

3. 大学共同利用機関の取組み

分子科学研究所は大学共同利用機関として様々な共同利用・共同研究を推進すると同時に、関連分野コミュニティのハブとして研究会の開催支援や国際交流事業・国際共同研究の活性化を行っている。またその他の事業として、ムーンショット型研究開発事業やマテリアル先端リサーチインフラ事業などの大型プロジェクト推進のほか、日本学術会議化学委員会と日本化学会との間での情報交換のための会議を毎年開催するなど、広く関連分野の中での合意形成プロセスを支援する活動も行っている。これらの活動を通じて、一研究所内の議論に留まらない、我が国全体の学術の振興、研究力強化、研究者のキャリアパス形成、大学や研究機関の在り方など、様々な話題についての多角的議論の場を提供するものである。

共同利用・共同研究においては、所内研究者と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共同研究専門部会で審議し、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3-2-4～3-2-7の項に詳述する。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。コロナ禍が一定の収束を迎えた2023年度から、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従来同様の活動が可能となり、2024年度からは平常に戻っている。ポスト・コロナ時代においては、オンラインツールの活用やDX化をますます進め、全国共同利用機関として、あるいはアジアの研究ハブとしての役割を発展的に担っていく。

3-1 共同利用／共同研究

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(3-3-5参照)

(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 2024年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名 (後期)	提案代表者
プラズモン-量子ドットハイブリッド構造の作製と超高速ナノ顕微分光による光誘起ダイナミクスの解明	大阪公立大学 渋田 昌弘

(2) 協力研究

課 題 名 (通年)	提案代表者
高効率スピン偏極測定用2次元スピンフィルターの実用化と利用最先端研究	大阪大学 菅 滋正
農作物の内部構造と金属ナノ粒子との相互作用—実験とシミュレーションによる研究—	名城大学 西山 桂
モータータンパク質キネシンの全原子分子動力学シミュレーション	熊本大学 鄭 誠虎
バナジウム酸化物薄膜における相転移現象のナノスケールイメージング	大阪大学 阿部 真之
糖タンパク質修飾糖鎖の構造決定と糖鎖認識受容体との相互作用解析	東北医科薬科大学 山口 芳樹

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
レーザー媒質との常温接合を可能とするダイヤモンド基板の超精密研磨技術の開発	大阪大学	山村 和也
膝島アミロイドポリペプチドによる細胞膜障害過程の分子シミュレーション	群馬大学	中村 和裕
新奇トポロジをもつ二次元分子磁石の開発	千葉大学	山田 豊和
多様な複合糖質を活用した糖鎖機能メカニズムの解析	北陸先端科学技術大学院大学	山口 拓実
Momentum Microscopy 装置による波数空間での偏光依存マップの取得とその解析による原子軌道同定と波動関数の位相検出	大阪大学	田中慎一郎
発光性マルチラジカルの励起状態ダイナミクスの解明	大阪大学	松岡 亮太
ハンチントン病原因タンパク質の凝集機構とアルギニン誘導体による凝集阻害機構の理論的解析	久留米工業高等専門学校	谷本 勝一
モメンタムマイクロスコープによる高移動度有機半導体の Mixed-Orbital Transport の研究	筑波大学	山田 洋一
包接型 P,N 含有多座配位子保護による金属クラスター触媒の開発	愛媛大学	太田 英俊
スピン偏極局所電子状態解析による新規トポロジカル物質の開拓	東北大学	佐藤 宇史

課 題 名 (前期)

提案代表者

CVD グラフェン有機薄膜接合における電子物性評価	横浜国立大学	大野 真也
光電子運動量顕微鏡による MXenes 単結晶 V ₂ CT ₂ の電子状態の研究	名古屋大学	伊藤 孝寛

課 題 名 (後期)

提案代表者

オペランド振動分光による水素分子錯体における H ₂ /D ₂ 分離能の解明	東北大学	高石 慎也
プロテアソーム複合体の機能発現および複合体形成機構の解析	兵庫県立大学	水島 恒裕
自立超薄膜を利用し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
光電子運動量顕微鏡による NiSbS の電子状態の研究	名古屋大学	伊藤 孝寛
機能性二分子層膜の電界応答における反応機構の解明: 探針増強ヘテロダイン和周波発生法による局所分光の試み	大阪大学	加藤 浩之

(3) 研究会

課 題 名 (通年)

提案代表者

複雑系へのアプローチ~物質の複雑性をどこまで予測できるのか?	東京大学	北田 敦
キラリティが関連する動的現象	大阪公立大学	戸川 欣彦
合成化学 2.0 : 研究手法の複合化による合成化学の新潮流をめざして	分子科学研究所	榎山 儀恵
スピンをプローブとした生命研究: 異分野融合を目指して	分子科学研究所	中村 敏和
電子強誘電体の新機能と新展開	東京科学大学	沖本 洋一

(4) 若手研究活動支援

課 題 名 (前期)

提案代表者

第 63 回分子科学若手の会夏の学校	北海道大学	田中 綾一
--------------------	-------	-------

(6) 施設利用

① UVSOR 施設利用

課 題 名 (通年)

提案代表者

軟 X 線吸収分光法による有機半導体/ドープした遷移金属酸化物界面の電子状態解析	千葉大学	奥平 幸司
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 および FOXSI-5 搭載装置の評価	国立天文台	成影 典之
高圧下メタン芳香族化耐久性を示す H-MFI 上 Mo 炭化物触媒活性種の L 殻 XANES による構造解析	埼玉工業大学	有谷 博文
高速重イオン照射誘起による HfO ₂ 結晶相転移の局所構造	九州大学	吉岡 聰
可搬型マニピレーターを用いた NEXAFS 分光法による電池材料のオペランド解析	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
sXAS Study of a Noble-Metal-Free Oxide Catalyst for High-Performance Oxygen Reduction Reaction	City University of Hong Kong	WANG, Jian
表面イオニクスによる低温触媒反応の軟 X 線オペランド分光	早稲田大学	関 根 泰
電解質水溶液中の脂質二重膜の X 線吸収スペクトル計測とそのイオン種依存性	豊橋技術科学大学	手老 龍吾
次期中性 K 中間子稀崩壊測定実験 KOTO step2 で使用するペロブスカイト量子ドットを用いたプラスチックシンチレータの単一光子計数法による蛍光寿命測定の評価	山形大学	田島 靖久

赤色・近赤外発光発光体の発光機構・バンド構造の解明とワイドエネルギーバンド放射線検出への展開研究	東北大学	黒澤 俊介
暗黒物質探索に向けたダイヤモンドシンチレータの発光特性理解	高エネルギー加速器研究機構	梅本 篤宏
VUV-UV 励起可能な近赤外シンチレータの光学特性評価	埼玉大学	小玉 翔平
紫外発光アルミニウム酸亜鉛薄膜内部領域の特性評価	静岡大学	小南 裕子
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
孤立励起分子の遅延解離過程の研究	京都大学	間嶋 拓也
擬カゴメ格子強相関系の動的ブランキアンスケーリング	大阪大学	木村 真一
NaCl:F,Ce ³⁺ 結晶における不純物イオン間のエネルギー移動機構の解明	大阪公立大学	河相 武利
VUV スペクトロスコーピーによる遷移金属イオン電荷移動遷移の包括的理解	北陸先端科学技術大学院大学	上田 純平
アモルファス半導体の光誘起光学特性変化に関する研究	岐阜大学	林 浩司
結晶有機半導体の分子振動に対する可溶化置換基導入効果の実験的検証	東京理科大学	中山 泰生
一軸圧力下のトポロジカル相転移	大阪大学	木村 真一
毛髪赤外分光による顕微分光装置性能評価	高輝度光科学研究センター	池本 真一
地球外有機物の3次元分布観察を目指した高輝度赤外分光マイクロトモグラフィー開発	広島大学	藪田ひかる
高速シンチレータ材料におけるエネルギー移動と内殻励起の寄与の定量的解析	静岡大学	越水 正典
中性子シンチレーターとして期待される Li-glass の真空紫外特性評価	大阪大学	清水 俊彦
機能性高融点化合物の高分解能光電子分光測定	広島大学	高口 博志
Energy Transfer Mechanism from Gd to Ce for Gd-Contained Glass Scintillator and Crystal Scintillators	Kyungpook National University	KIM, Hong Joo
最小電離損失粒子に対する原子核乾板の感度評価	名古屋大学	中野 敏行

課 題 名 (前期)

提案代表者

真空紫外域円偏光照射と磁場印加によるアミノ酸分子のホモキラリティ起源に関する研究	核融合科学研究所	小林 政弘
放射光源を用いた光誘起反応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
エラストマー混合材料における応力印可時の微小領域化学結合状態	東北大学	江島 丈雄
ビスマス系リクサー強誘電体のエネルギー貯蔵特性に及ぼす空孔型欠陥の役割	山形大学	北浦 守
水素添加応力荷重オペランド陽電子消滅測定による不安定欠陥の検出	千葉大学	藤浪 眞紀
透過型 NRF を用いた非破壊核種分析法の高精度化に関する研究	量子科学技術研究開発機構	静間 俊行
UVSOR-BL1U アンジュレータを用いた2次元同位体イメージングに関する研究	京都大学	大垣 英明
酸化セリウムのガンマ線誘起陽電子消滅寿命に及ぼすガス雰囲気の影響	大阪産業技術研究所	道志 智
単一光子レベルでの放射光特性の観測とその応用可能性の探索	広島大学	加藤 政博
光電子円二色性測定におけるキララル中心と周辺構造の相関	広島大学	高口 博志
タンデムアンジュレータによる軟X線ダブルパルスと固体との相互作用	九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫
酸化グラフェンの XAS 測定	東京大学	佐々木岳彦
単層カーボンナノチューブに制約されたイオン水溶液の水素結合チャンネル構造	信州大学	金子 克美
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
共鳴軟X線散乱法による有機薄膜太陽電池のバルクヘテロ接合構造の解析	分子科学研究所	岩山 洋士
電気化学オペランド軟X線分光による電解生成メタン酸化活性種の鉄 L 端吸収スペクトル観測	名古屋大学	山田 泰之
界面選択的な軟X線吸収分光法を用いるイオン液体の電極界面におけるイオン層構造の解析	京都大学	西 直哉
新しい試料形態を用いた軟X線共鳴散乱による液晶の自発形成構造の精密解析に関する研究	京都府立医科大学	高西 陽一
酸化チタン光触媒懸濁液の軟エックス線 XAFS を用いたオペランド計測	神戸大学	大西 洋
熱化学電池の高性能化に関わる酸化還元種の溶媒和に関する軟X線吸収分光観測	関西学院大学	吉川 浩史
軟X線吸収分光法で探るテトラメチル尿素水溶液の水和構造	広島大学	岡田 和正
酢酸/1-メチルイミダゾール混合液の分子構造と電子状態研究	山口大学	堀川 裕加
Probing the Local Order in the Vicinity of Aqueous Ammonia by X-Ray Absorption Spectroscopy	Synchrotron SOLEIL	CEOLIN, Denis
Probing the Water Structure at Silica Nanoparticle-Electrolyte Interface: Advancing Nanotechnology through NEXAFS Spectroscopy	University of Gothenburg	KONG, Xiangrui
リチウムイオン電池正極の劣化状態の可視化	産業技術総合研究所	朝倉 大輔
レドックスフロー電池の正極電解液の電子状態解析	産業技術総合研究所	細野 大輔
走査型透過X線顕微鏡を用いた応力条件下でのタイヤゴムのモーフロジー	高エネルギー加速器研究機構	大東 琢治
X-Ray Absorption Spectroscopic Analysis of Spatial Distribution of Water Molecules in Deep-Sea White Smoker Chimney Minerals	東京工業大学	LEE, Hye-Eun
STXM による生体試料の分子マッピングの精密化と高感度化への試み	分子科学研究所	荒木 暢
小惑星リュウグウの砂に含まれる特異な有機物-珪酸塩集合体の記載	京都大学	松本 徹

彗星有機物の初期水質変成条件を STXM で決定する試み Understanding the Aging of Coastal Aerosols: Insights from STXM-NEXAFS Experiments	広島大学 University of Gothenburg	藪田ひかる KONG, Xiangrui
Investigating Ti-Organometallic Complexes Found in Mars-Relevant Mineral-Microbial Interfaces Exposed outside the ISS as Potential Biosignatures in the Search for Life on Mars	University of Orleans	SFORNA, Marie Catherine
Enhancing the Electrocatalytic Activity of Mo-Doped Co ₃ O ₄ Nanowires for the Oxygen Evolution Reaction: An X-Ray Spectro-Microscopic Investigation	Tamkang University	DONG, Chung-Li
STXM Study of a Noble-Metal-Free Oxide Catalyst for High-Performance Oxygen Reduction Reaction	City University of Hong Kong	WANG, Jian
Operando Nano-Scaled Identification to Carbon Dioxide and Water Gas Adsorption Coupling to Fe ₃ O ₄ and Reduced Graphene Oxide	Tamkang University	CHUANG, Cheng-Hao
高効率無機/有機ハイブリッド太陽電池開発のための、軟X線吸収分光法による金属酸化物ナノ粒子/有機半導体界面の伝導帯電子構造解析	千葉大学	奥平 幸司
強誘電性分子流体における相転移と電子状態の相関に関する研究	理化学研究所	荒岡 史人
磁気ボトル型電子分析器を用いた多電子・イオン同時計測	富山大学	彦坂 泰正
定常紫外光で励起した半導体光触媒の軟エックス線吸収分光	名古屋大学	吉田 朋子
高速重イオン照射誘起による ZrO ₂ 結晶相転移の局所構造	九州大学	吉 岡 聡
sXAS Study of a Noble-Metal-Free Oxide Catalyst for High-Performance Oxygen Reduction Reaction	City University of Hong Kong	WANG, Jian
マイクロ ARPES による新型カゴメ超伝導体の電子状態解明	東北大学	佐藤 宇史
角度分解光電子分光による Ag 上に成長した単層ゲルマニウムのバンド構造の解明	日本原子力研究開発機構	寺澤 知潮
スピン分解光電子イメージング分光による Fe のスピン分極 Δ1 バンドの観測	東京大学	岡林 潤
電子ドープ型銅酸化物高温超伝導体における電子ドープ効果の全容解明	東京大学	堀尾 真史
グラフェン層間化合物の超伝導における d 軌道の役割	東京工業大学	一ノ倉 聖
Cu(111) 上二次元リンシートの電子状態測定	分子科学研究所	前島 尚行
BCS-BEC 型励起子絶縁体における励起子絶縁相クロスオーバーの探索	分子科学研究所	福谷 圭祐
強相関電子系が示す異常熱電特性に対する軌道分離解析	豊田工業大学	松波 雅治
角度分解光電子分光によるオリビン型正極活性物質 LiMnPO ₄ の電子状態の研究	名古屋大学	伊藤 孝寛
原子制御した立体形状シリコン：ファセットライン構造のエッジ状態	奈良先端科学技術大学院大学	服部 賢
キャリアドープされた強相関半導体における電子・正孔対凝縮相の電子構造	大阪大学	中村 拓人
Si(001) 表面における温度依存表面超構造相転移と電子状態：角度分解共鳴光電子分光による研究	大阪大学	田中慎一郎
一層系銅酸化物超伝導体における電子-電子相互作用に由来する自己エネルギーのドープ量依存性の評価	広島大学	出田真一郎
Exploring a Novel Spin-Splitting Effect in the Altermagnet Candidate MnTe through Spin-Resolved ARPES	Southern University of Science and Technology	LIU, Chang
純粋液晶状態と共存する超伝導状態の超伝導ギャップ対称性の解明：低エネルギー高分解能 ARPES	東北大学	佐藤 宇史
新規励起子絶縁体の電子構造の開拓的探索	東京大学	近藤 猛
高分解能角度分解好電子分光による表面モット絶縁体相およびドーピングによる超伝導発現の検証	東京工業大学	平原 徹
高い正孔移動度を示す可溶性有機半導体の単結晶性薄膜の価電子バンド計測 (II)	東京理科大学	中山 泰生
分子固体における遍歴電子バンドと電子フォノン相互作用の異方性 II	分子科学研究所	解良 聡
層状 MAB 相化合物 MoAIB の低励起エネルギー角度分解光電子分光	名古屋大学	伊藤 孝寛
貴金属薄膜上に作製した二次元近藤格子における重い電子状態の変調	大阪大学	中村 拓人
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 HgBa ₂ Ca ₂ Cu ₃ O _{8+δ} の電子構造の研究	広島大学	出田真一郎
角度分解光電子分光によるカイラル磁性体 GdNi ₃ Ga ₉ のバンド構造の研究	広島大学	佐藤 仁
Electronic Structure Study of Topological Materials Ge ₂ Bi ₂ Te ₅ and Ge ₃ Bi ₂ Te ₆	Southern University of Science and Technology	LIU, Chang
宇宙風化作用を経験した多環芳香族炭化水素の紫外特性調査	東京大学	吉川 一朗
減衰全反射型紫外可視分光法による界面イオン液体の電子状態研究	立教大学	田邊 一郎
ARPES Study of Anomalous Secondary Photoemission from SrTiO ₃ (100)	Westlake University	HE, Ruihua
高精度光電子散乱分布測定のための高速撮像系の開発	広島大学	高口 博志
真空紫外光学窓材料の屈折率測定	大阪大学	大石 裕
光学特性を激変させる超秩序構造の起源	山形大学	北浦 守
界面磁気近接効果を利用した Pd 薄膜の電子状態変調 III	名古屋大学	宮町 俊生
	課 題 名 (後期)	提案代表者
真空紫外域円偏光照射と磁場印加によるアミノ酸分子のホモキラリティ起源に関する研究	核融合科学研究所	小林 政弘
放射光源を用いた光誘起反応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

ガンマ線陽電子消滅寿命分光によって解き明かす環境半導体 Mg_2Sn における不純物共添加がマグネシウム単空孔に及ぼす影響	山形大学	北浦 守
UVSOR ガンマ線ビームを利用した陽電子寿命イメージング分析技術に関する研究	量子科学技術研究開発機構	田久 創大
雷ガンマ線の危険性を知るためにその発生場所を探る研究	名古屋大学	中澤 知洋
水素チャージ下での陽電子寿命その場測定による純鉄中の水素誘起空孔の検出	京都大学	藪内 敦
酸化セリウムのガンマ線誘起陽電子消滅寿命に及ぼすガス雰囲気の影響 (2)	大阪産業技術研究所	道志 智
放射光アンジュレタから発生する紫外光渦による生体分子の吸収測定	広島大学	松尾 光一
単一光子レベルでの放射光特性の観測とその応用可能性の探索	広島大学	加藤 政博
光電子円二色性測定の高精度化による状態選別分子キラリティの研究	広島大学	高口 博志
タンデムアンジュレタによる軟X線ダブルパルスと固体との相互作用	九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫
Measurement of the Linearly Polarized Component and the Spatial Polarization Distribution of Gamma Rays Generated by an Axially Symmetric Polarized Laser Using Compton Scattering	Chinese Academy of Sciences	WANG, Hongwei
Defect Identification Using Photon-Induced Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy	Tsinghua University	YANG, Yigang
エラストマー混合材料における応力印可時の微小領域化学結合状態	東北大学	江島 丈雄
リチウムイオン電池正極の遷移金属元素の価数変化の可視化	産業技術総合研究所	細野 英司
走査型透過X線顕微鏡を用いたタイヤゴムの亀裂摩耗の研究	高エネルギー加速器研究機構	大東 琢治
アポトーシス進行過程に伴う細胞核タンパク質の分布変動の高精度解析	分子科学研究所	荒木 暢
小惑星リュウグウのナトリウム炭酸塩に含まれる有機物の構造解析	京都大学	松本 徹
リュウグウ粒子の地球風化過程の解明	広島大学	宮原 正明
Chemical Insights at the Arctic Frontier: STXM/NEXAFS Analysis of Aerosol Particles during the ARTofMELT Expedition	University of Gothenburg	KONG, Xiangrui
Investigating Ti-Organometallic Complexes Found in Mars-Relevant Mineral-Microbial Interfaces Exposed outside the ISS as Potential Biosignatures in the Search for life on Mars	University of Orleans	SFORNA, Marie Catherine
Effect of Spin State Engineering on Spinel Co-Oxides for Enhanced Catalytic Performance Studied by X-Ray Spectro-Microscopy	Tamkang University	DONG, Chung-Li
有機薄膜太陽電池の高効率化を目指した軟X線吸収分光法による有機半導体/金属酸化物の表面界面分析	千葉大学	奥平 幸司
強誘電性分子流体における相転移と電子状態の相関に関する研究—その2	理化学研究所	荒岡 史人
磁気ボトル型電子分析器を用いた多電子・イオン同時計測	富山大学	彦坂 泰正
低光強度照射による高分子材の全電子収量法 XAFS 計測法の開発	分子科学研究所	岩山 洋士
XAFS イメージングによる CHO 細胞内の鉄価数分布の可視化	分子科学研究所	岩山 洋士
Studies of Electronic Properties of 2D Organic Single Crystal Films and Their Temperature Dependence	Linköping University	LIU, Xianjie
一軸圧力印加による電子液晶状態の観測：高空間分解 ARPES	東北大学	佐藤 宇史
グラフェン層間化合物における超伝導転移温度の層数依存性解明	物質・材料研究機構	一ノ倉 聖
Cu(111) 上ブルーフォスフォレンの電子状態測定	分子科学研究所	前島 尚行
BCS-BEC 型励起子絶縁体における励起子絶縁相クロスオーバーの探索 II	分子科学研究所	福谷 圭祐
3次元 ARPES と共鳴 ARPES による強相関熱電材料の電子状態の研究	豊田工業大学	松波 雅治
偏光依存角度分解光電子分光による Mo_2AlB_2 の電子状態の研究	名古屋大学	伊藤 孝寛
光電子分光計測における試料立体形状に対する SOR 光の反射効果	奈良先端科学技術大学院大学	服部 賢
原子層近藤格子における量子臨界的挙動の観測	大阪大学	中村 拓人
Si(001) 表面における温度依存表面超構造相転移と電子状態の相関：表面状態間共鳴角度分解光電子分光による研究	大阪大学	田中慎一郎
Exploring a Novel Spin-Splitting Effect in the Altermagnet Candidate MnTe through Spin-Resolved ARPES	Southern University of Science and Technology	LIU, Chang
Electronic Structure Study on Novel Spin-Split Collinear Antiferromagnets	City University of Hong Kong	LIN, Zihan
Photoemission Studies about the Spin Structure of g-Wave Type Altermagnet CrSb	Sunchon National University	CHO, Soohyun
高エネルギー天体観測用 EUV 偏光計の基礎開発	山形大学	郡司 修一
波長 6.9nm 用反射多層膜の反射率評価	東北大学	江島 丈雄
ディラック・ワイル超伝導候補物質の高分解能 ARPES	東北大学	佐藤 宇史
新規励起子絶縁体の電子構造の開拓的探求	東京大学	近藤 猛
電子ドーピング銅酸化物における位相不整合高温超伝導状態の検証	東京大学	堀尾 眞史
高分解能角度分解好電子分光による表面モット絶縁体相およびドーピングによる超伝導発現の検証 II：基板の清浄化過程の影響	東京科学大学	平原 徹
高い正孔移動度を示す可溶性有機半導体の単結晶性薄膜の価電子バンド計測 (II-b)	東京理科大学	中山 泰生
Ag 上に偏析した単層ゲルマニウムのバンド構造の角度分解光電子分光による解明	日本原子力研究開発機構	寺澤 知潮

強相関有機分子結晶におけるバンド構造と電子フォノン結合の検出	分子科学研究所	解良 聡
NASICON 型固体電解質 $\text{Li}_{1-x}\text{Al}_x\text{Ti}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ 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
貴金属薄膜上に作製した二次元近藤格子における重い電子状態の変調	大阪大学	中村 拓人
角度分解光電子分光による多層系銅酸化物高温超伝導体の電子構造の研究	広島大学	出田真一郎
角度分解光電子分光によるカイラル金属磁性体 GdNi_3Ga_9 のバンド構造の研究 II	広島大学	佐藤 仁
Electronic Band Structure Study of Topological Materials $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ and $\text{Ge}_3\text{Bi}_2\text{Te}_6$	Southern University of Science and Technology	LIU, Chang
ARPES Study of the Photocathode Quantum Material Candidate BaTiO_3	Westlake University	HE, Ruihua
Orbital-Selective Mott Phase-Induced Topological Phase Transition in Iron Chalcogenide Superconductors	Seoul National University	KIM, Changyoung
Disentangle the “Metallic” Properties of <i>n</i> -Type High-Conductive Polymer: PBFDO	Linkoping University	LIU, Xianjie
温度可変その場赤外分光測定を用いた層状酸化ポロフェン薄膜の液晶相転移過程における分子振動ダイナミクスの観察	東北大学	神永 健一
有機無機ハイブリッド化合物の真空紫外分光	山形大学	北浦 守
Energy Transfer Mechanism from Gd to Ce for Gd-Contained Glass Scintillators and Crystal Scintillators: Investigation of Luminescence Properties at Low Temperatures	Kyungpook National University	KIM, Hong Joo
VUV 光による孤立励起分子の遅延解離過程の研究	京都大学	間嶋 拓也
ライマンアルファ検出器の開発	九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫
有機-無機界面磁気結合による Co ナノ島のスピン再配列転移	名古屋大学	宮町 俊生

④ 計算科学研究センター施設利用

(分子科学分野共同利用)

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
高反応性のジボラン (4) と Al アニオンの性質の解明	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
自己集合過程とエネルギー変換材料, 高分子材料の計算科学	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
生体高分子の分子認識メカニズム解明のための理論統合法	九州大学 青木百合子
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
革新的量子科学と正確かつ大規模な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
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
溶液および溶液界面の構造と機能の計算化学	東北大学 森田 明弘
エチレンと極性モノマーの配位共重合を指向したパラジウム触媒の開発と安定ホウ素二置換カルベン合成	東京大学 野崎 京子
芳香族-貴ガスクラスターの3次元分子間ポテンシャルの見積りによる原子移動メカニズムの研究と, 赤外分光による芳香族アルコール-水和構造のエネルギー依存性の研究	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
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
選択的反応における溶媒効果と反応機構に関する理論研究	高知大学 金野 大助
分子動力学シミュレーションを用いた機能性分子の選択的膜会合と計算分子設計	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
水と疎水性分子のナノ不均一構造と動態の解析	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
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
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
三重項媒介配位子で保護された貴金属クラスターの構造と励起状態に関する計算科学的研究	立教大学 三井 正明
全原子モデル計算の情報を取り入れた粗視化モデルによるタンパク質の構造転移の自由エネルギーランドスケープ計算手法の開発	名古屋大学 寺田 智樹
生体分子と機能性分子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・ハイドレートの相転移の理論研究	岡山大学	松本 正和
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	大阪公立大学	森次 圭
生体内における糖鎖多価相互作用の理論研究	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
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
酸化グラフェンの構造探索と XAS シミュレーション	東京大学	佐々木岳彦
Proteins: Energy, Heat, and Signal Flow	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
柔らかい分子集合体の分子シミュレーション	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
アミノ酸変異によるタンパク質複合体の結合自由エネルギーシフト	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 聖浩
機能性有機分子材料の電子的性質に関する理論的研究	三重大学	伊藤 彰浩
重元素分子の高精度な相対論的量子化学計算にむけた方法論の開発と応用	広島大学	阿部 穰里
次世代カーボンニュートラル社会の基礎となる半導体/Aモルファス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
計算材料科学的手法による半導体ナノ構造形成機構の解明と物性探索に関する研究	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
分子・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
タンパク質の機能と構造の関係についての計算化学的研究	京都府立大学	リントゥルオト 正美
液晶の物性の起源としての動的分子間相互作用	大阪大学	内田 幸明
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
GABA 受容体の神経伝達に関わるアロステリックな分子制御機構に関する研究	近畿大学	米澤 康滋
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
高分子ブラシ/水界面における分子構造に関する分子動力学シミュレーション研究	富山大学	石山 達也
次世代再生可能エネルギーデバイスの分子論的解明	日本女子大学	村岡 梓
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
三体相互作用に基づく Lennard-Jones 液体の流体極限での動的構造因子の評価	新潟大学	大鳥 範和
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
多環芳香環を有する金属架橋カプセルのキラル光学特性	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
新規温度計イオンの開発による気相イオンの温度計測	産業技術総合研究所	浅川 大樹
フラグメント分子軌道法と DFTB 法によるタンパク質の pKa 揺らぎの算出	筑波大学	松井 亨
分子動力学シミュレーションによる溶液化学に関わる研究	福岡大学	永井 哲郎
液体の統計力学理論による生体分子の機能解析	名古屋大学	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分子・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
ジグリコールアミド系有機配位子による、ランタノイドイオンの選択的抽出に関する分子科学研究	広島大学	井口 佳哉
有機ロジウムフタロシアニン錯体の光アンケーシングによるヘテロ環化合物の放出	東京大学	村田 慧
イオン液体と CO ₂ の相互作用の量子化学計算と機械学習を用いた分子動力学による予測	北海道大学	島田 敏宏
MD シミュレーションを用いたタンパク質の機能解析と脂質力場開発	統計数理研究所	篠田 恵子
シミュレーションに基づく抗体・ワクチン抗原・治療薬の分子設計	国立感染症研究所	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
電極触媒および光触媒による小分子活性化の機構解明と速度論データの予測について	九州大学	伊勢川美穂
実験と計算による有機反応機構解析	静岡県立大学	滝田 良
新規不斉触媒の開発研究と機構解析および機械学習への適用	名古屋工業大学	中村 修一
α-Ca ₂ SiO ₄ 結晶の構造不規則化に基づく遷移金属・希土類元素の固溶形態および分子構造の解析	大阪大学	鈴木 賢紀
分子動力学計算による高接着タンパク質の接着メカニズムの解明	名古屋大学	鈴木 淳巨
Computational Investigation of the Effects of Multi-Promoter Driven Cobalt Catalysts for N ₂ Activation for Ammonia Synthesis	名古屋大学	Pradeep Risikrishna Varadwaj

五核多種金属クラスター及び熱活性化遅延蛍光分子の電子状態の理論解析	名古屋大学	柳井 毅
疎水的表面と浸水の表面の摩擦の違いに注目した巨大分子の拡散係数の分子動力学シミュレーション研究	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	高度情報科学技術研究機構	手島 正吾
窒素・ホウ素を組み込んだ非ベンゼノイド系芳香族化合物の合成と性質	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
生体分子集合及び電池電解質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: ソフトマテリアルのナノ界面における水素結合・溶解・拡散性の分子論的考察	兵庫県立大学	鷲津 仁志
先端分子分光と量子化学計算による生体分子認識の理解の深化	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
高分子配向材料の熱伝導および誘電特性における構造相関解析	東京工業大学	古屋 秀峰
二次元および三次元系における分子間相互作用が与える凝集挙動への影響の理論的研究	西日本工業大学	末松安由美
染色体の新規モデル開発と3次元原子間力顕微鏡像の解釈	金沢大学	炭竈 享司
刺激応答型ピナフチル架橋ピレノファンの立体構造と光学特性	岡山大学	高石 和人
アト秒X線過渡吸収分光法による水溶液中における超高速光化学反応の実時間追跡	理化学研究所	山崎 馨
星間でのアミノ酸前駆体生成を模擬する有機分子合成シミュレーション	核融合科学研究所	中村 浩章
Ag置換ゼオライトにおけるプロパン/プロピレン分離メカニズムの解明	信州大学	田中 秀樹
分子状金属酸化物と金属微粒子からなる複合触媒の開発	東京大学	鈴木 康介
ペプチド阻害剤設計の動的構造基盤の構築	医薬基盤・健康・栄養研究所	李 秀榮
星間空間におけるアモルファス氷の構造とアミノ酸合成反応の理論研究	筑波大学	堀 優太
新しい治療法の確立を目指した新規触媒の開発	東京大学	三ツ沼治信
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	九州大学	森 俊文
界面活性剤凝集挙動の理論モデリング	岡山大学	甲賀研一郎
自動シミュレーションと転移学習を基盤としたデータ駆動型高分子材料研究	統計数理研究所	林 慶浩
分子シミュレーションによるタンパク質の動態解析	東北大学	田口 真彦
グルタミド超分子組織体における新規機能を誘起する機能性基配向構造の解析	熊本大学	桑原 穰
量子化学計算による有機分子触媒の精密設計	東北大学	寺田 真浩
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
半導体ナノ結晶表面の π 共役系有機配位子の光脱離過程の解明	立命館大学	小林 洋一
有機触媒, 遷移金属触媒および典型元素錯体を用いた反応開発のための電子構造および機構解明	大阪大学	兒玉 拓也
人工力誘起反応法を利用した新規キラル化合物の創出: 円偏光発光材料及び高性能有機触媒への応用	北海道大学	長田 裕也
電気化学的に発生させた活性種の反応挙動および物性の理論的研究	岡山大学	光藤 耕一
フッ素化アルキル鎖の集合構造と物性に関する研究	京都工芸繊維大学	水口 朋子
高難度炭素骨格の構築による新奇分子性材料の創製	名古屋大学	八木亜樹子
新規触媒反応の理論的機構解明及び反応予測	岡山大学	山崎 賢
理論計算を駆使する高難度不斉環化反応を実現可能な新規配位子の開発	名古屋大学	安井 猛
分子間振動-分子内振動結合を考慮した9次元ポテンシャルモデルの構築とベンゼン-メタン分子錯体のIR-UV分光	東京工業大学	中村 雅明
ポリマー破壊の分子動力学シミュレーション	大阪大学	岩下 航
Smart Design, Short-Step Synthesis, and Theoretical and Experimental Study of the (Chiro)Optical Behavior of Chiral Heterocyclic Nanographenes Using Density-Functional Theory (DFT) and Time-Dependent DFT (TDDFT) Calculations	大阪大学	モハメッド サリム ヘフニ
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
アニリン誘導体の分光特性に対する溶媒効果の研究	九州大学	大橋 和彦
遷移金属複合系の構造, 電子状態, 反応の理論的研究	東京都立大学	中谷 直輝
有機光電変換層の電荷分離ダイナミクスと分光シグナル	量子科学技術研究開発機構	藤田 貴敏
多成分系に応用可能な機械学習モデル開発のためのデータ蓄積	大阪大学	南谷 英美
貴ガスを基にした隠れた薬剤結合部位の同定方法の開発	北里大学	飯田 慎仁
第一原理計算による金属間化合物表面の化学的特性の研究	鹿児島大学	野澤 和生
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	大阪大学	古賀 信康
ワイドギャップ材料の結晶成長における素反応の研究	九州大学	草場 彰
Identification of Functional Materials in Low Dimension for Different Types of Technological Applications Using Density Functional Theory	東京理科大学	Arpita Varadwaj

マルコフ状態モデルを用いた生体分子メカニズムの解明とデータ同化	兵庫県立大学	尾嶋 拓
次世代半導体デバイス開発に向けた表面・界面および格子欠陥の第一原理計算	九州工業大学	制野かおり
新規含フッ素機能性材料の合成とその物性の解明	東京大学	川口 大輔
第一原理分子動力学計算によるイオン水和動力学の研究	中央大学	黒木菜保子
液体の統計力学理論に基づく Human-ZIP8 のイオン輸送機能の理論的研究	筑波大学	藤木 涼
分光法と分子動力学計算／量子化学計算を用いた生体関連分子の動的構造解析	佐賀大学	海野 雅司
分子のイオン化による共有結合解離現象の局所量による解析	京都大学	瀬波 大土
振動回転波束イメージング分光法の高分解能化と分子クラスターの構造研究への応用	北里大学	水瀬 賢太
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	福岡大学	池田 浩人
低分子非晶質有機半導体薄膜における永久双極子モーメントの配向角度分布の分析	山形大学	横山 大輔
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
アゾ含有のアミノ酸シッフ塩基銅(II)錯体とラッカーゼの複合体における異性化と電子移動	東京理科大学	秋津 貴城
誘電率も含めて二原子分子溶媒モデルの相関関数を正確に求める方法論の開発	愛媛大学	宮田 竜彦
キラルな π 共役系化合物が生み出す円偏光発光特性	北里大学	長谷川真士
含リン三次元 π 共役分子の構造と物性	大阪公立大学	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
静電的相互作用に基づく分子機能の計算化学的検討	東京大学	伊藤 喜光
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
環状炭素骨格を持つ化合物の構造・反応性および蛍光特性に関する量子化学的研究	埼玉医科大学	土田 敦子
分子シミュレーションによる分子集合体の研究	名古屋文理大学	本多 一彦
生命関連星間分子の生成機構に関する理論的研究	明治学院大学	高橋 順子
キナクリドンキノンのホウ素化反応および光還元反応に関する研究	名古屋工業大学	小野 克彦
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	伊藤 聡
光化学反応の制御と応用に関する理論的研究	量子科学技術研究開発機構	黒崎 讓
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
新規光薬理分子の蛋白質内光異性化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
金属ナノクラスターの異種金属交換体の構造解明	広島大学	水田 勉
量子化学計算による光合成水分解機構の研究	名古屋大学	野口 巧
振動円二色性分光法の超分子キラリティへの応用	愛媛大学	佐藤 久子
発光性金属錯体の励起状態の研究	日本工業大学	大澤 正久
歪んだ多環芳香族化合物の構造と性質	東邦大学	渡邊総一郎
新規な典型元素化合物の反応性と特性に関する研究	学習院大学	狩野 直和
新奇な大環状 π 共役分子の電子状態	東京工業高等専門学校	井手 智仁
新規機能性 π 共役分子の合成と物性に関する研究	大阪大学	清水 章弘
第一原理計算によるトリプルハーフホイスラー化合物の低熱伝導率低減メカニズムの解明	名古屋工業大学	宮崎 秀俊
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
興味ある物質の角度分解高電子分光実験結果と第一原理計算の比較	大阪大学	田中慎一郎
ケイ素化合物に対する光と酸を用いた協働的結合開裂反応の反応機構解析	東京大学	正井 宏
典型元素の特性を活用した発光体および光触媒の開発	兵庫県立大学	吾郷 友宏
DFT 計算を用いた反応機構の解明による効率的有機合成反応の開発	奈良教育大学	山崎 祥子
有機テルル化合物の酸化により生成する活性種の理論計算	名古屋工業大学	高木 幸治
キラル NHC 配位錯体を用いた触媒反応に関する研究	東京電機大学	山本 哲也
電極触媒の分子変換に向けたメデイエータ設計指針の探索	横浜国立大学	信田 尚毅
Theoretical Studies of Strong Light-Matter Interactions in Molecular Systems	京都大学	Nguyen Thanh Phuc
機械学習支援による新規フェノール光触媒の開発	大阪大学	西本 能弘
空間的軌道相互作用に基づく π 共役およびキロプティカル特性に関する研究	名古屋市立大学	雨夜 徹
イオン液体-分子性液体溶液中で働く相互作用と遷移金属イオンの溶媒和構造の解明	佐賀大学	高椋 利幸
新奇機能性分子材料の構造-物性相関に関する理論研究	大阪大学	谷 洋介
有機分子光触媒の設計と遷移状態解析に関する研究	日本工業大学	小池 隆司
電解発生カルボカチオン種を利用した含窒素複素環骨格の直接的構築法の開発	横浜国立大学	岡本 一央
計算化学を利用した複雑天然物の効率的かつ立体選択的全合成研究	星薬科大学	加茂 翔伍
機能性開殻分子材料の構造-物性-電子状態相関の解明	大阪大学	草本 哲郎
ペプチド触媒による選択的反応の機構解明	東京大学	工藤 一秋
全合成による全立体配置決定を指向した複雑な海洋マクロリド amphidinolide N の構造・配座解析	中央大学	村田 佳亮

分子認識能を有する高輝度円偏光発光分子を利用したバイオセンシング技術の開拓	大阪大学	重光 孟
多核金属錯体を用いた分子変換反応の開拓	海上保安大学校	伊藤 淳一
水素分子クラスターの分子間振動ダイナミクスの研究	群馬大学	住吉 吉英
金触媒を用いたプロピレンエポキシ化反応に関する理論的研究	大阪大学	濱田 諭敬
人工光合成における有機金属構造体 UIO66-NH ₂ に付加した光触媒のシミュレーション	大阪公立大学	岩林 弘久
凝縮系における緩和および反応ダイナミクスの理論研究	分子科学研究所	斉藤 真司
複雑系の量子状態理論の開発と不均一系触媒および金属ナノクラスターへの応用	分子科学研究所	江原 正博
病気になる生体分子系の分子動力学シミュレーション	生命創成探究センター	奥村 久士
分子動力学計算と量子化学計算による液体の分子間相互作用の研究	分子科学研究所	長坂 将成
糖鎖の動的構造が糖鎖生成経路や抗体の免疫機能に及ぼす影響の解明	生命創成探究センター	谷中 冴子
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	分子科学研究所	岡崎 圭一
分子シミュレーションによるイオン液体の研究	分子科学研究所	石田 干城
計算機を用いたタンパク質機能設計	分子科学研究所	小杉 貴洋
新規機能性有機色素の開発	岐阜大学	船曳 一正
発光性化合物および蛍光プローブ分子の構造および電子状態の解明	室蘭工業大学	飯森 俊文
ピリジルキノリン三座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
植物ポリフェノールの立体化学および反応機構に関する研究	長崎大学	松尾 洋介
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
典型元素を含有化合物の構造物性理論計算	東京都立大学	瀬高 渉
真空中でのポリオール水溶液の凍結過程	九州大学	吉岡 拓哉
量子化学計算を用いた新規重合反応の設計	名古屋大学	渡邊 大展
有機機能性分子の合成と物性解明	九州大学	清水 宗治
水を反応剤として含むエナンチオ選択的パッセリーニ型反応の開発と量子化学計算による反応機構研究	大阪大学	佐古 真
π クラスター分子の電子物性の解明	大阪大学	西内 智彦
異元素添加金属ナノクラスターの電子・幾何構造の探究	九州大学	堀尾 琢哉
リパーゼ触媒 O-アシル化による軸不斉ピリアル化合物の動的速度論的光学分割	大阪大学	鹿又 喬平
新規双極性有機典型元素化合物の創成と気体分子の活性化	北里大学	内山 洋介
LC-MS/MS を用いた生体試料中代謝物定量におけるマトリックス効果の理論的考察	東邦大学	岡 真悠子
半古典分子動力学シミュレーションの開発と応用	上智大学	南部 伸孝
短寿命種や界面化学種の振動スペクトル解析	筑波大学	石橋 孝章
有機遷移金属錯体と小分子との反応における反応機構の理論的検討	群馬大学	村岡 貴子
量子化学計算を用いたニトロソアミン類の毒性予測	昭和薬科大学	臼井 一晃
CNT および高分子へのアルカン吸蔵のリバースモンテカルロ法による解明	慶應義塾大学	千葉 文野
DFT 計算による複数種の金属を含む常磁性混合原子価集積体の電子構造の解明	岐阜大学	植村 一広
分子動力学法ソフトウェアから得られる物理的性質・性能情報の違いについての解析	理化学研究所計	小林 千草
高強度レーザーパルスによる物質の照射損傷の分子シミュレーション開発	防衛大学校	山田 篤志
静電ポテンシャルマップに対する分子モデリングアルゴリズムの開発	名古屋大学	佐久間航也
反応自動探索を基盤とする有機合成・触媒開発・水和構造解析	九州大学	住谷 陽輔
電場中における分子・イオンの研究	学習院大学	奥津 賢一
分光学的実験手法と量子化学計算を併用した多座配位子を含む新奇金属錯体の発色および発光メカニズムの解明	佐賀大学	山田 泰教
3次元 π 共役構造体の創製	分子科学研究所	瀬川 泰知
「フラビント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」に対する理論的考察	広島大学	岡 芳美
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
光触媒・コバルト触媒の協働によるプロパルギルアミドへの二酸化炭素の固定化反応機構の解明	北海道大学	中村 顕斗
アセチレン協働配位を基盤とした金属ナノクラスター複合体の構造・性質解明	群馬大学	堂本 悠也
ESR スペクトル計算とその線量評価への応用	東北大学	山下 琢磨
新規パイ共役化合物の構造-物性相関の解明に関する理論研究	大阪大学	山下 健一
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
多孔性金属錯体を鋳型とした機能性ナノマテリアルの合成	東京大学	北尾 岳史
CNT 構造制御合成に向けた合金クラスターの探索	東京大学	小幡 郁真
エネルギー変換触媒の構造・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
4d または 5d 金属を含む多核金属錯体の電子状態	岐阜大学	海老原昌弘
セルロースナノファイバーのネットワーク形成に関する非平衡ダイナミクスシミュレーション	東京農工大学	坂本 道昭

メタリレン種を用いた不飽和化合物の変換反応の開発	京都大学	黒木 堯
キラルスピロπ共役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
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
異種ポルフィリン系巨大d-π共役化合物の電子構造解析	東京都立大学	石田 真敏
固定化金属錯体、有機分子および金属クラスターによる新奇触媒作用の理論的解明	横浜国立大学	長谷川慎吾
フォトクロミック分子に関する量子化学計算	立命館大学	長澤 裕
13族および14族元素またはフラレンを配位子とする金属錯体の電子構造に関する理論的研究	東北大学	小室 貴士
量子化学・統計力学的手法に基づく開殻分子系の理論的検討	東京大学	横川 大輔
Alchemicalシミュレーションによる天然物アナログの結合自由エネルギー計算	香川大学	柳田 亮
有機ケイ素化合物の構造と性質	特殊無機材料研究所	久新莊一郎
四面体構造を有する第一遷移金属錯体の分光学的性質の系統的理解	山陽小野田市立山口東京理科大学	竹山 知志
スルースペース型電荷移動型TADF分子の構造・物性相関研究	大阪大学	武田 洋平
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
Theoretical Prediction of Time-Resolved Pump-Probe Photoelectron and IR Spectra of Nucleobases in Solution via GPU-Accelerated Non-Adiabatic Molecular Dynamics Simulation	京都大学	Alexander Konstantin Humeniuk
金属錯体の分子集合体を用いた人工光合成反応系の開発に対する理論的研究	東京工業大学	小杉 健斗
生体分子および溶媒の構造機能相関の解明	立命館大学	高橋 卓也
理論計算による機能性有機材料の性能評価	東京都立産業技術研究センター	小汲 佳祐
金属錯体触媒とその半導体複合体の時間分解分光の理論化学的解析	九州大学	小川 知弘
中心金属近傍に芳香環を配するアミド配位子を導入した低原子価第一遷移系列錯体	大阪大学	畑中 翼
ラジカル反応およびイオン反応を用いた反応開発と材料科学への展開	山口大学	川本 拓治
デジタル化による高度精密有機合成の新展開	九州大学	大嶋 孝志
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
新規分子のキロプティカル特性の理論計算およびMD計算を用いた高分子の物性予測	大阪大学	石割 文崇
新規複核金属錯体を用いた有機分子活性化の理論的予測	京都大学	柏原美勇斗
金属・半導体ナノクラスターの発光性電子状態の解明	東京理科大学	新堀 佳紀
酸化的結合組換えアプローチに基づく反芳香族構築法の開発	九州大学	島尻 拓哉
基底電子状態の気相における、1,2-Diphenylethaneのantiとgauche異性体のconformation解析	日本大学	奥山 克彦
ルテニウム触媒を用いたフルオロオレフィンのメタセシス反応に適するカルベン配位子の探索	相模中央化学研究所	上地 達矢
近赤外発光性ポルフィリンの電子構造の理論解析	京都工芸繊維大学	森末 光彦
生体分子間および残基間相互作用の計算科学的解析	産業技術総合研究所	山崎 和彦
ペプチド化学に関する諸課題の計算化学研究	名古屋大学	中津 幸輝
CVDグラフェンの構造と電子状態の解明	横浜国立大学	大野 真也
DNA構造を利用した発光色素の自己組織化体の構築	兵庫県立大学	高田 忠雄
フッ素系発光材料の機能開拓	京都工芸繊維大学	小林 和紀
ビスセミキノコバルト錯体の原子価互変異性化と電子-分子振動結合	岡山理科大学	山本 薫
キラル分子の立体化学と反応性に関する研究	熊本大学	井川 和宣
人工光合成開発に向けた金属錯体触媒および分子変換反応の理論的研究	大阪大学	渡部 太登
第一原理計算および量子多体計算による有機-無機ハイブリッド系の電子・フォノン状態と超伝導	新潟大学	大野 義章
カーボンナノチューブ内の擬一次元水の変相挙動	東京大学	LIU Wenjie
光で駆動する動的核偏極の高効率化に向けた分子探索	九州大学	西村 亘生
タンパク質ベースの薬物ナノキャリアに対するナノ粒子表面化学の影響	Tokyo University of Science	Samal Kaumbekova
ニッケル白金ティアラクラスターの電子状態の解明	東京理科大学	川脇 徳久
層状結晶性有機電子材料の開発	産業技術総合研究所	東野 寿樹
分子性触媒を用いるエナンチオ選択的酸化反応の遷移状態解析	東北大学	笹野 裕介
可視光によるα-キノンメチドの[4+2]環化付加反応を経由したクロマンの合成	岡山大学	田中 健太
MOFの骨格変換による新奇多次元炭素材料の創製	東京大学	山田 圭悟
マイクロフロー反応場を用いて創製される準安定超分子構造の解析	京都府立大学	沼田 宗典
フェナントロイミダゾール連結分子のスピン状態解析	日本大学	吉田 純
反芳香族性の発現を戦略とする近赤外発光色素のデザイン	名古屋大学	村井 征史
シクロアルカン類をプロトン受容体とする微視的水素結合	北里大学	石川 春樹

σ - 非局在電子系の創製	埼玉大学	斎藤 雅一
遷移系列イオンを含む化合物の反応制御に関する理論的研究	岐阜大学	和佐田裕昭
環境低負荷な有機合成触媒反応の開発を指向した遷移金属錯体の構造および反応性に関する研究	奈良女子大学	浦 康之
ポリカーボネート, ポリウレタンのアンモニア分解に関する研究	千葉大学	青木 大輔
多孔性グラフェン材料合成におけるメタン分解反応速度論解析	東京工業大学	山本 雅納
シクロパラフェニレン内カルベンの電子状態に関する研究	広島大学	安倍 学
量子化学計算による反応機構の解明	産業技術総合研究所	栢沼 愛
カルコゲン元素を持つ有機合成用触媒の立体構造ならびに触媒反応機構の解明	京都薬科大学	小林 祐輔
リン脂質立体異性体における各種スペクトルの計算化学による予測と実測値の比較	愛媛大学	安部 真人
金属カルベノイド活性種の合成化学的有用性の開拓と理論的解明	北海道大学	岡本 和紘
高反応活性な遷移金属錯体及び典型元素化合物の構造と反応に関する理論計算	東京工業大学	石田 豊
原子核の量子効果を考慮した理論計算手法による応用計算	岐阜大学	宇田川太郎
Research on the Conformation and Circular Dichroism of Chiral Isotopomers	東京理科大学	川崎 常臣
深共晶溶媒の水素結合構造とダイナミクスの解析	佐賀大学	梅木 辰也
発光性金属錯体および集積体の光機能解析及び制御に関する計算化学的アプローチ	関西学院大学	吉田 将己
先端的コヒーレント振動分光による新規 π 共役分子の超高速構造ダイナミクスの研究	分子科学研究所	倉持 光
深層学習システムおよび分子シミュレーションを用いた染色体分配に関連するタンパク質の分子メカニズムの解明	早稲田大学	清野 淳司
交互積層型錯体の転移にかかる量子分子ダイナミクス計算	東京大学	藤野 智子
π 共役分子の円偏光二色性のシミュレーション	関西大学	三田 文雄
GPUを用いた共鳴軟X線散乱シミュレーション	分子科学研究所	岩山 洋士
有機典型金属化合物を用いた合成化学, 構造化学	広島大学	吉田 拡人
アシルメタロイドの特異な反応性が可能にする分子変換	学習院大学	増田 涼介
化学反応を伴う材料開発過程のモンテカルロシミュレーションと関連計算	一橋大学	本武 陽一
高周期典型元素を含む集積多重結合化合物の性質解明	立教大学	菅又 功
高分解能分子分光実験のための計算化学	京都大学	馬場 正昭
バイオ機能分子の集合体形成予測	東京農工大学	村岡 貴博
触媒的 [2+2+2] 付加環化反応における位置選択性の反応機構解析	早稲田大学	柴田 高範
イオン性光触媒の開発	岐阜薬科大学	山口 英士
遷移金属錯体に於けるゴーシュ効果の解明	東京都立大学	杉浦 健一
グライコプロテオミクスのためのグライコプロテアーゼ設計を目指したシミュレーション・実験連携研究	野口研究所	下山 紘充
PABI 結晶の光異性化特性の解明	早稲田大学	長谷部翔大
高周期典型元素を含む低配位化学種, 環状共役系の電子状態の精査	筑波大学	笹森 貴裕
イオン性有機分子の光触媒機能に関する理論的解析	慶應義塾大学	大松 亨介
分子シミュレーションによる光活性化アデニル酸シクラーゼの動態の解明	岡山大学	平野美奈子
含硫黄配位高分子の半導体特性の起源解明	関西学院大学	田中 大輔
理論計算によるキラル金属錯体の溶液中及び固体表面における構造解明	名古屋大学	邨次 智
芳香環と芳香環の間に sp^3 混成軌道を持つ官能基を有する基質における Pd 触媒の分子内移動の機構解明	神奈川大学	横澤 勉
多核キラル金属錯体の安定構造の探索と分子キラリティ識別過程の解明	北里大学	瀧本 和誉
WSME 計算による多ドメインタンパク質のフォールディング経路の予測	徳島大学	熊代 宗弘
典型元素不飽和結合の性質・反応性の解明	近畿大学	太田 圭
アルコール溶液中の Fe イオンの溶媒和構造解析	茨城大学	井上 大
π 電子系新規有機材料の物理・化学的性質に関する理論計算	名古屋大学	岡田 洋史
金クラスター触媒における計算科学アシスト	北海道大学	米澤 徹
π 電子造形を用いた新規液相分離場における微弱な相互作用の定量評価	分子科学研究所	高谷 光
多孔性ゲル材料を利用した常温水性ガスシフト反応	東京大学	原 正宜
スルホンを出発原料に用いた置換ヘリセンの合成	岡山理科大学	折田 明浩
親水性イオン液体におけるイオン対及び水との相互作用の DFT 計算による解析	産業技術総合研究所	金久保光央
非平衡第一原理分子動力学シミュレーションによる和周波発生分光スペクトル計算手法の開発	名古屋大学	大戸 達彦
湾曲共役化合物スマネンおよびその誘導体と集合体に関する理論計算研究	大阪大学	櫻井 英博
分子動力学計算に基づく LiF-BeF ₂ -ZrF ₄ -UF ₄ 混合溶融塩の物性評価	東北大学	穴戸 博紀
Mechanism of Infectivity Enhancing Antibodies in SARS-CoV-2	大阪大学	Floris van Eerden
材料系の大規模分子シミュレーション	関西大学	藤本 和士

Computational Modeling and Simulation to Optimize DNA Binding Affinity in Longevity-associated FOXO Proteins

水の振動分光マップの作製

高圧力によるセルロース溶解性の向上と理論計算によるメカニズムの解明

有機・無機半導体材料の光機能特性の開拓

大阪大学

信夫 愛

埼玉大学

山口 祥一

創価大学

菊池 廣大

兵庫県立大学

鈴木 航

(基礎生物学分野共同利用)

課 題 名 (通年)

提案代表者

新規モデル生物のオミクス解析

基礎生物学研究所

重信 秀治

酵母とヒトにおけるゲノム配列解析

東京大学

山下 朗

ディープラーニングを利用したアサガオの開花に関与する遺伝子発現シス因子の同定

長岡技術科学大学

西村 泰介

昆虫の体色模様の研究に関連したゲノム解析

京都大学

安藤 俊哉

脂肪組織のゆらぎの生物学

富山大学

小野木康弘

エミュー胚とニワトリ胚の枝芽の single cell RNA シーケンス解析

東京工業大学

田中 幹子

集団ゲノミクスによる野生植物の環境適応メカニズムの解明

京都大学

阪口 翔太

初期胚発生過程におけるゲノム制御機構の探索

愛知県医療療育総合センター

加藤 君子

抗生物質耐性分子メカニズムの理論的研究

城西国際大学

額賀 路嘉

アリ類の長期間にわたる大量の精子貯蔵メカニズムとその進化の解明

甲南大学

後藤 彩子

ニレの木に対するアブラムシの推定されるエフェクターの進化

理化学研究所

Xin Tong

器官再生能力解明に向けたトランスクリプトーム解析および構造解析

基礎生物学研究所

奥村 晃成

実用珪藻キートセラスのゲノム解析と遺伝子発現データベースの構築

京都大学

伊福健太郎

シロアリ類のソシオゲノミクス

富山大学

前川 清人

フジコナカイガラムシのゲノム解析

名古屋大学

一柳 健司

ゼノバスの四肢再生と皮膚再生で発現する遺伝子の網羅的解析

弘前大学

横山 仁

被子植物における跳躍的形態進化に関する研究

東京大学

片山 なつ

日本の植物の集団動態解析

京都大学

瀬戸口浩彰

昆虫の翅の起源

信州大学

竹中 將起

「アリ類の新奇カーストの分化決定を司る遺伝的基盤の解明」に関する次世代シーケンス解析

玉川大学

宮崎 智史

光合成生物の関わる細胞内共生およびゲノム制御機構の解析

東京大学

丸山真一郎

魚類のヒレを用いた形態形成メカニズムの遺伝情報解析

鳥取大学

阿部 玄武

植物の生殖の進化に関わる因子の同定

国立遺伝学研究所

越水 静

高分解能を備えた新規変異率測定法の開発

国立国際医療研究センター

竹本 訓彦

統合オミクス解析から明らかにする植物の発生・形態形成機構

基礎生物学研究所

川本 望

アサガオのマルチオミクス解析

基礎生物学研究所

星野 敦

野外撮影動画におけるメダカの自動検出・計測・解析

日本女子大学

深町 昌司

システイン修飾変化がミトコンドリアタンパク質複合体形成に及ぼす影響の検討

金沢大学

高山 浩昭

ニジマス生殖細胞のトランスクリプトーム解析

東京海洋大学

林 誠

共生、社会性に関わる分子機構・進化の解析

筑波大学

頼本 隼汰

植物が食虫性を獲得した分子基盤の解明

神奈川大学

荒井 直樹

オーソログ解析に立脚した比較ゲノム解析技術の開発と応用

基礎生物学研究所

内山 郁夫

メダカをモデルとした脊椎動物の季節適応に関する研究

名古屋大学

中山 友哉

Analysis of Helicobacter pylori synteny

National Institute of Genetics
Bioinformatics and DDBJ
Center

Kirill
Kryukov

真核生物の染色体が線状であることの生物学的意義の解明

関西学院大学

田中 克典

光合成生物の光環境変化に対する応答システムの解析

基礎生物学研究所

鎌田このみ

世界のピロリ菌 1000 株のゲノムとメチロームに基づく進化機構の解析

法政大学

小林 一三

盗葉緑体現象の分子機構解明

慶應義塾大学

前田 太郎

維管束植物野生集団の環境適応に関わる集団遺伝学的解析

岡山大学

三村真紀子

局所適応のモデルとなりうるマツ科針葉樹トドマツ (*Abies sachalinensis*) のゲノム解読

東京大学

後藤 晋

真社会性昆虫の比較ゲノム解析

慶應義塾大学

林 良信

脊椎動物の生殖器官における遺伝子機能と発現調節メカニズムの解析

北海道大学

藤森 千加

アブラムシの細胞内共生系におけるゲノミクス研究

基礎生物学研究所

依田 真一

矮化オオバコの適応進化ーエピジェネティックな変化による進化の検証

東北大学

石川 直子

次世代シーケンサーを用いた種に固有の仙椎ー後肢ユニットの位置決定機構の解明

大阪公立大学

鈴木 孝幸

マウス生殖細胞の不均一性と系譜動態の網羅的解析

基礎生物学研究所

吉田 松生

プラナリアの環境応答行動を制御する分子および神経基盤の解明

鳥取大学

井上 武

Long-ncRNA,RP11-399K21.11 は Wnt 依存性に骨芽細胞分化を制御する
 脳の進化の分子基盤を解明するための全脳単細胞トランスクリプトーム種間比較
 生物進化の分子機構の解明
 水圏生物の比較トランスクリプトーム解析
 有性生殖から単為生殖への進化を可能とする分子経路の探索
 日本沿岸に分布して海藻に穿孔するヨコエビ類ネクイムシ科 Ceinina 属の系統解析
 Understanding the Mechanisms of Plant Virus Infection and Other Biotic Stress Responses
 1 細胞 RNA-seq による植物幹細胞システムの基本原理の解明
 昆虫および関連微生物のシステム生物学, 合成生物学, ゲノミクス, 分子生物学
 ゲノム情報を用いたバイオ農薬の開発
 発光生物の発光タンパク質の機能および進化の解析
 神経活動のプロセスにおける核内制御機構の解明
 新しい進化指標を用いての数十億年前の生体システムの仕組みの解析
 メダカ科魚類の種分化ゲノミクス
 新規モデル生物イペリアトゲイモリのゲノム情報整備
 昆虫 - ウイルス間相互作用の分子機構解析
 昆虫新奇形質の形成メカニズムの解明
 遺伝子配列に依存しないエピジェネティックな遺伝情報の制御機構の解析
 制御系の進化から解き明かす始原的光合成超分子の環境適応原理
 寄生蜂による寄生戦略の分子メカニズムの解明およびその進化の解析
 有害赤潮藻類の RNA-seq 解析
 有機フッ素脂肪酸 PFOS による脂質代謝かく乱作用の解明
 全ゲノム解析による日本産野生植物の適応進化過程の解明
 草原生植物の集団遺伝学的解析
 カイコーバキュロウイルス発現系におけるタンパク質高発現化を目指したシステム改変
 哺乳類精巣における多細胞生命自律性に関する研究
 新興・再興ウイルスの生態と病態に関する研究

東京歯科大学
 名古屋大学
 基礎生物学研究所
 広島大学
 名古屋大学
 東北大学
 北海道大学
 東北大学
 北海道大学
 岐阜大学
 東北大学
 愛知県医療療育総合センター
 武蔵大学
 琉球大学
 琉球大学
 名古屋大学
 基礎生物学研究所
 基礎生物学研究所
 埼玉大学
 筑波大学
 水産研究・教育機構
 金沢大学
 九州大学
 北海道大学
 九州大学
 信州大学
 北海道大学
 小野寺 晶子
 石川 由希
 瀬上 紹嗣
 豊田 賢治
 菊地真理子
 岨中 夏美
 中原 健二
 秦 有輝
 佐藤 昌直
 山内 恒生
 別所 上原学
 高木 豪
 堀越 正美
 柿岡 諒
 松波 雅俊
 浜島 りな
 新美 輝幸
 林 亜紀
 日原由香子
 丹羽 隆介
 紫加田知幸
 本田 匡人
 高橋 大樹
 倉田 正観
 門 宏明
 高島 誠司
 田村 友和

(生理学分野共同利用)

課 題 名 (通年)

提案代表者

イオンチャネルの活性制御機構の解析のための分子動力学シミュレーション
 4次元 MRI による脳の機能及び構造解析
 巨大ボリウム電子顕微鏡画像の3次元再構築処理
 アコヤガイの細菌感染症に関する研究
 2型糖尿病の病態進展機序の解明

和歌山県立医科大学
 生理学研究所
 生理学研究所
 金沢大学
 University of Toyama
 入江 克雅
 福永 雅喜
 Nilton Liuji
 KAMIJI
 端野 開都
 恒枝 宏史

(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

全原子分子動力学シミュレーションによる PVA ハイドロゲルの分子レベル解析
 燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用
 極限環境構造材料の原子シミュレーションに資する構造材料用ニューラルネットワーク
 原子間相互作用の創出
 電子・光・フォノン物性および欠陥・界面構造のハイスループット第一原理計算とデータベース化

大阪大学
 関西大学
 大阪大学
 東京工業大学
 松林 伸幸
 藤本 和士
 尾方 成信
 神谷 利夫

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	2023	2024			登録者数
					前期	後期	計	
共同研究	(1) 課題研究		2	1	0	1	1	5
	(2) 協力研究 *1		47	33	18	21	39	155
	(マテリアル)*2		40	56	42	42	84	270
研究会	(3) 分子研研究会		6	6	5	0	5	74
	(4) 若手研究活動支援		1	0	1	0	1	23
	(5) 岡崎コンファレンス		0	0	0	0	0	0
	所長招へい *3		5	35	4	0	4	4
	UVSOR 研究会 *3		1	2	0	2	2	124
施設利用	(6) ① UVSOR		209	192	118	102	220	1,046
	(マテリアル)*2		5	3	1	1	2	18
	(6) ② 機器センター (マテリアル)*2		136	196	103	103	206	700
	(6) ③ 装置開発室 (マテリアル)*2		0	0	0	0	0	0
	(6) ④ 計算科学研究センター		298	302	429	0	429	1,757

*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 各種研究会プログラム

【分子研研究会】

合成化学 2.0：研究手法の複合化による合成化学の新潮流をめざして
2024年10月30日（水）～31日（木） 分子科学研究所山手3号館大会議室

10月30日（水）

- 13:30-13:40 開会の挨拶 大嶋 考志先生（九州大学大学院薬学研究院）
学術変革領域 A：デジタル有機合成領域代表
- 13:40-13:50 趣旨説明・招待講演者紹介
榎山 儀恵（分子科学研究所）
- 13:50-14:20 「実験と計算化学・情報科学を活用した、有機合成化学の理解を目指して」
森本 浩之先生（九州工業大学大学院 工学研究科）
- 14:20-14:50 「機械学習あり人間」による有機半導体の開発」
松井 康哲先生（大阪公立大学大学院 工学研究科）
- 14:50-15:10 情報交換
- 15:10-15:40 「合成化学の可能性を広げる重水素化」
中 寛史先生（京都大学大学院 薬学研究科）
- 15:40-16:10 ショートプレゼンテーション
講演者以外の参加者ひとり1分程度（パワーポイント1～2枚程度）
- 16:15- 明大寺地区へ移動
- 16:45- 計算科学センター見学（江原先生・白男川先生）

10月31日（木）

- 9:30- 9:40 事務連絡
- 9:40-10:10 「電気の力を触媒的に利用した有機電解合成反応とフロー合成」
佐藤 英佑先生（岡山大学学術研究院）
- 10:10-10:40 「化学の課題を機械学習のタスクに落とし込む」
畑中 美穂先生（慶應義塾大学理工学部）
- 10:40-11:00 情報交換
- 11:00-11:30 「保護基の使用を最少化する逆伸長型ペプチド合成法」
生長 幸之助先生（産業技術総合研究所）
- 11:30-12:00 自動合成装置見学（大塚助教）
- 12:00-13:20 情報交換
- 13:20-13:30 プレインストーミング説明と会場移動
榎山 儀恵（分子科学研究所）
- 13:30-14:30 プレインストーミング（各グループ）
お題：2040年の合成化学を考える「創造するための想像の時間」
- 14:40-15:00 プレインストーミングの内容紹介・共有
- 15:00-15:10 閉会の挨拶・事務連絡（榎山）
- 16:00 前後 UVSOR 見学（希望者のみ）

【分子研研究会】

複雑系へのアプローチ～物質の複雑性をどこまで予測できるのか？

2024年12月17日（火）～18日（水） 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）

12月17日（火）

◆座長：北田 敦（東京大）

- 13:30-13:45 『はじめに』
北田 敦（東京大）
- 13:45-14:45 『拡張型ランダウ自由エネルギーモデル：画像データからの埋もれた情報の抽出』
小嗣真人（東京理科大）

◆座長：阿部 洋（防衛大）

- 15:00-16:00 『構造多糖材料／イオン液体の分子シミュレーション研究』
宇都卓也（宮崎大）
- 16:00-17:00 『非平衡ダイナミクスによって誘起される結晶相転換』
勝野弘康（金沢大）
- 17:00-17:45 全体討議
- 18:00-20:00 現地ポスター&意見交換会

12月18日(水)

◆座長：岩橋 崇 (科学大)

- 9:00-10:00 『エントロピー制御を基軸とした機能性合金電析』
深見一弘 (京都大)
- 10:15-11:15 『液相マードルングポテンシャルによる電極電位の定量解釈』
竹中規雄 (東京大)
- 11:15-11:45 全体討議
- 11:45-12:00 閉会の挨拶 解良 聡 (分子研)

【分子研研究会】

電子強誘電体の新機能と新展開

2025年1月20日(月) 分子科学研究所研究棟301号室

座長 熊谷 崇 (分子研)

1. はじめに (10) 東京科学大理 沖本洋一
2. 電荷秩序系における非線形輸送現象 (30) 東大工 有沢洋希
3. スパッタ法による YbFe_2O_4 単結晶薄膜の作製 (20) 岡山大理 藤井達生
4. 時間分解 X線回折で観る YbFe_2O_4 薄膜の非平衡格子・電荷秩序ダイナミクス (20) 東大物性研 深谷 亮

座長 藤原孝将 (QST)

5. 電子強誘電分極ドメインのテラヘルツ駆動と動的マッピング (20) 関西学院大理 伊藤弘毅
6. 電子強誘電体の光励起状態 (15) 東京科学大理 石川忠彦
7. 電子顕微鏡と X線回折による層状鉄酸化物の変調構造の直接観察と構造解析 (20) 名工大 浅香 透

座長 漆原大典 (名工大)

8. スピン揺らぎ制御による分極磁歪結合 (20) 岡山大理 于洪武
9. 赤外近接場光学顕微鏡によるナノマテリアルの構造・物性解析 (30) 分子研 熊谷 崇
10. まとめ (10) 岡山大理 池田 直

17:10 - 総合討論, 見学会

【分子研研究会】

スピンをプローブとした生命研究：異分野融合を目指して

2025年2月27日(木)～28日(金) 岡崎コンファレンスセンター中会議室

2月27日(木)

- 13:15-13:20 分子研所長挨拶 分子科学研究所渡辺所長
- 13:20-13:25 スピン生命フロンティア代表挨拶 生理学研究所鍋倉所長
- 13:25-13:30 事務連絡 分子科学研究所中村敏和
- [座長 中村敏和 (分子研)]
- 13:30-13:50 がん代謝研究における電子スピン共鳴法の応用
稲波 修 (北海道大学大学院獣医学研究院)
- 13:50-14:10 NMRによる染色体基本構造の動的解析
西村善文 (横浜市大生命医科学研究科)
- 14:10-14:30 マウス構造 MRIを用いた精神疾患研究
阿部欣史 (慶應義塾大学医学部 先端医科学研究所)
- 14:30-14:50 高感度メンブレン THz ESRの生命研究への応用
太田 仁 (神戸大学分子フォトサイエンスセンター)

[座長 加藤賢 (阪大蛋白研)]

- 15:20-15:40 拡散 MRIによる腫瘍イメージングの新展開
飯間麻美 (名古屋大学大学院医学系研究科)
- 15:40-16:00 In-cell NMRによる細胞内タンパク質の構造動態研究
猪股晃介 (岡崎連携プラットフォームスピン生命コア)
- 16:00-16:20 プロトン MRIによる熱・物質輸送の可視化
黒田 輝 (東海大学情報理工学部)
- 16:20-16:40 生体関連レドックス反応におけるラジカル中間体のキャラクタリゼーション
中西郁夫 (QST 量子生命科学研究所)

予備枠
16:40-16:50 事務連絡 中村敏和 (分子科学研究所)
18:00- 懇親会

2月28日(金)

[座長 猪股晃介 (岡崎連携プラットフォーム スピン生命コア)]

9:00- 9:20 EPRI 法・OMRI 法を用いた生体内フリーラジカル計測装置の現状と展望
榎本彩乃 (長崎国際大学薬学部)
9:20- 9:40 局所分析を志向した動的確分極—MAS-NMR の方法論の開発
加藤 賢 (大阪大学 蛋白質研究所)
9:40-10:00 アミロイドβタンパク質の構造変化と分子集合：NMR を基軸とした分子科学アプローチ
矢木真穂 (名古屋市立大学大学院薬学研究科)
10:00-10:20 有機ラジカルを利用した MRI 造影剤へ向けての基礎研究
唐澤 悟 (昭和薬科大学大学院薬学研究科)

[座長 中村敏和 (分子研)]

10:50-11:10 超偏極 MRI を中心とした代謝イメージングによる脳研究
高堂裕平 (QST 量子生命科学研究所)
11:10-11:30 電子スピン共鳴装置を利用した植物の活性酸素種によるシグナル伝達機構の研究
蔭西知子 (北見工業大学工学部)
11:30-11:40 総評
西島和三 (東北大学/横浜市立大学)
11:40-11:50 事務連絡 中村敏和 (分子科学研究所)

【分子研研究会】

キラリティが関連する動的現象

2025年3月10日(月)～12日(水) 岡崎コンファレンスセンター

3月10日(月)

受付 13時より開始

13:20-13:30 オープニング&アナウンスメント

《セッション1》 座長：戸川 欣彦

13:30-14:00 岡本 裕巳 (分子科学研究所)
キラル光学効果と顕微イメージング

14:00-14:30 井改 知幸 (名古屋大学)
キラリティが導くラダーポリマー科学の新展開

14:30-15:00 石井 あゆみ (早稲田大学)
光とスピンを制御する次元らせんハイブリッドマテリアル

15:00-15:30 加藤 政博 (広島大学/分子科学研究所)
高エネルギー自由電子からのキラルな電磁放射とその応用

《セッション2》 座長：小田 玲子

16:00-16:30 中村 浩章 (核融合科学研究所)
光渦と様々な物質との相互作用

16:30-17:00 中川 鉄馬 (早稲田大学)
無機結晶および有機結晶におけるキラルサイエンスの新展開

17:00-17:30 笹部 潤平 (慶應義塾大学)
Amino Acid Chirality Modulates Mammalian Physiology and Pathology

《セッション3》

17:30-18:00 固体物理〈物質科学におけるカイラリティ〉特集号編集委員
カイラリティ、キラリティ、chirality に関する用語説明
『用語説明に対する質問を google form で回収します。2日目のラウンドテーブルで議論に使わせていただきます。』

《ナイトセッション》

18:00-21:00 ポスター発表, および, 懇親会
奇数 (odd) : 18:30-19:30
偶数 (even) : 19:30-20:30

3月11日(火)

- 《セッション4》 座長：佐藤 琢哉
- 09:00-09:30 大岩 陸人(理化学研究所)
スピレンスの電気トロイダル多極子による結晶キラリティの定量化
- 09:30-10:00 木村 剛(東京大学)
極性・軸性・キラル構造ユニットの組み合わせによる新規フェロイック物質の創成
- 10:00-10:30 大石 栄一(立命館大学)
円偏光ラマン分光による α 水晶の右巻きと左巻きのカイラルフォノンの選択的観測
- 10:30-11:00 集合写真撮影(予定)

《セッション5》 座長：山本 浩史

- 11:00-11:30 CISS 世話人
カイラリティ誘起スピン選択性(CISS)に関する研究の現状
- 11:30-12:00 須田 理行(京都大学)
キラルファンデルワールス超格子の創製
～キラル物性開拓のための新プラットフォーム～
- 12:00-12:30 石割 文崇(大阪大学)
高度な不斉誘起物性を発現するキラルな二面性物質

《セッション6》 座長：加藤 雄介

- 13:30-14:00 高野 淑識(海洋研究開発機構)
分子キラリティと太陽系物質科学の展望
- 14:00-14:30 重光 孟(大阪大学)
発光団を複数有する環状オリゴ糖のキロプロティカル特性の動的変化
- 14:30-15:00 荒木 保幸(東北大学)
過渡円二色性測定と時間分解ESRによるヘリセンの励起三重項状態の電子状態の研究
- 15:00-15:30 内田 幸明(大阪大学)
コレステリック液晶シエルの構造と機能

《セッション7》 座長：須田 理行

- 16:00-16:30 前田 勝浩(金沢大学)
ポリ(ジフェニルアセチレン)のらせん構造の解明とその特性を活用したキラルマテリアル開発
- 16:30-17:00 鈴木 裕太(東京科学大学)
フォノン角運動量のダイナミクス：界面輸送と緩和機構
- 17:00-17:30 佐藤 拓朗(分子科学研究所)
キラル有機超伝導体における巨大スピン軌道結合とスピン三重項クーバー対

《セッション8》 座長：加藤 雄介

- 17:30-18:00 ラウンドテーブル
パネリスト：小田玲子, 佐藤琢哉, 村上修一, 岸根順一郎, 山本浩史, 戸川欣彦
『google form で回収した用語説明に対する質問をきっかけとして議論を進めます。』

3月12日(水)

- 《セッション9》 座長：岸根 順一郎
- 09:00-09:30 Eliot Fried (OIST)
Orthoschemes, ortho-Circles, and Möbius Bands
- 09:30-10:00 水藤 寛(東北大学)
数学からのキラリティ記述の試み
- 10:00-10:30 加藤 将貴(東京大学)
多軌道スピン依存ホッピングとカイラルスピン軌道相互作用の微視的理論

《セッション10》 座長：佐藤 拓朗

- 11:00-11:30 加藤 岳生(東京大学)
接合界面におけるカイラリティ誘起フォノンスピン変換
- 11:30-12:00 加藤 彰人(大阪公立大学)
物質のカイラリティとカイラリティ誘起効果の関係について
- 12:00-12:30 三輪 真嗣(東京大学)
キラル誘起磁気抵抗効果の考察
- 12:30-12:40 クロージング

《ポスターセッション》

初日 2025.3.10 (月) 18:00-21:00 ポスター発表, および, 懇親会

奇数 (odd) : 18:30-19:30

偶数 (even) : 19:30-20:30

- P01 橋谷田 俊 (北海道大学)
単一キラル金属ナノ構造をプローブとして用いた光の軌道角運動量に基づく光学的キラリティの探究
- P02 松田 達磨 (東京都立大学)
カイラル構造を持つ金属間化合物におけるフェルミ面研究
- P03 Wijak YOSPANYA (東北大学)
Nanohelices for Chiral Light-Matter Interactions Fabrications of Different Chiral Nanohelical Materials and Their Applications
- P04 今井 喜胤 (近畿大学)
ペロブスカイト量子ドットからの円偏光発光 (CPL)
- P05 小野 純護 (近畿大学)
第三世代円偏光有機発光ダイオードからの磁気円偏光発光
- P06 高野 俊輔 (早稲田大学)
キラル液晶の輸送係数に動的キラリティと熱力学不確定性関係が与える効果
- P07 黄 宥綺 (東京科学大学)
Evaluation of True Chirality of Phonons in Chiral and Achiral Materials
- P08 岡野 洗明 (早稲田大学)
低温冷却が可能な一般型高精度万能旋光計 (G-HAUP) の開発と $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ 単結晶の擬ギャップにおける時間反転対称性の評価
- P09 渡邊 光 (東京大学)
軸性秩序系における円偏光活性ラマン散乱の理論
- P10 Junhe WANG (早稲田大学)
Synthesis of Chiral Gold Nanostructures on Mesoporous Gold Substrates for Chiral Discrimination by Surface-Enhanced Raman Spectroscopy
- P11 大原 繁男 (名古屋工業大学)
カイラル螺旋磁性体における反対称磁気相互作用の制御
- P12 谷口 紗貴子 (慶應義塾大学)
哺乳類体内におけるアミノ酸キラリティ恒常性維持のメカニズムと D- アミノ酸の存在意義の探求
- P13 吉良 美月 (早稲田大学)
昇華法を用いたサリドマイド単結晶育成におけるラセミ化の検証
- P14 後藤 拓 (分子科学研究所)
分子キラリティを埋め込んだ白金における巨大磁気カイラル異方性の観測
- P15 佐藤 哲也 (東京大学)
磁気回転効果を通じたスピン-フォノン相互作用の包括的導出
- P16 鈴木 ひかり (早稲田大学)
 $\text{Pb(II)/Bi(III)/Te(IV)}$ を用いた一次元らせんペロブスカイト結晶薄膜の円偏光検出特性
- P17 田内 大喜 (北里大学)
ピナフタル骨格を基盤とする円偏光発光材料のキラル光学特性
- P18 富田 知志 (東北大学)
磁気カイラルメタマテリアルでの非相反な超強結合マグノンポラリトン
- P19 宅見 美春 (東京科学大学)
カイラル結晶中に生じる非平衡スピン蓄積の検出を目指した磁気光学測定システムの開発
- P20 安岡 祥貴 (大阪公立大学)
キラル金属 NbGe_2 における電気抵抗率サイズ依存性
- P21 加藤 浩之 (大阪大学)
ヘリカル高分子単層膜の自己組織化: キラリティ誘起物性の探求に向けて
- P22 松本 綾香 (早稲田大学)
X線構造解析によるサリドマイドのキラル結晶とラセミ結晶の結晶構造の温度依存性の比較
- P23 西村 直樹 (東京大学物性研)
カイラリティ誘起スピンゼーベック効果の理論
- P24 谷元 優希美 (広島大学)
カイラル結晶構造をもつ $\text{Yb}(\text{Ni}_{1-x}\text{Cu}_x)_3\text{Al}_9$ の軟X線角度分解光電子分光
- P25 船戸 匠 (原子力機構)
差動回転によるスピン流生成
- P26 庄司 大希 (大阪公立大学)
カイラルらせん磁性における反対称交換相互作用の温度依存性
- P27 青柳 範幸 (宇都宮大学)
Frenkel 励起子フォノン三角形の量子光照射ダイナミクス
- P28 瀧本 和誉 (北里大学)
イリジウム錯体のキラル自己選別過程における架橋配位子の影響
- P29 黒白 ちひろ (放送大学)
近接場領域と放射場領域における保存量 "Zilch" の接続

- P30 吉見 光祐 (東京大学)
局所電流注入によりカイラル金属に誘起されるスピン分極の理論
- P31 中村 大輝 (早稲田大学)
有機キララル分子による一次元らせんペロブスカイトの空間反転対称性の破れと光学特性の制御
- P32 建石 朋美 (放送大学)
カイラル螺旋結晶における電子・カイラルフォノン相互作用の理論
- P33 Chenxu WANG (核融合科学研究所)
Investigation on the Propagation Characteristics of Millimeter-Wave Vortex in the Magnetized Plasma by FDTD Simulations
- P34 大湊 友也 (早稲田大学)
カイラル半金属における光電流と高次高調波発生の理論
- P35 楠野 楽到 (東京科学大学)
円偏光ラマン分光による NiTiO₃ のフェロアキシシャル秩序の観測
- P36 岡崎 豊 (京都大学)
ヘリカルナノシリカにおける熱誘起 VCD 信号増幅
- P37 原 慧人 (京都大学)
Current-Induced Spin Current in Parity-Mixed Superconductors with Structural Chirality
- P38 室谷 一晴 (大阪大学)
キララルな二面性ラダーポリマーの合成とその CISS 特性
- P39 中原 雄飛 (大阪大学)
C₃ キラル二面性トルキセン類の合成とその優れたキロプティカル特性
- P40 宍戸 寛明 (大阪公立大学)
ダイシリサイド薄膜におけるキラリティ誘起スピン選択性
- P41 岡 紗雪 (北海道大学)
無機キララルらせん構造電極における光電気化学水酸化反応
- P42 Shuang LI (大阪大学)
Development of Chiral Organic Electronic Material Based on Chiral Bifacial Indacenodithiophene
- P43 三国 宏樹 (東京科学大学)
有機カイラル分子/強磁性体接合における異方的な磁気ダンピング
- P44 村中 将来 (大阪公立大学)
キララル無機ナノ粒子物質の合成と評価
- P45 野崎 美沙 (量子科学技術研究開発機構)
[7]-ヘリセン/Au 系における光電子波動関数の第一原理計算
- P46 河合 克宏 (慶應義塾大学)
骨芽細胞集団はキララルに配列する
- P47 村上 修一 (東京科学大学)
フォノンの角運動量による磁化誘起の理論
- P48 奥田 太一 (広島大学)
スピン分解光電子分光による CISS 効果の観測
- P49 西村 達也 (金沢大学)
希土類元素を側鎖に有する合成らせん高分子の合成とそのキララル光学特性
- P50 中村 翔太 (名古屋工業大学)
単軸カイラル螺旋磁性体の磁気構造と反対称磁気相互作用の大きさ
- P51 宮崎 航平 (東京科学大学)
単結晶 Te における円偏光ガルバノ効果の測定

【UVSOR 研究会】

UVSOR 若手の会

2024 年 11 月 4 日 (月) 岡崎コンファレンスセンター

- 13:30 - 14:00 受付
- 14:00 - 14:05 開会・研究会の趣旨説明
伊藤孝寛 (名古屋大学) [進行: 中澤遼太郎 (分子研)]
- 14:05 - 14:35 自己紹介セッション
[進行: 中澤遼太郎 (分子研)・鈴木崇人 (東北大学)]
- 14:35 - 15:55 講演①
「角度分解光電子分光によるノーダルライン半金属 KAlGe の電子状態の観測」
西田拓磨 (東京大学) [座長: 鈴木崇人 (東北大学)]
- 14:55 - 15:15 講演②
「DPh-BTBT の 1 次元構造における HOMO と HOMO-1 の軌道混成」
小野裕太郎 (筑波大学) [座長: 松井文彦 (分子研)]
- 14:15 - 14:35 講演③
「時間分解電子エネルギー損失分光装置の開発」
西原快人 (大阪大学) [座長: 松井文彦 (分子研)]

- 15:40 - 16:15 招待講演
「ベイズ計測による放射光データ解析の高度化～統合解析、階層モデリング、ノイズ除去～」
横山優一 (JASRI) [座長：小野広喜 (名古屋大学)]
- 16:15 - 16:50 企画講演
「ぶっちゃけ企業での研究ってどうなの？～理物から半導体メーカーを経て思うこと～」
藤原弘和 (東京大学) [座長：鈴木崇人 (東北大学)]
- 17:00 - 17:30 若手による意見交換会 [進行：中村拓人 (大阪大学)]
- 17:30 閉会

【UVSOR 研究会】

UVSOR シンポジウム 2024

2024年11月5日(火)～6日(水) 岡崎コンファレンスセンター(ハイブリッド開催)

11月5日(火)

- 13:00-13:05 開会
- 13:05-13:25 施設報告
解良聡 (分子科学研究所)
- 13:25-13:45 ガンマ線誘起陽電子消滅寿命分光法による純鉄引張試験片の応力印加下その場分析
藪内敦 (京都大学)
- 13:45-14:05 二刀流ビームライン光電子運動量顕微鏡と価電子帯原子軌道解析への応用
萩原健太 (分子科学研究所)
- 14:05-14:35 [招待講演]
角度分解光電子分光を用いた希土類モノプニクタイトの精密電子状態観察
黒田健太 (広島大学)
- 15:05-15:45 ポスターショートプレゼンテーション
- 15:45-16:05 Recent Results of Photoelectron Momentum Microscopy without and with Spin Resolution
菅 滋正 (大阪大学)
- 16:05-16:35 [特別講演]
Scanning Transmission Soft X-Ray Spectro-Microscopy at the PolLux Beamline of the Swiss Light Source
Benjamin Watts (Paul Scherrer Inst., Swiss Light Source)
- 17:00-18:45 ポスターセッション
- 18:45-20:15 情報交換会

11月6日(水)

- 9:00-9:20 UVSOR-IIIにおける真空紫外光を用いた光電離プラズマ生成実験
小林政弘 (核融合科学研究所)
- 9:20-9:50 [招待講演]
高効率発光のシンチレータ検出器開発
黒澤俊介 (東北大学)
- 9:50-10:10 観測ロケット実験 FOXSI-4 で実施した世界初の太陽フレア X線集光撮像分光観測の初期成果
成影典之 (国立天文台)
- 10:25-10:55 [招待講演]
共鳴軟 X線散乱によるソフトマターの精密構造解析
高西陽一 (京都府立医科大学)
- 10:55-11:15 UVSOR BL4Bにおける表面・界面ナノ磁性研究
宮町俊生 (名古屋大学)
- 11:15-12:15 利用者懇談会
- 12:15 閉会

ポスターセッション (*は学生発表)

- [P01] 小林政弘 (核融合科学研究所)
UVSOR-IIIにおける真空紫外光を用いた光電離プラズマ生成実験
- [P02*] 浅井佑哉 (広島大学)
UVSOR-IIIにおける単一電子蓄積実験の現状 2024
- [P03*] 鴨志田 梢 (山形大学)
原子空孔をプローブして解き明かす Bi 系リラクサー強誘電体中の A サイト秩序
- [P04] 松尾光一 (広島大学)
生体分子と紫外光渦との相互作用観測に向けた実験・理論研究

- [P05*] 隅 琢磨 (山形大学)
光電子ホログラフィーとガンマ線誘起陽電子消滅寿命分光によって調べた Mg_2Sn 結晶のアンチモン添加効果
- [P06] 金安達夫 (九州シンクロトロン光研究センター)
ヘリウム原子のゼーマン量子ビートによる極紫外偏光測定
- [P07] 高口博志 (広島大学)
光電子円二色性による電子キラリティの研究
- [P08] 岩山洋士 (分子科学研究所)
共鳴軟X線散乱法によるソフトマターのメゾスコピック構造解析の開発
- [P09*] 山田泰成 (東京理科大学)
ルブレ単結晶上ルブレ誘導体薄膜の電子構造測定
- [P10*] 小野裕太郎 (筑波大学)
DPh-BTBT の 1 次元構造における HOMO と HOMO-1 の軌道混成
- [P11] 彦坂泰正 (富山大学)
Xe の 4d 二重空孔状態からの Collective Auger Decay
- [P12*] 藤本一志 (名古屋大学)
フェナントロリン誘電体と Co ナノ島による有機-無機界面磁気結合
- [P13*] 小野広喜 (名古屋大学)
Contribution of Co ions in CoPc to the Magnetic Properties of Pcs/ γ -Fe₄N Organic-Inorganic Hybrid Thin Films
- [P14*] 岩井敦志 (名古屋大学)
Cu(001) 単結晶基板上に成長した窒化コバルト単原子層の構造と電子・磁気状態
- [P15*] 岡村尚弥 (名古屋大学)
Cu(001) 単結晶基板上の Ni 薄膜の構造と電子・磁気状態の膜厚依存性
- [P16*] 山口絃佳 (大阪大学)
単原子層表面合金 $CeCu_x/Cu(111)-(2 \times 2)$ における二次元重い電子状態
- [P17*] Yogendra KUMAR (広島大学)
Observation of Topological Surface States in Superconducting Type-2 Dirac Semimetal PdSeTe
- [P18*] 後藤大輝 (豊田工業大学)
重い電子系における熱電特性の起源: ARPES による研究
- [P19*] 河野健人 (名古屋大学)
MoAlB の偏光依存角度分解光電子分光
- [P20*] 山口 広 (広島大学)
電子ドープ系銅酸化物高温超伝導体における量子電荷揺らぎが創発する電子状態の包括的研究
- [P21] 福谷圭祐 (分子科学研究所)
角度分解光電子円二色性によるカイラル結晶の対掌体識別
- [P22*] 西上莉楓 (東北大学)
バルクおよび単層 $TiSe_2$ の電子状態: 高分解能 ARPES
- [P23] 田中 慎一郎 (大阪大学)
VR 機器による 3 次元電子状態の表示
- [P24*] 橋本恵里 (青山学院大学)
光電子運動量顕微鏡を用いた Ir(111) 単結晶薄膜のドメイン構造のイメージング
- [P25*] 森田雄晴 (東北大学)
空間反転対称性の破れた物質 $PtBi_2$ におけるラシュバ分裂およびワイル分散の観測
- [P26] 長谷川友里 (筑波大学)
電子ドープされた MoS_2 のバンド構造
- [P27*] 秋山亮介 (東京科学大学)
交替磁性体 $MnTe$ 薄膜の電子状態と磁化特性およびそれらの終端面依存性
- [P28*] 増田圭亮 (名古屋大学)
ガーネット型固体電解質 $Li_{6.5}La_3Zr_{1.5}Ta_{0.5}O_{12}$ バルク単結晶の角度分解光電子分光
- [P29*] 田崎智也 (東京理科大学)
溶液プロセスで作製した高移動度有機半導体結晶の価電子バンド分散の実測
- [P30*] 市川 龍 (大阪大学)
単原子層 Yb/Si(111) の作製と電子状態観測
- [P31*] 西道広海 (東京科学大学)
Si(111)($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Sn 表面の電子状態の基板依存性
- [P32*] 西田拓磨 (東京大学)
角度分解光電子分光によるノーダルライン半金属 $KAlGe$ の電子状態の観測
- [P33*] 鈴木崇人 (東北大学)
1T-TaS₂ の電子構造に対する一軸圧力効果: マイクロ ARPES
- [P34*] 馬場雄也 (東京理科大学)
溶液成長したペンタセン誘導体結晶の赤外吸収分光
- [P35*] 西原快人 (大阪大学)
時間分解低速電子エネルギー損失分光装置の開発
- [P36] 大門 寛 (分子科学研究所)
原子ホログラフィー顕微鏡の開発

3-2 国際交流, 国際共同研究, 研究会

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	2024.11.13	2029.11.12
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	2022. 6.21	2025. 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	2023. 8.22	2028. 8.21
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. 4. 1	2026. 3.31
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	2024. 6. 1	2027. 5.31
廈門大学固体表面物理化学国家重点実験室	中国	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	2022. 3.23	2026. 3.22
韓国化学会物理化学ディビジョン	韓国	自然科学研究機構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	2022. 9.28	2026. 9.27
中央研究院原子と分子科学研究所	台湾	自然科学研究機構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)	2023. 1.12	2026. 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	2023. 6. 1	2028. 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	2022.10.30	2027.10.29
インド工科大学キャンブル校	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キャンブ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	2024. 4. 1	2028. 3.31
中国国家留学基金管理委員会	中国	自然科学研究機構分子科学研究所と中国国家留学基金管理委員会との研究協力および留学生支援に向けた協定	分子研と中国の大学/研究機関間の研究協力の構築	2023. 1. 4	2028. 1. 3

総合研究大学院大学提携校

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
チュラロンコーン大学理学部	タイ	・ Memorandum on Student Exchange between Faculty of Science, Chulalongkorn University and School of Physical Sciences, the Graduate University for Advanced Studies ・ Agreement on Academic Exchange between Faculty of Science, Chulalongkorn University and School of Physical Sciences, the Graduate University for Advanced Studies	学生交流	2010. 4. 1	2027.10.24
カセサート大学理学部	タイ	・ Memorandum on Student Exchange between School of Physical Sciences, the Graduate University for Advanced Studies, Sokendai and Faculty of Science, Kasetsart University ・ Agreement on Academic Exchange between School of Physical Sciences, the Graduate University for Advanced Studies, Sokendai and Faculty of Science, Kasetsart University	学生交流	2011. 3.29	2026. 3.28
マラヤ大学理学部	マレーシア	・ Memorandum of Understanding between Sokendai (the Graduate University for Advanced Studies), Japan and University of Malaya, Malaysia ・ Student Exchange Programme Agreement between Sokendai (the Graduate University for Advanced Studies), Japan and University of Malaya, Malaysia	学生交流	2014. 3.24	2030. 3.14
ヴィダヤシリメディー科学技術大学院大学	タイ	・ Memorandum of Understanding between Vidyasirimedhi Institute of Science and Technology and the Graduate University for Advanced Studies, Sokendai ・ Agreement on a Double Degree Program between the Graduate University for Advanced Studies, Sokendai and Vidyasirimedhi Institute of Science and Technology	ダブルディグリープログラム	2018. 9. 5	2028.10.10
イエナ大学固体物理学研究所	ドイツ	・ Memorandum of Understanding between Graduate Institute for Advanced Studies, Sokendai and Friedrich Schiller University Jena Institute of Solid State Physics ・ Agreement on Academic Cooperation and Exchange between Graduate Institute for Advanced Studies, Sokendai	学術協力・交流	2020. 7.17	2028. 7.16
チェンマイ大学理学部	タイ	・ Memorandum of Understanding on Student/Staff Exchange between Graduate Institute for Advanced Studies the Graduate University for Advanced Studies, Sokendai and Faculty of Science Chiang Mai University	学生交流	2025. 2.26	2030. 2.25

表2 外国人研究者数の推移 (単位：人)

中期計画区分	第4期				
	2022	2023	2024	計	
外国人研究職員（客員）	1	1	1	3	
日本学術振興会外国人招へい研究者	2	0	1	3	
日本学術振興会外国人特別研究員	1	1	0	2	
国際協力研究員	長期	18	28	30	76
	短期	24	37	76	137
研究会参加者（オンライン参加者含）	12	31	4	47	
招へい研究員等	17	38	24	79	
合計	75	136	136	347	

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			
	2022	2023	2024	計
フランス	19	21	21	61
ドイツ	6	10	7	23
イギリス	3	2	4	9
スウェーデン	7	7	8	22
スイス	3	1	5	9
アメリカ	9	6	9	24
中国	2	9	36	47
韓国	0	2	29	31
台湾	8	22	13	43
タイ	3	23	17	43
インド	6	4	6	16
その他*	5	7	9	21
合計	71	114	164	349

* その他に含まれる国は、オランダ、クロアチア、スペイン、ノルウェー、フィンランド、ルーマニア、カナダ、マレーシア、シンガポール

表4 海外からの研究者（2024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在開催されており、分子研研究会の新たな可能性を切り拓きつつある。

しかしながらコロナ禍において対面での岡崎コンファレンスの開催が滞る中で、特定の課題に関して意見・情報を交換し合い各自の個々の研究のみならず分野や領域の方向を語り合い、また新たな共同研究の萌芽を見出す上では、やはり研究者が対面にて胸襟を開いて交流することの意義が改めて見直されてきた。そのため 2023 年に新型コロナウイルス感染症が 5 類感染症に移行認定されたことを受け 2024 年度には次なる岡崎コンファレンス（あるいは類似した国際研究集会）の開催を模索する動きが活性化してきつつあり、実際に 2025 年度での開催申請が提出されている。今後は従来型の対面での開催形式の復活、それにくわえて研究会開催形式の変化にも柔軟に対応し after-corona における「岡崎コンファレンス」を始めとする国際研究集会の益々の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へい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、時に流行した中東呼吸器症候群（MERS）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 月に名古屋ににおいて新学術領域研究「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。第 18 回は 2021 年に釜山において開催予定であったが、2020 年初頭からの新型コロナウイルス感染症（COVID-19）の世界的流行のため、延期せざるを得なくなった。2023 年には世界的流行も落ち着き、前回開催から 5 年が経過した 2024 年 6 月に第 18 回シンポジウム“Cutting-Edge Molecular Sciences from Elementary to Complex Systems”を釜山において開催することができた。次回の第 19 回は、2026 年に日本において開催が予定されている。今後も日韓両国の研究者による活発な学術交流が進むことが期待される。

一方で、1984 年に本シンポジウムが開始されて既に 40 年が経過した。分子科学を取り巻く学術の潮目も変わり、また第 16 回および第 18 回は感染症の世界的流行の大混乱にも見舞われた。今後どのように日韓シンポジウムを組織、開催していくべきかを再考する時期に来ている。

開催一覧

回	開催年月	主テーマ	開催場所
1	1984 年 5 月	理論化学	分子科学研究所
2	1986 年 5 月	NA	ソウル（韓国）
3	1988 年 6 月	化学反応	分子科学研究所

4	1991年3月	凝縮系の分子科学	ソウル（韓国）
5	1993年1月	分子及び分子集合体の動的過程	分子科学研究所
6	1995年2月	Molecular Science on Solid and Solid Surface	テジョン（韓国）
7	1997年1月	Molecular Spectroscopy of Clusters and Related Compounds	分子科学研究所
8	1999年1月	Molecular Spectroscopy and Theoretical Chemistry	テジョン（韓国）
9	2001年1月	気相，凝縮相および生体系の光化学過程：実験と理論の協力的展開	分子科学研究所
10	2003年1月	理論化学と計算化学：分子の構造，性質，設計	浦項工科大学（韓国）
11	2005年3月	分子科学の最前線	分子科学研究所
12	2007年7月	光分子科学の最前線	済州島（韓国）
13	2009年7月	物質分子科学・生命分子科学における化学ダイナミクス	淡路島
14	2011年7月	New Visions for Spectroscopy & Computation: Temporal and Spatial Adventures of Molecular Science	釜山（韓国）
15	2013年7月	Herarchical Structure from Quantum to Functions of Biological System	神戸
16	2017年7月	Frontiers in Molecular Science: Structure, Dynamics, and Function of Molecules and Complexes	釜山（韓国）
17	2019年7月	Advances in Materials and Molecular Sciences	名古屋
18	2024年6月	Cutting-Edge Molecular Sciences from Elementary to Complex Systems	釜山（韓国）

3-2-4 国際共同研究事業の財源

(1) 自然科学研究機構「国際研究交流支援事業」

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。

分子科学研究所として以下の2事業が採択。

①「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（2024）」

アジアの研究機関等との間で、若手研究者（ポスドク・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。2024年度も、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「欧州の学術協定相手機関を中心とした国際共同加速事業（2024）」

重点的に選定した欧州の先端的研究教育機関と学術協定を締結することで、優れた外国人研究者を招聘し国際共同研究・共同利用を促進する。また、短期および中期の若手研究者・大学院生をインターンで受入れることで国際共同研究の促進のみならず、将来の中核を担い世界の第一線で活躍できる若手研究者を育成する。

(2) 自然科学研究機構「ネットワーク型研究加速事業」

自然科学分野において、国内外の大学や研究機関との幅広い連携による共同研究を推進し、異分野連携による新たな学

問分野の開拓や、自然現象シミュレーションや新技術の開発を生かした創造的研究活動を推進する、国際的にも評価される機関間連携ネットワークを構築し、分野融合型や国際的共同利用・共同研究拠点を形成することを目的とする。

【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（2024）」が採択。

欧米との国際共同研究と、IMS-IIP（Institute for Molecular Science International Internship Program）事業、共同研究等を支援。

(3) 分子科学研究所経常経費

以上の(1)と(2)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シップ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。

3-2-5 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、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。国外機関から来日している場合、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（短期滞在者も含めた総数）。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年度から新型コロナウイルスによる入国制限が緩和したため2022年度は20名、2023年度は28名、2024年度は30名の受入れが可能となった。（2022年度からは中長期滞在者のみカウント）

3-2-6 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・チェンマイ大学・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へいしている。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。

3-2-7 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、国外の研究者が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。

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が再開し、その実績は12件、2023年度は14件、2024年度は19件であった。

3-2-8 分子研コロキウム

分子研コロキウムは、所長をはじめ、所内の教授、准教授、研究者が集い、各人の専門分野を越えて学問的な刺激を享受することを趣旨とする、本年度で987回を数える歴史あるセミナーである。

分子研コロキウムの講演者は、各領域から1名の推薦と、ホストとなる各教員からの推薦を募り、年間を通し開催している。各領域からの推薦は、部門の垣根を越えて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招き、最先端の話題を提供していただくことを主な狙いとしている。

上記の開催要領に基づき、2024年度は全9回10名のコロキウムを、全て対面形式で開催した。分子研に関連する研究分野における国内外の著名な研究者から、最新の研究成果が紹介された。各回、多くの聴講者が集まり、活発な議論が交わされるなど、非常に盛況であった。全開催中、1件はオンラインを併用したハイブリッド形式として開催し、所外の参加者も多数議論に加わった。これはコロナ禍を経て生まれた新たなコロキウムの形態であり、引き続き、コロキウムが所内外の研究者を広く巻き込んだ活発な「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、2024年度に行われた分子研コロキウム一覧を示す。

回	開催日	テーマ	講演者	参加人数 (うち外国人)
979	2024. 4. 1	量子の時代における材料化学者の挑戦	楊井 伸浩 (九州大学大学院工学研究院 准教授)	27 (0)
980	2024. 5.23	分子科学研究における人工知能	Prof. Deva U. Priyakumar (国際情報工学研究所, ハイ ドラバード)	18 (5)
981	2024. 6.18	統合分子構造解析拠点「FS CREATION」 における産学連携による研究と教育	佐藤 宗太 (東京大学大学院工学系研究 科特任教授)	20 (0)
982	2024. 7.18	Insights into the Microenvironment of Catalysis: Water Oxidation and Selective C–H Bond Functionalization	Prof. Djamaladdin G. Musaev (Emory University)	17 (6)
983	2024. 8. 6	初期の誤り耐性量子コンピュータの実現 に向けて	藤井 啓祐 (大阪大学院工学研究科教授)	36 (12)
984	2024.10. 4	生体分子機械内のエネルギーと情報の流 れを可視化する	鳥谷部 祥一 (東北大学大学院工学研究科 教授)	21 (0)
985-1	2021.11.11	Ultrafast Dynamics in Photochemically Driven Molecular Rotary Motors	Prof. Stephen Meech (University of East Anglia)	30 (5)
985-2	2024.11.11	Excited State Dynamics in Various π -Conjugated Molecular Systems	Prof. Dongho Kim (Yonsei University)	30 (5)
986	2024.11.18 (ハイブリッド)	Quantum Systems Engineering	Prof. John Martinis (カリフォルニア大学サンタ バーバラ校 / Qolab 社 CTO)	36 (14)
987	2024.11.29	光電子ホログラフィによるドーパントと 界面欠陥の立体原子配列の観測	松下 智裕 (奈良先端科学技術大学院大 学教授)	17 (0)

3-3 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。

3-3-2 「光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP」事業

3-3-3 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」

3-3-4 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

3-3-5 文科省「マテリアル先端リサーチインフラ」

3-3-6 ネットワーク型研究加速事業（自然科学研究機構）

3-3-1 共創戦略統括本部（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。2023年度に、機構に共創戦略統括本部が設置され、新分野創成センターの機能はここに統合されることとなった。それに伴い、先端光科学研究分野も共創戦略統括本部の一分野となることとなった。また、従前機構の研究力強化推進本部で国際連携研究活動を推進していたアストロフュージョンプラズマ物理研究分野、定量・イメージング生物学研究分野も、共創戦略統括本部の一部となった。プラズマバイオ研究分野は2022年度までに終了した。新分野探索室は新分野探査チームとして、従前の活動を継続することとなった。

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。2024年度は、8件の共同研究（うち4件が機構外からの応募）と2件の研究会を採択し、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。

3-3-2 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200億ドル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1300億ユーロ規模を投資する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500億ユーロを投入した「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、1000億ユーロ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・主査／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。

3-3-3 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)を務めている。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。この他、Sylvain de LÉSÉLEUC 特任准教授、富田隆文助教、平等拓範特任教授が、課題推進者として、同事業に寄与している。

3-3-4 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78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710に上っている。参画機関の外部公開機器の登録台数は、1,254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3,125台であり、登録ユーザー数は約20,000名に達している（数値は2025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5,000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。

2024年度は第4期中期計画の3年目にあたるが、引き続き、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、2022年度からも機構本部の研究大学コンソーシアム（RUC）事業においても運営マネージャー人件費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
2023	185,837	1,112	1,097	3,264	5,473
2024	194,356	1,120	1,185	3,559	5,864

表2 2024年度加速事業課題一覧

大学	部署	代表者	職名	課題名
宇都宮大学	機器分析センター	松本 太輝	准教授	原子吸光分析装置 contrAA300 共用化に伴う移設作業
千葉大学	共用機器センター	榊 飛雄真	准教授	質量分析装置のイオン源クリーニングおよびオートサンプラー更新
千葉大学	共用機器センター	榊 飛雄真	准教授	溶液 NMR の自動測定環境整備
東京農工大学	学術研究支援総合センター	野口 恵一	教授	透過電子顕微鏡の安定稼働のための修繕
東京農工大学	学術研究支援総合センター	野口 恵一	教授	TOF 型質量分析装置の総合メンテナンスによる装置性能の復活
山梨大学	工学部附属ものづくり教育実践センター	河村隆之介	技術職員	SEM-EBSD 装置の作業効率向上と、利用する上での安全性向上のための整備
奈良先端科学技術大学院大学	マテリアル研究プラットフォームセンター	浦岡 行治	教授	共同利用者の利用促進、および利便性向上のための表面ダイナミクス解析原子間力顕微鏡への倒立顕微鏡の設置
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	大学院基礎工学研究科	新谷 亮	教授	質量分析装置の安定稼働のための修繕
鳥取大学	技術部	松井 陸哉	技術職員	蛍光X線分析装置の移設・点検・調整による学内外への共用促進
岡山大学	研究推進機構	堀金 和正	サイテックコーディネーター	液体ヘリウム再凝縮装置付き磁化測定装置の共同利用体制の構築
広島大学	技術センター	前田 誠	技術員	透過型電子顕微鏡のオーバーホールによる装置の良好な稼働状態維持
広島大学	技術センター	前田 誠	技術員	FE-SEM(S-5200) 安定稼働のための統合的オーバーホール
広島大学	デジタルものづくり教育研究センター	中谷都志美	特任助教	示差走査熱量計 (DSC) のヒートシンク部品の整備
愛媛大学	学術支援センター 物質科学研究支援部門	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
長崎大学	研究開発推進機構 設備共同利用部門	真木 俊英	部門長・ 准教授	元素分析装置ディスプレイ修理事業
鹿児島大学	先端科学研究推進センター	澤田 剛	准教授	高速X線回折、電子線マイクロアナライザの整備事業

表3 2024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—質量分析基礎概論—	質量分析技術者研究会	4月12日	51
技術職員のための英語研修 交流会, ovice 体験会	英語研修 WG	5月1日	19
XPS 講習会	XPS コミュニティー	5月10日	90
分析装置総覧講習会	分子研	5月22日	85
異分野技術交流セミナー バイオ AFM によるナノ生命科学	分子研	5月28日	68
技術職員のための英語研修 1～自分の仕事を英語で紹介しよう～	英語研修 WG	5月30日 5月31日	13
質量分析講習会 マススペクトル解析演習	質量分析技術者研究会	6月21日	19
異分野技術交流セミナー 生命の神秘を暴く：天然物化学と質量分析イメージングの挑戦	分子研	6月28日	62
クリーンルーム維持・管理情報交換会	分子研	7月12日	43
異分野技術交流セミナー 定量 NMR：生薬及び医薬品の評価への応用	分子研	7月23日	54
DOSY-NMR 測定研修（上級）	NMR Club	7月25日 7月26日	39
質量分析中級講習会 LC-ESI-MS 講習会	質量分析技術者研究会	7月26日	29
走査型プローブ顕微鏡初歩講習会	分子研	7月26日	41
Python を用いたケモメトリックス演習講習会 II	分子研	8月2日	9
EPMA 実技講習会	分子研	8月9日	30
技術職員のための英語研修～交流会・夏～	英語研修 WG	8月26日	11
SEM による微生物観察のための前処理手法の比較	電子顕微鏡技術情報交流会	8月27日	4
異分野技術交流セミナー 機械学習の材料開発への応用	分子研	8月30日	74
NMR & MS “相互” 活用講習会—第2弾—	NMR Club 質量分析技術者研究会	9月4日	18
XPS 技術情報交換会	XPS コミュニティー	9月6日	11
技術系・英語研修	英語研修 WG	9月12日	12
異分野技術交流セミナー NMR × 計算化学	分子研	10月25日	88
NMR メーカー技術紹介セミナー	NMR Club	10月29日	10
技術系職員のためのやさしい日本語研修①	英語研修 WG	11月20日	35
SEM の試料前処理講習会	電子顕微鏡技術情報交流会	11月25日	47
UPS 実地講習会	XPS コミュニティー	11月28日 11月29日	3
異分野技術交流セミナー 創薬ケミカルバイオロジーの最先端へ	分子研	11月29日	52
単結晶カット&マウント実習	奈良先端大	11月29日	3
技術系職員のためのやさしい日本語研修②	英語研修 WG	12月5日	38
質量分析講習会 サンプルを解析してみよう	質量分析技術者研究会	12月6日	25
薄膜X線回折研修	大阪大	12月23日	27
第2回オンライン研修会	電子顕微鏡技術情報交流会	2月4日	44
MS スペクトル講習会 3	質量分析技術者研究会	2月7日	15
ラマン分光実技講習	静岡大学	2月13日	49
技術系職員のためのやさしい日本語研修	英語研修 WG	2月19日	5
真空技術セミナー	分子研	3月7日	52
NMR 構造解析講習会	NMR Club	3月14日	27

3-3-5 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って運営体制を構築した。「マテリアル高度循環」領域はハブ機関・物質材料研究機構のもと、名古屋工業大学、電気通信大学とチームを構成し、4機関が有する種々の先端機器の共用を通じて、代替材料や再生材料由来の物質合成、材料削減に資する触媒反応の可視化などマテリアル循環に関わる支援をするとともに、創出されたデータを効率よく収集・蓄積・構造化し、その利活用を図ることで、サステイナブルなマテリアルのデータ駆動型研究開発に貢献する。

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、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、2022年度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なされ、2024年度から稼働を開始した。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2024年度の支援装置・プログラム一覧、表2には2024年度の採択課題一覧、表3には2024年度採択・実施件数日数（2024年4月1日～2025年3月31日実施分）、表4には2024年度合成横断領域活動一覧、表5には2024年度異分野技術交流セミナー開催実績（大学連携研究設備ネットワーク事業と共催）を示した。

表1 2024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 倉橋直也特任助教 前島尚行特任助教 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ブースは、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), スピンコーター (ミカサ社製 MS-A100)]	山本浩史室長 近藤聖彦主任技師 高田紀子主任技術員 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>山本浩史室長 近藤聖彦主任技師 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 高田紀子主任技術員 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>
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 平野佳穂技術員 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 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 賣市幹大技術員 平野佳穂技術員</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 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>
電子線プローブマイクロアナライザー (EPMA)	<p>50 eV までの低エネルギーを測定できる軟 X 線分光器 (SXES) を搭載した電子プローブマイクロアナライザ (EPMA)。</p> <p>[JEOL_JXA-8230, SS-94000SXES]</p>	<p>横山利彦センター長 平野佳穂技術員</p>	<p>機器センター 機器センター</p>
単結晶 X 線回折	<p>極低温 (80 K) からの測定が可能。高輝度 X 線源 (PhotonJet-R/DW: 出力 1.2 kW) と、高速読み出し HPC 検出器 (HyPix-6000) の組み合わせで、超高速・超高精度測定が可能。</p> <p>[Rigaku_XtaLAB Synergy-R/DW]</p> <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、CCD-1、-2に比べ、約10倍の高輝度X線ビームが得られ、測定が難しかった微小結晶でも測定が可能。ビーム径は $\phi 0.1\sim 0.2$ mmで、コリメータはバックグラウンド低減のためビーム径よりやや大きめの0.3mmのものが取付。 低温測定：ガス吹き付け型の冷却装置で、到達温度はN ₂ ガスモードで100 K、Heガスモードで24 K（実測）。到達時間は、N ₂ で240分、Heで150分かかる。運転モードの切り替えは、HeからN ₂ には迅速に切り替え可能だが、N ₂ からHeの場合は、冷凍機を一旦室温に戻す必要。 [Rigaku_HyPix-AFC]	横山利彦センター長 岡野芳則技術員	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, 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 佐藤宗太特任教授	特別研究部門 機器センター 特別研究部門 三井 柏の葉
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 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
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
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 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
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 石山 修特任研究員 伊木志成子特任専門員 平野佳穂技術員	機器センター 機器センター 機器センター 機器センター
電子スピン共鳴 (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 浅田瑞枝主任技術員 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 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, 不対電子 (電子スピン) をプローブとした分光装置。静磁場中に置かれた電子スピンはエネルギー準位が分裂し, 一定のマイクロ波を加えながら静磁場を掃引すると, このエネルギー差に相当する磁場で共鳴が起こる。この共鳴磁場や吸収強度などの観測から, 電子スピンを持つ原子や分子の量, 構造, 電子状態などに関する情報が得られる。ESR 装置は, 有機ラジカルや遷移金属などを含む物質の物性研究の他にも, 放射線や酸化などにより不対電子が生じた岩石や食品の評価, 触媒や重合反応などのプロセス追跡にも利用。 [Bruker_EMX Plus, E500] 電子スピン共鳴 (ESR) は, 不対電子を直接観測する分光法。ラジカル分子や遷移金属イオンなどの電子状態や電子軌道・化学反応・分子構造・光励起状態を調べることが可能。通常の測定法である定常法に加えて, パルス法では電子スピンの緩和時間を調べることも可能。申請の際は, 実施計画に利用希望装置を明記下さい。Bruker 社製 E580 では, 通常の X-band CW-ESR 以外にも, パルス測定が可能。 [Bruker_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
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] SQUID 型磁化測定装置 (Quantum Design 社製 MPMS-3) により, 高感度磁化測定が可能。DC 測定に加え, AC 測定, 超低磁場, 電気抵抗測定, 高温測定 (315 ~ 1000 K) が利用可能。従来の装置に比べて短時間で目的の温度, 磁場に到達が可能。 [Quantum Design_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, PEAQ-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 内田真理子技術支援員	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 Quantaurus-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 内田真理子技術支援員	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
^1H 600MHz 固体（高磁場 NMR）	600MHz 固体 NMR による蛋白などの生体分子、有機材料、天然物などの精密構造解析支援。 ^1H - ^{13}C - ^{15}N 三重共鳴実験まで対応。 [Bruker_AVANCE600]	横山利彦センター長 西村勝之准教授	機器センター 物質分子科学
^1H 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, JEOL JNM-ECZL600G]	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。 [超高真空下での磁性薄膜作成・磁気光学 Kerr 効果によるその場観察評価。紫外レーザー磁気円二色性光電子顕微鏡も利用可]	横山利彦教授	物質分子科学
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 2024 年度 (令和 6 年度) 採択課題一覧 分子科学研究所担当分 (2025 年 3 月 31 日現在)

(1) 協力研究

課 題 名	支援機器等	代 表 者
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
分子系量子ビットの評価	E680	東京大学大学院理学系研究科 楊井 伸浩
界面選択的な軟 X 線吸収分光法を用いるイオン液体の電極界面におけるイオン層構造の解析	機器センター長協力研究	京都大学大学院工学研究科 西 直哉
大規模量子化学計算による二次元層状物質のモアレポテンシャルの評価	量子計算	神戸大学大学院理学研究科 内野 隆司
液体-氷界面のナノ力学計測	走査プローブ	神戸大学大学院理学研究科 大西 洋
熱的相転移により伸縮する錯体分子結晶の変形特性と弾性率の関係評価	走査プローブ	岐阜大学教育学部 萩原 宏明
一次元らせんペロブスカイト薄膜デバイスの作製とスピン偏極現象の検出	有機 FET	早稲田大学先進理工学部 石井あゆみ
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グステン合金の開発	走査プローブ	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
液中レーザーアブレーション法で作製した窒化ホウ素ナノシートの物性評価	走査プローブ	徳島大学ポスト LED フォトニクス研究所 古部 昭広
局所仕事関数測定による二酸化バナジウム金属-絶縁体相転移現象の解明	走査プローブ	大阪大学大学院基礎工学研究科 阿部 真之
一層系銅酸化物超伝導体における電子-電子相互作用及び電子-ボゾン相互作用に由来する自己エネルギーの温度依存性の評価	ARUPS	広島大学放射光科学研究所 出田真一郎
イオン液体/電極界面構造に対する空間分布測定	走査プローブ	名古屋工業大学大学院工学研究科 本林 健太
高性能熱化学電池の開発研究	機器センター長協力研究	関西学院大学工学部 吉川 浩史
Analysis of the Reaction Mechanism at Electrode/Electrolyte in Water-Based Electrolyte	走査プローブ	Faculty of Engineering, Khon Kaen University Sutasinee Neramittagapong
CoFe ₂ O ₄ -BaTiO ₃ コアシェル型磁電ナノ粒子の磁場中 PFM 測定	走査プローブ	北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科 前之園信也
有機系潤滑添加剤による境界潤滑層の形成過程の可視化と摩擦マッピング	走査プローブ	京都工芸繊維大学機械工学系 山下 直輝
テトラド BODIPY 光増感剤の励起三重項状態に関する研究	E680	長崎大学大学院医歯薬学総合研究科 真木 俊英
真空紫外光照射によるアミノ酸薄膜試料の微細構造変化	走査プローブ	核融合科学研究所 小林 政弘
放射光 ARPES に向けた大気敏感な試料の準備	機器センター長協力研究	東京大学物性研究所 近藤 猛
Cr(V) 錯体を基盤とする分子 Qubit の開発	E680	九州大学大学院理学研究院 大場 正昭
第一遷移金属イオン置換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
スピנקロスオーバー金属錯体を用いたスピン量子ビットの開発	E680	熊本大学大学院先端科学研究部 禪野 光
量子ドット-プラズモンハイブリッド構造体のナノスケール評価	走査プローブ	大阪公立大学大学院工学研究科 渋谷 昌弘
π 拡張ペリレンジイミドの自己組織会合体における電子輸送性能評価	走査プローブ	静岡大学工学部 高橋 雅樹
有機合成に貢献する革新的な実験条件最適化機械学習手法の開発	有機合成 DX	静岡大学工学部 武田 和宏
強相関電子系 BEDT-TTF 分子性導体のモット絶縁体転移における歪み効果の解明	有機 FET	名古屋大学大学院工学研究科 伊東 裕
中国からの試料搬送	機器センター長協力研究	Department of Physics, Westlake University Ruihua He

祖先型ヘモグロビンの四次構造解析	SAXS	大阪大学大学院理学研究科	石川 春人
カイラル分子/強磁性金属接合における強磁性共鳴	有機 FET	東京工業大学理学院	山田 貴大
結晶スポンジ法を利用する新規テルベン環化産物の構造解析	結晶スポンジ法	東北大学大学院薬学研究科	浅井 禎吾
トポロジカル半金属を軸とした新規超伝導体の探索	機器センター長協力研究	東北大学材料科学高等研究所	相馬 清吾
コラニユレン骨格を有するジアリールエテンのフォトリソミック反応に関する量子化学計算	量子計算	奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学領域	山田美穂子
真空プロセスで作製した層状酸化ポロフェン薄膜の分光学的研究	機器センター長協力研究	東北大学大学院工学研究科	神永 健一
インクジェット法で作製したペロブスカイト結晶の表面構造と電子状態の解析	走査プローブ	桐蔭横浜大学大学院工学研究科	齋藤 直
高湿環境におけるガラス表面の液膜の構造・物性の解明	走査プローブ	金沢大学理工研究域	荒木 優希
走査プローブ顕微鏡像の情報学的解析による相互作用解析	走査プローブ	京都大学大学院人間・環境学研究所	坪倉 奏太
ヨウ素重合法に基づく高純度な n 型有機半導体ポリマーの創製と電子移動度の評価	有機 FET	東北大学多元物質科学研究所	赤井 亮太
フェロアキシナル物質における非対角輸送現象の開拓	有機 FET	東京大学大学院工学系研究科	永井 隆之
水分子が誘起するカンプトテシン集合体のキラリ電子物性の開拓	有機 FET	大阪大学大学院工学研究科	重光 孟
ニードル型金クラスターの実空間観察と構造解析	走査プローブ	東京大学大学院理学系研究科	高野慎二郎
分子デバイスにむけた分子性スピン液体物質の熱輸送特性に関する研究	有機 FET	大阪大学大学院理学研究科	中澤 康浩
遷移金属錯体によるアルコール類からの触媒的一酸化炭素/水素発生機構の中間体および遷移状態の量子化学計算	量子計算	奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	森本 積

(2) 施設利用

課題名	支援機器等	代表者	
燃料電池材料における光照射下極低温パルス ESR 測定	E680	和歌山大学システム工学部	秋元 郁子
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	E680, E500	和歌山大学システム工学部	秋元 郁子
コロイドカドミウムカルコゲナイド量子ドットの励起子素過程の圧力依存性	TEM, 粉末 X 線, ラマン, 紫外可視近赤外, 量子収率, TG-DTA/DSC, 蛍光分光	関西学院大学理工学部	江口 大地
希土類および遷移金属で置換したゼオライト粒子の磁場配向挙動の解明	MPMS-7, XL7, MPMS	熊本大学大学院先端科学研究部	松田 元秀
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 5	TEM	関西学院大学生命環境学部	増尾 貞弘
フッ素含有複合アニオン正極の磁性	MPMS-7, XL7, MPMS3	京都大学大学院人間・環境学研究所	高見 剛
安定な有機中性 π ラジカルの電子スピン構造・物性の解明	EMX, E500, E580	愛知工業大学工学部	村田 剛志
スピン依存的な光化学特性を示す開殻電子系の創製	微小結晶, EMX, TG-DTA/DSC	京都大学大学院工学研究科	清水 大貴
バナジウム酸化物薄膜表面の単結晶 X 線回折測定	オペランド, ラマン	大阪大学大学院基礎工学研究科	金 庚民
Chemodenitrification の検討	EMX, E500, 600NMR 溶液	愛知県環境局環境調査センター	野田 一平
ペプチド配位結合金属イオンの運動性と構造分布	EMX, E500, PEAQ-ITC, iTC200, 円二色性, E580	京都府立大学大学院生命環境科学研究科	織田 昌幸
T 細胞活性化シグナル伝達タンパク質の制御機構解析	PEAQ-ITC, iTC200, 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
合金触媒粒子を用いた単層カーボンナノチューブ成長	TEM	名城大学理工学部	丸山 隆浩
Sn/Ni/Sn 三層膜の電気伝導特性, Fe-ZnO ナノロッドの磁気的性質の解明	MPMS-7, XL7, MPMS3, TEM	岐阜大学工学部	嶋 睦宏
特異な磁気特性を発現する逆ペロブスカイト型マンガニ基窒化物に関する研究	MPMS-7, XL7, MPMS3	静岡大学学術院工学領域	川口 昂彦
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	名古屋大学大学院理学研究科	三野 広幸
超伝導体ナノ微粒子分散複合化合物の超伝導近接効果	EMX, E500, E580, MPMS-7, XL7, MPMS3, ラマン, 量子収率	神戸大学大学院理学研究科	内野 隆司
常磁性異種金属一次元鎖錯体および混合原子価集積体の構造と磁気物性	CCD-1, CCD-2, 微小結晶, シナジー, EMX, E500, E580, MPMS-7, XL7, MPMS3	岐阜大学工学部	植村 一広

有機配位子修飾複合酸化触媒、及び複合金属電極触媒の表面構造解析	ESCA, ラマン	名古屋大学大学院理学研究科	邨次 智
錯体分子の幾何異性に伴う集積構造変化とスピン転移、及びサーモサリエント効果への影響	オペランド, シナジー, MPMS-7, XL7, MPMS3, TG-DTA/DSC	岐阜大学教育学部	萩原 宏明
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	高知大学教育研究部	上田 忠治
阻害剤の配列制御のためのポリロタキサン合成と構造解析	MALDI	芝浦工業大学工学部	幡野 明彦
新奇磁性半導体 PbPdO ₂ の結晶構造解析	CCD-1, CCD-2, 微小結晶	名古屋大学大学院理学研究科	中埜 彰俊
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, VP-DSC, 蛍光分光, 紫外可視近赤外, 量子収率, ピコ秒, EMX	広島大学持続可能性に寄与するキラルノット超物質国際研究所	岡 芳美
電子スピン共鳴法による金属酵素, スピンラベル酵素の構造学的研究	E680, EMX, E500, E580, 円二色性	佐賀大学農学部	堀谷 正樹
強い水素結合鎖を有する分子性伝導体 (ImH)[HEDT-TTF-dc] ₂ の物性研究	MPMS-7, XL7, MPMS3	日本大学文理学部	周 彪
常温常圧で窒素固定可能な高原子価窒素固定触媒の開発	CCD-1, CCD-2, 微小結晶, MPMS-7, XL7, 600NMR 溶液	愛知工業大学工学部	梶田 裕二
先端電子スピン共鳴法を用いた酵素ダイナミクスの実測	E680, EMX, E500, E580	鹿児島大学大学院連合農学研究科	矢埜 紅音
近赤外光領域から赤外光領域の光を吸収する有機半導体の合成とその分子構造解明	CCD-1, CCD-2, 微小結晶	静岡大学大学院工学領域	植田 一正
磁性ナノ複合材料を用いた新規磁気光学材料の作製と評価	MPMS-7, XL7, MPMS3	静岡大学工学部	中嶋 聖介
金属酵素モデル錯体の構造および電子構造の研究	CCD-1, CCD-2, 微小結晶, EMX, E500, E580, 紫外可視近赤外, 600NMR 溶液, NMR 溶液 600G	奈良女子大学大学院自然科学系	藤井 浩
開殻分子性物質の創製と構造-物性-電子状態相関の解明	微小結晶, EMX, E500, E580, MPMS-7, XL7, MPMS3, TG-DTA/DSC, MALDI, ラマン, FT, 蛍光分光, 紫外可視近赤外, 円二色性	大阪大学大学院基礎工学研究科	草本 哲郎
酸素酸化を利用した含酸素複素環化合物の修飾反応の開発	600NMR 溶液, NMR 溶液 600G, MALDI	浜松医科大学医学部	黒野 暢仁
Zn _{1-x} Mg _x Fe ₂ O ₄ フェライトの強磁性に関する研究	E500, MPMS-7, XL7, MPMS3, E580	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
エネルギー変換発光物質の励起状態研究	E680, 蛍光分光, 紫外可視近赤外, 量子収率, ピコ秒	北海道教育大学(釧路校)教育学部	松岡 秀人
呼吸挙動を示す柔軟な多孔性有機金属骨格のX線構造解析と磁化率測定	CCD-1, CCD-2, 微小結晶, オペランド, シナジー, MPMS3, TG-DTA/DSC	島根大学大学院総合理工学研究科	片岡 祐介
非対称二座配位子を用いたランタノイド(III)錯体の磁気的性質	CCD-1, CCD-2, 微小結晶, オペランド, シナジー, EMX, E500, E580, MPMS-7, XL7, MPMS3, VP-DSC, TG-DTA/DSC	金沢大学国際基幹教育院	三橋 了爾
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
中空金属錯体へ包接されたタンパク質の分析	MALDI, 円二色性, PEAQ-ITC	東京大学大学院工学系研究科	中間 貴寛
低分子糖誘導体を基本構造とする日本脳炎ウイルス感染阻害剤の開発	600NMR 溶液, NMR 溶液 600G	愛知教育大学自然科学系	中野 博文
スピロ共役を有する分子性導体の物性研究	微小結晶, シナジー, E580, XL7, MPMS3, MPMS-7	愛媛大学大学院理工学研究科	藤崎 真広
圧電性を有する配位高分子磁性錯体の合成と磁気的性質	CCD-1, CCD-2, 粉末X線, MPMS-7, XL7, オペランド	東京海洋大学海洋電子機械工学部門	藤田 渉
カプトムシ外骨格の観察及び元素分析	低 SEM, EPMA	基礎生物学研究所	森田 慎一
カーボンナノチューブの自己組織化過程における配列メカニズムの調査	ラマン, FT, 蛍光分光, 紫外可視近赤外, 円二色性, 低 SEM	早稲田大学理工学術院	安倍 悠朔
特殊なスピン状態の Fe-S クラスタータンパク質の構造-機能相関の解明	EMX, E500, E580, 円二色性	埼玉大学大学院理工学研究科	藤城 貴史

新奇レーザー素子の物性および作製プロセスに関する学術基盤構築	オペランド, TG-DTA/DSC	理化学研究所放射光科学研究センター	平等 拓範
Investigation of Photoinduced Metastable Phases in Molecular Crystal Exhibiting Photoinduced Polarization Switching	微小結晶	Institute for Materials Chemistry and Engineering, Kyushu University	呉 樹旗
液中レーザーアブレーション法で作製した窒化ホウ素ナノシートの顕微ラマン分光	ラマン	徳島大学ポストLEDフォトンクス研究所	古部 昭広
水素発生触媒・光増感剤として機能するフタロシアニン錯体の開発	CCD-1, CCD-2, 微小結晶, シナジー, MPMS-7, XL7, MPMS3, MALDI, 蛍光分光, 紫外可視近赤外, 量子収率	島根大学総合理工学部	矢野 なつみ
有機 π 電子系化合物を成分とする導電性有機材料の構造と物性に関する研究	微小結晶, シナジー, E580, XL7, MPMS3, MPMS-7	愛媛大学大学院理工学研究科	白旗 崇
電子ドーピングされた有機半導体の構造と磁性 2	オペランド, EMX, E500, E580, MPMS-7, XL7, MPMS3	大阪工業大学工学部	平郡 諭
キラルな金属錯体液晶の内部構造解析	オペランド, 紫外可視近赤外	日本大学文理学部	吉田 純
高周波プラズマCVDによる純粋なQ-carbonの形成	ESCA, XL7, ラマン, E580, 蛍光分光, 量子収率, MPMS3	名城大学理工学部	アブラハム ペトロス
低環境負荷ナノマテリアルの物性評価	微小結晶, オペランド, EMX, E500, E580, MPMS-7, XL7, MPMS3, TG-DTA/DSC, MALD, ラマン, FT, 蛍光分光, 紫外可視近赤外, 量子収率, ピコ秒, CCD-2, CCD-1, シナジー	法政大学生命科学部	緒方 啓典
KI結晶中の貴金属ヨウ化物ナノ結晶の透過電子顕微鏡による構造評価	低SEM, TEM	大阪公立大学大学院理学研究科	河相 武利
時間分解ESR法による光機能性金属錯体の励起状態解析	E680, EMX, E500, 紫外可視近赤外	群馬大学大学院理工学府	浅野 素子
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
多環式芳香族化合物の合成に関する研究	微小結晶, シナジー	徳島大学社会産業理工学研究部	八木下 史敏
ポリオキソメタレート骨格として持つ金属錯体の磁気物性	MPMS-7, XL7, MPMS3	日本大学文理学部	石崎 聡晴
Measurements of Physical Properties of Metal Electrode for Water-Based Electrolyte Battery Systems	低SEM, TEM, EPMA, CCD-1, CCD-2, 微小結晶, 粉末X線, オペランド, シナジー, ESCA, 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	Faculty of Engineering, Khon Kaen University	Sutasinee Neramittapong
新規チオラート配位ヘム錯体の分光学的特性探究	EMX, MPMS-7, XL7, FT, 紫外可視近赤外	名古屋市立大学大学院薬学研究科	樋口 恒彦
有機分子の光学活性解析によるホモキラリティ起源の探求	円二色性	核融合科学研究所	小林 政弘
Analysis of the Reaction Mechanism at Electrode/Electrolyte in Water-Based Electrolyte by Scanning Electron Microscopy	低SEM	Faculty of Engineering, Khon Kaen University	Sutasinee Neramittapong
生物の磁気受容候補タンパク質のESR研究	E680, EMX, E500, E580, MPMS-7, XL7, MPMS3	埼玉大学大学院理工学研究科	長嶋 宏樹
新奇な金属反強磁性体における磁気異方性と臨界点の探索	MPMS-7, XL7	名古屋大学大学院工学研究科	浦田 隆広
二酸化炭素還元を指向した銅錯体の合成と構造解析	CCD-1, CCD-2, 微小結晶	名城大学理工学部	永田 央
鉄イオンの輸送と貯蔵に関わるタンパク質の相互作用解析	PEAQ-ITC, iTC200	長崎大学大学院総合生産科学研究科(工学系)	澤井 仁美
アニオン性ホウ素クラスターを利用した新規細胞膜透過法の開発	PEAQ-ITC, iTC200	信州大学先鋭材料研究所	北沢 裕
金属/有機層界面にイオン液体薄膜を挿入した2端子デバイスのデバイス特性評価と動作メカニズムの解明	紫外可視近赤外	北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	江口 敬太郎
多核金属骨格を有する配位高分子錯体の磁化率および熱分析測定	MPMS-7, XL7, MPMS3, TG-DTA/DSC, EMX, E580	島根大学大学院総合理工学研究科	半田 真
新口類に属する無脊椎動物の生殖腺刺激ホルモンの探索と機能解析	MALDI	基礎生物学研究所	大野 薫

高分子材料である C ₃ N ₅ の機構解明と WO ₃ との複合化による光触媒特性向上	蛍光分光, 量子収率, ピコ秒	慶應義塾大学理工学部	伊藤 皇聖
κ 型 BEDT-TTF 塩に対する歪印加下での磁性測定	EMX, E500, E580	名古屋大学大学院工学研究科	伊東 裕
フラビントキニ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反応精査	E680	広島大学持続可能性に寄与するキラルノット超物質国際研究所	岡 芳美
NMR による温度応答性高分子の運動性評価	600NMR 溶液, NMR 溶液 600G	同志社大学理工学部	西村慎之介
アルカリ金属をドーブしたペロブスカイト酸化ナノ粒子の合成と触媒利用	EMX	東京工業大学科学技術創成研究院	相原 健司
金属要求性二次代謝産物合成酵素の反応機構解析	EMX	東京大学大学院薬学系研究科	森 貴裕
種々の形態を有する遷移金属ドーブ酸化チタンの形態観察	TEM	名城大学理工学部	才田 隆広
リン酸ピラゾリウム塩単結晶の高温 X 線構造解析によるプロトン伝導機構の調査	CCD-1, シナジー	東京大学物性研究所	西岡 海人
レドックス活性な配位子を有するロジウム二核錯体の分子構造解析	CCD-1, CCD-2, 微小結晶, シナジー, 600NMR 溶液, NMR 溶液 600G	島根大学大学院総合理工学研究科	片岡 祐介
アドバンスド ESR を用いたフィチン酸 Mn の磁気機能解明	E680, EMX, E500, E580, MPMS-7, XL7, MPMS3	新潟大学研究統括機構	古川 貢
I 族元素の組成を制御した I-III-VI ₂ 族量子ドットの発光特性評価	蛍光分光, 紫外可視近赤外	名古屋工業大学大学院工学研究科	濱中 泰
Ag 錯体の多核 NMR 測定	600NMR 溶液, NMR 溶液 600G	名古屋工業大学技術部	瀧 雅人
Fe を含む酸化物の X 線発光分光	EPMA	物質・材料研究機構エネルギー・環境材料研究センター	伊藤 仁彦
人工結合タンパク質による酵素機能制御法の確立	VP-DSC, PEAQ-DSC, PEAQ-ITC, iTC200, 円二色性	奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	松尾 貴史
芳香環の立体制御配列に基づく新規 π 共役系分子の創製と機能開拓	EMX, E500, E580, MALDI, 円二色性	名古屋市立大学大学院理学研究科	雨夜 徹
生体内鉄動態に関わるタンパク質の相互作用解析	PEAQ-ITC, iTC200	長崎大学大学院総合生産科学研究科 (工学系)	澤井 仁美
酸化物分散強化 (ODS) 合金中ナノ酸化物粒子と α-γ 相界面の相互作用	オペランド	横浜国立大学大学院工学研究院	大野 直子
ドナー・アクセプター型複合機能性物質のメカニズム解明	微小結晶, シナジー, E680, EMX, E500, E580	新潟大学研究統括機構	古川 貢
希土類発光ナノ構造体の新規合成とモルフォロジー観察	低 SEM	名城大学理工学部	西山 桂
植物由来成分を用いたリニアポリマーの合成	MALDI	山梨大学大学院総合研究部教育学域	森長 久豊
開殻性分子の水中集合体の示す温度依存的マクロ構造変化と磁性との関連研究	EMX, E500, E580	東京大学物性研究所	藤野 智子
外部刺激応答性金属錯体の磁気特性解明	MPMS-7, XL7, MPMS3, CCD-1, CCD-2, 微小結晶, シナジー	熊本大学大学院先導機構	関根 良博
チオールを配位させた新規ポルフィリノイド金属錯体の磁気的性質	E500, E580, MPMS-7, XL7, MPMS3	島根大学大学院総合理工学研究科	池上 崇久
好熱性および好塩性紅色光合成細菌 LH1-RC 超分子複合体における耐熱化機構の解明	PEAQ-DSC, PEAQ-ITC, iTC200	神戸大学大学院農学研究科	木村 行宏
物質変換反応を可能とするメタルフリーの光レドックス触媒系の開発	量子収率, ピコ秒	静岡県立大学食品栄養科学部	岡本 衆資
がんの高精度診断のためのラマンプローブ開発	ラマン	金沢大学医薬保健研究域薬学系	淵上 剛志
電子スピン共鳴法による有機半導体単結晶二次元正孔ガスのスピン状態の研究	EMX, E500, E580	東京大学物性研究所	今城 周作
クロマチンタンパク質のヒストン修飾認識能の解析	PEAQ-ITC, iTC200	基礎生物学研究所	片岡 研介
植物由来のクエン酸を用いて合成された金属ナノ粒子観察	TEM	石川工業高等専門学校電気工学科	仲林 裕司
NO ₃ ⁻ アニオンを挿入した MgAl 系層状水酸化物における, 温度を変化させた際の層間距離調査	オペランド	名古屋工業大学大学院工学研究科	園山 範之
インクジェット法で成膜したペロブスカイト結晶のマイクロスケールにおける結晶構造と組成変化の解析	低 SEM, オペランド, ラマン, 蛍光分光, ピコ秒	桐蔭横浜大学大学院工学研究科	齋藤 直
シリコン光共振器の遠赤外分光特性	FT	北海道大学大学院理学研究院	上野 貢生
界面磁気近接効果を利用した Pd 薄膜の電子状態変調 III	XMCD (BL4B)	名古屋大学未来材料・システム研究所	宮町 俊生
有機-無機界面磁気結合による Co ナノ島のスピン再配列転移	XMCD (BL4B)	名古屋大学未来材料・システム研究所	宮町 俊生

フラーレン誘導体 LB 薄膜の表面観察と光電気化学測定 植物の細胞成長を評価するマイクロ流体デバイスの作製 フォトニック結晶ナノ構造を用いた量子情報デバイスの開発 組織・細胞における 3 次元温度イメージングを通して知る 生体物質の熱動態制御 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 アミノ酸薄膜試料表面の形状分布計測 培養型プレーナーパッチクランプ基板の微細加工	3 次元 マスクレス 電子ビーム描画 マスクレス, 電子ビー ム描画, 3 次元 マスクレス	愛知教育大学教育学部 基礎生物学研究所 豊橋技術科学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機械工学科	日野 和之 四方 明格 八井 崇 林 健太郎 神永 真帆
エキシマ VUV 照射された高分子材料表面の ESR 測定 グリシニンおよび β コングリシニンを主とする大豆タン パクの加熱加圧による凝集現象	マスクレス マスクレス, 電子ビーム描画 E580 円二色性	核融合科学研究所 (株) NANORUS ウシオ電機 (株) 三生医薬 (株)	小林 政弘 宇理須恆雄 有本 太郎 平澤 互

(3) 所内利用

課 題 名	支援機器等	代 表 者
周期的 3 次元有機構造体の創製	低 SEM, TEM, EPMA, CCD-1, CCD-2, 微小結晶, 粉末 X 線, オペランド, シナジー, ESCA, E680, EMX, E500, E580, MPMS-7, XL7, MPMS3, VP-DSC, PEAQ-ITC, iTC200, TG-DTA/DSC, 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, NMR 溶液 600G	生命・錯体分子科学研究領域 瀬川 泰知
酸化物微粒子の表面観測と物性・機能測定 金属をスパッタコートした AFM カンチレバ探針の製作と評価	走査プローブ ESCA, ラマン, FT, TEM, 紫外可視近赤外	物質分子科学研究領域 機器センター 佐藤 宏祐 中本 圭一
走査プローブ顕微鏡による機能性ナノ物質の研究 顕微ラマン分光による機能性ナノ物質の研究	走査プローブ ESCA, ラマン, FT, ピコ秒, オペランド, ICP OES	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 熊谷 崇 熊谷 崇
ナノ構造体作製	マスクレス, 電子ビーム描画	メゾスコピック計測研究センター 山西 絢介
界面で起きるエネルギー変換現象の解明 電極構造解析	走査プローブ 低 SEM, TEM, EPMA, CCD-1, CCD-2, 微小結晶, 粉末 X 線, オペランド, シナジー, ESCA, E680, EMX, E500, E580, MPMS-7, XL7, MPMS3, VP-DSC, PEAQ-ITC, iTC200, TG-DTA/DSC, 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, NMR 溶液 600G	機器センター 機器センター 湊 丈俊 湊 丈俊
電極の構造と組成解析 溶液光化学反応の励起ダイナミクスの研究	低 SEM 蛍光分光, 紫外可視近赤外	機器センター 光分子科学研究領域 湊 丈俊 長坂 将成
対称性と結合した量子伝導デバイスの作成	マスクレス, 電子ビーム 描画, 3 次元	協奏分子システム研究センター 佐藤 拓朗

対称性と結合した量子伝導デバイスの評価	低 SEM, TEM, EPMA, CCD-1, CCD-2, 微小結晶, 粉末X線, オペランド, シナジー, ESCA, E680, EMX, E500, E580, MPMS-7, XL7, MPMS3, VP-DSC, PEAQ-ITC, iTC200, TG-DTA/DSC, MALDI, ラマン, FT, 蛍光分光, 紫外可視近赤外, 量子取率, 円二色性, ピコ秒, 600NMR 溶液, NMR 溶液 600G	協奏分子システム研究センター	佐藤 拓朗
対称性と結合した量子伝導デバイスの局所磁気伝導評価	走査プローブ	協奏分子システム研究センター	佐藤 拓朗
Cu(111) 上 P 薄膜の化学状態解析	ESCA	物質分子科学研究領域	前島 尚行
鋭利な先端形状をもつ STM 金属探針の開発と観測	低 SEM, TEM, EPMA, CCD-1, CCD-2, 微小結晶, 粉末X線, オペランド, シナジー, ESCA, E680, EMX, E500, E580, MPMS-7, XL7, MPMS3, VP-DSC, PEAQ-ITC, iTC200, TG-DTA/DSC, MALDI, ラマン, FT, 蛍光分光, 紫外可視近赤外, 量子取率, 円二色性, ピコ秒, 600NMR 溶液, NMR 溶液 600G	物質分子科学研究領域	櫻井 敦教
新規有機分子の化学分析	低 SEM, 600NMR 溶液, EPMA, NMR 溶液 600G	生命・錯体分子科学研究領域	榎山 儀恵
単結晶基板の厚さ計測	マスクレス, 電子ビーム描画, 3次元	機器センター	湊 丈俊
フォトリソを塗布した基板作成	マスクレス, 電子ビーム描画	極端紫外光研究施設	岩山 洋士
リソグラフィによる微細構造の製作および評価	マスクレス, 電子ビーム描画, 3次元	装置開発室	高田 紀子
機能性有機分子薄膜の高単結晶化	走査プローブ	光分子科学研究領域	福谷 圭祐
有機・無機ヘテロ界面電子構造の決定	ARUPS	光分子科学研究領域	福谷 圭祐
薄膜をスパッタコートしたカンチレバの作製と評価	3次元	機器センター	中本 圭一
機能性高分子材料の分子運動性と水和水の雰囲気制御	600NMR 溶液, NMR 溶液 600G	物質分子科学研究領域	倉橋 直也
NMR 解析	TEM	生命・錯体分子科学研究領域	魚住 泰広
錯体触媒, ナノ触媒の創製	低 SEM, EPMA, 機器センター長協力研究	極端紫外光研究施設	田中 清尚
赤外分光ビームライン UVSOR BL6B における KRS5 結晶窓への付着物評価	低 SEM, TEM, ラマン	メゾスコピック計測研究センター	AHN, Hyo-Yong
Creation of Chiral Material for Nano-Optics	マスクレス, 3次元	物質分子科学研究領域	瀬戸 啓介
表面・界面の分子振動分光	走査プローブ	メゾスコピック計測研究センター	山西 絢介
可視域におけるタンパク分子多量体のキラリティ観測	ラマン, FT, 蛍光分光, 紫外可視近赤外	協奏分子システム研究センター	倉持 光
光機能性分子の構造・ダイナミクス解析	SAXS	協奏分子システム研究センター	秋山 修志
X線小角散乱研究	低 SEM	メゾスコピック計測研究センター	山西 絢介
円偏光誘起力顕微鏡の画像化機構の解明	機器センター長協力研究	光分子科学研究領域	高谷 光
溶液光化学反応の軟X線吸収分光測定	低 SEM, TEM, 蛍光分光, 紫外可視近赤外	生命・錯体分子科学研究領域	原島 崇徳
一方向に運動するロッド型人工 DNA モーターの開発	VP-DSC, PEAQ-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
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	EPMA, オペランド	機器センター	石山 修
CuBe 合金の構造解析	有機合成 DX	生命・錯体分子科学研究領域	大塚 尚哉
有機合成のデジタル化に向けたデータ収集			

(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。2024年度は、マイクロストラクチャー 1件、SAXS 2件、FT 1件、紫外可視近赤外 2件、蛍光分光・量子収率 1件、EMX 1件、走査プローブ顕微鏡 2件が採択された。業種別内訳は大企業4件、中小企業5件、その他1件であった。

表3 2024年度（令和6年度）利用件数一覧（2024年4月～2025年3月）

	協力研究	施設利用	所内利用	非公開利用
採択件数	43	114	36	10
実施件数	41	107	34	10
実施日数	1161	1437	1209	65

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。

表4 2024年度（令和6年度）合成横断領域活動一覧（2024年4月～2025年3月）

		活動実績
人材育成	講習会	技術スタッフ向けの講習会を設備ネットワークと共催し31回開催 905名参加
	異分野交流セミナー	異分野交流セミナー6回開催 398名参加
広報活動	学会展示子学会展示	3件（高分子，農芸化学，応用物理）
	出張説明会	7機関訪問 ARIM ミニセミナー開催（デンソー，イムラ・ジャパン，新潟大学，島根大学，東京都立大学，稀産金属，弘前大学）計52名参加
機関交流	第1回合成横断領域ワーキンググループキックオフミーティング	2024年6月27日 オンライン開催 42名参加
	第2回合成横断領域ワーキンググループ	2024年12月6日 オンライン開催 36名参加
	合成各機関訪問	8件（千歳科技大，電気通信大，信州大，名古屋工業大×2，奈良先端大，北陸先端大，大阪大）
	横断領域連携ミーティング	6回開催

表5 2024年度（令和6年度）異分野技術交流セミナー開催実績（大学連携研究設備ネットワーク事業と共催）

講習会・研修会名	開催場所	開催日	参加人数
バイオ AFM によるナノ生命科学	分子研(ハイブリッド)	5月28日	68
生命の神秘を暴く：天然物化学と質量分析イメージングの挑戦	分子研(ハイブリッド)	6月28日	62
定量 NMR：生薬及び医薬品の評価への応用	分子研(ハイブリッド)	7月23日	54
機械学習の材料開発への応用	オンライン	8月30日	74
NMR × 計算化学	分子研(オンライン)	10月25日	88
創薬ケミカルバイオロジーの最先端へ	分子研(ハイブリッド)	11月29日	52

3-3-6 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、ミ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9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。

3-3-7 分子科学研究所所長招へい会議（日本学術会議／日本化学会）

分子科学研究所 所長招へい会議は、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10年ほどは初夏の頃に本会議を開催しており、2024年度は、「博士人材のキャリアパス多様化を加速する」というタイトルで、産学官で議論されている博士人材の社会における役割の多様化と、そのために必要な施策について議論した。我が国ではポストク1万人計画などの影響もあり、博士課程に進学する学生の減少が進行しているが、他方で産業界において新規事業を立ち上げる際などにおいて博士人材の需要が高まっているとの指摘もなされている。博士人材の需要と供給のミスマッチに対して、学生の就職活動のあり方や産業界から学生へのメッセージの送り方など、現場で可能な改善点、あるいは統計データに基づく博士学位取得のメリットなどの情報発信など、様々な対策が議論された。その中で、博士人材は生涯賃金の比較において他の人材よりも優位にあることも示されたほか、諸外国での取り組み例なども紹介された。総合討論では、産学官で連携しながら、キャリアパス多様化の取り組みを継続することが確認された。

なお、2024年度は、引き続きオンラインと現地開催のハイブリッド形式で開催し、約214名の参加者があった。

開催テーマ：「博士人材のキャリアパス多様化を加速する」

開催日時：2024年6月11日（火） 13:10～17:10

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 岡本 裕巳（日本学術会議 第三部会員，分子科学研究所 教授）

見解

「日本の社会・産業をリードする化学系博士人材の育成支援と環境整備」の概要説明
関根 千津（日本学術会議 連携会員，株式会社住化技術情報センター 代表取締役社長）

講演

「博士人材の活躍促進に向けて」
高見 暁子（文部科学省 科学技術・学術政策局 人材政策課 人材政策推進室長）

「博士人材の持つ能力とは？ ～「研究者」像のズレに関する一考察～」
高橋 真木子（金沢工業大学大学院 イノベーションマネジメント研究科 教授）

「旭化成における博士人材の活躍に関して～「技術者」，「採用担当者」の目線から～」
時丸 祐輝（旭化成株式会社 人事部 人材採用室係長）

「富士通における高度人材の採用・キャリア・働き方」
岡本 青史（富士通株式会社 執行役員 EVP 富士通研究所長）

総合討論

司会：関根 千津

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（山本 浩史 教授）

3-3-8 スピン生命フロンティア（自然科学研究機構／文部科学省）

多様な磁気共鳴（Magnetic Resonance, MR）装置と多彩な専門性を持った研究者を集約し，既存の分野に捉われない統合的な新分野「スピン生命科学」の創成を目指して，生理学研究所，分子科学研究所および，生命創成探究センター（コア）と4つの連携機関（ノード）でハブを形成した。

中核となる岡崎の組織部分「スピン生命科学コア」は概算要求（組織改革教育研究組織改革分・基盤的設備等整備分）で組織ならびに設備の整備を行っている。岡崎外との連携プロジェクト「スピン生命フロンティアハブ」は文部科学省 共同利用・共同研究システム形成事業～学際領域展開ハブ形成プログラム～『分子・生命・生理科学が融合した次世代新分野創成のためのスピン生命フロンティアハブの創設』で事業展開を行っている。

【スピン生命科学コア】

岡崎3研究所と1センターにより構築した「岡崎連携プラットフォーム」に，スピン生命科学を推進する「スピン生命科学コア」を設立した。新規のMR用分子プローブの開発とモデル動物を対象としたMR画像計測までを，岡崎においてアンダーワンルーフで行い，生体を対象とするMR計測における新規原理・手法の開発および開拓を行う。岡崎地区3組織に配備された既設のMR装置および承継職員を再配置し，スピン生命科学の確立と展開を図る。分子のスピン状態を基にした計測法であるMR法について，既存の学問分野体系に捉われない挑戦的な計測技術の開発，

新規の原理の探求を行い、次世代バイオものづくり・次世代バイオ医薬品開発・次世代画像診断法開発などあらゆる分野において破壊的イノベーションを起こすことを目指す。

この先端的研究を国内の関連分野研究者を結集して強力に展開するため、特任教員によるプロジェクト研究や産学協同研究を推進し、人的交流・共同利用・共同研究・人材育成を推進する。

【スピン生命フロンティアハブ】

基盤技術である MR 装置および研究者が分野を超えて連携する『スピン生命フロンティアハブ』を設立した。生体情報の新規 MR 用分子プローブの開発からモデル動物を対象とした MR 画像計測までを、スピン生命科学コアと異なる領域を先導する 4 つの連携機関（ノード、参画機関：京都大学・化学研究所（京大・化研）、大阪大学・蛋白質研究所（阪大・蛋白研）、新潟大学・脳研究所（新潟大・脳研）、量子科学技術研究開発機構（QST・量子生命科学研究所））で形成するハブによって推進し、新規プローブ設計・合成、機能評価と測定系の最適化、さらに生体を対象とする MR 計測における新規原理・手法の開発および開拓を行う。国内の関連分野の研究者を集めて先進的な研究を進めるために、大学や公的研究機関とのクロスアポイントメントや企業との産学共同研究を推進し、交流・共同利用・共同研究や人材育成を推進する。大学共同利用機関としての経験と関連異分野研究ネットワークの活用によって新しい学術分野を構築し、参画する共同利用・共同研究拠点とともに新たな分野融合型共同利用研究体制を目指す。分子科学、生命科学、生理科学を統合することで、MR 分野で破壊的イノベーションを起こし、「スピン生命科学」を全国の研究者に展開する。自然科学研究機構は本事業に対し、岡崎連携プラットフォームに設置しているオープンミックスラボを本フロンティアハブの実施場所として提供する。