:50 生体材料の自律的合成——静から働の機能へ向けて
(東工大：上野隆史)
- 9:50-10:20 生体・人工ハイブリッド分子モーターの創出と特性解析
(分子研：飯野亮太)
- 10:20-10:50 人工的な DNA レール上を走るタンパク質モーターの創出
(情報研：古田健也)
- 11:00-11:30 動態イメージングで探る生命分子材料と人工分子材料の境界
(名大：内橋貴之)

(2) 生体分子材料と社会をつなぐ将来

- 11:30-12:00 生体分子材料の社会実装, 何をする? 何ができる?
——ライフサイエンス・ニューロサイエンスからの示唆——
(東通大：福土珠美)
- 13:00-13:55 総合討論 02
- 13:55-14:00 挨拶
(分子研：飯野亮太)

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
中央研究院原子と分子科学研究所	台湾	分子科学研究所と中央研究院原子と分子科学研究所との間の分子科学における協力に関する覚書	共同研究（物質関連分子科学、原子、分子との光科学、理論と計算の分子科学）	2020. 1.12	2023. 1.11
国立陽明交通大学	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4期	
年度	2022	
外国人研究職員（客員）	1	
日本学術振興会外国人招へい研究者	2	
日本学術振興会外国人特別研究員	0	
国際協力研究員	長期	18
	短期	24
研究会参加者（オンライン参加者含）	12	
招へい研究員等	17	
合計	74	

国際協力研究員＝短期：施設利用者等（学生含む）、長期：インターンシップ生等

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4期
年度	2022
フランス	19
ドイツ	5
イギリス	3
スウェーデン	7
フィンランド	2
スイス	3
アメリカ	9
中国	2
台湾	8
タイ	3
インド	6
その他*	3
合計	70

*その他に含まれる国は、チェコ、カナダ、マレーシア

表4 海外からの研究者（2022年度）（web版は削除）

3-2-2 岡崎コンファレンス

分子科学研究所では、1976年（1975年研究所創設の翌年）より2000年まで全国の分子科学研究者からの申請を受けて小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」を年2～3回、合計65回開催し、それぞれの分野で世界トップクラスの研究者を数名招へいし、情報を相互に交換することによって分子科学研究所における研究活動を核にした当該分野の研究を国際的に最高レベルに高める努力をしてきた。これは大学共同利用機関としての重要な活動であり、予算的にも文部省から特別に支えられていた。しかし、1997年以降、COEという考え方が大学共同利用機関以外の国立大学等にも広く適用されることとなり、大学共同利用機関として行う公募型の「岡崎コンファレンス」は、予算的には新しく認定されるようになったCOE各機関がそれぞれ行う独自企画の中規模の国際シンポジウムの予算に切り替わった。一方、法人化後、各法人で小～中規模の国際研究集会が独自の判断で開催できるようになり、分子科学研究所が属する自然科学研究機構や総合研究大学院大学でその枠が整備されつつある。ただし、所属している複数の機関がお互い連携して開催するのが主たる目的となっている。

このような背景の下、2006年には全国の分子科学研究者の立案に基づく先導的な中小規模の国際研究会を開催する枠組みを維持継続するために、運営交付金による分子研独自の事業として「岡崎コンファレンス」を再開した。同年の第66回岡崎コンファレンスを皮切りに2007年以降は研究会の開催提案を広く公募し、全国共同利用による共同研究の一環として継続的に開催してきた。しかしながら2020年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	Hierarchical 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

（2023年3月31日現在）

中期計画区分	第2期	第3期	第4期
年度	2010～ 2015	2016～ 2021	2022
北海道大学	0		
室蘭工業大学	0		
東北大学	6		
山形大学	1		
茨城大学	2		
筑波大学	1		
宇都宮大学	0		
群馬大学	0		
埼玉大学	0		
千葉大学	1	1	
東京大学	5	21	
東京工業大学	5	3	
お茶の水女子大学	0		
横浜国立大学	2		
金沢大学	0		
新潟大学	0		
福井大学	0		
信州大学	1	1	
岐阜大学	0		
静岡大学	4		
名古屋大学	59	60	10
愛知教育大学	0		
名古屋工業大学	7	1	1
豊橋技術科学大学	0		
三重大学	0		
京都大学	2	5	
京都工芸繊維大学	0		
大阪大学	6	1	
神戸大学	0		
奈良教育大学	0		
奈良女子大学	0		
鳥根大学	0		
岡山大学	0		
広島大学	0	1	
山口大学	0		
香川大学	0	1	

愛媛大学	0		
高知大学	0		
九州大学	3		
佐賀大学	0		
長崎大学	0		
熊本大学	0		
宮崎大学	0		
琉球大学	0		
北陸先端科学技術 大学院大学	1		
奈良先端科学技術 大学院大学	0	1	
総合研究大学院大学	0	1	
首都大学東京	0		
名古屋市立大学	14	24	5
大阪市立大学	0		
大阪府立大学	0		
姫路工業大学	0		
学習院大学	0		
北里大学	0		
慶應義塾大学	0		
上智大学	0		
立教大学	2		
中央大学	1		
東海大学	0		
東京理科大学	0		
東邦大学	0		
星薬科大学	0		
早稲田大学	0		
明治大学	0		
名城大学	0		
中部大学		2	
岡山理科大学	0		
海外機関	28	9	
計	151	132	16

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

(2022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	8		8	
	准教授	7		7	
	助教	13		18	
	計	28		33	
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〉
	2022	2	4	3	1
	2021	1	1	2(1)	1
	2020	0	5(2)	1(1)	2(1)
	2019	1(1)	1	2	2(2)
	2018	3	0	2	1(1)
	2017	0	0	0	1
	計	7(1)	11(2)	10(2)	8(4)

() 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、タイ1名、インド2名、二専攻合計で9名。

入学と学位取得の状況 単位：人 (2023年3月31日現在)

区分	専攻	中期計画区分	第2期	第3期	第4期
		年度	2010～2015	2016～2021	2022
入学者数	構造分子科学	5年一貫	15	21	2
		博士後期	20	12	4
	機能分子科学	5年一貫	10	23	3
		博士後期	18	14	1
	計		63	70	10
学位取得者数	構造分子科学	課程博士	20	22	6
		論文博士	0	0	0
	機能分子科学	課程博士	19	16	3
		論文博士	3	1	0
	計		42	39	9

外国人留学生数(国別入学者数) 単位：人 (2023年3月31日現在)

中期計画区分	第2期	第3期	第4期
年度	2010～2015	2016～2021	2022
フランス		0, 1	
ドイツ		1, 0	
ロシア			
チェコ			
カナダ		1, 0	
エルサルバドル		0, 1	
中国	14, 5	0, 5	
韓国		0, 1	
タイ	2, 3	1, 3	
インド	0, 2	0, 3	
バングラディッシュ			
パキスタン		1, 0	
ネパール	0, 2		
マレーシア	1, 0		
ベトナム	0, 1		
フィリピン			
エジプト		0, 1	
ナイジェリア			
合計	17, 13	4, 15	0, 0

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

(2023年3月31日現在)

専攻	構造分子科学			機能分子科学		
	第2期	第3期	第4期	第2期	第3期	第4期
中期計画区分	2010～2015	2016～2021	2022	2010～2015	2016～2021	2022
年度	2010～2015	2016～2021	2022	2010～2015	2016～2021	2022
北海道大学		3(3)				
東北大学		1		1(1)		1
山形大学				1		
筑波大学						1(1)
千葉大学	1(1)	1	1			
東京農工大学		1(1)				
東京工業大学	3(3)				1(1)	
新潟大学					1(1)	
長岡技術科学大学		1(1)				
金沢大学				1		
山梨大学			1(1)			
信州大学		1				
岐阜大学			1(1)	1	1(1)	
名古屋大学	3(3)	6(5)	1	2	4(3)	
愛知教育大学		1(1)				
名古屋工業大学					2(2)	
豊橋技術科学大学				1(1)		
京都大学	3	2(1)		1	2(1)	1(1)
大阪大学	1(1)					
神戸大学				1(1)		
鳥取大学				1		
岡山大学	1				1	
広島大学		1				1(1)
徳島大学					1(1)	
九州大学	1(1)				1	
熊本大学		1(1)				
群馬工業高等専門学校	1(1)					
奈良工業高等専門学校				1(1)	1(1)	
宇部工業高等専門学校					1(1)	
北九州工業高等専門学校		1(1)				
名古屋市立大学				1	3(3)	
大阪府立大学		1				
兵庫県立大学		1(1)				
いわき明星大学				1		
城西大学		1(1)				
北里大学		1(1)				
東海大学				1(1)		
東京電機大学					1(1)	
東京理科大学	1(1)	1		1(1)		
東邦大学		1(1)				
日本大学		1			1	
法政大学	1(1)					
立教大学	1					
神奈川大学		1(1)				
愛知工業大学					1(1)	

名城大学		1(1)	1		2(1)	
立命館大学				1(1)	1(1)	
関西大学					1(1)	
近畿大学			1			
福岡大学	1(1)					
海外機関・その他	17(2)	4(1)		12(3)	11(3)	
合計	35(15)	33(21)	6(2)	28(10)	37(23)	4(3)

() 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

(2022年12月現在)

		2010～2021年度修了生の 修了直後の進路状況			1991～2021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	11	27
	研究職	27	19	46	—	—	—
	小計	28	19	47	—	—	—
進学				0	—	—	—
民間企業(研究職含む)		3	8	11	—	—	—
その他		9	5	14	—	—	—
合計		40	32	72	—	—	—

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

2022年6月4日(土), zoomを用いたオンライン形式で分子研オープンキャンパスを開催した。COVID-19の影響で2020年度からオンラインで行っており, 今年度は現地開催も不可能ではない社会情勢ではあったものの, オンライン化によって入学を検討する参加者の割合が増えたこと, 全国どこからでも参加できるメリットが大きいことから, 今年もオンラインとした。

まずは周知が必要と考え, 分子研twitterの活用や所員へのretweetのお願い, ポータルサイト(chem-station.com, tayojp)への出稿などを通じて広報活動を1ヶ月間行った。結果として, 北は北大から南は九大まで, 過去2年間を上回る34名の参加登録があった。

当日は午前10時に開始し, 所長と大学院委員長による分子研・総研大の説明ののち研究室紹介を各5分で行った。事前に撮影した5分動画の提出も可としたが, リアルタイムでの説明が多く, ライブ感のある研究室紹介となった。

午後はブレイクアウトルームを使用したラボツアーを行った。前回参加者の「質問時間がもっと欲しかった」との意見を参考に、5研究室並列の3回制（1研究室50分）、かつ希望する学生がいれば追加対応可、とした。「ブレイクアウトルーム内ではカメラON」をお願いしたこともあり、実際に研究室見学に来たような臨場感を出すことができた。説明時間後に残って質問をしていた学生が見受けられたので、目当ての研究室が明確にある学生にとっては良かった一方で、登録時の「興味のある研究室」で分野をまたがって多数選択する学生が予想よりも多かったため、最大3研究室にしか参加できない今回の形式には改善の余地がありうる。

オープンキャンパス参加者のうち見学・体験入学申込者は6名であった。見学をもっと気軽にできるように、日程と行程が決まったラボツアーをあらかじめ設定しておくなど、今後さらに検討する余地はあるかと思われる。また、入学の検討を始めるには6月開催は遅いため、開催を早める、効果的なPRを行う、参加者が総研大在学生の話を聴く機会を設けるなど、今後改善していきたい。

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28名の学生（学部学生22名、大学院生5名、社会人1名）を受け入れ、うち4名については2回受け入れた。実施スケジュールは以下のとおりである。

6月4日(土)：分子研オープンキャンパス大学院説明会・体験入学説明会（オンライン開催）

1月6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	(公財)相模中央化学研究所	社会人	古賀 G	6月27日～28日
2	東京理科大学	学部生	杉本 G	6月15日
3	慶応義塾大学	大学院生	熊谷 G・杉本 G 杉本 G	8月3日～5日 3月22日～24日
4	九州大学	学部生	奥村 G・魚住 G	9月1日～2日
5	立命館大学	学部生	倉持 G・草本 G	8月1日～5日
6	東北大学	学部生	杉本 G	7月20日～23日 8月24日～27日
7	東京大学	学部生	杉本 G	9月9日～10日 3月1日～4日
8	信州大学	学部生	奥村 G・秋山 G	9月14日～15日

9	東京大学	学部生	大森 G	9月5日～9日
10	明治大学	学部生	杉本 G	9月16日～17日 3月28日～30日
11	京都大学	学部生	杉本 G	9月27日～29日
12	京都大学	学部生	杉本 G	9月27日～29日
13	北海道大学	大学院生	瀬川 G	12月2日～4日
14	東京大学	大学院生	瀬川 G	12月2日～3日
15	同志社大学	学部生	斉藤 G	3月27日
16	東京理科大学	学部生	魚住 G	2月2日～3日
17	近畿大学	学部生	大森 G	2月20日～22日
18	東京大学	学部生	秋山 G	2月28日～3月2日
19	北海道大学	学部生	杉本 G	2月8日～11日
20	北海道大学	学部生	杉本 G	2月8日～11日
21	京都大学	大学院生	熊谷 G	2月2日
22	近畿大学	学部生	青野 G	3月9日～10日
23	東京都立大学	大学院生	草本 G・瀬川 G	2月3日
24	九州大学	学部生	杉本 G	2月16日～17日
25	室蘭工業大学	学部生	斉藤 G	3月27日～28日
26	東北大学	学部生	杉本 G	3月2日～3日
27	関西学院大学	学部生	奥村 G	3月1日～2日
28	関西学院大学	学部生	奥村 G	3月1日～2日

3-3-5 総研大アジア冬の学校

総研大「アジア冬の学校」が、2022年12月21日（水）に分子科学研究所研究棟2階において開催された。アジア冬の学校は、物理科学研究科内の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年度に始まった。新型コロナウイルス感染拡大の影響により、2020年と2021年は開催が中止されたため、3年ぶりの開催となった。アジア全域から参加者を募り、今年度はインターンシップ生（IIPA：分子研アジア国際インターンシッププログラム）4名、マレーシアのマラヤ大学から2名、総研大生13名、広島大学1名、講演者2名、若手研究者を含めた教職員5名の計27名で実施された。今年度のテーマは、昨年度に引き続き「Challenges for New Frontiers in Molecular Science: From Basic to Advanced Researches」とし、参加者によるフラッシュトークおよびポスター発表、斉藤真司教授と熊谷崇准教授による講義が行われた。講義やポスター発表、休憩時間においても活発な議論が行われ、インターンシップ生や総研大生、参加者にとって有意義な国際交流の場になったと思われる。

SAITO, Shinji (IMS, SOKENDAI)

“Dynamics in Condensed Phase Systems: Basic Concepts and Applications”

KUMAGAI, Takashi (IMS, SOKENDAI)

“Physical Chemistry at the Bottom: Real-Space Study of Hydrogen-Bond Dynamics”

3-3-6 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イメージング科学、③発生生物学Ⅱ、④進化ゲノム生物学、⑤遺伝学、⑥生体分子シミュレーション入門（中止）、⑦機能発生生物学Ⅳ、⑧統合進化学）が実施された。②イメージング科学はPC演習が含まれるため、対面のみでの実施を計画していたが、新型コロナウイルス感染症拡大の影響により2名が急遽Zoomでの参加となった。前日での決定となったが、講師の尽力によりハイブリッドでの演習を実施することができた。

2023年4月より、現在の6研究科から、先端大学院のもとに20コースを設置する体制へ移行するため、「統合生命科学教育コース群」はその役目を終えることが決定している。一部は科目として存続するため、これからも学生の学びの一助となることを期待したい。

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 965 回を数える歴史あるセミナーであるが、近年、コロキウムに参加する所員は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った。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。

現行の開催要領では、(i) 各領域による講師の推薦と、(ii) ホスト（各教員）による講師の推薦に基づき、(iii) 4 月から翌年 3 月まで通年開催する、という 3 点を骨子としている。(i)(ii) は、講師の選出に複数の教員が関わることで所全体としてコロキウムへの関心を高めつつ、分子科学に関連する各研究分野のトップランナーである研究者をお招きし、最先端の話題を提供していただくことが主な狙いである。また、(iii) 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。

上記開催要領に基づき、2022 年度は計 10 件のコロキウムを開催し、8 件を対面形式で（うち 1 件はオンラインを併用したハイブリッド形式）、他 2 件をオンライン形式で行った。前年度は新型コロナウイルス感染症の拡大により全てのコロキウムがオンラインで開催されるなど、対面形式でのコロキウム開催は久々であった。しかしながら、いずれの回も多くの聴講者が集まり活発な議論が行われるなど盛況で、対面形式による議論の良い面をあらためて認識した。なお、コロナ禍対策として整備されたオンライン開催のための設備・技術を活用し、より多くの聴講者に参加していただけるように、ハイブリッド形式での開催および所外への公開が検討・実施された。感染状況が一定程度に収まってきていることから次年度のコロキウムも主に対面形式で開催される予定であるが、開催形式にこれらの新しい選択肢が加わったことで、今後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、より活発な「ブレインストーミング」の場となることが期待される。

以下に、2022 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
956	2022. 6.28	Quantum Technology at 100 Billionths of a Degree Above Absolute Zero	Prof. Dana Anderson (JILA fellow/UC Boulder)
957	2022. 7.12	金属-有機構造体 (MOF) の融解とガラス化, およびその機能	堀毛 悟史 (京都大学准教授)
958	2022. 8. 1 (オンライン)	Dynamic and Thermodynamic Performance Bounds for Collective Motor-Driven Transport	Prof. David Sivak (Simon Fraser Univ., Canada)
959	2022. 8. 2 (オンライン)	臨界現象とスケーリング: 切り紙の伸長から滴の融合・分離まで	奥村 剛 (お茶の水女子大学教授)
960	2023. 1.13	エネルギー応答型精密 Ir 錯体触媒が拓くバイオマス資源と CO ₂ の還元	斎藤 進 (名古屋大学教授)
961	2023. 2.10	固体の真空状態を破壊する ——固体の高次高調波発生の物理	田中耕一郎 (京都大学教授)

962	2023. 2.13	The Business of Quantum Computing: Market Dynamics, Funding and Future Prospects	Mr. Paul Lipman (ColdQuanta, Inc.)
963	2023. 3. 7 (オンライン・ オンサイト併用)	Giving Chemistry Direction	Prof. David A. Leigh (The University of Manchester, UK)
964	2023. 3.20	Organic Semiconductors—from Flexible Displays and Solar Cells to the Artificial Brain	Prof. Karl Leo (Technische Universität Dresden, Germany)
965	2023. 3.22	Does an Isolated Quantum Spin System Thermalize?	Prof. Matthias Weidemüller (Ruprecht-Karl University Heidelberg, Germany)

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。特に法人となつてからは、全国の分子科学コミュニティの連帯を強めるために研究支援部門を強化してきた。法人化後に新設された部門には、「安全衛生管理室」、「広報室」、「史料編纂室」があり、引き続き活発な活動を行っている。また、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年度より技術推進部に改組し、スタッフ制による所長直属の技術者組織とし、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味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、十名弱の併任の職員を配置し、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。

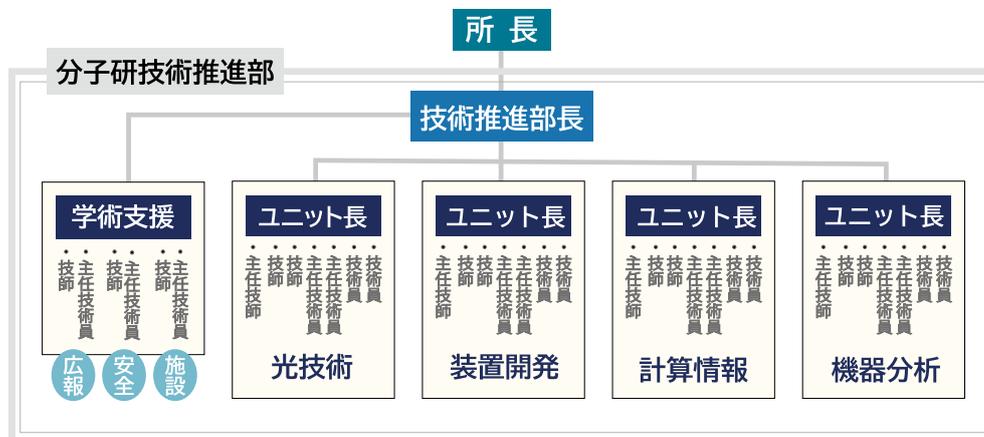
史料編纂室は、法人化後に設置された支援組織としては一番新しい。法人化後まもなく迎えた創立30周年記念行事の中で分子研設立の経緯を残すことの重要性が認識された。このため、総研大葉山高等研究センターを中心に発足した「大学共同利用機関の歴史」研究プロジェクトに参加する形で史料編纂室を発足させた。分子研設立の経緯と共に、過去に所員が行ってきた研究、分子科学コミュニティの形成過程などの歴史を整理・記録してきた。広報資料や研究活動等評価資料（IR資料）という観点で、研究力強化戦略室の中に位置付けられている。

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2022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压ガスの知識、放射線管理、その他技術的な側面から毎週職場巡視を行い、分子研の安全衛生管理に寄与している。

技術職員が組織化されたのは、1975年に創設された分子科学研究所技術課が日本で最初である。技術職員が組織化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4期）

年度	開催機関	開催日	分科会	備考
2022	大阪大学	2022年9月1-2日	電子顕微鏡、磁気共鳴、X線構造解析、質量分析、有機微量元素分析、分光分析、熱分析、XPS等、安全衛生関係	ハイブリッド開催
	広島大学	2023年3月2-3日	情報・電気系、機械系、建築・土木・農学・水産学系、化学・医学・理学系、地域貢献、安全衛生	オンライン開催
	分子科学研究所	2023年3月10-11日	装置運用、計測・制御、極低温、工作技術、情報ネットワーク	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4期）

年度	受入人数(延)
2022	3

表3 2022年度技術研修受入状況（2022.4.1～2023.3.31）

氏名	所属	受入期間	備考
千葉 寿	岩手大学	2023.3.16～3.17	電子回路技術研修
庄司 愛子	岩手大学	2023.3.16～3.17	電子回路技術研修
河尻 直幸	鳥取大学	2023.3.16～3.17	電子回路技術研修

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15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、文部科学大臣表彰研究支援賞1件である。今年度の受賞は以下の通りである。

中村永研 日本放射光学会功労報償（2023）

4-2 安全衛生管理室

安全衛生管理室は、研究所における快適な職場環境の実現と労働条件の改善を通じて、職場における職員の安全と健康を確保するための専門業務を行うことを目的として、2004年4月に設置された。安全衛生管理室には、室長、専任及び併任の安全衛生管理者、安全衛生管理担当者、化学物質・放射線・高圧ガス・電気・レーザーなどのそれぞれの分野を担当する作業主任者が置かれている。安全衛生管理者は、少なくとも毎週1回明大寺・山手両地区を巡視し、設備、作業方法又は衛生状態に危険及び有害のおそれがあるときは、直ちに、職員の健康障害を防止するための必要な措置を講じている。また、職場の安全衛生を推進するために必要な、作業環境測定（必要に応じ外部に委託）や、保護具、各種の計測機器、文献・資料、各種情報の集中管理を行い、分子研における安全衛生管理の中心としての活動を行っている。

また安全衛生管理室では、分子科学研究所全職員に対する安全衛生教育も行っており、そのための資料作成、各種資格取得の促進、専門家の養成などを行っている。雇入れ時の安全衛生教育は年度初旬に定例として行うほか、講習テキストと講習会DVDを用意し、年度途中の採用者に対しても、随時安全衛生教育が可能となるよう配慮している。

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

今年度も、「安全講習」と「安全巡視」は岡崎3機関等で策定されたコロナ対策活動指針に準拠して実施した。入構者の防疫管理手順については、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ている。防災対策として、3年ぶりに実動の防災訓練を実施した。自衛消防隊員の主体的な訓練参加を促すため、まず現場の指揮を担当する副班長に担当訓練のシナリオ作成や人員手配等の段取りに参画してもらった。

4-3 研究力強化戦略室

研究大学強化促進事業（5-8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、2022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、研究力の維持・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「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

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

回数	実施月日	入場者数
第11回	2006.10.21	2058人
第12回	2009.10.17	1346人
第13回	2012.10.20	1126人
第14回	2015.10.17	2600人
第15回	2018.10.20	3878人
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
132	2022. 6.10	量子コンピュータ ～開発者が明かすしくみと可能性～	武田 俊太郎 (東京大学准教授)	約 390 名 (累計 2,178 名)
133	2022. 9.30	物質科学とその美の源流をさぐる	田中 陵二 (公財)相模中央化学研究所)	約 310 名 (累計 826 名)
134	2022.12. 9	ミクロとマクロを結ぶ科学：小さくてあまり面白くないものがすごくたくさん集まると新しい面白い性質が勝手に生まれてくるという話	田崎 晴明 (学習院大学教授)	約 400 名 (累計 1,084 名)
135	2023. 2. 3	化学と幾何学——多面体の定理を活用したものづくり	藤田 誠 (分子科学研究所卓越教授／ 東京大学卓越教授)	約 410 名 (累計 1,419 名)

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35回開催されている。

本シンポジウムに対する分子科学研究所の関与は次の通りである。第1回において、「21世紀はイメージング・サイエンスの時代」と銘打ったパネルディスカッション中で、岡本裕巳教授が「ナノの世界まで光で見えてしまう近接場光学」というタイトルで講演を行った。第2回目は、講演会全体の企画を分子科学研究所が中心となって行った(詳細は「分子研レポート2006」を参照)。第7回では、加藤晃一教授が自らの体験に基づいて「研究の醍醐味とは何か」を伝える講演を行った。第11回では、大峯巖所長(当時)が「水の揺らめきの世界：揺らぎと反応と生命」というタイトルで講演を行った。第14回は、再び講演会全体の企画を分子科学研究所が中心となって行った(詳細は「分子研レターズ68号」を参照)。第21回では、正岡重行准教授(当時)が「人工光合成への挑戦～植物に学ぶ分子デザイン～」というタイトルで講演を行った。2020年度の第30回は分子科学研究所が企画し、機構と名古屋市科学館の主催で「宇宙科学と生命科学の深～いつながら」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
34	2022. 9.25	性差について考えよう ～生命から社会まで～	一橋講堂 (ハイブリッド開催)
35	2023. 3.12	自然の中に潜む不確実性とは何か？ ～科学の目で見た持続可能性～	東京大学安田講堂 (ハイブリッド開催)

(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。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。第12回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。第13回は分子研が主体となり企画・運営を行った。「科学の時代。見えてきた未来」と題し、大学共同利用機関の教員10名が講演、パネルディスカッションを行った。ハイブリッド開催だったが、名古屋市科学館に共同主催になっていただき、名古屋市科学館サイエンスホールを講演会場とした。午前・午後とも会場はほぼ満席、視聴者数も過去最高の約30,000（累計）となり、大変盛況なシンポジウムとなった。

第13回大学共同利用機関シンポジウム「科学の時代。見えてきた未来」プログラム

- 9:50 開会挨拶 田窪 行則（大学共同利用機関協議会 会長／国立国語研究所 所長）
来賓挨拶 森 晃憲（文部科学省研究振興局長）
- 10:00-12:45 午前の部 どこまで見える？ 宇宙科学の未来
- 10:05 巨大フレアの痕跡が明らかにした巨大噴火の年代
箱崎 真隆（国立歴史民俗博物館 准教授）
- 10:25 「ひさき」衛星観測から太陽系の惑星探査へ
山崎 敦（宇宙科学研究所 助教）
- 10:45 見えてきた、太陽系外の惑星の姿～宇宙における生命探査～
堀 安範（アストロバイオロジーセンター／国立天文台 特任助教）
- 11:05 天文学とデータ科学
池田 思朗（統計数理研究所 教授）
- 11:25 ビッグバン宇宙の謎
羽澄 昌史（素粒子原子核研究所 特任教授／量子場計測システム国際拠点（QUP）拠点長）
- 12:00 講演者5名によるパネルディスカッション
- 12:45-13:45 休憩（各機関紹介動画）
- 13:45-16:30 午後の部 生き物としてのあなたに、出会ったことはありますか？
- 13:50 プラズマで紐解く生命の謎
大坪 瑤子（核融合科学研究所／基礎生物学研究所／新分野創成センター 特任助教）
- 14:10 原子から生物まで——生命体をどのように理解すればいいのか——
千田 俊哉（物質構造科学研究所 教授）
- 14:30 デジタルツインに基づく人の経験の拡張
稲邑 哲也（国立情報学研究所 准教授）
- 14:50 日本人の読み書き能力1948年調査のナゾに迫る
横山 詔一（国立国語研究所 教授）
- 15:10 「長い目」で今の世界を見る —— 自然人類学から見た現在 ——
長谷川 真理子（総合研究大学院大学 学長）
- 15:45 講演者5名によるパネルディスカッション
- 16:30 閉会挨拶 渡辺 芳人（大学共同利用機関協議会 副会長／分子科学研究所 所長）
- 16:40 終了



実施状況は以下の通り。(中期計画第4期)

回	開催日	テーマ	会場／開催方法
13	2022.10.24	科学の時代。見えてきた未来	名古屋市科学館 (ハイブリッド開催)

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。2022年度は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4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	
2022	5	134	岡崎市立三島小学校，静岡県立浜松南高等学校，静岡 大学農学部，岡崎市現職研修委員会理科部，愛知県立 岡崎北高等学校	0	134

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	岡さんぼ（岡崎市観光協会主催のイベント）への協力
2019.10.11	岡さんぼ（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4期)

開催日	講師	テーマ
2022. 7. 8	奥村 久士 准教授	分子研授業～授業の先に何があるのか～病気に関わるタンパク質をコンピュータシミュレーションで観察する
2022.12.12	長坂 将成 助教	分子研授業～授業の先に何があるのか～軟X線で観る液体の化学
2023. 2.28	Adrian Urban 総研大学生	Science English

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 14 回（2022 年 12 月 27 日）は岡崎コンファレンス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無人ブース出展および生徒のポスター発表指導を行った。

今期（中期計画第 4 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
14	2022.12.27	岡崎コンファレンスセンター	533

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。

4-5-5 小中学校での出前授業

岡崎市内の小中学校を対象に、物理・化学・生物・地学に関わる科学実験や観察を通して、科学への興味・関心を高めることを目的に、岡崎市教育委員会や各小中学校が企画する理科教育に協力している。

分子科学研究所が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
2022.10.26	金属と電子	瀬川 泰知 准 教 授	三島小学校	84
2022.11.25	水溶液を使ったモノづくり	菊地 拓郎 技 術 員 片柳 英樹 助 手	小豆坂小学校	100
2022. 11.30	低温が創る食品や料理、そして超伝導 ——低温の世界と不思議に触れてみよう——	豊田 朋範 技 師 片柳 英樹 助 手	新香山中学校	39
2022.12.25	おもしろい形の分子を作る	鈴木 敏泰 チームリーダー	竜美丘小学校	157
2023. 1.17	光のてこを使って目に見えないモノの形と働きをさわって調べる顕微鏡を体験しよう ——てこの勉強のとき、どうしてめんどうな計算をするんだろう？——	片柳 英樹 助 手 湊 丈俊 主任研究員	六名小学校	169

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。2022年度は2件6名を受け入れた。

(2022年度)

受入中学校	体験受入施設・グループ等名
豊田市立若園中学校	装置開発室, 協奏分子システム研究センター山本 G, 計算科学研究センター
岡崎市立常磐中学校	装置開発室, 協奏分子システム研究センター山本 G, 計算科学研究センター

4-5-7 その他

(1) 岡崎市小中学校理科作品展

岡崎の3機関は、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。2021年は岡崎市総合学習センターでのオンライン開催となった。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。2022年は岡崎中央総合公園で開催された。

(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。2022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、理科作品展会場でトロフィー及び記念賞品贈呈の授与による表彰を行った。

(3) 地域連携「生徒作品表彰」

愛知教育大学附属岡崎中学校による写生会が毎年度、岡崎3機関において、「建物の配置や組み合わせの美しい自然科学研究機構を写生する」ことを目的として行われ、同校の生徒に対して岡崎3機関と触れる機会を提供している。この写生会は、2004年度の自然科学研究機構の創設以前より、毎年度受け入れている。この写生会をきっかけに、岡崎3機関を地域において身近な存在として感じてもらう機会として、2011年度から、同校の教育活動の一部である写生会における優秀者を岡崎3機関として表彰し、同校における生徒の教育の賛助となるよう、同校の協力の下、賞状等を贈呈している。2022年度は実施していない。

4-6 情報発信

2022年4月～2023年3月は、日本語プレスリリース29件、英語プレスリリース20件、新聞報道43件、その他報道9件、客員研究部門及び退職・転出後等の成果論文22件（6章掲載以外）であった。

研究成果プレスリリース（共同発表を含む）

（2022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
2022. 4. 5	資源循環を実現する革新的触媒の開発・実証事業の開始について—環境省「地域資源循環を通じた脱炭素化に向けた革新的触媒技術の開発・実証事業」の開始—	—	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門		2201*
2022. 4.13	どうして生物の24時間リズムは安定なのか？—水素原子の運動から迫る時計タンパク質の温度補償制御—	Communications Physics	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	量子科学技術研究 開発機構 総合科学研究機構 日本原子力研究 開発機構	2202*
2022. 4.18	概日リズムを奏でる時計タンパク質の内部で「2つの歯車」が噛み合う仕組み	Science Advances	協奏分子システム研究センター 階層分子システム解析研究部門	大阪大学 名古屋大学	2203*
2022. 4.20	肺癌細胞から出る細胞外小胞を調べて肺癌の種類を診断できる可能性	Journal of Biological Chemistry	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	大阪国際がんセ ンター 鹿児島大学	2204
2022. 4.21	AIが化学反応の行方を説明してくれる！—コンピュータシミュレーションに対して説明を与える人工知能の応用—	Journal of Chemical Physics	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	大阪大学 九州大学	2205
2022. 5. 6	時を刻むタンパク質の巧みなアクセラ・ブレーキ操作—概日リズムを原子から細胞スケールまで伝える省エネ分子, KaiC—	Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America	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	名古屋大学 大阪大学 立命館大学	2206*
2022. 5.20	炭素でできたメビウスの輪を合成—カーボンナノベルトにひねりが加わり裏表のない分子に—	Nature Synthesis	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門	名古屋大学 北海道大学	2207
2022. 6.16	グリセロールリン酸が糖鎖の伸長を止めて、がん悪性化に関与している	International Journal of Molecular Sciences	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	名古屋市立大学	2208
2022. 6.24	アモルファス構造のトポロジーから熱伝導率を予測する技術を開発—ミクロな構造と材料機能の相関解明に期待—	The Journal of Chemical Physics	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門		2209*
2022. 6.28	放射光の時間構造をアト秒精度で制御	Scientific Reports	極端紫外光研究施設	九州シンクロトロ ン光研究センター 名古屋大学 広島大学 富山大学	2210*
2022. 7. 1	全フッ素化カーボンナノリングを初合成—貴金属接媒を使わず市販の化合物からワンポットで合成可能—	Nature Communications	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門	名古屋大学	2211
2022. 7.13	タンパク質分子の中に組み込まれた糖鎖修飾の制御コードを発見！ バイオ医薬品の開発にも貢献	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	名古屋市立大学	2212
2022. 7.13	光電子運動量顕微鏡で明らかにしたグラファイト原子1層のステップ構造	Physical Review B	極端紫外光研究施設	大阪大学	2213*

2022. 8. 9	単一原子レベルで世界最速の2量子ビットゲートに成功—超高速量子コンピュータ実現へのブレークスルー—	Nature Photonics	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門		2214*
2022. 8.12	細胞内でリン光を発する金銀ナノクラスター！	Nature Communications	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	東京大学	2215
2022. 8.16	小惑星リュウグウ：太陽系外縁部からの来訪者—多機関連携分析が読み解いた小惑星の記録—	Nature Astronomy	極端紫外光研究施設	JAXA 海洋研究開発機構 岡山大学 名古屋大学 他	2216
2022. 9.22	右巻き粒子と左巻き粒子を光の力で区別する	Science Advances	メゾスコピック計測研究センター 繊細計測研究部門		2217*
2022. 9.28	結晶表面超構造によるトポロジカル電子の制御—表面原子層のみを操作して「頑固」なトポロジカル電子を「柔軟」に—	Nature Communications	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門	大阪大学 茨城大学	2218
2022.10.11	回転イオンポンプの2つの分子モーターは固くつながり連動して動く	Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門		2219*
2022.10.13	ラマン分光によって単一分子のジュール熱発生のマイクロな仕組みを解明	ACS Nano	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		2220*
2022.10.20	無機物のハロゲンと有機物を組み合わせて触媒を創り出すことに成功	iScience	生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門		2221*
2022.10.26	極微の時空間スケールで格子振動の量子ダイナミクスを観察	Science Advances	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 大阪大学	2222*
2022.11. 8	ケイ素を含む新しい有機構造体膜の合成に成功—表面合成による炭素ナノ薄膜の多様化に道—	Nature Chemistry	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門	物質・材料研究 機構	2223
2022.11.14	カゴメ格子超伝導を担う電子軌道を解明—放射光を用いた先端電子計測で照らし出す—	Physical Review Letters	極端紫外光研究施設	東北大学 高エネルギー加 速器研究機構 量子科学技術研 究開発機構	2224
2022.12. 1	不完全な酸化状態を純有機中性分子結晶で初めて実現—電子機能性有機物質の開発に新たな道—	Journal of the American Chemical Society	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門	熊本大学 大阪大学	2225
2023. 1.19	磁石で右と左を区別することに成功—鏡と電子スピンの不思議な関係—	Nature	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門, メゾスコピック計測研究センター 繊細計測研究部門	静岡大学	2226*
2023. 1.23	非熱的なメタンの活性化触媒反応における界面水の役割を分子レベルで明らかに！ 持続可能なメタン資源の有効活用に向けて	Communications Chemistry	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門		2227*
2023. 2.21	放射光の光電場を計測する新しい方法を発見—シンクロトロン放射光の光波が振動する様子を観測—	OPTICA	極端紫外光研究施設	豊田工業大学 広島大学 九州シンクロト ロン光研究セン ター 名古屋大学 他	2228
2023. 3.22	小惑星リュウグウの活発な地質活動の歴史が明らかに	Nature Astronomy	極端紫外光研究施設	国立極地研究所 海洋研究開発機構 神奈川大学 高輝度光科学研 究センター 他	2229

* 分子科学研究所主体

EurekAlert! 公開日	タイトル	日本語版 整理番号
2022. 4.13*	How Circadian Clocks Work so Stably? —Temperature Compensation Mechanism Revealed by Atomic-Dynamics Measurements—	2202
2022. 4.15	Unlocking Complex Workings of the Biological Clock	2203
2022. 5. 9	Chronobiologists Identify Key Circadian Clock Mechanism in Cyanobacteria	2206
2022. 5.19	A Möbius Band Constructed Solely by Carbon Atoms	2207
2022. 6.24	Stop for Migration! Glycerol Phosphate Serves as a Terminator of Glycan Elongation in Cancer Malignancy	2208
2022. 6.24	Topology and Machine Learning Reveal Hidden Relationship in Amorphous Silicon	2209
2022. 7.11	New Capability in Synchrotron Radiation Advances Control, Precision on Attosecond Time Scales	2210
2022. 7.13	Sugar Code in Protein—Identification of a Molecular Code Embedded in Protein for Regulating Its Glycosylation	2212
2022. 7.19	New Research Furthers Understanding of the Electronic Structure of Graphite	2213
2022. 8. 8	Breakthrough for the Realization of Ultrafast Quantum Computers: The World’s Fastest 2-Qubit Gate between Two Single Atoms	2214
2022. 8.16*	Asteroid Ryugu: A Drifter from the Outer Solar System Region—Geochemistry and Isotopic Evidence from Organic and Phyllosilicate-Rich Material	2216
2022. 9.21	Differentiate Right- and Left-Handed Particles by the Force Exerted by Light	2217
2022.10. 3	Judged by Its Cover: Engineered Surface Atomic Structures for Next-Generation Electronics	2218
2022.10.11	Molecular-Motor Specialists Deepen Our Understanding of a Rotary Ion Pump of the Cell	2219
2022.10.13*	Joule Heating in a Single Molecule	2220
2022.10.26*	Imaging Coherent Lattice Vibrations on the Nanoscale	2222
2022.12. 9	Synthesis of a Silicon-Integrated Organic Framework Film—Towards On-Surface Synthesis of Various Carbon Nanofilms—	2223
2023. 1.18	Distinguishing between Right and Left with Magnets—Electron Spins Reflect Chiral Molecules Without the Mirror—	2226
2023. 1.19	Towards Highly Conducting Molecular Materials with a Partially Oxidized Organic Neutral Molecule	2225
2023. 1.20	Critical Impacts of Interfacial Water on C–H Activation in Photocatalytic Methane Conversion	2227

*EurekAlert! 未公開のためホームページ公開日

新聞報道

（2022年度）

報道日	記事内容	新聞名	該当研究部門
2022. 5. 4	藤田東大教授ら企業と“同居”	日刊工業	特別研究部門
2022. 5.20	炭素で「メビウスの輪」名大などのチーム世界初合戦	中日	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門
2022. 5.20	生物の24時間リズム 一定に保たれる理由 分子研, QST など解明	科学	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
2022. 5.27	カーボンナノベルト合成 ひねり構造「メビウスの輪」で成功	科学	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門

2022. 5.31	基礎研究を社会につなぐ	日刊工業	特別研究部門
2022. 6.10	アミノ酸は23種 りゅうぐうの砂「生命の源」確認	中日	極端紫外光研究施設
2022. 6.29	100京分の1秒で制御 富大など 電磁波の一種「放射光」	富山	極端紫外光研究施設
2022. 7. 3	野依さん業績たたえ胸像	中日	分子科学研究所
2022. 7. 6	「位相幾何学」で熱伝導率予測	日経産業	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門
2022. 7. 8	「アト秒」精度で放射光制御	日経産業	極端紫外光研究施設
2022. 7.15	黒船表面の原子層判別 分子研など技術 端部性質を理解・制御	日刊工業	極端紫外光研究施設
2022. 7.22	「放射光の時間構造」アト秒精度で制御	科学	極端紫外光研究施設
2022. 7.28	「ガラス張り拠点」から革新 東大・藤田研と島津製作所など	日経産業	特別研究部門
2022. 7.29	科学の深淵	日刊工業	極端紫外光研究施設
2022. 7.29	タンパク質に組み込まれた踏査就職の制御コード発見 バイオ医薬品の開発期待	科学	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. 8. 4	地域中核大と新分野開拓	日刊工業	分子科学研究所
2022. 8. 9	世界初最速演算 分子研が成功	中日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2022. 8.11	世界最速6.5ナノ秒動作 分子研, 2量子ビットゲーム	日刊工業	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2022. 8.16	小惑星 地球に水運ぶ? りゅうぐうの砂 JAXA 分析	中日	極端紫外光研究施設
2022. 8.16	「リュウグウ」に水あった! 海洋機構など構成成分から証拠発見	日刊工業	極端紫外光研究施設
2022. 8.16	リュウグウ有機物 鉱物が「ゆりかご」	朝日	極端紫外光研究施設
2022. 8.19	冷却原子型量子コンピューター実現へ朗報	科学	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2022. 8.22	量子計算機の演算素子を高速化	日経産業	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2022. 8.27	量子計算 大規模化へ新技術	読売	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2022. 8.30	量子コンピューター第3の方式浮上 冷却原子型, 日本も先頭集団	日経産業	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2022. 9.30	科学の先端 体験しよう 来月16日, 名古屋で 宇宙や生命テーマに解説	中日	分子科学研究所
2022.10. 2	3~10日 ノーベル賞発表 日本2年連続受賞なるか	日本経済	特別研究部門
2022.10. 3	ノーベル賞きょうから発表 中部の有力候補 卓越の研究 吉報待つ	中日	特別研究部門
2022.10. 4	学際統合物質科学研究機構 名古屋大 設立記念シンポジウム	文教ニュース	所長

2022.10. 5	「アインシュタインの疑問 解き明かした」量子コンピューターなどに道筋	中日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2022.10.10	量子研究 日米の差鮮明	日刊工業	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2022.10.18	単一分子ジュール熱観測 分子研など素子実現の基礎知見に	日刊工業	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
2022.10.24	「冷却原子型」世界最速を記録 分子科学研, 第3の量子コンピューター確率	日経産業	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2022.11.18	ケイ素含む新有機構造体膜 NIMS が合成に成功	科学	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門
2022.12.16	分子研 岡崎の竜美丘小で授業 多様な形の分子学んだよ	中日	機器センター
2023. 1. 1	「自己組織化」一筋 化学を広げる	朝日	特別研究部門
2023. 1. 9	愛知県, 3 研究所と連携 科学技術の人材育成など	日刊工業	所長
2023. 1.16	基生研・生理研・分子研 自然機構 3 研究所が件と連携協定	文教速報	所長
2023. 1. 9 1.16	基生研・生理研・分子研 愛知県と連携に関する協定締結	文教ニュース	所長
2023. 1.19	「毒」と「薬」磁石で選別	中日	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門
2023. 1.19	超電導キラル物質 磁石で左右判定	日刊工業	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門
2023. 2. 3	「化学と幾何学」きょうオンライン講座	中日	特別研究部門
2023. 2. 3	超伝導体のキラリテイ 磁石の表面で分別	科学	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門
2023. 2. 6	文科省と分子研が連携 GIGA スクール特別講座 量子力学 100 年の謎と量子コンピューターへの挑戦!	文教ニュース	分子科学研究所

その他報道

(2022 年度)

発行日等	記事等内容	掲載誌等名	該当研究部門
2022. 7. 4 19:30	研究所と連携した理数授業(岡崎北高校出前授業)	チャンネルお かざき (地デジ121ch)	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
2022. 7. 4 18:00 【再放送】 7.4 21:00 7.5 7:00, 10:00, 12:00, 15:00	研究所と連携した理数授業(岡崎北高校出前授業)	チャンネルミ クス (CATV 131ch)	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
2022.10. 5	2022 年のノーベル物理学賞に「量子もつれ」の研究者 3 人	NHK 特設サイト ノーベル賞2022	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門

2022.10.28	ノーベル物理学賞で話題「量子力学」の権威が母校に	熊本朝日放送 テレビ KAB	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2022.10.29	やりたいことを見つけて頑張る	熊本日日新聞 (WEB)	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2023. 1. 4	まるっと！	NHK(G)	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2023. 2.17	出前授業「金属から「電子」を取り出してみよう！」	広報誌OKAZAKI 71号	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門
2023. 2.20	分子創造——美しい構造, 予想外の機能—— 澤田知久 × 瀬川泰知 × 宮島大吾	現代化学 (東京化学同人) 2023年3月号	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門
2023. 3.10	NEW GENERATION : 瀬川泰知准教授 (分子科学研究所) 前編	東京大学新聞 2023年3月10日 増刊『合格記念号』	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門

客員研究部門及び退職・転出後等の成果論文 (所属に分子科学研究所を含む)

(2022年度)

W. HIGEMOTO, M. YOKOYAMA, T. U. ITO, T. SUZUKI, S. RAYMOND and Y. YANASE, “Direct Measurement of the Evolution of Magnetism and Superconductivity toward the Quantum Critical Point,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **119(49)**, e2209549119 (2022). DOI: 10.1073/pnas.2209549119

S. KANASUGI and Y. YANASE, “Anapole Superconductivity from PT-Symmetric Mixed-Parity Interband Pairing,” *Commun. Phys.* **5(1)**, 39 (2022). DOI: 10.1038/s42005-022-00804-7

M. MATSUBARA, T. KOBAYASHI, H. WATANABE, Y. YANASE, S. IWATA and T. KATO, “Polarization-Controlled Tunable Directional Spin-Driven Photocurrents in a Magnetic Metamaterial with Threefold Rotational Symmetry,” *Nat. Commun.* **13(1)**, 6708 (2022). DOI: 10.1038/s41467-022-34374-7

R. KAWARAZAKI, H. NARITA, Y. MIYASAKA, Y. IKEDA, R. HISATOMI, A. DAIDO, Y. SHIOTA, T. MORIYAMA, Y. YANASE, A. V. OGNEV, A. S. SAMARDAK and T. ONO, “Magnetic-Field-Induced Polarity Oscillation of superconducting Diode Effect,” *Appl. Phys. Express* **15(11)**, 113001 (2022). DOI: 10.35848/1882-0786/ac99b9

H. NARITA, J. ISHIZUKA, R. KAWARAZAKI, D. KAN, Y. SHIOTA, T. MORIYAMA, Y. SHIMAKAWA, A. V. OGNEV, A. S. SAMARDAK, Y. YANASE and T. ONO, “Field-Free Superconducting Diode Effect in Noncentrosymmetric Superconductor/Ferromagnet Multilayers,” *Nat. Nanotechnol.* **17(8)**, 823–828 (2022). DOI: 10.1038/s41565-022-01159-4

K. TAKASAN, S. SUMITA and Y. YANASE, “Supercurrent-Induced Topological Phase Transitions,” *Phys. Rev. B* **106(1)**, 14508 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.106.014508

D. AOKI, J.-P. BRISON, J. FLOUQUET, K. ISHIDA, G. KNEBEL, Y. TOKUNAGA and Y. YANASE, “Unconventional Superconductivity in UTe_2 ,” *J. Phys.: Condens. Matter* **34(24)**, 243002 (2022). DOI: 10.1088/1361-648X/ac5863

Y. YANASE, A. DAIDO, K. TAKASAN and T. YOSHIDA, “Topological d-Wave Superconductivity in Two Dimensions,” *Phys. E* **140**, 115143 (2022). DOI: 10.1016/j.physe.2022.115143

T. KITAMURA, T. YAMASHITA, J. ISHIZUKA, A. DAIDO and Y. YANASE, “Superconductivity in Monolayer FeSe Enhanced by Quantum Geometry,” *Phys. Rev. Res.* **4(2)**, 23232 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.4.023232

- S. SUMITA and Y. YANASE**, “Topological Gapless Points in Superconductors: From the Viewpoint of Symmetry,” *Prog. Theor. Exp. Phys.* **2022(4)**, 04A102 (2022). DOI: 10.1093/ptep/ptab124
- M. IMAI, I. TANABE, Y. OZAKI and K. FUKUI**, “Solvation Properties of Silver Ions in Ionic Liquids Using Attenuated Total Reflectance Ultraviolet Spectroscopy,” *J. Mol. Liq.* **364**, 119998 (2022). DOI: 10.1016/j.molliq.2022.119998
- M. IMAI, I. TANABE, T. SATO and K. FUKUI**, “Local Structures and Dynamics of Interfacial Imidazolium-Based Ionic Liquid Depending on the Electrode Potential Using Electrochemical Attenuated Total Reflectance Ultraviolet Spectroscopy,” *Spectrochim. Acta, Part A* **273**, 121040 (2022). DOI: 10.1016/j.saa.2022.121040
- F. WEBER and H. MORI**, “Machine-Learning Assisted Design Principle Search for Singlet Fission: An Example Study of Cibalackrot,” *npj Comput. Mater.* **8(1)**, 176 (2022). DOI: 10.1038/s41524-022-00860-1
- K. MURATA, H. MORI and H. FUWA**, “GIAO NMR Calculation-Driven Stereochemical Assignment of Marine Macrolide Natural Products: Assessment of the Performance of DP4 and DP4+ Analyses and Assignment of the Relative Configuration of Leptolyngbyalide A–C/Oscillariolide Macrolactone,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **95(12)**, 1775–1785 (2022). DOI: 10.1246/bcsj.20220253
- N. KUROKI, Y. UCHINO, Y. FUNAKURA and T. H. MORI**, “Electronic Fluctuation Difference between Trimethylamine N-Oxide and *tert*-Butyl Alcohol in Water,” *Sci. Rep.* **12(1)**, 19417 (2022). DOI: 10.1038/s41598-022-24049-0
- M. OHKUMA, M. MITO, H. DEGUCHI, Y. KOUSAKA, J. OHE, J. AKIMITSU, J. KISHINE and K. INOUE**, “Nonequilibrium Chiral Soliton Lattice in the Monoaxial Chiral Magnet $MnNb_3S_6$,” *Phys. Rev. B* **106(10)**, 104410 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.106.104410
- Y. SHIMAMOTO, Y. MATSUSHIMA, T. HASEGAWA, Y. KOUSAKA, I. PROSKURIN, J. KISHINE, A. S. OVCHINNIKOV, F. J. T. GONCALVES and Y. TOGAWA**, “Observation of Collective Resonance Modes in a Chiral Spin Soliton Lattice with Tunable Magnon Dispersion,” *Phys. Rev. Lett.* **128(24)**, 247203 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevLett.128.247203
- M. OHKUMA, M. MITO, Y. KOUSAKA, J. OHE, J. AKIMITSU, J. KISHINE and K. INOUE**, “Soliton Locking Phenomenon in Bulk Single Crystal of Monoaxial Chiral Magnet $MnNb_3S_6$,” *Appl. Phys. Lett.* **122(9)**, 92403 (2023). DOI: 10.1063/5.0137379
- K. ISHITO, H. MAO, Y. KOUSAKA, Y. TOGAWA, S. IWASAKI, T. ZHANG, S. MURAKAMI, J. KISHINE and T. SATOH**, “Truly Chiral Phonons in α -HgS,” *Nat. Phys.* **19(1)**, 35–39 (2023). DOI: 10.1038/s41567-022-01790-x
- K. YONEDA, K. KANAZASHI, H. KUMAGAI, R. ISHIKAWA and S. KAWATA**, “Noncentrosymmetric Supramolecular Hydrogen-Bonded Assemblies Based on Achiral Pyrazine-Bridged Zinc(II) Coordination Polymers with Pyrazinedione Derivatives,” *Chemistry* **5(1)**, 179–186 (2023). DOI: 10.3390/chemistry5010015
- F. HIRATA**, “Does the Second Critical-Point of Water Really Exist in Nature?” *Condens. Matter Phys.* **25(2)**, 23601 (2022). DOI: 10.5488/CMP.25.23601
- M. ANDO, K. OHTA, T. ISHIDA, R. KOIDO and H. SHIROTA**, “Physical Properties and Low-Frequency Polarizability Anisotropy and Dipole Responses of Phosphonium Bis(fluorosulfonyl)amide Ionic Liquids with Pentyl, Ethoxyethyl, or 2-(Ethylthio)ethyl Group,” *J. Phys. Chem. B* **127(2)**, 542–556 (2023). DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c07466

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。

(1) 『先端的な研究を推進する拠点事業』の UVSOR 共同利用事業（放射光分子科学）、エクストリームフォトンクス連携事業（レーザー分子科学）に関連するものとして、光創成ネットワーク研究拠点プログラム（分子科学研究所は分担）を 2017 年度まで受託、実施した。また、スーパーコンピュータ共同利用事業（理論計算分子科学）に関連するものとして、文科省の「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）の構築」プロジェクトは 2015 年度で終了し、2014 年度より「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発（ポスト「京」重点課題⑤）」が実施された。これは 2019 年度で終了し、富岳成果創出加速プログラムとして継続した（分子科学研究所としての活動は行っていない）。さらに、理論計算に関連するものとして、文科省「元素戦略プロジェクト」の「触媒・電池の元素戦略研究拠点」（分子研は分担）を受託、2021 年度まで実施した。2018 年度より文部科学省から「光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP」事業を、2022 年度から内閣府／科学技術振興機構から「ムーンショット型研究開発事業」を受託している。

(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している。2022 年度からはこの事業が本格稼働した。前述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 つの目的である、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 2 者については、共同利用設備の安定的な運営を勧告し、旧分子スケールナノサイエンスセンターの共同利用設備をすべて機器センターに集約し、予算面では「マテリアル先端リサーチインフラ」事業予算（外部資金）を主な財源とし、運営費交付金一般経費も用いながら運用している。

(3) 『研究者の国際ネットワーク構築に関する事業』としては、個人ベースの萌芽的な取り組みと組織ベースの国際共同研究拠点の形成がある。従来からの外国人顧問制度、客員外国人制度、招へい外国人制度、国際研究集会（岡崎コンファレンスなど）を実施すると同時に、第1期中期計画期間には独自の分子研国際共同プログラムを進めた。このプログラムは個人ベースの国際共同研究のきっかけ（萌芽的国際共同）を作るものである。さらに国際共同研究拠点として組織ベースで取り組むために、第2期中期計画期間においては、自然科学研究機構としての運営費交付金特別経費で「自然科学研究における国際的学術拠点の形成」事業がスタートした。分子科学研究所では、「分子科学国際共同研究拠点の形成」による新たな取組（協定締結等）を進めている。また、日本学術振興会の多国間交流事業「アジア研究教育拠点事業」の一環として、「物質・光・理論分子科学のフロンティア」（2006年度～2010年度）の事業を行ってきた。5年間、日中韓台の4拠点（協定をそれぞれ締結）を中心にしてマッチングファンド方式での様々な試みを行った。また、分子科学研究所（総合研究大学院大学として）は、外務省による21世紀東アジア青少年大交流計画（JENESYSプログラム）の枠で設定された日本学術振興会の「若手研究者交流支援事業」に2008年度より2011年度まで毎年、応募・採択され、対象国の若手研究者（院生を含む）の人材育成に貢献してきた。これらの事業については、現在、これまでの経験を踏まえて精査を行った上で集中・重点化し、いくつかの予算枠を組み合わせる形で実施している。なお、2015年度以降はIMS-IIPA（International Internship Program in Asia）としてアジア地区の国際ネットワークを構築するとともに、米国、欧州、イスラエルとの若手研究者を対象とした国際共同研究（こちらはIMS-IIPと呼ぶ）を強化しているところである。

(4) 『研究力強化推進事業』

自然科学研究機構として文科省の「研究大学強化促進事業」の予算を受けて機構として一体的に行う事業である。2013年10月より10年計画で開始された。詳しくは5-8を参照のこと。

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

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

このような体制を構築した上で、新たな分野融合的発想に基づく光技術の適用法や新技術開発につながる先駆的・挑戦的な萌芽研究を開拓・推進する「共同研究」、およびそれらを探索する「研究会」のプロジェクト提案を広く機構内外から公募し、教授会議での審査を経て、採択課題を推進することとなった。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 Nanomaterials”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。2022年度は、学術変革領域研究A「キラル光物質科学」との共催として、ワークショップ「キラルな光とキラルな物質」を開催した。専任の特任助教は2018年度に公募によって広く人材を募集し、教授会議構成員の内の5名で構成される選考委員会で選考が行われて候補者が決定し、2018年度末に着任して研究活動を行っている。

5-2 光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP (文部科学省)

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

分子科学研究所では、光分子科学研究領域の大森賢治教授が量子科学技術委員会の専門委員・副主査として、我が国の量子科学技術に関する政策課題・将来展望の議論を先導する立場を果たしてきた。また、大森教授が研究代表者を務める新たな研究プロジェクト「アト秒ナノメートル領域の時空間光制御に基づく冷却原子量子シミュレータの開発と量子計算への応用」がQ-LEAP「量子情報処理」領域の大規模・基礎基盤研究に採択され進行中である。共同研究機関である浜松ホトニクス中央研究所・京都大学・岡山大学・近畿大学・オックスフォード大学・ハイデルベルグ大学・ストラスブール大学・インスブルック大学らと緊密に連携して、卓越したコアコンピタンスを有し、量子力学の根源的な問題に深く鋭く切り込む全く新しい量子シミュレータ・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))には石崎章仁教授が、分担者として加わっており、同事業に寄与している。

5-3 ムーンショット型研究開発事業（内閣府／科学技術振興機構）

「ムーンショット型研究開発事業」は、内閣府の主導により、超高齢化社会や地球温暖化問題など重要な社会課題に対し、我が国発の破壊的イノベーションの創出を目指し、従来技術の延長にない、より大胆な発想に基づく挑戦的な、そして人々を魅了する、野心的な目標（ムーンショット）の実現を推進するための、国家的な大型研究プログラムである。（内閣府／JST ムーンショット型研究開発事業：<https://www.jst.go.jp/moonshot/>）

目標6「2050年までに、経済・産業・安全保障を飛躍的に発展させる誤り耐性型汎用量子コンピュータを実現」では、従来のコンピュータの進歩が限界に達しつつあるなか、爆発的に増大する情報処理の需要に対応する量子コンピュータの開発を目指す。多様、複雑で大規模な実社会の問題を量子コンピュータで解くためには、量子的な誤りを直しながら正確な計算を実行する、誤り耐性型汎用量子コンピュータの実現が鍵となる。

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目標6の研究開発プログラム「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」のプロジェクトマネージャー（PM）に決定した。大森教授のプロジェクトでは、光ピンセットを用いて大規模に配列させた冷却原子量子ビットの各々を、自在かつ高速に移動させつつゲート操作、誤り検出・訂正を行う動的量子ビットアレーの実装、および産学連携の下での構成要素の統合・パッケージ化による高い安定性とユーザビリティの達成により、誤り耐性量子コンピュータの実現を目指す。

5-4 大学連携研究設備ネットワークによる研究設備共用促進事業

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、2022年度からは「大学連携研究設備ネットワークによる研究設備共用促進」事業（以下「本事業」という）として運営が行われている。

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約600に上っている。参画機関の外部公開機器の登録台数は、1,175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3,345台であり、登録ユーザー数は約17,000名に達している（数値は2023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3,000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。

第4期中期計画の初年度にあたる2022年度においても、設備の学外利用を促進するために、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研究設備共用加速事業（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、文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ事業、国立大学法人機器・分析センター協議会、等とも連携しながら、企画、運営を行っている。

本事業に対しては、2017年度より、機構本部の自然科学大学間連携推進（NICA）事業においても予算が継続的に措置されている。これまでは研究者間のつながりで運営されていたネットワーク型共同研究について、機関間の組織的な関係を強化し一層の発展を目指すことを目的に、連携の強化や集約による分野別予算の確保や人的・物的資源の有効活用等（マネージャー人件費や予約課金システム更新費、講習会強化費用等）が可能となった。これらの施策は本事業の安定運営に大きく寄与している。今後も引き続き、①予約・課金システム等の安定運用と改善、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
2022	175,491	1,121	810	1,870	3,801

表2 2022年度加速事業課題一覧

大学	部署	代表者	職名	課題名
千葉大学	共用機器センター	榊 飛雄真	准教授	高磁場 NMR の固体プローブ整備
東京農工大	学術研究支援総合センター	野口 恵一	教授	二重収束磁場型質量分析計の機能復活による設備共用加速
山梨大学	工学部附属ものづくり教育実践センター	勝又まさ代	技術専門職員	電子スピン共鳴装置の温度可変システム整備
奈良先端大	物質科学教育研究センター	河合 壯	教授	Autoflex2(MALDI-TOFMS) 装置の共用促進のための施設整備事業
奈良先端大	物質科学教育研究センター	河合 壯	教授	共同利用者の利便性向上のための多機能走査型 X 線光電子分光分析装置制御用パソコンアップグレード
大阪大学	産業科学研究所	鈴木 健之	准教授	固体核磁気共鳴装置の保守整備による依頼利用促進
大阪大学	理学研究科分析機器測定室	今田 勝巳	教授	分子間相互作用解析装置（表面プラズモン共鳴装置）のリモート測定対応化と整備
広島大学	技術センター	網本 智子	契約専門職員	ナノ LC システムの点検整備による質量分析計の外部利用促進
広島大学	技術センター	前田 誠	技術主任	真空ポンプ消耗品パーツ交換並びに清掃整備による装置の安定稼働促進
鳥取大学	研究推進機構研究基盤センター	森本 稔	准教授	ガスクロマトグラフ質量分析装置の自動化と多サンプル対応化による設備共用の加速化
高知大学	総合研究センター実験実習機器施設	坂本 修士	教授	オールインワン蛍光顕微鏡の共用化促進のための「機能拡張」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
九州大学	生体防御医学研究所	福井 宣規	教授	「多階層生体防御システム研究拠点」事業におけるクライオ電子顕微鏡 Polara と汎用電子顕微鏡 TE20 の全国相互利用の促進
九州大学	生体防御医学研究所	福井 宣規	教授	「トランスオミクス医学研究拠点ネットワーク形成事業」における超並列シーケンサー NovaSeq6000 の相互利用の促進
長崎大学	研究開発推進機構設備共同利用部門	真木 俊英	准教授	高輝度単結晶構造解析装置再整備事業
長崎大学	研究開発推進機構設備共同利用部門	真木 俊英	准教授	透過型電子顕微鏡整備事業

表3 2022年度講習会・研修会開催一覧

講習会・研修会名	申請者	開催日	参加数
質量分析初歩講習会1	大阪大学	2022年 4月22日(金)	68
ラマン分光初歩講習会	分子科学研究所	2022年 4月27日(水)	54
英語研修1(スピーキング)	静岡大学	2022年 5月16日(月) 2022年 5月17日(火)	12
質量分析初歩講習会2	大阪大学	2022年 5月20日(金)	63
NMR 初歩講習会	鳥取大学	2022年 5月27日(金)	65
分析装置総覧講習会	分子科学研究所	2022年 6月10日(金)	128
SPM 初歩講習会	分子科学研究所	2022年 6月23日(木)	38
英語研修2(英訳)	静岡大学	2022年 6月27日(月)	6
質量分析講習会3 質量分析MALDI-MSハイブリッド講習会	大阪大学	2022年 7月7日(木)	61
粉末X線回折初歩講習会	分子科学研究所	2022年 7月8日(金)	40
英語研修3(パラフレージング)	静岡大学	2022年 7月8日(金)	6
固体NMR測定【中級者コース】	鳥取大学	2022年 7月14日(木) 2022年 7月15日(金)	19
質量分析ESI-MSハイブリッド講習会	大阪大学	2022年 8月4日(木)	44
英語研修4(集合研修)	静岡大学	2022年 9月8日(木)	18
ESR 初歩講習会	分子科学研究所	2022年 9月16日(金)	27
英語研修5(スピーキング)	静岡大学	2022年 9月26日(月) 2022年 9月27日(火)	12
固体NMR測定(上級者コース)	鳥取大学	2022年10月6日(木) 2022年10月7日(金)	10
機器分析における試料前処理講習会	大阪大学	2022年10月13日(木)	47
単結晶X線回折初歩講習会	分子科学研究所	2022年10月20日(木)	45
第一回NMR構造解析講習会	鳥取大学	2022年11月10日(木)	45
質量分析講習会7-1	大阪大学	2022年11月11日(金)	34
第1回分子研NMRセミナー	分子科学研究所	2022年11月14日(月)	61
第2回分子研NMRセミナー	分子科学研究所	2022年11月17日(木)	58
SQUID 初歩講習会	分子科学研究所	2022年11月18日(金)	26
質量分析講習会6	大阪大学	2022年11月22日(火)	29
クライオミクロトーム実践講習会	分子科学研究所	2022年11月25日(金)	20
SEM(走査形電子顕微鏡)中級講習会	分子科学研究所	2022年11月25日(金)	61
質量分析講習会7-2	大阪大学	2022年12月9日(金)	27
質量分析講習会8	大阪大学	2022年12月14日(水)	25
第二回NMR構造解析講習会	鳥取大学	2022年12月16日(金)	37
質量分析講習会7-3	大阪大学	2023年 1月11日(水)	29
NMR 実地講習	鳥取大学	2023年 1月19日(木) 2022年 1月20日(金)	28
第三回NMR構造解析講習会	鳥取大学	2022年 2月10日(金)	24
英語研修6	静岡大学	2022年 2月7日(火) 2022年 2月8日(水)	12
英語研修7	静岡大学	2022年 3月7日(火) 2022年 3月8日(水)	11
第四回NMR構造解析講習会	鳥取大学	2022年 3月17日(金)	27

5-5 マテリアル先端リサーチインフラ ARIM (文部科学省)

2021年度から文部科学省委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。先行事業であるナノテクノロジープラットフォームで培った、全国的な最先端共用設備体制と高度な技術支援提供体制に加え、リモート化・自動化・ハイスループット化された先端設備を導入し、設備共用を継続すると共に、共用に伴って創出されるマテリアルデータを、利活用しやすい構造化された形で、収集・蓄積を行っていくことを主たる目的とした事業である。分子科学研究所はこのARIM事業の掲げる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物質・材料合成プロセス技術領域の責任機関として受託業務を遂行することとなった。本事業では機器センターが運営母体となり、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い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。

2021年度は準備期間に位置付けられ、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、2021年度補正予算により超伝導量子干渉型磁束計(SQUID)の更新された。2022年度本事業補正予算でも単結晶X線構造解析と有機自動合成システムの導入が認められ、2023年度末から稼働予定である。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のスポーク機関に移行し、実施担当者50名規模に加え、本格的に本事業が始動された。また、2022年度には、7つの重要技術領域間の連携を支援するため3つの横断技術領域が新設され、分子科学研究所は横断技術領域「物質・材料合成プロセス」責任機関として、有機合成のデジタル化、物質・材料合成プロセスのデータ構造化・自動化等を進める体制を構築しつつあるところである。

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

表1 2022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)	UVSOR BL4Bを用いた極低温高磁場X線磁気円二色性測定システム。薄膜作製用試料準備槽つき。利用エネルギー200-1000 eV、試料温度5-60 K、磁場±5 T(±7 Tまで一応可能)。作成した薄膜等を大気に曝すことなくそのまま元素選択磁性測定したい場合に有効。 [UVSOR-III BL4B(100-1000 eV円偏光)、超伝導磁石: JANIS社製7THM-SOM-UHV(±7 T, 5 K)、試料作製槽LEED/AES、蒸着などを装備]	解良 聡施設長 横山利彦教授 小坂谷貴典助教 山本航平助教 石山 修特任研究員	UVSOR 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プースは、フォトリソグラフィに関する一連の作業(基板洗浄、各種レジスト塗布、露光、現像、アッシング、エッチング)に利用可能。 [マスクレス露光装置(ナノシステムソリューションズDL-1000/IMC)、段差計(KLA Tencor P7)、精密温度調整機能付クリーンプース、マスクライナー(ミカサ社製MA-10)、スピコーター(ミカサ社製MS-A100)]	山本浩史室長 近藤聖彦主任技師 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

	<p>3次元光学プロファイラーシステム (Nexview)</p> <p>3次元光学プロファイラーシステム (ZYGO Nexview) は、非接触で表面の3次元形状測定、表面粗さ測定を行う装置。つなぎ合わせ機能により□46.5 mm 範囲の3次元形状測定や、Ra0.1 nm 以下の超精密研磨面の測定、透明膜の厚さ測定 (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</p> <p>[精密温度調整機能付クリーンブース]</p>	<p>山本浩史室長 近藤聖彦主任技師 菊地拓郎技術員 木村幸代技術員</p>	<p>装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室</p>
	<p>電子ビーム描画装置</p> <p>データ提供の可否 可の場合データ情報の内容を簡単に提供できるデータは加速電圧、ビーム電流、エリアドーズ (レジスト感度) となる。</p> <p>[エリオニクス製 ELS-G100 最大加速電圧: 100 kV, 最小ビーム径: 1.8 µm, 最小描画線幅: 6 nm]</p>	<p>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</p>	<p>装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室</p>
電解放出形走査電子顕微鏡	<p>走査電子顕微鏡を提供。主に施設利用に対応。</p> <p>[JEOL JSM-6700F(1) (試料 2 インチまで)]</p>	<p>横山利彦センター長 石山 修特任研究員 今井弓子技術支援員</p>	<p>機器センター 機器センター 機器センター</p>
低真空分析走査電子顕微鏡	<p>幅広い試料に対する、SEM 観察と EDS 元素分析の環境を提供。SEM 本体は、日立ハイテクノロジー社製 SU6600。10 ~ 300Pa の低真空観察に対応し、絶縁性試料を導電処理なしで観察可能。分解能は、高真空 1.2 nm (30 kV), 低真空 3.0 nm (30 kV)。EDS 分析装置は、BrukerAXS 社製 XFlash5060FQ 及び XFlash6 10。表面凹凸の影ができにくく高感度な EDS 検出器を搭載。温度を -20 ~ 50℃ 程度で変えられるステージも利用可能。</p> <p>[日立ハイテクノロジー SU6600, BrukerAXS_QUANTAX XFlash 5060FQ+XFlash6 10 コンバインシステム]</p>	<p>横山利彦センター長 石山 修特任研究員 上田 正主任技術員 今井弓子技術支援員</p>	<p>機器センター 機器センター 機器センター 機器センター</p>
電界放出形透過電子顕微鏡	<p>高輝度で高い干渉性の電子線が得られるフィールドエミッション電子銃 (FEG) を搭載した電子顕微鏡。ナノスケールオーダーの超高分解能の像観察や分析が可能。エネルギー分散型 X 線分析装置 (EDS) による微小部の元素分析、組成マップを測定可能。STEM 機能により走査透過像測定が可能。</p> <p>[JEOL_JSM-2100F (試料 3 mm φ 以内)]</p>	<p>横山利彦センター長 伊木志成子特任専門員 上田 正主任技術員 賣市幹大技術職員</p>	<p>機器センター 機器センター 機器センター 機器センター</p>
走査プローブ顕微鏡	<p>形状測定、機械特性測定、電気特性測定、ケルビンプローブ測定に特化した走査プローブ顕微鏡を用いた共同研究が可能。</p> <p>[Bruker Dimension XR Icon NanoElectrical]</p> <p>電気化学測定に特化した走査プローブ顕微鏡を用いた共同研究が可能。</p> <p>[Bruker Dimension XR Icon NanoElectrochemical]</p>	<p>横山利彦センター長 湊 丈俊主任研究員 上田 正主任技術員 杉本敏樹准教授</p>	<p>機器センター 機器センター 機器センター 物質分子科学</p>
単結晶 X 線回折	<p>単結晶試料に X 線を入射すると、結晶構造を反映した回折点が得られる。この回折点の位置および強度から、結晶構造解析が行われる。構造解析により、原子の三次元座標 (立体構造) や原子間距離・結合距離、三次元の電子密度などの情報が得られる。数十~数百 mm サイズの単結晶試料が作成出来れば、3 時間程度で測定~解析が可能。</p> <p>[Rigaku_MERCURY CCD-1・R-AXIS IV, MERCURY CCD-2]</p>	<p>横山利彦センター長 岡野芳則技術員</p>	<p>機器センター 機器センター</p>

単結晶 X 線回折 (微小結晶用)	高輝度 X 線：光学系にコンフォーカルミラーを用いており、CCCD-1, -2 に比べ、約 10 倍の高輝度 X 線ビームが得られ、測定が難しかった微小結晶でも測定が可能。ビーム径は $\phi 0.1 \sim 0.2$ mm で、コリメータはバックグラウンド低減のためビーム径よりやや大きめの 0.3mm のものが取付。 低温測定：ガス吹き付け型の冷却装置で、到達温度は N ₂ ガスモードで 100 K, He ガスモードで 24 K (実測)。到達時間は、N ₂ で 240 分, He で 150 分かかる。運転モードの切り替えは、He から N ₂ には迅速に切り替え可能だが、N ₂ から He の場合は、冷凍機を一旦室温に戻す必要。 [Rigaku_HyPix-AFC]	横山利彦センター長 岡野芳則技術員	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, XtaLAB SynergyCustom]	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・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 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 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 古池美彦助教	機器センター 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 福谷圭祐助教	光分子科学 UVSOR 光分子科学
X 線光電子分光	汎用性も高いハイスpek 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-K α 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 \times 3mm ² 単色 X 線源: エネルギー幅 300 meV	横山利彦センター長 山本航平助教 石山 修特任研究員 伊木志成子特任専門員	機器センター 物質分子科学 機器センター 機器センター

電子スピン共鳴 (E680)	電子スピンの分布や相互作用, ダイナミクスの解析支援。Bruker社製 E680 では, 通常の X-band CW-ESR 以外にも, 多周波数 (Q-, W-band), 多種測定 (パルス, 多重共鳴) が可能。 [Bruker_E680]	横山利彦センター長 中村敏和チームリーダー 浅田瑞枝技術員 上田 正主任技術員 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
電子スピン共鳴 (EMX Plus, E500, E580)	電子スピン共鳴 (ESR) 装置は, 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単位が分裂し, 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, E580]	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
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, MPMS-3]	横山利彦センター長 中村敏和チームリーダー 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
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 長尾春代技術員	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_PEAQ-ITC, iTC200]	横山利彦センター長 賣市幹大技術員 長尾春代技術員	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 正主任技術員	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ェアで計算によって吸光度を求めており、物質の同定や性質、あるいは濃度（定量分析）を調べることが可能。付属装置によって、半導体・薄膜・ガラスやフィルムなどの固体試料の反射率・透過率測定が可能。 [SHIMADZU_UV-3600Plus]	横山利彦センター長 上田 正主任技術員	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 Quantaaurus-QY C11347-01]	横山利彦センター長 上田 正主任技術員	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 ΔA （通常は楕円率 θ で表される）が観測。楕円率とは直線偏光を光学活性物質の吸収波長で通過させると楕円偏光になるが、その楕円の短軸長軸の正接角 θ をもって定義され、 ΔA が小さいと $\theta = 33 \times \Delta A$ が成立。CD 測定でのフルスケールは θ 表示（単位 mdeg）。 [JASCO J-1500]	横山利彦センター長 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 正主任技術員	機器センター 機器センター

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 長尾春代技術員	機器センター 機器センター 機器センター
合成ものづくり支援 (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	計算科学研究センター
合成ものづくり支援 (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 佐藤拓朗助教	協奏分子センター 協奏分子センター
合成ものづくり支援 (有機合成 DX)	自動および手動によるバッチ型反応実験, ならびに, AI や DFT 計算によるデータ解析を行い, 有機合成分野のデジタル化を支援。 [反応実験に用いる有機低分子化合物の合成支援, 自動スクリーニング装置によるバッチ型反応実験の実施支援, 手動実験による自動実験の検証支援, 有機合成反応のデータ構造化支援, 有機低分子および有機合成反応の DFT 計算支援]	榎山儀恵准教授 鈴木敏泰チームリーダー	生命・錯体分子科学 機器センター
合成ものづくり支援 (磁性薄膜作製評価)	超高真空中で磁性薄膜等を作成し, in situ 磁気光学 Kerr 効果による評価, ならびに, 紫外レーザー磁気円二色性光電子顕微鏡 (UV MCD PEEM) によるナノ磁気構造評価を実施。 [超高真空中での磁性薄膜作成・磁気光学 Kerr 効果によるその場観察評価。紫外レーザー磁気円二色性光電子顕微鏡も利用可]	横山利彦教授 山本航平助教	物質分子科学 物質分子科学
合成ものづくり支援 (金属錯体)	金属錯体の設計, 合成, 構造解析および物性評価を支援。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, 単結晶および粉末 X 線回折による構造解析, AFM 観察, 電気化学測定ならびに紫外-可視-近赤外吸光分光光度計, 分光蛍光光度計, 発光スペクトル-寿命測定システム, フーリエ変換赤外分光光度計による各種光物性測定が可能]	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
合成ものづくり支援 (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 2022年度(令和4年度)採択課題一覧 分子科学研究所担当分(2023年3月31日現在)

(1) 協力研究

課題名	支援機器等	代表者
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	E680	東京都立産業技術研究センター 中川 清子
濃厚電解液が形成する電極被膜構造の in-situ 解析	SPM	名古屋工業大学大学院工学研究科 本林 健太
高移動度有機半導体の完全なバンド構造決定	ARUPS	千葉大学大学院工学研究院 吉田 弘幸
超伝導体/磁性体/半導体複合材料の価電子バンド構造解析	ARUPS	神戸大学大学院理学研究科 内野 隆司
石英ガラス上に形成するナノ水滴の粘弾性計測	SPM	金沢大学理工研究域 荒木 優希
ダイヤモンド中における常磁性欠陥の NV センターへのデコヒーレンス効果の研究	E680	物質・材料研究機構機能性材料研究拠点 眞榮 力
多形により機械的柔軟性が異なる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	SPM	岐阜大学教育学部 萩原 宏明
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	SPM	神戸大学大学院理学研究科 大西 洋
光応答性分子の分子シミュレーション解析による蛍光挙動の解明	量子計算	新居浜工業高等専門学校 高見 静香
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
安定発光性ラジカル PyBTM 及び F ₂ PyBTM のパラ置換による新たな光物性開発	金属錯体	龍谷大学先端理工学部 服部 陽平
量子生物物理学のための新しいパルス ESR 実験	E680	埼玉大学大学院理工学研究科 前田 公憲
有機結晶表面に作成した電解質トランジスタと歪印加を併用した新奇物性探索	有機 FET	名古屋大学大学院工学研究科 伊東 裕
反応条件探索装置の活用による高度精密有機合成のデジタル化	有機合成 DX	九州大学大学院薬学研究院 大嶋 孝志
キラル誘起スピン選択性を用いたキラル物質の評価および検出	有機 FET	大阪公立大学大学院工学研究科 戸川 欣彦
コラニユレン骨格を有する錯体の合成と性質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
パルス ESR を用いたスピン間距離測定による輸送膜タンパク質の構造解析	E680	神戸大学大学院理学研究科 木村 哲就
光制御タンパク質ケージの構造解析	SAXS	大阪大学大学院理学研究科 石川 春人
結晶性キラル半導体におけるスピン依存非相反伝導とその電気的制御	有機 FET	静岡大学理学部物理学科 広部 大地
Theoretical Studies on Endohedral Metal-Metal-Bonding Fullerenes Lu ₂ @C _{2n} (2n = 76-84) and Their Two-Dimensional Nanomaterials	量子計算	Xi'an Jiaotong University Tao Yang
固体 NMR によるクマムシ由来タンパク質 SAHS の乾燥状態の構造解析	600NMR 固体	名古屋市立大学大学院薬学研究科 矢木 真穂
タンパク質への酸化修飾がもたらすミスフォールディングと神経変性疾患の発症メカニズム	SAXS	慶應義塾大学理工学部 古川 良明
コハク酸、リンゴ酸の吸着によるカルサイトの溶解促進メカニズムの解明	SPM	金沢大学理工学研究域 荒木 優希
液晶性有機薄膜の液晶転移に伴う表面モルフォロジー変化のその場観察	SPM	東北大学大学院工学研究科 丸山 伸伍
水中での非線形音響現象によるセラミックス合成の観察	SPM	桐蔭横浜大学医工学部 石河 睦生
最先端計算機科学・材料評価手法の融合による加速器科学を革新するタンガステン合金の開発	SPM	高エネルギー加速器研究機構素粒子原子核研究所 牧村 俊助
電子焦電性を示す分子結晶の表面構造と電子特性の解析	SPM	九州大学先端物質化学研究所 金川 慎治
イオン液体の基板に対する濡れ特性: 基板依存性	SPM	千葉大学大学院融合科学研究科 城田 秀明
量子化学計算に基づく金属ナノクラスターの構造-物性相間の解明	量子計算	大阪公立大学大学院理学研究科 武藤 克也
二酸化チタンのナノ構造と電子状態	SPM	九州工業大学大学院工学研究院 河野 翔也
走査プローブ顕微鏡による始原的隕石の物性の解析	SPM	海洋研究開発機構高知コア研究所 伊藤 元雄
結晶スポンジ法による放線菌由来新規有機ヒ素天然物の構造決定	結晶スポンジ	東京大学農学生命科学研究科 星野翔太郎
S = 1/2 第一遷移金属イオンを持つポリオキソメタレートのスピンコヒーレンス現象	E680	日本大学文理学部 石崎 聡晴

(2) 施設利用

課題名	支援機器等	代表者
カーボンナノチューブの生成メカニズムの解明	TEM	名城大学理工学部 丸山 隆浩
新規オリゴマー型有機伝導体の開発と伝導機構の解明	EMX E500	東京大学物性研究所 小野塚 洸太
人工ニッケルキラターゼへの部位特異的変異によるタンパク質立体構造と触媒機能の関連の調査	円二色性	埼玉大学大学院理工学研究科 藤城 貴史
EPR による 2 つの [2Fe-2S] クラスタから [3Fe-4S] クラスタへの構造変換反応の補足	EMX E500 E580	埼玉大学大学院理工学研究科 藤城 貴史

電子スピン共鳴による酵素の構造学的研究	E680 EMX E500 E580	佐賀大学農学部	堀谷 正樹
Sn/Ni 多層膜の電気伝導特性, Cu-ZnO ナノロッドの磁気的性質の解明	MS-7 XL7	岐阜大学工学部	嶋 睦宏
Interaction of Polymers with Lipids	iTC200	北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	Robin Rajan
高周波 ESR による Bilayer 型分子磁性体の磁気特性機構の解明	微小結晶 E680 EMX E500 E580	理化学研究所	大島 勇吾
人工光合成をめざす半導体光触媒の水中共 ESR 測定	EMX E500	神戸大学大学院理学研究科	大西 洋
逆バ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 XL7	静岡大学大学院工学領域	川口 昂彦
複合酸化物触媒, 及び電極触媒の表面構造解析	TEM ESCA	名古屋大学大学院理学研究科	邨次 智
多元系酸フッ化物の磁性 IV	MS-7	京都大学大学院人間・環境学研究科	高見 剛
Zr-Mo クラスタを含む複塩結晶における水素結合ネットワークと磁気的性質	CCD-1 CCD-2 微小結晶 粉末 X 線 オペランド EMX E500 E580 MS-7 XL7 熱解析	金沢大学国際基幹教育院	三橋 了爾
ナノ磁性微粒子, 及び磁性体ナノ周期構造を利用した新規磁気光学材料の開発	MS-7 XL7	静岡大学工学部	中嶋 聖介
遷移金属で置換したゼオライト粒子の磁気特性の解明	MS-7 XL7 ESCA EMX E500	熊本大学大学院先端科学研究部	松田 元秀
常磁性異種金属一次元鎖錯体と二次元状混合原子価集積体の合成と磁気物性	CCD-1 CCD-2 微小結晶 E500 MS-7 XL7	岐阜大学工学部	植村 一広
超伝導/強磁性/半導体ナノ複合材料の超伝導近接効果	MS-7 XL7 ラマン	神戸大学大学院理学研究科	内野 隆司
常温常圧で機能する高活性窒素固定触媒の開発	MS-7 XL7 600NMR 溶液 CCD-1 CCD-2 微小結晶	愛知工業大学工学部	梶田 裕二
多周波 EPR 法による光合成タンパク質の構造及び機能の解析	E680 EMX E500 E580 MS-7 XL7	名古屋大学大学院理学研究科	三野 広幸
コラーゲンの構造物性と抗体との分子間相互作用解析	PEAQ-ITC 円二色性	京都府立大学大学院生命環境科学研究科	織田 昌幸
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	大阪公立大学理学部	松岡 秀人
スピン依存的な光化学特性を示す開殻電子系の創製	E500 熱解析	京都大学大学院工学研究科	清水 大貴
β シート性ペプチド錯体の熱力学特性の評価	熱解析	東京大学大学院工学系研究科	恒川 英介

無脊椎動物の生殖腺刺激ホルモンペプチドの探索と解析 半導体量子ドット三次元超格子の構築と構造・電子状態解析	MALDI オペランド 蛍光分光 紫外可視近 赤外	基礎生物学研究所 名古屋工業大学大学院工学研究科	大野 薫 濱中 泰
自己組織化によるカーボンナノチューブの自在配列手法の構築	低 SEM ラマン	早稲田大学理工学術院	安倍 悠朔
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 VP-DSC	広島大学先進理工系科学研究科	岡 芳美
新規配位高分子錯体の合成と磁気的性質に関する研究	CCD-1 粉末 X線 MS-7 XL7 FT	東京海洋大学海洋電子機械工学 部門	藤田 渉
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 3 ペイポクロミズム及びエレクトロクロミズム特性を示すパドルホイール型ロジウム二核錯体の開発	TEM CCD-1 CCD-2 微小結晶 MS-7 XL7 熱解析 ESCA ラマン	関西学院大学生命環境学部 島根大学総合理工学部	増尾 貞弘 矢野なつみ
ポリオキソメタレートの前酸化還元反応メカニズムの定量的解析	EMX 600NMR 溶液 ラマン	高知大学教育研究部 大阪大学大学院理学研究科	上田 忠治 坏 広樹
β'' -(BEDT-TTF) ₂ XC ₂ H ₄ SO ₃ (X = Cl, Br) における Raman 分光による BEDT-TTF の価数決定 金属酵素モデル錯体の電子構造の研究	CCD-1 CCD-2 微小結晶 EMX E500 E580 MS-7 XL7 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
スピン転移とサーモサリエン特性が連動する錯体分子結晶のアルキル置換基効果の解明	微小結晶 オペランド MS-7 XL7 熱解析	岐阜大学教育学部	萩原 宏明
ポリオキソメタレートを骨格として持つ金属錯体の磁気物性	MS-7 XL7 熱解析 ラマン	日本大学文理学部 京都工芸繊維大学電気電子工学系	石崎 聡晴 今田 早紀
多段階電子遷移による高効率光電変換実現に向けた AlN バンドギャップ中電子状態の解明 金属錯体の時間分解 ESR による光励起構造の解明	E680 EMX E500 E580 紫外可視近 赤外	群馬大学大学院理工学府	浅野 素子
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素過程の調査	TEM 粉末 X線 ラマン 紫外可視近 赤外 量子収率	関西学院大学理工学部	江口 大地
光のエネルギーを蓄えることができる物質の光励起状態と緩和過程の電子スピン共鳴 種々の KI 結晶中に生成した AgI ナノ結晶の電子顕微鏡観察	EMX E500 TEM 蛍光分光	愛媛大学大学院理工学研究科 大阪公立大学大学院理学研究科	内藤 俊雄 河相 武利

触媒機能をもつ遷移金属錯体の遠赤外スペクトルによる金属ハロゲン結合の分析 ナノサイズ発光バイオマーカーの新規開発と細胞標識への展開	FT 600NMR 溶液 SEM 低 SEM TEM	岡山大学大学院自然科学研究科 名城大学理工学部	押木 俊之 西山 桂
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
ドーブ型 PEDOT の単結晶オリゴマーモデルの磁性における共役系拡張効果	CCD-2 微小結晶 EMX E500	東京大学物性研究所	藤野 智子
バレー自由度をもつ光注入キャリアの磁場下マイクロ波共鳴によるダイナミクス研究 鉄含有ペロブスカイト型酸化物の酸素放出挙動と結晶構造変化の相関解明 キラル磁性体の磁気物性	E680 オペランド E500 MS-7 XL7	和歌山大学システム工学部 高知大学教育研究部 広島大学大学院先進理工系科学研究科	秋元 郁子 藤代 史 井上 克也
新奇レーザーセラミックスの作製プロセスに関する学術基盤構築 (II)	粉末 X 線 オペランド 熱解析	理化学研究所	平等 拓範
三重項状態アントラキノン誘導体の磁気パラメーターの決定	E680 EMX E500	埼玉大学大学院理工学研究科	長嶋 宏樹
金属ドーブ型 BiFeO ₃ ナノ粒子の磁性に関する研究 キラルな大環状分子のゲスト包接と光学特性との相関解明	MS-7 XL7 iTIC200 量子収率 円二色性	山形大学大学院理工学研究科 福井大学学術研究院工学系部門	有馬ボシール アハンマド 内藤 順也
E580 イメージングユニットを利用した低温プラズマ-マテリアルインフォマティクス 液相合成法を用いたダイヤモンド様炭素膜の作製 二酸化炭素還元を指向した金属錯体の合成と構造解析	E580 ラマン CCD-1 CCD-2 微小結晶	名古屋大学低温プラズマ科学研究センター 大同大学電気電子工学科 名城大学理工学部	石川 健治 橋本 雄一 永田 央
生体に含まれる脂質分析のための脂肪酸 NMR 情報の収集 炭化水素中でのレーザー照射による金属表面への硬質炭化物被膜形成	600NMR 溶液 ESCA ラマン 蛍光分光	生理学研究所 名古屋工業大学大学院工学研究科	福永 雅喜 小野 晋吾
マグネシウムフェライド薄膜およびその置換系の強磁性に関する研究	E500 MS-7 XL7	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
エネルギー変換への応用のためのナノマテリアル薄膜の構造および物性評価	微小結晶 粉末 X 線 オペランド EMX E500 E580 MS-7 XL7 VP-DSC 熱解析 MALDI ラマン 蛍光分光 紫外可視近 赤外 量子収率 円二色性 ピコ秒	法政大学生命科学部	緒方 啓典
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	微小結晶 XL7 MALDI	愛媛大学大学院理工学研究科	白旗 崇
キラリティーを有する分子性導体の物性研究	MS-7 XL7 微小結晶 MALDI	愛媛大学大学院理工学研究科	藤崎 真広

ドナー・アクセプター型光誘起複合機能物質群のメカニズム解明	微小結晶 E680 EMX E500 E580 MS-7 XL7	新潟大学研究推進機構	古川 貢
金および Si ナノ粒子集合体の光学特性の解明	SEM 量子収率	早稲田大学理工学術院	井村 考平
ポルフィリンを主骨格とする DA タイプ COF の光誘起時間分解 ESR 研究	E680 E500	シンガポール大学	JIANG, Donglin
ESR を用いた新規 Ag クラスターの組成並びに電子状態研究	E680	東京理科大学理学部	根岸 雄一
有機伝導体 $\beta^{\prime\prime}$ -(BEDT-TTF) ₂ Hg(SCN) ₂ Cl の低温電荷秩序状態の構造の解明	微小結晶	北海道大学大学院理学研究院	河本 充司
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氣的性質の解明 -III	MS-7 XL7	熊本大学大学院先端科学研究部	上田 顕
超酸化物不均化反応活性を有する金属-有機構造体触媒の電子状態評価	ESCA	京都大学大学院理学研究科	小坂谷 貴典
糖鎖脂質含有二重膜表面で誘起されるアミドイド β 会合状態の固体 NMR を用いた構造解析	600NMR 溶液	名古屋市立大学大学院薬学研究科	矢木 真穂
アドバンスド ESR 法による植物性食品による環境計測	E680 EMX E500 E580	新潟大学研究推進機構	古川 貢
強い水素結合相互作用をもつ新規分子性伝導体の合成と物性研究	MS-7 XL7	日本大学文理学部	周 彪
有機色素の光学特性に関する研究	量子収率 ピコ秒 蛍光分光	神戸大学大学院工学研究科	堀家 匠平
バリウム黒鉛層間化合物の磁化率	オペラント MS-7 XL7	大阪工業大学工学部	平郡 諭
ハイブリッド光触媒における Ag 担持効果の解明	EMX E500	東京工業大学理学院	榊原 教貴
金属相と超伝導相の境界に位置する $\beta^{\prime\prime}$ -型 BEDT-TTF 塩の格子揺らぎの探索	ラマン	愛媛大学大学院理工学研究科	山本 貴
超薄層半導体光触媒の透過電子顕微鏡による計測評価	TEM	神戸大学大学院理学研究科	大西 洋
新規 N3S3 型 Fe(III) 錯体によるメタノール酸化反応の中間体および活性種の解明	E500 XL7	名古屋工業大学大学院工学研究科	小澤 智宏
イオン液体のコンフォメーションと非対称性アニオン効果	ラマン	防衛大学校機能材料工学科	阿部 洋
電子供与基を有するチオールを配位させた非平面ポルフィリン鉄(III)錯体の磁氣的性質	E500 E580 MS-7 XL7	島根大学大学院総合理工学研究科	池上 崇久
ヘム-カルコゲナート錯体の物性・化学研究	EMX XL7	名古屋市立大学大学院薬学研究科	樋口 恒彦
6-chloro-2,4-dinitroaniline 会合体の特異な発光過程の研究	ピコ秒	愛知教育大学教育学部	日野 和之
逆分子ふるい効果に連動した発光特性変化を示す金属錯体格子の励起状態ダイナミクス	E680 EMX E500	東北大学金属材料研究所	宮坂 等
金属酸化物のナノレベル構造解析	SEM 低 SEM	信州大学繊維学部	浅尾 直樹
放射線照射されたアラニン中のラジカル数の定量	MS-7	産業技術総合研究所	山口 英俊
ポリ N- イソプロピルアクリルアミドのダイマー水溶液の温度誘起型相分離現象の解明	VP-DSC	新居浜工業高等専門学校	橋本 千尋
強磁性/反強磁性分子間相互作用をもつ Galvinoxyl Radical の低温相の構造決定	微小結晶	名古屋大学大学院理学研究科	水津 理恵
Ca 結合型光合成タンパク質における耐熱化メカニズムの解明	VP-DSC PEAQ-ITC iTC200	神戸大学大学院農学研究科	木村 行宏
シグナル伝達に伴うベシクル型人工細胞組織の集団挙動発現	PEAQ-ITC iTC200	慶應義塾大学大学院理工学研究科	小島 知也
巨大中空錯体に内包されたタンパク質の構造解析	MALDI 円二色性	東京大学大学院工学系研究科	中間 貴寛
有機-無機界面磁気結合を利用した原子層物質の磁気状態制御	XMCD (BL4B)	名古屋大学未来材料・システム 研究所	宮町 俊生

XMCDを用いたβ-Mn型カイラル磁性体Fe _{2-x} Pd _x Mo ₃ NおよびCo _{2-x} Pd _x Mo ₃ Nエピタキシャル薄膜における磁気状態の研究 磁性ヘテロ薄膜構造の磁化方向制御に関する研究	XMCD (BL4B)	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤 孝寛
フラーレン誘導体LB薄膜の表面観察と光電気化学測定 分裂酵母ライブイメージングとデバイス内部からの選択的回収	XMCD (BL4B) 3次元 マスクレス 3次元 電子ビーム	名古屋大学未来材料・システム研究所 愛知教育大学教育学部 生命創成探究センター	宮町 俊生 日野 和之 杉山 博紀
界面選択的な振動分光を実現するナノ構造電極基板の開発 マイクロ流体デバイスを用いた植物の成長解析 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 キラリティ検出デバイスの作製	電子ビーム マスクレス マスクレス 3次元 マスクレス 電子ビーム	名古屋工業大学大学院工学研究科 基礎生物学研究所 豊田工業高等専門学校 大阪公立大学大学院工学研究科	本林 健太 四方 明格 神永 真帆 戸川 欣彦
FI-02 製イマージョン回折格子の形状・表面粗さ測定 α反跳トラックの密度測定による白雲母の年代推定	3次元 3次元	帝京大学医療共通教育研究センター 海洋研究開発機構数理科学・先端技術研究開発センター	藤代 尚文 廣瀬 重信
昆虫の発音器官の構造評価	マスクレス 3次元電子 ビーム	基礎生物学研究所	中村 太郎

(3) 所内利用

課 題 名	支援機器等	代 表 者
開殻分子性物質の創製と機能創出	低 SEM CCD-1 CCD-2 微小結晶 粉末X線 ESCA E680 EMX E500 E580 MS-7 XL7 熱解析 MALDI-TOF ラマン FT 蛍光分光 紫外可視近 赤外 量子収率 円二色性	生命・錯体分子科学研究領域 草本 哲郎
X線溶液散乱法およびX線単結晶回折法による生体分子の構造解析 周期的3次元有機構造体の創製	SAXS SEM 低 SEM TEM CCD-1 CCD-2 微小結晶 粉末X線 オペランド ESCA E680 EMX E500 E580 MS-7 XL7 VP-DSC PEAQ-ITC iTC200 熱解析 MALDI ラマン FT 蛍光分光 紫外可視近	協奏分子システム研究センター 秋山 修志 生命・錯体分子科学研究領域 瀬川 泰知

分子性伝導体の電子物性研究	赤外 量子収率 円二色性 ピコ秒 600NMR 溶液 E680 EMX E500 E580 MS-7 XL7	機器センター	中村 敏和
蛍光材料等の分光実験	低 SEM TEM 蛍光分光 紫外可視近 赤外 量子収率 ピコ秒	機器センター	上田 正
分子と対称性を用いた新奇機能性の創出	SEM 低 SEM TEM CCD-1 CCD-2 微小結晶 粉末 X 線 オペランド ESCA E680 EMX E500 E580 MS-7 XL7 VP-DSC PEAQ-ITC iTC200 熱解析 MALDI ラマン FT 蛍光分光 紫外可視近 赤外 量子収率 円二色性 ピコ秒 600NMR 溶液	協奏分子システム研究センター	佐藤 拓朗
金属センサータンパク質の NMR 構造研究	600NMR 溶液 円二色性	生命創成探究センター	村木 則文
有機分子変換を駆動・制御する新しい反応システムの構築	TEM MALDI	生命・錯体分子科学研究領域	奥村慎太郎
電極と電解質の表面や界面で起きる現象の解析	走査プローブ 顕微鏡	機器センター	湊 丈俊
有機材料のケルビンプローブ顕微鏡観察	走査プローブ 顕微鏡	物質分子科学研究領域	平本 昌宏
生命分子システムの動的秩序形成と高次機能発現の仕組みの探究	VP-DSC PEAQ-ITC iTC200 MALDI 円二色性 600NMR 溶液	生命創成探究センター	加藤 晃一
新規有機分子の合成と構造決定	600NMR 溶液 MALDI-TOF	生命・錯体分子科学研究領域	榎山 儀恵
超分子化学のツールを用いたタンパク質の構造・機能に関する研究	微小結晶 VP-DSC PEAQ-ITC iTC200 熱解析 MALDI-TOF 蛍光分光 円二色性 600NMR 溶液	特別研究部門	三橋 隆章

有機材料局所伝導度測定	走査プローブ 顕微鏡	協奏分子システム研究センター	佐藤 拓朗
ヒドリドの物質研究	SEM 低 SEM TEM 粉末 X 線 オペランド ESCA E680 EMX E500 E580 MS-7 XL7 VP-DSC PEAQ-ITC iTC200 熱解析	物質分子科学研究領域	竹入 史隆
新規高分子の表面解析	SEM 低 SEM	生命・錯体分子科学研究領域	榎山 儀恵
非常に鋭利な先端形状をもつ STM 用金属探針の開発	SEM 低 SEM TEM ラマン FT 蛍光分光 紫外可視近 赤外 量子収率 円二色性	物質分子科学研究領域	櫻井 敦教
EB 描画による Cr パターンの組成分析 天然および人工高分子分解酵素の機能解析	低 SEM VP-DSC PEAQ-ITC iTC200 MALDI-TOF	装置開発室 特別研究部門	木村 幸代 中村 彰彦
分子と対称性に基づいた新奇機能性デバイス作成	マスクレス 電子ビーム 3 次元	協奏分子システム研究センター	佐藤 拓朗
エネルギー材料の物性解析	SEM 低 SEM TEM CCD-1 CCD-2 微小結晶 粉末 X 線 オペランド ESCA E680 EMX E500 E580 MS-7 XL7 VP-DSC PEAQ-ITC iTC200 熱解析 MALDI ラマン FT 蛍光分光 紫外可視近 赤外 量子収率 円二色性 ピコ秒 600NMR 溶液	機器センター	湊 丈俊
一タンパク質赤外振動分光のための AFM 試料観察	走査プローブ 顕微鏡	メゾスコピック計測研究センター	西田 純
Fabrication of Plasmonic Chiral Nanostructure	SEM 低 SEM ラマン	メゾスコピック計測研究センター	Hyo-Yong Ahn

合成した光触媒の粒子の分析 AFM 液中電気化学電極評価	低 SEM 低 SEM ラマン	物質分子科学研究領域 機器センター	斎藤 晃 中本 圭一
遷移金属酸水素化物 BaTiO _{3-x} H _x の特性解析	低 SEM オペランド	物質分子科学研究領域	内村 祐
X線反射率による多層膜構造評価	オペランド	物質分子科学研究領域	山本 航平
蛍石型構造を持つ水素化物の結晶相特定	オペランド	物質分子科学研究領域	泉 善貴
溶液光化学反応の励起ダイナミクス研究	蛍光分光 紫外可視近 赤外	光分子科学研究領域	長坂 将成
スパッタリング法で得られた薄膜の膜厚測定 結晶の表面粗さ評価	マスクレス 3次元	物質分子科学研究領域 社会連携研究部門	内村 祐 小林 純
UVSOR 代行実験のためのグローブボックス利用	機器センター 長協力研究	極端紫外光研究施設	田中 清尚
電極表面の微細反応メカニズムを解明するための表面観察	走査プローブ 顕微鏡	物質分子科学研究領域	櫻井 敦教
Comparison of Surface Roughness Profile	走査プローブ 顕微鏡	社会連携研究部門	Arvydas Kausas
有機分子薄膜の表面構造研究	走査プローブ 顕微鏡	光分子科学研究領域	福谷 圭祐
ビームスポットの深さ測定	3次元	社会連携研究部門	小林 純
金属センサータンパク質の機能解明	PEAQ-ITC iTC200 蛍光分光 円二色性	生命創成探究センター	南 多娟
有機合成反応のデジタル化に向けたデータ収集	有機合成 DX	生命・錯体分子科学研究領域	大塚 尚哉
固体 NMR による 2次元および 3次元共有結合構造体の構造解析	600NMR 固体	生命・錯体分子科学研究領域	瀬川 泰知

(4) 非公開利用

マテリアル先端リサーチインフラ事業では、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。2022年度は 600MHz 溶液 1件、低 SEM 1件、ラマン 1件が採択された。業種別内訳は大企業 2件、その他 1件であった。

表 3 2022年度（令和4年度）利用件数一覧（2022年4月～2023年3月）

	協力研究	施設利用	所内利用	非公開利用
採択件数	33	101	40	3
実施件数	31	96	39	3
実施日数	793	1615	1276	12

マテリアル先端リサーチインフラ事業では、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。

5-6 分子科学国際共同研究拠点の形成

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

そこで、2012年度に国際共同の在り方を大きく見直し、2013年から外国人研究者に関わる諸手続や渉外事務を担当する専門員（現在はURA）を雇用し、国際的に分子科学研究所の存在感を示せるようなシステム作りを始めている。現在、以下のような財源を利用して国際共同を活性化しているが、それぞれの財源の制約に合わせた国際共同研究事業を個々に行うのではなく、分子科学研究所として自由度の高い国際共同研究体制をアジアと欧米を区別することなくグローバルに構築しながら各種財源を混合して実施するように工夫している。なお、ここでは3章に記述のある岡崎コンファレンス、ミニ国際シンポジウム、アジア連携分子研研究会、総研大アジア冬の学校、外国人客員教授については触れない（以下の国際共同研究事業の財源を一部使っているものもある）。

5-6-1 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、各機関が第4期中期計画の達成を見据え、競争力の高い海外の研究機関等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。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B】各分野の将来を担う国際的な若手研究者の育成

海外の研究機関等との間で、若手研究者（ポストドク・大学院生を含む）を受入れ・派遣することにより、中長期的に持続性のある国際交流関係を構築・強化するための戦略的取り組み。

分子科学研究所として「東南アジア地域の分子科学分野の将来を担う国際的な若手研究者の育成（2022）」が採択。

アジアを相手とする IMS-IIPA（Institute for Molecular Science International Internship Program in Asia）事業や共同研究を支援。

(2) 自然科学研究機構「ネットワーク型研究加速事業」

自然科学分野において、国内外の大学や研究機関との幅広い連携による共同研究を推進し、異分野連携による新たな学問分野の開拓や、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（5-7参照）。

【分野融合ネットワーク型研究加速】

異分野の研究領域を持つ機関が連携・ネットワーク化を図ることにより、新たな学問分野を開拓する国際的にも評価される研究拠点形成を目指すもの

分子科学研究所として「対称性の破れに基づく分子科学の深化（2022）」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。

(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】

2022年度は、アジアを相手とする IMS-IIPA 事業の支援として、タイ、インド、マレーシアからインターンシップ生4名を招へい。また、マレーシアのマラヤ大学からの総研大アジア冬の学校参加者2名の支援を行った。

(4) 分子科学研究所経常経費

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

5-6-2 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2名にとどまっていたが、2022年度は、新型コロナウイルスによる入国制限が緩和したため26名の受入れが可能となった。

5-6-3 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。

5-6-4 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、インド、タイ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なっている。

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実施者は105名、2022年度は73名であった。2022年度は、新型コロナウイルスの規制が緩和されたため短期外国人招へいプログラムによる国際共同研究実績は12件であった。

5-7 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「対称性の破れに基づく分子科学の深化」という事業を申請し、採択された。その内容の概略は、以下の通りである。

様々な物質相と階層において、対称性の破れを共通の原理とした理解を促進し、マイクロとマクロの間で起きる分子機能を解明する、新しい分子計測法と理論解析手法を開拓する。そのような研究によって、分子とそのシステムが関わる広い領域の自然現象を対象とした国際的な連携研究のネットワークを形成する。新しい発想の計測を中心とした実験手法と、そこから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一体的に開発し、物質科学、生命科学の広い階層の挙動解明に新たな視点を提供する。また、分子科学関連分野の国内外研究機関と共同研究を進め、生命科学分野の研究機関とも連携して、観察・解析手法の開発・展開にフィードバックし、それらの特徴を生かした新たな異分野融合研究領域を開拓する。

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、本事業に関わる研究会やセミナーを13件開催した。また海外諸機関との共同研究、インターンシップ受入れを継続して行っている。

5-8 研究大学強化促進事業（文部科学省）

「研究大学強化促進事業」は文部科学省の2013年度から10年間の事業であり、(A)研究戦略や知財管理等を担う研究マネジメント人材群（所謂、URA：University Research Administrator）の確保・活用と(B)集中的な研究環境改革による大学等の教育研究機関の研究力強化のための支援事業である。2022年度はその最終年度にあたる。

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

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

2022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

2022年5月9日-11日（ハイブリッドで実施）

北川 進（京都大学物質-細胞統合システム拠点拠点長、特別教授）

James M. Lisy（Research Professor, University of Illinois Urbana-Champaign）

- ・国際インターンシップ生の受入れを継続して行った。
- ・ソーシャルネットワークサービスでの発信、一般向け講演会のオンライン開催、ホームページにおける英文の強化を重点的に行った。
- ・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、2022年度はCOVID-19感染拡大の影響で実施実績はなかった。

5-9 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。

2022 年度には、完成した DX プラットフォームを活用し、前年の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った。

5-10 分子科学研究所所長招聘会議

分子科学研究所 所長招聘会議は、我が国の学術の姿、研究力強化、大学及び共同研究機関の変容と変革、大学院教育戦略・国際化、科学政策・評価などについて産官学の意見・考えを基に多角的統括的に討議することを目的に、2001年からほぼ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、2022年度は、「日本の人材育成を考える」というタイトルで、2020年度、2021年度に引き続き、我が国における博士人材の状況と果たす役割について議論を行った。日本の科学技術の低下を防ぐためにも優秀な博士人材の確保は喫緊の課題であるが、経済的な支援を含む様々な施策がなされてきたにも関わらず、博士課程の進学率は上がっていない。博士人材の層を厚くするためには何が必要なのか。今回は4名の講師を招き、博士課程学生支援を総括するとともに、欧米との博士人材育成の違い、社会に貢献できる博士人材の育成、日本特有の就職システムなど、どこに問題があるのかを議論した。

なお、2022年度は、COVID-19感染状況に鑑み、オンラインと現地開催のハイブリッド形式で開催し、約140名の参加者があった。

開催テーマ：「日本の人材育成を考える」

開催日時：2022年6月7日（火） 13:00～17:00

プログラム：

開会挨拶 渡辺芳人（分子科学研究所 所長）

趣旨説明 茶谷直人（大阪大学 名誉教授）

講演

「過去20年の博士支援の総括」

松尾泰樹（内閣府科学技術・イノベーション推進事務局長）

「私が体感した日本と欧州の博士人材育成の違い」

豊田良順（東北大学 助教）

「VUCAの時代の企業における博士人財の役割と期待」

高柳大（味の素株式会社）

「日本の悪しき就職活動を変えなければ博士人材育成の改革はできない」

菅裕明（東京大学 教授、日本化学会会長）」

総合討論

司会：玉田薫（九州大学 教授）

討論参加者：上記講演者及び関根千津（株式会社住化技術情報センター代表取締役社長）

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している。このように、分子機能の開発、そして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している。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進める研究者や、各研究領域の研究を発展的に展開する研究者のクロスアポイントメントによる招へいを開始した。「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38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
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
2021.10. ～ 2022.9.	2022	193	39

6-2 メゾスコピック計測研究センター

メゾスコピック計測研究センター（以後「本センター」）は、旧分子制御レーザー開発研究センター（1997年4月設立）からの改組により、2017年4月に設立された。分子科学研究所の研究対象は、広い意味での分子物質であることは設立当初から変わらないが、当初は一つ一つの分子の挙動に重点をおいて注目されていたのが、最近では様々な分子やナノ構造体などがシステムを作って発現する機能・特性の解明と制御、及び新しい機能を持つシステムの構築に重点がシフトしてきている。それによって、分子の物質・エネルギー・情報変換能力を精緻に引き出すことが初めて可能になると考えられる。そのような新しい研究の方向性に対応する一つの方策として、分子科学研究所では2013年4月に協奏分子システム研究センターが設立されたところである。

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

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

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

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

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

専任研究グループに所属する助教等のスタッフも本センターの各研究部門に所属する。また、旧分子制御レーザー開発研究センターに所属した技術職員も、引き続き本センターに所属させる。今後分子科学研究所に採用される教授・准教授も、状況に応じて上記のいずれかの部門の専任または併任ポストを占めることが想定されている。それぞれの部門の任務は、(1) 蓄積のある光観測・制御法を先鋭化し、更に量子系の構造変形を操作することによって、新しい量子相を作り出して制御し、量子情報処理など新規な分子の能力を引き出す；(2) 時空間を分解した計測法，増強光場を利用した超高感度・並列計測等による低摂動で繊細な分子計測法等を開発し，分子のありのままの姿を非破壊的に観測する；(3) 多変数スペクトロスコピー・多次元解析手法，高分解能広帯域計測法とその解析法を開発して分子の能力とそれを司る物理過程を明らかにし，従来とは質の異なる情報を獲得する革新的手法を開拓する；等を目指している。なお，信定准教授は2018年1月に残念ながら逝去された。平等准教授は2018年10月に理化学研究所（放射光科学研究センター）に，また藤准教授は2019年

4月に豊田工業大学に、それぞれ転出した。これらの研究領域の扱いについては今後の検討となる。一方、2018年5月には杉本敏樹准教授（物質量子計測研究部門）が物質分子科学研究領域からの、また2019年11月には江原正博教授（繊細計測研究部門）と南谷英美准教授（物質量子計測研究部門）が理論・計算分子科学研究領域からの併任として就任した。南谷准教授は2022年9月に大阪大学に転出した。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。

織細計測研究部門

岡本 裕 巳 (教授) (2000年11月1日着任)

吉澤 大智 (助教)
山西 絢介 (特任助教 (分子科学研究所特別研究員))
AHN, Hyo-Yong (特任助教 (新分野創成センター))
CHAKRABORTY, Ipsita (特任研究員)
成島 哲也 (特別訪問研究員)
石川 晶子 (技術支援員)
野村 恵美子 (事務支援員)
伊藤 敦子 (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。この他に主として所外の研究者と共同で、様々なキラルナノ物質の観察・同定に用いる研究を推進し、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も、医科学分野の研究者と共同で開始している。更に感度や測定速度を向上させる試み、波長範囲を拡張する試み等を推進している。
- b) レーザー光を強く集光すると、その焦点に微粒子がトラップされる (光トラッピング)。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、理論的に解釈した。これにより、キラル物質の光マニピュレーションの基礎となる知見を得た。

B-1) 学術論文

J. YAMANISHI, H.-Y. AHN, H. YAMANE, S. HASHIYADA, H. ISHIHARA, K. T. NAM and H. OKAMOTO, “Optical Gradient Force on Chiral Particles,” *Sci. Adv.* **8(38)**, eabq2604 (2022). DOI: 10.1126/sciadv.abq2604

R. NAKAJIMA, D. HIROBE, G. KAWAGUCHI, Y. NABEL, T. SATO, T. NARUSHIMA, H. OKAMOTO and H. M. YAMAMOTO, “Giant Spin Polarization and a Pair of Antiparallel Spins in a Chiral Superconductor,” *Nature* **613(7944)**, 479–484 (2023). DOI: 10.1038/s41586-022-05589-x

B-3) 総説, 著書

H. OKAMOTO, “Optical Manipulation with Nanoscale Chiral Fields and Related Photochemical Phenomena,” *J. Photochem. Photobiol., C* **52**, 100531 (2022). DOI: 10.1016/j.jphotochemrev.2022.100531

岡本裕巳, 「光と物質の量子相互作用ハンドブック」, 荒川泰彦, 島野 亮, 金光義彦, 岩本 敏, 高原淳一, 立間 徹, 編, エヌ・ティー・エス (2023).

O. ÁVALOS-OVANDO, E. Y. SANTIAGO, A. MOVSESYAN, X.-T. KONG, P. YU, L. V. BESTEIRO, L. K. KHORASHAD, H. OKAMOTO, J. M. SLOCIK, M. A. CORREA-DUARTE, M. COMESAÑA-HERMO, T. LIEDL, Z. WANG, G. MARKOVICH, S. BURGER and A. O. GOVOROV, “Chiral Bioinspired Plasmonics: A Paradigm Shift for Optical Activity and Photochemistry,” *ACS Photonics* **9(7)**, 2219–2236 (2022). DOI: 10.1021/acsp Photonics.2c00445

B-4) 招待講演

岡本裕巳, 「光学遷移の選択律を破るナノ分光」, 森野ディスカッション, 岡崎 (オンライン開催), 2022年8月.

岡本裕巳, 「キラル光学効果による顕微イメージング」, 早稲田大学理工学術院大学院講演会, 東京, 2022年10月.

岡本裕巳, 「キラル光学効果によるイメージングとその展開」, カイラル物質科学の新展開, 柏, 2022年12月.

岡本裕巳, 「「ねじれた光」で見る鏡写しの世界」, 愛知県と自然科学研究機構岡崎3研究所との連携協定締結式 基礎科学講演会, 名古屋, 2022年12月.

H. OKAMOTO, “Imaging with Local Chiro-Optical Effects,” The 13th Asia-Pacific Conference on Near-Field Optics, Sapporo (Hybrid), July 2022.

H. OKAMOTO, “Chiro-Optical Microscopic Imaging of Nano- and Micro-Sized Materials and Analyses of Chiro-Optical Functions,” 12th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META2022), Torremolinos (Spain) (Hybrid), July 2022.

H. OKAMOTO, “Optical force arising from chiro-optical light-matter interaction,” Structured Light for Life, Adelaide (Australia), February 2023.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

プラズモニク化学研究会副会長 (2020–).

学会の組織委員等

The 10th Optical Manipulation and Structured Materials Conference (OMC2023), Program committee member (2023).

The 31st International Conference on Photochemistry (ICP2023), National scientific committee member (2022–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術会議会員 (2020–2023), 同化学委員会幹事 (2020–2023), 同化学委員会物理化学・生物物理化学分科会委員長 (2020–2023), 同化学委員会分析化学分科会世話人 (2020–2023).

B-8) 大学等での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 集中講義「構造光科学」, 2022年6月–7月.

早稲田大学理工学術院, 集中講義「先端ナノ光物理化学特論」, 2022年4月–2023年3月.

早稲田大学理工学術院, 客員教授, 2022年4月–2023年3月.

B-10) 競争的資金

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年度–2024年度).

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年度–2022年度).

科研費学術変革領域研究(A), 「超螺旋光とナノレベル物質のキラルな動的相互作用」, 岡本裕巳 (2022年度–2026年度).

科研費基盤研究(B), 「シングル nm スケールでの物質の円偏光応答の解明」, 山西絢介 (2022年度–2025年度).

科研費学術変革領域研究(A), 「偏光近接場による星間塵ナノ微粒子のキラル分子科学」, 成島哲也 (2021年度–2022年度).

科研費学術変革領域研究(A) (総括班), 「光の螺旋性が拓くキラル物質科学の変革」(代表: 尾松 孝茂), 岡本裕巳 (研究分担者) (2022年度–2026年度).

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) (2020年度–2022年度).

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(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。円二色性顕微鏡を更に汎用性の高い装置とする開発を継続し, 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を持たれ、ナノ光学の観点からこの方向への研究展開について実際の共同研究も行っている。更に、円二色性イメージングの医療応用に関する共同研究も開始している。微粒子の光による力学的マニピュレーションについても、キラル微粒子の光トラッピングに関する新たな成果が得られ、その展開も進めたい。これらを総合した新たな方向への展開として、キラルな光-物質相互作用による、物質キラリティの創出の試みを進める科研費学術変革領域研究(A)が今般採択され、これに貢献していきたい。

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)

LIU, Shuyi (学振外国人特別研究員)

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：探針増強分光によるナノ物理化学の研究

- 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・多変量ナノ顕微分光の開発

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・多変量ナノ顕微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, M. WOLF and T. KUMAGAI, “Nanoscale Heating of an Ultrathin Oxide Film Studied by Tip-Enhanced Raman Spectroscopy,” *Phys. Rev. Lett.* **128(20)**, 206803 (2022). DOI: 10.1103/physrevlett.128.206803

T. KUMAGAI, “Sub-Molecular Diagnostics of Coherent Energy Transfer,” *Nat. Nanotechnol.* **17(7)**, 674–675 (2022). DOI: 10.1038/s41565-022-01171-8

B. CIRERA, M. WOLF and T. KUMAGAI, “Joule Heating in Single-Molecule Point Contacts Studied by Tip-Enhanced Raman Spectroscopy,” *ACS Nano* **16(10)**, 16443 (2022). DOI: 10.1021/acsnano.2c05642

S. LIU, A. HAMMUD, I. HAMADA, M. WOLF, M. MÜLLER and T. KUMAGAI, “Nanoscale Coherent Phonon Spectroscopy,” *Sci. Adv.* **8 (42)**, eabq5682 (2022). DOI: 10.1126/sciadv.abq5682

N. M. SABANÉS, F. KRECINIC, T. KUMAGAI, F. SCHULZ, M. WOLF and M. MÜLLER, “Femtosecond Thermal and Nonthermal Hot Electron Tunneling Inside a Photoexcited Tunnel Junction,” *ACS Nano* **16(9)**, 14479–14489 (2022). DOI: 10.1021/acsnano.2c04846

X. XING, J. LI, J. P. BREEN, J. NISHIDA, H. I. KARUNADASA and M. D. FAYER, “Probing Lattice Dynamics in Two-Dimensional Inorganic Pseudohalide Perovskites with Ultrafast Infrared Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. C* **126(24)**, 10145–10158 (2022). DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c03516

B-4) 招待講演

熊谷 崇, 「Atomic-Scale Optical Spectroscopy at Surfaces」, NanospecFY2022mini, オンライン開催, 2023年3月.

熊谷 崇, 「原子スケールの極微分光」, 物性研短期研究会「機能的走査プローブ顕微鏡の新展開」, オンライン開催, 2023年3月.

T. KUMAGAI, “Atomic-Scale Optical Spectroscopy at Surfaces,” 14th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices '22, Nago, October 2022.

T. KUMAGAI, “Atomic-Scale Optical Spectroscopy at Surfaces,” The DPG Spring Meeting of the Condensed Matter Section, Regensburg (Germany), September 2022.

T. KUMAGAI, “Atomic-Scale Optical Spectroscopy at Surfaces,” JSAP-Optica-SPP Joint Symposia, Sendai (Hybrid), September 2022.

B-7) 学会および社会的活動

その他

分子科学若手の会夏の学校講師 (2022). (西田 純)

B-8) 大学等での講義, 客員

北海道大学, 客員准教授, 2020年4月–.

京都大学大学院理学研究科, 客員准教授, 2022年4月–2023年3月.

京都大学大学院理学研究科, 非常勤講師, 2022年4月–2023年3月.

東京工業大学, 非常勤講師, 「化学コース化学特別講義第五」, 2022年9月–2023年3月.

北海道大学触媒科学研究所, 招へい教員, 2022年4月–2023年3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年度–2023年度).

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年度–2027年度).

自然科学研究機構新分野創成センター先端光科学研究分野プロジェクト, 「原子スケールのラマン分光による半導体・酸化物表面の局所構造と化学反応の解明」, 熊谷 崇 (2022年度).

科研費若手研究, 「時空間極限分光測定による有機鉛ペロブスカイトの電子–格子相互作用の実時空間観測」, 西田 純 (2022年度–2023年度).

自然科学研究機構新分野創成センター先端光科学研究分野プロジェクト,「超局在赤外近接場分光による単一タンパク質内の振動分光」,西田 純 (2022年度).

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・多変量ナノ分光の開発」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5名（斉藤教授、青野教授、加藤教授、飯野教授、古賀准教授）の計8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。

2022年度の特筆すべき研究成果として、磁場によるキラル分子の左右分別に関する共同研究（山本グループ）が科学雑誌「*Nature*」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、概日時計振動体の温度補償性、原子分解能構造、同調性に関する共同研究成果が「*Communications Physics, Science Advances, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*」誌に（秋山グループ）発表され、その学術的な新規性・重要性が高く評価されている。

専任PIはセンターが掲げる目標に向かって、これまでの研究とは違う新しい一歩を踏み出すことが求められる。既に一部のグループ間で共同研究が進行中であるが、より多くのセンター構成員で共有できる新しい研究プロジェクトを練り上げていく必要がある。専門から少し離れた分野でのプロジェクト立案には人的交流が何よりも重要であるため、研究グループの居室を南実験棟の3階の1フロアに集中させ、一部をオープンスペースとして運用しつつ、科学的な議論や交流を活発に進めている。

その他、CIMoSセミナー、ワークショップなどを企画・実施し、それらを通じてセンターの活動や成果を国内外のコミュニティに向けて発信している。

階層分子システム解析研究部門

秋山 修志 (教授) (2012年4月1日着任)

向山 厚 (助教)
古池 美彦 (助教)
DUBERN, Lucie (インターンシップ)
LEDOIGT, Magali (インターンシップ)
SIMON, Damien (大学院生)
鷺尾 みどり (技術支援員)
杉坂 かな恵 (技術支援員)
大原 さとみ (技術支援員)
山本 優里桂 (技術支援員)
谷浦 愛子 (技術支援員 (派遣))
蜂須賀 円 (技術支援員 (派遣))
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.*, *Sci. Adv.* 2022; Furuike *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2022; Furuike *et al.*, *Commun. Phys.* 2022; ; Mukaiyama *et al.*, *Biochem. J.* 2022; Simon *et al.*, *Biophys. Physicobiol.* 2022; Ito-miwa *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2020; Mukaiyama *et al.*, *Sci. Rep.* 2018; Abe *et al.*, *Science* 2015) や国際基調講演 (SRBR 2022; 5th Asian Forum on Chronobiology 2021; 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 (長瀬研究振興賞 2022；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年度]，基盤研究 (S) [2022～2026年度] 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, *Biophys. Physicobiol.* 2021; S. Akiyama, *Circadian Rhythms in Bacteria and Microbiomes* 2021; S. Akiyama, *Biophys. Rev.* 2020; Mukaiyama *et al.*, *Biol. Rhythms* 2019; Akiyama *et al.*, *Biol. Clocks* 2017; S. Akiyama, *Cell. Mol. Life. Sci.* 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.*, *Sci. Adv.* 2022; Furuike *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2022; Mukaiyama *et al.*, *Biochem. J.* 2022)。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

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.*, *Commun. Phys.* 2022)。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.* 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 (Furuike *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2022; Simon *et al.*, *Biophys. Physicobiol.* 2022; Abe *et al.*, *Science* 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.*, *PLoS ONE* 2022)。

- 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 (Okumura *et al.*, *Structure* 2021)。

B-1) 学術論文

Y. FURUIKE, D. OUYANG, T. TOMINAGA, T. MATSUO, A. MUKAIYAMA, Y. KAWAKITA, S. FUJIWARA and S. AKIYAMA, "Cross-Scale Analysis of Temperature Compensation in the Cyanobacterial Circadian Clock System," *Commun. Phys.* **5(1)**, 75 (2022). DOI: 10.1038/s42005-022-00852-z

Y. FURUIKE, A. MUKAIYAMA, D. OUYANG, K. ITO-MIWA, D. SIMON, E. YAMASHITA, T. KONDO and S. AKIYAMA, "Elucidation of Master Allostery Essential for Circadian Clock Oscillation in Cyanobacteria," *Sci. Adv.* **8(15)**, eabm8990 (2022). DOI: 10.1126/sciadv.abm8990

Y. FURUIKE, A. MUKAIYAMA, S.-I. KODA, D. SIMON, D. OUYANG, K. ITO-MIWA, S. SAITO, E. YAMASHITA, T. NISHIWAKI-OHKAWA, K. TERAUCHI, T. KONDO and S. AKIYAMA, “Regulation Mechanisms of the Dual ATPase in KaiC,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **119(19)**, e2119627119 (2022). DOI: 10.1073/pnas.2119627119

A. MUKAIYAMA, Y. FURUIKE, E. YAMASHITA and S. AKIYAMA, “Highly Sensitive Tryptophan Fluorescence Probe for Detecting Rhythmic Conformational Changes of KaiC in the Cyanobacterial Circadian Clock System,” *Biochem. J.* **479(14)**, 1505–1515 (2022). DOI: 10.1042/bsj20210544

B-4) 招待講演

S. AKIYAMA, “Molecular Aspects of Circadian Clock Evolution,” Seminar, Nagoya, 2022年9月.

秋山修志, 「どうして生物の24時間リズムは安定なのか?」, 2022年度量子ビームサイエンスフェスタ, つくば市, 2023年3月.

秋山修志, 「概日時計システムに夜明けを告げる時計タンパク質の自律的な複合体解離」, 日本化学会第103回春季年会, 野田市, 2023年3月.

古池美彦, 「原子分解能でみた概日時計の朝夕昼夜」, 日本生物物理学会年会 若手奨励賞選考会, 函館, 2022年9月.

古池美彦, 「放射光X線で照らす時計タンパク質KaiCの概日振動メカニズム」, SPring-8 シンポジウム 2022 Young Scientist Award 受賞講演, 兵庫県相生町, 2022年9月.

S. AKIYAMA, “Molecular Aspects of Circadian Clock Evolution Inspired by the Example of Cyanobacteria,” SRBR 2022 Biennial Conference, Amelia Island (USA), May 2022.

S. AKIYAMA, “Autonomous Disassembly of Circadian Clock System at Dawn,” The 60th Annual Meeting of the Biophysics Society of Japan, Hakodate (Japan), September 2022.

B-6) 受賞, 表彰

秋山修志, (公財)長瀬科学技術振興財団 長瀬研究振興賞 (2022).

古池美彦, 日本生物物理学会若手奨励賞 (2022).

古池美彦, 日本結晶学会進歩賞 (2022).

古池美彦, SPring-8 ユーザー協同体 The SPRUC 2022 Young Scientist Award (2022).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本時間生物学会 評議員 (2017–). (向山 厚)

学会の組織委員等

第61回(2023年)日本生物物理学会年会実行委員 (2022–). (向山 厚)

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 (2020–2024).

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 (2021–2025).

日本蛋白質科学会アーカイブ編集委員 (2017–). (向山 厚)

理科教育活動

港区立みなと科学館講演会講師 (2022). (古池美彦)

B-8) 大学等での講義, 客員

名古屋工業大学, 非常勤講師, 2022年7月-2023年3月.

理化学研究所, 客員研究員, 2021年4月-2024年3月.

理化学研究所, 客員技師, 2021年4月-2024年3月. (古池美彦)

理化学研究所, 客員研究員, 2021年4月-2024年3月. (向山 厚)

B-9) 学位授与

SIMON, Damien, 「Disassembly Mechanism of Circadian Clock Proteins in Cyanobacteria」, 2022年9月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

長瀬科学技術振興財団研究助成, 「単純化指向型アプローチによるシアノバクテリア概日時計システムの源振動解明」, 秋山修志 (2022年度).

武田科学振興財団 2022年度生命科学研究助成, 「概日時計タンパク質 KaiC における構造多型の操作と解析」, 秋山修志 (2022年度-2026年度).

科研費挑戦的研究(萌芽), 「月面閉鎖生態系の構築を目指した改変型シアノバクテリアの設計」, 秋山修志 (2022年度-2023年度).

科研費基盤研究(S), 「概日時計の複雑多様性の単純化」(代表: 秋山修志), 古池美彦(研究分担者), 向山 厚(研究分担者) (2022年度-2026年度).

科研費若手研究, 「時計タンパク質の絡み合ったアロステリック運動を読み解く」, 古池美彦 (2022年度-2024年度).

科研費学術変革領域研究(B), 「時間タンパク質学」(計画研究), 「生命の時間を宿す機能的 KaiC ホモログの探索技術の開発」, 向山 厚 (2021年度-2023年度).

科研費基盤研究(C), 「原始概日時計の試験管内再構成」, 向山 厚 (2022年度-2024年度).

科研費学術変革領域研究(B), 「時間タンパク質学: 時を生み出すタンパク質特性の総括」(代表: 吉種光), 向山 厚(研究分担者) (2021年度-2023年度).

C) 研究活動の課題と展望

2017年度から取り組んできた基盤研究(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: 2017 ~ 2021年度]が終了し, Kai タンパク質時計の普遍性と多様性の解明, ATPase /リン酸化構造基盤の解明, 温度補償性と揺らぎの関係性の解明, いずれにおいても当初の目標を上回る新発見があった(最終年度検証結果: A)。2022年度からは, 基盤研究(S) [概日時計の複雑多様性の単純化: 2022 ~ 2026年度], 挑戦的研究(萌芽) [月面閉鎖生態系の構築を目指した改変型シアノバクテリアの設計研究: 2022 ~ 2023年度], 長瀬科学技術振興財団 2022年度助成 [単純化指向型アプローチによるシアノバクテリア概日時計システムの源振動解明: 2022年度], 武田科学振興財団生命科学研究助成 [概日時計タンパク質 KaiC における構造多型の操作と解析への助成: 2022年度~]を中心に, 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～2022年9月30日)*)

小杉 貴洋 (助教)
古賀 理恵 (特任研究員)
南 慎太郎 (特別協力研究員)
鈴木 規子 (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, 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) 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、2量体および5量体の設計に成功し、6量体についても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。
- b) 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、2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。
- c) 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800 μ Mくらいの結合親和性を示した。さらに、結晶化して構造を解くことにより、設計通りの構造をしていることを確認した。今後は、より活性を向上させることを目指す。
- d) 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、ATPase 活性測定、cryo 電子顕微鏡構造解析、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。さらに、ここで設計したV-ATPaseと天然のV-ATPaseを比較することで、天然のV-ATPaseの複合体状態に関する知見も得られている。

- e) 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、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。
- f) 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典型的なループパターン18種を明らかにしている。これらのループパターンを組み合わせることで、計算機上で疎水性コアパッキングを形成し、加えて表面形状が多様な α ヘリカル構造を構築する手法を開発した。さらに、これら α ヘリカル構造に対して、側鎖-側鎖もしくは主鎖-側鎖水素結合が形成されるよう側鎖設計の手法を開発した。

B-1) 学術論文

M. MIYAZAKI and T. KOSUGI, “Uncovering the Design Principles of Supramolecular Assemblies through Manipulation of the Structures, Dynamics, and Functions,” *Biophys. Physicobiol.* **19**, e190031 (2022). DOI: 10.2142/biophysico.bppb-v19.0031

A. OTOMO and T. KOSUGI, “Tackle “Molecular Engine” by Early-Career Researchers,” *Biophys. Physicobiol.* **19**, e190039 (2022). DOI: 10.2142/biophysico.bppb-v19.0039

B-3) 総説, 著書

古賀理恵, 小杉貴洋, 古賀信康, 「タンパク質の新常識 4. de novo デザインタンパク質——生物がもたないタンパク質を設計できる時代」, *実験医学増刊*, **40(12)**, 2046–2054 (2022).

小杉貴洋, 「タンパク質設計技術で目指す未来——特集 現代化学の最前線 2023」, *現代化学*, 2023年1月号 (**662**), 34–36 (2022).

B-4) 招待講演

古賀信康, 「Design principles for proteins and exploration of novel ones」, IPR × RIKEN(BDR) Symposium 2023 「Dive into Data of Life」, 豊中, 2023年2月.

古賀信康, 「新規タンパク質配列空間の探索」, 第25回高速分子動画オンラインセミナー, オンライン開催, 2022年10月.

古賀信康, 「新規タンパク質構造の設計」, WINGS-LST/SPRING-GX コロキウム 2022, 大磯プリンスホテル, 大磯町, 2022年10月.

古賀信康, 「新規タンパク質構造の創出 (2SCP 生体分子の人工設計: タンパク質, RNA, DNA)」, 第60回日本生物物理学会年会, 函館, 2022年9月.

古賀信康, 「タンパク質の合理設計手法の開発: 酵素の耐熱化とゼロからの設計」, キリンホールディングス株式会社 R&D 本部キリン中央研究所, 湘南 iPARK, 藤沢, 2022年8月.

古賀信康,「タンパク質の合理設計：自然界のタンパク質の改造, 新規創成 (WS2発動分子エンジニアリング：タンパク質分子機械をいじり倒して実現する新機能)」, 第22回日本蛋白質科学会年会, つくば国際会議場, つくば, 2022年6月.

小杉貴洋,「機能を持った“新しい”蛋白質の設計」, 第22回日本蛋白質科学会年会ワークショップ「AlphaFoldの時代の分子シミュレーション」, つくば, 2022年6月.

小杉貴洋,「蛋白質(計算)科学から始まる生物学を目指して」, 第22回日本蛋白質科学会年会シンポジウム「未来の話をしよう!」, つくば, 2022年6月.

小杉貴洋,「人生の選択：その時私が考えたこと」, 蛋白質科学会若手の会第二回研究交流会, つくば, 2022年6月.

小杉貴洋,「アロステリック部位を設計して回転分子モーターを制御する」, 第6回学術変革(B) SPEED journal club, オンライン開催, 2022年5月.

小杉貴洋,「高次構造体の協奏的機能を合理的に制御することを目指して」, 第60回日本生物物理学会年会JST さきがけ「細胞の動的な高次構造体」共催シンポジウム「高次構造体を自在に操る」, 函館, 2022年9月.

小杉貴洋,「タンパク質設計技術を用いて生体内化学反応を理解・制御する」, 化学反応のポテンシャル曲面とダイナミックス, 京都, 2022年12月.

N. KOGA, “De novo design of protein structures,” iNANO-IMS-ExCELLS Interdisciplinary Nanoscience Joint Meeting, Okazaki (Japan), December 2022.

N. KOGA, “De novo design of novel protein structures,” Advances In Protein Folding, Evolution, and Design 2022, Bayreuth (Germany), April 2022.

T. KOSUGI, “Allosteric control of rotary molecular motor by redesigning non-catalytic interface,” Sendai2022 Workshop, Sendai (Japan), August 2022.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会分野別専門委員：タンパク質設計・ドラッグデザイン (2015–2023).

学会の組織委員等

第60回日本生物物理学会年会シンポジウム「生体分子の人工設計：タンパク質, RNA, DNA」オーガナイザー (2022).

第60回日本生物物理学会年会シンポジウム「高次構造体を自在に操る」オーガナイザー (2022). (小杉貴洋)

第60回日本生物物理学会年会シンポジウム「発動分子科学への若手研究者による挑戦」オーガナイザー (2022). (小杉貴洋)

学会誌編集委員

生物物理学会誌編集委員 (2022–).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「多様な形状の新規回転対称多量体タンパク質の合理デザイン」, 古賀信康 (2022年度–2024年度).

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年度–2023年度).

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,「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年度-2022年度).

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」,古賀信康(2022年).

C) 研究活動の課題と展望

2022年10月に大阪大学蛋白質研究所に着任した。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。蛋白研では、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。

*) 2022年10月1日大阪大学蛋白質研究所教授

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)

神谷 美穂 (事務支援員)

A-1) 専門領域：物理化学, 超高速分光, 非線形分光, 超短パルス発生

A-2) 研究課題：

- a) 先端的超高速分光による凝縮相複雑分子の機能・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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 室温・溶液中において分子はさまざまな時間スケールで起こる揺らぎの影響下にあり、分子の状態は時々刻々と変化する。こうした揺動する分子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。われわれは単一分子検出感度を有する新しい超高速分光法を開発し、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。特に本年は、新たに導入した高繰り返し高出力ファイバーレーザー増幅器に基づいて、その出力を波長変換し励起光として用いる自作の共焦点蛍光顕微鏡を構築した。蛍光光子相関解析を用いることで視野内に1分子以下の条件であることを確認し、蛍光検出に基づく単一分子検出感度での時間分解分光計測に成功した。平行して開発を進めている高繰り返しサブ10 fs パルス光源を用いることで、極限的な時間分解能により室温・溶液中における単一分子レベルの超高速分光計測を行う技術的基盤が整いつつある。
- b) 顕微時間分解分光は光機能性物質・材料の時空間ダイナミクスや、単一分子の反応ダイナミクスを調べる上で強力な手法である。これらの測定においては、高い信号雑音比を得るために高い繰り返し周波数を持つパルスレーザー光源を用いることが重要となるが、これまで高い繰り返し周波数で波長可変な極短パルス光を発生させることは困難であった。そこで、われわれは顕微鏡下で単一分子検出感度を有する超高速分光を実現するための、高繰り返し波長可変極短パルス光源の開発に取り組んだ。MHz周波数で発振するYbファイバーレーザー増幅器をベースとして、非線形光学過程を用いた波長変換を行い、さらに自作のパルス整形器を用い分散補償を行うことで、可視光領域全域で波長可変なサブ10 fs パルス光を得た。実際にこの広帯域パルス光を自作の顕微鏡に導入し、単一分子検出感度での顕微分光に成功した。本光源を用いることで、極限的な時間分解能による単一分子レベルでの超高速分光を今後展開する。

B-1) 学術論文

M. IWAMURA, R. URAYAMA, A. FUKUI, K. NOZAKI, L. LIU, H. KURAMOCHI, S. TAKEUCHI and T. TAHARA,
“Spectroscopic Mapping of the Gold Complex Oligomers (Dimer, Trimer, Tetramer, and Pentamer) by Excited-State Coherent Nuclear Wavepacket Motion in Aqueous Solutions,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **25**, 966–974 (2023). DOI: 10.1039/D2CP04823J

P. KUMAR, H. KURAMOCHI, S. TAKEUCHI and T. TAHARA, “Photoexcited Plasmon-Driven Ultrafast Dynamics of the Adsorbate Probed by Femtosecond Time-Resolved Surface-Enhanced Time-Domain Raman Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. Lett.* **14**, 2845–2853 (2023). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.2c03813

Y. YONEDA, E. A. ARSENAULT, S. JR YANG, K. ORCUTT, M. IWAI and G. R. FLEMING, “The Initial Charge Separation Step in Oxygenic Photosynthesis,” *Nat. Commun.* **13(1)**, 2275 (2022). DOI: 10.1038/s41467-022-29983-1

B-3) 総説, 著書

倉持 光, 田原太平, 「フェムト秒時間分解時間領域ラマン分光で観る光化学反応の超高速構造ダイナミクス」, *光化学*, **53(3)**, 132–137 (2022).

B-4) 招待講演

米田勇祐, 「先端的分光解析で解さほぐす光化学系IIの複雑な励起状態ダイナミクス」, 第29回「光合成セミナー2022」, オンライン開催, 2022年6月.

米田勇祐, **E. A. ARSENAULT, S. JR YANG, K. ORCUTT, M. IWAI and G. R. FLEMING**, 「励起子電荷分離混成が酸素発生型光合成を駆動する」, 第60回日本生物物理学会年会, 函館, 2022年9月.

H. KURAMOCHI, “Mapping Multi-Dimensional Excited-State Dynamics Using Nonlinear Electronic and Vibrational Spectroscopy,” JPCL summit, Tokyo (Japan), September 2022.

B-6) 受賞, 表彰

米田勇祐, 日本生物物理学会若手奨励賞 (2022).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第8回アジア分光国際会議 (8th Asian Spectroscopy Conference, ASC2022) 運営委員 (2020–2023).

理科教育活動

「科学三昧 in あいち 2022」ポスター指導 (2022). (米田勇祐)

その他

分子科学若手の会夏の学校講師 (2022).

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所, 客員研究員, 2022年5月–2024年4月.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「構造物性科学」, 2022年11月–2022年12月.

B-10) 競争的資金

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年度–2023年度).

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年度–2023年度).

科学技術振興機構創発的研究支援事業(受託研究),「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年度-2023年度).

科研費若手研究,「蛍光検出振動分光によるタンパク質発色団構造揺らぎダイナミクスの解明」, 米田勇祐 (2022年度-2023年度).

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年度-2022年度).

C) 研究活動の課題と展望

われわれはバルク溶液・固体に対する(アンサンブル平均を観る)先端的な超高速分光と,新たに開発を進めている室温・溶液中における単一分子レベルでの超高速分光を相補的に用いることで,凝縮相複雑分子系の反応ダイナミクスの研究に新たな途を拓くことを目指している。バルク溶液・固体系の超高速分光に関しては,世界最高性能を有する分光装置と光源を構築・整備した。これら装置を用いることで,所内外の共同研究者と連携しながら,多様な機能性複雑分子の超高速電子・構造ダイナミクスの解明に現在取り組んでいる。単一分子レベルの超高速分光に関しても,顕微分光装置・光源開発が順調に進んでいる。今後光受容タンパク質の時間分解分光計測へと展開し,光-エネルギー変換を決定づける超高速過程と,マイクロ秒~ミリ秒スケールで起こる構造揺らぎの相関を紐解く。

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)

AVARVARI, Narcis (外国人研究職員)
佐藤 拓朗 (助教)
WU, Dongfang (特任専門員)
CABRIERES, Marc (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)
楠本 恵子 (大学院生)
村田 了介 (技術支援員)
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)₂Cu(NCS)₂ 塩の薄膜単結晶を用いたスピントロニクスデバイスを作製し、その電氣的磁氣的特性を測定した。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の蓄積が見出された。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。また、シグナルの磁場角度依存性から、スピン蓄積が結晶の上下で反転し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。また、電子の量子状態を多極子展開することにより、キラリティの秩序変数を表現することが可能となり、キラリティの量子力学的再定義が可能であることを明らかにした。

- 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。我々はこれまで無機キラル金属に電流を通じることによって CISS 効果の発現を行ってきた。本年度は無機キラル半導体である単体テルルの薄膜に注目し、電界効果トランジスタによるゲート操作で非相反伝導性の変調を試みた。その結果、ゲート電界によって電子注入をした場合、100 倍以上の非相反伝導係数の増大を観測することに成功した。

B-1) 学術論文

- A. KATO, H. M. YAMAMOTO and J. KISHINE**, “Chirality-Induced Spin Filtering in Pseudo Jahn-Teller Molecules,” *Phys. Rev. B* **105(19)**, 195117 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.105.195117
- D. HIROBE, Y. NABEI and H. M. YAMAMOTO**, “Chirality-Induced Intrinsic Charge Rectification in a Tellurium-Based Field-Effect Transistor,” *Phys. Rev. B* **106(22)**, L220403 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.106.L220403
- R. NAKAJIMA, D. HIROBE, G. KAWAGUCHI, Y. NABEI, T. SATO, T. NARUSHIMA, H. OKAMOTO and H. M. YAMAMOTO**, “Giant Spin Polarization and a Pair of Antiparallel Spins in a Chiral Superconductor,” *Nature* **613(7944)**, 479–484 (2023). DOI: 10.1038/s41586-022-05589-x
- T. THOMAS, T. THYZEL, H. SUN, J. MÜLLER, K. HASHIMOTO, T. SASAKI and H. M. YAMAMOTO**, “Comparison of the Charge-Crystal and Charge-Glass State in Geometrically Frustrated Organic Conductors Studied by Fluctuation Spectroscopy,” *Phys. Rev. B* **105(20)**, 205111 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.105.205111
- K. HASHIMOTO, R. KOBAYASHI, S. OHKURA, S. SASAKI, N. YONEYAMA, M. SUDA, H. M. YAMAMOTO and T. SASAKI**, “Optical Conductivity Spectra of Charge-Crystal and Charge-Glass States in a Series of θ -Type BEDT-TTF Compounds,” *Crystals* **12(6)**, 831 (2022). DOI: 10.3390/cryst12060831

B-3) 総説, 著書

- J. KISHINE, H. KUSUNOSE and H. M. YAMAMOTO**, “On the Definition of Chirality and Enantioselective Fields,” *Isr. J. Chem.* **62(11-12)**, e202200049 (2022). DOI: 10.1002/ijch.202200049

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

山本浩史, 「フィルムを使った超伝導物性探索」, 新機能性材料展 2023, 東京, February 2023.

H. M. YAMAMOTO, “Symmetry considerations on the CISS effect,” Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung meeting, Bad Honnef (Germany), December 2022.

H. M. YAMAMOTO, “Polarized Spins in Chiral Materials,” Andre Collet meeting, Biarritz (France), October 2022. * (Plenary)

H. M. YAMAMOTO, “Detection of CISS Effects in Solid State Materials,” Telluride meeting, Telluride (USA), June 2022.

H. M. YAMAMOTO, “Chiral metals and superconductors for spin generation,” MRS Thailand 2023, Ubon Ratchathani (Thailand), March 2023. * (Keynote)

B-5) 特許出願

US2022214308, “Chirality Detection Device, Chirality Detection Method, Separation Device, Separation Method, and Chiral Substance Device,” Y. TOGAWA, H. SHISHIDO and H. YAMAMOTO, 2020年.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子科学会幹事 (2020–), 顕彰委員長 (2020–2022), 総務委員長 (2022–2024).

日本物理学会第 77 期・第 78 期代議員 (2021–2023).

学会の組織委員等

分子科学会運営委員 (2018–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2021–2022).

その他

凝縮系科学賞審査委員 (2019–).

森野基金推薦委員 (2021–).

Scientific Advisory Board member for the ELASTO-Q-MAT (Deutsche Forschungsgemeinschaft) (2022–).

Selection Committee member for Asian Young Scientist Fellowship (2022–).

B-8) 大学等での講義, 客員

公立大学法人大阪, 非常勤講師, 2022 年 4 月–2022 年 9 月.

理化学研究所, 客員主管研究員, 2020 年 12 月–2023 年 3 月.

理化学研究所, 客員研究員, 2022 年 4 月–2025 年 3 月. (佐藤拓朗)

B-9) 学位授与

鍋井庸次, 「Study of Chirality-induced Spin Polarization and Spin-dependent Photocurrent Response」, 2023 年 3 月, 博士(理学).

中島良太, 「CISS (Chirality-Induced-Spin-Selectivity) Effect in Chiral Molecular Superconductor」, 2023 年 3 月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

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

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 年度–2022 年度).

大幸財団研究助成, 「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 年度–2022 年度).

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 年度–2024 年度).

B-11) 産学連携

共同研究, (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 (2021 年度–2022 年度).

共同研究, 兼藤産業(株), 「既存する緊急告知防災ラジオと連動して動く防災システムに関する開発研究」, 山本浩史 (2020 年度–2022 年度).

共同研究, (株) アステム, 「アイ・ドラゴン4の機能を広範囲に警報周知するシステムへと機能を拡張する可能性に関する共同研究」, 山本浩史 (2022年度-2023年度).

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、キラル分子の量子状態が本質的にスピン構造を内包した電気トイダルモノポールによって表現されることが明らかとなってきた。このようなキラル物質特有の性質と、CISS 効果との関係性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

齊 藤 真 司 (教授) (2005 年 10 月 1 日着任)

甲田 信一 (助教)

TANG, Zhiye (助教)

CHANDRA, Amalendu (学振外国人招へい研究者)

小泉 愛 (特任研究員)

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。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、周期決定に重要な過程である。KaiB-KaiC 複合体形成速度の KaiC リン酸化依存性に関する実験結果および仮説に基づき、KaiC における ATP 加水分解、ADP/ATP 交換、構造変化を考慮した反応モデルを構築した。このモデルにより、ADP/ATP 交換の抑制による KaiB-KaiC 複合体形成の加速に KaiC の多量体性の重要性を明らかにした。
- 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 LHCH における励起エネルギー移動・散逸に関する解析を進めている。励起エネルギー移動の解明には、LHCH 中のクロロフィルの励起エネルギーやその揺らぎの知見が不可欠である。一般的に、クロロフィルやカロテノイドのような大きな分子の電子状態計算には密度汎関数理論 (DFT) や時間依存密度汎関数理論 (TD-DFT) が用いられる。しかし、DFT 計算に用いられるパラメータは小分子に対する結果から決定されており、大きな分子に対する電子状態の適切な記述、とくに、分子周囲の環境の違いによる電子状態変化の記述は困難である。そこで、最近我々は、誘電率の異なる複数の溶液中のクロロフィル分子の電子状態計算に基づき、DFT/TD-DFT 計算に用いるクロロフィル分子のパラメータを決定し直し、様々な環境下にあるクロロフィル分子の励起エネルギーを適切に記述する電子状態計算を可能にした。現在、LHCH 中のクロロフィル分子の電子状態計算の結果を再現する分子動力学 (MD) 計算のためのパラメータの開発を進めている。また、励起エネルギー散逸の解明には、クロロフィル分子に加えてカロテノイド分子の電子励起状態の知見も不可欠である。TD-DFT 計算では二電子励起を考慮しておらず、二電子励起配置が重要となるカロテノイド分子の最低電子励起状態を適切に記述することができない。そこで、まず我々は、二電子励起も考慮した理論を DFT 計算に適用・

実装した。また、LHCII 中の多様な局所環境下にあるカロテノイド分子の電子状態を記述するため、カロテノイド分子の DFT 計算のパラメータを適切に決め直す必要がある。パラメータの決定に向け、現在、複数の溶液中におけるカロテノイド分子の励起状態の計算を行い、実験結果との比較を行っている。

- c) 凝縮系の構造変化・反応に関して、過冷却液体の構造変化や生体分子系の反応の解析を進めている。とくに、非ボアソン過程で表される反応と遅い運動の競合（動的乱れ）の解明を目指している。過冷却液体に関して、温度低下に伴い構造変化の頻度の大ききなばらつき（真のレアイベント）で特徴づけられる再生過程に遷移し、弱エルゴード性の破綻の前兆を示すことを明らかにした。現在、温度とともにボアソン過程から再生過程へと遷移動的過程が変化する過冷却液体の構造変化が分子論的にどのように起こっているのか、とくに、状態や反応経路の多様性の変化の解明に向けた解析を進めている。

B-1) 学術論文

Y. FURUIKE, A. MUKAIYAMA, S.-I. KODA, D. SIMON, D. OUYANG, K. ITO-MIWA, S. SAITO, E. YAMASHITA, T. NISHIWAKI-OHKAWA, K. TERAUCHI, T. KONDO and S. AKIYAMA, “Regulation Mechanisms of the Dual ATPase in KaiC,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **119(19)**, e2119627119 (2022). DOI: 10.1073/pnas.2119627119

T. MORI and S. SAITO, “Molecular Insights into the Intrinsic Dynamics and Their Roles during Catalysis in Pin1 Peptidyl-Prolyl Isomerase,” *J. Phys. Chem. B* **126(28)**, 5185–5193 (2022). DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c02095.

T. KATO and S. SAITO, “Kohn–Sham Potentials by an Inverse Kohn–Sham Equation and Accuracy Assessment by Virial Theorem,” *J. Chin. Chem. Soc.* **70(3)**, 554–569 (2023). DOI: 10.1002/jccs.202200355

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 (2022–2024).

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).

Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (TRCS2025) 組織委員 (2022–2025).

文部科学省、学術振興会、大学共同利用機関等の委員等

東北大学金属材料研究所 次世代研究者育成委員会委員 (2020–2023).

東北大学金属材料研究所 計算物質科学人材育成コンソーシアム運営協議会委員 (2022–2023).

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) 大学等での講義、客員

Indian Institute of Technology Kanpur, 客員教授, 2020年4月–2025年3月.

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」, 齊藤真司 (2021年度-2025年度).

科研費若手研究,「シアノバクテリア時計タンパク質振動子の出力分子機構の理論的解明」, 甲田信一 (2022年度-2024年度).

B-11) 産学連携

受託研究, (株)ダイセル,「木質バイオマスの溶解シミュレーションに関わる共同研究」, 齊藤真司 (2022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。これらの研究に関する展望は、以下の通りである。

- a) 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、様々なスケールでの解析を行っている。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値モデルや分子動力学 (MD) 計算に基づく研究を進める。さらに、これらの結果をもとに、概日リズムに対する包括的な数値モデルの構築を目指す。
- b) 生体分子系の機能に関する2つ目の研究として、電子状態計算、MD 計算、密度行列の時間発展などを駆使し、高等植物の LHCII における励起エネルギー移動・散逸機構の解析を進めている。励起エネルギー移動に関しては、LHCII 系に対する適切な MD 計算を行うため、LHCII 中の個々のクロロフィル分子の電子状態を適切に再現する MD 計算のパラメータの決定を進めている。これらのパラメータを決定し、MD 計算により励起エネルギーおよびその揺らぎ、エキシトンの密度行列の時間発展などを解析することにより、LHCII における効率的励起エネルギー移動の機構の解明を目指す。
- c) 凝縮系のダイナミクスに関する研究として、化学反応論、確率過程論、計算科学的解析に基づき、凝縮系における構造変化や反応が如何に起こっているのかについて解析を進めている。これらの系では、系の熱力学的性質などにより構造変化や反応の時間スケールおよび動的過程の性質が変化し、定数と仮定していた反応速度が時間とともに大きく変動するようになる。(過冷却) 液体の構造変化に現れる分類や反応座標を適切に決定し、動的過程の変化に伴う反応経路分布の変化や分類される状態の変化、さらに、fragility (ダイナミクスの温度変化) の異なるモデル過冷却液体における構造変化ダイナミクスの変化などの解明を目指す。また、このアイデアを生体分子系における生体酵素反応に展開し、基質分子の様々な濃度における生体分子系の反応の様相の変化の解明、それらの起源などの解明も目指す。

南 谷 英 美 (准教授) (2019 年 4 月 1 日～ 2022 年 8 月 31 日)*)

下出 敦夫 (助教)
赤羽 厚子 (事務支援員)
増田 道子 (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，さらにそれを発展させ，超伝導体である Pb(111) 表面上の Tb 錯体分子における特異な電子状態の研究を実験グループと共同で行った。ターゲットとした錯体分子は，2つの Tb 原子がフタロシアニン骨格3つに挟まれたトリプルデッカー構造を取る Tb₂Pc₃ である。この分子は，単体では Tb の f 軌道以外のスピンを持たないが，Pb(111) 表面上では電荷移動にともない，フタロシアニンリガンド部位に不対電子が生じることが判明した。さらに，この不対電子が持つスピンの Pb(111) 中の電子と相互作用することによって，超伝導体中のクーパー対形成と，伝導電子と磁性不純物間の近藤効果の拮抗によって現れる Yu-Shiba-Rusinov (YSR) 束縛状態を生じていることが判明した。先行研究では，微分コンダクタンスの測定結果には，不対電子が1つであれば，YSR 束縛状態の形成によってギャップ内にピークのペアが1つ現れることが報告されている。しかし Pb(111) 表面上の Tb₂Pc₃ では，不対電子が1つであるにも関わらず，ピークのペアが2つ現れた。そこで，電子状態を第一原理計算によって詳細に解明した結果，不対電子が入る軌道の2重縮退が表面吸着の際のひずみによって僅かに解けることで，1つの軌道が価数揺動状態になり，その結果低エネルギー励起で遷移できる状態が増えたことによって追加のピークが現れていることが判明した。軌道自由度とスピン自由度の結合が，YSR 束縛状態にも変調を与える例である。

B-1) 学術論文

E. MINAMITANI, T. SHIGA, M. KASHIWAGI and I. OBAYASHI, “Relationship between Local Coordinates and Thermal Conductivity in Amorphous Carbon,” *J. Vac. Sci. Technol., A* **40(3)**, 33408 (2022). DOI: 10.1116/6.0001744

E. MINAMITANI, T. SHIGA, M. KASHIWAGI and I. OBAYASHI, “Topological Descriptor of Thermal Conductivity in Amorphous Si,” *J. Chem. Phys.* **156(24)**, 244502 (2022). DOI: 10.1063/5.0093441

A. SHITADE and G. TATARA, “Spin Accumulation without Spin Current,” *Phys. Rev. B* **105(20)**, L201202 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.105.L201202

A. SHITADE, “Spin Accumulation in the Spin Nernst Effect,” *Phys. Rev. B* **106(4)**, 045203 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.106.045203

S. SAKAMOTO, E. JACKSON, T. KAWABE, T. TSUKAHARA, Y. KOTANI, K. TOYOKI, E. MINAMITANI, Y. MIURA, T. NAKAMURA, A. HIROHATA and S. MIWA, “Control of Perpendicular Magnetic Anisotropy at the Fe/MgO Interface by Phthalocyanine Insertion,” *Phys. Rev. B* **105(18)**, 184414 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.105.184414

K. SHIMIZU, Y. DOU, E. F. ARGUELLES, T. MORIYA, E. MINAMITANI and S. WATANABE, “Using Neural Network Potential to Study Point Defect Properties in Multiple Charge States of GaN with Nitrogen Vacancy,” *Phys. Rev. B* **106(5)**, 54108 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.106.054108

N. KAWAKAMI, R. ARAFUNE, E. MINAMITANI, K. KAWAHARA, N. TAKAGI and C. L. LIN, “Anomalous Dewetting Growth of Si on Ag(111),” *Nanoscale* **14(39)**, 14623–14629 (2022). DOI: 10.1039/d2nr03409c

H. N. XIA, E. MINAMITANI, R. ŽITKO, Z. Y. LIU, X. LIAO, M. CAI, Z. H. LING, W. H. ZHANG, S. KLYATSKAYA, M. RUBEN and Y. S. FU, “Spin–Orbital Yu-Shiba-Rusinov States in Single Kondo Molecular Magnet,” *Nat. Commun.* **13(1)**, 6388 (2022). DOI: 10.1038/s41467-022-34187-8

K. YOKOTA, S. INAGAKI, W. QIAN, R. NEMOTO, S. YOSHIZAWA, E. MINAMITANI, K. SAKAMOTO and T. UCHIHASHI, “Non-Charge-Transfer Origin of T_c Enhancement in a Surface Superconductor Si(111)-($\sqrt{7}\times\sqrt{3}$)-In with Adsorbed Organic Molecules,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **91(12)**, 123704 (2022). DOI: 10.7566/JPSJ.91.123704

B-3) 総説, 著書

下出 敦夫, 「スピン流によらないスピンホール(ネルンスト)効果の定式化」, *日本物理学会誌*, **78(3)**, 146–151 (2023). DOI: 10.11316/butsuri.78.3_146

B-4) 招待講演

南谷 英美, 「発熱と熱輸送の第一原理計算」, 日本表面真空学会 2022年度関東支部講演会, オンライン開催, 2022年4月.

E. MINAMITANI, “Relationship between structural characteristics and thermal conductivity in covalent amorphous solids,” The 26th SANKEN International Symposium, Osaka (Japan) (Hybrid), January 2023.

E. MINAMITANI, “Topological descriptor of thermal conductivity in covalent amorphous solids,” 14th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices '22, Nago (Japan). October 2022.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面真空学会ダイバーシティー推進委員会委員 (2018-).

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所, 客員研究員, 2021年4月-2024年3月.

東京大学物性研究所 MP-CoMS, オンライン講義「マテリアルズ・インフォマティクスの基礎と応用」, 2022年9月.

東京理科大学理学部, オンラインセミナー講師, 「スピン流によらないスピン蓄積」, 2022年07月. (下出敦夫)

東京大学物性研究所, セミナー講師, 「スピン流によらないスピンHall効果・スピンNernst効果」, 2022年10月. (下出敦夫)

東京工業大学理学院, セミナー講師, 「スピン流によらないスピンHall効果・スピンNernst効果」, 2022年12月. (下出敦夫)

B-10) 競争的資金

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」(代表: 南谷英美), 下出敦夫(研究分担者)(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靱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(C), 「曲がった時空における波束の半古典論の構築と非線形応答への応用」, 下出敦夫(2022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: 渡邊 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, 弾性定数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。

*) 2022年9月1日大阪大学産業科学研究所教授

理論分子科学第二研究部門

石 崎 章 仁 (教授) (2016 年 4 月 1 日着任)

三輪 邦之 (助教)
布能 謙 (特任助教(分子科学研究所特別研究員))
坂本 想一 (特任研究員)
YAN, Yaming (特任研究員)
赤羽 厚子 (事務支援員)
増田 道子 (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) 量子光は、レーザーなどの古典的な光には無い特有の性質を持ち、分光計測などに対する光の非古典性の巧みな適用法を見出すことで、光計測技術は革新的な発展を遂げる可能性がある。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、量子光の一種である量子もつれ光子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。これまでに我々は、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 (PDC) によって発生させた周波数もつれ光子対を光源とする時間分解スペクトルの定式化を行ってきた。本年は、複雑分子系の動的過程の観測に対する本手法の有用性を明らかにするため、光合成色素タンパク質複合体の一つ Fenna-Matthews-Olson (FMO) 複合体における時間分解スペクトルの詳細な数値解析を行った。FMO 複体内の色素分子が吸収する周波数帯域のもつれ光子対の発生方法としては、 β -BaB₂O₄ 結晶、周期分極反転 KTiOPO₄ 結晶などの非線形光学結晶による PDC 過程を考えた。解析の結果、もつれ光子対の周波数分布は信号処理における sinc フィルターとして機能し、PDC 過程における位相整合条件の調節によって FMO 複合体のスペクトル上の特定のピークを選択的に増強できることを示した。したがって、本手法は、複雑分子系における動的過程を電子状態ごとに追跡するのに利用できると期待される。また、この周波数フィルター機能は現在利用可能なもつれ光子発生技術の範疇で分光計測に実現可能であることを明らかにした。
- b) 分子と光の相互作用は、分子の物性やそこで進行するダイナミクスを観測する上だけでなく、それらを制御する上においても重要な役割を果たす。近年、微小光共振器に閉じ込められた光や、金属ナノ構造の表面近傍に励起される局在表面プラズモンと、分子を強く結合させることによりポラリトンを形成させ、系の物性を制御する試みが盛んに行われている。分子の集団を用いた強結合系の場合、分子の分極の位相が揃った少数の状態がポラリトンの形成に寄与し、残りの多くの状態はポラリトン形成を介した特性制御の影響をほとんど受けないか、所望する制御の阻害要因になりうる。単一分子を用いた強結合系においては、光学特性を調べた先行研究が報告されている一方、電界発光や光誘起電流発生といった光電変換を調べた研究はほとんど報告されていない。また、分子の電界発光を利用する有機発光ダイオードにおいては、その材料として熱活性化遅延蛍光を示す分子が注目されている。このような分子では、第一励起一重項 (S₁) 状態と三重項 (T₁) 状態のエネルギー差が小さく、また、基底状態との間の遷移

における振動子強度が T_1 に比べ S_1 の方が数桁大きいことが知られている。本研究では、上記の特性を持つ分子一個を用いた強結合系に着目し、ポラリトン形成を通して単一分子の電界発光特性を制御する方法を提案した。ポラリトン形成には S_1 が支配的に寄与し、ポラリトンと T_1 のエネルギー位置の関係や、 S_1 と電磁場モードの離調および結合強度により、発光特性が変化することを示した。現在、解析を進め、発光効率を向上させるための設計指針を提示することを試みている。

- c) 近年、超電導量子ビット系などの量子系で熱流を測定することが可能となってきた。このような実験の進展に伴い、系の非平衡ダイナミクスに伴う熱・仕事のエネルギー変換効率の限界や、熱力学的不可逆性を特徴づけるエントロピー生成を最小化する手法などが、基礎原理の理論的理解や実験への応用という立場から注目を集めている。しかし、微小量子系では熱ゆらぎに加えて量子ゆらぎも無視できず、ゆらぎの熱力学の理論を量子系へと拡張する必要に迫られる。我々は、量子ブラウン運動による非マルコフダイナミクスを基軸として、ゆらぎの量子熱力学の構築に関する理論的研究に取り組んでいる。特に、熱浴の自由度を縮約したシステムの時間発展を記述する手法の一つである超演算子形式に着目し、エントロピー生成の表式を求めた。エントロピー生成は熱力学における最も重要な量の一つであるため、非マルコフ過程で厳密な表式が得られたことは重要な進展と考えられる。さらに、エントロピー生成が非負であること（熱力学第二法則）を証明することで、量子系の熱力学的不可逆性の物理的意味を明らかにしようとしている。現状では、熱浴とシステムの相互作用が十分弱い弱結合領域で証明が完了し、現在は一般的な場合に拡張を行っている。

B-1) 学術論文

M. IMAI-IMADA, H. IMADA, K. MIWA, Y. TANAKA, K. KIMURA, I. ZOH, R. B. JACULBIA, H. YOSHINO, A. MURANAKA, M. UCHIYAMA and Y. KIM, “Orbital-Resolved Visualization of Single-Molecule Photocurrent Channels,” *Nature* **603(7903)**, 829–834 (2022). DOI: 10.1038/s41586-022-04401-0

B-4) 招待講演

石崎章仁, 「Quantum Biophysics: Old Roots, New Shoots」, 量子科学技術研究開発機構関西光科学研究所 90th KPSI Seminar, 木津市, 2022年7月.

A. ISHIZAKI, “TBA,” WATOC 2020 12th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, Vancouver (Canada), July 2022. (スケジュールの不都合によりキャンセル)

A. ISHIZAKI, “Investigating Excited-state Dynamics in Molecules with Quantum Entangled Photons,” The 22nd International Conference on Ultrafast Phenomena, Montreal (Canada), July 2022.

A. ISHIZAKI, “TBA,” In-Person TSRC workshop: Spatio-Temporal Dynamics of Excitons: Bridging the Gap Between Quantum Mechanics and Applications, Telluride, Colorado (USA), September 2022. (スケジュールの不都合によりキャンセル)

A. ISHIZAKI, “Theoretical study on quantum dynamics in condensed phase molecular systems,” Quantum Innovation 2022: The International Symposium on Quantum Science, Technology and Innovation, Tokyo (Japan), November 2022.

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 (2019–2024).

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-).

東京大学物性研究所協議会委員 (2022-2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

関西学院大学, 非常勤講師, 2022年4月-2023年3月.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「基礎物理化学II」, 2022年7月.

理化学研究所, 客員研究員, 2020年12月-2023年3月. (三輪邦之)

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」, 石崎章仁 (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).

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), 「量子論的生命現象の解明・模倣」, 石崎章仁 (研究分担者) (2020年度-2022年度).

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年度-2022年度).

C) 研究活動の課題と展望

現在のグループメンバー (日本人PD, 助教, 特任助教, 外国人PD) がすべて最近2年 (それぞれ2021年4月, 2021年12月, 2022年7月, 2022年8月) に着任しており, 2022年4月-2023年3月は研究活動・成果を論文として発表することが困難な期間となったが, 現在3報の論文を投稿中, 1報の論文を投稿準備中である。理論研究に耐えうる卓越した若手人材を定常的に確保することは今後も重要な課題となる。

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 (特任研究員)

稲井 直人 (特任研究員)

杉本 縁 (事務支援員 (派遣))

A-1) 専門領域：量子化学，理論化学，触媒化学，光物性科学

A-2) 研究課題：

- a) 量子逆設計理論による分子-金属ナノ粒子系の光物性の最適化
- b) 細胞内でリン光発光する CAu_6Ag_2 クラスタ：発光のメカニズムと量子収率の理論解析
- c) 凝縮相銀ナノクラスタのゲスト分子によるキラリティ反転制御の機構
- d) 修飾単層カーボンナノチューブの置換基による発光波長制御
- e) 白金族担持微粒子触媒による NO 活性化の担体効果に関する系統的な理論解析
- f) 薄膜太陽電池の界面の安定化による光電変換効率の向上に関する理論解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子の光物性は金属ナノ粒子近傍で大きく増幅され，分子-金属ナノ粒子系は多様な光機能をもつ。分子-金属ナノ粒子系の機能のポテンシャルを引き出すには，適切な設計指針が必要である。本研究では，量子逆設計理論および量子最適制御理論を開発・実装し，所望の光物性を発現する最適な分子-金属ナノ粒子系と入射電場の設計を行った。逆設計理論では，「機能空間」の勾配に基づく最適化と探索を行い，「化学空間」の設計を行う。本研究では，分子を時間依存配置間相互作用法で記述し，金属ナノ粒子を誘電体モデルに基づく境界要素法で記述して分子-金属ナノ粒子系を表現し，各要素の最適化問題に帰着した。また，入射電場は量子最適制御理論で最適化した。これらの理論により，分子種・空間配置，金属ナノ粒子の金属種・形状，入射電場の最適化に成功した。本手法は，分子-金属ナノ粒子系と入射電場の設計方法として有望であり，分子プラズモニクスシステムへの適用が期待される。
- b) 発光性金属ナノクラスタは，配位子構造や金属の種類・核数や配列により，クラスタ構造に特異な物性が発現することが期待される。本研究では，含窒素複素環状カルベン (NHC) 配位子を用いた炭素中心金銀 (CAu_6Ag_2) クラスタを設計・合成し，このクラスタが溶液中で強いリン光を発光することを見出し，NHC 配位子がリン光発光に寄与することを理論計算により明らかにした。また，スピン軌道相互作用を含む解析によって発光速度定数を算出し，最小エネルギー交差点へのエネルギー障壁で量子収率を議論した。さらに，この発光寿命の長いリン光性金銀クラスタを細胞イメージングに用いたところ，細胞への取込みの経路や特定の小器官に選択的に局在することが明らかになり，従来のホスフィン配位子の非選択的な取込みとは異なる優れた機能が確認された。これらの結果から，高設計性の配位子と金属イオンから成る多核金属イオンクラスタが，強リン光性の新物質群として，光バイオ分析の発展に貢献しうることを示した。

- c) 金属クラスターは、キラリティを導入することで機能や応答性を付与することができる。本研究では、ゲスト分子の導入によって銀ナノクラスターのキラリティ制御を行った。銀ナノクラスターの合成にエナンチオマー配位子である α -ジヒドロリポ酸 (DHLLA) を用いると、銀-ジチオレート骨格からなる片手キラルな $\text{Ag}_{29}(\text{DHLLA})_{12}$ クラスターを生成することができる。さらに、ピリジン等の小さなルイス塩基分子をゲスト分子として導入し、右手系と左手系のナノクラスターの相対的安定性を速度論的に逆転させ、キラリティが逆転したナノクラスターを生成することに成功した。理論計算を用いて、ゲスト分子によってキラリティが逆転するメカニズムを明らかにした。このメカニズムは、ナノクラスター間の相互作用によるキラリティの自己制御や自己複製へと拡張される。
- d) 単層カーボンナノチューブ (SWNT) に置換基を導入することによって、発光ピークは赤色シフトし、発光強度が向上する。しかし、化学修飾と発光波長の精密制御は依然として課題である。本研究では、SWNT を段階的に化学修飾することで、部位特異的な機能化がなされ、発光強度・波長を制御できることを実験および理論計算によって示した。数種類のキラル角をもつ SWNT について、 $^n\text{Bu-SWNTs-}^n\text{Bu}$ および $^n\text{Bu-SWNTs-H}$ 付加体を合成し、それぞれ E_{11}^{**} 発光および E_{11}^* 発光が主に得られることを実証した。DFT/TD-DFT 法により、SWNT の 1,2- および 1,4- 付加体の熱力学的安定性と遷移エネルギーに基づいて発光を系統的に帰属した。その結果、付加基の立体障害と R 値 ((n,m) -ナノチューブの $R = \text{mod}(n-m,3)$) が、付加位置と局所バンドギャップの大きさを制御する重要な因子であることを示した。
- e) 白金族金属は、自動車から排出される有害物質を低減するための三元触媒として広く利用されている。担持微粒子触媒では、金属微粒子と金属酸化物の界面が重要な役割を持つ。本研究では、NO 結合活性化について、 $\text{Sr}_3\text{Ti}_2\text{O}_7$ 、 $\text{Sr}_3\text{Fe}_2\text{O}_7$ 、 CeO_2 、 TiO_2 、 ZrO_2 、 $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ 担体と白金族金属クラスター (Pd, Pt, Rh) の組み合わせによる金属/酸化物界面について Slab model DFT 計算により系統的に研究した。金属クラスターに近い酸素空孔を一つ構築し、Mars van Krevelen 機構による、NO の活性化を評価した。NO の O 原子は NO の解離後に金属酸化物の酸素欠陥を埋め、N 原子は金属クラスター上に残される。酸素欠陥がある場合、NO の活性化では発熱過程が確認され、金属クラスターと酸素欠陥の相互作用が重要であることが示された。
- f) 薄膜太陽電池の界面は、デバイスの効率と耐久性を決定する上で極めて重要な役割を担っている。本研究では、実験的にペロブスカイト表面をピペラジン (PP) で処理すると電荷抽出が促進され、 C_{60} ピロリジントリスアジッド (CPTA) で処理するとヒステリシスが減少して、光電変換効率が最大 22.7% に増強されることを見出した。さらに、DFT 計算によってペロブスカイト表面の A サイト空孔は PP^{2+} カチオンによって安定化され、CPTA は表面のヨウ化物空孔に吸着することを示した。また、 Pb^{2+} よりも Sn^{2+} の方が欠陥形成エネルギーが低いいため、CPTA は膜表面の Sn^{2+} サイトに優先的に結合することも示した。

B-1) 学術論文

T. SHIRAOGAWA, G. DALL'OSTO, R. CAMMI, M. EHARA and S. CORNI, "Inverse Design of Molecule-Metal Nanoparticle Systems Interacting with Light for the Desired Photophysical Properties," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24(37)**, 22768–22777 (2022). DOI: 10.1039/d2cp02870k

J. YIN, M. EHARA and S. SAKAKI, "Single Atom Alloys vs Phase Separated Alloys in Cu, Ag, and Au atoms with Ni(111) and Ni, Pd, and Pt atoms with Cu(111): A Theoretical Exploration," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24(17)**, 10420–10438 (2022). DOI: 10.1039/d2cp00578f

- T. NAKASHIMA, R. TANIBE, H. YOSHIDA, M. EHARA, M. KUZUHARA and T. KAWAI**, “Self-Regulated Pathway-Dependent Chirality Control of Silver Nanoclusters,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **61**, e202208273 (2022). DOI: 10.1002/anie.202208273
- M. HAN, S. TASHIRO, T. SHIRAOGAWA, M. EHARA and M. SHIONOYA**, “Substrate-Specific Activation and Long-Range Olefin Migration Catalysis at the Pd Centers in a Porous Metal-Macrocyclic Framework,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **95(9)**, 1303–1307 (2022). DOI: 10.1246/bcsj.20220185
- S. HU, P. ZHAO, B. LI, P. YU, L. YANG, M. EHARA, P. JIN, T. AKASAKA and X. LU**, “Cluster-Geometry-Associated Metal–Metal Bonding in Trimetallic Carbide Clusterfullerene,” *Inorg. Chem.* **61(29)**, 11277–11283 (2022). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.2c01399
- P. ZHAO, K. UEDA, R. SAKAI, M. EHARA, A. SATSUMA and S. SAKAKI**, “Surface Modification of $M\text{Cr}_2\text{O}_4$ ($M = \text{Mg}$ and Zn) by Cu-Doping: Theoretical Prediction and Experimental Observation of Enhanced Catalysis for CO Oxidation,” *Appl. Surf. Sci.* **605**, 154681 (2022). DOI: 10.1016/j.apsusc.2022.154681
- Z. LEI, M. ENDO, H. UBE, T. SHIRAOGAWA, P. ZHAO, K. NAGATA, X. L. PEI, T. EGUCHI, T. KAMACHI, M. EHARA, T. OZAWA and M. SHIONOYA**, “*N*-Heterocyclic Carbene-Based C-Centered Au(I)-Ag(I) Clusters with Intense Phosphorescence and the Organelle-Selective Translocation in Cells,” *Nat. Commun.* **13(1)**, 4288 (2022). DOI: 10.1038/s41467-022-31891-3
- Y. SHUI, G. PEI, P. ZHAO, M. XIONG, S. LI, M. EHARA and T. YANG**, “Understanding Electronic Structures, Chemical Bonding, and Fluxional Behavior of $\text{Lu}_2@C_{2n}$ ($2n = 76\text{--}88$) by a Theoretical Study,” *J. Chem. Phys.* **157(18)**, 184306 (2022). DOI: 10.1063/5.0100652
- Y. MAEDA, R. MOROOKA, P. ZHAO, D. UCHIDA, Y. KONNO, M. YAMADA and M. EHARA**, “Controlling Near-Infrared Photoluminescence Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes by Substituent Effect in Stepwise Chemical Functionalization,” *J. Phys. Chem. C* **127(5)**, 2360–2370 (2023). DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c06153
- S. HU, P. ZHAO, K. NAKANO, R. D. J. OLIVER, J. PASCUAL, J. A. SMITH, T. YAMADA, M. A. TRUONG, R. MURDEY, N. SHIOYA, T. HASEGAWA, M. EHARA, M. B. JOHNSTON, K. TAJIMA, Y. KANEMITSU, H. J. SNAITH and A. WAKAMIYA**, “Synergistic Surface Modification of Tin–Lead Perovskite Solar Cells,” *Adv. Mater.* **35(9)**, 2208320 (2023). DOI: 10.1002/adma.202208320

B-4) 招待講演

- 江原正博, 「Theoretical Studies on Photofunctional Systems and Heterogeneous Catalysts (English)」, 第41回CMD3 ワークショップ(先端事例講義), 大阪大学エマージングサイエンスデザインR³センター, オンライン開催, 2022年9月.
- 江原正博, 「分子集合体・金属クラスターのキラル光物性に関する理論的研究」, 計算アストロバイオロジー 2022, 筑波, 2022年11月.
- 江原正博, 「不均一系触媒・クラスター触媒の理論・計算科学」, 触媒学会界面分子変換研究会ワークショップ「固体触媒の活性構造を知る」, オンライン開催, 2022年11月.
- 江原正博, 「DFT・TDDFT法の基礎: 分子系・金属クラスター系のキラル光物性の理論計算」, キラル光物質科学第1回トレーニング工房, オンライン開催, 2022年12月.

江原正博,「励起子結合法と量子逆設計理論の光物性への応用」,キラル光物質科学第1回トレーニング工房,オンライン開催,2022年12月.

江原正博,「多孔性分子結晶Pd^{II}-MMFによる光照射オレフィン移動反応の反応機構」,IQCE量子科学探索講演会2022「量子化学で探る化学の最先端」,オンライン開催,2023年1月.

江原正博,「分子集合系と金属クラスターの光物性に関する理論研究」,ワークショップ「キラルな光とキラルな物質」,大阪,2023年3月.

M. EHARA, “Inverse Design Approach of Photofunctional Molecular Aggregates and Molecule-Nanocluster Systems (English),” Workshop 2022 on Multiscale Simulation of Complex Reacting Systems (StudyCamp2022), Shiga, 2023年3月.

M. EHARA, T. SHIRAOGAWA and P. ZHAO, “Theoretical Design of Photofunctional Molecular Aggregates and Molecule-Nanocluster Systems for Optical Properties with Inverse Design Approach,” The 10th Asian Pacific Conference of Theoretical & Computational Chemistry (APCTCC), Quy Nhon (Vietnam), February 2023.

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 (2020–2023).

理論化学会副会長 (広報・会誌・懸賞担当)(2021–2023), 幹事 (2019–2023), 企画委員 (2019–2023).

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–).

量子化学研究協会理事 (2006–2023).

日本化学会東海支部常任幹事 (2022–2023).

学会の組織委員等

The Vth Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC) Conference, Sapporo, Japan, Organizing Committee (2019–2023).

The VIIIth Japan-Czech-Slovakia (JCS) Symposium on Theoretical Chemistry, Sapporo, Japan, Organization Committee (2019–2024).

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 (2020–2024).

東京大学物性研究所計算物質科学研究センター運営委員会委員 (2020–2024).

東北大学金属材料研究所共同利用委員会および採択専門委員会委員 (2021–2025).

東北大学金属材料研究所イノベーション創出人材育成委員会委員 (2015–2023).

東京大学物性科学研究所データ創出活用型マテリアル研究開発プロジェクトデータ連携部会委員 (2022–2023).

学会誌編集委員

Journal of Computational Chemistry, Editor-in-Chief (2012–).

Theoretical Chemistry Accounts, Editorial Board (2015–).

The Chemical Record, Editorial Board (2015–).

Wiley Periodicals, Editor (2022–2023).

その他

量子化学スクール世話人 (2011-).

計算物質科学スパコン共用事業運営委員会委員 (2019-).

計算物質科学連絡会議委員 (2019-).

計算物質科学協議会運営委員会委員 (2020-), 代表 (2022-2023).

総合研究大学院大学特別教育プログラム等 WG 委員 (2021-2023).

B-8) 大学等での講義, 客員

大阪大学, 非常勤講師, 2022年4月-2022年9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年度-2022年度).

日本学術振興会学術動向等に関する調査研究, 「基礎物理化学関連分野に関する学術研究動向—複雑系の理論・計算科学の新たな潮流と展開—」, 江原正博 (2022年度).

科研費学術変革領域研究(A), 「超螺旋光に基づくキラル光物性の量子逆設計理論」, 江原正博 (2022年度-2026年度).

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年度-2024年度).

科学技術振興機構CREST研究, 「多元素金属イオンクラスターの精密設計と自在配列が拓く新物質科学」 (代表: 塩谷光彦), 江原正博 (共同研究者) (2022年度-2027年度).

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。2022年度から、学術変革領域研究(A)「光の螺旋性が拓くキラル物質科学の変革」が発足した。量子逆設計理論を用いて、超螺旋光に基づくキラル光物性の理論解析・設計に関する研究を推進する。また、CREST「多元素金属イオンクラスターの精密設計と自在配列が拓く新物質科学」では、多元素金属イオンクラスターの光物性や触媒反応活性について理論解析・設計の研究を推進する。

奥村久士（准教授）（2009年5月1日着任）

伊藤 暁（助教）

谷本 勝一（学振特別研究員）

福原 大輝（大学院生）

大多和 克紀（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) アミロイドβペプチドの凝集初期過程の解明
- b) 赤外線レーザーによるポリアラニンのアミロイド線維破壊の分子動力学シミュレーション
- c) 温度とレプリカの組み合わせをランダムに並べたリストを用いるレプリカ置換ソルトテンパリング法の開発
- d) ポリフェノールによるアミロイドβフラグメント凝集阻害効果を解明するレプリカ置換ソルトテンパリングシミュレーション
- e) 生体膜上の流れを再現する分子動力学シミュレーション手法の開発

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) ペプチドの凝集体が原因で発症する。Aβには42残基からなるAβ42と40残基からなるAβ40の2種類がある。Aβ42の方が凝集速度が速く毒性も高いが、その理由は明らかではなかった。我々は独自に開発してきた分子動力学手法を使ってまずAβがβヘアピン構造を形成している時に凝集しやすいことを発見した。次にAβ42の方がβヘアピン構造を取りやすく、そのため凝集しやすいことも明らかにした。さらに、凝集を促進しているのは5番目のアミノ酸であるアルギニンであることを理論的に予言した。この理論的予言の真偽を検証するために加藤晃一グループに依頼してArg5を変異したAβについて凝集実験を行ってもらった。その結果、変異体では凝集が大幅に抑制されることが明らかとなり、シミュレーションで予測された通りの結果を得ることができた。様々な物質について理論的手法で実験結果を説明する研究は数多くあるが、実験結果を事前に予言する理論研究は少ない。特に病気の原因物質については他に皆無であり、我々は病気の発症機構を予言する理論・計算化学のフロントランナーとなっている。
- b) 昨年度、我々は赤外線レーザーを照射してAβ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。今年度はポリアラニンのアミロイド線維を赤外線レーザー照射により破壊する非平衡分子動力学シミュレーションを行った。ポリアラニン病は長いアラニン鎖を含むタンパク質が凝集することで発症し、手足の多指症、合指症などを引き起こす。シミュレーションの結果、Aβアミロイド線維よりもポリアラニンのアミロイド線維の方が破壊されにくいことが分かり、この原因を次のように解明した。アミロイド線維の破壊は、レーザーパルスが照射される度にC=OとN-Hの間の分子間水素結合が切断され、その隙間に水分子が入り込むことで起こる。ポリアラニンには疎水性残基しかないため、アミロイド線維の周囲にもともと水分子が少なく、C=OとN-Hの間の分子間水素結合が破壊された後にその再形成が阻害されにくい。このためポリアラニンのアミロイド線維の方が破壊されにくいのである。

- c) 生体分子のように複雑な自由エネルギー地形を持つ系でも効率良くその構造を探索できるシミュレーション手法である「レプリカ置換法」を我々は開発してきた。この方法では異なる温度を持つ系のコピー（レプリカと呼ぶ）を複数用意し、シミュレーションの途中で3つ以上のレプリカ間で温度を置換する。さらに昨年度、溶質の自由度にのみ注目するレプリカ置換法である「レプリカ置換ソルトテンパリング法」を開発し、巨大な分子系にも対応できるよう、その適用範囲を広げることに成功した。この手法はレプリカ交換法など他の類似の手法よりも短時間に様々な構造データを収集でき、最も優れた構造探索手法である。ただ、従来のレプリカ置換法では、温度とレプリカの組み合わせを系統的に並べたリストを用いており、このリストを用いたレプリカ交換ソルトテンパリング法では、大きなレプリカ番号を持つレプリカで遷移確率が減少するという問題点が見つかった。この問題の原因を解明し、さらに解決するため、温度とレプリカの組み合わせをランダムに並べたリストを用いるレプリカ置換ソルトテンパリング法を開発した。その結果、全てのレプリカにおいて遷移確率を上昇させることに成功した。
- d) ポリフェノールはA β ペプチドの凝集を阻害する効果がある。我々はレプリカ置換ソルトテンパリング法をA β フラグメントとポリフェノールの系に適用して、凝集阻害のメカニズムを明らかにした。ポリフェノールにはミリセチン、ロスマリン酸の二種類を用いた。まず、ミリセチンやロスマリン酸が相互作用することで、A β フラグメントで分子間 β シートを形成する残基が減少することを示した。ミリセチンのグルタミン酸はA β フラグメントの親水性残基と、フェニルアラニンはA β フラグメントの疎水性残基と相互作用をすることが見られた。一方、ロスマリン酸は、A β フラグメントのグルタミン酸およびリジンと親水性相互作用をすることがわかった。このことから、ミリセチンとロスマリン酸は異なるメカニズムでA β フラグメントの凝集を阻害していることを明らかにした。
- e) 生体膜表面で溶液の流れを発生させるための非平衡分子動力学シミュレーション法を開発した。この手法では生体膜の重心をラグランジュ未定乗数法で固定しながら、生体膜上の溶液には一定の加速度を加えることで生体膜上の流れを作り出している。この手法を用いてジミリストイルホスファチジルコリン（DMPC）二重膜上のNaCl溶液の流れのシミュレーションを行った。その結果、系内の温度を一定に保ちながら溶液に放物線状の流れ場を作ることになった。また、DMPC二重膜の重心は固定されながらも揺らぎを生じさせることができた。

B-1) 学術論文

S. G. ITOH, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and H. OKUMURA, “Key Residue for Aggregation of Amyloid- β Peptides,” *ACS Chem. Neurosci.* **13**(22), 3139–3151 (2022). DOI: 10.1021/acscchemneuro.2c00358

D. FUKUHARA, M. YAMAUCHI, S. G. ITOH and H. OKUMURA, “Ingenuity in Performing Replica Permutation: How to Order the State Labels for Improving Sampling Efficiency,” *J. Comput. Chem.* **44**(4), 534–545 (2023). DOI: 10.1002/jcc.27020

M. X. MORI, R. OKADA, R. SAKAGUCHI, H. HASE, Y. IMAI, O. K. POLAT, S. G. ITOH, H. OKUMURA, Y. MORI, Y. OKAMURA and R. INOUE, “Critical Contributions of Pre-S1 Shoulder and Distal TRP Box in DAG-Activated TRPC6 Channel by PIP2 Regulation,” *Sci. Rep.* **12**(1), 10766 (2022). DOI: 10.1038/s41598-022-14766-x

M. JINDO, K. NAKAMURA, H. OKUMURA, K. TSUKIYAMA and T. KAWASAKI, “Application Study of Infrared Free-Electron Lasers towards the Development of Amyloidosis Therapy,” *J. Synchrotron Radiat.* **29**, 1133–1140 (2022). DOI: 10.1107/S1600577522007330

B-3) 総説, 著書

H. OKUMURA and S. G. ITOH, “Molecular Dynamics Simulation Studies on the Aggregation of Amyloid- β Peptides and Their Disaggregation by Ultrasonic Wave and Infrared Laser Irradiation,” *Molecules* **27(8)**, 2483 (2022). DOI: 10.3390/molecules27082483

Y. TACHI, S. G. ITOH and H. OKUMURA, “Molecular Dynamics Simulations of Amyloid- β Peptides in Heterogeneous Environments,” *Biophys. Physicobiol.* **19**, e190010 (2022). DOI: 10.2142/biophysico.bppb-v19.0010

谷本勝一, 伊藤暁, 奥村久士, 「新型コロナウイルスのRNA依存性RNAポリメラーゼによるリガンド認識の分子動力学シミュレーション」, *シミュレーション*, **41**, 83–94 (2022).

S. TANIMOTO, S. G. ITOH and H. OKUMURA, “State-of-the-Art Molecular Dynamics Simulation Studies of RNA-Dependent RNA Polymerase of SARS-CoV-2,” *Int. J. Mol. Sci.* **23(18)**, 10358 (2022). DOI: 10.3390/ijms231810358

奥村久士, 「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」, *レーザー加工学会誌*, **29**, 160–165 (2022).

H. OKUMURA, T. KAWASAKI and K. NAKAMURA, “Probing Protein Misfolding and Dissociation with an Infrared Free-Electron Laser,” *Methods in Enzymology*, Volume 679 “Integrated Methods in Protein Biochemistry: Part B,” Arun K. Shukla, Ed., Chap. 3, 65–96 (2023). DOI: 10.1016/bs.mie.2022.08.047 ISBN: 978-0-323-99264-0

B-4) 招待講演

奥村久士, 「各種統計アンサンブルの生成法」, 第16回分子シミュレーションスクール—基礎から応用まで—, 岡崎市, 2022年9月.

奥村久士, 「アミロイド β ペプチド凝集体の非平衡分子動力学シミュレーション」, Mie Meeting of Quantum Science, 津市, 2022年12月.

奥村久士, 「非平衡分子動力学シミュレーションで見る極限環境下におけるアミロイド線維破壊」, 第63回高压討論会シンポジウム: 高压力および関連する極限環境下の化学・生物・生命科学, 茨木市, 2022年12月.

奥村久士, 「アミロイド線維の非平衡分子動力学シミュレーション」, 山形大学理学部 離散数理セミナー, 山形市, 2022年12月.

奥村久士, 「生体機能に重要な分子の全原子分子動力学シミュレーション」, Biothermology Workshop 2022, 静岡市, 2022年12月.

奥村久士, 「病気の原因となるタンパク質の分子動力学シミュレーション」, 企業研究会第36期CAMMフォーラム本例会, 東京都港区, 2023年2月.

奥村久士, 「生命分子動態シミュレーション研究グループの最近の研究について」, ExCELLS ファカルティデベロップメント, 蒲郡市, 2023年2月.

奥村久士, 「物質—生命の境界探査のための分子動力学シミュレーション」, 物質—生命の境界探査プラットフォーム2022年度報告会, 岡崎市, 2023年3月.

奥村久士, 「アルツハイマー病の原因となるタンパク質凝集体の分子動力学シミュレーション」, 慶應義塾大学理工学部物理情報工学科渡辺研セミナー, 横浜市, 2023年3月.

H. OKUMURA, “Disaggregation of amyloid- β aggregates observed by nonequilibrium molecular dynamics simulations,” 18th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering, Heraklion (Greece), October 2022.

H. OKUMURA, “Protein aggregation and disaggregation by generalized-ensemble and nonequilibrium molecular dynamics simulations,” 4th International Conference on Materials Research and Innovation, Bangkok (Thailand), December 2022.

H. OKUMURA, “Generalized-ensemble and nonequilibrium molecular dynamics simulations of protein aggregates,” Asia and Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry, Quy Nhon (Vietnam), February 2023.

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–).

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–).

理科教育活動

出前授業「分子研授業～授業の先に何があるのか～『病気に関わるタンパク質をコンピュータシミュレーションで観察する』」愛知県立岡崎北高等学校あいちSTEMハイスクール研究指定事業 (2022).

その他

分子動力学シミュレーションの普及のため, 奥村の講義を動画に収録してYouTubeで無料公開した (<https://www.youtube.com/watch?v=6B3BE7-iIPk>). これは動画公開のために改めてカメラの前で私が講義を行い, それを配信しているものである。合計約16時間かけて分子動力学シミュレーションの基礎から発展的な内容まで系統的に説明している。昨年末に公開を始めて以来約3ヶ月で視聴回数は2200回を超え, 大きな反響を得た。この回数は大学の講義動画としては異例の多さであり, 全国の学生および若手研究者の育成に貢献している。

B-8) 大学等での講義, 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」, 2022年12月.

名古屋市立大学大学院薬学研究科, 客員准教授, 2019年4月–.

B-9) 学位授与

福原大輝, 「Development of calculation methods for proteins and their application to the inhibition of amyloid- β fragment aggregation」, 2023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年度–2023年度).

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ペプチドの凝集過程の解明」, 伊藤 暁 (2021年度–2023年度).

科研費若手研究, 「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年度–2023年度).

C) 研究活動の課題と展望

- a) 生体内は血液や細胞間液、細胞内液などの液体で満たされ、これらの液体は常に流動している。この流れがタンパク質のアミロイド線維化を促進していることが最近明らかになった。しかし、流れ場がアミロイド線維化を促進する機構はまだ分かっていない。そこで、今年度開発した流れを生み出す非平衡分子動力学シミュレーション手法を行って、流れによりアミロイド線維化が促進される理由を解明する。
- b) 全長のA β ペプチド(40および42残基)を32本水溶液中に配置した巨大系の分子動力学シミュレーションを行っている。これはA β ペプチドに関する世界最大のシミュレーションである。これまでに1.6マイクロ秒の計算が終了し、現在その解析を行っている。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。
- c) 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の分子動力学シミュレーションを現在実行中である。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）

小林 稜平（学振特別研究員）

MAHMOOD, Md Iqbal（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。また、このような運動を阻害する因子が存在することが知られている。一例として、回転モーターF₁-ATPaseの回転運動を阻害するIF₁があるが、興味深いことに、阻害状態を解除するには合成方向に回転させる必要があり、ここで再び1方向性の運動が必要になる。この1方向性の阻害状態解除メカニズムを分子シミュレーションによって解明する。シミュレーション中に、回転子にトルクをかけて加水分解・合成方向のそれぞれに回転させて、阻害因子・回転子の相互作用、回転に伴う仕事等の観点から解析を行なっている。
- 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。さらに、構造変化に重要な部位の相互作用を人工的に弱めたシミュレーションにより、これまで未知であった内向き開構造が解明されつつある。
- 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が、膜を曲げるPacsin1や、GTP加水分解エネルギーを用いて膜を切断するダイナミンである。我々は、全原子シミュレーションより大規模で長時間のシミュレーションが可能な粗視化Gō-MARTINIモデルの開発を行って、Pacsin1に応用することで、その構造揺らぎが正しく再現できることを示した。さらに、チューブ状膜とダイナミンの大規模多量体からなるシミュレーション系を構築して、ダイナミンによる膜切断の分子メカニズムに迫ろうとしている。

B-1) 学術論文

T. KIKUTSUJI, Y. MORI, K. OKAZAKI, T. MORI, K. KIM and N. MATUBAYASI, “Explaining Reaction Coordinates of Alanine Dipeptide Isomerization Obtained from Deep Neural Networks Using Explainable Artificial Intelligence (XAI),” *J. Chem. Phys.* **156(15)**, 154108 (2022). DOI: 10.1063/5.0087310

J. NOJI, A. YOSHIMORI, J. OHNUKI and M. TAKANO, “Effects of Solvent Density Distribution and Dipole–Dipole Interaction on a Polarization Fluctuation near an Electrically Neutral Surface,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **91(11)**, 114602 (2022). DOI: 10.7566/jpsj.91.114602

B-3) 総説, 著書

S. J. CHEN, M. HASSAN, R. L. JERNIGAN, K. JIA, D. KIHARA, A. KLOCZKOWSKI, S. KOTELNIKOV, D. KOZAKOV, J. LIANG, A. LIWO, S. MATYSIAK, J. MELLER, C. MICHELETTI, J. C. MITCHELL, S. MONDAL, R. NUSSINOV, K. OKAZAKI, D. PADHORN, J. SKOLNICK, T. R. SOSNICK, G. STAN, I. VAKSER, X. ZOU and G. D. ROSE, “Protein Folds vs. Protein Folding: Differing Questions, Different Challenges,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **120(1)**, e2214423119 (2023). DOI: 10.1073/pnas.2214423119

B-4) 招待講演

K. OKAZAKI, “Molecular simulation and machine learning of rare-event conformational dynamics of biomolecular machines toward controlling their functions,” Sendai 2022, An Update on Molecular Machines: Open Challenges and New Perspectives, Sendai (Hybrid), 2022年8月.

岡崎圭一, 「分子シミュレーションによるトランスポータータンパク質の基質輸送メカニズムの解明」, 第95回日本生化学会大会, 名古屋市, 2022年11月.

K. OKAZAKI, “Molecular Simulation and Statistical Inference of Functional Motions of Biomolecular Machines,” The 5th R-CCS International Symposium: Fugaku and Beyond, Kobe (Hybrid), 2023年2月.

岡崎圭一, 「ベイズ推定によるモータータンパク質の化学力学共役メカニズム解明」, 第45回日本分子生物学会年会, 幕張メッセ, 千葉市 (ハイブリッド開催), 2022年12月.

岡崎圭一, 「分子シミュレーションによるトランスポータータンパク質の基質輸送メカニズムの解明」, 令和4年度新学術領域研究「高速分子動画」シンポジウム, 淡路市 (ハイブリッド開催), 2022年11月.

K. OKAZAKI, “Coarse-grained simulations of curvature induction and sensing of the F-BAR protein Pacsin1 on lipid membranes,” The 6th Telluride Workshop on Coarse-Grained Modeling of Structure and Dynamics of Biomacromolecules, Online, July 2022.

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) (2021–2025).

分子シミュレーションスクール世話人 (2016–2023).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2022–). (大貫 隼)

日本生物物理学会第61回生物物理学会年会実行委員 (2022–). (大貫 隼)

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 (2021–2022).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「細胞膜変形分子マシンの動作メカニズム：多量体形成と構造変化による膜変形の理論研究」, 岡崎圭一 (2022年度–2025年度).

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。回転モーター F_1 -ATPase の阻害因子 IF_1 については、シミュレーションによる解析が進んでおり、その阻害メカニズムに基づいた改変等により新規阻害因子の開発に繋げたい。シュウ酸トランスポーターについては、今まで未知であった内向き開構造が明らかになりつつあるので、その構造遷移における律速過程や、内向き開構造における基質解離・結合過程について詳細な分子メカニズムを明らかにしていきたい。細胞膜変形については、細胞膜切断に関わるダイナミン多量体とチューブ状膜からなるシミュレーション系が構築できたので、膜切断の分子メカニズムの解明を目指す。その他、AlphaFold による高精度構造予測と分子シミュレーションを組み合わせたバイオセンサーの合理設計を目指している。

6-5 光分子科学研究領域

光分子科学第二研究部門

大 森 賢 治 (教授) (2003 年 9 月 1 日着任)

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)
CHAUHAN, Vikas Singh (特任研究員)
周 鳥居 諭来 (特任研究員)
藤川 武敏 (特命専門員)
川本 美奈子 (特任専門員)
鈴木 光一 (特任専門員)
牧野 茜 (特任専門員)
松尾 友紀子 (特任専門員)
MORLA AL YAHYA, Joa (インターンシップ)
DENECKER, Tom (インターンシップ)
KOCIK, Robin (インターンシップ)
BARRE, Maxence (インターンシップ)
MARTHOURET, Hugo (インターンシップ)
DELABRE, Antoine (インターンシップ)
北出 聡太 (インターンシップ)
梅岡 雅人 (インターンシップ)
MAURICIO URBINA, Jorge Antonio (インターンシップ)
TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh (大学院生)
VILLELA ESCALANTE, Rene Alejandro (大学院生)
田中 亮 (技術支援員)
中井 愛里 (技術支援員 (派遣))
西岡 稚子 (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マイクロレベルで整列させた人工原子結晶にアト秒精度のコヒーレント制御法を適用することによって、3 万個の粒子の量子多体問題を近似無しに 1 ナノ秒 (ナノ = 10^{-9}) 以内でシミュレートできる世界唯一・最速の「超高速量子シミュレータ」を開発することに成功した。それぞれ異なる研究分野で発展してきた「超高速化学」と「極低温物理」の手法を融合させた世界初の試みであり、材料科学・固体物理・溶液化学など広範囲の領域に波及効果を及ぼす新しい方法論として期待されている。
- h) 上記の人工原子結晶とアト秒精度のコヒーレント制御法を組み合わせた世界唯一・最速の「超高速量子コンピュータ」の開発を進めている。

B-1) 学術論文

Y. CHEW, T. TOMITA, T. P. MAHESH, S. SUGAWA, S. de LÉSÉLEUC and K. OHMORI, “Ultrafast Energy Exchange between Two Single Rydberg Atoms on a Nanosecond Timescale,” *Nat. Photonics* **16**, 724–729 (2022). (Front cover page highlight) DOI: 10.1038/s41566-022-01047-2

B-4) 招待講演

大森賢治, 「量子力学に残された 100 年の謎に迫る」, LG Japan Lab (株) 横浜 R&D Center 開所式・記念講演, 横浜, 2022 年 7 月.

大森賢治, 「量子力学に残された 100 年の謎に迫る」, 令和 4 年度 (2022 年度) 第 122 回 熊本県立熊本高等学校 創立記念講演会, 熊本, 2022 年 10 月.

大森賢治, 「ロックミュージシャンだった物理学者」, Kumamoto Education Week 2023——みんなの夢が未来を創る——オープニングトーク, 熊本, 2023 年 1 月.

大森賢治, 「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, KEK (高エネルギー加速器機構) 素核研・物構研 連携研究会, 高エネルギー加速器機構, 筑波 (オンライン開催), 2023 年 2 月.

大森賢治, 「量子力学 100 年の謎と量子コンピュータへの挑戦」, 文部科学省 GIGA スクール特別講座, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2023 年 3 月.

大森賢治, 「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, 第 70 回応用物理学会春季学術講演会, 上智大学, 東京, 2023 年 3 月.

大森賢治, 「量子スピード限界で動作する冷却原子型超高速量子コンピュータ」, 自然科学研究機構 経営協議会・教育研究評議会, 御茶ノ水ソラシティカンファレンスセンター, 東京, 2023 年 3 月.

大森賢治, 「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」, ムーンショット目標 6 公開シンポジウム 2023・プロジェクト紹介講演, ヘルサール秋葉原, 東京, 2023 年 3 月.

K. OHMORI, “Ultrafast and ultracold quantum simulator/computer with attosecond precision,” The 4th Asia-Pacific Workshop on Trapped Quantum Systems (APTQS 2022), 精華大学, Beijing (China) (Online), April 2022.

K. OHMORI, “Moonshot proposal: Large-scale and high-coherence fault-tolerant quantum computer with dynamical atom arrays,” ColdQuanta, Inc., Boulder (USA) (Hybrid), July 2022.

K. OHMORI, “Ultrafast and ultracold quantum simulator/computer with attosecond precision,” Special Summer 2022 Quantum Seminar Series, CUBit Quantum Initiative, University of Colorado Boulder and JILA/NIST, Boulder (USA) (Hybrid), July 2022.

K. OHMORI, “Ultrafast and ultracold quantum simulator/computer with attosecond precision,” ColdQuanta, Inc., Boulder (USA) (Hybrid), July 2022.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computer/simulator operating at the single-atom level,” Virtual Humboldt Colloquium “Top Global Research” and the Humboldt Network: New Frontiers of German-Japanese Scientific Cooperation, Alexander von Humboldt Foundation, Germany (Online), November 2022.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computer/simulator with attosecond precision,” The 4th International Symposium on Quantum Physics and Quantum Information Sciences, 北京量子信息科学研究院 (Beijing Academy of Quantum Information Sciences), Beijing (China) (Online), November 2022.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays,” The Chicago Quantum Exchange (CQE) Seminar, The University of Chicago, Chicago (USA) (Hybrid), February 2023.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays,” MIT-Harvard Center for Ultracold Atoms (CUA) Seminar, Harvard University, Cambridge (USA), February 2023.

B-5) 特許出願

特許登録(米国)US11567450,「量子シミュレーターおよび量子シミュレーション方法(Quantum Simulator and Quantum Simulation Method)」, 酒井寛人(浜松ホトニクス), 大森賢治(自然科学研究機構), 安藤太郎(浜松ホトニクス), 武井宣幸(自然科学研究機構), 豊田晴義, 大竹良幸, 兵土知子, 瀧口優(浜松ホトニクス)(登録日 2023年1月31日).

特願 2020-145826,「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), シルヴァンド レゼルック, 富田隆文, 素川靖司(自然科学研究機構), 大竹良幸, 豊田晴義(浜松ホトニクス), 2020年.

特願 2020-145812,「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), シルヴァンド レゼルック, 富田隆文, 素川靖司(自然科学研究機構), 大竹良幸, 豊田晴義(浜松ホトニクス), 2020年.

WO2022045146 (PCT),「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), シルヴァンド レゼルック, 富田隆文, 素川靖司(自然科学研究機構), 大竹良幸, 豊田晴義(浜松ホトニクス), 2020年.

WO2022045147 (A1) (PCT),「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), シルヴァンド レゼルック, 富田隆文, 素川靖司(自然科学研究機構), 大竹良幸, 豊田晴義(浜松ホトニクス), 2020年.

B-6) 受賞, 表彰

周 鳥居 諭来, 第9回SOKENDAI賞(2022).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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

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

Center for Quantum Engineering, Research and Education (CQuERE), TCG, CREST (India), Scientific Advisory Board (2021-).

日本分光学会代議員(2022-).

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-).

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

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

米国ゴードン研究会議 (Gordon Research Conferences: GRC, USA) 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 (2015-2023), 主査 (2023-).

文部科学省 研究計画・評価分科会 臨時委員 (2023-).

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-).

学会誌編集委員

Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, IOP, UK, Section Editor for Quantum Technologies (2019-) and Executive Editorial Board (2021-).

競争的資金等の領域長等

内閣府「ムーンショット型研究開発制度」, 「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」, プロジェクト・マネージャー (PM) (2022-).

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」, 研究代表者 (2018-).

その他

冷却原子型・量子コンピュータ開発において従来技術を2桁上回る世界最速の制御量子ゲート(量子コンピューティングに不可欠な条件つき2量子ビットゲート)を達成し, *Nature Photonics* 2022年10月号の表紙を飾るとともに, 日米欧中を中心に世界中の200件以上のニュース報道でハイライトされることによって, 分子研の世界的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献. (<https://www.ims.ac.jp/news/2022/09/0824.html>)

上記の世界最速の制御量子ゲート(量子コンピューティングに不可欠な条件つき2量子ビットゲート)の成果を受けて, 日本の学術会議はもとより, 米国を代表する量子技術開発コンソーシアムである Chicago Quantum Exchange (CQE), シカゴ大学, マサチューセッツ工科大学(MIT), ハーバード大学などの米国の量子技術開発の最重要拠点の数々や, ドイツのフンボルト財団, 原子物理分野で由緒ある大規模な国際会議 ICPEAC (今年の開催地: オタワ) などから, 次々にコロキウムや全体講演 (Plenary Lecture) 等に招待され, 世界のアカデミアで大反響を呼んでおり, 分子研の世界的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

上記の世界最速の制御量子ゲート(量子コンピューティングに不可欠な条件つき2量子ビットゲート)の成果を受けて, 日本光学会誌「光学」において「2022年の日本の光学研究を代表する成果」として解説記事を依頼されている他, 「日本物理学会誌」, 応用物理学会機関誌「応用物理」, 自動車技術会誌「自動車技術」などからも, 次々に解説記事を依頼されるなど, 光学, 物理学, 自動車技術など様々な研究分野に強烈なインパクトを与え, 分子研の全国的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

文部科学省の指名を受けて、量子科学技術をテーマにした文部科学省GIGA スクール特別講座「量子力学 100 年の謎と量子コンピュータへの挑戦」の企画と講師を務めることによって、分子研を「日本における量子科学技術の中心拠点」として広く社会に認知させるとともに、わが国の量子科学技術の将来を担う若い世代の人材育成に大きく貢献。

日本の量子技術政策の象徴である「文科省Q-LEAP プロジェクト」の前半(2018–2022年度)のステージゲート審査(2022年5月12日)において最高評価「S:評価項目を満たしており、特に優れたところが認められる」を獲得し(2022年6月24日に結果通知)、分子研の全国的な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(2015–2023)、同委員会の主査(2023–現在)、ならびに文部科学省 研究計画・評価分科会 臨時委員(2023–現在)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 Conferences: GRC, USA)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米国ゴードン研究会議(Gordon Research Conference: GRC, USA)“Quantum Control of Light and Matter”の2023年会議 議長, 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。

米国を代表する量子テクノロジー企業からの強い要望で、分子研・大森グループとの今後の協業に向けた協議を継続的に進めることによって(2022年2月18日–), 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。

文部科学省と、わが国の量子科学技術政策に関する意見交換・ブレインストーミングを継続的に行うことによって日本政府の政策立案、および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。

科学技術推進機構(JST)に対して国内外の研究動向やJSTが推進すべき研究領域などについてアドバイスを行うことによってわが国の量子技術の発展と分子研のプレゼンス向上に貢献。

文部科学省研究振興局大学研究基盤整備課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(2023年3月30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) 大学等での講義, 客員

Heidelberg University(ドイツ), 客員教授(フンボルト賞受賞者), 2012年–.

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」, 2022年12月13日, 15日, 20日, 22日.

B-9) 学位授与

周 鳥居 諭来, 「光ピンセット配列中の冷却リユードバリ原子を用いた超高速量子ダイナミクスの研究」, 2022年9月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

内閣府「ムーンショット型研究開発制度」,「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」, 大森賢治 (2022年度-2030年度).

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年度-2028年度).

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年度-2022年度).

科研費基盤研究 (B),「強相関リユ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年度-2025年度).

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年度-2022年度).

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年度-2022年度).

B-11) 産学連携

浜松ホトニクス (株),「超高速量子シミュレータの開発」, 大森賢治 (2016年-).

(株) 日立製作所,「超高速量子コンピュータの開発」, 大森賢治 (2022年-).

ColdQuanta, Inc. (米国),「超高速量子コンピュータの開発」, 大森賢治 (2022年-).

C) 研究活動の課題と展望

今後我々の研究グループでは, APM を高感度のデコヒーレンス検出器として量子論の基礎的な検証に用いると共に, より自由度の高い量子位相操作技術への発展を試みる。そしてそれらを希薄な原子分子集団や凝縮相に適用することによって, 「アト秒量子エンジニアリング」と呼ばれる新しい領域の開拓を目指している。当面は以下の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マイクロ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)
SCHAAL, Maximilian (インターンシップ)
西野 史 (大学院生)
PALASSERY ITHIKKAL, Jaseela (大学院生)
山内 早希 (特別共同利用研究員)
瀬間 亮太 (特別共同利用研究員)
神谷 美穂 (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。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進めている。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) による分子界面電子状態の計測法開拓を推進しつつ、BL6U における光電子運動量顕微鏡 (PMM) の装置開発と分子系への最適化のためのパラメータ調整を進めている。
- 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、バンド伝導移動度の定量的評価と、分子結晶特有の物理モデ

ルの構築を進めている。多体効果による電子構造への影響を検出し、非自明な機能開拓へ向けた研究を進めている。有機半導体結晶における振電相互作用の運動量異方性の検出に成功した。

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。ケイ素を含む共有結合性有機構造体の作製に成功した。
- 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)、高分解能スポット解析型低速電子線回折 (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

Y. HASEGAWA, F. MATSUI and S. KERA, “Resonant Photoemission Spectroscopy of Highly-Oriented-Coronene Monolayer Using Photoelectron Momentum Microscope,” *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **20(3)**, 174–179 (2022). DOI: 10.1380/ejsnt.2022-031

S. A. ABD-RAHMAN, T. YAMAGUCHI, S. KERA and H. YOSHIDA, “Sample-Shape Dependent Energy Levels in Organic Semiconductors,” *Phys. Rev. B* **106(7)**, 075303 (2022). DOI: 10.1103/physrevb.106.075303

H. OTA, M. FUJIMOTO, K. HAYASHI, T. HORIGOME, H. IWAYAMA, M. KATOH, N. KONDO, S. MAKITA, F. MATSUI, H. MATSUDA, T. MIZUKAWA, A. MINAKUCHI, E. NAKAMURA, M. NAGASAKA, Y. OKANO, T. OHIGASHI, M. SAKAI, K. SUGITA, K. TANAKA, Y. TAIRA, F. TESHIMA, J. YAMAZAKI, T. YANO, H. YUZAWA and S. KERA, “UVSOR Synchrotron Facility Update,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **2380**, 012003 (5 pages) (2022). DOI: 10.1088/1742-6596/2380/1/012003

Y. SHEN, Y. Q. LI, K. ZHANG, L. J. ZHANG, F. M. XIE, L. CHEN, X. Y. CAI, Y. LU, H. REN, X. GAO, H. XIE, H. MAO, S. KERA and J. X. TANG, “Multifunctional Crystal Regulation Enables Efficient and Stable Sky-Blue Perovskite Light-Emitting Diodes,” *Adv. Funct. Mater.* **32(41)**, 2206574 (2022). DOI: 10.1002/adfm.202206574

O. ENDO, F. MATSUI, S. KERA, W. J. CHUN, M. NAKAMURA, K. AMEMIYA and H. OZAKI, “Observation of Hole States at Perylene/Au(110) and Au(111) Interfaces,” *J. Phys. Chem. C* **126(37)**, 15971–15979 (2022). DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c04060

K. SUN, O. J. SILVEIRA, Y. MA, Y. HASEGAWA, M. MATSUMOTO, S. KERA, O. KREJČÍ, A. S. FOSTER and S. KAWAI, “On-Surface Synthesis of Disilabenzene-Bridged Covalent Organic Frameworks,” *Nat. Chem.* **15(1)**, 136–142 (2023). DOI: 10.1038/s41557-022-01071-3

B-4) 招待講演

福谷圭祐, 「Ta₂NiSe₅ の励起子絶縁体の根拠としての自発的励起子からの光電子観測」, 日本物理学会第 77 回年次大会, オンライン開催, 2022 年 3 月.

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 (2020–2022).

学会の組織委員等

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 組織委員会委員 (2022–2023).

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 (2021–2024).

KEK 物質構造科学研究所運営会議委員 (2021–2024).

東京大学物性研究所附属極限コヒーレント光科学研究センター軌道放射物性研究施設運営委員会委員 (2022–2024).

学会誌編集委員

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

B-8) 大学等での講義, 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年度-2022年度).

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年度-2022年度).

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年度-2022年度).

科研費基盤研究(C), 「基底状態観測と物質設計に基づく定常励起子の制御」, 福谷圭祐 (2022年度-2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

機能性分子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年度より福谷助教が着任し, 低次元物性と精密計測に関する研究力を強化した。分子結晶や界面の階層性に着目し, 電子物性の多体効果問題に挑戦する。一方, UVSOR 施設長として国内コミュニティの基盤強化を推進するための利用支援に注力している。2019年度から技術開発を進めているPMM装置について, スピン検出機能追加による第二期R&Dを開始した。松井教授らと共に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とともに, 国内で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。施設長期計画として次世代研究施設UVSOR-IVの建設に向けた準備を進めている。学術系施設PF, HiSORとの連携に加え, あいちSRとナノテラスを中心に, 国内外施設およびコミュニティの意見交換と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)

石川 裕子 (事務支援員)

神谷 美穂 (事務支援員)

A-1) 専門領域：物理化学, 軟X線分光

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) 軟X線吸収分光法による金属錯体溶液の局所構造解析
- c) 溶液の軟X線吸収分光法の低エネルギー領域への開拓
- d) 溶液光化学反応のオペランド時間分解軟X線吸収分光法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 2 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, ジメチルスルホキシド水溶液の O-K 吸収端 XAS 測定を行うことで, 異なる濃度におけるジメチルスルホキシドと水の水素結合ネットワークの変化を明らかにした。また, 液体エタノールの C-K 吸収端 XAS スペクトルを分子動力学計算と内殻励起計算の組み合わせから再現する方法を確立した。
- b) 水溶液中のヘミン (FePPIX) とその異種金属錯体 (CoPPIX) の N-K 吸収端 XAS 測定を行い, 金属錯体の中心金属依存性を調べた。N-K 吸収端では金属錯体の配位子の電子状態を観測するが, 配位子の 2p 軌道と中心金属の 3d 軌道の混成のため, その金属-配位子間相互作用を調べることに成功した。更に, 金属錯体のスピン状態や水溶液中での溶媒の配位効果などを, N-K 吸収端 XAS 測定から調べられることを実証した。
- c) 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。そこで, Si が含まれていない高分子ナノ膜を開発すると共に, 液体セルを満たすアルゴン光路長を 2.6 mm にできる超薄型液体セルを開発することで, 低エネルギー領域の溶液の XAS 測定の実現を目指している。
- d) 溶液光化学反応のオペランド時間分解 XAS 測定を実現するために, 超高速レーザーパルスと放射光から発生する軟X線パルスを 70 ps の時間分解能で同期するシステムを構築した。これにより, 鉄フェナントロリン錯体水溶液の N-K 吸収端 XAS スペクトルにおいて, 光励起後の高スピン状態から低スピン状態に緩和する過程の経時変化を, 金属錯体の配位子の電子状態変化から観測することに成功した。

B-1) 学術論文

M. NAGASAKA, M. BOUVIER, H. YUZAWA and N. KOSUGI, “Hydrophobic Cluster Formation in Aqueous Ethanol Solutions Probed by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. B* **126(26)**, 4948–4955 (2022). DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c02990

M. NAGASAKA, “Site Selective Analysis of Water in Hydrogen Bond Network of Aqueous Dimethyl Sulfoxide Solutions by Oxygen K-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy,” *J. Mol. Liq.* **366**, 120310 (2022). DOI: 10.1016/j.molliq.2022.120310

M. NAGASAKA, “Carbon K-Edge X-Ray Absorption Spectra of Liquid Alcohols from Quantum Chemical Calculations of Liquid Structures Obtained by Molecular Dynamics Simulations,” *J. Chem. Phys.* **158(2)**, 024501 (2023). DOI: 10.1063/5.0131017

F. KUMAKI, M. NAGASAKA, R. FUKAYA, Y. OKANO, S. YAMASHITA, S. NOZAWA, S. ADACHI and J. ADACHI, “Operando Time-Resolved Soft X-Ray Absorption Spectroscopy for Photoexcitation Processes of Metal Complexes In Solutions,” *J. Chem. Phys.* **158(10)**, 104201 (2023). DOI: 10.1063/5.0129814

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, “Stacking of a Cofacially Stacked Iron Phthalocyanine Dimer on Graphite Achieved High Catalytic CH₄ Oxidation Activity Comparable to That of pMMO,” *JACS Au* **3(3)**, 823–833 (2023). DOI: 10.1021/jacsau.2c00618

B-4) 招待講演

長坂将成, 「軟 X 線吸収分光法による溶液の化学現象の解明」, 第 130 回触媒討論会, 富山市, 2022 年 9 月.

長坂将成, 「軟 X 線吸収分光法による溶液反応のオペランド観測」, 第 12 回岩澤コンファレンス「サステナブル社会のための触媒化学・表面科学の最前線」, 東京, 2023 年 3 月.

M. NAGASAKA, “Development of Time-Resolved Soft X-Ray Absorption Spectroscopy for Observing Photochemical Reaction in Solution,” Conference on Laser and Synchrotron Radiation Combination Experiment 2022 (LSC 2022), OPTICS & PHOTONICS International Congress 2022, Yokohama (Japan), April 2022.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

International Workshop on Photoionization—Resonant Inelastic X-ray Scattering 2022, local organizing committee (2021–2022).

理科教育活動

出前授業「分子研授業～授業の先に何があるのか～『軟 X 線で観る液体の化学』」愛知県立岡崎北高等学校あいち STEM ハイスクール研究指定事業 (2022).

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所, 客員研究員, 2022 年 4 月–2023 年 3 月.

B-10) 競争的資金

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年度-2023年度).

科研費基盤研究(A),「人工光合成をめざす半導体光触媒:オペランド計測によるミリ秒反応化学の解明」(代表:大西洋),長坂将成(研究分担者)(2022年度-2024年度).

科研費基盤研究(B),「難分解性有機物資源化を可能にするグラファイト担持型超強力酸化触媒活性種の開発」(代表:山田 泰之),長坂将成(研究分担者)(2022年度-2024年度).

光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

加藤 政博（特任教授）（2019年4月1日着任）
（クロスアポイントメント；広島大学放射光科学センター）

藤本 将輝（助教）（兼任）
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を検討した後，新しい光源加速器の設計を開始し，これまでに電子エネルギー 1 GeV，周長約 70 m の放射光源の基礎設計を完了した。
- 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

T. KANEYASU, M. HOSAKA, A. MANO, Y. TAKASHIMA, M. FUJIMOTO, E. SALEHI, H. IWAYAMA, Y. HIKOSAKA and M. KATOH, “Double-Pulsed Wave Packets in Spontaneous Radiation from a Tandem Undulator,” *Sci. Rep.* **12(1)**, 9682 (2022). DOI: 10.1038/s41598-022-13684-2

T. FUJI, T. KANEYASU, M. FUJIMOTO, Y. OKANO, E. SALEHI, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, A. MANO, Y. HIKOSAKA, S. WADA and M. KATOH, “Spectral Phase Interferometry for Direct Electric-Field Reconstruction of Synchrotron Radiation,” *Optica* **10(2)**, 302–302 (2023). DOI: 10.1364/optica.477535

E. SALEHI, Y. TAIRA, M. FUJIMOTO, L. GUO and M. KATOH, “Lattice Design of the UVSOR-IV Storage Ring,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **2420(1)**, 012062 (2023). DOI: 10.1088/1742-6596/2420/1/012062

H. OTA, E. SALEHI, M. FUJIMOTO, K. HAYASHI, T. HORIGOME, H. IWAYAMA, M. KATOH, N. KONDO, S. MAKITA, F. MATSUI, H. MATSUDA, T. MIZUKAWA, A. MINAKUCHI, E. NAKAMURA, M. NAGASAKA, Y. OKANO, T. OHIGASHI, M. SAKAI, K. SUGITA, K. TANAKA, Y. TAIRA, F. TESHIMA, J. YAMAZAKI, T. YANO, H. YUZAWA and S. KERA, “UVSOR Synchrotron Facility Update,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **2380(1)**, 012003 (2022). DOI: 10.1088/1742-6596/2380/1/012003

H. KAWAGUCHI, T. MURAMATSU, M. KATOH, M. HOSAKA and Y. TAKASHIMA, “Time-Domain Eddy Current and Wake Fields Analysis of Pulsed Multipole Magnet Beam Injector in Synchrotron Radiation Ring,” *IEICE Trans. Electron.* **E105.C(4)**, 146–153 (2022). DOI: 10.1587/transele.2021rep0003

B-4) 招待講演

M. KATOH, “Physics and applications of electromagnetic radiation from relativistic electrons,” The 31st International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (ITC31), Online, November 2022.

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 (2020–).

日本放射光学会評議員 (2022–).

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) 大学等での講義, 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–.

核融合科学研究所, 客員教授, 2022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年度-2022年度).

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tron光源としては世界的にも最高レベルの性能に到達したが、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検討した結果、現在の性能を大幅に上回る高度化改造は困難であると結論づけ、新規に回折限界を目指す光源加速器の建設について検討を進めている。基礎設計は概ね完了し、今後、デザインレポートの作成を進める。また、高エネルギー加速器研究機構や名古屋大学シンクロtron光研究センターなどと連携し、持続可能な加速器施設を目指した省エネルギー化や運転の自動化などを念頭に、次期光源に必要とされるハードウェア技術開発を進める。

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tron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的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）
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）
小澤 舜ノ介（特別共同利用研究員）
塩原 慧介（特別共同利用研究員）
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原子スケー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。2022 年度に陽電子寿命測定法及び寿命運動量相関測定法の検出器の数を 2 倍にすることで、計数率が 2 倍になることを確認した。これまでと同じ統計を貯めるのに測定時間が半分になり、限られた時間で測定できる試料の数が増えたため、ユーザーにとって利便性が向上した。寿命運動量相関測定法の開発に関する論文が *Rev. Sci. Instrum.* に掲載され、シンチレータ材料の陽電子消滅分光法に関するユーザー執筆の論文が発表された。また、超短パルス円偏光ガンマ線を用いたスピン偏極陽電子消滅分光法の開発も開始しており、複数の分析技術をユーザーに提供することを目指す。一方で、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 16 件、2022 年度 16 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50mJのレーザー装置の立ち上げを現在行っている。2022年11月に非線形逆トムソン散乱実験を行ったが、光渦である高次高調波の確認が出来なかった。今後課題解決に取り組み、再実験する予定である。

B-1) 学術論文

Y. TAIRA, R. YAMAMOTO, K. SUGITA, Y. OKANO, T. HIRADE, S. NAMIZAKI, T. OGAWA and Y. ADACHI, “Development of Gamma-Ray-Induced Positron Age-Momentum Correlation Measurement,” *Rev. Sci. Instrum.* **93(11)**, 113304 (2022). DOI: 10.1063/5.0105238

H. OTA, E. SALEHI, M. FUJIMOTO, K. HAYASHI, T. HORIGOME, H. IWAYAMA, M. KATOH, N. KONDO, S. MAKITA, F. MATSUI, H. MATSUDA, T. MIZUKAWA, A. MINAKUCHI, E. NAKAMURA, M. NAGASAKA, Y. OKANO, T. OHIGASHI, M. SAKAI, K. SUGITA, K. TANAKA, Y. TAIRA, F. TESHIMA, J. YAMAZAKI, T. YANO, H. YUZAWA and S. KERA, “UVSOR Synchrotron Facility Update,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **2380(1)**, 012003 (2022). DOI: 10.1088/1742-6596/2380/1/012003

E. SALEHI, Y. TAIRA, M. FUJIMOTO, L. GUO and M. KATOH, “Lattice Design of the UVSOR-IV Storage Ring,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **2420(1)**, 012062 (2023). DOI: 10.1088/1742-6596/2420/1/012062

M. KITAURA, Y. TAIRA and S. WATANABE, “Characterization of Imperfections in Scintillator Crystals Using Gamma-Ray Induced Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy,” *Opt. Mater: X* **14**, 100156 (2022). DOI: 10.1016/j.omx.2022.100156

B-4) 招待講演

Y. TAIRA, “Ultra-short pulsed gamma rays and their application to material science,” Asia-Oceania Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation 2022, Sendai (Japan), November 2022.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

ビーム物理研究会 若手の会 幹事 (2020-).

日本加速器学会第19回年会組織委員 (2021-2023).

日本加速器学会第19回年会プログラム委員 (2022-2023).

日本加速器学会組織委員 (2022-2023).

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所, 客員研究員, 2018年9月-.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「光物理」, 2022年7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年度-2023年度).

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年度-2022年度).

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 (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)

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) STXM 用の引っ張り応力印加セルの開発を行なった。
- b) STXM 用に開発した大気非暴露試料搬送システムを用いて、リュウグウ帰還試料の有機物分析を行った。

B-1) 学術論文

J. BAROSCH, L. R. NITTLER, J. WANG, C. M. O'D. ALEXANDER, B. T. DE GREGORIO, C. ENGRAND, Y. KEBUKAWA, K. NAGASHIMA, R. M. STROUD, H. YABUTA, Y. ABE, J. ALÉON, S. AMARI, Y. AMELIN, K.-I. BAJO, L. BEJACH, M. BIZZARRO, L. BONAL, A. BOUVIER, R. W. CARLSON, M. CHAUSSIDON, B.-G. CHOI, G. D. CODY, E. DARTOIS, N. DAUPHAS, A. M. DAVIS, A. DAZZI, A. DENISET-BESSEAU, T. DI ROCCO, J. DUPRAT, W. FUJIYA, R. FUKAI, I. GAUTAM, M. K. HABA, M. HASHIGUCHI, Y. HIBIYA, H. HIDAKA, H. HOMMA, P. HOPPE, G. R. HUSS, K. ICHIDA, T. IIZUKA, T. R. IRELAND, A. ISHIKAWA, M. ITO, S. ITOH, K. KAMIDE, N. KAWASAKI, A. L. DAVID KILCOYNE, N. T. KITA, K. KITAJIMA, T. KLEINE, S. KOMATANI, M. KOMATSU, A. N. KROT, M.-C. LIU, Z. MARTINS, Y. MASUDA, J. MATHURIN, K. D. MCKEEGAN, G. MONTAGNAC, M. MORITA, S. MOSTEFAOUI, K. MOTOMURA, F. MOYNIER, I. NAKAI, A. N. NGUYEN, T. OHIGASHI, T. OKUMURA, M. ONOSE, A. PACK, C. PARK, L. PIANI, L. QIN, E. QUIRICO, L. REMUSAT, S. S. RUSSELL, N. SAKAMOTO, S. A. SANDFORD, M. SCHÖNBÄCHLER, M. SHIGENAKA, H. SUGA, L. TAFLA, Y. TAKAHASHI, Y. TAKEICHI, Y. TAMENORI, H. TANG, K. TERADA, Y. TERADA, T. USUI, M. VERDIER-PAOLETTI, S. WADA, M. WADHWA, D. WAKABAYASHI, R. J. WALKER, K. YAMASHITA, S. YAMASHITA, Q.-Z. YIN, T. YOKOYAMA, S. YONEDA, E. D. YOUNG, H. YUI, A.-C. ZHANG, M. ABE, A. MIYAZAKI, A. NAKATO, S. NAKAZAWA, M. NISHIMURA, T. OKADA, T. SAIKI, S. TANAKA, F. TERUI, Y. TSUDA, S.-I. WATANABE, T. YADA, K. YOGATA, M. YOSHIKAWA, T. NAKAMURA, H. NARAOKA, T. NOGUCHI, R. OKAZAKI, K. SAKAMOTO, S. TACHIBANA and H. YURIMOTO, "Presolar Stardust in Asteroid Ryugu," *Astrophys. J. Lett.* **935(1), L3 (2022). DOI: 10.3847/2041-8213/ac83bd**

I. KERRAOUCH, Y. KEBUKAWA, A. BISCHOFF, M. E. ZOLENSKY, E. WÖLFER, J. L. HELLMANN, M. ITO, A. KING, M. TRIELOFF, J. ALIX BARRAT, P. SCHMITT-KOPPLIN, A. PACK, M. PATZEK, R. D. HANNA, T. FOCKENBERG, Y. MARROCCHI, M. FRIES, J. MATHURIN, E. DARTOIS, J. DUPRAT, C. ENGRAND, A. DENISET, A. DAZZI, K. KIRYU, M. IGISU, T. SHIBUYA, D. WAKABAYASHI, S. YAMASHITA, Y. TAKEICHI, Y. TAKAHASHI, T. OHIGASHI, Y. KODAMA and M. KONDO, “Heterogeneous Nature of the Carbonaceous Chondrite Breccia Aguas Zarcas—Cosmochemical Characterization and Origin of New Carbonaceous Chondrite Lithologies,” *Geochim. Cosmochim. Acta* **334**, 155–186 (2022). DOI: 10.1016/j.gca.2022.07.010

J. LI, W. LIU, D. CASTARÈDE, W. GU, L. LI, T. OHIGASHI, G. ZHANG, M. TANG, E. S. THOMSON, M. HALLQUIST, S. WANG and X. KONG, “Hygroscopicity and Ice Nucleation Properties of Dust/Salt Mixtures Originating from the Source of East Asian Dust Storms,” *Front. Environ. Sci.* **10**, 897127 (2022). DOI: 10.3389/fenvs.2022.897127

M. C. LIU, K. A. MCCAIN, N. MATSUDA, A. YAMAGUCHI, M. KIMURA, N. TOMIOKA, M. ITO, M. UESUGI, N. IMAE, N. SHIRAI, T. OHIGASHI, R. C. GREENWOOD, K. UESUGI, A. NAKATO, K. YOGATA, H. YUZAWA, Y. KODAMA, K. HIRAHARA, I. SAKURAI, I. OKADA, Y. KAROUJI, S. NAKAZAWA, T. OKADA, T. SAIKI, S. TANAKA, F. TERUI, M. YOSHIKAWA, A. MIYAZAKI, M. NISHIMURA, T. YADA, M. ABE, T. USUI, S. WATANABE and Y. TSUDA, “Incorporation of ^{16}O -Rich Anhydrous Silicates in the Protolith of Highly Hydrated Asteroid Ryugu,” *Nat. Astron.* **6**(10), 1172–1177 (2022). DOI: 10.1038/s41550-022-01762-4

M. ITO, N. TOMIOKA, M. UESUGI, A. YAMAGUCHI, N. SHIRAI, T. OHIGASHI, M.-C. LIU, R. GREENWOOD, M. KIMURA, N. IMAE, K. UESUGI, A. NAKATO, K. YOGATA, H. YUZAWA, Y. KODAMA, A. TSUCHIYAMA, M. YASUTAKE, R. FINDLAY, I. FRANCHI, J. MALLEY, K. MCCAIN, N. MATSUDA, K. MCKEEGAN, K. HIRAHARA, A. TAKEUCHI, S. SEKIMOTO, I. SAKURAI, I. OKADA, Y. KAROUJI, M. ARAKAWA, A. FUJII, M. FUJIMOTO, M. HAYAKAWA, N. HIRATA, N. HIRATA, R. HONDA, C. HONDA, S. HOSODA, Y. IJIMA, H. IKEDA, M. ISHIGURO, Y. ISHIHARA, T. IWATA, K. KAWAHARA, S. KIKUCHI, K. KITAZATO, K. MATSUMOTO, M. MATSUOKA, T. MICHIKAMI, Y. MIMASU, A. MIURA, O. MORI, T. MOROTA, S. NAKAZAWA, N. NAMIKI, H. NODA, R. NOGUCHI, N. OGAWA, K. OGAWA, T. OKADA, C. OKAMOTO, G. ONO, M. OZAKI, T. SAIKI, N. SAKATANI, H. SAWADA, H. SENSU, Y. SHIMAKI, K. SHIRAI, S. SUGITA, Y. TAKEI, H. TAKEUCHI, S. TANAKA, E. TATSUMI, F. TERUI, R. TSUKIZAKI, K. WADA, M. YAMADA, T. YAMADA, Y. YAMAMOTO, H. YANO, Y. YOKOTA, K. YOSHIHARA, M. YOSHIKAWA, K. YOSHIKAWA, R. FUKAI, S. FURUYA, K. HATAKEDA, T. HAYASHI, Y. HITOMI, K. KUMAGAI, A. MIYAZAKI, M. NISHIMURA, H. SOEJIMA, A. IWAMAE, D. YAMAMOTO, M. YOSHITAKE, T. YADA, M. ABE, T. USUI, S. WATANABE and Y. TSUDA, “Hayabusa2 Returned Samples: A Unique and Pristine Record of Outer Solar System Materials from Asteroid Ryugu,” *Nat. Astron.* **6**, 1163–1171 (2022). DOI: 10.1038/s41550-022-01745-5

R. C. GREENWOOD, I. A. FRANCHI, R. FINDLAY, J. A. MALLEY, M. ITO, A. YAMAGUCHI, M. KIMURA, N. TOMIOKA, M. UESUGI, N. IMAE, N. SHIRAI, T. OHIGASHI, M.-C. LIU, K. A. MCCAIN, N. MATSUDA, K. D. MCKEEGAN, K. UESUGI, A. NAKATO, K. YOGATA, H. YUZAWA, Y. KODAMA, A. TSUCHIYAMA, M. YASUTAKE, K. HIRAHARA, A. TEKEUCHI, S. SEKIMOTO, I. SAKURAI, I. OKADA, Y. KAROUJI, S. NAKAZAWA, T. OKADA, T. SAIKI, S. TANAKA, F. TERUI, M. YOSHIKAWA, A. MIYAZAKI, M. NISHIMURA, T. YADA, M. ABE, T. USUI, S. WATANABE and Y. TSUDA, “Oxygen Isotope Analysis of Ryugu Particles: Fresh Evidence for Hydration of Earth by CI Chondrites,” *Nat. Astron.* **7**, 29–38 (2023).

K. A. MCCAIN, N. MATSUDA, M.-C. LIU, K. D. MCKEEGAN, A. YAMAGUCHI, M. KIMURA, N. TOMIOKA, M. ITO, N. IMAE, M. UESUGI, N. SHIRAI, T. OHIGASHI, R. C. GREENWOOD, K. UESUGI, A. NAKATO, K. YOGATA, H. YUZAWA, Y. KODAMA, K. HIRAHARA, I. SAKURAI, I. OKADA, Y. KAROUJI, S. NAKAZAWA, T. OKADA, T. SAIKI, S. TANAKA, F. TERUI, M. YOSHIKAWA, A. MIYAZAKI, M. NISHIMURA, T. YADA, M. ABE, T. USUI, S. WATANABE and Y. TSUDA, “Early Fluid Activity on Ryugu Inferred by Isotopic Analyses of Carbonates and Magnetite,” *Nat. Astron.* **7**, 309–317 (2023).

A. YAMAGUCHI, N. TOMIOKA, M. ITO, N. SHIRAI, M. KIMURA, R. C. GREENWOOD, M.-C. LIU, K. A. MCCAIN, N. MATSUDA, M. UESUGI, N. IMAE, T. OHIGASHI, K. UESUGI, A. NAKATO, K. YOGATA, H. YUZAWA, Y. KODAMA, K. HIRAHARA, I. SAKURAI, I. OKADA, Y. KAROUJI, S. NAKAZAWA, T. OKADA, T. SAIKI, S. TANAKA, F. TERUI, M. YOSHIKAWA, A. MIYAZAKI, M. NISHIMURA, T. YADA, M. ABE, T. USUI, S. WATANABE and Y. TSUDA, “Insight into Multi-Step Geological Evolution of C-Type Asteroids from Ryugu Particles,” *Nat. Astron.* **7**, 398–405 (2023).

W. ZHANG, E. HOSONO, D. ASAKURA, H. YUZAWA, T. OHIGASHI, M. KOBAYASHI, H. KIUCHI and Y. HARADA, “Chemical-State Distributions in Charged LiCoO₂ Cathode Particles Visualized by Soft X-Ray Spectromicroscopy,” *Sci. Rep.* **13**, 4639 (2023). DOI: 10.1038/s41598-023-30673-1

D. ASAKURA, E. HOSONO, M. KITAMURA, K. HORIBA, E. MAGOME, H. SETOYAMA, E. KOBAYASHI, H. YUZAWA, T. OHIGASHI, T. SAKAI, R. KANEGA, T. FUNAKI, Y. SATO and A. OHIRA, “Redox Reaction in Ti-Mn Redox Flow Battery Studied by X-Ray Absorption Spectroscopy,” *Chem. –Asian J.* **18**(1), e220201047 (2022). DOI: 10.1002/asia.202201047

B-4) 招待講演

大東琢治, 「軟 X 線顕微鏡のこれまでとこれから ナノバブルの化学状態分析への挑戦」, 日本マイクロ・ナノバブル学会第 10 回学術総会, 東北大学, 仙台, 2022 年 12 月.

大東琢治, 「A cosmic cradle for water and organic molecules; spectro-microscopic analysis in Hayabusa2 project」, 淡江大学, 台湾, 2023 年 3 月.

T. OHIGASHI, “A cosmic cradle for water and organic molecules; spectro-microscopic analysis in Hayabusa2 project,” Academia Sinica Seminar, Taipei (Taiwan), March 2023.

大東琢治, 「A cosmic cradle for water and organic molecules; spectro-microscopic analysis in Hayabusa2 project」, NSRRC (台湾), 2023 年 3 月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第 27 回日本放射光学学会年会シンポジウム組織委員会, 座長 (2022–2023).

SpectroNanoscopy Workshop, Organizing Committee (2014–).

X 線結像光学研究会幹事 (2015–).

理科教育活動

日本天文教育普及研究会講演「宇宙のゆりかご, 地球へ～はやぶさ 2 帰還試料の有機物分析」慶應大学日吉キャンパス (2022).

B-8) 大学等での講義, 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フィラー周囲の化学状態解析」, 大東琢治 (2017年度-2022年度).

C) 研究活動の課題と展望

タイヤゴムにおいて, その破断や損傷の主な原因の一つが, その形状変形の際に内部にかかる応力である。その化学的メカニズムおよび形状の変化の観察を行うため, in-situ で試料に引っ張り応力を印加するための, STXM 用の試料セルのテスト機の開発を行なった。現在, 問題点を改善すべく改良中であり, 今後のビームタイムにて実際に運用し, 分析研究を進める予定である。

惑星探査機はやぶさ2が小惑星リュウグウから持ち帰った試料について, STXM を用いて高分解能有機物分析を行ってきた。リュウグウ試料にはX線照射に対して非常に弱い有機物が含まれており, 特に有機物に対する観察時の試料ダメージが小さいとされるSTXMでも, その化学変化が確認されたため, その変化の過程の解明を行ってきた。この試料は2023年4月をもってJAXAに返還しており, 現在は研究成果を論文として執筆中である。

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）

萩原健太（特任研究員（IMSフェロー））

松田博之（特任研究員）

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・マルチモーダル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・スピン科学の応用展開

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。電子物性研究に適した 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 並行して全地球エネルギー・スピン分析器を考案し特許出願した。上記の MM は 3 \AA^{-1} までの波数空間の一括測定ができるため価電子帯研究で有効な運動エネルギー 36 eV 以下の領域では全地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 でも全地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 ($45\text{--}700 \text{ eV}$) 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。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。本年は「運動量分解光電子顕微鏡法」を新たに確立しグラファイトの単原子層ステップの可視化に成功し、プレスリリースを行った。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 や代表的層状物質 TaSe_2 , TiSe_2 の相転移前後の電子状態をとらえた。graphite 表面の単原子層ステップの顕微像の撮影に成功した (*Phys. Rev. B* 2022) は大きな前進である。新たに確立した顕微 ARPES/ARPES 顕微法の論文 (*J. Phys. Soc. Jpn.* 2022) は Editor's Choice に選定された。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

E. HASHIMOTO, K. TAMURA, H. YAMAGUCHI, T. WATANABE, F. MATSUI and S. KOH, “Characterization of Epitaxial CVD Graphene on Ir(111)/ α -Al₂O₃(0001) by Photoelectron Momentum Microscopy,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **61(SD)**, SD1015 (2022). DOI: 10.35848/1347-4065/ac4ad8

F. MATSUI and S. SUGA, “Coupling of k_z -Dispersing π Bands with Surface Localized States in Graphite,” *Phys. Rev. B* **105(23)**, 235126 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.105.235126

松井文彦, 「光電子運動量顕微鏡：局所フェルミオロジーと内殻共鳴」, *固体物理*, **57(7)**, 423 (2022).

F. MATSUI, Y. OKANO, H. MATSUDA, T. YANO, E. NAKAMURA, S. KERA and S. SUGA, “Domain-Resolved Photoelectron Microscopy and μ m-Scale Momentum-Resolved Photoelectron Spectroscopy of Graphite Armchair Edge Facet,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **91(9)**, 094703 (2022). DOI: 10.7566/JPSJ.91.094703

F. MATSUI, H. OTA, R. EGUCHI, H. GOTO, K. KOBAYASHI, J. AKIMITSU, H. OZAKI, T. NISHIOKA, K. KIMURA, K. HAYASHI, T. SHIMANO, N. HAPPO and Y. KUBOZONO, “Multiple-Site Ag Doping in Bi₂Se₃: Compositional Crossover from Substitution to Intercalation as Revealed by Photoelectron Diffraction and X-Ray Fluorescence Holography,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **264**, 147295 (2023). DOI: 10.1016/j.elspec.2023.147295

P. KRÜGER and F. MATSUI, “Observation and Theory of Strong Circular Dichroism in Angle-Resolved Photoemission from Graphite,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **258**, 147219 (2022). DOI: 10.1016/j.elspec.2022.147219

O. ENDO, F. MATSUI, S. KERA, W. J. CHUN, M. NAKAMURA, K. AMEMIYA and H. OZAKI, “Observation of Hole States at Perylene/Au(110) and Au(111) Interfaces,” *J. Phys. Chem. C* **126(37)**, 15971–15979 (2022). DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c04060

T. KATO, Y. LI, K. NAKAYAMA, Z. WANG, S. SOUMA, F. MATSUI, M. KITAMURA, K. HORIBA, H. KUMIGASHIRA, T. TAKAHASHI, Y. YAO and T. SATO, “Fermiology and Origin of T_c Enhancement in a Kagome Superconductor Cs(V_{1-x}Nb_x)₃Sb₅,” *Phys. Rev. Lett.* **129(20)**, 206402 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevLett.129.206402

N. V. VLADIMIROVA, A. S. FROLOV, J. SÁNCHEZ-BARRIGA, O. J. CLARK, F. MATSUI, D. YU USACHOV, M. MUNTWILER, C. CALLAERT, J. HADERMANN, V. S. NEUDACHINA, M. E. TAMM and L. V. YASHINA, “Occupancy of Lattice Positions Probed by X-Ray Photoelectron Diffraction: A Case Study of Tetradymite Topological Insulators,” *Surf. Interfaces* **36**, 102516 (2023). DOI: 10.1016/j.surfin.2022.102516

B-4) 招待講演

松井文彦, 「もう一つの顕微ARPES：光電子運動量顕微法 世界動向とUVSORの現状」, ナノテラスARPESシンポジウム, 仙台, 2023年2月.

松井文彦, 「UVSORにおける先端計測拠点構築：光電子運動量顕微鏡」, 日本表面真空学会中部支部研究会, 名古屋, 2022年11月.

F. MATSUI, “Photoelectron Momentum Microscope at UVSOR-III BL6U, Okazaki,” DESY PETRA-3 seminar, Hamburg (Germany), November 2022.

F. MATSUI, “Surface resonance and monoatomic step of graphite surface imaged by Photoelectron Momentum Microscope,” 14th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices ’22, Nago (Japan), October 2022.

B-5) 特許出願

EP4075475, “Spherical Aberration Adjustment Cathode Lens, Spherical Aberration Correction Electrostatic Lens, Electron Spectroscopy, and Photoemission Electron Microscope,” H. MATSUDA and F. MATSUI (National Institutes of Natural Sciences), 2020年.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面真空学会理事 (2021.5–2023).

日本放射光学会庶務幹事 (2021.9–2023).

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–).

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–).

日本学術振興会運営委員 (2022–2023).

学会誌編集委員

日本表面真空学会出版委員 (2013–).

B-8) 大学等での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「光物理」, 2022年7月–2022年8月.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「全角取り込み光電子分光法の開発」, 松田博之 (2021年度–2025年度).

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年度–2022年度).

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年度–2025年度).

B-11) 産学連携

共同研究, SPECS Surface Nano Analysis GmbH, 「Development of 2D-projection analyzers」, 松井文彦 (2022年度–2024年度).

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, 建設段階に入った。2020 年度は片方 (BL6U) での運用が始まった。2022 年度に 2D スピンフィルタを導入し, 9 月末にデータ取得開始にこぎつけた。2022 年度以降 2 本目のビームラインに接続, 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ている。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・第 3 回 (2022.10) 国際会議特別セッション共催に続き, 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）

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）
小山 正太郎（特別共同利用研究員）
三田 愛也（特別共同利用研究員）
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 Bi2213 の角度分解光電子分光測定を行った。Bi2223 では結晶構造に起因する 2 種類の CuO₂ 面（IP と OP）が存在し、それぞれに対応するバンド分散が観測できるが、運動量空間上でノードとアンチノードと呼ばれる領域を結ぶ中間領域において IP と OP バンドが交差し、その交差点においてバンド分散に異常が観測されることを発見した。二つの CuO₂ 面間での電子のホッピングや、種々の格子振動との結合を仮定したスペクトルのシミュレーションを行うことで、バンド分散の異常を再現できることが分かった。この結果は格子振動と電子の結合が、この系では重要であることを示唆している。また理論計算により、スピン揺らぎだけではなく格子振動も高温超伝導の実現に必要であるという、今回の観測結果を支持する結果を得ることができた。
- b) UVSOR BL5U では高効率スピン分解角度分解光電子分光測定の開発を進めている。これまで 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、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ている。ただし、測定時には頻繁にスピント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。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、スピント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。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

C. W. CHUANG, S. SOUMA, A. MORIYA, K. NAKAYAMA, A. IKEDA, M. KAWAGUCHI, K. OBATA, S. R. SAHA, H. TAKAHASHI, S. KITAGAWA, K. ISHIDA, K. TANAKA, M. KITAMURA, K. HORIBA, H. KUMIGASHIRA, T. TAKAHASHI, S. YONEZAWA, J. PAGLIONE, Y. MAENO and T. SATO, “Fermiology of a Topological Line-Nodal Compound CaSb_2 and Its Implication to Superconductivity: Angle-Resolved Photoemission Study,” *Phys. Rev. Mater.* **6(10)**, 104203 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.6.104203

T. SUMI, T. SENOO, M. HORIO, S. EL MOUSSAOUI, E. NAKAMURA, K. TANAKA, A. TSUKAMOTO and I. MATSUDA, “Element-Selective Magnetization States in a $\text{Gd}_{23}\text{Fe}_{67}\text{Co}_{10}$ Alloy, Probed by Soft X-Ray Resonant Magneto-Optical Kerr Effect,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **62(SB)**, 8001 (2022). DOI: 10.35848/1347-4065/aca3b1

T. KATO, Y. LI, T. KAWAKAMI, M. LIU, K. NAKAYAMA, Z. WANG, A. MORIYA, K. TANAKA, T. TAKAHASHI, Y. YAO and T. SATO, “Three-Dimensional Energy Gap and Origin of Charge-Density Wave in Kagome Superconductor KV_3Sb_5 ,” *Commun. Mater.* **3(1)**, 30 (9 pages) (2022). DOI: 10.1038/s43246-022-00255-1

T. NAKAMURA, T. NAKAYA, Y. OHTSUBO, H. SUGIHARA, K. TANAKA, R. YUKAWA, M. KITAMURA, H. KUMIGASHIRA, K. IMURA, H. S. SUZUKI, N. K. SATO and S. KIMURA, “Surface Valence Transition in SmS by Alkali Metal Adsorption,” *Phys. Rev. B* **107(4)**, L041102 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevB.107.L041102

S. ICHINOKURA, A. HEMMI, H. CUN, K. TANAKA, R. SHIMIZU, T. HITOSUGI, T. GREBER and T. HIRAHARA, “Efficiency of Electron Doping to Monolayer Hexagonal Boron Nitride by Alkali Metals,” *Appl. Phys. Lett.* **122(7)**, 071601 (2023). DOI: 10.1063/5.0140074

I. SUZUKI, S. KAWANISHI, K. TANAKA, T. OMATA and S. TANAKA, “Experimental Identification of Atomic Orbital Contributions to SnS Valence Band Using Polarization-Dependent Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy,” *Phys. Status Solidi B* **260(4)**, 2200408 (2023). DOI: 10.1002/pssb.202200408

C) 研究活動の課題と展望

開発中のスピン分解ARPESシステムは、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、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ている。ユーザー利用を目指して、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たが、電子レンズ系のパラメータ整備に時間がかかっている。できるだけ早期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。

光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

荒 木 暢（主任研究員）（2023年1月1日着任）

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：放射光科学

A-2) 研究課題：

- a) Scanning Transmission X-Ray Microscopy (STXM) ビームラインにおける他の検出方法の検討
- b) STXM を用いた応用研究とそのための試料環境開発
- c) Resonant Soft X-Ray Scattering/Reflectivity (RSOXS/R) 及び STXM の生命科学研究への適用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) Swiss Light Source と共同で AFM と STXM を組み合わせた装置の導入およびその周辺技術の検討を行なった。
- b) 上記に関係して、ユーザー及び Swiss Light Source との共同開発研究に関する打ち合わせを行った。2023年1月に着任以来、前任者（今年度クロスアポイントメント）の大東氏からの引き継ぎを行って来た。ビームライン・エンドステーションの現状と民間利用も含めたユーザーサイエンスの把握に努めつつ、ユーザー実験のサポートを行なった。
- c) 両手法を軸にした UVSOR における生命科学研究を岡崎3機関連携のもとで進めるための準備を行なってきた。1月行なった研究会では、両手法の生命科学への適用を念頭においた解説を行い、その後、個別の議論・テスト実験も行なった。また、昨年11月に日本における RSOXS/R の普及と発展を目指して、関係する放射光施設及びユーザーとこの手法をリードしている米国 Advanced Light Source の Dr. Cheng Wang 氏による講演を内容とする研究会を開催した。

B-1) 学術論文

D. M. BUCHANAN, L. NEWSOME, J. R. LLOYD, M. KAZEMIAN, B. KAULICH, T. ARAKI, H. BAGSHAW, J. WATERS, G. VAN DER LAAN, A. N'DIAYE and V. S. COKER, “Investigating Nanoscale Electron Transfer Processes at the Cell-Mineral Interface in Cobalt-Doped Ferrihydrite Using *Geobacter sulfurreducens*: A Multi-Technique Approach,” *Front. Earth Sci.* **10**, 799328 (2022). DOI: 10.3389/feart.2022.799328

A. DYBOWSKA, P. F. SCHOFIELD, L. NEWSOME, R. J. HERRINGTON, J. F. W. MOSSELMANS, B. KAULICH, M. KAZEMIAN, T. ARAKI, T. J. SKIGGS, J. KRUGER, A. OXLEY, R. L. NORMAN and J. R. LLOYD, “Evolution of the Piauí Laterite, Brazil: Mineralogical, Geochemical and Geomicrobiological Mechanisms for Cobalt and Nickel Enrichment,” *Minerals* **12(10)**, 1298 (2022). DOI: 10.3390/min12101298

B-4) 招待講演

荒木 暢,「世界の軟X線イメージングの現状」,第36回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム特別企画講演「いよいよ動き出す NanoTerasu——整備状況とサイエンスの展開——」,草津市,2023年1月.

荒木 暢,「マルチプローブを用いたソフト界面解析技術～量子ビームの枠を超えたマルチプローブ実験の普及を目指して」,CIQuS 研究会,つくば市,2023年3月.

B-8) 大学等での講義, 客員

Diamond Light Source, Visiting Scientist, 2023年-.

岩 山 洋 士 (助教) (2010 年 4 月 1 日着任)

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) 共鳴軟X線散乱の開発を通して、ポリマーや液晶などを含むソフトマターのメゾスコピック領域の構造解析技術の開発を行っている。ソフトマターは様々な空間スケールで階層構造を持つ物質であり、特に数 nm から数 100 nm のメゾスコピック領域の構造が、その物質のマクロな性質を理解するうえで重要である。このようなメゾスコピック領域の構造解析法として従来X線小角散乱が広く用いられているが、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、平均原子番号の近い化学種ごとの構造解析は難しい。そのため、ポリマーブレンドなどの異なる化学種の複合材に対しては、化学種を選別したメゾスコピック領域の構造解析法が開発が望まれている。共鳴軟X線散乱法は、化学種ごとに内殻共鳴エネルギーが異なることを利用し、放射光軟X線を用い化学種ごとの構造解析を可能とする。本グループでは2020年度より共鳴軟X線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、本共鳴軟X線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。本年度は、観測装置の高度化に取り組み、軟X線用の in-vacuum CMOS カメラを用いた検出器回転型の散乱光観測装置の設計・開発を行った。本測定器では、真空チャンバー内で散乱角 2θ 方向に検出器が可動することで、広い散乱角 1° から 60° までを観測できる。これは炭素の内殻共鳴エネルギー 285 eV (波長 4.4 nm) 付近において、散乱ベクトル 0.02 nm⁻¹ から 1.2 nm⁻¹、空間スケールにおいて 5 nm から 300 nm の範囲で構造解析が可能なことに対応する。2023年度より立ち上げ・稼働する予定である。
- b) X線自由電子レーザー SACLA BL1 を利用した液体試料用のポンプ・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。これまでの実験結果により高強度のポンプ光によりメンブレンが破損することが明らかになり、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。また発光分光器の回折格子を更新し、エネルギー分解能 $E/\Delta E$ を 2000 まで向上させた。今後、超薄膜フラットジェットおよび発光分光器を用いた、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

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 CO₂,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24(2)**, 1131–1146 (2022). DOI: 10.1039/d1cp03947d

T. KANEYASU, M. HOSAKA, A. MANO, Y. TAKASHIMA, M. FUJIMOTO, E. SALEHI, H. IWAYAMA, Y. HIKOSAKA and M. KATO, “Double-Pulsed Wave Packets in Spontaneous Radiation from a Tandem Undulator,” *Sci. Rep.* **12(1)**, 9682 (2022). DOI: 10.1038/s41598-022-13684-2

K. KAWAGUCHI, T. MIYAMACHI, T. GOZLINSKI, T. IIMORI, Y. TAKAHASHI, T. HATTORI, K. YAMAMOTO, T. KOITAYA, H. IWAYAMA, O. ISHIYAMA, E. NAKAMURA, M. KOTSUGI, W. WULFHEKEL, T. YOKOYAMA and F. KOMORI, “Layer-Resolved Magnetic Moments in N-Surfactant Assisted FeNi Ordered Alloy Thin Films,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **61(SL)**, SL1001 (2022). DOI: 10.35848/1347-4065/ac66c1

Y. TAKANISHI, F. ARAOKA and H. IWAYAMA, “The Effect of the Structure of a Helical Nanofilament of the B4 Phase of Bent-Core Liquid Crystals on the Nano-Phase Separation Mixed with a Rod-Like Cholesteric Liquid Crystal Mixture,” *RSC Adv.* **12(45)**, 29346–29349 (2022). DOI: 10.1039/d2ra03316j

J. J. LEE, S. KIM, H. NISHIKAWA, Y. TAKANISHI, H. IWAYAMA, C. KIM, S. W. CHOI and F. ARAOKA, “Chiroptical Performances in Self-Assembled Hierarchical Nanosegregated Chiral Intermediate Phases Composed of Two Different Achiral Bent-Core Molecules,” *Int. J. Mol. Sci.* **23(23)**, 14629 (2022). DOI: 10.3390/ijms232314629

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–).

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所, 客員研究員, 2022年4月–2023年3月.

6-6 物質分子科学研究領域

電子構造研究部門

横山 利彦 (教授) (2002年1月1日着任)

小坂谷 貴典 (助教)

山本 航平 (助教)

倉橋 直也 (特任助教 (分子科学研究所特別研究員))

BUTTIENS, Thomas (インターンシップ)

小林 明斗 (特別共同利用研究員)

石川 あずさ (事務支援員)

栗田 佳子 (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線磁気円二色性などを用いた磁性薄膜の磁気構造解析
- c) X線吸収分光を用いた機能合金の局所構造と熱的性質

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不均一触媒の反応進行中のオペランド観測を行っている。本設備は NEDO 燃料電池プロジェクトにより導入され、固体高分子形燃料電池 (PEFC) 電極触媒の in situ 測定を行っていたが、NEDO 終了後は、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ものである。
- b) 分子研シンクロトン放射光施設 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ところである。
- c) X線吸収分光を用いて、強磁性などの機能を発現する合金の局所構造と熱的性質を理論計算を含めて検討している。

B-1) 学術論文

T. YOKOYAMA, "Metallic Bonds and Thermal Vibration in Brass," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **25**, 3413–3419 (2023). DOI: 10.1039/D2CP05035H

K. KAWAGUCHI, T. MIYAMACHI, T. GOZLINSKI, T. IIMORI, Y. TAKAHASHI, T. HATTORI, K. YAMAMOTO, T. KOITAYA, H. IWAYAMA, O. ISHIYAMA, E. NAKAMURA, M. KOTSUGI, W. WULFHEKEL, T. YOKOYAMA and F. KOMORI, "Layer-Resolved Magnetic Moments in N-Surfactant Assisted FeNi Ordered Alloy Thin Films," *Jpn. J. Appl. Phys.* **61(SL)**, SL1001 (2022). DOI: 10.35848/1347-4065/ac66c1

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, “Stacking of a Cofacially Stacked Iron Phthalocyanine Dimer on Graphite Achieved High Catalytic CH₄ Oxidation Activity Comparable to That of pMMO,” *JACS Au* **3**, 823–833 (2023). DOI: 10.1021/jacsau.2c00618

K. YAMAMOTO, T. TSUYAMA, S. ITO, K. TAKUBO, I. MATSUDA, N. PONTIUS, C. SCHÜSSLER-LANGEHEINE, M. MINOHARA, H. KUMIGASHIRA, Y. YAMASAKI, H. NAKAO, Y. MURAKAMI, T. KATASE, T. KAMIYA and H. WADATI, “Photoinduced Transient States of Antiferromagnetic Orderings in La_{1/3}Sr_{2/3}FeO₃ and SrFeO_{3-δ} Thin Films Observed through Time-Resolved Resonant Soft X-Ray Scattering,” *New J. Phys.* **24(4)**, 043012 (2022). DOI: 10.1088/1367-2630/ac5f31

Y. ZHANG, T. KATAYAMA, A. CHIKAMATSU, C. SCHÜSSLER-LANGEHEINE, N. PONTIUS, Y. HIRATA, K. TAKUBO, K. YAMAGAMI, K. IKEDA, K. YAMAMOTO, T. HASEGAWA and H. WADATI, “Photo-Induced Antiferromagnetic-Ferromagnetic and Spin-State Transition in a Double-Perovskite Cobalt Oxide Thin Film,” *Commun. Phys.* **5(1)**, 50 (2022). DOI: 10.1038/s42005-022-00823-4

B-2) 国際会議のプロシーディングス

H. T. FUJII, N. SAKAGUCHI, K. ONA, F. URAGUCHI, Y. HAYANO and T. YOKOYAMA, “Low Thermal Expansion at Cryogenic Temperature in Fe_{39-x}Co_{49+x}Cr₁₀Ni₂ Alloy Used for Astronomical Telescopes,” *Proc. SPIE, Advances in Optical and Mechanical Technologies for Telescopes and Instrumentation V*, 1218806 (2022). DOI: 10.1117/12.2626196

B-3) 総説、著書

高木康多, 横山利彦, 「大気圧硬X線光電子分光による燃料電池電極の触媒反応分析」, *放射光*, **35(3)**, 191–199 (2022).
S. YAMAMOTO, Y. TAKAGI, T. KOITAYA, R. TOYOSHIMA, M. HORIO, I. MATSUDA, H. KONDOH, T. YOKOYAMA and J. YOSHINOBU, “Materials Science Research by Ambient Pressure X-Ray Photoelectron Spectroscopy Systems at Synchrotron Radiation Facilities in Japan: Applications in Energy, Catalysis, and Sensors,” *Synchrotron Radiat. News* **35(3)**, 19–25 (2022). DOI: 10.1080/08940886.2022.2082168

B-4) 招待講演

横山利彦, 「燃料電池のその場X線光電子分光と次世代放射光への期待」, 触媒学会次世代放射光WG 公開シンポジウム, 仙台, 2022年6月.

横山利彦, 「雰囲気制御硬X線光電子分光と燃料電池・触媒反応その場観察への応用」, 2022年度立命館大学SRセンター研究成果報告会, 草津, 2022年9月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会会長 (2021.10–2023.9).

日本放射光学会評議員 (2020–2022).

触媒学会次世代放射光ワーキンググループ委員 (2021–2022). (小坂谷貴典)

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-).

北海道大学触媒研究所 触媒科学計測共同研究拠点運営委員会委員 (2022-2023).

その他

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 (2021-2031).

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 (2022-2031).

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), 小坂谷貴典(研究分担者), 山本航平(研究分担者) (2021年度-2023年度).

科研費基盤研究(C), 「オペランド分光測定による二酸化炭素の電気化学還元反応機構の解明」, 小坂谷貴典 (2022年度-2024年度).

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年度-2023年度).

C) 研究活動の課題と展望

2002年1月着任以降, 磁性薄膜の表面分子科学的制御と新しい磁気光学分光法の開発を主テーマとして, 高磁場極低温X線磁気円二色性(UVSOR)や紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の発明, 広域X線吸収微細構造(EXAFS)法と経路積分法によるインバー等磁性合金の熱膨張などで成果を上げてきた。2011年度から, SPring-8の超高輝度硬X線を利用した燃料電池のin situ 雰囲気制御型硬X線光電子分光の開発を行い, 2017年度には完全大気圧での光電子分光観測に世界で初めて成功した。光電子分光は, 燃料電池中の各構成成分の電位を電極なしに観測可能な有効手法であることを示し, 今後もこれを中心課題に据えた研究を推進する。さらに, 2013年度からは放射光やX線自由電子レーザーを用いた(超)高速時間分解X線吸収法の開発的研究を行ってきた。2022年度は, SPring-8を用いた雰囲気制御光電子分光等を用いた表面化学反応研究, UVSORを利用した共鳴X線磁気散乱による磁性薄膜解析, KEK-PFを用いた合金のEXAFS局所構造解析等を行った。本年度は2022年8月に小坂谷助教が転出, 2023年4月に山本助教が転出(予定), 2022年12月に倉橋特任助教が着任, もう1名の特任助教を公募中であり, 人の移動が激しかった。退職まで3年であるが, 非弾性共鳴X線散乱等を視野に入れた新たな展開を検討中である。

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)
市井 智章 (特任研究員)
高橋 翔太 (特任研究員)
鶴岡 和幸 (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 (大学院生)
金 成翔 (大学院生)
吉澤 龍 (大学院生)
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) メタン活性化光触媒反応系における新奇な水・金属助触媒効果の発見
- b) 高感度ラマン分光計測法の開発と電子非共鳴・表面プラズモン共鳴から脱却した表面分子吸着系の汎用的ラマン観測の実現
- c) 高次非線形分光法の開発と埋没界面フォノン・分子観測への応用
- d) 二次非線形極微分光法の開発と金属ナノギャップにおける局所・非局所非線形光学応答現象の発見

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 天然ガス中に豊富に含まれる資源であるメタン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。我々は、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たところ、水分子吸着層の厚さが二分子層程度の時にメタンの非酸化カップリング ($2\text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6 + \text{H}_2$) によるエタン生成効率が顕著に増大することを見出した。このメタンカップリング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メチルラジカルを効率的に生成させ ($\text{CH}_4 + \text{OD} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{HDO}$)、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 ($2\text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$) 事を突き止めた [Sato *et al.*, *Communications Chemistry* **6**, 8 (2023)]。また、我々は、Pt や Pd などの種々の金属助触媒を用いてメタン活性化光触媒反応を系統的調べ、更に表面反応場のオペランド赤外分光計測を行うことにより、担持する金属種に依存してメタンと水の混合系における完全酸化種・部分酸化種の生成（反応選択性）が大きく変調され、さらに金属助触媒が正孔を補足し酸化されることを明らかにした。一般に、光触媒分野において金属助触媒は光誘起電子を補足し還元反応を促進することが想定されている。したがって、我々は、還元反応場としての従来の定説を超えて金属助触媒が酸化反応場としても機能していることを世界初で見出した [Sato *et al.*, 論文投稿中]。

- b) 二つの光の差周波の喰りによって分子振動を共鳴励起（強制振動）させる非線形ラマン分光法に着目し、MHz 高繰り返しフェムト秒レーザーをベースとして時間的に非対称なパルス波形の成形とパルス遅延の精密制御を導入することで、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かつ高感度にラマン活性モードの観測を可能とする新しい界面非線形分子分光法を開発した。この新規方法論により、三次非線形ラマン分光法を表面界面系に適用する際に問題となるバルク由来の非共鳴バックグラウンド信号を4桁以上低減させることが可能となった。これにより、我々は代表的な金属・絶縁体の表面分子系として Pt(111)・Au(111)・SiO₂(0001) 基板表面に吸着した水分子の超薄膜やサブナノメートル薄さの自己組織化単分子膜の計測に成功した [論文2 報準備・投稿中, Haruyama *et al.*, *Vac. Surf. Sci.* **65**, 355 (2022)]。とりわけ、水分子超薄膜系においては、協同的な水素結合揺らぎに起因するラマン活性モードの観測・解析から 100 K ~ 150 K の温度領域においてアモルファスの水素結合ネットワークが結晶化する挙動を捉えることに成功し、自己組織化単分子膜においても集合構造の違いに起因した低振動数・高振動数ラマン活性モードを捉えることに成功した [Ichii *et al.*, 論文投稿中]。
- c) 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喰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法を展開し始めている。特に、この手法を用いて、空間反転対称性が無い水晶 (SiO₂) 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なく、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。また、バルク水晶に埋没した界面振動モードの観測に成功した [Yoshizawa *et al.*, 論文準備中]。
- 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極微分光法 (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。その要素技術として、①先端形状を制御したプラズモニック Au ナノ探針の作成 [Mochizuki *et al.*, 論文準備中], 及び②光の回折限界以下のナノ探針先端領域からの STM 発光及び探針増強ラマン信号の検知, に成功してきた。現在、我々は数 10MHz オーダーの高繰り返しレーザー光源を用いた赤外波長可変 OPO システムとの融合を経て、可視域から中赤外領域にわたる幅広い波長領域において Au ナノ探針 - Au(111) 基板間のナノギャップにおける二次非線形光学応答の計測に成功するに至った。その結果、プラズモン共鳴に有利な可視域よりもむしろ赤外領域の光入射においてナノギャップから強く第二高調波が発生するという特異な近接場非線形光学応答を見出した [Takahashi, Sakurai *et al.*, 論文準備中]。この特異な近接場非線形光学応答を把握し制御・高度利活用することにより、現在、ナノギャップに配置した種々のモデル分子の近接場和周波発生 (振動共鳴) 信号の検出にも成功し始めている [Sakurai *et al.*, 論文準備中]。

B-1) 学術論文

H. SATO, A. ISHIKAWA, H. SAITO, T. HIGASHI, K. TAKEYASU and T. SUGIMOTO, “Critical Impacts of Interfacial Water on C-H Activation in Photocatalytic Methane Conversion,” *Commun. Chem.* **6(1)**, 8 (2023). DOI: 10.1038/s42004-022-00803-3

J. HARUYAMA, T. SUGIMOTO and O. SUGINO, “First-Principles Study for the Structures of Pt(111)/H₂O Adsorption Layer,” *Vac. Surf. Sci.* **65(8)**, 355–360 (2022). DOI: 10.1380/vss.65.355 (in Japanese)

B-3) 総説, 著書

M. YAMAUCHI, H. SAITO, T. SUGIMOTO, S. MORI and S. SAITO, “Sustainable Organic Synthesis Promoted on Titanium Dioxide Using Coordinated Water and Renewable Energies/Resources,” *Coord. Chem. Rev.* **472**, 214773 (2022). DOI: 10.1016/j.ccr.2022.214773

B-4) 招待講演

杉本敏樹, 「実触媒科学と表面科学を融合させるオペランド分光研究の挑戦」, 触媒学会若手会「第33回フレッシュマンゼミナール」, オンライン開催, 2022年5月.

杉本敏樹, 「和周波発生振動分光法で拓く物質表面界面における水分子の特異構造・機能物性化学」, 三井化学分析センター技術交流会, 千葉, 袖ヶ浦, 2022年11月.

杉本敏樹, 「固体表面水分子凝集系の構造物性に迫る非線形振動分光」, 量子科学技術研究開発機構セミナー, 奈良, 2023年2月.

T. SUGIMOTO, “Elucidation of H-up/H-down Orientation of Water Molecules in Interfacial Hydrogen-Bond Network: Non-Linear Molecular Spectroscopy of Water Adsorbed on Metal Surfaces,” 18th International Conference on Diffusion in Solids and Liquids (DSL-2022), Online, June 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

8th Asian Spectroscopy Conference (ASC2021), Organizing committee (2019–2024).

International Workshop on Nonlinear Optics at Interfaces 2023, Conference vice Chair (2019–2024).

表面界面スペクトロスコープ 2022研究会主催 (2022).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

文部科学省学術調査官 (2021–2023).

JST 研究開発戦略センター (CRDS) 材料科学分野俯瞰ワークショップグループリーダー (2023).

その他

分子科学若手の会夏の学校分子科学研究所対応者 (2018–).

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所, 客員研究員, 2021年4月–2024年3月.

B-9) 学位授与

佐藤宏祐, 「オペランド分光計測に基づく光触媒メタン転換反応の微視的メカニズム解明」, 2023年3月, 博士(理学).

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).

科研費基盤研究(A),「新原理高次非線形分光法で拓く未踏の電気化学固液ナノ界面水研究」,杉本敏樹(2022年度-2024年度).

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

科学技術振興機構CREST研究(受託研究),「in-situ 高次非線形分光によるアップサイクリング反応場観測」(代表:斎藤 進),杉本敏樹(共同研究者)(2022年度-2027年度).

早稲田大学環境省委託事業「地域資源循環を通じた脱炭素化に向けた革新的触媒技術の開発・実証事業」(受託研究),「革新的多元素ナノ合金触媒・反応場活用による省エネ地域資源循環を実現する技術開発(非在来型触媒反応による次世代プロセス開発と学理構築)」(代表:関根 泰),杉本敏樹(共同実施者)(2022年度-2029年度).

C) 研究活動の課題と展望

表面界面系の分子計測法の限界突破を目指し,従来の手法では困難であった「①プラズモン共鳴・電子共鳴が利用できない表面界面少数分子系に対しても汎用的に振動分光計測を可能とする新しい非線形分光計測法の開発」,並びに「②光の回折限界以下のナノスケールで表面界面分子系の観測を可能とする新たな極微非線形分光法の開発」に従事してきた。また,こうした地道かつ先進的な手法開発・挑戦と同時平行的に,「③光触媒微粒子をはじめとする複雑な実材料系の表面界面分子科学現象の開拓」にも取り組んできた。2018年5月に当研究室が発足してからの4年間において,これら3つの基軸で挑戦してきた分野先導的な試みは芽を出し大きく開花しつつあり,現在,それぞれにおいて相当規模の競争的資金の獲得と共に共同研究もすすんできている。

今後は,これまで独立に挑戦してきたこれら3つの取り組みをさらに高度に融合させていくことにも注力し,従来の実験手法で開拓・解明が困難であった未踏の表面界面系領域や実材料系・複雑系界面の分子科学を力強く開拓する。また,それと同時並行的に,このような先端的な計測研究を産学官緊密連携の下で大きく発展・応用させることにより,『表面界面エンジニアリング』・『界面分子戦略』に基づく革新的な材料創製・新技術創出に向けた大きな原動力・研究潮流を作り出し,環境・エネルギー分野をはじめとし人類が直面する重要な社会課題の解決に貢献する。

分子機能研究部門

平 本 昌 宏 (教授) (2008年4月1日～2023年3月31日)*)

伊澤 誠一郎 (助教)

足立 和宏 (研究員 (派遣))

藪谷 和樹 (研究員 (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) ドーピング有機単結晶基板の開発
- c) 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，スピニング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。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赤色発光できる，世界最小電圧で駆動する有機 EL の開発に成功した。さらに最近，この UC 発光を，新たな材料系に展開し，超低電圧駆動の青色有機 EL を開発した。用いた材料系は，青色発光体・ドナー材料はアントラセン誘導体，アクセプター材料はナフタレンジイミド誘導体，蛍光ドーパントはペリレン誘導体である。この青色 UC-OLED は 462 nm (2.68 eV) にピーク波長をもつ EL 発光を示した。このデバイスは，光エネルギーに相当する電圧の約半分程度である 1.26 V から発光が開始し，1 cd/m² には 1.47 V，100 cd/m² には 1.97 V で到達するという超低電圧での青色発光を示した。その結果，1.5 V の乾電池を 1 本つなぐだけで青色発光が観測できるデバイスの開発に成功した。
- b) 熱拡散法によって，ルブレン単結晶へアクセプター (F4-TCNQ) をドーピングする初の試みを行った。単結晶表面に F4-TCNQ を 2 nm または 20 nm 蒸着し，真空中 60 °C で加熱すると加熱時間 30 分以内で拡散が完了し，ルブレン単結晶の厚さ (c 軸) 方向の比伝導度は，1 × 10⁻⁷ から 2 × 10⁻² Scm⁻¹ に 10 万倍以上増大し，60 Acm⁻² に達する非常に大きな電流を流すことができた。これはホール濃度が 10¹⁰ cm⁻³ から 10¹⁸ cm⁻³ まで増大したためである。ドーピン

グ効率は最大 55% が得られた。今後、この低抵抗ドーピング有機単結晶基板の上に、太陽電池、トランジスタなどの有機デバイスを作製することを考えている。

- c) 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 cm²/Vs）と PTCDI-C8（電子移動度：1.7 cm²/Vs）を積層した 2 層セルを作製し、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

S. IZAWA, M. MORIMOTO, S. NAKA and M. HIRAMOTO, “Spatial Distribution of Triplet Exciton Forming from Charge Transfer State at Donor/Acceptor Interface,” *J. Mater. Chem. A* **10(37)**, 19935–19940 (2022). DOI: 10.1039/d2ta02068h

H. UENO, D. KITABATAKE, H. LIN, Y. MA, I. JEON, S. IZAWA, M. HIRAMOTO, F. MISAIZU, S. MARUYAMA and Y. MATSUO, “Synthesis of Neutral Li-Endohedral PCBM: An n-Dopant for Fullerene Derivatives,” *Chem. Commun.* **58(73)**, 10190–10193 (2022). DOI: 10.1039/d2cc03678a

Y. SAKAMOTO, S. IZAWA, H. OHKITA, M. HIRAMOTO and Y. TAMAI, “Triplet Sensitization via Charge Recombination at Organic Heterojunction for Efficient Near-Infrared to Visible Solid-State Photon Upconversion,” *Commun. Mater.* **3(1)**, 76 (2022). DOI: 10.1038/s43246-022-00300-z

B-3) 総説、著書

M. HIRAMOTO, “Organic Photocurrent Multiplication,” *Series; Electronic Materials: Science & Technology*, Springer Nature, 225 pages (2023).

伊澤誠一郎, 森本勝大, 「世界最小電圧で発光する有機ELの開発」, *クリーンエネルギー*, **5**, 33 (2022).

伊澤誠一郎, 森本勝大, 「乾電池 1 本で高輝度発光する有機ELの開発」, *月刊機能材料*, **8**, 28–35 (2022).

B-4) 招待講演

平本昌宏, 「新しいフェーズに入った有機太陽電池」, 有機太陽電池研究コンソーシアム定例研究会「次世代太陽電池と有機太陽電池の可能性」, 京都, 2022年11月.

平本昌宏, 「新しいフェーズに入った有機太陽電池」, 高分子学会有機エレクトロニクス研究会「カーボンニュートラル実現に向けた有機薄膜太陽電池の新展開」, 広島, 2022年12月.

平本昌宏, 「新しいフェーズに入った有機太陽電池」, 電子情報通信学会有機エレクトロニクス研究会 (OME), 日間賀島, 南知多町 (愛知), 2023年1月.

平本昌宏, 「有機半導体光電変換デバイスの発展と未来」, 応用物理学会 2023年春季学術講演会シンポジウム「有機半導体デバイスの現在・過去・未来：光電変換を中心として」, 東京, 2023年3月.

伊澤誠一郎, 「有機半導体界面を利用した光機能・デバイスの創出」, *Material Science Seminar 2022*, 仙台, 2022年5月.

伊澤誠一郎, 「有機半導体界面を舞台にした高効率光エネルギー変換」, *InterOpto2022*, 東京, 2022年6月.

伊澤誠一郎,「有機半導体界面での電荷移動状態を利用した光アップコンバージョン」,第24回分子性固体オンラインセミナー,オンライン開催,2022年8月.

M. HIRAMOTO, “Carrier generation in high-mobility organic semiconductors,” 13th International Conference on Nano-Molecular Electronics (ICNME2022), Tokyo (Japan), December 2022.

S. IZAWA, “Efficient Interfacial Upconversion Emission in Organic Semiconductor Devices,” 12th International Symposium on Organic Molecular Electronics, Tokyo, May 2022.

S. IZAWA, “Efficient Solid-State Photon Upconversion Enabled by Triplet Formation at Organic Semiconductor Interface,” 241st Meeting of the Electrochemical Society, Vancouver (Canada), May 2022.

B-5) 特許出願

PCT/JP2022/016598,「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),2022年.

B-6) 受賞,表彰

S. IZAWA, *Journal of Materials Chemistry A*, Emerging Investigators (2022).

伊澤誠一郎,自然科学研究機構若手研究者賞(2022).

伊澤誠一郎,分子科学研究奨励森野基金(2022).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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

応用物理学会 Multidisciplinary Young Researcher Chapter 副代表(2020-). (伊澤誠一郎)

学会の組織委員等

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

学会誌編集委員

Organic Solar Cells Energetic and Nanostructural Design, Springer Editor (2020–2021).

Organic Solar Cells Energetic and Nanostructural Design, Springer Editor (2020–2021). (伊澤誠一郎)

Special Issue “Organic Solar Cell and Optoelectronic Functional Materials,” *Materials* Co-Guest Editor (2020-). (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グラム「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(2021.4–2023).

B-10) 競争的資金

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年度–2022年度).

科研費若手研究,「有機半導体界面でのスピン反転機構を利用した光機能の創出」,伊澤 誠一郎(2022年度-2023年度).
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年度-2022年度).

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),伊澤誠一郎(研究分担者)(2021年度-2023年度).

C) 研究活動の課題と展望

平本は, 研究員1名を雇用し, 「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, 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み, 2023年1月1日付けで, 東京工業大学フロンティア材料研究所の准教授として転出した。平本は, *Springer Nature* に, “Organic Photocurrent Multiplication” のタイトルで英語本の執筆を完了しており, 今年中に出版予定である。平本は2023.3.31付けで定年退職となるため, 平本グループの装置類を, 主に, 伊澤助教の転出先である東工大に移設し, 3月初めに全ての装置類の譲渡, 廃棄が完了した。

*) 2023年3月31日定年退職

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¹³C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) 固体NMRによる糖鎖脂質含有脂質二重膜上で誘起されるアミロイドβの会合状態の解析
- e) 固体NMRによる有機分子材料の解析
- f) 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¹³Cを観測して，高い分子運動性を示す液晶相における脂質分子の¹³C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，有効性の確認まで完了している。さらに信号重複が激しい部位に関して正確な信号帰属を達成するため，上記の新規測定法の拡張版を検討中である。
- 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(PrP^C)の高次構造がβシートリッチな感染型(PrP^{Sc})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，1D¹³C固体NMRによる解析を行った。現在測定結果の解析，検討を行っている。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の内，良く研究されている熱耐性が非常に高いsecretory abundant heat soluble (SAHS)タンパク質の乾燥状態での分子構造を固体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。改良型試料調製法により調製した特定残基のみ¹³C全安定同位体標識したSAHSタンパク質試料，さらに複数の変異体型同タンパク質試料に2次元¹³C同種核間相関固体NMR測定法などを適用し，信号帰属を完了した。さらに同タンパク質の二次構造変化の検証を完了した。
- d) これまでアルツハイマー型認知症の発症への関与が示唆されるアミロイドβ(Aβ)の糖鎖脂質GM1含有脂質二重膜上での固体NMRを用いた構造解析を行ってきた。同研究の学術論文の投稿において，同タンパク質と脂質膜の直接的な相互作用の固体NMRによる解析結果の要求が生じたため，paramagnetic relaxation enhancement (PRE)を用いた方法で，以前行った手法とは異なるアプローチでAβが脂質膜面に存在していることを実証する実験を行い，その立証に成功した。

- e) 分子科学研究所の瀬川泰知准教授のグループで独自に合成された有機分子の状態解析を固体 NMR を用いて行っている。¹H 核が少ないことから天然存在比同位体観測による構造同定は有効な手法が限られており、十分な情報が得られていない。現在、¹³C 核を中心に他核種の検討も行っている。
- f) 現在使用している Bruker 社製分光器, および周辺機器と完全互換性を有する独自の固体 NMR プロープの開発を行ってきた。本プロープでは、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。自作のスピニングモジュールは、メーカー純正の自動回転コントローラーを用いて同社市販品と同一の最高回転周波数を達成した。更に、自作のマニュアル回転コントローラーで独自の圧力変数を用いることにより市販品の最高回転周波数を超える周波数で安定的に回転可能であるところまで確認を完了した。しかし、著しい高速回転テストを行った際、クラッシュして一部部品が破損したため、市販品を超える高速域での回転安定性の向上, および更なる最高回転周波数の向上をめざして 2 種類の改良版の再設計しテストを行った。再度のクラッシュの後、独自に達成した回転周波数領域では、市販の試料管の材料であるジルコニアの材料強度が不足していることが判明した。このため、より高強度な材料を用いた試料管を作成しない限り、遠心力による試料管の破壊が生じることが判明した。現在、これまでと同様の完全互換版と独自仕様の 2 種類の異なる設計でスピニングモジュールの開発を進めている。

B-8) 大学等での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 講義「機能生体分子科学」, 2023 年 1 月.

C) 研究活動の課題と展望

独自開発プロープ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。過去 2 年程、最難関のスピニングモジュールの開発を行ってきたが、遂に純正コントローラーを用いて市販品と同じ最高回転周波数を達成することができた。さらに市販品を超えた最高回転周波数を独自条件で達成できた。現状の設計で、同一試料管外径で世界最高速を達成している。しかし、独自に達成した高回転速度域では試料管の素材であるジルコニアの材料強度が不足していることが判明した。このため、より高い強度を持つ素材を用いて市販品と同一形状の試料管を作成する必要がある。更なる回転周波数の向上は可能であるが、元々市販品と完全互換のスピニングモジュールの開発を行ってきたため全て独自に作成するのであればより効率を追求したオリジナルの試料管, およびスピニングモジュールの開発を行う方が良く、開発を完全オリジナルと互換版の 2 つに分けて行う予定である。これまで何年間か、上述のような性質の異なる全ての作業を一人で行ってきたが、生産性に限界があり、特に新規試料の調製初期段階では多くの地道な作業が必要である為、試料調製を担う有能なスタッフを渴望しているが、良い人材確保が難しい状況である。

小林 玄 器 (准教授) (2018年4月1日～2022年5月31日)*)

竹入 史隆 (助教)
内村 祐 (大学院生)
岡本 啓 (大学院生)
泉 善貴 (大学院生)
楠本 恵子 (大学院生)
今井 弓子 (技術支援員)
久保田 亜紀子 (技術支援員)
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⁻ 導電性化合物の物質探索
- 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 $\text{La}_4\text{H}_3\text{S}$ ($A = \text{Ba}, \text{Sr}$) は、400 °C 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 において固体電解質として機能することを実証した。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、非加熱合成プロセスであるメカノケミカル法を適用することによって $\text{BaTiO}_{3-x}\text{H}_x$ 中の H⁻ の固溶限界を拡張することに成功し、イオン導電性が向上する傾向を捉えた。また、スパッタ法により成膜した同物質の多結晶膜の組成を確認し、遷移金属酸水素化物の直接成膜に初めて成功した。
- b) 相転移によって H⁻ 超イオン導電性が発現する $\text{Ba}_{1.75}\text{LiH}_{2.7}\text{O}_{0.9}$ について、核密度分布解析から超イオン導電状態における H⁻ 拡散経路を調べた結果、新たな格子間位置への H⁻ の部分占有と周囲の元素と関連した異方的な熱振動を確認した。いずれも相転移によって H⁻ の拡散機構が変化したことを示唆している。
- c) 上記の $\text{Ba}_{1.75}\text{LiH}_{2.7}\text{O}_{0.9}$ を固体電解質として用いた新規電気化学デバイスの開発をおこなっている。これまで、焼結密度の低さ (~70%) が主要な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。また、焼結密度の違いによって導電率の温度依存性が変化することも捉えており、固体電解質応用に向けた新たな研究方針が得られた。

B-1) 学術論文

H. W. T. MORGAN, T. YAMAMOTO, T. NISHIKUBO, T. OHMI, T. KOIKE, Y. SAKAI, M. AZUMA, H. ISHII, G. KOBAYASHI and J. E. MCGRADY, “Sequential Pressure-Induced B1–B2 Transitions in the Anion-Ordered Oxyhydride Ba_2YHO_3 ,” *Inorg. Chem.* **61**, 7043–7050 (2022). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.2c00465

K. OKAMOTO, F. TAKEIRI, Y. IMAI, M. YONEMURA, T. SAITO, K. IKEDA, T. OTOMO, T. KAMIYAMA and G. KOBAYASHI, “Stabilization of a High H⁻-Conducting Phase via K Doping of Ba–Li Oxyhydride,” *J. Mater. Chem. A* **10(43)**, 23023–23027 (2022). DOI: 10.1039/D2TA06278J

K. OKAMOTO, F. TAKEIRI, Y. IMAI, M. YONEMURA, T. SAITO, K. IKEDA, T. OTOMO, T. KAMIYAMA and G. KOBAYASHI, “Impact of Na Concentration on the Phase Transition Behavior and H⁻ Conductivities in the Ba–Li–Na–H–O Oxyhydride System,” *Adv. Sci.* **10(1)**, 2203541 (2023). DOI: 10.1002/advs.202203541

H. UBUKATA, F. TAKEIRI, C. TASSEL, S. KOBAYASHI, S. KAWAGUCHI, T. SAITO, T. KAMIYAMA, S. KOBAYASHI, G. KOBAYASHI and H. KAGEYAMA, “Trihalide Mixing by Size-Flexible H⁻ Ions in Layered Ba₂H₃ (Cl, Br, I),” *Chem. Mater.* **34(12)**, 5654–5662 (2022). DOI: 10.1021/acs.chemmater.2c01004

H. TORIUMI, G. KOBAYASHI, T. SAITO, T. KAMIYAMA, T. SAKAI, T. NOMURA, S. KITANO, H. HABAZAKI and Y. AOKI, “Barium Indate-Zirconate Perovskite Oxyhydride with Enhanced Hydride Ion/Electron Mixed Conductivity,” *Chem. Mater.* **34(16)**, 7389–7401 (2022). DOI: 10.1021/acs.chemmater.2c01467

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

小林玄器, 「ヒドリドイオン導電性材料の研究——現状と今後の展望——」, 日本金属学会第 171 回講演大会, 福岡, 2022 年 9 月.*

小林玄器, 「層状ペロブスカイト型酸水素化物におけるヒドリド超イオン導電」, 日本MRS 年次大会, 横浜, 2022 年 12 月.

小林玄器, 「ヒドリドイオン導電性材料の研究——物質開発の現状と今後の展望——」, 第 82 回固体イオニクス研究会, 東工大, 東京, 2022 年 11 月.

小林玄器, 「ヒドリドイオン導電性材料の開拓」, 電池技術委員会第 117 回新電池構想部会, オンライン開催, 2022 年 9 月.

小林玄器, 「ヒドリドイオン導電性材料の開拓」, アドバンスト・バッテリー技術研究会第 196 回定例研究会, 名古屋, 2022 年 8 月.

竹入史隆, 「ヒドリドの固体化学とイオニクス材料への展開」, 信州大学RISM セミナー, ハイブリッド開催, 2022 年 8 月.

小林玄器, 「水素のアニオン ヒドリド が導電する物質系の開拓」, 金沢大学ナノマテリアル研究所講演会, 金沢, 2022 年 7 月.

小林玄器, 「酸水素化物中にアニオン配列とヒドリドイオン導電特性」, 日本セラミックス協会第 55 回基礎科学部会セミナー, 蒲郡, 2022 年 7 月.

G. KOBAYASHI, “Study on hydride ion conductors: Progress and prospects,” Core-to-Core Seminar, Kyoto (Japan) (Online), December 2022.

G. KOBAYASHI, “Effect of anion configuration on the phase transition behavior and hydride ion conductivities in Ba-Li oxyhydrides,” The 5th International Conference on Neutron Scattering 2022, Buenos Aires (Argentina) (Online), August 2022.

G. KOBAYASHI, “Hydride Superionic Conduction in Ba_{1.75}LiH_{2.7}O_{0.9},” CIMTEC 2022—15th International Ceramics Congress, Perugia (Italy), June 2022.

G. KOBAYASHI, “H⁻ Superionic Conduction in Oxyhydrides,” 2nd International Symposium Hydrogenomics, Tsukuba (Japan), May 2022.

B-5) 特許出願

特許登録JP7067731,「ヒドリドイオン導電体およびその製造方法」,小林玄器,渡邊明尋,菅野了次,平山雅章(東京工業大学,自然科学研究機構)(登録日 2022年5月6日).

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-).

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所,客員研究員,2022年6月-2025年5月.(竹入史隆)

B-9) 学位授与

岡本 啓,「Effects of Compositions and Sintering Process on Phase Transition Behavior and Hydride Ion Conducting Property in K_2NiF_4 -Type Ba-Li Oxyhydride」,2023年3月,博士(理学).

内村 祐,「Study on Materials Processing for Barium Titanium Oxyhydride with Hydride Ion and Electron Mixed Conductivity」,2023年3月,博士(理学).

B-10) 競争的資金

科研費挑戦的研究(萌芽),「水素の電荷自由度を活用した物質変換デバイスの創出」,小林玄器(2022年度-2023年度).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型),「 H^- 導電性材料のメカノケミカル合成」,小林玄器(2022年度-2023年度).

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年度-2022年度).

科学技術振興機構創発的研究支援事業(受託研究),「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年度-2028年度).

科研費若手研究,「複合アニオン水素化物の探索空間拡張とヒドリド導電機能の開拓」,竹入史隆(2022年度-2023年度).

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年度-2022年度).

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年度-2022年度).

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年度-2022年度).

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、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成果を *Advanced Science* 誌と *J. Mater. Chem. A* 誌に発表することができた。本成果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、高い評価を得ており、2022 年 3 月に博士号を取得した。2023 年度からは他大学の助教として研究活動を開始することになっている。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のように、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見ついた。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 NH₃ 合成や CO₂ 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压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。

*) 2022 年 6 月 1 日理化学研究所開拓研究本部主任研究員

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（IMS フェロー））

東田 怜（特任研究員（IMS フェロー））

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) 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
- b) 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) HemAT は細菌の酸素に対する走化性制御系を担っている酸素センサータンパク質である。細菌の走化性制御系は、外部シグナルである誘引／忌避物質のセンサーとして機能するシグナルトランスデューサータンパク質（methyl-accepting chemotaxis protein（MCP））と、シグナル伝達・制御に関与する Che タンパク質（CheA, CheW, CheY 等）から構成されている。本研究では、HemAT による酸素センシングおよび、酸素に応答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なった。これまでの研究で、HemAT, CheA, CheW が安定な三者複合体（HemAT/CheA/CheW 複合体）を形成することを明らかにした。生成した HemAT/CheA/CheW 複合体を用い、クライオ電子顕微鏡単粒子解析による複合体の構造解析を行なった。その結果、7.6 Å 分解能で HemAT/CheA/CheW 複合体の構造解析に成功した。現在、より高分解能での構造決定に向けて、各種実験条件の検討を行っている。また、HemAT 単独でのクライオ電子顕微鏡単粒子解析も合わせて実施するとともに、HemAT センサードメインの結晶構造解析を行った。HemAT センサードメインについては、酸化型、還元型、酸素結合型の結晶構造解析に成功した。現在、それらの構造を詳細に比較検討することにより、酸素センシングに伴うヘム周辺の構造変化とシグナル伝達経路の解析を進めている。
- b) 鉄は、全ての生物に必須の微量元素である。しかし、過剰な鉄は細胞毒性を示すため、細胞内の鉄の濃度は厳密に調節する必要がある。生物が最適な鉄濃度を感知するためには、外部環境および細胞内の鉄濃度をセンシングするためのシステムが必要である。本研究では、細胞内鉄濃度の制御に関与する新規な二成分制御系（VgrR-VgrS）を研究対象として、その構造機能相関解明を目的として研究を行なった。本系でレスポンスレギュレータとして機能する VgrR は、VgrS によるリン酸化のみならず、細胞内の鉄イオンによっても機能制御されると推定されている。本研究では、鉄イオンによる VgrR- 標的 DNA 複合体形成への影響を確認した。DNA 結合能を有する、リン酸化 VgrR を DNA に結合した後、鉄を加え相互作用解析を行った。鉄の濃度が上昇するにつれ、VgrR-DNA 複合体形成が阻害されることが確認できた。また、ICP 測定の結果、鉄センサーとして機能する VgrS には、Fe(III) が 2 当量結合す

ることが分かった。現在、VgrS、VgrRの結晶構造解析のため、結晶化条件の検討を行っている。また、前年度までの研究に引き続き、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た研究も進めている。

B-1) 学術論文

D. MATSUI, N. MURAKI, K. CHEN, T. MORI, A. A. INGRAM, K. OIKE, H. GRÖGER, S. AONO and Y. ASANO, “Crystal Structural Analysis of Aldoxime Dehydratase from *Bacillus sp.* OxB-1: Importance of Surface Residues in Optimization for Crystallization,” *J. Inorg. Biochem.* **230**, 111770 (2022). DOI: 10.1016/j.jinorgbio.2022.111770

B-3) 総説、著書

青野重利, 「CO センサータンパク質」, 「ヘムタンパク質の科学～生理機能の理解とその展開に向けて」, (株)エヌ・ティー・エス (2022). ISBN: 978-4-86043-778-7 C3045

村木則文, 青野重利, 「アルドキシム脱水酵素」, 「ヘムタンパク質の科学～生理機能の理解とその展開に向けて」, (株)エヌ・ティー・エス (2022). ISBN: 978-4-86043-778-7 C3045

青野重利, 「酸素センサータンパク質」, 「ヘムタンパク質の科学～生理機能の理解とその展開に向けて」, (株)エヌ・ティー・エス (2022). ISBN: 978-4-86043-778-7 C3045

B-4) 招待講演

青野重利, 「ガス分子と生命金属の協奏による生体機能制御」, 第一回生命金属科学シンポジウム, 東京, 2022年5月.

B-7) 学会および社会的活動

その他

総合研究大学院大学物理科学研究科研究科長 (2022).

豊田理化学研究所審査委員会委員 (2019–2024).

B-10) 競争的資金

科研費新学術領域研究(研究領域提案型)「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年度–2023年度).

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年度–2022年度).

自然科学研究機構ExCELLS 若手奨励研究, 「細胞外からの鉄取り込みに関わる二成分シグナル伝達系VgrR-VgrSの機構解明」, NAM, Dayeon (2022年度).

日本科学協会 2022年度笹川科学研究助成, 「二成分シグナル伝達系VgrR-VgrSによる細胞内鉄濃度制御の分子機構解明」, NAM, Dayeon (2022年度).

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年度–2023年度).

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（准教授（兼任））

谷中 冴子（准教授（兼任））

神田 智哉（助教）

西 栄美子（研究員）

小櫃 冴未（研究員）

MOUTAKANNI, Alix（インターンシップ）

関口 太一郎（大学院生）

斉藤 泰輝（特別共同利用研究員）

梅澤 美美子（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）

山本 葉（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) 生命分子ネットワークが創発する高次機能のメカニズム探査と設計と制御
- b) 生命体を構成する多様な分子素子がダイナミックに秩序形成する仕組みの探究
- c) 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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) タンパク質の糖鎖修飾機構に関する研究において重要な進展を遂げた。第一に、タンパク質分子の中に組み込まれた糖鎖修飾の制御コードを発見した。自然界に存在する多くのタンパク質は、タンパク質（ポリペプチド鎖）と糖鎖からなる糖タンパク質として存在している。タンパク質の構造は遺伝子の情報を設計図として決定されるが、糖鎖の情報はゲノムが直接コードしているわけではない。我々は、LAMP-1 のポリペプチド鎖の中に、ルイス X と呼ばれる特定の糖鎖の修飾を促進する 29 アミノ酸残基からなる配列を発見した。さらに、この配列をバイオ医薬品として用いられるエリスロポエチンなどの他の糖タンパク質の一端に連結させることで、それらにもルイス X 修飾をもたらすことを明らかにした。本研究の成果を活用すれば、バイオ医薬品の糖鎖構造を合理的に制御する知見につながり、次世代バイオ医薬品の開発に資することが期待される。一方、タンパク質の糖鎖修飾は、疾患発症にも関わっている。我々は以前、マトリグリカンのコア部分にグリセロールリン酸（GroP）が結合し、その伸長を阻害するという新しい翻訳後修飾を発見した。今回、この GroP 修飾は、ヒトの CDP-Gro 合成酵素である PCYT2 によって担われており、様々ながん組織において発現すること、さらには、大腸がんの悪性度が高まるにつれて、亢進していることを見出した。GroP 修飾が亢進することで、がん細胞の遊走能が高まるなど、GroP 修飾ががんの悪性化に関わることも明らかとなった。こうした成果は、GroP 修飾を対象としたがんの治療法の開発に資するものと期待できる。さらに、リツキシマブなどの治療抗体の機能に血清タンパク質が与える影響について調査し、ヒト血清アルブミン（HSA）と血清 IgG

の Fab 領域が、リツキシマブと Fc γ 受容体 III との相互作用を介した抗体依存性細胞傷害作用を非競合的に阻害することを明らかとした。また、NMR データにより、HSA がリツキシマブの Fab および Fc 領域、および Fc γ RIII の細胞外領域と相互作用することを示した。本研究の結果は、治療抗体の設計や適用において血清タンパク質との相互作用を考慮することが重要であることを示唆している。

- b) 本グループが擁する構造生物学的手法を基軸に、分子研内外の共同研究ネットワークを強化発展し、生命分子の動秩序創発の仕組みを探究した。具体的には、アルツハイマー病の発症に関わるアミロイド β (A β) タンパク質について、オリゴマー化の初期過程である二量体化過程を調べた。分子動力学 (MD) シミュレーションと *in vitro* アッセイの結果、A β 42 の二量体形成には Arg5 側鎖とカルボキシル末端の分子内静電相互作用が重要であることが明らかとなった (奥村久士博士との共同研究)。A β は神経細胞膜に豊富に存在する糖脂質である GM1 ガングリオシドと強固に結合し、アミロイド線維形成を促進することが知られている。固体 NMR 法と MD シミュレーションを用いて、GM1-A β 複合体の 3 次元構造解析を実施した結果、二層の逆平行 β 構造を特徴とする新規な集合体構造であることを明らかにした。さらに、この A β 集合体自身は GM1 膜上においてアミロイド線維へと変換することはなく、 β シートからなる疎水性表面を触媒場として GM1 糖鎖上に提示することにより、モノマー状態の A β のアミロイド線維形成を促進することが明らかとなった (西村勝之博士および奥村久士博士との共同研究)。一方、タンパク質のフォールディング過程に関しても NMR 法を用いた解析を展開した。水素/重水素交換 NMR 法により、6M 塩酸ゲアニジンにより変性したタンパク質に残存する構造情報を捉えるとともに (東京大学 桑島邦博博士との共同研究)、球状の自己組織化錯体の内腔にタンパク質を捕捉することにより、タンパク質のフォールディング・リフォールディング過程におけるヒステリシスの挙動を捉えることができた (東京大学/分子研 藤田 誠博士との共同研究)。
- c) 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仕組みを理解するとともに、得られた知見に基づいた生物工学的な応用研究を展開することを目指している。2022 年度は、トランスクリプトーム解析により、ヨコヅナクマムシにおいて紫外線ストレスへの曝露後に急速に誘導された遺伝子ファミリーを同定した。さらに、同定されたタンパク質の X 線結晶構造解析および生化学実験を実施した結果、本タンパク質が新規のマンガン依存性ペルオキシダーゼであることが判明した。また、これらのタンパク質が主にゴルジ体に存在していることから、乾燥耐性時の酸化ストレスに対処する新しいメカニズムとして、ゴルジ体におけるストレス応答が不可欠であることが示唆された。こうした発見は、水のない過酷な環境に対する生命体の適応戦略の理解につながると考えられる。

B-1) 学術論文

H. YAGI, E. AMAGASA, M. SHIOTA, I. YAMADA, K. F. AOKI-KINOSHITA and K. KATO, “GALAXY Ver3: Updated Web Application for Glycosylation Profiling Based on 3D HPLC Map,” *Glycobiology* **32(8)**, 646–650 (2022). DOI: 10.1093/glycob/cwac025

F. UMEZAWA, M. NATSUME, S. FUKUSADA, K. NAKAJIMA, F. YAMASAKI, H. KAWASHIMA, C. W. KUO, K. H. KHOO, T. SHIMURA, H. YAGI and K. KATO, “Cancer Malignancy Is Correlated with Upregulation of PCYT2-Mediated Glycerol Phosphate Modification of α -Dystroglycan,” *Int. J. Mol. Sci.* **23(12)**, 6662 (2022). DOI: 10.3390/ijms23126662

T. SAITO, H. YAGI, C. W. KUO, K. H. KHOO and K. KATO, “An Embeddable Molecular Code for Lewis X Modification through Interaction with Fucosyltransferase 9,” *Commun. Biol.* **5(1)**, 676 (2022). DOI: 10.1038/s42003-022-03616-1

- S. YANAKA, R. YOGO, H. YAGI, M. ONITSUKA, N. WAKAIZUMI, Y. YAMAGUCHI, S. UCHIYAMA and K. KATO**, “Negative Interference with Antibody-Dependent Cellular Cytotoxicity Mediated by Rituximab from Its Interactions with Human Serum Proteins,” *Front. Immunol.* **14**, 1090898 (2023). DOI: 10.3389/fimmu.2023.1090898
- T. MATSUMARU, K. SAKURATANI, S. YANAKA, K. KATO, S. YAMASAKI and Y. FUJIMOTO**, “Fungal β -Mannosyloxymannitol Glycolipids and Their Analogues: Synthesis and Mincle-Mediated Signaling Activity,” *Eur. J. Org. Chem.* **2022(20)**, e202200109 (2022). DOI: 10.1002/ejoc.202200109
- Y. YOSHIDA, T. SATOH, C. OTA, S. TANAKA, D. D. HORIKAWA, M. TOMITA, K. KATO and K. ARAKAWA**, “Time-Series Transcriptomic Screening of Factors Contributing to the Cross-Tolerance to UV Radiation and Anhydrobiosis in Tardigrades,” *BMC Genomics* **23(1)**, 405 (2022). DOI: 10.1186/s12864-022-08642-1
- K. KONDO, Y. HARADA, M. NAKANO, T. SUZUKI, T. FUKUSHIGE, K. HANZAWA, H. YAGI, K. TAKAGI, K. MIZUNO, Y. MIYAMOTO, N. TANIGUCHI, K. KATO, T. KANEKURA, N. DOHMAE, K. MACHIDA, I. MARUYAMA and H. INOUE**, “Identification of Distinct N-Glycosylation Patterns on Extracellular Vesicles from Small-Cell and Non-Small-Cell Lung Cancer Cells,” *J. Biol. Chem.* **298(6)**, 101950 (2022). DOI: 10.1016/j.jbc.2022.101950
- R. HASHIMOTO, M. MINOSHIMA, S. SAKATA, F. ONO, H. ISHII, Y. WATAKABE, T. NEMOTO, S. YANAKA, K. KATO and K. KIKUCHI**, “Efficient Visible/NIR Light-Driven Uncaging of Hydroxylated Thiazole Orange-Based Caged Compounds in Aqueous Media,” *Chem. Sci.* **13(25)**, 7462–7467 (2022). DOI: 10.1039/D2SC02364D
- S. G. ITOH, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and H. OKUMURA**, “Key Residue for Aggregation of Amyloid- β Peptides,” *ACS Chem. Neurosci.* **13(22)**, 3139–3151 (2022). DOI: 10.1021/acscemneuro.2c00358
- S. YANAKA, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and K. KUWAJIMA**, “The B Domain of Protein A Retains Residual Structures in 6 M Guanidinium Chloride as Revealed by Hydrogen/Deuterium-Exchange NMR Spectroscopy,” *Protein Sci.* **32(3)**, e4569 (2023). DOI: 10.1002/pro.4569
- M. HIRANYAKORN, M. YAGI-UTSUMI, S. YANAKA, N. OHTSUKA, N. MOMIYAMA, T. SATOH and K. KATO**, “Mutational and Environmental Effects on the Dynamic Conformational Distributions of Lys48-Linked Ubiquitin Chains,” *Int. J. Mol. Sci.* **24**, 6075 (2023). DOI: 10.3390/ijms24076075
- T. NAKAMA, A. ROSSEN, R. EBIHARA, M. YAGI-UTSUMI, D. FUJITA, K. KATO, S. SATO and M. FUJITA**, “Hysteresis Behavior in the Unfolding/Refolding Processes of a Protein Trapped in Metallo-Cages,” *Chem. Sci.* **14**, 2910–2914 (2023). DOI: 10.1039/D2SC05879K

B-3) 総説, 著書

- K. KUWAJIMA, M. YAGI-UTSUMI, S. YANAKA and K. KATO**, “DMSO-Quenched H/D-Exchange 2D NMR Spectroscopy and Its Applications in Protein Science,” *Molecules* **27(12)**, 3748 (2022). DOI: 10.3390/molecules27123748
- M. YAGI-UTSUMI and K. KATO**, “Conformational Variability of Amyloid- β and the Morphological Diversity of Its Aggregates,” *Molecules* **27(15)**, 4787 (2022). DOI: 10.3390/molecules27154787
- 矢木真穂, 加藤晃一, 「クマムシの乾燥耐性の仕組み～水分消失に伴うタンパク質の繊維化～」, *生物物理*, **62(4)**, 232–234 (2022). DOI: 10.2142/biophys.62.232
- 加藤晃一, 谷中冴子, 「抗体のエフェクター活性と定常部を介した抗体の高機能化」, *実験医学*, **40(20)**, 3253–3258 (2022).

矢木真穂, 加藤晃一, 「“地上最強生物”クマムシの乾眠の分子機構の解明に挑む」, *生化学*, **94(6)**, 888–891 (2022). DOI: 10.14952/SEIKAGAKU.2022.940888

柚木康弘, 松本 淳, 守島 健, Anne Martel Lionel Porcar, 佐藤信浩, 與語理那, 富永大輝, 矢木真穂, 井上倫太郎, 河野秀俊, 矢木宏和, 加藤晃一, 杉山正明, 「時計タンパク質複合体の構造解析を通して明らかとなった中性子小角散乱の強み」, *日本中性子科学会誌「波紋」*, **40**, 3253–3258 (2023).

Y. YAMAGUCHI, T. YAMAGUCHI and K. KATO, “Structural Analysis of Oligosaccharides and Glycoconjugates Using NMR,” *Adv. Neurobiology* **29**, 163–184 (2022). DOI: 10.1007/978-3-031-12390-0_6

B-4) 招待講演

加藤晃一, 「生命創成探究センター (ExCELLS)」, NMR プラットフォーム シンポジウム 2022, 東京, 2022年11月.

加藤晃一, 「生命分子動秩序創発研究と極限環境生命分子研究の2022年の進展」, 第5回ExCELLS シンポジウム, 岡崎, 2022年12月.

K. KATO, 「From Antibody NMR to Integrative Glycoscience」, 20th IPR Retreat, 大阪, 2022年12月.

加藤晃一, 谷中冴子, 「抗体の高次構造と相互作用のダイナミクス」, 第1回日本抗体学会設立記念学術大会, 鹿児島, 2022年11月.

加藤晃一, 「生命分子動秩序創発研究と極限環境生命分子研究の最近の進展」, ExCELLS ファカルティデベロップメント, 岡崎, 2023年2月.

矢木真穂, 「アミロイドβの構造変化とアッセムブリー」, 日本生物物理学会次世代NMRワーキンググループ金曜Spin-off会, 2022年7月.

矢木真穂, 「微小重力環境下におけるアミロイド線維形成」, 日本マイクロ重力応用学会第34回学術講演会 (JASMAC-34), 2022年9月.

S. YANAKA and K. KATO, “Integrative approach for the observation of conformational dynamics and interactions of antibodies,” The 7th International Symposium on Drug Discovery and Design by NMR, Yokohama, October 2022.

S. YANAKA, R. YOGO, H. YAGI and K. KATO, “Multifaceted observation of conformational dynamics and interactions of antibodies,” ABA APPA & TBS Join Congress, Tainan (Taiwan), June 2022.

K. KATO, “Subsequent developments of the project on dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions,” iNANO-IMS-ExCELLS Interdisciplinary Nanoscience Joint Meeting, Okazaki, December 2022.

S. YANAKA, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and K. KUWAJIMA, “The B domain of Protein A Retains Residual Structures in 6 M Guanidium Chloride as Revealed by Hydrogen/Deuterium-Exchange NMR Spectroscopy,” Joint Meeting of the 20th KIAS Conference on Protein Structure and Function and The 7th Korean-Polish Conference on “Protein Folding: Theoretical and Experimental Approaches,” Seoul (Korea), September 2022.

K. KATO, “Recent research activities in the Kato Groups,” Symposium on Frontier Research for Disease-related Proteins and 2023 Korea-Japan Joint Meeting for Molecular Sciences, Seoul (Korea), January 2023.

M. YAGI-UTSUMI and K. KATO, “The double-layered structure of amyloid-β assemblage on GM1-containing membranes,” Symposium on Frontier Research for Disease-related Proteins and 2023 Korea-Japan Joint Meeting for Molecular Sciences, Seoul (Korea), January 2023.

S. YANAKA, R. YOGO, H. YAGI and K. KATO, “Exploring the Structural Dynamics and Interactions of Antibodies: A Multidisciplinary Approach,” Symposium on Frontier Research for Disease-related Proteins and 2023 Korea-Japan Joint Meeting for Molecular Sciences, Seoul (Korea), January 2023.

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–), 評議員 (2022–).

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–).

日本生物物理学会代議員 (2021–2023). (谷中冴子)

日本蛋白質科学会 アーカイブ編集委員 (2017–). (矢木真穂)

日本生物物理学会代議員 (2023–2025). (矢木真穂)

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–).

Universal Scientific Education and Research Network (USERN), Advisory board member (2021–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

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 (2012–2024).

日本学術会議連携会員 (2017–2023).

日本学術振興会先端科学 (FoS) シンポジウム事業委員会委員 (2018–2024).

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–).

理科教育活動

理科年表物理／化学部監修者 (2022).

B-8) 大学等での講義, 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, 講義「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, 講義「創薬生命科学基礎Ⅱ」「生命分子構造学特論」, 2015年-.

京都大学複合原子力科学研究所, ユニット研究員, 2022年4月-2025年3月.

大阪大学蛋白質研究所, 招へい教授, 2022年4月-2023年3月.

Kasetsart University, Collaborating Professor, 2021年9月-2022年8月.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A), 「先端計測アプローチの統合による抗体の構造動態と機能発現の関連機構の解明」, 加藤晃一 (2019年度-2022年度).

科学技術振興機構CREST研究, 「ゴルジ体の動態解明に基づく糖鎖修飾の制御」, 加藤晃一 (2021年度-2025年度).

日本学術振興会学術国際交流事業二国間交流事業, 「ヌクレオソームダイナミクスに関わるATPaseの動的構造解析」, 加藤晃一 (2021年度-2022年度).

科研費基盤研究(B), 「抗体医薬の高機能化に向けた抗体の分子経絡の解読と改変」, 谷中冴子 (2022年度-2025年度).
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索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年度-2025年度).

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年度-2023年度).

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年度-2025年度).

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年度-2023年度).

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。さらに, 第3の生命鎖とよばれる糖鎖の構造・機能・形成に関する統合的な研究を推進する。

飯野 亮太 (教授) (2014年6月1日着任)

大友 章裕 (助教)

原島 崇徳 (助教)

YU, Yan (学振外国人招へい研究者)

KEYA, Jakia Jannat (特任研究員)

松本 浩輔 (特任研究員)

GRAHAM, Rosie (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) 回転分子モーター V-ATPase のエネルギー変換機構の解明，機能創成，特性解析
- b) リニア分子モーターキネシンの改変・ハイブリッド化による運動制御と特性解析
- c) 人工 DNA ナノ粒子モーターの高速化，運動制御と特性解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) V-ATPase (V_0V_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_0 の2つの回転分子モーターの複合体である。我々が研究対象としている腸球菌由来 V_0V_1 (EhV_0V_1) はナトリウムイオン (Na^+) を輸送する。我々は， EhV_0V_1 のイオン結合部位を改変することで，イオン選択性を Na^+ からプロトン (H^+) に変えることに成功した。
- 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) タンパク質分子モーターに触発されて開発された DNA 人工分子モーターは設計の自由度が高く，DNA の塩基配列や長さを変えることで足場との結合の親和性や選択性を制御できる。しかし，先行研究で報告されている DNA 人工分子モーターの運動速度は数 nm/s 程度であり，10-1000 nm/s で動くタンパク質分子モーターに比べて大きく劣る。我々は，DNA 修飾金ナノ粒子，RNA 修飾足場，DNA 依存的 RNA 分解酵素で構成される DNA ナノ粒子モーターの律速過程を1粒子追跡とシミュレーションで特定・改善し，タンパク質分子モーターに匹敵する数 10 nm/s の運動速度を達成した。

B-1) 学術論文

A. OTOMO, T. IIDA, Y. OKUNI, H. UENO, T. MURATA and R. IINO, “Direct Observation of Stepping Rotation of V-ATPase Reveals Rigid Component in Coupling between V_0 and V_1 Motors,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **119(42)**, e2210204119 (2022). DOI: 10.1073/pnas.2210204119

A. OTOMO, M. MIZUNO, K. INOUE, H. KANDORI and Y. MIZUTANI, “Protein Dynamics of a Light-Driven Na^+ Pump Rhodopsin Probed Using a Tryptophan Residue near the Retinal Chromophore,” *Biophys. Physicobiol.* **20**, e201016 (2023). DOI: 10.2142/biophysico.bppb-v20.s016

T. HARASHIMA, Y. EGAMI, K. HOMMA, Y. JONO, S. KANEKO, S. FUJII, T. ONO and T. NISHINO, “Unique Electrical Signature of Phosphate for Specific Single-Molecule Detection of Peptide Phosphorylation,” *J. Am. Chem. Soc.* **144(38)**, 17449–17456 (2022). DOI: 10.1021/jacs.2c05787

B-3) 総説, 著書

K. FUJIMOTO, R. IINO and R. YOKOKAWA, “Linear-Zero Mode Waveguides for Single-Molecule Fluorescence Observation of Nucleotides in Kinesin-Microtubule Motility Assay,” *Methods in Molecular Biology*, **2430**, 121–131 (2022). DOI: 10.1007/978-1-0716-1983-4_8

A. OTOMO and T. KOSUGI, “Tackle ‘Molecular Engine’ by Early-Career Researchers,” *Biophys. Physicobiol.* **19**, e190039 (2022). DOI: 10.2142/biophysico.bppb-v19.0039

B-4) 招待講演

飯野亮太, 「リニア分子モーターキネシン1のエンジニアリング」, 第22回日本蛋白質科学会年会ワークショップ「発動分子エンジニアリング: タンパク質分子機械をいじり倒して実現する新機能」, つくば, 2022年6月.

飯野亮太, 「結晶性高分子分解酵素の反応サイクルの1分子イメージング解析」, 第19回糖鎖科学コンソーシアムシンポジウム, 岐阜, 2022年11月.

飯野亮太, 「分子モーターの動きをみる, 動きをつくる」, 名古屋大学理学研究科談話会, 名古屋, 2022年11月.

飯野亮太, 「分子モーターの動きをみる, 動きをつくる」, 第36回分子シミュレーション討論会, 東京, 2022年12月.

飯野亮太, 「生体・人工ハイブリッド分子モーターの創出と特性解析」, 分子研研究会「生体分子材料を探る: 発動分子のさらなる理解と設計に向けて」, 岡崎, 2023年3月.

大友章裕, 「1分子計測と共鳴ラマン分光法を用いた細胞膜で働くタンパク質のダイナミクス研究」, 光科学若手研究会, オンライン開催, 2022年6月.

大友章裕, 「1分子計測・活性測定・タンパク質工学による回転型V-ATPaseの統合的研究」, 第60回日本生物物理学会年会, 函館市, 2022年9月.

大友章裕, 「1分子散乱イメージングによる回転分子モータータンパク質の構造ダイナミクス研究」, 物性研究所機能物性セミナー, 柏市, 2023年2月.

R. IINO, “Single-molecule analysis and engineering of molecular motor proteins,” Sendai 2022, An Update on Molecular Machines: Open Challenges and New Perspectives, Sendai, August 2022.

R. IINO, “Engineering rotary and linear molecular motor proteins,” The 3rd NINS-Princeton Joint Symposium, Princeton (USA), March 2023.

A. OTOMO and R. IINO, “Single-molecule analysis and engineering of Na⁺-pumping V-ATPase,” EASMB 2022 Symposium, Singapore, October 2022.

R. IINO, “Engineering linear motor protein kinesin-1,” EASMB 2022 Symposium, Singapore, October 2022.

R. IINO, “Single-molecule analysis and engineering of motor proteins,” iNANO-IMS-ExCELLS Interdisciplinary Nanoscience Joint Meeting, Okazaki (Japan), December 2022.

R. IINO, “Engineering linear molecular motor kinesin-1 (*Canceled due to COVID-19 situation),” 2nd Workshop “Molecules, Materials, Devices and Systems,” New York (USA), June 2022.

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, 「タンパク質, 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-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ェブサイト編集委員長 (2021–2022).

日本生物物理学会理事 (2019.6–2023.6).

学会誌編集委員

米国生物物理学会誌 *Biophysical Journal*, Editorial Board Member (2020–2025).

B-8) 大学等での講義, 客員

静岡大学大学院総合科学技術研究科, 非常勤講師, 「応用生命科学特別講義I」, 2022 年 9 月.

名古屋大学大学院理学研究科, 非常勤講師, 「分子物性学特別講義」, 2022 年 4 月–2023 年 3 月.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「機能生体分子科学」, 2022 年 4 月.

B-10) 競争的資金

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 年度–2023 年度).

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 年度–2022 年度).

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 年度–2023 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, 「ボトムアップアプローチによる分子モータータンパク質の機能改変」, 大友章裕 (2022 年度).

自然科学研究機構分野融合型共同研究事業, 「ハイブリッド微小管の創製・配列・制御」(代表; 内橋貴之), 飯野亮太 (研究分担者) (2022 年度).

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,「超局在赤外近接場分光による単一タンパク質内の振動分光」(代表:西田 純),大友章裕(研究分担者)(2022年度).

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ナノサイズの生体分子機械は,人間が作ったマクロなサイズの機械と比べてはるかに小さく,ブラウン運動の活用等,全く異なる作動原理で働く。今後も引き続き,天然の分子モーターを1分子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し,機能向上や制御に繋げる。例えば,1回転で2倍のイオンを輸送するV-ATPaseをつくることで,ATP加水分解モーター V_1 とイオン輸送モーター V_0 のエネルギー変換の共役機構の理解を深めるだけでなく,イオン輸送速度や電気化学ポテンシャル形成能を制御する。また,創成した非天然型キネシンに我々が以前に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機構をさらに深く理解するだけでなく,運動方向や速度の制御に繋げる。さらに,ヘテロな塩基配列を有するDNAナノ粒子モーターを二量体化して外部からのDNA添加で運動方向の制御を可能にし,センサー機能とアクチュエーター機能を兼ね備えた高速高制御人工分子モーターを創成する。

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))
ZHANG, Kaili (大学院生)
高橋 輝気 (大学院生)
服部 修佑 (大学院生)
鳥居 薫 (技術支援員)
新見 涼子 (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

R. N. DHITAL, A. SEN, H. HU, R. ISHII, T. SATO, Y. YASHIRODA, H. KIMURA, C. BOONE, M. YOSHIDA, Y. FUTAMURA, H. HIRANO, H. OSADA, DA. HASHIZUME, Y. UOZUMI and Y. M. A. YAMADA, “Phenylboronic Ester-Activated Aryl Iodide-Selective Buchwald-Hartwig-Type Amination toward Bioactivity Assay,” *ACS Omega* **7(28)**, 24184–24189 (2022). DOI: 10.1021/acsomega.2c01092

K. MINAMI, M. MINAKAWA and Y. UOZUMI, "Preparation of Benzothiazoles and Heterocyclic Spiro Compounds Through Cu-Catalyzed S-S Bond Cleavage and C-S Bond Formation," *Asian J. Org. Chem.* **11**(9), e202200211 (2022). DOI: 10.1002/ajoc.202200211

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-).

日本化学会理事 (2022-2023).

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

科学技術振興機構CREST 研究「革新的触媒」領域アドバイザー (2015-2023).

京都大学ゼロエミッション研究拠点運営委員 (2022-).

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-).

SYNFACTS 誌編集委員 (2020-). (奥村慎太郎)

B-8) 大学等での講義, 客員

九州工業大学, 客員教員, 2022年4月-2023年3月.

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年度-2023年度).

科研費若手研究, 「カルボニル化合物の二電子還元による極性転換とカルボニルへの付加反応の開発」, 奥村慎太郎 (2021年度-2023年度).

有機合成化学協会第34回富士フィルム研究企画賞研究助成, 「二酸化炭素による活性化を利用したカルボニル化合物の光触媒的極性転換」, 奥村慎太郎 (2022年度-2023年度).

C) 研究活動の課題と展望

2000年にゼロからのスタートを切った精密有機分子変換反応のaqueous-switching, heterogeneous-switchingの試みも十分な成果と蓄積を得てきた。理想の有機分子変換を標榜した当研究室の歩みの中で多くの水中機能性固定化錯体触媒, 水中機能性固定化ナノ金属触媒を開発し, その幾つかは汎用性ある触媒として市販されるに至っている。これらの研究は科学研究費補助金(基盤研究, 新学術研究など)にくわえ, 多くの競争的外部研究費を得て推進してきた。即ちこれまでに水中機能性固定化触媒に関する「グリーンナノ触媒」CREST研究(2002年10月-2008年3月), 続いてその成果を実践的に発展させるMETI-NEDOプロジェクト(2008年9月-2012年2月), 希少元素の元素循環・元

素減量・元素代替に焦点を当てた「元素戦略」CREST 研究(2011年10月－2017年3月)を展開してきた。さらに2014年12月からACCEL 研究(2014年－2020年)に採択され「超活性固定化触媒開発に立脚した基幹化学プロセスの徹底効率化」研究を進めつつある。また自己集積錯体触媒研究は2007年以降、理化学研究所フロンティア研究に指名され、現在同研究所・環境資源科学研究センターにて展開した(2007年－2019年)。現在、魚住の本拠地である分子科学研究所に於いては、次の研究の萌芽を見いだし育てる研究にも大いに注力しており、幾つかの新機軸候補課題の中から大きな発展に繋がる新課題を見いだしつつある。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。

榎山 儀 恵 (准教授) (2014年6月1日着任)

大塚 尚哉 (助教)

MOHD ARIS, Muhammad Zhafran Bin (インターンシップ)

堀 達暁 (大学院生)

大石 峻也 (大学院生)

加藤 雅之 (大学院生)

西岡 雪奈 (技術支援員 (派遣))

原田 晋子 (技術支援員 (派遣))

柿沼 秀哉 (技術支援員 (派遣))

丸山 莉央 (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：

- 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
- 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
- ハロゲン結合を活用する高分子触媒反応場の開発
- 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
- 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
- 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

- 触媒量のキラルプレnstet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、キラルプレnstet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発表した。
- 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。本年度内の掲載決定に向け、追加実験をもとに論文の改訂と実験項の作成を進めている。
- 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。本年度中の論文発表を目指し、現在、論文執筆中である。
- d) エチルビスピリジン配位子とするヨードニウム錯体やジアリールヨードニウムトリヨードの合成と構造解析に成功した。合成した錯体が、向山型反応や細見-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。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。向山型反応については、追加実験および追加計算、論文改訂作業を完了して、2 報の学術論文として掲載に至った。細見-櫻井反応については、データ整理を行い、論文の改訂作業を行っている。
- 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、臭素、塩素で置換した全フッ素ハロゲン化ペリレンの合成に成功した。全フッ素ハロゲン化ペリレンおよびその誘導体が、市販の全フッ素ハロゲン化ベンゼンとは異なる分子配列を形成し、ハロゲン元素の違いに伴う発光特性を有することを見出した。現在、合成と構造に関する論文を執筆中である。また、全フッ素ハロゲン化ペリレン化合物の合成にあたり、その最小骨格である F7 ナフタレンへのハロゲン化反応の開発を行った。安定で取り扱いが容易な $\text{Mg}(\text{TMP})_2 \cdot 2\text{LiBr}$ が本反応の脱プロトン化に有効であることを見出した。市販で入手可能なハロゲン化剤を用いることで、ヨウ素化、臭素化、塩素化、F7 ナフタレンに対する全てのハロゲン化に成功した。本成果についても、論文を執筆中である。
- 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を進めている。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、有機低分子の反応性の理解と定量化を進めるため、機械学習モデルの開発に成功した。アプリケーションとしての実装に向けて、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。現在、触媒化学空間を可視化しながら、触媒反応開発を進めている。

B-1) 学術論文

N. MOMIYAMA, C. JONGWOHAN, N. OHTSUKA, P. CHAIBUTH, T. FUJINAMI, K. ADACHI and T. SUZUKI, “Chiral Counteranion-Directed Catalytic Asymmetric Methylene Migration Reaction of Ene-Aldimines,” *J. Org. Chem.* **87**(14), 9399–9407 (2022). DOI: 10.1021/acs.joc.2c00742

S. OISHI, T. FUJINAMI, Y. MASUI, T. SUZUKI, M. KATO, N. OHTSUKA and N. MOMIYAMA, “Three-Center-Four-Electron Halogen Bond Enables Non-Metallic Complex Catalysis for Mukaiyama–Mannich-Type Reaction,” *iScience* **25**(10), 105220 (2022). DOI: 10.1016/j.isci.2022.105220

S. OISHI, T. FUJINAMI, Y. MASUI, T. SUZUKI, M. KATO, N. OHTSUKA and N. MOMIYAMA, "Protocol for Efficient Dearomatization of *N*-Heteroaromatics with Halogen(I) Complex Catalyst," *STAR Protoc.* **4**, 102140 (2023). DOI: 10.1016/j.xpro.2023.102140

B-3) 総説, 著書

榎山儀恵, 「三中心ハロゲン結合を基盤とする分子性触媒の創成」, *日本薬学会「ファルマシア」*, **58(10)**, 948 (2022).

B-4) 招待講演

榎山儀恵, 「Challenge toward Halogen Bond-Driven Molecular Catalysis」, 令和4年度化学系学協会東北大会有機化学コロキウム, 盛岡市, 2022年9月.

榎山儀恵, 「ハロゲン結合の触媒科学——触媒反応空間の構築に向けて——」, 第8回電子状態理論シンポジウム, 東京, 2022年11月.

榎山儀恵, 「精密合成のデジタル化——反応性の規格化に向けて——」, 日本プロセス化学会ウィンターシンポジウム, 京都市, 2022年12月.

榎山儀恵, 「有機合成のデジタル化——これまでの有機合成・これからの有機合成——」, 第5回発動分子科学サロン「発動分子とAI」, 横浜市, 2023年2月.

N. MOMIYAMA, "Non-Metallic Complex Catalysis Enabled by Three-Center-Four-Electron Halogen Bond," 5th International Symposium on Halogen Bonding, Kazusa, Chiba (Japan), November 2022.

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 (2021–2023).

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–).

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 (2022).

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」, 榎山儀恵 (2021年度–2025年度).

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), 榎山儀恵(研究支援) (2021年度–2025年度).

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。2021年度後期から2022年度前期にかけて、投稿論文の審査コメントをもとに追加実験を実施し、論文3報が学術誌に掲載された。また、2022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。その内1報は、プレスリリースを行った。引き続き、修正および追加実験を依頼されている論文2報の改訂作業を行い、2023年度中の論文掲載を目指す。また、8報の論文を執筆中であり、2023年度はこれらの論文投稿に注力する。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、精密合成情報科学の学理構築を目指す。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～2023年3月31日)*)

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

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

H. H. CHO, S. KIMURA, N. C. GREENHAM, Y. TANI, R. MATSUOKA, H. NISHIHARA, R. H. FRIEND, T. KUSAMOTO and E. W. EVANS, “Near-Infrared Light-Emitting Diodes from Organic Radicals with Charge Control,” *Adv. Opt. Mater.* **10**, 2200628 (2022). DOI: 10.1002/adom.202200628

S. MATTIELLO, Y. HATTORI, R. KITAJIMA, R. MATSUOKA, T. KUSAMOTO, K. UCHIDA and L. BEVERINA, “Enhancement of Fluorescence and Photostability of Luminescent Radicals by Quadruple Addition of Phenyl Groups,” *J. Mater. Chem. C* **10(40)**, 15028–15034 (2022). DOI: 10.1039/D2TC03132A

Y. HATTORI, R. KITAJIMA, W. OTA, R. MATSUOKA, T. KUSAMOTO, T. SATO and K. UCHIDA, “The Simplest Structure of a Stable Radical Showing High Fluorescence Efficiency in Solution: Benzene Donors with Triarylmethyl Radicals,” *Chem. Sci.* **13(45)**, 13418–13425 (2022). DOI: 10.1039/D2SC05079J

T. SUEMUNE, K. SONODA, S. SUZUKI, H. SATO, T. KUSAMOTO and A. UEDA, “Partially Oxidized Purely Organic Zwitterionic Neutral Radical Conductor: Multi-step Phase Transitions and Crossover Caused by Intra- and Intermolecular Electronic Interactions,” *J. Am. Chem. Soc.* **144(48)**, 21980–21991 (2022). DOI: 10.1021/jacs.2c08813

B-3) 総説, 著書

R. MATSUOKA, A. MIZUNO, T. MIBU and T. KUSAMOTO, “Luminescence of Doublet Molecular Systems,” *Coord. Chem. Rev.* **467**, 214616 (2022). DOI: 10.1016/j.ccr.2022.214616

B-4) 招待講演

草本哲郎, 「安定有機ラジカルを基とするスピン相関発光機能の創出」, 第6回高密度共役若手会セミナー, オンライン開催, 2022年8月.

草本哲郎, 「対電子を有する分子性物質が示す磁気・電気・光機能」, ISSP ワークショップ「1000 テスラ超強磁場科学の開拓」, オンライン開催, 2022年6月.

草本哲郎, 「安定有機ラジカルが示すスピン相関発光機能」, 第53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, 2022年11月.

T. KUSAMOTO, “An open-shell, magnetoluminescent, two-dimensional coordination polymer with a triangular organic radical ligand,” the 8th Asian Conference on Coordination Chemistry (ACCC8), Taipei (Taiwan), August 2022.

T. KUSAMOTO, “Spin-correlated photoluminescence of organic radicals,” 25th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC25), Hiroshima (Japan), July 2022.

T. KUSAMOTO, “Spin-correlated photoluminescence of open-shell molecules,” Pure and Applied Chemistry International Conference 2023 (PACCON 2023), Chiang Rai (Thailand), January 2023.

T. KUSAMOTO, “Interplay Between Spin and Luminescence in Stable Organic Radicals,” The 11th Singapore International Chemical Conference (SICC-11), Singapore, December 2022.

T. KUSAMOTO, “Spin-correlated Photofunctions Based on Luminescent Radicals,” Institute for Materials Research International Symposium, Sendai (Japan), October 2022.

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–), ホームページ委員長 (2019–), 理事 (2022–).

錯体化学若手の会中部・東海支部世話人 (2019–). (松岡亮太)

学会誌編集委員

Journal of Materials Chemistry C, Royal Society of Chemistry, Advisory Board (2022–).

その他

岡崎ものづくり推進協議会学識委員 (2022–2023).

B-8) 大学等での講義, 客員

愛媛大学大学院理工学研究科, 応用化学セミナーミニシンポジウム講演講師, 2022年7月.

名城大学, 非常勤講師, 2022年9月–2023年3月.

理化学研究所, 客員研究員, 2020年12月–2023年3月.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究, 「三回対称ラジカルを基とするカゴメーハニカムハイブリッド格子の構築と機能開拓」, 草本哲郎 (2020年度–2023年度).

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年度–2022年度).

科研費若手研究, 「発光開殻分子を用いた単分子マグネトルミネッセンスの実現」, 松岡亮太 (2021年度–2022年度).

中部科学技術センター令和3年度学術・みらい助成最優秀提案, 「磁場で発光色が変わる有機ラジカル分子の開発」, 松岡亮太 (2021年度–2022年度).

C) 研究活動の課題と展望

有機ラジカルや磁性金属錯体に代表される開殻電子系分子は, 不対電子に基づき, 通常の開殻分子とも無機物質とも異なる物性を発現する。我々の研究グループでは, 開殻電子系分子を用いてユニークな光・電気・磁気相関物性を創製・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。

*) 2023年4月1日大阪大学大学院基礎工学研究科教授

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)
廣田 宗士 (大学院生)
渡邊 幸佑 (大学院生)
吉田 瑠 (大学院生)
中野 さち子 (技術支援員 (派遣))
平田 直 (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
- b) 解明複雑な幾何構造をもつトポロジカル分子群の創製
- c) 電子回折結晶構造解析の有機機能性材料開発への活用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 湾曲構造をもつ π 共役有機分子の合成と構造解析を行った。大環状に π 共役がつながった分子「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論文を発表した。また、全てのベンゼン環にフッ素が2つずつ置換した「ハーフフルオロシクロパラフェニレン」の合成についてのプレプリントを発表した。
- 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論文を発表した。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、論文を発表した。
- c) 京都大学化学研究所宮内雄平教授らとの共同研究により、トポロジカル半金属 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ の偏光ラマンスペクトルによる簡便な構造解析手法の開発を行い論文として発表した。
- d) 3次元共有結合構造体のユニット合成において、特徴的な構造をもつ π 共役化合物が得られたため、総研大アジア冬の学校にて2件のポスター発表を行った。

B-1) 学術論文

Y. SEGAWA, T. WATANABE, K. YAMANOE, M. KUWAYAMA, K. WATANABE and K. ITAMI, "Synthesis of a Möbius Carbon Nanobelt," *Nat. Synth.* **1**, 535–541 (2022). DOI: 10.1038/s44160-022-00075-8

H. SHUDO, M. KUWAYAMA, M. SHIMASAKI, T. NISHIHARA, Y. TAKEDA, N. MITOMA, T. KUWABARA, A. YAGI, Y. SEGAWA and K. ITAMI, "Perfluorocycloparaphenylenes," *Nat. Commun.* **13(1)**, 3713 (2022). DOI: 10.1038/s41467-022-31530-x

H. SATO, R. SUIZU, T. KATO, A. YAGI, Y. SEGAWA, K. AWAGA and K. ITAMI, "N-Doped Nonalternant Aromatic Belt via a Six-Fold Annulative Double N-Arylation," *Chem. Sci.* **13(34)**, 9947–9951 (2022). DOI: 10.1039/d2sc02647c

K. TANAKA, T. NISHIHARA, A. TAKAKURA, Y. SEGAWA, K. MATSUDA and Y. MIYAUCHI, “Polarized Raman Spectroscopy on Topological Semimetal $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$,” *J. Raman Spectrosc.* **54(1)**, 93–100 (2022). DOI: 10.1002/jrs.6459

J. NOGAMI, Y. NAGASHIMA, H. SUGIYAMA, K. MIYAMOTO, Y. TANAKA, H. UEKUSA, A. MURANAKA, M. UCHIYAMA and K. TANAKA, “Synthesis of Cyclophenacene- and Chiral-Type Cyclophenylene-Naphthylene Belts,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **61(15)**, e202200800 (2022). DOI: 10.1002/anie.202200800

K. FUJII, Y. NAGASHIMA, T. SHIMOKAWA, J. KANAZAWA, H. SUGIYAMA, K. MASUTOMI, H. UEKUSA, M. UCHIYAMA and K. TANAKA, “Stereoselective Cyclohexadienylamine Synthesis through Rhodium-Catalysed [2+2+2] Cyclotrimerization,” *Nat. Synth.* **1(5)**, 365–375 (2022). DOI: 10.1038/s44160-022-00043-2

B-3) 総説, 著書

Y. SEGAWA, “Nonplanar Aromatic Hydrocarbons: Design and Synthesis of Highly Strained Structures,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **95(11)**, 1600–1610 (2022). DOI: 10.1246/bcsj.20220270

Y. SEGAWA, M. NAGASE, Y. SAITO, K. KATO and K. ITAMI, “C–H Borylation of Arenes: Steric-Controlled Para-Selectivity and Application to Molecular Nanocarbons,” *Yuki Gosei Kagaku Kyokaiishi (Journal of Synthetic Organic Chemistry)*, **80(11)**, 994–999 (2022). DOI: 10.5059/yukigoseikyokaiishi.80.994

B-4) 招待講演

瀬川泰知, 「トポロジカル π 共役分子の合成と展開」, 有機化学研究会 (白鷺セミナー), オンライン開催, 2022年5月.

瀬川泰知, 「Synthesis of topologically unique molecular nanocarbons」, 第63回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東京, 2022年8月.

B-6) 受賞, 表彰

瀬川泰知, 宇部興産学術振興財団第62回学術奨励賞 (2022).

B-7) 学会および社会的活動

理科教育活動

三重県立伊勢高等学校スーパーサイエンスハイスクール事業における課題研究に係る指導・助言 (2022).

出前授業「金属から『電子』を取り出してみよう!」岡崎市立三島小学校 (2022).

広報誌OKAZAKI 第71号「出前授業: 金属から『電子』を取り出してみよう!」, 2023年2月.

その他

教育系 Youtube チャンネル「予備校のノリで学ぶ大学の数学・物理」にて紹介された (2023).

東京大学新聞 2023年3月10日号にインタビュー記事掲載 (2023).

現代化学 (東京化学同人) 2023年3月号にインタビュー記事掲載 (2023).

B-8) 大学等での講義, 客員

大阪公立大学大学院農学研究科, 講師, 2022年5月.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「基礎錯体化学」, 2022年4月–9月.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「トポロジカル π 共役構造体の創製」瀬川泰知(2022年度-2024年度).

科学技術振興機構創発的研究支援事業(受託研究),「革新的有機半導体を指向した周期的3次元 π 共役構造体の創製」,瀬川泰知(2022年度).

科研費挑戦的研究(萌芽),「有機半導体の配向配列問題を解決する3次元 π スタック分子の創製」,瀬川泰知(2022年度-2023年度).

宇部興産学術振興財団第62回学術奨励賞研究助成,「3次元トポロジカル構造制御を鍵とした結晶性有機半導体材料の開発」,瀬川泰知(2022年度).

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).

科研費若手研究,「アニオン性有機共有結合フレームワークの3次元精密構築と機能化」,杉山晴紀(2022年度-2023年度).

中部科学技術センター学術・みらい助成,「水素結合を利用したカゴ型有機分子の自己集積制御:バイポーラスな有機多孔質結晶の合成」,杉山晴紀(2021年度-2022年度).

C) 研究活動の課題と展望

本年度は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やハーフ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。また京都大学化学研究所宮内雄平教授らとの共同研究により、トポロジカル半金属 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ の偏光ラマンスペクトルによる簡便な構造解析手法の開発を行い論文として発表した。

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。すでに3件の国内学会での発表を行っており、本研究グループにおいて新たにスタートした研究成果が出つつある。これらを迅速に論文発表するとともに、分子科学研究所の共同利用施設としての利用促進を併せて進めていく。

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)

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) 結晶スポンジ法の二次代謝酵素の機能解析への応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 結晶スポンジ法とは, 超分子化学の基礎研究から生まれた分子の構造解析技術である。本手法は, 信頼性の高い構造決定手法として知られる X線結晶構造解析を, 本来は必要な工程である解析対象物の単結晶化を経ることなく行うことができる画期的な構造解析法である。我々は, この結晶スポンジ法を用いて, 二次代謝酵素の機能解析に取り組んでいる。二次代謝酵素の機能解析においては, 酵素の生産する酵素産物の構造決定が極めて重要であると同時に困難であり, この問題の解決に結晶スポンジ法の利用が有効であると考えた。

また, 結晶スポンジ法は, 解析対象物の結晶化を必要としないという利点の他に, 微量 (数マイクログラム以下) の解析対象物しか必要としないという利点も併せ持っている。本年度は, この後者の点に着目し, 結晶スポンジ法の使用によって, 二次代謝酵素の解析スキーム全体を小スケール化できることを実証した。具体的には, 二次代謝酵素の解析に頻用される遺伝子組換え微生物を用いた酵素産物の生産を小スケール化して行い, 得られたごく僅かな酵素産物のみを用い, 結晶スポンジ法によって構造決定を達成した。具体的には, 通常 NMR などを用いた構造決定に十分な量の酵素産物を得るために遺伝子組換え微生物を数 L から数十 L の培地を用いて培養を行う必要があるところ, 本研究では, おおよそ 100 分の 1 にあたる 25 mL の培養液を用いた培養から得た酵素産物のみを用いて, その構造決定に成功した。

B-1) 学術論文

Y. DOMOTO, K. YAMAMOTO, S. HORIE, Z. YU and M. FUJITA, “Amplification of Weak Chiral Inductions for Excellent Control over the Helical Orientation of Discrete Topologically Chiral $(M_3L_2)_n$ Polyhedra,” *Chem. Sci.* **13**(15), 4372–4376 (2022). DOI: 10.1039/d2sc00111j

H. TAKEZAWA, Y. FUJII, T. MURASE and M. FUJITA, “Electrophilic Spirocyclization of a 2-Biphenylacetylene via Conformational Fixing within a Hollow-Cage Host,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **61**(24), e202203970 (2022). DOI: 10.1002/anie.202203970

R. TABUCHI, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, “Selective Confinement of Rare-Earth-Metal Hydrates by a Capped Metallo-Cage under Aqueous Conditions,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **61**(37), e202208866 (2022). DOI: 10.1002/anie.202208866

H. TAMURA, H. TAKEZAWA, M. FUJITA and H. ISHIKITA, “A Self-Assembled Coordination Cage Enhances the Reactivity of Confined Amides via Mechanical Bond-Twisting,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24(35)**, 21367–21371 (2022). DOI: 10.1039/D2CP03126D

B-3) 総説, 著書

Y. DOMOTO and M. FUJITA, “Self-Assembly of Nanostructures with High Complexity Based on Metal···Unsaturated-Bond Coordination,” *Coord. Chem. Rev.* **466**, 214605 (2022). DOI: 10.1016/j.ccr.2022.214605

B-4) 招待講演

藤田 誠, 「化学と幾何学：多面体の定理を活用したものづくり」, 第 135 回分子科学フォーラム, オンライン開催, 2023 年 2 月.

藤田 誠, 「マイクロ結晶スポンジ法 (MicroCS 法) : 質量分析に迫る極微量 X 線分子構造解析」, 第 70 回質量分析総合討論会, 福岡, 2022 年 6 月.

藤田 誠, 「化学と幾何学：多面体定理を活用したものづくり」, 令和 4 年度化学系学協会東北大会 (盛岡大会), 岩手, 盛岡市, 2022 年 9 月.

M. FUJITA, “Complex molecular topologies via reversible ring/loop threading,” ArtMoMa Summer School, Oxford (UK), July 2022.

M. FUJITA, “Self-Assembly of Gigantic Polyhedra: From Synthetic To Peptidic,” ICC2022, Rimini (Italy), August 2022.

M. FUJITA, “Self-assembly of Gigantic Coordination Polyhedra: From Synthetic to Peptidic,” 11th Singapore International Chemistry Conference (SICC-11), Singapore, December 2022.

M. FUJITA, “Self-assembly of Gigantic Coordination Polyhedra: From Synthetic to Peptidic,” 3DMM2O conference, Schöntal Monastery, Schöntal (Germany), March 2023.

B-6) 受賞, 表彰

藤田 誠, 朝日新聞文化財団朝日賞 (2023).

藤田 誠, 化学の家財団国際賞 (2022).

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 年度–2023 年度).

C) 研究活動の課題と展望

本年度は、結晶スポンジ法の利用によって、二次代謝酵素の機能解析実験を小スケール化することが可能であると実証できた。これにより、二次代謝酵素の機能解析をますます迅速に行うことができるようになることが期待される。近年の遺伝子解析技術の発展を背景に、興味深い二次代謝酵素をコードする遺伝子が次々と見出だされており、こうした酵素について結晶スポンジ法を駆使することで逸早く解析し、酵素機能に関する数多くの知見を蓄積していきたい。

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)
栗田 佳子 (事務支援員)

A-1) 専門領域: 物性物理学, 量子ビーム科学

A-2) 研究課題:

- a) 機能性固体・薄膜の電子状態の分光研究
- b) 物質科学に向けた新しい放射光分光法の開発
- c) 新しい量子ビームを使った分析技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 機能性固体・薄膜の電子状態の分光研究: 磁性と伝導が複雑に絡み合うことにより新しい機能が現れる固体・薄膜について, 低温・高圧・高磁場下の赤外・テラヘルツ分光と高分解能三次元角度分解光電子分光および時間分解分光により, 機能性の起源である電子状態を詳細に決定している。また, それらの実験条件に合わせた第一原理電子状態計算を組み合わせることで, 機能性固体・薄膜の電子状態の総合的な情報を得ている。
- b) 物質科学に向けた新しい放射光分光法の開発: UVSOR や次世代放射光で用いることを想定した新たな分光法を開発する。特に, 電子構造のダイナミクスを可視化することを目標に, 新たな光電子分光法と赤外分光法の開発を進めており, 物質科学への応用を図る。
- c) 新しい量子ビームを使った分析技術の開発: スピン偏極高輝度電子源を用いた高エネルギー分解能スピン・角度分解共鳴電子エネルギー損失分光法の開発を進めている。

B-1) 学術論文

T. NAKAMURA, Y. OHTSUBO, A. HARASAWA, K. YAJI, S. SHIN, F. KOMORI and S. KIMURA, “Fluctuating Spin–Orbital Texture of Rashba-Split Surface States in Real and Reciprocal Space,” *Phys. Rev. B* **105(23)**, 235141 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.105.235141

H. MIYAZAKI, T. HAJIRI, M. MATSUNAMI, M. INUKAI, T. ITO and S. KIMURA, “Observation of Thickness-Dependent Exchange Interaction in EuO Ultrathin Films,” *Front. Nanotechnol.* **4**, 872717 (2022). DOI: 10.3389/fnano.2022.872717

Y. OHTSUBO, T. NAKAYA, T. NAKAMURA, P. LE FÈVRE, F. BERTRAN, F. IGA and S. KIMURA, “Breakdown of Bulk-Projected Isotropy in Surface Electronic States of Topological Kondo Insulator $\text{SmB}_6(001)$,” *Nat. Commun.* **13(1)**, 5600 (2022). DOI: 10.1038/s41467-022-33347-0

T. NAKAMURA, T. NAKAYA, Y. OHTSUBO, H. SUGIHARA, K. TANAKA, R. YUKAWA, M. KITAMURA, H. KUMIGASHIRA, K. IMURA, H. S. SUZUKI, N. K. SATO and S. KIMURA, “Surface Valence Transition in SmS by Alkali Metal Adsorption,” *Phys. Rev. B* **107(4)**, L041102 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevB.107.L041102

H. MIYAZAKI, S. KIMURA, K. ONISHI, T. HIHARA, M. YOSHIMURA, H. ISHII, M. MIKAMI and Y. NISHINO, “Relation between Electronic Structure and Thermoelectric Properties of Heusler-Type Ru₂VAl Compounds,” *Crystals* **12(10)**, 1403 (2022). DOI: 10.3390/cryst12101403

B-3) 総説, 著書

Y. OHTSUBO, S. KIMURA and F. IGA, “Recent Progress in Clean-Surface Formation of Topological Kondo Insulators and Topological Surface States Observed There,” *Electron. Struct.* **4(3)**, 033003 (2022). DOI: 10.1088/2516-1075/ac8631

B-4) 招待講演

H. WATANABE, S. TATSUKAWA, Y. CHEN, T. NAKAMURA, K. IMURA, H. S. SUZUKI, N. K. SATO and S. KIMURA, “Carrier-induced insulator-to-metal transition on SmS,” 11th International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources, Hiroshima (Japan), October 2022.

R. IKEDA, H. WATANABE, M.-H. JUNG and S. KIMURA, “Terahertz electric-field drive on Weyl fermions,” 11th International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources, Hiroshima (Japan), October 2022.

S. KIMURA, “Origin of the valence transition in samarium mono-sulfide,” 3-day International Conference on Materials Science, Verona (Italy), October 2022.

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 (2021.9–2023.9).

日本物理学会領域5代表 (2022–2023).

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 (2021.4–2023.3).

広島大学放射光科学研究センター協議会委員 (2018.4–2024.3).

SPring-8/SACLA 成果審査委員会「査読者」(2016.4–2024.3).

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) 大学等での講義, 客員

大阪大学大学院生命機能研究科, 教授, 2013年7月–.

大阪大学大学院理学研究科, 講義「シンクロトロン分光学」, 2022年4月–9月.

大阪大学理学部, 講義「光物理学」, 2022年4月–9月.

大阪大学大学院生命機能研究科, 講義「基礎物理学I」, 2022年4月–9月.

大阪大学大学院生命機能研究科, 実習「基礎物理学実習」, 2022年4月–9月.

大阪大学全学教育推進機構, 講義「力学詳論II」, 2022年10月–2023年2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年度-2022年度).

(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年度-2022年度).

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素励起である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)
栗田 佳子 (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

H. ONISHI, “Semiconductor Photocatalysts for Artificial Photosynthesis: Operando Characterization under Water,” Seminar at RIKEN, Wako, 2022年4月.

大西 洋, 「半導体光触媒をもちいた人工光合成反応のオペランド計測: 溶存酸素の高速検出とダイヤモンドプリズムを用いた光学分光」, 日本オプトメカトロニクス協会第 2 回フォトンテクノロジー技術部会, オンライン開催, 2022 年 10 月.

大西 洋, 「半導体光触媒のオペランド界面計測: ダイヤモンドプリズムを用いた光学分光と溶存酸素の高速検出」, 実用表面分析セミナー 2022, 神戸, 2022 年 11 月.

大西 洋, 「水中ですすむ触媒反応のオペランド計測: 光触媒の事例」, 第 445 回触媒科学研究所コロキウム, 北海道大学, ハイブリッド開催, 2023 年 2 月.

H. ONISHI, “Infrared absorption of semiconductor photocatalysts excited under water: operando study with an ATR prism,” 12th International Conference on Environmental Catalysis (ICEC2022), Osaka, July 2022.

M. HIRADE, S. MORIGUCHI, A. KOGURE, H. NAKAJIMA and H. ONISHI, “Application of FM-AFM,” 14th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices '22 (ALC '22), Nago, October 2022.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

(社)応用物理学会薄膜・表面物理分科会幹事(2006-).

日本表面真空学会理事(2022-).

学会の組織委員等

The 22nd International Vacuum Congress (IVC-22), program committee co-chair (2020-2022).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会ナノプローブテクノロジー第167委員会委員(2016-2023).

触媒科学計測共同研究拠点課題等審査専門委員会委員長(2022-).

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), 「人工光合成をめざす半導体光触媒: オペランド計測によるミリ秒反応化学の解明」, 大西 洋(2022年度-2024年度).

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年度-2023年度).

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年度-2022年度).

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 (兼任; 京都大学)) (2022 年 3 月 1 日 ~ 2022 年 3 月 31 日)
(教授 (兼任; 帝京科学大学)) (2022 年 4 月 1 日着任)

神谷 美穂 (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の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り組んでいる。2020年度には、リグニン認識能を有する12残基ペプチドに高い酸化能を有するRu錯体触媒を結合した人工酵素の合成に成功した。また、蛍光異方性測定と分子動力学計算によってペプチドのリグニン認識においてペプチド残基とリグニン水酸基および芳香族骨格の水素結合とCH/ π 型相互作用が支配的であることを明らかにした。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り組むとともに、マイクロ波／メカノケミカル反応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

M. UEDA, M. KIMURA, S. MIYAGAWA, M. NAITO, H. TAKAYA and Y. TOKUNAGA*, “Four- and Two-Armed Hetero Porphyrin Dimers: Their Specific Recognition and Self-Sorting Behaviours,” *Org. Biomol. Chem.* **20(2)**, 387–395 (2022). DOI: 10.1039/D1OB01694F (Supramolecular chemistry in OBC)

H. KOBAYASHI, Y. MASUDA, H. TAKAYA, T. KUBO* and K. OTSUKA, “Separation of Glycoproteins Based on Sugar Chains Using Novel Stationary Phases Modified with PEG-Conjugated Boronic-Acid Derivatives,” *Anal. Chem.* **94**, 6882–6892 (2022). (Front cover)

A. MURANAKA, H. BAN, M. NAITO, S. MIYAGAWA, M. UEDA, S. YAMAMOTO, M. HARADA, H. TAKAYA, M. KIMURA, N. KOBAYASHI, M. UCHIYAMA and Y. TOKUNAGA, “Naked-Eye-Detectable Supramolecular Sensing System for Glutaric Acid and Isophthalic Acid,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **95**, 1428–1437 (2022). (BCSJ Award)

B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. YOKOYAMA, H. TAKAYA and M. SAKAMOTO, “¹⁴C Dating of Historical Japanese Musical Instrument Flute Sack,” *24th Radiocarbon Conference, 10th ¹⁴C & Archaeology Conference* (2022).

B-3) 総説, 著書

高谷 光, 「4章–11. 単結晶X線構造解析 (Single Crystal X-ray Structure Analysis)」, 「触媒総合辞典」, 朝倉書店 (2023).

B-4) 招待講演

高谷 光, 「文化財と放射光分析」, 京都大学「陶磁器の化学」第1回ワークショップ, 京都大学吉田キャンパス百周年時計台記念館, 京都市, 2022年10月.

高谷 光, 「反応性有機金属種の軟X線XAFS」, UVSOR シンポジウム 2022, 分子科学研究所, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎市, 2022年11月.

高谷 光, 「X線吸収分光による溶液中分子構造決定」, 筑波大学数理物質系セミナー, 筑波大学, つくば市, 2022年12月.

B-5) 特許出願

特許登録

特許第7072778号, 「イミダゾール誘導体の製造方法」, 渡辺 隆司, 中村正治, 高谷 光, 磯崎勝弘, フランチェスカ ピンチェラ, 福田健治 (京都大学, 太陽日酸 (株)) (登録日 2022年5月13日).

B-6) 受賞, 表彰

A. MURANAKA, H. BAN, M. NAITO, S. MIYAGAWA, M. UEDA, S. YAMAMOTO, M. HARADA, H. TAKAYA, M. KIMURA, N. KOBAYASHI, M. UCHIYAMA and Y. TOKUNAGA, 日本化学会論文誌BCSJ 賞 (2022).

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」主査委員 (2017-).

学会の組織委員等

日本化学会春季年会イノベーション共創プログラム (CIP) 企画委員 (2015-).

日本化学会第 102 春季年会 ATP 企画 TIC 「インフォマティクスの基礎」幹事 (2018-).

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 (2022-2023).

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「R024 電磁波励起反応場委員会」幹事委員 (2020-).

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-).

その他

京都大学分野横断プラットフォーム「陶磁器の化学」(<https://research.kyoto-u.ac.jp/gp/g069/>)で清水焼「陶菴」社会長, 社長および京都大学(佐々木, 井田, 宇治ら)と曜変天目茶碗における曜変発現メカニズムの科学的解明と量産化のための焼成条件の基礎技術開発に取り組んでいる。(<https://www.atpress.ne.jp/news/203342>)(2022).

B-8) 大学等での講義, 客員

京都大学量子ビームアライアンス, オンライン講義講師, 「X線吸収分光」, 2021年-.

中部大学工学部, 客員准教授, 2022年4月-2023年2月, 客員教授, 2023年3月-.

帝京科学大学生命環境学部, 「有機化学I」「有機化学II」「化学療法論」「生命科学基礎実験I」「生命科学基礎実験II」「1年次基礎ゼミ」, 2022年-.

理化学研究所, 客員研究員, 2022年4月-.

B-10) 競争的資金

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年度-2023年度).

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年度-2025年度).

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: 小林宏資), 高谷 光(分担者) (2021年度-2025年度).

令和4年度「産学公の森」推進事業補助金アールステージコース、「曜変天目茶碗」再現のための基盤要素技術の開拓事業」(代表：土淵善重貴(陶菴社長)), 高谷 光(共同研究者)(2022年度).

B-11) 産学連携

共同研究, 抗菌化研(株), 「新奇な抗菌性物質の開発と作用機序の解明」, 高谷 光(2022年).

共同研究, ENEOS(株), 「潤滑油成分の物性・構造解析」, 高谷 光(2022年).

共同研究, 本田技研工業(株), 高谷 光(2022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およびメカノケミカル条件での XAS 測定可能なセル開発に注力した研究を行なう。また, これら XAS 測定から得られたスペクトルを用いた構造解析のために溶媒を含めた触媒活性種, 反応機構解析のために QM/MM による内核励起スペクトルシミュレーションに取り組む。

中 村 彰 彦 (准教授) (2022 年 8 月 1 日着任)
(クロスアポイントメント; 静岡大学農学部)

中根 香織 (事務支援員)

A-1) 専門領域: 生化学, 生物物理学

A-2) 研究課題:

- a) ポリエチレンテレフタレート加水分解酵素の改良
- b) ポリエチレンテレフタレート吸着酵素の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ポリエチレンテレフタレートは飲料ボトルや衣料などに使用されている身近なプラスチックである。低コストで環境負荷の低いリサイクル方法を開発するため, その分解酵素の機構の向上を試みている。酵素表面に露出しているアミノ酸 95 個を塩基性アミノ酸または酸性アミノ酸に変更し, 表面電荷を改変した酵素ライブラリを作成した。活性スクリーニングしたところ 2 つの変異体で鋳型酵素よりも高い活性をもつことがわかった。
- b) 使用量が多いプラスチックは環境中へ流出する可能性が高く, 細かく粉碎されたプラスチック片による環境汚染が問題視されている。しかし検出に手間がかかるため正確な実態は不明である。そこでポリエチレンテレフタレートに特異的に吸着する酵素の開発を試みた。キチン吸着酵素を鋳型としてファージディスプレイ法により変異体のスクリーニングを行ったところ, ポリエチレンテレフタレートに吸着する変異体が取得できた。蛍光タンパク質との複合体を作成し吸着を計測したところ, 天然型酵素では吸着しないが変異体では吸着が確認でき, PET が染色可能であることがわかった。

B-1) 学術論文

T. UCHIYAMA, T. UCHIHASHI, T. ISHIDA, A. NAKAMURA, J. V.V ERMAAS, M. F. CROWLEY, M.SAMEJIMA, G. T. BECKHAM and K. IGARASHI, “Lytic Polysaccharide Monooxygenase Increases Cellobiohydrolases Activity by Promoting Decrystallization of Cellulose Surface,” *Sci. Adv.* **8(51)**, eade5155 (2022). DOI: 10.1126/sciadv.ade5155

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

(公財) 新世代研究所バイオ単分子研究会会員 (2022-).

学会の組織委員等

第 61 回日本生物物理学会実行委員 (2022).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構創発的研究支援事業,「プラスチックを採して壊すバイオマイクロドロンの創出」,中村彰彦(2022年度-2024年度).

科研費基盤研究(B),「自然界に学ぶ「バイオマス分解機構」の解明」(代表:金子 哲),中村彰彦(研究分担者)(2021年度-2023年度).

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」,中村彰彦(2022年).

C) 研究活動の課題と展望

ポリエチレンテレフタレート分解酵素の改良では,得られた2つの変異を掛け合わせることで相加的に活性が向上するかどうか,及び耐熱性が向上しているかどうかの確認が必要である。今後精製酵素を用いて詳細な比較をおこなっていく。ポリエチレンテレフタレート吸着酵素の開発では,天然型酵素では全く吸着しなかったが変異体では明確に吸着が確認できたため新たな吸着酵素の開発に成功したといえる。ただし天然型酵素の天然基質であるキチンへの吸着能が残っているため,今後は吸着特異性の向上を進めていく。

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)
殖粟 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 (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ンニクスの展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

分子科学に関連して重要な波長域にレーザーの高輝度光を展開する為の固体レーザー, 非線形波長変換法につき包括的な研究を進めている。特には近年のマイクロ固体フォトンニクス [マイクロチップ Nd:YVO₄ レーザー (1990年), Yb:YAG レーザー (1993年), セラミックレーザー (1997年), バルク擬似位相整合 (QPM) 素子: 大口径周期分極反転 MgO:LiNbO₃ (PPMgLN) (3mm厚 2003年, 5mm厚 2005年, 10mm厚 2012年)] を先導すると共に, 共同研究を通し赤外域分子分光などにその展開を図っている。国際誌の雑誌編集, 特集号企画から国際シンポジウム・会

議の企画提案，開催に積極的に参加する事でその成果を内外に発信している。

- a) マイクロドメイン構造，界面（粒界面，結晶界面，さらには自発分極界面）を微細に制御する固相反応制御法の研究として，レーザーセラミックス，レーザー素子，分極反転素子の作製プロセスの高度化を図っている。特に，固体レーザーの発光中心である希土類イオンの軌道角運動量を利用したマイクロドメインの配向制御は，これまで不可能だった異方性セラミックスによるレーザー発振を成功させただけでなく原理的にはイオンレベルでの複合構造を可能とする。さらに最近，表面活性接合による異種材料接合に成功し，Distributed Face Cooling (DFC) 構造による Tiny Integrated Laser (TILA) なる次世代の高性能な高集積小型レーザーに関するコンセプトが検証された。これより，新たなフォトニクスを創出できるものと期待している。
- b) 光の発生，増幅，変換の高度制御を可能とする為の研究として，希土類イオンの発光・緩和機構の解明，固体中の光，エネルギー伝搬，さらにはマイクロドメイン構造と光子及び音子の相互作用機構解明，非線形光学過程の解明，モデル化を進めている。Yb レーザーの機構解明，Nd レーザーの直接励起可能性，希土類レーザーの励起光飽和特性，YVO₄ の高熱伝導率特性の発見，実証に繋がったばかりでなく，マイクロ共振器の高輝度効果，レーザー利得と非線形光学過程の量子相関などの興味深い展開も見せている。特にレーザー科学発展の中で生じたパルスギャップ領域であるサブナノ秒からピコ秒の便利な光源開拓に関する貢献，パルスギャップレーザーによる新現象の解明などが期待できる。
- c) 開発した光素子を用いた新規レーザー，波長変換システムの開発と展開を図っている。これまでもエッジ励起セラミック Yb:YAG マイクロチップレーザーによる高平均出力動作，手のひらサイズジャイアントパルスマイクロチップレーザーからの高輝度温度光発生，マイクロチップレーザーからの UV 光（波長:266 nm）からテラヘルツ波（波長:100~300 μm），さらには高効率・高出力のナノ秒光パラメトリック発生（出力エネルギー約 1 J，効率約 80%），波長 5~12 μm に至る広帯域波長可変中赤外光発生，1.5 サイクル中赤外光からのコヒーレント軟 X 線（波長:~5 nm）・アト秒（200~300 as）発生などをマイクロ固体フォトニクスで実証した。アト秒発生に重要な中赤外 OPCPA では，LA-PPMgLN を用い波長 2.1 μm にてパルス幅 15 fs を平均出力 10 W と，この領域で世界最大出力を達成した。特にマイクロチップレーザーでは，パルスギャップであるサブナノ秒での高輝度光発生が望め，光イオン化過程に有利なため極めて低いエネルギーで効率的なエンジン点火が可能となる。すでに世界ではじめての自動車エンジン搭載，走行実験にも成功している。また，この高輝度光は光パラメトリック過程によるテラヘルツ (THz) 波発生にも有利である。また，LA-PPMgLN を用いてピコ秒領域で mJ に至る狭線幅 THz 波発生も可能となった。マンレー・ローによる量子限界を超える効率である。今後，分子の振動状態についてのより詳細な分光学的情報を得ることから，THz 波による電子加速までと幅広い展開が期待される。

B-1) 学術論文

Y. SANO, T. KATO, Y. MIZUTA, S. TAMAKI, K. YOKOFUJITA, T. TAIRA, T. HOSOKAI and Y. SAKINO, “Development of a Portable Laser Peening Device and Its Effect on the Fatigue Properties of HT780 Butt-Welded Joints,” *Forces in Mechanics* **7**, 100080 (2022). DOI: 10.1016/j.finmec.2022.100080

A. KAUSAS and T. TAIRA, “Laser-Induced Damage Study of Bonded Material for a High-Brightness Laser System,” *Opt. Lett.* **47(12)**, 3067–3070 (2022). DOI: 10.1364/OL.456760

K. TAMURA, R. NAKANISHI, H. OHBA, T. TAIRA and I. WAKAIDA, “Recovery of the Laser-Induced Breakdown Spectroscopy System Using a Ceramic Microchip Deteriorated by Radiation for the Remote Elemental Analysis,” *J. Nucl. Sci. Technol.* **60(2)**, 175–184 (2022). DOI: 10.1080/00223131.2022.2091056

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. TAKEYA, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Discussion on evaluation of THz spectroscopy on low absorbers,” *Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, LIC1-02 (2022).

H. H. LIM and T. TAIRA, “>50 MW peak power microchip laser with unstable resonator for string ignition,” *Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, LIC2-04 (2022).

T. TAIRA, “High-power extreme solid-state laser in giant micro-photonics,” *ATLA-Project 1, Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, LIC3-01 (2022).

A. KAUSAS and T. TAIRA, “Inter layer assist surface activated bonding for TILA PowerChip,” *ATLA-Project 1, Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, LIC3-02 (2022).

M. YOSHIDA, T. TAIRA, A. KAUSAS, A. TSUJI and Y. VINCENT, “High power laser development based on the direct bonded laser crystal technology,” *ATLA-Project 2, Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, LIC4-02 (2022).

Y. SATO and T. TAIRA, “Precise thermo-mechanical and -optical parameters in YAG from 100 K to 493 K,” *Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, LIC5-02 (2022).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Narrow-bandwidth 2- μm source by KTP/PPLN-OPO,” *Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, LIC5-03 (2022).

V. YAHIA and T. TAIRA, “Design of a hot-band pumped 500mJ-preamplifier for Joule-class laser system,” *Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, LIC7-02 (2022).

H. H. LIM, A. KAUSAS and T. TAIRA, “Sub-100 ps Nd:YVO₄ μ -MOPA for two-photon imaging,” *Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, LIC7-03 (2022).

A. KAUSAS and T. TAIRA, “Laser damage threshold evaluation of bonded single crystal and ceramic Nd:YAG,” *Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, LIC8-02 (2022).

T. TAIRA, “Tiny Integrated Laser Power Chip for Electron Acceleration,” *The International Conference on Laser, Plasma and Radiation-Science and Technology (ICLPR-ST 2022)* (2022).

T. TAIRA, “TILA Power-Chip for Laser-Driven Electron-Acceleration,” *The XXIII International Symposium on High-Power Laser Systems and Applications (HPLS&A 2022)* (2022).

K. TAKEYA, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Discussion on optical parameters of quartz crystal in the terahertz frequency,” *The 15th Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO-PR 2022)*, CTuP3C-05 (2022).

H. H. LIM and T. TAIRA, “High Brightness Microchip Laser with Unstable Resonator,” *The 15th Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO-PR 2022)*, CThP1H-06 (2022).

A. KAUSAS, A. TSUJI, V. YAHIA and T. TAIRA, “Direct bonded microchip gain aperture laser system,” *The 15th Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO-PR 2022)*, CThP1H-07 (2022).

H. H. LIM and T. TAIRA, “>70 MW peak power/100 Hz unstable cavity microchip laser,” *The 25th Congress of the International Commission for Optics (ICO-25)*, TS 1-7-04 (2022).

T. TAIRA, “High Power, High Brightness Microchip Lasers and Their Applications,” *The 83rd JSAP Autumn Meeting 2022 (JSAP-Optica-SPP Joint Symposia 2022)*, 23a-C205-1 (2022).

Y. SANO, T. KATO, Y. MIZUTA, S. TAMAKI, T. TAIRA, Y. SAKINO and T. HOSOKAI, “Laser Peening by Microchip Laser on a Collaborative Robot and Its Effect on Fatigue Properties of Welded Steel Joints,” *The 17th Asia-Pacific Conference on Fracture and Strength (APCFS 2022)* (2022).

H. H. LIM and T. TAIRA, “>80 MW Peak Power/80 Hz Nd:YAG Microchip Laser,” *OPTICA Topical Meeting on Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress and Exhibition 2022*, AW2A.3 (2022).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Spectrum-narrowed 2- μ m source by KTP/PPMgLN-OPO,” *OPTICA Topical Meeting on Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress and Exhibition 2022*, JW3B.4 (2022). (poster)

A. KAUSAS, A. TSUJI, V. YAHIA and T. TAIRA, “Direct Bonded Tiny Integrated Laser for High Energy Gain Aperture Amplifier System,” *OPTICA Topical Meeting on Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress and Exhibition 2022*, JW3B.6 (2022).

Y. SATO and T. TAIRA, “Comprehensive thermal parameters of YAG single crystal from 160 K to 500 K,” *OPTICA Topical Meeting on Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress and Exhibition 2022*, ATH1A.8 (2022).

H. H. LIM and T. TAIRA, “>70 MW peak power air-cooled Nd:YAG/Cr⁴⁺:YAG unstable cavity microchip laser at 100 Hz,” *SPIE Photonics West 2023*, 12399-33 (2023).

K. TAKEYA, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Discussion on measurement method for small absorption coefficients in THz spectroscopy,” *Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, TILA-LIC6-02 (2023).

Y. MIZUTA, S. TAMAKI, K. YOKOFUJITA, K. MASAKI, T. KATO, Y. SAKINO, T. TAIRA, T. HOSOKAI and Y. SANO, “Improvement of residual stress and fatigue properties of metallic materials by laser peening using low-energy microtip lasers,” *Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, TILA-LIC8-03 (2023).

T. TAIRA, “Tiny Integrated Lasers towards Giant Micro-photonics,” *Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, TILA-LIC9-01 (2023). (Invited)

H. H. LIM and T. TAIRA, “>80 MW peak power Nd:YAG microchip laser for ignition,” *Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, TILA-LIC9-02 (2023).

V. YAHIA, A. KAUSAS and T. TAIRA, “Modular gain medium for mitigation of parasitic oscillations in high-energy solid-state laser amplifier,” *Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, TILA-LIC9-03 (2023).

A. TSUJI, A. KAUSAS, V. YAHIA and T. TAIRA, “Direct-Bonded Materials for High Beam Quality and Energy Gain Aperture Amplifier System,” *Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, TILA-LIC9-04 (2023).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Study on crystal quartz for QPM device,” *Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, TILA-LIC10-02 (2023).

Y. SATO and T. TAIRA, “Comprehensive evaluation of YAG thermal parameters in a wide temperature range from cryogenic to high,” *Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, TILA-LIC10-03 (2023).

A. KAUSAS and T. TAIRA, “Automated LIDT system development for composite-structure power-laser,” *Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, TILA-LIC10-04 (2023).

K. HIROSAWA M. NISHIDA J. NOMURA T. YANAGISAWA N. OHATA and T. TAIRA, “High brightness gain aperture microchip laser for Joule-class compact power laser system,” *ATLA-Project 1, Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022*, LIC3-03 (2022).

B-3) 総説, 著書

T. TAIRA, “Fundamental Study on Laser Induced Breakdown Plasma and Engine Ignition,” *J. Combust. Soc. Jpn.* **64(207)**, 58–64 (2022). DOI: 10.20619/jcombsj.64.207_58 (in Japanese)

M. YOSHIDA, R. ZHANG, X. ZHOU, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Recent Status of Laser Driven Dielectric Accelerator,” *Rev. Laser Eng. (Special Issue on the Future of Laser Acceleration)* **50(7)**, 354–358 (2022).

T. TAIRA, “Lasers for Electron Acceleration Based on Micro Solid-State Photonic,” *Rev. Laser Eng. (Special Issue on the Future of Laser Acceleration)* **50(7)**, 382–387 (2022).

B-4) 招待講演

平等拓範, 「【LIC】小型集積レーザーの自動車展開」, OPIC2022 セミナー「新ビジネス展開の鍵が潜む世界の先端光技術」, オープンセミナー『5G/beyond 5G 時代の革新的ネットワーク技術』, OPTICS & PHOTONICS International Exhibition 2022 (OPIE '22), パシフィコ横浜, 横浜, 2022年4月.

平等拓範, 「先進レーザーの様々な自動車展開——小型集積レーザーを中心に——」, 自動車産業で活躍するレーザー, レーザー基礎&応用技術セミナー, OPTICS & PHOTONICS International Exhibition 2022 (OPIE '22), パシフィコ横浜, 横浜, 2022年4月.

平等拓範, 「マイクロチップレーザーの開発と展開(仮)」, 電子情報通信学会レーザー・量子エレクトロニクス研究専門委員会(LQE) / レーザー学会合同研究会(LSJ) 合同7月研究会, 彦根, 2022年7月.

平等拓範, 「極限固体レーザーとレーザー加速」, 第26回(2022年度)福井セミナー, オンライン開催, 2022年8月.

平等拓範, 「TILA コンソーシアムの活動」, 光産業技術振興協会, 2022年度多元技術融合光プロセス研究会第2回研究交流会, 分子科学研究所, 岡崎, 2022年9月.

佐野雄二, 平等拓範, 「小型レーザー開発の最前線とそのピーニング・フォーミングへの応用」, レーザー学会学術講演会第43回年次大会, ウィンクあいち, 名古屋, 2023年1月.

平等拓範, 「国際会議Photonics West 2023参加報告」, 光産業技術振興協会, 第4回光材料・応用技術研究会, ハイブリッド開催, 2023年3月.

T. TAIRA, “High-power extreme solid -state laser in giant micro-photoniscse,” ATLA-Project 1, Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022, Yokohama (Japan) (Hybrid), April 2022.

A. KAUSAS and T. TAIRA, “Inter layer assist surface activated bonding for TILA PowerChipe,” ATLA-Project 1, Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022, Yokohama (Japan) (Hybrid), April 2022.

K. HIROSAWA, M. NISHIDA, J. NOMURA, T. YANAGISAWA, N. OHATA and T. TAIRA, “High brightness gain aperture microchip laser for Joule -class compact power laser systeme,” ATLA-Project 1, Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022, Yokohama (Japan) (Hybrid), April 2022.

M. YOSHIDA, T. TAIRA, A. KAUSAS, A. TSUJI and Y. VINCENT, “High power laser development based on the direct bonded laser crystal technology,” ATLA-Project 2, Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2022), OPIC 2022, Yokohama (Japan) (Hybrid), April 2022.

T. TAIRA, “Tiny Integrated Laser Power Chip for Electron Acceleration,” The International Conference on Laser, Plasma and Radiation-Science and Technology (ICLPR-ST 2022), Bucharest (Romania), June 2022.

T. TAIRA, "TILA Power-Chip for Laser-Driven Electron-Acceleration," The XXIII International Symposium on High-Power Laser Systems and Applications (HPLS&A 2022), Prague (Czech Republic), June 2022.

T. TAIRA, "High Power, High Brightness Microchip Lasers and Their Applicationse," The 83rd JSAP Autumn Meeting 2022 (JSAP-Optica-SPP Joint Symposia 2022), Jpn. Society of Appl. Phys., Kawauchi-Kita Campus, Tohoku University, Sendai (Hybrid), September 2022.

B-5) 特許出願

US2022143752, "Laser Processing Device, and Laser Processing Method," T. TAIRA, Y. SANO, L. ZHENG and H. H. LIM, 2020年.

US20220271488, EP3989374, "Method for Manufacturing Optical Element and Optical Element," T. TAIRA, A. KAUSAS and L. ZHENG, 2020年.

US20220329205, EP4027194, CN114341727, "Crystal Element, Method For Manufacturing Same, and Optical Oscillation Device Including Crystal Element," H. ISHIZUKI and T. TAIRA, 2020年.

WO2022158529, "Optical Element, Optical Device, and Method For Producing Optical Element," T. TAIRA, 2022年.

EP4120014, CN115280608, "Optical Oscillator, Method for Designing Optical Oscillator, And Laser Device," T. TAIRA and H. H. LIM, 2021年.

特許登録(米国)US20220271488, "Method for Manufacturing Optical Element and Optical Element," T. TAIRA, KAUSAS Arvydas and L. ZHENG (登録日 2022年 11月 29日).

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-), 諮問員(2012.4-2022.5), 「小型集積レーザー」技術専門委員会主査(2021-2025).

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-).

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-).

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-).

日本光学会生体ひかりイメージング産学連携専門委員会委員及び幹事(2022-2026).

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(2021-2023).

SPIE Maiman Laser Award Subcommittee 委員(2020-2023).

科学技術交流財団「ジャイアント・マイクロフォトンクス」研究会座長(2021-2024).

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)(2019-2024).

Mid-Infrared Coherent Sources (MICS) 2022, テクニカル・プログラム委員会委員(2021-2023).

OPTICS & PHOTONICS International Congress 2022 (OPIC2022), 国際会議組織委員会委員 (2021–2023).

OPTICA Laser Congress and Exhibition, Advanced Solid State Laser Conference (ASSL '22), 国際会議プログラム委員会委員 (2022).

The 25th Congress of the International Commission for Optics (ICO-25), プログラム分科委員会委員 (ドイツ, ドレスデン) (2022).

CLEO/Europe 2023, Solid-State Lasers, 国際会議プログラム委員会委員 (ドイツ, ミュンヘン) (2022–2023).

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).

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 (2021–2024).

B-10) 競争的資金

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年度–2020年度), 自然科学研究機構佐野雄二 (2021年度–2026年度)), 平等拓範 (再委託) (2017年度–2026年度).

科学技術振興機構 CREST 研究, 「ジャイアントパルス・マイクロチップレーザーの生体応用への最適化」, 平等拓範 (2017年度–2022年度).

安全保障技術研究推進制度, 「ジャイアント・マイクロフォトンクスによる高出力極限固体レーザー」, 平等拓範 (2020年度–2022年度).

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: 和氣弘明), 平等拓範 (再委託) (2017年度–2022年度).

文部科学省平成 30 年度科学技術試験研究委託事業 (Q-LEAP) 「先端レーザーイノベーション拠点「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」部門」, 「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」 (② a.10KHz 赤外 OPCPA 光源の開発), 再委託 (東京大学), 平等拓範 (2018年度–2027年度).

中小企業経営支援等対策費補助金 戦略的基盤技術高度化支援事業 (サポイン), 「狭隘部への適用が可能な可搬型レーザーピーニング装置の開発」 (事業管理機関: 公益財団法人名古屋産業科学研究所, 総括研究代表者: LAcubed), 平等拓範 (副総括研究代表者), (2020年度–2022年度).

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年度–2022年度).

B-11) 産学連携

受託研究, (株) コンボン研究所, 「物資, 生命, コンピューター科学の融合領域における光科学視点の調査研究」, 平等拓範 (2022年度).

共同研究, 東芝エネルギーシステムズ (株), 「マイクロチップレーザーを用いた非接触超音波検査」, 平等拓範 (2022年度).

共同研究, 東海光学 (株), 「透明樹脂内部へのレーザー加工にかかる研究開発」, 平等拓範 (2022年).

共同研究, 東海光学 (株), 「高出力密度レーザー材料に適した表面処理法の開発」, 平等拓範 (2022年).

共同研究, 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年度–2022年度).

共同研究, トヨタ自動車(株), 「量子LiDAR や量子イメージング向けに, 高輝度レーザーとPPLN 等の多機能非線形光学材料を用いた量子光源の研究を行う」, 平等拓範 (2022年度-2023年度).

共同研究, (株)村田製作所, 「水晶波長変換デバイスの研究」, 平等拓範 (2018年度-2022年度).

共同研究, (株)成田製作所, 「マイクロチップレーザーによる成型手法の開発」(2022年度).

共同研究, 三菱電機(株), 「小型集積化に向けた高強度レーザー光源研究開発」(2022年度-2023年度).

C) 研究活動の課題と展望

先端的レーザー光源の中で, 特にビーム高品質化(空間特性制御)ならびに短パルス化(時間特性制御)などの高輝度化, そしてスペクトルの高純度化を広い波長領域(スペクトル特性制御)でコンパクト化と同時に実現することは, 極めて重要な課題である。一方, 極限的な粒子加速が期待されるレーザー加速では, 物質の性質を原子・分子レベルで解明し, さらに化学反応などの超高速の動きを捉えることができ, 広範な分野の最先端研究に利用される加速器, 特にX線自由電子レーザー SACLA をトレーラーサイズにまで小型化できると期待される。しかし, その加速のための高強度レーザーが非常に大型であることが深刻な問題となり, マイクロ固体フォトニクスへの期待が高まっている。今後, レーザー加速による小型加速器の構築を目指すと共に, レーザー加速に資する先端レーザー科学を, 別途, 社会連携研究, 小型集積レーザー (TILA, Tiny Integrated Laser) コンソーシアムにて製造, 医療, 環境・エネルギー問題などに展開し, 基礎研究の推進が社会貢献に繋がることを検証して行きたい。

6-10 研究施設等

機器センター

湊 文 俊（主任研究員）（2020年6月1日着任）

兵藤 由美子（事務支援員）

A-1) 専門領域：表面界面科学，エネルギー変換，物理化学

A-2) 研究課題：

- a) 走査プローブ顕微鏡の高度化と物性・反応機構の解明
- b) 表面界面におけるエネルギー変換の機構解明
- c) 環境浄化反応の材料物性と反応機構解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 構築した大気非暴露環境で稼働する電気化学走査プローブ顕微鏡のシステムを用いて，原子およびナノレベルの物性を解析した。結晶性と平坦度を高めた試料を用いることが出来るセルを開発し，昨年度よりも高感度かつハイスループトな測定を可能にした。昨年度は電極電解液界面に生成する界面膜の機械物性を数十個のデータから解析していたが，今年度は，1000~10000以上のデータを用いてその特性を解析した。その結果，これまで見えなかった新しい特徴を検出する事が出来た。また，走査プローブ顕微鏡の画像から新たな情報を引き出す手法の開発を進め，第一原理計算を用いた解析によって，固体表面での電子的な相互作用の特徴を解明することに成功した。
- b) 固体と液体の界面で起きる現象には，温度による影響を大きく受ける現象がある。これらの現象が生まれる物性や機構を解析するために，本年度は気体雰囲気中で固液界面系の温度を制御するシステムを構築し，走査プローブ顕微鏡測定を行った。低温での固液界面観察に成功し，ナノレベルでの構造を観察する事が出来た。また，フォースカーブ解析によって，機械特性などの物性を測定することに成功した。
- 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原子レベルでの構造解析を行った。イオン交換反応によって構造が変化する様子を解析し，さらに特徴解析などを用いて，構造と性能の相関を解析した。また，イオン交換反応中における金属酸化物単粒子の変化を in-situ 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

Y. TAKABAYASHI, K. KIMURA, H. KONISHI, T. MINATO, R. TAKEKAWA, T. NAKATANI, S. FUJINAMI, T. ABE and K. HAYASHI, “Study of Behavior of Supporting Electrolyte Ion of Fluoride Shuttle Battery Using Anomalous X-Ray Scattering,” *Adv. Energy Sustainability Res.* **3**, 2200020 (2022). DOI: 10.1002/aesr.202200020

H. KONISHI, R. TAKEKAWA, T. MINATO, Z. OGUMI and T. ABE, “Interactions among Solvent, Anion Acceptor, and Supporting Electrolyte Salt in Fluoride Shuttle Battery Electrolyte Based on Nuclear Magnetic Resonance,” *Energy Storage* **e403** (2022). DOI: 10.1002/est2.403

B-4) 招待講演

湊 丈俊,「ナノレベル解析手法の最前線」, 東海・北陸地区国立大学法人等技術職員合同研修, 岡崎市, 2022年9月.

湊 丈俊,「科学を学ぶ意義」, 令和4年度青森県高教研理科部会研究大会, 八戸市, 2022年8月.

T. MINATO, “Physical properties of defects on metal oxide surfaces analyzed by scanning probe microscopy,” IMS symposium “Metal-Oxides: Structure Chemistry of Films and Surfaces,” Okazaki (Japan), September 2022.

T. MINATO, “Interfaces between electrode and electrolyte in rechargeable batteries analyzed by scanning probe microscopy,” 14th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices '22 (ALC'22), Nago (Japan), October 2022.

T. MINATO, “Physical properties of atomic defects on titanium dioxide studied by scanning probe microscopy,” The International Ultrafast Knowledge Coffee House, Pittsburg (USA) (Online), January 2023.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会 代議員 (2023-).

学会の組織委員等

ALC'22 国際会議 プログラム委員 (2022-2023).

ISSS10 国際会議 プログラム委員 (2022-2023).

ICSPM 国際会議 プログラム委員 (2021-2023).

理科教育活動

出前授業「光のてこを使って目に見えないモノの形と働きをさわって調べる顕微鏡を体験しよう——てこの勉強のとき、どうしてめんどうな計算をするんだろう? ——」岡崎市立六名小学校 (2023).

その他

青森県三戸町ふるさと応援大使 (2021-2023).

B-10) 競争的資金

文部科学省「英知を結集した原子力科学技術・人材育成推進事業」(再委託), 「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 共同研究のためのスタートアップ, 「昆虫のクチクラ表面構造から創る土付着低減素材」(代表: 森田慎一), 湊 丈俊(共同研究者) (2022年度).

中 村 敏 和 (チー ム リー ダー)

B-1) 学術論文

M. ITOI, T. NAKAMURA and Y. UWATOKO, “Pressure-Induced Superconductivity of the Quasi-One-Dimensional Organic Conductor (TMTTF)₂TaF₆,” *Materials* **15**(13), 4638 (2022). DOI: 10.3390/ma15134638

E. ITO, S. ITO, S. TAKANO, T. NAKAMURA and T. TSUKUDA, “Supervalence Bonding in Bi-Icosahedral Cores of [M₁Au₃₇(SC₂H₄Ph)₂₄]⁻ (M = Pd and Pt): Fusion-Mediated Synthesis and Anion Photoelectron Spectroscopy,” *JACS Au* **2**(11), 2627–2634 (2022). DOI: 10.1021/jacsau.2c00519

S. TAKANO, E. ITO, T. NAKAMURA and T. TSUKUDA, “Effect of Group-10 Element M (Ni, Pd, Pt) on Electronic Structure of Icosahedral M@Au₁₂ Cores of MAu₂₄L₁₈ (L = Alkynyl, Thiolate),” *J. Phys. Chem. C* **127**, 4360–4366 (2023). DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c09037

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

電子スピンスイエンズ学会代議員 (2018–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構 創発的研究支援事業 事前評価, 外部専門家 (2021–2022).

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, C. JONGWOHAN, N. OHTSUKA, P. CHAIBUTH, T. FUJINAMI, K. ADACHI and T. SUZUKI, “Chiral Counteranion-Directed Catalytic Asymmetric Methylene Migration Reaction of Ene-Aldimines,” *J. Org. Chem.* **87**(14), 9399–9407 (2022). DOI: 10.1021/acs.joc.2c00742

B-7) 学会および社会的活動

理科教育活動

出前授業「おもしろい形の分子を作る」岡崎市立竜美ヶ丘小学校 (2022).

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年度–2025年度).

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) ORION2022（Okazaki Research Institutes Organization Network）において，Google Workspace 等のパブリッククラウドサービスの利用を前提としたゼロトラスト・アーキテクチャを取り入れたシステム構築を行い，従来のORION 主認証システムを拡張し，ゼロトラストを実現する認証基盤とした。ORION 主認証システムは，FIDO規格に準拠した多要素認証（MFA）を利用した新しい統合認証システム（IdP）に改修し運用している。ORION2022 主認証システムは，ORION へのネットワーク接続時の定期的な端末及びユーザ認証，VPN接続時ユーザ認証及び Google Workspace 等のユーザ認証に利用され MFA 及びシングルサインオン機能を提供している。また，MFA を行う事により確実に本人確認が行えるようになった。2023 年度の早い段階で Microsoft365 の認証も統合できるように開発を進めている。

更に，アンチウイルス・ソフトウェアに代わり新たに端末向けに EDR（Endpoint Detection and Response）の導入や端末の脆弱性検査機能の導入など，ゼロトラストを実現する上で重要な本人認証及び端末健全性の担保を行えるようにしている。

- b) ORION2022 で導入した器機及びサービスでは API の提供を原則求めており，提供された API によりログやイベントなどの自動取得や処理の自動化，器機／サービス間連携を行えるようになっている。また，標準で提供されていない機能についても API とローカルプログラムを組み合わせる柔軟に提供している。

C) 研究活動の課題と展望

ユーザや端末の認証と認可の統一化を推進していく。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，仕様化し調達を行い運用を開始している。更に，API によるシステム間連携が行えるようになっているため，API を用いた各システム間の連携や独自機能の開発と運用開始しており，今後機能拡張を行っていく。

技術推進部及び安全衛生管理室

B-1) 学術論文

F. KUMAKI, M. NAGASAKA, R. FUKAYA, Y. OKANO, S. YAMASHITA, S. NOZAWA, S. ADACHI and J. ADACHI, “Operando Time-Resolved Soft X-Ray Absorption Spectroscopy for Photoexcitation Processes of Metal Complexes In Solutions,” *J. Chem. Phys.* **158(10)**, 104201 (2023). DOI: 10.1063/5.0129814

T. FUJI, T. KANEYASU, M. FUJIMOTO, Y. OKANO, E. SALEHI, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, A. MANO, Y. HIKOSAKA, S. WADA and M. KATOH, “Spectral Phase Interferometry for Direct Electric-Field Reconstruction of Synchrotron Radiation,” *Optica* **10(2)**, 302–302 (2023). DOI: 10.1364/optica.477535

H. OTA, M. FUJIMOTO, K. HAYASHI, T. HORIGOME, H. IWAYAMA, M. KATOH, N. KONDO, S. MAKITA, F. MATSUI, H. MATSUDA, T. MIZUKAWA, A. MINAKUCHI, E. NAKAMURA, M. NAGASAKA, Y. OKANO, T. OHIGASHI, M. SAKAI, K. SUGITA, K. TANAKA, Y. TAIRA, F. TESHIMA, J. YAMAZAKI, T. YANO, H. YUZAWA and S. KERA, “UVSOR-III Synchrotron Update,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **2380**, 012003 (5 pages) (2022). DOI: 10.1088/1742-6596/2380/1/012003

Y. TAIRA, R. YAMAMOTO, K. SUGITA, Y. OKANO, T. HIRADE, S. NAMIZAKI, T. OGAWA and Y. ADACHI, “Development of Gamma-Ray-Induced Positron Age-Momentum Correlation Measurement,” *Rev. Sci. Instrum.* **93(11)**, 113304 (2022). DOI: 10.1063/5.0105238

F. MATSUI, Y. OKANO, H. MATSUDA, T. YANO, E. NAKAMURA, S. KERA and S. SUGA, “Domain-Resolved Photoelectron Microscopy and μm -Scale Momentum-Resolved Photoelectron Spectroscopy of Graphite Armchair Edge Facet,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **91(9)**, 094703 (2022). DOI: 10.7566/JPSJ.91.094703

V. SELVANATHAN, S. A. RAZALI, J. NISHIDA, M. TOMURA, G. MUHAMMAD, H. ABDULLAH, A. WATANABE and M. AKHTARUZZAMAN, “Deep Eutectic Solvent Assisted Ionothermal Synthesis of Cobalt Based Metal–Organic Complex as Electrode Material in Supercapacitors,” *J. Mater. Res. Technol.* **19**, 4417 (11 pages) (2022). DOI: 10.1016/j.jmrt.2022.06.131

F. MATSUI, H. OTA, R. EGUCHI, H. GOTO, K. KOBAYASHI, J. AKIMITSU, H. OZAKI, T. NISHIOKA, K. KIMURA, K. HAYASHI, T. SHIMANO, N. HAPPO and Y. KUBOZONO, “Multiple-Site Ag Doping in Bi_2Se_3 : Compositional Crossover from Substitution to Intercalation as Revealed by Photoelectron Diffraction and X-Ray Fluorescence Holography,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **264**, 147295 (2023). DOI: 10.1016/j.elspec.2023.147295

B-5) 特許出願

特許登録

特許第 7090242 号, 「コードレスハンダゴテ及び保持台」, 千葉 寿, 米倉達郎, 豊田朋範, 古館守通, 藤崎聡美 (自然科学研究機構, 岩手大学) (登録日 2022 年 6 月 16 日).

特許第 7170260 号, 「緊急防災ドッキングステーション」, 千葉 寿, 豊田朋範, 古館守通, 藤崎聡美 (自然科学研究機構, 岩手大学) (登録日 2022 年 11 月 4 日).

B-6) 受賞, 表彰

中村永研, 第 10 回日本放射光学会功労報賞 (2023).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会第 77 期・第 78 期代議員 (2021–2023). (豊田朋範)

理科教育活動

出前授業「低温が創る食品や料理, そして超伝導——低温の世界と不思議に触れてみよう——」岡崎市立新香山中学校 (2022). (豊田朋範)

出前授業「水溶液を使ったモノづくり」岡崎市立小豆坂小学校 (2022). (菊地拓郎)

B-8) 大学等での講義, 客員

岡野泰彬, 中部大学非常勤講師, 「力学」, 2022 年度春学期, 「基礎電磁気学」, 2022 年度秋学期.

7. 点検評価と課題

2022年度より James M. Lisny 教授（イリノイ大学）と北川 進教授（京都大学）に研究顧問に就任頂いた。2022年5月開催の IMS Presentations 2022 に Web 参加頂き、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。

2023年3月には、新型コロナウイルスによる感染者の大幅な減少を受けて、ハイデルベルグ大学の Matthias Weidem 教授に来所頂き、光分子科学研究領域を中心ヒアリングが実施され、各グループの研究内容と極端紫外光研究施設（UVSOR）の評価をいただいた。同じく2023年3月に、マンチェスター大学 David A. Leigh 教授が来所し、生命・錯体分子科学研究領域を中心にヒアリングが実施され、各グループの研究内容の評価をいただいた。

2023年2月に Web で開催された運営顧問会議では2022年度に実施した特任教員などの新たな雇用制度等、就任1年目の運営上の課題について議論頂いた。

（渡辺芳人）

7-1 運営顧問による点検評価

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、3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、分子研レポート2019において、7-1 国際諮問委員会による点検評価、また分子研レポート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レポートとして公開されている。また、2021年度に実施された運営顧問会議の議論内容が、川合前所長から申し送られている。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、渡辺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、渡辺所長の考える改革案に対する支持とアドバイスが表明された。

1. 日時： 2023年2月27日（月）10:00～11:00

2. 方式： オンライン開催（zoom会議）

3. 出席者：

運営顧問

菊池 昇 （株式会社コンボン研究所 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）

分子科学研究所

渡辺 芳人 所長

山本 浩史 教授 （研究総主幹，装置開発室長）

4. 議論内容：

人事制度改革案について

電気代の高騰について（情報共有）

7-2 光分子科学研究領域の評価

7-2-1 Matthias Weidemüller 外国人運営顧問

Report on the visit to the Institute for Molecular Science (IMS), Okazaki

22 March to 27 March 2023

Matthias Weidemüller (Heidelberg University)

This report is based on a visit to the Institute for Molecular Science from 22 March to 27 March 2023. On 22 March, Director General Professor Watanabe gave a general overview of IMS. On 23 and 24 March, there were presentations by a selection of PIs from different research departments of the institute, namely Professors Ohmori, Kera, Katho, Y. Taira, Matsui, and Tanaka from the Department of Photo-Molecular Science, Professor Sugimoto from the Department of Materials Molecular Science, Professor Kuramochi from the Research Center of Integrative Molecular Systems, Professors Okamoto and Kumagai from the Center for Mesoscopic Sciences, and Professor Taira from the Division of Research Innovation and Collaboration. The presentations were about 40–50 minutes each, including discussion. In addition, after the general introduction into the scientific activities at UVSOR Synchrotron Facility by Professor Kera on 24 March, I was also given a tour of the facility by him on the next day. On 27 March, DG Professor Watanabe had a closing discussion with me. Additional information for this report was extracted from the Annual Reviews of IMS of the years 2021 and 2022.

First of all, I would like to thank all members of IMS participating in the review as well as the team organizing my visit, who made it such a rewarding experience for me. I greatly enjoyed high quality of the presentations as well as the openness and honesty in the scientific discussions. Despite the limited duration of my stay, I could get a very good impression on part of the scientific activities at IMS as well as its general structure, which I will describe in detail in the following.

Before starting, I would like to make two disclaimers. First, most of the topics presented during my stay do not fall into my specific area of expertise. Therefore, my assessment is based on a rather general scientific point-of-view and thus cannot be regarded as a thorough evaluation, but more as a first impression from a non-expert in the field. Second, I have a long-standing and very fruitful collaboration with Professor Ohmori. So far, we have published two joint papers in the last years, a third one is close to completion. Therefore, my view on his scientific work is positively biased, and this obvious conflict of interest should be taken into consideration with regard to my statements on his research activities.

General remarks

IMS is one of five National Institutes of Natural Sciences of Japan. It is involved in a large number of prestigious national science programs. With UVSOR, it hosts one of Japan's synchrotrons as a user facility specifically dedicated to study the structure and dynamics of chemical and condensed-matter systems. IMS maintains a large number of national and international collaborations. The training of graduate students is structured in the framework of the SOKENDAI Graduate University of Advanced Studies.

IMS meets highest international standards in terms of its scientific activities as well as its infrastructure. It hosts a large number of internationally highly renowned research groups acting at the forefront of modern science. Collaboration within the institute as well

as with national and international partners appears to be natural, if not essential as part of IMS' mission and is supported by its structure through, *e.g.*, dedicated funds for joint research, inter-university research networks, or support for users at the multiple beamlines at UVSOR serving different research communities.

From the presentations and the discussions with the researchers from the various departments, I gained the very positive, general impression that their research is not merely driven by scientific mainstream or rather short-term goals, but instead by a deep interest in science as well as genuine curiosity. By the same token, technological developments are motivated by providing the best possible and sustainable solution to a given scientific question, be it, *e.g.*, instrumentation and detectors at UVSOR beamlines, or cutting-edge light sources in different IMS labs. Thus, these devices bear the promise to offer best performance and deliver excellent experimental results, thus setting standards for an entire field of research. I am certain that this kind of scientific honesty, paired with the serious dedication to the development of the best possible scientific instruments, is one of the key factors for IMS' outstanding national and international reputation.

UVSOR Synchrotron Facility and associated research groups

From the various presentations and the guided tour around UVSOR I came to the conclusion that such a facility is well suited to an institute of the size of IMS, as it can still be largely operated and maintained with local resources. The integration of the user facility into a diverse, inspiring scientific environment as represented by the different departments at IMS provides an important added value, which might even be explored further as it possibly was already in the past. UVSOR's operation parameters cover the range of comparably low energies (sub-GeV) combined with very high emittance. I am not an expert in electron synchrotron facilities at all, but all researchers involved in UVSOR could make a convincing case that the synchrotron is well positioned in the landscape of different synchrotron facilities in Japan and worldwide with regard to brightness and photon energies. Some of the experiments and investigations, in particular those addressing material science and biological applications, can actually be performed exclusively at UVSOR, also making use of its exquisite detector infrastructure. Therefore, UVSOR and its 14 beamlines serve a large number of national and, to a smaller extent, international users.

The different beamlines contain a large number of outermost sophisticated detectors serving a broad variety of scientific applications. Novel developments include tunable gamma-ray creation, generation of exotic light beams, and the development of Photoelectron Momentum Microscopy (PMM) and spin-resolved photoelectron spectroscopy. Due to the exquisite instrumentation, the beamlines cover a broad range of scientific applications ranging from condensed matter science, material science and biology, but also some more exotic topics such as medical applications or the structure analysis of meteorites.

Planning for future upgrade to the next generation of synchrotron facility at IMS, coined UVSOR IV, is already in progress. In this context, it will be an important task to provide a clear vision on how this future facility will maintain its competitive status, and to identify key scientific areas where the upgraded facility would provide unique scientific insights and world-leading discoveries. Ideally, design parameters for the facility as well construction plans for its instrumentation and detectors would follow from such general considerations.

Masahiro KATOH

Masahiro Katoh is responsible for the technological development and characterization of novel and highquality light sources at UVSOR. Important recent developments include the production of light beams with non-standard propagation properties (vortex and vector beams as well as temporally-structured light) using a combination of two undulators with a synchronized laser beam. In addition, a gamma-ray source based on laser-aided Compton scattering was developed offering tunable monochromatic gamma rays. A rather spectacular result is the detection of synchrotron radiation emitted from a single stored electron and the analysis of the corresponding detection statistics. Besides these scientific studies, he pushes technological design studies for the futures UVSOR-IV facility forward.

Fumihiko MATSUI

Fumihiko Matsui leads the development of photoelectron detectors at UVSOR for high-resolution electron and spin spectroscopy. He can look back to an impressive track record in the realization of 2D photoelectron spectrometers based on projection type analyzers for the study of spatially resolved atomic and electronic structure. Currently, he is heading towards further extending this technology to also reveal spin textures in condensed matter materials. While the focus of his work is on the development of instrumentation, there are important scientific results demonstrating, on the one side, the capabilities of the novel detectors. On the other side, serving the use of these detectors for studies of interesting properties of solid-state materials like, e.g., the valence band of graphite or chiral charge density waves. Being positioned between basic and applied science, his group maintains collaborations with scientific users of UVSOR from different academic institutions as well as with companies. His future plans follow a clear strategy and are well embedded into the general strategy of UVSOR. The outcomes of his activities are not only published as scientific papers, but there are also patents emerging from the technological developments.

Kiyohisa TANAKA

The group of Kiyohisa Tanaka develops instruments for Angular-Resolved Photoelectron Spectroscopy (ARPES) and applies these instruments to the investigation of the electronic structure of high- T_c superconductors, in particular from the families of cuprates and ironpnictides. For the cuprates, the role of phonons for the enhancement of the transition temperature could be revealed, while for the ironpnictides, the superconducting gap could be observed in the electronic structure of a specific material. His scientific program is well balanced between questions from basic condensed-matter science and the required technological development of instrumentation for addressing these questions. The latest technological achievements comprise the development of a new highly efficient spin resolved ARPES system with drastically improved momentum and energy resolution. Soon, information on the spin structure will be accessible in all three dimensions by the integration of a spin manipulator foreseen as the next upgrade of the instrument.

Yoshitaka TAIRA

The research theme of Yoshitaka Taira is the the generation of novel gamma-ray sources using high-energy electron beams. He uses the unique possibilities offered by UVSOR's energy range to create cw or pulsed gamma rays in the mid-MeV range through inverse Compton scattering. As an important application, the availability of coherent gamma radiation at UVSOR opens novel applications using positron annihilation spectroscopy for probing defects in condensed matter samples. As a specific innovation, age-momentum correlations have recently been demonstrated successfully as an extension of standard positron annihilation spectroscopy. Future

plans include the generation of spin-polarized positrons using the available circularly polarized gamma rays, and the creation of gamma-ray vortex beams from Nonlinear Inverse Thomson Scattering based on a proposal of Professor Taira and coworkers. Professor Taira recently joined IMS. His research is very well embedded into the research agenda of UVSOR facility, significantly extending the current capabilities of gamma-ray generation and offering intriguing applications in material research through high-resolution gamma-ray induced positron annihilation spectroscopy.

Research groups from the Department of Photo-Molecular Science

Kenji OHMORI

The group of Kenji Ohmori pursues non-standard approaches for the implementation of quantum information processing and quantum simulation. The experiments ingeniously combine techniques from the physics of ultracold gases, in particular Bose-Einstein condensates, optical lattices, optical tweezers and frozen Rydberg gases, with the application of coherent control techniques employing ultrashort laser pulses. As a recent highlight, the group has demonstrated controlled energy exchange between two single Rydberg atoms on a nanosecond time scale, which constitutes an important precursor step for implementing ultrafast qubit gates. Kenji Ohmori is internationally highly recognized and plays a leading role in Japan's national quantum information program. His group is internationally highly connected and recognized, which is also reflected by the large number of highly talented international researchers and PhD students working in his team.

Hiromi OKAMOTO

Hiromi Okamoto is an internationally highly renowned researcher famous for his contributions to near-field chiro-optical imaging and microscopy. The work which he presented in our meeting was truly impressive. Among recent spectacular results are, the observation of the enhancement of spin-orbit interactions and chirality by a pair of oppositely polarized spins in an organic chiral superconductor, the development of high-precision circular dichroism spectroscopy, or the demonstration of optical gradient forces on chiral particles. These achievements provide exciting perspectives for further future developments in the field of nanoscopic chiroptics with plasmonic enhancement. Without any doubt, he will continue to shape this important research field as one of its internationally leading researchers.

Satoshi KERA

Satoshi Kera fulfills a double task at IMS in an impressively effective manner: On the one hand he is the head of the UVSOR facilities and thus responsible also for developing concepts for the next upgrade of this synchrotron facility (see statements on UVSOR above). On the other hand, he also leads a research team devoted to studies of the electronic properties of functional organic materials. While his core group is rather small with only few students, he takes great profit from collaborations with researchers exploring the rich capabilities of the UVSOR facility and its dedicated beam lines, like, *e.g.*, the Photoelectron Momentum Microscope. One current focus of his research are studies on the dynamics of polaron formation and dynamics in organic semiconductor materials.

Research group from the Department of Materials Molecular Science

Toshiki SUGIMOTO

Toshiki Sugimoto and his team study the role of interfacial water and ice using heterodyne-detected nonlinear spectroscopy for

unveiling the molecular orientation. This innovative technique, which directly detects the proton configuration of the OH-stretching mode in water molecules, finds fruitful applications in a broad variety of material systems as explored by his group at IMS. Recent achievements include the observation of the emergence and disappearance of net proton order in heteroepitaxially grown crystalline ice films on metal surfaces as a model system of a strongly correlated proton system, or the impact of interfacial water on the C–H activation in photocatalytic methane conversion. Overall, Toshiki Sugimoto makes very efficient use of the unique capabilities of the nonlinear spectroscopy methods, which he developed, to a broad range of systems featuring interfacial water. The results obtained have high impact on the fundamental understanding of the importance of interfacial water as well as offering intriguing opportunities for engineering surfaces for novel functionalities in water aggregates.

Research group from the Research Center of Integrative Molecular Systems

Hikaru KURAMOCHI

Hikaru Kuramochi has recently joined IMS faculty from RIKEN introducing advanced ultrafast spectroscopy for studies of chemical reaction dynamics reaching from larger molecular ensembles down to the single-molecule level. For this purpose, the group also develops novel light sources for highly sensitive time-resolved 2D Raman spectroscopy of electronic and vibrational molecular degrees of freedom. In the past, Hikaru Kuramochi has already obtained impressive scientific results with high impact. Based on his outstanding career path, he presented a very ambitious, yet convincing work program with the realistic perspective to produce important scientific results at IMS in the very near future. Within a very short period of time, the (still rather small) group has built up a state-of-the-art laser lab featuring Raman spectrometers with unprecedented performance and has already realized the essential precursor steps for single-molecule ultrafast spectroscopy. I was intrigued by the nice combination of cutting-edge technological developments with exciting applications to basic science. The group maintains collaborations with a large number of groups in Japan, in particular for exploring a broad variety of molecular and material systems using the unique capabilities of time-resolved Raman spectroscopy. The future prospect of applying time-resolved correlation spectroscopy to single-molecular complexes in solution could potentially become a real game-changer for the entire field of molecular reaction dynamics.

Research group from the Center for Mesoscopic Sciences

Takahashi KUMAGAI

Takahashi Kumagai recently came to IMS starting a new field of research on atomic-scale optical microscopy based on his previous experience as research group leader at the Fritz-Haber Institute in Berlin. He combines enhanced near-field optical coupling at specially designed plasmonic tips near surfaces with quantum plasmonics in the STM junction and time-resolved femtosecond laser spectroscopy. In a series of spectacular experiments, he could reach sensitivity down to the single atom or molecule level. At IMS, he is now further developing this intriguing field of research by combining ultra-broadband pulsed laser sources with atomic-force microscopy. In a very short period of time, he has set up a world-class lab at IMS. His ambitious goals already bear first spectacular results on nanoscale mid-infrared imaging and single-protein infrared spectroscopy. His group maintains a large number of national and international cooperations. I was very impressed not only by the internationally highly competitive research program, which he presented, but also by the outstanding results already achieved at IMS.

Research group from the Division of Research Innovation and Collaboration

Takunori TAIRA

Takunori Taira holds a double appointment at IMS and RIKEN. His expertise is on the development of laser ceramics for the realization of high-power laser sources, coined TILA (Tiny Integrated Laser). These ceramics laser materials find a broad variety of applications ranging from laser-driven beam accelerators over narrowband Terahertz generation and material processing to microlaser-induced ignition of combustion engines. Professor Taira has formed a large consortium of academic institutions and companies to further promote the TILA technology and to explore novel applications. For this purpose, a dedicated TILA Laboratory has been established at IMS. The excellent activities of Professor Taira demonstrate the remarkable potential of combining basic research with technological progress at IMS.

In conclusion, IMS hosts a large number of outstanding scientific groups covering a broad range of fields, yet with a tangible general mission in fostering interdisciplinary research in the crossroads between physics, chemistry and material science. I gained an outermost positive impression of its scientific and technological excellence, which makes it one of Japan's internationally highly visible research centers. My visit was very enjoyable from a professional as well as personal perspective, and I would like to thank all participating members of IMS for great efforts and their warm hospitality.

Heidelberg, 30 April 2023

7-3 生命・錯体分子科学研究領域の評価

7-3-1 David A. Leigh 外国人運営顧問

Prof. Dr. Yoshihito Watanabe

Director General

Institute for Molecular Science

Okazaki

Japan

24th April 2023

Dear Director Watanabe,

Evaluation of the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science of the NINS Institute for Molecular Science, Okazaki, Japan

Many thanks for the warm and kind hospitality of you and your colleagues during my on-site visit to the NINS Institute for Molecular Science on 6–8 March 2023. During my visit I was given in-depth presentations by Prof. Ryota Iino, Director of the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science, and other members of the Department and IMS. I also received presentations from Prof. Masahiro Ehara, Director of the Research Center for Computational Science (RCCS), Prof. Satoshi Kera, Director of the UVSOR Synchrotron Facility, Prof. Koichi Kato, Ex-Director of the Exploratory Research Center on Life and Living Systems (ExCELLS) and Distinguished Professor Makoto Fujita of the Division of Advanced Molecular Science. For reasons of clarity I have organised my report in 4 Sections, plus a Summary at the beginning.

Summary

The Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science at IMS is a center of research excellence that is tackling some of the most important and profound challenges in the molecular sciences today. Its success and performance is reflected not only in the outstanding research outputs (in terms of journal publications, invited lectures and prizes) of the current PIs, but also in the remarkable number of high quality scientists that have started their independent careers at IMS and then moved to be highly successful Associate or Full Professors at other universities.

The Institute and Department strengths include that the staff are well motivated and perform at the highest level. The leadership is outstanding. The level of equipment and instrumentation is well above that of many world class laboratories in the USA and Europe. This gives the groups at IMS a significant advantage over competitors worldwide in terms of their ability to tackle the toughest problems in science today. However, the IMS groups are considerably smaller than those of international competitors, which means that they simply do not have the human resource to exploit breakthroughs as quickly or as well as larger competitor groups internationally. A contributing reason for the small group sizes is the available budget for personnel, which is perhaps half that of competitors in the USA and Europe. Another factor may be poor access to the best students for recruitment purposes because of a general lack of integration and cooperation for mutual benefit with universities. A striking weakness in terms of staffing is the lack of diversity in gender at PI level. In my opinion, it is important for IMS, and for the future of Japanese science in general, that this is addressed as quickly as possible.

1. Overall impressions

My overall impression of IMS, and the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science in particular (one of the four Departments of IMS), is over-whelmingly positive: It is an influential and highly respected institute in the field of the molecular sciences. The Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science is globally renowned for carrying out high quality innovative research, its strong faculty, an excellent research environment, and collaborations with other institutions and universities, all of which make it a leading centre for research internationally.

2. The role of IMS in the national scientific landscape

The Institute for Molecular Science was founded in 1975. I believe that one reason for establishing national research institutes at that time was to support and supplement the national research effort of universities by being a focal point for ‘big’ facilities that individual universities could neither afford to purchase nor to run. This remains a compelling need today, for example few universities would be able to run a synchrotron. Nevertheless, the scientific era we live in now is very different from the 1970s, and many universities have large instruments and facilities that serve as resources for others researchers in Japan and worldwide. Within this changing scientific climate, research institutions and their position in national and international science strategies benefit from growth and reevaluation of purpose. In particular, the role and interaction of research institutions with other national bodies, such as universities, should evolve. In this regard, I note that IMS has undergone a healthy number of changes in structural organisation over its lifetime, including the establishment of many new, highly successful and internationally important, research centers.

A key part of IMS’s Mission Statement is that it should ‘...*enhance the progress of molecular science covering broader research areas via mutual exchange of human resources among all the universities in this country...*’. IMS fulfils this role admirably by providing an opportunity for researchers to be fully independent at a much earlier stage (associate professor) than is traditional in Japanese universities. For a dramatic example of the impact that independence at a young age can have in the chemical sciences, one need look no further than the 2021 Nobel Prize in Chemistry, awarded to Ben List and David MacMillan for the development of asymmetric organocatalysis. The two seminal papers that led to that Nobel Prize were the first (List) and second (MacMillan) papers of the recipients as independent PIs. Perhaps because they have no scientific program of their own to build on initially—or perhaps because of the impetuosity of youth(!)—young PIs are often less conservative than more established PIs and more inclined to explore radically new concepts and ideas that can lead to breakthroughs, and even completely new fields of science. The consequences of this aspect of IMS’s employment policy must be taken into account in any objective consideration of the impact and success of IMS.

Since IMS was founded in 1975, more than 60 IMS associate professors have been promoted to full professors or similar positions at other institutions, including the following researchers who are particularly relevant to the research area covered by the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science: Tatsuya Tukuda (Professor, University of Tokyo; <https://www.chem.s.u-tokyo.ac.jp/users/chemreact/index-e.html>); Takeaki Ozawa (Professor, University of Tokyo; <https://analyt.chem.s.u-tokyo.ac.jp/en/>); Hirokazu Tada (Professor, Osaka University; <http://molelectronics.jp/en/>); Hidehiro Sakurai (Professor, Osaka University; <https://www-chem.eng.osaka-u.ac.jp/~sakurai-lab/en/index.html>); Donglin Jiang (Professor, National University of Singapore; <https://blog.nus.edu.sg/chmjdp/professor/>); and Shigeyuki Masaoka (Professor, Osaka University; http://www.chem.eng.osaka-u.ac.jp/masaoka_lab/english/index.html).

In addition, nearly 130 IMS assistant professors have been promoted to full professors or similar positions at other institutions. Outstanding examples include: Mitsuhiro Shionoya (Professor, University of Tokyo; <https://www.chem.s.u-tokyo.ac.jp/~bioinorg/indexE.html>); Hiroshi Kitagawa (Professor, Kyoto University; <http://kuchem.kyoto-u.ac.jp/osscc/index.html>); and Hajime Ito (Professor, Hokkaido University; <https://itogroupphp.eng.hokudai.ac.jp/>).

These are staggeringly successful numbers. Although Japanese universities are increasingly allowing full independence of PIs earlier in careers, I believe that this is still one of the most important factors that makes IMS stand out as an attractive institution for outstanding young researchers wanting to start their independent academic career.

However, the very success of this role of IMS disadvantages the institute in terms of metrics such as citations and international awards. Since promotions in IMS are prohibited, all of your (very successful) young staff have to leave to be promoted elsewhere. It is at the Full Professor stage that one gets the full benefit, in terms of citations, recognition and funding, of having built an internationally important research program. The tremendous success of IMS is thus reflected in these 190(!) staff that have been promoted to positions elsewhere in the 48 years since it was founded. That is, on average, nearly 4 staff members a year for an institution that currently numbers 36 Full, Associate and Project Professors and 40–50 Assistant Professors.

3. Gender imbalance and lack of international diversity at PI level

IMS currently has 18 Full Professors (including Distinguished Professor Fujita), 16 Associate Professors and 2 Project Professors. Of these 36 senior academic staff, just one (Assoc. Prof. Momiyama) is female. This extremely poor gender imbalance at PI level is a weakness for many reasons: First of all it means that IMS is missing out on a huge amount of talent; secondly, it means there is a lack of senior role-models in IMS that would showcase to female young researchers that IMS is well set up for women to succeed in a scientific career. In contrast, the junior positions (PhD and Post-Doctoral Fellows) in all of the research groups I met with had good gender balance (typically 30–50% female). There are no doubt many reasons—historical, cultural, social and practical—that contribute to the gender imbalance at PI level, but it is a problem that I strongly suggest you start solving immediately.

Of course, it would be wrong to suggest that IMS is unique in having a gender imbalance problem; my own Department has only 15 women PIs out of 80 faculty, which is probably typical of UK Chemistry Departments. It is an issue in science academia that many western countries struggled with. My advice is to start by asking female professors and female PhD students what they think are the issues involved and what would make a difference to them. Then it will be up to men and senior leadership to take the lead in implementing solutions that women feel would make a difference. If, for example, young women scientists tell you that the non-promotion of Assistant or Associate Professors within the Institute is an issue because it is desirable to have stable roots for starting or growing a family then, in my view, that rule should be *very publicly* removed for women scientists. Other ways of supporting women professors, such as giving them a PDRA for a year any time they give birth to help them run their group during this important time, should be considered if, again, young female scientists tell you that they are reluctant to pursue academic careers because of the difficulty of juggling a young family with establishing their research program. These are examples of the sort of initiatives that might help make IMS an institute that women PIs really want to join. Let me reiterate that in my opinion the role of men in this should be to put into place initiatives that women say they want; it is not for men to concoct plans that they *think* women want.

Also on the issue of diversity, although less important, it feels to me like a missed opportunity that all 36 of the professors in IMS are Japanese. There is some international diversity within research groups—Prof. Iino’s group is an excellent example of this—it is at PI level that it is lacking. As with gender, diversity in terms of origins, ethnicity, upbringing and education brings different ways of thinking, not just with regards as to how to tackle scientific problems, but also in the way institutes and laboratories are organised and run. Europeans and Americans love Japan: The people, the culture, the country and the food. Although there may be cultural and language issues with attracting outstanding foreign PIs of the quality that would benefit the institute to move full time to Japan, I suggest it would be easy for IMS to attract outstanding foreign PIs to have satellite labs at IMS. Many leading chemists (including Fraser Stoddart, Ben Feringa and myself in the molecular machines field) have satellite labs in China, for example. I believe the Chinese have found that our presence (and that of many others) gives them insight into how leading US and UK scientists think and run their research programs and labs and that has benefitted Chinese science in their ways of thinking and scientific culture. Perhaps this is something that IMS could consider, maybe through participating in or leading bids in the WPI program, which could provide funding for such cross-national appointments.

4. The Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science

The Department has 8 research groups, four primarily associated with studies on the molecular basis and mechanisms of biological systems (Iino, Kato, Aono and Nakamura) and four motivated by unsolved problems in chemical synthesis (Uozumi, Kusamoto, Momiyama and Segawa). All of these groups are of very high quality; they tackle important fundamental problems in creative ways and publish their findings in the best international journals.

Prof. Ryota IINO

Professor Iino’s research focuses on the study of biomolecular motors using advanced imaging techniques. He is a world leader in the use of super-resolution microscopy to investigate the operational and design principles of molecular motors. These include the visualisation of fast dynamics of motor-molecules such as V-ATPase, kinesin, chitinase and dynein by single-molecule imaging. In the last few years he has expanded his group’s program to include the development of new cutting-edge single-molecule techniques for angstrom-precision tracking and high-speed tracking. This is a highly competitive area trying to answer profound questions regarding the way that biology works at the molecular level. Recent highlights include “*Direct observation of stepping rotation of V-ATPase reveals rigid component in coupling between V_0 and V_1 motors,*” *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **119**, e2210204119 (2022) and “*Combined approach to engineer a highly active mutant of processive chitinase hydrolyzing crystalline chitin,*” *ACS Omega* **5**, 26807–26816 (2020).

Prof. Yasuhiro UOZUMI

Professor Uozumi is a highly respected international leader in the development of highly effective heterogeneous catalysts, particularly for applications in green chemistry. In recent years he has developed highly active ppb-catalysts with turnover numbers >3 million for various coupling reactions and developed polymer supported asymmetric Pd-catalysts that work in water. He has recently applied his expertise in polymer supported reagents to photoredox catalysis in water, bringing a ‘green’ perspective to one of the hottest areas of synthetic organic chemistry today. Recent highlights include “*Photocatalytic carbinol cation/anion Umpolung: Direct addition of aromatic aldehydes and ketones to carbon dioxide,*” *Org. Lett.* **23**, 7194–7198 (2021) and “*Production of bio hydrofined diesel,*

jet fuel, and carbon monoxide from fatty acids using a silicon nanowire array-supported rhodium nanoparticle catalyst under microwave conditions,” *ACS Catal.* **10**, 2148–2156 (2020).

Assoc. Prof. Norie MOMIYAMA

Associate Professor Momiyama is well known for her significant, original and important contributions in asymmetric organocatalysis. She continues to use halogen bonding as a recognition element in new organocatalysts and polymer catalysts. She has recently started a highly ambitious program on the digitisation of chemistry which seeks to take organic synthesis to the frontiers of what is chemically possible. Recent highlights include “Three-center-four-electron halogen bond enables non-metallic complex catalysis for Mukaiyama–Mannich-type reaction,” *iScience* **25**, 105220 (2022) and “Chiral counteranion-directed catalytic asymmetric methylene migration reaction of ene-aldimines,” *J. Org. Chem.* **87**, 9399–9407 (2022).

Assoc. Prof. Tetsuro KUSAMOTO

Associate Professor Kusamoto’s group create photofunctions based on stable radicals. These include luminescent systems based on photostable triaryl radicals and magnetoluminescent systems. His group have a series of papers in the top journals in the field, such as *JACS* and *Angewandte Chemie*. Recent highlights include “An open-shell, luminescent, two-dimensional coordination polymer with a honeycomb lattice and triangular organic radical,” *J. Am. Chem. Soc.* **143**, 4329–4338 (2021) and “Radical-based coordination polymers as a platform for magnetoluminescence,” *J. Am. Chem. Soc.* **143**, 5610–5615 (2021).

Assoc. Prof. Yasutomo SEGAWA

Associate Professor Segawa is widely regarded internationally as a rising star in the field of organic chemistry. His research focuses on the development of new synthetic methods and strategies for constructing topologically complex carbon-rich molecules. He has published the synthesis of a series of extraordinary catenanes and knots and Mobius strip molecules. His research achievements have been published in the highest impact, most visible, journals, including *Science*, *Nat. Chem.*, *Nat. Synth.*, *JACS* and *Chem*. Recent highlights include “Synthesis of a Möbius carbon nanobelt,” *Nat. Synth.* **1**, 535–541 (2022) and “Topological molecular nanocarbons: All-benzene catenane and trefoil knot,” *Science* **365**, 272–276 (2019). In addition, he has started a research program on microcrystal electron diffraction structure determination which offers the potential for revolutionising structure determination of organic molecules.

Assoc. Prof. Akihiko NAKAMURA (cross-appointment)

Associate Professor Nakamura is a cross-appointment with Shizuoka University and his group’s research interests include protein engineering, heterogeneous enzyme catalysis, and single-molecule analysis. His research program is involved in developing and improving plastic degrading enzymes which have the potential to solve critical environmental problems related to plastic degradation. Recent highlights include “Positive charge introduction on the surface of thermostabilized PET hydrolase facilitates PET binding and degradation,” *ACS Catal.* **11**, 8550–8564 (2021) and “Domain architecture divergence leads to functional divergence in binding and catalytic domains of bacterial and fungal cellobiohydrolases,” *J. Biol. Chem.* **295**, 14606–14617 (2020).

Prof. Koichi KATO (ex-Director of ExCELLS)

The ambitious aims of this group are to understand how chemistry becomes biology, the origin of life. This is one of the contemporary ‘Grand Challenges’ of science, involving chemistry, physics and biology. Professor Kato collaborates with many groups around the world and has been hugely successful in establishing major consortia, such as ExCELLS. His group’s own research program is aimed at answering fundamental questions such as what is the blue print for protein glycosylation? and what are the design principles for protein assembling systems? Recent highlights include “*Key residue for aggregation of amyloid- β peptides,*” *ACS Chem. Neurosci.* **22**, 3139–3151 (2022) and “*An embeddable molecular code for Lewis X modification through interaction with fucosyltransferase 9,*” *Commun. Biol.* **5**, 676 (2022).

Prof. Shigetoshi AONO

Professor Aono is a bioorganic chemist whose research interests revolve around metalloproteins and sensor proteins. His group are working to establish the protein machinery responsible for the active site assembly and maturation of NiFe-hydrogenases and also the molecular mechanism of O₂ sensing and signal transduction by the HemAT/CheA/CheW complex. Recent highlights include “*Crystal structural analysis of aldoxime dehydratase from Bacillus sp. OxB-1: Importance of surface residues in optimization for crystallization,*” *J. Inorg. Biochem.* **230** (2022) and “*Heme controls the structural rearrangement of its sensor protein mediating the hemolytic bacterial survival,*” *Commun. Biol.* **4**, 467 (2021).

There are a number of successful collaborations between groups in the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science and other groups in IMS that clearly add value: For example, the Uozumi group with Prof. Ehara (Dept. Theoretical Comp. Mol. Sci.); Prof. Momiyama working with Prof. Suzuki (Instrument Center) on the design and understanding of complex catalysts; a series of highly successful collaborations between the Iino group and Prof. Okazaki (Dept. Theoretical Comp. Mol. Sci.) on simulations of chitinase, with Prof. Koga (ExCELLS) and Kosugi (CIMoS) on computational engineering of PET hydrolase and redesigning of V₁-ATPase, and with Profs. Kumagai and Nishida (Mesoscopic) on single protein vibrational spectroscopy; as well as a series of collaborations between the Kato group and various groups that bring both experiment and theory to bear on problems relating to amyloid formation mechanisms.

The quality of equipment in each group’s laboratories in the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science, and in the institute in general, is outstanding and significantly better than almost all university laboratories worldwide. The Segawa laboratories, in particular, are one of the best equipped labs for cutting-edge organic synthesis that I have ever seen. They are better equipped than my own lab, which is one of the best equipped labs in the UK! This gives the groups at IMS a significant advantage over competitors worldwide in terms of their ability to tackle the toughest problems in the molecular sciences today.

However, although they are highly productive, the groups tend to be significantly smaller than that of their international competitors (my own group, for example, is 30–35 researchers, equally split between PhD students and postdoctoral scientists). The small size of the groups in the Department inevitably means that they do not have the person-power necessary to capitalise on conceptual breakthroughs as quickly as others around the world would do.

I think that there are several ways that IMS could consider addressing this issue:

- (i) The first is that, in my opinion, there needs to be an increase in budget. I realise that it is always easy to say ‘give more money’ but, in this case, it is clear that the groups are underfunded in terms of personnel by a factor of 2 compared to their international competitors. This is a key disadvantage when one is in competition to find answers to important scientific problems.
- (ii) A second approach that might be useful could be to reconsider your relationship with universities. As I noted earlier, you have more and better laboratory equipment than universities, but they have more—and better access to—young researchers in the form of students. I suggest you consider the possibility of having more cross-appointments with universities, perhaps having IMS staff teach courses at the universities (which would give potential PhD students exposure to IMS staff as well as easing teaching loads for staff at universities). In this way universities would benefit by having easier access to more equipment and extra staff who would teach, while IMS would benefit from having better access to a larger pool of potential researchers. However, if this is done, care must be taken to ensure that cross-appointments are done properly. If I recall correctly, the cross-appointment of Prof. Nakamura requires him to teach a full teaching load at Shizuoka University. That appears from the outside to be completely inappropriate; if it is a cross-appointment then I would expect half his salary should be paid by the university (and half by IMS) and he should have, at most, a 50% teaching load and no administration at the university so as to take into account all the additional travel and work he has to do in order to play a substantial role in two locations.

I hope that this short report proves useful to you and your colleagues in thinking about how to continue to develop IMS. It is a truly fantastic institute with excellent scientists doing world class research. It has been a pleasure to visit and interact with such inspiring people, from the young researchers to the thoughtful generous leadership. Thank you for this opportunity.

Best wishes,



David A. Leigh FRS

Royal Society Research Professor & Sir Samuel Hall Chair of Chemistry, University of Manchester, UK

24 April 2023

8. 研究施設の現状と将来計画

共同利用設備を充実させ、大学等の共同利用研究者の研究支援を行うことは大学共同利用機関の主要な役目のひとつである。1975年の研究所発足当初から装置開発室と機器センターを設置し、1976年に化学試料室、1977年に極低温センターを設置した。さらに1979年には電子計算機センターに大型計算機を導入し、1983年から極端紫外光実験施設（UVSOR施設）で放射光源装置が運転を開始した。これらの施設では単に設備を設置するだけでなく、共同利用支援業務を滞りなく行うために技術職員を配置した。高度な研究を進めるためには研究開発が不可欠であり、研究職員との密な連携が必須である。

教員の流動性が高い分子科学研究所では、着任後の研究立ち上げスピードの速さが求められる。また、各研究グループサイズが小さいことも補う必要があり、このような観点でも施設を充実させることが重要である。また、分子研転出後もこれらの施設を利用することで研究のアクティビティを維持することが可能である。研究者が開発した優れた装置が転出後も、共同利用設備として施設の管理下でさらに広くの共同利用に供されるケースもある。このように、研究所にとって施設の充実、研究職員が流動していくシステムそのものを支援する意味もあり、施設の継続的な運営が重要である。高度な施設運営を維持するために施設の技術職員の技術の向上に努め、絶えず技術レベルの高い人材を確保するように留意している。技術職員が研究所外に出かけその高い技術力で研究支援するなどの技術交流も重要である。

現在、極端紫外光研究施設（UVSOR施設）、計算科学研究センター（組織的には岡崎共通研究施設のひとつ）が大型設備を有し、計画的に高度化、更新を行うことで世界的にトップクラスの共同利用を実施している。国内外の超大型の放射光施設やスーパーコンピュータ拠点との連携を図りつつ、差別化・役割分担を行い、機動性を活かした特徴ある共同利用が進んでいる。機器センター（2007年に旧機器センター、旧極低温センター、旧化学試料室の機能を再構築して設置）は本来の共同利用支援業務を行う一方で、全国規模でナノテクノロジーネットワーク事業や大学連携研究設備ネットワーク事業を推進し、特定分野の重点的な強化、大学等の研究を支えるシステム作りを行ってきた。また、装置開発室は高度な特殊装置・コンポーネント開発にその高い技術力を活かすべく、研究所外からの依頼に対応することで共同利用施設としての役目を果たしている。

分子研では、共同利用をより活性化し、大学の研究活動に貢献する施策として、2018年に新しい人事交流制度を開始した。これは、かつて法人化前に運用されていた「流動研究部門」制度を元に、現在の人事制度と我が国が置かれている状況とに対応した新たな取り組みである。具体的には、以下の2つの制度を通じて、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施策を実施している。特別研究部門では、(1) 2023年4月より、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である東京大学の藤田 誠卓越教授をクロスアポイントメントで分子科学研究所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。(2) 2022年度は、分子科学分野において産学連携を進める研究を行っている中村 彰准教授（静岡大学学術院農学領域准教授）が特別研究部門にクロスアポイントメント教員として着任した。

（渡辺芳人）

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 39 年が経過した。その間、2003 年度の第一期高度化（低エミッタンス化、直線部増強 4→8 か所）、2012 年度の第二期高度化（TOP-UP 運転、挿入光源追加、エミッタンス 27→17 nm rad）のように、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 10 年目を迎え、全 14 ビームラインのうち 6 基の先端計測放射光ビームライン設備が成熟し、主として材料科学、光化学、環境エネルギー分野の先端の実験成果の収穫期に入った。また UVSOR の高い光源性能とコンパクトな運転体制の特徴を活かした、独自性の高い特徴的な研究開発が行われており、新規量子ビーム源の開発や回折限界光源の特性を利用した放射光コヒーレンスの科学も推進している。その他の標準共同利用ビームライン（8 基）においても、国際的に唯一無二の可視光から真空紫外光まで連続した波長可変な分光システムが稼働しており、材料開発研究にて貴重な成果が発信されている。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中の次世代放射光施設 NanoTerasu と稼働中の大型放射光施設 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先端分析を利活用できるユーザーを育成することや、コミュニティ全般強化へ向けた組織間連携や、未活用分野への支援による研究領域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ある。こうした潜在的放射光利用者となりうる当該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く、岡崎三機関として基礎生物学研究所、生理学研究所との連携を深めることが重要で、これからの UVSOR が目指すべき方向性と捉えて検討を進めている。さらに 30 余年来にわたり積み重ねられた貴重な学術資産と、共同利用環境の継続的支援を視野に入れると、次期施設の建設計画（UVSOR-IV：仮）を算段する時期にあり、2018 年度より検討を開始し、日本学会会議へのビジョン提案やロードマップ申請へと準備を進めている。将来計画の経緯は過去レポート 2018～2021 もご参照いただきたい。2022 年度はシンポジウム（第五回検討会：施設間連携）を開催し、UVSOR 利用者懇談会と次期施設の目指すべき形態についての概要がまとまった。概要は、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成熟期にあり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、マルチビームやマルチモーダル計測など、より挑戦的な光計測の手法開拓を目指す。そして、光源として放射光のみならずレーザー光源（自由電子レーザーや卓上小型レーザー）を多彩に活用できる実験設備を提供することで、計測を通じて多くの分野を融合し、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に入射加速器として用いる計画も検討した。この技術は相補的に 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。前者の融合拠点には、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、現組織規模を倍程度に大きくした「極限光科学イノベーションセンター（仮）」の組織改編を検討している。特にバ

イオ系の実験手順では、放射光を利用した実験の前後の評価や試料調製環境の充実が不可欠である。一方、後者の学術開拓は、高出力かつ安定なレーザー光源技術の進展のみならず、入射加速器への応用のための更なる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。こうした以上の提案を日本学術会議が募集した「未来の学術振興構想」の策定に向けた「学術の中長期研究戦略」施設計画の提案に対し、UVSOR 将来計画をベースにした提案「複雑系・不均一系の分子ダイナミクスに挑む量子光科学拠点の構築」を提出した。その後、グランドビジョン「量子ビームを用いた極限世界の解明」にグルーピングされる予定である。その後も議論が進められているが、各種プロジェクトへの申請に向けた議論が進められる中で、バイオ系を中心とした未活用分野への研究展開が検討され、岡崎三機関間連携の方向性が議論された。2023 年度からのバイオ系ユーザーの支援を目指した光計測機能強化を目的に掲げ、文部科学省のロードマップ 2023 へ向けた申請準備を開始している。現 UVSOR-III は次施設建設までへの研究活動の持続性を担保することが責務であるが、同時に、次期施設へ繋ぐための軟 X 線や真空紫外線を用いたバイオ系の斬新な研究成果の発信を狙い、着実な需要開拓を目指したい。また、光源グループによる先端的量子ビーム実験環境・設備の継続的な深化も重要で、低エネルギー帯施設における国際的な発信力を強化したい。

8-1-2 光源加速器の現状と将来計画

現在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、2030 年付近で大規模な更新が想定され、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げ、国際的にも希少かつ競争力のある貴重な極端紫外放射光源を安定供給し続けることで、多彩な分野の学術発展に資する大学共同利用機関の使命を果たす責務がある。このうち数億円規模の高額設備以外については逐次更新を行ってきているが、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決定（2019 年度）し、順次進めている。2022 年度は電力料金の高騰問題があり節電対策を検討し、昨年度比で同月毎 2~10% の使用量削減に成功した。電気料の圧縮は一定程度の実行ができたが、予算使途対策としては費用対効果は小さく、抜本的な解決策とはいえない状況である。次年度に向けて、空調設備をインバーター空冷型への変更を検討している。いずれも水冷型で、現 7 台の耐年経過による更新時期が間近である。現状は水冷型空調機であるため on/off のスイッチングにおける設備膨張率の影響があり、蓄積リング内における数 10 マイクロメートル程度のビーム軌道の空間変動に効いてくる。ビーム軌道補正により対処しているが、更新により恒温環境になれば高精度実験へ向けたより高水準の調整が可能と考えている。

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。こうした研究は、大型施設では通常の放射光ユーザーのための定常運転への影響があるため困難であるが、小型施設ならではのメリットとして、光源パラメータ操作の自由度が高いことや、週末実験などで定期的な実験環境が与えられていることがあげられる。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。前述のように特殊運転が必要な実験は、ユーザー利用の無い週末あるいは特定の専用運転週をユーザー利用週の間を設定して運営してきた。今後の需要バランスを鑑みて、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、2022 年春に蓄積リングの電子バンチ軌道を新たに設計し、新軌道で定常運転することに成功した。その他、ここ 1-2 年は、加藤特任教授（クロアポ）らによる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も行われているが、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。アカデ

ミア全般で人材難が深刻になりつつあるが、助教2名の転出等により加速器関連のスタッフ不足に陥っている。共同研究者であるパワーユーザーに兼任職を依頼することで人的補填とし、特殊運転業務を運用している。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、国際的な10年程度の先端開発研究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る方針である。

軟X線BL6Uでは、2020年から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。2022年度に二次元スピン検出ユニットを導入し、スピン分解機能を付加した同顕微鏡装置の最終設備開発が始まった。さらに、低エネルギーVUVのBL7Uの光源をブランチ化し、同顕微鏡に導入する機構を立ち上げ中である。一方、同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。またいずれも電子構造の大規模な多次元計測の効率化のために、計測自動システムの構築を進めている。

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。2022年度から、絶縁性試料や易光損傷試料系における需要を鑑み、BL4Bにおける有機用角度分解光電子分光エンドステーションによる実験支援を開始した。代わりに既BL2Bにおける光電子分光システムの利用支援は次年度は停止する。将来的には空きスペースを活用し、オペランド化学状態計測ビームラインの拡張を計画している。なお、結果的にBL4Bは複数の実験設備が併設されることで利用コミュニティが多岐にわたり、磁気円二色性(XMCD)実験や、その他X線吸収分光実験の需要と共に申請競争下に置かれることとなった。審査体制を見直し、半期毎にこれら3分野の割り当て実験週数を策定し、それぞれの枠内で配分審査を実施することとした。

一方で、小規模施設の運営面の課題として、ビームラインスタッフの増強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、UVSORは組織規模に比して極めて少人数で運営している。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(合計60時間/週)。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」という運用方針のも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。また週末運転やスタディ運転では、所外のパワーユーザーに兼任職として支援を依頼している。グループ助教の空きポスト人事も平行しているが、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ければ、採用枠を確保しスタッフとして迎えたい。運営面では後述のように、課題審査システムを抜本的に見直し、スタッフ業務の軽減をはかっている。

8-1-4 中長期計画（次期施設計画，課題審査システム再構築）

2018年度より、UVSOR-IIIの後継となる次期小型放射光施設の建設に関する検討が進められている。2023年度は40周年事業に合わせ、各実験手法を軸として次期施設コンセプトデザインレポートをまとめる予定である。歴史を振り返ると、光科学は光源技術の深化と共に多様な分野へ発展してきたが、まだ多くの未活用分野が残る。特に近年の化学・バイオ系分野の需要の高まりに対応できていない。かつてUVSORでもそうであったように、複雑系の計測は萌芽的に試みられてきたが、当時の技術背景もあって成功例が十分とは言えない。今後、新たな学術開拓を目指すためには、これまでの易損傷物質への計測技術ノウハウを元にした、放射光施設の支援体制の抜本的な変革が求められる。成熟した各種光源の最適化・安定化を軸に、時代背景に即した使い易いインフラ環境と高度な研究支援体制による光科学の一般化を実現し、岡崎三機関の研究土壤を生かした新たな融合生命分子科学拠点を構築する計画である。個人研究から協調的研究活動の時代へ適合するための融合型ファシリティと組織体制改革が効果的で、光源技術の集約と組織規模の拡大により支援体制を刷新する。新センターは現状の倍程度である60余名規模の支援体制を想定している。また、歴史的にUVSORの強みである新たな量子ビーム開発技術を元にした先端光科学による新規基盤学術の開拓によるブランド化も有効であるため、一般化と合わせた二面展開による中核研究基盤を構築する。

大小様々な検討会を積み重ねてきているが、11月に行われた第五回次期施設建設検討会においては、NanoTerasuとあいちSRセンターとの連携について議論した。あいちSRの産業利用に特化した利用コンセプトと支援システムは極めて特徴的で、利用率の6割強を民間企業が担う稼働実績は、国際的にみて極めて独自であり、同様の目標を掲げる欧州施設のロールモデルとなっているほどである。放射光大国として10か所のリング型施設をもつ我が国の強みが発揮されている点、つまり施設の役割分担が効果的に機能している事例ともいえる。中部地区の放射光施設としては、産学利用の役割分担を意識し、有効な連携関係を継続していくことが望ましいだろう。例えば産業利用でよりアドバンストな実験が求められる時には、UVSORで発展課題を実施するなど、こうした近隣施設間を橋渡しするような利用支援も有効と思われる。NanoTerasuではコアリションメンバーシステムで、同様の民間企業に対する支援環境問題を打破する計画であるが、運転開始からその動向を注視したい。我が国における各施設の将来計画が散見される中、大学共同利用機関の役割やミッションを明確にし、次期施設の詳細について更なる検討を進めていきたい。

一方で、2023年度の申請課題からwebシステムの完全英語対応と、新たな審査体制システムを導入した。次期施設建設の実現へ向けた国際競争力強化のために既存の審査システムの再構築を行うものである。コンセプトは、利用の国際化によって高インパクト成果の件数増加を期待しつつ、未利用分野等のユーザー拡張を目論見、新規参入を拒まない共存スタイルにする。また短期インパクトは低くとも着実な基礎学術的課題と恒常的な成果発信力は施設の特徴付けとなるもので、課題審査で評価することとした。また、小型施設の特徴的な運営の柔軟性は維持し、適宜自由度をもって短期中期的な施設意向が反映できるように設定した。課題審査は前期後期の2回であり、審査項目の内容を一部見直した（web公開情報）。さらに、新たに一段階の審査過程を追加し、複数名の外部審査委員を含む分野別審査体制を初段階に導入した。採択までのプロセスは、3段階（第1次：分野別審査小委員会、第2次：課題採択小委員会、第3次：施設運営委員会）の審査によって進める。第1次では各課題の学術レベルを絶対評価で数値化。第2次は中期計画に基づいた施設ミッション評点と技術評点による配分日数を決めるための合議審査とし、相対評価5段階の査定と採択週数案を決定する。これを第3次で合議し承認する流れとした。これまでは分野別審査に相当するプロセスが無く、今後の分野の細分化・国際化の傾向や競争率の増加に対して煩雑であり運用上の懸念があった（競争率の高い一部のビームラインについては、これまでも第1次に相当する追加審査を実施していた）。今後は審査システム構築によるスタッフの業務負担の軽減が期待される。

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）、文部科学省各課との意見交換、における意見交換を元に改訂してきたものである（過去リポート参照）。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 2021 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（設備 NW）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、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）事業の「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、2022年度からは同事業運営機構横断領域物質・材料合成プロセス技術分野の責任機関として機器共用・民間利用拠点を務めることとなっている。

2022年度の機器センターの人員は以下のものである。センター長は2018年度から横山利彦が務め、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センターの運営、設備の維持・管理・開発・更新を行い、さらには、大学共同利用機関法人としての大学等への組織的な機能強化貢献をミッションとする。専任技術職員は、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、宮島瑞樹技術員、長尾春代技術員（2023年2月に特任専門員から配置換）の8名が在籍し、ユニット長は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1名（伊木志成子）、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、設備 NW と ARIM の2事業において、運営マネージャー4名〔石山修、中本圭一、太田康仁（2022年5月～）、賀来美恵（2022年5月～）〕、事務支援員4名（船木弓子、内田真理子（育休中）、石川あずさ（2022年11月まで）、栗田佳子（2022年4月～））が配置されている。

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。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、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、2021年度補正予算により超伝導量子干渉型磁束計（SQUID）が導入され、さらには、2022年度概算要求によりヘリウム液化機の更新（2024年度納入予定）、ARIM事業2022年度補正予算による単結晶X線構造解析と有機自動合成システムの導入、所内予算による600MHz溶液NMRの新規導入（いずれも2023年度末納入予定）と名工大からの電子プローブマイクロアナリシス譲渡が進んでいる（2023年夏頃始動予定）。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800MHz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、協力研究・施設利用の審査を行うほか、共同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ている。利用状況として、最近では年間200件程度の所外利用があり、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、2022年度から所外委員比を増やすこととなった。機器センターは設備NW、ARIM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、現在所有の多くの機器の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、単結晶X線構造解析、高磁場核磁気共鳴、ヘリウム液化機など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の機器。これらの維持は、特に人事流動の活発な分子研において、各グループが類似の装置をそれぞれ新たに用意する必要がない環境作りの面で最重要である。一方、使用頻度や維持経費の点で負担が大きいと判断されたものは見直しの対象とし、所内特定グループや他機関へも含めた移設などにより有効に利用してもらうことも検討する。
- 2) 当機器センターとしての特色ある測定機器。汎用機器をベースとしつつ改良を加えることによってオリジナル性の高いシステムを開発し、それを共同利用に供する取り組みを強化する。分子科学研究所の特色として「低温」「オペランド」を柱とした分野強化を進める。その際、技術職員が積極的に関与して技術力を高めることが重要であり、主任研究員制度の適用も視野に含める。所外の研究者の要請・提案を取り込みつつ連携して進めるとともに、所内研究者の積極的な関与も求める。当センター内のみならず、UVSORをはじめとする所内センター等と共同して取り組むことも効果的である。所内技術職員の連携協力が技術を支えるのに不可欠であるが、コミュニティ全体から提案を求める体制づくりも必要となろう。
- 3) 国際的な水準での先端的機器。分子科学の発展・深化を強力に推進する研究拠点としての分子研の役割を体現する施設として、UVSORや計算科学研究センターと同様に、機器センターも機能する必要がある。高磁場NMR装置やESR装置は、国際的な競争力を有する先端的機器群であり、研究所全体として明確に位置付けを行い、利用・運営体制を整備することによって、このミッションに対応すべきである。国外からの利用にも対応するため、技術職員には国際性が求められる。2)と同様に、所外コミュニティからの要請・提案と、所内研究者の積極的関与が不可欠である。特に、新規ユーザーの開拓は、分子科学の新領域形成へと繋がると期待されるものであり、これまで分子研との繋がりがあまり深くなかった研究者層・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 ARIM 事業が始動し、分子科学研究所は「マテリアルの高度循環のための技術」領域スポーク機関と運営機構横断領域物質・材料合成プロセス技術分野の責任機関としてマテリアル DX プラットフォーム形成に関与することとなった。このプログラムの主たる目的は、マテリアルデータベースのデータ収集・蓄積、共用プラットフォーム・データ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などであり、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も推進していく。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な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装置の導入を行った。2020 年度は、附属 3 棟の改修により、工作环境およびクリーンルームの整備を行うこともできた。今後も、装置開発室の将来計画・将来像の検討を進めながら、その方向性を強く意識しつつ、日常の実験研究を支えるための基盤的設備、先端技術習得のための先進設備、双方の更新・導入を進める。また、他機関との連携や、他機関共用設備の利用も積極的に検討する。

8-4 計算科学研究センター

計算科学研究センターは、2000年度に分子科学研究所の電子計算機センターから岡崎共通研究施設の計算科学研究センターへの組織改組が行われ、現在は分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所の3研究所により運営されている。従来の共同利用に加えて、理論、方法論の開発等の研究、さらに、研究の場の提供、ネットワーク業務の支援、人材育成等に取り組んでいる。2022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。

2023年2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、2017年10月から稼働していた旧「高性能分子シミュレータ」を2023年2月に更新した「高性能分子シミュレータ」である。本シミュレータでは、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HPE製のApolloシリーズで構成される834ノードの共有メモリ型スカラ計算機クラスタであり、全サーバは全て同一CPU（AMD E7763）、同一OS（Rocky Linux 8.7）を有し、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6.68 Pflopsで総メモリ容量224 TBである。主力の演算サーバはType Cと呼ぶもので、2.45 GHzのクロック周波数をもつ128コア、256 GBメモリ構成の804台である。仮想ノード単位とコア単位の利用形態のジョブの大半はType Cで実行される。Type Fはメモリを1 TBに強化した14台であり、他はType Cと同一である。多くのメモリを必要とするジョブが仮想ノード単位で実行される。Type Gは1ノードあたり8 GPUを有する16台であり、筐体が違うものの他はType Cと同一である。インターコネクタはInfiniBandアーキテクチャを採用し、全台数を100 Gb/sで接続しており、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。これらクラスタ演算サーバは14.8 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, GAMESS, Molpro, TURBOMOLE, 分子動力学分野では、Lammps, GROMACS, Amber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、2022年度は296研究グループにより、総数1,238名（2023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、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、データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクトとも連携を行っている。これら2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、2022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研究施設のワークショップ「複雑電子状態の理論・計算科学」と2つのスクール「第12回量子化学スクール」と「第16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。

2022年度 システム構成

高性能分子シミュレータシステム 6.68 PFlops

クラスタ演算サーバ Type C	
	型番：HPE Apollo2000 Gen 10 Plus
	OS：Linux
	コア数：102,912 コア（128 コア× 804 ノード） 2.45 GHz
	総理論性能：4,034 TFlops（5,017.6 GFlops × 804 ノード）
	総メモリ容量：206 TB（256 GB × 804 ノード）
クラスタ演算サーバ Type F（メモリ強化）	
	型番：HPE Apollo2000 Gen 10 Plus
	OS：Linux
	コア数：1,792 コア（128 コア× 14 ノード） 2.45 GHz
	総理論性能：70 TFlops（5,017.6 GFlops × 14 ノード）
	総メモリ容量：14 TB（1024 GB × 14 ノード）
クラスタ演算サーバ Type G（演算性能強化）	
	型番：HPE Apollo6500 Gen10 Plus
	OS：Linux
	コア数：2,048 コア（128 コア× 16 ノード） 2.45 GHz
	GPU：NVIDIA A100 NVLink
	総理論性能：80 TFlops（5,017.6 GFlops × 16 ノード） + 2,496 TFlops（19.5 TFlops × 128 ノード）
	総メモリ容量：14 TB（1024 GB × 14 ノード）
外部磁気ディスク装置	
	型番：HPE ClusterStor E1000
	総ディスク容量：14.8 PB
インターコネクト装置	
	型番：NVIDIA Mellanox InfiniBand Switch
フロントエンドサーバ	
	型番：HPE ProLiant DL385 Gen10 Plus v2
	OS：Linux
	総メモリ容量：1 TB（256 GB × 4 ノード）
運用管理クラスタ	
	型番：HPE ProLiant DL360 Gen10 Plus
	OS：Linux
	総メモリ容量：1.1 TB（192 GB × 6 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。

2022年度を迎えるにあたり、ExCELLS創設から4年間の基盤整備期において整えた研究体制をさらに発展させていくために、新たに先端共創プラットフォーム及び連携強化プラットフォームを始動した。この2つのプラットフォームにより、国内外の大学・研究機関との共同利用・共同研究を一層強化するとともに、産業界との共創の推進も目指している。

先端共創プラットフォームでは、センターに所属する教員と外部の研究機関が一体となって研究チームを構成し、設定された研究課題に共創的に取り組むExCELLSプロジェクト研究を実施する。その第一弾として、2022年9月から「物質-生命の境界探査」プロジェクトを始動した。本プロジェクト研究では、ExCELLSの研究者が中心となって進める8つのサブチームと、外部の大学の研究者から提案された研究課題を進める4つのサブチームとが互いに共創しながら、生命機能を維持するために必要となる、本質的あるいは最小の機構や原理を解き明かすために、極限環境に生きる生物、ウイルス等における生物間相互作用や環境応答に関する分子複合体の形態・機能・動態を観測し、物質-生命の境界の体系的理解を目指す研究を実施している。

連携強化プラットフォームでは、国内外の大学・研究機関との組織間のネットワークの強化を図り、連携構築を戦略的に推進している。糖鎖生命科学ユニットでは、共同利用・共同研究拠点である「糖鎖生命科学連携ネットワーク型拠点（J-GlycoNet）」の活動を東海国立大学機構糖鎖生命コア研究所及び創価大学糖鎖生命システム融合研究所と連携して進めている。さらに、このネットワーク型拠点を基盤として、文部科学省 大規模学術フロンティア促進事業「ヒューマングライコームプロジェクト」の本格始動に向けての準備を進めている。この活動を強化する目的で、創成研究領域に糖鎖構造機能解析グループを新規に立ち上げた。一方、先端創薬ユニットでは、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）NMRプラットフォームの活動を分子科学研究所より引き継ぐとともに、日本医療研究開発機構 生命科学・創薬研究支援基盤事業（BINDS）の活動を開始し、名古屋市立大学の創薬基盤科学技術開発研究拠点とも連携して、先端的な創薬基盤技術等の創出を目指す活動に取り組んでいる。

これらの連携活動を支え、共同利用・共同研究拠点やMOU締結先研究機関等との連携の強化を図るため、研究連携推進室を改組して研究戦略室を新たに設置した。

2022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、2023年2月には「細胞のまるごとモデリング」を目指す連携研究グループ細胞シミュレーション

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。2022年度は、超高解像度クライオ電子顕微鏡及び800MHz溶液NMR装置を活用した共同利用研究を開始した。

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。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。デンマーク政府が支援するInternational Network Programに基づき、Aarhus UniversityのInterdisciplinary Nanoscience Center（iNANO）から2名の研究者を迎え、分子研とExCELLSの共催でiNANO-IMS-ExCELLS Interdisciplinary Nanoscience Joint Meetingを開催した。デンマークと日本の学術交流の発展に向けて、iNANOと分子研・ExCELLSの研究活動紹介と今後の共創活動に関する意見交換を行った。

分子科学研究所を兼務している教員のうち、青野重利教授が副センター長をつとめるとともに金属生命科学研究グループを主宰し、加藤晃一教授が研究戦略室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、奥村久土准教授が生命分子動態シミュレーション研究グループ、古賀信康教授が生命分子創成研究グループをそれぞれ主宰している。

9. 資 料

9-1 歴代所長

初 代 赤松 秀雄 (1975.4.22 ~ 1981.3.31)

第二代 長倉 三郎 (1981.4.1 ~ 1987.3.31)

第三代 井口 洋夫 (1987.4.1 ~ 1993.3.31)

第四代 伊藤 光男 (1993.4.1 ~ 1999.3.31)

第五代 茅 幸二 (1999.4.1 ~ 2004.3.31)

第六代 中村 宏樹 (2004.4.1 ~ 2010.3.31)

第七代 大峯 巖 (2010.4.1 ~ 2016.3.31)

第八代 川合 真紀 (2016.4.1 ~ 2022.3.31)

第九代 渡辺 芳人 (2022.4.1 ~)

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 莊次（(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～'23.3.31
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～'23.3.31
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～'23.3.31

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, Recharad 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 ～ '22.3.31

TANG, Ching Wan (香港科技大学教授) '20.4.1 ～ '22.3.31

WEIDEMÜLLER, Matthias (独国ルプレヒト・カール大学ハイデルベルク副学長) '22.4.1 ～

LEIGH, David A. (英国王立協会特任教授、英国マンチェスター大学サー・サミュエル・ホール化学教授) '22.4.1 ～

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
(副) 副議長

人-人事選考部会に属する委員
共-共同研究専門委員会に属する委員

氏名・所属 (当時)	第1期	第2期	第3期	第4期	第5期	第6期	第7期	第8期	第9期	第10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	○	○	○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	○共
薬師 久彌 分子研教授	○人	◎共 '07.4.1~	○共							
齊藤 真司 分子研教授				○人	○人	○人	○共	◎共	○共	○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	○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	第10期
加藤 政博					○					
山本 浩史					○	○人	○人	○共	○共	○人
秋山 修志						○	○人	○人	◎共	◎人
榎 敏明		○人	○人							
加藤 昌子		○共	○							
関谷 博		○	○共							
中嶋 敦		○	○							
山下 晃一		○人	○人							
江幡 孝之			○人	○人						
篠原 久典			○	○共						
富宅 喜代一			○(副)人	○(副)人						
山下 正廣			○人	○人						
渡辺 芳人			○	○						
山縣 ゆり子				○	○					
上村 大輔				○	○					
山内 薫				○	○					
森 健彦				○人	○人					
佃 達哉				○人	○人					
朝倉 清高				○	○	○				
神取 秀樹				○	○(副)人	○(副)人				
河野 裕彦				○	○共	○				
寺崎 亨				○人	○人	○人				
水谷 泰久				○人	○人	○人				
大西 洋						○共	○共			
鈴木 啓介						○	○			
高田 彰二						○	○			
田原 太平						○人	○人			
森 初果						○人	○人			
有賀 哲也							○(副)人	○人		
米田 忠弘							○	○(副)		
高原 淳							○	○		
西原 寛							○人	○人		
山口 茂弘							○人	○人		
解良 聡							○人	○人	○人	○
鹿野田一司								○人	○人	
袖岡 幹子								○	○	
谷村 吉隆								○	○	
中井 浩巳								○人	○人	
藤井 正明								○共	○共	
江原 正博								○人	○人	○
秋吉 一成									○人	○人
忍久保 洋									○人	○人
芳賀 正明									○	○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	第10期
福井 賢一 阪大院基礎工教授									○人	○人
村越 敬 北大院理教授									○(副)	○(副)共
飯野 亮太 分子研教授									○人	○人
石崎 章仁 分子研教授									○人	○人
岩佐 義宏 東大院工教授										○
高橋 聡 東北大多元研教授										○共
唯 美津木 名大物科国際研教授										○共
真船 文隆 東大院総合文化教授										○
吉澤 一成 九大先導研教授										○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

第10期 ; '22. 4. 1 ~ '24. 3. 31

法人番号 88

第3期中期目標期間に係る業務の実績に関する報告書

令和4年6月

大学共同利用機関法人
自然科学研究機構

【目次】

○ 法人の概要	1	II 予算（人件費の見積もりを含む。）、収支計画及び資金計画.....	42
○ 全体的な状況	16	III 短期借入金の限度額.....	42
○ 項目別の状況	21	IV 重要財産を譲渡し、又は担保に供する計画.....	42
I 業務運営・財務内容等の状況	21	V 剰余金の使途.....	43
(1) 業務運営の改善及び効率化に関する目標	21	VI その他 1 施設・設備に関する計画.....	44
① 組織運営の改善に関する目標	21	VII その他 2 人事に関する計画.....	46
② 教育研究組織の見直しに関する目標	24		
③ 事務等の効率化・合理化に関する目標	26		
(1) 業務運営の改善及び効率化に関する特記事項	27		
(2) 財務内容の改善に関する目標	29		
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	29		
② 経費の抑制に関する目標	30		
③ 資産の運用管理の改善に関する目標	31		
(2) 財務内容の改善	32		
(3) 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	33		
① 評価の充実に関する目標	33		
② 情報公開や情報発信等の推進に関する目標	35		
(3) 自己点検・評価及び情報提供	36		
(4) その他業務運営に関する重要目標	37		
① 施設設備の整備・活用等に関する目標	37		
② 安全管理に関する目標	38		
③ 法令遵守等に関する目標	39		
(4) その他の業務運営	40		

○ 法人の概要

(1) 現況

① 法人名

大学共同利用機関法人自然科学研究機構

② 所在地

法人の本部	東京都三鷹市
大学共同利用機関	
国立天文台	東京都三鷹市
核融合科学研究所	岐阜県土岐市
基礎生物学研究所	愛知県岡崎市
生理学研究所	愛知県岡崎市
分子科学研究所	愛知県岡崎市

③ 役員の状況

機構長 小森 彰夫（平成 28 年 4 月 1 日～令和 4 年 3 月 31 日）

理事数 5（2）人

監事数 2（1）人

※（ ）は非常勤の数で、内数（国立大学法人法第 24 条第 1 項及び第 2 項）

④ 大学共同利用機関等の構成

大学共同利用機関

- 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

研究施設等

- 国立天文台
- 水沢 VLBI 観測所、野辺山宇宙電波観測所、三鷹地区太陽観測施設、

ハワイ観測所、ハワイ観測所岡山分室、チリ観測所、重力波プロジェクト神岡分室、天文データセンター、先端技術センター、天文情報センター、石垣島天文台

核融合科学研究所

六ヶ所研究センター

基礎生物学研究所

モデル生物研究センター、生物機能解析センター、IBBP センター、新規モデル生物開発センター

生理学研究所

研究連携センター、行動・代謝分子解析センター、脳機能計測・支援センター、情報処理・発信センター

分子科学研究所

極端紫外光研究施設、協奏分子システム研究センター、メゾスコピック計測研究センター、機器センター、装置開発室

岡崎共通研究施設

計算科学研究センター、動物資源共同利用研究センター、アイソトープ実験センター

機構直轄の研究施設

新分野創成センター、アストロバイオロジーセンター、生命創成探究センター、国際連携研究センター

⑤ 教職員数（令和 3 年 5 月 1 日現在、任期付職員を含む。）

研究教育職員	439 人	技術職員・事務職員	351 人
年俸制職員	320 人	URA職員	26 人

(2) 法人の基本的な目標等

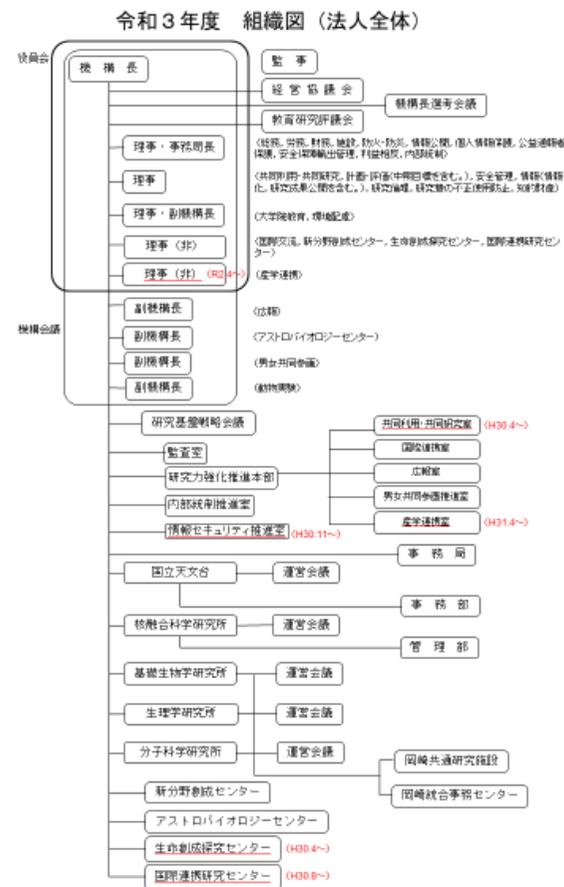
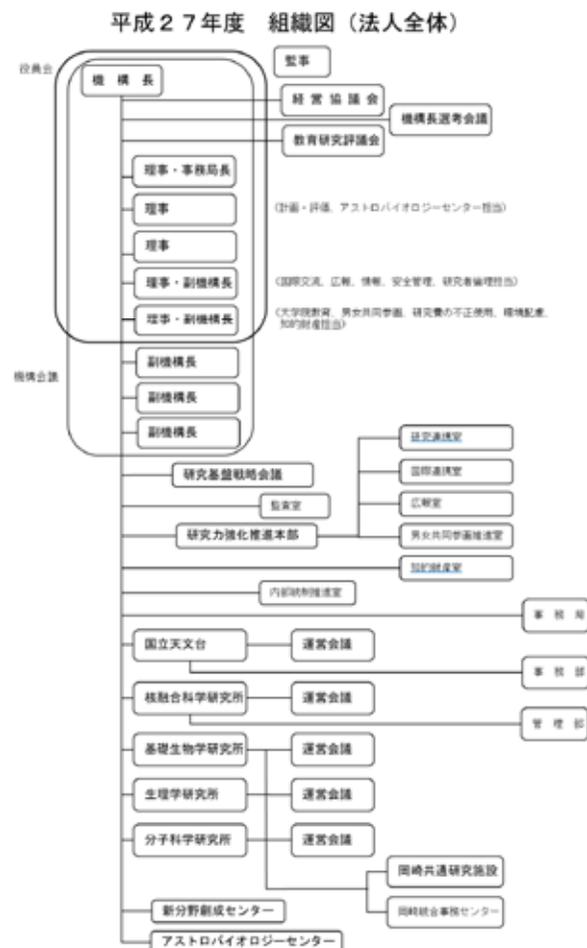
大学共同利用機関法人自然科学研究機構（以下「本機構」という。）は、宇宙、エネルギー、物質、生命等に関わる自然科学分野の拠点的研究機関を設置・運営することにより国際的・先導的な研究を進めるとともに、本機構が設置する各大学共同利用機関（以下「各機関」という。）の特色を活かしながら、さらに各々の分野を超え、広範な自然の構造と機能の解明に取り組み、自然科学の新たな展開を目指して新しい学問分野の創出とその発展を図るとともに、若手研究者の育成に努める。また、大学共同利用機関としての特性を活かし、大学等との連携の下、我が国の大学の自然科学分野を中心とした研究力強化を図る。これらのミッションを踏まえ、特に第3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。

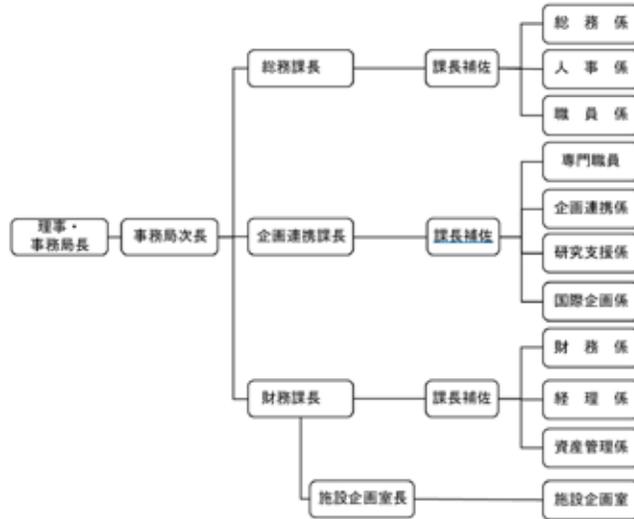
研究システム改革については、本機構の行う公募型の共同利用・共同研究の申請から審査・採択、成果報告・分析までを統合的に管理するシステム（自然科学共同利用・共同研究統括システム）を整備して、それらの成果の分析評価を行うとともに、機関の枠を超え、機構全体として異分野融合研究が自然に行える研究体制を構築する。また、本機構と各大学との緊密な連携体制の下で、大学の各分野の機能強化に貢献する新たな仕組み（自然科学大学間連携推進機構）を構築する。さらに、柔軟な雇用制度（多様な年俸制、混合給与）の導入等の人事・給与システム改革を通じて若手研究者の育成、女性研究者の支援、外国人研究者の招へいに取り組む。

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。

(3) 法人の機構図
組織図 (法人全体)



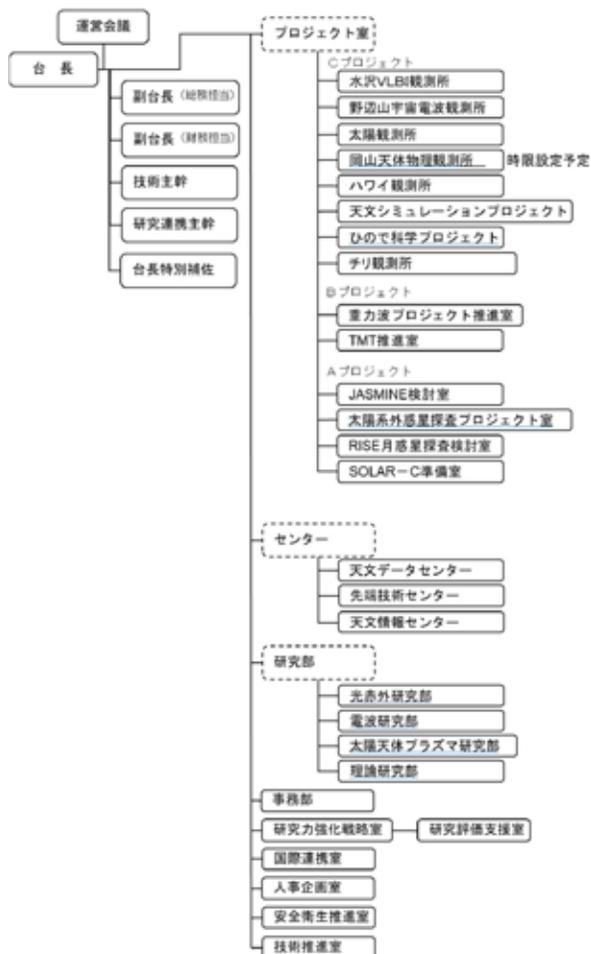
平成27年度 事務組織図（事務局）



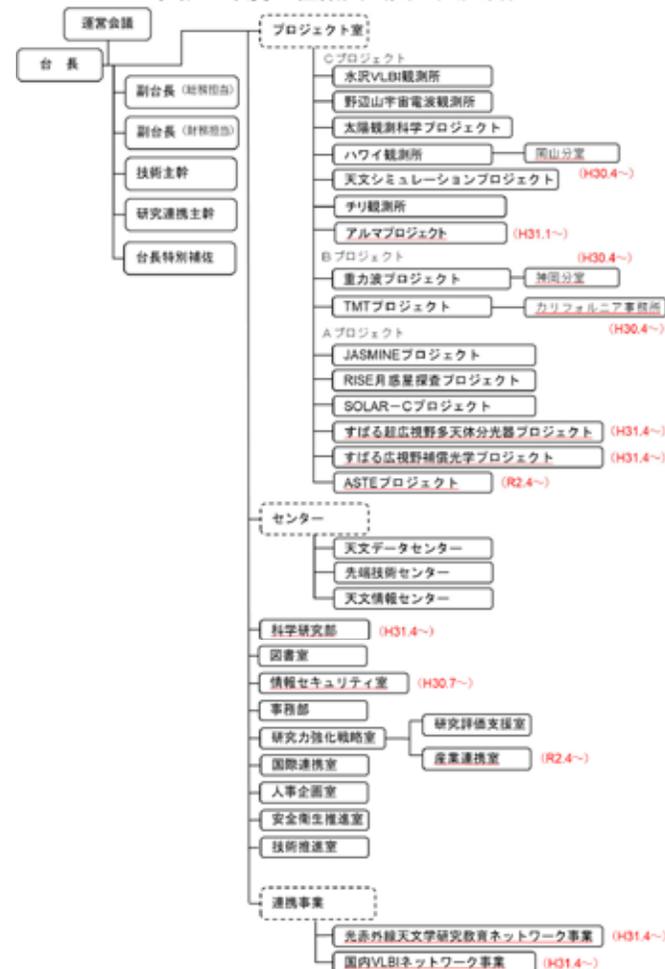
令和3年度 事務組織図（事務局）



平成27年度 組織図 (国立天文台)



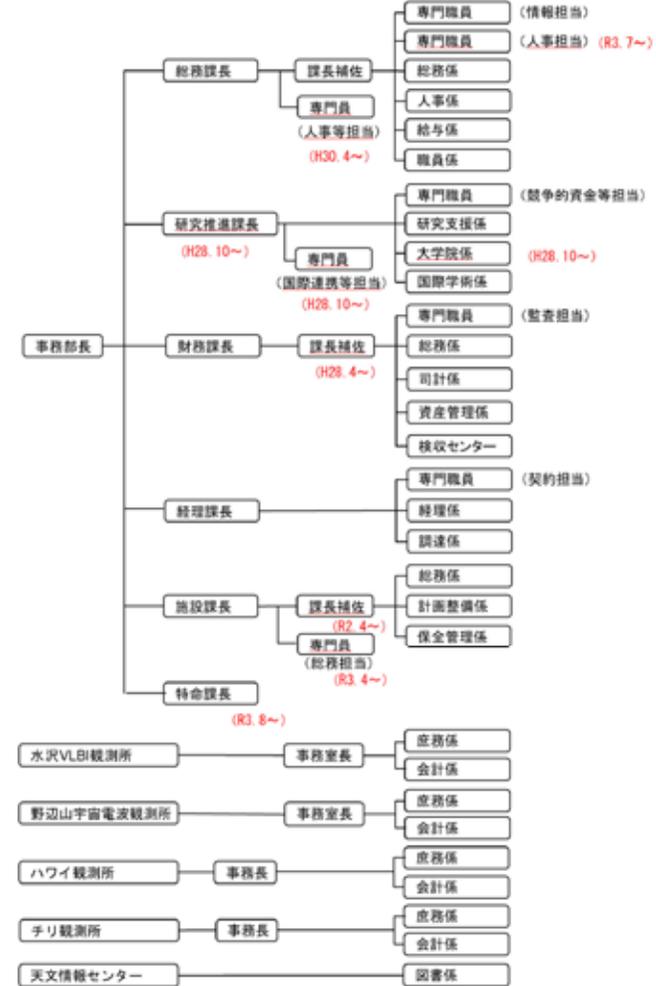
令和3年度 組織図 (国立天文台)



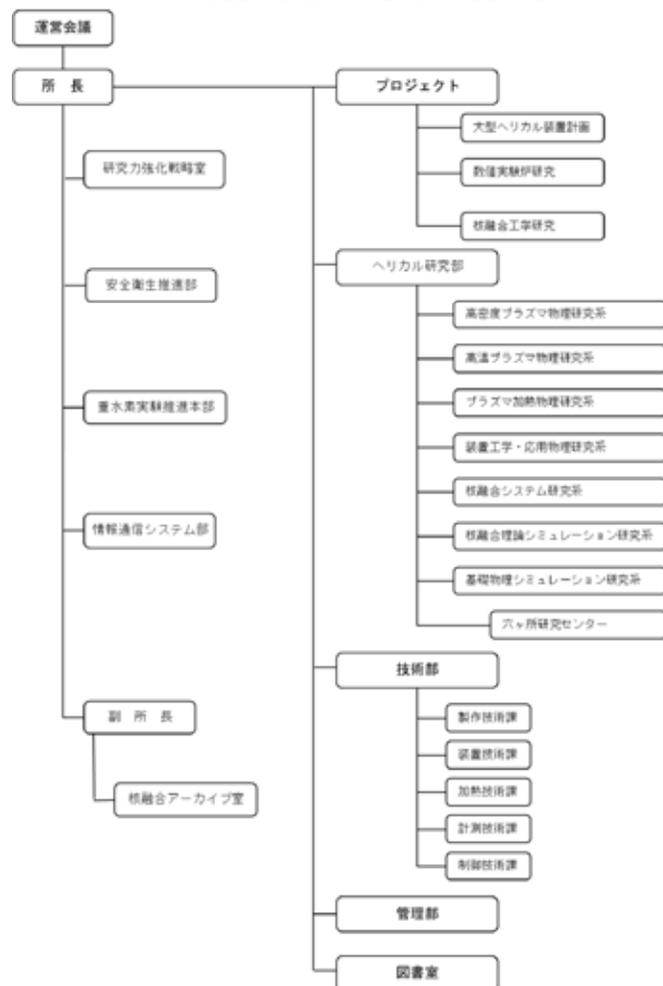
平成27年度 事務組織図(国立天文台事務部)



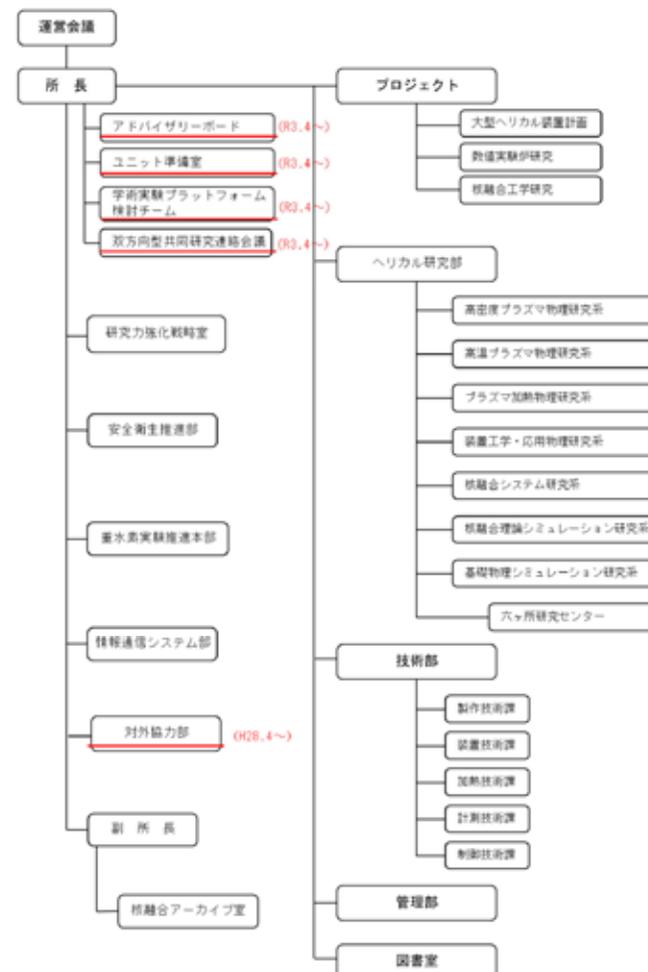
令和3年度 事務組織図(国立天文台事務部)



平成27年度 組織図 (核融合科学研究所)



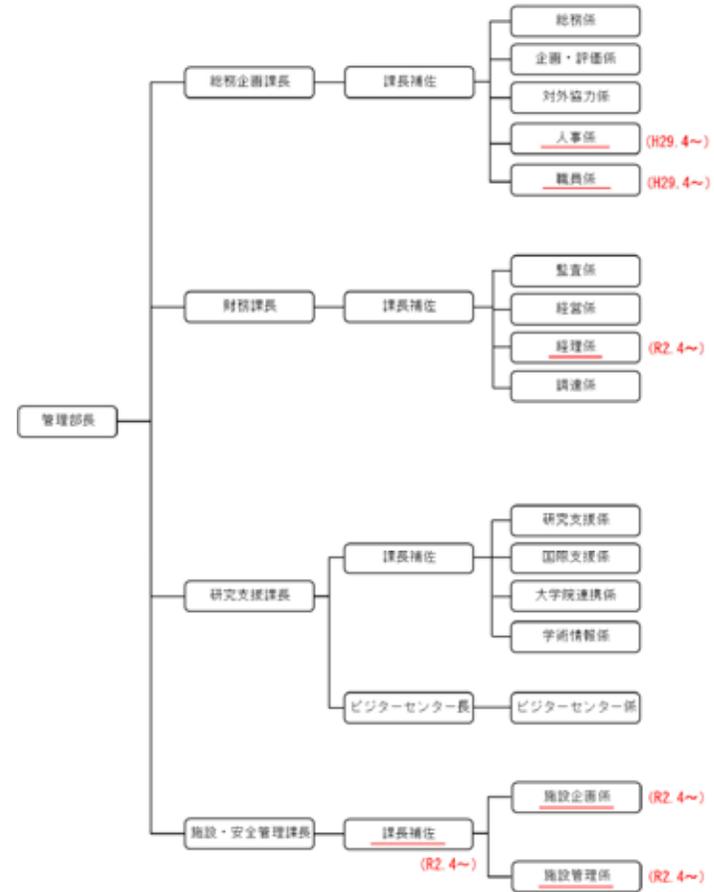
令和3年度 組織図 (核融合科学研究所)



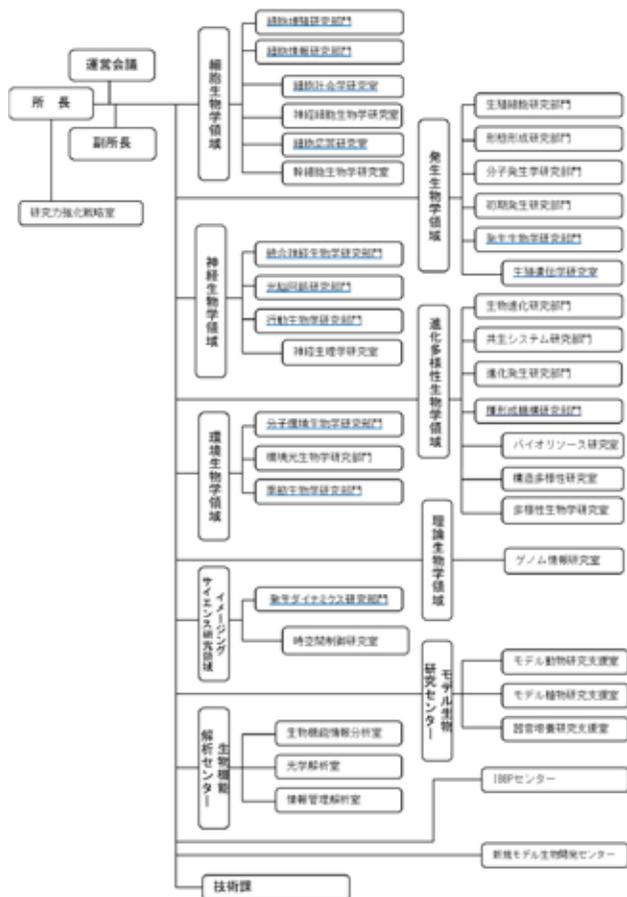
平成27年度 事務組織図（核融合科学研究所管理部）



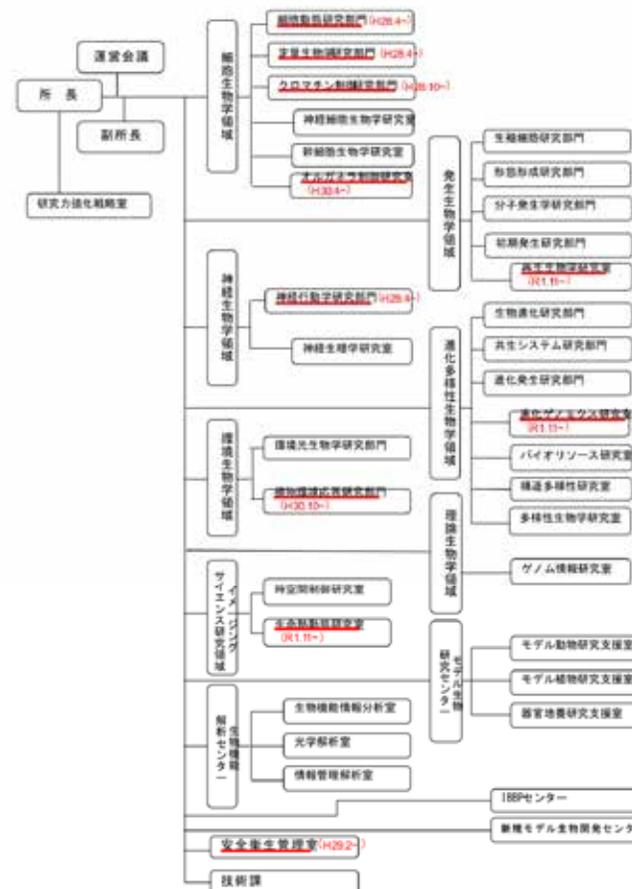
令和3年度 事務組織図（核融合科学研究所管理部）



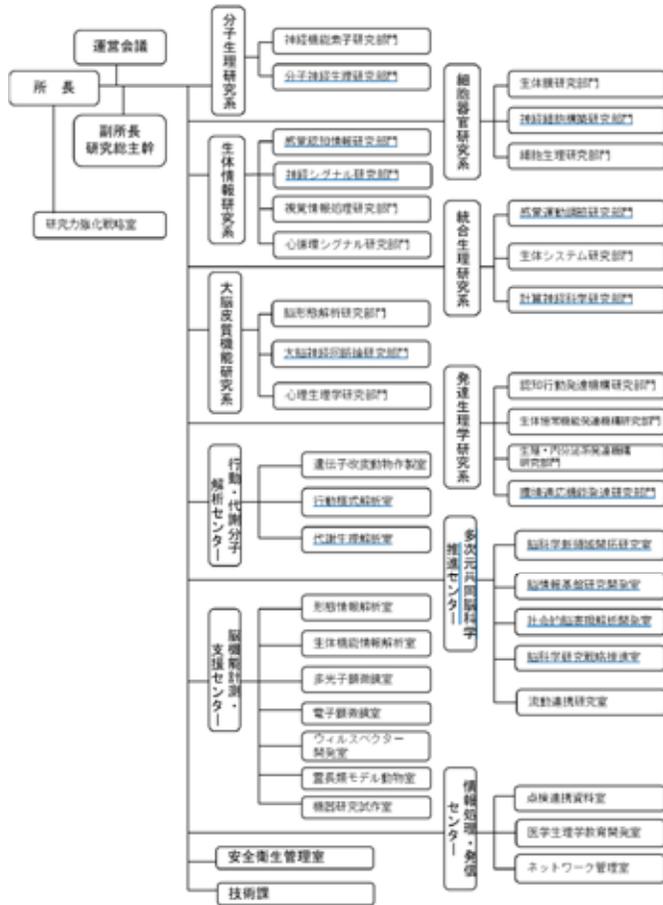
平成27年度 組織図 (基礎生物学研究所)



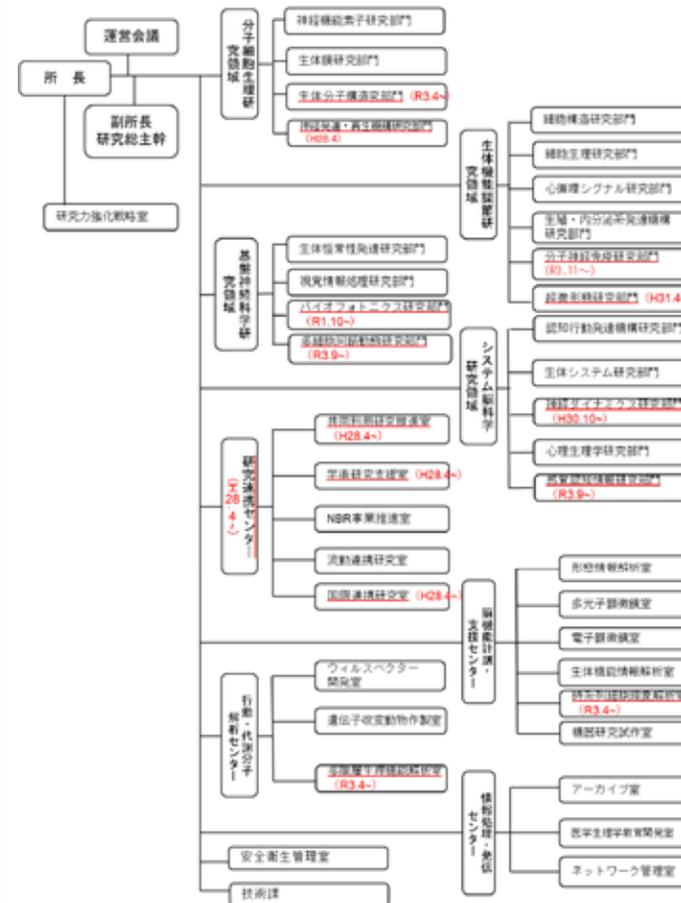
令和3年度 組織図 (基礎生物学研究所)



平成27年度 組織図 (生理学研究所)



令和3年度 組織図 (生理学研究所)



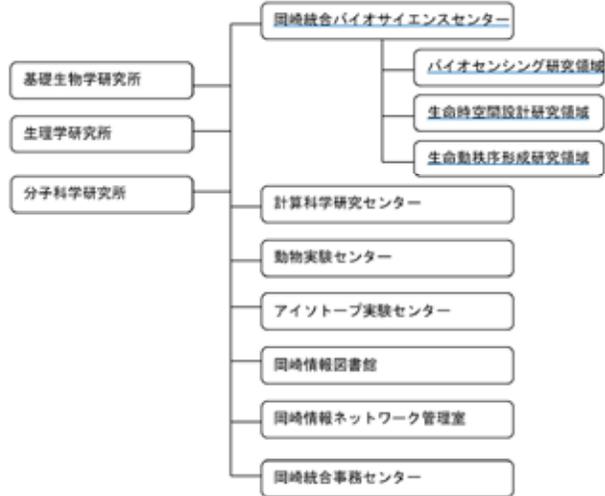
平成27年度 組織図 (分子科学研究所)



令和3年度 組織図 (分子科学研究所)



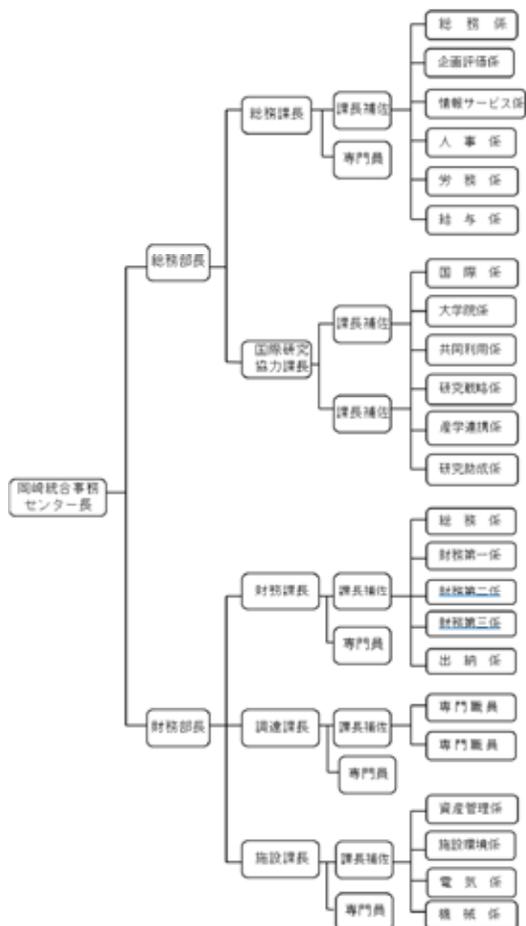
平成27年度 組織図（岡崎共通研究施設等）



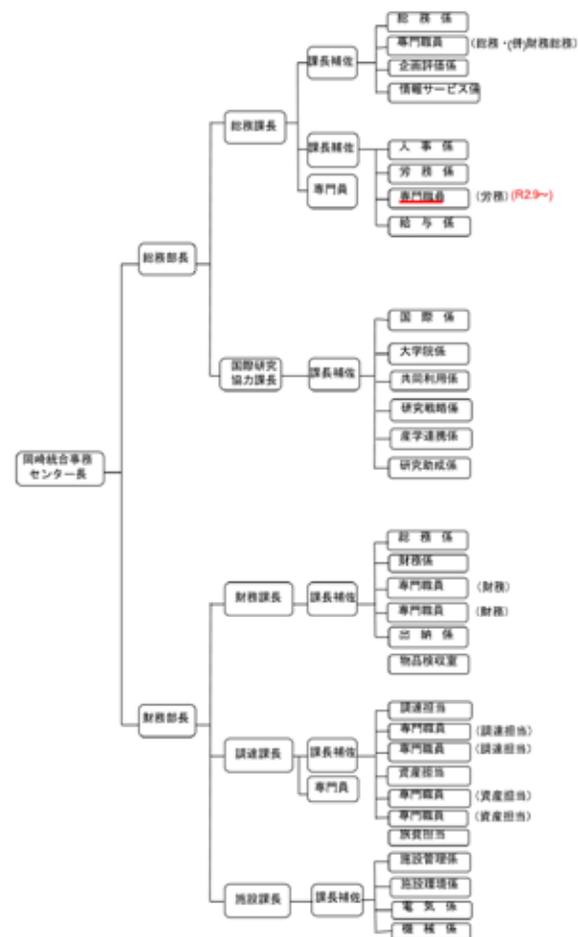
令和3年度 組織図（岡崎共通研究施設等）



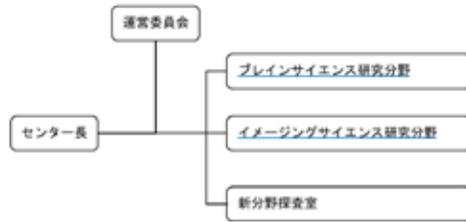
平成27年度 事務組織図（岡崎統合事務センター）



令和3年度 事務組織図（岡崎統合事務センター）



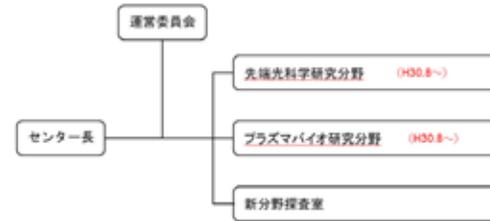
平成27年度 組織図（新分野創成センター）



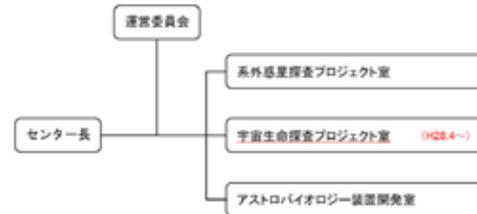
平成27年度 組織図（アストロバイオロジーセンター）



令和3年度 組織図（新分野創成センター）



令和3年度 組織図（アストロバイオロジーセンター）



平成27年度 該当なし

平成27年度 該当なし

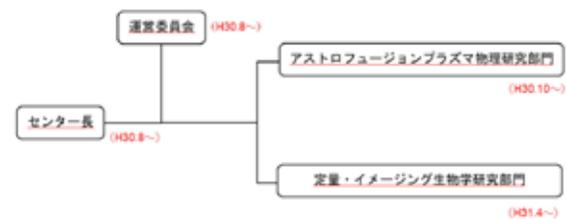
令和3年度 組織図(生命創成探究センター)

(H30.4~)



令和3年度 組織図(国際連携研究センター)

(H30.8~)



○ 全体的な状況

自然科学研究機構（以下「機構」という。）は、学術の大型プロジェクト研究を牽引する国立天文台、核融合科学研究所と、基礎科学の最先端研究を牽引する基礎生物学研究所、生理学研究所、分子科学研究所と、性格の異なる研究方法をとる機関を包含するところに特色がある。それぞれ当該分野の COE として、大学共同利用機関の特徴を活かし世界最高水準の学術的成果を上げてきた。

こうした特徴を活かし、機構は第3期中期目標として、

- ① 宇宙、エネルギー、物質、生命等に関す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
- ② 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、さら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
- ③ 若手研究者の育成に努める
- ④ 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

ことを主な柱とし、これらを達成するための中期計画を策定し実行した。

＜組織改革＞ ※まとめ(1)①

●運用・研究マネジメント組織の改革

平成 28 年度に機構長の下に執行部及び機関の長・センター長からなる「研究基盤戦略会議」を新たに設置し、従来の研究教育組織だけでなく、運用・マネジメントを担う組織の組織改革も実施した。機構における機能強化の方針や資源再配分等の組織改革の方針を議論し、研究組織の再編等を強力に進めるとともに、研究所の枠を超えた共同利用・共同研究、異分野融合・新分野創成を積極的に推進した。特に、研究力強化推進本部に共同利用・共同研究室を設置し（平成 30 年度）、共同利用・共同研究の運用から、その分析（IR）、技術面まで統合的な実施体制を構築した。また、産学官連携を組織的に進めるため、研究力強化推進本部に産学連携室を設置し（令和元年度）、産学連携コーディネーターを配置した。令和 3 年度には、幅広い課題の解決に向け、部門横断的な検討を可能とするため、研究力強化推進本部の改組を決定した。具体的には、研究力強化推進本部の下にチーム制からなる企画戦略室を新たに設置し、URA の専門性を最大限に活かし、かつ事務部門との連携を強化することで、融合的課題に対応し、学術のみならず社会へも貢献を果たす体制とする。

●新分野創成センターの刷新：

新分野探査室での議論などにより新分野創成センターを刷新し、新たに 2 つの研究分野（「先端光科学」「プラズマバイオ」）を平成 30 年度に立ち上げた。特に、プラズマバイオ研究分野においては、効率的・効果的に共同研究を推進するため、名古屋大学（共同利用・共同研究拠点との連携）・九州大学と「プラズマバイオコンソーシアム」を平成 30 年に発足させるとともに、共同利用・共同研究を活用して大学と連携したオールジャパン体制の構築を図った。令和 2 年度には本コンソーシアムに新たに東北大学も参画し、体制が拡充したほか、令和 3 年度にはプラズマバイオ分野をテーマとした自然科学研究機構シンポジウムを開催した。

●アストロバイオロジーセンターの発展：

異分野連携に関する「戦略性が高く意欲的な目標・計画」の一つとして掲げた機構直轄の「アストロバイオロジーセンター」については、クロスアポイントメント制度を活用し国内外から優秀な研究者を雇用して研究体制を構築（センター長も東京大学とのクロスアポイントメントで迎えている）するとともに、令和 3 年度に外国人特任助教を新規に採用した。これらにより、系外惑星観測の世界的なネットワークの構築を図り、幅広い国内外との共同研究を展開し我が国におけるアストロバイオロジー分野の拠点として発展させた。

●生命創成探究センター（ExCELLS）の設置：

分野や機関の枠を超えた融合研究を行うため、基礎生物学研究所、生理学研究所、分子科学研究所（以下「岡崎 3 機関」という。）の共通施設「岡崎統合バイオサイエンスセンター」（以下「統合バイオ」という。）を発展的にスクラップ&ビルドし、平成 30 年度に新たに生命創成探究センター（ExCELLS）を設置した。統合バイオでは行わなかった一般的な共同利用・共同研究に加え、「ExCELLS 課題研究」、「ExCELLS 連携研究」など特徴ある共同研究を開始した。特に、共同利用研究を推進する目的で、令和 3 年度に共同利用研究に供する機器設備の一層の充実を図り、超高解像度クライオ電子顕微鏡及び 800MHz 溶液 NMR 装置の導入準備を進めた。クライオ電子顕微鏡を活用するための研究グループとして、令和 2 年度に極限環境生命探査室に物質-生命境界領域研究グループを立ち上げた。令和 3 年度には研究体制、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・強化を目的とし、外部評価を実施した。国際連携活動としては、令和 2 年度に学術交流協定を締結している台湾中央研究院の研究者との共同利用研究を実施し、外国人研究職員の受け入れも行った。また、分野横断型の研究集会（ExCELLS シンポジウム）

を開催し、国際研究交流を図った。また、国内連携活動としては、令和2年度に宇宙航空研究開発機構（JAXA）等との共同プロジェクトにより、極限環境生命探査室の活動をより一層推進した。また、名古屋市立大学との連携協定に基づく教育活動も行った。令和3年度には包括連携協定を締結した慶應義塾大学先端生命科学研究所等の研究者との共同利用研究を実施し、学術交流を推進した。さらに、機構外の研究機関との連携を通じた極限環境生命探査室の活動の一層の推進も図った。センター内外の若手育成の取り組みとしては、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）を実施し、若手研究者の育成と研究者コミュニティの形成を図った。

●国際連携研究センター（IRCC）の新設：

飛躍的な国際化促進のため、平成30年に国際連携研究センター（IRCC）を新たに設置した。従来の国際共同研究とは異なり、国外2か国にブランチを設置し、設置先の海外機関と共同で、異分野融合的戦略目標を定め、共同国際公募・選考による人事、内外両機関による研究指導など、一体となって運用する体制を整えた。米国プリンストン大学やドイツ・マックスプランク協会と連携し、アストロフュージョンプラズマ物理研究部門及び定量・イメージング生物学研究部門を立ち上げた。令和2、3年度は新たに3名の外国籍の特任研究員を採用したほか、プリンストン大学との間でクロスアポイントメント契約を締結し、プリンストン大学の研究者1名が日米双方において研究を行うこととした。研究体制が整備されたことにより、海外における共同研究から生まれた知的財産の米国仮出願や、著名な雑誌に論文が掲載される等、複数の研究成果が上がっている。

●研究システム改革※まとめ(1)①

●自然科学共同利用・共同研究統括システム（NOUS）の推進：

機関・分野の壁を取り除き、異分野融合を自然に促進させるため、機構が統一して行う新たな共同利用・共同研究体制を構築した。具体的には、共同利用・共同研究の申請の窓口を1本化し、申請から審査、採択、成果報告・公表、分析・評価に至るまでを統合的にWeb上で管理する『自然科学共同利用・共同研究統括システム（NOUS）』の構築とその適用を強力に推進した。令和3年度は、NOUSに共同利用・共同研究の成果論文自動取得機能や大学院生の学位取得への貢献を把握する機能などを実装した。これによりこれまで十分に把握しきれなかった共同利用・共同研究の成果論文を収集できるようになったほか、博士号取得への貢献という指標により、共同利用・共同研究による大学の教育への貢献度を評価できるようになるなど、これまで以上に共同利用・共同研究による大学の研究力強化への貢献を把握できる体制を整えた。

●大学の研究力強化への貢献 ※整理2

●自然科学大学間連携推進機構（NICA）の推進：

「大学との組織的対話」を強力に進め、大学の執行部の要望を把握して共同利用・共同研究を推進することにより、大学の機能強化・研究力強化に貢献するとともに、共同利用・共同研究全体の更なる発展を図っている。NICAでの議論に依り、大学の枠を超えて若手研究者を育成する「NICAフェロー制度」を発足・実施するとともに、大学の枠を超えた設備共有・技術共有などの取組みを実施した。令和2年度からは、コロナ禍における研修促進に向け、技術研修動画を作成してウェブサイトへ掲載するなどし、必要な時に常時アクセス可能な体制を整えた。

●研究大学コンソーシアムの推進：

研究力強化に取り組む大学及び大学共同利用機関法人が、各大学等における取組み・課題の発信や好事例の共有化を進めるため、ネットワークとしてのコンソーシアムを形成し、それら取組みの全国的な普及・定着を図っている（現在、36の国公立大学等で構成、メンバーは各構成機関の研究担当理事）。我が国の大学の研究力強化に貢献するため、機構は「研究大学コンソーシアム」の幹事機関として、積極的な運営を行った。令和2年度には新たに「異分野融合タスクフォース」を設置するとともに、令和3年度には分野や機関の枠を超えた共同研究を推進するため「MIRAI-DXプラットフォーム」の整備を完了した。令和4年度以降、同プラットフォームを活用し、更なる大学の研究力強化を図る。

●大学連携による保有する設備の共用化の全国展開 ※まとめ(1)③

●「NICA」による「設備共有」「技術共有」の促進：

前述の「NICA」において、各大学の持つ設備共用システムをネットワーク化した全国的な共用体制の構築、及び各大学に所属する技術職員の知識共有化の検討を開始した。

●「大学連携研究設備ネットワーク」事業：

本機構・分子科学研究所が行っている事業であり、全国の国公立大学等が所有する物質科学を中心とした設備の共用を行うため、装置の改修を支援し、共同利用に提供してもらい、それを利用するための予約・課金システムを運用している。本ネットワークの登録装置は3,000台を超え、毎年度約150,000件の利用がある。

●新分野創成の取組み

分野融合型共同研究事業（令和2年度：12件採択、令和3年度：13件採択）、若手研究者による分野間連携研究プロジェクト（令和2年度：8件採択、令和

3年度：8件採択）を実施し、異分野融合による新たな研究分野の開拓・創成に取り組んだ。また、オンラインによる機構内サイトビジットの開催やオーブンラボの基盤整備を進め、異なる分野の研究者交流の活性化を図った。

《大学の共同利用・共同研究拠点との連携》※まとめ(3)①

●双方向型共同研究：

毎年運営費交付金が減少していく中、年間約100件程度の水準の採択件数の確保と高い研究水準を維持しつつ、特徴ある核融合関連研究設備を持つ大学附置研究所・センター（共同利用・共同研究拠点となっている研究所・センターを含む）と核融合科学研究所との間で、双方向性のある共同研究を進めた。大学附置研究所・センターの装置を核融合科学研究所の共同利用設備と同等に見なして共同研究を受入れることで、核融合研究の一層の発展を目指したネットワークの構築（核融合科学研究所、筑波大学、富山大学、京都大学、大阪大学、九州大学）を行ったほか、拠点間で予算を傾斜配分できるシステムを利用し、大学附置研究所・センターの有する装置について、予算を重点配分し、集中的な設備整備を行うことにより、核融合研究のより一層の推進に貢献した。

●プラズマバイオコンソーシアム：

プラズマの分子生物学的作用を解明する基礎研究を中心に推進し、新分野の創成を目指して、機構の新分野創成センターと、名古屋大学の共同利用・共同研究拠点となっているセンター及び九州大学のセンターが一体となって、平成30年度にプラズマバイオコンソーシアムを形成し、活動した。令和2年度には本コンソーシアムに新たに東北大学も参画し、体制が強化された。また、令和3年度には自然科学研究機構シンポジウム「生命科学とプラズマ工学がつくる未来」を開催し、プラズマバイオ分野の研究成果について、広く一般へ公開した。

《産学連携体制の強化》※整理4、まとめ(3)②

●産学連携体制の充実：

これまで各機関がそれぞれ独自に行っていた産学官連携を、機構の統一したポリシー・規程・運用等の下で実施し、研究成果を社会に還元し、より一層、社会に貢献することを目指して、令和元年度に「産学連携室」を設置するとともに、規程の整備、産学連携コーディネータ（URA）の新規雇用など、産学連携体制の充実を図った。また、令和2年度には企業向けのPR動画の制作、産学連携に関する専門ホームページの作成、令和3年度には科学技術振興機構（JST）が主催する新技術説明会への参加など、産業界との連携に積極的に取り組んだ。

●産学官連携研究部門の設置：

民間等外部機関からの資金を活用した産学官連携研究部門を制度化し、分子科学研究所に、産学官連携研究部門（社会連携研究部門）を設置し、産業界から得た資金を活用して、TILA（Tiny Integrated Laser:小型集積レーザー）コンソーシアムを運営している。

《人材育成》※まとめ(1)②、まとめ(2)

●若手研究者の育成と支援：

岡崎3機関では内部昇格を禁止するなど流動性を高めた上で、若手研究者の登用や、若手独立フェロー制度（学位取得後間もない若手研究者が独立研究室を主宰）等を、積極的に実施した。さらに、海外の大学や研究機関への若手研究者の派遣事業、国際連携研究センターでの若手の特任研究員の雇用や若手研究者による分野間連携研究プロジェクトを実施するとともに、各機関単位でも若手研究者を対象とした独自の研究費支援の事業を行うなど、国際的に活躍する若手研究者の育成を図った。また、機構の優秀な若手研究者に対して、「若手研究者賞」（平成24年度より実施。毎年度5名。）を授与するなどの表彰を行った。このほか、令和元年度からは大学の枠を超えて若手研究者を育成する「NICAフェロー制度」を発足し、実施した。

機構における若手研究者の割合は、令和3年度末時点で35.8%となり、中期計画に掲げる目標（35%程度を維持）を達成した。

●大学院教育の充実：

大学院教育では、機構内各機関が総合研究大学院大学（以下「総研大」という）の基盤機関として専攻を担当するとともに、特別共同利用研究員や連携大学院制度により学生を受け入れた。また、機構直轄のアストロバイオロジーセンターも令和元年度から新たに総研大の連携機関として大学院教育を担当し、宇宙・天文学と生物学が融合する新しい学問領域での教育を実施した。

※「今後の共同利用・共同研究体制の在り方について（意見の整理）」及び「第4期中期目標期間における大学共同利用機関の在り方について（審議のまとめ）」に関する取組みについては、それぞれ「※整理（該当番号）」、「※まとめ（該当番号）」と、見出しの末尾に付している。

また、共同利用・共同研究体制の強化については、以下の取組みを行った。

国立天文台では、ハワイのすばる望遠鏡による共同利用観測の一環として、超広視野主焦点カメラ（HSC）戦略枠観測プログラム（SSP）を約7年かけて完了した（令和4年1月）。HSC-SSP大規模データより計5億個超の天体の位置・明るさ・形状が正確に測定されており、3回に分けて世界中の研究者に公開した。

自然科学研究機構

チリのアルマ望遠鏡について、運用・保守の国際責務を果たして観測時間を確保し、日本を含む東アジア地域の研究者の支援（観測提案の作成、データ解析、論文等）を継続した。新型コロナウイルス感染症の影響により、共同利用観測を約1年間停止したが、令和3年3月に再開した。令和3年度には、台湾を中心とする国際協力によりバンド1受信機66台の組立てを完了したほか、GPU

(Graphics Processing Unit) 技術に基づく新型分光計を開発し、チリ現地でファーストライトを達成した。

天文シミュレーション用の演算加速器として、GPUを用いた大規模並列計算機システムを令和2年度に導入し、令和3年度より共同利用に供し、研究を推進した。共同利用機能を持続的かつ高いレベルで提供するため、すばる望遠鏡の共同利用率を90%に、天文シミュレーションシステムの共同利用率を100%に維持した。

外部委員が過半数を占める「科学戦略委員会」の下に2つのワーキンググループ(WG)を設置し(令和2年度に惑星科学WG、令和3年度に天文データアーカイブWG)、天文学分野を横断する課題や将来計画等の議論を進めている。

令和2年度よりテニュアトラック制度を開始し、助教2名を統計数理研究所に派遣して同研究所との研究交流を強化した。また、鹿児島大学、電気通信大学、大阪府立大学等と包括的な研究協力の協定を締結し、各大学の大学院生が国立天文台の施設等を活用して天文学の研究・開発を行っている。令和3年度には、台湾中央研究院 天文及天文物理研究所(ASIAA)とすばる望遠鏡に関する科学協力覚書を締結し、天文学研究分野における日本と台湾のより強固な連携を促進した。

核融合科学研究所では、核融合研究の拠点となる大学等の装置を同研究所の共同利用設備と同等と見なし、全国の大学研究者がそれら大学等の装置を対象に共同利用・共同研究として進めることが出来る「双方向型共同研究」をはじめ、「LHD(大型ヘリカル装置)計画共同研究」及び「一般共同研究」という三つの制度から成る共同研究を推進し、大学等からの幅広いニーズに対応した。さらに、令和元年度からは、原型炉開発に向けた研究開発を推進するため、新たに「原型炉研究開発共同研究」を開始し、基礎から応用に至る広範囲の共同利用・共同研究を学術研究として展開した。これら四つの共同研究のそれぞれの特徴を活かし、大学等の研究力強化に貢献した。また、令和2年度には、共同研究“Fusion 2030”を主催し、核融合科学分野の多様な意見を取りまとめ、コミュニティに対して長期的なビジョンを提示し、ホームページで公開した。

基礎生物学研究所では、共同研究のニーズに応えるために、平成28年度からは「統合ゲノミクス共同利用研究」と「統合イメージング共同利用研究」を、令和3年度からは「新規モデル生物開発共同利用研究」を開始した。また、次世代DNAシーケンサーの導入や高速ストレージの容量の大幅な増強を行うなど、共同利用機器の高度化を進めた。さらに、ゲノム編集技術を専門とする特任准教授のクロスアポイントメントのエフォート比率を高め、同技術による支援体制を強化した。

新型コロナ感染拡大に伴う移動制限への対応として、トレーニングコースをオンライン及びオンライン/オンサイトのハイブリッド形式で開催するとともに、共同利用研究においても遠隔化・リモート化の体制整備を進めた。

プリンストン大学と共催でプロテオミクストレーニングコースを開催し、質量分析に関する技術水準の向上と人材育成を図った。米国・プリンストン大学や台湾中央研究院との研究者交流を通じて、今後の連携活動の可能性について議論を行った。

先端バイオイメーjing支援プラットフォーム(ABiS)の中核機関を生理学研究所とともに担当し、科研費取得者のバイオイメーjing解析支援を行った。さらに、欧州のEuro-BioImagingが進めている国際ネットワークGlobal Bio-Imagingに参画し、合同シンポジウムやトレーニングコースを開催し、最先端イメージングの情報共有と解析技術の普及を推進した。

北海道大学・低温科学研究所をはじめとする4つの共同利用・共同研究拠点(以下「共共拠点」という)と連携協定を結び、異分野間の共同利用研究促進や情報共有を進めたほか、中部大学 AI 数理データサイエンスセンター及び生理学研究所との「AIを活用した生命システムの解明」に係る連携を開始した。

生理学研究所では、研究連携センター・共同利用研究推進室の相談窓口において、大学・企業等からの問い合わせに対応し、所内外の共同研究先の紹介を行うことにより共同研究を推進した。同志社大学赤ちゃん学術センター、昭和大学発達障害医療研究所、玉川大学脳科学研究所、3つの共共拠点と連携協定を締結し、ヒトの発達、社会性に関する学術分野における連携に着手した。中部大学 AI 数理データサイエンスセンター及び基礎生物学研究所との「AIを活用した生命システムの解明」に係る連携を開始した。新学術領域研究・学術研究支援基盤形成「先端バイオイメーjing支援プラットフォーム」の中核機関を基礎生物学研究所とともに担当し、電子顕微鏡及びMRIの先端的な機器や技術に関して、全国の大学機関を束ねて支援体制を構築し、支援推進において中心的役割を果たした。本プラットフォームの実績が高く評価され、令和4年度から学術変革領域研究・学術研究支援基盤形成「先端バイオイメーjing支援プラットフォーム」として継続されることになった。脳科学コミュニティからの要請を受け、人材育成に主眼をおいた「次世代脳」プロジェクトの運営サポートを担うとともに、AMED事業「戦略的国際脳科学研究推進プログラム」の中核的組織として、脳科学研究の国際対応に関する国内の調整業務を担いつつ、同事業での研究開発推進支援を進めた。

分子科学研究所では、新たな分子能力の創発の現場となるメゾスコピック領域(ミクロとマクロの機能が影響を及ぼし合う領域)で、分子の機能や反応の契機となる過程を明らかにすることを目的に、新しい発想に基づく革新的な計測法の開拓を目指し、分子制御レーザー開発研究センターをメゾスコピック計測研究セ

ンターに改組した。分子科学研究所が有する特徴的な実験施設である極端紫外光研究施設の高度化に向けて海外の研究機関と学術交流協定を締結し、世界最高性能の光電子運動量顕微鏡の開発を海外の研究機関と共同で推進するとともに、主任研究員を採用し、競争力ある新規放射光利用測定装置を開発整備する研究活動を開始した。また、10年単位の次世代計画についての検討を継続して行った。計算科学研究センターでは、分子科学分野での国際的な競争力を持つ計算機環境を維持するため、次期の計算機導入計画（次期機種種の借入期間：令和4年12月～令和10年11月予定）の策定を開始した。国際的見地から研究体制及び共同利用・共同研究体制についての助言を得るため、令和元年度に国際諮問委員会を開催した。その報告に基づき、必要と考えられる改善方針を策定し、一部実施を開始するとともに、それらを取りまとめて国際諮問委員会への回答書とし、公開した。分子科学研究所で生み出した新たな研究分野を大学等に拡大するなど、大学等との共同研究の活性化を継続的に図るため、研究者の流動化を目的として内部昇格禁止を実施している。その結果、高い流動性（平成28年度から令和3年度の間に、教授2名、准教授11名、助教32名、特任助教5名が転出した。※教授、准教授には特任教員を含む）を維持し、研究者の流動とそれによる共同利用の展開に大きく貢献した。特別研究部門におけるクロスアポイントメント制度の活用による他大学との人事交流について、関連分野の大学関係者との意見交換・調整を進め、2名の教授、1名の准教授を他大学から招聘し、所内の研究グループと協力して推進する共同研究プロジェクトを実施した。また、分子科学分野で顕著な業績を上げた研究者を他大学等から招聘してその研究をさらに発展させる特別研究部門における卓越教授の制度を制定・発足させ、1名の卓越教授の研究グループが共同研究活動を推進した。

この他、4機構として連携した取組みを以下に述べる。

◀ 4機構連携の取組み ▶

大学共同利用機関法人の4機構及び総研大を構成員とする「連合体」設立準備委員会にて検討を重ね、当初、令和4年度設立としていた計画を前倒しし、令和3年度に「一般社団法人 大学共同利用研究教育アライアンス」を設立した。本アライアンスには、研究力強化部会、大学院教育部会、業務運営部会の3つの部会を置き、今後それぞれの課題に対し、検討・取組みを行う。

○ 項目別の状況

I 業務運営・財務内容等の状況
 (1) 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

中期目標	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。
------	--

中期計画	進捗状況	判断理由（計画の実施状況等）
<p>【51】 社会のニーズを的確に反映し、幅広い視点での自立的な運営改善に資するため、経営協議会及び教育研究評議会からの指摘事項等への対応を1年以内に行うとともに、フォローアップを毎年度実施する。</p>	III	(令和2及び3事業年度の実施状況) 機構長のリーダーシップの下、経営協議会や教育研究評議会の外部有識者の多様な意見を取り入れ、法人として責任ある運営を進めるとともにその対応について役員会で確認を行った。さらに、機構長、理事に加え各機関の長が副機構長として参加する機構会議の開催を通じて、機構として一体的かつ、円滑な運営を行った。
<p>【52】 専門分野ごと又は境界領域・学際領域ごとに、外部評価における提言や外部の学識経験者からの指導・助言に基づき、指摘から1年以内に、研究活動計画、共同利用・共同研究等における重要事項の改善を行う。</p>	III	(令和2及び3事業年度の実施状況) 各機関では、運営会議、外部評価委員会等において、研究計画や共同利用・共同研究の重要事項について点検・評価等を行い、その結果を次年度業務の改善、効率的な運営に活用した。
<p>【53】 機構長のリーダーシップの下で機構の強みや特色を生かし、教育、研究、社会貢献の機能を最大化できるよう、権限と責任が一致した意思決定システムの確立や、法人運営組織の役割分担を明確化するとともに、新たに対応が求められる事案については、担当理事を明確化する。また機構長を補佐する体制の強化を図る。</p>	IV	(令和2及び3事業年度の実施状況) 令和2年度より、外部理事として、産学連携担当理事を登用し、NINSの産学連携全般の活動における強化を図った。令和2、3年度は、NINSの基礎研究シーズ等を産業界にPRする活動及び基礎研究から実用化を見据えた応用研究への研究支援等、産業界からの視点を取り込んだ活動の強化を図った。 また、令和3年度に、研究力強化戦略本部の下に新たに企画戦略室を設置するとともに担当理事を配置することを決定し、融合的課題の解決、学術のみならず社会への貢献を果たす体制とした。
<p>【54】 監事機能の強化を図るとともに、サポート体制を強化するため、監事が機構長選考方法や法人内部の意思決定システムをはじめとした法人のガバナンス体制等についても監査するとともに、内部監査組織と連携する。</p>	III	(令和2及び3事業年度の実施状況) 令和2年度には、これまで兼任となっていた監査室長を専任職員として機構本部に配置し、監事と監査室の連携強化を図った。令和3年度には、監事監査規程を改正し、「競争的研究費等の運営及び管理に関する事項」も新たに監査対象とすることとし、研究費不正防止に対する監事の役割を明確化した。

自然科学研究機構

<p>【55】 優秀な若手・外国人の増員や研究者の流動性向上などにより教育研究の活性化を図るため、クロスポイントメントを含む混合給与及び研究教育職員における年俸制の活用による人事・給与システムの弾力化に取り組む。特に、年俸制については、業績評価体制を明確化し、退職手当に係る運営費交付金の積算対象となる研究教育職員について年俸制導入等に関する計画に基づき促進し、年俸制職員の割合を第3期中期目標期間終了時まで全研究教育職員の25%以上に引き上げる。また、若手研究者の割合は、第3期中期目標期間において全研究教育職員の35%程度を維持する。</p>	IV	<p>(令和2及び3事業年度の実施状況) 機構では、教育研究の活性化を図るため、様々な種別によるクロスポイントメント制度の活用を積極的に進め、適用者は令和2年度末時点で17名、令和3年度末時点で21名(平成27年度比17名増)に上った。受入及び派遣先については、国内の国立大学のみならず、研究機関や海外の大学等多岐にわたり、さまざまなバックグラウンドを持った人材の交流により、機構の教育研究活動を活性化させることとなった。 また、年俸制については、令和2年度に新しい年俸制を導入し、新規採用者や希望者の年俸制への転換を一層進めた。これにより、<u>年俸制職員割合は令和2年度の時点で29.6%に上り、第3期中期目標期間終了時まで25%以上に引き上げるとする計画を、一年早く達成した。</u>なお令和3年度にはこの割合は32.0%まで上昇している。 このほか、計画的な人事採用計画により若手研究者比率も令和2年度36.7%、令和3年度35.8%と、35%程度を維持するとした中期計画を達成した。</p>
<p>【56】 職員の研究に対するインセンティブを高めるため、職員の適切な人事評価を毎年度行い、問題点の把握や評価結果に応じた処遇を行う。また、URA (University Research Administrator) などの高度な専門性を有する者等、多様な人材の確保と、そのキャリアパスの確立を図るため、URA と研究教育職員等との相互異動など多様な雇用形態のロールモデルを構築する。</p>	IV	<p>(令和2及び3事業年度の実施状況) 令和2年度に、退職時に退職手当を支給する年俸制(新年俸制)を導入するとともに、<u>これに併せて、研究教育職員の評価を一つの評価基準の下で実施し、機構の業績評価委員会において決定した評価結果に応じて給与に反映するよう評価制度を見直した。</u> 機構ではURAのキャリアパスについて、研究職、事務職、技術職を問わず現職からURAを務めた後、再び前職へ復帰できるURAの多様なキャリアパスを確立している。令和2年度、令和3年度は「研究大学コンソーシアム」の下に置かれたタスクフォースにおいて、文部科学省におけるURA 質保証の議論に関する情報共有をするとともに、<u>特に令和2年度においては、コロナ禍におけるURAの安定的雇用及びその財源確保に関する要望書を取りまとめ、文部科学省へ提出した。</u></p>
<p>【57】 技術職員、事務職員の資質と専門的能力の向上を図るため、職能開発、研修内容を充実するとともに、自己啓発の促進並びに研究発表会、研修等への積極的な参加を促す。事務職員については、機構全体を対象として、各役職・業務に応じた研修を毎年度5回以上実施する。</p>	IV	<p>(令和2及び3事業年度の実施状況) 技術職員については、技術研究会等への参加を通じ、技術交流を発展させるとともに、技能の向上を図った。特に令和2年度からは、新型コロナウイルス感染症の感染拡大の影響により、集合しての技術研修を実施することが困難な情勢が続いたため、<u>NICAを通じて、技術研修の動画作成を進め、積極的に活用した。</u>事務職員については、機構全体を対象とし、令和2年度は11回、令和3年度は14回、それぞれ役職・業務に応じた研修を実施した。 また、平成30年度より実施しているURA研修(東京工業大学との合同開催)を令和2年度、令和3年度も引き続いて実施した。</p>

<p>【58】 女性研究者を積極的に採用し、女性研究者の割合を第3期中期目標期間終了時までに13%に引き上げる。また、新たな男女共同参画推進アクションプログラムを設定・実行することにより、男女共同参画の環境を整備・強化する。さらに、出産、育児、介護支援など様々なライフステージにおいて柔軟な就労制度を構築する。</p>	<p>III</p> <p>(令和2及び3事業年度の実施状況) 令和2年度は、育児支援制度・出張帯同支援制度について、記入項目の削減など様式を見直し、手続の効率化を図り、利用者の利便性の向上を図るとともに、昨年度に引き継ぎチラシを作成し、制度の周知を図った。また、<u>女性研究者を積極的に採用する施策として、女性研究者を雇用した機関に対して女性研究者雇用支援経費を配分する制度を実施し、配分対象となる女性研究者を雇用した5機関に対し、当該支援経費(5名分)を配分した。</u>さらに、ライフステージにおける柔軟な就労制度の構築を進めるため、<u>在宅勤務制度を構築し、令和2年度から運用を開始した。</u> 令和3年度は、第3期中期目標期間を総括する内容の講演会を4機構合同で開催したほか、育児支援制度・出張帯同支援制度の更なる周知のため、<u>新たに共同利用・共同研究者向けのチラシを作成した。</u>また、令和2年度に運用を開始した在宅勤務制度について、<u>対象を研究教育職員から全職員へと広げ、就労制度の更なる柔軟化を図った。</u> これら男女共同参画推進にかかる環境整備・強化等により、令和3年5月、10月の時点で女性研究者割合13%以上を達成した。</p>
--	--

<p>I 業務運営・財務内容等の状況 (1) 業務運営の改善及び効率化に関する目標 (2) 教育研究組織の見直しに関する目標</p>

<p>中期目標</p>	<p>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。</p>
-------------	---

中期計画	進捗状況	判断理由（計画の実施状況等）
<p>【59】 各分野の研究動向の詳細な把握の上で、機構長のリーダーシップの下、機構長を議長とした研究基盤戦略会議において、機能強化及び資源の再配分の方針の策定を行うとともに、新たな組織の運営の評価を行い、機能強化を強力に推進する。</p>	<p>III</p>	<p>（令和2及び3事業年度の実施状況） 機構長を議長とした研究基盤戦略会議において、機構における機能強化及び資源の再配分の方針を策定したほか、機構直轄の新分野創成センター、アストロバイオロジーセンター、生命創成探究センター、国際連携研究センターの運営状況の確認・評価を行った。また、研究基盤戦略会議においては、競争的研究費における制度改善（研究代表者等人件費制度の導入）について審議・決定を行ったほか、研究設備整備促進事業により、タンパク質動態機能解析システムを生命創成探究センターに導入（約6億円）し、研究環境の充実に努めた。</p>
<p>【60】 研究基盤戦略会議における機能強化の方針、資源の再配分を始めとした組織改革の方針に基づき、各機関等において、教育研究組織の再編・改革等を行う。</p>	<p>III</p>	<p>（令和2及び3事業年度の実施状況） 国立天文台では、令和3年度に野辺山45m電波望遠鏡による共同利用の終了とそれに伴う令和4年度以降の同望遠鏡の利用に関して、電波天文学コミュニティや運営会議とも意見交換を重ね、望遠鏡時間を有料化する新しい制度を定めた（国内大学院生には年間100時間まで無償提供する緩和措置あり）。 核融合科学研究所では、外部評価による提言や、運営会議などにおける将来計画に関する議論、研究力強化戦略室での分析結果等に基づいて組織再編の素案を策定するとともに、本案について研究コミュニティとの議論を行った。 基礎生物学研究所では、令和2年度に研究力強化戦略室に「産学連携グループ」を新設し、研究成果のシーズ化等、産学連携の円滑化を図った。令和3年度は、第4期中期目標期間での組織改編について、運営会議での意見も踏まえながら検討を行い、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の3センターを超階層生物学センターに改組することとした。 生理学研究所では、令和2年度にクロスアポイントメント制度を利用した期限付き研究室の新規立ち上げを決定し、人事公募を行った。また、令和3年度には、運営会議での議論を踏まえて、新たに「感覚認知情報研究部門」及び、クロスアポイントメント教員が主宰する「多細胞回路動態研究部門」と「分子神経免疫研究部門」を立ち上げた。また、共同利用研究の強化に向け、新たに「多階層生理機能解析室」及び「時系列細胞現象解析室」を立ち上げた。</p>

自然科学研究機構

		分子科学研究所では、令和2年度に引き続き、社会連携研究部門において、超小型レーザー光源技術の社会実装に係る研究開発を推進し、産学連携が進んだ。
--	--	---

<p>I 業務運営・財務内容等の状況 (1) 業務運営の改善及び効率化に関する目標 ③ 事務等の効率化・合理化に関する目標</p>
--

<p>中期目標</p>	<p>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。</p>
-------------	--

中期計画	進捗状況	判断理由（計画の実施状況等）
<p>【61】 事務局と各機関及び他機構の事務部門との連携を強化し、事務の共同実施等による事務処理の効率化を進める。また、テレビ会議システムによる会議開催を促進し、機構内会議に占めるテレビ会議の比率を、前年度比1以上とする。さらに、経費の節減と事務等の合理化を図るため、第3期中期目標期間終了時まで、すべての機構内会議においてペーパーレス化を導入する。</p>	<p>III</p>	<p>（令和2及び3事業年度の実施状況） これまでの役員会・機構会議及び研究基盤戦略会議のテレビ会議（zoom）開催に加え、経営協議会、教育研究評議会、機構長選考会議についてもテレビ会議（zoom）で開催（令和2年度より）するなどし、令和2、3年度において、<u>機構内会議に占めるテレビ会議比率を前年度比1以上とする中期計画を達成した。</u> また、令和3年度には、<u>すべての機構内会議においてペーパーレス化を実施した。</u> さらに、クラウドアプリケーション（Google Workspace、Microsoft365等）を導入・活用することにより事務処理の一層の効率化を進めた。</p>

(1) 業務運営の改善及び効率化に関する特記事項

1. 特記事項

1) 組織運営の改善

機構長のリーダーシップの下、共同利用・共同研究及び計画・評価担当理事の常勤化（平成 28 年度）、副機構長への担当分野の割り当て（平成 28 年度）等、機構長を多方面から補佐する体制の強化を実施するとともに、機構のグローバル化機能機能を最大化するため海外駐在型 URA を積極的に活用するなど、機構の持つ強みや特色を生かした機能強化策を実施してきた。

特に産学連携に関しては、機構として統一的な体制を整えるため、抜本的な改革に取り組んだ。関係規程の大幅改訂・整備（平成 30 年度）、産学連携担当 URA 2 名の本部への配置（令和元年度）に加え、令和 2 年度には新たに民間企業経験者を産学連携担当理事として登用し、その知見を産学連携活動に生かす仕組みを構築した。これらの体制強化により、令和 2 年度には企業向けの PR 動画の制作、産学連携に関する専門ホームページの作成、令和 3 年度には JST が主催する新技術説明会への参加など、産業界との連携を積極的に推進した。

令和 3 年度には、幅広い課題の解決に向け、部門横断的な検討を可能とするため、研究力強化推進本部の改組を決定した。研究力強化推進本部の下にチーム制からなる企画戦略室を新たに設置し、URA の専門性を最大限に活かし、かつ事務部門との連携を強化することで、融合的課題に対応し、学術のみならず社会へも貢献を果たす体制とした。【53】

法人のガバナンス体制等における監査の一環として、役員会、機構会議、経営協議会及び教育研究評議会に加えて、機構長選考会議、所長選考委員会、研究基盤戦略会議に監事が陪席するとともに、監事と機構長の意見交換を行う機会を 3 か月に 1 回程度設け、機構の組織運営及び業務運営に関する諸問題について意見交換を行うなど、法人のガバナンス体制等についての監事の監査体制の強化を図った。また、監事と内部監査組織である監査室との情報共有を目的とした会合を定期的に開催している。令和 2 年度には、これまで兼任となっていた監査室長を専任職員として機構本部に配置し、監事と監査室の連携強化を図った。令和 3 年度には、監事監査規程を改正し、「競争的研究費等の運営及び管理に関する事項」も新たに監査対象とすることとし、研究費不正防止に対する監事の役割を明確化した。【54】

研究教育職員の意欲を向上させ多様で優秀な人材の確保の促進等を目的に令和 2 年 4 月 1 日から、人事給与マネジメント改革の一環として退職時に退職手当を支給する年俸制（新年俸制）を導入するとともに、これに併せて、学術分野の特性や職位等に配慮しつつ研究教育職員の能力や成果が厳格かつ公正に評価される

よう給与体系の違いにかかわらず全ての研究教育職員を一つの評価制度の下で実施し、機構の業績評価委員会において決定した評価結果に応じて給与に反映する評価制度の見直しを行った。令和 3 年度においても同様に、公平・公正な人事評価を実施した。【56】

技術職員については、技術研究会等への参加を通じ、技術交流を発展させるとともに、技能の向上を図った。特に令和 2 年度からは、新型コロナウイルス感染症の感染拡大の影響により、集合しての技術研修を実施することが困難な情勢が続いたため、NICA を通じて技術研修の動画作成を進め、これらを積極的に活用した。国立天文台では、技術職員との意見交換を重ね、国立天文台が目指す技術職員の人材像を定めた上で、そこに至るためのキャリアパスイメージと人材育成計画を体系的に整備する一連の文書を令和 2、3 年度に制定した。これに基づいて研修を計画、実施している。

また、URA の質向上という課題の重要性を鑑み、平成 30 年度より開始した URA 研修（東京工業大学との合同開催）を令和 2 年、3 年度も引き続き実施した。参加者数は初回の 44 名から、令和 2 年度は 59 名、令和 3 年度は 72 名に上り、URA の能力向上に寄与した。【57】

「第三期中期目標期間における男女共同参画推進に関するアクションプラン」で予定されていた講演会やパンフレット作成をそれぞれ 1 年前倒しで進め（講演会：平成 30 年度、パンフレット：令和元年度）、また育児支援制度、出張帯同制度などを新設するなど、男女共同参画推進の環境整備・強化を積極的に推進した。

また、ライフステージにおける柔軟な就労制度構築のため、在宅勤務制度を整備し、令和 2 年度から運用を開始した。新型コロナウイルス感染症拡大前からの準備が奏功し、コロナ禍においてもスムーズな業務継続が可能となった。令和 3 年度には在宅勤務制度の対象を研究教育職員から全職員へと広げ、就労制度の更なる柔軟化を図った。国立天文台では、令和 2、3 年度に在宅勤務に関する台内アンケートを実施し、オンライン職員懇談会等の場で、在宅勤務の状況や意見（業務の遂行状況、職場内コミュニケーション等）を共有した。

これら男女共同参画推進にかかる環境整備・強化等により、令和 3 年 5 月、10 月の時点で女性研究者割合 13%以上を達成した。令和 3 年度末では 12.5%と、13%をわずかに下回ったが、反面、准教授等へ昇任の上で機構から転出するなど、人材の流動化への貢献ともなっている。【58】

<p>2. 共通の観点に関する取組み状況</p> <p>ガバナンス改革</p> <p>令和2年度には、これまで兼任となっていた監査室長を専任職員として機構本部に配置し、監事と監査室の連携強化を図った。令和3年度には、監事監査規程を改正し、「競争的研究費等の運営及び管理に関する事項」も新たに監査対象とすることとし、研究費不正防止に対する監事の役割を明確化した。(再掲)</p>	
---	--

<p>1 業務運営・財務内容等の状況</p> <p>(2) 財務内容の改善に関する目標</p> <p>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</p>
--

<p>中期 目標</p>	<p>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。</p>
------------------	---

中期計画	進捗 状況	判断理由（計画の実施状況等）
<p>【62】 外部研究資金の募集等の情報を広く収集し、周知を徹底することにより、応募、申請を促し、受託研究等収入、共同研究等収入、寄附金収入、科学研究費助成事業収入など多様な収入源を確保する。</p>	<p>IV</p>	<p>(令和2及び3事業年度の実施状況) 機構ウェブサイト外部研究資金情報を一括掲載するページを設け、機構内への周知徹底を図ったほか、各機関においても科研費や外部資金の情報をウェブサイト（イントラサイト）へ掲載する、電子メールでアナウンスするなど、関係者への情報提供に努めた。また、国立天文台では令和3年度に、優秀な博士人材を確保する「次世代研究者支援事業」として、株式会社岩手日報社との間で包括的な連携協定を締結した。</p>

<p>1 業務運営・財務内容等の状況 (2) 財務内容の改善に関する目標 ② 経費の抑制に関する目標</p>
--

<p>中期目標</p>	<p>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。</p>
-------------	--

中期計画	進捗状況	判断理由（計画の実施状況等）
<p>【63】 人件費以外の経費について、増減要因の分析を踏まえ、毎年度、経費の節約方策を定める。また、不使用時の消灯やペーパーレスなど経費の節減に関する教職員の意識改革を行う。 さらに、各機関や他大学等の節約方法に関する情報の共有化を通じ、経費の削減につなげる。</p>	<p>IV</p>	<p>(令和2及び3事業年度の実施状況) 機構では、<u>機構長のリーダーシップの下、最先端の研究設備を計画的に整備するため、自然科学研究機構設備整備費促進事業として、運営費交付金から効率化等により捻出した一定の額を毎年度確保（令和元年度～、2億円/年）する仕組みを構築した。令和2年度においては、この事業により、タンパク質動態機能解析システムを導入（約6億円）し、研究環境の一層の充実に努めた。</u> また、各機関でも積極的に経費節減に取り組み、照明器具のLED化、老朽化した機器の使用停止、経年劣化した公用車の廃止などを実施した。</p>

I 業務運営・財務内容等の状況
(2) 財務内容の改善に関する目標
③ 資産の運用管理の改善に関する目標

中期目標	資産の効率的かつ効果的な運用管理を行う。
------	----------------------

中期計画	進捗状況	判断理由（計画の実施状況等）
<p>【64】 固定資産について、各機関の使用責任者による実地検査を行い、6年間ですべての資産の実地検査を行う。また、資産管理部署においても使用状況を定期的に検証し、利用率の低い資産や所期の目的を達した資産については、機構全体的な観点から活用方策を検討するなど、資産の不断の見直しを行う。</p>	III	<p>（令和2及び3事業年度の実施状況） 機構では、固定資産について、使用責任者及び資産管理担当職員による使用状況確認を含む実査を継続的に行い、<u>すべての資産の実地検査を完了</u>した。また、不使用となった資産（少額備品を含む）等については、資産の有効利用を図る観点から、機構内 Web ページに掲載することで機構内のリユース活用を呼びかけるなど積極的に再利用に取り組んだ。</p>
<p>【65】 機構直轄管理の施設の運用促進に取り組むとともに、これまでの運用状況を踏まえ、将来に向けた運用計画を検討し、平成30年度までに、運用継続の可否を含めた結論を得る。</p>	III	<p>（令和2及び3事業年度の実施状況） 野辺山研修所は新型コロナウイルス感染症の流行拡大に伴い、令和2年9月より利用を停止していたが、利用状況、費用対効果などを総合的に勘案の上、令和2年12月の役員会にて、廃止を決定した。なお、当該施設については、所在する長野県南牧村より取得要望があったことから、令和4年1月に譲渡した。 乗鞍観測所については、平成30年度末に運用を停止して以降、近隣自治体及び観光協会と情報共有を図りつつ、存置及び譲渡を模索してきたが、所在する国立公園の保護管理等を行っている中部山岳国立公園管理事務所（環境省）より解体撤去の指導があったことから、これを廃止することとし、関係機関等に対して周知・説明を行った。 なお、伊根実験室については、令和元年度に建物を取り壊し、更地にした上で土地を返還している。</p>

(2) 財務内容の改善**1. 特記事項****1) 外部研究資金、寄附金その他の自己収入の増加**

機構では、外部研究資金等に関する情報収集を図り、機構内限定 Web ページへの募集情報の掲載や説明会の実施等により、機構内の職員への周知に努め、外部研究資金等獲得による自己収入の増加を図った。なお、令和2、3年度の科学研究費助成事業における獲得実績は下記図のとおりである。特に一件当たり採択額順位ではトップレベルの水準となっている。

	令和2年度	令和3年度
採択件数(件)	399	395
採択額(百万円)	1,927	2,193
一件当たり採択額(千円)	4,828	5,552
一件当たり採択額順位 ※採択件数50件以上機関中	<u>5位</u>	<u>2位</u>

国立天文台では、令和2年度に水沢 VLBI 観測所において、観測所を応援するために地元の方々から計53件、総額35,934,800円の寄附金が寄せられたほか、野辺山宇宙電波観測所では、地元の長野県南牧村から5,562,945円の寄附金が寄せられた。また、令和2年度より三鷹本部構内におけるドラマ・映画等の撮影料の徴収を開始し、令和2年度は1,760,000円、令和3年度は412,500円の収入を得た。さらに、令和3年度に、優秀な博士人材を確保する「次世代研究者支援事業」として、株式会社岩手日報社との間で包括的な連携協定を締結した。

基礎生物学研究所では、令和2年度に引き続き、令和3年度にも株式会社ドワンゴと共同でインターネット中継を実施(タイトル:「【超変態企画】テントウムシの完全変態を200時間見守る春の自由研究 基礎生物学研究所×ニコニコ」、実施日:令和3年4月24日)し、89万8179件のアクセスを得るとともに、ニコニコ生放送のギフト機能の活用により収益を得た。また、このポイントを原資に「基礎生物学研究所 ニコニコ生物研究助成」として、番組作りに貢献した研究者に研究費として還元した。【62】

2) 経費の抑制

機構では、機構長のリーダーシップの下、最先端の研究設備を計画的に整備するため、自然科学研究機構設備整備費促進事業として、運営費交付金から効率化等により捻出した一定の額を毎年度確保(令和元年度～、2億円/年)する仕組みを構築した。令和2年度においては、この事業により、タンパク質動態機能解析システムを導入(約6億円)し、研究環境の一層の充実に努めた。【63】

2. 共通の観点に関する取組み状況**財務内容の改善**

機構では、機構長のリーダーシップの下、最先端の研究設備を計画的に整備するため、自然科学研究機構設備整備費促進事業として、運営費交付金から効率化等により捻出した一定の額を毎年度確保(令和元年度～、2億円/年)する仕組みを構築した。この事業により導入したタンパク質動態機能解析システムは、溶液中のタンパク質を原子分解能で構造解析でき、in situ トモグラフィ機能を有し、バイオセーフティにも対応しており、更に光顕電顕相関観察機能までを有するオンリーワンのシステムであり、医学・薬学をはじめ、多岐にわたる研究分野への貢献、異分野融合研究の推進が期待される。(再掲)

I 業務運営・財務内容等の状況
(3) 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

中期目標	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。
------	--

中期計画	進捗状況	判断理由（計画の実施状況等）
<p>【66】 国際的見地から研究体制及び共同利用・共同研究体制について、様々な機構外の者の意見を反映させ、定期的に自己点検及び外部評価等を実施し、その結果を広く公開するとともに、当該意見に応じて見直しを行う。</p>	III	<p>（令和2及び3事業年度の実施状況）</p> <p>国立天文台では、外部委員が過半数を占める「科学戦略委員会」において天文学の将来計画に関する議論を行ってきたが、その一助として、「2021年度 国立天文台の将来シンポジウム～波長を超えて将来計画を考える～」をオンラインで開催した（令和2年度検討開始、令和3年度開催）。273名が参加し、約半数が台外者であった。また、外部委員が過半数を占める「プロジェクト評価委員会」において、プロジェクト室等の新たな評価方針と同委員会の役割を議論し、新方針をとりまとめた。これに沿って令和3年度に国内外の有識者を迎えた国際外部評価（4件）をオンラインで実施した（評価報告書は令和4年度に完成、公開予定）。</p> <p>核融合科学研究所では、運営会議の下に外国人委員を含む外部評価委員会を設置し、外部評価を実施している。令和2年度は、安全衛生推進部、情報通信システム部、対外協力部を対象に、令和3年度は、大型ヘリカル装置計画プロジェクト、数値実験炉研究プロジェクト、核融合工学研究プロジェクトを対象とし、外部評価を実施した。外部評価結果報告書は運営会議に提出されるとともに、研究所のホームページで公開し、今後の研究計画の策定や研究活動の改善等に役立てた。</p> <p>基礎生物学研究所では、着任後10年目を迎える教授を対象に、その業績を確認するため、複数の外国人を含む評価者による評価を実施した（令和2、3年度各1名）ほか、基礎生物学研究所点検評価委員会の指揮の下、外部運営委員、外部有識者委員を招聘し、令和3年度においては、第3期中期目標期間の活動の総括及び第4期中期目標期間の活動計画について議論を行った。</p> <p>生理学研究所では、運営会議の構成員の過半数を外部委員とし（令和2年度）、より開かれた運営体制を整備するとともに、研究所全体の活動を点検・総括する報告書を作成し、運営会議にて審議を行った。また、海外機関の外国人研究者による研究所全体の評価を実施した。さらに、各研究部門についても海外機関の有識者1名、国内有識者2名（学会推薦）による業績評価を、令和2、3年度各3研究部門に対して実施した。</p> <p>分子科学研究所では、令和元年度に実施した国際諮問委員会の報告を公開するとともに、必要と考えられる改善方針の策定・改善策の実施を開始した。令和3年度には、外</p>

自然科学研究機構

		<p>国人を含む研究顧問から各研究グループの研究内容の評価を受けるとともに、運営顧問から研究所の運営に関する助言を得た。</p>
<p>【67】 本機構の業務運営を改善するため、各機関の IR 機能の連携により機構全体の IR 機能を強化するとともに、平成 30 年度に機構全体の自己点検及び外部評価等を実施し、その結果を広く公開する。</p>	<p>III</p>	<p>(令和 2 及び 3 事業年度の実施状況) 令和 2 年度は評価分析ツール (InCites、SciVal) を活用し、機構の研究成果及び共同利用・共同研究の成果の評価分析を実施するとともに、ORCID と連携した研究者総覧を用いて業績の把握を行った。令和 3 年度は、NOUS に共同利用・共同研究の成果論文自動取得機能や大学院生の学位取得への貢献を把握する機能などを実装した。これにより手作業では把握しきれなかった共同利用・共同研究の成果論文を収集できるようになったほか、博士号取得への貢献という指標により、共同利用・共同研究による大学の教育への貢献度を評価できるようになるなど、これまで以上に共同利用・共同研究による大学の研究力強化への貢献を把握できる体制を整えた。</p>

<p>1 業務運営・財務内容等の状況</p> <p>(3) 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</p> <p>② 情報公開や情報発信等の推進に関する目標</p>
--

<p>中期 目標</p>	<p>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。</p>
------------------	---

中期計画	進捗 状況	判断理由（計画の実施状況等）
<p>【68】</p> <p>機構シンポジウムを毎年度2回実施するとともに、ホームページ、プレスリリース、定期刊行物などの充実や、一般公開の実施を通して、本機構の研究を含む諸活動の状況を、積極的に社会に発信する。特に、国際化の観点から、英文のホームページをさらに充実させ、そのアクセス数を増やすとともに、海外へのプレスリリース件数を6年間で20%増加するなど、多様な伝達手段を活用し、海外への情報発信をより積極的に行う。</p>	<p>IV</p>	<p>(令和2及び3事業年度の実施状況)</p> <p>機構シンポジウムを各年度2回開催するとともに、機構長プレス懇談会、若手研究者賞受賞記念講演会なども実施した。令和3年度には、連携協定を締結している岡崎市において、市内の小・中学校に向け、オンライン授業を実施した。各機関においても一般公開、市民公開講座等をオンラインにより開催し、社会や地元に対する情報発信・貢献に意欲的に取り組んだ。</p> <p>また、国際広報については、機構の英文ホームページを充実させることにより、アクセス数が平成27年度比で約20%増加したほか、プレスリリース配信サービス「EurekAlert!」を活用し、令和3年度には80件のプレスリリースを配信した（令和2年度は101件）。リリース件数は、平成27年度の45件から、約77%の増加となり、6年間で20%増加するとした中期計画を大きく上回る実績となった。</p>

(3) 自己点検・評価及び情報提供**1. 特記事項****1) 評価の充実**

令和2年度は、評価分析ツール (InCites、SciVal) を活用し、機構の研究成果及び共同利用・共同研究の成果の評価分析を実施するとともに、同ツールの対象外の業績の把握のため、ORCID と連携した研究者総覧を用いて業績の把握を行った。一方で、機構内の研究者の ORCID レコードの記載が徹底されておらず、総括的な分析が難しいという問題点も確認されたため、令和3年度は researchmap からのデータ取得による ORCID の補填を検討した。また、NOUS による IR 強化として、令和3年度に共同利用・共同研究の成果論文自動取得機能 (論文の謝辞欄に機関名と課題番号が記載されている論文の情報を課題に紐づけて取得) を実装したことにより、これまで十分に把握しきれなかった成果論文も取得できるようになり (平成30年～令和3年の4年間で246報の論文を本機能で新たに把握)、共同利用・共同研究の成果の把握の精度が向上した。また、更なる精度向上のため、本機能の仕様に合わず論文が取得できない共同利用のカテゴリーについて、仕様に合わせた課題番号に変更した。同じく令和3年度に NOUS に実装した共同利用・共同研究に参加した学生の博士号取得への貢献の把握の機能について、機構本部で実施している分野融合型共同研究事業で試行したところ、令和3年度に当該事業の研究に参加した学生2名の博士号取得に貢献したというデータが得られ、共同利用・共同研究を通じた大学の教育への貢献の分析への道筋が見ついた。【67】

2) 情報公開や情報発信等の推進

メディアとの関係構築、定期的な情報交換の場である機構長プレス懇談会を令和2、3年度で計7回開催し、延べ72名の記者の参加を得た。加えて、国民の科学に対する関心を高めるとともに、機構の研究活動を広く社会に発信するため、「自然科学研究機構シンポジウム」を、いずれもオンラインにて各年度2回開催した (第30回「宇宙科学と生命科学の深～いつながり」令和2年9月26日実施。第31回「生きているとは何か？」令和3年3月13日実施。第32回「生命科学とプラズマ工学がつくる未来」令和3年8月21日実施。第33回「宇宙と、分子と、私たち」令和4年3月13日実施)。

また、令和3年度には、連携協定を締結している岡崎市において、市内の小中学生向けにオンライン授業を3回実施した。特に第3回目では、岡崎市内の全小中学校と接続し、8,000名以上の参加者に向けて「生命の材料はどこから来たのか?～電波で探る宇宙～」と題した講演を行った。途中にクイズやアンケートを挟み、適宜それを踏まえて話を進めるなど双方向コミュニケーションを重視した構成とし、8割近い参加者から好評を得た。

また、国際広報については、米国科学振興協会 (AAAS) が運営するプレスリリ

ース配信サービス EurekAlert! を活用し、令和2年度に101件、令和3年度に80件を投稿した。これは平成27年度のリリース件数45件の約77%の増加であり、6年間で20%増加するとした中期計画を大きく上回る実績となった。

このほか、機構内各機関においても、一般公開、市民公開講座等をオンラインにより開催し、社会や地元に対する情報発信・貢献に取り組んだ。

国立天文台では、新型コロナウイルス感染症対策のため全国一斉に学校が臨時休校となる中、学習用ポータルサイト「おうちで天文学～家で楽しく学べる国立天文台コンテンツ」を早期に開設し、学びの機会を提供した。小・中・高校生や一般向けのライブ配信として、令和2年度から令和3年度にかけて計14回の天文ミニレクチャー等を実施した。令和3年5月26日の皆既月食中継では、当日の視聴数が200万回を超えた。また、「天文学振興募金」支援による出前授業「ふれあい天文学」を、国内外の小中学校等に向けてオンラインと現地訪問により実施した (令和2年度：国内69件、国外30件、令和3年度：国内72件、国外43件)。さらに、世界より多くの人々へ天文学を普及する活動を推進するため、令和3年度に国際天文学連合 (IAU) と国際普及室に関する新協定を締結した。

基礎生物学研究所では、コロナ禍におけるアウトリーチ活動としてインターネットを利用した活動に力を入れ、株式会社ドワンゴと共同で生き物の発生のインターネット中継 (研究者が解説を担当) を、令和2年度は「メダカ」及び「プランナリア」を題材に実施し、それぞれのべ39万9885件とのべ69万2043件のアクセス、令和3年度は「テントウムシ」を題材に実施し、のべ89万8179件のアクセスを得るとともに、ニコニコ生放送のギフト機能の活用により収益を得た。このほか、科学テレビ番組の取材に、リモート取材も併用しつつ、積極的に協力し、NHK ワールドの番組「AI と錯視を活用した脳科学家研究」に関する番組が国際放送された。【68】

<p>I 業務運営・財務内容等の状況 (4) 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</p>

<p>中期 目標</p>	<p>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。</p>
------------------	---

中期計画	進捗 状況	判断理由（計画の実施状況等）
<p>【69】 グローバル化の推進やイノベーションの創出など教育研究の質の向上の観点から、国の財政措置の状況を踏まえ、キャンパスマスタープランの年次計画に沿った研究施設・設備等の充実を図る。</p>	<p>III</p>	<p>(令和2及び3事業年度の実施状況) キャンパスマスタープランの年次計画に沿って、各地区の研究施設・整備等の改修・更新を行った。</p>
<p>【70】 施設マネジメントポリシーの点検・評価に基づき、重点的かつ計画的な整備を進め、施設整備の見直しを毎年度実施し、施設の効率的かつ効果的な活用を図る。</p>	<p>III</p>	<p>(令和2及び3事業年度の実施状況) 施設マネジメントポリシーに基づき、各機関において毎年度、利用実態調査、満足度調査等を実施し、施設の利用状況の把握に努めた。また、その結果を活用し、施設の効率的・効果的な活用を進めた。</p>
<p>【71】 施設・設備の安全性・信頼性を確保し、所要の機能を長期間安定して発揮するため、計画的な維持・保全を行う。</p>	<p>III</p>	<p>(令和2及び3事業年度の実施状況) 令和元年度に策定したインフラ長寿命化計画に基づき、各機関の施設・設備に対し適切な維持保全事業を実施した。</p>

I 業務運営・財務内容等の状況 (4) その他業務運営に関する重要目標 ② 安全管理に関する目標

中期目標	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。
-------------	--

中期計画	進捗状況	判断理由（計画の実施状況等）
【72】 施設・設備及び機器の安全管理、教育研究及び職場環境の保全並びに毒物劇物、放射性同位元素、実験動物、遺伝子組み換え生物等の適正な管理を行うため、既存の安全管理・危機管理体制を検証し、体制の見直しを行う。また、関係行政機関との防災に係る相互協力体制を確立させ、毎年度、連携した訓練を行う。	III	(令和2及び3事業年度の実施状況) 令和2年度は岡崎3機関明大寺地区、国立天文台水沢地区、核融合科学研究所総合工学研究棟の3か所において、令和3年度は国立天文台三鷹地区、核融合科学研究所（オンライン）、岡崎3機関山手地区において、特別相互巡視を実施し、その結果を各機関へフィードバックすることで体制の見直しを行った。また関係行政機関と協力し、訓練を実施した。
【73】 職員の過重労働及びそれに起因する労働災害を防止するため、労働災害の要因調査・分析を行うとともに、メンタルヘルスケアのためのストレスチェック及び講習会を毎年度実施する。	III	(令和2及び3事業年度の実施状況) 令和2年度よりメンタルヘルス不調による健康障害を予防するための心の健康づくり計画を策定するとともに、メンタルヘルス不調による休職者への職場復帰支援制度を整備した。また、引き続きストレスチェックを実施するとともに、その結果を職場環境の改善につなげるための職場環境改善対策検討会を開催した。
【74】 情報システムや重要な情報資産への不正アクセスなどに対する十分なセキュリティ対策を行うとともに、セキュリティに関する啓発を行う。また、本機構のセキュリティポリシーや規則などを毎年度見直し、それらを確実に実行する。	III	(令和2及び3事業年度の実施状況) 令和元年度に策定したサイバーセキュリティ対策に基づき、自己点検、監査、訓練・研修等を実施した。

<p>I 業務運営・財務内容等の状況 (4) その他業務運営に関する重要目標 ③ 法令遵守等に関する目標</p>

<p>中期目標</p>	<p>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。</p>
-------------	--

中期計画	進捗状況	判断理由（計画の実施状況等）
<p>【75】 職員就業規則などの内部規則の遵守を徹底するため、幹部職員を含む全職員を対象とした服務規律やハラスメント等に関する研修を毎年度実施する。</p>	<p>III</p>	<p>（令和2及び3事業年度の実施状況） 服務規律やハラスメント防止に関する研修を実施するとともに、周知メールの配信、パンフレットの配布などを通じ、職員の意識向上に努めた。</p>
<p>【76】 研究活動における不正行為及び研究費の不正使用を防止するため、組織の管理責任体制を明確化し、eラーニングによる研究倫理教育、各種啓発活動の実施、競争的資金等の不正使用防止に係るコンプライアンス教育等を毎年度実施するとともに、その効果を定期的に検証し、実効性を高める。</p>	<p>III</p>	<p>（令和2及び3事業年度の実施状況） 研究活動における不正行為を防止するため、不正行為防止委員会を実施し、各機関や直轄センターにおける不正行為防止に関する実績の共有や、防止計画等について審議を行った。また、eラーニングを活用し、研究倫理教育を実施し、コンプライアンス教育を行った。 研究費の不正使用防止に関しては、策定した不正使用防止計画に基づき、業務執行を行い不正使用防止に取り組むとともに、各機関の管理責任者による実施状況の検証を行った。また、競争的資金に関わる者について、公的研究費の不正使用防止に関するコンプライアンス研修を行い、誓約書を徴した。さらに、文部科学省所管の「研究機関における公的研究費の管理・監査のガイドライン」に基づき、新規取引業者に対し、誓約書の提出を求めた。</p>

(4) その他の業務運営**1. 特記事項****1) 施設設備の整備・活用等**

- ① 施設の有効利用や維持管理（予防保全含む）に関する事項
 ② キャンパスマスタープラン等に基づく施設整備に関する事項
 ③ 多様な財源を活用した整備手法による整備に関する事項
 ④ 環境法全対策や積極的なエネルギーマネジメントの推進に関する事項
 「令和2事業年度に係る業務の実績に関する報告書」の記載方法について（令和3年2月17日付事務連絡）より抜粋

以下、上記に関する事項に係る記述について、末尾に該当の番号を付している。

本機構では、施設担当理事の下に機構全体の施設整備・マネジメントに関する重要事項（キャンパスマスタープラン、インフラ長寿命化計画の基本方針や各機関等の内容、概算要求事業、施設マネジメントの取組み内容等）を審議する「施設整備検討委員会」を設置するとともに、本機構が設置する機関区分（国立天文台、核融合科学研究所、岡崎3機関）に、施設経営の観点から副所長クラスを、施設利用の観点から研究者を構成員とした施設整備委員会等を設置して、施設マネジメントに関する取組み体制を構築している。

施設整備費補助金、施設費交付事業費、運営費交付金、施設維持管理等整備費等の多様な財源を活用して（③）、キャンパスマスタープランやインフラ長寿命化計画（個別施設計画）等に基づき、明大寺、山手、三島地区の老朽化著しい中央監視設備の改修、土岐、三鷹地区の空調設備の更新などを実施した（②）。また、利用実態調査、満足度調査等の結果に基づき、国立天文台ではサーバ室を集約し、空きスペースを大学院生の研究スペースとして確保したほか、山手地区では、共同利用・共同研究の機能強化としてオープンラボの整備を推進した（①）。さらに、省エネの観点から、各所の照明器具等のLED化、高効率機器への更新に取り組み、エネルギーマネジメントを推進した（④）。

また、国立天文台科学研究部では、コロナ禍に対応して、令和3年度にオンライン会議用個人型ワークブースを2台購入し、三鷹本部に設置した（エントランスの有効利用①）。個室をもたない大学院生や若手研究者が会議で発言しやすくなるなどの効果が見込まれるため、令和4年度より台内共同利用として試験運用し、今後の運用方針を決めることとした。【69】【70】【71】

2) 安全管理

防災・防火の体制及び対策について常に見直しを図り、必要に応じて改善を図

っていくことが重要であることから、機構では、平成28年度より機構内各機関の安全管理担当者による「安全管理に係る特別相互巡視」を実施し、その結果を自機関に持ち帰り活かすことにより、研究施設における従来の想定を超えた事態に対応できる防災・防火体制の再構築を図り、安全な環境の下での実験研究を推進している。令和2年度は、岡崎3機関明大寺地区、国立天文台水沢地区、核融合科学研究所総合工学研究棟の3箇所において、令和3年度は、国立天文台三鷹地区、核融合科学研究所（オンライン）、岡崎3機関山手地区において、特別相互巡視を実施した。具体的な実施内容としては、①機関における防災・防火体制の強化に向けた体制等の整備状況確認、②研究施設における安全管理の状況確認、③その他安全管理に関する情報交換を行った。【72】

機構では、各機関に設置の安全衛生委員会等において職員の過重労働に起因する労働災害の防止策について検討し、必要な対策を講じている。また、業務量が一職員に偏らないよう指導するとともに、業務の一部外注化や職員に対する意識啓発の実施等により、超過勤務の縮減を図っている。令和2年度においては、メンタルヘルス不調による健康障害を予防するための心の健康づくり計画を策定するとともに、メンタルヘルス不調による休職者への職場復帰支援制度を整備した。令和3年度は機関で発生した労働災害の状況を各機関担当者が参加する安全衛生相互巡視において、労働災害の要因及び改善状況を把握し、労働災害の低減に繋げることができた。【73】

情報セキュリティに関する取組みについて、機構では、令和元年度に作成したサイバーセキュリティ対策基本計画に沿って実施している。これまで実施してきた対策を継続するとともに、クラウドのユーザ認証に2要素認証の導入を進めた（取組事項5.7.）ほか、新型コロナウイルス感染症拡大にともなう在宅勤務への対応として、SSL-VPN等の提供（取組事項5.9.）とセキュリティ監視（取組事項5.2.）を実施している。また、情報セキュリティ自己点検については、従来は各機関により独自に実施していたが、令和3年度から機構全体として情報セキュリティ推進室が開発したWebアプリケーションにより実施（取組事項4.1.-4.3.）した。【74】

2. 共通の観点に関する取組み状況**法令遵守及び研究の健全化**

機構では、法令遵守等に関する取組みについて、機構として個人情報保護研修、ハラスメント防止研修等の研修を実施するとともに、パンフレットの配付、メールの配信などを通じ、職員に周知徹底を図った。新型コロナウイルス感染症の拡

大によりオンラインでの研修としたものや、海外ブランチの職員を対象にeラーニング形式での研修を実施したものなど、状況に応じ、柔軟な研修体制をとった【75】

研究活動における不正行為を防止するため、不正行為防止委員会を開催し、各機関や直轄センターにおける不正行為防止に関する実績の共有や、防止計画等について審議を行った。また、一般財団法人公正研究推進協会（APRIN）のeラーニングプログラム（eAPRIN）等を活用し、研究倫理教育及びコンプライアンス教育を行った。

研究費の不正使用防止に関しては、策定した不正使用防止計画に基づき、業務執行を行い不正使用防止に取り組むとともに、各機関の管理責任者による実施状況の検証を行った。研究機関における公的研究費の管理・監査のガイドラインの改正に対応した関係規程の改正及び不正使用防止計画の変更を行い、不正使用防止体制の充実を図った。また、コンプライアンス教育・啓発活動の実施計画を策定し、令和3年度に新たに作成したビデオ教材を活用したコンプライアンス研修及び理解度チェックの実施、啓発ポスターの作製・掲示など、計画に基づき啓発活動を行った。さらに、競争的研究費等に関わる者から誓約書を徴取するとともに、取引業者に対しても誓約書の提出を求めた。【76】

II 予算（人件費の見積もりを含む。）、収支計画及び資金計画

※ 財務諸表及び決算報告書を参照

III 短期借入金の限度額

中期計画	年度計画	実績
1 短期借入金の限度額 7,153,342千円 2 想定される理由 運営費交付金の受け入れ遅延及び事故の発生等により緊急に必要となる対策費として借り入れることが想定されるため。	1 短期借入金の限度額 6,440,131千円 2 想定される理由 運営費交付金の受け入れ遅延及び事故の発生等により緊急に必要となる対策費として借り入れることが想定されるため。	該当なし

IV 重要財産を譲渡し、又は担保に供する計画

中期計画	年度計画	実績
1 重要な財産を譲渡する計画 ①国立天文台岡山天体物理観測所職員宿舎跡地及び駐車場跡地（岡山県浅口市鴨方町鴨方2037-1及び2177-2）を譲渡する。 ②国立天文台野辺山宇宙電波観測所職員宿舎の土地及び建物の一部（長野県南佐久郡南牧村462-5）を譲渡する。 ③野辺山研修所の土地及び建物（長野県南佐久郡南牧村316-34）を譲渡する。 2 重要な財産を担保に供する計画 該当なし	1 重要な財産を譲渡する計画 野辺山研修所の土地及び建物（長野県南佐久郡南牧村316-34）を譲渡する。 2 重要な財産を担保に供する計画 該当なし	令和4年1月に野辺山研修所の土地及び建物（長野県南佐久郡南牧村316-34）を譲渡した。

V 剰余金の使途

中期計画	年度計画	実績
<p>毎事業年度の決算において剰余金が発生した場合は、その全部又は一部を、文部科学大臣の承認を受けて、教育研究の質の向上及び業務運営の改善に充てる。</p>	<p>決算において剰余金が発生した場合は、教育研究の質の向上及び業務運営の改善に充てる。</p>	<p>目的積立金 5,635 千円を取り崩し、教育研究の質の向上及び業務運営の改善に充てた。</p>

VI その他 1 施設・設備に関する計画

中期計画			年度計画			実績		
施設・設備の内容	予定額(百万円)	財源	施設・設備の内容	予定額(百万円)	財源	施設・設備の内容	予定額(百万円)	財源
30m 光学赤外線望遠鏡(TMT)計画の推進 超高性能プラズマの定常運転の実証 実験研究棟改修(基生研) 小規模改修	総額 1,801	施設整備費補助金 (1,285) (独)大学改革支援・学位授与機構 施設費交付金 (516)	30m 光学赤外線望遠鏡(TMT)計画の推進 大型光学赤外線望遠鏡「すばる」の共同利用研究 (明大寺他)ライフライン再生(電気設備) (土岐)ライフライン再生(空調設備) (明大寺)基幹・環境整備(衛生対策等) 小規模改修	総額 2,238	施設整備費補助金 (2,182) (独)大学改革支援・学位授与機構施設費交付金 (56)	30m 光学赤外線望遠鏡(TMT)計画の推進 大型光学赤外線望遠鏡「すばる」の共同利用研究 大型電波望遠鏡「アルマ」による国際共同利用研究の推進 (明大寺他)ライフライン再生(電気設備) (土岐)ライフライン再生(空調設備) (明大寺)基幹・環境整備(衛生対策等) (三鷹)研究開発棟改修 (明大寺)ライフライン再生(給排水設備等) 小規模改修	総額 1,584	施設整備費補助金 (1,528) (独)大学改革支援・学位授与機構施設費交付金 (56)
<p>(注1) 施設・設備の内容、金額については見込みであり、中期目標を達成するために必要な業務の実施状況等を勘案した施設・設備の整備や老朽度合等を勘案した施設・設備の改修等が追加されることもある。</p> <p>(注2) 小規模改修について平成28年度以降は、平成27年度と同額として試算している。なお、各事業年度の施設整備費補助金、(独)大学改革支援・学位授与機構施設費交付金については、事業の進展等により所要額の変動が予想されるため、具体的な額については、各事業年度の予算編成過程において決定される。</p>								

○ 計画の実施状況等

- ・ 30m光学赤外線望遠鏡（TMT）計画の推進
30m光学赤外線望遠鏡（TMT）の関連設備の整備を実施した。
- ・ 大型光学赤外線望遠鏡「すばる」の共同利用研究
大型光学赤外線望遠鏡「すばる」の関連設備の整備を実施しており、年度内に完了しなかったため、予算を一部翌年度へ繰越した。
- ・ 大型電波望遠鏡「アルマ」による国際共同利用研究の推進
大型電波望遠鏡「アルマ」の関連設備の整備を補正予算により実施するもので、年度内に完了しなかったため、予算を全額翌年度へ繰越した。
- ・ (明大寺他) ライフライン再生（電気設備）
明大寺地区などの中央監視設備の更新を実施した。
- ・ (土岐) ライフライン再生（空調設備）
開発実験棟及び準定常電源棟の空調設備の更新を実施した。
- ・ (明大寺) 基幹・環境整備（衛生対策等）
事務センター棟の換気設備の更新を実施した。
- ・ (三鷹) 研究開発棟改修（空調設備）
開発棟2号館のクリーンルームの拡張工事を補正予算により実施するもので、年度内に完了しなかったため、予算を全額翌年度へ繰越した。
- ・ (明大寺) ライフライン再生（給排水設備等）
明大寺A・B団地の給排水設備等の更新を補正予算により実施するもので、年度内に完了しなかったため、予算を全額翌年度へ繰越した。
- ・ 小規模改修
三鷹団地の開発棟2号館空調設備改修（I期目）ALMA 棟防水改修、土岐団地のシミュレーション科学研究棟等屋上防水改修、明大寺B団地のエネルギーセンター棟の屋上防水改修、三島団地の岡崎コンファレンスセンターの屋上防水及び冷却塔改修、山手団地の山手2号館防災設備改修等を実施した。

Ⅶ その他 2 人事に関する計画

中期計画	年度計画	実績
<p>教育研究の活性化を図るため、クロスアポイントメント制度を含む混合給与及び研究教育職員における年俸制の活用による人事・給与システムの弾力化に取り組む。特に、年俸制については、業績評価体制を明確化し、年俸制導入等に関する計画に基づき促進する。</p> <p>国内外の優秀な若手・外国人の研究者を集め、教育研究の活性化を図るとともに、特に国際的な研究機関として広い視点を取り込むため、外国人研究者の採用を促進する。また、男女共同参画の環境を整備・強化し、女性研究者を積極的に採用する。</p> <p>(参考) 中期目標期間中の人件費総額見込み 61,141百万円(退職手当は除く。)</p>	<p>教育研究の活性化を図るため、クロスアポイントメント制度を含む混合給与の導入を進めるとともに、併せて新たな年俸制の制度(新承継年俸制)によって海外機関等で活躍する有為な人材の確保に努める。研究教育職員の評価制度について、研究分野別、職位別の基準設定や重みづけによる評価基準を構築する。また、海外の連携機関との混合給与制度を活用し、国際公募を積極的に実施することにより、外国人研究者の採用を促進する。併せて、男女共同参画の環境を整備・強化し、女性研究者を積極的に採用する施策を講じる。</p> <p>(参考1) 令和3年度の常勤職員数 1,144人 また、任期付き職員数の見込みを417人とする。 (参考2) 令和3年度の人件費総額見込み 10,411百万円(退職手当は除く)</p>	<p>『「(1) 業務運営の改善及び効率化に関する目標」 P21, P22, 参照』</p>

9-6 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おい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。

1 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携・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、先導的・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、強靱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

9-7 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従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索データより、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)を上回ることを。
------	---

- [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、生命現象の基本原則を解明するために、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キ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、器官間の機能協働、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	<p>[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。</p> <p>[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。</p> <p>[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。</p> <p>[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。</p>
------	---

- [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	<p>[14-1] 先端的な学術研究を次の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。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・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な光源・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	<p>[15-1] 観測遂行夜数を毎年100夜以上とする。</p> <p>[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。</p> <p>[15-3] 外国人研究者割合20%以上を維持する。</p> <p>[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。</p> <p>[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。</p> <p>[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。</p>
------	--

- [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	<p>[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。</p>
------	--

- [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	<p>[17-1] 若手研究者比率35%以上を維持する。</p> <p>[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。</p> <p>[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。</p>
------	--

- [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	<p>[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。</p> <p>[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。</p> <p>[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。</p>
------	--

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	<p>[19-1] 登録数3,000件以上を維持する。</p> <p>[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。</p>
------	--

- [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を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靱なガバナンス体制を構築する。

評価指標	<p>[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。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・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。 <p>[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。</p> <p>[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。</p> <p>[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。</p>
------	---

[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	<p>[38-1] 運営会議等の所内委員割合が1/2以下であること。</p> <p>[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。</p> <p>[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。</p> <p>[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。</p>
------	---

[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	<p>[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。</p> <p>[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。</p>
------	---

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	<p>[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。</p> <p>[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。</p> <p>[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。</p> <p>[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。</p>
------	--

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	<p>[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。</p> <p>[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。</p> <p>[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。</p>
------	--

[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。
------	--

9-8 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-012.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>

分子研レポート 2022

現状・評価・将来計画

2023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 渡辺 芳人

編集責任者 解良 聡

