



分子研リポート2024

現状・評価・将来計画

「分子研リポート 2024」 目次

1. 序 言.....	1
2. 分子科学研究所の概要	3
2-1 研究所の目的	3
2-2 沿 革.....	3
2-3 組 織.....	6
2-4 運 営.....	8
2-4-1 運営顧問.....	8
2-4-2 研究顧問.....	8
2-4-3 産学連携研究アドバイザー	9
2-4-4 運営会議.....	9
2-4-5 運営会議人事選考部会.....	10
2-4-6 運営会議共同利用研究部会.....	10
2-4-7 学会等連絡会議.....	11
2-4-8 教授会議.....	12
2-4-9 主幹・施設長会議.....	12
2-4-10 各種委員会等.....	12
2-5 研究領域.....	16
2-6 研究施設.....	22
2-7 研究部門等.....	24
2-8 研究支援部門等	25
2-8-1 技術推進部.....	25
2-8-2 安全衛生管理室.....	28
2-8-3 研究力強化戦略室.....	28
2-9 構成員.....	30
2-9-1 構成員.....	30
2-9-2 現 員.....	36
2-9-3 人事異動状況.....	37
2-10 財 政.....	39
2-11 岡崎共通施設.....	44
2-11-1 岡崎情報図書館.....	44
2-11-2 岡崎コンファレンスセンター	44
2-11-3 岡崎共同利用研究者宿泊施設.....	44
2-11-4 職員会館.....	44
2-12 知的財産.....	45
2-13 受 賞.....	46

3. 大学共同利用機関の取組み	47
3-1 共同利用／共同研究	48
3-1-1 共同利用研究の概要.....	48
3-1-2 2024 年度の実施状況.....	48
3-1-3 共同利用研究実施件数一覧.....	62
3-1-4 各種研究会プログラム.....	63
3-2 国際交流, 国際共同研究, 研究会	71
3-2-1 外国人客員部門等及び国際交流.....	71
3-2-2 岡崎コンファレンス.....	76
3-2-3 日韓共同研究.....	77
3-2-4 国際共同研究事業の財源.....	78
3-2-5 分子研国際インターンシッププログラム (IMS-IIP)	79
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)	80
3-2-7 短期外国人研究者招へいプログラム.....	80
3-2-8 分子研コロキウム.....	81
3-3 各種事業.....	82
3-3-1 共創戦略統括本部 (自然科学研究機構).....	82
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)	83
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).....	84
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.....	85
3-3-5 マテリアル先端リサーチインフラ ARIM (文部科学省).....	88
3-3-6 ネットワーク型研究加速事業 (自然科学研究機構).....	102
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).....	102
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).....	103
4. 研究活動の現状.....	105
4-1 論文発表状況.....	106
4-2 メゾスコピック計測研究センター	107
繊細計測研究部門	109
広帯域相関計測解析研究部門	113
4-3 協奏分子システム研究センター	116
階層分子システム解析研究部門	117
機能分子システム創成研究部門	131
4-4 理論・計算分子科学研究領域.....	135
理論分子科学第一研究部門	135
理論分子科学第二研究部門	138
計算分子科学研究部門	141
4-5 光分子科学研究領域	154
光分子科学第二研究部門	154
光分子科学第三研究部門	166
光源加速器開発研究部門 (極端紫外光研究施設).....	173
電子ビーム制御研究部門 (極端紫外光研究施設).....	176
光物性測定器開発研究部門 (極端紫外光研究施設).....	179
光化学測定器開発研究部門 (極端紫外光研究施設).....	187

4-6 物質分子科学研究領域.....	192
電子構造研究部門	192
電子物性研究部門	200
分子機能研究部門	202
4-7 生命・錯体分子科学研究領域.....	204
生体分子機能研究部門	204
錯体触媒研究部門	217
錯体物性研究部門	223
4-8 特別研究部門	226
4-9 社会連携研究部門	245
4-10 研究施設等.....	251
機器センター	251
計算科学研究センター（ネットワーク担当）	256
技術推進部及び安全衛生管理室	258
客員研究部門及び退職・転出後等の成果論文	259
 5. 点検評価と課題.....	 263
5-1 研究顧問／産学連携研究アドバイザーによる点検評価	264
5-2 理論・計算分子科学研究領域の評価	265
5-2-1 David E. Manolopoulos 外国人運営顧問	265
5-3 物質分子科学研究領域の評価	269
5-3-1 Mischa Bonn 外国人運営顧問	269
 6. 研究施設の現状と将来計画	 279
6-1 極端紫外光研究施設（UVSOR）.....	280
6-2 機器センター	286
6-3 装置開発室.....	289
6-4 計算科学研究センター.....	290
6-5 岡崎連携プラットフォーム.....	292
6-6 生命創成探究センター.....	293
 7. 大学院教育.....	 295
7-1 特別共同利用研究員	296
7-2 総合研究大学院大学二専攻・コース	297
7-3 オープンキャンパス	302
7-4 短期インターンシップ.....	303
7-5 総研大アジア冬の学校.....	306

8. 社会活動等.....	307
8-1 社会との交流.....	308
8-1-1 一般公開.....	308
8-1-2 分子科学フォーラム.....	309
8-1-3 市民向けシンポジウム.....	310
8-1-4 見学者受け入れ.....	311
8-1-5 その他.....	311
8-2 理科教育への協力.....	312
8-2-1 スーパーサイエンスハイスクール.....	312
8-2-2 理数科（旧コスモサイエンスコース）.....	312
8-2-3 あいち科学技術教育推進協議会.....	313
8-2-4 国研セミナー.....	313
8-2-5 小中学校での出前授業.....	313
8-2-6 職場体験学習.....	313
8-2-7 その他.....	314
8-3 情報発信.....	315
8-4 産学連携.....	320
9. 資 料.....	321
9-1 歴代所長.....	321
9-2 運営顧問.....	322
9-3 外国人運営顧問.....	323
9-4 研究顧問.....	324
9-5 産学連携研究アドバイザー.....	325
9-6 運営会議委員.....	326
9-7 大学共同利用機関法人自然科学研究機構第4期中期目標.....	329
9-8 大学共同利用機関法人自然科学研究機構第4期中期計画.....	331
9-9 自然科学研究機構分子科学研究所規則リンク集.....	338

1. 序 言

分子科学とは、豊かな自然において多様な物質循環、エネルギー変換を司っている「分子」についての知識を深め、卓越した機能をもつ分子系を創成することを目指す学問です。分子科学研究所は、そのような分子科学の研究の中核拠点として実験的研究および理論的研究を行うとともに、広く研究者の共同利用に供することを目的として1975年に設立された大学共同利用機関です。国際的な中核共同研究センターとして、国内外の分子科学研究を先導すると同時に、生命科学・天文科学など、分子が関与する広汎な関連分野と協同して、科学の新たな研究領域を創出することも目標としており、現在、理論・計算分子科学、光分子科学、物質分子科学、生命・錯体分子科学の四つの研究領域とそれらを繋ぐ協奏分子システム研究センターおよび、メゾスコピック計測研究センターで研究基盤を構築しています。さらに、極端紫外光研究施設（UVSOR）を始めとする研究施設を擁し、分子の構造、反応、機能についての先鋭的な基礎研究を進め、分子の新たな可能性を探っています。また、分子研独自の産学協同研究を推進することを目的に、2019年度には「社会連携研究部門」を設置しました。2018年度から、新たな試みとして分子科学分野を世界的に牽引することが期待される卓越教授、および、施設の高度化などを担う人材として主任研究員の二つの新しい人事システムが始まりました。2019年度からは、分子研の共同利用の施設や設備の高度な利用を目指して、所外の研究機関との協定に基づき、クロスアポイントメントによる研究人事を開始し、これまでの人事制度と併せて、分子研を支える重要な人材を所に迎えることで、研究所のさらなる活性化が期待されます。概算要求（教育研究組織改革分）で2024年度新規に認められた「岡崎連携プラットフォームスピン生命科学コア（分子科学研究所、生理学研究所、生命創成探究センターが参画）」が岡崎共通研究施設として発足しました。

このレポートには、2024年度における各研究グループと、所としての活動状況が述べてあります。分子研では(1)「大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用の促進」、(2)「マテリアル先端リサーチインフラ」、(3)ムーンショット目標6研究開発プロジェクト「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」等の特別プロジェクトが進行中です。また、国際的事業として(1)分子研国際インターンシッププログラム（IMS-IIP）と(2)分子研アジア国際インターンシッププログラム（IMS-IIPA）などの特徴ある国際共同を推進しています。後者では、アジア諸国（特にタイ、マレーシア、インド、台湾）の若手研究者を1～6ヶ月招へいし、研究室での研究体験と成果発表による人材育成を行なっています。

分子研の人の流れは常に活発であり、2024年度も多く的人事異動がありました。8月1日付けで生命創成探究センター創成研究領域に岡本泰典准教授（協奏分子システム研究センター兼任）、2025年1月1日付けで篠北啓介准教授（物質分子科学研究領域）が赴任され、一昨年度新設した特任教員職には、9月1日付けで泉 雄大特任講師（極端紫外光研究施設）、クロスアポイントメントにより4月1日付けで澤井仁美准教授（長崎大学）、6月1日付けで畑中美穂准教授（慶応義塾大学）が赴任されました。新設の岡崎連携プラットフォームスピン生命科学コアには、10月1日付けで猪股晃介特任准教授が赴任され、研究活動が開始されました。また、4月16日付けで極端紫外光研究施設の岩山洋士助教が主任研究員に昇任されました。ここでは講師以上のお名前のみを書かせていただきましたが、多くの助教の方々が着任あるいは転出されました。転出された先生方には、分子研の研究活動を支えていただいたことに感謝するとともに、新たな職場での活躍を期待し、分子研にも所外から御貢献いただけるようお願い申し上げます。

研究顧問をお勤めいただいている北川 進京都大学高等研究院副院長・特別教授と James M. Lisy イリノイ大学教授、産学連携研究アドバイザーをお願いしている菊池 昇、株式会社トヨタコンボン研究所代表取締役所長と福田 伸、株式会社三井化学分析センター・技術顧問には、2024 年 5 月 9 日－10 日に開催された IMS Presentations 2024（全ての研究室主宰者から提示される 2024 年度の研究計画の発表会）に参加頂き、その活動への提言をいただきました。外国人運営顧問の David Manolopoulos オックスフォード大学教授には、2024 年 10 月 1 日－4 日に理論・計算分子科学研究領域の、Misha Bonn マックスプランク研究所教授には、10 月 9 日－11 日に物質分子科学研究領域の研究活動評価を実施していただきました。

2024 年度は COVID-19 の影響が完全になくなり、教員・学生の国際会議出席のための海外出張や、海外からの研究者の訪問も通常の状態に戻りました。研究会やシンポジウムは一部を除き会場参加とオンラインを併用するハイブリッドなどで開催されるなど、多様な運営形態へと移行しています。対面の研究会が交流の観点からは最良であると考えますが、ハイブリッドにすることで参加できる研究者も多いことから、ケースバイケースで開催形式が選ばれるものと考えています。

2025 年 3 月

自然科学研究機構

分子科学研究所 所長

渡辺 芳人

2. 分子科学研究所の概要

2-1 研究所の目的

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

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

2-2 沿革

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

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

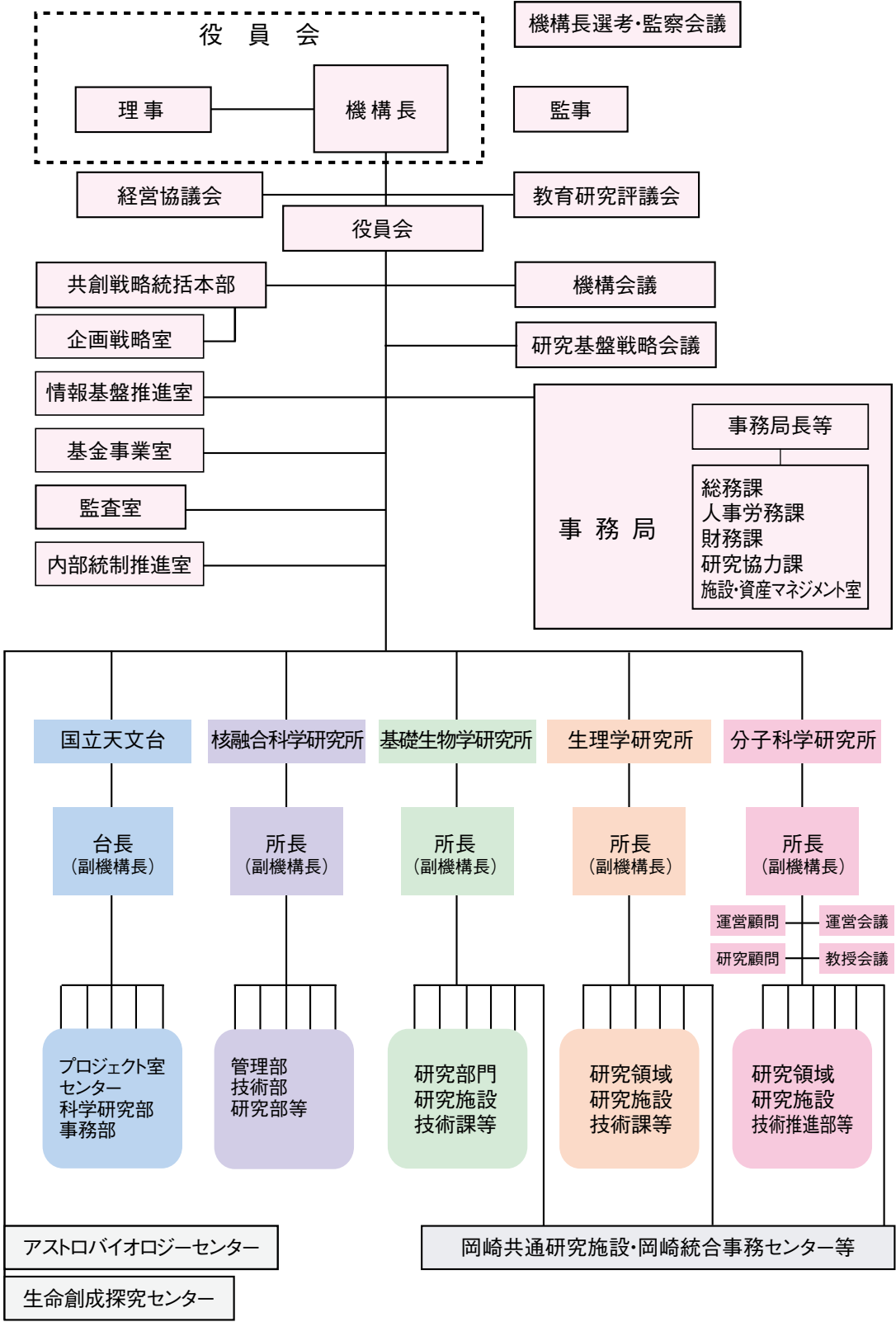
1979. 4. 1 分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され、管理局が総務部（庶務課、人事課、国際研究協力課）、経理部（主計課、経理課、建築課、設備課）、技術課に改組された。
1979. 11. 8 分子科学研究所創設披露式が挙行された。
1981. 4. 1 第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4.14 国立学校設置法の一部を改正する法律により、分子科学研究所と生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所、生理学研究所）は統合され、岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され、管理局が岡崎国立共同研究機構管理局となり、技術課が研究所所属となった。
1982. 4. 1 研究施設として極端紫外光実験施設（UVSOR）が設置された。
1982. 6.30 極端紫外光実験棟第1期工事（1,281 m²）が竣工した。
1983. 3.30 極端紫外光実験棟第2期工事（1,463 m²）が竣工した。
1983. 4. 1 電子構造研究系に分子エネルギー変換研究部門が、分子集団研究系に分子集団動力学研究部門、極端紫外光研究部門が設置された。
1983. 11.10 極端紫外光実験施設ストレージリング装置への電子貯蔵に成功した。
1984. 2.28 極端紫外光実験施設の披露が行われた。
1984. 4.11 研究施設として、錯体化学実験施設（錯体合成研究部門、錯体触媒研究部門）が設置された。流動研究部門制度が発足し錯体化学実験施設に錯体合成研究部門が設置された。
1985. 5.10 分子科学研究所創設10周年記念式典が挙行された。
1987. 4. 1 第三代研究所長に井口洋夫分子科学研究所教授が任命された。
1989. 2.28 分子科学研究所南実験棟（3,935 m²）が竣工した。
1989. 5.28 分子集団研究系に界面分子科学研究部門が、関連領域研究系に有機構造活性研究部門（共に流動研究部門）が設置された。
1991. 3.27 極端紫外光実験棟（増築）（283 m²）が竣工した。
1991. 4.11 極端紫外光科学研究系（反応動力学研究部門）が設置された。基礎光科学、界面分子科学、極端紫外光の各研究部門は分子集団研究系から極端紫外光科学研究系へ振替された。
1993. 4. 1 第四代研究所長に伊藤光男前東北大学教授が任命された。
1993. 12. 3 極端紫外光実験施設創設10周年記念式典が挙行された。
1994. 1.31 電子計算機センター棟（増築）（951 m²）が竣工した。
1995. 3.31 関連領域研究系有機構造活性研究部門（流動）が廃止された。
1995. 4. 1 理論研究系に分子基礎理論第四研究部門が設置された。
1995. 5.12 分子科学研究所創設20周年記念式典が挙行された。
1996. 5.11 関連領域研究系に分子クラスター研究部門（流動）が設置された。
1997. 4. 1 機器センター、極低温センター、化学試料室が廃止され、分子制御レーザー開発研究センター、分子物質開発研究センターが設置された。
1999. 4. 1 第五代研究所長に茅幸二慶應義塾大学教授が任命された。
2000. 4. 1 電子計算機センター、錯体化学実験施設錯体合成研究部門が廃止され、電子計算機室が設置された。共通研究施設として、統合バイオサイエンスセンター、計算科学研究センター、動物実験センター、アイソトープ実験センターが設置された。
2002. 2.28 山手2号館（統合バイオサイエンスセンター、計算科学研究センター）（5,149 m²）が竣工した。
2002. 3.11 山手1号館A（動物実験センター、アイソトープ実験センター）（4,674 m²）が竣工した。
2002. 4. 1 関連領域研究系分子クラスター研究部門（流動）、極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門（流動）、分子物質開発研究センターが廃止され、分子スケールナノサイエンスセンター（分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門、ナノ触媒・生命分子素子研究部門、ナノ光計測研究部門、界面分子科学研究部門（流動）、分子クラスター研究部門（流動））が設置された。
2003. 8.20 山手4号館（分子科学研究所分子スケールナノサイエンスセンター）（3,813 m²）が竣工した。
2003. 12. 2 極端紫外光実験施設創設20周年記念式典が挙行された。

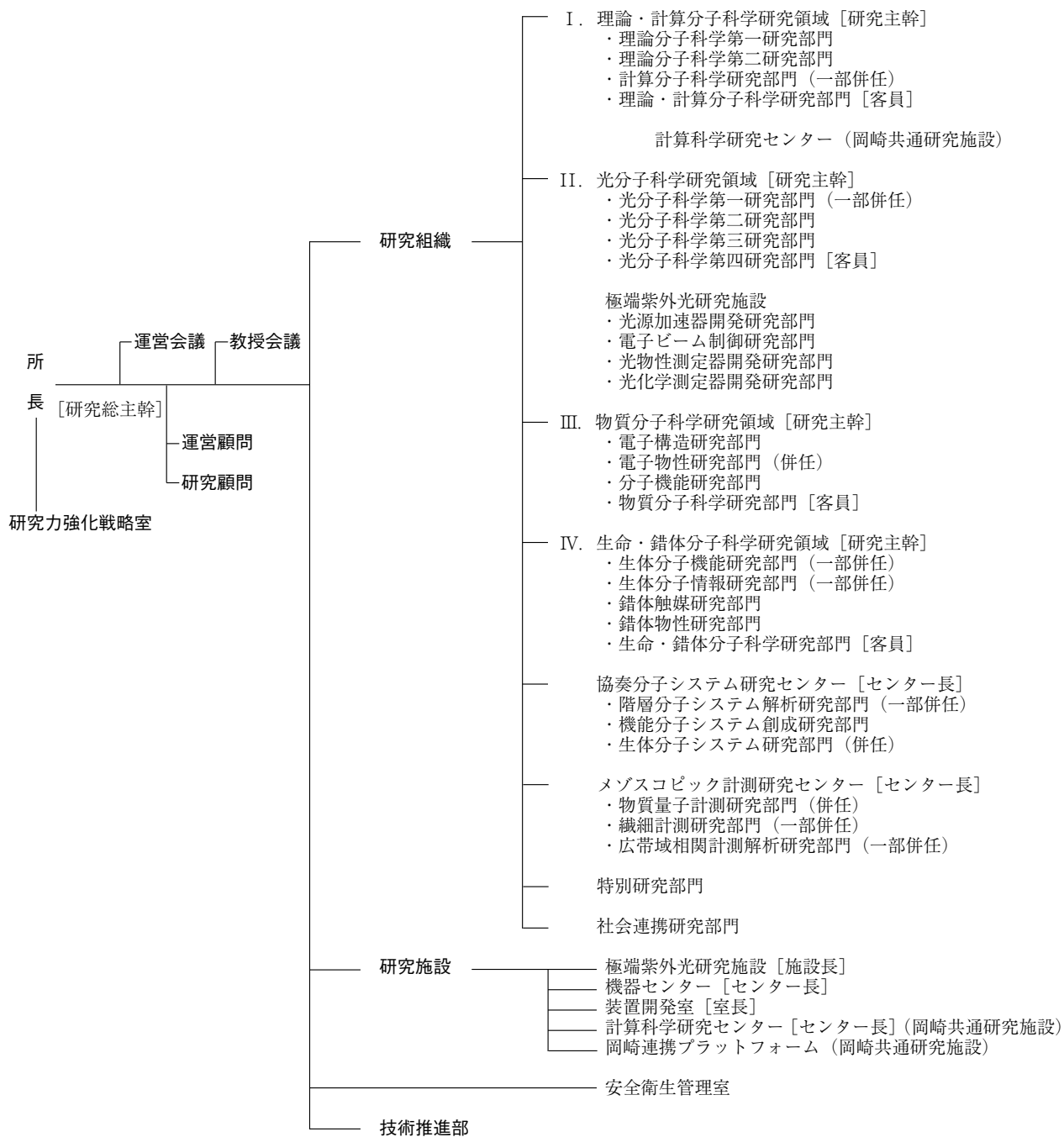
4 分子科学研究所の概要

2004. 3. 1 山手 5 号館 (NMR) (664 m²) が竣工した。
2004. 3. 8 山手 3 号館 (統合バイオサイエンスセンターなど) (10,757 m²) が竣工した。
2004. 4. 1 国立大学法人法により、国立天文台、核融合科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所、分子科学研究所が統合再編され、大学共同利用機関法人自然科学研究機構が創設された。岡崎国立共同研究機構管理局が、大学共同利用機関法人自然科学研究機構岡崎統合事務センターとなり、総務部 (総務課、国際研究協力課)、財務部 (財務課、調達課、施設課) に改組された。
2004. 4. 1 理論研究系が理論分子科学研究系に改組された。計算分子科学研究系 (計算分子科学第一研究部門、計算分子科学第二研究部門、計算分子科学第三研究部門) が設置された。分子スケールナノサイエンスセンターに、先導分子科学研究部門が設置され、界面分子科学研究部門、分子クラスター研究部門が廃止された。極端紫外光実験施設が、極端紫外光研究施設に改組された。安全衛生管理室が設置された。
2004. 4. 1 第六代研究所長に中村宏樹分子科学研究所教授が任命された。
2005. 5.20 分子科学研究所創設 30 周年記念式典が挙行された。
2007. 4. 1 研究系及び錯体化学実験施設が廃止され、理論・計算分子科学研究領域 (理論分子科学第一研究部門、理論分子科学第二研究部門、計算分子科学研究部門、理論・計算分子科学研究部門)、光分子科学研究領域 (光分子科学第一研究部門、光分子科学第二研究部門、光分子科学第三研究部門、光分子科学第四研究部門)、物質分子科学研究領域 (電子構造研究部門、電子物性研究部門、分子機能研究部門、物質分子科学研究部門)、生命・錯体分子科学研究領域 (生体分子機能研究部門、生体分子情報研究部門、錯体触媒研究部門、錯体物性研究部門、生命・錯体分子科学研究部門) の 4 つの研究領域が設置された。極端紫外光研究施設に、光源加速器開発研究部門、電子ビーム制御研究部門、光物性測定器開発研究部門、光化学測定器開発研究部門が設置 (名称変更) された。分子スケールナノサイエンスセンターに、ナノ分子科学研究部門、ナノ計測研究部門、ナノ構造研究部門が設置され、分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門、ナノ触媒・生命分子素子研究部門、ナノ光計測研究部門が廃止された。分子制御レーザー開発研究センターに、先端レーザー開発研究部門、超高速コヒーレント制御研究部門、極限精密光計測研究部門が設置された。機器センターが新たに設置された。広報室及び史料編纂室が設置された。
2010. 3.30 実験棟改修第 1 期工事 (耐震及び全面改修) が竣工した。
2010. 4. 1 第七代研究所長に大峯巖京都大学福井謙一記念研究センターリサーチリーダーが任命された。
2011. 3.30 実験棟改修第 2 期工事 (耐震及び全面改修) が竣工した。
2013. 4. 1 分子スケールナノサイエンスセンターが廃止され、協奏分子システム研究センター (階層分子システム解析研究部門、機能分子システム創成研究部門、生体分子システム研究部門) が設置された。
2013. 10. 1 広報室及び史料編纂室が廃止され、研究力強化戦略室が設置された。
2013. 12. 6 極端紫外光研究施設創設 30 周年記念式典が挙行された。
2016. 4. 1 第八代研究所長に川合眞紀東京大学大学院新領域創成科学研究科教授、理化学研究所理事長特別補佐が任命された。
2017. 4. 1 分子制御レーザー開発研究センターが廃止され、メゾスコピック計測研究センター (物質量子計測研究部門、繊細計測研究部門、広帯域相関計測解析研究部門) が設置された。
2018. 4. 1 岡崎統合バイオサイエンスセンターが廃止され、生命創成探究センターが設置された。特別研究部門が設置された。
2019. 4. 1 社会連携研究部門が設置された。
2020. 3.31 共同研究棟 A 棟、共同研究棟 B 棟及び共同研究棟 C 棟の改修工事が竣工した。
2021. 3.10 共同研究棟 D 棟の改修工事が竣工した。
2021. 4. 1 技術課が技術推進部に改組された。
2022. 4. 1 第九代研究所長に渡辺芳人総合研究大学院大学理事が任命された。
2023. 12. 1 極端紫外光研究施設創設 40 周年記念式典が挙行された。
2024. 7. 1 共通研究施設として、岡崎連携プラットフォームが設置された。

2-3 組織

大学共同利用機関法人自然科学研究機構





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

2-4 運 営

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

2-4-1 運営顧問

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

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

運営顧問（2024年度）

石田 美織	三菱ケミカル株式会社 Science & Innovation Center Organic Materials Laboratory 所長
高田 昌樹	東北大学国際放射光イノベーション・スマート研究センター教授／ 一般財団法人光科学イノベーションセンター理事長
谷口 功	国立高等専門学校機構理事長

外国人運営顧問（2024年度）

BONN, Mischa	Director and Professor, Max Planck Institute for Polymer Research
MANOLOPOULOS, David E.	Professor, The University of Oxford

2-4-2 研究顧問

分子科学研究所では、法人化の前から所長が研究面を諮問するために研究顧問制度を導入している。第一期中期計画期間では国内3名の研究顧問が、所内の各研究グループによる予算申請ヒアリングに参加し、それぞれについて採点し、所長はその採点結果を参照しつつ各研究グループに配分する研究費を決定してきた。第二期中期計画期間は国際的な研究機関としての研究面を中心に諮問することとし、国外委員も追加することとした。第三期中期計画期間か

ら国内外各1名で運用している。

研究顧問（2024年度）

北川 進

京都大学高等研究院理事・副学長，特別教授

LISY, James M.

Research Professor, University of Illinois Urbana-Champaign

2-4-3 産学連携研究アドバイザー

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

産学連携研究アドバイザー（2024年度）

菊池 昇

株式会社トヨタコンボン研究所代表取締役所長

福田 伸

株式会社三井化学分析センター技術顧問／北海道大学触媒科学研究所研究推進支援教授

2-4-4 運営会議

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

運営会議委員（任期2024.4-2026.3）（◎：議長 ○：副議長）

○岩佐 義宏

理化学研究所創発物性科学研究センター副センター長

杉野目 道紀

京都大学大学院工学研究科教授

高橋 啓介

北海道大学大学院理学研究院教授

高橋 聡

東北大学多元物質科学研究所教授

唯 美津木

名古屋大学物質科学国際研究センター教授

菱川 明栄

名古屋大学物質科学国際研究センター教授

廣田 俊

奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科教授

真船 文隆

東京大学大学院総合文化研究科教授

山内 美穂

九州大学先端物質化学研究所教授

吉澤 一成

京都大学福井謙一記念研究センター研究員

秋山 修志

協奏分子システム研究センター教授

◎飯野 亮太	生命・錯体分子科学研究領域教授
石崎 章仁 (-2024.9)	理論・計算分子科学研究領域教授
魚住 泰広	生命・錯体分子科学研究領域教授
江原 正博	理論・計算分子科学研究領域教授
岡本 裕巳	メゾスコピック計測研究センター教授
解良 聡	光分子科学研究領域教授
齊藤 真司	理論・計算分子科学研究領域教授
松井 文彦 (2024.10-)	極端紫外光研究施設教授
山本 浩史	協奏分子システム研究センター教授
横山 利彦	物質分子科学研究領域教授

2-4-5 運営会議人事選考部会

分子科学研究所における研究教育職員候補者（教授，准教授，助教，上席研究員および主任研究員）は，専任，客員を問わず，全て公募による自薦，他薦の応募者の中から人事選考部会において選考する。また，特任准教授（若手独立フェロー）に加えて2017年度より導入された特別研究部門の卓越教授も人事選考部会で選考することになった。人事選考部会の委員は2年ごとに運営会議の所内委員5名と所外委員5名の計10名によって構成される。人事選考部会で審議した結果は運営会議の審議結果として取り扱われる。所長はオブザーバーとして人事選考部会に参加する。なお，人事が分子科学の周辺に広く及びかつ深い専門性を伴いつつある現状に対応し，人事選考部会は必要に応じて所内外から専門委員を加えることができる。また，助教，特任准教授（若手独立フェロー），主任研究員の選考に関しては専門委員を含む小委員会を，生命創成探究センター（分子研兼務）教授・准教授の選考に関しては専門委員を含む選考委員会を，人事選考部会の下に置いている。人事選考部会の審議結果は部会長より所長に答申され，所長は教授会議（後述）でその結果を報告し，可否の投票等によって了解を得たうえで，最終決定する。

専任の教授，准教授を任用する場合には，まず教授会議メンバーによる懇談会において当該研究分野及び募集方針の検討を行い，それに基づいて作成された公募文案を人事選考部会，教授会議で審議した後，公募に付する。助教から准教授，准教授から教授への内部昇任は原則として認められていない。助教は6年を目途に転出することを推奨されているが，法制化された任期があるわけではない。なお，1999年1月から法人化直前の2004年3月までに採用された助教（2003年4月以前は研究系の助教だけ）には6年の任期（法制化された任期）と3年ごとの再任が規定されたが，法人化による見直しによって，6年の任期を越えて勤務を継続する場合は再任手続きを経たのち，任期のない助教に移行した。

人事選考部会委員（2024，2025年度）（○：部会長）

岩佐 義宏	（理研副センター長）	秋山 修志	（分子研教授）
菱川 明栄	（名大教授）	○江原 正博	（分子研教授）
廣田 俊	（奈良先端大教授）	岡本 裕巳	（分子研教授）
山内 美穂	（九大教授）	解良 聡	（分子研教授）
吉澤 一成	（京大研究員）	山本 浩史	（分子研教授）

2-4-6 運営会議共同利用研究部会

全国の大学等との共同利用研究は分子研の共同利用機関としての最も重要な機能の一つである。本部会は従来の共同研究専門委員会を廃止し新たに2023年度から部会として発足したものである。本部会では，共同利用研究計画（課

題研究，協力研究，研究会等）に関する事項等の調査を行う。半年毎（前，後期）に，申請された共同利用研究に対して，その採択及び予算について審議・決定する。

運営会議共同利用研究部会の委員は，運営会議委員 6 名以内と運営会議の議を経て所長が委嘱する運営会議委員以外の者 6 名以内によって構成される。委員会から部会となったことにより，共同利用研究全般の運用に関する権限が運営会議から本部会に移譲されることとなり，より迅速できめ細かい対応が可能となった。例えば 2023 年度末～2024 年度にかけては能登半島地震への緊急対応としての共同利用枠の設定などを迅速に実施することができた。

運営会議共同利用研究部会委員（2024，2025 年度）（○：部会長）

杉野目 道紀	（名大教授）	○魚住 泰広	（分子研教授）
須藤 雄気	（岡山大院教授）	齊藤 真司	（分子研教授）
高橋 聡	（東北大教授）	横山 利彦	（分子研教授）
唯 美津木	（名大教授）	熊谷 崇	（分子研准教授）
内藤 俊雄	（愛媛大教授）	田中 清尚	（分子研准教授）
深澤 愛子	（京大院教授）	椋山 儀恵	（分子研准教授）

2-4-7 学会等連絡会議

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

学会等連絡会議構成員（2024 年度）

【所外委員】

（日本化学会推薦）

塩谷 光彦	（東京大院教授）	三浦 雅博	（大阪大特任教授）
宮崎 あかね	（日本女子大教授）		

（日本物理学会推薦）

木村 昭夫	（広島大院教授）	松田 巖	（東京大教授）
松本 卓也	（大阪大院教授）		

（日本放射光学会推薦）

熊坂 崇	（高輝度光科学研究センター室長）	佐藤 友子	（高エネルギー加速器研究機構特別准教授）
------	------------------	-------	----------------------

（錯体化学会推薦）

馬越 啓介	（長崎大院教授）
-------	----------

（分子科学会推薦）

竹内 佐年	（兵庫県立大院教授）	細越 裕子	（大阪公立大院教授）
柳井 毅	（名古屋大教授）	山内 美穂	（九州大教授）

（日本生物物理学会推薦）

池口 満徳	（横浜市立大院教授）
-------	------------

【所内委員】

秋山 修志	（分子研教授）	石崎 章仁 （-2024.9）	（分子研教授）
解良 聡	（分子研教授）	齊藤 真司 （2024.10-）	（分子研教授）
山本 浩史	（分子研教授）	田中 清尚	（分子研准教授）

2-4-8 教授会議

分子科学研究所創設準備会議山下次郎座長の申し送り事項に基づいて、分子研に教授会議を置くことが定められている。法人化の際も教授会議を継続することを決めた。所長が議長を務める。同会議は分子研の専任・客員の教授・准教授および主任研究員で構成され、研究及び運営に関する事項について調査審議し、所長を補佐する（一部の議案については、特任教授、特任准教授も教授会議に参画する）。所長候補者の選出に当たっては、教授会議に選挙管理人を置き、その指示に従い、教授会議は運営会議から独立した会議体として独自の見識のもとに候補者を選出し、運営会議に提案しその審議結果に対し教授会議として了承するかどうかを審議する。また、研究教育職員の任用に際しては人事選考部会からの報告結果を審議し、教授会議としての可否の投票を行う。

2-4-9 主幹・施設長会議

主幹・施設長会議は、所長の諮問に応じて研究所の運営等の諸事項について審議し、所長を補佐する。所長が議長を務める。そこでの審議事項の大半は教授会議に提案され、審議の上、決定する。特任教員（特任准教授、特任講師、特任助教）及びIMSフェロー等の選考に関する審議を行う。主幹・施設長会議の構成員は各研究領域の主幹、研究施設長・センター長等の教授で、所長が招集し、主催する。

2-4-10 各種委員会等

上記以外に次表に示すような“各種の委員会”があり、研究所の諸活動、運営等に関するそれぞれの専門的事項が審議される。詳細は省略する。

(1) 分子科学研究所の各種委員会

会議の名称	設置の目的・審議事項	委員構成	設置根拠等	実施日
点検評価委員会	研究所の設置目的及び社会的使命を達成するため自ら点検及び評価を行い研究所の活性化を図る。	所長、研究総主幹、研究主幹、研究施設の長、本部研究連携室の研究所属の研究教育職員、技術推進部長、他	点検評価規則	—
将来計画委員会	研究所の将来計画について検討する。	所長、研究総主幹、教授数名、准教授数名	委員会規則	—
放射線安全委員会	放射線障害の防止に関する重要な事項、改善措置の勧告。	取扱主任者 研究所の職員若干名（放射線発生装置所有グループ及びエックス線発生装置所有グループをそれぞれ1グループ以上含む） 人事労務課長 技術推進部長 安全衛生管理室長	放射線障害予防規則	—
極端紫外光研究施設運営委員会	研究施設の運営に関する重要事項。施設利用の採択に関する調査。	研究施設長 研究施設の教授、准教授及び主任研究員 教授又は准教授4 職員以外の研究者7	委員会規則	2024.9.2, 2025.3.11
機器センター運営委員会	センターの管理運営に関する重要事項。	センター長 センターの研究教育職員 センター以外の分子研の研究教育職員若干名 職員以外の研究者若干名	委員会規則	2024.7.8, 11.22–29 (メール審議), 2025.3.14–21 (メール審議)

装置開発室運営委員会	装置開発室の運営に関する重要事項。	(原則) 室長 研究教育職員 8 技術職員若干名 所外の研究者及び技術者若干名 技術推進部長	委員会規則	2024.9.2-9 (メール審議), 12.17
安全衛生委員会	安全衛生管理に関する事項。	安全衛生管理者 各研究領域から各 1 研究施設から若干名	分子科学研究所安全衛生管理規則	2024.6.20, 12.26, 2025.2.25 (メール持ち回り審議)
図書委員会	購入図書の選定。他	(原則)		—
ネットワーク委員会	情報ネットワークの維持、管理運営。	各研究領域から各 1 施設から必要数		随時メールで対応
情報ネットワークセキュリティ委員会	分子研情報ネットワークセキュリティに関する必要な事項。	各研究領域教授各 1 各研究施設教授各 1 技術推進部長 分子研広報委員長 分子研ネットワーク委員長		随時メールで対応
知的財産委員会	研究所における知的財産の管理及び活用に関する事項。	研究教育職員(所長指名) 1, 研究領域及び研究施設の研究教育職員若干名, 岡崎共通研究施設の研究教育職員若干名, 技術推進部長が指名するユニット長 1 名	委員会規則	2024.4.5, 6.7, 10.4, 12.6, 2025.2.7, 3.12
利益相反委員会	研究所構成員の利益相反に関する事項。	所長, 研究領域及び研究施設の研究教育職員若干名, 岡崎共通研究施設の研究教育職員若干名, 技術推進部長	委員会規則	2024.7.29, 9.12, 2025.2.20
大学院委員会	総合研究大学院大学の運営に関する諸事項, 学生に関する諸事項等の調査審議を行い, その結果をコース委員会に提案し, その審議に委ねる。	(原則) 大学院委員長, 正副コース長を含む		2024.5.7, 6.7, 7.5, 10.4, 11.1, 12.6, 2025.1.7, 3.7
特別共同利用研究員受入審査委員会	特別共同利用研究員の受入れ等について審査を行なう。	研究総主幹, 研究主幹, 研究施設長, 計算科学研究センター長, 大学院委員会委員長	委員会要領	随時持ち回り審議

設置根拠の欄 分子科学研究所で定めた規則, 略式で記載。記載なきは規定文なし。
表以外に, 分子研コロキウム係, 自衛消防隊組織がある。

(2) 岡崎 3 機関等の各種委員会等

会議の名称	設置の目的・審議事項	分子研からの委員	設置根拠等	実施日
岡崎 3 機関所長会議	研究所相互に関連のある管理運営上の重要事項について審議するとともに円滑な協力関係を図る。	所長	所長会議運営規則	2024.4.16, 5.22, 6.18, 7.16, 9.25, 10.15, 11.19, 12.16, 2025.1.21, 2.18, 3.18
岡崎 3 機関職員福利厚生委員会	職員レクリエーションに関する事項及び職員会館の運営に関すること。他	研究教育職員 1 技術職員 1	委員会規則	2024.10.8

岡崎情報セキュリティ管理運営委員会	岡崎3機関における情報セキュリティの確保及び岡崎情報ネットワークの管理運営に関する必要事項。	研究総主幹，教授1 計算科学研究センター長 責任担当所長	委員会規則	2024.7.5 (メール審議)， 2025.3.14
岡崎情報セキュリティ管理運営専門委員会	岡崎3機関における情報セキュリティと岡崎情報ネットワークの日常の管理。将来における岡崎情報セキュリティ及びネットワークの整備，運用等について調査審議。	教授1 技術職員3 室長が必要と認めた者2	委員会規則	2024.5.22， 8.27，11.27， 2025.3.4
岡崎共同利用研究支援施設運営委員会	岡崎コンファレンスセンター及び宿泊施設（ロッジ）の管理運営に関し必要な事項。	担当責任所長 教授又は准教授1 国際研究協力課長	委員会規則	2024.7.22， 2025.1.20
岡崎3機関安全衛生委員会	岡崎3機関の安全衛生に関し必要な事項について審議する。	安全衛生統括代表者1 安全衛生管理者2 職員2	委員会規則	2024.4.16， 5.21，6.18， 7.16，8.20， 9.17，10.15， 11.19，12.17， 2025.1.21， 2.18，3.18 ※3.18以外 はメール審議
防火防災対策委員会	防火防災管理に関する内部規定の制定改廃，防火防災施設及び設備の改善強化。防火防災教育訓練の実施計画。防火思想の普及及び高揚。他	所長，研究所の代表 (教授1)，副防火 防災管理者（技術推進 部長），高圧ガス保 安員統括者	委員会規則	2024.5.20– 24（メール 審議）， 7.26–8.2 (メール審議)， 9.30， 2025.1.22
動物実験委員会	動物実験に関する指導及び監督。実験計画の審査。他	技術推進部長	委員会規則	2024.4.23， 6.25，12.2， 2025.2.19， 随時持ち 回り審議
計算科学研究センター運営委員会	センターの管理運営に関する重要事項を審議するため。	教授又は准教授1	委員会規則	2024.9.5， 2025.3.4
動物資源共同利用研究センター運営委員会	センターの管理運営に関する重要事項を審議するため。	教授又は准教授2	委員会規則	2024.7.19， 12.13–19 (メール審議)
アイソトープ実験センター運営委員会	センターの管理運営に関する重要事項を審議するため。	教授又は准教授2 技術推進部長が指名 するユニット長1	委員会規則	2024.6.10
岡崎連携プラットフォームスピ生命科学コア運営委員会	スピ生命科学コアの管理運営に関する重要事項を審議するため。	自然科学研究機構が岡 崎に置く研究機関の長 及び生命創成探究セン ター長が推薦する職員1 その他コア長が必要 と認める者1	委員会規則	2024.9.25

ハラスメント防止委員会	ハラスメントの防止並びにその苦情の申出及び相談に対応するため。	所長が指名する者 3	委員会等規則	2024.6.18 (Web 会議), 4.18, 2025.2.10, 2.25, 3.12 (オンサイト開催), 2024.6.27– 7.4, 11.29–12.3, 12.23–26 (メール審議)
アイソトープ実験センター明大寺地区実験施設放射線安全委員会	明大寺地区実験施設における放射線障害の防止に関し必要な事項を企画審議する。	研究教育職員 3 技術推進部長	センター明大寺地区実験施設放射線障害予防規則	2024.4.9 (メール審議), 2025.2.17– 3.3 (メール審議)
岡崎山手地区連絡協議会	岡崎山手地区における建物の円滑な管理及び環境整備等を協議する。	担当責任所長 教授 2 技術推進部長	協議会規則	2024.4.26, 7.3, 11.6, 2025.3.5
施設整備委員会	岡崎 3 機関各地区の施設整備, エネルギー及び環境保全等に関する事項の立案を行い, 所長会議に報告する。	研究総主幹 教授 1 計算科学研究センター長 技術推進部長	委員会規則	2025.2.27
岡崎情報公開委員会	「独立行政法人等の保有する情報の公開に関する法律」を円滑に実施するため。	所長又は研究総主幹 教授 1	委員会規則	—
生命倫理審査委員会	機構における人を対象とする研究及びヒトゲノム・遺伝子解析研究を, 倫理的配慮のもとに適正に推進するため。	教授又は准教授 2	委員会規則	2024.11.18– 12.16 (メール審議)

設置根拠の欄 岡崎 3 機関が定めた規則, 略式で記載。記載なきは規定文なし。

2-5 研究領域

理論・計算分子科学研究領域

研究目的 量子力学，統計力学，情報・計算科学に基づき，凝縮系における構造，反応，物性，機能の解明を目指す理論および方法論の開発と，それらの応用研究

理論分子科学第一研究部門

研究目的 凝縮系における反応ダイナミクス，物性，機能の解明のための理論・計算科学的研究

研究課題 1，凝縮系における反応，物性，機能発現の理論研究

理論分子科学第二研究部門

研究目的 主として量子力学・統計力学に立脚した凝縮相分子系における動的現象および機能発現の理論計算研究及び量子化学計算と機械学習の融合による機能性材料の理解と設計に関する研究

研究課題 1，凝縮相化学過程の量子ダイナミクス理論
2，量子科学技術に基づく複雑分子系の観測と制御の理論研究
3，機能性材料の反応経路のデータベース化と機械学習への応用

計算分子科学研究部門

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

研究課題 1，電子状態理論の開発と光物性科学・不均一系触媒への応用
2，生体分子マシンにおける機能発現ダイナミクスの解明
3，分子動力学シミュレーションにおける新しい手法の開発と生体系への応用

理論・計算分子科学研究部門（客員）

研究目的 量子コンピュータに関する基礎および応用研究と複雑な電子状態に対する基礎理論開発

研究課題 1，誤り耐性量子コンピュータとその物理シミュレーションへの応用に関する理論的研究
2，特異な量子効果を含む電子状態を記述する理論の開発と実在系への応用
3，相対論的電子状態理論の開発と応用

光分子科学研究領域

研究目的 様々な物質の構造や性質を光で調べることで，物性や反応を光で制御すること，及びそれに必要となる高度な光源を開発することを目的とする

光分子科学第一研究部門

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

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

光分子科学第二研究部門

- 研究目的 物質の量子力学的な性質を, デザインされた光電場で詳細に観察し制御するための新しい方法論と, それを支える高度な光源の開発を目指した研究を行う
- 研究課題 1, 高度にデザインされたレーザー場を用いて, 原子・分子及びその集合体の量子ダイナミクスを精密に観測・制御するための研究, および超高速量子シミュレータ・量子コンピュータの研究開発

光分子科学第三研究部門

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

光分子科学第四研究部門 (客員)

- 研究目的 原子や比較的簡単な分子から, それらの集合体, 固体表面に吸着した原子・分子やナノ構造体, さらに生体分子までを広く対象とし, 高度な周波数・時間・空間分解分光法, 極端紫外光や特殊波長レーザー等を用いた光学測定等によりそれらの性質を明らかにする
- 研究課題 1, 電気化学反応や触媒反応の変換場における局所構造と電子状態の研究
2, 極低温原子を用いた量子シミュレータ・量子コンピュータの開発
3, データ科学を活用した放射光光電子分光の計測と理論の研究

光源加速器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)

- 研究目的 シンクロトロン光源用電子加速器に関する開発研究を行う
- 研究課題 1, 先進的な光源加速器の設計開発研究
2, 相対論的電子ビームを用いた新しい光発生法とその利用に関する研究

電子ビーム制御研究部門 (極端紫外光研究施設)

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

光物性測定器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)

- 研究目的 固体の新奇物性に関わる電子状態を放射光赤外・テラヘルツ分光及び高分解能角度分解光電子分光により明らかにする
- 研究課題 1, 放射光を用いた固体分光用の観測システムの開発
2, 固体物質の局在から遍歴に至る電子状態の分光研究

光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的 放射光軟X線を利用した新しい分子分光法の開発研究を行う

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

物質分子科学研究領域

研究目的 分子及びその集合体を示す新たな現象や有用な機能の発見を目指し、新規分子・物質の開発やそれらの高次集積化と、電子・光物性、反応性、触媒能、エネルギー変換などの研究を行う。また、分子・分子集合体・生体分子等の物性・機能の起源を解明するため、主として分光法に基づいた新たな観測技術開発に努める

電子構造研究部門

研究目的 分子・物質材料の物理的・化学的新機能と機構解明

- 研究課題
- 1, 物質科学・表面科学のための新しい分光学的計測手法の開発
 - 2, 新規分光法による固体表面界面における分子集合体の特異的な構造物性・化学機能・量子ダイナミクスの探求
 - 3, 多次元分光計測法による新奇物性開拓
 - 4, 有限の厚さをもつ固液界面のオペランド分子科学研究

電子物性研究部門

研究目的 分子集合体・生体分子の物性と機能

- 研究課題
- 1, 原子層ナノ材料の構造設計に基づく電子光学物性制御と光機能の創出

分子機能研究部門

研究目的 物質変換・エネルギー変換のためのデバイス創製、生体分子の構造と機能

- 研究課題
- 1, 固体 NMR 新規測定法およびハードウェアの開発
 - 2, 次世代電気化学デバイスの創出に向けた機能性無機材料の探索

物質分子科学研究部門（客員）

研究目的 物質分子科学のコミュニティ交流を通じた新しい先端的研究分野の開拓

- 研究課題
- 1, 固体物質からの高次高調波発生
 - 2, 有機薄膜太陽電池の高効率化に向けた新規半導体ポリマーの開発
 - 3, バレー自由度をもつ光注入キャリアの磁場下マイクロ波共鳴によるダイナミクス研究

生命・錯体分子科学研究領域

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

生体分子機能研究部門

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

生体分子情報研究部門

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

錯体触媒研究部門

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

錯体物性研究部門

- 研究目的 機能性金属錯体, 集積化芳香族化合物の設計と合成, 新規な物性, 機能の開拓
- 研究課題 1, 3次元幾何構造をもつ有機共有結合結晶の合成と機能解明

生命・錯体分子科学研究部門 (客員)

- 研究目的 広義の錯体を対象とした触媒機能, 反応性および構造の相関の解明, 分子科学的手法を用いた生命機能の解明
- 研究課題 1, 結晶スポンジ法, 拡張スポンジ法の開発と産業応用
2, 1分子操作法を用いた分子モーターのエネルギー変換機構の解明
3, 非天然型核酸の合成と機能・構造解析

協奏分子システム研究センター

研究目的 分子を軸足に「個」と「集団」を結ぶロジックを確立し、その原理をもとに斬新な分子システムを創成する

階層分子システム解析研究部門

研究目的 個々の分子の動態が分子間相互作用や複雑な制御ネットワークを介して多重の階層を貫き、分子システムとしての卓越した機能へ繋がっていく仕組みの解明

研究課題 1, 生物時計タンパク質が24時間周期のリズムを奏でる仕組みの解明
2, 先端的分光法による複雑分子系の機能・構造・ダイナミクスの解明
3, タンパク質分子構造および機能の合理デザイン
4, 生体分子系における反応および階層的構造変化の解明

機能分子システム創成研究部門

研究目的 機能性新分子の合成と、その複合化による創発的分子ナノデバイスの創成

研究課題 1, 機能性分子の多重集積化による新規機能性分子デバイス

生体分子システム研究部門

研究目的 生物が示す多彩な生命現象の分子レベルでの解明

研究課題 1, 新規な機能を有する金属タンパク質の構造と機能
2, 超高磁場 NMR を機軸とする生命分子のダイナミクスの探究
3, タンパク質分子が相互作用する際の認識、情報伝達、機能制御及びそのための実験・理論的手法の開発
4, 生体分子モーターのエネルギー変換機構の解明

メゾスコピック計測研究センター

研究目的 分子が集まって機能するシステムにおいて特性発現に役割を担う、ミクロとマクロを繋ぐ階層間の情報・物質・エネルギーのやりとりの現場を、できる限りありのままの姿で捉え、新しい分子の能力を引き出すための極限的計測法の開発とその利用研究を行う

物質量子計測研究部門

研究目的 精密な光観測・制御法を先鋭化し、新しい量子相を作り出して制御し、量子情報処理など新規な分子の能力を引き出す

研究課題 1, 振幅と位相をデザインしたレーザー場による超精密コヒーレント制御法の開発
2, 固体表面における分子集合体の特異的量子ダイナミクスの探究

繊細計測研究部門

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

研究課題 1, ナノ領域顕微分光法による原子・分子集合体の微細光学解析
2, ナノ構造体の光応答理論開発と多階層系の特性解析，光・電子機能物質の理論設計

広帯域相関計測解析研究部門

研究目的 多変数計測解析手法，高分解能広帯域計測法とその解析法を開発し，分子の能力とそれを司る物理過程の解析を展開

研究課題 1, 生体分子モーターのエネルギー変換機構解明のための新計測法開発
2, 表面ナノ構造とその機能を解明するプローブ顕微鏡の開発

2-6 研究施設

極端紫外光研究施設

- 目 的 極端紫外光研究施設は、全国共同利用施設として UVSOR-III 光源加速器（電子蓄積リング）からのシンクロトン光を国内の大学等の研究者に安定に供給して極端紫外光物性・光化学の共同利用研究を支援するとともに、極端紫外光源の高輝度化，加速器を利用した新しい光源に関する研究や新たな放射光分子科学の開拓的研究を国内外の研究者と共同して推進する。

機器センター

- 目 的 機器センターは、新規物質開発を行う上で基盤設備となる汎用物性測定装置、汎用化学分析装置、及び汎用分光計測装置を集中管理し、さらに、先端機器の開発と冷媒の供給管理を担当することにより、研究所内外の共同利用に資することを目的としている。共同利用としては協力研究を通して利用する形態と施設利用の二種類がある。また、大学連携研究設備ネットワークの幹事機関を担い、さらには、2021 年度からは文部科学省受託研究マテリアル先端リサーチインフラ事業の「マテリアルの高度循環のための技術」領域スポーク機関、2022 年度からは同事業運営機構横断領域・物質・材料合成プロセス技術分野の責任機関として本国家プロジェクトの設備共用・DX 拠点を務めている。

装置開発室

- 目 的 装置開発室は、多様化する材料の精密加工技術及び非機械加工を含むマイクロ・ナノ加工技術の高度化，並びに高密度集積回路の設計・製作・評価技術を確立し，所内研究あるいは共同利用研究の技術支援を行うほか，デジタルエンジニアリングの導入を進める。また，迅速な研究成果が求められる研究者からの要求に応じて装置の設計・製作を行う。

計算科学研究センター（岡崎共通研究施設）

- 目 的 計算科学研究センターは、全国共同利用施設として、高性能分子シミュレータを国内の大学等の研究者に提供し、個々の研究室の計算機等では不可能な大規模計算等に関する共同利用研究を支援する。さらに、分子科学分野の計算に必要なライブラリの整備を進める。また、ワークショップやスクールなどを通して研究交流や人材育成の場を提供する。これらの活動に加え、スーパーコンピュータ「富岳」成果創出プログラム，データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクトの 2 プロジェクト研究に対し，研究の場・計算機資源を提供する。

岡崎連携プラットフォーム（岡崎共通研究施設）

- 目 的 岡崎連携プラットフォームは、岡崎3機関（基礎生物学研究所、生理学研究所及び分子科学研究所）の枠を超えた融合研究を推進するための組織として2024年7月に設置された。分子科学分野では、計算科学手法の開発と活用、光を用いた先端的な研究手法や光源の開発、そして新規分子・物質の設計やそれらの高度集積化を通して、原子・分子・生命システムが示す多様な構造、物性、反応性、触媒能、エネルギー変換などの高次機能や動的構造を解明するとともに、新たな現象や有用な機能の設計と制御に取り組む。また、国内外の大学・研究機関と連携し、国際的に卓越した若手研究者を育成するための支援を強化する。
- 2024年11月時点で、同プラットフォーム下に「スピン生命科学コア」,「オープンミックスラボ [OML OKAZAKI]」が設置されている。

生命創成探究センター（自然科学研究機構）

- 目 的 生命創成探究センター（Exploratory Research Center on Life and Living Systems = ExCELLS）は、自然科学研究機構の更なる機能強化を目指すために、岡崎統合バイオサイエンスセンターを中核として機構の組織を再編・統合して設置された。本センターでは、「生きているとは何か？」という人類の根源的な問いの解明に向けて、生命の仕組みを観察する新たな技術を開発するとともに、蓄積されていく多様な情報の中に隠されている意味を読み解き、さらに合成・構成的アプローチを通じて生命の基本情報の重要性を検証する活動を行っている。こうした「みる・よむ・つくる」のアプローチを基軸に、生命の始原形態や環境適応戦略を理解するために、極限環境生命の研究者とも協力しながら異分野融合型の研究を進め、生命の設計原理を探究する。この目的のもとに、国内外の大学・研究機関の連携によりコミュニティ横断型の共同利用・共同研究を推進する。

2-7 研究部門等

特別研究部門

- 研究目的
- 1, 分子科学分野において最先端の科学を切り拓く世界的研究者を「卓越教授」として招へいし、研究に専念できる環境を提供する。分子科学分野のトップレベル研究を支援する
 - 2, 分子科学分野において独創的な研究を行っている大学教員をクロスアポイントメントで招へいし、分子研の先端設備を使った研究に集中的に取り組む場を提供する

社会連携研究部門

- 研究目的
- 主に企業などからの資金によって運営するオープンイノベーション拠点とし産官学の共同研究を実施する

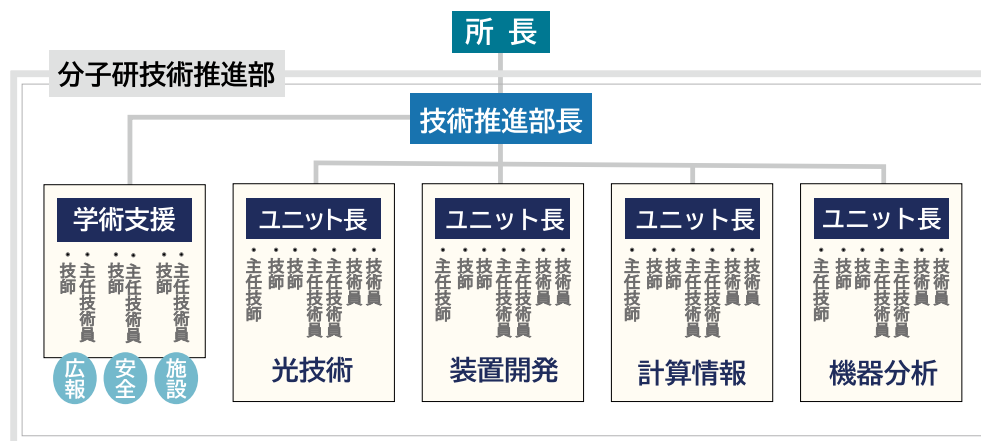
2-8 研究支援部門等

2-8-1 技術推進部

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

技術推進部は、以前の技術課と同様に所長直属の組織であり、技術職員を統轄する技術推進部長の下、光技術ユニット、装置開発ユニット、計算情報ユニット、機器分析ユニットの4つのユニット、及び学術支援担当職員により構成される。構成員は2024年4月1日現在で37名である。技術職員は、主に研究施設に配属され、それぞれの持つ高い専門技術で研究教育職員と協力し、先端的かつ独創的な研究を技術面から支え、大学共同利用機関の使命を果たすために努力している。各施設に配属された技術職員の対応する技術分野は広範囲にわたっている。機械、電気、電子、光学、情報、といった工学知識や各要素技術の技能を基に支援業務として実験機器の開発、システム開発等を行い、物理・化学・生命科学を基に物質の構造解析や化学分析等を支援している。この様に技術職員の持っているスキルを活用し、UVSORやスパコン、レーザーシステム、X線回折装置、電子顕微鏡、ESR、SQUID、NMRなど大型設備から汎用機器の維持管理、施設の管理・運用も技術職員の役割としている。さらに、科学の知識を基に研究所のアウトリーチ活動も職務として担い、広報に関する業務、出版物の作成も行っている。所内の共通業務としてネットワークの管理・運用、安全衛生管理も技術推進部の業務として行っている。安全衛生管理では、研究所の性質から毒物・劇物・危険物など薬品知識や低温寒剤等高压ガスの知識、放射線管理、その他技術的な側面から毎週職場巡視を行い、分子研の安全衛生管理に寄与している。

技術職員が組織化されたのは、1975年に創設された分子科学研究所技術課が日本で最初である。技術職員が組織化されたことで直接待遇改善につながったが、組織化の効果はそれだけでなく、施設や研究室の狭い枠に留まっていた支援を広く分子科学分野全体の研究に対して行うことができるようになり、強力な研究支援体制ができあがった。支援体制の横のつながりを利用し、岡崎3機関の岡崎統合事務センターと技術推進部が協力して最良の研究環境を研究者に提供することを目標に業務を推進している。しかし、事務組織とは違って分子研の技術職員は流動性に乏しいので、組織と個人の活性化を図るために積極的に次のような事項を推進している。



(1) 技術研究会

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

表1 技術研究会開催機関（中期計画第4期）

年度	開催機関	開催日	分科会	備考
2022	大阪大学	2022年9月1-2日	電子顕微鏡、磁気共鳴、X線構造解析、質量分析、有機微量元素分析、分光分析、熱分析、XPS等、安全衛生関係	ハイブリッド開催
	広島大学	2023年3月2-3日	情報・電気系、機械系、建築・土木・農学・水産学系、化学・医学・理学系、地域貢献、安全衛生	オンライン開催
	分子科学研究所	2023年3月10-11日	装置運用、計測・制御、極低温、工作技術、情報ネットワーク	オンライン開催
2023	熊本大学	2023年9月7-8日	電子顕微鏡、磁気共鳴、X線構造解析、質量分析、有機微量元素分析、分光分析、熱分析、XPS等、安全衛生関係、その他	ハイブリッド開催
	鳥取大学	2024年3月15日	実験・実習技術分野（化学、機械、教育工学、農学・水産・生物、土木・建築・環境、電気・電子・情報）、地域貢献技術分野、安全衛生技術分野	オンライン開催
	高エネルギー加速器研究機構	2024年3月7-8日	機械工作、実験装置、計測制御、真空・低温、情報技術・ネットワーク	ハイブリッド開催
2024	広島大学	2024年9月5-6日	電子顕微鏡、磁気共鳴、X線回折、質量分析、DNAシーケンサー、フローサイトメーター、共焦点レーザー顕微鏡、その他の装置、安全衛生関係、その他	ハイブリッド開催
	筑波大学	2025年3月5-7日	機械工作・ガラス工作、装置関係・実験装置・大型実験、回路・計測・制御、極低温、情報・ネットワーク、フィールド計測・農林水産海洋、生命科学、分析・評価、実験・実習・社会貢献、建築・土木・資源開発、施設管理・環境安全衛生管理、その他	オンサイト開催

(2) 技術研修

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

課セミナー」を行ってきた。技術推進部に改組後も、様々な技術分野のトピックを中心に開催する予定である。また、従来の受け入れ研修も小規模ながら続けている。なお、2020年度は新型コロナウイルス感染症の感染拡大の影響により実施できなかった。

表2に分子研での受け入れ状況を示す。

表2 技術研修受入状況（中期計画第4期）

年 度	受 入 人 数 (延)
2022	3
2023	5
2024	7

表3 2024年度技術研修受入状況（2024.4.1～2025.3.31）

氏 名	所 属	受入期間	備 考
後藤伸太郎	名古屋大学	2024.8.8～9	電子回路技術研修
後藤伸太郎	名古屋大学	2024.9.19～20	電子回路技術研修
後藤伸太郎	名古屋大学	2024.10.30～31	電子回路技術研修
太田 紘志	高輝度光科学研究センター	2024.11.5～6	光技術研修
後藤伸太郎	名古屋大学	2024.11.20～21	電子回路技術研修
庄司 愛子	岩手大学	2025.2.12～14	電子回路技術研修
太田 紘志	高輝度光科学研究センター	2025.2.24	光技術研修

(3) 人 事

技術職員人事は、法人化されてからは、広く人材を確保するために、国立大学法人等採用試験や公募採用も取り入れ、即戦力、より高度な専門技術を持つ人材の採用を行ってきた。また、職員採用については技術職員の年齢構成も考慮しているが、現在の職員の年齢構成は、やや団塊となる世代がベテラン層に見られ、ライン制の組織構造で起こる人材登用問題も深刻になりつつある。これらを踏まえスタッフ制に改組した。技術職員は教員と違って人事の流動性はほとんどないため、長期間、同一職場に勤務すると、職務に対する意識が慢性化し活力が低下しがちである。従って人事の流動は、組織と個人の活性化に重要な施策として不可欠である。その対策として法人化前は一定の期間、所属を移して勤務する人事交流を行ってきた。しかし、法人化後は、交流先の機関での人材確保や技術分野の一致が見られず、実施されていない状況である。現在、全国の技術職員のネットワークを通じて、新たな人事交流の可能性を模索している。

(4) 受 賞

高度で専門的な技術支援業務を通じて、分子科学研究の発展や研究成果の創出に顕著な貢献を行った技術職員に対して、その功績を讃えるために、日本化学会を始めとする学協会等が表彰制度を創設している。分子研創設以来の技術職員の受賞は、日本化学会化学技術有功賞15件、低温工学協会功労賞1件、日本放射光学会功労報賞2件、ナノテクノロジープラットフォーム技術支援貢献賞1件、文部科学大臣表彰研究支援賞1件、マテリアル先端リサーチインフラ技術支援貢献賞1件である。

2-8-2 安全衛生管理室

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

また安全衛生管理室では、分子科学研究所全職員に対する安全衛生教育も行っており、そのための資料作成、各種資格取得の促進、専門家の養成などを行っている。雇入れ時の安全衛生教育は年度初旬に定例として行うほか、講習テキストと講習会 DVD を用意し、年度途中の採用者に対しても、随時安全衛生教育が可能となるよう配慮している。また長期滞在する外国人研究者に対しては、英文の安全衛生講習会テキストならびに英語版講習会 DVD を作成し、これらの教材を用いた安全衛生教育を行っている。安全衛生に必要な情報は、安全衛生管理室の WEB ページ (<http://info.ims.ac.jp/safety/>) にまとめて掲載しており、必要な規則や書式に即座にアクセス可能である。また、安全衛生管理室員全員のメールアドレスが登録されたメーリングリスト (safety@ims.ac.jp) も設定しており、各種の質問などに機動的に対応できる体制になっている。年に数回、分子研安全衛生委員会（岡崎 3 機関の「安全衛生委員会」に相当）と合同で連絡会議を開催し、所内の安全衛生状況に関する情報交換、連絡の徹底等が円滑に行なわれる体制を採っている。

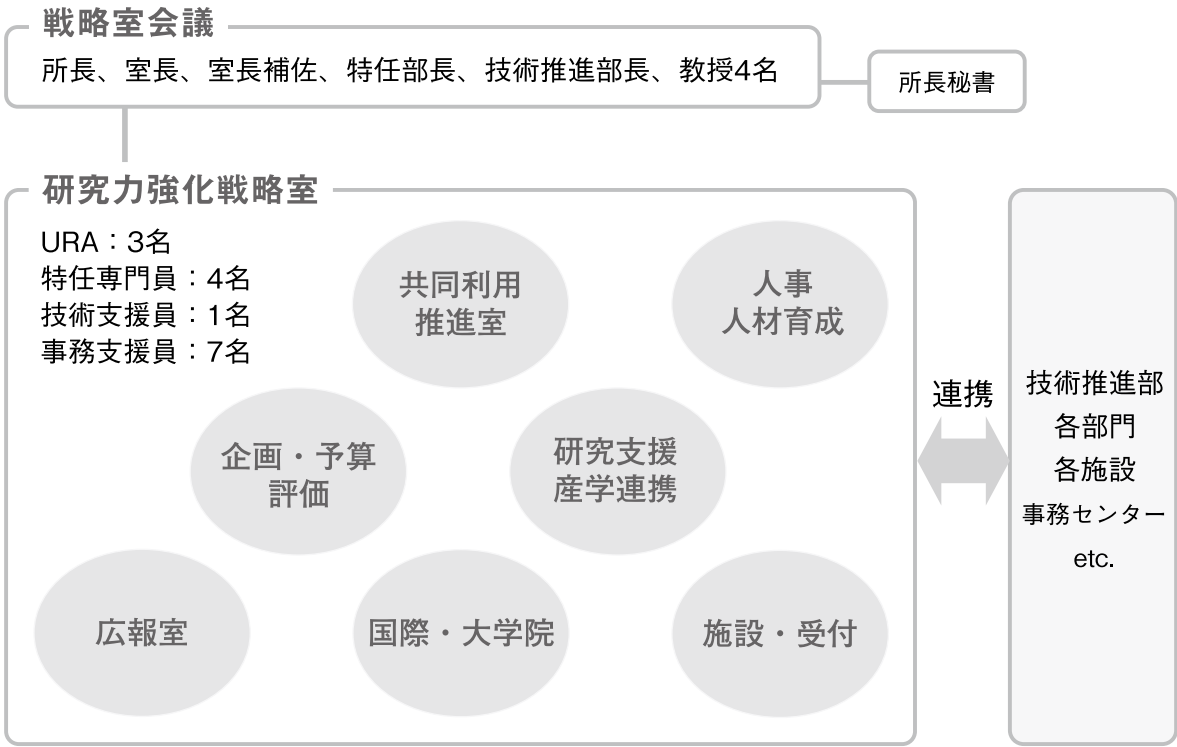
ガスボンベなどの高圧ガス容器は「高圧ガス保安法」に基づく管理が義務付けられており、一定数量を超えて所持する場合、県庁への届出が必要となる。そこで、分子研内で現在保有するガスボンベの数量と配置を把握するため、今年度、CRIS 化学物質管理システムへガスボンベ入出庫登録を行うこととした。また、モノシラン等の特殊高圧ガスの調査も実施する。登録実施にあたっては、ガスボンベ入出庫オンラインマニュアル・動画を作成した。

2-8-3 研究力強化戦略室

2013 年度から 10 年にわたって実施された研究大学強化促進事業においては、各研究機関にリサーチ・アドミニストレーター（University Research Administrator, URA）を置き、研究活動の企画・マネジメント、研究力の強化、また研究成果の活用、そのための広報等を担当することが求められてきた。自然科学研究機構では、2023 年度の事業終了後も各機関の研究力強化戦略室を維持する一方で、機構本部に置かれた研究力強化推進本部を再構築し、共創戦略統括本部を置いた。それぞれに URA 等のマネジメント人材、支援スタッフを置く形となっている。分子科学研究所の研究力強化戦略室では、室長を研究総主幹が務め、現場の運営を担うスタッフとして、2024 年度現在で URA 職員 3 名、特任専門員 4 名、事務及び技術支援員 8 名の体制で運用している。また室員として、室長の他に所内教授 4 名と技術推進部長及び研究戦略担当の特任部長を指名し、随時、研究力の維持・強化に向けた方策に関する議論をする会議の場を設けている。この会議には、所長、及び必要に応じて URA 職員等も同席する。また研究力強化戦略室の内部組織として共同利用推進室を設置し推進室長が中心となり、所外の共同利用の推進のための諸業務を担うこととなった。それには、「大学連携研究設備ネットワーク」や「マテリアル先端リサーチインフラ」等の事業に関わる業務も一部含まれる。

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

研究力強化戦略室の体制



2-9 構成員

2-9-1 構成員

渡辺 芳人	所長
山本 浩史	研究総主幹（併）
大峯 巖	特別顧問, 名誉教授
中村 宏樹	特別顧問, 名誉教授
岩田 末廣	名誉教授
岩村 秀	名誉教授
宇理須 恆雄	名誉教授
岡崎 進	名誉教授
加藤 政博	名誉教授
北川 禎三	名誉教授
桑島 邦博	名誉教授
小杉 信博	名誉教授
小林 速男	名誉教授
田中 晃二	名誉教授
永瀬 茂	名誉教授
西 信之	名誉教授
平田 文男	名誉教授
平本 昌宏	名誉教授
廣田 榮治	名誉教授
藤井 正明	名誉教授
薬師 久彌	名誉教授
吉原 經太郎	名誉教授
渡辺 芳人	名誉教授

物故名誉教授

赤松 秀雄
伊藤 光男
井口 洋夫
茅 幸二
木村 克美
齋藤 修二
長倉 三郎
花崎 一郎
丸山 有成
諸熊 奎治

理論・計算分子科学研究領域

研究主幹（併） 石崎 章仁

理論分子科学第一研究部門

斉藤 真司	教授
甲田 信一	助教
TANG, Zhiye	助教
DASCHAKRABORTY, Snehasis	学振外国人招へい研究者
ZHU, Zhe	大学院生
鶴間 稜平	大学院生

理論分子科学第二研究部門

石崎 章仁	教授
三輪 邦之	助教

計算分子科学研究部門

江原 正博	教授（兼）（計算科学研究センター）
奥村 久士	准教授（兼）（計算科学研究センター） （生命創成探究センター）
岡崎 圭一	准教授（兼）（計算科学研究センター）
UDAYSKUMAR, Deva Priyakumar	外国人研究職員

伊藤 暁	助教
大貫 隼	助教
白男川 貴史	助教
ZHAO, Pei	特任助教
大多和 克紀	大学院生
関 健仁	大学院生
鈴木 日奈子	特別共同利用研究員
杉本 縁	事務支援員

理論・計算分子科学研究部門（客員研究部門）

藤井 啓祐	客員教授（阪大院基礎工）
土持 崇嗣	客員教授（芝浦工大工）
阿部 穰里	客員准教授（広大院先進理工）

千葉 史朱香	事務支援員
川口 律子 *	事務支援員
増田 道子	事務支援員

光分子科学研究領域

研究主幹（併） 大森 賢治

光分子科学第一研究部門

岡本 裕巳	教授（併）
-------	-------

光分子科学第二研究部門

大森 賢治	教授
DE LÉSÉLEUC, Sylvain	特任准教授
富田 隆文	助教
田村 光	特任助教
CHAUHAN, Vikas Singh	特任研究員
周 烏居 諭来	特任研究員
松原 卓也	特任研究員
JAUNET USAGE JAUNET-LAHARY, Titouan Teddy	特任研究員
岡田 満哉	特別訪問研究員

犬飼 和久	特任専門員	高橋 翔太	若手研究者雇用特別研究員
川本 美奈子	特任専門員	佐藤 宏祐	特任研究員
鈴木 光一	特任専門員	御領 紫苑	研究員
牧野 茜	特任専門員	林 仲秋	大学院生
松尾 友紀子	特任専門員	望月 達人	大学院生
西岡 稚子	特任専門員	吉澤 龍	大学院生
TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh	大学院生	金 成翔	大学院生
田中 愛登	大学院生	常川 響	大学院生
KOCIK, Robin Rayane	大学院生	高原 裕大	大学院生
渡部 元輝	大学院生	手塚 玄惟	特別共同利用研究員
MAURICIO URBINA, Jorge Antonio	大学院生	榊原 隆之	技術支援員
越田 陽子	技術支援員	電子物性研究部門	
中井 愛里	技術支援員	山本 浩史	教授（併）
山岸 芽衣	事務支援員	分子機能研究部門	
武井 美緒	事務支援員	西村 勝之	准教授
光分子科学第三研究部門		物質分子科学研究部門（客員研究部門）	
解良 聡	教授	尾坂 格	客員教授（広大院先進理工）
長坂 将成	助教	田中 耕一郎	客員教授（京大院理）
福谷 圭祐	助教	秋元 郁子	客員准教授（和歌山大システム工）
下ヶ橋 龍之介	特任助教		
中澤 遼太郎	特任研究員	横田 光代 *	事務支援員
PALASSERY ITHIKKAL, Jaseela	大学院生	志村 真希	事務支援員
西野 史	大学院生	栗田 佳子 *	事務支援員
光分子科学第四研究部門（客員研究部門）		生命・錯体分子科学研究領域	
福原 武	客員教授（理研量子コンピュータ研）	研究主幹（併） 飯野 亮太	
松下 智裕	客員教授（奈良先端大院先端科学）	生体分子機能研究部門	
中山 泰生	客員准教授（東理大理工）	青野 重利	教授（兼）（生命創成探究センター）
神谷 美穂	事務支援員	加藤 晃一	教授（兼）（生命創成探究センター）
物質分子科学研究領域		飯野 亮太	教授
研究主幹（併） 横山 利彦		中村 彰彦	准教授（ク）（静岡大農）（特別研究部門）
電子構造研究部門		澤井 仁美	准教授（ク）（長崎大総合生産）（特別研究部門）
横山 利彦	教授	大友 章裕	助教
木村 真一	教授（ク）（阪大院生命機能）（特別研究部門）	原島 崇徳	助教
大西 洋	教授（ク）（神戸大院理）（特別研究部門）	林 成一郎	特任研究員（IMS フェロー）
杉本 敏樹	准教授	岩崎 美雪	研究員
金井 恒人	特任講師	矢木 真穂	特別訪問研究員
櫻井 敦教	助教	谷中 冴子	特別訪問研究員
倉橋 直也	特任助教	磯野 裕貴子	特任専門員
前島 尚行	特任助教	高木 克樹	特別共同利用研究員
斎藤 晃	若手研究者雇用特別研究員	西崎 竜平	特別共同利用研究員
		山本 真由子	技術支援員

生体分子情報研究部門

秋山 修志	教授（併）
倉持 光	准教授（併）
古池 美彦	助教（併）

錯体触媒研究部門

魚住 泰広	教授
檜山 儀恵	准教授
大塚 尚哉	助教
塚本 兼司	特任助教
田澤 文	研究員
ZHANG, Kaili	大学院生
服部 修佑	大学院生
加藤 雅之	大学院生
寺島 悠人	大学院生
西岡 雪奈	技術支援員
原田 晋子	技術支援員
丸山 莉央	技術支援員
牛田 妃菜乃	事務支援員

錯体物性研究部門

瀬川 泰知	准教授
張本 尚	助教
杉山 晴紀	特別訪問研究員
廣田 宗士	大学院生
渡邊 幸佑	大学院生
吉田 瑠	大学院生
加納 春華	大学院生
中野 さち子	技術支援員
平田 直	技術支援員

生命・錯体分子科学研究部門（客員研究部門）

神谷 由紀子	客員教授（神薬大工）
佐藤 宗太	客員教授（東大院工）
鳥谷部 祥一	客員教授（東北大院工）
福富 幸代	事務支援員
谷分 麻由子	事務支援員
川口 律子*	事務支援員
野村 潤子	事務支援員

協奏分子システム研究センター

センター長（併） 秋山 修志

階層分子システム解析研究部門

秋山 修志	教授
斉藤 真司	教授（併）
倉持 光	准教授
古池 美彦	助教
小杉 貴洋	助教

米田 勇祐	助教
堀内 滉太	助教
近藤 貫太	大学院生
落合 奎介	大学院生
杉坂 かな恵	技術支援員
鷲尾 みどり	技術支援員
鈴木 規子	技術支援員
大原 さとみ	技術支援員
山本 優里佳	技術支援員
岡田 亜樹	技術支援員
谷浦 愛子	技術支援員
蜂須賀 円	技術支援員

機能分子システム創成研究部門

山本 浩史	教授
佐藤 拓朗	助教
WU, Dongfang	特任研究員
加藤 雄介	特別訪問研究員
戸川 欣彦	特別訪問研究員
佐藤 琢哉	特別訪問研究員
岸根 順一郎	特別訪問研究員
楠瀬 博明	特別訪問研究員
楠本 恵子	大学院生
竹脇 由佳	大学院生
後藤 拓	大学院生
村田 了介	技術支援員

生体分子システム研究部門

青野 重利	教授（兼）（生命創成探究センター）
加藤 晃一	教授（兼）（生命創成探究センター）
飯野 亮太	教授（併）
鈴木 博子	事務支援員
石川 裕子	事務支援員
神谷 美穂*	事務支援員

メゾスコピック計測研究センター

センター長（併） 岡本 裕巳

物質量子計測研究部門

大森 賢治	教授（併）
杉本 敏樹	准教授（併）

織細計測研究部門

岡本 裕巳	教授
江原 正博	教授（併）
山西 絢介	特任助教
CHENG, An-Chieh	特任助教
AHN, Hyo-Yong	特任助教（併）（共創戦略統括本部）

広帯域相関計測解析研究部門

飯野 亮太	教授（併）
熊谷 崇	准教授
西田 純	助教
WANG, Yu	特任研究員
伊藤 敦子	事務支援員

特別研究部門

藤田 誠	卓越教授（ク）（東大国際高等研）
木村 真一	教授（ク）（阪大院生命機能）（電子構造研究部門）
大西 洋	教授（ク）（神戸大院理）（電子構造研究部門）
高谷 光	教授（任）（帝京科学大生命環境）
中村 彰彦	准教授（ク）（静岡大農）（生体分子機能研究部門）
澤井 仁美	准教授（ク）（長崎大総合生産）（生体分子機能研究部門）
三橋 隆章	特任助教
増田 道子 *	事務支援員
神谷 美穂 *	事務支援員
栗田 佳子 *	事務支援員
川口 律子 *	事務支援員
野村 潤子 *	事務支援員

社会連携研究部門

平等 拓範	特任教授（ク）（理研 SPring-8）
竹家 トーマス啓	特任准教授
YAHIA, Vincent	特任研究員
鈴木 昌世	特任研究員
CASSOURET, Florent	特任研究員
BRUNETEAU, Baptiste Valentin	特任研究員
佐藤 庸一	特別訪問研究員
石月 秀貴	特別訪問研究員
吉田 光宏	特別訪問研究員
瀧上 浩幸	特別訪問研究員
田村 彰良	特別訪問研究員

KAUSAS, Arvydas

尾高 英穂	特別訪問研究員
角谷 利恵	特別訪問研究員
殖栗 敦	特任専門員
佐野 雄二	特任専門員
松田 美帆	特命専門員
小林 純	技術支援員
水嶋 一彦	技術支援員
伊吹 剛	技術支援員
小野 陽子	事務支援員
奥原 紀恵	事務支援員

極端紫外光研究施設

施設長（併） 解良 聡

光源加速器開発研究部門

加藤 政博	特任教授（ク）（広大 HiSOR）
-------	-------------------

電子ビーム制御研究部門

平 義隆	准教授
松田 博之	特任研究員
脇田 幸哉	特別共同利用研究員

光物性測定器開発研究部門

松井 文彦	教授
田中 清尚	准教授
佐藤 祐輔	助教
萩原 健太	特任研究員(IMS フェロー)
大門 寛	研究員
佐々葉 遼平	特別共同利用研究員
河野 健人	特別共同利用研究員
増田 圭亮	特別共同利用研究員
ZHU, Yupeng	特別共同利用研究員

光化学測定器開発研究部門

荒木 暢	主任研究員
岩山 洋士	主任研究員
金安 達夫	准教授（任）（九州シンクロトロン光研究センター）
片柳 英樹	助手
杵本 泰伸	特任専門員
水口 あき	技術支援員
石原 麻由美	事務支援員
加茂 恭子	事務支援員
横田 光代	事務支援員

機器センター	センター長(併) 横山 利彦
湊 丈俊	主任研究員
中村 敏和	特任研究員(併)
鈴木 敏泰	特任研究員
石山 修	特任研究員
中本 圭一	特任研究員
太田 康仁	特任研究員
賀来 美恵	特任研究員
伊木 志成子	特任専門員
石田 向日葵	特任専門員
大原 三佳	特別協力研究員
今井 弓子	技術支援員
久保田 亜紀子	技術支援員
内田 真理子	技術支援員
兵藤 由美子	事務支援員
船木 弓子	事務支援員
栗田 佳子	事務支援員
遠山 遊	事務支援員

装置開発室	室長(併) 山本 浩史
石川 晶子	技術支援員
菅沼 光二	技術支援員
稲垣 いつ子	事務支援員

安全衛生管理室	室長(併) 鈴木 敏泰
戸村 正章	助手

研究力強化戦略室	室長(併) 山本 浩史
中村 敏和	特任研究員(特任部長 (研究戦略担当))
藤田 浩正	特任専門員
永園 尚代	特任専門員
野川 京子	特任専門員
太田 みのり	特任専門員
野村 恵美子	特任専門員
川尻 敏孝	特任専門員
池永 優弥子	特任専門員
藤川 武敏	特命専門員
福井 豊	特命専門員
中村 理枝	技術支援員
杉山 加余子	事務支援員
鈴木 さとみ	事務支援員
小倉 康子	事務支援員
太刀川 茉莉	事務支援員
朝倉 由希子	事務支援員
鶴田 由美子	事務支援員

岡崎共通研究施設(分子科学研究所関連)	
計算科学研究センター	センター長(併) 江原 正博
斉藤 真司	教授(兼)
江原 正博	教授
奥村 久士	准教授(兼)
岡崎 圭一	准教授
大野 人侍	准教授
大貫 隼	助教(兼)
白男川 貴史	助教(兼)
石田 干城	助手
MAHMOOD, Md Iqbal	特任研究員
WANG, Yuelin	特任研究員
宇野 明子	技術支援員
近藤 紀子	事務支援員
浦野 宏子	事務支援員

生命創成探究センター(分子科学研究所関連)	
創成研究領域	
加藤 晃一	教授
青野 重利	教授
古賀 信康	教授(任)(阪大蛋白研)
奥村 久士	准教授
伊藤 暁	助教(兼)
小杉 貴洋	助教(兼)
川口 律子	事務支援員
極限環境生命探査室	
加藤 晃一	教授(併)

技術推進部	部長 繁政 英治
原田 美幸	技師
内山 功一	主任技術員
光技術ユニット	ユニット長 林 憲志
中村 永研	主任技師
林 憲志	技師
牧田 誠二	技師
岡野 泰彬	技師
矢野 隆行	主任技術員
酒井 雅弘	主任技術員
近藤 直範	主任技術員
手島 史綱	主任技術員
湯澤 勇人	主任技術員
太田 紘志	技術員
清水 康平	技術員
水川 哲徳	技術支援員
山崎 潤一郎	技術支援員

装置開発ユニット	ユニット長	近藤 聖彦
		近藤 聖彦
		主任技師
		豊田 朋範
		主任技師
		松尾 純一
		主任技術員
		高田 紀子
		主任技術員
		木村 和典
		技術員
		木村 幸代
		技術員
		宮崎 芳野
		技術員

計算情報ユニット	ユニット長	岩橋 建輔
		岩橋 建輔
		主任技師
		神谷 基司
		主任技術員
		内藤 茂樹
		主任技術員
		澤 昌孝
		技術員
		長屋 貴量
		技術員
		木下 敬正
		技術員

金城 行真	技術員	
鈴木 和磨	技術員	
矢崎 稔子	特定技術職員	
水谷 文保	技術支援員	
機器ユニット	ユニット長	繁政 英治
		高山 敬史
		主任技師
		藤原 基靖
		主任技術員
		上田 正
		主任技術員
		浅田 瑞枝
		主任技術員
		賣市 幹大
		主任技術員
		岡野 芳則
		技術員
		宮島 瑞樹
		技術員
		長尾 春代
		技術員
		平野 佳穂
		技術員

整理日付は 2024 年 5 月 1 日現在。

(併)：併任, (兼)：兼務, (任)：兼任, (ク)：クロスアポイントメント。

* 事務支援員で複数の研究領域・研究施設を担当しているもの。

職名の後に () 書きがある者は客員教員等で、本務所属等を記載している。

派遣職員を含む。

2-9-2 現 員

2024 年 5 月 1 日現在

区 分 職 名		研究力強化戦略室・安全衛生管理室等	研究領域 *1				研究部門	
			理論・計算分子科学	光分子科学	物質分子科学	生命・錯体分子科学	特別	社会連携
研究	教 授	1	2[2,0]	3[2,0]	2[2,0]	3[3,0]	3[0,1]	1
	准教授	0	0[1,0]	2[1,0]	2[1,0]	3[0,0]	2	1
	主任研究員	0	0	0	0	0	0	0
	講 師	0	0	0	1	0	0	0
	助 教	0	6	4	2	8	0	0
	特任助教	0	1	6	2	1	1	0
	研究員	1	0	4	6	2	0	4
	小計	2	9[3,0]	19[3,0]	15[3,0]	17[3,0]	6[0,1]	6
研究支援	技術職員	3	0*3					
	特任専門員*2	11	10*3					
	再雇用職員	2	0*3					
	技術支援員	1	11*3					
	事務支援員	6	13*3					
	小計	23	34					
合計		25	106					

区 分 職 名		研究施設			岡崎共通研究施設	自然科学研究機構(分子研)	合 計 所内 (女性／外国人) [客員, 兼任]	
		極端紫外光研究施設	機器センター	装置開発室	計算科学研究センター	生命創成探究センター*4		
研究	教 授	2	0	0	1	2	20 (0/0)	[9,1]
	准教授	2[0,1]	0	0	2	1	15 (2/1)	[3,1]
	主任研究員	2	1	0	0	0	3 (0/0)	[0,0]
	講 師	0	0	0	0	0	1 (0/0)	[0,0]
	助 教	1	0	0	0	0	21 (0/1)	[0,0]
	特任助教	0	0	0	0	0	11 (2/2)	[0,0]
	研究員	2	5	0	2	0	26 (3/9)	[0,0]
	小計	9[0,1]	6	0	5	3	97 (7/13)	[12,2]
研究支援	技術職員	11	9	7	8	0	38	
	特任専門員*2	2	2	0	2	0	27	
	再雇用職員	1	0	0	0	0	3	
	技術支援員	1	3	2	1	0	19	
	事務支援員	3	4	1	2	0	29	
	小計	18	18	10	13	0	116	
合計		27	24	10	18	3	213	

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

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

* 2 助手を含む。

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

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

2-9-3 人事異動状況

(1) 分子科学研究所の人事政策

分子科学研究所では創立以来、研究教育職員（教授、准教授、助教、上席研究員および主任研究員）の採用に関しては厳密に公募の方針を守り、しかもその審議は全て所内5名、所外5名の委員で構成される運営会議人事選考部に委ねられている。さらに、厳密な選考を経て採用された准教授、助教は分子科学コミュニティと分子科学研究所教員の流動性を保つため原則として内部昇任が禁止されている（例外は創立以来2件のみ）。教授、准教授の研究グループの研究活動に関しては、所長および運営顧問、研究顧問によるヒアリング、また研究領域あるいは施設ごとに国内委員と国外委員による点検・評価を受けている。さらに、教授、准教授の個人評価は confidential report の形で所長に報告されるなど、所長は教授、准教授の研究グループの活性化と流動性に心がけている。なお、助教が6年を越えて勤務を継続する場合は、毎年、本人の属する研究領域の主幹あるいは施設長が主幹・施設長会議においてそれまでの研究活動と転出の努力の状況を報告し、同会議で承認された後、教授会議では本人の属するグループの教授または准教授によって同様の手続きを行い、研究期間の1年延長の承認を得るという手続きをとっている。2011年度より、特任制度年俸制職員の特任准教授である若手独立フェロー制度を実施している。特任制度年俸制職員の定めに従って任期は5年である。対象は、博士号取得2年以内（見込み含む）、あるいは博士号取得後、海外で研究中の人は帰国後1年以内（滞在中含む）であったが、2017年度に見直しが行われ、国内外を問わず博士号取得3年以内を対象とすることとなった。2015年度より、新規採用の研究教育職員は原則、年俸制に移行することになった。特任制度の年俸制ではなく、任期は定めず、毎年度末に業績評価が実施される。2017年度より、新たに主任研究員制度の運用を開始したほか、特別研究部門を設けて、世界トップレベルの研究者を招へいすることとした。2019年より、同部門に大学教員をクロスアポイントメントで招へいする制度の運用を開始した。

(2) 創立以来の人事異動状況（2025年3月31日現在）

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

着任人数

中期計画区分	第3期	第4期				現員数* 2024年5月1日現在
年 度	2016～ 2021	2022	2023	2024	2022～ 2024 計	
教 授	5	1	1	0	2	20 (0/0)
准教授	11	1	1	5	7	15 (2/1)
主任研究員	2	1	0	0	1	3 (0/0)
講 師			1	1	2	1 (0/0)
助 教	22	2	2	2	6	21 (0/1)
特任助教	8	3	5	3	11	11 (2/2)
研究員	88	11	14	11	36	26 (3/9)
計	136	19	24	22	65	97 (7/13)

* (A/B) は、女性 (A) と外国人 (B) 研究者人数で内数

転出人数

中期計画区分	第 3 期	第 4 期			
年度	2016 ～ 2021	2022	2023	2024	2022 ～ 2024 計
教 授	3	0	0	4	4
准教授	10	5	0	2	7
主任研究員	0	0	0	0	0
講 師			0	0	0
助 教	32	12	3	1	16
特任助教	5	0	1	6	7
研究員	88	9	11	12	32
計	138	26	15	25	66

② 客員教員等

区分	職 名	創立～2024 年度	現員数 ^{*2} 2024 年 5 月 1 日現在
客員研究部門（国内）	教 授	173	9(1)
	准教授	182	3(2)
国外 ^{*1}	教 授	85	0
	准教授	51	0

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

* 2 （ ）は女性の人数で内数。

2-10 財 政

2024 年度

収入 (単位：千円)

	分子科学研究所	岡崎共通研究施設 分子研関係 (計算科学研究センター)	生命創成探究セン ター分子研関係	計
運営費交付金	2,296,346	638,000	66,814	3,001,160
施設整備費補助金	0	0	0	0
補助金等収入	22,921	0	0	22,921
大学改革支援・学位授与機構施設費交付金	0	0	0	0
自己収入（雑収入）	56,850	0	0	56,850
産学連携等研究収入及び寄附金収入等 小計	2,734,717	7,075	73,610	2,815,402
産学連携等研究収入	2,649,950	6,675	73,610	2,730,236
寄附金収入	33,502	400	0	33,902
その他	51,264	0	0	51,264
目的積立金取崩額	0	0	0	0
引当特定資産取崩	266,273	14,630	0	280,903
合計	5,377,107	659,705	140,424	6,177,236

支出 (単位：千円)

	人件費	物件費	施設費	計
業務費 小計	1,123,619	2,039,426	857	3,163,902
教育研究経費	963,822	2,035,463	857	3,000,142
一般管理費	159,797	3,963	0	163,760
施設整備費	0	0	0	0
補助金等	8,688	14,233	0	22,921
産学連携等研究経費及び寄附金事業費等 小計	259,195	1,456,997	0	1,716,193
産学連携等研究費	234,478	1,411,887	0	1,646,365
寄附金事業費	2,800	15,763	0	18,563
その他	21,916	29,348	0	51,264
合計	1,391,501	3,510,657	857	4,903,015
繰越額				1,274,221
運営費交付金繰越（業務達成基準適用分）				70,000
引当特定資産				105,012
外部資金執行残				1,099,209
直接経費				717,405
間接経費				381,804
支出総額（繰越等を含む）				6,177,236

注）端数処理のため、合計が合わない場合がある。

補助金等：若手研究者雇用支援事業雇用支援金、共同利用・共同研究拠点形成事業費補助金など（科研費を除く。当該年度における科研費の受入（採択）状況は、「外部資金獲得状況の推移」及び「科学研究費助成事業」を参照）

産学連携等研究費：受託研究・共同研究の直接経費・間接経費・産学官連携推進経費並びに科研費の間接経費で、いずれも当該年度の受入分のほか当該年度に執行した前年度からの繰越分は収入並びに支出に含む。（当該年度における受入状況等については、「外部資金獲得状況の推移」、「受託研究 内訳」を参照）

寄附金：当該年度に受け入れた寄付・基金のほか、前年度以前に受け入れた寄付・基金のうち当該年度に執行したものは収入並びに支出に含む。（当該年度受入分については、「外部資金獲得状況の推移」を参照）

その他：大学院教育経費（総研大）など

2023 年度

収入

(単位：千円)

	分子科学研究所	岡崎共通研究施設 分子研関係 (計算科学研究センター)	生命創成探究セン ター分子研関係	計
運営費交付金	2,096,544	621,538	61,112	2,779,195
施設整備費補助金	0	0	0	0
補助金等収入	13,386	2,172	0	15,558
大学改革支援・学位授与機構施設費交付金	0	0	0	0
自己収入（雑収入）	59,348	0	0	59,348
産学連携等研究収入及び寄附金収入等 小計	1,433,401	6,968	46,266	1,486,635
産学連携等研究収入	1,359,385	6,568	44,910	1,410,863
寄附金収入	23,257	400	1,356	25,013
その他	50,759	0	0	50,759
目的積立金取崩額	0	0	0	0
引当特定資産取崩	92,037	0	0	92,037
合計	3,694,716	630,678	107,378	4,432,773

支出

(単位：千円)

	人件費	物件費	施設費	計
業務費 小計	1,084,030	1,609,779	10,098	2,703,907
教育研究経費	935,742	1,604,190	10,098	2,550,030
一般管理費	148,288	5,589	0	153,877
施設整備費	0	0	0	0
補助金等	6,516	9,042	0	15,558
産学連携等研究経費及び寄附金事業費等 小計	208,700	1,041,329	0	1,250,030
産学連携等研究費	186,574	999,961	0	1,186,536
寄附金事業費	1,490	11,245	0	12,735
その他	20,636	30,123	0	50,759
合計	1,299,246	2,660,150	10,098	3,969,495
繰越額				463,279
運営費交付金繰越（業務達成基準適用分）				180,000
引当特定資産				46,673
外部資金執行残				236,606
直接経費				189,042
間接経費				47,564
支出総額（繰越等を含む）				4,432,773

注）端数処理のため、合計が合わない場合がある。

補助金等：若手研究者雇用支援事業雇用支援金、共同利用・共同研究拠点形成事業費補助金など（科研費を除く。当該年度における科研費の受入（採択）状況は、「外部資金獲得状況の推移」及び「科学研究費助成事業」を参照）

産学連携等研究費：受託研究・共同研究の直接経費・間接経費・産学官連携推進経費並びに科研費の間接経費で、いずれも当該年度の受入分のほか当該年度に執行した前年度からの繰越分は収入並びに支出に含む。（当該年度における受入状況等については、「外部資金獲得状況の推移」、「受託研究 内訳」を参照）

寄附金：当該年度に受け入れた寄付・基金のほか、前年度以前に受け入れた寄付・基金のうち当該年度に執行したものは収入並びに支出に含む。（当該年度受入分については、「外部資金獲得状況の推移」を参照）

その他：大学院教育経費（総研大）など

外部資金獲得状況の推移（実施課題数と交付金額）

区 分			年 度		2019	2020	2021	2022	2023	2024
寄付金	分子科学研究所	件数（件）	20	24	16	9	119	128		
		金額(千円)	37,505	37,224	31,394	18,203	20,765	27,823		
	生命創成探究センター・岡崎共通研究施設（分子研分）	件数（件）	3	1	1	1	0	2		
		金額(千円)	3,100	2,000	1,500	610	0	400		
文部科学省 科学研究費 助成事業＊	分子科学研究所	件数（件）	81	76	74	87	75	68		
		金額(千円)	453,118	479,779	508,495	453,450	406,679	423,131		
	生命創成探究センター・岡崎共通研究施設（分子研分）	件数（件）	15	20	19	24	23	14		
		金額(千円)	104,130	80,331	73,515	94,026	86,970	53,560		
共同研究＊	分子科学研究所	件数（件）	8	9	10	12	13	10		
		金額(千円)	35,396	34,337	40,380	21,761	18,889	22,807		
	生命創成探究センター・岡崎共通研究施設（分子研分）	件数（件）	0	0	0	0	0	0		
		金額(千円)	0	0	0	0	0	0		
受託研究＊	分子科学研究所	件数（件）	25	21	25	27	26	29		
		金額(千円)	914,065	563,906	859,124	910,486	1,240,159	2,472,740		
	生命創成探究センター・岡崎共通研究施設（分子研分）	件数（件）	1	2	3	6	7	8		
		金額(千円)	16,250	14,560	17,810	56,861	63,401	100,711		
合計金額（千円）			1,440,084	1,115,246	1,439,393	1,403,900	1,686,492	2,946,501		

＊間接経費，産学官連携推進経費を含む。代表者課題および分担者課題の件数・配分額の合計（分子科学研究所，生命創成探究センター・岡崎共通研究施設の分子研分）を計上。

科学研究費助成事業

代表者課題

(単位：千円)

研究種目	分子科学研究所		生命創成探究センター・岡崎共通研究施設		合計	
	件数	交付金額	件数	交付金額	件数	交付金額
特別推進研究	0	0	0	0	0	0
新学術領域研究	0	0	0	0	0	0
挑戦的研究（開拓）	1	8,840	0	0	1	8,840
挑戦的研究（萌芽）	3	5,330	0	0	3	5,330
若手研究	9	10,660	1	1,690	10	12,350
学術変革領域研究 (A)	7	82,420	1	13,390	8	95,810
学術変革領域研究 (B)	0	0	0	0	0	0
基盤研究 (S)	3	144,950	0	0	3	144,950
基盤研究 (A)	5	73,210	1	17,420	6	90,630
基盤研究 (B)	10	63,700	1	4,810	11	68,510
基盤研究 (C)	5	7,150	1	2,080	6	9,230
研究活動スタート支援	2	3,120	0	0	2	3,120
国際共同研究（帰国発展）	0	0	0	0	0	0
国際共同研究強化 (B)	0	0	0	0	0	0
特別研究員奨励費	5	3,660	3	4,160	8	7,820
計	50	403,040	8	43,550	58	446,590

間接経費を含む。交付金額は分担者への配分金額を含む。
特別研究員奨励費は総研大分を除く。

分担者課題

(単位：千円)

研究種目	分子科学研究所		生命創成探究センター・岡崎共通研究施設		合計	
	件数	交付金額	件数	交付金額	件数	交付金額
特別推進研究	0	0	0	0	0	0
新学術領域研究	0	0	0	0	0	0
挑戦的研究（開拓）	2	975	0	0	2	975
学術変革領域研究 (A)	4	12,740	2	4,030	6	16,770
学術変革領域研究 (B)	0	0	0	0	0	0
基盤研究 (S)	0	0	1	3,900	1	3,900
基盤研究 (A)	2	975	0	0	2	975
基盤研究 (B)	5	3,081	2	1,690	7	4,771
基盤研究 (C)	3	520	1	390	4	910
計	16	18,291	6	10,010	22	28,301

間接経費を含む。
分子科学研究所と生命創成探究センター・岡崎共通研究施設で研究代表者と分担者の所属が異なる場合は、代表者課題の交付金額に含まれる分担者への配分金額と重複。

代表者課題及び分担者課題は、当該年度受入分の件数・受入金額のみ（繰越分は除外）を計上。

事業体	事業名		実施課題数 (代表者／分担者)	交付金額
文部科学省	科学技術試験研究委託事業	光・量子飛躍フラッグシップ プログラム Q-LEAP	0 /3	68,838
		マテリアル先端リサーチ インフラ	0 /1	67,800
		スーパーコンピュータ「富岳」 成果創出加速プログラム	0 /1	2,000
		NMR プラットフォーム	0 /1	2,041
		量子生命技術の創製と医学・ 生命科学の革新	0 /1	10,250
	学際領域展開ハブ形成プログラム		0 /1	9,400
環境省	令和 5 年度地域資源循環を通じた脱炭素化に向けた 革新的触媒技術の開発・実証事業		0 /1	18,074
防衛装備庁	令和 2 年度安全保障技術研究推進制度における委託事業		0 /1	42,002
国立研究開発法人 科学技術振興機構	ムーンショット型研究開発事業		2 /3	2,021,512
	戦略的創造研究推進事業	CREST	3 /0	62,365
		さががけ	4 /0	81,907
		ACT-X	2 /0	8,717
		ASPIRE	1 /0	3,198
	未来社会創造事業	大規模プロジェクト型	1 /0	82,737
創発的創造研究推進事業		6 /0	61,881	
国立研究開発法人 日本医療研究開発機構	創薬基盤推進研究事業		0 /1	1,300
	次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発事業		0 /2	19,160
	革新的医療技術研究開発推進事業		0 /1	8,710
独立行政法人 日本学術振興会	学術研究動向調査研究		1 /0	1,560
計			20 /17	2,573,451

間接経費を含む。

分子科学研究所，生命創成探究センター・岡崎共通研究施設の分子研分の合計件数・交付金額。

交付金額は，代表者課題には他機関の分担者・再委託先への配分金額を含む。分担者は代表者所属機関からの再委託による受入金額を計上。

2-11 岡崎共通施設

2-11-1 岡崎情報図書館

岡崎情報図書館は機構（岡崎 3 機関）の共通施設として 3 研究所の図書、雑誌等を収集・整理・保存し、機構（岡崎 3 機関）の職員や共同利用研究者等の利用に供している。

現在（2025.3）岡崎情報図書館は雑誌 1,521 種（和 291，洋 1,230），単行本 97,051 冊（和 13,363，洋 83,688）を所蔵している。

また、学術雑誌の電子ジャーナル化の趨勢にいち早く対応するよう努めており、現在、機構（岡崎 3 機関）として約 8,000 誌の電子ジャーナルが機構内部からアクセスできるようになっている。

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

2-11-2 岡崎コンファレンスセンター

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

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

2-11-3 岡崎共同利用研究者宿泊施設

自然科学研究機構岡崎 3 機関には、日本全国及び世界各国の大学や研究機関から共同利用研究等のために訪れる研究者のために三島ロッジ及び明大寺ロッジという共同利用研究者宿泊施設がある。施設概要は下記のとおりで、宿泊の申込みは、訪問する研究室の承認を得て、web 上の専用ロッジ予約システムで予約する。空室状況も同システムで確認することができる。また、明大寺ロッジでは総合研究大学院大学に所属する留学生用にも 8 室を割り当てている。平成 27 年度より、三島ロッジの一部を大学院生用のシェアハウスとして貸与している。

三島ロッジ	室数	シングル：60 室	ツイン：14 室	ファミリー：12 室
-------	----	-----------	----------	------------

共同設備	炊事場，洗濯室，公衆電話，情報コンセント
------	----------------------

明大寺ロッジ	室数	シングル：14 室	ファミリー：3 室
--------	----	-----------	-----------

2-11-4 職員会館

職員会館は機構（岡崎 3 機関）の福利厚生施設として建てられ、多様な面にて日常の活動に供している。

地下	トレーニングルーム
----	-----------

1 階	飲食・談話スペースおよび生協
-----	----------------

2 階	大会議室，中会議室，特別食堂，和室
-----	-------------------

2-12 知的財産

分子科学研究所では、特許出願、特許権の帰属等に関する実質的な審議を行うため、知的財産委員会を設けている。委員会は、概ね各領域から教員 1 名、装置開発室ユニット長、国際研究協力課長、財務課長から構成されている。この分子科学研究所知的財産委員会での議決を機構長に報告し、機構として特許出願等を行うことになる。法人化によって知的財産の研究機関による保有が円滑に行われるようになり、独創的な技術や物質開発に対する権利が相応に保証されるシステムが確立され、知的財産権の保有に対する評価が根付いてきたため、研究所における特許保有件数は着実に増加している。内容は、レーザー装置、抗体のサブサイトを改変する技術など多岐にわたっている。特許取得を基にした企業との共同研究も盛んであり、基礎科学の成果が企業を通して社会に還元される道を作っている。一部の成果は実用化され、2020 年度以降は、特許収入の増加につながっている。

2023 年度の発明件数は、個人有としたもの 0 件、機構有としたもの 5 件、2024 年度は、個人有 1 件、機構有 6 件であった（2025 年 3 月 31 日現在）。

特許登録数と特許料収入

中期計画区分	第 2 期	第 3 期	第 4 期				
年度	2010 ～ 2015 計	2016 ～ 2021 計	2022	2023	2024	2022 ～ 2024 計	
出願件数	67	92	4	6	9	19	
	国内	37	55	2	6	4	12
	国外	30	37	2	0	5	7
登録件数	59	61	8	5	14	27	
	国内	37	30	6	4	9	19
	国外	22	31	2	1	5	8
総保有件数	66	107	108	107	113	113	
	国内	44	61	63	63	64	64
	国外	23	46	45	44	49	49
特許料収入（千円） 国内外合計	1,670	54,548	24,330	24,919	26,874	76,123	

2-13 受 賞

分子科学研究所の研究内容は内外で高く評価を受けており、多くの受賞につながっている。研究所では特に若手研究者の育成を重要活動のひとつと位置付けており、その成果が若手人材の受賞という形で現れている。2023 年度の受賞件数は 15 件、2024 年度は 10 件であった。

受賞一覧（2023 年度～ 2024 年度）

受賞者名	賞の名称	受賞年月
山西 絢介	第 13 回名古屋大学石田賞	2025. 1
大門 寛	日本表面真空学会（JVSS）第 29 回榊賞	2024. 11
中村 敏和	電子スピンスイエンズ学会 令和 6 年度学会賞	2024. 11
中村 彰彦	日本応用糖質科学会 奨励賞	2024. 9
山西 絢介	第 56 回応用物理学会 講演奨励賞	2024. 9
小杉 貴洋	自然科学研究機構 第 13 回若手研究者賞	2024. 7
原島 崇徳	IUPAB2024, Student and Early Career Researcher Poster Award	2024. 6
大貫 隼	日本蛋白質科学会 若手奨励賞優秀賞	2024. 6
藤田 誠	Van't Hoff Award	2024. 6
杉本 敏樹	OPIC, TILA-LIC Internatinal Conference 2024, Best Paper Award	2024. 4
高橋 翔太	第 55 回応用物理学会 講演奨励賞	2024. 3
佐藤 宗太	日本化学連合 化学コミュニケーション賞	2024. 3
佐藤 拓朗	日本物理学会 若手奨励賞	2024. 3
原島 崇徳	第 7 回分子ロボティクス年次大会 若手研究奨励賞	2024. 3
長尾 春代	マテリアル先端リサーチインフラ令和 5 年度技術支援貢献賞	2024. 2
米田 勇祐	日本化学会 英国王立化学会 PCCP Prize	2024. 2
望月 達人	第 23 回日本表面真空学会 中部支部若手講演会 講演奨励賞	2023. 12
平 義隆	日本陽電子科学会 奨励賞	2023. 12
小林 稜平	日本生物物理学会 若手奨励賞	2023. 11
奥村 久士	日本シミュレーション学会 ベストオーサー賞	2023. 11
小林 速男	瑞宝中綬章	2023. 11
高橋 翔太	第 17 回分子科学討論会 分子科学会優秀講演賞	2023. 10
吉澤 龍	日本物理学会第 78 回年次大会 学生優秀発表賞	2023. 9
Sylvain de Léséleuc	自然科学研究機構 第 12 回若手研究者賞	2023. 7
中村 宏樹	瑞宝中綬章	2023. 5

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、ムーンスロ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	
ブラズモン—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	渋谷 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_2CT_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 聡
可搬型マニピレータを用いた 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ブラスタ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
紫外発光アルミン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ルリング	大阪大学	木村 真一
NaCl:I ⁻ ,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
ビスマス系リラ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
水素添加応力負荷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 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 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 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 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 sXAS Study of a Noble-Metal-Free Oxide Catalyst for High-Performance Oxygen Reduction Reaction マイクロ ARPES による新型カゴメ超伝導体の電子状態解明 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 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 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 グラフェン層間化合物の超伝導における d 軌道の役割 Cu(111) 上二次元リンシートの電子状態測定 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 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 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 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 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 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 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ピング量依存性の評価 Exploring a Novel Spin-Splitting Effect in the Altermagnet Candidate MnTe through Spin-Resolved ARPES 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 新規励起子絶縁体の電子構造の開拓的探求 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 高い正孔移動度を示す可溶化有機半導体の単結晶性薄膜の価電子バンド計測 (II) 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 層状 MAB 相化合物 MoAlB の低励起エネルギー角度分解光電子分光 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 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 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 Electronic Structure Study of Topological Materials Ge ₂ Bi ₂ Te ₅ and Ge ₃ Bi ₂ Te ₆ 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 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 ARPES Study of Anomalous Secondary Photoemission from SrTiO ₃ (100) 高精度光電子散乱分布測定のための高速撮像系の開発 真空紫外光学窓材料の屈折率測定 光学特性を激変させる超秩序構造の起源 界面磁気近接効果を利用した Pd 薄膜の電子状態変調 III	千葉大学 理化学研究所 富山大学 名古屋大学 九州大学 City University of Hong Kong 東北大学 日本原子力研究開発機構 東京大学 東京大学 東京工業大学 分子科学研究所 分子科学研究所 豊田工業大学 名古屋大学 奈良先端科学技術大学院大学 大阪大学 大阪大学 広島大学 Southern University of Science and Technology 東北大学 東京大学 東京工業大学 東京理科大学 分子科学研究所 名古屋大学 大阪大学 広島大学 広島大学 Southern University of Science and Technology 東京大学 立教大学 Westlake University 広島大学 大阪大学 山形大学 名古屋大学	奥平 幸司 荒岡 史人 彦坂 泰正 吉田 朋子 吉 岡 聡 WANG, Jian 佐藤 宇史 寺澤 知潮 岡林 潤 堀尾 真史 一ノ倉 聖 前島 尚行 福谷 圭祐 松波 雅治 伊藤 孝寛 服部 賢 中村 拓人 田中慎一郎 出田真一郎 LIU, Chang 佐藤 宇史 近藤 猛 平原 徹 中山 泰生 解良 聡 伊藤 孝寛 中村 拓人 出田真一郎 佐藤 仁 LIU, Chang 吉川 一朗 田邊 一郎 HE, Ruihua 高口 博志 大石 裕 北浦 守 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 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 核融合科学研究所	小林 政弘 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
放射光アンジュレー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
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の挙動の観測	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
電子ドーピング型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化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	Linköping 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の合成	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 聖治
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／ア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原子・分子電子励起状態精密量子化学計算	東洋大学	田代 基慶
タンパク質に結合する人工オリゴアミドのインシリコ設計	東京大学	森本 淳平
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
疎水的表面と浸水的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
刺激応答型ビ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 眞浩
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
含リン三次元パイ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	工藤 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 譲
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ィ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
機能性開設分子材料の構造-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発	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
病気に関わ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ト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ビア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 $d-\pi$ 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 族元素またはフラー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相変化挙動	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スト効果の解明	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 $LiF-BeF_2-ZrF_4-UF_6$ 混合熔融塩の物性評価	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
Bioinformation 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	小野寺 晶子
名古屋大学	石川 由希
基礎生物学研究所	瀬上 紹嗣
広島大学	豊田 賢治
名古屋大学	菊地真理子
東北大学	唄中 夏美
北海道大学	中原 健二
東北大学	秦 有輝
北海道大学	佐藤 昌直
岐阜大学	山内 恒生
東北大学	別所 - 上原学
愛知県医療療育総合センター	高木 豪
武蔵大学	堀越 正美
琉球大学	柿岡 諒
琉球大学	松波 雅俊
名古屋大学	浜島 りな
基礎生物学研究所	新美 輝幸
基礎生物学研究所	林 亜紀
埼玉大学	日原由香子
筑波大学	丹羽 隆介
水産研究・教育機構	紫加田知幸
金沢大学	本田 匡人
九州大学	高橋 大樹
北海道大学	倉田 正観
九州大学	門 宏明
信州大学	高島 誠司
北海道大学	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

和歌山県立医科大学	入江 克雅
生理学研究所	福永 雅喜
生理学研究所	Nilton Liuji KAMIJI
金沢大学	端野 開都
University of Toyama	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	松林 伸幸
関西大学	藤本 和士
大阪大学	尾方 成信
東京工業大学	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			
					前期	後期	計	登録者数
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		0	0	0	0	0	0
	(マテリアル) ^{*2}		12	10	6	6	12	40
	(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 『拡張型ランダム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 ₂ O ₄ 単結晶薄膜の作製(20) | 岡山大工 藤井達生 |
| 4. 時間分解X線回折で観るYbFe ₂ O 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 高感度メムブレ 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一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ェルの構造と機能

《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パー対

《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 宥錡 (東京科学大学)
Evaluation of True Chirality of Phonons in Chiral and Achiral Materials
- P08 岡野 洸明 (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)
ビ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）
有機キラル分子による一次元らせんベ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 NiTiO_3 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）
 C_3 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 穴戸 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 CoPe to the Magnetic Properties of Pcs/ γ - Fe_4N Organic-Inorganic Hybrid Thin Films
- [P14*] 岩井敦志（名古屋大学）
 $\text{Cu}(001)$ 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）
 $\text{Cu}(001)$ 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 $\text{CeCu}_y/\text{Cu}(111)-(2\times 2)$ 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）
電子ドーブ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 $\text{Ir}(111)$ 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）
電子ドーブされた 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 $\text{Li}_{6.5}\text{La}_3\text{Zr}_{1.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_{12}$ 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 $\text{Yb/Si}(111)$ の作製と電子状態観測
- [P31*] 西道広海（東京科学大学）
 $\text{Si}(111)(\sqrt{3}\times\sqrt{3})-\text{Sn}$ 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-TaS_2 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
フランス国立バリ高等化学学校	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バ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
インド工科大学カンプール校	インド	自然科学研究機構分子科学研究所とインド工科大学カンプール校との分子科学分野における共同研究に関する覚書	学術交流及び共同研究等の実施	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			
年度		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			
年度	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ようになり、大学共同利用機関として行う公募型の「岡崎コンファレンス」は、予算的には新しく認定されるようになった COE 各機関がそれぞれ行う独自企画の中規模の国際シンポジウムの予算に切り替わった。一方、法人化後、各法人で小～中規模の国際研究集会が独自の判断で開催できるようになり、分子科学研究所が属する自然科学研究機構や総合研究大学院大学でその枠が整備されつつある。ただし、所属している複数の機関がお互い連携して開催するのが主たる目的となっている。

このような背景の下、2006 年には全国の分子科学研究者の立案に基づく先導的な中小規模の国際研究会を開催する枠組みを維持継続するために、運営交付金による分子研独自の事業として「岡崎コンファレンス」を再開した。同年の第 66 回岡崎コンファレンスを皮切りに 2007 年以降は研究会の開催提案を広く公募し、全国共同利用による共同研究の一環として継続的に開催してきた。しかしながら 2020 年以降は世界的コロナ禍のため岡崎コンファレンスとしての国際研究会の提案・採択が無く、本コンファレンスは 2019 年の第 80 回を最後に開催されていない。一方で、

2020–2021 年度には岡崎コンファレンスの枠組みとは別に分子研 PI が主導的に関与する web を利用した幾つかの国際研究会や産学連携研究集会が開催されており、分子研研究会の新たな可能性を切り拓きつつある。

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あり, 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200億円オーダーの投資が行われている他、NSFおよびエネルギー省（DOE）において2019年より新たな量子科学技術プロジェクトが始まった。EUでは2018年から総額約1300億円規模を投資する10年プロジェクト「Quantum Technology Flagship」が進行中だ。英国では2014年から5年間で約500億円を投入した「The UK National Quantum Technologies Programme」の第2期が始まった。中国政府は、「科学技術イノベーション第13次五カ年計画（2016年）」の重点分野として、量子通信と量子コンピュータを重大科学技術プロジェクト、量子制御と量子情報を基礎研究の強化に位置づけている他、1000億円以上を投資して量子情報科学の国立研究所を合肥に建設中である。民間企業でも、Google、IBM、Microsoft、Intel等のITジャイアントが2000年代半ば以降、量子情報技術に莫大な投資を進めている。これらの国際動向を受けて、日本でも、文部科学省の科学技術・学術審議会において、量子科学技術に関する政策課題を議論する「量子科学技術委員会」が2015年6月に発足し、ここでの議論を踏まえ2018年に新たな国家事業「光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP」（2018～2027年度；2018年度予算総額22億円）がスタートした。本事業は、経済・社会的な重要課題に対し、量子科学技術を駆使して、非連続的な解決（Quantum

leap)を目指す研究開発プログラムである (<https://www.jst.go.jp/stpp/q-leap/index.html>)。(1)「量子情報処理(主に量子シミュレータ・量子コンピュータ)」(2)「量子計測・センシング」(3)「次世代レーザー」の3つの技術領域から成り立っている。

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

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 $\times$ 100 mm、最小線幅 1 μ m の描画が可能。段差計は、150 mm までの領域でステッチングなしで測定可能。その他にも、精密温湿度調整付きのイエロークリーンブースは、フォトリソグラフィーに関する一連の作業（基板洗浄、各種レジスト塗布、露光、現像、アッシング、エッチング）に利用可能。 [マスクレス露光装置（ナノシステムソリューションズ DL-1000/IMC）、段差計（KLA Tencor P7）、スピコート（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

	3次元光学プロファイラーシステム (Nexview) 3次元光学プロファイラーシステム (ZYGO Nexview) は、非接触で表面の3次元形状測定、表面粗さ測定を行う装置。つなぎ合わせ機能により□46.5 mm 範囲の3次元形状測定や、Ra0.1 nm 以下の超精密研磨面の測定、透明膜の厚さ測定 (1μm 以上) などが可能。X-Y ステージ可動範囲 200 mm×200 mm。Z 軸可動範囲 100 mm	山本浩史室長 近藤聖彦主任技師 木村幸代技術員	装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室
	電子ビーム描画装置 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。 [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 nm, 最小描画線幅: 6 nm]	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
低真空分析走査電子顕微鏡	幅広い試料に対する、SEM 観察と EDS 元素分析の環境を提供。SEM 本体は、日立ハイテクノロジー社製 SU6600。10 ~ 300Pa の低真空観察に対応し、絶縁性試料を導電処理なしで観察可能。分解能は、高真空 1.2 nm (30 kV), 低真空 3.0 nm (30 kV)。EDS 分析装置は、BrukerAXS 社製 XFlash5060FQ 及び XFlash6[10。表面凹凸の影ができにくく高感度な EDS 検出器を搭載。温度を -20 ~ 50℃ 程度で変えられるステージも利用可能。 [日立ハイテクノロジー SU6600, BrukerAXS_QUANTAX XFlash 5060FQ+XFlash6[10 コンバインシステム]	横山利彦センター長 石山 修特任研究員 上田 正主任技術員 平野佳穂技術員 今井弓子技術支援員	機器センター 機器センター 機器センター 機器センター 機器センター
電界放出形透過電子顕微鏡	高輝度で高い干渉性の電子線が得られるフィールドエミッション電子銃 (FEG) を搭載した電子顕微鏡。ナノスケールオーダーの超高分解能の像観察や分析が可能。エネルギー分散型 X 線分析装置 (EDS) による微小部の元素分析、組成マップを測定可能。STEM 機能により走査透過像測定が可能。 [JEOL_JSM-2100F (試料 3 mm φ 以内)]	横山利彦センター長 伊木志成子特任専門員 上田 正主任技術員 賣市幹大技術員 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 機器センター
走査プローブ顕微鏡	形状測定、機械特性測定、電気特性測定、ケルビンプローブ測定に特化した走査プローブ顕微鏡を用いた共同研究が可能。 [Bruker Dimension XR Icon NanoElectrical] 電気化学測定に特化した走査プローブ顕微鏡を用いた共同研究が可能。 [Bruker Dimension XR Icon NanoElectrochemical]	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	機器センター 機器センター 機器センター 物質分子科学
電子線プローブマイクロアナライザー (EPMA)	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)。 [JEOL_JXA-8230, SS-94000SXES]	横山利彦センター長 平野佳穂技術員	機器センター 機器センター
単結晶 X 線回折	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。 [Rigaku_XtaLAB Synergy-R/DW] 単結晶試料に X 線を入射すると、結晶構造を反映した回折点が得られる。この回折点の位置および強度から、結晶構造解析が行われる。構造解析により、原子の三次元座標 (立体構造) や原子間距離・結合距離、三次元の電子密度などの情報が得られる。数十~数百 mm サイズの単結晶試料が作成出来れば、3 時間程度で測定~解析が可能。 [Rigaku_MERCURY CCD-1・R-AXIS IV, MERCURY CCD-2]	横山利彦センター長 岡野芳則技術員	機器センター 機器センター

単結晶X線回折（微小結晶用）	高輝度X線：光学系にコンフォーカルミラーを用いており、CCD-1、-2に比べ、約10倍の高輝度X線ビームが得られ、測定が難しかった微小結晶でも測定が可能。ビーム径は ϕ 0.1～0.2mm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・空孔径分布などの情報が得られる。本装置では、各種ミラー・ステージ・オプションにより、様々な測定に対応可能である。 [Panalytical Empyrean]	横山利彦センター長 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。ディフレッ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pekX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 1×3mm 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-bandCW-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、吸収した光の光子数に対して分子から放出される発光光子数の割合で、発光の効率を表す。 [HAMAMATSU Quantaaurus-QY C11347-01]	横山利彦センター長 上田 正主任技術員	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用光源として用いられ、超高速時間分解吸収、或いは蛍光スペクトルを高い分解能で観測するための最も重要なツール。また、ピコ秒レーザーは、パルス幅が短くピークパワーが高いため、熱影響の少ない精密微細加工を実現できるツールとしても応用。 [Spectra-Physics, Quantronix_Millennia-Tsunami, TITAN-TOPAS]	横山利彦センター長 上田 正主任技術員	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。 [超高真空中での磁性薄膜作成・磁気光学 Kerr 効果によるその場観察評価。紫外レーザー磁気円二色性光電子顕微鏡も利用可]	横山利彦教授	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シ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
スピントロニク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 禅野 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
コラニュレン骨格を有するジアリールエテンのフォトリ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・環境学研究科	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
フェロアキシシャ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・環境学研究科 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ン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
ポリオキシ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架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 Neramittagapong
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 Neramittagapong
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_3N_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プスカイト酸化物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生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	熊本大学大学院先端機構	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 系層状複水酸化物における, 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プ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 佐藤 宏祐 機器センター 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 熊谷 崇 メゾスコピック計測研究センター 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 湊 丈俊 機器センター 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 湊 丈俊 光分子科学研究領域 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, 量子収率, 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, 量子収率, 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			
表面・界面の分子振動分光	マスクレス, 3 次元	物質分子科学研究領域	瀬戸 啓介
可視域におけるタンパク分子多量体のキラリティ観測	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
光機能性分子の構造・ダイナミクス解析	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
X 線小角散乱研究	SAXS	協奏分子システム研究センター	秋山 修志
円偏光誘起力顕微鏡の画像化機構の解明	低 SEM	メゾスコピック計測研究センター	山西 絢介
溶液光化学反応の軟 X 線吸収分光測定	機器センター長協力研究	光分子科学研究領域	高谷 光
一方向に運動するロッド型人工 DNA モーターの開発	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
生命分子システムの動的秩序形成と高次機能発現の仕組みの探究	VP-DSC, PEAQ-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
CuBe 合金の構造解析	EPMA, オペランド	機器センター	石山 修
有機合成のデジタル化に向けたデータ収集	有機合成 DX	生命・錯体分子科学研究領域	大塚 尚哉

(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年からはほぼ1年に1回の頻度で開催されている。日本学術会議 化学委員会、日本化学会 戦略企画委員会と分子科学研究所の共同主催として開催され、日本学術会議 化学委員会の主要活動の一つに位置づけられている。分子科学研究所は運営事務局として参画する。

ここ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財の活躍に関して～「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 人財採用室係長）

「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。

4. 研究活動の現状

分子科学研究所は、現在、理論・計算分子科学、光分子科学、物質分子科学、生命・錯体分子科学の四つの研究領域とそれらを繋ぐ協奏分子システム研究センターおよび、メゾスコピック計測研究センターで研究基盤を構築している。協奏分子システム研究センターでは、多重の階層を越えて機能する分子システムを構築することを目的とした研究を展開している。メゾスコピック計測研究センターでは、広い時空間領域で階層間のエネルギー・情報の変換を可視化する新しい計測手法の開発を目指している。このように、分子機能の開発、そして機能を計測する研究を組み合わせることで、分子科学研究所の特徴を活かしつつ、新しい分子科学研究領域の開拓を目指している。また、自然科学研究機構直属の組織「生命創成探究センター」は、岡崎3研究所（基礎生物学研究所、生理学研究所そして分子科学研究所）の研究力を統合した活動を展開している。本年度は、分子科学研究所と生理学研究所、そして生命創成探究センターが合同で新たな研究領域にチャレンジする「スピン生命科学コア」という研究組織を立ち上げた。さらに、極端紫外光研究施設（UVSOR）を始めとする研究施設を擁し、分子の構造と反応と機能についての先鋭的な基礎研究を進め分子の新たな可能性を探っている。

「特別研究部門」では、分子科学分野を世界的に牽引することが期待される卓越教授による研究、分子研の共同利用の施設や設備の高度な利用を進める研究者や、各研究領域の研究を発展的に展開する研究者のクロスアポイントメントによる招へい事業を進めている。「社会連携研究部門」では、産学官の連携研究の推進を目指している。ここでは、コンソーシアムを作り所外からのニーズを反映するオープンイノベーションの拠点として研究室を運営している。「小型集積レーザーコンソーシアム」は、平等拓範特任教授をリーダーとして、民間企業を中心に38団体の会員とともに研究を推進している。

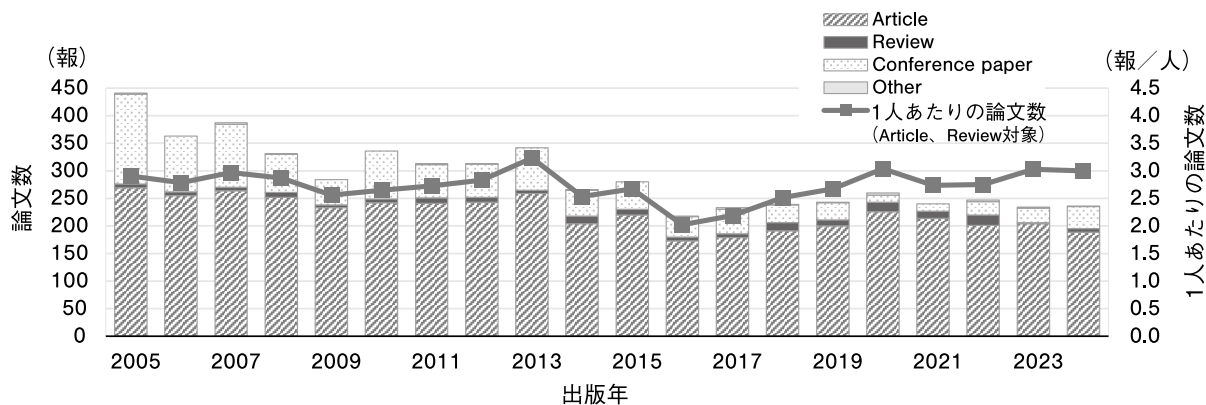
4-1 論文発表状況

分子研では毎年多くの学術論文を発表している。近年は民間の論文データベースが充実してきているため、これを用いたIRを研究力強化戦略室で行っている。ここでは出版論文数^{*1}の年次推移と在籍者1人あたりの原著・総説論文数の推移を示し、所属研究者の活動状況が維持されていることが確認できる。

出版年	Article	Review	Conference paper	Other	在籍者数 ^{*2}
2005	269	7	163	2	95
2006	254	7	101	0	94
2007	264	6	114	3	91
2008	252	9	69	1	91
2009	233	5	46	0	93
2010	242	7	87	0	94
2011	241	10	60	2	92
2012	243	9	60	1	89
2013	259	6	77	0	82
2014	204	14	47	1	86
2015	220	10	50	0	86
2016	173	7	37	1	89
2017	179	7	44	3	85
2018	191	15	32	1	82
2019	200	11	31	1	79
2020	226	17	13	4	80
2021	214	13	13	0	83
2022	201	19	24	3	80
2023	204	2	26	2	68
2024	189	6	40	1	65

* 1 Scopus 調べ（2025 年 4 月 21 日現在）。

* 2 教授、准教授・助教授、主任研究員、助教・助手の総計。教授、准教授は、卓越・特任・クロスアポイントメント・客員教員を含む。



論文数と在籍者数の推移

4-2 メゾスコピック計測研究センター

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

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

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

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

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

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

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

4月に豊田工業大学に、それぞれ転出した。これらの研究領域の扱いについては今後の検討となる。一方、2018年5月には杉本敏樹准教授（物質量子計測研究部門）が物質分子科学研究領域からの、また2019年11月には江原正博教授（繊維計測研究部門）と南谷英美准教授（物質量子計測研究部門）が理論・計算分子科学研究領域からの併任として就任した。南谷准教授は2022年9月に大阪大学に転出した。2021年4月からは、熊谷 崇准教授が広帯域相関計測解析研究部門に専任で就任した。2025年度末での岡本センター長の退職、その後のセンター活動の継続を見据え、専任教授の公募を開始した。2025年度中の新任教授の着任と、センター長業務の後任者への引き継ぎを目指している。

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

織細計測研究部門

岡本 裕巳（教授）（2000 年 11 月 1 日着任）

山西 絢介（特任助教）

AHN, Hyo-Yong（特任助教（共創戦略統括本部））

CHENG, An-Chieh（特任助教）

石川 晶子（技術支援員）

伊藤 敦子（事務支援員）

A-1) 専門領域：ナノ光物理化学

A-2) 研究課題：

- a) キラルナノ・マイクロ物質における局所的なキラル光学効果とその応用
- b) 光によるナノ物質の力学操作手法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 光学活性分光手法と顕微イメージングを組み合わせた新手法を開発し、それらを用いたナノ・マイクロ物質の局所光学活性に関する基礎研究、及び応用研究を推進している。ナノレベルの空間分解能での測定が可能な近接場光学顕微鏡による光学活性イメージングでは、主にキラルな構造を持つ金ナノ構造体を対象とし、局所的な円二色性信号が巨視的な円二色性信号に比べて極めて大きくなること、高い対称性を持つアキラルな金属ナノ構造においても局所的には強い光学活性を示すこと、局所的な誘起双極子が局所的な円偏光場の起源になること等、幾つかの基礎的に重要な結果を得た。通常の遠方場の顕微鏡においても光学活性によるイメージングは国際的にも未開拓であるが、我々は高い精度・確度で顕微光学活性イメージングを可能とする実験手法を開発し、微結晶試料、生体組織等への応用を、共同研究を通じて推進している。キラルな構造を持つ金属有機構造体（MOF）微結晶の掌性同定に成功し、多数の微結晶でそれぞれの掌性同定に有効であることを示した。液晶分子集合体をテンプレートとした螺旋状金微粒子集合体では、螺旋の掌性による円二色性信号の差を検出することに成功した。所内の共同研究で、有機スピントロニクス物質のキラル結晶の掌性同定にも有効に活用された。この他にも主として所外の研究者と共同で、様々なキラルナノ物質の観察・同定に用いる研究を推進し、また円二色性イメージングの医療応用を想定した基礎研究も、医科学分野の研究者と共同で行った。更に感度や測定速度を向上させる試み、波長範囲を拡張する試み等を推進している。また、それらの基盤的情報に基づき、キラル金属ナノ構造を用いて円偏光発光が高い偏光度で得られることを示した。円偏光によるキラル構造物質の創出に関する研究展開も進め、キラルでない系に円偏光を作用させることでユニークなキラルらせん構造が創出できることを、実験的に示した。
- b) レーザー光を強く集光すると、その焦点に微粒子がトラップされる（光トラッピング）。非線形効果、共鳴効果、偏光を有効利用することで、このような光による力学的マニピュレーションの自由度が格段に広がることが予想される。この研究展開を図ることを、現在の研究活動の今一つの柱とした。キラルな物質においては、左右円偏光に対する力学的な作用が異なることが期待され、我々はキラル金ナノ微粒子の円偏光による光トラッピングを行いその挙動を調べた。その結果、光トラッピングに関する従来知られている機構では説明困難な部分が見いだされ、理論的に解

積した。これにより、キラル物質の光マニピュレーションの基礎となる知見を得た。また現在、このような光の力学作用を利用した、原子間力顕微鏡の原理に基づく顕微イメージング法（光誘起力顕微鏡）でナノ構造上のキラルな光場を可視化する手法の開発も行い、キラル金属ナノ構造においてナノスケールのキラル光学効果イメージングに成功した。

B-1) 学術論文

H.-Y. AHN, K. Q. LE, T. NARUSHIMA, J. YAMANISHI, R. M. KIM, K. T. NAM and H. OKAMOTO, “Highly Chiral Light Emission Using Plasmonic Helicoid Nanoparticles,” *Adv. Opt. Mater.* **12(22)**, 2400699 (2024). DOI: 10.1002/adom.202400699

H.-Y. AHN, T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, “Creation of a Photopolymerized Double Spiral Structure by Interference of Plasmonic Scattering and Circularly Polarized Light,” *J. Phys. Chem. C* **128(17)**, 7159–7168 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c08473

B-3) 総説、著書

橋谷田 俊, 岡本裕巳, 「キラル光学応答」, *固体物理*, **59(11)**, 643–658 (2024).

山西純介, **AHN, Hyo-Yong**, 岡本裕巳, 「光誘起力顕微鏡によるキラル光学効果のナノ顕微観測」, *表面と真空*, **67(10)**, 478–482 (2024). DOI: 10.1380/vss.67.478

岡本裕巳, 「プラズモン共鳴のキラル光学効果」, *光学*, **53(7)**, 285–291 (2024).

B-4) 招待講演

山西純介, 「光誘起力顕微鏡法の開発とキラル光学効果のナノ顕微観測」, 2025 年日本物理学会春季大会, オンライン開催, 2025 年 3 月.

岡本裕巳, 「キラル光学効果と顕微イメージング」, 分子研研究会「キラリティが関連する動的現象」, 岡崎, 2025 年 3 月.

山西純介, **H.-Y. AHN**, 岡本裕巳, 「エナンチオ選択的光圧のナノ顕微観測」, 第 71 回応用物理学会春季学術講演会, 新潟, 2024 年 09 月.

H. OKAMOTO, “Imaging Chiral Optical Fields in Nano/Micro-Structured Materials,” Conference on Research and Innovations in Science and Technology of Materials, SNAIA – CRISTMAS 2024, Paris (France), December 2024.

J. YAMANISHI, “Optical Force Nanoscopy of Chiro-Optical Effect,” ISSP International Workshop, Materials Science of Solids and Surfaces using Radiation Field Controlled in Time/Space Domain, Kashiwa (Japan), October 2024.

H. OKAMOTO, “Optical Chiral Field Imaging of Nano/Micro-Structured Materials,” 32nd International Materials Research Congress, IMRC2024, Cancun (Mexico), August 2024.

H. OKAMOTO, H.-Y. AHN and T. NARUSHIMA, “Asymmetric electric fields induced on symmetric structure that yield chiral structured materials,” The 14th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics, META2024 Toyama, Toyama (Japan), July 2024.

H. OKAMOTO, “Imaging with Local Chiro-Optical Effects and Chiral Light-Matter Interaction,” Department seminar, Politecnico di Milano, Milan (Italy), June 2024.

H. OKAMOTO and J. YAMANISHI, “Imaging chirality of optical fields near nano-/micro-structured materials,” The 10th International Conference on Antennas and Electromagnetic Systems, AES2024 Rome, Rome (Italy), June 2024.

B-5) 特許出願

US2024142370(A1), “Circularly Polarized Light Illuminator, Analysis Device, and Microscope,” H. OKAMOTO and T. NARUSHIMA (National Institutes of Natural Sciences), 2022 年.

40106088, “Circularly Polarized Light Illuminator, Analysis Device, and Microscope,” H. OKAMOTO and T. NARUSHIMA (National Institutes of Natural Sciences), 2022 年.

B-6) 受賞, 表彰

山西絢介, 応用物理学会 講演奨励賞 (2024).

山西絢介, 名古屋大学石田賞 (2025).

AHN Hyo-Yong, プラズモニク化学研究会最優秀若手講演賞 (2025).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

プラズモニク化学研究会副会長 (2020–).

学会の組織委員等

14th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META2024), Organizing Committee (2023–2024).

34th International Symposium on Chirality, Local Organizing Committee (2024).

33rd International Materials Research Congress (IMRC2025), symposium organizer (2025).

Pacificchem 2025 symposium, organizer (2025).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術会議会員 (2020–2026), 化学委員会委員長 (2023–2026).

東京大学アト秒レーザー科学研究機構 連携協議会「ユーザー設備開発・利用研究」分科会委員 (2024–2025).

その他

学術変革領域研究(A)「光の螺旋性が拓くキラル物質科学の変革」事務局 (2022–2027).

B-8) 大学等での講義, 客員

早稲田大学理工学術院, 客員教授, 「先端ナノ光物理化学特論」, 2024 年 4 月–2025 年 3 月.

総合研究大学院大学先端学術院, オムニバス講義のコマ担当, 「機能物性科学」, 2024 年 4 月–9 月.

総合研究大学院大学先端学術院, 「構造光科学」, 2024 年 4 月–9 月.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「高精度円偏光二色性イメージングによるキラリティ時空間構造の可視化」, 岡本裕巳 (2021年度–2024年度).

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

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

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

C) 研究活動の課題と展望

着任以来、ナノ構造物質の観察と、特徴的な光学的性質、励起状態の超高速ダイナミクス等を探るための、近接場分光イメージング装置を開発し、試料の測定を行ってきた。その中で近接場光学活性イメージング法を開発して金属ナノ構造の局所光学活性、キラルな光場の空間構造の解析に使い、そこからグループの主要な研究内容をキラル物質の局所光学活性のイメージングにシフトした。金属ナノ構造の近接場光学活性イメージングによって、独自の実験的情報を得ることができ、プラズモン由来の強くねじれた局所光場の存在、また対称性の高いアキラルな構造でも局所的に強い光学活性を示すという、ユニークな成果も得られた。これらの研究から得られたプラズモンのキラリティに関する性質を基礎として、キラルプラズモンが分子の特性に及ぼす効果に関する研究にも展開し、高い円偏光度を示す発光物質系を見出しその起源を解明するなど、成果が得られた。通常の(遠方場)顕微鏡で精度の高い円二色性イメージングを可能とする装置開発も行い、これは物質開発、生物科学、結晶学等の様々な分野の研究者から興味を持って頂いている。これらの近接場及び遠方場円二色性イメージングは、今後様々なナノ・マイクロ構造光学活性物質の機能解明のための有力な実験手法になることを期待しており、国内外との共同研究を数件行っている。円二色性顕微鏡を更に汎用性の高い装置とする開発を継続する。また物質および光のキラリティは磁性との相関においても興味を持たれ、ナノ光学の観点からこの方向への研究展開について共同研究も行った。更に、円二色性イメージングの医療応用に関する共同研究も行った。微粒子の光による力学的マニピュレーションについても、キラル微粒子の光トラッピングに関する新たな成果が得られ、その展開も進めた。これらを総合した新たな方向への展開として、キラルな光-物質相互作用による、物質キラリティの創出の試みを進める科研費学術変革領域研究(A)が採択されており、残り少ない在任期間中、これに貢献していきたい。

広帯域相関計測解析研究部門

熊谷 崇（准教授）（2021 年 4 月 1 日着任）

西田 純（助教）

WANG, Yu（特任研究員）

伊藤 敦子（事務支援員）

A-1) 専門領域：物理化学，走査プローブ顕微鏡，近接場分光，単一分子科学，超高速ダイナミクス

A-2) 研究課題：探針増強近接場分光を基軸としたナノ物質科学の研究

- a) 超高真空・低温探針増強近接場分光による原子スケールの光と物質の相互作用の解明
- b) 超短パルスレーザーと探針増強近接場分光を融合したナノスケールコヒーレント分光の開発と応用
- c) 超高速探針増強顕微分光に基づく多次元・多変量ナノ顕微分光の開発と低次元ナノ物質への応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) プラズモニックナノ接合では，局在表面プラズモン共鳴の励起を介して強く局在化した光電場を発生させることができる。この強く局在化した光電場の性質と，それによって引き起こされる光物理・光化学現象について超高真空・低温探針増強顕微分光によって調べている。最近の重要な成果として，金属単結晶表面に吸着した単一原子のラマン散乱の計測を行い，原子スケールにまで閉じ込められた光電場の存在を証明し，原子スケールの光と物質の相互作用について新しい知見を与える研究を報告している [*ACS Nano* **17**, 10172 (2023)]。
- b) 超高真空・低温走査トンネル顕微鏡のプラズモニックナノ接合に発生する強く局在化した光電場を操る技術と，超短パルスレーザーとを組み合わせるアプローチによって時空間極限におけるナノスケールコヒーレント分光の開発を行っている。最近の重要な成果として，金属単結晶表面上にエピタキシャル成長させた酸化亜鉛超薄膜においてコヒーレントフォノンをナノスケールで直接観測することに成功している [*Science Advances* **8**, eabq5682 (2022)]。
- c) 原子間力顕微鏡に基づく非開口型近接場光顕微分光と，超短パルスレーザーとを組み合わせたナノスケール非線形分光の開発を行っている。この新しい先端計測技術によって，次世代の機能性材料やデバイスの基盤となるナノ物質科学の分野へと展開している。最近の成果として，原子層物質における光誘起ダイナミクスをナノスケールで直接観察し，その微視的機構を解明した研究を報告している [*ACS Photonics* **12**, 207 (2025)]。

B-1) 学術論文

H. WIEDENHAUPT, F. SCHULZ, L. E. PARRA LÓPEZ, A. HAMMUD, Y. PARK, A. SHIOTARI, T. KUMAGAI, M. WOLF and M. MÜLLER, “Plasmonic Light Emission by Inelastic Charge Transport in Ultrathin Zinc Oxide/Metal Heterostructures,” *Nano Lett.* **25**(7), 2870–2877 (2025). DOI: 10.1021/acs.nanolett.4c06099

Y. WANG, J. NISHIDA, K. NAKAMOTO, X. YANG, Y. SAKUMA, W. ZHANG, T. ENDO, Y. MIYATA and T. KUMAGAI, “Ultrafast Nano-Imaging of Spatially Modulated Many-Body Dynamics in CVD-Grown Monolayer WS₂,” *ACS Photonics* **12**(1), 207–218 (2025). DOI: 10.1021/acsp Photonics.4c01545

- C. LIN, J. LI, G. LI, W. LUO, S. LIU, A. HAMMUD, Y. XIA, A. PAN, M. WOLF, M. MÜLLER and T. KUMAGAI**, “Quantitative Comparison of Local Field Enhancement from Tip-Apex and Plasmonic Nanofocusing Excitation via Plasmon-Assisted Field Emission Resonances,” *Nanoscale* **17**, 7164 (2025). DOI: 10.1039/D4NR04262J
- Y. PARK, I. HAMADA, A. HAMMUD, T. KUMAGAI, M. WOLF and A. SHIOTARI**, “Atomic-Precision Control of Plasmon-Induced Single-Molecule Switching in a Metal–Semiconductor Nanojunction,” *Nat. Commun.* **15**(1), 6709 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-51000-w
- B. CIRERA, S. LIU, Y. PARK, I. HAMADA, M. WOLF, A. SHIOTARI and T. KUMAGAI**, “Single-Molecule Tip-Enhanced Raman Spectroscopy of C₆₀ on the Si(111)-(7×7) Surface,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26**(32), 21325–21331 (2024). DOI: 10.1039/d4cp01803f

B-4) 招待講演

- 熊谷 崇, 「Nanomaterial Characterization Using Infrared Nano-Spectroscopy」, 分子科学研究所研究会「電子強誘電体の新機能と新展開」, 岡崎, 2025 年 1 月.
- 熊谷 崇, 「Single-Molecule Raman Spectroscopy in Plasmonic “Picocavity”」, 一分子の科学, 静岡, 2024 年 10 月.
- T. KUMAGAI**, “Visualizing local exciton formation and many-body dynamics in single-walled carbon nanotubes,” The 67th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General Symposium, 高知, 2024 年 9 月.
- 熊谷 崇, 「Nano- & Atomic-Scale Spectroscopy Using Tip-Enhanced Near-Field Optics」, ナノ赤外分光の新展開ワークショップ, 兵庫県佐用町, 2024 年 7 月.
- T. KUMAGAI**, “Ultrafast Nano-Spectroscopy of Photo-Induced Dynamics in Low-Dimensional Materials,” DPG Spring Meetings 2025, Regensburg (Germany), March 2025.
- T. KUMAGAI**, “Tip-Enhanced Vibrational Spectroscopy for Single Atoms & Molecules,” Sino-German Workshop on Surface Science of Complex Systems, Changchun (China), January 2025.
- T. KUMAGAI**, “Nanomaterial Characterization Using Infrared Nano-Spectroscopy,” FHI-ICAT Joint Symposium 2024, Berlin (Germany), November 2024.
- T. KUMAGAI**, “Nanomaterial Characterization Using Infrared Nano-Spectroscopy,” ISSP International Workshop, “Materials Science of Solids and Surfaces using Radiation Field Controlled in Time/Space Domain,” Tokyo (Japan), October 2024.
- T. KUMAGAI**, “Tip-Enhanced Raman Spectroscopy in STM picocavities,” Light-Matter Interaction at Nanoscale 2024, Madrid (Spain), September 2024.
- J. NISHIDA**, “Local Carrier and Exciton Dynamics in Low-Dimensional Semiconductors Probed by Ultrafast Mid-Infrared Nanoscopy,” International Symposium on the Physics of Semiconductors and Applications (ISPSA 2024), Jeju (Korea), June 2024.
- T. KUMAGAI**, “Nano-Spectroscopy for Single Atoms, Molecules, Nanomaterials,” Seminar at University of Malaya, hosted by Prof. Raymond Ooi, Kuala Lumpur (Malaysia), February 2025.
- T. KUMAGAI**, “Nano-Spectroscopy for Single Atoms, Molecules, Nanomaterials,” Seminar at Shinshu University, hosted by Prof. Katsumi Kaneko, Nagano (Japan), February 2025.
- T. KUMAGAI**, “Nano-Spectroscopy for Single Atoms, Molecules, Nanomaterials,” Seminar at Osaka University, hosted by Prof. Masayuki Abe, Osaka (Japan), October 2024.

T. KUMAGAI, “Nano-Spectroscopy for Single Atoms, Molecules, Nanomaterials,” Seminar at CSIC ICM, hosted by Dr. Borja Cirera, Madrid (Spain), September 2024.

T. KUMAGAI, “Nano- & Atomic-Scale Spectroscopy Using Tip-Enhanced Near-Field Optical Microscopy,” Seminar at Yokohama National University, hosted by Prof. Ikufumi Katayama, Kanagawa (Japan), June 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面真空学会中部支部幹事 (2022–).

学会の組織委員等

NanospecFY2023 (2024/3/4–5, 愛知) “Frontier of Nano- & Atomic-Scale Characterization,” Organizer (Chair) (2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

北海道大学, 客員准教授, 2020年4月–.

北海道大学触媒科学研究所, 招へい教員, 2024年4月–2025年3月.

大阪大学大学院基礎工学研究科, 招へい教員, 2024年4月–2025年3月.

B-10) 競争的資金

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

科研費学術変革領域研究 (A), 「超高速・超広帯域近接場顕微分光で拓く 2.5 次元物質の光科学」, 熊谷 崇 (2024年度–2025年度).

科研費基盤研究 (B), 「キャリア・励起子輸送の実時空間観測とナノスケール制御」, 西田 純 (2024年度–2026年度).

科学技術振興機構創発的研究支援事業, 「極低温フォノンポラリトニクスによる固体物性制御」, 西田 純 (2024年度–2027年度).

大幸財団自然科学系研究助成, 「単一分子振動コヒーレンスの赤外観測と非線形制御」, 西田 純 (2024年度–2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

概要としては, 探針増強近接場分光の先端計測を研究室の柱としてナノ物質科学の新しい学際領域の形成, 革新的な光科学・光技術の創出を目指した基礎研究を展開する。超高真空・低温探針増強顕微分光の技術開発についてはほぼ完了し, 超高感度・超高分解能の顕微分光の原理についても理解が深まっている。今後はこの先端計測を応用し, 不均一触媒や光電デバイスなどの物質機能の根幹に関わる表面の局所的な構造や反応, またそれらの動態についての研究へと展開していく。現在は, これまで探針増強分光があまり応用されていなかった半導体・酸化物表面の計測を進めている。原子間力顕微鏡に基づく超高速探針増強近接場分光については, 現在も技術開発要素が残されているが, ナノ物質の計測へと応用を進めることができおり, 現在はナノカーボン, 原子層物質, 有機–無機ハイブリッドペロブスカイト, 生体分子などの研究を進めている。今後は多次元・多変量ナノ顕微分光のコンセプトに基づき, ナノ物質の物性・機能について物理化学的な理解を得ることを目的とした研究を展開する。国際的な研究活動として, 2021年に研究協力協定を締結したフリッツ・ハーバー研究所 (ベルリン, ドイツ) との共同研究や学術交流についても積極的に推進していきたいと考えている。

4-3 協奏分子システム研究センター

4-3-1 経緯と現状、将来構想

協奏分子システム研究センターは 2013 年 4 月に発足し、分子科学研究所がこれまでに培ってきたナノサイエンスに関する研究資産を基盤に、新しい分子科学の開拓に取り組んでいる。センターのミッションは、「分子それぞれの性質が階層構造を持つ分子システムの卓越した機能発現にどう結びつくのか」という分野横断的な重要課題を解決することである。そのためには、システムの構成要素である分子自身について理解を深めるのに加え、それぞれの分子がどのようなネットワークや制御を介して混然一体となり、複雑かつ高度な機能の発現へと繋がっていくのかを理解しなければならない。

このような目的の達成に向けて、微細なナノスケールの分子科学からタンパク質や細胞のようなマクロで不均一な分子科学まで研究者を幅広く募り、「階層分子システム解析研究部門」、「機能分子システム創成研究部門」、「生体分子システム研究部門」の 3 部門体制で研究活動を展開している。現在、専任 PI が 3 名（秋山教授、山本教授、倉持准教授）、併任 PI が 4 名（斉藤教授、青野教授、加藤教授、飯野教授）の計 7 名となっている。未踏の領域に切り込む若手研究者から、分野をリードするシニア研究者まで、異なる学問領域の研究者が集うメンバー構成となっている。

2024 年度の特筆すべき研究成果として、ラパマイシンによる FRB-FKBP 融合タンパク質のオリゴマー化に関する共同研究（秋山グループ）が科学雑誌「*FEBS Letters*」誌に掲載された。その他、階層分子システム解析研究部門からは、励起状態の分子が芳香族性を獲得する過程を直接観察した成果が「*Journal of the American Chemical Society*」誌に（倉持グループ）発表され、その学術的な新規性・重要性が高く評価されている。

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

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

階層分子システム解析研究部門

秋山 修志（教授）（2012 年 4 月 1 日着任）

古池 美彦（助教）

堀内 滉太（助教）

尾上 靖宏（特任研究員）

NACER, Lamia（インターンシップ）

CHAWAPUN, Pornthip（インターンシップ）

近藤 貫太（大学院生）

鷺尾 みどり（技術支援員）

大原 さとみ（技術支援員）

山本 優里桂（技術支援員）

岡田 亜樹（技術支援員）

谷浦 愛子（技術支援員（派遣））

蜂須賀 円（技術支援員（派遣））

鈴木 博子（事務支援員）

A-1) 専門領域：生物物理学，時間生物学

A-2) 研究課題：

- a) タンパク質時計が奏でる概日リズムの分子科学的解明
- b) X線溶液散乱による生体分子システムの動的構造解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) シアノバクテリアをモデル系とした概日時計研究に取り組み，独自性の高い数々の研究（Mukaiyama *et al.* *BioRxiv* 2024; Furuike *et al.* *BioRxiv* 2024; Furuike *et al.*, *Sci. Adv.* 2022; Furuike *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2022; Furuike *et al.*, *Commun. Phys.* 2022; Ito-miwa *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2020; Abe *et al.*, *Science* 2015）や国際基調講演（SRBR 2022; 5th Asian Forum on Chronobiology 2021; ELSI Symposium 2020; V-WCC 2019）をとおして，「概日時計システムの周波数特性が，ごく限られた種類の構成因子にエンコードされている」という新概念を提示した（長瀬研究振興賞 2022；日本学術振興会賞 2016；文部科学大臣表彰若手科学者賞 2008；日本生物物理学会若手奨励賞 2007；2006 SAS Young Scientist Prize from IUCr）。直近では，基盤研究 (S) [2017～2021 年度]，基盤研究 (S) [2022～2026 年度]，学術変革領域 (A) 計画研究 [2024～2028 年度] 等のプロジェクトで代表者を務め，国内外の研究コミュニティの拡大に尽力するとともに，以下に詳述する波及効果の高い成果（5 件）を輩出してきた。

一つ目は，KaiC が自律的振動子として分子進化した仮説の提唱である（Mukaiyama *et al.*, *BioRxiv* 2024）。明暗サイクルは独立栄養生物の一種であるシアノバクテリアの光合成効率に影響を与える。よって，酸素発生型光合成系が確立した太古のシアノバクテリアが自律的な概日時計を保持していたかどうかを明らかにすることは，時間生物学における重要な課題である。現生型および祖先型 KaiC の機能と構造を調べ，自律的な Kai タンパク質振動子の進化の起源を明らかにした。

二つ目は、KaiC の第一自己リン酸化過程の解明である (Furuike *et al.*, *BioRxiv* 2024)。自己キナーゼ活性を有する KaiC において、T432 で起こる最初のリン酸化 (第一リン酸化) は、それに続いて起こる S431 のリン酸化 (第二リン酸化) を促進する重要なステップである。KaiC の自己リン酸化には KaiA が必須であると考えられているが、第一リン酸化の活性化と不活性化のメカニズムは依然として不明であった。我々は、KaiA 非存在下でも第一リン酸化は進行するが、その反応速度が 0.019 h^{-1} のレベルまで著しく自己抑制されていることを見いだした。構造解析や QM/MM シミュレーションを実施することにより、KaiC の自己阻害と KaiA による自己阻害解除のメカニズムを解明した。

三つ目は、KaiC に隠されたアロステリック制御の解明である (Furuike *et al.*, *Biophys. Physicobiol.* 2024; Furuike *et al.*, *Sci. Adv.* 2022; Furuike *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2022)。複雑多様なアロステリック制御は細胞機能に振動現象をもたらす非線形性の源であるため、時計タンパク質のアロステリック構造転移を解明するための努力が続けられてきた。しかし、これまでに報告されている KaiC の全構造は、リン酸化修飾の有無に依らず構造が同一であり、概日リズムを駆動するアロステリーについては理解が進んでいなかった。我々は、S431 と T432 のリン酸化修飾サイクルを網羅する 4 つの異なる状態の KaiC を結晶化し、検出された複雑多様なアロステリーを詳細に分析することで、KaiC の振動性に必須となる最小単位のアロステリーを特定した。これらの成果を複数の総説 (Furuike *et al.*, *SPRING-8/SACLA Research Frontiers* 2023; 古池美彦, *日本結晶学会誌* 2023; 古池美彦, *生物物理* 2023; 古池美彦, *SPRING-8/SACLA 利用者情報* 2022) として取りまとめた。複数の学協会 (日本結晶学会, 日本生物物理, SPRING-8 ユーザー協団体) から、研究グループ所属の助教 (古池美彦) に若手を対象とした賞が贈られている。

四つ目は、KaiC の温度補償性に関する成果である (Furuike *et al.*, *Commun. Phys.* 2022)。時計タンパク質は、酵素活性を生理的な温度範囲で一定に保つ温度補償能を有する。他方、酵素を構成するアミノ酸は高温でより頻繁に揺らぎ、それに伴って酵素活性が上昇する傾向が一般的にみられる。よって、温度補償能を有する概日時計タンパク質のダイナミクスが特殊な制御を受けている可能性があるが、それを実験的に証明した例は皆無である。我々は、温度補償型 ATPase である KaiC のダイナミクスに及ぼす温度の影響を中性子準弾性散乱法で精査した。その結果、KaiC が揺らぎを利用しつつ、高温下で C1-ATPase 活性が上昇しないように自律制御していることが明らかとなった。酵素が自らの活性を高めるためだけでなく、恒常性を実現する自律的手段として揺らぎを積極的に利用していることを示す独自性の高い研究成果である。

五つ目は、概日時計の絶対的な遅さの起源解明である (Furuike *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2022; Simon *et al.*, *Biophys. Physicobiol.* 2022; Abe *et al.*, *Science* 2015)。概日時計は、ゆっくりとした秩序ある細胞ダイナミクスを生み出す、高速で動く生体高分子で構成されているため、全体としての遅さの原因は不明であった。我々は、周期を規定する C1-ATPase の遅さが、加水分解に用いられる水分子の隔離や、高い活性化エネルギーを有するペプチド異性化に起因していることを解明した。本成果は国内外の化学誌 (*ChemistryWorld* June 2015, *現代化学* 2015)、専門家評価コメント (<http://smc-japan.org/?p=4072>)、国内の新聞記事 (毎日新聞, 日本経済新聞) 等で取り上げられ、学術的な新規性が世界的に高く評価されている。

- b) 生体分子システム (時計タンパク質, 抗酸化酵素, 受容体など) の X 線溶液散乱を記録し、散乱データと結晶構造の比較や低分解能モデルの構築を通して、分子システムの動的構造解析を行った (Inobe *et al.*, *FEBS Lett.* 2024)。

B-4) 招待講演

秋山修志,「Past & Future of the Circadian Clock System in Cyanobacteria」, 学術動向調査の会, 熱海, 2025年3月.

秋山修志,「Past & Future of the Circadian Clock System in Cyanobacteria」, 第3回タンパク質シンポジウム, 東京大学鉄門記念講堂, 東京, 2025年1月.

秋山修志,「KaiCの反応・動態・構造から探る概日時計制御機構」, 第二回領域会議, 高槻, 2025年1月.

古池美彦, 森 俊文, 秋山修志,「Molecular Mechanism of KaiC Autophosphorylation」, 第31回時間生物学会学術大会, 富山国際会議場, 富山, 2024年11月.

秋山修志, 古池美彦, 森 俊文,「Mechanism of KaiC Autophosphorylation」, 第97回日本生化学会大会, パシフィコ横浜, 横浜, 2024年11月.

秋山修志,「KaiCの反応・動態・構造から探る 概日時計制御機構」, キックオフシンポジウム・公募説明会, 東京大学, 東京, 2024年7月.

S. AKIYAMA, “Past & Future of the Circadian Clock System in Cyanobacteria,” IPR International Conference 2025, Awaji Island, Awaji (Japan), January 2025.

S. AKIYAMA, “Evolution of Cross-scale Causality in the Cyanobacterial Circadian Clock System,” SAS2024, Taipei (Taiwan), November 2024.

S. AKIYAMA, “Autonomous Disassembly of Circadian Clock System of Cyanobacteria at Dawn,” Sapporo Symposium on Biological Rhythm 2024, Sapporo (Japan), August 2024.

S. AKIYAMA, “Cross-Scale Causality in the Cyanobacterial Circadian Clock System,” International Chronobiology Summer School 2024, Nagoya (Japan), August 2024.

S. AKIYAMA, “Past & Future of the Circadian Clock System in Cyanobacteria,” SRBR 2024 Biennial Conference, San Juan (Puerto Rico), May 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会理事 (2023–2025).

学会の組織委員等

名古屋大学大学院理学研究科 学会組織委員 (2025).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術会議連携会員 (2020–2024).

SPRing-8長期利用分科会委員 (2019–).

日本学術振興会学術システム研究センター研究員 (2023–2026).

学会誌編集委員

Biophysics and Physicobiology, Editorial Board Members (2022–2025).

B-8) 大学等での講義, 客員

琉球大学, 非常勤講師, 2025年1月–3月.

琉球大学, 客員教授(客員研究員), 2025年1月–3月.

B-10) 競争的資金

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

科研費学術変革領域研究(A),「時間タンパク質学: KaiC の反応・動態・構造から探る概日時間制御機構」,秋山修志(2024年度-2028年度).

日本学術振興会学術動向等に関する調査研究(受託研究),「生物物理学関連分野に関する学術研究動向」,秋山修志(2023年度-2024年度).

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

(公財)豊秋奨学会 2023 年度研究費助成,「月面環境サイクルに適合した概月時計の設計」,秋山修志(2023年度-2025年度).

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

科研費学術変革領域研究(A),「時間タンパク質学領域の総括」(代表者:吉種 光),秋山修志(研究分担者)(2024年度-2028年度).

科研費基盤研究(B),「Kai システムの自律振動過程で生じる KaiC-KaiA/KaiB 結合モードの時間依存的変調」(代表者:上久保裕生),秋山修志(研究分担者)(2023年度-2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

2017年度から取り組んできた基盤研究(S) [統合的多階層アプローチによるシアノバクテリア生物時計システムの新展開:2017~2021年度]が終了し, Kai タンパク質時計の普遍性と多様性の解明, ATPase /リン酸化構造基盤の解明, 温度補償性と揺らぎの関係性の解明, いずれにおいても当初の目標を上回る新発見があった(最終年度検証結果:A)。2023年度に開始した基盤研究(S) [概日時計の複雑多様性の単純化:2022~2026年度]については, 2024年度に「A(順調に研究が進展しており, 期待どおりの成果が見込まれる)」との中間評価を頂いた。2023年度に開始した基盤研究(S), そして 2024年に採択された学術変革領域(A)の計画研究(代表), いずれの課題についても波及効果の大きい論文として公表できるよう, 今の質を堅持しつつも更にペースを上げて研究を進める。

倉持 光（准教授）（2020 年 4 月 1 日～2025 年 3 月 31 日）＊）

米田 勇祐（助教）

古賀 雅史（特任助教）

落合 奎介（大学院生）

神谷 美穂（事務支援員）

A-1) 専門領域：物理化学，超高速分光，非線形分光，超短パルス発生

A-2) 研究課題：

- a) 新規超高速非線形分光法の開発と応用
- b) 単一分子レベルでの新規分光法の開発と応用
- c) 先端的超高速分光による凝縮相複雑分子の電子・構造ダイナミクスの研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 室温・溶液中にあるタンパク質などの巨大分子における遅い構造揺らぎに伴う励起エネルギー揺らぎの観測を目的として、新たに蛍光励起相関分光法（Fluorescence excitation correlation spectroscopy: FECS）を開発した。この手法では、広帯域の極短パルスを対にして励起光とし、二つのパルス間の遅延時間を掃引しながら、単一分子レベルで蛍光を検出し、蛍光相関分光を行う。パルス間の遅延時間の関数として得られる規格化されていない蛍光自己相関関数をフーリエ解析することで、励起エネルギー分解された自己相関関数が得られることを、典型色素溶液を対象として実証した。このデータからは、マイクロ秒～ミリ秒スケールで励起周波数が自発的にどのように変化するか、すなわち光反応などではない熱反応や平衡過程などの非同期過程によってどのように変化するかを明らかにすることが可能であり、タンパク質などの自発的な構造揺らぎに伴う励起エネルギー揺らぎの観測と解明に応用できる可能性を示している。
- b) 我々が最近開発した蛍光励起相関分光法（FECS）は励起エネルギーの自発的な揺らぎを観測することができる強力な手法であるが、得られる情報は自己相関関数に限られている。複雑系で平衡状態にあるサブアンサンブル間のスペクトル交換を観測・解明するには、相互相関の取得が重要となる。そこで、我々は FECS をさらに発展させることで、マイクロ～ミリ秒スケールにおける異なるスペクトル間の相互相関を明らかにする 2 次元蛍光励起相関分光法（2D-FECS）の開発を進めた。この方法は、速い励起エネルギー揺らぎやスペクトル拡散・交換を観測するために用いられるコヒーレント 2 次元電子分光法（2D-ES）とコンセプトを共有しつつも、2D-ES では観測が困難な、電子励起状態の寿命を超える時間スケールでのダイナミクスの観測が可能な強力な手法である。典型色素溶液や量子ドットを用いた原理検証実験に成功しており、今後光応答性タンパク質などへと応用展開するべく、更なる感度向上に取り組んでいる。
- c) 電子基底状態において芳香族性を持たない分子が電子励起状態において芳香族性を発現する「励起状態芳香族性」が近年、基礎・応用の両面で注目を集めている。特に、励起状態芳香族性の発現に伴う分子構造の変化を駆動力とする光機能性分子材料の開発が盛んに行われているが、この構造変形過程が実時間観測された例はない。我々は、所外研究者と共同し、励起状態芳香族性を示す典型分子 FLAP に対しフェムト秒時間分解ラマン分光を行い、フェムト～ピコ秒の時間スケールで起こる構造ダイナミクスの観測を行った。その結果、芳香族性の発現によって、数ピ

コ秒で分子が曲がった V 字形状から平面形状へと変化する構造ダイナミクスを実時間で捉えることに成功した。また、その過程において、振動モード間の共鳴 (Fermi resonance) が過渡的に起こるという興味深い現象も明らかにした。これらの結果は、励起状態芳香族性に基づく新規機能性分子材料の設計において、新たな構造学的指針を与えるものである。

B-1) 学術論文

H. WATANABE, M. IWAMURA, K. NOZAKI, T. TAKANASHI, H. KURAMOCHI and T. TAHARA, “Torsional Structural Relaxation Caused by Pt–Pt Bond Formation in the Photoexcited Dimer of Pt(II) N⁺C⁺N Complex in Solution,” *J. Phys. Chem. Lett.* **16**(1), 406–414 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.4c03170

K. SUGA, K. OCHIAI, Y. YONEDA, H. KURAMOCHI and S. SAITO, “An Energy-Tunable Dual Emission Mechanism of the Hybridized Local and Charge Transfer (HLCT) and the Excited State Conjugation Enhancement (ESCE),” *Chem. –Eur. J.* **31**(18), e202404376 (2024). DOI: 10.1002/chem.202404376

D. H. KANG, M. KOGA, N. HALDAR and D. M. NEUMARK, “Dynamics of Photoexcited 5-bromouracil and 5-Bromo-2'-deoxyuridine Studied by Extreme Ultraviolet Time-Resolved Photoelectron Spectroscopy in Liquid Flat Jets,” *Chem. Sci.* **15**(41), 17245–17255 (2024). DOI: 10.1039/D4SC03920C

Y. YONEDA and H. KURAMOCHI, “Room-Temperature Solution Fluorescence Excitation Correlation Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. Lett.* **15**(33), 8533–8539 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.4c01798

M. KOGA, D. H. KANG, Z. N. HEIM, P. MEYER, B. A. ERICKSON, N. HALDAR, N. BARADARAN, M. HAVENITH and D. M. NEUMARK, “Extreme Ultraviolet Time-Resolved Photoelectron Spectroscopy of Adenine, Adenosine and Adenosine Monophosphate in a Liquid Flat Jet,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26**(17), 13106–13117 (2024). DOI: 10.1039/D4CP00856A

B-4) 招待講演

倉持 光, 「数サイクルパルスを用いた複雑分子系の超高速コヒーレント振動分光」, レーザー学会学術講演会第 45 回年次大会, 広島, 2025 年 1 月.

倉持 光, 「数サイクルパルスを用いた複雑系の超高速コヒーレント振動分光」, 京都大学理学部化学教室セミナー, 京都, 2024 年 12 月.

倉持 光, 「数サイクルパルスで観る複雑分子系の超高速化学反応ダイナミクス」, 計算・分光・情報・合成が拓く分子設計の最前線, 筑波, 2024 年 11 月.

倉持 光, 「Unraveling ultrafast chemical reaction dynamics through vibrational coherence」, 令和 6 年度化学系学協会東北大会, 秋田, 2024 年 9 月.

倉持 光, 「数サイクルパルスを用いた超高速非線形分光で観る光化学反応のダイナミクス」, 2024 年光化学討論会, 福岡, 2024 年 9 月.

倉持 光, 「有機化学者のための超高速分光・非線形分光の基礎と最先端」, 第 55 回構造有機化学若手の会夏の学校, 大阪府池田市, 2024 年 7 月.

H. KURAMOCHI, “Unraveling chemical reaction dynamics with ultrafast time-domain vibrational spectroscopy using few-cycle pulses,” Department Seminar at Yonsei University, Seoul (Korea), February 2025.

H. KURAMOCHI, “Unraveling Ultrafast Chemical Reaction Dynamics of Condensed-Phase Complex Molecular Systems through Vibrational Coherence,” G-LAMP symposium, Cheongju (Korea), February 2025.

Y. YONEDA, “Chemical dynamics in condensed phases observed by ultrafast time-domain vibrational spectroscopy,” Asian Conference on Ultrafast Phenomena 2025, Taipei (Taiwan), January 2025.

Y. YONEDA, “Exploration of excited state dynamics using time-domain vibrational spectroscopy,” Oktoberfest of Chemical Physics, Okazaki, October 2024.

H. KURAMOCHI, “Tracking non-equilibrium excited-state dynamics with ultrafast time-domain vibrational spectroscopy,” 39th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Shizuoka, June 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子科学会運営委員 (2024–2026).

学会の組織委員等

第 22 回時間分解振動分光学国際会議 運営委員 (2022–2025).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

文部科学省研究振興局学術調査官 (2023–2025).

理科教育活動

講師「第 44 回数理の翼夏季セミナー」NPO 法人数理の翼 (2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所, 客員研究員, 2022 年 5 月–2027 年 3 月.

京都大学大学院理学研究科, 非常勤講師, 「超高速分光・非線形分光の基礎から最先端まで」, 2024 年 10 月–2025 年 3 月.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構創発的研究支援事業 (受託研究), 「室温・溶液中における単一分子の極限時間分解分光」, 倉持 光 (2021 年度–2027 年度).

科研費基盤研究 (A), 「単一分子超高速分光による動的生体光エネルギー変換機構の探究」 (代表者: 倉持 光), 米田 勇祐 (研究分担者) (2024 年度–2026 年度).

科研費基盤研究 (B), 「新規多次元振動分光による反応ポテンシャル特異点の探究」, 米田 勇祐 (2024 年度–2026 年度).

C) 研究活動の課題と展望

我々は先端的な超高速分光法を駆使し, 凝縮相複雑分子系の機能・構造・ダイナミクスの解明に取り組んでいる。特に, アンサンブル平均を観るバルク溶液・固体に対する先端的な超高速分光と, 室温・溶液中の単一分子レベルでの各種分光法を相補的に用いることで, 凝縮相複雑分子系の反応ダイナミクスの研究に新たな途を拓くことを目指している。最近, 我々は励起エネルギーの自発的揺らぎを観測する蛍光励起相関分光を開発したが, 今後は本手法をさらに発展させた 2 次元蛍光励起相関分光法の開発とその応用を推進する。これにより, 光合成系をはじめとする光応答性タンパク質におけるマイクロ～ミリ秒スケールでのサブアンサンブル間のスペクトル交換を可視化し,

これらタンパク質の光反応を駆動する発色団分子の電子状態が、遅い自発的構造揺らぎによってどのように制御されているのか観測・解明する。さらに、この手法をポンプ・プローブ法と融合させることで、反応ダイナミクス揺らぎの計測へと展開する。バルクな系に対する先端的な超高速分光においても、新奇光機能性分子や光合成タンパク質など、多様な系から有意な成果が得られつつあり、今後もその応用をさらに強力に推進していく。

＊) 2025 年 4 月 1 日大阪大学大学院基礎工学研究科教授

岡本 泰典（准教授）（2024 年 8 月 1 日着任）

江藤 智子（技術支援員）

野田 彩加（事務支援員）

A-1) 専門領域：生物無機化学，生体化学，錯体化学，タンパク質工学

A-2) 研究課題：生命分子システムの設計・制御をめざした生体分子工学

- a) 光駆動型人工金属酵素の開発と応用
- b) 人工多核金属酵素の開発
- c) 構造変化と触媒機能が連動する人工酵素の開発
- d) 生物由来ベシクルのエンジニアリング基盤の形成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

生命分子システムの設計・制御をめざした **designer biomolecule** の創出；連鎖的につながった生体内化学反応ネットワークによって細胞機能は制御されている。この生体内化学反応ネットワークを再設計して物質生産や医薬への応用をめざす研究が精力的に行われている。この生体内化学反応ネットワークに非天然化学反応を自在に統合できれば、天然の酵素反応だけではアクセスできない高付加価値化合物の生産や新たな作用機序の医薬の開発につながる。このような背景のもと、我々は非天然の物質変換能を付与した人工金属酵素を用いて生体内化学反応ネットワークに介入することをめざしている。

人工金属酵素とは、ホストとなるタンパク質の内部空間に非天然の合成金属錯体を導入する、あるいは非天然の金属中心をタンパク質のアミノ酸側鎖を用いて構築することで得られるものを指す。人工金属酵素研究では、酵素の持つ「温和な反応条件で高選択的な物質変換能」と、金属錯体の持つ「自然界に存在しない強力な化学変換能」の両方を兼ね備える触媒の開発を目指している。一方、我々は人工金属酵素の高い生体分子寛容性に注目してきた。生体分子寛容性とは、他の生体分子が存在する細胞内環境でも失活しないことを意味する。我々のグループでは、この人工金属酵素の特性を活かし、人工金属酵素による生体内化学反応ネットワークの再編成・制御をねらった次の4つのプロジェクトを並行して進めている。

- a) 光駆動型人工金属酵素の開発と応用；多くの人工金属酵素が開発されてきたが、触媒活性を外部刺激によって制御可能なものはほとんど報告されていない。我々は細胞や生体内での利用を念頭に光によって活性制御可能な人工金属酵素の開発に取り組んできた。以前に我々はタンパク質の内部空間に導入することでルテニウム錯体の光化学特性を変化させることに成功している。ここで得られる人工金属酵素は光照射によって活性化され、抗体のアミノ酸残基選択的な化学修飾反応を触媒する。現在、この光駆動型人工金属酵素の高機能化をめざし、他の金属錯体の検討を開始している。また、ホストタンパク質の変更および改変も検討しており、新たなホストタンパク質候補の探索や変異体作成に向けた基盤技術の開発に取り組んでいる。
- b) 人工多核金属酵素の開発；複数の金属イオンによって活性中心を構築する多核金属酵素は、合成化学的に困難な物質変換を低環境負荷型の反応条件で高選択的に進行させる。そのため、多核金属酵素を人工的に作り直すことで、強力な触媒開発の指針が得られる。しかし、タンパク質内部で複数の金属イオンを設計通り自在に配置することは極めて困難である。このような背景のもと、これまでに我々は独自の計算科学的設計手法を用いて、多核金属中心

の構築に挑んできた。これまでに、いくつかのタンパク質の内部で設計通りの多核金属中心が構築されていることを結晶構造解析によって確認することができた。さらに、そのうちのいくつかにおいて、興味深い特性が発現することを見出した。

- c) 構造変化と触媒機能が連動する人工酵素の開発；生命現象を制御する高次機能，例えばエネルギー変換やシグナル伝達は，複数のタンパク質や酵素で構成される「システム」によって実現されている。このようなシステムを構成するタンパク質の活性は，シグナル分子を介して連動している。そのようなシステムの構築を念頭に，本研究ではシグナル分子との結合によって誘起される構造変化と触媒活性が連動する人工酵素の開発を行っている。現在，シグナル分子との結合によって構造変化するタンパク質への触媒部位の設計に取り組んでいる。
- d) 生物由来ベシクルのエンジニアリング基盤の形成；人工金属酵素の細胞／個体内送達システムとして，我々は生物由来のベシクルに注目している。我々はベシクルに複数種類の機能性分子を搭載するための方法論を開拓している。現在までに，このベシクルの内部に任意のタンパク質を内包することに成功している。

B-3) 総説，著書

Z. LIU, Y. OKAMOTO and S. SATO, “Photocatalytic Structures for Protein Modifications,” *ChemCatChem* **16**(14), e202301424 (2024). DOI: 10.1002/cctc.202301424

岡本泰典, 「生物学的環境における合成金属触媒による非天然化学変換」, *生体の科学*, **75**(2), 170–175 (2024). DOI: 10.11477/mf.2425201841

B-4) 招待講演

Y. OKAMOTO, “Development of designer enzymes for concerted uses with biological molecules,” The 145th Annual Meeting of the Pharmaceutical Society of Japan, Fukuoka, March 2025.

Y. OKAMOTO, “Regulating the reactivity of a synthetic metal complex by a protein matrix for biochemical applications,” 2024 Frontier Bioorganization Forum, Taipei (Taiwan), September 2024.

Y. OKAMOTO, “Artificial enzyme for biochemical applications,” Korea-Japan Symposium on Molecular Science, Busan (Korea), June 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

錯体化学会副事務局長 (2024–).

理科教育活動

パネルディスカッション司会「研究者という仕事」東北大学 (小学生以上対象) (2024).

その他

生体分子の工学的研究のコミュニティ形成に向けたPodcastの収録・配信 (名称：分子デザインははじめました, URL: <https://t.co/aqYGgPTpK6>, 2024年3月31日配信開始, 2025年3月10日時点で14エピソード) (2024).

B-8) 大学での講義, 客員

東北大学国際学士コース, 全学教育科目展開科目講義「生命科学B」, 2021年4月–2024年7月.

東北大学学際科学フロンティア研究所, 非常勤講師 (客員准教授), 2024年12月–2025年3月.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究 (受託研究), 「金属イオンのタンパク質内精密多点配置による機能創出」, 岡本泰典 (2022年度–2025年度).

(公財) 豊田理化学研究所 2024年度豊田理研スカラー研究助成金, 「多機能化バイオベシクルの開発」, 岡本泰典 (2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

上述のように我々のグループでは, 非天然の物質変換能を付与した人工金属酵素を用いて生体内化学反応ネットワークに介入することをめざしている。この目標の達成に必要なパーツとして, 上記の4つの研究を進めている。今後この4つを並行して進めていくが, 来年度は, この長期的目標に向けて興味深いデータの得られているb) 人工多核金属酵素の研究に力点を置く。

小杉 貴洋（助教）（2015 年 6 月 1 日着任）

鈴木 規子（技術支援員）

鈴木 博子（事務支援員）

A-1) 専門領域：生物物理学，理論化学，生体関連化学

A-2) 研究課題：

- a) 機能を持ったタンパク質をゼロから創り，その機能を理解する
- b) タンパク質複合体を改造し，その協奏的機能を理解・制御する
- c) 改造タンパク質複合体を用いて細胞機能を理解・制御する
- d) 蛍光タンパク質の設計原理の解明と新規創出

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) アデノシン 3 リン酸（ATP）は生体内でのエネルギー源やシグナル伝達物質として多様な役割を果たしている。この ATP に結合し加水分解するタンパク質を創ることは，ATP 結合・加水分解の分子機構解明，さらには生体内の様々な現象の理解と制御につながる。そこで，計算機を用いて，ATP を結合および加水分解するタンパク質を創り出すことを目指し研究を行っている。これまでに，設計したタンパク質が ATP 結合および加水分解活性を持ち，結晶構造解析により設計通りの構造であることを確認した。さらに，このタンパク質の変性温度は 100 °C 以上であり，タンパク質としては異常な熱安定性をもつことも明らかにした。これらの結果をまとめ論文を投稿中である。また，更なる活性向上を目指した研究を継続中である。
- b) タンパク質複合体の協奏的な機能をアロステリックに（触媒活性部位から離れた部分から）制御する手法を考案し，タンパク質複合体である回転モータータンパク質 V_1 -ATPase の協奏的な機能である回転能を制御することに成功した。これまでに回転モーターの変異体は多数作られてきたが，回転速度を向上させたものは存在せず，天然が長い年月をかけて生み出した精密な機械である回転モーターの機能を向上することは不可能ではないかと思われていた。ここで，我々は，半世紀以上も前に提唱されたが，誰も創り出すことはできていなかったアロステリック部位を設計することで，その回転を加速することに成功した。2023 年度，その成果を論文としてまとめ，*Nature Chemistry* 誌に出版した。現在，進化の過程で機能を失った擬似酵素に注目するこの手法を用いて，他の様々なタンパク質（例えば，並進型分子モーターであるキネシン）を改造し，その協奏的機能の制御を目指した研究を行っている。また，細胞内では回転モーターのように常時決まった複合体状態で機能を発揮するタンパク質複合体だけでなく，その構成タンパク質を変えながら機能を発揮するものも多い。そこで，構成タンパク質の組み合わせを変えることで，その機能を制御する研究も行っている。これらの研究を通して，様々なタンパク質複合体の協奏的機能の理解と制御を目指している。
- c) 改造したタンパク質複合体を細胞内に戻すことで，細胞内でのタンパク質複合体の機能の理解と細胞機能の制御を目指した研究を行っている。例えば，細胞が栄養状態などの環境の変化に応答するために中心的な役割を果たしている TOR 複合体は，その構成タンパク質の組み合わせを変えながら機能を果たす。そして，特定の構成タンパク質の組み合わせの複合体を欠損させると細胞の寿命が延びることも明らかとなっている。この TOR 複合体の構成タンパク質の組み合わせを合理的に変え，細胞の寿命を制御する研究を行い，これまで同じと考えられていた二つの複

合体状態が寿命に対して異なる働きをすることを発見した。この結果は、哺乳類を含めた様々な生物の寿命を制御できる可能性を期待させるものである。2023 年度、その成果をまとめ、*Journal of Cell Science* 誌に論文を出版した。さらに、既知の擬似酵素の改造だけでなく、未知の擬似酵素を探索し、それらを利用した細胞制御技術の開発も始めている。

- d) 構成的なアプローチにより蛍光タンパク質の設計原理の解明を目指した研究を進めている。また、細胞内イメージングに役立つ各種蛍光タンパク質の開発も行っている。これまでに、溶解性を上げた数種類の蛍光タンパク質の開発に成功しており、いくつかの結晶構造も得た。現在、その性能の最終評価を行いながら、論文投稿に向けて結果をまとめている。

B-2) 国際会議のプロシーディングス他

T. KOSUGI, M. TANABE and N. KOGA, “De Novo Design of ATPase Based on the Blueprint Optimized for Harboring the P-Loop Motif,” *bioRxiv* 2024.10.03.616451 (2024). DOI: 10.1101/2024.10.03.616451

B-3) 総説、著書

T. KOSUGI and N. KOGA, “Develop a Strategy to Design Artificial Allosteric Sites in Protein Complexes—Rate Acceleration of Rotary Molecular Motor—,” *Photon Factory Highlights* 2023, 24–25 (2024).

小杉貴洋, 「[ノーベル化学賞 2024] 不可能と思われていたタンパク質の構造予測とデザインの扉が開かれた」, *科学*, **94**(12), 1101–1105 (2024).

小杉貴洋, 「David Baker 研究室を振り返って」, *化学*, **79**, 27 (2024).

小杉貴洋, 「構造解析が導いたタンパク質の改造とその理解」, *PHOTON FACTORY NEWS*, **42**(1), 26 (2024).

B-4) 招待講演

小杉貴洋, 「タンパク質のデザインと構造予測～機械学習がノーベル賞をもたらした?～」, JST「計測・解析基盤」×「データ科学」研究交流会, 東京, 2025 年 2 月.

T. KOSUGI, “Creation and control of ATPase by computational protein design,” Protein Trajectories Symposium, Tokyo, December 2024.

小杉貴洋, 「構造モデルに基づいた合理的改造により出芽酵母 TOR 複合体の機能に迫る」, 第 47 回日本分子生物学会年会シンポジウム「やっぱり大事な TOR シグナリング～複層的 TOR の包括的理解へ向けて～」, 福岡, 2024 年 11 月.

小杉貴洋, 「タンパク質機能の合理的設計・制御とその応用」, 酵素工学研究会 第 92 回講演会, 川崎, 2024 年 11 月.

小杉貴洋, 「タンパク質の設計・改造: 計算結果を自ら実験で検証する」, 第 97 回日本生化学会大会シンポジウム「高速分子動画: その先へ」, 横浜, 2024 年 11 月.

小杉貴洋, 「ノーベル化学賞 2024『タンパク質のデザインと構造予測』」, 第 14 回 CSJ 化学フェスタ 2024「2024 ノーベル賞解説講演」, 東京, 2024 年 10 月.

小杉貴洋, 「計算機を用いたタンパク質の設計・改造」, 第 458 回 CBI 学会講演会「創薬の多様化に対応するタンパク質構造観察技術の進化」, オンライン開催, 2024 年 8 月.

小杉貴洋, 「蛋白質デザインにおける構造ダイナミクスについて考える」, 基礎から学ぶ最新 NMR 解析法第 9 回ワークショップ—AI を活用した NMR 解析—, 吹田, 2024 年 8 月.

T. KOSUGI, “Understanding and controlling functions of protein complexes by computational protein design,” 2024 Frontier Symposium in Computational Chemistry, Biophysics, and Biological Sciences, Seoul (Korea), November 2024.

T. KOSUGI, “Diffraction method for current and future protein design,” Diffraction Methods in Structural Biology 2024, Berlin (Germany), July 2024.

B-6) 受賞, 表彰

小杉貴洋, 第 13 回自然科学研究機構若手研究者賞 (2024).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会分野別専門委員 (E-05 タンパク質設計・ドラッグデザイン) (2025).

学会の組織委員等

第 13 回分子モーター討論会世話人 (2024).

学会誌編集委員

生物物理学会誌編集委員 (2025–2026).

B-8) 大学での講義, 客員

九州大学先導物質化学研究所, 研究指導者, 2024 年 4 月–2025 年 3 月.

静岡大学, 非常勤講師, 2024 年 10 月–2025 年 2 月.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究, 「タンパク質複合体を合理的に改造し, 細胞内機能を理解・制御する」, 小杉貴洋 (2020 年度–2024 年度).

科研費基盤研究 (B), 「調節分子の違いが生み出すアロステリーの向上と拡張」, 小杉貴洋 (2024 年度–2028 年度).

科研費基盤研究 (B), 「還元的手法と構成的手法を組合せた蛍光蛋白質の設計原理の解析と新規蛍光蛋白質開発」 (代表者: 今村博臣), 小杉貴洋 (研究分担者) (2024 年度–2026 年度).

自然科学研究機構 OPEN MIX LAB (OML) 公募研究プログラム (研究共創型), 「並進型分子モーターの改造: 細胞分裂の制御を目指して」, 小杉貴洋 (2024 年度).

科学技術振興機構さきがけ研究, 「失われたタンパク質機能を復活・拡張する細胞制御技術の開発」, 小杉貴洋 (2024 年度–2027 年度).

(公財) 住友財団基礎科学研究助成, 「構成的アプローチによる De Novo 設計 ATP 加水分解酵素の高活性化」, 小杉貴洋 (2024 年度–2026 年度).

機能分子システム創成研究部門

山本 浩史（教授）（2012 年 4 月 1 日着任）

佐藤 拓朗（助教）

WU, Dongfang（特任研究員）

後藤 拓（大学院生）

竹脇 由佳（大学院生）

楠本 恵子（大学院生）

村田 了介（技術支援員）

石川 裕子（事務支援員）

A-1) 専門領域：分子物性科学

A-2) 研究課題：

- a) キラル有機超伝導体を用いたスピントロニクス
- b) キラル分子によるスピン偏極の理論構築
- c) 交代磁性体の非相対論的検出

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機キラル超伝導体である κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂ 塩の薄膜単結晶を用いたスピントロニクスデバイスを作製し、その電気的磁気的特性を測定した。その結果、超伝導転移点付近で交流による励起を行うと、磁場と平行に印可した電流において非相反現象が見出された。これは超伝導結晶のキラルな空間群に基づくスピン流生成が原因であると考えられるが、その大きさを見積もると、理論的な予想値よりもはるかに高いスピン偏極が生じていることが示唆された。また、電流を印加する方向によって臨界電流が異なる超伝導ダイオード効果も観測することに成功した。
(BEDT-TTF = Bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene)
- b) CISS (Chirality-Induced Spin Selectivity) 効果はキラル分子に対してトンネル電流を流すと、分子を通過してきた電子のスピンが電流と平行あるいは反平行に偏極する現象であり、近年新たな有機スピントロニクス的手段として注目されつつある。我々は、CISS 効果の根本的なメカニズムを解明するために、キラル物質の量子論的理解に取り組んだ。その結果、電子の量子状態を多極子展開することにより、キラリティの秩序変数を表現することが可能となり、分子のキラリティを量子力学的に表現するためにはスピンの本質的な役割を果たすことを明らかにした。この事実は、キラル分子が巨大なスピン偏極を生み出す CISS 効果と、根本的なところでつながっている可能性がある。
- c) 強磁性体・反強磁性体に続く第三の磁性体として注目されている、交替磁性体のスピン流検出に取り組んだ。理論計算により、 κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Cl 塩は交替磁性体であり、電場誘起スピン流を生成することが予想されているが、その検証はまだ為されていない。その原因のひとつは、系が絶縁体であるために効率的な輸送現象計測が困難であることであると想定される。そこで我々は外場制御により、より伝導性の高い状況を実現し、その条件でのスピン流生成を試みた。その結果、スピン流を起源とすると思われる特殊なホール効果の検出に成功した。

B-1) 学術論文

H. M. YAMAMOTO, “Rolling Carbon on a Rock: Graphene,” *Nat. Mater.* **24**, 330–331 (2025). DOI: 10.1038/s41563-025-02151-8

H. KUSUNOSE, J. KISHINE and H. M. YAMAMOTO, “Emergence of Chirality from Electron Spins, Physical Fields, and Material-Field Composites,” *Appl. Phys. Lett.* **124**(26), 260501 (2024). DOI: 10.1063/5.0214919

A. INDA, R. OIWA, S. HAYAMI, H. M. YAMAMOTO and H. KUSUNOSE, “Quantification of Chirality Based on Electric Toroidal Monopole,” *J. Chem. Phys.* **160**(18), 184117 (2024). DOI: 10.1063/5.0204254

B-4) 招待講演

山本浩史, 「CISS 研究の現状と固体科学への展開」, 日本物理学会年次大会シンポジウム「キラリティがもたらす新現象の開拓と制御～CISS 効果を中心に～」, オンライン開催, 2025 年 3 月.

山本浩史, 「CISS 効果の固体デバイスへの展開」, 電気学会日本磁気学会共催「光と CISS と磁性錯体」研究会, 東京, 2025 年 1 月.

山本浩史, 「カイラリティと電子状態」, CREST トポロジ領域合同セミナー, 京都, 2024 年 11 月.

山本浩史, 「Spin-polarization control by chiral materials」, 物性研究所短期研究会「新物質開発・システム創成研究の最前線：分子・クラスターがもたらす物性と機能」, 柏, 2024 年 10 月.

山本浩史, 「キラリティとスピントロニクス」, 東京大学工学部物理工学科教室談話会, 東京, 2024 年 5 月.

H. M. YAMAMOTO, “Chiral molecules and helical electrons,” Solvay Workshop on Chirality, Spin and Reactivity, Brussel (Belgium), November 2024.

H. M. YAMAMOTO, “Chirality-Induces Spin Selectivity in Various Materials,” Thailand-Japan Symposium in Chemistry 2024, Chiang Mai University, Chiangmai (Thailand), November 2024.

H. M. YAMAMOTO, “Chiral Spintronics with Molecular Materials,” ISCOM2024, Anchorage (U.S.A.), September 2024.

H. M. YAMAMOTO, “Chiral phonon-mediated circular photo galvanic effect,” Electron Spin in Chiral Matter — Sigtuna CISS meeting 2024, Sigtuna (Sweden), July 2024.

H. M. YAMAMOTO, “Chiral Atoms and Helical Electrons,” META2024, Toyama (Japan), July 2024.

H. M. YAMAMOTO, “Novel spintronics devices based on chiral materials,” Workshop on physics and electronics of 2D doped materials, Tatehina (Japan), June 2024.

H. M. YAMAMOTO, “Chirality-Induced Spin Selectivity and Multipoles,” OIST-JST-AIMR Joint International Symposium: Interaction Between Various Chiral Fields and Chiral Materials, Okinawa (Japan), June 2024.

H. M. YAMAMOTO, “Chirality-based spintronic devices with molecular materials,” ICSM2024, Dresden (Germany), June 2024.

H. M. YAMAMOTO, “Emergent Chiral Spintronics based on Molecular Materials,” CEMS Topical Meeting on Emergent Phenomena in Topological Quantum Materials, Wako (Japan), May 2024.

B-5) 特許出願

特開 2024-158274,「配向体製造装置」, 平等拓範, 佐藤庸一, 青山正樹, 吉田久史, 木村幸代, 山本浩史, 伊東正篤, 井上龍夫, 長谷川順(自然科学研究機構), 2023 年.

WO2024225471(A1),「配向体製造装置」, 平等拓範, 佐藤庸一, 青山正樹, 吉田久史, 木村幸代, 山本浩史, 伊東正篤, 井上龍夫, 長谷川順(自然科学研究機構), 2024 年.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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

学会の組織委員等

分子科学会運営委員 (2018–2024).

ISCOM2025 組織委員会組織委員長 (2025).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会 世界トップレベル研究拠点プログラム委員会拠点作業部会委員 (2023–2028).

日本学術会議事務局連携会員 (2023–2027).

東京大学物性研究所協議会委員 (2024–2026).

理科教育活動

「科学三昧 in あいち 2024」指導助言 (2024). (佐藤 拓朗)

その他

凝縮系科学賞審査委員 (2019–).

森野基金推薦委員 (2021–).

ELASTO-Q-MAT (Deutsche Forschungsgemeinschaft), Scientific Advisory Board (2022–).

Asian Young Scientist Fellowship (physical science), Selection Committee member (2022–).

Chirality at the nanoscale, International Advisory Board (2023–).

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所, 客員主管研究員, 2023 年 4 月–2026 年 3 月.

東京大学大学院工学系研究科, 教授, 2024 年 4 月–2026 年 3 月.

理化学研究所, 客員研究員, 2022 年 10 月–2025 年 3 月. (佐藤拓朗)

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「キラル伝導体を用いた巨大スピン偏極デバイスの開発」, 山本浩史 (2023 年度–2026 年度).

科学技術振興機構さきがけ研究(受託研究),「キラルな分子性物質を舞台にした強相関スピントロニクスの開拓」, 佐藤拓朗 (2023 年度–2024 年度).

日本学術振興会研究拠点形成事業(A. 先端拠点形成型),「量子創発分子層エレクトロニクス」山本浩史 (2024 年度–2028 年度).

科学技術振興機構創発的研究支援事業(基金)(受託研究),「創発的研究推進のための研究環境整備」, 山本浩史 (2024年度-2025年度).

科研費基盤研究(B),「キラル超伝導デバイス設計による巨大スピン偏極流の自在制御」, 佐藤拓朗 (2024年度-2026年度).

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

科研費基盤研究(A),「カイラル物質が誘導する非局所スピン偏極の解明と基礎学理の構築」(代表者: 戸川欣彦), 山本浩史(研究分担者) (2023年度-2026年度).

B-11) 産学連携

共同研究, (株) アステム, 「アイ・ドラゴン 4 の機能を広範囲に警報周知するシステムへと機能を拡張する可能性に関する共同研究 2」, 山本浩史 (2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

キラリティによるスピン流生成は、近年益々注目されるようになっている。どちらかと言うと化学分野で注目されている CISS のみならず、物性物理分野でも空間反転対称性を失った物質構造に基づく新たな物性発現が盛んになされており、両者の共通点と相違点を検討しながら実験を進めていく必要があると考えられる。さらに空間反転対称性の破れのみならず、時間反転対称性の破れについても、様々なスピン物性の源となることが明らかになってきた。その文脈において、交替磁性体の物理も今後より発展していくことが期待できる。このようにキラル物質特有の性質、あるいは交替磁性体特有の性質を用いて、様々な外場によるスピン流の生成・制御に取り組んでいきたい。

4-4 理論・計算分子科学研究領域

理論分子科学第一研究部門

齊藤 真司（教授）（2005 年 10 月 1 日着任）

甲田 信一（助教）

TANG, Zhiye（助教）

KUMAR, Shubham（特任研究員）

ZHU, Zhe（大学院生）

鶴間 稜平（大学院生）

千葉 史朱香（事務支援員）

A-1) 専門領域：物理化学，理論化学

A-2) 研究課題：

- a) 生体機能ダイナミクスの理論研究：天然光合成系における効率的励起エネルギー移動
- b) 凝縮系ダイナミクスの理論研究：顕著な構造変化を伴わない過冷却液体の運動の遅延化
- c) 凝縮系ダイナミクスの理論研究：揺らぎエネルギー障壁を越える反応・拡散過程

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 生体機能ダイナミクスに関する研究として，高等植物の光化学系 II の光捕集アンテナ複合体 LHCII における励起エネルギー移動（EET）の解析を進めている。LHCII 中の EET の解明には，クロロフィル（Chl）分子の励起エネルギーやその揺らぎ（スペクトル密度）の知見が不可欠である。最近，我々は TDDFT 計算におけるパラメータの調整を行い，異なる誘電率をもつ複数の溶液中での Chl 分子の励起エネルギーを適切に記述することに成功した。さらに，これらの適切な電子状態計算の結果を再現する分子動力学（MD）計算における Chl 分子のパラメータの開発にも成功し，LHCII 中の Chl 分子の吸収スペクトルなどの実験結果を再現できることを確認した。これらの成果に基づき，現在，LHCII における励起エネルギー移動がどのように起こっているかについて解析を進めている。
- b) 凝縮系ダイナミクスに関する研究として，温度低下による過冷却液体のダイナミクスの遅延化の分子起源の解明に取り組んでいる。過冷却液体状態は，構造的には通常の液体状態と類似しているが，ダイナミクスに関しては，液体状態のものに比べ著しく遅いという特徴をもつ。液体から結晶への変化のような顕著な構造変化を伴わない過冷却液体の運動の遅延化の機構解明は，凝縮系物理学における長年の課題の一つである。我々は，反応理論において提案された「動的乱れ」の概念に基づき，過冷却水における運動の遅延化における分子機構を明らかにした。これらの成果に基づき，現在，水以外の過冷却液体やシリカなどの粘性液体の遅延化機構について解析を進めている。
- c) 凝縮系ダイナミクスに関する研究として，拡散過程における揺らぎの影響に関する課題にも取り組んでいる。化学的および物理的性質が非常に似ている軽水と重水の分離は，極めて困難であることが知られている。最近，京都大学の北川特別教授らが開発した多孔質配位高分子により，従来にない高効率で同位体水の分離が可能であることが示された。しかし，その同位体水の分離機構については未だ解明されていない。そこで，北川グループとの共同研究として，実験を反映した理論モデル系を構築し，実験で見出された質量比を超える拡散係数の比の分子機構について解析を進めている。

B-1) 学術論文

A. CHANDRA, S. SAITO and A. CHANDA, “Effects of Cations on the Structure, Dynamics and Vibrational Sum Frequency Generation Spectroscopy of Liquid/Vapor Interfaces of Aqueous Solutions of Monovalent and Divalent Metal Nitrates,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **27**, 6154–6167 (2025). DOI: 10.1039/D4CP04413D

Z. ZHU, M. HIGASHI and S. SAITO, “Development of Molecular Dynamics Parameters and Theoretical Analysis of Excitonic and Optical Properties in the Light-Harvesting Complex II,” *J. Chem. Theory Comput.* **21(1)**, 413–427 (2025). DOI: 10.1021/acs.jctc.4c01214

S.-I. KODA and S. SAITO, “Flat-Bottom Elastic Network Model for Generating Improved Plausible Reaction Paths,” *J. Chem. Theory Comput.* **20(16)**, 7176–7187 (2024). DOI: 10.1021/acs.jctc.4c00792

S. SAITO, “Unraveling the Dynamic Slowdown in Supercooled Water: The Role of Dynamic Disorder in Jump Motions,” *J. Chem. Phys.* **160(19)**, 194506 (2024). DOI: 10.1063/5.0209713

R. MALIK, S. SAITO and A. CHANDRA, “Effect of Counterions on the Structure and Dynamics of Water near a Negatively Charged Surfactant: A Theoretical Vibrational Sum Frequency Generation Study,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26(24)**, 17065–17074 (2024). DOI: 10.1039/D4CP00537F

B-4) 招待講演

S. SAITO, “Exploring the molecular origins of water’s anomalies and slow dynamics,” Korea-Japan Molecular Symposium, Pusan (Korea), June 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子科学会運営委員 (2022–2024).

日中韓理論化学ワークショップ幹事 (2013–).

学会の組織委員等

Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (TRVS2025) 組織委員 (2022–2025).

学会誌編集委員

日本化学会速報誌編集委員会委員 (2023–).

その他

森野基金 運営委員会委員 (2020–).

計算物質科学協議会 運営委員会委員 (2020–).

B-8) 大学等での講義, 客員

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

B-9) 学位授与

ZHU, Zhe, 「Theoretical study of the excitonic properties and excitation energy transfer dynamics in light-harvesting complex II」, 2025年3月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

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

科研費挑戦的研究(開拓),「凝縮系反応・構造力学における動的乱れの解明に向けた理論・計算手法の開拓」, 齊藤真司 (2023年度–2026年度).

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

B-11) 産学連携

共同研究, (株) ダイセル,「木質バイオマスの溶解シミュレーションに関わる共同研究」, 齊藤真司 (2022年度–).

C) 研究活動の課題と展望

我々は、生体分子系の機能および凝縮系のダイナミクスに関する理論研究を進めている。これらの研究に関する展望は、以下の通りである。

生体機能に関するダイナミクスに関しては、高等植物のLHCIIにおける励起エネルギー移動の分子機構の解明を進める。励起エネルギー移動の分子論的解明には、LHCII系の個々のChl分子の適切な電子状態とダイナミクスの記述が不可欠である。我々は、これらの物理量を適切に記述する方法論の開発に成功し、膜中に存在するLHCIIにおける励起エネルギー移動ダイナミクスの解析を可能にした。今後は、LHCII内の不均一な環境下でのChl分子の励起ダイナミクスを解析し、LHCIIにおける高速なEETダイナミクスの分子レベルでの解明を目指す。これまでに、我々は緑色硫黄細菌のFMOタンパク質における励起エネルギー移動を解析し、各色素分子のエネルギー揺らぎがFMOタンパク質中の効率的な励起エネルギー移動に重要な役割を果たしていることを明らかにしてきた。今後は、LHCIIにおける励起エネルギー移動の解析を進め、LHCIIとFMOタンパク質の励起エネルギー移動を比較し、天然光合成系における励起エネルギー移動の理解を一層深めたい。さらに、バクテリアと高等植物という異なる進化段階における励起エネルギー移動の普遍性および特異性を明らかにしたい。

凝縮系ダイナミクスに関する研究として、構造変化や反応・拡散過程がどのように進行するかについて、研究を進める。構造変化ダイナミクスに関しては、(過冷却)液体における運動の遅延化の分子機構の解明を目指す。液体状態からガラス状態に向かう構造緩和の時間や粘性率の温度依存性に基づき、全ての液体はアレニウス則に従う「strong液体」と、温度低下とともに緩和時間や粘性率が急激に増加し超アレニウス性を示す「fragile液体」に大別される。温度低下に伴う液体の運動の遅延化は一見当たり前の現象に思われる。しかし、異なる温度依存性を持つこれらの液体のダイナミクスの遅延化が、どのような分子機構に由来するのかは凝縮系物理学の長年の課題であり、未だに解明されていない。今後は、異なるfragilityをもつ液体における運動の遅延化がどのように起こるのかについて、体系的な理解の獲得を目指す。また、反応・拡散過程に関する課題として、多孔質配位高分子系による同位体水の高効率分離の分子機構の解明に向けた研究をさらに進める。これらの構造変化・拡散ダイナミクスの研究で明らかになってきたように、揺らぐ環境下では動的乱れや共鳴活性化などにより、反応や構造変化・拡散ダイナミクスが興味深い様相を示す。そこで、これまで物理化学的な研究が進んでいなかったこれらの観点から、揺らぐ環境下における反応や拡散現象に関する研究の展開を目指す。

理論分子科学第二研究部門

石崎 章仁（教授）（2016 年 4 月 1 日～2024 年 9 月 30 日）^{*}

三輪 邦之（助教）

布能 謙（特任助教）

増田 道子（事務支援員）

A-1) 専門領域：理論物理化学

A-2) 研究課題：

a) 光・量子科学技術に基づく複雑分子系の観測と制御の理論研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 昨年度までの研究では、自発的パラメトリック下方変換によって生成される量子もつれ光子対の非古典相関を利用した時間分解分光の理論を構築してきた。しかし、一対のもつれ光子を分子系に照射して誘起される非線形光学応答は非常に弱く、検出が困難であると予想される。本年度は、この問題を解決する手段として、もつれ光子を用いた時間分解蛍光分光計測を理論的に検討した。提案する方法では、もつれ光子対の一方を色素分子に照射し、残りの一光子と分子からの蛍光光子を同時計数計測する。光子検出には位置検出型の単一光子検出カメラを用い、分光器と組み合わせることで二光子の時間情報と周波数情報を同時に取得し、分子系における時間分解スペクトルを得ることができる。この方法は、もつれ光子対のうち一方のみを分子に照射するため、現在の光子検出技術でも十分な信号強度が得られるという利点がある。また、本研究の量子分光法は非線形光学シグナルとして誘導放出の寄与のみを抽出できることを理論的に示した。この結果により、得られるスペクトルの解釈が大幅に簡略化でき、たとえば光合成光捕獲タンパク質などの複雑分子系におけるスペクトル解析を容易になる可能性がある。
- b) 三重項-三重項消滅（TTA）を利用したエネルギーアップコンバージョン（TTA-UC）は、太陽電池や発光ダイオードなどの光電子デバイスの性能向上に寄与することが期待され、産業技術への応用の観点から高い注目を集めている。特に、固体材料において高効率な TTA-UC を実現することは、これらのデバイスへの応用に向けた重要な課題の一つである。近年、固体中の分子配向や分子間の三重項励起子の移動レートが TTA-UC の効率に与える影響について活発な議論がなされている。特に、三重項励起子の移動に伴い、励起子間に働く交換相互作用の大きさや、励起子が位置する分子配向が変調する点に着目したモデルが提案され、高い TTA-UC 効率の説明が与えられている。しかし、TTA-UC 効率がモデル内のパラメータにどのように依存するかについては未解明な部分が多く、さらなる高効率化のためには詳細な解析が肝要である。本研究では、TTA-UC 効率が分子配向および三重項励起子の移動レートにどのように依存するのかを理論的に解析し、効率向上のための条件を明らかにすることを試みた。2つの三重項励起子が TTA 過程を介し高エネルギーの一重項励起子を形成する確率 η を計算した結果、以下の3点を明らかにした。(1) 三重項励起子が位置する分子同士がある程度離れ、2つの励起子間に働く交換相互作用が弱い場合、それらが位置する分子の相対的な配向が平行に近づくほど、 η が向上する。(2) 分子間を移動する2つの三重項励起子について、それらが位置する分子ペア同士において、分子の相対的な配向が揃っているほど、 η が向上する。(3) 三重項励起子の移動レートが遅く、励起子間に強い交換相互作用が働く分子ペアと弱い交換相互作用が働く分子ペアと

の間で三重項励起子ペアが移動するレートが遅いほど、 η が向上する。以上の成果から得られる知見は、TTA-UC のさらなる高効率化に向けた分子設計の指針の提示に貢献することが期待される。

B-1) 学術論文

K. FUNO and A. ISHIZAKI, “Dynamics of a Quantum System Interacting with White Non-Gaussian Baths: Poisson Noise Master Equation,” *Phys. Rev. Lett.* **132**(17), 170402 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevLett.132.170402

K. MIWA, S. SAKAMOTO, K. FUNO and A. ISHIZAKI, “Coarse-Grained Description of Anharmonic Lattice Environments Affecting the Quantum Dynamics of Charge Carriers,” *Phys. Rev. Res.* **7**, 013323 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.7.013323

E. KIM, D. LEE, S. SAKAMOTO, J.-Y. JO, M. VARGAS, A. ISHIZAKI, J. MINAGAWA and H. KIM, “Network Analysis with Quantum Dynamics Clarifies Why Photosystem II Exploits Both Chlorophyll *a* and *b*,” *Sci. Adv.* **11**, eads0327 (2025). DOI: 10.1126/sciadv.ads0327

B-4) 招待講演

A. ISHIZAKI and K. MIWA, “Control and enhancement of single-molecule electroluminescence through strong light-matter coupling,” Telluride Workshop on Strong Light-Matter Interactions, Telluride Intermediate School, Telluride, CO (USA), June 2024.

A. ISHIZAKI and K. MIWA, “Quantum dynamics of photoexcited electronic systems coupled to anharmonic oscillator environments,” Telluride Workshop on Strong Light-Matter Interactions, Telluride Intermediate School, Telluride, CO (USA), June 2024.

石崎章仁, 「量子性と環境揺らぎが織りなす分子物質機能」, 第1回スピシンフォニー化学研究会, 京都大学桂キャンパス, 京都府京都市, 2024年6月.

A. ISHIZAKI and Y. FUJIIHAHI, “Potential of time-resolved optical spectroscopy with quantum entangled photons,” Coherent Multidimensional Spectroscopy 2024, National STEM Learning Centre, University of York, York (UK), June 2024.

石崎章仁, 「私の海外修行」, 日本学術振興会特別研究員-DC フレンドシップミーティング 2024 in Kyoto, 京都国際会議館, 京都府京都市, 2024年6月.

石崎章仁, 「Network analyses with quantum dynamic calculations on energy flow in the photosystem II supercomplex」, 第107回KPSIセミナー, 量子科学技術研究開発機構 関西光量子科学研究所, 京都府木津市, 2024年8月.

Y. FUJIIHAHI and A. ISHIZAKI, “Theory of time-resolved optical spectroscopy with quantum entangled photons,” Quantum Innovation 2024: International Symposium on Quantum Science, Technology and Innovation, Sora City Conference Center, Chiyoda-ku, Tokyo (Japan), October 2024.

A. ISHIZAKI, “Exploring the dynamics in molecular systems with quantum science/technology,” New Theoretical and Computational Perspectives for the Quantum Technology of Molecular Systems, Graduate Center, City University of New York, New York, NY (USA), February 2025.

A. ISHIZAKI, “Exploring the dynamics in molecular systems with quantum science/technology,” Les Houches School of Physics Workshop on Quantum Dynamics and Spectroscopy of Functional Molecular Materials and Biological Photosystems, Les Houches (France), March 2025. (スケジュールの都合によりキャンセル。)

石崎章仁,「量子効果の維持と崩壊が織りなす光捕集・エネルギー変換ダイナミクス」,日本化学会第 105 春季年会「エキシトン操作の新展開と展望」,関西大学千里山キャンパス,大阪府吹田市,2025 年 3 月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

量子生命科学会 学術委員会委員 (2019–2024).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

東京大学物性研究所協議会委員 (2022–2024).

学会誌編集委員

日本物理学会会誌編集委員 (2023–2025).

B-8) 大学等での講義, 客員

総合研究大学院大学先端学術院分子科学コース,「基礎物理化学 2」,2024 年 7 月.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「量子分子計測と動力学解析の理論基盤」,石崎章仁 (2021 年度–2024 年度).

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

文部科学省光・量子飛躍フラッグシッププログラム (Q-LEAP),「Flagship プロジェクト:量子生命技術の創製と医学・生命科学の革新」(代表:馬場嘉信),「量子論的生命現象の解明・模倣」,石崎章仁 (研究分担者) (2020 年度–2024 年度).

C) 研究活動の課題と展望

生体及び有機物質系における励起子及び電荷移動などの動力学過程は,周囲の溶媒,タンパク質,分子の核運動等の影響を受けることによって多様かつ頑健な機能を生み出しており,その全容を明晰に理解することは物理学の最も魅力的な問題の一つである。このような複雑な相互作用により生ずる非自明な機能を理解するためには,各動力学過程における様々な要素の適切な理論的取り扱いが必要である。我々は,量子散逸系のダイナミクス理論を用い,または新たに発展させ,複雑な分子系における物理現象の本質的かつ簡明な理解を得ることを目指している。また同時に,最新の量子科学技術を適用することで,従来技術と比較してより詳細な分子系の情報を得ることが可能な手法の開発に向けて研究を進めている。

*) 2024 年 10 月 1 日東京大学大学院理学系研究科教授

計算分子科学研究部門

江原 正博（教授）（2008 年 6 月 1 日着任）

PRIYAKUMAR, U. Deva（外国人研究職員）

白男川 貴史（助教）

ZHAO, Pei（特任助教）

WANG, Yuelin（特任助教）

KONGKAEW, Naline（インターンシップ）

杉本 縁（事務支援員（派遣））

A-1) 専門領域：量子化学，理論化学，触媒化学，光物性科学

A-2) 研究課題：

- a) 金単原子エッチングによる CAu^{I}_5 クラスターの創製と機能化
- b) 担持金微粒子触媒界面のルイス酸密度の制御：C-O 結合および C-N 結合のホウ素化
- c) 酸化ニオブ固体触媒によるアルコール光酸化の反応機構
- d) PdAu_{12} クラスター触媒によるパラ置換ベンジルアルコールの酸化：Pd 原子ドーブの効果
- e) スズを含むペロブスカイト半導体の界面構造制御法の開発とメカニズム解明—高性能多接合型太陽電池の実現—
- f) 還元的アリール化による立体障害を利用した修飾単層カーボンナノチューブの発光波長制御

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) エッチングはナノ材料の構造や化学的・物理的特性を制御するための優れたトップダウン合成法である。原子レベルでの化学エッチングは、ナノサイズの金属クラスターを精密に合成する上で特に難しい課題である。本研究では、安定な金 (I) クラスター中のハイパーカーボン中心における金原子の単原子エッチングに成功した。具体的には、キラルな *N*-ヘテロ環カルベンで保護された C-中心の CAu^{I}_6 クラスターをビスホスフィンでエッチングし、C-中心の CAu^{I}_5 クラスターを得た。 CAu^{I}_5 クラスターは非常に大きな深色効果（バソクロミックシフト）を示し、発光色変化の起源を理論的に明らかにした。エッチング機構はタンデム解離-会合-脱離経路であることを実験的・理論的に明らかにした。さらに、 CAu^{I}_5 クラスターの中心炭素の空いたサイトに $\text{Au}^{\text{I}}\text{Cl}$ を導入し、Cを中心とする金 (I) クラスターのポスト官能基化を可能にした。
- b) 担持金属触媒は、金属ナノ粒子と担体との間に界面サイトを有し、複数の触媒成分が協働して分子間反応を効率的に促進する。担持金属触媒の活性な界面サイトを設計するための指針を確立することは、効率的なクロスカップリング反応を可能にするヘテロ接合触媒にとって不可欠である。本研究では、担持金触媒による C-O 結合および C-N 結合のホウ素化反応における金属と担体の協働効果を明らかにするために、速度論解析および理論解析を行い、担体のルイス酸密度が、金属ナノ粒子と担体表面のルイス酸点が協働する活性サイトの数を決定することを明らかにした。DFT 計算により、Au ナノ粒子と担体の界面におけるジボロンの強い吸着と、吸着したジボロンの LUMO 準位の低下が、効率的な C-O 結合ホウ素化に寄与することを明らかにした。金属-金属酸化物協同サイトを最適化した担持 Au 触媒である $\text{Au}/\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ 触媒は、C-O 結合および C-N 結合ホウ素化に優れた活性を示し、連続フロー反応を用いた有機ホウ素化合物の高効率な合成を可能にした。

- c) 高効率固体光触媒が開発されているが、アルコールからカルボニル化合物への変換は、化学産業や有機合成において重要な反応である。これまで TiO_2 等の不均一系光触媒が開発されたが、反応条件の制限、低級アルコールの制約、低い選択性等の課題があった。最近、 Nb_2O_5 固体表面触媒が、アルコールの光酸化反応を低温で選択的に進行し、これらの課題を克服することが見出されたが、その反応機構や電子状態は十分に理解されていない。多層クラスターモデルを用いた量子化学計算により、吸着したアルコールから水素移動の後、 $\text{O}(2p)$ から $\text{Nb}(4d)$ への光電子移動励起が起これ、反応が進行する反応機構を解明した。表面-分子吸着系の吸収スペクトル・スピン密度・自然占有密度解析を行い、実験で観測されている UV-Vis スペクトル、EPR、速度方程式解析の結果を説明した。本研究は、固体光触媒の研究に有用な方法論とモデル化のアプローチを示した。
- d) 原子サイズ制御された金属ナノクラスターへの単原子ドーピングは、触媒作用におけるドーピング効果の解明に有用である。Co と Ce からなる二重金属水酸化物上に MAu_{12} ($\text{M} = \text{Au}, \text{Ir}, \text{Rh}, \text{Pt}, \text{Pd}$) ナノクラスターを合成し、ベンジルアルコール (BnOH) 酸化の触媒活性ならびに活性化機構を実験と理論計算の両面から解析した。 PdAu_{12} は Au_{13} の 4.4 倍の触媒活性を示し、他の MAu_{12} ($\text{M} = \text{Ir}, \text{Rh}, \text{Pt}$) 触媒は Au_{13} と同等の活性を示した。スラブモデル構造に基づく周期境界 DFT 計算により、酸素分子は Au_{13} よりも PdAu_{12} の方がより効率的に活性化されることが示され、活性化された酸素分子が介在する異なるメカニズムが Pd の単ドーピングによって現れることが示された。
- e) 多接合太陽電池は、単接合セルの放射限界を超える光電変換効率を達成する優れた性能を示す。また、高性能な Sn-Pb ペロブスカイト半導体膜を開発することは薄膜デバイスにとって極めて重要である。独自の添加剤としてアミノ酸基とカルボン酸基を分子内にもつフェニルアラニンを用いて Sn-Pb 系ペロブスカイト半導体の前駆体溶液に用いることで、高品質な Sn-Pb 系ペロブスカイト半導体膜を作製する手法を開発した。各種分光測定と理論計算により、塗布成膜過程でフェニルアラニンがペロブスカイトの構成イオンと相互作用し、スズ (II) 種が前駆体や添加剤との相互作用を支配していることを見出した。Sn-Pb ペロブスカイト層により、単接合セル、2 接合型タンデムセル、3 接合型タンデムセルの各デバイスでは、各々 0.91 V, 2.22 V, 3.46 V の開放電圧が得られ、23.9%, 29.7% (認証値 29.26%), 28.7% の高い光電変換効率を達成した。さらに初めて 4 接合型のペロブスカイトタンデム型デバイスを作製し、4.94 V の高い開放電圧と 27.9% の光電変換特性が得られることを実証した。
- f) 単層カーボンナノチューブ (SWCNT) の発光特性制御を目的として、修飾 SWCNT の設計・開発を行ってきた。本研究では一置換および二置換ヨードベンゼン誘導体を用いて還元的アリール化による波長制御を行った。置換ヨードベンゼンによる化学修飾により、アリール基上の置換基の位置によって化学修飾が変化し、発光強度と波長の制御を実現した。フェニル基の 2 位に Me 基または MeO 基を、3,5 位に Me 基を導入すると、各々 E_{11}^{**} PL (~1230 nm), E_{11}^{*} PL (~1100 nm) の選択性が増加した。理論計算から、オルト位の置換基の異性体の相対的安定性に対する効果は、ヒドロアリール化よりもジアリール化 SWCNT の方が大きいことが示された。実験と理論計算から、ベンゼン環上の置換基位置により発光波長を調節し、SWCNT 付加体の有利な結合配置、コンフォメーション異性体の相対安定性と発光波長に影響を与えることを明らかにした。

B-1) 学術論文

S. HU, J. WANG, P. ZHAO, J. PASCUAL, J. WANG, F. ROMBACH, A. DASGUPTA, W. LIU, M. A. TRUONG, H. ZHU, M. KOBER-CZERNY, J. N. DRYSDALE, J. A. SMITH, Z. YUAN, G. J. W. AALBERS, N. R. M. SCHIPPER, J. YAO, K. NAKANO, S.-H. TURREN-CRUZ, A. DALLMANN, M. GREYSON CHRISTOFORO, J. M. BALL, D. P. MCMEEKIN, K.-A. ZAININGER, Z. LIU, N. K. NOEL, K. TAJIMA, W. CHEN, M. EHARA, R. A. J. JANSSEN, A.

- WAKAMIYA and H. J. SNAITH**, “Steering Perovskite Precursor Solutions for Multijunction Photovoltaics,” *Nature* **639**, 93–101 (2025). DOI: 10.1038/s41586-024-08546-y
- Y. MAEDA, Y. IGUCHI, P. ZHAO, A. SUWA, Y. TAKI, K. KAWADA, M. YAMADA, M. EHARA and M. KAKO**, “Switching Photoluminescence Wavelength of Arylated Single-Walled Carbon Nanotubes by Utilizing Steric Hindrance in Reductive Arylation,” *Chem. –Eur. J.* **31(13)**, e202404529 (2025). DOI: 10.1002/chem.202404529
- C. H. LIN, W. K. SHIH, Y. KONNO, P. ZHAO, Y. MAEDA, M. EHARA, T. KOBAYASHI and A. YABUSHITA**, “Relaxation Dynamics of (6,5) Single-Walled Carbon Nanotube under Xylyl Functionalization,” *J. Electron. Mater.* **54(2)**, 985–995 (2025). DOI: 10.1007/s11664-024-11628-2
- S. MASUDA, H. HIRAI, P. ZHAO, S. TAKANO, M. EHARA and T. TSUKUDA**, “Substrate-Dependent Role of a Pd Dopant in PdAu₁₂ Catalysts in the Oxidation of *p*-Substituted Benzyl Alcohols: Promotion of Hydride Abstraction and Reductive Activation of O₂,” *ACS Catal.* **14(22)**, 17123–17131 (2024). DOI: 10.1021/acscatal.4c03871
- S. SHIRAI, S. MURATSUGU, H. MATSUI, K. HARADA, M. EHARA, H. NAKAI and M. TADA**, “Circularly Polarized Luminescence Induction on a Tb(III) Complex with a Tris(*o*-*tert*-Butylaryloxy)-Functionalized 1,4,7-Triazacyclononane Ligand Coordinating Chiral 1-Phenylethylamine,” *Chem. Commun.* **60(96)**, 14180–14183 (2024). DOI: 10.1039/D4CC05191B
- X. L. PEI, P. ZHAO, H. UBE, Z. LEI, M. EHARA and M. SHIONOYA**, “Single-Gold Etching at the Hypercarbon Atom of C-Centred Hexagold(I) Clusters Protected by Chiral N-Heterocyclic Carbenes,” *Nat. Commun.* **15(1)**, 5024 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-49295-w
- H. MIURA, K. IMOTO, H. NISHIO, A. JUNKAEW, Y. TSUNESADA, Y. FUKUTA, M. EHARA and T. SHISHIDO**, “Optimization of Metal-Support Cooperation for Boosting the Performance of Supported Gold Catalysts for the Borylation of C–O and C–N Bonds,” *J. Am. Chem. Soc.* **146(40)**, 27528–27541 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c08340
- Z. LEI, P. ZHAO, Z. J. GUAN, Z. A. NAN, M. EHARA and Q. M. WANG**, “‘Passivated Precursor’ Approach to All-Alkynyl-Protected Gold Nanoclusters and Total Structure Determination of Au₁₃₀,” *Chem. –Eur. J.* **30(42)**, e202401094 (2024). DOI: 10.1002/chem.202401094
- W. W. WANG, T. TANAKA and M. EHARA**, “Theoretical Study on the Mechanism of Alcohol Photooxidation on Nb₂O₅ Surface,” *J. Comput. Chem.* **45(25)**, 2128–2135 (2024). DOI: 10.1002/jcc.27435
- B. BOEKFA, T. MAIHOM, M. EHARA and J. LIMTRAKUL**, “Investigation of the Suzuki-Miyaura Cross-Coupling Reaction on Palladium H-Beta Zeolite with DFT Calculations,” *Sci. Rep.* **14(1)**, 611 (2024). DOI: 10.1038/s41598-023-51116-x
- B. ZHOU, P. ZHAO, J. GUO, Y. QIAO, S. HU, X. GUO, J. LIU and C. LI**, “Unlocking the Potential of Antisolvent-Free Perovskite Solar Cells: Modulating Crystallization and Intermediates through a Binary Volatile Additive Strategy,” *Nano Energy* **124**, 109487 (2024). DOI: 10.1016/j.nanoen.2024.109487

B-3) 総説, 著書

- B. SRIDHARAN, A. SINHA, J. BARDHAN, R. MODEE, M. EHARA and U. D. PRIYAKUMAR**, “Deep Reinforcement Learning in Chemistry: A Review,” *J. Comput. Chem.* **45(22)**, 1886–1898 (2024). DOI: 10.1002/jcc.27354

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

- M. EHARA**, “Inverse Design Approach of Molecular Aggregates and Molecule-Nanocluster Systems,” Indian Institute of Technology, Hyderabad, Hyderabad (India), July 2024.

M. EHARA, “Nanocluster and Heterogeneous Catalysis: Interplay between Theory and Experiment,” International Institute of Information and Technology (IIIT) Hyderabad, Hyderabad (India), July 2024.

M. EHARA, “Nanocluster and Heterogeneous Catalysis: Interplay between Theory and Experiment,” Sustainable Catalysis: Synthesis, Theory, and Applications (SusCat-STA 2024), Udaipur (India), July 2024.

M. EHARA, T. SHIRAOGAWA and P. ZHAO, “Electronic Structures and Optical Properties of Metal Nanoclusters,” The 8th Japan-Czech-Slovakia International Symposium on Theoretical Chemistry (JCS8), Sapporo (Japan), June 2024.

江原正博, 「量子化学に基づく理論精密分光」, 第三回冷却分子・精密分光シンポジウム, 調布, 2024年8月.*

江原正博, 「複雑電子系の光物性科学と触媒化学」, 第43回QCRIセミナー, 京都, 2024年8月.

白男川貴史, 「化合物空間の合理的探索と理論的体系化に向けた研究」, シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア 2024」, 京都, 2024年9月.

白男川貴史, 「分子・物質系の機械学習の基礎」, 2024年度分子研異分野技術交流セミナー (第4回) ～機械学習の材料開発への応用～, 岡崎, 2024年8月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子科学会運営委員 (2020–2024).

触媒学会界面分子変換研究会世話人会委員 (2015–), コンピュータの利用研究会世話人会委員 (2018–), 元素循環触媒超・研究会委員 (2022–2025).

量子化学研究協会理事 (2006–2026).

計算物質科学協議会, 運営委員会委員 (2020–2025).

学会の組織委員等

The XIth Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC), National Advisory Committee (2023–2025).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

東京大学物性研究所計算物質科学研究センター運営委員会委員 (2020–2026).

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

東京大学物性研究所データ創出活用型マテリアル研究開発プロジェクトデータ連携部会委員 (2022–2025).

名古屋大学情報連携推進本部 研究情報環境将来構想ワーキンググループ委員 (2024–2025).

学会誌編集委員

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

Theoretical Chemistry Accounts, Editorial Board (2015–).

The Chemical Record, Editorial Board (2015–).

Wiley Periodicals, Editor (2022–).

理科教育活動

出前授業「Science English (サイエンス・イングリッシュ)」愛知県立岡崎北高等学校 (2024). (ZHAO, Pei)

その他

量子化学スクール世話人 (2011–).

計算物質科学スパコン共用事業運営委員会委員 (2019-).

計算物質科学連絡会議委員 (2019-).

文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ「マテリアルの高度循環のための技術 スポーク機関」データ構造化責任者 (2021-2031).

2024年度 ARIM 学生研修プログラム (2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

総合研究大学院大学先端学術院,「機能物性科学」, 2024年 5月.

B-10) 競争的資金

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

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

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

科学技術振興機構CREST 研究(受託研究),「多元素金属イオンクラスターの理論設計と反応機構解析」, 江原正博 (2022年度-2024年度).

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

科研費基盤研究(B),「熱的 1 電子移動を高度に制御する担持金属触媒の設計・開発と未利用資源活用への展開」(代表者: 三浦 大樹), 江原 正博(研究分担者) (2024年度-2026年度).

科研費若手研究,「鉛フリーペロブスカイト光触媒の理論設計: CO₂還元効率の向上」, ZHAO, Pei (2024年度-2026年度).

C) 研究活動の課題と展望

我々は、高精度電子状態理論を基盤として、光機能性分子の電子過程や金属微粒子・バルク触媒を主たる対象とした理論研究を実施し、新しい化学概念を構築することを目的として研究を進めている。近年、電子状態理論では大規模化が進展し、ナノ材料やバイオ系への応用が展開している。しかし、複雑な励起状態や固体表面などに対して信頼性のある情報を提供できる理論は未だ開発途上にあり、さらに開発を進める必要がある。高機能化と大規模化の観点から我々の方法を発展させるとともに、固体表面を高精度に記述できる理論開発を行う。光機能性分子の電子過程の研究では、励起状態における構造緩和や分子間相互作用について検討し、分子システムとしての機能設計へと展開する。分子系・分子集合系の非対称性に関わる励起子相互作用や非対称因子、錯体光化学反応に関する理論研究を実験と協力して進める。2022年度から、学術変革領域研究(A)「光の螺旋性が拓くキラル物質科学の変革」が発足した。量子逆設計理論を用いて、超螺旋光に基づくキラル光物性の理論解析・設計に関する研究を推進する。また、CREST「多元素金属イオンクラスターの精密設計と自在配列が拓く新物質科学」では、多元素金属イオンクラスターの光物性や触媒反応活性について理論解析・設計の研究を推進する。不均一系触媒の研究では、主に担持合金クラスターの触媒作用や反応機構について理論解析を実施する。

奥村 久士（准教授）（2009 年 5 月 1 日着任）

伊藤 暁（助教）

FARAH, Anne-Idil（インターンシップ）

TOOPRADAB, Borwornlak（インターンシップ）

大多和 克紀（大学院生）

鶴間 稜平（大学院生）

鈴木 日奈子（特別共同利用研究員）

森 丈（特別共同利用研究員）

川口 律子（事務支援員）

A-1) 専門領域：理論生物物理学，理論化学物理学

A-2) 研究課題：

- a) 流れによるアミロイド β ペプチドの凝集メカニズムの解明
- b) アミロイド β ペプチドの凝集過程を解明する大規模分子動力学シミュレーション
- c) アルギニンによるポリグルタミンタンパク質の凝集阻害効果の解明
- d) LEDGF の結合におけるヒストンメチル化の影響の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) アルツハイマー病はアミロイド β ($A\beta$) ペプチドの凝集体が原因で発症する。 $A\beta$ には 42 残基からなる $A\beta_{42}$ と 40 残基からなる $A\beta_{40}$ の 2 種類がある。我々は昨年度までに 2 本の $A\beta_{42}$ からなる系および 2 本の $A\beta_{40}$ からなる系の分子動力学シミュレーションを実行し、① $A\beta$ が β ヘアピン構造を形成している時に凝集しやすいこと、② $A\beta_{42}$ の方が $A\beta_{40}$ よりも β ヘアピン構造を形成しやすいため凝集しやすいこと、③ 5 番目のアミノ酸残基であるアルギニンが凝集のカギとなっていることを解明してきた。これらの成果によりタンパク質の凝集に関する理論研究で世界をリードしている。最近、生体膜表面上に血液やリンパ液の流れがあると $A\beta$ ペプチドの凝集が促進されることが明らかになった。しかし、その機構は分かっていない。この問題を解決するため、我々は昨年度生体膜表面で溶液の流れを発生させるための非平衡分子動力学シミュレーション法を開発した。この手法では生体膜の重心をラグランジュ未定乗数法で固定しながら、溶液には一定の加速度を加えて生体膜上の流れを作り出す。今年度はこの手法を用いて $A\beta(16-22)$ ペプチドの凝集過程のシミュレーションを行った。その結果、流れがある場合には流れがない場合よりも $A\beta(16-22)$ ペプチドの凝集が促進されることが分かった。これは実験と一致する結果である。さらにその理由も解明した。流れよりずりが生じると流れに乗って速く移動するペプチドと生体膜付近で流れに乗らずあまり速く移動しないペプチドが生じる。そのため流れに乗ったペプチドが流れに乗っていないペプチドに追いつき、出会う頻度が高まるため凝集が促進されるのである。
- b) より大規模に $A\beta$ の凝集過程を解明するために 32 本の $A\beta_{42}$ および $A\beta_{40}$ からなる系の分子動力学シミュレーションを実行している。これまでに 2.0 マイクロ秒のシミュレーションが完了した。これは世界最大の $A\beta$ の分子動力学シミュレーションである。その結果、 $A\beta_{42}$ も $A\beta_{40}$ も凝集と解離を繰り返しながら、徐々に凝集していくことを明らかにした。最終的に 32 量体など従来のシミュレーションよりも大きなオリゴマーの形成を再現することに成功した。また、 $A\beta_{42}$ の方が $A\beta_{40}$ よりも速く大きな凝集体を形成した。これは実験結果と一致するものである。さらに、 $A\beta_{42}$ も

Aβ40 も小さいオリゴマーでは比較的球状であるのに対し、大きくなると棒状に変化することも明らかにした。今後この形状変化の理由も含め、より詳細な凝集メカニズムを解明する。

- c) ポリグルタミンタンパク質はグルタミンの繰り返しが異常に拡張したもので、ハンチントン病などのポリグルタミン病を引き起こす。これまでの実験研究から、アルギニンがポリグルタミンタンパク質の凝集を抑制することが明らかになっている。アルギニンのポリグルタミンタンパク質凝集抑制機構とアルギニンだけが凝集抑制効果を持つ理由を明らかにするために、1本のポリグルタミンを含む系のレプリカ置換分子動力学シミュレーションを行った。その結果、アルギニンは同じく正電荷を持つリジンに比べてポリグルタミンタンパク質とよく水素結合を形成することが分かった。このことがアルギニンのポリグルタミンタンパク質凝集抑制機構を解明するうえでカギになると考えられた。さらに、その凝集に対する効果を検証するため、2本のポリグルタミンを含む系のレプリカ置換分子動力学シミュレーションを開始した。現在詳細な解析を進めている。
- d) 水晶体上皮由来成長因子（LEDGF/p75/PSIP1）はクロマチン結合タンパク質であり、遺伝子の転写にかかわっている。様々なタンパク質とクロマチンとの結合を仲介する役割を担っており、後天性免疫不全症候群（AIDS）、白血病、癌などの疾患との関連も報告されている。LEDGF のクロマチン結合部位は PWWP ドメインであり、ヒストン H3 の 36 番目のリジン残基（H3K36）がジメチル化またはトリメチル化されている時のみ結合することが知られている。我々はこのメチル化に依存した結合親和性の詳細を明らかにするために、PWWP ドメインとヒストンフラグメントの分子動力学シミュレーションを行った。その結果、PWWP ドメインと H3K36 の結合には、疎水的相互作用だけでなく静電的相互作用も重要であることがわかった。また、水分子がモノメチル化または非メチル化状態の H3K36 との結合を不安定化する要因であることも見出した。

B-1) 学術論文

H. KOYAMA, A. M. ITO, H. OKUMURA, T. OTANI, K. NAKAMURA and T. FUJIMORI, “Cell Position-Based Evaluation of Mechanical Features of Cells in Multicellular Systems,” *J. Theor. Biol.* **604**, 112070 (2025). DOI: 10.1016/j.jtbi.2025.112070

M. OTAWA, S. G. ITOH and H. OKUMURA, “Nonequilibrium Molecular Dynamics Method to Generate Poiseuille-Like Flow between Lipid Bilayers,” *J. Chem. Theory Comput.* **20(22)**, 10199–10208 (2024). DOI: 10.1021/acs.jctc.4c00750

M. YAGI-UTSUMI, Y. KANAOKA, S. MIYAJIMA, S. G. ITOH, K. YANAGISAWA, H. OKUMURA, T. UCHIHASHI and K. KATO, “Single-Molecule Kinetic Observation of Antibody Interactions with Growing Amyloid β Fibrils,” *J. Am. Chem. Soc.* **146(46)**, 31518–31528 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c08841

S. TANIMOTO and H. OKUMURA, “Why Is Arginine the Only Amino Acid That Inhibits Polyglutamine Monomers from Taking on Toxic Conformations?” *ACS Chem. Neurosci.* **15(15)**, 2925–2935 (2024). DOI: 10.1021/acscchemneuro.4c00276

H. KOYAMA, H. OKUMURA, T. OTANI, A. M. ITO, K. NAKAMURA, K. KATO and T. FUJIMORI, “Effective Mechanical Potential of Cell–Cell Interaction in Tissues Harboring Liquid Cavity and in Cell Sheet toward Morphogenesis,” *Front. Cell Dev. Biol.* **12(12)**, 1414601 (2024). DOI: 10.3389/fcell.2024.1414601

B-4) 招待講演

奥村久士,「分子動力学シミュレーションでアルツハイマー病の原因物質に迫る」, 国研セミナー, 岡崎市, 2024年7月.

奥村久士,「各種統計アンサンブルの生成法」, 第 18 回分子シミュレーションスクール—基礎から応用まで—, 分子科学研究所, 岡崎, 2024 年 9 月.

S. G. ITOH, “Effect of H3K36 methylation on LEDGF binding studied by MD simulation,” Sugadaira Winter Workshop 2025 on the role of fluctuations and dynamics in bio and soft matter, Ueda (Japan), February 2025.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulation for disease-causative molecules,” Sugadaira Winter Workshop 2025 on the role of fluctuations and dynamics in bio and soft matter, Ueda (Japan), January 2025.

H. OKUMURA, “Protein aggregation and its inhibition observed by molecular dynamics simulation,” 4th International Conference on Materials Research and Innovation, Bangkok (Thailand), December 2024.

H. OKUMURA, “Molecular insight into protein aggregates to cause neurodegenerative disease,” Thailand-Japan Symposium in Chemistry, Chiang Mai (Thailand), November 2024.

H. OKUMURA, “Molecular Dynamics Simulation,” Molecular and Materials Science Academy, Bangkok (Thailand), October 2024.

H. OKUMURA, “SARS-CoV-2 RNA Polymerase and its Inhibitor Studied by Molecular Dynamics Simulation,” Chula Mini-Symposium Protein Dynamics in Living System, Bangkok (Thailand), September 2024.

S. G. ITOH, “MD simulation on A β peptides in a heterogeneous solvent,” Workshop on Biomaterial design inspired by the origin of life caused by liquid–liquid phase separation in dynamic solution environment, Bangkok (Thailand), September 2024.

H. OKUMURA, “Seeing protein aggregation and disaggregation by molecular dynamics simulation,” Workshop on biomaterial design inspired by the origin of life caused by liquid–liquid phase separation in dynamic solution environment, Bangkok (Thailand), September 2024.

S. G. ITOH, “Aggregation process of amyloid- β peptides using the replica-permutation method,” The 27th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 27), Bangkok (Thailand), August 2024.

H. OKUMURA, “Trends in molecular dynamics simulation research of amyloid- β aggregates,” The 27th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 27), Bangkok (Thailand), July 2024.

H. OKUMURA, “What I learned from Professor Fumiko Yonezawa,” Professor Fumiko Yonezawa Memorial Lecture Series, Newcastle (UK), April 2024.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulation for the causative molecules of Alzheimer's disease,” Tribology group seminar, Department of mechanical engineering, Imperial College London, London (UK), April 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会名古屋支部役員 (2017–).

分子シミュレーション学会 幹事 (2024–).

学会の組織委員等

XXXIV IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2023), Steering Committee member (実行委員) (2021–).

分子シミュレーション学会 分子シミュレーションスクール世話人 (2024–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

東京大学物性研究所附属物質設計評価施設スーパーコンピュータ共同利用課題審査委員会委員 (2024–2026).

高度情報科学技術研究機構学際共同研究 WG 委員 (2024–2025).

学会誌編集委員

ACS Chemical Neuroscience, Editorial Advisory Board (2024–).

その他

分子動力学シミュレーションの普及のため, 総研大の講義とは別にビデオカメラの前で講義を行い, それを YouTube で無料公開した: <https://www.youtube.com/watch?v=6B3BE7-iIPk> 合計約 16 時間かけて分子動力学シミュレーションの基礎から発展的な内容まで系統的に説明している。約 2 年 5 カ月で視聴回数は 9000 回を超えた。多くの他大学の先生方から研究室で大学院生向けの教材として活用していると聞く。全国の学生および若手研究者の育成に貢献している。

B-8) 大学等での講義, 客員

名古屋市立大学大学院薬学研究科, 客員准教授, 2019 年 4 月–.

東京大学物性研究所, 客員准教授, 2024 年 4 月–2025 年 3 月.

Kasetsart University, Faculty of Science, 講義講師「Molecular Dynamics Simulation」, 2024 年 10 月.

Kasetsart University, Faculty of Science, 講義講師「Molecular Dynamics Simulation」, 2025 年 2 月.

総合研究大学院大学先端学術院, 講義「生体分子シミュレーション」, 2024 年 4 月–2025 年 3 月.

中京大学, 非常勤講師, 2024 年 9 月–2025 年 3 月. (伊藤 暁)

Kasetsart University, Faculty of Science, 講義講師「Basic Statistical Mechanics and Monte Carlo Simulation」, 2025 年 2 月. (伊藤 暁)

B-9) 学位授与

大多和克紀, 「生体膜上に流れを発生させる非平衡分子動力学法の開発とその応用」, 2025 年 3 月, 博士 (理学).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究 (C), 「脂質膜上の流れによるペプチドの凝集促進機構を分子動力学シミュレーションで解明する」, 奥村久士 (2024 年度–2026 年度).

科研費基盤研究 (C), 「蛋白質ミスフォールディング病全般に対するペプチドを用いた治療法開発」(代表者: 中村和裕), 奥村久士 (研究分担者) (2024 年度–2026 年度).

C) 研究活動の課題と展望

- a) アミロイド β の Arg5 近傍の N 末端領域が変異した英国型変異体 (H6R) や鳥取型変異体 (D7N) は, 野生型よりも凝集速度が速く, 若年性アルツハイマー病を引き起こす傾向がある。これらの変異体では N 末端領域の正味の正電荷が野生型に比べて増加しているので, このことが凝集を促進している可能性を示唆している。今後, 分子動力学シミュレーションを行い, これらの変異体で凝集が促進される理由を明らかにする。

- b) ポリグルタミンタンパク質の凝集をアルギニンが阻害する現象に関して、我々は1本のポリグルタミンとアルギニンを含む系のシミュレーションを行い、アルギニンがポリグルタミンの分子内 β シート構造の形成を阻害する理由を解明した。現在、分子内 β シートの抑制が凝集阻害に及ぼす効果を解明するため、2本のポリグルタミンを含む系のレプリカ置換分子動力学シミュレーションを行っている。このシミュレーションを解析し、アルギニンが分子内 β シートの形成だけでなく凝集体の形成も阻害する理由を解明する。
- c) 山形大学の真壁教授らはアミロイド触媒構造を可溶性 β シート蛋白質PSAM(Peptide Self Assembly Mimics)に移植し、従来の酵素とは異なるタンパク質触媒を開発している。具体的にはPSAMの β シート部分にHis残基を8個導入した変異体(Cat-H8)とHis残基を24個導入した変異体(Cat-H24)を作製し、これらがエステル加水分解反応と脱リン酸化反応の触媒活性を有していることを示した。そこで、我々はその触媒機構を解明するため分子動力学シミュレーションを用いた理論研究を行っている。これまでにCat-H8とエステル加水分解反応を示す分子(p-NPA: p-nitrophenyl acetate)を含む系およびCat-H8と脱リン酸化反応を示す分子(p-NPP: p-nitrophenyl phosphate)を含む系の分子動力学シミュレーションを行った。今後、これらの結果からリガンドが近付きやすいアミノ酸残基を特定する。さらに、これらの情報を基に触媒活性機構解明のための解析を進める予定である。
- d) 神戸薬科大学の神谷教授らは人工核酸であるアミノ酸型人工核酸に着目し、新規核酸医薬の開発に取り組んでいる。我々は神谷教授らと協力して分子動力学シミュレーションによる人工核酸の研究に取り組んでいる。これまでに量子化学計算によりアミノ酸型人工核酸の1つであるL-aTNAの電荷パラメータを決定した。今後、人工核酸分子のレプリカ置換分子動力学シミュレーションを実行する。これまでのテスト計算で低温(300 K)から高温(450 K)までの幅広い温度範囲を変化させることに成功した。シミュレーション時間を延長して十分な構造サンプリングデータを生成し、主成分解析により自由エネルギー地形を計算する予定である。さらに比較対象としてDNAについても同様のシミュレーションと解析を実行する。DNAとL-aTNAの構造およびその揺らぎを比較検討する。

岡崎 圭一（准教授）（2020 年 12 月 1 日着任）

大貫 隼（助教）

MAHMOOD, Md Iqbal（特任研究員）

関 健仁（大学院生）

千葉 史朱香（事務支援員）

A-1) 専門領域：理論生物物理学

A-2) 研究課題：

- a) 分子モーターの 1 方向性運動メカニズムの解明
- b) トランスポーターの輸送メカニズムの解明
- c) タンパク質が引き起こす細胞膜変形メカニズムの解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子モーターは、生体内で ATP 加水分解エネルギーなどの化学エネルギーを消費して、1 方向性の運動をするタンパク質である。また、このような運動を阻害する因子が存在することが知られている。一例として、回転モーター F_1 -ATPase の回転運動を阻害する IF_1 があるが、興味深いことに、阻害状態を解除するには合成方向に回転させる必要があり、ここで再び 1 方向性の運動が必要になる。この 1 方向性の阻害状態解除メカニズムを分子シミュレーションによって解明する。シミュレーション中に、回転子にトルクをかけて加水分解・合成方向のそれぞれに回転させて、阻害因子・回転子の相互作用、回転に伴う仕事等の観点から解析を行なっている。また、ATP 合成酵素である V / A -ATPase の膜ドメインである V_o モーターにおける一方向回転メカニズムを全原子 MD シミュレーションで解明した。
- b) シュウ酸は多量に摂取すると、体内で尿管結石等の症状を引き起こす。このシュウ酸は腸内細菌により分解され制御されているが、その際にシュウ酸を細菌内に輸送するのがシュウ酸トランスポーターである。このシュウ酸トランスポーターの全原子 MD シミュレーションにおいて、構造変化に重要な部位の相互作用を人工的に弱めたシミュレーション（accelerated MD）を行い、これまで未知であった内開き構造を解明した。また、内開き構造になる際のコンタクト変化の解析と配列情報の共進化解析により構造変化に重要なアミノ酸残基を特定し、その残基を構造予測 AI である AlphaFold2 で変異させることで、内開き構造を安定化する変異を予測した。さらに、「浅い MSA」を用いた AlphaFold により幅広いトランスポーター構造を生成した後、それらを初期構造とした MD シミュレーションを実施するアプローチにより、トランスポーター構造ダイナミクスの効率的なシミュレーションが可能になった。
- c) 細胞膜は、多種多様なタンパク質と相互作用して、ダイナミックに変形する。例えば、エンドサイトーシスなどで見られるように一部切り離されて袋状構造（ベシクル）を作って細胞内外の物質輸送に使われる。このような細胞膜変形に関わるタンパク質が、膜を曲げる Pacsin1 や、GTP 加水分解エネルギーを用いて膜を切断するダイナミンである。我々は、全原子シミュレーションより大規模で長時間のシミュレーションが可能な粗視化 Gō-MARTINI モデルの開発を行って、Pacsin1 に応用することで、その構造揺らぎが正しく再現できることを示した。さらに、チューブ状膜とダイナミンの大規模多量体からなるシミュレーション系を構築して、ダイナミンによる膜切断の分子メカニズムに迫ろうとしている。

B-1) 学術論文

- K. KAWASHIMA, T. SATO, K. OKAZAKI, K. KIM, N. MATUBAYASI and T. MORI**, “Investigating the Hyperparameter Space of Deep Neural Network Models for Reaction Coordinates,” *APL Mach. Learn.* **3**, 016113 (2025). DOI: 10.1063/5.0252631
- J. KISHIKAWA, Y. NISHIDA, A. NAKANO, T. KATO, K. MITSUOKA, K. OKAZAKI and K. YOKOYAMA**, “Rotary Mechanism of the Prokaryotic V_0 Motor Driven by Proton Motive Force,” *Nat. Commun.* **15**(1), 9883 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-53504-x
- J. OHNUKI and K. OKAZAKI**, “Integration of AlphaFold with Molecular Dynamics for Efficient Conformational Sampling of Transporter Protein NarK,” *J. Phys. Chem. B* **128**(31), 7530–7537 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c02726
- K. OKADA, T. KIKUTSUJI, K. OKAZAKI, T. MORI, K. KIM and N. MATUBAYASI**, “Unveiling Interatomic Distances Influencing the Reaction Coordinates in Alanine Dipeptide Isomerization: An Explainable Deep Learning Approach,” *J. Chem. Phys.* **160**(17), 174110 (2024). DOI: 10.1063/5.0203346
- T. MATSUDA, S. SAKAI, K. OKAZAKI and T. NAGAI**, “Improvement of the Green-Red Förster Resonance Energy Transfer-Based Ca^{2+} Indicator by Using the Green Fluorescent Protein, Gamillus, with a Trans Chromophore as the Donor,” *ACS Sens.* **9**(4), 1743–1748 (2024). DOI: 10.1021/acssensors.3c02398

B-3) 総説, 著書

- 岡崎圭一, 「研究室だより「自然科学研究機構 分子科学研究所 岡崎研究室」, アンサンブル, **26**(2), 233–237 (2024).
- 岡崎圭一, 大貫 隼, 「タンパク質の構造変化予測～AlphaFold と分子動力学の統合～」, 実験医学別冊最強のステップUP シリーズ: AlphaFold 時代の構造バイオインフォマティクス実践ガイド～今日からできる! 構造データの基本操作から相互作用の推定, タンパク質デザインまで, 富井健太郎編, 第4章 1, pp. 184–190 (2024).
- 大貫 隼, 「分子シミュレーション×AlphaFold2 でトランスポータータンパク質の未解明構造を明らかにする」, 細胞, **56**(4), 326–328 (2024).

B-4) 招待講演

- 岡崎圭一, 「分子シミュレーションと AlphaFold の統合によるトランスポータータンパク質の構造変化ダイナミクス解明」, 第 463 回 CBI 学会講演会, オンライン開催, 2025 年 3 月.
- 岡崎圭一, 「タンパク質構造予測 AI: AlphaFold のリバースエンジニアリングと分子シミュレーション」, 2024 年度第 5 回物性アプリーオープンフォーラム, 東京大学 物性研究所, 柏, 2024 年 11 月.
- 岡崎圭一, 「分子シミュレーションと反応速度論・マルコフモデル」, 第 18 回分子シミュレーションスクール—基礎から応用まで—, 岡崎, 2024 年 8 月.
- 岡崎圭一, 「分子シミュレーションと AlphaFold の統合によるタンパク質構造変化ダイナミクスの解明」, 物性研究所 パソコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の現在と未来」, 柏, 2024 年 4 月.
- K. OKAZAKI**, “Biomolecular simulation facilitated by AI,” Cyprus Meets Japan, The Cyprus Institute, Nicosia (Cyprus), November 2024.
- J. OHNUKI**, “Integration of AlphaFold with Molecular Dynamics to Uncover Missing Conformational States of Transporter Proteins,” International Conference on Theoretical and High Performance Computational Chemistry 2024, Wuhan (China), April 2024.

B-6) 受賞, 表彰

大貫 隼, 日本蛋白質科学会若手奨励賞優秀賞 (2024).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会代議員 (2023–2025).

学会の組織委員等

分子シミュレーション学会幹事 (分子シミュレーションスクール担当) (2021–2025).

分子シミュレーションスクール世話人 (2016–).

分子シミュレーションスクール世話人 (2022–). (大貫 隼)

B-8) 大学等での講義, 客員

静岡大学大学院総合科学技術研究科農学専攻, 非常勤講師, 「フロンティア科学特論II」, 2024年12月.

総合研究大学院大学先端学術院, 「生体分子シミュレーション」, 2024年12月.

B-10) 競争的資金

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

科研費若手研究, 「蛋白質サイズの大規模構造遷移に適用可能な反応座標推定法の開発」, 大貫 隼 (2023年度–2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

本グループでは, 生体分子マシンの機能ダイナミクスを理論的な手法で解明して, そのデザイン原理を探索する研究を進めている。回転モーター F_1 -ATPase の阻害因子 IF_1 については, シミュレーションによる解析が進んでおり, その阻害メカニズムに基づいたデザインにより新規阻害因子の開発に繋げたい。シュウ酸トランスポーターについては, 今まで未知であった内向き開構造を明らかにしたので, その構造遷移における律速過程についての詳細な分子メカニズムを明らかにしていきたい。また, 他のトランスポーターへの展開も考える。細胞膜変形については, 細胞膜切断に関わるダイナミン多量体とチューブ状膜からなるシミュレーション系が構築できたので, 膜切断の分子メカニズムの解明を目指す。

4-5 光分子科学研究領域

光分子科学第二研究部門

大森 賢治（教授）（2003 年 9 月 1 日着任）

DE LÉSELEUC, Sylvain（特任准教授）

富田 隆文（助教）

周 鳥居 諭来（特任助教）

松原 卓也（特任助教）

田村 光（特任助教）

CHAUHAN, Vikas Singh（特任研究員）

JAUNET-LAHARY, Titouan（特任研究員）

KUMAR SINGH, Pushpander（特任研究員）

SRAKAEW, Kritsana（特任研究員）

TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh（特任研究員）

LIENHARD, Vincent（招へい研究員）

岡田 満哉（特別訪問研究員）

藤川 武敏（特命専門員）

川本 美奈子（特任専門員）

鈴井 光一（特任専門員）

牧野 茜（特任専門員）

松尾 友紀子（特任専門員）

犬飼 和久（特任専門員）

酒井 志帆（特任専門員）

伊神 賢人（特任専門員）

西岡 稚子（特任専門員）

GANESAN, Karthikeyan（インターンシップ）

MAITY, Arnab（インターンシップ）

KETAIAM, Kittisak（インターンシップ）

SIRIWORAKOONCHAI, Phatwarach（インターンシップ）

BRAUN, Eduard（インターンシップ）

ROUSSEL, Mathis（インターンシップ）

LERICHE, Axel-Ugo（インターンシップ）

DUPERON, Isaline（インターンシップ）

石坂 晴（インターンシップ）

SCHMID, Otto（インターンシップ）

MEMBREZ, Gaetan（インターンシップ）

BROSIG, Jule（インターンシップ）

KOCIK, Robin（大学院生）

DENECKER, Tom（大学院生）

HASSANALY, Sapna（大学院生）

KECIR, Omar（大学院生）

田中 愛登（大学院生）

ANTONIO, Jorge (大学院生)
渡部 元輝 (大学院生)
中井 愛里 (技術支援員 (派遣))
鶴田 笑子 (技術支援員 (派遣))
越田 陽子 (事務支援員)
山岸 芽衣 (事務支援員)
久樂 由莉耶 (事務支援員)
武井 美緒 (事務支援員 (派遣))
八幡 菜穂子 (事務支援員 (派遣))

A-1) 専門領域：量子物理学，量子コンピュータ，量子シミュレータ，原子分子光 (AMO) 物理学，物理化学

A-2) 研究課題：

- a) アト秒精度のコヒーレント制御法の開発
- b) 量子論の検証実験
- c) コヒーレント分子メモリーの開発
- d) 分子ベースの量子情報科学
- e) 強レーザー場非線形過程の制御
- f) バルク固体の極限コヒーレント制御
- g) 超高速量子シミュレータの開発
- h) 超高速量子コンピュータの開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) コヒーレント制御は、物質の波動関数の位相を操作する技術である。その応用は、量子コンピューティングや結合選択的な化学反応制御といった新たなテクノロジーの開発に密接に結び付いている。コヒーレント制御を実現するための有望な戦略の一つとして、物質の波動関数に波としての光の位相を転写する方法が考えられる。例えば、二原子分子に核の振動周期よりも短い光パルスを照射すると、「振動波束」と呼ばれる局在波が結合軸上を行ったり来たりするような状態を造り出す事ができる。波束の発生に際して、数フェムト秒からアト秒のサイクルで振動する光電場の位相は波束を構成する各々の振動固有状態の量子位相として分子内に保存されるので、光学サイクルを凌駕する精度で光の位相を操作すれば波束の量子位相を操作することができる。我々はこの考えに基づき、独自に開発したアト秒位相変調器 (APM) を用いて、二つのフェムト秒レーザーパルス間の相対位相をアト秒精度で操作するとともに、このパルス対によって分子内に発生した二つの波束の相対位相を同様の精度で操作する事に成功した。さらに、これらの高度に制御された波束干渉の様子を、ピコメートルレベルの空間分解能とフェムト秒レベルの時間分解能で観測する事に成功した。
- b) APM を用いて、分子内の 2 個の波束の量子干渉を自在に制御する事に成功した。また、この高精度量子干渉をデコヒーレンス検出器として用いる事によって、熱的な分子集団や固体中の電子的なデコヒーレンスを実験的に検証した。さらに、固体パラ水素中の非局在化した量子状態 (vibron) の干渉を観測し制御する事に成功した。
- c) 光子場の振幅情報を分子の振動固有状態の量子振幅として転写する量子メモリーの開発を行なった。ここでは、フェムト秒光パルス対によって分子内に生成した 2 個の波束間の量子位相差をアト秒精度で操作し、これらの干渉の結果生成した第 3 の波束を構成する各振動固有状態のポピュレーションを観測することによって、光子場の振幅情報が高精度で分子内に転

写されていることを証明することができた。また、フェムト秒光パルス対の時間間隔をアト秒精度で変化させることによって波束内の固有状態のポピュレーションの比率を操作できることを実証した。さらに、固体パラ水素中の振動量子状態 (vibron) の位相情報の 2 次元分布を操作し可視化することによって、固体 2 次元位相メモリーの可能性を実証することに成功した。

- d) 分子メモリーを量子コンピュータに発展させるためには、c) で行ったポピュレーション測定だけでなく、位相の測定を行う必要がある。そこで我々は、c) の第 3 の波束の時間発展を別のフェムト秒パルスを用いて実時間観測した。これによって、ポピュレーション情報と位相情報の両方を分子に書き込んで保存し、読み出すことが可能であることを実証した。振動固有状態の組を量子ビットとして用いる量子コンピュータの可能性が示された。さらに、分子波束を用いた量子フーリエ変換を開発した。
- e) 分子の振動波束を構成する振動固有状態の振幅と位相を強レーザー場で制御することに成功した。
- f) バルク固体中の原子の超高速 2 次元運動をフェムト秒単位で制御し画像化する新しい光技術を開発した。
- g) ほぼ絶対零度 (~50 ナノケルビン) まで冷やした極低温のルビジウム原子をミクロンレベルで整列させた人工原子結晶にアト秒精度のコヒーレント制御法を適用することによって、3 万個の粒子の量子多体問題を近似無しに 1 ナノ秒 (ナノ = 10^{-9}) 以内でシミュレートできる世界唯一・最速の「超高速量子シミュレータ」を開発することに成功した。それぞれ異なる研究分野で発展してきた「超高速化学」と「極低温物理」の手法を融合させた世界初の試みであり、材料科学・固体物理・溶液化学など広範囲の領域に波及効果を及ぼす新しい方法論として期待されている。
- h) 上記の人工原子結晶とアト秒精度のコヒーレント制御法を組み合わせた世界唯一・最速の「超高速量子コンピュータ」の開発を進めており、新規特許出願 2 件を行っている。

B-1) 学術論文

T. P. MAHESH, T. MATSUBARA, Y. T. CHEW, T. TOMITA, S. DE LÉSÉLEUC and K. OHMORI, “Generation of 480 nm Picosecond Pulses for Ultrafast Excitation of Rydberg Atoms,” *Opt. Lett.* **50**(2), 403–406 (2025). DOI: 10.1364/OL.538707

Y. CHEW, M. POITRINAL, T. TOMITA, S. KITADE, J. MAURICIO, K. OHMORI and S. DE LÉSÉLEUC, “Ultra-Precise Holographic Optical Tweezers Array,” *Phys. Rev. A* **110**, 053518 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevA.110.053518

M. KUNIMI, T. TOMITA, H. KATSURA and Y. KATO, “Proposal for Simulating Quantum Spin Models with the Dzyaloshinskii-Moriya Interaction Using Rydberg Atoms and the Construction of Asymptotic Quantum Many-Body Scar States,” *Phys. Rev. A* **110**, 043312 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevA.110.043312

V. BHARTI, S. SUGAWA, M. KUNIMI, V. S. CHAUHAN, T. P. MAHESH, M. MIZOGUCHI, T. MATSUBARA, T. TOMITA, S. DE LÉSÉLEUC and K. OHMORI, “Strong Spin-Motion Coupling in the Ultrafast Dynamics of Rydberg Atoms,” *Phys. Rev. Lett.* **133**(9), 093405 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevLett.133.093405

X. ZHOU, H. TAMURA, T. H. CHANG and C. L. HUNG, “Trapped Atoms and Superradiance on an Integrated Nanophotonic Microring Circuit,” *Phys. Rev. X* **14**(3), 031004 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevX.14.031004

B-2) 国際会議のプロシーディングス他

C. NILL, S. DE LÉSÉLEUC, C. GROß and I. LESANOVSKY, “Resonant Stroboscopic Rydberg Dressing: Electron-Motion Coupling and Multi-Body Interactions,” *arXiv* 2411.10090 (2024).

K. NISHIMURA, H. SAKAI, T. TOMITA, S. DE LÉSÉLEUC and T. ANDO, “Super-Resolution Holographic Optical Tweezers Array,” *arXiv* 2411.03564 (2024).

T. TOMITA, Y. CHEW, R. VILLELA, T. P. MAHESH, H. SAKAI, K. NISHIMURA, T. ANDO, S. DE LÉSÉLEUC and K. OHMORI, “Atom Camera: Super-Resolution Scanning Microscope of a Light Pattern with a Single Ultracold Atom,” *arXiv* 2410.03241 (2024).

B-3) 総説, 著書

大森賢治, 「量子コンピュータ概観, “巻頭言”」, *表面と真空*, **68(3)**, 127–128 (2025).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

大森賢治, 「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」, ムーンショット目標 6 公開シンポジウム 2025, バルサール秋葉原, 東京都千代田区, 2025 年 3 月.

大森賢治, 「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, 応用物理学会超伝導分科会第 70 回研究会「量子コンピュータの現状と展望」, 同志社大学東京オフィス セミナー室, 東京都中央区, 2024 年 12 月.

大森賢治, 「冷却原子の量子コンピュータへの展開」, 量子フォーラムシンポジウム「冷却原子が拓く量子技術の最前線」, 赤坂インターシティコンファレンス 301, 東京都港区, 2024 年 11 月.

大森賢治, 「量子コンピューティングの最新研究開発の状況と今後の展望」, 第 5 回量子コンピューティング EXPO 【秋】, 幕張メッセ, 千葉県千葉市, 2024 年 11 月.

大森賢治, 「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, DBJ iHub 量子コンピュータ実現への道, 大手町プレイスホール&カンファレンス 2F ホール A, 東京都千代田区, 2024 年 11 月.

大森賢治, 「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, 自然科学研究機構シンポジウム「量子はめぐる」, 一橋大学一橋講堂, 東京都千代田区, 2024 年 10 月.

大森賢治, 「量子力学 100 年の謎と超高速量子コンピュータへの挑戦」, 名古屋大学総長がナビゲートする科学最前線「知の地平線未来への挑戦」, 中日ホール&カンファレンス, 名古屋市中区, 2024 年 10 月.

大森賢治, 「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, 令和 6 年度第 3 回量子技術研究会 JATES 科学技術と経済の会, バルサール飯田橋駅前, 東京都千代田区, 2024 年 7 月.

大森賢治, 「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, Q2B2024 Tokyo サテライトイベント「量子グローバルイノベーション・サミット 東京 2024」, Deloitte Tohmatsu Innovation Park, 東京都千代田区, 2024 年 7 月.*

大森賢治, 「量子力学 100 年の謎と超高速量子コンピュータへの挑戦」, 第 13 回 JACI/GSC シンポジウム, 一橋講堂, 東京都千代田区, 2024 年 6 月.*

大森賢治, 「世界に羽ばたく大森量子コンピュータ・スタートアップいよいよ始動へ 2」, 政策アクション会議, 神戸大学東京六甲クラブ, 東京都千代田区, 2024 年 6 月.

大森賢治, 「量子力学 100 年の謎と超高速量子コンピュータへの挑戦」, 日本表面真空学会特別講演会, 東京大学武田ホール, 東京都文京区, 2024 年 5 月.*

大森賢治, 「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, 一般社団法人量子技術による新産業創出協議会 (Q-STAR) 講演会, 分子科学研究所, 愛知県岡崎市, 2024 年 5 月.

大森賢治, 「世界に羽ばたく大森量子コンピュータ・スタートアップいよいよ始動へ」, 政策アクション会議, 神戸大学東京六甲クラブ, 東京都千代田区, 2024 年 4 月.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” CESQ Colloquium, Centre Européen de Sciences Quantiques (CESQ), Strasbourg (France), March 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” SXSW 2025 Quantum Session, South by Southwest (SXSW) Conference & Festivals, Austin Convention Center, Austin (USA), March 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” International Year of Quantum Science and Technology (IYQ)-2025, The Centre for Quantum Engineering, Research and Education (CQuERE), TCG Centres for Research and Education in Science and Technology (TCG CREST), Kolkata (India), February 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” iSAP-Hamamatsu 2024, Invited Lecture and Symposium Chair, International Symposium on Advanced Photonics(iSAP), Okura Act City Hotel, Hamamatsu (Japan), November 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Center for Quantum Dynamics Colloquium, Universität Heidelberg, Heidelberg (Germany), October 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” QUP Colloquium, International Center for Quantum-field Measurement Systems for Studies of the Universe and Particles (QUP), KEK, Tsukuba (Japan), October 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Okinawa School in Physics 2024: Coherent Quantum Dynamics, OIST Seaside House, Okinawa (Japan), September 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” The 14th Japan-US Joint Seminar on Quantum Electronics and Laser Spectroscopy, Stanford University, Stanford, CA (USA), September 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” R. G. Herb Condensed Matter Seminar, Chicago Quantum Exchange, Physics Department 2320 Chamberlin Hall 1150, University of Wisconsin, Madison, WI (USA), July 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Laboratoire Kastler Brossel (LKB) Seminar 2024, Collège de France, Paris (France), June 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Colloquium, Laboratoire Charles Fabry, Institut d'optique, Palaiseau (France), June 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Swiss-Japanese Quantum Symposium 2024, University of Tokyo Yayoi Auditorium, Tokyo (Japan), June 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Colloquium at Stewart Blusson Quantum Matter Institute, University of British Columbia, Vancouver (Canada), May 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” 26th Photonics North 2024, Vancouver Convention & Exhibition Centre, Vancouver (Canada), May 2024.*

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Innsbruck Physics Colloquium, Innsbruck Physics Research Center, Universität Innsbruck, Innsbruck (Germany), April 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Quantum Simulation of Novel Phenomena with Ultracold Atoms and Molecules, University of Kyoto Panasonic Auditorium, Yukawa Hall, Kyoto (Japan), April 2024.

B-5) 特許出願

登録

特許第 7511839 号, 「量子シミュレータおよび量子シミュレーション方法 (Quantum Simulator and Quantum Simulation Method)」, 酒井寛人 (浜松ホトニクス), 大森賢治 (自然科学研究機構), 安藤太郎 (浜松ホトニクス), シルヴァン ドレゼルック, 富田隆文, 素川靖司 (自然科学研究機構), 大竹良幸, 豊田晴義 (浜松ホトニクス), 2020 年. (登録日 2024 年 6 月 28 日)

特許第 7511838 号, 「量子シミュレータおよび量子シミュレーション方法 (Quantum Simulator and Quantum Simulation Method)」, 酒井寛人 (浜松ホトニクス), 大森賢治 (自然科学研究機構), 安藤太郎 (浜松ホトニクス), シルヴァン ドレゼルック, 富田隆文, 素川靖司 (自然科学研究機構), 大竹良幸, 豊田晴義 (浜松ホトニクス), 2020 年. (登録日 2024 年 6 月 28 日)

WO2025/063038(A1)(PCT), 「レーザー制御装置, 光ピンセット生成システム, レーザー制御方法, 光ピンセット生成方法及びプログラム」, シルヴァン ドレゼルック, 大森賢治, 富田隆文 (自然科学研究機構), 2023 年. (公開日 2025 年 3 月 27 日)

B-6) 受賞, 表彰

TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh, The Dean's Award of the Physical Sciences Graduate School (2024).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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

Center for Quantum Engineering, Research and Education (CQuERE), TCG, CREST (India), Scientific Advisory Board (2021–), 委員長 (2024–).

日本分光学会代議員 (2022–).

欧州研究会議 (European Research Council: ERC, EU) 外部評価者 (2007–).

学会の組織委員等

原子・分子・光科学 (AMO) 討論会プログラム委員 (2003–).

iSAP HAMAMATSU (International Symposium on Advanced Photonics) 組織委員 (2016–), 議長 (2024).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

文部科学省 科学技術・学術審議会 専門委員 (2015–).

文部科学省 科学技術・学術審議会 量子科学技術委員会 主査代理 (2015–2023), 主査 (2023–2025).

文部科学省 研究計画・評価分科会 臨時委員 (2023–2025).

学会誌編集委員

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

競争的資金等の領域長等

文部科学省「光・量子飛躍フラッグシッププログラム (Q-LEAP)」量子情報処理・大規模基礎基盤研究, 「アト秒ナノメートル領域の時空間光制御に基づく冷却原子量子シミュレータの開発と量子計算への応用」, 研究代表者 (2018–).

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

内閣府「ムーンショット型研究開発制度」,「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」,「大規模冷却原子型量子コンピュータプラットフォームの開発および統合」,課題推進者 (PI) (2022-).

文部科学省「先端国際共同研究推進事業 (ASPIRE)」量子技術領域,「冷却原子型量子コンピュータ」,日本側研究代表者 (2024-).

理科教育活動

セミナー講師「夢への挑戦～自然科学研究機構の研究者・職員から学ぶ」岡崎市第1回MIRAI オンラインセミナー (2024). (Sylvain de LÉSÉLEUC)

出前授業「未来の量子ネイティブ×ムーンショット研究者」神奈川県立相模原中等教育学校 (2024). (Sylvain de LÉSÉLEUC, 富田隆文)

ワークショップ「Atomic Qubits: Neutral atoms and Trapped ions」量子コンピュータ関連研究者及び学生の技術交流 大阪大学 (2024). (Sylvain de LÉSÉLEUC, 富田隆文, 牧野 茜)

ワークショップ「ASPIRE, Neutral atom QC Winter Camp 2024」量子コンピュータ関連若手研究者及び学生の技術交流 (2024). (Sylvain de LÉSÉLEUC, 富田隆文, 牧野茜)

その他

大森賢治個人で年額 (換算) およそ 17 億円にも上る極めて高額的外部資金を獲得 (上記の「競争的資金等の領域長等」および下記「B-10) 競争的資金」の項を参照) することで, 分子研の財政に多大な貢献をもたらすとともに, 分子研の世界的な知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

大森が研究代表者 (プロジェクトマネージャー) を務める内閣府・ムーンショット型研究開発プロジェクト「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」が, ムーンショット事業の 2024 年度年次評価において「中性原子量子コンピュータの研究開発で世界トップレベルにあることを, 非常に高く評価する」などと絶賛され, 総合評価において「最高の S 評価」を受けるなど, 量子コンピュータ研究開発で世界のトップを牽引しており, 分子研の世界的な知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

米国ホワイトハウスが公表した日米首脳会談 (ワシントン D.C. 2024 年 4 月 10 日) の公式資料「FACT SHEET」において分子研大森グループの強力な量子コンピュータ開発における日米協力がハイライトされた。これによって分子研の世界的な知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

自然科学研究機構本部と分子科学研究所が中心となり, 分子研大森グループの量子コンピュータ開発の成果を用いた事業化のための協議体「事業化検討プラットフォーム」を立ち上げ, 日本政策投資銀行 (DBJ), 日立製作所, 富士通, NEC, 浜松ホトニクス, 豊田通商, 岡崎信用金庫, 産総研 G-QuAT をはじめとする 13 社・1 国立研究所の参画を得ている。本件は日本経済新聞の朝刊 1 面トップ記事として掲載された。これによって, 国内外の産業界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

分子研大森グループによるムーンショット量子コンピュータ開発の最新状況が, 日本経済新聞の朝刊 1 面トップ記事として掲載された。これによって, 国内外のアカデミア・政財界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

8-3 情報発信に記載されている通り、過去1年に限っても読売新聞、日本経済新聞、産経新聞、中日新聞、NHK 総合テレビ全国放送などを始めとする全国的な主要ニュースメディアに度々露出している。これらの極めて頻繁な全国区の報道によって、一般社会に対する分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。(web ニュース等については、<https://ohmori.ims.ac.jp/kenjihomori/> を参照)

文部科学省・科学技術・学術審議会・量子科学技術委員会の主査(2023–現在)、主査代理・専門委員(2015–2023)、ならびに文部科学省・研究計画・評価分科会・臨時委員(2023–現在)として、量子テクノロジー開発および分子研 UVSOR を含む量子ビーム(放射光施設・大型レーザー施設)利用推進に関する政策検討に大きく貢献。これによって、日本政府における分子研の知名度・プレゼンス向上に大きく貢献。

冷却原子型・量子コンピュータ開発において従来技術を一気に2桁加速する超高速2量子ビットゲート(量子コンピューティングの心臓部である計算素子)を達成し、Nature Photonics 2022年10月号の表紙を飾るとともに、日米欧中を中心に世界中の200件以上のニュース報道(2022年8月以降～現在も継続)でハイライトされ、この成果に関連して、日経サイエンス7月号(2024年5月24日・雑誌)、日経コンピュータ9月5日号(2024年9月5日・雑誌)にも特集されるなど、関連報道が現在も継続している(ニュース報道については、<https://ohmori.ims.ac.jp/kenjihomori/> を参照)。これらの報道によって分子研の世界的な知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

上記の超高速2量子ビットゲートの成果等、大森ムーンショット量子コンピュータの開発の進展を受けて、日本の学術会議や大型の産業展示会等をはじめ、オーストリアのインスブルック大学、カナダのプリティッシュ・コロンビア大学、フランス・アカデミアの最高峰であるCollege de France、同じくフランスのInstitut d'Optique、ストラスブール大学、米国のスタンフォード大学、ウィスコンシン大学、ドイツのハイデルベルグ大学、インドのTCG CREST、バンクーバーの国際会議Photonics North、米国オースティンで開催された世界最大級の産業展示会・カンファレンスSXSW などから、次々にコロキウムや招待講演に招かれ、世界のアカデミアや産業界で大反響を呼んでおり、分子研の世界的な知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

分子研・大森グループと米国を代表する量子テクノロジー企業であるColdQuanta (現Infleqtion) 社(<https://coldquanta.com>)との間で量子コンピュータ開発における協業を進めており(2022年2月18日–現在)、米国の産業界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

インドを代表する新しい研究機関TCG CREST, The Center for Quantum Engineering Research and Education (CQuERE)のScientific Advisory Board メンバー(2021–現在)(2024年よりArtur Ekert 英オックスフォード大教授の後任として委員長に就任)として、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

経産省が進める量子コンピュータ関係のヒアリング(2024年3月14日、8月27日)に、冷却原子型量子コンピュータの代表として貢献することによって、経産省における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

財務省関係者を中心とするシンクタンクである政策アクション会議に招かれ(2024年4月4日、6月6日、12月5日)、政財界の実力者らに向けて、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況や事業化に関するレクチャーを行うとともに、それら実力者らと量子コンピュータ開発の現状と展望および関連政策に関する討論を行うことによって、我が国の政財界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

Q-STAR (一般社団法人量子技術による新産業創出協議会)メンバーが多数分子研に所属し、これに対して大森が、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況と事業化に関するレクチャー(2024年5月20日)を行うことによって、日本の産業界に対する分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

JACI（公益社団法人新化学技術推進協会）シンポジウムに招かれ大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況と事業化に関する基調講演（2024年6月18日）を行うことによって、従来の電気、情報業界を超えて日本の化学業界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

世界初の量子超越性の実証（2019年）で有名な John Martinis 教授（UCSB）と彼が新たに立ち上げた米国の量子コンピュータスタートアップ Qolab 社の経営陣主催のコロキウム（2024年7月16日 @ ウィスコンシン大学マディソン）に招かれ大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況と事業化に関するレクチャーを行うことによって、米国の量子コンピュータ業界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

世界を代表する量子関連企業である NVIDIA 社、Oxford Quantum Circuits 社、QuEra Computing 社、Strangeworks 社の経営陣や、我が国を代表する量子関連企業の研究開発幹部（富士通、NEC、東芝、日立総合計画研究所、東芝デジタルソリューションズ）が登壇する Q2B 会議のサテライト会議「Quantum Globalization Summit: Tokyo 2024」（2024年7月22日 @ デロイトトーマツ社、東京・丸の内）における唯一の基調講演に招かれ、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況と事業化に関するレクチャーを行うことによって、国際的な量子コンピュータ業界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

JATES（一般社団法人科学技術と経済の会）が主催する講演会「量子技術研究会」（2024年7月26日）に大森が招かれ、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況と事業化に関するレクチャーを行うことによって、我が国の産業界や政府関係者（総務省など）に対する分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

文科省研究振興局長ご一行の分子研来所に際して、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー（2024年9月17日）を行うことによって、大学共同利用機関法人としての分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

経済産業省ご一行の分子研・大森グループ訪問に際して、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー（2024年10月9日）を行うことによって、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

自然科学研究機構シンポジウム（2024年10月20日）で、大森グループの超高速量子コンピュータに関する招待講演を行うことによって、自然科学研究機構と分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

経済産業省に招かれ（2024年11月5日）、大森グループの超高速量子コンピュータの研究開発状況に関するレクチャーを行うことによって、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

大森が、浜松ホトニクス社 関連財団である光科学技術研究振興財団が主催する国際会議 第4回 iSAP Hamamatsu（2024年11月11-13日、オークラアクトシティホテル浜松、浜松市）の議長を務めるとともに、招待講演を行った。この会議には、2019年に世界で初めて量子コンピュータの量子超越性を実証した John Martinis 教授（米国・UCSB）をはじめ、Vladan Vuletic 教授（米国・MIT）、Jonathan Home 教授（スイス・ETH Zurich）、Michelle Simmons 教授（オーストラリア・UNSW）、藤井啓祐教授（大阪大学）ら量子コンピュータ分野の世界最高峰の面々が集結した。会議の様子はNHK 総合テレビの「おはよう日本」（全国版）で大きく取り上げられ、大森のインタビュー動画が全国に向けて放映された。これによって、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

財務省傘下の日本政策投資銀行（DBJ）が主催するシンポジウム「DBJ iHub 量子コンピュータ実現への道」（2024年11月14日、大手町プレイスホール&カンファレンス、東京）において、大森グループの超高速量子コンピュータの研究開発状況に関する招待講演を行うことによって、全国の産業界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

2019年に世界で初めて量子コンピュータの量子超越性を実証したJohn Martinis 教授(米国・UCSB)を分子研に招聘し、同教授による分子研コロキウム(2024年11月18日)を主催することによって、分子研の知名度・プレゼンス向上に大きく貢献。

量子コンピューティングEXPO(2024年11月21日、幕張メッセ)で大森グループの超高速量子コンピュータの研究開発状況に関する招待講演、および量子コンピュータ全般に関するパネルディスカッションを行うことによって、全国の産業界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

量子フォーラムシンポジウム「冷却原子が拓く量子技術の最前線」(2024年11月27日、赤坂インターシティコンファレンス、東京)で、大森グループの超高速量子コンピュータの研究開発状況に関する招待講演を行うことによって、量子技術関連のアカデミアと産業界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

三菱ケミカル社ご一行の分子研・大森グループ訪問に際して、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー(2025年1月7日)を行うことによって、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

日本経済新聞社記者の分子研・大森グループ訪問・取材に際して、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー(2025年1月14日)を行うことによって、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

衆議院議員の分子研・大森グループ訪問に際して、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー(2025年1月16日)を行うことによって、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

文部科学省 研究振興局 量子研究推進室室長ご一行の分子研・大森グループ訪問・取材に際して、大森グループの超高速量子コンピュータの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー(2025年2月17日)を行うことによって、大学共同利用機関法人としての分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

世界最大級のビッグテックカンファレンス／EXPOであるSXSW(2025年3月7-15日、Austin市、Texas州、USA)において、「量子力学100年の謎と大森グループの超高速量子コンピュータの研究開発状況」に関する招待講演を行うことによって、世界中の産業界・マスコミにおける分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

読売新聞 東京本社 記者の分子研・大森グループ訪問・取材に際して、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー(2025年3月19日)を行うことによって、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

公益社団法人 日本表面真空学会からの依頼で、同学会の会誌「表面と真空」第68巻3月号(特集「量子コンピュータの最前線」)の巻頭言を執筆することによって、大学共同利用機関法人としての分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

「欧州研究会議(European Research Council: ERC)」や量子コンピュータ研究開発コンソーシアム「ミュンヘン量子バレー(Munich Quantum Valley: MQV)」などヨーロッパを代表する研究開発助成機関から量子技術関係の数々の大型研究プロポーザルの審査を依頼されるなど、世界的な科学研究コミュニティから大きな信頼を集めており、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

B-8) 大学等での講義, 客員

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

総合研究大学院大学先端学術院, 集中講義「量子動力学」, 2024年.

総合研究大学院大学先端学術院, 集中講義「量子動力学」, 2024年. (富田隆文)

B-9) 学位授与

TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh, “Ultrafast excitation of atoms to a Rydberg orbit using picosecond pulsed lasers,” 2025年3月, 博士 (理学).

B-10) 競争的資金

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

内閣府「ムーンショット型研究開発制度」, 「大規模冷却原子型量子コンピュータプラットフォームの開発および結合」, 大森賢治 (2022年度–2030年度).

内閣府「ムーンショット型研究開発制度」, 「Novel techniques and tools for high-fidelity operation of a cold-atom based, fault-tolerant, quantum computer」, Sylvain de LÉSELEUC (2022年度–2030年度).

内閣府「ムーンショット型研究開発制度」, 「高忠実度ゲート操作および誤り訂正のための光学的・量子制御技術の開発」, 富田隆文 (2022年度–2030年度).

文部科学省「光・量子飛躍フラッグシッププログラム (Q-LEAP)」量子情報処理・大規模基礎基盤研究, 「アト秒ナノメートル領域の時空間光制御に基づく冷却原子量子シミュレータの開発と量子計算への応用」, 大森賢治 (2018年度–2028年度).

文部科学省 先端国際共同研究推進事業 (ASPIRE) 量子技術領域, 「冷却原子型量子コンピュータ」, 大森賢治 (日本側・研究代表者) (2024年度–2029年度).

B-11) 産学連携

共同研究, キュエル (株), 「量子コンピュータの制御」, 大森賢治 (2024年度–).

共同研究, 浜松ホトニクス (株), 「高精度光技術を用いた量子シミュレータの研究」, 大森賢治 (2016年–).

共同研究, (株) 日立製作所, 「動的量子ビットを用いた量子コンピュータの研究」, 大森賢治 (2023年度–).

共同研究, ColdQuanta, Inc. d.b.a. Infleqtion (米国), 「超高速量子コンピュータの開発」, 大森賢治 (2023年度–).

C) 研究活動の課題と展望

今後我々の研究グループでは, APM を高感度のデコヒーレンス検出器として量子論の基礎的な検証に用いると共に, より自由度の高い量子位相操作技術への発展を試みる。そしてそれらを希薄な原子分子集団や凝縮相に適用することによって, 「アト秒量子エンジニアリング」と呼ばれる新しい領域の開拓を目指している。当面は以下の5テーマの実現に向けて研究を進めている。

- ① デコヒーレンスの検証と抑制: デコヒーレンスは, 物質の波としての性質が失われて行く過程である。量子論における観測問題と関連し得る基礎的に重要なテーマであるとともに, テクノロジーの観点からは, 反応制御や量子情報処理のエラーを引き起こす主要な要因である。その本質に迫り, 制御法を探索する。

- ②量子散逸系でのコヒーレント制御の実現：①で得られる知見をもとにデコヒーレンスの激しい凝縮系でのコヒーレント制御法を探索する。
- ③原子・分子ベースの量子情報科学の開拓：アト秒精度の超高速コヒーレント制御技術によって、原子・分子内の電子・振動固有状態を用いるユニタリ変換とそれに基づく量子情報処理の確立を目指す。さらに、単一原子・分子の操作・読み出し技術の開発を進める。
- ④超高速量子シミュレータの開発：ほぼ絶対零度（～50 ナノケルビン）まで冷やした極低温のルビジウム原子をミクロンレベルで整列させた人工原子結晶とアト秒精度の超高速コヒーレント制御技術を組み合わせた世界唯一・最速の「超高速量子シミュレータ」のさらなる高機能化を目指す。
- ⑤超高速量子コンピュータの開発：極低温のルビジウム原子をミクロンレベルで整列させた人工原子結晶とアト秒精度の超高速コヒーレント制御技術を組み合わせた世界唯一・最速の「超高速量子コンピュータ」の開発を進める。

これらの研究の途上で量子論を深く理解するための何らかのヒントが得られるかもしれない。その理解はテクノロジーの発展を促すだろう。我々が考えている「アト秒量子エンジニアリング」とは、量子論の検証とそのテクノロジー応用の両方を含む概念である。

光分子科学第三研究部門

解良 聡（教授）（2014 年 4 月 1 日着任）

福谷 圭祐（助教）

下ヶ橋 龍之介（特任助教）

中澤 遼太郎（特任研究員）

WONGKANYA, Ratchada（インターンシップ）

西野 史（大学院生）

PALASSERY ITHIKKAL, Jaseela（大学院生）

神谷 美穂（事務支援員）

A-1) 専門領域：表面物理学，有機薄膜物性

A-2) 研究課題：

- a) シンクロトロン放射光・レーザー光励起による弱相互作用系の電子状態計測
- b) 配向分子薄膜の光電子放出強度の理論解析と分子軌道撮影法の開発
- c) 有機半導体薄膜の電荷輸送機構の研究
- d) 有機半導体薄膜の界面電子準位接合機構の研究
- e) 自己組織構造体の作製と分子機能の分光研究
- f) 機能性分子薄膜の振動状態と電子励起計測
- g) 低次元電子相関物質の物性機構解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 機能性分子薄膜の弱相互作用による電子状態変化を計測する技術開発を進めている。弱相互作用を定量的に評価するため、蒸気圧の低い大型分子対応の気相光電子分光実験装置を開発し、分子集合による電子状態の違いに関する議論を進めている。超短パルスレーザー光を励起源とする二光子光電子分光装置を構築し、ホール緩和や励起子拡散など、電荷ダイナミクス関連の研究を進めている。UVSOR では BL7U における低エネルギー励起光を用いた角度分解光電子分光（ARPES）による分子界面電子状態の計測法開拓を推進しつつ、BL6U における光電子運動量顕微鏡（PMM）の装置開発と分子系への最適化のためのパラメータ調整を進めている。
- b) 高配向分子薄膜からの光電子放出強度の角度依存性について、多重散乱理論による強度解析を行い、有機分子薄膜構造の定量的解析を行うための方法論を検討してきた。その後、高配向試料では広波数空間二次元分解測定が分子軌道の可視化に対応することが指摘され、新たな量子計測ツールになりうると期待されている。前述の放射光を利用した PMM 装置による高効率計測が強力である。特に単層膜界面の分子配向に依存した電子波のポテンシャル散乱と干渉問題を定量化し、局在電子系における一電子近似の限界を吟味しつつ、弱相互作用系の物理現象を議論するための新たな方法論の構築を目指している。
- c) 有機半導体のバンド分散関係：良質な配向有機結晶膜を作製し、価電子エネルギーバンド分散を測定する技術確立した。分子間相互作用の大きさ、ホール有効質量、バンド伝導移動度の定量的評価と、分子結晶特有の物理モデルの構築を進めている。多体効果による電子構造への影響を検出し、非自明な機能開拓へ向けた研究を進めている。

有機半導体結晶における振電相互作用の運動量異方性の検出に成功した。

有機半導体の電荷振動結合：配向有機超薄膜の作製により、大型の分子薄膜系における光電子スペクトルの高エネルギー分解測定を実現する方法論を開拓して、分子薄膜における伝導ホールと分子振動の結合状態を初めて実測し、ホッピング移動度（そのポーラロン効果を含む）を分光学的に得る方法を開拓した。これらの物理量を実測することで、準粒子描像に基づいた輸送機構の解明を目指している。

- d) 本質的には絶縁物である有機分子が n 型／p 型半導体として機能する起源を明らかにすべく研究を進めている。極めて高効率に光電子を捕捉し評価可能な高感度紫外光電子分光装置を開発し、バンドギャップに生じる 10ppm レベルの状態密度検出に成功した。価電子帯トップバンドの状態密度分布がガウス型から指数関数型に変化し、基板フェルミ準位まで到達している様子を捉えた。また低エネルギー逆光電子分光装置の導入により、伝導帯構造を合わせて評価することが可能となり、ドナー・アクセプター半導体分子間の弱い vdW 結合から、分子と金属原子の局所的な強い化学結合によるギャップ準位形成までを統括検討し、エネルギー準位接合機構の解明を目指している。レーザー励起光によるギャップ状態密度の評価を開始した。
- e) 表面場で織り成すパイ共役分子系の超格子構造や、分子薄膜の自己組織化により発現する各種機能の解明を目指す。新規な共有結合性有機構造体の作製、自己組織化や原子・分子捕獲などによる有機無機複合構造体の作製に挑戦している。各種分子機能の起源について解明するため、電子状態の局在性の視点で構造との相関を各種先端分光法を駆使して研究を進めている。2022 年度より、キラル分子によるスピン選択性の定量的電子構造評価に向けた高配向キラル二次元膜の研究を開始した。分子薄膜や低次元物質の電子状態を議論する上で、試料調整方法の確立が鍵である。光電子放射顕微鏡 (PEEM), 走査プローブ顕微鏡 (STM), 高分解能スポット解析型低速電子線回折 (SPALED), 準安定励起原子電子分光 (MAES), X線定在波法 (XSW), 軟X線吸収分光 (NEXAFS) 等を用い、基板界面における単分子膜成長から結晶膜成長までの多様な集合状態について構造（分子配向）と成長を観察している。
- f) 低速電子エネルギー損失分光により、機能性分子薄膜の振動状態と電子励起状態を測定し、弱相互作用による振動構造への影響を調べている。国際共同による二次元検出器を利用したフォノン分散実験を進めている。
- g) 電子が物質中の様々な準粒子と相互作用することにより発現する特異物性はその複雑性・多様性から根本起源が未解明であるものが多い。レーザー励起 ARPES, 二次元 ARPES や PMM 法などの電子と準粒子の直接観測を可能とする分光法を用いて、主に励起子絶縁体や電荷密度波物質の電子物性の解明・制御を目指した研究プロジェクトの立ち上げを行なっている。

B-1) 学術論文

F. NISHINO, K. FUKUTANI, J. BRANDHOFF, M. GRUENEWALD, E. FUERCH, M. SCHAAL, F. OTTO, D. STELTER, R. FORKER, Z. ZHANG, T. HIROSE, T. FRITZ and S. KERA, “Enantiospecific Mirror-Imaged Growth in Overlayers of Enantiopure Thiadiazole-[9]helicene on Au(111) without Commensurability,” *Appl. Phys. Express* **18**(1), 015502 (2025). DOI: 10.35848/1882-0786/ada688

F. MATSUI, K. HAGIWARA, Y. SATO, E. NAKAMURA, R. SAGEHASHI, S. KERA and S. SUGA, “Dual-Beamline Photoelectron Momentum Microscopy for Valence Orbital Characterization,” *Synchrotron Radiat. News* **37**(4), 43–48 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2391256

S. LEE, K.-H. JIN, K. FUKUTANI, J. LEE, C. I. KWON, J. S. KIM, J. KIM and H. W. YEOM, “Surface Doping and Dual Nature of the Band Gap in Excitonic Insulator Ta₂NiSe₅,” *ACS Nano* **18**(36), 24784 (2024). DOI: 10.1021/acsnano.4c02784

J. P. ITHIKKAL, K. FUKUTANI, F. NISHINO, T. MINATO, H. ISHII, S. IZAWA, K. TANAKA, M. HIRAMOTO and S. KERA, “Direct Observation of the Electronic Structure and Many-Body Interactions of Low-Mobility Carriers in Perylene Diimide Derivative,” *Appl. Phys. Lett.* **125(5)**, 052102 (2024). DOI: 10.1063/5.0221293

K. HAGIWARA, E. NAKAMURA, S. MAKITA, S. SUGA, S. TANAKA, S. KERA and F. MATSUI, “Development of Dual-Beamline Photoelectron Momentum Microscopy for Valence Orbital Analysis,” *J. Synchrotron Radiat.* **31(Pt3)**, 540–546 (2024). DOI: 10.1107/s1600577524002406

T. YAMADA, R. NEMOTO, F. NISHINO, T. HOSOKAI, C. H. WANG, M. HORIE, Y. HASEGAWA, S. KERA and P. KRÜGER, “On-Surface Growth of Transition-Metal Cobalt Nanoclusters Using a 2D Crown-Ether Array,” *J. Mater. Chem. C* **12(3)**, 874–883 (2023). DOI: 10.1039/d3tc03339b

B-3) 総説, 著書

S. KERA, T. ARAKI, K. TANAKA, Y. TAIRA, M. KATOH and F. MATSUI, “UVSOR Synchrotron Facility 40th Anniversary,” *Synchrotron Radiat. News* **37(2)**, 41–42 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2330876

B-4) 招待講演

解良 聡, 「有機材料の光電子分光計測：電子状態の次元階層性の特徴」, 第 19 回有機デバイス・物性院生研究会, 京都, 2024 年 10 月.

S. KERA, “Insight into the charge transport mechanisms of molecular crystals,” Nanyang Technological University, Singapore (Singapore), July 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

VUVX (International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-Ray Physics) 真空紫外光物理および X 線物理国際会議 国際諮問委員 (2014–).

SRI (International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation) シンクロトロン放射装置技術国際会議国際諮問委員 (2018–).

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

日本放射光学会評議員 (2024–2026).

学会の組織委員等

第 37 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム 組織委員会委員 (2024–2025).

VSX・SX 高輝度光源利用者懇談会会長 (2024–2026).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

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

KEK 物質構造科学研究所運営会議委員 (2024–2027).

東京大学物性研究所附属極限コヒーレント光科学研究センター軌道放射物性研究施設運営委員会委員 (2022–2026).

科学技術交流財団あいちシンクロトロン光センター運営委員会委員 (2023–2025).

量子科学技術研究開発機構 NanoTerasu 共用ビームライン整備検討委員会委員 (2023–).

B-8) 大学等での講義, 客員

東北大学大学院理学研究科, 委嘱教授, 「強相関電子物理学特論」, 2020年4月–.

千葉大学大学院融合科学研究科, 連携客員教授, 2014年9月–.

千葉大学大学院融合科学研究科, 「ナノ創造物性工学特論II」, 2014年9月–.

蘇州大学, 客員教授, 2014年4月–.

B-9) 学位授与

PALASSERY ITHIKKAL, Jaseela, “Material design for lateral organic solar cells by studying semiconductor electronic properties,” 2024年9月, 博士(理学).

西野 史, 「キラル分子による表面对称性の操作と電子物性への影響」, 2025年3月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(S), 「階層的準粒子の先端計測による可知化と分子材料研究の変革」, 解良 聡 (2023年度–2027年度).

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

科研費研究活動スタート支援, 「半導体電気物性の起源: ギャップ内のppm オーダー低状態密度の定量観察と全容解明」, 中澤遼太郎 (2024年度–2025年度).

B-11) 産学連携

共同研究, 東ソー(株), 「電荷輸送材料の薄膜状態における電子状態の解析」, 解良 聡 (2024年度).

共同研究, 三菱ケミカル(株), 「軟X線共鳴散乱を用いた樹脂素材の元素選択的な構造解析法の開発」, 解良 聡 (2023年度–2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

機能性分子の高配向試料作製法と精密電子状態計測で蓄積したノウハウを集結し, 分子集合体における「電子の真の姿を可知化」することでその機能・物性の根源を理解することを主眼とし, 様々な放射光利用先端分光法や独自に開発した分光装置群を駆使して多角的に研究を進めている。2021年度に福谷助教が着任し, 低次元物性と精密計測に関する研究力を強化した。分子結晶や界面の階層性に着目し, 電子物性の多体効果問題に挑戦する。一方, UVSOR 施設長として国内コミュニティの基盤強化を推進するための利用支援に注力している。2019年度から技術開発を進めているPMM装置について, スピン検出機能追加による第二期R&Dを開始した。松井教授らと共に多彩な計測機能をもつ複合システムの完成を目指す。ドイツの装置開発拠点であるユーリッヒ研究所との学術協定によって, 装置開発とその利用展開についての国際共同研究を推進するとともに, 国内では分子固体系のオールジャパン体制(実験班, 理論班)を構築し, 戦略的に上記装置を利用した新奇実験を牽引する。下ヶ橋特任助教ならびに中澤研究員の若手2名を雇用し, 科研費基盤(S) 課題による研究推進を強化した。施設長期計画として次世代研究施設UVSOR-IVの建設に向けた準備を多面的に進めている。国内外施設およびコミュニティの意見交換と情報収集に邁進している。

長坂 将成（助教）（2007 年 4 月 1 日着任）

神谷 美穂（事務支援員）

A-1) 専門領域：物理化学，軟X線分光学

A-2) 研究課題：

- a) 軟X線吸収分光法による溶液の局所構造解析
- b) 溶液中の金属錯体の金属－配位子間の非局在化の解明
- c) 大規模な分子系の構造解析のための内殻励起計算法の開発
- d) 時間分解軟X線吸収分光法によるエネルギー・電子移動のオペランド計測

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 2 keV 以下の軟X線領域には炭素，窒素，酸素の K 吸収端や遷移金属の $L_{2,3}$ 吸収端が存在するため，軟X線吸収分光（XAS）法は溶液の局所構造を元素選択的に調べることができる有用な手法である。我々は液体層の精密厚さ制御法（20 nm～40 μ m）を独自に開発することで，溶液の XAS 測定を実現した。更に，XAS スペクトルのエネルギーシフトの高精度測定と量子化学に基づく内殻励起計算から，異なる元素ごとに溶液中の分子間相互作用を調べる手法を確立した。最近では，小さな分子だけでなく，溶液中の高分子の XAS 計測を実現した。これにより，純水と純メタノールには溶ける高分子が，メタノール水溶液中では溶けなくなる共貧性溶媒効果のメカニズムを，高分子の C=O 基の酸素 K 吸収端 XAS 計測により明らかにした。
- b) 水溶液中のポルフィリン金属錯体の金属－配位子間の非局在化を，中心金属の $L_{2,3}$ 吸収端と配位子の窒素 K 吸収端の XAS 計測により明らかにした。配位子の窒素 K 吸収端を用いることで，金属－配位子間の非局在化の中心金属依存性を調べた。また，水溶液中で配位構造の分かっていないポルフィリンコバルト錯体の窒素 K 吸収端 XAS 計測と様々な配位モデルの内殻励起計算から，水溶液中においてポルフィリンコバルト錯体に溶媒の水は配位しないで，5 配位構造を維持することを明らかにした。
- c) XAS 計測から溶液中の高分子や生体分子の構造を調べるには，大規模な分子系の内殻励起計算法を確立する必要がある。そこで，分子動力学計算により得た分子配置から，励起分子とその周りの分子を切り出して，内殻励起計算するスキームを確立した。これにより，液体エタノールの炭素 K 吸収端 XAS スペクトルが，実験で得られたスペクトル形状を良く再現することを確かめた。また，アセトニトリル水溶液の酸素 K 吸収端 XAS スペクトルで得られたシャープなピークが，アセトニトリル中に孤立して存在する水分子に由来することを明らかにした。更に，高分子の鎖の一部を切り出して，内殻励起計算を行う方法論の開発を行った。
- d) 超高速レーザーと放射光から発生する軟X線パルスを 70 ps の時間分解能で同期するシステムを構築して，溶液光化学反応のオペランド XAS 測定を実現した。これにより，フェナントロリン鉄錯体水溶液の窒素 K 吸収端 XAS スペクトルにおいて，光励起後の高スピン状態から低スピン状態に緩和する過程の経時変化を，金属錯体の配位子の電子状態変化から観測することに成功した。また，XAS の吸収端の違いによる緩和時間の変化や，緩和時間の溶媒依存性と温度依存性についても明らかにした。現在，異種金属錯体間での蛍光共鳴エネルギー移動や，二元分子系における光電子移動の機構解明に，時間分解 XAS 法を適用するための実験条件の検討を行っている。

B-1) 学術論文

T. MIBU, R. MATSUOKA, M. NAGASAKA and T. KUSAMOTO, “Emission Enhancement in a Luminescent Polychlorinated Diphenylpyridylmethyl Radical through Coordination to Silver(I),” *Dalton Trans.* **54(6)**, 2265–2270 (2025). DOI: 10.1039/D4DT03129F

M. NAGASAKA, Y. YAO and K. MOCHIZUKI, “Oxygen K-Edge Inner-Shell Calculations of Polymers in Solutions Realized by the Extraction of Local Structures from Molecular Dynamics Simulations,” *J. Chem. Phys.* **162(5)**, 054901 (2025). DOI: 10.1063/5.0245456

M. NAGASAKA, S. TSURU and Y. YAMADA, “Metal–Ligand Delocalization of Iron and Cobalt Porphyrin Complexes in Aqueous Solutions Probed by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26(36)**, 23636–23645 (2024). DOI: 10.1039/D4CP02140A

Y. YAO, M. NAGASAKA and K. MOCHIZUKI, “Salt-Specific Effect on the Solubility and Aggregation of 1-Butanol in Water,” *Phys. A* **647**, 129917 (2024). DOI: 10.1016/j.physa.2024.129917

M. NAGASAKA, “Probing Isolated Water Molecules in Aqueous Acetonitrile Solutions Using Oxygen K-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. Lett.* **15(19)**, 5165–5170 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.4c01087

M. NAGASAKA, F. KUMAKI, Y. YAO, J. ADACHI and K. MOCHIZUKI, “Mechanism of Poly(*N*-isopropylacrylamide) Cononsolvency in Aqueous Methanol Solutions Explored via Oxygen K-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26(18)**, 13634–13638 (2024). DOI: 10.1039/D4CP00676C

B-3) 総説, 著書

工藤優斗, 熊木文俊, 長坂将成, 足立純一, 野口良史, 古賀伸明, 板橋英之, 樋山みやび, 「ホタル生物発光における内殻吸収計測技術」, *Photon Factory News*, **42(4)**, 15–20 (2025).

熊木文俊, 長坂将成, 深谷 亮, 足立純一, 「溶液試料の光励起緩和過程の研究に向けた時間分解軟X線吸収分光法の開発」, *しょうとつ*, **22(1)**, R001 (2025). DOI: 10.50847/collision.22.R001

長坂将成, 「軟X線吸収分光法による高分子溶液の共貧性溶媒効果の解明」, *月刊機能材料*, **44(10)**, 41–47 (2024).

B-4) 招待講演

長坂将成, 「軟X線吸収分光測定のための液体セルの開発」, 第24回R&Dビームライン検討会, オンライン講演会, 2024年10月.

長坂将成, 「溶液の軟X線吸収分光計測の現状と将来展望」, 物理化学と放射光・先端計測に関する研究会, 岡崎, 2024年10月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第2回PF-UAサマースクール「放射光の特長を活かした分析手法」実行委員長 (2024).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

PF User Association 教育担当幹事 (2024–2027).

B-10) 競争的資金

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

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

光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

加藤 政博（特任教授（クロスアポイントメント*））（2019年4月1日着任）

石原 麻由美（事務支援員）

加茂 恭子（事務支援員）

横田 光代（事務支援員）

*広島大学放射光科学研究所

A-1) 専門領域：ビーム物理学，加速器科学，放射光科学

A-2) 研究課題：

- a) シンクロトロン光源の研究
- b) 自由電子レーザーの研究
- c) 相対論的電子ビームからの電磁放射の研究
- d) 量子ビームの発生と応用に関する研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) シンクロトロン光源 UVSOR の性能向上に向けた開発研究を継続している。電子ビーム光学系の最適化による電子ビーム輝度の大幅な向上，電子ビーム強度を一定に保つトップアップ入射の導入などに成功し，低エネルギー放射光源としては世界最高水準の光源性能を実現した。高輝度放射光発生のために真空封止アンジュレータ3台，可変偏光型アンジュレータ3台を設計・建設し，稼働させた。UVSOR の将来計画に関する設計研究に着手し，既存加速器の更なる高度化の可能性を検討した後，新しい光源加速器の設計を開始し，これまでに電子エネルギー 1 GeV，周長約 70 m の放射光源の基礎設計を完了した。高エネルギー加速器研究機構などと連携し，持続可能な加速器の実現を目指して加速器要素技術の開発を進めている。
- b) 自由電子レーザーや関連技術に関する研究を継続している。蓄積リング自由電子レーザーとして世界最高の出力を記録した。また，共振器型自由電子レーザーに関する基礎研究を進め，レーザー発振のダイナミクスやフィードバック制御に関する先駆的な成果を上げた。外部レーザーを用いて電子パルス上に微細な密度構造を形成することでコヒーレント放射光を極紫外領域やテラヘルツ領域において生成する研究を継続している。この手法により一様磁場中から準単色テラヘルツ放射光を発生することに世界に先駆けて成功した。電子パルス上に形成された密度構造の時間発展に関するビームダイナミクス研究により先駆的な成果を上げた。
- c) 高エネルギー電子ビームによる光渦の生成に成功し，その原理の解明に世界に先駆けて成功した。自然界での光渦の生成の可能性について，研究を進めると共に，広島大学や室蘭工業大学と協力し，深紫外・真空紫外領域での物質系と光渦の相互作用に関する基礎研究を進めている。
- d) 外部レーザーと高エネルギー電子線を用いた逆コンプトン散乱によるエネルギー可変，偏光可変の極短ガンマ線パルス発生に関する研究を進めた。パルス幅数ピコ秒以下の超短ガンマ線パルスの生成，エネルギー可変性の実証に成功した。光陰極を用いた電子源の開発を進めた。また，これら偏極量子ビームの応用研究の開拓を進めている。

- e) アンジュレータ放射光波束の時間構造に着目した研究に原子分子物理学研究者と共同で取り組み、2連のアンジュレータからの自然放射を用いた孤立原子の量子状態制御に世界で初めて成功した。放射光の時間構造や干渉性の実験的検証を進めた他、単一電子からの放射の観測など、全く新しい放射光利用法の開拓に向けた実験研究を進めている。

B-1) 学術論文

M. KATOH, M. FUJIMOTO, E. SALEHI, M. HOSAKA and H. KAWAGUCHI, “Chirality in Electromagnetic Radiation from Relativistic Electrons,” *Chirality* **36**(5), e23677 (2024). DOI: 10.1002/chir.23677

M. KOBAYASHI, S. YOSHIMURA, H. IWAYAMA, N. KONDO, J. TAKAHASHI, H. OTA, M. KATOH, K. KOBAYASHI and H. NAKAMURA, “First Attempt at Photoionized Plasma Production with VUV Radiation in Synchrotron Light Source UVSOR-III,” *Plasma Fusion Res.* **19**, 1301028 (2024). DOI: 10.1585/pfr.19.1301028

M. KOBAYASHI, J. TAKAHASHI, H. OTA, K. MATSUO, M.I.A. IBRAHIM, T. MINATO, G. FUJIMORI, M. KATOH, K. KOBAYASHI, Y. KEBUKAWA and H. NAKAMURA, “Emergence of Optical Activity and Surface Morphology Changes in Racemic Amino Acid Films under Circularly Polarized Lyman- α Light Irradiation,” *Chirality* **36**, e70004 (2024). DOI: 10.1002/chir.70004

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本加速器学会評議員 (2020–).

日本放射光学会評議員 (2022–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設運営委員 (2018–).

B-8) 大学等での講義, 客員

名古屋大学シンクロtron光研究センター, 客員教授, 2018年4月–.

高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設, 客員教授, 2018年4月–.

B-10) 競争的資金

科研費挑戦的研究(萌芽), 「広帯域インコヒーレント放射光の可干渉性を利用する革新的光技術の探索」, 加藤政博 (2022年度–2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

UVSOR は 2000 年以降の継続的な高度化により、低エネルギーのシンクロtron光源としては世界的にも最高レベルの性能に到達したが、国内外では新しい光源の建設稼働が相次ぎ、更なる競争力の向上が求められている。現在の加速器の更なる高度化の可能性を検討した結果、現在の性能を大幅に上回る高度化改造は困難であると結論づけ、新規に回折限界を目指す光源加速器の建設について検討を進めた。高エネルギー加速器研究機構や名古屋大学シンクロtron光研究センター、広島大学放射光科学研究所などと連携し、持続可能な加速器施設を目指した省エネルギー化や運

転の自動化などを念頭に、次期光源に必要とされるハードウェア技術開発を進めている。

高エネルギー自由電子を用いた光発生として、自由電子レーザーやレーザーコンプトン散乱ガンマ線、コヒーレントシンクロトロン放射の発生法の開発や高度化、それらの利用法の開拓に取り組んできた。最近では光子の時空間構造やその干渉性の実験的検証やその利用法の開拓に挑戦している。放射光による光渦の生成、さらに放射光光渦同士の合成によるベクトルビーム発生など、UVSORの研究環境を活用して世界に先駆けた研究ができた。また、二連アンジュレータから放射される光子の時間構造を利用した量子状態制御について先駆的な成果が出ている。最近では、単一電子からの電磁放射に関する基礎研究にも着手した。相対論的自由電子からの電磁放射の時空間構造の制御とその応用というこれまで全く着目されていなかった領域を切り拓きつつあり、引き続き基礎研究を進めるとともに幅広く応用展開の可能性を探っていきたい。

電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）

平 義隆（准教授）（2020 年 4 月 1 日着任）

脇田 幸哉（特別共同利用研究員）

YANG, Yuxuan（特別共同利用研究員）

ZHOU, Weixin（特別共同利用研究員）

石原 麻由美（事務支援員）

加茂 恭子（事務支援員）

横田 光代（事務支援員）

A-1) 専門領域：ガンマ線計測，陽電子計測，光渦計測

A-2) 研究課題：

- a) 超短パルスガンマ線の発生と利用研究
- b) 軸対称偏光レーザーを用いたガンマ線の発生と計測技術開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 世界の放射光施設でも UVSOR の独自技術である超短パルスガンマ線を用いた陽電子消滅分光法によるバルク材料の原子スケール欠陥分析に関する研究である。超短パルスガンマ線は、フェムト秒レーザーと 750MeV 電子ビームの 90 度衝突逆トムソン散乱によって発生し、そのパルス幅はサブピコ秒からピコ秒オーダーである。この超短パルス性とバックグラウンドの低さを活かしたガンマ線の利用研究として、陽電子消滅分光法による材料中の欠陥分析をユーザーに提供している。陽電子は、対生成と呼ばれる現象によって材料内部でガンマ線から発生し、材料中の欠陥に捕獲される。欠陥の大きさによって陽電子の寿命が変化するために、陽電子寿命を測定することで材料中の欠陥を非破壊で分析することができる。さらに、ガンマ線は物質に対する透過率が高いために厚さ数 cm のバルク材料の欠陥分析を行うことが可能である。陽電子寿命測定法のユーザー利用が現在行われており、放射性同位元素から発生する陽電子を直接試料に照射する従来の方法では実施困難な金属材料の応力負荷及び水素脆化時の欠陥形成のその場測定手法の開発を進めている。応力負荷時の測定については論文の執筆を開始している。

逆トムソン散乱では、偏光レーザーを使うことで偏光ガンマ線が発生する。エネルギー広がり準単色かつエネルギー可変の偏光ガンマ線を発生する唯一の方法であるため、偏光ガンマ線検出器の応答測定にも利用されている。J-PARC において中性子捕獲反応によって発生する円偏光ガンマ線を測定することで、原子核の励起状態のスピンやパリティを決定するための実験が行われている。ガンマ線の偏光計として使用される電磁石を UVSOR に持ち込み、円偏光ガンマ線に対する偏光計の感度測定が行われた。開発している偏光計が、円偏光ガンマ線に対して予想値とほぼ一致する感度が得られている事を確認した。この偏光計を J-PARC 物質・生命科学実験施設の ANNRI ビームラインに設置し、中性子捕獲反応によって発生する円偏光ガンマ線の測定が行われている。この実験に関するユーザー執筆の論文が *Eur. Phys. J. A* に掲載された。

- b) 本研究課題では、特殊な偏光状態であるラジアル偏光やアジマス偏光の軸対称偏光レーザーを用いた逆トムソン散乱によって発生するガンマ線の偏光分布を明らかにする。直線偏光及び円偏光レーザーを用いると、直線偏光及び円偏光のガンマ線が発生する事は既に実験的に確かめられているが、軸対称偏光レーザーを使用した場合にどのよ

うな偏光状態のガンマ線が発生するのは理論的にも実験的にも確認されていない。新しい偏光特性をもつガンマ線を発生出来れば、新たな利用開拓に繋がる可能性がある。軸対称偏光レーザーは、Altechna 社の S-waveplate を用いて直線偏光のレーザーから変換する。最初の実験として、ガンマ線の空間分布を 2 次元検出器 (AdvaPIX TPX3) で測定した。軸対称偏光レーザーを用いると、直線偏光及び円偏光のガンマ線とは異なる空間分布になることが確認された。この結果に関する論文が *Phys. Rev. A* に掲載された。

ガンマ線の空間偏光分布を測定するため、偏光計の設計および構築を行った。ガンマ線が直線偏光の場合、ターゲットで散乱されるコンプトン散乱ガンマ線の断面積が方位角方向に変化するため、ガンマ線の偏光軸に対して 90 度方向に散乱されるガンマ線の割合が高くなる。そのため、ガンマ線検出器を方位角方向に複数配置し、散乱ガンマ線の方位角分布を測定する事でガンマ線の偏光軸を測定できる。また、直径 10 mm 程度に広がったガンマ線の一部を直径 1 mm の鉛コリメータを用いて切り出してターゲットに照射することでその位置での偏光軸を測定できる。さらに、コリメータを 2 次元スキャンして同様の測定を行う事で、ガンマ線の空間偏光分布を測定できる。実験に向けて、最初に偏光計の設計を行った。放射線シミュレーションコードを用いてガンマ線検出器の選定、ターゲット形状や配置および計数率の計算を行った。検出器固定治具の設計および組立は装置開発室に依頼した。

最初に、偏光特性の分かっている直線偏光および円偏光ガンマ線の空間偏光分布を測定した。理論計算が示すように、ガンマ線ビーム断面の位置によってガンマ線の偏光軸が変化することを測定することができた。今後、軸対称偏光レーザーを用いて発生するガンマ線の空間偏光分布を測定し、その偏光特性を明らかにする。

B-1) 学術論文

R. SATO, M. HAMDAN, K. SHIMAZOE, M. UENOMACHI and Y. TAIRA, “Measurement of Scattering Azimuthal Distribution of Polarized Gamma-Rays in Compton Scattering Using GAGG(Ce) Scintillator,” *J. Instrum.* **20(2)**, C02007 (2025). DOI: 10.1088/1748-0221/20/02/C02007

Y. TAIRA, “Spatial Distribution of Gamma Rays Produced by Axially Symmetric Polarized and Optical Vortex Lasers,” *Phys. Rev. A* **110(10)**, 043525 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevA.110.043525

S. ENDO, R. ABE, H. FUJIOKA, T. INO, O. IWAMOTO, N. IWAMOTO, S. KAWAMURA, A. KIMURA, M. KITAGUCHI, R. KOBAYASHI, S. NAKAMURA, T. OKU, T. OKUDAIRA, M. OKUIZUMI, M. OMER, G. ROVIRA, T. SHIMA, H. M. SHIMIZU, T. SHIZUMA, Y. TAIRA, S. TAKADA, S. TAKAHASHI, H. YOSHIKAWA, T. YOSHIOKA and H. ZEN, “Circular Polarization Measurement for Individual Gamma Rays in Capture Reactions with Intense Pulsed Neutrons,” *Eur. Phys. J. A* **60(8)**, 166 (2024). DOI: 10.1140/epja/s10050-024-01392-6

B-3) 総説, 著書

S. KERA, T. ARAKI, K. TANAKA, Y. TAIRA, M. KATOH and F. MATSUI, “UVSOR Synchrotron Facility 40th Anniversary,” *Synchrotron Radiat. News* **37(2)**, 41–42 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2330876

B-4) 招待講演

平 義隆, 「超短パルスガンマ線の発生と利用研究」, RARiS 研究会「加速器を用いたガンマ線ビームの生成, 基礎科学と産業分野への利用」, 仙台, 2024 年 9 月.

平 義隆, 「UVSOR におけるガンマ線源の開発と利用」, 第 664 回高崎研オープンセミナー, 高崎, 2024 年 5 月.

Y. TAIRA, “Gamma-ray-induced positron annihilation spectroscopy at UVSOR,” 13th International Workshop on Positron and Positronium Chemistry (PPC-13), Kanazawa, November 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

ビーム物理研究会 若手の会 幹事 (2020–).

日本加速器学会第 21 回年会組織委員 (2024).

学会誌編集委員

日本陽電子科学学会会報編集委員 (2024–2025).

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所, 客員研究員, 2018 年 9 月–.

総合研究大学院大学先端学術院, 「放射光科学」, 2024 年 7 月–8 月.

C) 研究活動の課題と展望

陽電子消滅分光法に関しては, 陽電子寿命測定法と寿命運動量相関測定法に加えて, 同時計数ドップラー拡がり法やスピン偏極陽電子の発生と計測技術開発を行い, 分析技術の拡充を図る。計算上はパルス幅数ピコ秒のガンマ線が発生していると考えられるが, 超短パルスガンマ線のパルス幅計測手法の開発も行う。軸対称偏光レーザーを用いたガンマ線発生に関しては, ガンマ線の偏光分布の測定技術を開発する。

光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

松井 文彦（主任研究員）（2018年4月1日～2021年11月15日）
（教授）（2021年11月16日昇任）

佐藤 祐輔（助教）
萩原 健太（特任研究員（IMS フェロー））
松田 博之（特任研究員）
大門 寛（研究員）
佐々葉 遼平（特別共同利用研究員）
石原 麻由美（事務支援員）
加茂 恭子（事務支援員）
横田 光代（事務支援員）

A-1) 専門領域：表面物性物理学，電子分光計測技術，放射光科学

A-2) 研究課題：

- a) 電子分光装置・マルチモーダルスピン分析器の新規開発を突破口とした UVSOR の高度化
- b) 運動量分解光電子分光による相転移やスピン物性など新規現象を基盤とした測定手法確立
- c) 新奇表面電子物性・化学特性・スピン科学の応用展開
- d) 諸分光手法の融合による電子状態計測データベース構築と利用コミュニティの開拓

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ① UVSOR オリジナルの Photoelectron Momentum Microscope (PMM) 拠点構築を主務とする。PMM は空間・波数空間・エネルギーの幅広い範囲での高分解能測定を可能にするユニークな分析器である。電子物性研究に適した VUV/EUV 領域での高強度・可偏光などといった UVSOR の光源特性を活かした測定機能を実装する PMM の導入を実現し、論文・プレスリリースを通じて成果発信を続けている。②並行して全天球電子レンズ及び電子エネルギー・スピン分析器を考案し国際特許出願した。上記の PMM は $3 \text{ \AA}^{-1}$ までの波数空間の一括測定ができるため価電子帯研究で有効な運動エネルギー 36 eV 以下の領域では全天球をカバーすることができるが、原子配列を研究するのに有効な運動エネルギー 500 eV 以上の領域ではせいぜい 15° の領域でしかない。新規分析器は 2 keV でも全天球の放出光電子を取り込むことができ（こちらは特許が2件成立した）、後段のスピン偏向器でスピンの3次元ベクトル解析ができるようになる。①は high-end 型価電子帯光電子分光装置、②は内殻光電子ホログラフィー測定装置である。両者を融合させ、スピン3次元ベクトル解析を実・逆空間で自在にマッピングできる唯一無二の装置を構築する。
- b) 物性評価に適した光波長帯の連続的なエネルギー可変性が UVSOR の最大の特徴である。BL6U は軟X線領域（45–700 eV）をカバーする直線偏光ビームラインである。③分子科学で重要となる CNO 吸収端の光を用い、元素選択的な共鳴励起によって価電子帯の原子軌道構成を解明できる共鳴光電子分光の実験を成功させた。特に、吸収端にてグラファイトの π バンドが選択的に励起される様子を波数空間上で可視化した。共鳴 Auger 電子スペクトルに価電子帯分散が重なる現象の発見は重要である。グラフェンから π 共役系分子への展開に歩を進め、お家芸としての共鳴光電子回折法を確立した。当グループで確立した「運動量分解光電子顕微鏡法」はグラファイトの単原子層ステッ

プの可視化で威力を発揮し、プレスリリースを行った。表面の劈開や分子吸着のエネルギーに関する詳細な議論ができるようになった。④光エネルギー可変性を活かした k_z 分散測定による全 Brillouin 域価電子帯分散マッピングや偏光特性を活かした原子軌道波動関数解析技術は BL6U での共同研究推進の基盤であるが、さらに精緻な測定を行い、表面特有の電子状態や現象の情報を引き出す研究展開を進めている。

- c) BL7U は真空紫外領域 (6–40 eV) をカバーする偏光可変ビームラインである。ブランチ化を行い、新たに PMM に直入射配置で導入することに成功した。軟 X 線の照射位置と同じ場所で真空紫外光による全立体角光電子分光を行うことができる。特にバンドを構成する原子軌道の対称性を直接的に解析することができる新しい手法の展開が始まった。二つのアンジュレータ光源を駆使する包括的な光電子分光ステーションの構築が実現した。この直入射配置を活用した PMM 展開 (*J. Synchrotron Radiat.* 2024 プレスリリース済) をもとに、高対称の光励起実験が可能となり、価電子帯を構成する原子軌道の情報が得られること、および解析で問題となる散乱現象の見分け方を早速実証実験で示すことに成功した。念願の多次元スピン分析解析機能が立ち上がり、基礎データの取得を系統的に進めている段階である。直入射配置と組み合わせたスピン分析は唯一無二の手法となる。
- d) 光電子回折・分光を用いて典型的な高温超伝導体 Bi2212 や代表的層状物質 TaSe₂, TiSe₂ の相転移前後の電子状態をとらえた。graphite 表面の単原子ステップの顕微像の撮影に成功した (*Phys. Rev. B* 2022) は大きな前進である。新たに確立した顕微 ARPES/ARPES 顕微法の論文 (*J. Phys. Soc. Jpn.* 2022) および (*Rev. Sci. Instrum.* 2023) は両方とも Editor's Choice に選定された。劈開試料表面の局所部分の精密分析の成功は今後の共同研究を呼び込む重要な成果である。共同研究先から Ir 単結晶薄膜の電子状態評価の依頼を受け、バンド分散の測定に成功した。この薄膜は新しいスピン 2 次元フィルターとして有望な材料であり、上記で述べたスピン 3 次元ベクトル解析への応用展開につながるものである。

B-1) 学術論文

- T. KOBAYASHI, F. MATSUI, E. IWAMOTO, H. KIZAKI, M. MIYATA, M. KOYANO, I. YAMAMOTO, S. SUGA and K. SAKAMOTO**, “Temperature-Dependent Electronic Structure of a Quasi-Two-Dimensional Conductor η -Mo₄O₁₁,” *Sci. Rep.* **15**, 9034 (2025). DOI: 10.1038/s41598-025-93355-0
- Y. SATO, Y. FUKAYA, A. NAKANO, T. HOSHI, C. C. LEE, K. YOSHIMI, T. OZAKI, T. NAKASHIMA, Y. ANDO, H. AOYAMA, T. ABUKAWA, Y. TSUJIKAWA, M. HORIO, M. NIIBE, F. KOMORI and I. MATSUDA**, “Surface Structure of the 3×3-Si Phase on Al(111), Studied by the Multiple Usages of Positron Diffraction and Core-Level Photoemission Spectroscopy,” *Phys. Rev. Mater.* **9**(1), 014002 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.9.014002
- Y. HASHIMOTO, J. MIZUNO, H. MATSUDA, F. MATSUI and T. MATSUSHITA**, “High-Resolution Electron Energy Analyzer with Wide Acceptance Angle for Hard X-Ray Photoelectron Holography: Integrating PESCATORA and Retarding Field Analyzer,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **63**(12), 124001 (2024). DOI: 10.35848/1347-4065/ad9447
- F. MATSUI, K. HAGIWARA, Y. SATO, E. NAKAMURA, R. SAGEHASHI, S. KERA and S. SUGA**, “Dual-Beamline Photoelectron Momentum Microscopy for Valence Orbital Characterization,” *Synchrotron Radiat. News* **37**(4), 43–48 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2391256
- T. INOUE, T. INA, H. MASAI, N. KONDO, F. MATSUI, T. KINOSHITA and A. NAKAJIMA**, “Extended X-Ray Absorption Fine Structure (EXAFS) Measurements on Alkali Metal Superatoms of Ta-Atom-Encapsulated Si₁₆ Cage,” *J. Phys. Chem. Lett.* **15**(20), 5376–5381 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpclett.4c00492

K. HAGIWARA, E. NAKAMURA, S. MAKITA, S. SUGA, S. TANAKA, S. KERA and F. MATSUI, “Development of Dual-Beamline Photoelectron Momentum Microscopy for Valence Orbital Analysis,” *J. Synchrotron Radiat.* **31(Pt3)**, 540–546 (2024). DOI: 10.1107/s1600577524002406

H. MATSUDA, K. OZAWA, Y. HASHIMOTO, T. MATSUSHITA and F. MATSUI, “Use of Planar Retarding Field to Improve Energy Resolution of Projection-Type Electron Spectroscopy Collimator Analyzer,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **63(4)**, 046503 (2024). DOI: 10.35848/1347-4065/ad3ab8

B-3) 総説, 著書

H. DAIMON, T. MATSUSHITA, F. MATSUI, K. HAYASHI and Y. WAKABAYASHI, “Recent Advances in Atomic Resolution Three-Dimensional Holography,” *Adv. Phys.:X* **9(1)**, 2350161 (2024). DOI: 10.1080/23746149.2024.2350161

S. KERA, T. ARAKI, K. TANAKA, Y. TAIRA, M. KATOH and F. MATSUI, “UVSOR Synchrotron Facility 40th Anniversary,” *Synchrotron Radiat. News* **37(2)**, 41–42 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2330876

T. YOKOYAMA, F. MATSUI, H. ABE and T. KINOSHITA, “60 Years of Synchrotron Radiation in Japan (JPSR60),” *Synchrotron Radiat. News* **37(2)**, 43–44 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2330877

B-4) 招待講演

松井文彦, 「光電子運動量顕微鏡による電子状態研究：ミルからワカルへ」, 日本物理学会領域 2, 5, 9, 10 合同シンポジウム「先端計測のフロンティア～見えないモノを見る挑戦」, 札幌, 2024 年 9 月.

松井文彦, 「マルチモーダル光電子シネマトグラフィー：表面相転移の観察から解明へ」, NIFS 研究会数理科学・プラズマ科学・物質科学の共通研究拠点形成, 土岐, 2024 年 5 月.

松井文彦, 「顕微 ARPES と光電子顕微鏡：光電子運動量顕微鏡を中心に」, JVSS-MBA 研修セミナー「多様な表面分析が可能な電子分光法」, 仙台, 2024 年 4 月.

F. MATSUI, “Dual-beam (Soft X-ray/VUV) Photoelectron Momentum Microscope,” Korea-Japan Symposium on Molecular Science, Cutting-Edge Molecular Science from Elementary to Complex Systems, Busan (Korea), June 2024.

B-5) 特許出願

登録

特許第 7505794 号, 「球面収差調整カソードレンズ, 球面収差補正静電型レンズ, 電子分光装置, 及び光電子顕微鏡」, 松田博之, 松井文彦 (自然科学研究機構), 2020 年. (登録日 2024 年 6 月 17 日)

特許第 7607953 号, 「静電偏向収束型エネルギー分析器, 結像型電子分光装置, 反射結像型電子分光装置, およびピンベクトル分布イメージング装置」, 松田博之, 松井文彦 (自然科学研究機構), 2021 年. (登録日 2024 年 12 月 20 日)

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面真空学会理事 (2021.5–), 協議員 (2023–2025).

学会の組織委員等

表面構造に関する国際学会 ICSOS 国際アドバイザー委員 (2017–).

VUV・SX 高輝度光源利用者懇談会幹事 (2024–2026).

日本表面真空学会若手部会運営委員 (2025). (佐藤祐輔)

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会 R026 先端計測技術の将来設計委員会運営委員 (2019–2025), 副委員長 (2024–2025).

広島大学放射光科学研究所協議会委員 (2024–2026).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所人事委員会委員 (2024).

量子科学技術研究開発機構 Nanoterasu 利用研究検討委員会委員 (2024–2025).

学会誌編集委員

日本表面真空学会出版委員 (2013–).

B-8) 大学等での講義, 客員

総合研究大学院大学先端学術院, 「放射光科学」, 2024 年 7 月–8 月.

B-10) 競争的資金

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

科研費基盤研究(B), 「グラフェン／h-BN 構造を用いたグラフェン透明アンテナの特性向上に関する研究」(代表者: 黄 晋二), 松井文彦(研究分担者) (2023 年度–2025 年度).

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

B-11) 産学連携

共同研究, 三菱ケミカル(株), 松井文彦 (2020 年度–).

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

C) 研究活動の課題と展望

UVSOR 型 Photoelectron Momentum Microscope (PMM) 利用研究を推進する。顕微角度分解光電子分光, 共鳴光電子分光, 3D 波数空間分解光電子分光法を協力研究に供するとともに自身の表面物性科学研究を進める。軟X線ビームラインとVUVビームライン両方を同時にPMMに導くtwo-beam PMM実験ステーションを構築し, 2023年度は両方での運用が始まった。現在2Dスピンスピンフィルタが立ち上がり, 最適化を進め, 両ビームラインを利用したスピンを含めた電子状態解析環境の構築を進めている。基礎研究として磁性薄膜・キラル分子膜の電子状態・原子構造研究を進める。

PMM 開発の先駆者がいる Forschungszentrum Jülich (FZJ) の電子物性部門 (PGI-6) と学術協定を結び, 表面電子物性の共同研究を進めてきたおかげで, UVSOR でも PMM が順調に立ち上がった。時間分解型の PMM 開発を進めるドイツ・DESY の M. Hoesch らとも共同研究を密にし, こちらからスピン研究に関して相手から時間分解測定法に関して経験技術交流を進めている。本装置を活かした実験を積極的に進めるユーザーコミュニティ構築のための第1回 (2019)・第2回 (2020.10) 国際ワークショップ・第3回 (2022.10) 国際会議特別セッション共催, 第4回 (2023.7) 分子

研研究会，第5回(2024.11)国際会議特別セッション共催と継続的に開催し，東アジア圏でのPMM開発グループの萌芽のネットワークが密になった。2022年にはDESYにて招待講演を行った。UVSORの国内外からのビジビリティを高めるとともに，他のビームラインにも先端拠点を目指す機運と風土の定着を活動指針として進めている。各種分光研究で取得されるデータを有効活用するためのデータフォーマット策定や公開のためのインフラづくりの重要性が近年認識されてきている。多量のデータを協力研究の研究者と共同で解析するために，データ解析ソフトや手法の整備を進めている。学会(放射光学会)，産学連携委員会(R026先端計測)，計測コミュニティー(XAFS)などでデータフォーマット整備の活動に加わっている。UVSOR放射光利用を産業界を含めた広い潜在的ユーザーに拡大する機会ととらえている。

田中 清尚（准教授）（2014 年 4 月 1 日着任）

ZHU, Yupeng（特別訪問研究員）
河野 健人（特別共同利用研究員）
増田 圭亮（特別共同利用研究員）
興田 康人（特別共同利用研究員）
波多江 勇太（特別共同利用研究員）
石原 麻由美（事務支援員）
加茂 恭子（事務支援員）
横田 光代（事務支援員）

A-1) 専門領域：物性物理学，放射光科学

A-2) 研究課題：

- a) 新規スピン分解角度分解光電子分光装置の開発
- b) 高温超伝導体の電子状態の解明
- c) UVSOR ビームラインの高精度化

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) UVSOR BL5U では高効率イメージスピン分解角度分解光電子分光測定の開発を進めている。昨年度から導入している超高輝度電子銃を用いて電子レンズパラメータの調整を実施し、試料面内 2 軸方向のスピン分解測定可能運動エネルギー領域を、125 eV からビームラインの最低励起光エネルギー（21.2 eV）の領域まで拡大することに成功した。また今年度はユーザー利用開始の最も大きな障害となっていたスピントーゲットの 2 軸モーター制御を新たに開発し導入することに成功した。スピントーゲットを装置に適切なトルクで、再現性良く押し付けることが最大の課題であったが、既製品である 2 軸モータートランスファーシステムの 1 軸機構を完全に取り外し、新たにラックアンドピニオンギアを取り付けることで実現したことに大きな特徴がある。さらに 2 軸モーター制御導入の副次的効果として、試料面直方向のスピン分解測定を実施するための電子レンズパラメータ設定に自由度ができたことで、電子銃での実験ではあるが、はじめて試料位置での角度情報を保ったまま面直方向電子を検出器まで導くことに成功した。来年度は面直方向用の電子レンズパラメータの調整を継続するとともに、面直スピン検出の実証実験を実施する予定である。成功すれば世界初の高効率マルチチャンネル検出器を利用した全方位スピン情報を得ることのできる角度分解光電子分光装置が実現する。
- b) UVSOR BL7U において、銅酸化物高温超伝導体 Bi2213 の角度分解光電子分光測定を行った。超伝導転移温度の上下でのスペクトルを比較することで、超伝導によるスペクトラルウェイト変化の運動量空間依存性とホール濃度依存を導出することに成功した。これまで長い間有効とされてきたフェルミアーキ描像を否定する結果が得られており、高温超伝導が超伝導ギャップよりも超流動密度に強く影響を受けていることを示唆している。現在論文にまとめている。
- c) 放射光のビームラインでは使用する励起光エネルギーを設定したときに、毎回エネルギーとビームスポット位置が再現されることが、高精度な実験、あるいは測定の自動化を実現する上で欠かせない。BL5U では励起光エネルギーの再現性があまりよくないことが問題となっていたが、回折格子の角度制御における機械的な動作の問題を回避するための特別なモーター制御を開発・導入し、再現性を確保することに成功している。他の光電子ビームライン（BL7U）

でも同様の制御システムを導入し、再現性のある励起光エネルギーの提供に成功したが、運用開始後1年後に突然再現性が確保できなくなった。今後の自動測定に向けて最も重要な要素であり、現在原因究明に向けて、ひとつひとつの光学素子制御の確認実験を実施している。

B-1) 学術論文

Y. MIYAI, S. IDETA, M. ARITA, K. TANAKA, M. ODA, T. KUROSAWA and K. SHIMADA, “Dual Origin in the Temperature Dependence of the Coupling Parameter for the Strange Metal State in Heavily Overdoped Cuprate Superconductor,” *Phys. Rev. Res.* **7(1)**, L012039 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.7.L012039

Y. LEE, Y. SUR, S. KIM, J. CHA, J. HYUN, C. LIM, M. HASHIMOTO, D. LU, Y. KIM, S. HUH, C. KIM, S. IDETA, K. TANAKA, K. H. KIM and Y. KIM, “Coupling Between Electrons and Charge Density Wave Fluctuation and its Possible Role in Superconductivity,” *Adv. Sci.* **11(41)**, 2406043 (2024). DOI: 10.1002/advs.202406043

Y. NAKAYAMA, K. YAMAUCHI, Y. BABA, K. KIKUCHI, H. HATTORI, F. TESHIMA and K. TANAKA, “Synchrotron Radiation Fourier-Transform Infrared Absorption Measurements on the Single-Crystal Dinaphtho[2,3-*b*:2',3'-*f*]thieno[3,2-*b*]thiophene,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **63(9)**, 09SP07 (2024). DOI: 10.35848/1347-4065/ad70c0

T. KATO, K. NAKAYAMA, Y. LI, Z. WANG, K. SUGAWARA, K. TANAKA, T. TAKAHASHI, Y. YAO and T. SATO, “Quasi-Homoepitaxial Growth of Highly Strained Alkali-Metal Ultrathin Films on Kagome Superconductors,” *Adv. Sci.* **11(29)**, 2309003 (2024). DOI: 10.1002/advs.202309003

R. FUKUSHIMA, V. N. ANTONOV, M. M. OTROKOV, T. T. SASAKI, R. AKIYAMA, K. SUMIDA, K. ISHIHARA, S. ICHINOKURA, K. TANAKA, Y. TAKEDA, D. P. SALINAS, S. V. EREMEEV, E. V. CHULKOV, A. ERNST and T. HIRAHARA, “Direct Evidence of Induced Magnetic Moment in Se and the Role of Misplaced Mn in MnBi₂Se₄-Based Intrinsic Magnetic Topological Insulator Heterostructures,” *Phys. Rev. Mater.* **8(8)**, 084202 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.8.084202

T. KAWASAKI, A. NAGASE, K. HAYAKAWA, F. TESHIMA, K. TANAKA, H. ZEN, A. IRIZAWA, T. SAKAI and Y. HAYAKAWA, “Investigating Structural Property of Human Hair by Using Infrared Free Electron Lasers,” *Discover Appl. Sci.* **6(8)**, 397 (2024). DOI: 10.1007/s42452-024-06104-9

J. P. ITHIKKAL, K. FUKUTANI, F. NISHINO, T. MINATO, H. ISHII, S. IZAWA, K. TANAKA, M. HIRAMOTO and S. KERA, “Direct Observation of the Electronic Structure and Many-Body Interactions of Low-Mobility Carriers in Perylene Diimide Derivative,” *Appl. Phys. Lett.* **125(5)**, 052102 (2024). DOI: 10.1063/5.02212938.

K. YAMAGUCHI, M. NIIBE, X. ZHANG, T. SUMI, M. HORIO, Y. ANDO, J. YAMAURA, E. NAKAMURA, K. TANAKA, T. KONDO and I. MATSUDA, “Macroscopic Sheets of Hydrogen Boride and Their Spectroscopic Evaluation,” *Phys. Rev. Mater.* **8(7)**, 074005 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.8.074005

S. ICHINOKURA, K. TOKUDA, M. TOYODA, K. TANAKA, S. SAITO and T. HIRAHARA, “Van Hove Singularity and Enhanced Superconductivity in Ca-Intercalated Bilayer Graphene Induced by Confinement Epitaxy,” *ACS Nano* **18(21)**, 13738–13744 (2024). DOI: 10.1021/acsnano.4c01757

Y. NAKAYAMA, J. MIYAMOTO, K. YAMAUCHI, Y. BABA, F. TESHIMA and K. TANAKA, “Far- and Mid-Infrared FT-IR Analysis of the Single-Crystal Pentacene Using a Linearly Polarized Synchrotron Radiation Light Source,” *Vib. Spectrosc.* **132**, 103681 (2024). DOI: 10.1016/j.vibspec.2024.103681

D. OOTSUKI, H. TAKATSU, K. FUNADA, T. ISHIDA, M. ARITA, S. IDETA, K. TANAKA, H. KAGEYAMA and T. YOSHIDA, “Tiny Fermi Surface with an Extremely Light Mass of Ternary Chalcopyrite CdSnAs₂ Revealed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy,” *Phys. Rev. Mater.* **8(4)**, 044604 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.8.044604

B-3) 総説, 著書

S. KERA, T. ARAKI, K. TANAKA, Y. TAIRA, M. KATOH and F. MATSUI, “UVSOR Synchrotron Facility 40th Anniversary,” *Synchrotron Radiat. News* **37(2)**, 41–42 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2330876

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「最新の高分解能光電子分光による高温超伝導体スピン電荷ストライプ相の電子状態の解明」, 田中清尚 (2024年度–2026年度).

C) 研究活動の課題と展望

開発中のスピン分解ARPES システムは、試料面内 2 軸方向のイメージでのスピン分解スペクトルの取得に成功し、運動量空間分解能や検出効率なども既存システムを大きく上回ることも確認できている。ユーザー利用の障害となっていたスピントラゲットの磁化操作については自動化に成功し利便性が大きく向上した。これまで一番問題となっていた面直方向スピン測定も実装する目途が立ちつつある状況である。これまでスピン分解測定は一部ユーザーには開放していたが、一般ユーザーの利用開始に向けて整備を急ぎたい。

光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

荒木 暢（主任研究員）（2023 年 1 月 1 日着任）

石原 麻由美（事務支援員）

加茂 恭子（事務支援員）

横田 光代（事務支援員）

A-1) 専門領域：放射光科学

A-2) 研究課題：

- a) 軟X線吸収分光を基礎とした生命科学へのアプローチ
- b) 液中観察のためのX線分光顕微鏡と試料環境開発
- c) 夾雑環境生体試料の定量化学状態マッピング

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 軟X線吸収分光を基礎とした生命科学へのアプローチ；UVSOR の次期計画を念頭に、既存の軟X線ビームラインを利用したトライアルとして、以下の2つの試料システムについて Scanning Transmission X-ray Microscopy (STXM) による実験を行った。

光合成タンパク質の超複合体の測定を行い、鉄の L 吸収端 X 線吸収スペクトル (XAS) において十分なレベルの信号を検出でき、スペクトルを正しく測定できることを確認したが、マンガンについては限られたビームタイム中では検出できなかった。更に実験を行い、鉄およびマンガンの共鳴 X 線散乱の実験に繋がりたいと考えている。

極限環境下で乾眠することが知られているクマムシについて、その微視的解剖学の観点から、樹脂に包埋した超薄切片試料について STXM 観察を行った。炭素、窒素、酸素の K 吸収端ではエネルギーを変化させる（特定の吸収構造に合わせる）ことでオルガネラに対応すると思われる微細構造が観察され、Scanning Electron Microscopy (SEM) で観察された構造にほぼ対応していることを確認した。今後、相補的な観点で用いる SEM との対比などを共同研究者と議論し、① STXM でしか見えない構造があるのか？ ② SEM で観察されている構造の特定に STXM が寄与できるか？ といったことを明らかにし、研究を進めたい。

X 線のコヒーレンスを生かしたイメージング（散乱からの像再構成）について現在の UVSOR および次期リングでの実現を検討するために、先行する海外施設での装置見学および実験を検討し、実際に、蓄積リングのサイズこそ大きいもの、そのエミッタンス（電子ビームのサイズ×発散角）がほぼ同じである Canadian Light Source (CLS) のコミッション実験に参加した。上記のクマムシ試料を使った Ptychography（コヒーレントイメージングの一つ）のテスト実験において、確かな空間分解能の向上（X 線のビームサイズで決まる分解能よりも優れていること）を確認した。

- b) 液中観察のためのX線分光顕微鏡と試料環境開発；Diamond Light Source において硬X線顕微分光によって液中セルを使ったバクテリアに金ナノ粒子が担持されたポリマー粒子を添加した試料の観察を共同研究者と行った。金の酸化状態を XAS スペクトル測定から決定した。今後、軟X線領域での STXM でも同様の試料の観察を計画している。Transmission Electron Microscopy (TEM) 用に開発されたセルを利用した実験であり、今後の STXM 実験の参考になるものであった。TEM 用の液体セルの活用または、独自セルの開発の2つの観点で計画を進める。試料自体を走

査する STXM の場合、液中セル自体を揺さぶることになるため、今後、集光X線の走査または結像型による試料を固定した状態での測定を模索する。また、液体エタンなどを冷媒に用いた急速凍結による試料準備のオプションも併せて検討する。TEM 試料セルの利用は、現在検討中の TEM と X 線イメージング・共鳴散乱手法の相補利用も念頭にその導入を進める。

- c) 夾雑環境生体試料の定量化学状態マッピング：細胞中の「夾雑環境」で、これまで高分子研究や皮膚への薬剤の浸透などで発揮された化学状態弁別性とメソスケールの空間分解能を生かした定量分析をどう実現するかを検討する。上記のクマムシの共同研究もその一つである。NINS の本部主導のフォトンバイオロジー研究プラットフォーム：PBRP を通じて、東北大の医学・農学研究科、量子生命研究所のメンバーと UVSOR を使ったフィージビリティ実験を行った（R6 年度前期）。1 件については日本バイオイメーjing学会にて発表が行われた。後期は同様の実験と、更に、PBRP で立ち上げるプロジェクト：X 線によるオルガネラソーティングの基礎データ収集を行う予定である。

B-1) 学術論文

J. A. LAUX, T. OHIGASHI, M. R. BITTERMANN, T. ARAKI, H. YUZAWA, F. RANCAN, A. VOGT and E. RÜHL, “Scanning Transmission Soft X-Ray Microscopy Probes Topical Drug Delivery of Rapamycin Facilitated by Microneedles,” *ChemPhysChem* **26(2)**, e202400819 (2025). DOI: 10.1002/cphc.202400819

T. MATSUMOTO, T. NOGUCHI, A. MIYAKE, Y. IGAMI, M. MATSUMOTO, T. YADA, M. UESUGI, M. YASUTAKE, K. UESUGI, A. TAKEUCHI, H. YUZAWA, T. OHIGASHI and T. ARAKI, “Sodium Carbonates on Ryugu as Evidence of Highly Saline Water in the Outer Solar System,” *Nat. Astron.* **8(12)**, 1536–1543 (2024). DOI: 10.1038/s41550-024-02418-1

B-3) 総説、著書

S. KERA, T. ARAKI, K. TANAKA, Y. TAIRA, M. KATOH and F. MATSUI, “UVSOR Synchrotron Facility 40th Anniversary,” *Synchrotron Radiat. News* **37(2)**, 41–42 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2330876

B-4) 招待講演

荒木 暢, 「軟 X 線顕微分光法」, 第 16 回日本放射光学会放射光基礎講習会, 仙台 (ハイブリッド開催), 2024 年 9 月。

B-8) 大学等での講義、客員

Diamond Light Source, Visiting Scientist, 2023 年–。

B-10) 競争的資金

生命創成探究センター特別共同研究, 「無水生物学を開拓する技術基盤の構築とその展開」, 荒木 暢 (2024 年度)。

岩山 洋士（助教）（2010 年 4 月 1 日～2024 年 4 月 15 日）
（主任研究員）（2024 年 4 月 16 日昇任）

石原 麻由美（事務支援員）
加茂 恭子（事務支援員）
横田 光代（事務支援員）

A-1) 専門領域：軟X線構造解析，軟X線顕微鏡法，ソフトマター，X線非線形光学

A-2) 研究課題：

- a) 軟X線共鳴散乱法によるソフトマターのメゾスコピック構造解析
- b) 密着型軟X線顕微鏡法による生体試料の XAFS イメージング
- c) X線自由電子レーザーを用いた溶液表面における二次高調波発生による化学状態分析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 高分子，液晶，コロイドなどのソフトマターは，メゾスコピック領域に特徴的な構造を持ち，多くの物性はその構造に由来する。偏光顕微鏡などで観察できない数 nm から数 100nm 程度のメゾスコピック領域の構造をしらべる手法として，X線小角散乱法が用いられ，多くの成果が挙げられている。しかしながら，X線小角散乱は試料の電子密度の変調に対して敏感であるが，電子密度の近い多成分系における特定の成分の構造や，ねじれ構造などの観測は難しい。X線共鳴過程を用いることで元素・分子種・分子配向に選択性を有する散乱光をえることができる。しかしソフトマターの主成分である軽元素（炭素，窒素，酸素など）のX線共鳴エネルギーは，0.1 eV～1 keV の軟X線領域であり，X線小角散乱法で使用する 10 keV 程度のX線とは一致しない。そのため，我々は軟X線領域の共鳴散乱光を観測できるための手法（共鳴軟X線散乱法）を行っている。我々は UVSOR のビームライン BL3U および Photon Factory BL7A において，共鳴軟X線散乱装置を開発し，高分子や液晶の構造解析を行っている。本年度は，入射光エネルギーをスキャンしながら散乱画像を取得するプログラムを開発し，炭素，窒素，酸素の K 殻吸収端の内殻共鳴に相当する軟X線を用いて，有機薄膜太陽電池のバルクヘテロジャンクション構造の解析や，多成分系の有機薄膜の成分ごとの解析，キラル液晶のモルフォロジーの解析を行った。また，放射光施設 Photon Factory BL7A では，軟X線検出器が回転できることを利用し，反射率計測することで膜厚評価できるシステムを構築した。
- b) 2023 年度より，軟X線による生体試料の可視化を実現すべく密着型軟X線顕微鏡の開発を始めた。本手法では，シンチレーター上に細胞を培養し，Si₃N₄ メンブレン（100 nm）で封入することで，軟X線を照射し，その透過光像をシンチレーターで可視光に変換し，細胞を観測する。10 月ごろより，犬の腎臓尿細管上皮細胞由来の細胞株である MDCK 細胞などの標準的な細胞を培養し，使うことにした。また，そのための細胞培養準備室を明大寺に設置した。今期は細胞に軟X線を照射する装置を改良し，従来気泡などがはいる，測定がうまくいかなかったことを，ヘリウム雰囲気下で実験することで解決した。また軟X線およびテnder X線を使うことで，軽元素 C, N, O に加え S, P などの元素についても測定できる環境を整備している。
- c) X線自由電子レーザー SACLA BL1 を利用した液体試料を対象とした実験装置の開発を進めている。昨年度は，Nevada 大の Craig Schwartz さんと液体表面からの二次高調波発生の実験を行った。液体表面などの界面においては，空間対称性の破れより，二次高調波が発生する。そのため，二次高調波を観測することで表面敏感な実験を行うこ

とができる。特に液体表面は気液界面であるため、反応場として重要であり、その化学状態を測定する手法は重要である。また軟X線の共鳴過程を利用することで、表面の特定の元素の化学状態を選択的に観測できる長所がある。そのため、SACLA BL1を利用して、高強度の軟X線パルスを鉄硝酸水溶液の超薄膜フラットジェットに照射し、その反射光を、斜入射分光器で分光観測した。現在解析中である。

B-1) 学術論文

T. N. TRAN, T. HAYASHI, H. IWAYAMA, M. SEKINE, M. HORI and K. ISHIKAWA, “Hydrofluoroethane Plasma Etching of SiN, SiO₂, and poly-Si Films with CHF₂CF₃, CF₃CH₃, and CHF₂CH₃,” *Appl. Surf. Sci.* **684**, 161815 (2025). DOI: 10.1016/j.apsusc.2024.161815

T. WALMSLEY, J. W. MCMANUS, Y. KUMAGAI, K. NAGAYA, J. HARRIES, H. IWAYAMA, M. N. R. ASHFOLD, M. BRITTON, P. H. BUCKSBAUM, B. DOWNES-WARD, T. DRIVER, D. HEATHCOTE, P. HOCKETT, A. J. HOWARD, J. W. L. LEE, Y. LIU, E. KUKK, D. MILESEVIC, R. S. MINNS, A. NIOZU, J. NISKANEN, A. J. ORR-EWING, S. OWADA, P. A. ROBERTSON, D. ROLLES, A. RUDENKO, K. UEDA, J. UNWIN, C. VALLANCE, M. BROUARD, M. BURT, F. ALLUM and R. FORBES, “The Role of Momentum Partitioning in Covariance Ion Imaging Analysis,” *J. Phys. Chem. A* **128**(22), 4548–4560 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpca.4c00999

W. O. RAZMUS, F. ALLUM, J. HARRIES, Y. KUMAGAI, K. NAGAYA, S. BHATTACHARYYA, M. BRITTON, M. BROUARD, P. H. BUCKSBAUM, K. CHEUNG, S. W. CRANE, M. FUSHITANI, I. GABALSKI, T. GEJO, A. GHRIST, D. HEATHCOTE, Y. HIKOSAKA, A. HISHIKAWA, P. HOCKETT, E. JONES, E. KUKK, H. IWAYAMA, H. V. S. LAM, J. W. MCMANUS, D. MILESEVIC, J. MIKOSCH, S. MINEMOTO, A. NIOZU, A. J. ORR-EWING, S. OWADA, D. ROLLES, A. RUDENKO, D. TOWNSEND, K. UEDA, J. UNWIN, C. VALLANCE, A. VENKATACHALAM, S. WADA, T. WALMSLEY, E. M. WARNE, J. L. WOODHOUSE, M. BURT, M. N. R. ASHFOLD, R. S. MINNS and R. FORBES, “Exploring the Ultrafast and Isomer-Dependent Photodissociation of Iodothiophenes via Site-Selective Ionization,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26**(16), 12725–12737 (2024). DOI: 10.1039/d3cp06079a

Y. UMEDA, H. ONO, K. YAMAMOTO, O. ISHIYAMA, H. IWAYAMA, E. NAKAMURA, T. YOKOYAMA, M. MIZUGUCHI and T. MIYAMACHI, “Annealing Temperature Dependence of Magnetic Properties in FeCo Ordered Alloy Thin Films Fabricated Using the Nitrogen Surfactant Effect,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **63**(4), 04SP80 (2024). DOI: 10.35848/1347-4065/ad396b

J. UNWIN, W. O. RAZMUS, F. ALLUM, J. R. HARRIES, Y. KUMAGAI, K. NAGAYA, M. BRITTON, M. BROUARD, P. BUCKSBAUM, M. FUSHITANI, I. GABALSKI, T. GEJO, P. HOCKETT, A. J. HOWARD, H. IWAYAMA, E. KUKK, C.-S. LAM, J. MCMANUS, R. S. MINNS, A. NIOZU, S. NISHIMURO, J. NISKANEN, S. OWADA, J. D. PICKERING, D. ROLLES, J. SOMPER, K. UEDA, S.-I. WADA, T. WALMSLEY, J. L. WOODHOUSE, R. FORBES, M. BURT and E. M. WARNE, “Time-Resolved Probing of the Iodobenzene C-Band Using XUV-Induced Electron Transfer Dynamics,” *ACS Phys. Chem. Au* **4**(6), 620–631 (2024). DOI: 10.1021/acspyschemau.4c00036

M. KOBAYASHI, S. YOSHIMURA, H. IWAYAMA, N. KONDO, J. TAKAHASHI, H. OTA, M. KATOH, K. KOBAYASHI and H. NAKAMURA, “First Attempt at Photoionized Plasma Production with VUV Radiation in Synchrotron Light Source UVSOR-III,” *Plasma Fusion Res.* **19**, 1301028 (2024). DOI: 10.1585/pfr.19.1301028

B-4) 招待講演

岩山洋士,「放射光で見る EUV 露光の光化学」, EUV フォトン第三回研究会, 福岡, 2025 年 3 月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

日本放射光学会年次大会プログラム編集 (2024–2026).

学会誌編集委員

原子衝突学会学会誌編集員 (2020–).

B-10) 競争的資金

自然科学研究機構 OPEN MIX LAB (OML) 公募研究プログラム (研究共創型),「放射光 X 線による心筋細胞内の超硫黄分子のバイオイメーキング」, 岩山洋士 (2024 年度).

B-11) 産学連携

共同研究, 三菱ケミカル (株), 岩山洋士 (2023 年度–2024 年度).

4-6 物質分子科学研究領域

電子構造研究部門

横山 利彦（教授）（2002 年 1 月 1 日着任）

倉橋 直也（特任助教）

前島 尚行（特任助教）

栗田 佳子（事務支援員）

A-1) 専門領域：表面科学，X線分光学

A-2) 研究課題：

- a) 雰囲気制御型硬X線光電子分光法の開発と不均一触媒その場観察への応用
- b) X線磁気円二色性などを用いた磁性薄膜の磁気構造解析
- c) X線吸収分光を用いた機能合金の局所構造と熱的性質
- d) X線発光分光による固体高分子形燃料電池の電解質に関する研究
- e) 遷移金属リン化合物単結晶・薄膜の触媒活性・磁性に関する研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) SPring-8 BL36XU で我々が開発した雰囲気制御型硬X線光電子分光装置により不均一触媒の反応進行中のオペランド観測を行っている。本設備は NEDO 燃料電池プロジェクトにより導入され、固体高分子形燃料電池（PEFC）電極触媒の in situ 測定を行っていたが、NEDO 終了後は、より一般的な不均一触媒等について対象を拡げて研究を遂行しているものである。
- b) 分子研シンクロトン放射光施設 UVSOR-III BL4B を用いた高磁場極低温X線磁気円二色性法（XMCD）を共同利用公開し、様々な磁性薄膜の磁気特性検討について国内外との共同研究を広く実施している。また、磁性薄膜の原子層毎の磁性を解析するべく軟X線共鳴反射測定技術開発を行っているところである。
- c) X線吸収分光を用いて、強磁性などの機能を発現する合金の局所構造と熱的性質を理論計算を含めて検討している。
- d) X線発光分光による固体高分子形燃料電池の電解質に関する研究を始めた。
- e) 遷移金属リン化合物単結晶・薄膜の触媒活性・磁性に関する研究を始めた。

B-1) 学術論文

T. YOKOYAMA, H. T. FUJII, S. MATSUMURA, N. SAKAGUCHI, N. KURAHASHI and N. MAEJIMA, “Local Thermal Expansion of Co-Containing Invar Alloys,” *Phys. Rev. Mater.* **8**, 083603 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.8.083603
Y. UMEDA, H. ONO, K. YAMAMOTO, O. ISHIYAMA, H. IWAYAMA, E. NAKAMURA, T. YOKOYAMA, M. MIZUGUCHI and T. MIYAMACHI, “Annealing Temperature Dependence of Magnetic Properties in FeCo Ordered Alloy Thin Films Fabricated Using the Nitrogen Surfactant Effect,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **63**(4), 04SP80 (2024). DOI: 10.35848/1347-4065/ad396b

B-3) 総説, 著書

T. KOITAYA and T. YOKOYAMA, “Operando Characterization of Copper-Zinc-Alumina Catalyst for Methanol Synthesis by Ambient-Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *SPring-8 Research Frontiers* 2023, 78–79 (2024).

T. YOKOYAMA, F. MATSUI, H. ABE and T. KINOSHITA, “60 Years of Synchrotron Radiation in Japan (JPSR60),” *Synchrotron Radiat. News* **37(2)**, 43–44 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2330877

B-4) 招待講演

倉橋直也, 「放射光を利用した分光分析の医用高分子への展開」, 第 41 回医用高分子研究会講座, 東京都八王子市, 2024 年 11 月.

倉橋直也, 「さまざまな光を使った機能性高分子材料の解析」, 日本ゴム協会 2024 年年次大会, 名古屋, 2024 年 5 月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会評議員 (2024–2026).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

広島大学 放射光科学研究センター協議会委員 (2020–).

未来工学研究所「宇宙・海洋・地球・科学基盤分科会」委員 (2023–2024).

理科教育活動

指導・助言「探究 AKCII」愛知県立岡崎高等学校 (2024 年度). (倉橋直也)

その他

文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ・スポーク機関「マテリアルの高度循環のための技術」業務主任者 (2021–2031).

文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ・運営機構業務「横断技術領域 (物質・材料合成プロセス)」業務主任者 (2022–2031).

本多記念会本多記念研究奨励賞受賞候補者選考委員会委員 (2024–2025).

B-10) 競争的資金

科研費若手研究, 「テンダー X 線発光分光法によるプロトン伝導性高分子膜の電子状態解析」, 倉橋直也 (2024 年度–2027 年度).

C) 研究活動の課題と展望

2002 年 1 月着任以降, 磁性薄膜の表面分子科学的制御と新しい磁気光学分光法の開発を主テーマとして, 高磁場極低温 X 線磁気円二色性 (UVSOR) や紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の発明, 広域 X 線吸収微細構造 (EXAFS) 法と経路積分法によるインバー等磁性合金の熱膨張などで成果を上げてきた。2011 年度から, SPring-8 の超高輝度硬 X 線を利用した燃料電池の in situ 雰囲気制御型硬 X 線光電子分光の開発を行い, 2017 年度には完全大気圧での光電子分光観測に世界で初めて成功した。光電子分光は, 燃料電池中の各構成成分の電位を電極なしに観測可能な有効手法であることを示し, 今後もこれを中心課題に据えた研究を推進する。さらに, 2013 年度からは放射光や X 線自由

電子レーザーを用いた(超)高速時間分解X線吸収法の開発的研究を行ってきた。2022年度は、SPring-8を用いた雰囲気制御光電子分光等を用いた表面化学反応研究、UVSORを利用した共鳴X線磁気散乱による磁性薄膜解析、KEK-PFを用いた合金のEXAFS局所構造解析等を行った。2022年8月に小板谷助教が転出、2023年4月に山本助教が転出、2022年12月に倉橋特任助教が着任、公募中であつたもう1名の特任助教として2023年8月16日に前島尚行特任助教が着任した。退職まで1年半であるが、X線発光分光による固体高分子形燃料電池の電解質に関する研究、遷移金属リン化合物単結晶・薄膜の触媒活性・磁性に関する研究を新たに展開し始めた。

杉本 敏樹（准教授）（2018年5月1日着任）

櫻井 敦教（助教）
金井 恒人（特任講師）
斎藤 晃（若手研究者雇用特別研究員）
高橋 翔太（若手研究者雇用特別研究員）
佐藤 宏祐（特任研究員）
瀬戸 啓介（特任研究員）
御領 紫苑（研究員）
林 仲秋（大学院生）
望月 達人（大学院生）
金 成翔（大学院生）
吉澤 龍（大学院生）
常川 響（大学院生）
高原 裕大（大学院生）
手塚 玄惟（特別共同利用研究員）
榊原 隆之（技術支援員）
志村 真希（事務支援員）

A-1) 専門領域：物理化学，分光学，機能物性化学，表面界面科学

A-2) 研究課題：

- a) 非熱的触媒反応系のオペランド分光と新奇界面現象の発見
- b) 高感度ラマン分光計測法の開発と電子非共鳴・表面プラズモン共鳴から脱却した表面分子吸着系の汎用的ラマン観測の実現
- c) 高次非線形分光法の開発と埋没界面フォノン・分子観測への応用
- d) 二次非線形極微分光法の開発と金属ナノギャップにおける新奇非線形光学応答現象の発見

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 天然ガス中に豊富に含まれる資源であるメタンを光により活性化させ，次世代エネルギー媒体としての水素を取り出すと共に，化学的により付加価値が高い分子に変換させる光触媒技術は持続可能な社会の実現に向けて重要な化学技術である。一般に，光触媒分野において酸化物光触媒に担持する金属助触媒は，光誘起電子を補足し還元反応（水素発生）を促進することが広く想定されている。ところが，赤外分光法を用いてメタンと水の混合反応条件下における光誘起キャリア（電子・正孔）のオペランド分光を行ったところ，金属助触媒に注入される光誘起電子ではなく，下地の酸化物と金属助触媒の間の複合界面（金属助触媒の縁）にトラップされた光誘起電子が水素発生に対して高い反応活性を示すことが判明した [*J. Am. Chem. Soc.* **146**, 24800 (2024)]。実際に，原子間力顕微鏡を用いたケルビンプローブ力測定を実施し局所仕事関数を観測したところ，下地の酸化物と金属助触媒の間の複合界面における光誘起キャリアの存在サイトを特定するに至っている [Sato *et al.*, in preparation]。また，担持する金属種と担持量に依存して，メタンと水の混合系における完全酸化種・部分酸化種の反応選択性・及び反応カインेटクスが大きく変調されることを見出し，「金属助触媒が正孔を補足し酸化反応にも積極的に関与している」 [*Angew. Chem., Int. Ed.* **62**, e2023060

(2023)]]という我々が禁煙世界に先駆けて提示した新たな描像をさらに裏付ける重要な証拠を得た [Chem. Commun., in press (2025)]。これらの触媒材料側に関する最先端の知見を生み出すだけでなく、表面分子科学の観点からは、水蒸気雰囲気下の非熱的水分解水素発生反応において触媒活性が最大になる反応条件を解明し、水分子の存在量や水素結合構造／状態を設計・制御する方向性、すなわち『界面水のエンジニアリング』により既存の限界を突破して水素発生反応の更なる活性向上を図る新たな研究開発の方向性を示すことに成功した [J. Am. Chem. Soc. **146**, 22276 (2024)]。

- b) 二つの光の差周波の喰りによって分子振動を共鳴励起（強制振動）させる非線形ラマン分光法に着目し、MHz 高繰り返しフェムト秒レーザーをベースとして時間的に非対称なパルス波形の成形とパルス遅延の精密制御を導入することで、電子共鳴あるいはプラズモン共鳴を用いて信号増大させることができない表面吸着分子系についても汎用的かつ高感度にラマン活性モードの観測を可能とする新しい界面非線形分子分光法を開発した。この新規方法論により、三次非線形ラマン分光法を表面界面系に適用する際に問題となるバルク由来の非共鳴バックグラウンド信号を4桁以上低減させることが可能となった [T. Sugimoto *et al.*, submitted]。これにより、我々は代表的な金属・絶縁体の表面分子系として Pt(111)・Au(111)・SiO₂(0001) 基板表面に吸着した水分子の超薄膜やサブナノメートル薄さの自己組織化単分子膜の計測に成功した [Yoshizawa *et al.*, in preparation, Takahara *et al.*, in preparation, Commun. Mater. **5**, 204 (2024), Phys. Rev. Mater. **7**, 115803 (2023)]。とりわけ、本分光手法において重要となる ω_3 パルスの時間遅延をフェムト秒オーダーで精密に制御することにより、表面分子系のラマン活性振動モードの超高速ダイナミクスの計測に世界初で成功すると共に、この方法論をアモルファス物質に適用することで、アモルファス物質のブロードな振動スペクトルを一意的に成分分解する新しい解析方法論の開発に成功した [Yoshizawa *et al.*, in preparation]。
- c) 和周波発生振動分光法に代表される二次非線形分光法は空間反転対称性が破れたドメインに選択的な計測手法であり、表面界面観測に広く用いられている。しかし、振動励起に赤外光を用いるため、赤外光が透過しない“物質に埋没した界面”の観測には適用できない。これを克服するため、物質中を透過する二つの光の差周波の喰りで分子振動を共鳴励起（強制振動）させ、それを第二高調波でコヒーレントにアップコンバージョンさせる四次非線形光学過程に基づく振動分光法を展開し始めている。特に、この手法を用いて、空間反転対称性が無い水晶 (SiO₂) 薄膜の観測に透過配置と反射配置でそれぞれ成功し、更に、水溶液中に埋没した電極表面由来の信号計測に成功してきた [Kanai *et al.*, in preparation]。また、非対称にパルスシェーブした光照射により三次非線形光学効果を誘起することで、既存の分光法では困難であった、水溶液環境下に埋没したモデル炭素電極表面やナノ分子修飾電極表面における溶液-電極界面の高感度観測や、電気化学条件下におけるそれらの状態変化をオペランド観測で捉えることにも成果に先駆けて成功するに至った [Kin *et al.*, in preparation, Kanai *et al.*, in preparation]。
- d) 走査トンネル顕微鏡 (STM) と和周波発生振動分光法を組み合わせ、水分子吸着系の水素結合ネットワークにおいて機能発現のカギを握る重要な構造情報である“水分子の配向 (水素の H-up・H-down 配置)”を高い空間分解能で観測する二次非線形極微分光法 (探針増強和周波発生振動分光法) の開発に世界に先駆けて取り組んでいる。その要素技術として、①先端形状を制御したプラズモニック Au ナノ探針の作成 [Mochizuki *et al.*, in preparation], 及び②光の回折限界以下のナノ探針先端領域からの第二高調波発生 (SHG) 信号の検知 [J. Phys. Chem. Lett. **14**, 6919 (2023)], に成功してきた。特に我々は、数 10MHz オーダーの高繰り返しレーザー光源を用いた赤外波長可変 OPO システムを新たに光学系に組み込むことで、可視域から中赤外領域にわたる幅広い波長領域において Au ナノ探針-Au(111) 基板間のナノギャップに存在する分子系の和周波発生振動スペクトルの計測に成功するに至った [Asakurai *et al.*, submitted (Nano Lett., under review)]。現在は、STM の電場変調でナノギャップからの近接場和周波発生信号を飛躍的に増大させる新

技術の構築にも成功すると共に[Takahashi *et al.*, submitted (*Nat. Photonics*, under review)], Pt や Ni などの非プラズモニックな基板表面の分子系に対する探針増強和周波発生振動分光にも世界に先駆けて成功してきている [Mochizuki *et al.*, in preparation, 講演奨励賞受賞 (望月達人), 第 23 回日本表面真空学会中部支部若手講演会]。

B-1) 学術論文

H. SATO, H. SAITO, T. HIGASHI and T. SUGIMOTO, “Critical Impacts of Metal Cocatalysts on Oxidation Kinetics and Optimal Reaction Conditions of Photocatalytic Methane Reforming,” *Chem. Commun.* **61**, 5942–5945 (2025). DOI: 10.1039/D4CC06774F

N. AIGA and T. SUGIMOTO, “Tuning the Thermodynamic Ordering of Strongly Correlated Protons in Ice by Angstrom-Scale Interface Modification,” *Commun. Mater.* **5**, 204 (2024). DOI: 10.1038/s43246-024-00648-4

H. SATO and T. SUGIMOTO, “Direct Operando Identification of Reactive Electron Species Driving Photocatalytic Hydrogen Evolution on Metal-Loaded Oxides,” *J. Am. Chem. Soc.* **146**(36), 24800–24807 (2024). DOI: 10.1021/jacs.3c14558

Z. LIN, H. SAITO, H. SATO and T. SUGIMOTO, “Positive and Negative Impacts of Interfacial Hydrogen Bonds on Photocatalytic Hydrogen Evolution,” *J. Am. Chem. Soc.* **146**(32), 22276–22283 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c04271

B-4) 招待講演

杉本敏樹, 「非熱的メタン転換触媒技術の学理を拓くオペランド分光/表面計測」, 第 14 回次世代天然ガス利用を考える若手勉強会, 静岡, 2024 年 12 月.

杉本敏樹, 「オペランド分光法による触媒 反応場における界面水の分子科学」, 学術変革領域研究 (A) イオン渋滞学第一回固体触媒 WG, 東京, 2024 年 9 月.

杉本敏樹, 「界面非線形振動分光法の 新たな動向紹介～最近の挑戦例から～」, 学術変革領域研究 (A) イオン渋滞学第一回複合材料 WG, 名古屋, 2024 年 9 月.

A. SAKURAI, “Tip-enhanced sum frequency generation for molecular vibrational nanospectroscopy,” Oktoberfest of Chemical Physics, Okazaki (Japan), October 2024.

A. SAKURAI, “Tip-enhanced sum frequency generation for molecular vibrational nanospectroscopy,” Korea-Japan Symposium on Molecular Science 2024, Busan (Korea), June 2024.

T. SUGIMOTO, “Pioneering nonlinear optical spectroscopy to break through the detection limit of nanoscale interfaces,” 2024 Korea-Japan Symposium on Molecular Science, Busan (Korea), June 2024.

B-6) 受賞, 表彰

杉本敏樹, OPIC, TILA-LIC international conference 2024 Best paper award (2024).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面真空学会若手部会幹事 (2018–).

分子科学会運営委員 (2020–).

学会の組織委員等

日本物理学会領域運営委員(領域9)(2024–2025)。(櫻井敦教)

日本物理学会第79回年次大会講演座長(領域9)(2024)。(櫻井敦教)

日本物理学会2025年春季大会シンポジウム提案および世話人(領域9)(2025)。(櫻井敦教)

日本表面真空学会若手部会運営委員(2025)。(佐藤宏祐)

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

文部科学省学術調査官(2021–2023)。

その他

分子科学若手の会夏の学校分子科学研究所対応者(2018–)。

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所, 客員研究員, 2021年4月–2025年3月。

理化学研究所, 客員研究員, 2021年4月–2025年3月。(櫻井敦教)

B-9) 学位授与

LIN, Zhongqiu, “Critical Impacts of Interfacial Hydrogen Bonds on Photocatalytic Hydrogen Evolution via Water Splitting,”
2025年3月, 博士(理学)。

B-10) 競争的資金

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

科研費基盤研究(B), 「探針増強を用いた振動和周波発生分光法の実現と表面分子科学の開拓」, 櫻井敦教(2023年度–2026年度)。

科研費挑戦的研究(萌芽), 「少数分子の配向を検出可能にする新規振動和周波発生分光法の創出」, 櫻井敦教(2024年度–2025年度)。

科学技術振興機構ACT-X研究(受託研究), 「光触媒表面の反応場設計を拓く光誘起活性種のオペランド分光」, 斎藤 晃(2024年度–2025年度)。

科研費基盤研究(B), 「zepto秒原子・分子・素粒子物理学のための中赤外レーザー駆動X線分光システムの開発」, 金井恒人(2024年度–2025年度)。

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

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

科学技術振興機構創発的研究支援事業(受託研究), 「次世代アクアナノ界面機能化学を拓く高次非線形分子分光」, 杉本敏樹(2023年度–2025年度)。

科研費学術変革領域研究(A), 「イオン渋滞現象の解明に向けた高度計測技術の統合利用」(代表者: 中村崇司), 杉本敏樹(研究分担者)(2024年度–2028年度)。

C) 研究活動の課題と展望

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

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

電子物性研究部門

篠北 啓介（准教授）（2025 年 1 月 1 日着任）

栗田 佳子（事務支援員）

A-1) 専門領域：半導体光物性，原子層科学

A-2) 研究課題：

- a) 原子層ナノ材料の構造制御と精密積層技術の確立
- b) 原子層ナノ構造における光物性制御と光機能の創出

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 前任教地（京都大学エネルギー理工学研究所）からの実験装置の移設および新規装置の導入準備を進めた。協奏分子システム研究センターの山本教授グループと連携し，原子層ヘテロ構造作製のための転写法に基づく精密積層技術の最適化について検討した。また，角度精度 0.1 度以下での原子層ヘテロ構造の作製プロセスの確立と，分子研内の共同利用機器を活用したモアレ超格子の特性評価システムの整備に向けた準備を進めた。
- b) 前任教地から移設した光学系を改良し，ファイバー光学系へと発展させることで，原子層ナノ構造のより安定した光学測定のための実験系を確立した。この改良により，測定の再現性と精度が向上し，微細な光学特性の解析が可能となった。さらに，原子層ナノ構造における非線形光学応答の観測に向けた測定系の設計と構築に関する検討を開始し，必要な光源の選定と測定系の最適化を進めている。

B-1) 学術論文

H. AGO, Y.-C. LIN, K. MATSUDA, S. OKADA, M. MARUYAMA, K. SHINOKITA, K. SUENAGA, Y. TAKAHASHI, P. SOLÍS-FERNÁNDEZ, Z. MA, K. HIRATA, K. HONDA, T. KATO, A. UCHIDA, H. OGURA, T. OTSUKA, M. HARA and T. KATO, “Lattice-Guided Growth of Dense Arrays of Aligned Transition Metal Dichalcogenide Nanoribbons with High Catalytic Reactivity,” *Sci. Adv.* **11**, eadr8046 (2025). DOI: 10.1126/sciadv.adr8046

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

マイクロプロセス・ナノテクノロジー国際会議論文委員 (2025).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構創発的研究支援事業（基金）（受託研究）, 「半導体モアレ超構造を用いた量子電磁力学の創生」, 篠北啓介 (2024 年度).

C) 研究活動の課題と展望

- a) 今後の研究活動では、原子層ナノ材料における構造制御と精密積層技術の確立に注力する。具体的には、異なる角度で積層した原子層半導体によるモアレ超格子の精密な構造設計と作製に取り組む。 $\text{WSe}_2/\text{MoSe}_2$ ヘテロ構造などの二次元材料を用い、原子レベルでの角度制御積層技術を確立することで、モアレポテンシャルの周期性を最適化する。また、協奏分子システム研究センターの山本教授グループとの連携により、分子吸着を利用したナノ構造の新たな制御手法の開発を進める。さらに、シリコンナノ粒子と原子層材料を組み合わせたハイブリッド構造の作製にも着手し、新たな光学応答を示すナノ構造のデザインと開発を行う。これらのヘテロ構造の対称性を精密に制御する新手法を開発し、非線形光学応答に最適な構造設計指針を確立する。加えて、光分子科学研究領域の解良教授グループとの協力により、角度分解光電子分光 (ARPES) 測定を通じて電子構造を精密に評価し、モアレ構造と電子状態の相関解明を目指す。
- b) a) で確立した精密制御された原子層ナノ構造を基盤として、革新的な光物性制御と新しい光機能の創出を目指す。まず、モアレ超格子における励起子の量子コヒーレンス制御に取り組む。さらに、物質分子科学研究領域の杉本准教授グループやメソスコピック計測研究センターの熊谷准教授グループとの協力により、プラズモン共鳴を用いた発光増強技術を開発し、モアレ超格子中の励起子が協奏する超蛍光現象の実現を目指す。次に、二次元遷移金属ダイカルコゲナイドに特有の「バレースピン」自由度を活用した円偏光発光制御技術の確立に取り組む。特にシリコンナノ粒子と組み合わせたハイブリッド構造により、バレースピンの由来する円偏光特性を保持したまま発光を増強する手法を開発し、室温でのバレースピン分極の長寿命化と発光効率の向上を同時に実現する。さらに、対称性制御されたナノ構造におけるシフト電流などの非線形光学応答の研究を進め、高効率な光電変換デバイスの実現を目指す。これらの研究を通じて、原子層二次元物質を基盤とした新たな光機能材料の創出に貢献する。

分子機能研究部門

西村 勝之（准教授）（2006 年 4 月 1 日着任）

横田 光代（事務支援員）

A-1) 専門領域：固体核磁気共鳴，構造生命科学

A-2) 研究課題：

- a) 有機分子の ^{13}C 信号帰属に資する新規固体 NMR 測定法の開発
- b) 新規 ^1H 同種核間磁気双極子相互作用デカップリング法の開発
- c) マジック角試料回転下での新規異種核間磁気双極子相互作用リカップリング法の開発
- d) 固体 NMR による有機分子材料の解析
- e) 独自固体 NMR プローブのための要素技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機分子の ^{13}C 信号帰属に資する新規固体 NMR 測定法の開発を試みた。炭素核に化学結合した水素核数に応じて高度に ^{13}C 核を区別する新規スペクトル編集固体 NMR 測定法を 2 種類に関して理論的検討を完了した。
- b) 高分解能 ^1H スペクトルを得るための新規 ^1H 同種核間磁気双極子相互作用デカップリング法の開発を行った。考案した複数種の内，1 種について国際共同研究先の施設を用いてテスト測定まで行った。さらに，同手法に観測 window を追加した際の化学シフトのスケールリングファクター変化について，理論的な検討を行った
- c) マジック角試料回転下で ^1H -X（希薄核），および，X（希薄核）- Y（希薄核）異種核間磁気双極子相互作用をリカップリングしながら照射核の同種核間磁気双極子相互作用をデカップリングする新規法の開発を各々の場合に関して行った。理論的計算まで完了した。
- d) 分子科学研究所の瀬川泰知准教授のグループで独自に合成された有機分子の状態解析を固体 NMR を用いて行ってきた。 ^1H 核が少ないことから天然存在比同位体観測による構造同定は有効な手法が限られていたが，残留不純物の同定，および ^{13}C 核信号帰属を達成した。当該分子 2 種に関して信号帰属を完了し，学術論文として発表した。
- e) 現在使用している Bruker 社製分光器，および周辺機器と完全互換性を有する独自の固体 NMR プローブの開発を行ってきた。この目的の為，4mm 試料管を対象とした自作のスピニングモジュールを開発してきた。第 4 世代の同モジュールは，メーカー純正の最高回転周波数を大幅に超越する回転周波数を達成した。しかし，そのような回転周波数ではメーカー製ジルコニア試料管では強度不足であることが判明した。このため，市販品と互換であるが独自構造の試料管を窒化ケイ素を用いて製作することに成功した。Bruker 社製プローブに設置可能な互換型モジュールの第 5 世代版を開発した。エアータービン完成し，ベアリング部の最適化のみが残っている状態であり，モジュールとしては完成した。また，2.5mm 試料管用独自スピニングモジュールの開発も開始した。本モジュールもエアータービンは完成し，ベアリング部の最適化のみが残っている状態であり，モジュールとしては完成した。これらモジュールに最適化した独自の 600 MHz 固体 NMR プローブを開発している。

B-1) 学術論文

K. WATANABE, J. USUBA, Y. HIJIKATA, T. TOYA, Y. TOYOTA, Y. KOBAYASHI, R. MATSUDA, K. NISHIMURA, H. SUGIYAMA and Y. SEGAWA, “Synthesis of Fully Fused Tetrapyrazinoporphyrazine Polymers Bearing Three-Dimensional Structures Controlled by Steric Repulsion,” *Chem. Commun.* **61**, 2822–2825 (2025). DOI: 10.1039/d4cc06293k

B-8) 大学等での講義, 客員

総合研究大学院大学先端学術院, 講義「機能物性科学」, 2024年6月.

総合研究大学院大学先端学術院, 講義「機能生体分子科学」, 2025年1月–2月.

C) 研究活動の課題と展望

独自開発プローブのための要素開発として、最難関のスピンングモジュールの開発を行ってきたが、4mm 試料管用モジュールで市販品を超えた最高回転周波数を独自条件で達成できた。現状の設計で、同一試料管外径で世界最高速を達成している。同研究分野ではより高速回転可能な 1 mm 以下の外径の試料管用モジュール開発が最もホットな領域である。これまでの 4mm 試料管用モジュールの開発で得られた知見を用いて、bruker 社製試料管と互換性のある 2.5mm, 1.9mm, 1.3mm の回転モジュールの開発を予定している。

一方、固体NMR 測定では、これまで分光器のエア配管の鋭利な刃物による連日の切断などのセキュリティ問題があったため、監視カメラを設置しており、物理的な被害はその後確認されていない。しかし、測定では、パルスプログラムと異なる強度、位相でのパルス照射が観測され、制御ワークステーションの不可思議な挙動が観測されており、制御ワークステーションへのサイバー攻撃が強く示唆される状況にあるため、測定を停止していた。これらの問題に対処するため、2024年2月に中国へ渡航し、同国の University of Science and Technology of China の研究者と国際共同研究を開始した。しかし、2024年4月末頃国際共同研究代表者の他機関への転出が確定し、国際共同研究の継続が困難になった。2024年中に安全な測定が可能な国際共同研究先を検討したが、困難であることが判明した。

また、私のPC 使用時にもネットワーク、およびPC の不可思議なトラブルが多発し、ネットワーク管理室に連絡すると共に所長へも報告してきたが、多くの事象について問題解決には至らず、日々深刻化している。これらもワークステーション同様のサイバー攻撃が強く示唆されるが、所からの十分な対応は得られていない。以上の状況から、研究継続を実現するために来年度ではこのサイバー攻撃に用いられている無線電波を遮断するシールドボックス、およびシールドルームの導入を計画している。

4-7 生命・錯体分子科学研究領域

生体分子機能研究部門

青野 重利（教授）（2002年5月1日～2025年3月31日）＊）

野村 潤子（事務支援員）

川口 律子（事務支援員）

A-1) 専門領域：生物無機化学

A-2) 研究課題：

- a) バクテリアの走化性制御系における酸素センサーシステムの構造機能相関解明
- b) NiFe 型ヒドロゲナーゼ活性中心の生合成分子機構の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) HemAT は細菌の酸素に対する走化性制御系を担っている酸素センサータンパク質である。細菌の走化性制御系は、外部シグナルである誘引／忌避物質のセンサーとして機能するシグナルトランスデューサータンパク質（methyl-accepting chemotaxis protein (MCP)）と、シグナル伝達・制御に関与する Che タンパク質（CheA, CheW, CheY 等）から構成されている。本研究では、シグナル ON 状態である酸素結合型 HemAT, およびシグナル OFF 状態である還元型 HemAT の分子構造を明らかにし、両者の構造を比較することにより、HemAT による酸素センシングおよび、酸素に応答したシグナル伝達反応の分子機構解明を目的として研究を行なった。酸素化型および還元型 HemAT センサードメインの X 線結晶構造解析を行い、酸素化型は 2.50 Å 分解能、還元型は 2.36 Å 分解能でそれぞれ構造を決定した。酸素化型 HemAT, 還元型 HemAT いずれの場合も、His119 が軸配位子としてヘムに配位している。酸素化型 HemAT の近位側ヘムポケットでは、軸配位子である His119 の近傍に存在する Tyr129 が、3つの水分子を解して Glu168 との間で水素結合ネットワークを形成している。一方、還元型 HemAT では、この水素結合ネットワークは形成されていない。酸素化型 HemAT では、この水素結合ネットワークが存在することによりセンサードメインの C 末端ヘリックスが固定化されているのに対して、水素結合ネットワークが存在しない還元型 HemAT では、C 末領域がフレキシブルになっているものと推定される。センサードメインの C 末端ヘリックスは、センサードメインとシグナリングドメインを連結するリンカーとして機能している。このことは、HemAT 中のヘムに酸素が結合する（酸素がセンシングされる）ことにより、リンカー部分のコンフォメーション変化が誘起されることを示唆しており、このコンフォメーション変化が HemAT による酸素特異的なシグナル伝達に重要な役割を果たしていると考えられる。現在、この仮説を検証するため、X 線結晶構造解析、およびクライオ電顕単粒子解析による全長型 HemAT の構造解析を進めている。
- b) 本研究では、NiFe 型ヒドロゲナーゼ活性中心の構築に必要な CO の生合成を触媒する酵素 HypX の構造機能相関解明を目的として研究を行なった。本研究において決定した HypX の結晶構造を基に、次に示すような CO 生合成反応機構を提唱した。HypX の N 末ドメインと C 末ドメインでは、それぞれ異なる二つの化学反応が進行すると考えられる。N 末ドメインでは、反応基質として N 末ドメイン中のキャビティーに結合したホルミルテトラヒドロ葉酸か

ら CoA へのホルミル基転移反応が進行する。HypX の N 末ドメインに結合した N¹⁰-formyl-THF から CoA へのホルミル基転移反応が進行すると、ホルミル -CoA が反応中間体として生成する。生成したホルミル -CoA は、CoA 分子の末端部分に存在するホルミル基が、HypX の C 末ドメイン中の酵素活性サイトに位置するよう、キャビティー中で大きくそのコンフォメーションが変化すると考えられる。最終的に、C 末ドメイン中で、ホルミル -CoA からの CO 脱離反応が進行し、CO と CoA が生成する。ホルミル -CoA からの CO 生成反応は、これまでに全く報告例の無い、新規な反応である。

B-4) 招待講演

青野重利,「30年間のセンサータンパク質研究を振り返って」,生物無機化学シンポジウム 2025,大阪,2025年1月.

S. AONO, “Complex formation of the maturation factors responsible for Fe(CN)₂CO biosynthesis in NiFe-hydrogenase,” Frontier Bioorganization Forum, Taipei (Taiwan), September 2024.

B-7) 学会および社会的活動

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構創発的研究支援事業事前評価外部専門家 (2023–2025).

C) 研究活動の課題と展望

2002年に岡崎に着任以来、非常に恵まれた研究環境で23年間の研究生活をおくらせていただきました。無事に定年退職を迎えることができ、研究の第一線からは退くこととなりますが、分子研OBの一人として、分子研の益々の発展を祈念しております。

*) 2025年3月31日定年退職

加藤 晃一（教授）（2008 年 4 月 1 日着任）

林 成一郎（特任研究員（IMS フェロー））

立尾 清吾（特任研究員）

斉藤 泰輝（特任研究員）

岩崎 美雪（研究員（派遣））

矢木 真穂（特別訪問研究員）

谷中 冴子（特別訪問研究員）

高木 克樹（特別共同利用研究員）

西崎 竜平（特別共同利用研究員）

磯野 裕貴子（特任専門員）

近藤 幸子（特任専門員）

西尾 美穂（技術支援員）

新美 しおり（技術支援員）

上條 真弘（技術支援員）

穂積 知佳子（技術支援員）

笠原 裕子（事務支援員）

福富 幸代（事務支援員）

A-1) 専門領域：構造生物学，タンパク質科学，糖鎖生物学，NMR 分光学

A-2) 研究課題：

- a) 生命分子ネットワークが創発する高次機能のメカニズム探査と設計と制御
- b) 極限環境において生命活動を司る分子集団の構造・動態・機能の解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 糖鎖修飾の舞台としてのゴルジ体に着目し，その微細構造の時空間ダイナミクスと糖タンパク質の輸送経路を探索する研究を進めた。本年度の主要な成果として，ExCELLS の糖鎖構造機能解析グループとの連携のもと，細胞内における糖鎖修飾を制御する「パスポート配列」の働きを明らかにした。この配列を糖タンパク質に組み込むことで，エリスロポエチンなどの糖タンパク質が特定のゴルジ体領域を通過し，シアル酸やガラクトースを含む糖鎖の形成が促進されることを見出した。また，ゴルジ体内の糖転移酵素の局在を 3 次元超解像イメージングで解析し，同じゴルジ区画に存在すると考えられていた酵素間にも局在の違いがあることを発見した。さらに，糖転移酵素の N 末端領域（細胞質ドメイン，膜貫通領域，ステム領域）が酵素の局在を決定する重要な因子であることを示した（理化学研究所・戸島拓郎博士との共同成果）。加えて，ゴルジ体を含む細胞小器官の 3 次元超微細構造解析を目的に，オスミウム浸軟法を活用した電子顕微鏡観察を実施した。本手法により，ゴルジ体，ミトコンドリア，小胞体の詳細な構造を直接観察し，ゴルジ体の立体構造と細胞・組織レベルでの分子局在の可視化を実現した（旭川医科大学・甲賀大輔博士との共同成果）。さらに，ヒトの糖鎖修飾に関する網羅的・体系的な情報を取得する「ヒューマングライコムプロジェクト」も，昨年度の着手段階から大きく進展し，精力的に推進している。加えて，国内外の共同研究を通じて，糖鎖修飾や糖タンパク質に関する研究を推進し，以下の成果を得た。

- ① NGLY1 欠損症に関与する SCF/FBS2 ユビキチンリガーゼによる糖鎖認識の構造基盤（理化学研究所・鈴木匡博士との共同成果）
 - ② 糖タンパク質の小胞体品質管理機構における UGGT1 の役割の解明（神戸大学・蛭川聡博士との共同成果）
 - ③ 免疫グロブリン C_L ドメインにおける補体系成分 C1 の結合部位の同定（大阪大学・宮ノ入洋平博士, ExCELLS 生命分子動態計測グループとの共同成果）
 - ④ プレセニリン欠損によるタンパク質糖鎖修飾異常と NPC1 機能障害を介した細胞内コレステロール蓄積のメカニズム解明（国際共著論文）
 - ⑤ COVID-19 のパンデミックを通じて明らかとなったウイルス感染症と糖鎖修飾の関係性、特に糖鎖がウイルス受容体認識や免疫応答に果たす役割に焦点を当て、パンデミック後の糖鎖研究の新たな課題と展望を議論（国際共著論文）
- b) 極限環境において生命活動を司る分子集団の構造・動態・機能を解析することで、生命の環境適応の仕組みを理解するとともに、得られた知見に基づく生物工学的な応用研究を展開することを目指している。本年度は、ExCELLS の生命分子動態計測グループおよび生命分子動態シミュレーション研究グループとの共同研究を通じて、アミロイド β (A β) 線維の成長過程における抗体との相互作用を 1 分子レベルで動的に観察し、抗体が線維形成を抑制する分子機構の解明に取り組んだ。その結果、A β の線維成長は、2 本のプロトフィラメントが交互に伸びる「伸長期」と、線維の成長が一時的に停止する「停止期」が断続的に繰り返されることが明らかとなった。特に、伸長期には A β モノマーが 2 本のプロトフィラメントに交互に付加する様子が観察され、一方で、2 本のプロトフィラメントの先端が揃った状態では、線維の成長が一時的に停止することを見出した。さらに、特異的抗 A β 抗体 4396C が、この停止状態にある線維の先端に選択的に結合し、線維のさらなる伸長を効果的に阻害することを明らかにした。高速原子間力顕微鏡によるこれらの観察結果と分子シミュレーションを組み合わせることで、A β 線維形成過程における動的な集合メカニズムを分子レベルで深く理解することができた。本研究の成果は、A β 線維形成過程の基盤的な理解を進めるとともに、アルツハイマー病の進行を阻止する新たな予防法および治療法の開発につながる可能性を示唆している。一方、微小重力環境下で形成されたアミロイド線維の構造研究においては、物質・生命境界領域研究グループと共同で、地上で形成された野生型 A β 線維におけるユニークな J 字型プロトマー構造を決定し、論文として発表した。現在、野生型に加えて家族性変異型 A β についても、クライオ電子顕微鏡を用いた精密構造解析を進めている。また、深海・地下生命研究グループとの共同研究として、深海微生物の糖鎖構造解析に関する成果を論文として発表した。また、さらに、極限環境耐性研究グループおよび定量生物学研究グループとの共同研究により、クマムシ固有タンパク質 CAHS-1 の機能解析を進めるとともに、東京理科大学の武村政春博士との共同研究として、巨大ウイルスにおける糖鎖修飾メカニズムの解明にも引き続き取り組んでいる。

B-1) 学術論文

P. ARUNRATTIYAKORN, C. JUIPRASERT, S. M. KOULAS, P. BOONSRI, T. AREE, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and D. D. LEONIDAS, “Synthesis and Evaluation of Tetrahydrobenzo[cd]indole Derivatives as Glycogen Phosphorylase Inhibitors,” *Med. Chem. Res.* **34**, 870–881 (2025). DOI: 10.1007/s00044-025-03384-7

R. N. BURTON-SMITH, M. YAGI-UTSUMI, S. YANAKA, C. SONG, K. MURATA and K. KATO, “Elucidating the Unique J-Shaped Protomer Structure of Amyloid- β (1-40) Fibril with Cryo-Electron Microscopy,” *Int. J. Mol. Sci.* **26**(3), 1179 (2025). DOI: 10.3390/ijms26031179

H. YAGI, R. YAMADA, T. SAITO, R. HONDA, R. NAKANO, K. INUTSUKA, S. TATEO, H. KUSANO, K. NISHIMURA, S. YANAKA, T. TOJIMA, A. NAKANO, J. FURUKAWA, M. YAGI-UTSUMI, S. ADACHI and K. KATO, “Molecular Tag for Promoting *N*-Glycan Maturation in the Cargo Receptor-Mediated Secretion Pathway,” *iScience* **27**, 111457 (2024). DOI: 10.1016/j.isci.2024.111457

S. NINAGAWA, M. MATSUO, D. YING, S. OSHITA, S. ASO, K. MATSUSHITA, M. TANIGUCHI, A. FUEKI, M. YAMASHIRO, K. SUGASAWA, S. SAITO, K. IMAMI, Y. KIZUKA, T. SAKUMA, T. YAMAMOTO, H. YAGI, K. KATO and K. MORI, “UGGT1-Mediated Reglucosylation of *N*-Glycan Competes with ER-Associated Degradation of Unstable and Misfolded Glycoproteins,” *eLife* **12**, RP93117 (2024). DOI: 10.7554/eLife.93117.4

M. YAGI-UTSUMI, Y. KANAOKA, S. MIYAJIMA, S. G. ITOH, K. YANAGISAWA, H. OKUMURA, T. UCHIHASHI and K. KATO, “Single-Molecule Kinetic Observation of Antibody Interactions with Growing Amyloid β Fibrils,” *J. Am. Chem. Soc.* **146**(46), 31518–31528 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c08841

S. NAKAGAWA, H. D. SAKAI, S. SHIMAMURA, Y. TAKAMATSU, S. KATO, H. YAGI, S. YANAKA, M. YAGI-UTSUMI, N. KUROSAWA, M. OHKUMA, K. KATO and K. TAKAI, “N-Linked Protein Glycosylation in Nanobdellati (formerly DPANN) archaea and Their Hosts,” *J. Bacteriol.* **206**, e00205-24 (2024). DOI: 10.1128/jb.00205-24

T. SATOH, M. YAGI-UTSUMI, N. ISHII, T. MIZUSHIMA, H. YAGI, R. KATO, Y. TACHIDA, H. TATENO, I. MATSUO, K. KATO, T. SUZUKI and Y. YOSHIDA, “Structural Basis of Sugar Recognition by SCFFBS2 Ubiquitin Ligase Involved in NGLY1 Deficiency,” *FEBS Lett.* **598**, 2259–2268 (2024). DOI: 10.1002/1873-3468.15003

S. YANAKA, A. KODAMA, S. NISHIGUCHI, R. FUJITA, J. SHEN, P. BOONSRI, D. SUNG, Y. ISONO, H. YAGI, Y. MIYANOIRI, T. UCHIHASHI and K. KATO, “Identification of Potential C1-Binding Sites in the Immunoglobulin CL Domains,” *Int. Immunol.* **36**(8), 405–411 (2024). DOI: 10.1093/intimm/dxae017

H. YAGI, S. TATEO, T. SAITO, Y. OHTA, E. NISHI, S. OBITSU, T. SUZUKI, S. SEETAHA, C. HELLEC, A. NAKANO, T. TOJIMA and K. KATO, “Deciphering the Sub-Golgi Localization of Glycosyltransferases via 3D Super-Resolution Imaging,” *Cell Struct. Funct.* **49**(2), 47–55 (2024). DOI: 10.1247/csf.24008

M. FABIANO, N. OIKAWA, A. KERKSIEK, J. FURUKAWA, H. YAGI, K. KATO, U. SCHWEIZER, W. ANNAERT, J. KANG, J. SHEN, D. LÜTJOHANN and J. WALTER, “Presenilin Deficiency Results in Cellular Cholesterol Accumulation by Impairment of Protein Glycosylation and NPC1 Function,” *Int. J. Mol. Sci.* **25**(10), 5417 (2024). DOI: 10.3390/ijms25105417

S. NAKAGAWA, H. IMACHI, S. SHIMAMURA, S. YANAKA, H. YAGI, M. YAGI-UTSUMI, H. SAKAI, S. KATO, M. OHKUMA, K. KATO and K. TAKAI, “Characterization of Protein Glycosylation in an Asgard archaeon,” *BBA Adv.* **6**, 100118 (2024). DOI: 10.1016/j.bbadva.2024.100118

B-3) 総説、著書

N. YAZDANPANA, C. SEDIKIDES, H. D. OCHS, C. A. CAMARGO JR., G. L. DARMSTADT, A. CERDA, V. CAUDA, G. J. PETERS, F. SELLKE, N. D. WONG, E. COMINI, A. R. JIMENO, V. GLOVER, N. HATZIARGYRIOU, C. E. VINCENOT, S. P. A. BORDAS, I. M. RAO, H. ABOLHASSANI, G. B. GHAREHPETIAN, R. WEISKIRCHEN, M. GUPTA, S. S. CHANDEL, B. O. OLUSANYA, B. CHESON, A. POMPONIO, M. TANZER, P. S. MYLES, W.-X. MA, F. BELLA, S. GHAVAMI, S. M. MOGHIMI, D. PRATICO, A. M. HERNANDEZ, M. MARTINEZ-URBISTONDO, D. M. URBISTONDO, S.-M. FERESHTEHNEJAD, I. ALI, S. KIMURA, A. W. HAYES, W. CAI, C. K. J. ERNEST, S.

THOMAS, K. RAHIMI, A. SOROOSHIAN, M. SCHREIBER, K. KATO, J. H. T. LUONG, S. PLUCHINO, A. M. LOZANO, J. F. SEYMOUR, K. S. KOSIK, S. G. HOFMANN, R. S. MCINTYRE, M. PERC, A. LEEMANS, R. S. KLEIN, S. OGINO, C. WLEZIEN, G. PERRY, J. J. NIETO, L. LEVIN, D. J. KLIONSKY, B. MOBASHER, T. DORIGO, N. REZAEI and USERN ADVISORY BOARD, “Global Challenges After a Global Challenge: Lessons Learned from the COVID-19 Pandemic,” *Adv. Exp. Med. Biol. (The COVID-19 Aftermath. Advances in Experimental Medicine and Biology)*, N. Rezaei, Ed., **1457**, 1–31 (2024). DOI: 10.1007/978-3-031-61939-7_1

H. YAGI, K. TAKAGI and K. KATO, “Exploring Domain Architectures of Human Glycosyltransferases: Highlighting the Functional Diversity of Non-Catalytic Add-On Domains,” *Biochim. Biophys. Acta, Gen. Subj.* **1868**, 130687 (2024). DOI: 10.1016/j.bbagen.2024.130687

K. F. AOKI-KINOSHITA, Y. AKUNE-TAYLOR, H. ANDO, K. ANGATA, M. FUJITA, J. FURUKAWA, H. KAJI, K. KATO, K. KITAJIMA, Y. KIZUKA, Y. MATSUI, K. NAKAJIMA, S. NISHIHARA, T. OKAJIMA, K. SAKAMOTO, C. SATO, M. THAYSEN-ANDERSEN, A. TOGAYACHI, H. YAGI, A. ZAPPA and K. KADOMATSU, “The Human Glycome Atlas Project for Cataloging All Glycan-Related Omics Data in Human,” *Glycobiology*, **34**, cwae077 (2024). DOI: 10.1093/glycob/cwae052

D. KOGA, S. KUSUMI, H. YAGI and K. KATO, “Three-Dimensional Analysis of the Intracellular Architecture by Scanning Electron Microscopy,” *Microscopy*, **73**, 215–225 (2024). DOI: 10.1093/jmicro/dfad050

矢木宏和, 加藤晃一, 「糖鎖構造のオミクス解析」, *細胞*, **56**, 260–262 (2024).

K. KATO, S. YANAKA and H. YAGI, “Technical Basis for Nuclear Magnetic Resonance Approach for Glycoproteins,” *Experimental Approaches of NMR Spectroscopy II*, The Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan, Ed., Springer Nature Singapore, 169–195 (2025).

B-4) 招待講演

加藤晃一, 「統合構造生物学における生命創成探究センターの取り組み」, よこはまNMR研究会, 横浜, 2025年3月.

矢木真穂, 「Biophysical characterization of protein assemblies with physiological and pathological interests」, 社会連携講座「タンパク包接PJ」総括講演会(兼成果報告会)ミニシンポジウム, 柏, 2025年3月.

矢木真穂, 「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」, 分子研研究会／スピン生命異分野研究会, 岡崎, 2025年2月.

加藤晃一, 「広がるExCELLSの連携ネットワーク:連携強化プラットフォームの活動」, 第7回ExCELLSシンポジウム, 岡崎, 2025年1月.

加藤晃一, 「糖鎖修飾のプログラム解読を目指したゴルジ体の動的構造探査」, 第3回タンパク質シンポジウム, 東京, 2025年1月.

加藤晃一, 「統合的構造生物学による抗体の構造・機能の探査」, 第76回構造生物応用研究会, 東京, 2025年1月.

加藤晃一, 「NMRプラットフォーム事業紹介:生命創成探究センター(ExCELLS)」, NMRプラットフォームシンポジウム2024, 東京, 2024年12月.

加藤晃一, 「糖鎖の4次元構造とゴルジ体のダイナミクス」, 第21回糖鎖科学コンソーシアムシンポジウム, 福島, 2024年11月.

齋藤泰輝, 立尾清吾, 足達俊吾, 戸島拓郎, 矢木宏和, 加藤晃一, 「近接依存性標識法を用いた分泌経路における分子ネットワークの解析」, 第 97 回日本生化学会大会, 横浜, 2024 年 11 月.

加藤晃一, 「緊急シンポジウム「日本の NMR コミュニティにおける喫緊の課題について」話題提供 1 「総論」」, 第 63 回 NMR 討論会, 札幌, 2024 年 10 月.

加藤晃一, 「糖鎖科学を基軸とする物質-生命協会探査の進展」, 物質-生命の境界探査 PF 報告会, オンライン開催, 2024 年 10 月.

矢木真穂, 「アルツハイマー病の解明に向けて: 宇宙実験で見た新たなアミロイド構造」, 第 27 回 SMJYC マンスリーウェビナー, オンライン開催, 2024 年 09 月.

加藤晃一, 「生きているとは何か? ExCELLS」, スピン生命フロンティア Spin-L 「若手の会」, 岡崎, 2024 年 9 月.

加藤晃一, 谷中冴子, 「非標識 NMR」, 令和 6 年度 AMED 創薬基盤推進研究事業「先端的生体医薬品の最適な実用化促進のための CMC 分野における創薬基盤技術の高度化に関する研究」第 1 回全体班会議, 川崎, 2024 年 8 月.

加藤晃一, 「糖タンパク質の超階層的設計原理の探究」, 創価大学糖鎖生命システム融合研究所コロキウム, 東京, 2024 年 7 月.

加藤晃一, 谷中冴子, 「抗体医薬品の高次構造評価に向けた非標識 NMR 法の開発と応用」, 第 24 回日本蛋白質科学会年会, 札幌, 2024 年 6 月.

矢木真穂, 「クマムシ由来 CAHS1 タンパク質の脱水に伴う繊維状コンデンセートの形成」, 第 24 回日本蛋白質科学会年会, 札幌, 2024 年 06 月.

K. KATO, “Dynamic glycan-protein interplays controlling the fates and functions of glycoproteins,” 2024 Frontier Bioorganization Forum, Taipei (Taiwan), September 2024.

S. YANAKA and K. KATO, “Unveiling Dynamic Interactions in IgG Glycoproteins: A Biophysical Approach for Therapeutic Antibody Design,” Japan-UK Strategic Partnership Workshop, Quantum Sensing in Biology—Spins for Sensing, Sensing of Spins, Tokyo (Japan), September 2024.

M. YAGI-UTSUMI, “Biophysical characterization of protein assemblies with physiological and pathological interests,” 2024 Frontier Bioorganization Forum, Taipei (Taiwan), September 2024.

S. YANAKA, “Biophysical characterization of dynamic structures and interactions of immunoglobulin G glycoproteins as therapeutic antibodies,” 第8回国際シンポジウム「NMR創薬」, 横浜, August 2024.

K. KATO and S. YANAKA, “Exploring Structural Glycobiology: Integrating NMR and Computational Approaches to Illuminate Antibody Functions,” ICMRBS 2024, Seoul (Korea), August 2024.

K. KATO, “NMR approach to structural glycobiology highlighting antibody functions,” Symposium “Future of NMR spectroscopy and more,” Göttingen (Germany), April 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本バイオイメーシング学会評議員 (1995–), 理事 (2012–), 副会長 (2021–2024), 会長 (2025–).

日本生化学会評議員 (2002–).

日本糖質学会評議員 (2003–), 理事 (2013–).

日本核磁気共鳴学会幹事 (2020–), 評議員 (2022–), 理事 (2024–).

日本蛋白質科学会理事 (2015–).

日本糖鎖科学コンソーシアム常任幹事 (2016–).

学会の組織委員等

The International Glycoconjugate Organisation, National Representative (2017–).

Universal Scientific Education and Research Network (USERN), Advisory board member (2021–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術会議連携会員 (2017–).

日本学術振興会先端科学 (FoS) シンポジウム事業委員会委員 (2018–).

日本学術振興会国際事業委員会書面評価員 (2024–).

科学技術振興機構創発の研究支援事業事前評価外部専門家 (2023–).

大阪大学蛋白質研究所「共同利用・共同研究」委員会超高磁場 NMR 共同利用・共同研究専門部会委員 (2012–).

日本医療研究開発機構プログラムオフィサー (2024–).

学会誌編集委員

Glycoconjugate Journal, Editorial board member (2009–).

World Journal of Biological Chemistry, Editorial board member (2010–).

Glycobiology, Editorial board member (2011–).

Scientific Reports, Editorial board member (2015–).

International Journal of Molecular Sciences, Editorial board member (2017–).

理科教育活動

理科年表 (国立天文台編) 監修者 (2018–).

B-8) 大学等での講義, 客員

名古屋市立大学薬学部, 大学院薬学研究科, 特任教授, 2008 年 4 月–.

名古屋市立大学薬学部, 講義「構造生物学」「薬学物理化学 II」「生命薬科学研究入門」「一般教養科目 創薬と生命」「創薬科学・知的財産活用論」「物理系実習 II」, 2015 年–.

名古屋市立大学大学院薬学研究科, 講義「創薬生命科学基礎 II」「生命分子構造学特論」, 2015 年–.

京都大学複合原子力科学研究所, ユニット研究員, 2022 年 4 月–2025 年 3 月.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構 CREST 研究 (受託研究), 「ゴルジ体の動態解明に基づく糖鎖修飾の制御」, 加藤晃一 (2021 年度–2025 年度).

科研費基盤研究 (A), 「糖タンパク質の動的 3 次元構造の設計原理の解明とバイオ医薬への応用」, 加藤晃一 (2024 年度–2026 年度).

文部科学省科学技術試験研究委託事業 (受託研究), 「NMR プラットフォーム」 (代表者: 理化学研究所), 加藤 晃一 (研究分担者) (2021 年度–2024 年度).

AMED 次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発事業,「国際競争力のある次世代抗体医薬品製造技術開発／革新的な次世代抗体医薬品製造基盤技術の開発(分子中に秘められた新規相互作用部位の探索と変化を通じた次世代抗体創成の基盤構築)」(代表: 谷中冴子), 加藤晃一(研究分担者)(2021年度-2025年度).

AMED 次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発事業,「国際競争力のある次世代抗体医薬品製造技術開発／次世代抗体医薬品の実用化に向けた物性・品質評価及び管理手法に関する技術的研究(次世代抗体医薬品の実用化に向けた品質評価及び管理手法に関する技術的研究)」(代表: 石井明子), 加藤晃一(研究分担者)(2021年度-2025年度).

科研費基盤研究(B),「系統的抗体糖鎖改変と有機合成糖鎖を用いた抗体機能強化」(代表者: 眞鍋史乃), 加藤晃一(研究分担者)(2024年度-2027年度).

C) 研究活動の課題と展望

これまでの成果をさらに発展させ, 複雑な生命分子システムを舞台とする分子科学を開拓する。すなわち, 具体的には, 生命分子システム内の各構成要素のダイナミックな振る舞いを「見る」アプローチを発展させると同時に, 得られたデータを情報科学的に「読む」ための手法も開発する。さらに, 階層横断的な機能解析を実施し, 外部環境の変動の中で秩序を創発していくロバストな生命の本質を統合的に理解することを目指す。生命体を構成する多様な分子素子がダイナミックに秩序を創出するメカニズムを理解するためには, 生命分子を取り巻く不均一で複雑な環境因子の影響を考慮する必要がある。微小重力環境下で形成したアミロイド線維の構造解析を継続し, 極限環境における生命活動を司る分子集団の構造, 動態, 機能の解析を通じて, 生命の環境適応のメカニズムを理解することを目指した研究を展開する。さらに, 第3の生命鎖とよばれる糖鎖の構造・機能・形成に関する統合的な研究を推進する。

飯野 亮太（教授）（2014 年 6 月 1 日着任）

大友 章裕（助教）

原島 崇徳（助教）

LAHORE, Juliette（インターンシップ）

山本 真由子（技術支援員）

川口 律子（事務支援員）

野村 潤子（事務支援員）

A-1) 専門領域：生物物理学，分子モーター，分子機械，1 分子計測，タンパク質工学

A-2) 研究課題：

- a) 回転分子モーター V-ATPase のエネルギー変換機構の解明，機能創成，特性解析
- b) 人工 DNA ナノ粒子モーターの運動機構解明，高性能化，運動制御能の付与
- c) リニア分子モーターキネシンとレールの改変・ハイブリッド化による運動制御と特性解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) V-ATPase (V_0V_1) は，ATP の化学エネルギーを利用して細胞膜を介するイオンの能動輸送を行う回転型イオンポンプであり，ATP 加水分解反応を触媒する V_1 とイオン輸送を担う V_0 の 2 つの回転分子モーターの複合体である。我々が研究対象としている腸球菌由来 V_0V_1 (EhV_0V_1) はナトリウムイオン (Na^+) を輸送する。我々は， EhV_0V_1 が脂質二重膜を介する Na^+ の電気化学ポテンシャルにより，高い熱力学的効率で ATP を合成することを明らかにし，エネルギー変換の可逆性を実証した。さらに， EhV_0V_1 のイオン結合部位を改変することで，イオン選択性を Na^+ から水素イオン (H^+) に変えることに成功し，クライオ電顕単粒子解析でその構造的基盤を解明した。
- b) タンパク質分子モーターに触発されて開発された DNA 人工分子モーターの運動速度は数 nm/s 程度であり，10–1000 nm/s で動くタンパク質分子モーターに比べて大きく劣る。我々は，DNA 修飾金ナノ粒子，RNA 修飾足場，DNA 依存 RNA 分解酵素で構成される DNA ナノ粒子モーターの運動機構と律速過程を高速高精度 1 粒子追跡と速度論シミュレーションで特定し，タンパク質分子モーターに匹敵する 100 nm/s の運動速度を達成した。しかしながら，運動速度と運動距離の間にトレードオフが存在し，運動速度の上昇とともに運動距離が低下することも明らかになった。そこで，シミュレーションによる予測に基づき DNA 塩基配列を改良し，高速運動，長距離運動，および高い一方向性を両立することに成功した。
- c) 2 本足で歩く分子モーターキネシン - 1 は，後足が前足を常に追い越すいわゆるハンドオーバーハンド機構で，レールである微小管上を直進運動する。我々は，人工分子 PEG でキネシンの 2 つの足を繋いだ生体–人工ハイブリッドキネシンが天然型と同様のハンドオーバーハンド機構で正確に直進運動することを明らかにした。また，剛直で長いタンパク質リンカーで 2 つの足を繋ぐと，微小管上を短いピッチでらせん運動することを明らかにした。さらに，3 本もしくは 6 本の足を持つ多脚型キネシンを創成し，野生型と異なり多脚型は微小管上の欠陥（穴）を迂回して運動し続けることが可能なことを明らかにした。

B-1) 学術論文

T. HARASHIMA, A. OTOMO and R. IINO, “Rational Engineering of DNA-Nanoparticle Motor with High Speed and Processivity Comparable to Motor Proteins,” *Nat. Commun.* **16**(1), 729 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-56036-0

A. OTOMO, J. WIEMANN, S. BHATTACHARYYA, M. YAMAMOTO, Y. YU and R. IINO, “Visualizing Single V-ATPase Rotation Using Janus Nanoparticles,” *Nano Lett.* **24**(49), 15638–15644 (2024). DOI: 10.1021/acs.nanolett.4c04109

K. SUZUKI, Y. GOTO, A. OTOMO, K. SHIMIZU, S. ABE, K. MORIYAMA, S. YASUDA, Y. HASHIMOTO, J. KURUSHIMA, S. MIKURIYA, F. L. IMAI, N. ADACHI, M. KAWASAKI, Y. SATO, S. OGASAWARA, S. IWATA, T. SENDA, M. IKEGUCHI, H. TOMITA, R. IINO, T. MORIYA and T. MURATA, “Na⁺-V-ATPase Inhibitor Curbs VRE Growth and Unveils Na⁺ Pathway Structure,” *Nat. Struct. Mol. Biol.* **32**, 450–458 (2025). DOI: 10.1038/s41594-024-01419-y

T. NAKAMURA, Y. SHINOZAKI, A. OTOMO, T. URUI, M. MIZUNO, R. ABE-YOSHIZUMI, M. HASHIMOTO, K. KOJIMA, Y. SUDO, H. KANDORI and Y. MIZUTANI, “Unusual Vibrational Coupling of the Schiff Base in the Retinal Chromophore of Sodium Ion-Pumping Rhodopsins,” *J. Phys. Chem. B* **128**(32), 7813–7821 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c04466

B-4) 招待講演

飯野亮太, 「回転型ATPaseのイオン輸送の一方向性について」, 日本生体エネルギー研究会第50回討論会パネルディスカッション「イオン駆動力を考える」, 名古屋, 2024年12月.

飯野亮太, 「たんぱく質でできたとても小さな機械」, いいかげんなロボット展 2024, 東京, 2024年9月.

R. IINO, “Optical tracking and rational engineering of DNA-nanoparticle artificial motor with high speed and processivity comparable to motor proteins,” 65th Annual Meeting of the Biophysical Society, Workshop, “Enabling Technologies: From Atoms, Optics, and Beyond,” Los Angeles (USA), February 2025.

R. IINO, “Engineering Biological and Artificial Molecular Motors,” The 1st International Symposium on Molecular Materials for Future (1st ISMMF), Sendai (Japan), February 2025.

R. IINO, “Rational engineering of DNA-nanoparticle artificial motor with high speed and processivity comparable to motor proteins,” 17th International Symposium on Nanomedicine (ISNM2024), Nagoya (Japan), December 2024.

R. IINO, “Engineering Cyborg Molecular Motors and Motor Systems,” 2024 IEEE International Conference on Cyborg and Bionic Systems (CBS2024), Nagoya (Japan), November 2024.

R. IINO, “Rational engineering of DNA-nanoparticle artificial motor with high speed and processivity comparable to motor proteins,” East Asian Single-molecule Biophysics Symposium (EASMB) 2024, Busan (Korea), November 2024.

A. OTOMO, L. ZHU, M. YAMAMOTO, Y. OKUNI, T. HARASHIMA and R. IINO, “Sodium motive force-driven ATP synthesis by EhV-ATPase,” IUPAB2024, Kyoto (Japan), June 2024.

B-5) 特許出願

WO2025013877(A1), “Protein, and Method for Decomposing Polyethylene Terephthalate,” T. MATSUZAKI, F. YAMAZAKI, T. SAEKI, A. NAKAMURA, R. IINO and N. KOGA (National Institutes of Natural Sciences), 2024年.

B-6) 受賞, 表彰

原島崇徳, IUPAB 2024 Student and Early Career Researcher Poster Award (2024).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

アメリカ生物物理学会評議員 (2025–2028).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

東京大学物性研究所外来研究員等委員会委員 (2024–2026).

科学技術振興機構出資事業投資委員会審議に係る助言者 (2024).

学会誌編集委員

米国生物物理学会誌 *Biophysical Journal*, Editorial Board Member (2020–2025).

日本生物物理学会誌 *Biophysics and Physicobiology*, Editorial Board Member (2024–2025).

理科教育活動

施設見学時講演会講師, 山梨県立日川高等学校 (2024). (原島崇徳)

指導・助言者「課題研究「SAII」中間発表会」愛知県立豊田西高等学校 (2024). (原島崇徳)

その他

森野基金運営委員会委員 (2024–2026).

B-8) 大学等での講義, 客員

総合研究大学院大学先端学術院, 「機能生体分子科学」, 2022 年 4 月–.

慶應義塾大学理工学部, 非常勤講師, 「応用物理学第 1」, 2024 年 4 月–9 月.

総合研究大学院大学先端学術院, 「機能物性科学」, 2024 年 4 月–2025 年 3 月.

総合研究大学院大学先端学術院, 「基礎生体分子科学」, 2021 年 4 月–.

静岡大学, 非常勤講師, 2024 年 10 月–2025 年 2 月. (原島崇徳)

B-10) 競争的資金

科研費学術変革領域研究(A), 「生体分子モーターに匹敵する速さで動き制御可能な人工分子モーターをつくる」, 飯野亮太 (2023 年度–2024 年度).

科研費基盤研究(B), 「ナトリウムイオン輸送性回転イオンポンプ V-ATPase のエネルギー変換機構の解明」, 飯野亮太 (2024 年度–2026 年度).

自然科学研究機構 OPEN MIX LAB (OML) 公募研究プログラム (若手支援型), 「新しい分子モータータンパク質の創生を目指したボトムアップアプローチ」, 大友章裕 (2023 年度–2025 年度).

科研費若手研究, 「V-ATPase のナトリウム駆動力による回転 1 分子観察とイオン / ATP 共役比の改変」, 大友章裕 (2024 年度–2026 年度).

科研費若手研究, 「生体分子モーターに匹敵する速度で駆動する二輪駆動型 DNA モーターカーの開発」, 原島崇徳 (2023 年度–2025 年度).

科研費学術変革領域研究(A),「メゾヒエラルキー人工分子モーター「DNA 水車」の設計と運動の可視化」, 原島崇徳 (2024年度-2025年度).

科学技術振興機構 ACT-X 研究,「生命と情報」研究領域,「多価DNA 人工分子モーターの合理的性能向上」, 原島崇徳 (2024年度-2026年度).

B-11) 産学連携

共同研究, 静岡大学, 大阪大学, キリンホールディングス(株),「PET 分解酵素の開発」, 飯野亮太 (2021年度-2024年度).

共同研究, 静岡大学, ポリプラスチックス(株),「ポリブチレンテレフタレート (PBT) 分解酵素の創出」, 飯野亮太 (2023年度-2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

生体分子モーター等のナノサイズの生体分子機械は, 人間が作ったマクロなサイズの機械と比べてはるかに小さく, ブラウン運動の活用等, 全く異なる作動原理で働く。今後も引き続き, 天然の分子モーターを1分子計測して機構を調べるだけでなく, 天然に存在しない分子モーターを積極的につくることで, その作動原理と設計原理をさらに深く理解し, 機能向上や制御に繋げる。例えば, 1回転で2倍のイオンを輸送する V_0V_1 をつくることで, ATP 加水分解モーター V_1 とイオン輸送モーター V_0 のエネルギー変換の共役機構の理解を深めるだけでなく, イオン輸送速度や電気化学ポテンシャル形成能を制御する。また, ヘテロな塩基配列を有するDNA ナノ粒子モーターを二量体化して外部からのDNA 添加で運動方向の制御を可能にし, センサー機能とアクチュエーター機能を兼ね備えた高速高制御人工分子モーターを創成する。さらに, 非天然型キネシンだけでなく非天然型のレール(微小管)を創成して組み合わせ, 選別輸送, 速度変調輸送, 大規模一方向輸送等を実現する。

錯体触媒研究部門

魚住 泰広（教授）（2000 年 4 月 1 日着任）

塚本 兼司（特任助教）

田澤 文（研究員（派遣））

ZHANG, Kaili（大学院生）

服部 修佑（大学院生）

谷分 麻由子（事務支援員）

A-1) 専門領域：有機合成化学，有機金属化学

A-2) 研究課題：

- a) 不均一反応メディア中での触媒反応システムの構築
- b) 光触媒を利用した分子変換反応の開発
- c) 新しい遷移金属錯体触媒・ナノ構造触媒の創製

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) パラジウム，ロジウム，銅錯体触媒などを両親媒性高分子に固定化するとともに機能修飾することで，これら遷移金属錯体触媒有機変換工程の多くを完全水系メディア中で実施することに成功した。水中不均一での高立体選択的触媒反応の開発を世界にさがけて成功した。
- b) 新しいピンサー錯体の合成方法論を確立し，それらピンサー錯体分子が自発的に集積することで形成する分子集合体の三次元高次構造に立脚した新しい触媒機能システムの開拓に注力しつつある。
- c) 水中での反応加速，連続フローシステムに依る効率化，ピンサー錯体触媒化学における新しい反応形式などに立脚して各種反応の ppm-ppb 触媒化を進めつつある。
- d) 超高触媒活性を示す単原子触媒種の発生・発現を見出し，その構造評価および有機分子変換触媒としての適用一般性を確立しつつある。
- e) 遷移金属錯体を用いた光触媒反応による新しいカルボニル化合物の活性化と，それに立脚した分子変換反応の開発を遂行しつつある。特に光触媒によるカルボニル基の極性転換に成果を上げつつある。
- f) 新しい有機光触媒を創製し有機分子変換上の未踏反応を開拓しつつある。特にジアザベンツアゼナフテン骨格を有する新触媒を設計合成し，それによるエステル類の可視光による光触媒還元成功した。

B-1) 学術論文

T. SAKAGUCHI, K. FUKUOKA, T. MATSUKI, M. KAWASE, A. TAZAWA, Y. UOZUMI, Y. MATSUMURA, O. SHIMOMURA and A. OHTAKA, “Silver-Mediated Homocoupling of Arylboronic Acids,” *Synlett* **36(2)**, 161–165 (2025).
DOI: 10.1055/a-2315-8369

K. ZHANG, S. OKUMURA and Y. UOZUMI, “Transfer Hydrogenolysis of O- and N-Benzyl Groups in Water with Tetrahydroxydiboron by Using an Amphiphilic Polymer-Supported Nano-Palladium Catalyst,” *Eur. J. Org. Chem.* **27(26)**, e202400322 (2024). DOI: 10.1002/ejoc.202400322

S. OKUMURA, S. HATTORI, L. FANG and Y. UOZUMI, “Multielectron Reduction of Esters by a Diazabenzacenaphthenium Photoredox Catalyst,” *J. Am. Chem. Soc.* **146(25)**, 16990–16995 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c05272

K. ZHANG, S. OKUMURA and Y. UOZUMI, “Transfer Hydrogenation of Aldehydes and Ketones with Tetrahydroxydiboran in Water by an Amphiphilic Resin-Supported Nano-Palladium Catalyst,” *Chem. Lett.* **53(5)**, upae082 (2024). DOI: 10.1093/chemle/upae082

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

有機合成化学協会支部幹事 (1998–).

学会の組織委員等

名古屋メダル実行委員 (2000–).

有機金属討論会組織委員 (2012–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

京都大学エネルギー理工学研究所共同利用運営委員会委員 (2023–2025).

学会誌編集委員

SYNLETT 誌アジア地区編集主幹 (2002–).

SYNFACTS 誌編集委員 (2005–).

B-9) 学位授与

ZHANG, Kaili, “Development of Tetrahydroxydiboron-Mediated Reductive Molecular Transformations in Water by Use of an Amphiphilic Resin-Supported Palladium Nanocatalyst,” 2024 年 9 月, 博士 (理学).

服部修佑, 「Multielectron Reduction of Esters and Amides Using a Diazabenzacenaphthenium Photoredox Catalyst」, 2025 年 3 月, 博士 (理学).

C) 研究活動の課題と展望

2000 年にゼロからのスタートを切った精密有機分子変換反応の aqueous-switching, heterogeneous-switching の試みも十分な成果と蓄積を得てきた。理想の有機分子変換を標榜した当研究室の歩みの中で多くの水中機能性固定化錯体触媒, 水中機能性固定化ナノ金属触媒を開発し, その幾つかは汎用性ある触媒として市販されるに至っている。これらの研究は科学研究費補助金 (基盤研究, 新学術研究など) にくわえ, 多くの競争的外部研究費を得て推進してきた。即ちこれまでに水中機能性固定化触媒に関する「グリーンナノ触媒」CREST 研究 (2002 年 10 月–2008 年 3 月), 続いてその成果を実践的に発展させる METI-NEDO プロジェクト (2008 年 9 月–2012 年 2 月), 稀少元素の元素循環・元素減量・元素代替に焦点を当てた「元素戦略」CREST 研究 (2011 年 10 月–2017 年 3 月) を展開してきた。さらに 2014 年 12 月から ACCEL 研究 (2014 年–2020 年) に採択され「超活性固定化触媒開発に立脚した基幹化学プロセスの徹底効率化」研究を進めつつある。また自己集積錯体触媒研究は 2007 年以降, 理化学研究所フロンティア研究に指名

され、同研究所・環境資源科学研究センターにて展開した(2007年－2019年)。現在、魚住の本拠地である分子科学研究所に於いては、次の研究の萌芽を見いだし育てる研究にも大いに注力しており、幾つかの新機軸候補課題の中から大きな発展に繋がる新課題を見いだしつつある。なかでも最近は未開拓元素群の触媒反応性(とくにCu, Fe, Ag)の探索と確立、さらには分子の自己集積化に立脚した触媒機能の自発的獲得など目指した研究開発を推進しつつある。また分子研内外の研究者とチームで取り組み遷移金属触媒カップリング反応の極端紫外光分光を利用したオペランド観察による反応機構解析、企業との産学連携による基幹的有機化合物の工業生産プロセスへの展開研究などの共同研究に取り組みつつある。さらに、基礎研究として、これまでの高活性触媒の設計概念と駆動原理を駆使し、従来パーセント量の利用が常識であった化学変換触媒をppm-ppb量のレベルへと転換すべく研究に取り組んでいる。これは触媒活性の 10^4 – 10^7 向上を意味し「改善」を凌駕する「飛躍」が要求される圧倒的な高活性化であり、学術的にも大きなチャレンジである。また特にグループ内での奥村博士(2024年3月転出：現京都大学)との協働により新規な光触媒の開発を推進し、従来にないカルビノール基の極性転換反応を開発・展開し、更にはエステル基の光触媒還元を世界に先駆けて実現した。本課題は現在も京都大学との共同研究として継続され大きな成果を上げつつある。

楳山 儀恵（准教授）（2014 年 6 月 1 日着任）

大塚 尚哉（助教）
加藤 雅之（大学院生）
寺島 悠人（大学院生）
西岡 雪奈（技術支援員）
中井 愛里（技術支援員）
原田 晋子（技術支援員（派遣））
丸山 莉央（技術支援員（派遣））
牛田 妃菜乃（事務支援員（派遣））

A-1) 専門領域：有機合成化学

A-2) 研究課題：

- ペルフルオロハロゲン化ベンゼンを基盤とする触媒機能の体系化
- ハロゲン結合を活用する高分子触媒反応場の開発
- 三中心四電子ハロゲン結合を活用するハレニウム錯体触媒の創成と触媒機能の開拓
- 全フッ素ハロゲン化リレン化合物の精密合成と多機能性材料への応用
- 化学反応空間の構築と有機合成反応開発への応用
- 自動有機合成システムの構築と有機合成への応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- 種々のペルフルオロヨードベンゼンが、ピリジンとアリルシラトランとのアリル化反応、クロチル化反応、プレニル化反応の触媒として機能することを見出した。江原グループとの共同研究、岡山大自然生命科学研究支援センターでの HOESY 測定により、本反応の触媒作用機構を明らかにした。触媒母骨格の立体的影響ならびに電子的影響を詳細に調査し、鈴木敏泰チームリーダーとの共同研究により、反応の駆動力と推測される分子間の静電相互作用を計算化学的に示すことに成功した。現在、ペルフルオロハロゲン化ベンゼンを基盤とする触媒機能の体系化を試みている。次年度の掲載決定に向け、機械学習によるデータ解析結果を加え、論文の改訂と実験項の作成を進めている。
- ハロゲン結合供与部位を有する高分子と DMAP から調製した高分子触媒が、水中でのアシル基転移反応に有効であることを見出した。産総研触媒化学融合研究センター田中主任研究員と共同研究を実施し、固体 DNP-NMR 測定により高分子触媒中の DMAP とそのハロゲン結合供与能を検証した。分光学的に触媒活性中心となる DMAP を同定することに初めて成功した。共同研究の成果について、現在、論文を執筆中である。さらに、ハロゲン結合供与部位を有する高分子を溶媒の代替として用いることで、本触媒反応システムを ppm レベルの触媒反応へと展開することに成功した。岐阜医療科学大学の萬代准教授と共同研究において ppm レベルでの不斉触媒化に挑戦し、開発した不斉高分子触媒がエナンチオ選択性の発現に有効であることを明らかにした。
- エチニルビスピリジンを配位子とするヨードニウム錯体やジアリールヨードニウムトリヨードの合成と構造解析に成功した。合成した錯体が、向山型反応や細見-櫻井反応において、極めて高い触媒活性を示すことを見出した。NMR や CSI-MS 測定により本錯体触媒の反応駆動力を実験化学的に検証した。これらの成果をもとに、新たなハレニウム錯体触媒を設計・開発した。様々な求電子剤に対して、多くのケイ素系求核剤を反応させることができることを見出した。

- d) 全フッ素ハロゲン化ベンゼンでは達成できない新規機能の探究を目的として、全フッ素ハロゲン化多環芳香族の精密合成を実施した。構成素子となる部分フッ素化ナフタレンの位置選択的フッ素化法を確立した。メタ位をヨウ素、臭素、塩素で置換した全フッ素ハロゲン化ペリレンの合成に成功した。全フッ素ハロゲン化ペリレンおよびその誘導体が、市販の全フッ素ハロゲン化ベンゼンとは異なる分子配列を形成し、ハロゲン元素の違いに伴う発光特性を有することを見出した。論文投稿に向けて、現在、物性データの収集中である。
- e) 化学反応の開発は、新規有機分子の精密合成を実現するうえで重要な鍵となる。合成研究から機能創成研究への迅速展開を目的として、これまで取り組んできた新規有機分子の合成と機能開拓に、情報科学手法を活用する反応開発システムの構築を進めている。静岡大武田准教授、山手機器センター鈴木敏泰チームリーダーと共同研究を実施し、機械学習と量子化学計算の融合による反応開発を行った。その結果、定量的な解析にもとづく反応条件の最適化が可能になり、反応収率の飛躍的な向上に成功した。本共同研究の成果について、学術誌に論文投稿中である。また、有機低分子の反応性の理解と定量化を実現する機械学習モデルの開発に成功した。アプリケーションとしての実装に向けて、マテリアルインフォマティクス企業と共同研究を実施し、アプリ開発を行った。さらに、市販試薬約40,000個の反応性パラメータを推算し、得られた推算値をもとに低分子医薬品の類縁体の合成に成功した。
- f) バッチ型有機合成の自動化は、実験操作の多様性から、材料化学や生命化学分野に比べて大きく遅れをとっている。ハイスループット合成装置の導入が代表的な自動化手法として知られているが、導入コストと取得データ量の多さから、十分に活用されていない。榎山グループでは、自動有機合成システムとしてCole-Parmer社のIntegrity-10を導入した。本システムは、10本のリアクターを独立制御でき、並列合成が可能である。各リアクターの温度、攪拌速度、反応時間を精密に設定できるため、反応条件の最適化が効率的に行える。さらに、システムはコンパクトな設計であり、ラボ内での柔軟な運用が可能である。現在、分離と評価の自動化システムを構築しながら、データ駆動型研究と本装置の融合研究を推進している。

B-1) 学術論文

K. TAKEDA, N. OHTSUKA, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Prediction Method for Reaction Yield of Deuteration of Polyfluoroperylene Using Generative AI Techniques,” *Comput.-Aided Chem. Eng.* **53**, 2689–2694 (2024). DOI: 10.1016/b978-0-443-28824-1.50449-x

N. OHTSUKA, H. OTA, S. SUGIURA, S. KAKINUMA, H. SUGIYAMA, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Perfluorohalogenated Naphthalenes: Synthesis, Crystal Structure, and Intermolecular Interaction,” *CrystEngComm* **26**, 764–772 (2024). DOI: 10.1039/d3ce01124k

B-4) 招待講演

榎山儀恵, 「有機合成化学者のためのケミカルスペースを考える：化学反応性の定量化と有機合成への応用」, IRCCSフォーラム産学共創ワークショップ, 名古屋市, 2025年3月.

榎山儀恵, 「暗黙知から形式知へ 有機合成のデジタル化を考える」, フロー・マイクロ合成研究会in加賀, 加賀市, 2025年1月.

榎山儀恵, 「全フッ素ハロゲン化多環芳香族の科学——デジタル有機合成からAI有機合成への挑戦——」, 第97回白鷺セミナー, 堺市, 2024年12月.

榎山儀恵, 「ハロゲンによる元素置換戦略：新たな機能性有機分子の創成をめざして」, 第55回中部化学関係学協会支部連合秋季大会, 名古屋市, 2024年11月.

楳山儀恵,「有機合成のデジタル化に基づく分子性ハロゲンの精密合成科学」,第1回東海ハロゲン科学研究会,静岡市,2024年9月.

楳山儀恵,「デジタル有機合成から有機合成DXへ」,日本化学会関東支部2024年度講演会「有機合成とDX——基礎／探索から製造プロセスまで——」,オンライン開催,2024年9月.

楳山儀恵,「ハレニウム錯体触媒の創成:化学反応の地図づくりから低分子医薬品類縁体合成への展開」,第182回創薬科学セミナー／GTRセミナー,名古屋市,2024年6月.

楳山儀恵,「全フッ素ハロゲン化多環芳香族化合物の科学:合成・構造・相互作用」,第20回フッ素相模セミナー,綾瀬市,2024年6月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

日本プロセス化学会東海地区フォーラム幹事(2021-).

B-8) 大学等での講義,客員

九州大学,集中講義講師,2025年1月.

B-10) 競争的資金

科研費学術変革領域研究(A)(計画研究),「精密合成を迅速に実現する全データ駆動型反応開発システムの構築」(代表:楳山儀恵),大塚尚哉(研究分担者)(2021年度-2025年度).

科研費学術変革領域研究(A),「デジタル化による高度精密有機合成の新展開」総括班(代表:大嶋孝志),楳山儀恵(研究分担者)(2021年度-2025年度).

科研費基盤研究(C),「フッ素化ペリレン化合物の合成とデバイスへの応用」(代表:鈴木敏泰),楳山儀恵(研究分担者)(2023年度-2025年度).

科学技術振興機構ムーンショット型研究開発事業(受託研究),「人と融和して知の創造・越境をするAIロボット」(代表者:牛久祥孝),「汎用型有機合成ロボットの活用による反応条件予測AI」,楳山儀恵(研究分担者)(2024年度-2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

当グループでは,精密合成化学を基盤として,有機機能性分子の設計・合成・機能化を進めている。これまでに,種々の新規ハロゲン分子の精密合成に取り組み,これらの分子が,触媒分子として機能することを見出してきた。特に,所内外の研究グループと共同研究を実施することで,ハロゲン原子を起点とする様々な分子間相互作用を詳細に考察し,これらの分子間相互作用が開発した触媒の機能発現に重要な役割を果たしていることを実証している。2024年度は,これまで取り組んできた研究成果を学術論文としてまとめ,現在,2報の論文を*ChemRxiv*で公開中であり,2025年度中の論文掲載を目指す。また,執筆途中の論文が6報あり,2025年度はこれらの論文投稿に注力する。従来法による反応および触媒の開発に加え,インフォマティクスを活用した次世代精密有機合成システムの構築に尽力し,有機ハロゲン分子の精密合成から機能創成への研究展開を加速する。

今後は,有機合成のデジタル化を推進しながら,新たな分子性触媒・分子変換反応を開発する。さらに,機能性有機分子材料の開発へと研究を展開することで,ハロゲン元素の触媒科学から精密合成情報科学の学理構築を目指す。近い将来,本研究の成果が,新機能性物質創成の有力な手段として用いられることを目標に,引き続き研究を遂行する。

錯体物性研究部門

瀬川 泰知（准教授）（2020 年 4 月 1 日着任）

張本 尚（助教）
杉山 晴紀（特別訪問研究員）
廣田 宗士（大学院生）
渡邊 幸佑（大学院生）
吉田 瑠（大学院生）
加納 春華（大学院生）
中野 さち子（技術支援員（派遣））
平田 直（技術支援員（派遣））
谷分 麻由子（事務支援員）

A-1) 専門領域：有機合成化学，構造有機化学

A-2) 研究課題：

- a) 3次元幾何構造をもつ機能性有機構造体の合成と機能
- b) トポロジカル π 共役分子の創製
- c) 電子回折結晶構造解析の有機機能性材料開発への活用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 我々は、フタロシアニンの類縁体であるテトラピラジノポルフィラジン（TPyzPz）が3次元的に縮環構造で組み上がったネットワークポリマーの合成に成功した。TPyzPzを鞍状にひずませる大きさの置換基を量子化学計算より特定し、これを置換基にもつモノマーの重合によってネットワークポリマーを得た。得られたポリマーはTPyzPz分子よりも長波長である近赤外領域に吸収をもつことから、 π 共役が伸長した電子構造をもつことが分かった。二酸化炭素ガスの吸着能があることから、ナノ空孔を有するネットワークポリマーであることが示唆された。この成果は縮環 π 共役ポリマーの化学を3次元周期構造へと拡張させるものであり、「パズルのように空間を敷き詰める」有機合成化学を体現するものである。
- b) 生理学研究所村田研究室との共同研究によって、透過型電子顕微鏡を用いた電子回折構造解析（MicroED）の実施に成功した。合成中間体として得られた不溶性の π 共役分子2種について、カラムクロマトグラフィーや再結晶といった精製操作をせず直接MicroEDを行ったところ、分子構造および結晶中における配列様式を決定することに成功した。本研究は不溶性 π 共役分子の構造決定という点で画期的であり、様々な不溶性・難溶性分子の合成化学の発展に資する成果である。
- c) テキサス大学オースティン校の鳥居教授、関西学院大学の村上准教授らによる「気孔発生司令因子の機能を妨害する化合物の発見」に関する研究に協力した。当グループがもつ単結晶X線構造解析技術および分子科学研究所のX線結晶構造解析装置を用いることで、鍵となる化合物の構造決定に成功し研究の進展に寄与した。

B-1) 学術論文

K. WATANABE, J. USUBA, Y. HIJIKATA, T. TOYA, Y. TOYOTA, Y. KOBAYASHI, R. MATSUDA, K. NISHIMURA, H. SUGIYAMA and Y. SEGAWA*, “Synthesis of Fully Fused Tetrapyrazinoporphyrazine Polymers Bearing Three-Dimensional Structures Controlled by Steric Repulsion,” *Chem. Commun.* **61**, 2822–2825 (2025). DOI: 10.1039/d4cc06293k

A. NAKAGAWA, K. M. SEPURU, S. J. YIP, H. SEO, C. M. COFFIN, K. HASHIMOTO, Z. LI, Y. SEGAWA, R. IWASAKI, H. KATO, D. KURIHARA, Y. AIHARA, S. KIM, T. KINOSHITA, K. ITAMI, S.-K. HAN, K. MURAKAMI* and K. U. TORII*, “Chemical Inhibition of Stomatal Differentiation by Perturbation of the Master-Regulatory bHLH Heterodimer via an ACT-Like Domain,” *Nat. Commun.* **15**, 8996 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-53214-4

H. SUGIYAMA*, K. WATANABE, C. SONG, K. MURATA and Y. SEGAWA*, “Structure Determination of Tweezer-Shaped π -Extended Tetraphenylenes by Microcrystal Electron Diffraction,” *Chem. Lett.* **53**, upae192 (2024). DOI: 10.1093/chemle/upae192

B-3) 総説, 著書

T. HARIMOTO and Y. ISHIGAKI, “Recent Advances in NIR-Switchable Multi-Redox Systems Based on Organic Molecules,” *Chem. –Eur. J.* **31**(3), e202403273 (2025). DOI: 10.1002/chem.202403273

B-4) 招待講演

瀬川泰知, 「ひずみを乗り越える3次元 π 共役構造の合成戦略」, 光機能物理化学セミナー, 滋賀県草津市, 2024年5月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第34回基礎有機化学討論会実行委員会 (2024). (張本 尚)

理科教育活動

出前授業「自然科学研究機構による授業」愛知県立岡崎北高等学校 (2024).

三重県立伊勢高等学校見学対応 (2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

名城大学理工学部, 非常勤講師, 2024年9月–2025年3月.

B-9) 学位授与

廣田宗士, 「含8員環 π 共役分子の設計・合成・性質解明および三次元有機構造体への展開」, 2025年3月, 博士(理学).

渡邊幸佑, 「Theoretical, synthetic, and crystallographic studies on three-dimensional polycyclic π -systems」, 2025年3月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「トポロジカル π 共役構造体の創製」瀬川泰知(2022年度–2024年度).

科学技術振興機構創発的研究支援事業(受託研究),「革新的有機半導体を指向した周期的3次元 π 共役構造体の創製」, 瀬川泰知(2022年度–2024年度).

村田学術振興・教育財団研究助成,「細くしなやかで強い半導体性有機材料の開発」, 瀬川泰知(2024年度–2025年度).
立松財団研究助成,「計算法学スクリーニングを併用した3次元電荷輸送材料の効率的探索と開発」, 瀬川泰知(2024年度–2025年度).

科研費研究活動スタート支援,「電荷移動相互作用を鍵とする π 共役分子の三次元集積の実現」, 張本 尚(2024年度–2025年度).

(公財)戸部眞紀財団研究助成,「酸化還元活性な有機分子ユニットをもちいた三次元集積体の精密構築」, 張本 尚(2024年度–2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

今年度は、当グループとして初となる3次元ネットワーク高分子の論文発表を行うことができた。

今後はさらに複雑なトポロジーをもつ有機分子や3次元ネットワーク高分子の合成および機能開拓を行い、既存の有機合成の限界を突破した物質創製研究を遂行していく。3次元的に複雑で、かつ非常に高い対称性をもった構造に着目し、有機合成化学によって幾何学的に要請される構造をもつユニットを精密に設計・合成し、さらにこれを高効率反応によって重合させることで、これまでにない物質創製を行っていく。また、当グループがもつ構造解析の技術・知見を活かして、今後も大学共同利用機関としての役割を果たしていく。

4-8 特別研究部門

藤田 誠（卓越教授（クロスアポイントメント*））（2018 年 4 月 1 日着任）

三橋 隆章（特任助教）

増田 道子（事務支援員）

* 東京大学国際高等研究所（2023 年 4 月 1 日～）

A-1) 専門領域：錯体化学，有機化学，超分子化学

A-2) 研究課題：

a) 結晶スポンジ法の二次代謝酵素の機能解析への応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 結晶スポンジ法は，結晶スポンジと呼ばれる多孔性の結晶に解析対象物を染み込ませることで，解析対象物を結晶内で整列させ，X線回折法により構造解析を達成する手法である。結晶スポンジ法を用いることで，小分子の構造決定を迅速に達成することができる。この結晶スポンジ法の有力な応用先として，二次代謝酵素の機能解析研究を挙げることができる。なぜならば，二次代謝酵素の機能解析を行う際，二次代謝酵素から生産される酵素産物を構造決定する過程が研究のボトルネックになることがしばしばあるためである。こうした背景から，我々は，結晶スポンジ法を活用した二次代謝酵素の機能解析研究を展開しており，特に本年度は，昨年度から着目している巨大ウイルス由来の二次代謝酵素について，補因子の種類により酵素産物に変化する現象を見いだすなどより詳細な解析を達成するとともに，結晶スポンジ法を用いた二次代謝物のコンフォメーション解析や，結晶スポンジを活用した二次代謝研究の新しいワークフローの提案などをおこなった。

B-1) 学術論文

R. EBIHARA, T. NAKAMA, K. MORISHIMA, M. YAGI-UTSUMI, M. SUGIYAMA, D. FUJITA, S. SATO and M. FUJITA, “Physical Isolation of Single Protein Molecules within Well-Defined Coordination Cages to Enhance Their Stability,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**(7), e202419476 (2025). DOI: 10.1002/anie.202419476

K. IIZUKA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, “Host-in-Host Complexation: Activating Classical Hosts through Complete Encapsulation within an M_9L_6 Coordination Cage,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**(6), e202422143 (2025). DOI: 10.1002/anie.202422143

E. TSUNEKAWA, M. FUJITA and T. SAWADA, “A Discrete Four-Stranded β -Sheet through Catenation of M_2L_2 Metal-Peptide Rings,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**(4), e202416442 (2025). DOI: 10.1002/anie.202416442

Y. DOMOTO, R. NAKABAYASHI, T. TSURUMI, K. YAMAMOTO, H. HAYASHI, Y. NAKAMURA and M. FUJITA, “Fine-Tuning of the Sequential Self-Assembly of Entangled Polyhedra by Exploiting the Side-Chain Effect,” *Chem. –Asian J.* **20**(6), e202401378 (2025). DOI: 10.1002/asia.202401378

K. IIZUKA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, “Template and Solid-State-Assisted Assembly of an M_9L_6 Expanded Coordination Cage for Medium-Sized Molecule Encapsulation,” *J. Am. Chem. Soc.* **146**(47), 32311–32316 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c14509

C. PARK, T. MITSUHASHI, N. WADA, T. KIKUCHI and M. FUJITA, “New Workflow for the Structure Elucidation of Trace Amount Natural Products with Microgram-Scale Crystalline Sponge Method: A Scaled-Down Genome-Mining Study,” *Chem. Lett.* **53(11)**, upae202 (2024). DOI: 10.1093/chemle/upae202

Y. JUNG, T. MITSUHASHI, K. KAGEYAMA, T. KIKUCHI, S. SATO and M. FUJITA, “Conformational Analysis of (+)-Germacrene D-4-ol Using the Crystalline Sponge Method to Elucidate the Origin of its Instability,” *Chem. –Eur. J.* **30(39)**, e202400512 (2024). DOI: 10.1002/chem.202400512

Y. JUNG, T. MITSUHASHI, T. KIKUCHI and M. FUJITA, “Functional Plasticity of a Viral Terpene Synthase, OILTS, that Shows Non-Specific Metal Cofactor Binding and Metal-Dependent Biosynthesis,” *Chem. –Eur. J.* **30(31)**, e202304317 (2024). DOI: 10.1002/chem.202304317

H. TAMURA, T. NAKAMA, A. ROSSEN, H. ISHIKITA and M. FUJITA, “Organic Solvent-Induced Structural Changes in a Protein Confined in a Giant Coordination Cage,” *Chem. Lett.* **53(5)**, upae101 (2024). DOI: 10.1093/chemle/upae101

B-4) 招待講演

M. FUJITA, “Self-Assembly of Gigantic Coordination Polyhedra: From Synthetic to Peptidic,” The International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry (ISMSC 2024), Hangzhou (China), May 2024.

M. FUJITA, “Molecular Confinement Effects in Self-assembled Cages,” 8th EuCheMS Conference on Nitrogen Ligands, Cassis (France), June 2024.

M. FUJITA, “Molecular confinement effects in self-assembled cages,” Curious 2024, Mainz (Germany), July 2024.

M. FUJITA, “Coordination Self-assembly: From Origins to the Latest Advances,” European Winter School on Physical Organic Chemistry, Bressanone (Italy), February 2025.

B-6) 受賞, 表彰

藤田 誠, Van't Hoff Award (2024).

B-7) 学会および社会的活動

学会誌編集委員

Chemical Science 誌, Editorial Board (2018–).

Acc. Chem. Soc. 誌, Editorial Board (2018–).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(S), 「フェムトからピコグラム量の極微量代謝物構造解析法の開発」, 藤田 誠 (2024年度–2029年度).

C) 研究活動の課題と展望

昨年度から続けている巨大ウイルス由来二次代謝酵素の結晶スポンジ法を用いた解析は、本年度も一定の成果があった一方、まだ解析すべき酵素が多数存在しており、引き続き研究を続けていくことで今後も様々な発見があると期待している。また今後は、結晶スポンジ法自体を、より微量の化合物をより簡便に構造解析することができる技術へと、更に発展させる研究にも力を入れていきたい。結晶スポンジ法をより強力な手法へと発展させることで、その応用の幅も大きく広がるものと期待している。

木村 真一（教授(クロスアポイントメント*)）(2020年4月1日～2025年3月31日)

栗田 佳子（事務支援員）

*大阪大学大学院生命機能研究科

A-1) 専門領域：物性物理学，量子ビーム科学

A-2) 研究課題：

- a) 機能性固体・薄膜の電子状態の分光研究
- b) 物質科学に向けた新しい放射光分光法の開発
- c) 新しい量子ビームを使った分析技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 機能性固体・薄膜の電子状態の分光研究：磁性と伝導が複雑に絡み合うことにより新しい機能性が現れる固体・薄膜について，低温・高圧・高磁場下の赤外・テラヘルツ分光と高分解能三次元角度分解光電子分光および時間分解分光により，機能性の起源である電子状態を詳細に決定している。また，それらの実験条件に合わせた第一原理電子状態計算を組み合わせることで，機能性固体・薄膜の電子状態の総合的な情報を得ている。
- b) 物質科学に向けた新しい放射光分光法の開発：UVSOR や次世代放射光で用いることを想定した新たな分光法を開発する。特に，電子構造のダイナミクスを可視化することを目標に，新たな光電子分光法と赤外分光法の開発を進めており，物質科学への応用を図る。
- c) 新しい量子ビームを使った分析技術の開発：スピン偏極高輝度電子源を用いた高エネルギー分解能スピン・角度分解共鳴電子エネルギー損失分光法の開発を進めている。

B-1) 学術論文

Y. CHEN, T. NAKAMURA, H. WATANABE, T. SUZUKI, Q. REN, K. LIU, Y. ZHONG, T. KANAI, J. ITATANI, K. OKAZAKI, H. S. SUZUKI, S. SHIN, K. IMURA, N. K. SATO and S. KIMURA, “Photo-Induced Nonlinear Band Shift and Valence Transition in SmS,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **94**(1), 013702 (2025). DOI: 10.7566/JPSJ.94.013702

K. WANG, S. KIMURA, K. YAMAUCHI, H. YAMAHARA, H. MURAKAMI, M. SEKI, T. OGUCHI, H. TABATA and M. TONOUCHI, “Temperature Dependence of Low-Frequency Phonon Behavior in Gadolinium Gallium Garnet and Yttrium Aluminum Garnet,” *J. Appl. Phys.* **136**(24), 245105 (2024). DOI: 10.1063/5.0242789

H. WATANABE, Y. TAKENO, Y. NEGORO, R. IKEDA, Y. SHIBATA, Y. CHEN, T. NAKAMURA, K. YAMAGAMI, Y. HIRATA, Y. ZHANG, R. TAKAHASHI, H. WADATI, K. TAMASAKU, K. IMURA, H. S. SUZUKI, N. K. SATO and S. KIMURA, “Photoinduced Phase Transition on Black Samarium Monosulfide,” *Phys. Rev. B* **110**(24), 245133 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevB.110.245133

J. H. PARK, M. T. PARK, G. W. BAEK, S. KIMURA, M. H. JUNG and K. J. KIM, “Unraveling the Origin of Conductivity Change in Co-Doped FeRh Phase Transition,” *Commun. Mater.* **5**(1), 250 (2024). DOI: 10.1038/s43246-024-00694-y

R. IKEDA, H. WATANABE, M. J. HEON, M. H. JUNG, K. TAKASAN and S. KIMURA, “Light-Field-Driven Non-Ohmic Current Generation by an Intense THz Pulse in a Weyl Semimetal,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **93(5)**, 053701 (2024). DOI: 10.7566/JPSJ.93.053701

B-3) 総説, 著書

中村拓人, 木村真一, 「単原子層重い電子系の実現—単原子層物質における近藤効果—」, *固体物理*, **59(6)**, 331–339 (2024).

B-4) 招待講演

S. KIMURA, “Anisotropic Non-Fermi Liquid and Dynamical Planckian Scaling of Quasi-Kagome Kondo Lattice Systems,” American Physical Society Joint March & April Meeting: Global Physics Summit 2025, Anaheim (USA), March 2025.

S. KIMURA, “Light-Field-Driven Non-Ohmic Current and Keldysh Crossover in a Weyl Semimetal,” 2024 MRS Spring Meeting & Exhibit, Seattle (USA), April 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会評議員 (2024–2026).

学会の組織委員等

国際ワークショップ「12th International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources」国際諮問委員 (2024).

国際会議「International Conference on Low Energy Electrodynamics of Solids」, Organizing Committee Program Committee Member (2024–2025).

その他

アグネ技術センター「固体物理」誌友 (2023–2025).

B-8) 大学等での講義, 客員

大阪大学大学院生命機能研究科, 教授, 2013年7月–.

大阪大学理学部, 講義「光物理学」, 2024年4月–9月.

大阪大学大学院理学研究科, 講義「シンクロトロン分光学」, 2024年4月–9月.

大阪大学全学教育推進機構, 講義「力学詳論II」, 2024年10月–2025年3月.

大阪大学理学部, 講義「現代物理学の最前線」, 2024年10月–2025年3月.

大阪大学大学院生命機能研究科, 講義「基礎物理学I」, 2024年4月–6月.

大阪大学大学院生命機能研究科, 実習「基礎物理学実習I」, 2024年6月–8月.

大阪大学生命機能研究科, 講義「生体ダイナミクス概論III」, 2024年4月–9月.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「時間・スピン分解共鳴電子散乱法の確立と光励起電子・格子・スピン相関の直接観測」, 木村真一 (2023年度-2025年度).

科研費挑戦的研究(開拓),「ナノスピン角度分解共鳴非弾性電子散乱法を用いた運動量依存スピン流のオペランド観測」, 木村真一 (2024年度-2027年度).

科研費基盤研究(A),「局所場における光テラヘルツ波変換モデルリングと半導体分析応用」(代表者: 斗内政吉), 木村真一(研究分担者) (2023年度-2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

物質機能の起源である電子構造を明確にすることは、物性の理解を深め、新しい機能性を創りだすのに重要である。そのため、準粒子を観測するための手段として、これまで放射光を使った角度分解光電子分光と赤外・テラヘルツ分光を推進してきた。現在は、準粒子とともに重要な素励起である集団励起の観測を行うために、内殻共鳴電子エネルギー損失分光法(rEELS)の開発を進めている。クロスアポイントメントの5年間で、rEELSをスピン分解、角度分解、時間分解に拡張するとともに、スピン・角度分解共鳴逆光電子分光法の開発も行っていく。

大西 洋（教授（クロスアポイントメント*））（2021 年 11 月 1 日着任）

栗田 佳子（事務支援員）

*神戸大学大学院理学研究科

A-1) 専門領域：界面分子科学，触媒科学

A-2) 研究課題：

a) 有限厚さをもつ固液界面のオペランド計測：創／省エネルギーを支えるサイエンスの構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 創エネルギーと省エネルギーという社会ニーズに応えるために，高収率の半導体光触媒と低摩擦の潤滑油が最近 20 年のあいだに次々と開発されてきた。これら新材料をオペランド計測する手法に工夫をこらして有限の厚さ（1 μm –1 nm）をもつ液体–固体界面が機能を発現するしくみを理解する。分子論的な界面（液体分子と固体分子が接触する場所）でおきる現象と，分子論的な界面へ物質とエネルギーを入出力する場所でおきる現象を同時に計測し一体として理解することの重要性を光触媒（物質変換）と潤滑油（力学的エネルギー散逸）というケーススタディをとおして世界へ発信することを目的とする。①電子励起状態にある光触媒の軟エックス線分光と全反射光学分光による計測評価②氷と不凍液体が接する界面のナノ力学計測が本年度の成果である。

B-1) 学術論文

Y. H. CHEW, N. SAIJO, Y. KUMABE, T. TACHIKAWA and H. ONISHI, “Unravelling the Influence of Major Seawater Salt Ions on the Photogenerated Charge Carriers in a Sr-Doped NaTaO₃ Photocatalyst via ATR-FTIR,” *J. Phys. Chem. C* **129**(7), 3531–3538 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c07833

C.-M. FUNG, B.-J. NG, Y.-H. CHEW, C.-C. ER, J. LOW, X. GUO, X. Y. KONG, L.-L. TAN, H. ONISHI, A. R. MOHAMED and S.-P. CHAI, “MXene Quantum Dot-Sensitized Heterostructures for Broad Solar Spectrum CO₂ Reduction,” *Cell Rep. Phys. Sci.* **5**, 102296 (2024). DOI: 10.1016/j.xcrp.2024.102296

R. YANAGISAWA, T. UEDA, K. NAKAMOTO, Z. LU, H. ONISHI and T. MINATO, “The Interface between Ice and Alcohols Analyzed by Atomic Force Microscopy,” *J. Chem. Phys.* **161**(2), 024702 (2024). DOI: 10.1063/5.0211501

T. OTAKE, R. KAJITA, I. OGASAWARA, M. IWAKI, H. ONISHI and K. AMANO, “Theoretical Investigation of Interaction Measurements in Liquid Systems with Viscosity Distributions,” *Phys. A* **647**, 129918 (2024). DOI: 10.1016/j.physa.2024.129918

Y. H. CHEW and H. ONISHI, “Infrared Absorption of Zn_{0.5}Cd_{0.5}S Photocatalyst Bandgap-Excited Under an Aqueous Environment,” *J. Phys. Chem. C* **128**(11), 4535–4543 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c08343

B-4) 招待講演

大西 洋, 湊 丈俊, 「市販AFM 装置を用いた水-液体界面の計測」, 次世代ナノプローブ技術委員会第5回研究会, 東京, 2025年1月.

森口志穂, 大西 洋, 平山朋子, 山下直輝, 「潤滑油における添加剤吸着膜の分子スケール構造と摩擦特性」, 第20回高分子表面研究討論会, 神戸, 2024年11月.

大西 洋, 「水中で進む触媒反応のオペランド計測: 赤外分光とマイクロ電気化学」, 触媒学会西日本支部第15回触媒科学研究発表会, 神戸, 2024年11月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

(社)応用物理学会薄膜・表面物理分科会幹事 (2006-).

日本表面真空学会理事 (2022-2024).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構創発的研究支援事業アドバイザー (創発AD) (2023-).

北海道大学触媒科学研究所運営協議会委員 (2024-).

学会誌編集委員

日本表面真空科学会電子ジャーナル委員 (2002-).

その他

水-不凍液界面のナノ力学計測を報告した原著論文 (*J. Chem. Phys.* 誌) とプレスリリース (分子研および神戸大学) が広く注目され, *Physics Today* (アメリカ物理協会広報誌), JST サイエンスポータル, Yahoo ニュースなど, 国内外 30 以上のウェブ媒体で二次報道された。

B-10) 競争的資金

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

科研費基盤研究(S), 「境界潤滑の科学-添加剤吸着層の構造・物性に基づく低摩擦現象の本質的理解」 (代表者: 平山朋子), 大西 洋 (研究分担者) (2023年度-2027年度).

C) 研究活動の課題と展望

【光触媒】水-光触媒界面ですすむ物質変換に焦点を絞った研究を展開していく。従来の光触媒ダイナミクス研究はフェムト秒からマイクロ秒で進む電子のうごき (電子励起と電荷分離) に注目してきた。有限の厚さをもつ水-光触媒界面で物質輸送を含むミリ秒の反応化学の解明をめざす。

【潤滑油】広い意味での潤滑油-固体界面におけるエネルギー散逸の鍵となる分子運動性を定量評価するために原子間力顕微鏡を用いたナノ力学計測を進めていく。

高谷 光（准教授（兼任*¹））（2022 年 3 月 1 日～2022 年 3 月 31 日）
（教授（兼任*²））（2022 年 4 月 1 日～2025 年 3 月 31 日）

神谷 美穂（事務支援員）

*1 京都大学

*2 帝京科学大学生命環境学部

A-1) 専門領域：有機合成化学，有機金属化学，ペプチド科学，バイオマス有効活用，X線吸収分光

A-2) 研究課題：

- a) X線吸収分光を基盤とする革新触媒の創製
- b) マイクロ波照射による有機反応促進機構の解明
- c) メタル化ペプチド基盤人工酵素を用いる木質バイオマスの循環資源化
- d) 未利用バイオマス由来有機分子を基盤とする高機能バイオマテリアル創出

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 溶液X線種分光と量子化学計算の融合によって，NMR等の従来の分析手法では困難な，常磁性の触媒活性種や高活性で不安定な活性種の「その場観 XAFS」の開発を目的とした研究を推進してきた。特に UVSOR (BL3U)において，長坂博士と共同研究を行ない，酸素や水分に対して不安定な反応活性種の溶液軟X線吸収分光法の開発に成功した。具体的には，鉄触媒クロスカップリング反応の触媒活性種であるアリール鉄錯体や Grignard 反応剤の溶液 XAFS 測定を行うために，各種有機溶媒に高い耐性を有するピーク樹脂製フローセルを開発した。このセルでは，金蒸着された SiN 薄膜を窓材として用いており，金線で窓材をアースすることによって有機溶媒の送液によって発生・蓄積する静電気を除去できる。そのため，従来型フローセルで問題となっていた静電気によるノイズやベースラインのドリフトを抑え，長時間安定して溶液 XAFS 測定を行える。また，上記フローセルを用いる XAFS 測定では，常に新鮮なサンプル溶液が供給されるため，軟X線によるサンプルダメージを最小限に抑えることができる。さらに，フローリアクタを接続することで，実際の反応に用いる試薬と触媒を流路内で反応させ，系中に生成する反応／触媒活性種の「その場観察」が可能であるという特徴を有する。2021 年度に不安定な Fe/Ni 触媒種の Fe-L/Ni-L 端および有機マグネシウム反応剤（Grignard 試薬）の C-K/O-K 端の溶液 XAFS 測定に成功した。これらの成果を基盤として，2023-2024 年度では様々な有機金属種の構造・反応機構解析に成功した。
- b) マイクロ波照射化学合成は，電熱ヒータ等の従来型の通常熱源を用いる反応と比べて，1/10 程度のエネルギー消費量で，最大 1000 倍にも達する反応加速効果が得られること，反応物質や触媒選択加熱による反応制御によって所望の物質のみを高選択的に合成できる優れた特徴を有する。しかしながら，このような加速現象の発見から 30 年以上が経過した現在でも，マイクロ波照射によって化学反応が加速される分子科学的な機序は明らかになっていない。我々は，マイクロ波による反応加速現象の学理解明を目的として，2020 年度より分子研（田中，長坂）と核融合研（加藤，村上）の融合研究を立上げ，マイクロ波照射下における化学反応のその場観察と分子動力学・QM/MM による分子挙動のシミュレーションについて基礎検討を行っている。2021 年度は，UVSOR の赤外／THz ビームライン（BL1B）の光学系に挿入できるマイクロ波反応装置の開発に成功し，マイクロ波照射下でのテラヘルツ測定に成功した。こ

これらの成果を背景に、2022–2024 年度ではマイクロ波と様々な有機金属種の創発現象に基づく反応開発に成功した他、環境省の革新的な省 CO₂ 実現のための部材や素材の社会実装・普及展開加速化事業「CO₂ 削減に貢献する大電力高効率 GaN マイクロ波加熱装置」に採択された。本課題では、上述の装置を用いて「マイクロ波反応『その場』観察装置の開発」に取り組む。

- c) 木質バイオマスはリグニン、セルロース、ヘミセルロースを主成分とする夾雑な生体分子である。我々は、リグニンおよびセルロースを認識するペプチドと金属触媒を結合した人工酵素を開発し、これを用いて木質夾雑系からのリグニン／セルロース選択的な分子変換法の開発に取り組んでいる。2020 年度には、リグニン認識能を有する 12 残基ペプチドに高い酸化能を有する Ru 錯体触媒を結合した人工酵素の合成に成功した。また、蛍光異方性測定と分子動力学計算によってペプチドのリグニン認識においてペプチド残基とリグニン水酸基および芳香族骨格の水素結合と CH/ π 型相互作用が支配的であることを明らかにした。2022–2024 年度では、分子動力学計算および ITC によるリグニン認識機構の解明に取り組むとともに、マイクロ波／メカノケミカル反応による木質バイオマスの高効率／高選択的な分解反応の開拓に取り組んだ結果、廃棄木材および廃棄生花（ロスフラワー）からの高付加価値な医薬品原料（2025 年 5 月上梓予定）の抽出・製造および製品化に成功した他、廃棄自動車由来 PE/PP の高効率分解と循環資源化に成功し、特許出願を行った。

B-1) 学術論文

S. NAKAJIMA, T. HASHIMOTO, S. LU, D. HASHIZUME, H. MATSUDA, T. HATAKEYAMA, K. ISOZAKI, H. TAKAYA* and M. NAKAMURA*, “SciPROP-R: An Effective Bisphosphine Ligand for the Chemo-Selective Iron-Catalyzed Suzuki–Miyaura Coupling of Alkyl Chlorides,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **96**, 1298–1309 (2023). (BCSJ Award)

F. PINCELLA, K. ISOZAKI,* R. SATO, T. TERANISHI, H. TAKAYA* and M. NAKAMURA*, “Reusable Magnetite Nanoparticle (Fe₃O₄ NP) Catalyst for Selective Oxidation of Alcohols under Microwave Irradiation,” *ACS Omega* **9**, 24477–24488 (2024).

E. KANAO, H. OSAKI, T. TANIGAWA, H. TAKAYA, T. SANO, J. ADACHI, K. OTSUKA, Y. ISHIHAMA and T. KUBO*, “Rational Supramolecular Strategy via Halogen Bonding for Effective Halogen Recognition in Molecular Imprinting,” *Anal. Chem.* **95**, 9304–9313 (2023).

R. TOYODA, N. FUKUI, H. TANIGUCHI, H. URATANI, J. KOMEDA, Y. CHIBA, H. TAKAYA, H. NISHIHARA and R. SAKAMOTO*, “Discrete Coordination Nanochains Based on Photoluminescent Dyes Reveal Intrachain Exciton Migration Dynamics,” *Nat. Commun.* **16**, 1367 (2025).

S. KIMURA, K. ADACHI, Y. ISHII, T. KOMIYAMA, T. SAITO, N. NAKAYAMA, M. YOKOYA, H. TAKAYA, S. YAGAI, S. KAWAI, T. UCHIHASHI and M. YAMANAKA, “Molecular-Level Insights into the Supramolecular Gelation Mechanism of Urea Derivative,” *Nat. Commun.* **16**, 3758 (2025).

B-4) 招待講演

高谷 光, 「放射光による文化財分析」, 奈良教育大学公開シンポジウム「科学からみえる伝統のかたち」, 奈良教育大学, 奈良, 2024 年 10 月.

高谷 光, 「文化財と放射光科学」, 第 3 回茨城大学 KEK DAY 「量子線科学講座_量子の目でモノを見る」, 茨城大学, 水戸, 2024 年 1 月.

高谷 光,「放射光計測の高度化学利用：軟X線で拓く物質・材料科学」, 分子研 UVSOR 極端紫外光研究施設 40 周年記念行事記念講演会, 分子科学研究所, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2023 年 12 月.

H. TAKAYA, “Multimetal-Catalyzed One-Stop Chain Transfer Oligomerization of Ethylene/Propylene for Synthetic Lubricants,” International Symposium on Catalysis and Fine Chemicals 2023 (C&FC2023), Tokyo (Japan), December 2023.

B-6) 受賞, 表彰

S. NAKAJIMA, T. HASHIMOTO, S. LU, D. HASHIZUME, H. MATSUDA, T. HATAKEYAMA, K. ISOZAKI, H. TAKAYA* and M. NAKAMURA, 日本化学会論文誌 BCSJ 賞 (2023).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

SPRING-8 利用推進懇談会「SPRING-8 先端放射光技術による化学イノベーション研究会」主査委員 (2017–2024).

学会の組織委員等

日本化学会春季年会イノベーション共創プログラム (CIP) 企画委員 (2015–).

日本化学会第 105 春季年会 ATP 企画 TIC「インフォマティクスの基礎」幹事 (2018–).

日本化学会第 104 春季年会特別企画「化学者のための放射光ことはじめ——XAFS の基礎と応用」代表幹事 (2024–2025).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会産学協力研究委員会「R024 電磁波励起反応場委員会」幹事委員 (2020–2024).

環境省「革新的な省 CO₂ 実現のための部材や素材の社会実装・普及展開加速化事業」有識者委員会委員 (大学) (2024).

学会誌編集委員

日本電磁場エネルギー応用学会機関誌編集委員 (2019–).

その他

足立区「足立区ブランド」認定選考委員 (2023–2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

京都大学量子ビームアライアンス, オンライン講義講師,「X線吸収分光」, 2021 年–.

中部大学工学部, 客員教授, 2023 年 3 月–2024 年 3 月.

筑波大学数理物質系物質工学域, 客員教授, 2023 年 4 月–.

帝京科学大学生命環境学部,「有機化学 I」「有機化学 II」「化学療法論」「生命科学基礎実験 I」「生命科学基礎実験 II」「1 年次基礎ゼミ」, 2022 年–.

理化学研究所, 客員研究員, 2022 年 4 月–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究 (C),「植物バイオマス循環資源化のためのメタル化ペプチド人工酵素の創製」, 高谷 光 (2021 年度–2023 年度).

科学技術振興機構CREST 研究,「社会課題解決を志向した革新的計測・解析システムの創出」領域,「分子・情報技術の創発による液相分離の限界突破と社会実装」(代表:久保 拓也),高谷 光(主たる共同研究者)(2023年度-2028年度).
科学技術振興機構CREST 研究「新たな生産プロセス構築のための電子やイオン等の能動的制御による革新的反応技術の創出」領域,「レドックスメカノケミストリーによる固体有機合成化学」(代表:伊藤 肇),高谷 光(共同研究者)(2021年度-2025年度).

科学技術振興機構研究開発最適展開支援プログラムA-STEP 産学共同(本格型): with/post コロナにおける社会変革への寄与が期待される研究開発,第4分野(アグリ・バイオ),「糖鎖認識PEG 誘導体を用いた糖たんぱく質の糖鎖に基づく精密分離技術の開発」(代表:小林宏資),高谷 光(研究分担者)(2021年度-2025年度).

B-11) 産学連携

共同研究,抗菌化研(株),「新奇な抗菌性物質の開発と作用機序の解明」,高谷 光(2022年-).

共同研究,カネカ(株),「マイクロ波反応の開発」,高谷 光(2024年-).

共同研究,ENEOS(株),「潤滑油成分の物性・構造解析」,高谷 光(2022年-2024年).

共同研究,本田技研工業(株),高谷 光(2022年-2024年).

C) 研究活動の課題と展望

XAS 研究においては,触媒と反応基質を混合・反応させて任意のタイミングでXAS 測定が行えるフローリアクタの開発と,これを用いる均一系触媒反応機構に関する研究,およびマイクロ波照射下におけるin situ 反応解析に注力した研究を行う。特に,未利用バイオマスである廃棄木材や廃棄生花等や廃棄自動車や家電製品由来のプラスチックを研究対象として,触媒・分解反応開発を行うとともに,in situ XAF 測定を利用した分解・脱重合機序の解明を目指す。

中村 彰彦 (准教授(クロスアポイントメント*)) (2022年8月1日～2024年12月31日)
(教授(クロスアポイントメント*)) (2025年1月1日～3月31日)

川口 律子 (事務支援員)

野村 潤子 (事務支援員)

*静岡大学農学部

A-1) 専門領域：生化学，生物物理学

A-2) 研究課題：

- a) ポリエチレンテレフタレート加水分解酵素の改良
- b) ポリエチレンテレフタレート吸着酵素の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) PET 分解酵素の高効率スクリーニングを行うために，ファージ表面に活性型の PET 分解酵素を提示する方法の開発をおこなった。直接ファージのタンパク質と PET 分解酵素を連結すると，立体障害によりファージに生産が確認できなかったため，ファージに SpyCatcher タンパク質，PET 分解酵素に Spytag を連結し，ペリプラズム領域で結合させる方法を試みた。各種プロモーターを検討したところ，コールドショックプロモーターを用いて，ファージの生産量を少し抑えながら PET 分解酵素を誘導することで高い提示率を占めすファージを生産することができた。
- b) 作成した PET 吸着タンパク質のライブラリを RFP と連結し，小スケールでの可溶性酵素生産性の解析を行い，生産可能な変異体のライブラリを取得した。シーケンスを確認し，5 種の変異体を取得した。キチン及びセルロースに対する吸着はほとんど確認できず，また PET への吸着親和性は天然型吸着タンパク質と比較して 2.7 倍向上していた。セルロース，キチン及び PET 粉末をガラス上に配置し，RFP 融合吸着タンパク質で染色したところ，天然型タンパク質では全てが染色されたのに対し，変異体吸着タンパク質では PET のみが強い蛍光を示したことから，PET 染色タンパク質が開発が確認できた。

B-1) 学術論文

R. KUSHIHARA, A. NAKAMURA, K. TAKEGAMI, Y. SETO, Y. KATO, H. DOHRA, T. OHNISHI, Y. TODOROKI and J. TAKEUCHI, “Structural Requirements of KAI2 Ligands for Activation of Signal Transduction,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **122(8)**, e2414779122 (2025). DOI: 10.1073/pnas.2414779122

S. TSUJINO, Y. YAMADA, M. SENDA, A. NAKAMURA, T. SENDA and T. FUJIWARA, “Structural Characterization of Pyruvic Oxime Dioxygenase, a Key Enzyme in Heterotrophic Nitrification,” *J. Bacteriol.* **207(2)**, e00342-24 (2025). DOI: 10.1128/jb.00342-24

Y. OGURA, Y. HASHINO and A. NAKAMURA, “Direct Screening of PET Hydrolase Activity in Culture Medium Based on Turbidity Reduction,” *ACS Omega* **9(31)**, 34151–34160 (2024). DOI: 10.1021/acsomega.4c05488

B-5) 特許出願

WO2025013877(A1), “Protein, and Method for Decomposing Polyethylene Terephthalate,” T. MATSUZAKI, F. YAMAZAKI, T. SAEKI, A. NAKAMURA, R. IINO and N. KOGA (National Institutes of Natural Sciences), 2024年.

B-6) 受賞, 表彰

中村彰彦, 日本応用糖質科学会奨励賞 (2024).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構創発的研究支援事業, 「プラスチックを採して壊すバイオマイクロドロンの創出」, 中村彰彦 (2022年度–2025年度).

科研費挑戦的研究 (萌芽), 「高活性リグニン分解菌を用いた新規リグニンリファイナリー技術の構築」 (代表者; 平井浩文), 中村 彰彦 (研究分担者) (2023年度–2024年度).

B-11) 産学連携

共同研究, 静岡大学, キリンホールディングス (株), 大阪大学, 「結晶性PET 分解活性の高い酵素の開発」, 中村彰彦 (2023年度–2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

開発したPET 分解酵素提示ファージベクターに変異導入を行い, PET 分解酵素変異体ライブラリーの作成を行う。得られたライブラリーを用いて顕微鏡下でPET 分解活性の計測を行い高活性変異体の取得を試みる。また作成したPET 吸着タンパク質はPET 分解酵素との融合体を作成し, PET 分解活性に与える影響を確認する。

澤井 仁美（准教授（クロスアポイントメント*））（2024 年 4 月 1 日着任）

村木 めぐみ（技術支援員）

川口 律子（事務支援員）

野村 潤子（事務支援員）

*長崎大学大学院総合生産科学研究科

A-1) 専門領域：生物無機化学，生命金属科学，生化学

A-2) 研究課題：

- a) 生体内「鉄」動態の分子科学
- b) 軟X線顕微鏡による生細胞の元素イメージング
- c) ヘムセンサータンパク質を標的とする新規抗菌剤の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 鉄はすべての生物の生命維持に必須の金属元素である。生体内の鉄は Fe^{2+} または Fe^{3+} で存在するが，種々のタンパク質を介して方向性と選択性をもって受け渡しされることで，細胞毒性を抑えつつ，鉄の動態（吸収・輸送・貯蔵・排泄など）が制御されている。しかし，そのような生体内「鉄」動態の分子機序は精密に解明されていない。本研究課題では，鉄イオンの受け渡し機構に関与する各種タンパク質を対象として，タンパク質間相互作用ならびに立体構造の解析により鉄イオンの授受機構を解明することを目的としている。鉄貯蔵タンパク質 Ferritin の H 鎖に対して鉄輸送タンパク質 PCBP が結合して Fe^{2+} を渡し，アポ型になった PCBP は速やかに Ferritin から解離する新しい機構を明らかにした。
- b) UVSOR の岩山グループで開発中の密着型軟X線顕微鏡を用いて，生きている（含水状態）の細胞における元素分布をイメージングする手法の開発に着手した。数種類の接着系培養細胞を蛍光シンチレーター板上で培養した結果，形状がそろった状態で蛍光板に強く接着したイヌの正常腎臓尿管上皮細胞について実験した。炭素ならびにリンの吸収端では，細胞の輪郭（形質膜）や核などの小器官の存在がわかる解像度で観察することができ，XAFS スペクトルを抽出した。鉄については，細胞内濃度が低いため，XAFS 解析までは至っていない。今後，鉄栄養強化細胞や潜在的に鉄量が多い肝細胞などを用いて，鉄の分布を観察する。
- c) 動物の血液に感染する病原菌の多くは，宿主動物の赤血球を破壊し，鉄栄養源としてヘム（ポルフィリン鉄錯体）を奪取して増殖する。しかし，栄養であるはずのヘムが菌体内で余剰になると毒性を示すため，溶血性の病原菌は余剰なヘムを感知して排除するためにヘムセンサータンパク質を有している。したがって，病原菌のヘムセンサータンパク質の機能を阻害する薬剤は抗菌薬の開発に有用となる。本研究課題では，新生児の敗血症や髄膜炎の起因となるだけでなく，乳牛の乳房炎を引き起こし日本の酪農経済に年間 100 億円以上の損失を与える病原菌 *Streptococcus agalactia* のヘムセンサータンパク質 PefR を対象とした。PefR に対して特異的に結合し，ヘム感知能を阻害する素材として VHH 抗体を作製し，各種相互作用解析により PefR に対する VHH 抗体の親和性や結合特異性を明らかにした。

B-3) 総説, 著書

澤井仁美,「膜貫通型鉄還元酵素 Dcytb の構造機能解析により明らかになった細胞への鉄取り込みメカニズム」, *生体の科学*, **75**(2), 112–115 (2024).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

H. SAWAI, “Iron as a nutrient: the molecular and cellular mechanisms of dietary iron absorption in humans,” French-Japanese symposium in BioInorganic Chemistry and FrenchBIC annual meeting, Marseille (France), April 2024.

H. SAWAI, “Structural insights into the sensing of iron nutrients as a basis for the development of new drugs,” Gordon Research Conference—Metals in Medicine, Andover (USA), June 2024.

H. SAWAI, “Sensing of iron nutrients as a new target for antibiotic development,” The 11th Asian Biological Inorganic Chemistry (AsBIC11), Guilin (China), December 2024.*

澤井仁美,「生体内におけるヘムおよび鉄イオンの動態と制御について」, 第31回日本血液代替物学会年次大会, 京都, 2024年12月.*

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本鉄バイオサイエンス学会代議員 (2024–).

学会の組織委員等

UK/Japan meeting and workshop on dynamic crystallography, Program Committee (2023–2024).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

九州シンクロトン光応用研究センター会議委員 (2023–2024).

理科教育活動

夢ナビ講義ビデオ (大学受験生向けオンデマンド講義)(2024).

夢ナビLIVE2024 (大学受験生向けオンライン研究室ツアー)(2024).

高大連携公開講座: 教科書の化学実験を体験しよう (2023–).

高校生・大学受験生のための化学・物質関連分野の実験実習 (2023–2024).

出前授業ならびに実験講座, 大村高等学校 (2024).

出前授業ならびに実験講座, 諫早高等学校 (2024).

出前授業ならびに実験講座, 純心女子高等学校 (2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

長崎大学大学院工学研究科,「化学・物質工学総合演習」, 2022年5月–.

長崎大学大学院工学研究科／総合生産科学研究科,「実践英語 ABCD」, 2022年5月–.

長崎大学工学部,「技術英語 III」, 2022年9月–.

長崎大学工学部,「生化学 I」, 2023年4月–.

長崎大学医学部医学科／医学部保健学科／歯学部／情報データ学部? 環境学部,「教養モジュール b13: 生体分子の構造と機能」, 2023年6月–.

長崎大学大学院工学研究科,「生命金属ダイナミクス」,2023年8月－.
長崎大学大学院工学研究科／総合生産科学研究科,「生命金属科学特論」,2023年10月－.
長崎大学大学院総合生産科学研究科,「医工連携B：先端医用材料・創薬」,2024年4月－.
長崎大学大学院総合生産科学研究科,「細胞機能生化学特論」,2024年4月－.
長崎大学大学院総合生産科学研究科,「特別研究I」,2024年4月－.
長崎大学工学部,「蛋白質工学」,2024年6月－.
長崎大学大学院総合生産科学研究科,「機能性錯体化学特論」,2024年6月－.
長崎大学大学院総合生産科学研究科,「細胞機能分子メカニズム特論」,2024年10月－.
理化学研究所,客員研究員,2006年10月－.
Lund Institute of Advanced Neutron and X-ray Science (LINXS), LINXS Core Group Fellow, 2023年9月－.

B-10) 競争的資金

(公財)旭硝子財団 2024年度研究助成,「鉄トランスポーターと鉄輸送シャペロンの相互作用による安全で効率的な細胞内 Fe^{2+} 制御機構の解明」,澤井仁美(2024年–2025年).
(公財)アサヒグループ財団学術研究助成 食・生活部門,「鉄栄養素の吸収効率を高める新たな食品成分の探索とその作用機序の解明」,澤井仁美(2024年).
長崎大学令和6年度研究費獲得支援事業,「鉄リレーシステムにより制御される二価鉄イオンの細胞内動態の可視化」,澤井仁美(2024年).

B-11) 産学連携

共同研究,(株)レフェインジャパン,「タンパク質の分子量分布解析」,澤井仁美(2022年度－).

C) 研究活動の課題と展望

これまでに鉄を中心に生体内金属の吸収・輸送・貯蔵の分子機序について、タンパク質レベルでの研究を展開してきた。しかし、試験管内にとり出した個々のタンパク質間の相互作用だけでは説明がつかない現象があることを、細胞レベルでの研究を取り入れることで実感した。つまり、細胞内では金属イオンの局所的な濃度変化により、タンパク質や核酸に対する金属の結合解離が起こり、それに伴い生体分子が離合集散しながら生体内金属の動態を制御しているように観える。細胞内で起きている「真の金属動態」を追跡するために、密着型軟X線顕微鏡を用いて生きている細胞内の金属イオンの分布を(特に Fe^{2+} と Fe^{3+} を区別して)イメージングする方法を確立したい。生細胞内の各金属イオンの分布が、金属関連タンパク質の局在・形状・活性などと、どのようにリンクするのかを解明することで、分子科学的な理解が進んでいない「金属毒性の閾値(栄養か毒かの境界)」を浮き彫りにしていきたい。

畑中 美穂（准教授（クロスアポイントメント*））（2024 年 6 月 1 日着任）

増田 道子（事務支援員）

千葉 史朱香（事務支援員）

*慶應義塾大学理工学部

A-1) 専門領域：理論化学，マテリアルズインフォマティクス

A-2) 研究課題：

- a) 触媒および高分子材料の反応経路のデータベース化と機械学習への応用
- b) ベイズ最適化を活用した円錐交差点の探索手法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 近年，データ駆動科学を触媒や高分子材料に応用する試みが注目を集めている。しかし，限られたデータセットで予測精度の高い機械学習モデルを構築するには，材料に対する適切な特徴量の開発が不可欠である。我々は，二元共重合体の特徴量として，モノマーペアの重合初期段階における素過程の反応エネルギーや活性化障壁を含む DFT 計算値が有用であることを示した。また，この考え方を触媒にも拡張し，遷移金属錯体触媒の素反応のエネルギーを特徴量に用いるべく，DFT 法による計算結果の収集を実施している。現在，1648 種のホスフィン配位子を持つパラジウム錯体の構造と素反応の中間体データの収集まで完了している。
- b) 従来，ポテンシャルエネルギー曲面（PES）上における分子構造の探索には，量子化学計算によって求めたエネルギーとエネルギー勾配が使われてきた。だが，エネルギー計算を量子コンピュータ上での測定に置き換えた場合，エネルギー値には測定誤差が含まれるので滑らかな PES が描けない，つまり，従来のエネルギー勾配を用いる構造探索法が適用できないという問題が出てきた。この問題に対処するために，我々は，機械学習的手法の一つであるベイズ最適化（BO）を用いて光機能発現の鍵となる最安定円錐交差点を探索する手法の開発を行い，エチレンやホルムアルデヒド，ベンゼンなどの小分子の最安定円錐交差点構造を精度良く求めることに成功した。

B-1) 学術論文

T. YOSHIMURA, H. KATO, S. OIKAWA, T. INAGAKI, S. ASANO, T. SUGAWARA, T. MIYAO, T. MATSUBARA, H. AJIRO, M. FUJII, Y. OHNISHI and M. HATANAKA, “CopDDB: A Descriptor Database for Copolymers and Its Applications to Machine Learning,” *Digital Discovery* **4**, 195–203 (2025). DOI: 10.1039/D4DD00266K

R. SOMAKI, T. INAGAKI and M. HATANAKA, “Exploration of the Global Minimum and Conical Intersection with Bayesian Optimization,” *Mol. Inf.* **44**(2), e202400041 (2025). DOI: 10.1002/minf.202400041

R. OHNO, K. OTA, N. NISHIMURA, K. TANIGUCHI, S. KUROKAWA, T. WAKABAYASHI, M. HATANAKA, A. ROSAS-SÁNCHEZ, D. HASHIZUME and T. MATSUO, “Silicon Analogues of Cyclopropyl Radical Derived from a Highly Stable Cyclic Disilene Compound Featuring a Si–Br Bond,” *J. Am. Chem. Soc.* **146**(36), 24911–24924 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c06111

- K. MUTO, M. HATANAKA, F. KAKIUCHI and T. KOCHI**, “Theoretical Studies on Relative Stability of Cationic 1,10-Phenanthroline Palladium Complexes Bearing Alkyl Groups by Using Designed Alkane Templates,” *Organometallics* **43**(14), 1528–1535 (2024). DOI: 10.1021/acs.organomet.4c00097
- S. KANNO, H. NAKAMURA, T. KOBAYASHI, S. GOCHO, M. HATANAKA, N. YAMAMOTO and Q. GAO**, “Quantum Computing Quantum Monte Carlo with Hybrid Tensor Network for Electronic Structure Calculations,” *npj Quantum Inf.* **10**, 56 (2024). DOI: 10.1038/s41534-024-00851-8
- A. WAKIUCHI, S. JASIAL, S. ASANO, R. HASHIZUME, M. HATANAKA, Y. OHNISHI, T. MATSUBARA, H. AJIRO, T. SUGAWARA, M. FUJII and T. MIYAO**, “Multiple Comonomer Concentrations Prediction from FTIR Spectra with Quantum Chemistry-Based Interpretation,” *MRS Commun.* **14**, 439–444 (2024). DOI: 10.1557/s43579-024-00568-x

B-4) 招待講演

- M. HATANAKA**, “A descriptor database for metal-phosphorus complexes to evaluate the catalytic abilities using machine learning,” The 8th Japan-Czech-Slovakia (JCS) International Symposium on Theoretical Chemistry, Sapporo (Japan), June 2024.
- M. HATANAKA**, “Understanding and Designing Lanthanide Photofunctional Materials,” The 8th ICRDD International Symposium + Rising Star Program, Sapporo (Japan), October 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

理論化学会幹事 (2022–).

日本化学会関東支部幹事 (2023–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業 ACT-X アドバイザー (2023–).

文部科学省量子科学技術委員 (2023–).

文部科学省 科学技術・学術政策研究所 (NISTEP) 専門調査員 (2019–).

理科教育活動

総合学習, 横浜雙葉高等学校 (2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

慶應義塾大学理工学部, 「化学A」, 2024年4月–7月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「量子化学基礎」, 2024年10月–2025年1月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「分子量子化学」, 2024年4月–7月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「電子状態理論」, 2024年10月–2025年1月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「物理化学演習第1」, 2024年4月–7月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「物理化学演習第2」, 2024年10月–2025年1月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「化学実験第1」, 2024年4月–7月.

B-10) 競争的資金

科研費学術変革領域研究(A),「金属錯体触媒データベースの構築による触媒開発の加速」, 畑中美穂 (2024年度–2025年度).

科研費基盤研究(A),「電解発生活性化学種の利用による新物質変換系の構築」(代表: 栄長泰明), 畑中美穂 (研究分担者) (2023年度–2025年度).

B-11) 産学連携

共同研究, ダイキン工業(株),「自動反応経路探索 GRRM プログラムに基づく計算化学と機械学習を活用した触媒配位子を提案するシステムの開発」, 畑中美穂 (2020年度–2024年度).

共同研究, DIC (株),「マテリアルズインフォマティクス(MI)活用によるアルキド樹脂用非コバルトドライヤの開発」, 畑中美穂 (2018年度–2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

遷移金属錯体触媒の特徴量として、錯体構造とモデル分子との素反応で得られる生成物のデータ収集を完了したため、次は、遷移状態のデータ収集に取り掛かる。触媒の作用は遷移状態を安定化することであるため、遷移状態の安定性が、触媒に対する最も良い特徴量となると期待している。遷移状態を含む特徴量データベースの構築が完了し次第、触媒反応の実験結果の予測ができるか検証すべく、実験グループとの共同研究を開始する予定である。

4-9 社会連携研究部門

平等 拓範（特任教授（クロスアポイントメント*））（2019年4月1日着任）

佐野 雄二（特命専門員）

竹家 啓（特任准教授）

YAHIA, Vincent（特任研究員）

鈴木 昌世（特任研究員）

角谷 利恵（特任専門員）

殖栗 敦（特任専門員）

CASSOURET, Florent（特任研究員）

BRUNETEAU, Baptiste（特任研究員）

LIM, Hwanhong（共同研究員）

花村 諭志（共同研究員）

吉田 光宏（特別訪問教授）

石月 秀貴（特別訪問研究員）

佐藤 庸一（特別訪問研究員）

瀧上 浩幸（特別訪問研究員）

KAUSAS, Arvydas（特別訪問研究員）

田村 彰良（特別訪問研究員）

PERY, Mattin（インターンシップ）

MILAN, Fayat（インターンシップ）

松田 美帆（技術支援員（派遣（理研）））

小林 純（技術支援員（派遣））

水嶋 一彦（技術支援員（派遣（理研）））

伊吹 剛（技術支援員（派遣（理研）））

小野 陽子（事務支援員）

奥原 紀恵（事務支援員（派遣））

*理化学研究所放射光科学研究センター

A-1) 専門領域：量子エレクトロニクス，光エレクトロニクス，レーザー物理，非線形光学

A-2) 研究課題：

- a) マイクロドメイン構造制御に関する研究
- b) マイクロドメイン光制御に関する研究
- c) マイクロ固体フォトリソの展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

分子科学に関連して重要な波長域にレーザーの高輝度光を展開する為の固体レーザー，非線形波長変換法につき包括的な研究を進めている。特には近年のマイクロ固体フォトリソ [マイクロチップ Nd:YVO₄ レーザー（1990年），Yb:YAG レーザー（1993年），セラミックレーザー（1997年），バルク擬似位相整合（QPM）素子：大口径周期分極

反転 $\text{MgO}:\text{LiNbO}_3$ (PPMgLN) (3mm 厚 2003 年, 5mm 厚 2005 年, 10mm 厚 2012 年)] を先導すると共に, 共同研究を通し赤外域分子分光などにその展開を図っている。国際誌の雑誌編集, 特集号企画から国際シンポジウム・会議の企画提案, 開催に積極的に参加する事でその成果を内外に発信している。

- a) マイクロドメイン構造, 界面 (粒界面, 結晶界面, さらには自発分極界面) を微細に制御する固相反応制御法の研究として, レーザーセラミックス, レーザー素子, 分極反転素子の作製プロセスの高度化を図っている。特に, 固体レーザーの発光中心である希土類イオンの軌道角運動量を利用したマイクロドメインの配向制御は, これまで不可能だった異方性セラミックスによるレーザー発振を成功させただけでなく原理的にはイオンレベルでの複合構造を可能とする。さらに最近, 表面活性接合による異種材料接合に成功し, Distributed Face Cooling (DFC) 構造による Tiny Integrated Laser (TILA) なる次世代の高性能な高集積小型レーザーに関するコンセプトが検証された。これより, 新たなフォトリソを創出できるものと期待している。
- b) 光の発生, 増幅, 変換の高度制御を可能とする為の研究として, 希土類イオンの発光・緩和機構の解明, 固体中の光, エネルギー伝搬, さらにはマイクロドメイン構造と光子及び音子の相互作用機構解明, 非線形光学過程の解明, モデル化を進めている。Yb レーザーの機構解明, Nd レーザーの直接励起可能性, 希土類レーザーの励起光飽和特性, YVO_4 の高熱伝導率特性の発見, 実証に繋がったばかりでなく, マイクロ共振器の高輝度効果, レーザー利得と非線形光学過程の量子相関などの興味深い展開も見せている。特にレーザー科学発展の中で生じたパルスギャップ領域であるサブナノ秒からピコ秒の便利な光源開拓に関する貢献, パルスギャップレーザーによる新現象の解明などが期待できる。
- c) 開発した光素子を用いた新規レーザー, 波長変換システムの開発と展開を図っている。これまでにエッジ励起セラミック Yb:YAG マイクロチップレーザーによる高平均出力動作, 手のひらサイズジャイアントパルスマイクロチップレーザーからの高輝度温度光発生, マイクロチップレーザーからの UV 光 (波長: 266 nm) からテラヘルツ波 (波長: 100 ~ 300 μm), さらには高効率・高出力のナノ秒光パラメトリック発生 (出力エネルギー約 1 J, 効率約 80%), 波長 5~12 μm に至る広帯域波長可変中赤外光発生, 1.5 サイクル中赤外光からのコヒーレント軟 X 線 (波長: ~5 nm) ・アト秒 (200 ~ 300 as) 発生などをマイクロ固体フォトリソで実証した。アト秒発生に重要な中赤外 OPCPA では, LA-PPMgLN を用い波長 2.1 μm にてパルス幅 15 fs を平均出力 10 W と, この領域で世界最大出力を達成した。特にマイクロチップレーザーでは, パルスギャップであるサブナノ秒での高輝度光発生が望め, 光イオン化過程に有利なため極めて低いエネルギーで効率的なエンジン点火が可能となる。すでに世界ではじめての自動車エンジン搭載, 走行実験にも成功している。一方, DFC チップでは常温にてサブナノ秒で 2.8 J の 1 μm 光発生に成功しており尖頭値で 3.5 GW に達する。フルエンスでは, 1.12 J/cm², 1.56 GW/cm² にも達するもので世界記録になる。この高輝度光は光パラメトリック過程によるテラヘルツ (THz) 波発生にも有利である。また, LA-PPMgLN を用いてピコ秒領域で mJ に至る狭線幅 THz 波発生も可能となった。マンレー・ローによる量子限界を超える効率である。今後, 分子の振動状態についてのより詳細な分光学的情報を得ることから, THz 波による電子加速まで幅広い展開が期待される。

B-1) 学術論文

K. TAMURA, R. NAKANISHI, H. OHBA, T. KARINO, T. SHIBATA, T. TAIRA and I. WAKAIDA, “Development of a Radiation Tolerant Laser-Induced Breakdown Spectroscopy System Using a Single Crystal Micro-Chip Laser for Remote Elemental Analysis,” *J. Nucl. Sci. Technol.* **61**(8), 1109–1116 (2024). DOI: 10.1080/00223131.2023.2298485

B. S. HETTIARACHCHI, Y. TAKAOKA, Y. UETAKE, Y. YAKIYAMA, H. H. LIM, T. TAIRA, M. MARUYAMA, Y. MORI, H. Y. YOSHIKAWA and H. SAKURAI, “Uncovering Gold Nanoparticle Synthesis Using a Microchip Laser System through Pulsed Laser Ablation in Aqueous Solution,” *Ind. Chem. Mater.* **2**, 340–347 (2024). DOI: 10.1039/d3im00090g

- V. YAHIA, A. KAUSAS, A. TSUJI, M. YOSHIDA and T. TAIRA**, “Joule-Class Sub-Nanosecond Pulses Produced by End-Pumped Direct Bonded YAG/Sapphire Modular Amplifier,” *Opt. Express* **32**(8), 14377–14393 (2024). DOI: 10.1364/OE.518251
- N. H. MATLIS, H. T. OLGUN, C. RENTSCHLER, K. RAVI, T. TAIRA, H. ISHIZUKI and F. X. KÄRTNER**, “Scaling Narrowband THz Generation to Large Apertures in LiNbO₃ and KTP,” *Opt. Express* **32**(19), 33875–33893 (2024). DOI: 10.1364/OE.533354
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Characterization of Crystal Quartz for QPM Wavelength-Conversion Device,” *Opt. Express* **32**(27), 48491–48499 (2024). DOI: 10.1364/OE.539371
- Y. SATO, T. TAKEMASA and T. TAIRA**, “Comprehensive Thermal Properties of Y₃Al₅O₁₂ from 160 K to 500K,” *Opt. Express* **33**(5), 9479–9488 (2025).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Nd³⁺-Doping in Al³⁺-Site of α -Al₂O₃ as a Raw Material of Nd:Sapphire Laser Ceramics,” *Opt. Express* **33**(6), 13077–13086 (2025).

B-2) 国際会議のプロシーディングス他

- K. TAKEYA, V. YAHIA, H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Terahertz Differential Frequency Generation Via Narrow Linewidth Dual Wavelength Light Obtained By Degenerated OPO-VBG System,” *49th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves (IRMMW-THz 2024)* (2024).
- K. HIROSAWA, N. OHATA, A. KAUSAS, V. YAHIA and T. TAIRA**, “2-J, 20-Hz Pulse Laser System Operating at Room Temperature and Wavelength Conversion to 266 nm,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, ATu1A.4 (2024).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Nd³⁺-doping into Al³⁺-site in bulk-shaped α -Al₂O₃,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, JTu2A.11 (2024). (poster)
- A. OSANAI, A. KAUSAS and T. TAIRA**, “Laser Induced Damage Evaluation for Laser Material Development,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, JTu2A.18 (2024). (poster)
- K. TAKEYA, V. YAHIA, H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Amplification of narrow linewidth 2-wavelength light for THz wavelength conversion,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, JW2A.16 (2024). (poster)
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Wavelength-tunable, dual 2 μ m light source for high-brightness THz-wave generation,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, JW2A.33 (2024). (poster)
- B. BRUNETEAU, H. H. LIM and T. TAIRA**, “Highly-stable 1064 nm laser for high-fidelity quantum-operations,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, JW2A.37 (2024). (poster)
- B. BRUNETEAU, B. FAURE, J. DEBRAY, P. SEGONDS, T. TAIRA and B. BOULANGER**, “Singly Resonant Infrared Tunable Optical Parametric Oscillator Based on a Cylindrical 5%MgO:PPLN Crystal Pumped by a 1064 nm Sub-nanosecond Microchip Laser,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, AW4A.3 (2024).
- F. CASSOURET, Y. SATO, A. KAUSAS and T. TAIRA**, “Room temperature bonded Cr:LiSAF crystal for high-power broadband laser,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, AW5A.1 (2024).
- Y. SATO, A. KAUSAS and T. TAIRA**, “Improved effective thermal conductivity of DFC-PowerChip fabricated by il-SAB,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, AW5A.3 (2024).

Y. SATO and T. TAIRA, “Augmentation of the emission bandwidth by spectrum tailoring with Nd-doped garnets and bixbyites,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, AW5A.4 (2024).

V. YAHIA, A. KAUSAS, H. ODAKA and T. TAIRA, “25 Hz, 2 J pulses generated by DFC-PowerChip Amplifier,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, ATh1A.7 (2024).

M. YOSHIDA, A. KAUSAS, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, Z. R. RUI and X. ZHOU, “Yb:YAG Fiber, Disk and DFC Hybrid Amplifier for DFG THz generation,” *Laser Applications, Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, LTh1B.2 (2024). (Invited)

Y. SATO, A. KAUSAS and T. TAIRA, “Improvement of the effective thermal conductivity in DFC-PowerChip for highly intense laser gain media,” *2024 8th International Workshop on Low Temperature Bonding for 3D Integration (LTB-3D 2024)*, 31P-02 (2024).

A. KAUSAS and T. TAIRA, “Performance Optimization of Gigawatt-Class DFC-PowerChip Laser System through Bonding Technology,” *2024 8th International Workshop on Low Temperature Bonding for 3D Integration (LTB-3D 2024)*, 30O-08 (2024).

B-3) 総説, 著書

平等拓範, 「先端レーザーを支える材料技術」特集号によせて, *レーザー研究*, **53(2)** (「先端レーザーを支える材料技術」特集号), pp. 58–59 (2025).

A. KAUSAS and T. TAIRA, “Room Temperature Bonded Structures for Novel Laser Devices,” *The Review of Laser Engineering*, **53(2)** (Special Issue on “Material Science toward the Extreme Lasers”), pp. 79–82 (2025). (in Japanese)

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

A. KAUSAS and T. TAIRA, “DFC-chip Tiny Integrated Laser,” The 10th Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2024), OPIC 2024, Yokohama (Japan) (Hybrid), April 2024.* (Keynote)

I. WAKAIDA, H. OHBA, K. AKAOKA, T. KARINO, R. NAKANISHI, K. SAKAMOTO, Y. IKEDA and T. TAIRA, “‘TILA’ application in severe environments as a powerful tool for in-situ remote analysis of fuel debris in decommissioning of Fukushima Daiichi Nuclear Power Station,” The 10th Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2024), OPIC 2024, Yokohama (Japan) (Hybrid), April 2024.

平等拓範, 「マイクロ固体フォトンクスと光量子技術のもつれ」, 「光量子センシング社会実装コンソーシアム (KU-PhotonIQS)」2024年度年次総会, 京都大学, 京都, 2024年6月.

平等拓範, 「マイクロチップレーザーの可視光応用」, 日本光学階レーザーディスプレイ技術研修会, あうら橋, 神奈川県箱根町, 2024年7月.

平等拓範, 「小型集積パワーチップレーザー」, 第48回レーザ協会セミナー「自動車業界におけるレーザ加工の現在と未来」, 東京都立産業貿易センター, 東京, 2024年10月.

M. YOSHIDA, A. KAUSAS, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, Z. R. RUI and X. ZHOU, “Yb:YAG Fiber, Disk and DFC Hybrid Amplifier for DFG THz generation,” *Laser Applications, Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, Grand Prince Hotel Osaka Bay, Osaka (Japan), October 2024.

T. TAIRA, “Tiny Integrated PowerChip Laser for LIBS,” Joint International Conferences on Post-CSI/ASLIBS2023 and The 9th Symposium on Applications of Advanced Measurement Technologies (SAAMT)2024, AOSSA, Fukui (Japan), December 2024.* (Keynote)

平等拓範,「直接接合による小型集積極限パワーレーザー」,日本学術振興会第R032産業イノベーションのための結晶成長委員会第19回研究会,名古屋大学,名古屋,2025年1月.

平等拓範,「DFC パワーチップによる小型集積レーザーの可能性」,微小光学研究会(応用物理学会)第174回研究会,早稲田大学,東京,2025年3月.

平等拓範,「マイクロチップレーザーから小型集積レーザーへ」,一般社団法人ワイドギャップ半導体学会(WideG),第20回研究会,コモレ四谷,東京(ハイブリッド開催),2025年3月.

B-6) 受賞, 表彰

T. TAIRA, Research.com Engineering and Technology in Japan, Leader Award (2024).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

レーザー学会研究会委員(1999-),「小型集積レーザー」技術専門委員会主査(2021-2025).

光産業技術振興協会光材料・応用技術研究会幹事(2004-), 多元技術融合光プロセス研究会幹事(2009-).

日本光学会レーザーディスプレイ技術研究グループ実行委員(2015-), 光エレクトロニクス産学連携専門委員会学会委員及び主査(2020.4-), 生体ひかりイメージング産学連携専門委員会委員及び幹事(2022-2026).

米国光学会 The Optical Society (OSA) フェロー(2010-).

国際光工学会 The International Society for Optical Engineering (SPIE) (米国) フェロー(2012-).

米国電気電子学会 The Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE) フェロー(2014-).

The International Academy of Photonics and Laser Engineering (IAPLE) フェロー(2018-).

OPTICA(Formerly OSA), 会議評議員(Meetings Council)(2023-).

(公財)天田財団理事(2023-).

学会の組織委員等

SPIE Photonics West, LASE, 国際会議委員会共同議長(米国, サンフランシスコ)(2019-2024).

CLEO/Europe, Solid-State Lasers, 国際会議プログラム委員会委員(ドイツ, ミュンヘン)(2022-2024).

9th International Symposium on Optical Materials (IS-OM'9), 国際会議諮問委員(スペイン, タラゴナ)(2023-).

Advanced Solid State Laser Conference (ASSL), 国際会議プログラム委員会委員(Materials Program Committee)(2017-).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業ACT-X 研究領域「リアル空間を強靱にするハードウェアの未来」領域アドバイザー(2021-).

学会誌編集委員

Applied Sciences (<https://www.mdpi.com/journal/applsci>, ISSN 2076-3417), MDPI, 編集委員会委員(2021-2024).

“*Tiny Integrated Lasers and Their Application to Industrial Laser Technologies (TILA-LIC 2024)*,” *Feature Issue in Optics Express* (2025), Lead Editor (2024).

その他

ハイティラ株式会社CTO(2023-).

B-8) 大学等での講義, 客員

核融合科学研究所, 客員教授, 2023 年 -.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構未来社会創造事業(大規模プロジェクト型)「レーザー駆動による量子ビーム加速器の開発と実証」(代表: 公益財団法人高輝度光科学研究センター熊谷教孝(2017年度-2020年度), 自然科学研究機構佐野雄二(2021年度-2026年度)), 平等拓範(再委託)(2017年度-2026年度).

安全保障技術研究推進制度, 「ジャイアント・マイクロフォトンクスによる高出力極限固体レーザー」, 平等拓範(2020年度-2024年度).

文部科学省平成 30 年度科学技術試験研究委託事業(Q-LEAP)「先端レーザーイノベーション拠点「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」部門」, 「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」(②a.10KHz 赤外 OPCPA 光源の開発), 再委託(東京大学), 平等拓範(2018年度-2027年度).

安全保障技術研究推進制度, 「超小型ロバストテラヘルツ波イメージング装置の研究開発」(代表: 南出泰亜), 平等拓範(研究分担者)(2020年度-2024年度).

科学技術振興機構ムーンショット型研究開発事業, 「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」(代表: 大森賢治), 「高安定・高強度小型集積レーザーシステムの研究開発」, 平等拓範(研究分担者)(2023年度-2025年度).

日本原子力研究開発機構廃炉・汚染水対策事業費補助金, 「燃料デブリの性状把握のための分析・推定技術の開発」(代表: 若井田育夫), 「DFC 型高出力マイクロチップレーザーの開発に関する研究」, 平等拓範(研究分担者)(2023年度-2024年度).

B-11) 産学連携

共同研究, トヨタ自動車(株), 「量子光源の研究 2」, 平等拓範(2024年度).

共同研究, 三菱電機(株), 「小型集積化に向けた高強度レーザー光源研究開発」, 平等拓範(2022年度-2024年度).

共同研究, (株)ハナムラオプティクス, 「ジャイアントパルス・マイクロチップレーザーによる波長変換」, 平等拓範(2023年度-2024年度).

共同研究, ハイティラ(株), 「接合型小型集積レーザーの研究」, 平等拓範(2023年度-2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

先端的レーザー光源の中で, 特にビーム高品質化(空間特性制御)ならびに短パルス化(時間特性制御)などの高輝度化, そしてスペクトルの高純度化を広い波長領域(スペクトル特性制御)でコンパクト化と同時に実現することは, 極めて重要な課題である。一方, 極限的な粒子加速が期待されるレーザー加速では, 物質の性質を原子・分子レベルで解明し, さらに化学反応などの超高速の動きを捉えることができ, 広範な分野の最先端研究に利用される加速器, 特にX線自由電子レーザー SACLA をトレーラーサイズにまで小型化できると期待される。しかし, その加速のための高強度レーザーが非常に大型であることが深刻な問題となり, マイクロ固体フォトンクスへの期待が高まっている。今後, レーザー加速による小型加速器の構築を目指すと共に, レーザー加速に資する先端レーザー科学を, 別途, 社会連携研究, 小型集積レーザー(TILA, Tiny Integrated Laser)コンソーシアムにて製造, 医療, 量子コンピュータ, 環境・エネルギー問題などに展開し, 基礎研究の推進が社会貢献に繋がることを検証して行きたい。

4-10 研究施設等

機器センター

湊 丈俊（主任研究員）（2020 年 6 月 1 日着任）

兵藤 由美子（事務支援員）

A-1) 専門領域：表面界面科学，エネルギー変換，物理化学

A-2) 研究課題：

- a) 走査プローブ顕微鏡の高度化と物性・反応機構の解明
- b) 電極／電解液界面におけるエネルギー変換の機構解明
- c) 環境触媒の反応機構解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 温度は化学反応に大きな影響を与える要因の一つであり，液中での走査プローブ顕微鏡（SPM）測定においても精密な温度制御が求められる。しかし，氷点下環境での高分解能測定はこれまで報告されていなかった。本研究では，試料周辺の温度を制御する機構を構築し測定を試みたが，探針との温度差が原因で安定した測定が困難だった。そこで，測定システム全体を均一に温度制御する新たなシステムを開発し，世界で初めて液中における氷表面の高分解能測定に成功した。本成果は，大西洋教授（神戸大学・分子科学研究所）との共同研究によるものである。さらに，湿度を制御しながら測定可能な SPM システムを開発し，ナノ水滴の特異な凝着力を検出することにも成功した。湿度変化がナノスケールの液体挙動に及ぼす影響を詳細に解析し，ナノ水滴の凝着メカニズムに関する新たな知見を得た。本研究は，荒木優希助教（金沢大学）との共同研究として実施された。これらの成果は，低温環境下や湿度制御下でのナノスケール測定技術の発展に寄与し，エネルギー材料研究や界面科学分野への応用が期待される。
- b) リチウムイオン電池は，小型電子機器や電気自動車など幅広い分野で利用されているが，さらなる高性能化と環境負荷の低減が求められている。本研究では，アニオンの移動を利用した新型蓄電池の開発と，その反応メカニズムの解明に取り組んでいる。今年度は，環境循環型の電解液と電極を発見し，X線回折（XRD），X線光電子分光（XPS），電子顕微鏡などを用いて詳細に分析した。また，走査型プローブ顕微鏡（SPM）を活用し，ナノスケールでの反応メカニズムを調査した。これらの成果は，新たな蓄電池技術の発展に貢献し，持続可能なエネルギー貯蔵システムの実現に寄与するものである。
- c) 大気中の二酸化炭素濃度の増加という環境問題に対処するため，低温でのメタン化反応において高いメタン収率を得ることを目指し，La と Zr を添加した Ni/CeO₂ 触媒の研究を行った。触媒を合成し，その触媒活性と物性を詳細に解析した。その結果，La を添加した触媒が，より大きな表面積と十分な酸素空孔，そして高い Ni 分散性を示し，低温でのメタン化において優れた性能を発揮することが明らかになった。本研究は，タイの Khon Kaen 大学との共同研究である。

B-1) 学術論文

M. KOBAYASHI, J. TAKAHASHI, H. OTA, K. MATSUO, M. I. A. IBRAHIM, T. MINATO, G. FUJIMORI, M. KATOH, K. KOBAYASHI, Y. KEBUKAWA and H. NAKAMURA, “Emergence of Optical Activity and Surface Morphology Changes in Racemic Amino Acid Films Under Circularly Polarized Lyman- α Light Irradiation,” *Chirality* **36(11)**, e70004 (2024). DOI: 10.1002/chir.70004

J. P. ITHIKKAL, K. FUKUTANI, F. NISHINO, T. MINATO, H. ISHII, S. IZAWA, K. TANAKA, M. HIRAMOTO and S. KERA, “Direct Observation of the Electronic Structure and Many-Body Interactions of Low-Mobility Carriers in Perylene Diimide Derivative,” *Appl. Phys. Lett.* **125(5)**, 052102 (2024). DOI: 10.1063/5.0221293

R. YANAGISAWA, T. UEDA, K. NAKAMOTO, Z. LU, H. ONISHI and T. MINATO, “The Interface between Ice and Alcohols Analyzed by Atomic Force Microscopy,” *J. Chem. Phys.* **161(2)**, 024702 (2024). DOI: 10.1063/5.0211501

Y. ARAKI, T. MINATO and T. ARAI, “Microscopic Behavior of Nano-Water Droplets on a Silica Glass Surface,” *Sci. Rep.* **14(1)**, 10693 (2024). DOI: 10.1038/s41598-024-61212-1

S. TSUBOKURA, S. KAWANO, Y. IMAI, T. UEDA, K. NAKAMOTO, H. NOMA, H. HIOKI and T. MINATO, “Development of a Method for Analyzing the Positional Correlation of Local Structures in Scanning Probe Microscopy Images Using Template-Matching Image-Processing Method,” *Appl. Phys. Express* **17(3)**, 035003 (2024). DOI: 10.35848/1882-0786/ad2784

B-4) 招待講演

湊 丈俊, 「原子間力顕微鏡を用いた蓄電池の電極と電解液の界面における物性と反応機構の in-situ 解析」, ブルカージャパンナノ表面計測事業部 AFM ミーティング【関西】AFM を用いた電池特性評価技術, 大阪, 2024 年 10 月.

荒木優希, 湊 丈俊, 新井豊子, 「FM-AFM によるナノスケロピックなぬれのその場観察」, 第 85 回応用物理学会秋季学術講演会シンポジウム: 異分野に広がる界面ナノ電子化学～最先端半導体からバイオサイエンスまで～, 新潟, 2024 年 9 月.

T. MINATO, “Reaction Mechanism at Interface between Electrode and Electrolyte Analyzed by Scanning Probe Microscopy,” The 12th Vacuum and Surface Sciences Conference of Asia and Australia, Taipei (Taiwan), October 2024.

T. MINATO, “Breaking Boundaries,” Special Lecture, Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering, Kohn Kaen University, Kohn Kaen (Thailand), September 2024.

T. MINATO, “Surface & Interface Sciences in Energy Conversion Materials,” International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC) MONGOLIA 2024, Ulaanbaatar (Mongolia), September 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会 代議員 (2023–2025).

International Union for Vacuum Science, Technique and Applications (IUVSTA)-Japan 国際連携委員会委員 (2023–).

Applied Surface Science Division, International Union for Vacuum Science, Technique and Applications (IUVSTA)-Japan, Vice Chair (2023–).

日本表面真空学会 国際連携委員会委員 (2024–2025).

次世代ナノプローブ技術委員会 運営委員 (2024–2025).

日本表面真空学会マイクロビームアナリシス技術部会 幹事 (2024–2025).

学会の組織委員等

日本表面真空学会 ISSS-10 プログラム委員会委員 (2022–2025).

The 34th Thai Institution of Chemical Engineering and Applied Chemistry International Conference International Scientific Committee (2024–2025).

ALC'24組織委員会 ALC'24 プログラム委員 (2023–2025).

学会誌編集委員

e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, Associate Editor (2024–2025).

その他

青森県三戸町ふるさと応援大使 (2021–2025).

B-8) 大学等での講義, 客員

Kohn Kaen University, Department of Chemical Engineering, Inbound Visiting Scholar, “Instrumental Analysis,” 2024年9月–12月.

Khon Kaen University, Inbound Visiting Scholar, 2024年9月–12月.

B-10) 競争的資金

自然科学研究機構 Open Mix Lab (OML) 公募研究プログラム (テーマ設定型), 「アニオン移動型革新型蓄電池反応の研究」, 湊 丈俊 (2023年度–2024年度).

科研費基盤研究(C), 「ガラス上のナノ水滴の構造観察による微視的ぬれの解明」 (代表者: 荒木優希), 湊 丈俊 (研究分担者) (2023年度–2025年度).

中村 敏和（チームリーダー）
（研究力強化戦略室特任部長（研究戦略担当））

B-1) 学術論文

T. ISHIZAKI, M. ASADA, T. NAKAMURA and T. OZEKI, “Spin Coherence Phenomena of an $S = 1/2$ Copper(II) System in a Polyoxometalate with a Less-Abundant Nuclear Spin,” *Dalton Trans.* **54(9)**, 3581–3585 (2024). DOI: 10.1039/D4DT02832E

T. FUJINO, R. KAMEYAMA, K. ONOZUKA, K. MATSUO, S. DEKURA, T. MIYAMOTO, Z. GUO, H. OKAMOTO, T. NAKAMURA, K. YOSHIMI, S. KITOU, T. ARIMA, H. SATO, K. YAMAMOTO, A. TAKAHASHI, H. SAWA, Y. NAKAMURA and H. MORI, “Orbital Hybridization of Donor and Acceptor to Enhance the Conductivity of Mixed-Stack Complexes,” *Nat. Commun.* **15(1)**, 3028 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-47298-1

M. INOUE, A. YAMAUCHI, B. PARMAR, K. ORIHASHI, M. SINGH, M. ASADA, T. NAKAMURA and N. YANAI, “Guest-Responsive Coherence Time of Radical Qubits in a Metal-Organic Framework,” *Chem. Commun.* **60(48)**, 6130–6133 (2024). DOI: 10.1039/D4CC01564A

A. YAMAUCHI, S. FUJIWARA, N. KIMIZUKA, M. ASADA, M. FUJIWARA, T. NAKAMURA, J. PIRILLO, Y. HIJIKATA and N. YANAI, “Modulation of Triplet Quantum Coherence by Guest-Induced Structural Changes in a Flexible Metal-Organic Framework,” *Nat. Commun.* **15(1)**, 7622 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-51715-w

B-4) 招待講演

中村敏和, 「機能性分子集合体の磁気共鳴研究」, 第 63 回電子スピンサイエンス学会, 福井市, 2024 年 11 月.

T. NAKAMURA, “ESR Study of Functional Molecular System,” International Workshop “Modern developments and applications of ESR, THz and high magnetic fields,” Kobe (Japan), September 2024.

B-6) 受賞, 表彰

中村敏和, 電子スピンサイエンス学会学会賞 (2024).

B-7) 学会および社会的活動

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用・共同研究運営協議会委員 (2018–2025).

科学技術振興機構大学発新産業創出基金事業及び研究成果展開事業外部専門家 (2023–2025).

科学技術振興機構創発的研究支援事業事前評価外部専門家 (2023–2025).

文部科学省科学技術・学術政策局 科学技術・学術審議会人材委員会外部有識者 (2024).

文部科学省科学技術・学術政策局 科学技術・学術審議会臨時委員 (2024–2025).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「凝縮系のスピンドコヒーレンスを支配しているものは何か?」中村敏和 (2024 年度–2027 年度).

鈴木 敏泰（チームリーダー）

B-1) 学術論文

K. TAKEDA, N. OHTSUKA, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Prediction Method for Reaction Yield of Deuteration of Polyfluoroperylene Using Generative AI Techniques,” *Comput.-Aided Chem. Eng.* **53**, 2689–2694 (2024). DOI: 10.1016/b978-0-443-28824-1.50449-x

N. OHTSUKA, H. OTA, S. SUGIURA, S. KAKINUMA, H. SUGIYAMA, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Perfluorohalogenated Naphthalenes: Synthesis, Crystal Structure, and Intermolecular Interaction,” *CrystEngComm* **26**, 764–772 (2024). DOI: 10.1039/d3ce01124k

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「フッ素化ペリレン化合物の合成とデバイスへの応用」, 鈴木敏泰 (2023年度–2025年度).

科研費学術変革領域研究(A), 「デジタル化による高度精密有機合成の新展開」 (代表: 大嶋孝志), 鈴木敏泰 (研究分担者) (2021年度–2025年度).

計算科学研究センター（ネットワーク担当）

大野 人侍（准教授）（1996年4月1日着任，2019年10月1日昇任）

A-1) 専門領域：情報科学，ネットワーク運用技術及びサイバーセキュリティ

A-2) 研究課題：

- a) ソフトウェアを用いたネットワークの自動制御
- b) ログ解析等によるネットワーク／サイバーセキュリティの自動最適化及び認証
- c) a), b) への AI の応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ORION2022（Okazaki Research Institutes Organization Network）において，Google Workspace 等のパブリッククラウドサービスの利用を前提としたゼロトラスト・アーキテクチャを取り入れたシステム構築を行い，従来の ORION 主認証システムを拡張し，ゼロトラストを実現する認証基盤とした。ORION2022 主認証システムは，ORION へのネットワーク接続時の定期的な端末及びユーザ認証，VPN 接続時ユーザ認証や管理システムなどのシステム及びパブリック SaaS（Google Workspace 及び Microsoft Office365）のユーザ認証に利用され MFA 及びシングルサインオン機能を提供している。現在，ORION2022 運用期間中の安全なシステム利用継続のための近代化改修を行っている。更に，自然科学研究機構における統合認証基盤構築を行う機構タスクフォースの一員としてシステム化のための調査研究を行うと共に，評価用システムの開発に着手している。
- b) ORION2022 で導入した器機及びサービスでは API の提供を原則求めており，提供された API によりログやイベントなどの自動取得や処理の自動化，器機／サービス間連携を行えるようになっている。また，標準で提供されていない機能についても API とローカルプログラムを組み合わせる柔軟に提供している。現在，その適用範囲を広げるシステム開発を行っている。また，機構情報セキュリティ基本計画にもログをプロアクティブに活用する目標が示されており今後はそれに沿った開発を行っていくことを検討している。
- c) a), b) についてより効果的な利活用が行えるように AI の適用について踏査を行っており，予備的な評価システムの構築運用を行っている。

B-7) 学会および社会的活動

その他

総合研究大学院大学情報セキュリティアドバイザー (2024–2025).

C) 研究活動の課題と展望

ORION におけるユーザや端末の認証と認可の統一化を引き続き推進していく。ORION2022 は，クラウド等 ORION 外部のサービスを含んだ統合型ユーザ／端末管理・認証基盤，現在のログ解析基盤を拡張発展させクラウド・ログを取り込み ORION とクラウドの一貫した取扱と分析を可能とする情報セキュリティ・インシデント対応基盤やそれらを統合し自動制御するシステムとして設計，仕様化し調達を行い運用している。更に，API によるシステム間連携

が行えるようになっているため、APIを用いた各システム間の連携や独自機能の開発と運用開始と機能拡張をおこなっている。現在、この環境を機構全体に広げるために自然科学研究機構統合認証基盤構築へ向け機構認証基盤タスクフォースメンバーとして踏査研究を推進すると共に評価システムの開発やプロアクティブに情報を活用する検討を行っていく。

また、AIの応用に向けた調査等を行っている。

技術推進部及び安全衛生管理室

B-1) 学術論文

- Y. MIZUTA, D. SAKAKIBARA, S. NAGAHARA, I. KANESHIRO, T. T. NAGAE, D. KURIHARA and T. HIGASHIYAMA**, “Deep Imaging Reveals Dynamics and Signaling in One-To-One Pollen Tube Guidance,” *EMBO Rep.* **25**, 2529–2549 (2024). DOI: 10.1038/s44319-024-00151-4
- R. YANAGISAWA, T. UEDA, K. NAKAMOTO, Z. LU, H. ONISHI and T. MINATO**, “The Interface between Ice and Alcohols Analyzed by Atomic Force Microscopy,” *J. Chem. Phys.* **161**(2), 024702 (5 pages) (2024). DOI: 10.1063/5.0211501
- T. MATSUMOTO, T. NOGUCHI, A. MIYAKE, Y. IGAMI, M. MATSUMOTO, T. YADA, M. UESUGI, M. YASUTAKE, K. UESUGI, A. TAKEUCHI, H. YUZAWA, T. OHIGASHI and T. ARAKI**, “Sodium Carbonates on Ryugu as Evidence of Highly Saline Water in the Outer Solar System,” *Nat. Astron.* **8**(12), 1536–1543 (2024). DOI: 10.1038/s41550-024-02418-1
- J. A. LAUX, T. OHIGASHI, M. R. BITTERMANN, T. ARAKI, H. YUZAWA, F. RANCAN, A. VOGT and E. RÜHL**, “Scanning Transmission Soft X-Ray Microscopy Probes Topical Drug Delivery of Rapamycin Facilitated by Microneedles,” *ChemPhysChem* **26**(2), e202400819 (10 pages) (2025). DOI: 10.1002/cphc.202400819
- M. ODELIUS, S. D. FOLKESTAD, T. SAISOPA, Y. RATTANACHAI, W. SAILUAM, H. YUZAWA, N. KOSUGI, A. C. PAUL, H. KOCH and D. CÉOLIN**, “Symmetry Breaking around Aqueous Ammonia Revealed in Nitrogen K-Edge X-Ray Absorption,” *J. Phys. Chem. Lett.* **16**, 3411–3419 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpclett.4c03625

B-7) 学会および社会的活動

理科教育活動

国研セミナー「低温が創る世界，低温と超電導の不思議—低温の世界と物理法則を学習・体験する—」岡崎市理科部 (2024). (豊田朋範)

その他

学内演習「各種センサーで WAN-WAN を動かすまで」大阪大学大学院理学研究科 (2024). (豊田朋範)

WAN-WAN 実演セミナー「WAN-WAN 事例紹介—分子科学研究クリーンルーム—」東北大学大学院工学研究科 (2024). (豊田朋範)

中西電機工業(株) 研修講演「国立研究機関における研究支援業務とサプライヤー」分子科学研究所 (2025). (豊田朋範)

B-8) 大学等での講義，客員

岡野泰彬, 中部大学非常勤講師, 「基礎力学」および「力学」, 2024 年度春学期, 「基礎電磁気学」, 2024 年度秋学期.

客員研究部門及び退職・転出後等の成果論文
(所属に分子科学研究所を含む)

- S. A. SHAH, H. VALI, DAIJIRO OKAUE, K.-I. FUKUI, D.-S. YANG and S. BALDELLI**, “Surface Structure Characterization of Rubrene(001) Single Crystal with Sum Frequency Generation Spectroscopy and Reflection High-Energy Electron Diffraction,” *J. Chem. Phys.* **162**(1), 014701 (2025). DOI: 10.1063/5.0236513
- T. TSUCHIMOCHI**, “Double Configuration Interaction Singles: Scalable and Size-Intensive Approach for Orbital Relaxation in Excited States and Bond-Dissociation,” *J. Chem. Phys.* **161**(24), 241102 (2024). DOI: 10.1063/5.0243710
- M. KIRA, Y. SHIGA, K. NAKAGAWA, A. MATSUMOTO, K. TOKITA, Y. TERASAWA, K. ZHANG, K. TSUTAO, T. NAKANISHI, S. YOSHIDA, S. SATO, N. SHIBATA and T. ASAHI**, “Chiral Inversion of Thalidomide During Crystal Growth by Sublimation,” *Cryst. Growth Des.* **24**(8), 3133–3139 (2024). DOI: 10.1021/acs.cgd.3c01030
- N. KOGA, Y. SAITO, K. MIYAKE, S. AMUTI, S. FUKUYOSHI, S. YOSHIDA, S. SATO, Y. YAMADA, A. IKEDA, N. ADACHI, M. KAWASAKI, A. TAKASU, S. ARAMAKI, T. SENDA, A. RAHIM, A. NAJIB, G. ALAM, N. TANAKA and K. NAKAGAWA-GOTO**, “Cyclic Sesquiterpene–Flavanone [4+2] Hybrids, Syzygioblanes A–C, Found in an Indonesian Traditional Medicine, ‘Jampu Salo’ (*Syzygium oblanceolatum*),” *Org. Lett.* **26**(20), 4302–4307 (2024). DOI: 10.1021/acs.orglett.4c01248
- X. ZHANG, H. HE, C. GE, Q. XIANG, S. SATO, M. LV, X. CHEN and Z. SUN**, “Crystallization-Induced Dimerization and Solution-Phase Bond Dissociation of Stable Dibenzoolympicenyl Radicals,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**(6), e202418261 (2025). DOI: 10.1002/anie.202418261
- K. LI, S. YOSHIDA, R. YAKUSHIJI, X. LIU, C. GE, Z. XU, Y. NI, X. MA, J. WU, S. SATO and Z. SUN**, “Molecular Cylinders with Donor–Acceptor Structure and Swinging Motion,” *Chem. Sci.* **15**, 18832–18839 (2024). DOI: 10.1039/d4sc05849f
- Z. ZHOU, Y. YANG, J. LIANG, S. SATO, Z. ZHANG and Z. WEI**, “Stepwise Chemical Reduction of [4]Cyclo[4]helicenylene: Stereo Transformation and Site-Selective Metal Complexation,” *Precis. Chem.* **3**(1), 27–34 (2025). DOI: 10.1021/prechem.4c00064
- A. KANNO, R. TANIFUJI, S. YOSHIDA, S. SATO, S. MAKI-YONEKURA, K. TAKABA, J. KANG, K. TONO, K. YONEKURA and H. OGURI**, “Streamlined Modular Synthesis of Saframycin Substructure via Copper-Catalyzed Three-Component Assembly and Gold-Promoted 6-*endo* Cyclization,” *Beilstein J. Org. Chem.* **21**, 226–233 (2025). DOI: 10.3762/bjoc.21.14
- G. TAKEKAWA, Y. NAKASON, Y. KAMIYA, H. ASANUMA and M. TERAZIMA**, “Reaction and Interaction Dynamics of Azobenzene-Tethered DNA with T7 RNA Polymerase,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **27**(6), 3302–3312 (2025). DOI: 10.1039/d4cp04080e
- A. MIZUNO, R. MATSUOKA, S. KIMURA, K. OCHIAi and T. KUSAMOTO**, “Spin-Correlated Luminescence of a Carbazole-Containing Diradical Emitter: Single-Molecule Magnetoluminescence and Thermally Activated Emission,” *J. Am. Chem. Soc.* **146**(27), 18470–18483 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c03972
- K. SONODA, S. SHIMOKAWA, S. SUZUKI, T. KUSAMOTO and A. UEDA**, “Boron-Bridged Bis(tetrathiafulvalene) Zwitterionic Neutral Radical Conductors: Substituent Effects on Intramolecular and Intermolecular Electronic Interactions and Physical Properties,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **97**(10), uoae107 (2024). DOI: 10.1093/bulcsj/uoae107
- H. IZU, M. KONDO, M. OKAMURA, M. TOMODA, S. K. LEE, T. AKAI, V. K. K. PRANEETH, M. KANAIKE, S. KAWATA and S. MASAOKA**, “Precise Manipulation of Electron Transfers in Clustered Five Redox Sites,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **63**(47), e202408514 (2024). DOI: 10.1002/anie.202408514
- R. M. STROUD, J. BAROSCH, L. BONAL, K. BURGESS, G. D. CODY, B. T. DE GREGORIO, L. DALY, E. DARTOIS, E. DOBRICÁ, J. DUPRAT, C. ENGRAND, D. HARRIES, M. HASHIGUCHI, H. ISHII, Y. KEBUKAWA, A. D. KILCOYNE,**

F. LANGENHORST, M. R. LEE, L. R. NITTLER, E. QUIRICO, T. OKUMURA, L. REMUSAT, S. SANDFORD, H. YABUTA, M. ABE, N. M. ABREU, P. A. J. BAGOT, P. BECK, L. BEJACH, P. A. BLAND, J. C. BRIDGES, B. A. CYMES, A. DAZZI, F. DE LA PEÑA, A. DENISET-BESSEAU, S. ENJU, Y. ENOKIDO, D. R. FRANK, J. GRAY, M. HARUTA, S. HATA, L. HICKS, Y. IGAMI, D. JACOB, K. KAMIDE, M. KOMATSU, S. LAFORET, H. LEROUX, C. LE GUILLOU, Z. MARTINS, M. MARINOVA, J. MARTINEZ, J. MATHURIN, M. MATSUMOTO, T. MATSUMOTO, J. MATSUNO, S. MCFADZEAN, T. MICHIKAMI, I. MITSUKAWA, A. MIYAKE, M. MIYAHARA, A. MIYAZAKI, G. MONTAGNAC, S. MOSTEFAOUI, T. NAKAMURA, A. NAKATO, H. NARAOKA, Y. NAKAUCHI, S. NAKAZAWA, M. NISHIMURA, T. NOGUCHI, K. OHTAKI, T. OHIGASHI, T. OKADA, S. OKUMURA, R. OKAZAKI, T. H. V. PHAN, R. REBOIS, K. SAKAMOTO, T. SAIKI, H. SAITO, Y. SETO, M. SHIGENAKA, W. SMITH, H. SUGA, M. SUN, S. TACHIBANA, Y. TAKAHASHI, Y. TAKEICHI, A. TAKEUCHI, A. TAKIGAWA, Y. TAMENORI, S. TANAKA, F. TERUI, M. S. THOMPSON, N. TOMIOKA, A. TSUCHIYAMA, Y. TSUDA, K. UESUGI, M. UESUGI, T. USUI, M. VERDIER-PAOLETTI, D. WAKABAYASHI, S. WATANABE, T. YADA, S. YAMASHITA, M. YASUTAKE, K. YOGATA, M. YOSHIKAWA, H. YURIMOTO, P.-M. ZANETTA, T. ZEGA and M. E. ZOLENSKY, “Electron Microscopy Observations of the Diversity of Ryugu Organic Matter and Its Relationship to Minerals at the Micro- to Nano-Scale,” *Meteorit. Planet. Sci.* **59**(8), 2023–2043 (2024). DOI: 10.1111/maps.14128

J. MATHURIN, L. BEJACH, E. DARTOIS, C. ENGRAND, A. DAZZI, A. DENISET-BESSEAU, J. DUPRAT, Y. KEBUKAWA, H. YABUTA, L. BONAL, E. QUIRICO, C. SANDT, F. BORONDICS, J. BAROSCH, P. BECK, G. D. CODY, B. T. DE GREGORIO, M. HASHIGUCHI, D. A. L. KILCOYNE, M. KOMATSU, Z. MARTINS, M. MATSUMOTO, G. MONTAGNAC, S. MOSTEFAOUI, L. R. NITTLER, T. OHIGASHI, T. OKUMURA, V. T. H. PHAN, L. REMUSAT, S. SANDFORD, M. SHIGENAKA, R. STROUD, H. SUGA, Y. TAKAHASHI, Y. TAKEICHI, Y. TAMENORI, M. VERDIER-PAOLETTI, S. YAMASHITA, T. NAKAMURA, T. MORITA, M. KIKUIRI, K. AMANO, E. KAGAWA, T. NOGUCHI, H. NARAOKA, R. OKAZAKI, K. SAKAMOTO, H. YURIMOTO, M. ABE, K. KAMIDE, A. MIYAZAKI, A. NAKATO, S. NAKAZAWA, M. NISHIMURA, T. OKADA, T. SAIKI, S. TACHIBANA, S. TANAKA, F. TERUI, Y. TSUDA, T. USUI, S. WATANABE, T. YADA, K. YOGATA and M. YOSHIKAWA, “AFM-IR Nanospectroscopy of Nanoglobule-Like Particles in Ryugu Samples Returned by the Hayabusa2 Mission,” *Astron. Astrophys.* **684**, A198 (2024). DOI: 10.1051/0004-6361/202347435

N. IMAE, N. TOMIOKA, M. UESUGI, M. KIMURA, A. YAMAGUCHI, M. ITO, R. C. GREENWOOD, T. KAWAI, N. SHIRAI, T. OHIGASHI, C. PILORGET, J.-P. BIBRING, M.-C. LIU, K. UESUGI, A. NAKATO, K. YOGATA, H. YUZAWA, Y. KODAMA, M. YASUTAKE, K. HIRAHARA, A. TAKEUCHI, I. SAKURAI, I. OKADA, Y. KAROUJI, T. YADA, M. ABE and T. USUI, “Mineralogical Approach on Laboratory Weathering of Uncontaminated Ryugu Particles: Comparison with Orgueil and Perspective for Storage and Analysis,” *Meteorit. Planet. Sci.* **59**(7), 1705–1722 (2024). DOI: 10.1111/maps.14178

M. KOMATSU, H. YABUTA, Y. KEBUKAWA, L. BONAL, E. QUIRICO, T. J. FAGAN, G. D. CODY, J. BAROSCH, L. BEJACH, E. DARTOIS, A. DAZZI, B. DE GREGORIO, A. DENISET-BESSEAU, J. DUPRAT, C. ENGRAND, M. HASHIGUCHI, Z. MARTINS, J. MATHURIN, G. MONTAGNAC, S. MOSTEFAOUI, L. R. NITTLER, T. OHIGASHI, T. OKUMURA, L. RÉMUSAT, S. SANDFORD, R. STROUD, H. SUGA, Y. TAKAHASHI, Y. TAKEICHI, Y. TAMENORI, M. VERDIER-PAOLETTI, S. YAMASHITA, H. YURIMOTO, T. NAKAMURA, T. NOGUCHI, R. OKAZAKI, H. NARAOKA, K. SAKAMOTO, M. YOSHIKAWA, T. SAIKI, S. TANAKA, F. TERUI, S. NAKAZAWA, T. USUI, M. ABE, T. OKADA, T. YADA, M. NISHIMURA, A. NAKATO, A. MIYAZAKI, K. YOGATA, S. TACHIBANA, S. WATANABE and Y. TSUDA, “Raman Spectroscopy of Ryugu Particles and Their Extracted Residues: Fluorescence Background Characteristics and Similarities to CI Chondrites,” *Meteorit. Planet. Sci.* **59**(8), 2166–2185 (2024). DOI: 10.1111/maps.14234

A. B. VERCHOVSKY, F. A. J. ABERNETHY, M. ANAND, I. A. FRANCHI, M. M. GRADY, R. C. GREENWOOD, S. J. BARBER, M. SUTTLE, M. ITO, N. TOMIOKA, M. UESUGI, A. YAMAGUCHI, M. KIMURA, N. IMAE, N. SHIRAI, T. OHIGASHI, M.-C. LIU, K. UESUGI, A. NAKATO, K. YOGATA, H. YUZAWA, Y. KAROUJI, S. NAKAZAWA, T. OKADA, T. SAIKI, S. TANAKA, F. TERUI, M. YOSHIKAWA, A. MIYAZAKI, M. NISHIMURA, T. YADA, M. ABE, T. USUI, S. WATANABE, Y. TSUDA, N. MATSUDA, K. MCCAIN, T. LE PIVERT-JOLIVET, L. RIU, J. CARTER, D. LOIZEAU, J.-P. BEBRING, C. PILORGET, X. ZHAO, J. A. MALLEY, R. FINDLAY, I. OKADO, I. SAKURAI, K. HIRAHARA and N. SHIRAI, “A Primordial Noble Gas Component Discovered in the Ryugu Asteroid and Its Implications,” *Nat. Commun.* **15**(1), 8075 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-52165-0

C. PILORGET, D. BAKLOUTI, J.-P. BIBRING, R. BRUNETTO, M. ITO, I. FRANCHI, N. TOMIOKA, M. UESUGI, A. YAMAGUCHI, R. GREENWOOD, T. OKADA, T. USUI, T. YADA, K. HATAKEDA, K. YOGATA, D. LOIZEAU, T. LE PIVERT-JOLIVET, T. JIANG, J. CARTER, V. HAMM, M. ABE, A. ALÉON-TOPPANI, F. BORONDICS, Y. ENOKIDO, Y. HITOMI, N. IMAE, Y. KAROUJI, K. KUMAGAI, M. KIMURA, Y. LANGEVIN, C. LANTZ, M.-C. LIU, M. MAHLKE, A. MIYAZAKI, Z. MUGHAL, K. NAGASHIMA, A. NAKANO, A. NAKATA, A. NAKATO, M. NISHIMURA, T. OHIGASHI, T. OJIMA, F. POULET, L. RIU, N. SHIRAI, Y. SUGIYAMA, R. TAHARA, K. UESUGI, M. YASUTAKE, H. YUZAWA, A. MOUSSI-SOFFYS, S. NAKAZAWA, T. SAIKI, F. TERUI, M. YOSHIKAWA, S. TANAKA, S. WATANABE and Y. TSUDA, “Phosphorus-Rich Grains in Ryugu Samples with Major Biochemical Potential,” *Nat. Astron.* **8**, 1529–1535 (2024). DOI: 10.1038/s41550-024-02366-w

T. OHKOCHI, R. TAKAHASHI, H. FUJIWARA, H. TAKAHASHI, R. ADAM, U. PARLAK, K. YAMAMOTO, H. OSAWA, M. KOTSUGI, A. TSUKAMOTO, H. WADATI, A. SEKIYAMA, C. M. SCHNEIDER, M. TSUNODA, S. SUGA and T. KINOSHITA, “Investigation of Deterministic and Cumulative Nature in Helicity-Dependent Optical Switching of Ferrimagnetic Gd-Fe-Co Films,” *J. Magn. Magn. Mater.* **593**, 171854 (2024). DOI: 10.1016/j.jmmm.2024.171854

K. YAMAGAMI, H. UEDA, U. STAUB, Y. ZHANG, K. YAMAMOTO, S. H. PARK, S. KWON, A. MITSUDA, H. WADA, T. UOZUMI, K. MIMURA and H. WADATI, “ $4f$ Electron Temperature Driven Ultrafast Electron Localization,” *Phys. Rev. Res.* **6**(2), 023099 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.6.023099

P. MENCZEL, K. FUNO, M. CIRIO, N. LAMBERT and F. NORI, “Non-Hermitian Pseudomodes for Strongly Coupled Open Quantum Systems: Unravelings, Correlations, and Thermodynamics,” *Phys. Rev. Res.* **6**(3), 033237 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.6.033237

Y. C. HATAKAKI, R. KOBAYASHI, R. R. WATANABE, M. HARA, H. UENO and H. NOJI, “Engineering of IF₁-Susceptive Bacterial F₁-ATPase,” *Protein Sci.* **33**(4), e4942 (2024). DOI: 10.1002/pro.4942

G. BORNET, G. EMPERAUGER, C. CHEN, F. MACHADO, S. CHERN, L. LECLERC, B. GÉLY, Y. T. CHEW, D. BARREDO, T. LAHAYE, N. Y. YAO and A. BROWAEYS, “Enhancing a Many-Body Dipolar Rydberg Tweezer Array with Arbitrary Local Controls,” *Phys. Rev. Lett.* **132**(26), 263601 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevLett.132.263601

H. AKUTSU, M. URUICHI, S. IMAJO, K. KINDO, T. MASUTA, H. MANABE, Y. NAKAZAWA and S. S. TURNER, “Suppression of a Structural Phase Transition by an Orientational Disorder of Counteranions in an Organic Conductor, β'' - β'' -(BEDT-TTF)₂ClC₂H₄SO₃,” *Inorg. Chem.* **63**(36), 16872–16877 (2024). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.4c02735

H. ABE, S. MARUYAMA, H. KISHIMURA, M. URUICHI, D. OKUYAMA and H. SAGAYAMA, “Multiphase Coexistence in an Ionic Liquid: 1-Decyl-3-methylimidazolium Nitrate,” *J. Phys. Chem. Lett.* **15**(42), 10668–10676 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.4c02716

- T. YAMAMOTO, Y. NAKAMURA, T. NAITO, K. KONISHI, M. URUICHI, K. MATSUSHITA and Y. NAKAZAWA**, “Diverse Charge Distributions in the Triangular Lattice Superconductor κ -(ET)₂Cu[N(CN)₂]I: Infrared and Raman Spectroscopic Insights,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **93**(12), 124701 (10 pages) (2024). DOI: 10.7566/JPSJ.93.124701
- T. YAMAMOTO, T. FUJIMOTO, Y. NAKAZAWA, M. TAMURA, M. URUICHI, Y. IKEMOTO, T. MORIWAKI, H. CUI and R. KATO**, “Charge and Valence Bond Orders in the Spin-12 Triangular Antiferromagnet,” *Phys. Rev. B* **110**(20), 205126 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevB.110.205126
- F. HIRATA**, “Entropy Associated with Conformational and Solvent-Density Fluctuations in Biomolecular Solutions,” *J. Mol. Liq.* **409**, 125359 (2024). DOI: 10.1016/j.molliq.2024.125359
- S. HAYAMI, R. YAMBE and H. KUSUNOSE**, “Analysis of Photo-Induced Chirality and Magnetic Toroidal Moment Based on Floquet Formalism,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **93**(4), 043702 (4 pages) (2024). DOI: 10.7566/JPSJ.93.043702
- H. KUSUNOSE and J. KIKUCHI**, “Configuration Determination for Chiral and Polar Crystals by Anisotropic NMR Shift,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **93**(7), 074701 (11 pages) (2024). DOI: 10.7566/JPSJ.93.074701
- S. HAYAMI and H. KUSUNOSE**, “Unified Description of Electronic Orderings and Cross Correlations by Complete Multipole Representation,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **93**(7), 072001 (37 pages) (2024). DOI: 10.7566/JPSJ.93.072001
- L. LIAO, F. CHEN, J. PUEBLA, J. KISHINE, K. KONDOU, W. LUO, D. ZHAO, Y. ZHANG, Y. BA and Y. OTANI**, “Nonreciprocal Magnetoacoustic Waves with Out-of-Plane Phononic Angular Momenta,” *Sci. Adv.* **10**(28), eado2504 (2024). DOI: 10.1126/sciadv.ado2504
- A. A. TERESHCHENKO, VL. E. SINITSYN, I. G. BOSTREM, P. V. PRUDNIKOV, A. S. OVCHINNIKOV and J. KISHINE**, “Emergent Elasticity and Wavelike to Particle-Like Crossover in a Magnetic Chiral Soliton Lattice,” *Phys. Rev. B* **110**(14), 144426 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevB.110.144426
- S. SUMITA, A. TANAKA and Y. KATO**, “Anisotropy-Induced Spin Parity Effects,” *Phys. Rev. B* **110**(10), L100403 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevB.110.L100403
- A. DUTTA, C. TZSCHASCHEL, D. PRIYADARSHI, K. MIKUNI, T. SATOH, R. MONDAL and S. PAL**, “Evidence of Relativistic Field-Derivative Torque in Nonlinear THz Response of Magnetization Dynamics,” *Adv. Funct. Mater.* **35**(7), 2414582 (2025). DOI: 10.1002/adfm.202414582
- H. DAIMON and S. MATSUSHIMA**, “Cubic Coil System Composed of Three Sets of Cubic Triple Coils to Produce Wide Area 0.66% Uniform Magnetic Field in Any Direction,” *Rev. Sci. Instrum.* **95**(7), 074704 (2024). DOI: 10.1063/5.0185643

5. 点検評価と課題

2022 年 4 月から研究顧問をお引き受けいただいている James M. Lisy 教授（イリノイ大学）と北川 進教授（京都大学）、産学連携研究アドバイザーに就任いただいている菊池 昇博士（（株）トヨタコンポジット研究所所長）と福田伸博士（（株）三井化学分析センター技術顧問）に 2024 年 5 月開催の IMS Presentations 2024 に現地参加頂き、所全体の研究評価、研究体制、産業界の視点からの研究評価などについての提言をいただいた。

独マックスプランク高分子研究所 Mischa Bonn 教授と英オックスフォード大学 David Manolopoulos 教授が 2024 年 10 月に来所し、それぞれ物質分子科学研究領域と機器センタ、理論・計算分子科学研究領域と計算科学研究センターを中心にヒアリングが実施され、各グループの研究内容やセンターの活動を評価いただいた。加えて、分子科学研究所の全般的な課題について所長と議論した。

（渡辺芳人）

5-1 研究顧問／産学連携研究アドバイザーによる点検評価

分子科学研究所では、法人化の前から所長が研究面を諮問するために研究顧問制度を導入している。第一期中期計画期間では国内3名の研究顧問が、所内の各研究グループによる予算申請ヒアリングに参加し、それぞれについて採点し、所長はその採点結果を参照しつつ各研究グループに配分する研究費を決定してきた。第二期中期計画期間は国際的な研究機関としての研究面を中心に諮問することとし、国外委員も追加することとした。第三期中期計画期間から国内外各1名で運用している。これに加えて第四期中期計画期間（2022年度～2027年度）より、分子科学の分野において特に優れた研究業績を有する者又は産学連携関係に特に精通した者に、研究所の産学連携研究に関する指導、助言等をお願いする「産学連携研究アドバイザー」を新たに設けた。産業界で研究所長などの責を担っているアドバイザーから見て、基礎研究が中心となっている分子科学研究所の個々の研究者の研究課題や成果がどのように受け止められるのかをフィードバックして頂くための制度である。また、アドバイザーが有するネットワークを通じて、分子科学研究所の研究が産業界に広く知られることも期待するものである。産学連携研究アドバイザーには、予算申請ヒアリング（2024年5月9-10日開催）に同席して頂き、評価の過程に加わって頂くと共に、社会実装や産業利用に資する可能性のある研究成果の発掘をお願いしている。その結果として、企業による分子研各施設の利用や研究者間の交流が始まっている。

研究顧問（2024年度）

北川 進 京都大学副学長，特別教授

LISY, James M. Research Professor, University of Illinois Urbana-Champaign

産学連携研究アドバイザー（2024年度）

菊池 昇 株式会社トヨタコンボン研究所代表取締役所長

福田 伸 株式会社三井化学分析センター技術顧問

5-2 理論・計算分子科学研究領域の評価

5-2-1 David E. Manolopoulos 外国人運営顧問

Report on first visit to IMS, 1–4 October 2024

1. Scientific discussions with members of the IMS faculty

Prof. Hiroshi Yamamoto

I had a very interesting discussion with Prof. Yamamoto about his work on chirality and the CISS (chirality induced spin selectivity) effect, in which he showed me the results of his experiment revealing giant spin polarisation in a chiral superconductor. Prof. Yamamoto was one of the first to become interested in the CISS effect as a result of a visit to IMS by Ron Naaman, and the experiments he has since done on it are quite remarkable. He has found a spin polarisation of around 80% in the chiral superconducting device he has fabricated, which is comparable to the spin polarisation found in earlier work on photoelectron currents through DNA. Both effects are too large to be explained by any simple theory so a great deal of theoretical work is now being done to try to understand them. These experiments performed at IMS have therefore made a truly significant contribution to an exciting new field.

Prof. Shinji Saito

I first met Prof. Saito when he visited Oxford around five years ago, and I am of course well aware of his work as an Editor for the Journal of Chemical Physics (JCP), where he has published a number of very fine papers. It was therefore a pleasure to meet him again and to hear about his recent work on dynamic phenomena in condensed phase systems. He described how he has constructed an accurate Frenkel exciton model for the photosynthetic light harvesting complex LHCII and then presented a wonderfully detailed analysis of hydrogen bond dynamics in supercooled water. Both studies struck me as absolutely first rate. This is the best work that has been done on either of these problems to date.

Prof. Masahiro Ehara

Prof. Ehara is an expert in accurate (correlated) electronic structure theory and its application to interesting chemical problems. His more recent work has focussed on the development of new methodology and on the application of time-dependent density functional theory (TD-DFT) to the excited states of systems that are beyond the reach of correlated wavefunction techniques. He began by describing a new inverse design method he has developed to target specific properties of molecule-nanoparticle systems. He then described his recent applications of TD-DFT to problems ranging from the photoluminescence and conductivity of carbon and BN materials to the suitability of nanoclusters for heterogeneous catalysis. These are topical studies and they seemed to me to have been executed extremely well, at least in part because of Prof. Ehara's expertise with more accurate techniques (TD-DFT is only safe in the hands of those who understand its limitations!).

Associate Prof. Kei-ichi Okazaki

Prof. Okazaki gave me a truly beautiful presentation about his work on biomolecular machines. He began by explaining how his group's molecular dynamics simulations of the F_1 catalytic motor in ATP synthase had provided mechanistic insight into the ATP synthesis/proton pump reversal experiments performed by Dr. Kobayashi. The simulations were published along with the experimental data in *Nature Communications* in 2023 and they have since resulted in Dr. Kobayashi winning an early career award from the

Biophysical Society of Japan. Prof. Okazaki then went on to describe how his simulations of the “inward open” → “outward open” transition in a transmembrane transporter protein have led to an interesting prediction that is currently being tested by his experimental collaborators: When the wild type protein is put into alpha-fold the resulting folded structure is purely “outward open,” whereas when a D280 mutant is put into alpha-fold it is purely “inward open.” He also described how the use of “shallow multiple sequence alignment (MSA)” rather than the default optimisation setting in alpha-fold results in structures along the reaction path between “outward open” and “inward open,” as can be verified by running molecular dynamics from these intermediate structures. This is an intriguing result that seems to open up the possibility of gaining mechanistic insight from alpha-fold optimisations. Prof. Okazaki ended his presentation by describing his coarse-grained simulations of membrane deformations induced by the protein Pacsin 1. These too were interesting: The standard cartoon is that the protein squeezes the membrane until it breaks but his simulations suggest that quite the opposite happens: The protein instead stretches the membrane locally resulting in narrower sections nearby, which are where the breaks then presumably occur. Indeed some recent high speed atomic force microscopy experiments seem to corroborate this. Needless to say I found Prof. Okazaki’s presentation extremely impressive from beginning to end.

Associate Prof. Hisashi Okumura

Prof. Okumura’s presentation was focussed on using molecular dynamics simulations to shed light on the important problem of amyloid- β (A β) peptide aggregation. He began by describing his atomistic molecular dynamics simulations of β -hairpin formation in A β 40 and A β 42 (a variant with two extra residues that is known to aggregate faster than A β 40). These simulations found the Arg5 residue to form a hydrogen bond to one of the two additional residues in A β 42, a prediction has since been supported by Arg5 mutation experiments performed by Prof. Kato. Hence Arg5 appears to be the key residue that explains the greater tendency of A β 42 to form β -hairpins, which presumably also explains why it aggregates faster. To investigate this further, Prof. Okumura is now performing some very large-scale (32 peptide) molecular dynamics simulations of the aggregation kinetics of A β 40 and A β 42 in aqueous solution. While the preliminary results of these simulations look interesting, their statistical errors are still too large to draw any firm conclusions from, despite the fact that the calculations have already been running for 5 years. This is clearly because Prof. Okumura has chosen to do fully atomistic simulations, which require a great deal of computer time for such large systems. I would strongly encourage him to develop a cheaper coarse-grained model and use that instead. Coarse-grained models are not always as reliable as atomistic simulations, but with the atomistic simulations he has already done he has more than enough data to fit a coarse-grained model that should be good enough to capture the processes he is interested in at the thermodynamic state point he is studying, for example with the help of modern machine-learning techniques. I hope this suggestion helps and that by next year he will be in a position to show me some well-converged A β aggregation kinetics results.

Prof. Akihito Ishizaki

I have followed Prof. Ishizaki’s research for a number of years and enjoyed meeting him and listening to his talks at conferences, so it was a real pleasure for me to end my meetings by hearing about his latest research interests. Prof. Ishizaki is a deep thinker who works on difficult problems. He outlined his preliminary attempts to go beyond the usual assumption of a Gaussian environment by considering a quantum system in the presence of Poisson noise, his work on entangled photons that suggests the possibility of a simpler alternative to four-wave mixing experiments, and his work on the use of network modelling to find the excitation energy transfer bottlenecks in the photosystem II super-complex. All of this work is profound and at the very forefront of modern condensed

phase quantum dynamics. Prof. Ishizaki's move to Tokyo will be a serious blow to the IMS and I sincerely hope that the institute will be able to find someone of equal stature to fill his shoes.

2. Visits to IMS Facilities

Prof. Ehara kindly showed me the computer cluster at the Research Centre for Computational Science, and Prof. Matsui kindly gave me a guided tour of the UVSOR Synchrotron Facility. Both were thoroughly enjoyable. I found the UVSOR Facility especially interesting as I have never visited a synchrotron before. Prof. Matsui explained its operation to me extremely clearly and knowledgeably. His enthusiasm for the facility was delightful!

3. Discussion with the Director General

Prof. Yoshihito Watanabe

I began my visit with a meeting with the Director General, Prof. Watanabe. Much of our discussion focussed on retention and other difficulties associated with running the IMS in the current financial climate (the Yen has decreased in value by 35% against the dollar in the last three years so overheads are now exceptionally high), and on some of the initiatives he has put in place to overcome them. These include increased support for PIs in receipt of large research grants, the option for those with sufficient grant income to support their research to extend their retirement age from 65 to 70, and the idea of encouraging Associate Professors whose research activity has not enabled them to secure promotions at top tier universities to apply for promotions at provincial universities instead. All of these initiatives strike me as sensible and in line with what other institutions (including my own) are doing to remain competitive. For example, Prof. Omori has recently secured a very significant grant for quantum computing, the overheads of which contribute 4% to the total budget of IMS. New "designated professorships" have been created with competitive salaries and a tenure of up to 10 years to enable him to recruit suitably qualified project leaders for this grant. Another example concerns the theoretical and computational molecular science group. In the last few years, this group has been very strong indeed under Prof. Ishizaki (an expert in condensed phase quantum dynamics), Prof. Ehara (an expert in electronic structure theory), and Prof. Saito (an expert in statistical mechanics and simulation). However, Prof. Ishizaki has recently accepted an offer from Toyko University, and Profs. Ehara and Saito are both approaching retirement age. The search for a replacement for Prof. Ishizaki is already underway, and I hope the planned increase in retirement age for those with active research grants will help the IMS to retain Profs. Ehara and Saito for a while longer before they too are eventually replaced.

4. Final thoughts and a recommendation

The "no promotion" policy of the IMS is a contentious one that has been highlighted in several previous reports on the institute. Historically, the policy seems to have succeeded in its goal. The vast majority (more than 80%) of previous IMS Associate Professors have in fact been promoted to positions elsewhere, and more than 90% of these have moved to Full Professorships at universities in Japan. Since the brightest researchers are often the best teachers, and there is no undergraduate teaching at IMS, this has clearly been beneficial for the education of Japanese scientists. However, the policy is problematic for the few who do not manage to secure outside promotions, and potentially also for the institute itself, since these people are then stuck in IMS with no foreseeable career development until retirement. Encouraging these people to apply for promotions at provincial universities and/or alternative roles within IMS (such as university research administrators) is clearly sensible. But more importantly, my impression from some of the

conversations I have had during this visit is that the recruitment and retention of Full Professors at IMS is becoming more difficult than it once used to be. Given this, and the fact that the institute nurtures some of the very best Associate Professors in Japan, it does seem strange to me that they are not allowed to apply for Full Professorships at IMS when they become available, in competition with external candidates. This would not significantly impact the flow of scientific talent from IMS to the universities, since the competition with external candidates would ensure that internal promotions remained rare. But it would give the IMS more scope to hire the best possible candidates to its Full Professorships and thereby help to safeguard its future international standing.

5-3 物質分子科学研究領域の評価

5-3-1 Mischa Bonn 外国人運営顧問

Assessment of the Institute for Molecular Science, Okazaki

By Mischa Bonn, Max Planck Institute for Polymer Research, Mainz, Germany

Overall Impression of IMS

The Institute for Molecular Science (IMS) is a center of research excellence tackling important challenges in molecular sciences. It has outstanding research outputs and has launched the careers of many successful scientists who have gone on to professorships at other institutions. The Institute's strengths include highly motivated staff performing at the highest level, outstanding leadership, and equipment/instrumentation that exceeds that of many world-class laboratories internationally. The research facilities are well-organized and well-maintained by dedicated technical and research staff, and they are open to the public and local research groups. As such, the scientific infrastructure benefits both the local scientific endeavors and molecular science throughout Japan. IMS hosts numerous outstanding scientific groups covering a broad range of fields, with a tangible mission to foster interdisciplinary research at the intersection of physics, chemistry, and materials science. The Institute maintains a high level of scientific and technological excellence, making it one of Japan's most internationally visible research centers. The UVSOR Synchrotron Facility is well-suited to an institute of IMS's size and provides unique capabilities for experiments in material science and biological applications. The integration of this user facility into the diverse scientific environment at IMS provides important added value. IMS plays a crucial role in the Japanese scientific landscape, by providing both research facilities and opportunities for researchers to become fully independent at a much earlier stage than is traditional in Japanese universities.

The Institute for Molecular Science (IMS) has demonstrated a bold and visionary approach to recruitment, consistently providing exceptional young scientists with the necessary resources and support to flourish in their research endeavors. This strategic investment in emerging talent has yielded remarkable results, with nearly 100 staff members advancing to prestigious positions such as professorships at other esteemed institutions over the course of its 49-year history. The IMS stands as a beacon of excellence in the Japanese scientific community, serving as a fertile ground for nurturing and developing the next generation of scientific leaders. Its commitment to fostering innovation and cultivating talent has solidified its position as a crucial incubator for cutting-edge research and a cornerstone in shaping the future of molecular science both within Japan and on the global stage.

Opportunities for improvement and strategic recommendations:

1. **Group Size:** IMS research groups tend to be smaller than international competitors, limiting their ability to quickly capitalize on breakthroughs. Contributing factors may include personnel budget constraints and challenges in recruiting top students due to limited integration with universities (see also points 2 and 3).
2. **Enhance Financial Resources for Global Competitiveness:** To maintain its position as a world-class research institution, IMS must prioritize securing additional funding. While the Institute's budget has remained stable relative to Japan's GNP over the past three decades, the lack of economic growth has resulted in a static financial situation. This presents challenges in an increasingly global, highly competitive research landscape. Additional funding is essential for:
 - Equipment Modernization: Allocate resources to replace aging infrastructure with state-of-the-art technology.

- **Expansion of Research Teams:** Increase funding to support larger, more robust research groups capable of tackling complex scientific challenges.
- **International Talent Acquisition:** Secure funds to attract and retain top-tier researchers from around the world.
- **Retaining a Competitive Edge:** Ensure IMS remains at the forefront of molecular science by investing in cutting-edge projects and collaborations. Continue to leverage and expand on the strengths of facilities like UVSOR and the interdisciplinary nature of IMS to maintain its position as a world-leading research institute.

By actively pursuing increased funding through various channels, IMS can reinforce its critical mass of resources and talent. This financial boost is essential for the Institute to keep pace with and lead the international scientific community.

3. **University Integration / PhD Student Recruitment:** Consider developing stronger relationships with universities to improve access to potential PhD students and young researchers. A concrete suggestion would be to initiate an active alumni network (for instance, on the occasion of the 50th birthday of the IMS) and/or initiate an exchange student program where students (from these alumni) can come to IMS for extended stays of defined length (*e.g.*, six months, one year, or two years). The competition for PhD students among Japanese universities and research institutes like the Institute for Molecular Science (IMS) is expected to intensify in the coming years due to the projected decline in the student population. This demographic shift necessitates the urgent development of a comprehensive strategy to attract high-quality students, both domestically and internationally. The IMS could consider developing cross-disciplinary programs in emerging scientific frontiers that resonate with a wider spectrum of students. Simultaneously, simplifying application procedures and offering comprehensive support services for international students can remove barriers to entry and enhance the institution's global appeal. Additionally, effectively utilizing digital platforms and social media to highlight research accomplishments and share student experiences can significantly boost visibility and engagement with potential candidates worldwide.
4. **Promotion Policy:** The non-promotion policy for Assistant or Associate Professors within IMS may be a barrier for some researchers, particularly those looking to establish stable roots for family reasons. While I appreciate the reluctance to install a tenure-track model for Assistant or Associate Professors, IMS scientists should be allowed to apply for openings at the Institute. This should be unproblematic given the clear and transparent procedures for appointing new staff.
5. **Gender Balance:** There is a significant underrepresentation of women at the Principal Investigator (PI) level. While this gender disparity is a widespread issue across Japan, the IMS, given its influential position in the country's scientific community, has a responsibility to take proactive steps to address and improve this imbalance. As a leading institution, IMS can set an example by implementing measures to increase female representation in senior research roles, thereby contributing to broader efforts to enhance gender diversity in Japanese academia. Address gender imbalance by actively seeking input from female professors and PhD students on barriers and potential solutions. Implement policies that specifically support women in science, such as providing additional research support during family leave.

In the following, I will provide my observations on the IMS researchers and facilities in the sequence they were introduced to me. My commentary will begin with the individuals and facilities I was explicitly requested to evaluate more thoroughly, followed by those for which I was asked to offer brief remarks.

Assessment of individual researchers

Prof. Hiroshi Yamamoto

Prof. Hiroshi Yamamoto's outstanding research focuses on organic electronics and spintronics, aiming to revolutionize future electronic devices through the development of organic superconductors and molecular spintronics. His excellent work is centered on novel mechanisms such as electric-field-induced superconductivity in organic field-effect transistors (FETs) and chiral molecular systems to explore the mechanism behind the chirality-induced spin selectivity (CISS) effect. He cleverly bridges the fields of organic and inorganic superconductors. His contributions aim to enhance device mobility and efficiency in the next generation of electronic materials through a fundamental understanding of the physics involved.

Key Strengths:

- **Innovative Device Development:** Prof. Yamamoto has pioneered organic chiral superconductors to study the CISS effect, setting new standards in such studies.
- **Cross-Disciplinary Impact:** His research merges organic chemistry, physics, and material science, impacting not only electronics but also superconductivity and spintronics.
- **Recognized Excellence:** His work is well-cited and has garnered accolades, affirming his leadership in material sciences.

Assoc. Prof. Katsuyuki Nishimura

Associate Professor Katsuyuki Nishimura's research is focused on solid-state NMR spectroscopy of biological and material-science systems. His research aims to develop novel solid-state NMR techniques for studying membrane proteins and misfolded protein assemblies, *i.e.*, amyloids. The goal is to elucidate structure–function relationships in these systems. Dr. Nishimura has established productive collaborations combining NMR with other biophysical methods. His work contributes significantly to our understanding of membrane protein structure and dynamics.

Key strengths:

- Development of novel solid-state NMR techniques, including exceptionally high-rate MAS devices, for studying membrane proteins and complex molecular materials
- Elucidation of structure–function relationships in important membrane proteins
- Productive collaborations combining NMR with other biophysical methods

Prof. Toshihiko Yokoyama

Prof. Toshihiko Yokoyama specializes in surface and interface science, particularly investigating the structural and electronic properties of surfaces and nanomaterials. His research on surface phenomena such as adsorption, catalysis, and thin-film growth contributes to advancements in nanotechnology and energy materials. His *operando* hard x-ray photoelectron spectroscopy (HAXPES) is particularly admirable, having been applied to various complex, important systems, including heterogeneous catalysis, electrochemistry, and Nafion membranes. The ability to probe the local electrochemical potentials and oxidation states is very impressive. In an independent line of research, the atomic origin of the zero thermal expansion of specific alloys is investigated.

Key Strengths:

- **Pioneering Surface Science:** Prof. Yokoyama's work substantially advances our understanding of active material interfaces, which is crucial for technology applications.

- **Leader in Energy Materials:** He is at the forefront of exploring the electronic properties of surfaces at the nanoscale, with the perspective of enhancing material performance in various technologies.
- **Enables advanced photoelectron spectroscopy** for a large community with the *operando* HAXPES setup, which is now available as a user facility at a beamline.

Senior Researcher Taketoshi Minato

Taketoshi Minato's excellent research program focuses on energy conversion processes at molecular interfaces, particularly in relation to electrode/electrolyte interfaces. Despite being a relatively recent addition to the faculty, Taketoshi Minato has an impressive track record in both developing new measurement techniques, using *operando* surface probe microscopy (SPM), and applying these tools to critical challenges in energy conversion systems. The ability to extract both the elastic modulus and adhesive force from the SPM force curve provides detailed insights into the electrode–electrolyte interface. This approach allows Minato to quantitatively assess mechanical properties and adhesion characteristics at the nanoscale, elucidating complex physicochemical processes and enhancing our understanding of interfacial phenomena. In a second line of work, mechanistic insights into a new type of battery, the fluoride shuttle battery, are obtained. His work involves understanding how these molecular interactions at surfaces can be harnessed to improve energy efficiency and create more sustainable technologies.

Key Strengths:

- **Interfacial Chemistry Expertise:** Minato excels in unveiling energy conversion at molecular interfaces, improving catalysis processes.
- **Focus on Sustainability:** His research addresses critical challenges in renewable energy, particularly in battery technologies.
- **Technological Application:** Minato's work can translate into practical improvements in energy technologies, bridging fundamental science with real-world applications.

Prof. Toshikazu Nakamura

Prof. Nakamura is a prominent researcher at the Institute for Molecular Science (IMS), contributing significantly to the field of spin-based molecular systems. His research is centered on low-dimensional, highly correlated electron systems and functional materials, with a focus on understanding electron spin dynamics and the functionalities of these systems at low temperatures. His investigations primarily involve molecular-based conductors, employing advanced techniques such as broad-line NMR (Nuclear Magnetic Resonance) and ESR (Electron Spin Resonance) to study electronic phases and the role of spin in complex molecular environments. One of the central goals of Nakamura's work is to explore how competition between electronic phases in these systems can lead to novel functionalities. His studies have implications for developing materials with unique electronic properties, which could play a role in next-generation technologies, including quantum computing and spintronics. A notable project under his leadership is the MEXT CURE Program, "Frontiers of Spin Life Sciences, Spin-L," which aims to bridge the gap between life sciences and spintronics by understanding the role of electron spins in biological and molecular systems. This interdisciplinary approach seeks to uncover novel applications of spin in fields such as biomedicine and material science, reflecting Nakamura's commitment to pioneering new frontiers in science.

Key Strengths:

- **Interdisciplinary Vision:** Prof. Nakamura is a leader in pushing the boundaries between molecular science and spintronics,

as seen in his involvement in the Spin-L program. His research not only advances fundamental physics but also applies this knowledge to life sciences, an innovative approach that opens up new avenues for scientific exploration.

- **Expertise in Advanced Measurement Techniques:** His proficiency in techniques like ESR allows him to delve deeply into the quantum behaviors of electron systems, providing precise insights into spin dynamics, and photo-injected charge carriers. These advanced techniques are crucial for investigating complex materials that are not well understood through conventional methods.
- **Pioneering in Functional Material Discovery:** Prof. Nakamura's research contributes to the discovery of new materials with potential applications in fields like quantum computing and spin-based electronics.

Prof. Shin-ichi Kimura

Prof. Shin-ichi Kimura is a distinguished researcher in solid-state physics and spectroscopy, holding joint appointments at Osaka University's Graduate School of Frontier Biosciences and the Institute for Molecular Science (IMS). This unique dual position allows him to leverage the strengths of both institutions, fostering interdisciplinary research and collaboration. His research focuses on elucidating the electronic states of materials and their interactions, fundamental to understanding physical properties and life phenomena. Prof. Kimura's research approach is distinctive in its dual focus. He excels in both the development of advanced beamline instrumentation and the application of these cutting-edge tools to investigate compelling scientific questions, particularly in the field of correlated electron systems. This synergistic combination of technical innovation and fundamental research allows him to push the boundaries of experimental capabilities while simultaneously addressing critical problems in condensed matter physics. This work aligns well with both institutions' goals, advancing our understanding of molecular systems from different perspectives. The joint appointment allows Prof. Kimura to access diverse resources and expertise, enhancing his research capabilities. Simultaneously, both institutions benefit from his broad knowledge and experience, fostering a dynamic research environment that spans traditional disciplinary boundaries. I understand that Prof. Kimura's appointment at IMS is up for renewal shortly. I strongly support that renewal.

Key strengths:

- **Expertise in Advanced Spectroscopic Techniques:** He has developed novel methods using synchrotron radiation and quantum beams to visualize changes in electronic states, benefiting both institutions with cutting-edge research tools.
- **Interdisciplinary Research Approach:** His work bridges physics, chemistry, and life sciences, investigating topics from solid-state physics to biological molecules. This broad perspective enriches both Osaka University's biosciences program and IMS's molecular science focus.
- **Collaborative Network Builder:** Prof. Kimura's dual role facilitates strong connections between Osaka University and IMS, promoting joint research projects and knowledge and student exchange.

Assoc. Prof. Toshiaki Sugimoto

Assoc. Prof. Toshiaki Sugimoto's excellent research program focuses on developing new, highly sensitive techniques, and applying those techniques to complex (photocatalytic) systems. Sugimoto and his team developed a novel approach using *operando* FT-IR spectroscopy under varying humidity, synchronized with periodic excitations of photocatalysts. This has allowed them to directly quantify the water-film-thickness-dependent photocatalytic hydrogen evolution on metal-loaded oxides.

These contributions demonstrate Sugimoto's ability to develop novel experimental techniques and apply them to gain deep insights

into complex photocatalytic systems, advancing our understanding of surface chemistry and catalysis.

Key Strengths:

- **Deep Insights into Complex Photocatalytic Systems:** Sugimoto's work has provided microscopic insights that shift the paradigm on the role of water in photocatalysis. This understanding offers a fundamental basis for the rational design of metal/oxide complex interfaces for efficient hydrogen evolution and methane upcycling.
- **Technical Innovation:** Sugimoto has developed STM-based near-field surface-specific SFG spectroscopy, a cutting-edge technique allowing unprecedented spatial resolution in studying molecular systems at surfaces. This innovation combines the high spatial resolution of scanning tunneling microscopy (STM) with the chemical specificity of sum-frequency generation (SFG) spectroscopy, enabling detailed investigations of surface reactions and dynamics at the molecular level.

Prof. Hiroshi Onishi

Prof. Hiroshi Onishi holds a cross-appointment position as a Professor at both Kobe University and the Institute for Molecular Science (IMS). His research focuses on surface science, catalysis, and energy-related chemistry, with particular expertise in scanning probe microscopy and optical spectroscopy. Prof. Onishi is a nationally and internationally highly visible ambassador for IMS. Key strengths of Prof. Onishi include:

- **Pioneering Work in Atomic Force Microscopy (AFM):** He has made significant contributions to the development and application of AFM techniques for studying surfaces at the atomic level.
- **Expertise in Surface Chemistry:** His research provides deep insights into chemical reactions occurring at solid surfaces, particularly in catalytic processes.
- **Interdisciplinary Approach:** Onishi combines advanced microscopy techniques with spectroscopy to elucidate complex surface phenomena.

Recently, Prof. Onishi has made notable achievements in performing high-level AFM studies of ice surfaces. His work has revealed unprecedented details about the structure and behavior of ice at the molecular level, contributing to our understanding of ice physics and chemistry. These studies have implications for various fields, including atmospheric science and materials engineering. The cross-appointment between Kobe University and IMS brings significant added value to both institutions. At IMS, Prof. Onishi brings his knowledge and experience to cutting-edge facilities and a collaborative environment with experts in molecular science. This arrangement allows him to combine the strengths of both institutions, fostering interdisciplinary research and enabling more comprehensive studies of surface phenomena. The synergy between the two institutions enhances the impact and scope of the research, particularly in the areas of surface science and catalysis. I, therefore, recommend extending the cross-appointment until Prof. Onishi's retirement at Kobe in March 2028.

Comments on specific facilities

IMS Instrument Center

The Instrument Center at the Institute for Molecular Science (IMS) is a pivotal facility providing advanced equipment and technical support for molecular research. It houses cutting-edge instruments like high-resolution electron microscopes, NMR spectrometers, mass spectrometers, and synchrotron radiation tools. These resources enable researchers to conduct high-precision experiments in fields such as molecular spectroscopy, surface science, and material chemistry.

The center fosters collaboration between IMS researchers and external institutions by providing access to its sophisticated facilities. This collaborative approach supports cross-disciplinary studies, contributing to advancements in molecular sciences. Additionally, the center emphasizes continuous innovation, upgrading its instruments and developing new methodologies to stay at the forefront of research.

Another core strength of the Instrument Center is its commitment to education and training. The center's expert staff provide hands-on training for young researchers, offering guidance in the use of complex equipment and data interpretation. This ensures efficient experimentation and supports the professional development of students and early-career scientists.

Key strengths of the Instrument Center:

- **State-of-the-Art Equipment:** Cutting-edge instruments for high-precision molecular research.
- **Collaborative Support:** It promotes inter-institutional collaboration, driving innovation.
- **Comprehensive Training:** Offers essential guidance and training, contributing to skill development in molecular sciences.

In sum, the IMS Instrument Center is essential for advancing molecular science, fostering innovation, and developing future scientific leaders.

Comments on other IMS researchers and infrastructure

Prof. Shuji Akiyama is a distinguished researcher, specializing in biophysics and chronobiology. His work focuses on elucidating the molecular mechanisms of circadian clocks, particularly in cyanobacteria. Akiyama has made significant contributions to understanding the KaiABC oscillator system, employing advanced techniques such as X-ray crystallography and NMR spectroscopy. His research has provided crucial insights into the structural basis of circadian rhythms and protein-protein interactions in clock systems. Akiyama's innovative approaches have led to breakthroughs in visualizing the dynamic processes of circadian oscillations at the molecular level. As a professor in the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science, Akiyama continues to push the boundaries of chronobiology research, combining structural biology with biophysical techniques to unravel the complexities of biological timekeeping mechanisms.

Prof. Yasuhiro Uozumi is a renowned professor, specializing in organic synthesis and catalysis. His recent work on photocatalytic conversion has garnered significant attention, particularly for its innovative approaches to sustainable chemistry. Uozumi's research focuses on developing novel photocatalysts that demonstrate enhanced activity and selectivity in various organic transformations. By utilizing visible light for these reactions, he has made strides in reducing the need for harsh reagents and conditions, aligning his work with the principles of green chemistry. Notably, he has pioneered the use of water as a reaction medium for photocatalytic conversions, further promoting environmentally friendly practices. The implications of Uozumi's research extend beyond academia, with potential applications in pharmaceutical synthesis and fine chemical production. His impressive contributions to photocatalysis not only address critical challenges in modern chemistry but also pave the way for more efficient and sustainable production processes across various industries.

Assoc. Prof. Hikaru Kuramochi is a highly accomplished ultrafast molecular spectroscopist at the Institute for Molecular Science. His work focuses on elucidating the function, structure, and dynamics of condensed-phase molecular systems using advanced ultrafast laser spectroscopy. He develops new techniques and applies these to important questions in the field. His expertise in ultrafast and

nonlinear spectroscopy has led to notable publications, including studies on protein dynamics and photoisomerization. Kuramochi's innovative research extends to developing highly sensitive and ultrafast electronic spectroscopy for visualizing multi-dimensional chemical reaction dynamics. His ongoing projects and collaborations continue to push the boundaries of molecular science, making him a valuable asset to the Institute for Molecular Science.

Prof. Kenji Ohmori is a world-renowned physicist and chemist, with a remarkable track record. Ohmori's outstanding research program focuses on 'fast and cold': Ultrafast spectroscopy, coherent control, and quantum information processing using cold atoms. His notable achievements include developing ultrahigh-precision coherent control techniques and pioneering work on visualizing quantum wave packet interference. Prof. Ohmori's contributions to molecular science and quantum computing are recognized worldwide and his work has accordingly been published in high-impact journals. His research continues to push the boundaries of quantum control and molecular dynamics, with major potential applications in quantum computing.

Prof. Hiromi Okamoto leads groundbreaking, internationally well-connected research on nanomaterial optical properties. His work primarily involves developing and using near-field optical microscopy to investigate chiral light-matter interactions. His group has made significant advances in visualizing wave functions of nanostructures and exploring local optical activity, which includes the observation of strong localized optical fields in gold nanoparticles, as well as local chiral fields around achiral structures. Recent achievements include demonstrating high selectivity for left- or right-handed circularly polarized light using chiral gold nanoparticles. The prospect of making these technologies available to the wider scientific community by commercializing the CD microscope is very appealing. The outlook of inducing chirality in molecular systems to create chiral (supramolecular) structures is very exciting and innovative. These advancements highlight his contributions to nanophotonics and plasmonics, pushing the boundaries of how we visualize and manipulate light at the nanoscale.

Given that a recently appointed assistant professor is currently on maternity leave, coupled with the demonstrated excellence and promising nature of the research being conducted, I recommend extending the group's tenure by 1–2 years. This extension would provide the necessary time to compensate for the temporary absence, ensure continuity in ongoing projects, and allow the group to realize exciting research plans. It would also demonstrate support for work-life balance and recognize the value of the research contributions made thus far.

Prof. Shinji Saito specializes in theoretical and computational studies of molecular dynamics. His research delves into the complex behaviors of many-body molecular systems, such as liquids and biomolecules, with a focus on energy dynamics in light-harvesting complexes, aqueous and other liquid systems, and glass transitions. He explores dynamic heterogeneity, a critical concept for understanding the glass transition and reactions in fluctuating environments. His work connects to multidimensional spectroscopy through multi-time correlation functions to study these dynamic processes at both the collective and single-molecule levels, revealing how biomolecular conformational changes influence their functions. Key strengths of Prof. Saito include his deep theoretical insights into molecular behavior, particularly in explaining the non-uniform dynamics in supercooled liquids and biomolecular systems. He is also renowned for his innovative application of advanced computational techniques, such as higher-order nonlinear spectroscopy, to elucidate reaction and conformational dynamics. Finally, his interdisciplinary approach, linking theoretical chemistry with experimental insights, has provided a comprehensive understanding of both biological and physical systems at the molecular level.

His contributions have significantly advanced our understanding of molecular dynamics, particularly in systems with complex environments.

Prof. Fumihiko Matsui leads pioneering work at the UVSOR Synchrotron Facility. His research focuses on advanced photoemission methodologies, particularly through the use of the photoelectron momentum microscope (PMM). His team aims to investigate the behavior of electrons and electron spins in novel spin materials, which is crucial for understanding magnetism, superconductivity, and topological properties. One of Dr. Matsui's major contributions is the construction and development of the PMM at UVSOR, enabling 3D spin vector imaging and resonant photoelectron diffraction spectroscopy. His work has revolutionized the analysis of electronic structures and valence band dispersions with high spatial resolution. These efforts are critical for advancing the understanding of complex materials and their applications in various technological fields.

Prof. Masahiro Ehara is a leading researcher focusing on advancing computational chemistry to understand complex chemical systems, in addition to being head of the Research Center for Computational Science. His scientific work significantly contributes to quantum chemistry and photochemistry, where he develops state-of-the-art electronic structure theories to examine light-matter interactions. Notably, Ehara's research on time-dependent light-matter interactions involves using advanced theoretical models to also calculate the effects of solvent and excited states. These approaches have applications in understanding the behavior of molecules under light excitation and in catalysis. His group successfully explores a remarkably wide range of topics, including photophysical chemistry, heterogeneous catalysis, and metal nanoclusters, applying quantum chemical calculations to develop efficient catalytic systems. His work helps bridge the gap between theoretical chemistry and real-world applications in fields like energy and materials science.

Assoc. Prof. Takashi Kumagai is a leading researcher in the field of nanoscale molecular science. His outstanding work focuses on advancing scanning probe microscopy techniques to observe and manipulate single molecules with unprecedented precision. Kumagai has made seminal contributions to single-molecule chemistry, directly observing reactions like tautomerization in porphycene molecules. His research has also demonstrated the ability to visualize quantum dynamics at the atomic level, such as hydrogen transfer via quantum tunneling. Recently, Kumagai's team achieved a major breakthrough by successfully observing vibrational spectra of single proteins using near-field infrared nanospectroscopy. This technique allows for detailed analysis of extremely small samples, overcoming the limitations of conventional infrared spectroscopy. Kumagai's innovative approach combines scanning probe microscopy with plasmonics to develop novel nanoscale spectroscopy methods with exceptional spatial and temporal resolution.

Brief comments on facilities

The Research Center for Computational Science (RCCS) plays a vital role in supporting computational research across molecular science and bioscience. Its mission is to provide large-scale computation services that surpass the capacities available at typical university computer centers, making it a crucial resource for complex simulations in molecular and material science. The RCCS supports researchers by offering advanced hardware and software environments, program libraries, and databases, ensuring that scientists can execute high-performance, large-scale calculations with ease. For the next generation of computational researchers, the Center provides schooling on different aspects of computational Chemistry and Physics. One of the very impressive statistics is

the large number of yearly publications (~600) enabled by contributions from RCCS, relative to the number of unique users (~1000) and groups (~300, numbers from 2020). The number of users has been rapidly increasing in the past few years. With state-of-the-art computational resources and dedicated support staff, the RCCS remains at the forefront of computational research, driving innovations that benefit a broad spectrum of scientific fields.

The UVSOR Synchrotron Facility is a unique, highly specialized synchrotron radiation facility, with a focus on generating extreme ultraviolet light and soft X-rays for cutting-edge research in multiple fields. Following its upgrade to the UVSOR-III model in 2012, the facility now boasts one of the highest brilliance levels for sub-1 GeV synchrotron light sources. The facility operates 14 beamlines, including “Open beamlines” accessible to a broad range of researchers and “In-house beamlines” used exclusively by IMS teams. These beamlines enable advanced studies in molecular science, materials physics, life sciences, and solid-state physics. Key research achievements include photoelectron spectroscopy, the development of gamma-ray sources, and the exploration of new light sources for nanomaterials and biological systems. The UVSOR facility supports various academic and industrial applications, including nanotechnology and biomedicine, and is actively engaged in developing next-generation microscopy and spectroscopy techniques.

6. 研究施設の現状と将来計画

共同利用設備を充実させ、大学等の共同利用研究者の研究支援を行うことは大学共同利用機関の主要な役目のひとつである。1975年の研究所発足当初から装置開発室と機器センターを設置し、1976年に化学試料室、1977年に極低温センターを設置した。さらに1979年には電子計算機センターに大型計算機を導入し、1983年から極端紫外光実験施設（UVSOR施設）で放射光源装置が運転を開始した。これらの施設では単に設備を設置するだけでなく、共同利用支援業務を滞りなく行うために技術職員を配置した。高度な研究を進めるためには研究開発が不可欠であり、研究職員との密な連携が必須である。

教員の流動性が高い分子科学研究所では、着任後の研究立ち上げスピードの速さが求められる。また、各研究グループサイズが小さいことも補う必要があり、このような観点でも施設を充実させることが重要である。また、分子研転出後もこれらの施設を利用することで研究のアクティビティを維持することが可能である。研究者が開発した優れた装置が転出後も、共同利用設備として施設の管理下でさらに広くの共同利用に供されるケースもある。このように、研究所にとって施設の充実、研究職員が流動していくシステムそのものを支援する意味もあり、施設の継続的な運営が重要である。高度な施設運営を維持するために施設の技術職員の技術の向上に努め、絶えず技術レベルの高い人材を確保するように留意している。技術職員が研究所外に出かけその高い技術力で研究支援するなどの技術交流も重要である。

現在、極端紫外光研究施設（UVSOR施設）、計算科学研究センター（組織的には岡崎共通研究施設のひとつ）が大型設備を有し、計画的に高度化、更新を行うことで世界的にトップクラスの共同利用を実施している。国内外の超大型の放射光施設やスーパーコンピュータ拠点との連携を図りつつ、差別化・役割分担を行い、機動性を活かした特徴ある共同利用が進んでいる。機器センター（2007年に旧機器センター、旧極低温センター、旧化学試料室の機能を再構築して設置）は本来の共同利用支援業務を行う一方で、全国規模でナノテクノロジーネットワーク事業や大学連携研究設備ネットワーク事業を推進し、特定分野の重点的な強化、大学等の研究を支えるシステム作りを行ってきた。また、装置開発室は高度な特殊装置・コンポーネント開発にその高い技術力を活かすべく、研究所外からの依頼に対応することで共同利用施設としての役目を果たしている。

分子研では、共同利用をより活性化し、大学の研究活動に貢献する施策として、2018年に新しい人事交流制度を開始した。これは、かつて法人化前に運用されていた「流動研究部門」制度に準じ、現在の人事制度と我が国が置かれている状況とに対応した新たな取り組みである。具体的には、特別研究部門に以下の2つの制度を整備し、分子科学分野のトップレベルの研究推進と研究者層の増強を図っている。(1) 2023年4月より、分子科学分野において最先端の科学を切り拓く世界的研究者である東京大学の藤田 誠卓越教授をクロスアポイントメントで分子科学研究所卓越教授として招へいし、研究に専念できる環境を提供している。(2) 分子科学分野において独創的な研究を行っている教員に対してクロスアポイントメントで分子研教員ポジションを提供し、分子研の先端設備を使った研究に集中的に取り組む時間を提供することとし、現在3名を配置している。2023年度は女性研究者を積極的にクロスアポイントメント教員として受け入れる事を決定し、2024年4月以降、2名を採用した。

(渡辺芳人)

6-1 極端紫外光研究施設 (UVSOR)

6-1-1 はじめに

UVSOR 施設は 1983 年 11 月 10 日に「初点」を発してから 40 年が経過した。その間、2003 年度の第一期高度化（低エミッタンス化、直線部増強 4→8 か所）、2012 年度の第二期高度化（TOP-UP 運転、挿入光源追加、エミッタンス 27→17 nm rad）のように、新規光源開発と先端計測の専門家のコラボレーションにより、UVSOR では 2 度の光源加速器高度化に成功した。1 GeV 以下の低エネルギー放射光施設としては、回折限界光源に迫る世界最高性能を達成し（電子ビーム低エミッタンス）、真空紫外光から軟 X 線領域をカバーする国際競争力をもつ放射光施設として運用している。研究力の維持には高い光源性能に見合う実験設備の整備が不可欠であるが、UVSOR-III として 12 年目を迎え、全 13 ビームラインのうち 6 基の先端計測放射光ビームライン設備が成熟し、主として材料科学、光化学、環境エネルギー分野の先端の実験成果の収穫期に入った。また UVSOR の高い光源性能とコンパクトな運転体制の特徴を活かした、独自性の高い特徴的な研究開発が行われており、新規量子ビーム源の開発や回折限界光源の特性を利用したコヒーレント放射光科学も推進している。その他の標準共同利用ビームライン（7 基）においても、国際的に唯一無二の可視光から真空紫外光まで連続した波長可変な分光システムが稼働しており、材料開発研究にて貴重な成果が発信されている。高度化で生まれ変わった現在の UVSOR-III は、特に 10 eV 付近をカバーする真空紫外光領域では国際的にみても希少な第三世代放射光施設で、今後も国際共同研究の持続的な発展を目指す。また中型放射光施設 NanoTerasu と大型放射光施設 SPring-8 とともに国際的な先端放射光施設としての相補的運用と研究主導が求められる。大型・中型・小型の先端放射光施設を国内に有するというコミュニティ総合力は、我が国の国際的にみた優位性である。各施設における光源の波長帯域の相補性だけでなく、ゼロをイチにする学術開拓、研究の厚みを創る学術発展から社会実装までのニーズとシーズの相関とその研究時間スケールの違いによる相補性も重要な因子である。

これまで 40 年来にわたり積み重ねられた貴重な学術資産と、共同利用環境の継続的支援を視野に入れると、次期施設の建設計画（UVSOR-IV：仮）を算段する時期にあり、後述のように 2018 年度より具体的な検討を進めている。現状の先端研究の活動力を維持すると同時に、今後の放射光利用において先端分析を利活用できるユーザーを育成することや、コミュニティ全般強化へ向けた組織間連携や、未活用分野への支援による研究領域の拡張が重要であり、特に歴史的に放射光利用が普及していない化学・バイオ系への分野展開が国際的な命題である。こうした潜在的放射光利用者となりうる当該分野を長年にわたり支えてきた分子科学研究所への期待は高い。

計画概要として、次期施設は小型放射光を軸としつつも、あらゆる光源（高輝度放射光、自由電子レーザー、高次高調波レーザー等）を多彩に活用できる実験設備を一元集約して提供することで、光計測が研究連携の横串となつて多くの異分野を融合し、分子科学研究所の牽引力とともに未踏の学術を広く開拓する。成熟した各種光源技術を有機的に組み込んだ国際的に見ても稀有な、唯一無二の研究空間の創出を目指す。特に「分子機能・生命機能・量子物性などの複雑系／不均一系の光計測拠点」としての先端計測設備を機能強化し、大学共同利用機関として長期的に支援する施設と位置付けた。また今後の技術的成熟に応じて、高出力小型レーザー光を新規に入射加速器として用いる計画も検討している。この技術は相補的に EUV 波長帯における自由電子レーザーの併用など、時間・空間軸で極限化されたコヒーレント光源を利用した未踏の新規計測による学術開拓の場としての拡大展開が視野に入る。

先端サイエンス分野の細分化の時代において、異分野融合によるコミュニティの構築は容易ではない。各分野が緻密化・専門化されるに従い多くの専門用語が生成され、独自のコミュニティにおける集中的な議論体制の形成もあり、分野の垣根を超えた議論は極めて難しい時代となった。もはや卓越した俯瞰的視野と大局観を有するような研究者がいたとしても、分野横断による新分野創発の作業は、一個人の能力を超えてしまっている感がある。こうした時代に

においては、横串として適切な規模の設備・人員を整備した拠点センターが総合的な体制として不可欠である。また光科学は、放射光施設の実績と在り方を見れば明らかなように、あらゆる分野における利便性と拡張性を持ち合わせている。特定分野を出口戦略の短期的視点で強化する政策に対し、長期的視点で学術の裾野を広げる役割を担う。今まさに未開拓の分野に「光」をあて、国際的に見て爆発的にコミュニティ拡大に繋がるような光利用実験のロールモデルを作り上げることが不可欠である。分子研が設置当初にケミストリー分野への放射光利用学術展開を意識して UVSOR を建設し、分野育成に貢献したと同じように、その第二弾の学術開拓を意識した計画を検討している。大学共同利用機関のユーザー支援ノウハウの蓄積と共同研究の実績により、各関連センターと連携した多面的な支援による自由度の高い「高度研究支援環境パッケージ」を提供することができる。特にバイオ系（生物学、農学、薬学、生命科学等）の実験手順では、放射光を利用した実験の前後の評価や試料調製環境の充実が不可欠で、時間と空間のスペース感覚を意図することが極めて重要となる。光科学の設備を軸としつつも、周辺の汎用分析器も一元集約する新センターが必須であろう。

こうした背景に基づき、本計画の関連提案を日本学術会議が募集した「未来の学術振興構想」の策定に向けた「学術の中長期研究戦略」の施設計画に提案した。我々の「複雑・不均一系の分子ダイナミクスに挑む量子光科学拠点の構築」は、2023 年 10 月にグランドビジョン「量子ビームを用いた極限世界の解明」の一計画に策定された。また、文部科学省のロードマップ 2023 へ提案「自律型機能の解明に向けたテラレーメイド光科学研究拠点」を申請した（不採択）。また 2023 年 12 月には UVSOR 設立 40 周年記念事業を開催し、これまでの UVSOR を振り返りつつ、持続的に未来へ向けて次期施設の目指すべき姿について議論した。そこでは 40 周年記念冊子を発行するとともに、コンセプトデザインレポートを執筆した（web 公開）。現 UVSOR-III は次施設建設までへの研究活動の持続性を担保することが責務であるが、同時に、次期施設へ繋ぐための軟 X 線と真空紫外線を用いたバイオ系の斬新な研究成果の発信を狙い、着実な需要開拓を目指したい。岡崎三機関の基礎生物学研究所、生理学研究所の各研究グループとの共同研究を開始しており、Proof of Concept 実験検証を通じて、相互連携を強化する作業を進めている。また、光源グループによる先端の量子ビーム実験環境・設備の継続的な深化も重要で、低エネルギー帯施設における国際的な発信力を強化したい。こうした計画の経緯は過去の分子研リポート 2018 ～ 2023 もご参照いただきたい。

6-1-2 光源加速器の現状と老朽化対策

現在の光源加速器については、従来の 15 ～ 20 年の設備更新サイクルを鑑みると、2030 年程度には大規模な更新が想定され、特に建設当初 1983 年来、未更新の基本設備への対応が緊迫した課題である。設備トラブルによる不測の運転停止をさけ、国際的にも希少かつ競争力のある貴重な極端紫外放射光源を安定供給し続けることで、多彩な分野の学術発展に資する大学共同利用機関の使命を果たす責務がある。このうち数億円規模の高額設備以外については逐次更新を行ってきているが、過去の履歴から計画的に更新可能な老朽設備（電磁コイル、シンクロコンデンサ、ストレージコンデンサ、クライストロン、シンクロ偏向ダクト真空ベローズの一部）は、今後 10 年間を目安に所長裁量経費によりその約 6 割について更新完了させることを 2019 年度に決定し順次進めている。2022 年度からは電力料金の高騰問題から節電対策を検討し、昨年度比で同月毎 2～10% の使用量削減に成功した。2024 年度も継続して節電に努めている。

加速器老朽化における緊急課題として入射効率の低下が挙げられる。2023 年 1 月頃から効率が減少し始め、一時は入射効率が 10% を切る事例が発生し、蓄積電流値を通常 300mA のところを 200mA に下げて運転してきた。その後、原因特定の作業を進め、入射効率低下の要因を見出し、次年度は改善する見込みがたった。執筆現在 2025 年 3 ～ 5

月は、シャットダウン期間中であるが、シンクロトロンブースターリングの大規模改修を実施している最中であり、偏向部真空ダクトを全て新品に交換を進め、より安定な状態でのビーム入射を目指した設備整備を実施している。

他機関連携については、マスタープラン 2020 での協力体制方針を継承し、2023 年度から KEK-PF、UVSOR、HiSOR さらに名古屋大 SR センターの光源部門が共同で SR 加速器情報交換会を月一回程度の間隔で開催し、研究者から技術職員までが参加し、それぞれの施設の運転状況や技術開発への取り組みなどを報告している。技術情報の交換による各施設職員のレベルアップ、若手への技術伝承、要素技術・保守部品などの共通化による維持管理コスト低減、将来計画へ向けた共同技術開発などを狙いとしている。

一方、光源開発研究の視点で新規光源探査や量子ビーム開発とその利用にかかる研究は、今や UVSOR の独創性の代名詞とも呼べるもので、多彩な学術利用あるいは産業利用の展開が期待されている。こうした研究は、大型施設では通常の放射光ユーザーのための定常運転への影響があるため困難であるが、小型施設ならではのメリットとして、光源パラメータ操作の自由度が高いことや、週末実験などで定期的な実験環境が与えられていることがあげられる。2020 年度に、平 准教授が着任し、パルスガンマ線発生と陽電子消滅によるビーム利用研究を推進している。前述のように特殊運転が必要な実験は、ユーザー利用の無い週末あるいは特定の専用運転週をユーザー利用週の間に設定して運営してきた。今後の需要バランスを鑑みて、ガンマ線利用実験が通常のビームタイムで実施できるように、2022 年春に蓄積リングの電子パンチ軌道を新たに設計し、新軌道で定常運転することに成功した。その他、加藤特任教授(クロアボ)らによるタンデムアンジュレータの特性を活用した斬新な光干渉実験等も行われてきた。金安教授が 2025 年 4 月着任予定で、新規光源開発とその利用に関する研究力を強化する。これにより、中長期的な加速器運転における持続性が担保されるとともに、次期計画推進に向けた強力な陣容となった。

6-1-3 ビームラインと観測系利用状況

現在ビームラインは 13 基が稼働している。海外からの第一線の研究者が利用に来るような競争力のあるアンジュレータビームライン 6 基を中心に実験設備の重点整備を進めている。特に真空紫外分光、光電子分光、軟 X 線吸収分光は物性・機能研究の点で世界的競争力がある。ビームライン実験設備については、国際的な動向を鑑みて 10 年程度の先端開発研究サイクルに後れを取らぬように、各ビームラインの利用状況等を踏まえた設備の高度化が必要で、分子研予算と外部研究費等により開発研究を継続してきた。開発が終了したビームラインからユーザー利用が開始されている。ユーザーバランスはコロナ禍以前に戻りつつあり、今後は国際申請数や、民間需要への対応、採択競争率を意識した運用となるであろう。

軟 X 線 BL6U では、2020 年から立ち上げ中の光電子運動量顕微鏡の調整を進めつつ、デモンストレーション実験を協力研究により推進している。2022 年度に二次元スピン検出ユニットを導入し、スピン分解機能を付加した同顕微鏡装置の最終設備開発が始まった。さらに、低エネルギー VUV の BL7U の光源をブランチ化して同顕微鏡に導入する機構を立ち上げ、直入射光源による偏光依存実験に成功している。

また汎用設備であるペンディングラインにおいても、国際的に唯一無二の波長帯をカバーする光反射・吸収測定設備を提供しており、貴重な材料物性評価の成果が発信され続けている。ペンディングラインは設備の希少性と稼働率を鑑みて将来計画を立て、アンジュレータ光源の先端ビームラインとのバランスを取りつつ運用を継続していく。大型放射光施設 SPring-8 の大規模更新計画で、赤外分光ビームラインが廃止されることを受け、国内ユーザーコミュニティのアクティビティ維持を目的として、UVSOR で積極的に受け入れを行うことで合意し、2025 年度から設備の移設や関連ビームラインの更新を予定している。2024 年度は、シャットダウン 10 週、調整運転 2 週、マシンスタディ

4 週, ユーザータイム 36 週 (うちシングルバンチモード 2 週) であった。前期の申請件数は 109 件 (うち有償利用 7 件, 随時申請 3 件, BL3U 水漏れによるキャンセル 14 件を含む) で, 後期の申請件数は 123 件 (うち有償利用 9 件, キャンセル 4 件を含む) であった。

最近の成果として以下の 6 点を取り上げる。いずれもこれまで見えなかったものを「観る」ことにより「解る」につなげた研究である。

[BL1U] 世界で希少な高フラックス・エネルギー可変・偏光可変・超短パルスガンマ線源

円偏光度を制御したガンマ線にて磁性体の空孔などを調べる独自の手法の利用が広がる

[BL3U] 共鳴軟 X 線散乱の測定システムを整備。ソフトマターの構造解析手法を開発

対象は液晶や高分子, 生体試料など。100 nm 程度のねじれ構造の観測や元素選択的な解析

[BL4U] 走査透過 X 線顕微鏡 (STXM) を核とした複合分析による化学状態マッピング

軟 X 線を使った生命科学ヘフィージビリティスタディを進めている

[BL5U] 全方位スピン分解 ARPES を目指して最終電子レンズ調整

軟 X 線の広いエネルギー範囲で高分解能スピン偏極バンド分散計測が可能に

[BL6U] 光電子運動量顕微鏡 (PMM) による TaS₂ や IrT₂ などの CDW 相転移中の Fermi 面変化観察

顕微分光と暗視野像法を駆使し相分離の顕微分布と各所の電子状態の変化過程を可視化

[BL7U] 世界で最も低温まで冷却できる 6 軸光電子マニピュレータを実装

低エネルギー帯連続光源で世界トップクラスの高エネルギー分解能バルク敏感電子状態測定拠点

[BL3B] ベンディングビームラインにおけるシンチレータなどの材料評価計測

福島第一原子力発電所事故における内部調査委に使われる新規材料開発で有効活用されている

6-1-4 中長期計画 (次期施設計画)

本施設規模 (小型リング型高輝度放射光施設) の光源加速器技術と性能は, UVSOR-III にて実証されたように既に成熟期にあり概ね極限化されている。そこで現状のリング型光源加速器性能を基本骨格とし, 利用ニーズに即した組織体制の在り方に重点を置く計画とした。近代サイエンスにおいて欠かせない異分野融合を真に具現化するために必要な拠点スタイルとインフラストラクチャー設備群を検討した。これは奇しくも分子科学研究所の設立時の理念として, ケミストリー分野のための放射光施設を建設する必要性を提示したコンセプトと合致する。つまり光科学を軸とする新たな学術創成計画の第二弾と捉えていただければ幸いである。

光源技術の発展により, 今や放射光のみならずレーザー光源 (自由電子レーザー FEL や高次高調波 HHG レーザー) を自在に利用できる施設が求められている。特に EUV 領域 (100 eV 程度以下) の波長帯は現時点では放射光よりもレーザー光源の方が時間分解能や周波数特性において高性能を示す側面がある。これまで HHG レーザーは安定性や技術的な困難さから汎用的に普及するには至っていないが, 今後は世界に先駆けて我が国の共同利用施設が主導することで, 広く HHG レーザーを活用するフェーズに移行する必要がある。こうしたレーザー設備に対して, 放射光分野で培われてきたビームライン技術を転用することで更なる高度化が期待されるとともに, 大学共同利用機関の支援体制と運用法を広く展開することによる包括的な効果として, 周辺分野の活性化が期待できる。より短波長の光源としては放射光の優位性は揺るぎなく, 物性や機能を研究するために不可欠な広帯域の光の利用には, これらの光源 (SR, FEL, HHG) を網羅する設備が欠かせない。

2024 年度は自然科学研究機構のオープンミックスラボ（OML）事業支援により、所外グループと連携し、フォトンバイオロジーフィージビリティ研究を開始した。生体試料の多彩な計測を意識した手法開拓を進めている。また、各実験手法や分野毎の研究会を以下のように開催した。

2024.10 分野研究会「物理化学と放射光・先端計測に関する研究会」

2024.12 分野研究会「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？」

2024.12 VSX 研究会共催（物性研究のための VUV・SX レーザー光源と加速器光源の協奏利用）

2025. 1 日本放射光学会年会特別企画（日本の放射光施設のポートフォリオと将来展望）

一方で、UVSOR-IV の建設費用の獲得は非常に困難であるため、事業継続性の観点から既存リング設備を軸とする UVSOR-III+（プラス）高度化および光源最適化を同時進行で計画しており、予算を概算要求している。電子ビーム蓄積リングの電磁石構成を DBA 型に刷新することで、世界最高レベルの低エミッタンス高輝度 EUV 光源の超安定運転が実現する。先端光源の更なる高度化により、ビーム安定性が飛躍的に向上するとともに、光源のコヒーレンス特性が向上し、未開の計測手法が開発される。これらの先行開発は、ニーズの高まりをみる複雑系分野への展開に必須で、国際競争が激しさを見せる中、我が国の基礎学術の持続的発展に不可欠である。また懸念の老朽化設備を全て刷新し、ビームプロファイル機構を導入することによる光源安定化により、時空間計測のための先駆的实验の検証が実現し、新イメージング法により国際研究展開をリードすることにつながると考えている。また老朽設備の撤廃により、24 時間運転の実施が可能となり、UVSOR の強みである挑戦的な光計測法の開発研究機能を維持しつつ、スタッフ対応が困難な夜間タイムにおいては、汎用型計測の自動化機能、AI ロボット支援システムを開発することで高スループット型の実験が実現する。大型施設では相容れない汎用自動型と先進開発型の二面展開が可能となり、分子科学の新たな潮流を生み出せると期待している。ここで開発される新規イメージング法やオペランド法など先端実験設備は、次期施設（UVSOR-IV）へ持続的かつ効果的に誘い、新たな要素技術の供給源ともなるだろう。

UVSOR-IV の詳細のコンセプトデザインレポート全容は web 開示している。繰り返しになるが、リング型放射光の仕様は、UVSOR-III よりも一回り大きな省エネ小型の高輝度光源 UVSOR-IV を新地に刷新する。光源のテラレーメイド利用のために、運営自由度のある小型施設規模が不可欠で、成熟した各先端技術を導入しオペランド・イメージング手法への適用に耐えうる安定性を重視した設計である。SX、VUV の長波長帯域では回折限界性能の高輝度光源となりレーザーを組み合わせたコヒーレント特性を利用する最先端研究が行える。また次世代の最新技術である小型レーザー加速器による入射器を世界に先駆けて導入し、50 年後も持続可能な長期的な展開を視野に入れる。次期計画のコンセプト概要の詳細はリンク先をご高覧いただきたい。

<https://www.uvsor.ims.ac.jp/uvSOR4/>



ミッション：先端光計測による生命と物質の謎の解明

Knowledge innovation by seeing the unseen “観るから解るへ”

戦略目標：

省エネ／高輝度小型リング放射光源設備による新センター建設

サイエンスニーズ視点で光のテーラード利用による未開拓分野の啓発

ゼロをイチにする学術開拓的・異分野融合型研究の推進

次世代への技術伝承と人材育成

研究者・技術者の相補性強化 “技術職員の待遇改善”

タスク：

SR, HHG, FEL の自在提供による先端開発と最新技術の協奏

付帯分析機器群によるマルチモーダル実験設備の複合研究支援

ワンルーフ集約された研究環境による融合型研究の促進

知識・技術を持ち寄り新しい発想を生み出す異分野交流の潮流

シニアと若手が切磋琢磨する光道場による相互作用の仕掛け

本報告は、UVSOR 施設運営委員会（2018 年度より年 2 回）、UVSOR 将来検討ワーキング・小委員会（2018 年 10 月以降逐次）、UVSOR 利用者懇談会（2018 年度より年 1 回）、国際諮問委員会や運営顧問会議（2019 年 12 月、2024 年 2 月）における意見交換を元に改訂してきたものである（過去レポート参照）。また継続して外国人運営顧問により意見聴取も行われている（分子研レポート 2016 から 2023 参照）。

6-2 機器センター

機器センターは、先端機器の開発・維持・管理・運用、汎用的な物性・分析・分光機器の維持・管理・運用、所員ならびに所外の協力研究・施設利用者への技術支援を主な業務としている。先端機器開発に関しては、研究所内外の共同利用者と協力して、特色ある測定装置の開発とその共同利用を行っている。また、汎用的な化学分析機器、構造解析機器、物性測定機器、分光計測機器、および液体窒素・ヘリウム等の寒剤供給装置等の多様な機器の維持・管理を行い、全国の共同利用者が分子科学研究を推進するための研究支援を担っている。一方、大学連携研究設備ネットワーク（設備 NW）の幹事機関として、機器センター所有の多くの機器を設備ネットワークに登録・公開し、この事業の運営を主導し事務局を担当している。また、2021 年度からは文部科学省受託研究マテリアル先端リサーチインフラ（Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology in Japan, ARIM）事業の「マテリアルの高度循環のための技術」領域のスポーク機関、2022 年度からは同事業運営機構横断領域物質・材料合成プロセス技術分野の責任機関として本国家プロジェクトの設備共用・DX 拠点を務めている。

2023 年度の機器センターの人員は以下のようなものである。センター長は 2018 年度から横山利彦が務め、分析チームリーダー・中村敏和（2019～、2023 年 11 月から研究力強化戦略室・特任部長が主務）、合成チームリーダー・鈴木敏泰（2019～）、主任研究員・湊丈俊（2020～）の 3 名が先端的な共同利用を推進している。この 3 名は、先端的・開発的な共同利用（協力研究並びに施設利用）の推進に加え、俯瞰的視野に立った機器センターの運営、設備の維持・管理・開発・更新を行い、さらには、大学共同利用機関法人としての大学等への組織的な機能強化貢献をミッションとする。専任技術職員は、高山敬史主任技師、上田 正主任技術員（年度途中で技師に昇任）、藤原基靖主任技術員、浅田瑞枝主任技術員、岡野芳則技術員、賣市幹大技術員、宮島瑞樹技術員、長尾春代技術員、平野佳穂技術員に加え、安全衛生管理室と併任の南田悠技術員が本年度に新たに採用され計 10 名の在籍となった。ユニット長は 2024 年度も繁政英治技術推進部長が兼任する体制とした。また、技術系特任専門員 2 名（伊木志成子、石田向日葵）に加え、育児休暇中の事務支援員・内田真理子が技術支援員として復帰し、さらには、設備 NW と ARIM の 2 事業において、運営マネージャー 4 名（石山 修、中本圭一、太田康仁、賀来美恵）が配置されており、事務支援員は、計 4 名（兵藤由美子、船木弓子、遠山 遊、栗田佳子）が業務に当たっている。

研究所全体としては大規模装置を効率的に運用する必要性が高まっているが、機器センターは其中で比較的汎用性の高い装置群を集中的かつ経常的に管理している。2013 年度には、2012 年度ナノプラットフォーム補正予算により、マイクロストラクチャー製作装置（マスクレス露光装置、3 次元光学プロファイラーシステム、クリーンブース）、低真空分析走査電子顕微鏡、機能性材料バンド構造顕微分析システム（紫外光電子分光）、X 線溶液散乱装置が導入され、マイクロストラクチャー製作装置は装置開発室が管理し、それ以外の 3 機器は担当教員のもと機器センターが維持・管理・運用し、既に多くの利用がある。2017 年度には、他では利用しにくく外部利用頻度の高い極低温・微結晶単結晶 X 線回折の検出器の更新、マトリックス支援レーザー脱離イオン化（MALDI-TOF）質量分析計の新規導入、示差走査熱量計（DSC）、熱重量計（TGA）の新規導入などを行い、2018 年度は、光励起状態の時間分解高磁場パルス電子スピン共鳴測定を可能にするための大強度ナノ秒レーザー・OPO システムを新規導入した。2019 年度には、オペランド多目的粉末・薄膜 X 線回折装置が導入され、さらには 2019 年度末に最先端の高速原子間力顕微鏡 2 機が導入された。さらに、競争資金で購入された汎用的な機器の共有・共同利用機器化が始まり、高性能二重収束質量分析計（所内共通機器、魚住教授より）、ESI-TOF 型質量分析装置（所内共通機器、藤田卓越教授より）、電界放出形透過電子顕微鏡（共同利用機器、魚住教授より）が登録されている。2020 年度は、老朽化した可視・紫外円二色性分散計の設備更新を行い、かつ、新型コロナウイルス感染症対策の 2020 年度第 2 次補正予算により 400 MHz、600 MHz 溶液核磁

気共鳴の液体ヘリウム再凝縮器を付加することができた。また、ARIM 事業 2020 年度補正予算によりデータ連携・遠隔操作機能付電子スピン共鳴装置、ARIM 事業 2021 年度補正予算により超伝導量子干渉型磁束計 (SQUID)、ARIM 事業 2022 年度補正予算により単結晶 X 線構造解析と有機自動合成システム、所内予算による 600 MHz 溶液 NMR が新規に導入された。また、名工大から電子プローブマイクロアナリシスが譲渡され始動しており、2023 年度センター予算において山手地区に蛍光分光と蛍光寿命装置、2024 年度センター予算において山手地区に示差走査型溶液熱分析計を導入している。さらには、2022 年度概算要求によりヘリウム液化機の更新が実現し、本年度から運転されている。設備予算はなかなか措置されにくい状況が続いているが、所内予算・競争資金・概算要求を含めて何とかある程度の新規設備が導入できている状況である。

所外委員 5 名を含む機器センター運営委員会では、協力研究・施設利用の審査を行うほか、共同利用の在り方やセンターの将来計画について、所内外の意見を集約しつつ方向性を定めている。利用状況として、最近では年間 200 件程度の所外利用があり、共同利用機関としての責務は十分に果たしている。なお、大学共同利用機関法人評価において、所外運営委員を半数以上とすることが求められ、2022 年度から所外委員比を増やすこととなった。機器センターは設備 NW、ARIM 事業を推進しつつ、大学利用共同機関法人として大学等の研究者への直接的な研究強化貢献のみならず、大学等への組織的な機能強化貢献にも積極的・具体的に寄与すべきであろう。国家全体の厳しい財務状況を考慮すると、汎用機器の配置や利用を明確な戦略のもとに進めることが不可欠となるのは言をまたない。実際、現在所有の多くの機器の老朽化が進んでいる。所内外の要望と需要を検討し、重点化の方向性と導入優先順位を議論し、概算要求のみならず外部資金を積極的に獲得することに努めた結果、電子スピン共鳴、超伝導量子干渉型磁束計、単結晶 X 線構造解析、高磁場核磁気共鳴、ヘリウム液化機などの更新が行える状況である。

今後さらに中長期的にどのような機器ラインアップを維持するかの検討については、次の 3 つのタイプに階層化することを想定する。

- 1) 比較的多数のグループ（特に研究所内）が研究を遂行していく上で不可欠な共通基盤の機器。これらの維持は、特に人事流動の活発な分子研において、各グループが類似の装置をそれぞれ新たに用意する必要がない環境作りの面で最重要である。一方、使用頻度や維持経費の点で負担が大きいと判断されたものは見直しの対象とし、所内特定グループや他機関へも含めた移設などにより有効に利用してもらうことも検討する。
- 2) 当機器センターとしての特色ある測定機器。汎用機器をベースとしつつ改良を加えることによってオリジナル性の高いシステムを開発し、それを共同利用に供する取り組みを強化する。分子科学研究所の特色として「低温」「オペランド」を柱とした分野強化を進める。その際、技術職員が積極的に関与して技術力を高めることが重要であり、主任研究員制度の適用も視野に含める。所外の研究者の要請・提案を取り込みつつ連携して進めるとともに、所内研究者の積極的な関与も求める。当センター内のみならず、UVSOR をはじめとする所内センター等と共同して取り組むことも効果的である。所内技術職員の連携協力が技術を支えるのに不可欠であるが、コミュニティ全体から提案を求める体制づくりも必要となろう。
- 3) 国際的な水準での先端的機器。分子科学の発展・深化を強力に推進する研究拠点としての分子研の役割を体現する施設として、UVSOR や計算科学研究センターと同様に、機器センターも機能する必要がある。高磁場 NMR 装置や ESR 装置は、国際的な競争力を有する先端的機器群であり、研究所全体として明確に位置付けを行い、利用・運営体制を整備することによって、このミッションに対応すべきである。国外からの利用にも対応するため、技術職員には国際性が求められる。2) と同様に、所外コミュニティからの要請・提案と、所内研究者の積極的な関与が不可欠である。特に、新規ユーザーの開拓は、分子科学の新領域形成へと繋がると期待されるものであり、これまで分

子研との繋がりがあまり深くはなかった研究者層・学協会との積極的な連携を模索することにも取り組む。先端的機器は不断の性能更新が宿命であるが、全ての面でトップたることは不可能であるので、意識して差別化を行い、分子研ならではの機器集合体を構成することに留意する。

2021 年度から ARIM 事業が始動し、分子科学研究所は「マテリアルの高度循環のための技術」領域スポーク機関と運営機構横断領域物質・材料合成プロセス技術分野の責任機関としてマテリアル DX プラットフォーム形成に関与することとなった。このプログラムの主たる目的は、マテリアルデータベースのデータ収集・蓄積、共用プラットフォーム・データプラットフォーム構築、AI 等を用いたデータベース利活用などであり、マテリアルの構造・物性計測における測定自動化・遠隔化、マテリアル創成における合成自動化・AI 解析等によるハイスループット化も推進していく。DX は省庁を跨いだ大規模な国家プロジェクトであり、機器センターもその一翼を担う組織として積極的にデータ収集・蓄積さらには特徴ある解析アプリの提供等による利活用を推進していきたい。

6-3 装置開発室

装置開発室は、分子科学分野の研究者と協力し最先端の研究に必要となる装置や技術を開発することと、日常の実験研究において必要となる装置や部品類の設計・製作に迅速に対応する、という二つの役割を担っている。製作依頼件数は年間 400 件超に及ぶ。新しい装置の開発では技術職員が研究者と密接に連携し、また、日常の実験研究で必要となる工作依頼などについては、機械加工技能を持つ技術支援員が中心となり、対応している。

2021 年度より新たに有償利用制度を設けることで、分子研外部からの製作・開発依頼受付を持続可能なシステムとして運用開始し、海外からの依頼も含めて対応できる体制を整えつつある。また従来からある施設利用については、他の施設と同様の形で継続している。

装置開発室は大きく機械工作を担当するメカトロニクスセクションと電子回路工作を担当するエレクトロニクスセクションに分かれている。メカトロニクスセクションでは従来の機械加工技術の超精密化に向けた取り組みに加え、近年では、リソグラフィなど非機械加工による超微細加工技術の習得に取り組んでいる。エレクトロニクスセクションでは、高速化や多機能化が進む電子回路の需要にこたえるために、プログラマブル論理回路素子を用いたカスタム IC の開発等に取り組んでいる。これに加えて、3D プリンタ、CAM やシミュレーションなどのデジタルエンジニアリングの導入を進めている。

装置開発室の設備については、創設から 40 年以上が経過し、老朽化、性能不足、精度低下などが進み、設備の更新は急務となっている。2013 年度には、ナノテクノロジープラットフォーム事業の一環として、マイクロストラクチャー製作・評価のための先進設備を導入することができた。また、2019 年度には 5 軸加工機と電子ビームリソグラフィ装置の導入を行った。2020 年度は、附属 3 棟の改修により、工作环境およびクリーンルームの整備を行うこともできた。今後も、装置開発室の将来計画・将来像の検討を進めながら、その方向性を強く意識しつつ、日常の実験研究を支えるための基盤的設備、先端技術習得のための先進設備、双方の更新・導入を進める。また、他機関との連携や、他機関共用設備の利用も積極的に検討する。

6-4 計算科学研究センター

計算科学研究センターは、2000 年度に分子科学研究所の電子計算機センターから岡崎共通研究施設の計算科学研究センターへの組織改組が行われ、現在は分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所の3 研究所により運営されている。従来の共同利用に加えて、理論、方法論の開発等の研究、さらに、研究の場の提供、ネットワーク業務の支援、人材育成等に取り組んでいる。2024 年度においても、計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業や各種スクールの開催をはじめとした様々な活動を展開している。ここでは共同利用に関する活動を中心に、特に設備の運用等について記す。2024 年度には、基礎生物学研究所のスーパーコンピュータとの統合がなされた。

2025 年2 月現在の共同利用サービスを行っている計算機システムの概要を示す。本システムは、2017 年10 月から稼働していた旧「高性能分子シミュレータ」を2023 年2 月に更新した「高性能分子シミュレータ」である。本シミュレータでは、量子化学、分子シミュレーション、固体電子論、生物物理などの共同利用の多様な計算要求に応えうための汎用性があるばかりでなく、ユーザーサイドの PC クラスタでは不可能な大規模計算を実行できる性能を有する。

高性能分子シミュレータは、主として HPE 製の Apollo シリーズで構成される 834 ノードの共有メモリ型スカラ計算機クラスタであり、全サーバは全て同一 CPU (AMD E7763)、同一 OS (Rocky Linux 8.7) を有し、バイナリ互換性を保ち一体的に運用される。システム全体として総演算性能 6.68 Pflops で総メモリ容量 224 TB である。主力の演算サーバは Type C と呼ぶもので、2.45 GHz のクロック周波数をもつ 128 コア、256 GB メモリ構成の 804 台である。仮想ノード単位とコア単位の利用形態のジョブの大半は Type C で実行される。Type F はメモリを 1 TB に強化した 14 台であり、他は Type C と同一である。多くのメモリを必要とするジョブが仮想ノード単位で実行される。Type G は 1 ノードあたり 8 GPU を有する 16 台であり、筐体が違うものの他は Type C と同一である。インターコネクトは InfiniBand アーキテクチャを採用し、全台数を 100 Gb/s で接続しており、大規模な分子動力学計算などノードをまたがる並列ジョブを高速で実行することができる。これらクラスタ演算サーバは 14.8 PB の容量を持つ外部磁気ディスクを共有し、Lustre ファイルシステムを構成している。

ハードウェアに加え、利用者が分子科学の計算をすぐに始められるようにソフトウェアについても整備を行っている。量子化学分野においては、Gaussian, GAMESS, Molpro, TURBOMOLE, 分子動力学分野では、Lammps, GROMACS, Amber などがインストールされている。これらを使った計算は全体の 1/3 強を占めている。

共同利用に関しては、2024 年度は 429 研究グループにより、総数 1,737 名 (2025 年3 月現在) におよぶ利用者がこれらのシステムを日常的に利用している。近年、共同利用における利用者数が増加傾向にあり、このことは計算科学研究センターが分子科学分野、物性科学分野、生物物理分野において極めて重要な役割を担っており、特色のある計算機資源とソフトウェアを提供していることを示している。最近、錯体化学分野や有機化学分野など幅広い分野の研究者の利用も増加している。また、基礎生物学研究所のスーパーコンピュータとの統合の結果、利用者数が格段に増加した。

計算科学研究センターは、国家基幹技術の一つとして位置づけられているスーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム、データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクトとも連携を行っている。これら2 つの大規模並列計算を志向したプロジェクトを支援し、各分野コミュニティにおける並列計算の高度化へさらなる取り組みを促すことを目的として東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所が共同で「計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業 (SCCMS)」を運営しており、2024 年度はこれらプロジェクトにコンピュータ資源の一部 (10% 以下) を提供・協力している。さらに、ハード・ソフトでの協力以外にも、分野振興および人材育成に関して、計算科学研究センター研究施設のワークショップ「AI/ML に基づく材料設計と開発：理論と実験の接

点」と2つのスクール「第14回量子化学スクール」と「第18回分子シミュレーションスクール—基礎から応用まで—」を開催した。また、東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所、大阪大学エマージングサイエンスデザイン R³ センターと協力し、我が国の最先端の計算物質科学技術を振興し、世界最高水準の成果創出と、シミュレーション技術、材料情報科学技術の社会実装を早期に実現するため、計算物質科学協議会を設立・運営し、分野振興を行っている。

2024 年度 システム構成

高性能分子シミュレータシステム 6.68 PFlops

クラスタ演算サーバ Type C	
	型番：HPE Apollo2000 Gen 10 Plus
	OS：Linux
	コア数：102,912 コア（128 コア × 804 ノード）2.45 GHz
	総理論性能：4,034 TFlops（5,017.6 GFlops × 804 ノード）
	総メモリ容量：206 TB（256 GB × 804 ノード）
クラスタ演算サーバ Type F（メモリ強化）	
	型番：HPE Apollo2000 Gen 10 Plus
	OS：Linux
	コア数：1,792 コア（128 コア × 14 ノード）2.45 GHz
	総理論性能：70 TFlops（5,017.6 GFlops × 14 ノード）
	総メモリ容量：14 TB（1024 GB × 14 ノード）
クラスタ演算サーバ Type G（演算性能強化）	
	型番：HPE Apollo6500 Gen10 Plus
	OS：Linux
	コア数：2,048 コア（128 コア × 16 ノード）2.45 GHz
	GPU：NVIDIA A100 NVLink
	総理論性能：80 TFlops（5,017.6 GFlops × 16 ノード）+ 2,496 TFlops（19.5 TFlops × 128 ノード）
	総メモリ容量：14 TB（1024 GB × 14 ノード）
外部磁気ディスク装置	
	型番：HPE ClusterStor E1000
	総ディスク容量：14.8 PB
インターコネクト装置	
	型番：NVIDIA Mellanox InfiniBand Switch
フロントエンドサーバ	
	型番：HPE ProLiant DL385 Gen10 Plus v2
	OS：Linux
	総メモリ容量：1 TB（256 GB × 4 ノード）
運用管理クラスタ	
	型番：HPE ProLiant DL360 Gen10 Plus
	OS：Linux
	総メモリ容量：1.1 TB（192 GB × 6 ノード）

6-5 岡崎連携プラットフォーム

岡崎連携プラットフォームは、岡崎3機関（基礎生物学研究所、生理学研究所及び分子科学研究所）の枠を超えた融合研究を推進するための組織として2024年7月に設置された。分子科学分野では、計算科学手法の開発と活用、光を用いた先端的な研究手法や光源の開発、そして新規分子・物質の設計やそれらの高度集積化を通して、原子・分子・生命システムが示す多様な構造、物性、反応性、触媒能、エネルギー変換などの高次機能や動的構造を解明するとともに、新たな現象や有用な機能の設計と制御に取り組む。また、国内外の大学・研究機関と連携し、国際的に卓越した若手研究者を育成するための支援を強化する。

2024年11月時点で、同プラットフォーム下に「スピン生命科学コア」、 「オープンミックスラボ [OML OKAZAKI]」が設置されている。

6-6 生命創成探究センター

生命創成探究センター（Exploratory Research Center on Life and Living Systems = ExCELLS）は、自然科学研究機構の更なる機能強化を目指すために、岡崎統合バイオサイエンスセンターを中核として機構の組織を再編・統合して2018年4月に設置された機構直轄の組織である。本センターでは、「生きているとは何か？」という人類の根源的な問いの解明に向けて、生命の仕組みを観察する新たな技術を開発するとともに、蓄積されていく多様な情報の中に隠されている意味を読み解き、さらに合成・構成的アプローチを通じて生命の基本情報の重要性を検証する活動を行っている。こうした「みる・よむ・つくる」のアプローチを基軸に、極限環境生命の研究者とも協力しながら異分野融合型の研究を進め、生命の設計原理を探究する。この目的のもとに、国内外の大学・研究機関の連携によりコミュニティ横断型の共同利用・共同研究を推進する。

2022年度からは、新たに先端共創プラットフォーム及び連携強化プラットフォームを実施し、共同利用・共同研究の活性化を図っている。この2つのプラットフォームにより、国内外の大学・研究機関との共同利用・共同研究を一層強化するとともに、産業界との共創の推進も目指している。

先端共創プラットフォームでは、センターに所属する教員と外部の研究機関が一体となって研究チームを構成し、設定された研究課題に共創的に取り組む ExCELLS プロジェクト研究を実施している。2022年度に始動した「物質－生命の境界探査」チームに加え、2023年度からは新たに「オルガネラの時空間アトラス編纂」チームを立ち上げ、異分野融合型の研究を積極的に進めている。「物質－生命の境界探査」チームでは、生命機能を維持するために必要となる、本質的あるいは最小の機構や原理を解き明かすために、極限環境に生きる生物、ウイルス等における生物間相互作用や環境応答に関する分子複合体の形態・機能・動態を観測し、物質－生命の境界の体系的理解を目指す研究を実施している。また、「オルガネラの時空間アトラス編纂」チームでは、膜オルガネラに加え、近年の非膜オルガネラ同定に伴い拡張しつつあるオルガネラ研究を推進し、その構成を明らかにすると共に、様々な要因によって引き起こされる再編成、ダイナミクス変換や機能発現制御を解き明かす研究を実施している。各チームは ExCELLS の研究者が中心となって進めるサブチームと、外部の大学の研究者から提案された研究課題を進めるサブチームで構成されており、互いに共創しながら研究を進めることで、新たな研究者コミュニティの創出や、広い視野を持つ若手研究者の育成を目指している。2024年度は新たな研究プロジェクトチーム「生命体のシミュレーション」および「ネオ生命体の創成」の発足準備を進めるための計画研究2課題を立ち上げ、2025年度の本格始動に向けたチームの体制整備を進めた。

連携強化プラットフォームでは、国内外の大学・研究機関との組織間のネットワークの強化を図り、連携構築を戦略的に推進している。糖鎖生命科学ユニットでは、共同利用・共同研究拠点である「糖鎖生命科学連携ネットワーク型拠点（J-GlycoNet）」の活動を東海国立大学機構糖鎖生命コア研究所及び創価大学糖鎖生命システム融合研究所と連携して進めている。さらに、このネットワーク型拠点を基盤として、文部科学省 大規模学術フロンティア促進事業「ヒューマングライコームプロジェクト」を開始した。また、先端創薬科学ユニットでは、文部科学省・先端研究基盤共用促進事業（先端研究設備プラットフォームプログラム）NMR プラットフォームの活動を分子科学研究所より引き継ぐとともに、日本医療研究開発機構 生命科学・創薬研究支援基盤事業（BINDS）の活動を開始し、名古屋市立大学の創薬基盤科学技術開発研究拠点とも連携して、先端的な創薬基盤技術等の創出を目指す活動に取り組んでいる。

さらに、2023年度より、文部科学省 令和5年度共同利用・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」の採択課題のうち、「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（申請機関：生理学研究所）」および「マルチスケール量子－古典生命インターフェース研究コンソーシアム（申請

機関：東京大学物性研究所)」に参画し、関係機関と連携して異分野の研究を行う大学の研究所や研究機関と連携した学際共同研究、組織・分野を超えた研究ネットワークの構築・強化・拡大を推進している。これを受けて、連携強化プラットフォームに、「スピン生命科学ユニット」及び「量子生命科学ユニット」を設置し、活動を推進している。「スピン生命科学ユニット」に関しては、関連する組織体として2024年度より岡崎共通研究施設岡崎連携プラットフォームスピン生命科学コアが始動し、本センターからも関連する教員が本事業の構成員として参加し、国内の集約型MR研究技術開発拠点の構築に向けて活動を推進している。また、このユニットの研究活動を充実させるため、2024年度は新たに2つのSpin-L連携研究グループを設置した。また、「量子生命科学ユニット」に関しては、2024年度より文部科学省令和5年度 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」の採択課題「マルチスケール量子-古典生命インターフェース研究コンソーシアム（申請機関：東京大学物性研究所）」の運営協力に関する覚書を締結した。

これらの連携活動を推進する上で、研究戦略室の体制の強化を図り、2025年4月に予定されている研究力強化戦略室への組織改編およびURA配置に向けた準備を進めた。

2024年度も前年度に引き続き、本センター以外の研究機関に所属する複数の研究者が研究グループを構成したうえで、新規な研究手法・測定手法の開発等を通じて分野横断的な研究を推進する連携研究グループの活動、並びに機構外の研究者がセンター内の複数のグループとともに異分野融合研究に取り組むExCELLS課題研究（一般・シーズ発掘）を実施した。

一方、極限環境生命探査室では深海、地下、極地、大気圏外などにおける生命体の活動を探査・解析することを目指して生命の始原形態と環境適応戦略を理解する研究を実施する。海洋研究開発機構と連携した深海・地下生命研究グループ、慶應義塾大学先端生命科学研究所と連携した極限環境耐性研究グループと極限環境生命分子研究グループ、物質-生命境界領域研究グループが活動している。加えて、鳥取大学染色体工学研究センターと新たに連携協定を締結し、学術交流の強化を図った。

さらに、昨年度締結した株式会社生体分子計測研究所とクロスアポイントメント協定に基づき、生命分子動態計測グループのChristian Ganser 特任助教がクロスアポイントメント教員として企業連携型の研究機器の高度化を推進している。

異分野融合研究を推進するためのセミナーや研究会も活発に行っており、海外の研究者との学際的交流を企画したシンポジウムも開催している。分野横断型の研究集会（ExCELLSシンポジウム）や若手が主体的に企画運営する研究集会（ExCELLS若手交流リトリート）を開催し、センター内外の研究者との研究交流及び若手研究者の育成を図った。また、学術交流協定を締結しているアカデミアシニカ（台湾）および韓国科学技術院生命科学技術大学（KAIST・韓国）の研究者との国際交流および共同利用研究を実施した。この国際交流事業の一環として共同企画したFrontier Bioorganization Forum を2024年9月にアカデミアシニカ（台湾）で実施し、本センターからも教員8名が参加した。また、本フォーラムの2025年度の日本開催に向けて、本センターの若手教員が中心となって準備を進めている。さらに、デンマーク政府のInternational Network Programの支援を受けている学術交流の一環として、Aarhus UniversityのInterdisciplinary Nanoscience Center（iNANO）と新たに連携協定を締結し、学術交流の強化を図った。

分子科学研究所を兼務している教員のうち、青野重利教授が副センター長をつとめるとともに金属生命科学グループを主宰し、加藤晃一教授が研究戦略室長をつとめるとともに生命分子動秩序創発研究グループと極限環境生命分子研究グループ、奥村久士准教授が生命分子動態シミュレーション研究グループをそれぞれ主宰している。2024年度からは新たに岡本泰典准教授が生命分子設計化学研究グループを主宰している。

7. 大学院教育

分子科学研究所は、従来より大学共同利用機関を基盤機関とする総合研究大学院大学に属する二つの大学院専攻を持ち、大学院教育を行ってきた（設立時は博士課程後期3年のみ；2006年度より5年一貫制博士課程）。2023年度において総合研究大学院大学の大幅な改組に伴い従来の二専攻を「分子科学コース」としての一つの教育コースに統合した。分子科学コースでは他の大学院では整備されていない各種の高度な大型の研究施設・実験設備を活用して特色のある大学院教育を行っている。本コースでは、分子科学における最先端の基礎研究を行うとともに、学生の研究課題に応じて、複数指導体制を採用し、研究活動に密着した学生セミナー、国際シンポジウム、共同研究等を通して若手研究者育成のための大学院教育を行っている。またこれまで年2回だった学位審査を4回に増やし、より柔軟な学位研究指導が実施できる体制へと変革された。さらに、他大学の大学院生や学部学生に対しても、それぞれ受託大学院生（特別共同利用研究員制度による）、体験入学者として受け入れ、先端的な研究施設を用いて積極的な教育研究活動を行っている。

2020-2022年度の3年間はコロナ禍により、外部からの研究者の出入りが伴う共同利用、多くの人が集う研究会、海外との往来が不可欠な国際インターンシップ、院生の研究教育に資する学会参加・発表、外部との研究交流、全てが低調に陥ってしまった。コロナ禍が収束した2024年度においては、研究会や国際共同研究、国際インターンシップに関しては従来の活力をほぼ取り戻している。大学院に進学する外国人留学生数についても回復しつつあり、国内外からの大学院生のさらなる獲得に向けた活動を行っている。

いつの時代にも、どのような体制下・環境下でも自然科学研究の本質が変わるものではない。分子科学研究所は、全国共同利用機関として、アジアの研究ハブとして、また高度専門的な大学院教育の場としての役割を発展的に担っていく。

7-1 特別共同利用研究員

分子科学研究所は、分子科学に関する研究の中核として、共同利用に供するとともに、研究者の養成についても各大学の要請に応じて、大学院における教育に協力し、学生の研究指導を行っている。また、特別共同利用研究員の受入状況は以下の表で示すとおりであり、研究所のもつ独自の大学院制度（総合研究大学院大学）と調和のとれたものとなっている。

特別共同利用研究員（1991 年度までは受託大学院生、1992 年度から 1996 年度までは特別研究学生）受入状況

（2025 年 3 月 31 日現在）

中期計画区分	第 2 期	第 3 期	第 4 期			
年度	2010 ～ 2015	2016 ～ 2021	2022	2023	2024	2022 ～ 2024 計
東北大学	6				1	1
山形大学	1					
茨城大学	2					
筑波大学	1					
千葉大学	1	1				
東京大学	5	21				
東京工業大学	5	3				
横浜国立大学	2					
信州大学	1	1		1	1	2
静岡大学	4					
名古屋大学	59	60	10	7	5	22
名古屋工業大学	7	1	1			1
京都大学	2	5				
大阪大学	6	1		1	1	2
広島大学	0	1				
香川大学	0	1				
九州大学	3					
北陸先端科学技術 大学院大学	1					
奈良先端科学技術 大学院大学	0	1				
総合研究大学院大学	0	1				
名古屋市立大学	14	24	5	2	2	9
立教大学	2					
中央大学	1					
早稲田大学	0			2	1	3
中部大学		2				
海外機関	28	9			3	3
計	151	132	16	13	14	43

第 1 期（2009 年度）以前の受入があった大学を以下に示す。

豊橋技術科学大学（40 名）。首都大学東京（20 名）。岡山大学（16 名）。佐賀大学（13 名）。北海道大学（12 名）。金沢大学（11 名）。福井大学（10 名）。愛媛大学、慶應義塾大学、東京理科大学（9 名）。三重大学（7 名）。お茶の水女子大学、新潟大学、京都工芸繊維大学、神戸大学、熊本大学、宮崎大学（6 名）。宇都宮大学、奈良女子大学、大阪市立大学、名城大学（4 名）。東海大学、東邦大学（3 名）。室蘭工業大学、埼玉大学、岐阜大学、高知大学、長崎大学、大阪府立大学、北里大学（2 名）。群馬大学、愛知教育大学、奈良教育大学、島根大学、山口大学、琉球大学、姫路工業大学、学習院大学、上智大学、星薬科大学、明治大学、岡山理科大学（1 名）。

7-2 総合研究大学院大学二専攻・コース

総合研究大学院大学は、1988年10月1日に発足した。分子科学研究所は、同大学院大学に参加し、構造分子科学専攻及び機能分子科学専攻を受け持ち、1991年3月には6名の第一回博士課程後期修了者を誕生させた。なお、所属研究科は2004年4月より数物科学研究科から物理科学研究科に再編された。2023年4月より二専攻を「分子科学コース」としての一つの教育コースに統合した。

その専攻・コースの概要は次のとおりである。

構造分子科学専攻

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

機能分子科学専攻

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

分子科学コース

物質の基本構成単位である分子に対する体系的理解を確立し物質が示す多種多様な現象を解き明かす次世代の研究者を育成する。高度な研究（実験、測定、理論等）を遂行し、研究結果を合理的に理解し、自由な着想から未踏の課題に挑戦し、新たな知的価値や普遍的な真理を生み出し、分子科学に立脚した人類の発展に貢献する人材の輩出を目指す。

大学開設以来の分子科学二専攻・分子科学コースの入学者数、学位取得状況等及び各年度における入学者の出身大学の分布等を以下に示す。

担当教員数 単位：人		(2024年5月1日現在)
		分子科学コース
担当教員	教 授	16
	准教授	10
	助 教	21
	計	47

在籍学生数 単位：人

(2024年5月1日現在)

		構造分子科学専攻		機能分子科学専攻		分子科学コース	
学生数	入学年度	5年一貫	博士後期	5年一貫	博士後期	5年一貫	博士後期
	2024	－	－	－	－	6(1)	3(1)
	2023	－	－	－	－	3	2
	2022	2	4	3	1	－	－
	2021	0	0	0	0	－	－
	2020	0	0	1(1)	1(1)	－	－
	2019	1(1)	0	1	1(1)	－	－
	2018	0	0	0	1(1)	－	－
	計	3(1)	4	5(1)	4(3)	9(1)	5(1)

() は留学生数で内数。

フランス1名、ペルー1名、中国3名、インド2名、二専攻・コース合計で7名。

入学と学位取得の状況 単位：人

(2025年3月31日現在)

区分		中期計画区分	第2期	第3期	第4期			
		年度	2010～2015	2016～2021	2022	2023	2024	2022～2024計
入学者数	構造分子科学専攻	5年一貫	15	21	2	－	－	2
		博士後期	20	12	4	－	－	4
	機能分子科学専攻	5年一貫	10	23	3	－	－	3
		博士後期	18	14	1	－	－	1
	分子科学コース	5年一貫	－	－	－	3	6	9
		博士後期	－	－	－	2	6	8
	計		63	70	10	5	12	27
学位 取得者数	構造分子科学専攻	課程博士	20	22	6	4	5	15
		論文博士	0	0	0	0	0	0
	機能分子科学専攻	課程博士	19	16	3	3	5	11
		論文博士	3	1	0	0	0	0
	分子科学コース	課程博士	－	－	－	0	0	0
		論文博士	－	－	－	1	0	1
	計		42	39	9	8	10	27

外国人留学生数（国別入学者数） 単位：人 （2025 年 3 月 31 日現在）

中期計画区分	第 2 期	第 3 期	第 4 期			
年度	2010 ～ 2015	2016 ～ 2021	2022	2023	2024	2022 ～ 2024 計
フランス		0, 1			3	3
ドイツ		1, 0				
カナダ		1, 0				
エルサルバドル		0, 1				
ペルー					1	1
中 国	14, 5	0, 5				
韓 国		0, 1				
タイ	2, 3	1, 3				
インド	0, 2	0, 3				
パキスタン		1, 0				
ネパール	0, 2					
マレーシア	1, 0					
ベトナム	0, 1					
エジプト		0, 1				
アルジェリア					1	1
合計	17, 13	4, 15	0, 0	0	5	5

構造分子科学専攻 (A) と機能分子科学専攻 (B) の入学者数を A, B で表す。

第 1 期（2009 年度）以前の入学者があった国名を以下に示す。

バングラディッシュ（8 名）。フィリピン（3 名）。ロシア、チェコ、ナイジェリア（1 名）。

大学別入学者数 単位：人

（2025 年 3 月 31 日現在）

	構造分子科学専攻			機能分子科学専攻			分子科学コース
中期計画区分	第 2 期	第 3 期	第 4 期	第 2 期	第 3 期	第 4 期	第 4 期
年度	2010 ～ 2015	2016 ～ 2021	2022	2010 ～ 2015	2016 ～ 2021	2022	2023 ～ 2024
北海道大学		3(3)					
室蘭工業大学							1(1)
東北大学		1		1(1)		1	1(1)
山形大学				1			
筑波大学						1(1)	
千葉大学	1(1)	1	1				
東京大学							1(1)
東京農工大学		1(1)					
東京工業大学	3(3)				1(1)		
新潟大学					1(1)		
長岡技術科学大学		1(1)					
金沢大学				1			
山梨大学			1(1)				
信州大学		1					
岐阜大学			1(1)	1	1(1)		
名古屋大学	3(3)	6(5)	1	2	4(3)		1
愛知教育大学		1(1)					

	構造分子科学専攻			機能分子科学専攻			分子科学コース
中期計画区分	第2期	第3期	第4期	第2期	第3期	第4期	第4期
年度	2010～2015	2016～2021	2022	2010～2015	2016～2021	2022	2023～2024
名古屋工業大学					2(2)		1(1)
豊橋技術科学大学				1(1)			
京都大学	3	2(1)		1	2(1)	1(1)	2(1)
大阪大学	1(1)						
神戸大学				1(1)			
鳥取大学				1			
岡山大学	1				1		
広島大学		1				1(1)	
徳島大学					1(1)		
九州大学	1(1)				1		
熊本大学		1(1)					
奈良先端科学技術大学院大学							1
群馬工業高等専門学校	1(1)						
奈良工業高等専門学校				1(1)	1(1)		
宇部工業高等専門学校					1(1)		
北九州工業高等専門学校		1(1)					
名古屋市立大学				1	3(3)		
大阪府立大学		1					
兵庫県立大学		1(1)					
いわき明星大学				1			
城西大学		1(1)					
北里大学		1(1)					
東海大学				1(1)			
東京電機大学					1(1)		
東京理科大学	1(1)	1		1(1)			1
東邦大学		1(1)					
日本大学		1			1		
法政大学	1(1)						
立教大学	1						
早稲田大学							1(1)
明治大学							1(1)
神奈川大学		1(1)					
愛知工業大学					1(1)		
名城大学		1(1)	1		2(1)		
立命館大学				1(1)	1(1)		1(1)
関西大学					1(1)		
近畿大学			1				1(1)
福岡大学	1(1)						
海外機関・その他	17(2)	4(1)		12(3)	11(3)		4
合計	35(15)	33(21)	6(2)	28(10)	37(23)	4(3)	17(9)

() は5年一貫で内数。

第1期(2009年度)以前の入学者があった大学を以下に示す。

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

		2010 ～ 2023 年度修了生の 修了直後の進路状況			1991 ～ 2023 年度修了生の 現在の状況		
専攻		構造分子科学	機能分子科学	計	構造分子科学	機能分子科学	計
大学・ 公的機関等	教 授	0	0	0	26	21	47
	准教授	1	0	1	13	11	24
	講 師	0	0	0	5	4	9
	助 教	1	1	2	15	6	21
	研究職	31	20	51	－	－	－
	小計	33	21	54	－	－	－
民間企業（研究職含む）		6	9	15	－	－	－
その他		10	7	17	－	－	－
合計		49	37	86	－	－	－

修了直後は 1 年以内の就職・進学先等。
各項目には海外の機関・団体等を含む。

7-3 オープンキャンパス

2024年6月1日（土）に、オンサイト形式にて分子研オープンキャンパスを開催した。周知方法としては、各研究教育機関へのポスター送付、専用HP（<https://www.ims.ac.jp/sokendai/>）、分子研X（旧 twitter）、YouTube（<https://www.youtube.com/@bunshiken/shorts>）などを通じて、広報活動を2ヶ月程度行った。COVID-19 パンデミック後初の対面開催であった。日本全国から35名の大学生・大学院生の参加があった。

午前の部は、岡崎コンファレンスセンターの大隅ホールにて9時50分から開催された。所長と大学院委員長による分子研・総研大の概要説明の後、大学院入試の説明、及び参加者からの質問回答の時間が設けられた。ラボ紹介PRセッションでは、約15の研究室の教員から、分子研で行われている最先端の研究取り組み内容の紹介があった。難しい内容も含まれていたが、多くの参加学生が熱心に聴講している様子が大変印象的であった。今回は、総研大現役大学院生4名によるキャンパスライフトークと質問回答セッションを設けた。さらに、お昼休憩を活用し、中会議室で約1時間のランチ交流会を実施した。和気藹藹とした雰囲気の中で、様々な出身大学の学生と分子研の教員・大学院生の間で交流が活発にすすみ、あっという間に時間が過ぎた。

午後の部では、明大寺キャンパス及び山手キャンパスのラボツアーが行われた。オフィスでの研究室紹介や実験室での研究室紹介に加え、体験実験も企画する研究室があるなど、ラボツアーの実施内容は研究室によって様々であった。参加学生の所属学部・学科の分布などの影響もあり、訪問学生数が研究室によって20名超～数名とばらつきもあった。参加した学生からは、「研究環境が素晴らしかった」、「今後の進路を選ぶ上で大変貴重な体験となった」、「大学院生の先輩方や教員の方々が親身に話してくれありがたかった」、「運営スタッフの方の対応がとても丁寧でありがたかった」などの声があった。

次回開催に向けて改善できる余地はまだあるが、以上のように、参加された先生方や大学院生、運営スタッフの方々のご協力により充実したオープンキャンパスを開催することができた。

7-4 短期インターンシップ

本事業は、他大学の学部学生・大学院生に対して、実際の研究室での体験学習を通じて、分子科学研究所（総合研究大学院大学分子科学コース）における研究環境や設備、大学院教育、研究者養成、共同利用研究などを周知するとともに、分子研や総研大への理解促進を目的としている。本事業は、総研大本部から「新入生確保のための広報事業」として例年、特定教育研究経費の予算補助を受けており、総研大物理科学研究科の主催行事として2004年から毎年開催している。本年度も昨年度と同様、各研究室個別に見学者や体験入学者を受け入れる対応をとった。選考の結果、2024年度は61件の短期インターンシップ（学部学生47件、大学院生14件）を実施した。実施実績は以下のとおりである。

	所属	身分	訪問先	受入期間
1	鳥取大学	学部生	松井 G	2024/6/6-7
2	横浜国立大学	学部生	大森 G	2024/6/12
3	東京大学	大学院生	熊谷 G	2024/6/18
4	大阪公立大学	大学院生	熊谷 G	2024/6/19-21
5	静岡大学	学部生	奥村 G	2024/6/20
6	東京工業大学	学部生	杉本 G	2024/6/21
7	東京工業大学	学部生	杉本 G	2024/6/21
8	大阪公立大学	大学院生	熊谷 G	2024/7/10-12
9	東北大学	大学院生	奥村 G	2024/7/17-19
10	大阪大学	大学院生	熊谷 G	2024/7/23-26
11	大阪大学	学部生	熊谷 G	2024/7/23-26
12	大阪大学	学部生	熊谷 G	2024/7/23-26
13	東北大学	学部生	倉持 G	2024/8/4-6
14	島根大学	学部生	楳山 G	2024/8/5-7
15	東北大学	学部生	楳山 G	2024/8/5-8
16	静岡理工科大学	大学院生	奥村 G	2024/8/7-8
17	東北大学	学部生	杉本 G	2024/8/9-10
18	東北大学	学部生	熊谷 G	2024/8/12-14
19	静岡大学	学部生	斉藤 G	2024/8/13
20	九州大学	学部生	杉本 G	2024/9/4-7
21	山形大学	学部生	瀬川 G	2024/9/5-7
22	名古屋大学	大学院生	熊谷 G	2024/9/9
23	奈良女子大学	学部生	奥村 G	2024/9/27
24	東京理科大学	学部生	大森 G	2024/10/23-25

25	京都大学	大学院生	大森 G	2024/10/23-25
26	名城大学	学部生	瀬川 G	2024/11/1
27	名城大学	学部生	瀬川 G	2024/11/1
28	大阪大学	大学院生	熊谷 G	2024/11/11-15
29	大阪大学	学部生	熊谷 G	2024/11/11-15
30	大阪大学	学部生	熊谷 G	2024/11/11-15
31	東京電機大学	学部生	瀬川 G	2024/11/19
32	鳥取大学	学部生	魚住 G	2024/11/28-29
33	九州大学	学部生	飯野 G	2025/1/14-17
34	名城大学	学部生	瀬川 G	2025/2/17
35	名城大学	学部生	瀬川 G	2025/2/17
36	東京大学	学部生	杉本 G	2025/2/17-3/8
37	名城大学	学部生	岡本 G	2025/2/18
38	名城大学	学部生	岡本 G	2025/2/18
39	北海道大学	学部生	奥村 G	2025/3/24-27
40	東京科学大学	大学院生	斉藤 G	2025/2/25-27
41	東京科学大学	大学院生	倉持 G	2025/2/25-27
42	愛知工業大学	学部生	瀬川 G	2025/2/27
43	東京科学大学	大学院生	倉持 G	2025/2/27
44	東京農工大学	学部生	奥村 G	2025/3/5-7
45	東京大学	学部生	熊谷 G	2025/3/5-8
46	大阪大学	学部生	倉持 G	2025/3/6
47	大阪大学	学部生	倉持 G	2025/3/6
48	東京理科大学	学部生	岡本 G	2025/3/9-15
49	東京大学	学部生	江原 G	2025/3/10-12
50	北海道大学	学部生	岡崎 G	2025/3/10-12
51	大阪大学	学部生	倉持 G	2025/3/11
52	大阪大学	学部生	倉持 G	2025/3/11
53	近畿大学	学部生	大森 G	2025/3/12-14
54	近畿大学	学部生	大森 G	2025/3/12-14
55	近畿大学	学部生	大森 G	2025/3/12-14
56	近畿大学	学部生	大森 G	2025/3/12-14
57	近畿大学	学部生	大森 G	2025/3/12-14

58	大阪大学	学部生	倉持 G	2025/3/19
59	大阪大学	学部生	倉持 G	2025/3/19
60	東京理科大学	大学院生	杉本 G	2025/3/23-26
61	早稲田大学	大学院生	岡本 G	2025/3/25

7-5 総研大アジア冬の学校

総合研究大学院大学（総研大）が主催する「アジア冬の学校」が2025年1月20日に開催された。このイベントは、分子科学研究所（分子研）が行う研究及び教育活動をアジア諸国の大学や研究機関に紹介する目的で2004年から毎年開催されている。特にアジア国際インターンシッププログラム（IIPA）に参加している学生や研究者を中心に学術交流を促している。今年度は、シンガポールの南洋理工大学から Zhengyang Zhang 講師、タイの連携校であるカセサート大学から Prapasiri Pongprayoon 准教授、マレーシアの連携校であるマラヤ大学から Muhammad Faisal Bin Khyasudeen 講師を招き、光触媒系、発光材料系の実験研究と、生体分子系の理論研究に関する講義が行われた。総研大生を含む若手研究者のポスターセッションが開催され、活発な議論が行われた。今後もアジアを軸とした国際的な学術交流の推進において、『アジア冬の学校』の役割が期待される。

ZHANG, Zhengyang

Nanoscale Imaging on Photocatalysts

PONGPRAYOON, Prapasiri

Exploring the Binding of Biomarkers to Graphene Quantum Dot for NCD Aptasensor Design and Development

BIN KHYASUDEEN, Muhammad Faisal

Elucidating Dexter Energy Transfer and Hot-Exciton Behavior in TADF Compounds via Ultrafast Spectroscopy

8. 社会活動等

社会に広く科学的思考を広め、産業に研究成果を還元し、次世代の科学コミュニティ形成を促進することは、公的研究機関の責務である。一般市民の方々に科学の面白さ・意義を伝えるとともに、科学コミュニティの健全な発展を促すような相互交流を醸成するための取り組みは、近年ますます重要性を増している。分子科学研究所では、このようなアウトリーチ活動の一環として、他機関との連携・共同により国内の広い範囲をカバーする事業、および、岡崎の地域性を重視した事業という2つのタイプを実施している。前者としては、自然科学研究機構シンポジウムならびに大学共同利用機関シンポジウムがあり、後者は一般公開、分子科学フォーラム等である。また、全国の中学・高等学校の団体から、個人の申し込みまで、見学者を受け入れている。

次世代育成においては、特に愛知県や岡崎市という地域性を重視して、小学校から高等学校までの様々なレベルで理科教育への協力を行ってきている。岡崎市内の高等学校には、文部科学省に応募して採択されたスーパーサイエンスハイスクール（以下SSHと略す）研究指定校、愛知県教育委員会より指定を受けた愛知スーパーハイスクール研究校や、あいちSTEMハイスクール研究指定校、さらに、科学技術振興機構（JST）のサイエンスパートナーシッププロジェクト（SPP）に応募して採択されたSPP実施校など、理科教育の充実を目指して独自の取り組みを行っているところも多い。分子研は、岡崎の3研究所で連携しつつ、もしくは単独で、これらの高校の活動に協力している。一方、小中学校を対象とした事業としては、出前授業、職場体験などが挙げられる。また、教員対象の支援も行っている。

8-1 社会との交流

8-1-1 一般公開

2024 年 10 月 19 日（土）に分子研一般公開 2024 を開催した。前回 2021 年の一般公開はコロナ禍の影響でオンライン開催であったため、2018 年から 6 年ぶりの現地開催となった。今回のテーマは、来たる 2025 年の分子研設立 50 周年も見据えて「分子一筋 50 年、極小世界が紡ぐ夢！」とした。また、2018 年の一般公開では予想以上に多数の方々が来場されたため、今回は事前申し込み制とし、1700 名あまりの皆様にご来場頂いた。

今回の一般公開は、分子研の各施設やいくつかの研究グループの実験室の公開、体験イベント、市民公開講座、分子研クイズ王選手権等と盛り沢山の内容であった。また、岡崎高校スーパーサイエンスハイスクール（SSH）部の生徒の皆さんによる研究紹介とワークショップも行われた。主な実施内容を以下に記す。

施設公開

- ・ 極端紫外光研究施設（UVSOR）：シンクロtron光を使って極小世界をのぞいてみよう！
- ・ 計算科学研究センター：最先端のスパコンを見てみよう
- ・ 装置開発室：「モノづくりと集中力」のフィールドへようこそ
- ・ 機器センター：氷点下の世界をのぞいてみよう！

実験室公開

- ・ 最先端のレーザー技術で解き明かす表面界面科学——宇宙の神秘の解明からエネルギー革命まで——
- ・ 原子のシートを剥がして見る
- ・ 分子の性質を調べる方法

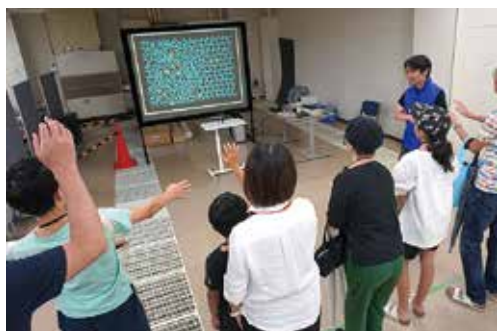
体験イベント（一部抜粋）

- ・ 最先端の電池に挑戦！
- ・ タンパク質のはたらきを学ぼう！
- ・ 磁石の力で分子を見る
- ・ “光の色”で分子を見る
- ・ “糖鎖”って何？
- ・ スライム作りで分子のつながりを体験しよう！

市民公開講座

渡辺芳人 所長「分子研の歩み」／魚住泰広 教授「持続可能な循環型分子合成への挑戦」

上記のイベントに加え、会場のところどころにポイントを設定したタッチラリーも用意した。ポイントを全て回った方には抽選で、オカザえもんと分子研がコラボしたオリジナルアクリルスタンド（アクスタ）、分子研ロゴ入りのペンやメモ帳などを贈呈した。



回 数	実施月日	入場者数
第 11 回	2006.10.21	2058 人
第 12 回	2009.10.17	1346 人
第 13 回	2012.10.20	1126 人
第 14 回	2015.10.17	2600 人
第 15 回	2018.10.20	3878 人
第 16 回	2021.10.23 (オンライン開催)	YouTube 再生回数；2618 回 ニコニコ動画来場者数；26,964 人 (10/23 一般公開終了時点)
第 17 回	2024.10.19 (事前申込制)	1746 人

8-1-2 分子科学フォーラム

当フォーラムは「分子科学の内容を他の分野の方々や一般市民にも知らせ、また、幅広い科学の話を分子研の研究者が聞き自身の研究の展開に資するように」との趣旨のもとに、1996 年より実施されている。豊田理化学研究所と共催となっており、年度毎に年間計画を豊田理化学研究所の理事会に提出している。2008 年度よりは、一般市民の方々に科学の面白さ・楽しさを伝える「市民一般公開講座」として新たに位置づけられ、2009 年度には、一元的で効率的な活動の展開を目指して、広報室を中心とした実施体制の整備を進めた。この際、講演回数をこれまでの年 6 回から 4 回に変更し、密度の高い講座を開講することで、より魅力的な『分子科学フォーラム』の実現を図った。COVID-19 感染拡大後はオンライン開催に切り替えたが、開催時間、広報活動をターゲットに合わせ変更した結果、全国の社会人、大学生、高校生に参加いただけるようになり、参加人数もリアル開催よりオンライン開催の方が多い結果となった。

本年度の実施状況は以下の通り。

回	開催日	テーマ	講演者	参加人数
139	2024. 7. 3	どこが特別!? ペロブスカイト太陽電池の性能と社会実装の可能性とは？	宮坂 力 (桐蔭横浜大学特任教授)	360 名 (アーカイブ配信 累計 1.6 万回再生 (2025.2.26 時点))
140*	2024.10.19	分子研の歩み	渡辺 芳人 (分子科学研究所所長)	94 名 (会場のみ)
		持続可能な循環型分子合成への挑戦	魚住 泰広 (分子科学研究所教授)	
141	2024.11. 8	病気や老化、寿命を左右する細胞のしくみ・オートファジー ～役に立つか分からなかった研究は、いかにしてノーベル賞をとったか～	吉森 保 (大阪大学大学院特任教授)	110 名 (会場) (アーカイブ配信 累計 1207 回再生 (2025.2.26 時点))
142	2025. 1.21	ピンクダイヤモンドが量子センサに?!	波多野 睦子 (東京科学大学理事・副学長)	230 名 (累計 698 名)

*一般公開と同時開催

8-1-3 市民向けシンポジウム

(1) 自然科学研究機構シンポジウム

当シンポジウムは2006年より年2回のペースで実施され、計39回開催されている。本シンポジウムに対する2024年度の分子科学研究所の関与は、第38回において山本浩史教授が「マテリアルサイエンスにおける量子力学」、大森賢治教授が「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」というタイトルで講演を行った。

今年度の実施状況は以下の通り。

回	開催日	テーマ	開催方法
38	2024.10.20	量子はめぐる ——量子科学技術で創造する未来——	一橋講堂 (ハイブリッド開催)
39	2025. 2.22	頑張るカラダ	名古屋市科学館

(2) 大学共同利用機関シンポジウム

本シンポジウムは、自然科学研究機構を含む4つの大学共同利用機関法人を構成する19の研究機関と宇宙科学研究所が、総合研究大学院大学と合同で開催したものである。各研究機関が「知の拠点群」として果たしている役割と、研究の推進を通じて切り拓かれた科学の広大なフロンティアの現状について、広く一般市民の方に紹介することを目指している。分子科学研究所はブース展示に参加し、先端的研究成果や分子科学に関連する基本事項の解説を行っている。例えば、常設展示室に設置されている920MHz NMRの半立体模型（第2回）、大型スクリーンに投影したスーパーコンピューターによるシミュレーションCG（第3回～第9回）、および各種の大型分子模型（第4回～第10回）、研究者トーク（第6回～第9回）等を通じて研究活動に関する詳しい説明を行った。第11回、第12回はオンライン開催となり、分子科学研究所は研究所紹介CM動画を配信し、またシンポジウム特設サイト内に分子研紹介ページを掲載した。第13回は分子研が主体となり企画・運営を行った。「科学の時代。見えてきた未来」と題し、大学共同利用機関の教員10名が講演、パネルディスカッションを行った。ハイブリッド開催だったが、名古屋市科学館に共同主催になっていただき、名古屋市科学館サイエンスホールを講演会場とした。午前・午後とも会場はほぼ満席、視聴者数も過去最高の約30,000（累計）となり、大変盛況なシンポジウムとなった。第14回は秋山修志教授が「概日時計のこれまでとこれから」というタイトルで講演を行った。

実施状況は以下の通り。（中期計画第4期）

回	開催日	テーマ	会場／開催方法
13	2022.10.24	科学の時代。見えてきた未来	名古屋市科学館 (ハイブリッド開催)
14	2023.10.22	現代の社会問題に挑む日本の科学	日本科学未来館 (ハイブリッド開催)
15	2024.11. 9	現代の社会問題に挑む日本の科学	JAXA 相模原キャンパス (ハイブリッド開催)

8-1-4 見学者受け入れ

自然科学研究機構岡崎3機関の見学者の受け入れは、岡崎統合事務センター総務課企画評価係が窓口になって行われており、その中で分子科学研究所の見学分については、研究力強化戦略室が中心となってその対応にあたっている。2010年5月に展示室を開設し、個人の見学受け入れを開始した。年間およそ300名が来訪している。2022年度は感染状況が落ち着いていることを条件として受け入れた。

見学申込み					(中期計画第4期)
年度	団体申込（施設見学＋展示室見学）			個人申込（展示室）	見学者総数
	団体数	見学者数	実施機関名	見学者数	
2022	5	134	静岡大学農学部 岡崎市現職研修委員会理科部 ほか	0	134
2023	10	235	愛知県立高蔵寺高校 名古屋市役所経済局 ほか	2	237
2024	8	260	愛知県弁護士会、岡崎市現職研修委員会理科部、愛知県高校理科教員研修、静岡県立浜松南高等学校、山梨県立日川高等学校、愛知県立春日井高校、三重県立伊勢高校・津高校、愛知県立高蔵寺高校	0	260

8-1-5 その他

(1) 岡崎商工会議所（岡崎ものづくり推進協議会）との連携

岡崎商工会議所は、産学官連携活動を通じて地元製造業の活性化と競争力向上を目的に「岡崎ものづくり推進協議会」を設立し、多くの事業を行っている。この協議会と自然科学研究機構岡崎3研究所との連携事業の一環で、協議会の会員である市内の中小企業との交流会を2007年度に開催し、この交流会によって出来あがった協力体制は現在も継続している。また岡崎商工会議所主催で隔年開催される「岡崎ものづくりフェア」へ大学・研究機関として展示ブースを設けて参加している。

(2) 岡崎市観光協会との連携

2018年より岡崎市観光協会と連携を開始し、各種市民向けのイベント等で相互に協力することで、市民への広報活動がより活発に行えるようになっている。

実施日	内容
2018.10.20	一般公開 キッチンカーのご提供
2019. 6.13	岡さんぽ（岡崎市観光協会主催のイベント）への協力
2019.10.11	岡さんぽ（岡崎市観光協会主催のイベント）への協力
2024.10.19	一般公開 キッチンカーのご提供

8-2 理科教育への協力

8-2-1 スーパーサイエンスハイスクール

愛知県立岡崎高等学校が2002～2005年度にSSH指定校となったことを契機として、分子科学研究所は同校のSSH事業に協力してきた。2007年度には、再度、指定を受け、5年間にわたる第二次SSH事業がスタートしている。これまでは、スーパーサイエンス部の支援が主な活動であったが、2011年度に同校が「コアSSH」としての指定を受けたのに際して、他校も含む理科教員の研修をお願いしたいとの依頼が分子研に寄せられた。これに対応して、2012年2月4日にはNMRの原理と応用に関する研修会を実施し、県内から8名の高校教員が参加して午前・午後を費やして講義ならびに実習を受講した。2013年3月9日には、「分子を探る、放射光の科学」としてUVSORにおいて研修会を実施した（5校7名が参加）。2014年2月10日にはSSH進路オリエンテーション（2年生理系対象の講演会）の講師対応も行った。また、魚住グループ、山本グループによる「国際化学オリンピック」に参加された同校生徒さんに対する実験指導・支援（見事、銀メダルを受賞された）も行った。尚、山本グループは海陽中等教育学校の生徒さんの実験指導・支援も行った（見事、金メダルを受賞された）。岡崎高校への支援としてはその他に、イングリッシュコミュニケーション研修に対して当研究所の外国人博士研究員が講師として参加した。2024年度は片柳英樹助手より「機械仕掛けの世界の中のあなたの未来の自由について」と題した出前授業を実施した。岡崎高校は2018年度に4回目となるSSH指定を受け、新たに「SSHの日」を設定して生徒の成果発表を行うなど、新規の活動を展開していたが、2024年度より「SSHの日」から「探究活動発表会」に名称を変更した。ポスター発表や課題研究の計画書の指導など、引き続き分子科学研究所はこれに協力している。

8-2-2 理数科（旧コスモサイエンスコース）

分子科学研究所では、2008年度に愛知県立岡崎北高等学校が国際的に活躍できる科学技術者の育成を目的に新たに設置した、コスモサイエンスコースへの協力を、岡崎市にある基礎生物学研究所、生理学研究所とともに開始した。一時期中断したが、2015年より総合的学習の時間（研究者の講話）に講師を派遣している。同校は2020年度より2022年度まであいちSTEMハイスクール研究指定校となり、3研究所で出前授業を実施した。コスモサイエンスコースは2024年度より理数科に名称が変更されたが、引き続き自然科学研究機構連携講座として出前授業を実施している。

（中期計画第4期）

開催日	講 師	テーマ
2022. 7. 8	奥村 久士 准教授	分子研授業～授業の先に何があるのか～病気に関わるタンパク質をコンピュータシミュレーションで観察する
2022.12.12	長坂 将成 助 教	分子研授業～授業の先に何があるのか～軟X線で観る液体の化学
2023. 2.28	Adrian Urban 総研大学生	Science English
2023. 6.30	倉持 光 准教授	生物、物理、化学～授業の先に何があるのか～超短パルスレーザー光で観る分子の世界
2024. 1.19	奥村慎太郎 助 教	生物、物理、化学～授業の先に何があるのか～研究職への進路と有機光反応
2024. 2. 9	ZHAO, Pei 特任助教	Science English
2024. 7. 5	瀬川 泰知 准教授	分子研授業～授業の先に何があるのか～
2024. 7.11	ZHAO, Pei 特任助教	Science English

8-2-3 あいち科学技術教育推進協議会

SSH 研究指定校、愛知スーパーハイスクール研究校、さらに、SPP 実施校である愛知県下の 16 高校が、2009 年度に「あいち科学技術教育推進協議会」を立ち上げた。これは、文部科学省指定 SSH 中核拠点育成プログラムの一貫として、SSH で得た知識や組織力を活用し、全県的な取り組みとして理数教育の推進を目指したものである。当協議会は、毎年「科学三昧 in あいち」というイベントを開催している。当イベントには、県内の多数の高校から総数 300 名以上の参加者が集い、科学や技術についての先進的教育活動の紹介が行われる。第 16 回（2024 年 12 月 25 日）は岡崎コンファレンスセンターでのオンサイト開催となった。分子科学研究所からは佐藤宗太客員教授より VR-MD デモに関する有人のブース出展および生徒のポスター発表指導を行った。

今期（中期計画第 4 期）開催された「科学三昧 in あいち」は以下の通りである。

回	開催日	会 場	参加者数
14	2022.12.27	岡崎コンファレンスセンター	533
15	2023.12.27	岡崎コンファレンスセンター	767
16	2024.12.25	岡崎コンファレンスセンター	813

8-2-4 国研セミナー

このセミナーは、岡崎 3 機関と岡崎南ロータリークラブとの交流事業の一つとして行われているもので、岡崎市内の小・中学校の理科教員を対象として、岡崎 3 機関の研究教育職員が講師となって 1985（昭和 60）年 12 月から始まり、毎年行われている。

分子科学研究所が担当したものは以下の通りである。（中期計画第 4 期）

回	開催日	テーマ	講 師
134	2024. 7.24	分子動力学シミュレーションでアルツハイマー病の原因物質に迫る	奥村 久士 准教授

8-2-5 小中学校での出前授業

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

分子科学研究所が今年度担当したものは以下の通りである。

開催日	テーマ	講 師	対象校	聴講生徒数
2024. 5.30	MIRAI オンラインセミナー「夢への挑戦」	Sylvain de Léséleuc 特任准教授	岡崎市内小中学校 (オンライン)	約 4,700

8-2-6 職場体験学習

岡崎市内及び近隣の中学校及び高等学校の要請により、職職場体験学習として中・高生の受け入れに協力している。2018 年度より、研究グループによる受け入れを開始した。2024 年度は 7 件 13 名を受け入れた。

(2024 年度)

受入中学校	体験受入施設・グループ等名
豊田市立若園中学校	計算科学研究センター
豊田市立益富中学校	UVSOR, 広報, 瀬川 G
岡崎市立矢作中学校	計算科学研究センター, 広報
岡崎市立美川中学校	装置開発室
豊田市立豊南中学校	計算科学研究センター, 広報, 機器センター
名古屋市立平針中学校	UVSOR
岡崎市立岩津中学校	UVSOR

8-2-7 その他

(1) 岡崎市小中学校理科作品展

岡崎の3研究所は、岡崎市小中学校理科作品展に輪番（原則として3年に1回）でブース出展を行っている。2024年からは理科部の要望で、3研究所がブースを出展することとなり、岡崎中央総合公園で開催された作品展に出展した。

(2) 未来の科学者賞

岡崎3機関では、2009年度より理科教育並びに科学の将来の発展に資することを目的とし、豊かな発想や地道な努力の積重ねなど特色のある自由研究を行った児童又は生徒を褒賞するため、岡崎市小中学校理科作品展に出展された自由研究課題の中から、岡崎3機関の各研究所の研究者により構成される選考委員会により優秀者を選出し、未来の科学者賞を授与している。2024年度は、作品展前日に開催された選考会により、小学生6名、中学生4名の計10名の受賞を決定し、理科作品展会場でトロフィー及び記念賞品の贈呈による表彰を行った。

(3) 地域連携「生徒作品表彰」

愛知教育大学附属岡崎中学校による写生会が毎年度、岡崎3機関において、「建物の配置や組み合わせの美しい自然科学研究機構を写生する」ことを目的として行われ、同校の生徒に対して岡崎3機関と触れる機会を提供している。この写生会は、2004年度の自然科学研究機構の創設以前より、毎年度受け入れている。この写生会をきっかけに、岡崎3機関を地域において身近な存在として感じてもらう機会として、2011年度から、同校の教育活動の一部である写生会における優秀者を岡崎3機関として表彰し、同校における生徒の教育の賛助となるよう、同校の協力の下、賞状等を贈呈している。2024年度は実施していない。

(4) イベント出展

下記イベントに出展し、理科教育への協力を行った。

開催日	イベント名	出展タイトル
2023. 8. 3	令和5年度こども霞が関見学デー	虹を使って、モノの性質を調べてみよう
2023.11.25	岡崎商工会議所主催 Okazaki Craft Fes	スライムを作ろう！
2024. 3. 9	とよた科学体験館ワークショップ	めざせ科学者！ 実験と学会発表を体験しよう

8-3 情報発信

2024 年 4 月～2025 年 3 月は、日本語プレスリリース 30 件、英語プレスリリース 18 件、新聞報道 30 件、その他報道 13 件、客員研究部門及び退職・転出後等の成果論文 36 件であった。

研究成果プレスリリース（共同発表を含む）(2024 年度)

ホームページ 公開日	タイトル	発表雑誌	担当研究部門	共同研究 機関	整理 番号
2024. 4.12	ホタルの発光メカニズムを探れ！ 炭素原子 X 線吸収計測でルシフェリン分子の構造変化を解明	The Journal of Physical Chemistry A	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門	群馬大学 高エネルギー加速器研究機構 静岡大学 名古屋大学	2401
2024. 4.17	光電子運動量顕微鏡を二刀流にアップグレード―物性を決定づける原子軌道の完全解析への革新―	Journal of Synchrotron Radiation	極端紫外光研究施設	大阪大学	2402*
2024. 4.17	電気が流れる交互積層型電荷移動錯体の実現―常識を覆す、大量合成可能な新種の有機伝導体材料―	Nature Communications	機器センター	東京大学 岡山理科大学 高輝度光科学研究センター	2403
2024. 5.17	溶媒を混ぜると高分子が溶けなくなる現象を解明―高分子溶液の軟 X 線吸収分光計測―	Physical Chemistry Chemical Physics	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門	高エネルギー加速器研究機構 浙江大学	2404*
2024. 5.30	ガラス表面の「ナノ水滴」の挙動を可視化することに成功！	Scientific Reports	機器センター	金沢大学	2405
2024. 6. 4	溶液中で孤立した水分子の観測に成功―水分子の新たな分析手法の確立―	The Journal of Physical Chemistry Letters	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門		2406*
2024. 6. 5	左回り／右回りの光を選択的に発光する金ナノ粒子	Advanced Optical Materials	メゾスコピック計測研究センター 繊維計測研究部門	ソウル国立大学校	2407*
2024. 6. 5	グラフェンと炭化ケイ素の間に超伝導を支える金属層―大規模量子コンピュータに向けた素子の微細化に貢献―	ACS Nano	極端紫外光研究施設	東京工業大学	2408
2024. 6.17	エステルを還元する新規光触媒を開発―エステルからアルコールへの光触媒多電子還元を達成―	Journal of the American Chemical Society	生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門		2409*
2024. 7.10	冷やした顕微鏡で氷と液体が接する界面を分子レベルで初計測！―高さ 0.1 nm の階段構造を発見―	The Journal of Chemical Physics	機器センター	神戸大学	2410
2024. 7.19	水蒸気雰囲気下の非熱的水分解水素発生反応において触媒活性が最大になる反応条件を解明！ 界面における水分子数及び水素結合ネットワーク制御の重要性を提示・実証	Journal of the American Chemical Society	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門		2411*
2024. 8.29	非熱的な水・メタン分解水素生成における反応活性電子種の正体を分光学的に特定！～金属－半導体複合界面場の協奏的機能解明への大きな一歩～	Journal of the American Chemical Society	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門		2412*
2024. 9. 2	冷却原子型・量子シミュレータで原子の「電子状態」と「運動状態」の間の量子もつれを観測することに成功	Physical Review Letters	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門	東京理科大学	2413*
2024. 9.10	分子性量子ビットの量子重ね合わせ状態が化学物質に応答～ケミカル量子センシングの実現への重要な一歩～	Nature Communications	機器センター	九州大学 名古屋大学	2414

2024. 9. 17	水溶液中の金属錯体の電子状態と配位構造を解明する新手法を開発—軟X線吸収分光計測による配位子側からの詳細な解析を実現—	Physical Chemistry Chemical Physics	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門	理化学研究所 名古屋大学	2415*
2024.10.24	植物の気孔を減らす化合物の合成に成功— 気孔発生病因因子の機能を妨害する化合物の発見—	Nature Communications	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門	名古屋大学	2416
2024.10.25	停止状態を狙え！ アミロイドβ線維の成長メカニズムを解明し、アルツハイマー病の進行を阻止する新たな手がかり	Journal of the American Chemical Society	生命創成探究センター 生命分子動秩序創発研究部門／ 生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	名古屋市立大学 名古屋大学 筑波大学	2417
2024.11.21	水素イオンの流れを使って ATP 合成酵素が回転する仕組みを解明！ 創薬ターゲットタンパク質である ATP 合成酵素の解明によって将来的な医薬応用への波及にも期待	Nature Communications	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	京都産業大学 京都工芸繊維大学	2418
2024.11.21	小惑星リュウグウの砂つぶに発見された塩の結晶—太陽系の海洋天体とのつながりを知る新たな手がかり—	Nature Astronomy	極端紫外光研究施設	京都大学 東北大学 高輝度光科学研究センター	2419
2024.11.25	タンパク質修飾技術で細胞内輸送を制御して糖鎖修飾をコントロール：バイオ医薬品の開発を加速！	iScience	生命創成探究センター 生命分子動秩序創発研究部門／ 生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	名古屋市立大学 理化学研究所	2420
2024.11.25	PET を高効率で分解するケミカルリサイクル技術を開発、廃繊維中の PET も循環可能に—混紡繊維中の PET 分解率が世界最高値の 90%、ペットボトルの PET 分解量が 28 倍に向上—	—	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	キリンホールディングス(株) 静岡大学 大阪大学	2421
2024.11.25	バンコマイシン耐性腸球菌（VRE）感染症の治療に道—ナトリウムポンプ阻害剤の発見とその阻害機構を解明—	Nature Structural & Molecular Biology	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	千葉大学 高エネルギー加速器研究機構 真菌医学研究センター 京都大学 他	2422
2024.12.11	タンパク質の小胞体における運命決定機構を解明—構造形成 or 分解 糖鎖を介したタンパク質の綱引き—	eLife	生命創成探究センター 生命分子動秩序創発研究部門／ 生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	神戸大学 京都大学 名古屋市立大学	2423
2024.12.24	スズを含むペロブスカイト半導体の界面構造制御法の開発とメカニズム解明—高性能多接合（タンデム）型太陽電池の実現—	Nature	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	京都大学 オックスフォード大学 理化学研究所	2424
2025. 1. 22	人工分子モーターの合理的な改造で天然のモータータンパク質に匹敵する運動速度と走行距離を達成	Nature Communications	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門		2425*
2025. 2. 7	光が流れるナノチェーンを開発し機構も解明—究極の微小・超高速・省エネルギーデバイスの実現に期待—	Nature Communications	特別研究部門	東北大学 東京理科大学 京都大学 帝京科学大学	2426
2025. 2. 25	高温超伝導が生じる舞台となる「奇妙な金属状態」に光をあてる—高温超伝導の起源の解明や量子技術への応用に期待—	Physical Review Research	極端紫外光研究施設	広島大学 室蘭工業大学 北海道大学	2427
2025. 3. 6	第二世代結晶スポンジ法—中分子創薬化合物を標的に「簡便・汎用」な構造解析を実現—	Nature Chemistry	特別研究部門	東京大学	2428
2025. 3. 12	光で変形する分子が“芳香族性”を獲得する瞬間を初観測—超高速計測で明らかにした段階的な平面化プロセス—	Journal of the American Chemical Society	協奏分子システム研究センター 階層分子システム解析研究部門	大阪大学 京都大学	2429*

2025. 3.14	AIを活用し化学反応の理解を自動化する仕組みを開発—深層学習による反応機構の解明をより容易に—	APL Machine Learning	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	九州大学 大阪大学	2430
------------	---	----------------------	-----------------------------	--------------	------

* 分子科学研究所主体

研究成果英語プレスリリース（共同発表を含む）

（2024 年度）

EurekAlert! 公開日	タイトル	日本語版 整理番号
2024. 4.16	Dual-Beamline Photoelectron Momentum Microscopy Upgrade Revolutionizes Valence Orbital Analysis	2402
2024. 5.16	Exploration of Polymer Cononsolvency Mechanism through Soft X-Ray Absorption Spectroscopy	2404
2024. 5.30*	Successful Visualization of “Nano-Water Droplet” Behavior on Glass Surface	2405
2024. 6. 4	Soft X-Ray Absorption Spectroscopy Analysis of Isolated Water Molecules within Aqueous Acetonitrile Solutions	2406
2024. 6. 4	Gold Nanoparticles that Selectively Emit Left-/Right-Handed Light	2407
2024. 5.20	Enhancing Superconductivity of Graphene-Calcium Superconductors	2408
2024. 6.15	Reduction of Esters by a Novel Photocatalyst	2409
2024. 7. 9	It Takes a Cool Microscope and Antifreeze to Really Look at Ice	2410
2024. 7.18	Positive and Negative Impacts of Interfacial Hydrogen Bonds on Photocatalytic Hydrogen Evolution—Identifying the Reaction Conditions that Maximize Catalytic Activity in Photocatalytic Hydrogen Evolution under Water Vapor Atmospheres—	2411
2024. 8.29	Direct Operando Identification of Reactive Electron Species Driving Photocatalytic Hydrogen Evolution on Metal-Loaded Oxides—Unveiling Actual Role of Metal Cocatalysts—	2412
2024. 9. 2	Quantum Entanglement between Electronic and Motional States in Cold-Atom Quantum Simulator	2413
2024. 9.16	Electronic and Coordination Structures of Metal Porphyrin Complexes in Aqueous Solutions Probed by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy	2415
2024.10.23	New Chemical Treatment Reduces Number of Plant Pores that Regulate Water Loss	2416
2024.10.24	Take Aim at the Pause!	2417
2025. 1.23	V-161: A Breakthrough in the Fight against Antibiotic-Resistant VRE Infections	2422
2024.12.24*	Understanding and Controlling the Precursor Solution of Tin-Containing Perovskites Enabled Efficient Multijunction Photovoltaics	2424
2025. 1.21	Can DNA-Nanoparticle Motors Get Up to Speed with Motor Proteins?	2425
2024. 3.11	Catching Aromaticity in the Act: Direct Real-Time Tracking of How “Excited-State Aromaticity” Drives Molecular Shape Changes	2429

*EurekAlert! 未公開のためホームページ公開日

新聞報道

（2024 年度）

報道日	記事内容	新聞名	該当研究部門
2024. 4. 6	ALS 解析装置必ず実用化	中日	分子科学研究所
2024. 4.26	2つのビームライン併用で物性計測に革新	科学	極端紫外光研究施設

2024. 5.31	研究者の仕事や目指し方は？ 岡崎の33小中校でのオンライン授業	中日	分子科学研究所
2024. 5.31	岡崎 科学者から学ぶ 市内33校でオンラインセミナー	東海愛知	分子科学研究所
2024. 7.11	新会長の横顔 岡崎南ロータリークラブ	東海愛知	分子科学研究所
2024. 8.29	自然科学系学術研究17件に計6000万円助成大幸財団	中日	メゾスコピック計測研究センター 広帯域相関計測解析研究部門
2024. 9.11	中日文化センター栄 秋の新講座（下） 栄の真ん中でワクワク深掘り	中日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2024. 9.20	ケミカル量子センシング実現へ一歩 量子重ね合わせ状態が化学物質に応答 九大、東大、分子研、名大など室温下で成功	科学	機器センター
2024. 9.26	「情熱のエンジニア」大森賢治	日本経済	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2024. 9.28	化学 分子の「自己組織化」研究	読売	特別研究部門
2024. 9.29	日の丸技術発展へ適切評価	読売	特別研究部門
2024. 10. 1	ノーベル賞あの候補この研究	朝日	特別研究部門
2024.10. 6	日本人3年ぶり栄誉輝くか	中日	特別研究部門
2024.10. 7	社会に役立つ量子コンピューターを	熊本日日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2024.10.11	塩見振興局長が自然機構岡崎3研究所等を視察	文教速報	分子科学研究所
2024.10.14	文科省塩見研究振興局長 自然科学研究機構の岡崎3研究所等を視察	文教ニュース	分子科学研究所
2024.10.17	社会に役立つ量子コンピューターを	信濃毎日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2024.10.25	アルツハイマー病の原因 タンパク質成長過程を解明	中日	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門
2024.10.27	タンパク質の設計と構造予測にノーベル化学賞AIで50年来の難関突破	東京	協奏分子システム研究センター 階層分子システム解析研究部門
2024.11. 4	タンパク質の設計と構造予測にノーベル化学賞AIで50年来の難関突破	中日	協奏分子システム研究センター 階層分子システム解析研究部門
2024.11.23	りゅうぐうの「塩」初発見 京大など発表	中日	極端紫外光研究施設
2024.11.27	リュウグウに塩試料の結晶観測 京大・東北大チーム	毎日	極端紫外光研究施設
2024.12. 5	リュウグウ砂から塩 京大など分析 「塩水」存在した証拠	読売	極端紫外光研究施設
2024.12. 6	小惑星リュウグウの砂粒に塩の結晶	科学	極端紫外光研究施設
2024.12.10	AI「火や霞気のように」 ノーベル化学賞ハサビス氏記念講演 日本人貢献 制御に課題	中国	協奏分子システム研究センター 階層分子システム解析研究部門
2025. 1.17	小胞体のタンパク質の運命 構造形成か分解か綱引きで決定	科学	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門
2025. 2. 3	「石田賞」に樋口さん、山西さん 若手研究者顕彰 名大で授賞式	中日	メゾスコピック計測研究センター 繊細計測研究部門

2025. 2.14	光が流れるナノチェーン開発 微小・超高速・省エネデバイス実現に期待	科学	特別研究部門
2025. 2.21	天然のモータータンパク質に匹敵	科学	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門
2025. 3. 1	量子計算機世界トップ級 国内初の方式 年内に稼働 分子研や日立	日本経済	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2025. 3. 6	分子を分析「結晶スポンジ法」第2世代を開発 創薬へ活用期待	中日	特別研究部門

TV・ラジオ出演

(2024 年度)

放送日等	内容	放送局名	該当研究部門
2024.11.12	おはよう日本 量子コンピューター国際会議 研究加速のため 認識共有 浜松	NHK(G)	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2024. 4. 5 (初回放送*)	EGAO FRIDAY SCIENCE LAB.	エフエム EGAO	所長
2024. 5. 3 (初回放送*)	EGAO FRIDAY SCIENCE LAB.	エフエム EGAO	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門
2024. 6. 6 (初回放送*)	EGAO FRIDAY SCIENCE LAB.	エフエム EGAO	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2024. 7. 5 (初回放送*)	EGAO FRIDAY SCIENCE LAB.	エフエム EGAO	極端紫外光研究施設
2024. 8. 2 (初回放送*)	EGAO FRIDAY SCIENCE LAB.	エフエム EGAO	計算科学研究センター
2024. 9. 6 (初回放送*)	EGAO FRIDAY SCIENCE LAB.	エフエム EGAO	分子科学研究所
2024.10. 4 (初回放送*)	EGAO FRIDAY SCIENCE LAB.	エフエム EGAO	分子科学研究所
2024.11. 1 (初回放送*)	EGAO FRIDAY SCIENCE LAB.	エフエム EGAO	分子科学研究所
2024.12. 6 (初回放送*)	EGAO FRIDAY SCIENCE LAB.	エフエム EGAO	装置開発室
2025. 1. 3 (初回放送*)	EGAO FRIDAY SCIENCE LAB.	エフエム EGAO	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門
2025. 2. 7 (初回放送*)	EGAO FRIDAY SCIENCE LAB.	エフエム EGAO	機器センター
2025. 3. 7 (初回放送*)	EGAO FRIDAY SCIENCE LAB.	エフエム EGAO	生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門

* 毎月第1金曜日初回放送, 第2週以降再放送 7時15分～45分 (30分)
再放送毎週土・日曜日 17時～17時30分

8-4 産学連携

社会から大学や研究機関に求められる役割が変化する中で、大学共同利用機関である分子科学研究所も、基礎科学研究が果たすことの出来る社会への貢献を担っていく必要がある。分子科学研究所では、産学連携の窓口を設けて、共同研究・研究委託・施設利用・寄附講座などの利用を、自然科学研究機構の産学連携担当者と連携しながら進めている。このような取り組みは、社会の課題解決に資するのみならず、分子科学の研究の切り口を増やし、研究分野の裾野を拡げる取り組みの一つとして、重要なものである。なお寄附講座は、単独または複数の企業等外部機関からの会費により運営するオープンイノベーションの拠点として設置された「社会連携研究部門」に配置されることとなっている。このような社会連携研究部門では、企業等外部機関と緊密に連携を取りながら、新たな産学連携研究の創出を目指していく。

9. 資 料

9-1 歴代所長

初 代 赤松 秀雄（1975.4.22 ～ 1981.3.31）

第二代 長倉 三郎（1981.4.1 ～ 1987.3.31）

第三代 井口 洋夫（1987.4.1 ～ 1993.3.31）

第四代 伊藤 光男（1993.4.1 ～ 1999.3.31）

第五代 茅 幸二（1999.4.1 ～ 2004.3.31）

第六代 中村 宏樹（2004.4.1 ～ 2010.3.31）

第七代 大峯 巖（2010.4.1 ～ 2016.3.31）

第八代 川合 眞紀（2016.4.1 ～ 2022.3.31）

第九代 渡辺 芳人（2022.4.1 ～ ）

9-2 運営顧問

2004 年度以前は評議員による諮問を行った。

(<https://www.ims.ac.jp/publications/report2020/920.pdf>)

(<https://www.ims.ac.jp/publications/report2020/930.pdf>)

加藤 伸一（豊田中央研究所代表取締役）'04.5.19 ～ '10.3.31
小間 篤（高エネルギー加速器研究機構理事物質構造科学研究所長）'04.5.19 ～ '06.3.31
土屋 莊次（（台湾）国立交通大学講座教授，東京大学名誉教授）'04.5.19 ～ '10.3.31
益田 隆司（電気通信大学長）'04.5.19 ～ '06.3.31
江崎 信芳（京都大学化学研究所長）'06.4.1 ～ '08.3.31
野口 宏（中日新聞編集局文化部長）'06.4.1 ～ '08.7.31
時任 宣博（京都大学化学研究所長）'08.4.1 ～ '10.3.31
田中 宏明（中日新聞編集局文化部長）'08.8.1 ～ '10.3.31
齊藤 軍治（名城大学教授）'13.4.1 ～ '16.3.31
廣田 襄（京都大学名誉教授）'13.4.1 ～ '16.3.31
増原 宏（（台湾）国立交通大学講座教授）'13.4.1 ～ '16.3.31
菊池 昇（豊田中央研究所代表取締役所長）'16.4.1 ～ '23.3.31
晝間 明（浜松ホトニクス代表取締役社長）'16.4.1 ～ '20.3.31
瀧川 仁（東京大学物性研究所所長（～'18.3.31）東京大学物性研究所教授）'16.4.1 ～ '23.3.31
松本 吉泰（京都大学教授（～'18.3.31）豊田理化学研究所常勤フェロー）'16.4.1 ～ '22.3.31
長我部 信行（日立製作所ライフ事業統括本部企画本部長兼ヘルスケアビジネスユニットチーフエグゼクティブ）'20.4.1 ～ '23.3.31
石田 美織（三菱ケミカル Science & Innovation Center Organic Materials Laboratory 所長）'23.4.1 ～ '25.3.31
高田 昌樹（東北大学国際放射光イノベーション・スマート研究センター教授／光科学イノベーションセンター理事長）'23.4.1 ～ '25.3.31
谷口 功（国立高等専門学校機構理事長）'23.4.1 ～ '25.3.31

9-3 外国人運営顧問

2004 年度以前は外国人評議員による諮問を行った。

(<https://www.ims.ac.jp/publications/report2020/950.pdf>)

FLEMING, Graham R. (米国カリフォルニア大学バークレー校教授) '04.5.19 ~ '05.3.31

JORTNER, Joshua (イスラエルテルアビブ大学教授) '04.5.19 ~ '05.3.31

NORDGREN, Joseph (スウェーデンウプサラ大学教授) '05.4.1 ~ '07.3.31

CASTLEMAN, A. Worford Jr. (米国ペンシルバニア州立大学教授) '05.4.1 ~ '07.3.31

MILLER, William H. (米国カリフォルニア大学バークレー校教授) '07.4.1 ~ '09.3.31

LAUBEREAU, Alfred (ドイツミュンヘン工科大学教授) '07.4.1 ~ '09.3.31

STACE, Anthony John (英国ノッティンガム大学教授) '09.4.1 ~ '11.3.31

SAUVAGE, Jean-Pierre (フランスストラスブール大学教授) '09.4.1 ~ '11.3.31

WOLYNES, Peter (米国ライス大学教授) '11.4.1 ~ '13.3.31

BERRY, Rechard Stephen (米国シカゴ大学名誉教授) '11.4.1 ~ '12.3.31

WALMSLEY, Ian A. (英国オックスフォード大学副学長) '12.4.1 ~ '15.3.31

O'HALLORAN, Thomas V. (米国ノースウェスタン大学教授) '13.4.1 ~ '15.3.31

NAAMAN, Ron (イスラエルワイツマン科学研究所教授) '15.4.1 ~ '17.3.31

ROSSKY, Peter J. (米国ライス大学自然科学研究部部長・教授) '15.4.1 ~ '17.3.31

UMBACH, Eberhard (ドイツミュンヘン国立科学アカデミー理事, カールスルーエ工科大学教授) '17.4.1 ~ '20.3.31

LIST, Benjamin (ドイツマックス・プランク石炭研究所所長) '17.4.1 ~ '20.3.31

MICHL, Josef (米国コロラド大学ボルダー校教授) '20.4.1 ~ '22.3.31

TANG, Ching Wan (香港科技大学教授) '20.4.1 ~ '22.3.31

WEIDEMÜLLER, Matthias (独国ルプレヒト・カール大学ハイデルベルク副学長) '22.4.1 ~ '24.3.31

LEIGH, David A. (英国王立協会特任教授, 英国マンチェスター大学サー・サミュエル・ホール化学教授) '22.4.1 ~ '24.3.31

BONN, Mischa (Director and Professor, Max Planck Institute for Polymer Research) '24.4.1 ~ '26.3.31

MANOLOPOULOS, David E. (Professor, The University of Oxford) '24.4.1 ~ '26.3.31

9-4 研究顧問

小谷 正雄 1982.4.1 ～ 1990.3.31

福井 謙一 1982.4.1 ～ 1998.3.31

森野 米三 1984.4.1 ～ 1990.3.31

長倉 三郎 1988.4.1 ～ 2005.3.31

植村 泰忠 1989.6.1 ～ 1994.3.31

田丸 謙二 1990.4.1 ～ 1995.3.31

田中 郁三 1993.4.1 ～ 2001.3.31

馬場 宏明 1994.4.1 ～ 2001.3.31

井口 洋夫 1995.4.1 ～ 2005.3.31

土屋 莊次 2000.4.1 ～ 2004.3.31

伊藤 光男 2001.4.1 ～ 2005.3.31

廣田 襄 2001.4.1 ～ 2010.3.31

近藤 保 2001.4.1 ～ 2010.3.31

玉尾 皓平 2004.4.1 ～ 2008.3.31

入江 正浩 2008.4.1 ～ 2010.3.31

柳田 敏雄 2011.4.1 ～ 2016.3.31

Graham R. Fleming 2011.4.1 ～ 2016.3.31

中嶋 敦 2017.4.1 ～ 2022.3.31

Hrvoje Petek 2017.4.1 ～ 2022.3.31

北川 進 '22.4.1 ～

LISY, James M. '22.4.1 ～

9-5 産学連携研究アドバイザー

菊池 昇（(株)トヨタコンボン研究所代表取締役所長）'22.4.1 ～

福田 伸（(株)三井化学分析センター技術顧問, 北海道大学触媒科学研究所研究推進支援教授）'22.4.1 ～

9-6 運営会議委員

1975 ～ 1981 年は運営に関する委員会委員

(<https://www.ims.ac.jp/publications/report2020/970.pdf>)

1981 ～ 2004 年は運営協議員による諮問を行った。

(<https://www.ims.ac.jp/publications/report2020/980.pdf>)

◎ 議長
(副) 副議長

人－人事選考部会に属する委員
共－共同研究専門委員会に属する委員

氏名・所属（当時）	第 1 期	第 2 期	第 3 期	第 4 期	第 5 期	第 6 期	第 7 期	第 8 期	第 9 期	第 10 期	第 11 期
阿久津 秀雄 阪大たんぱく質研所長	○共										
阿波賀 邦夫 名大院理教授	○人	○人									
太田 信廣 北大電子科研教授	○人										
加藤 隆子 核研研究・企画情報 セ教授	○										
榊 茂好 京大院工教授	○人										
田中 健一郎 広大院理教授	○人	○(副)人									
寺嶋 正秀 京大院理教授	○人	○人									
西川 恵子 千葉大院自然教授	○(副)										
藤田 誠 東大院工教授	○	○									
前川 禎通 東北大金材研教授	○	○									
宇理須 恆雄 分子研教授	○共	○共	◎共								
小川 琢治 分子研教授	○	○ ~'07.9.30									
北川 禎三 分子研教授(岡崎統 合バイオ)	○ ~'05.3.31										
岡本 裕巳 分子研教授	○ '05.4.1~	○人	○人	○共	○共	◎人・共	◎人	○	○	○人	○人
小杉 信博 分子研教授	○人	○	○人	◎人・共	◎共	○共	○共				
小林 速男 分子研教授	◎共	○共 ~'07.3.31									
大森 賢治 分子研教授		○ '07.4.1~	○	○人	○人	○	○	○			
田中 晃二 分子研教授	○人・共	○人・共	○共	○							
永瀬 茂 分子研教授	○人	○人	○	○							
西 信之 分子研教授	○共	○人・共	○人・共								
平田 文男 分子研教授	○	○	○人	○							
松本 吉泰 分子研教授	○人	○人 ~'07.3.31									
横山 利彦 分子研教授		○人 '07.4.1~	○人	○人	○	○	○	○人	○人	○共	○共
薬師 久彌 分子研教授	○人	◎共 '07.4.1~	○共								
斉藤 真司 分子研教授				○人	○人	○人	○共	◎共	○共	○共	○共
大島 康裕 分子研教授				○	○人	○					
魚住 泰広 分子研教授				○共	○人・共	○人・共	○共	○共	○共	○共	○共
青野 重利 分子研教授				○人・共	○人・共	○共	○共	○人・共			
加藤 晃一 分子研教授					○	○人	○人	○	○		

氏名・所属（当時）	第1期	第2期	第3期	第4期	第5期	第6期	第7期	第8期	第9期	第10期	第11期
加藤 政博	分子研教授				○						
山本 浩史	分子研教授				○	○人	○人	○共	○共	○人	○人
秋山 修志	分子研教授					○	○人	○人	◎共	◎人	○人
榎 敏明	東工大院理工教授	○人	○人								
加藤 昌子	北大院理教授	○共	○								
関谷 博	九大院理教授	○	○共								
中嶋 敦	慶應大理工教授	○	○								
山下 晃一	東大院工教授	○人	○人								
江幡 孝之	広大院理教授		○人	○人							
篠原 久典	名大院理教授		○	○共							
富宅 喜代一	神戸大院理名誉教授		○(副)人	○(副)人							
山下 正廣	東北大院理教授		○人	○人							
渡辺 芳人	名大副総長，教授		○	○							
山縣 ゆり子	熊本大院薬教授			○	○						
上村 大輔	神奈川大理教授			○	○						
山内 薫	東大院理教授			○	○						
森 健彦	東工大院理工教授			○人	○人						
佃 達哉	東大院理教授			○人	○人						
朝倉 清高	北大触媒セ教授			○	○	○					
神取 秀樹	名工大院工教授			○	○(副)人	○(副)人					
河野 裕彦	東北大院理教授			○	○共	○					
寺崎 亨	九大院理教授			○人	○人	○人					
水谷 泰久	阪大院理教授			○人	○人	○人					
大西 洋	神戸大院理教授					○共	○共				
鈴木 啓介	東工大院理工教授					○	○				
高田 彰二	京大院理教授					○	○				
田原 太平	理研主任研究員					○人	○人				
森 初果	東大物性研教授					○人	○人				
有賀 哲也	京大院理教授						○(副)人	○人			
米田 忠弘	東北大多元研教授						○	○(副)			
高原 淳	九大先導研教授						○	○			
西原 寛	東大院理教授						○人	○人			
山口 茂弘	名大トランス研教授						○人	○人			
解良 聡	分子研教授						○人	○人	○人	○	
鹿野田一司	東大院工教授							○人	○人		○人
袖岡 幹子	理研主任研究員							○	○		
谷村 吉隆	京大院理教授							○	○		
中井 浩巳	早稲田大理工教授							○人	○人		
藤井 正明	東工大科技創成院教授							○共	○共		
江原 正博	分子研教授							○人	○人	○	
秋吉 一成	京大院工教授								○人	○人	○人
忍久保 洋	名大院工教授								○人	○人	
芳賀 正明	中央大理工名誉教授								○	○人	

氏名・所属（当時）		第1期	第2期	第3期	第4期	第5期	第6期	第7期	第8期	第9期	第10期	第11期
福井 賢一	阪大院基礎工教授									○人	○人	◎ ○ ~'24.9.30
村越 敬	北大院理教授									○(副)	○(副共	
飯野 亮太	分子研教授									○人	○人	
石崎 章仁	分子研教授									○人	○人	
岩佐 義宏	理研グループディレクター										○	○(副)人
高橋 聡	東北大多元研教授										○共	○共
唯 美津木	名大物科国際研教授										○共	○共
真船 文隆	東大院総合文化教授										○	○
吉澤 一成	九大先導研教授										○人	○人
杉野目 道紀	京大院工教授											○共
高橋 啓介	北大院理教授											○
菱川 明栄	名大物科国際研教授											○人
廣田 俊	奈良先端大教授											○人
山内 美穂	九大先導研教授											○人
松井 文彦	分子研教授											○ '24.10.1~

第1期：'04.4.1～'06.3.31

第2期：'06.4.1～'08.3.31

第3期：'08.4.1～'10.3.31

第4期：'10.4.1～'12.3.31

第5期：'12.4.1～'14.3.31

第6期：'14.4.1～'16.3.31

第7期：'16.4.1～'18.3.31

第8期：'18.4.1～'20.3.31

第9期：'20.4.1～'22.3.31

第10期：'22.4.1～'24.3.31

第11期：'24.4.1～'26.3.31

9-7 大学共同利用機関法人自然科学研究機構第4期中期目標

(前文) 法人の基本的な目標

学術研究は、真理の探究と文化の創造を目指して行われる知的創造活動であり、科学技術や産業、経済、教育、社会などの発展の基盤となるものである。大学共同利用機関法人自然科学研究機構（以下「本機構」という）は、宇宙、エネルギー、物質、生命等に関わる自然科学分野の中核的研究機関（大学共同利用機関、以下「機関」という）を設置・運営することにより、自ら国際的・先導的な学術研究を進めるとともに、保有する最先端設備の共同利用や先導的共同研究の場を全国の大学・研究機関（以下「大学等」という）の研究者に提供し、我が国の大学等の自然科学分野を中心とした学術研究の発展に貢献する。

具体的には、本機構が分野の異なる機関を複数持つ強みを活かし、各々の分野を超えて広範な自然の構造と機能の解明に取り組み、自然科学の新たな展開となる新しい学問分野の創出とその発展を図るとともに、これらをリードする若手研究者を育成する。また、最先端研究の現場を大学院教育にも広く開放し、次世代の学術研究を担う人材を育成する。加えて、自然科学研究が明らかにした自然が持つ多彩かつ深遠な世界を社会に向けて発信し、市民の広い関心と学術研究への理解を得る。さらに、若い世代の理科への関心を促す出前授業を行うなど、社会的な貢献も積極的に実施する。

本機構は以上を基本的なミッションとし、機構長のリーダーシップの下、急速に進む世界の研究状況下にあって先導的な役割を果たすべく、不断の組織改革やDXによる研究システム改革等を通じて、新しい時代に向けた共同利用・共同研究機能強化を図る。

特に、第4期中期目標期間においては、国内外における異分野連携活動の促進、これらを支える研究者の多様性の確保、大学との組織的連携ネットワークを通じた大学研究力強化への貢献、IRによる共同利用・共同研究の戦略的推進、研究データの集約化によるデータ駆動型サイエンスへの展開、等を重点的に進める。

これらを推進する体制整備のひとつとして、新分野創成センターの役割を見直し、各機関の枠を超えた異分野連携による新分野の創成に加え、基礎研究から生まれた新たな「知」の持つ社会貢献への可能性を追求する。また、異分野連携研究を国際的に展開するため、国際連携研究センターの活動を更に推進するとともに、機関に研究者が互いに触発する交流空間を形成する。

さらに、本機構は、他の3つの大学共同利用機関法人及び国立大学法人総合研究大学院大学とともに「一般社団法人 大学共同利用研究教育アライアンス」（以下「アライアンス」という）を設立し、同アライアンスが企画する取組に参画することにより、異分野融合による研究力の強化や人材育成の充実、運営の効率化などの課題に対して、法人の枠組みを超えた取組を一層推進する。

◆ 中期目標の期間

中期目標の期間は、令和4年4月1日から令和10年3月31日までの6年間とする。

I 教育研究の質の向上に関する事項

1 研究

- (1) 各分野の学術研究を先導する中核拠点として、国際的な研究競争の激化や国際協力の進展等の動向を踏まえながら、大規模プロジェクトをはじめとした世界最先端の学術研究プロジェクト等の推進を図り、世界最高水準の研究成果を創出して、当該分野における我が国のプレゼンスを高める。①
- (2) 各分野の特性を踏まえつつ、学術的又は社会的な要請を踏まえた学術研究を戦略的に推進し、その卓越性を強化する。時代の変化にかかわらず、継承・発展すべき学問分野に対して必要な資源を確保する。②
- (3) 若手、女性、外国人など研究者の多様性を高めることで、知の集積拠点として、また各分野の研究者コミュニティの中核として、持続的に新たな価値を創出し、発展し続けるための基盤を構築する。⑤

2 共同利用・共同研究

- (4) 実験施設、研究設備、情報インフラ・データ基盤等の研究基盤について、ユーザーのニーズを的確に把握し、かつ、関係機関との連携・分担等を考慮した上で、高度化、利用の利便性向上、研究のDXへの対応等を適切に進め、共同利用機能の充実を図る。⑥
- (5) 文献、標本、バイオリソース等をはじめとした学術資料について、学術的価値を踏まえた適切な保存・維持管理を行うとともに、関係機関との連携・分担を考慮しつつ、強みを持つ分野の資料、利用ニーズの高い資料等の収集・整備を戦略的に進めるなど、共同利用機能の充実を図る。
各分野における共同利用・共同研究体制の中核機関として、データ駆動型サイエンス・オープンサイエンスの基盤となるデータの収集、公開・提供、利活用等への対応について、方針を明確化し、戦略的な対応を図る。⑦
- (6) 各分野における研究コミュニティの中核として、新たな課題に対応するための研究者グループの組織化等を支援・促進するとともに、組織的連携の拡充、クロスアポイントメントによる人的交流の拡大など、大学等との組織間ネットワークの強化を図る。さらに、これらのネットワークを活用し、本機構が包含する自然科学分野における大学の研究力強化にも貢献する。また、競争力の高い海外の研究機関等との連携構築を戦略的に推進し、これら機関との研究者交流等を促進する。
異分野融合の促進等をも視野に入れ、大学の共同利用・共同研究拠点との連携による共同利用・共同研究機能のネットワーク化を推進する。⑩

3 教育・人材育成

- (7) 総合研究大学院大学との緊密な連係・協力による大学院教育について、大学共同利用機関が有する優れた研究環境を活用し、他大学の大学院教育との差別化、個々の学生のニーズへのきめ細かな対応等により、その強みを伸ばし、優秀な学生の獲得につなげる。連携大学院制度、特別共同利用研究員制度等による大学院教育への協力について、受入れ学生に対し、先導的・国際的な共同研究への参加機会を積極的に提供するなど、各大学共同利用機関の特色を活かした教育の充実を図る。⑫
- (8) ポストドクター等の若手研究人材について、その育成方針を明確化し、多様な経験機会を付与しつつ実践的な研究指導を行うなど、大学共同利用機関の研究環境を活かした人材育成の充実を図る。また、最先端の研究活動を支援するURAなど高度専門人材の育成を図る。これら人材の研究者としてのキャリアパス形成を支援する。⑬

4 社会との共創

- (9) 産業界との連携による研究開発の推進について、研究者個人ベースでの受託研究・共同研究等に留まらず、組織対組織の連携の強化、オープンイノベーションの推進等に向けた取組を進める。特許等の知的財産の戦略的活用も視野に入れつつ、研究成果を活用する事業者への技術移転等の取組を進める。⑭

5 その他教育研究の質の向上に関する重要事項

- (10) 社会が大きく変化する中、機関等の垣根を超えた組織体制の見直しを不断に行い、柔軟かつ機動的な組織の改編・整備を推進する。異分野融合による研究力強化や人材育成の充実、運営の効率化などの課題に対し、法人の枠組みを超えた対応を進める。⑯

II 業務運営の改善及び効率化に関する事項

- (11) 内部統制機能を実質化させるための措置や外部の知見を法人経営に生かすための仕組みの構築、機構内外の専門的知見を有する者の法人経営への参画の推進等により、機構長のリーダーシップのもとで、強靱なガバナンス体制を構築する。^⑰
- (12) 大学共同利用機関の運営について、研究者コミュニティの意見を効果的に取り入れるとともに、その運営状況について積極的な情報発信を行うなど、開かれた運営の推進を図る。^⑱
- (13) 大学共同利用機関等の機能を最大限発揮するための基盤となる施設及び設備について、保有資産を最大限活用するとともに、法人全体のマネジメントによるスペース配分や設備の整備・共用等を戦略的に進めるなど、効率的な整備・運用の推進を図る。^⑲

III 財務内容の改善に関する事項

- (14) 公的資金のほか、寄附金や産業界からの資金等の受入れを進めるとともに、適切なリスク管理のもとでの効率的な資産運用や、保有資産の積極的な活用、研究成果の活用促進のための出資等を通じて、財源の多元化を進め、安定的な財務基盤の確立を目指す。併せて、目指す機能強化の方向性を見据え、その機能を最大限発揮するため、法人内及び機関内の資源配分の最適化を進める。^⑳

IV 教育及び研究並びに組織及び運営の状況について自ら行う点検及び評価並びに当該状況に係る情報の提供に関する事項

- (15) 外部の意見を取り入れつつ、客観的なデータに基づいて、自己点検等の活動に取り組み、自らの強み・特色と課題等を可視化するとともに、それを用いたエビデンスベースの法人経営を実現する。併せて、経営方針や計画、その進捗状況等に留まらず、研究教育の成果と社会発展への貢献等を含めて、ステークホルダーに積極的に情報発信を行うとともに、双方向の対話等を通じて法人経営に対する理解・支持を獲得する。また、市民に対するアウトリーチ活動を通じ、科学的リテラシーの涵養を図るとともに我が国の知的基盤の向上を推進する。^㉑

V その他業務運営に関する重要事項

- (16) 多様なデジタル技術の適切な活用や、マイナンバーカードの活用等により、業務全般の継続性の確保と併せて、機能を高度化するとともに、事務システムの効率化や情報セキュリティ確保の観点を含め、必要な業務運営体制を整備し、デジタル化を推進する。^㉒

9-8 大学共同利用機関法人自然科学研究機構第 4 期中期計画
(Ⅵ以降を省略)

Ⅰ 教育研究の質の向上に関する目標を達成するためにとるべき措置

1 研究に関する目標を達成するための措置

- [1] 自然科学分野の学術研究を先導する中核拠点として、世界最先端の学術研究を推進し、世界最高水準の研究成果を創出して、当該分野における我が国のプレゼンスを高める。

評価指標	[1-1] 第 4 期中期目標期間中に 9,000 編以上の論文を発表する。 [1-2] Top10% 論文の割合 12% 以上を維持する。 [1-3] 国際共著論文の割合 57.4% 以上。
------	--

- [2] 天文学分野では、宇宙の構造の進化と元素の起源を解明するため、ハワイ島マウナケア山頂に設置した口径 8.2m の大型光学赤外線望遠鏡「すばる」を安定して運用しつつ、機能強化を段階的に行う（「すばる 2」計画）。超広視野多天体分光器（PFS）を用いた本格観測を開始し、超広視野撮像及び多天体分光による大規模サーベイ観測を中心に国際共同利用研究を推進し、高品質なデータを供する。口径 8m 以上の望遠鏡の中で最も広い視野を持つ強みを活かし、世界最先端の衛星プロジェクトや地上望遠鏡プロジェクトと連携し、宇宙の大規模構造の進化や元素の起源について他の追従を許さない研究を展開する。

評価指標	[2-1] すばる望遠鏡全体の高い論文生産性（年平均 145 編以上）を維持するとともに、第 3 期中期目標期間以上の高いインパクト（Top10% 論文の割合 16% 以上）を目指す。 [2-2] 超広視野多天体分光器（PFS）をすばる望遠鏡に搭載して、科学観測を開始し（令和 5 年度）、データ解析用ソフトウェアを公開する。第 4 期中期目標期間終了までに、PFS を用いた大規模サーベイ及び共同利用観測を総計 240 夜以上実施する。 [2-3] 超広視野主焦点カメラ（HSC）を用いた大規模銀河探索データより、宇宙における暗黒物質の 3 次元地図をこれまでの約 8 倍以上に拡大し、宇宙論パラメータをより高い精度（推定誤差 2% 以下）で求める。 [2-4] 重力波イベントを含む突発現象を迅速に追跡観測できるように、観測課題の動的割付（キュー観測）システムを拡張し、HSC の共同利用観測時間の 1/2 以上（これまでは 1/4 以下）に適用して運用する。
------	---

- [3] 天文学分野では国際共同事業として以下を進める。
- ・惑星誕生の現場と生命素材を含む宇宙における物質の進化を解明するため、日米欧共同で南米チリに設置したアタカマ大型ミリ波サブミリ波干渉計（アルマ望遠鏡）の国際共同運用を継続し、科学観測を推進する。東アジア地域の中核機関として最大限の観測時間を利用可能とし、高品質なデータを供する。並行して、アルマ望遠鏡の機能強化を段階的に行う。
 - ・太陽系外の地球型惑星における生命の存在や宇宙で最初の日体の形成など、天文学における人類のフロンティアを開拓するため、既存の望遠鏡を凌駕する解像力と感度をもつ口径 30m の超大型光学赤外線望遠鏡（TMT）の建設事業を、日本・米国・カナダ・インド・中国の 5 ヶ国と共同で推進する。日本が分担する研究開発部分について、本格的製造・製作に向けた準備を行い、製造・製作を推進するとともに、運用期に向けた共同利用・共同研究の準備を行う。

評価指標	[3-1] アルマ望遠鏡の運用を継続し、その貢献割合に応じた観測時間割合を東アジアの科学者コミュニティに確保することで、アルマ全体（年平均 300 編以上）及び東アジア（年平均 60 編以上）の論文生産性を維持する。 [3-2] アルマ望遠鏡の最も低い周波数帯域を観測するバンド 1 受信機（66 台）を国際協力によりアルマ望遠鏡へ搭載し、令和 5 年度までに試験観測を実施、令和 6 年度までに共同利用の募集を開始し、令和 7 年度までに共同利用観測を開始する。 [3-3] アルマ望遠鏡について、現在より約 2 倍高い解像度（約 5 ミリ秒角）を達成する。 [3-4] 日本が研究開発を分担する TMT の望遠鏡本体構造、主鏡分割鏡、第一期観測装置の 3 つ全てについて、製造・加工に着手するために必要となる「製造前審査」に第 4 期中期目標期間中に合格する。 [3-5] 2030 年代の TMT 完成後の科学運用期に向けて、第 4 期中期目標期間中に以下を実施する。すばる望遠鏡との一体的運用のあり方を含めた、国立天文台としての TMT の科学運用・観測装置計画について、国立天文台 TMT 科学諮問委員会における審議を踏まえて計画書として取りまとめ、公表する。さらに同計画書の内容を、共同利用運用体制の構築、観測装置の基礎技術開発、データ解析・アーカイブシステムの開発に反映させる。
------	--

- [4] 核融合科学分野では、高温プラズマの中心的な課題（プラズマ中の乱流・構造形成、電磁流体不安定性、高エネルギー粒子の振る舞い、プラズマとその対向材料との相互作用等）について、特に磁場構造の対称性や 3 次元性に注目して、実験と理論シミュレーションの連携と国内外の研究機関との共同研究により、それらの物理機構の解明を行う。研究者コミュニティの合意形成及び核融合研究の学際化に向け主導的な役割を担い、実験装置、超高速計算機、統合解析システム、シミュレーションコード等を活用・整備・拡張し、世界最先端の学術研究を多角的に推進する。

評価指標	[4-1] 核融合科学に関する共同研究・共同利用に基づく学術論文の発表件数を第 4 期中期目標期間中に年間 200 編以上に、及びジャーナルの種類を第 4 期中期目標期間中に年間 40 種類以上に増加させる。
------	--

- [1] 自然科学分野の学術研究を先導する中核拠点として、世界最先端の学術研究を推進し、世界最高水準の研究成果を創出して、当該分野における我が国のプレゼンスを高める。（再掲）

評価指標	[1-1] 第 4 期中期目標期間中に 9,000 編以上の論文を発表する。 [1-2] Top10% 論文の割合 12% 以上を維持する。 [1-3] 国際共著論文の割合 57.4% 以上。
------	--

- [5] 本機構がカバーする各分野の特性を踏まえつつ、学術的又は社会的な要請を踏まえた学術研究を戦略的に推進するため、機構直轄センターにおいて、各機関も交え、異分野融合・新分野創成を目指した国際的共同研究を推進する。

評価指標	[5-1] 機構直轄センターにおける異分野融合共同研究件数が第 3 期中期目標期間の実績数（参考：令和 2 年度までの延べ数 367 件）を上回ること。
------	--

- [6] 天文学の研究を推進するため、中小型望遠鏡、次世代観測装置、超高速計算機等の開発研究、整備及び運用を行う。プロジェクト間の連携も含めた柔軟な組織運営を推進するとともに、研究者コミュニティの合意形成に向けたコーディネート機能を担う。また、宇宙航空研究開発機構（JAXA）宇宙科学研究所主導のもと、日本の科学衛星・探査機の運用を継続するほか、将来の科学衛星や飛翔体に搭載する高度な観測装置の開発、そのための基礎的技術研究を推進し、新たな科学技術の基盤の創成に寄与する。

評価指標	[6-1] 天文学専用の共同利用計算機システムの性能向上と定常的かつ安定な運用を行い、論文数 100 編／年を超える水準を維持する。 [6-2] 大型低温重力波望遠鏡 KAGRA の感度向上を進めつつ、国際共同観測に参加し、重力波を検出する。 [6-3] JAXA 火星衛星探査計画（MMX）において、「測地チーム」を統率し、測地プロダクト（形状モデル等）獲得のための科学観測運用シミュレーションを、高・低高度について各 1 回以上、衛星打上げ前に実施する。取得データの分析から、火星衛星の内部構造探査に貢献する。
------	--

- [7] 国立天文台において、日の出・日の入りなど市民生活に直結した暦などの天文情報を提供する。また、天文観測に適した環境を保護するための活動を行う。

評価指標	[7-1] 暦を計算し編纂する、すなわち「暦要項」、「暦象年表」を毎年着実に作成・公表する。ウェブページ等を通じて暦に関する情報を提供する。 [7-2] 天文観測環境を保護する「周波数資源保護」業務の着実な実施と、本業務の社会への発信状況。（第 3 期中期目標期間では周波数資源保護業務を開始し、ウェブページで随時活動を報告。第 4 期中期目標期間においてはさらに、本業務に対する社会からのフィードバックを集めるフォームを構築し、受け付けた意見を業務へ反映、社会へ発信する双方向性の流れを作る。）
------	--

- [8] 核融合科学分野において、高度な極限技術の複合系である核融合システムの実現に向けた課題について学際化に取り組み、技術の普遍化を図る。そのために、特に、大型高磁場超伝導マグネット、超高熱流プラズマ対向機器、中性粒子ビーム入射加熱等に関わる核融合科学研究所が有する先端的中核試験設備の高度化を進め、国内外の研究機関との共同研究を推進する。これにより、高効率核融合炉の設計に資するとともに、関連研究分野との連携を強化し、広く科学技術の基盤醸成に貢献する。

評価指標	[8-1] 核融合科学研究所が有する核融合工学分野の先端的中核試験設備を用いた研究を基にした、核融合科学研究所による論文の発表数について、第 6 期中期目標期間中における論文数を累計 60 編以上（年間 10 編程度）、国際共著論文、累計 6 編以上、Top10% 論文、累計 6 編以上に増加させる。 [8-2] 超高熱流プラズマ対向機器の技術開発を推進し、1 平方メートルあたり 3 万キロワット以上の定常（10 分以上）熱負荷に耐える高熱流束機器を設計・製作する。また、製作した機器の性能を検証することで、先進材料の極限性能を解明する。
------	---

- [9] 核融合科学分野において、発電のみならず、大規模・安定な水素製造も可能とする核融合炉の概念の構築とそれに必要な技術の高度化を進めるとともに、水素の効率的利用に関連する学術研究を推進するなど、エネルギーの高効率利用に核融合極限技術を適用し、広くエネルギー科学研究を展開することにより、水素エネルギー社会・カーボンフリー社会の実現に貢献する。

評価指標	[9-1] 定常核融合炉設計や水素がキーワードとなる研究を基に、核融合科学研究所による論文の発表数について、第 4 期中期目標期間中に年間 6 編以上に増加させる。 [9-2] 液体水素を用いた高温超伝導システムの安定な冷却の原理検証のため、マグネットの過渡的熱負荷増大に対する液体水素の冷却応答特性を詳細に調べ、超伝導技術の高度化を進める。
------	---

- [10] 基礎生物学研究分野において、生命現象の基本原理解明するために、細胞の構造・機能・組織化・相互作用・情報伝達、発生・分化・再生、神経系の働きや行動の制御、環境適応、多様性、共生、進化等の機構を研究し、基礎生物学のフロンティアを開拓する。

評価指標	[10-1] 第 4 期中期目標期間中に、第 3 期中期目標期間を上回る 780 本以上の論文を発表する。
------	---

- [11] 基礎生物学研究分野において、遺伝子やタンパク質解析技術、ゲノム編集技術、シングルセル解析技術、多様な先端顕微鏡によるバイオイメーキング技術等の最先端技術の開発導入や新規モデル生物の開発を進めるとともに、AI やビッグデータを活用した人と機械の協働作業による新しい発見、思考を行うプラットフォームを確立する。生物機能解析センター、モデル生物研究センター、新規モデル生物開発センターを超階層生物学センターへ改組し、遺伝子から個体群に至る様々な階層を超えた統合的な解析による「超階層生物学」を推進し、世界を先導する独創的な生物学研究を行う。

評価指標	[11-1] 生物機能解析センター、モデル生物研究センター、及び新規モデル生物開発センターを改組し、超階層生物学センターを設立する。 [11-2] 研究費を支給する超階層生物学共同利用研究を新設して公募し、毎年 3 件実施する。 [11-3] 超階層生物学に関する研究会とトレーニングコースをそれぞれ年 1 回開催する。
------	---

- [12] 生理学分野の、分子・細胞・細胞群・器官・システム・個体間の各階層において、機能メカニズム及び構造機能連関に関する研究を推進する。また、階層間の連結、器官間の機能協同、さらには神経系と免疫系など異なる機能システム間の連関を追求することにより、生命機能の成り立ちと恒常性の維持に関する理解を促進する。さらに、基礎生理科学・神経科学の確固たる知見の提供により、臨床医学との架け橋研究の基盤形成に貢献する。

評価指標	[12-1] 「生体の各階層における生命現象の機能メカニズム」、「生体の階層間・臓器間・機能システム間の連関に基づく生体恒常性維持のメカニズム」、「生体の機能メカニズムの破綻による病態現象」の 3 つの範疇において、新知見を論文として発表し、第 4 期中期目標期間全体における全当該論文の Top10% 論文の割合を 12.8% 以上に、国際共著論文の割合を 36.8% 以上に維持する。
------	--

- [13] 生理学分野において、時系列細胞現象計測等の専門性の高い重要な方法論を継承するとともに、分野間連携等により機能生命科学の新展開を図る。すなわち、理工系分野等との連携により、研究の推進・変革に寄与しうる現象計測・機能操作技術の新しい方法論や研究ツール等を開発し、生命科学に適用する。他機関との協力により MRI 脳画像等のデータベース構築の基盤技術を開発する。文理融合を推進すること等により、ヒト及び非ヒト霊長類動物の高次脳機能の理解を促進する。

評価指標	[13-1]「時系列細胞現象解析の専門技術を継承する室の運営と、その技術の共同利用研究への提供」に関して、時系列細胞現象解析室の研究教育職員が貢献した共同利用研究の年平均実施件数3件を達成する。 [13-2]「分野間連携に基づいた、新たな計測技術や機能操作技術等の開発」に関して、第4期中期目標期間中に当該技術の原理や方法論に関する論文3報以上を発表する。 [13-3]「MRI脳画像等のデータベース構築の基盤技術に関する開発」に関して、開発の達成を示す構築したデータベースの設計図、管理システム、及び全体像の概略を提示する。 [13-4]「ヒト及び非ヒト霊長類動物の高次脳機能のメカニズムやその種間比較等」の新知見を論文として発表し、第4期中期目標期間全体における当該論文中のTop10%論文の割合を12.8%以上に、国際共著論文の割合を36.8%以上に維持する。
------	---

- [14] 分子科学分野では、計算科学手法の開発と活用、光を用いた先端的研究手法や光源の開発、そして新規分子・物質の設計やそれらの高度集積化を通して、原子・分子・生命システムが示す多様な構造、物性、反応性、触媒能、エネルギー変換などの高次機能や動的構造を解明するとともに、新たな現象や有用な機能の設計と制御に取り組む。

評価指標	[14-1] 先端の学術研究を次の5項目にわたって戦略的に推進し、うち3項目以上において、原著論文や総説を項目あたり130本以上公表する。 ・機能性材料の物性評価と高度な電子状態理論による解析 ・新規物性観測設備と先端的光源・分光法の開発 ・凝縮相原子・分子系が示す量子動力学現象、反応、物性及び秩序形成ダイナミクスの解明 ・有機分子を基盤とした新しい反応システムや機能性デバイスの開拓 ・分子システムの高次機能発現、作動原理、設計原理の探究
------	--

- [15] アストロバイオロジーセンターでは、第一線の外国人研究者の招へい、若手研究者の海外派遣に取り組むとともに、大学等と連携して国際的かつ先端的な共同研究を推進し、アストロバイオロジー分野の国際的研究拠点を形成し、ハビタブル系外惑星の発見及び特徴づけなどで世界的成果を上げるとともに、生物系との分野融合的研究を推進し、当該研究拠点の国際化を進める。

評価指標	[15-1] 観測遂行夜数を毎年100夜以上とする。 [15-2] 第4期中期目標期間末までに地球型惑星の発見確認数を10個以上とする。 [15-3] 外国人研究者割合20%以上を維持する。 [15-4] 第4期中期目標期間末までに生物系研究者割合を35%以上とする。 [15-5] 大学共同利用件数、若手研究者派遣数を毎年それぞれ30件以上とする。 [15-6] アストロバイオロジーセンターにおけるTop10%論文の割合12%以上。
------	--

- [16] 生命創成探究センターでは、「みる・よむ・つくる」の3つのアプローチを基軸に、極限環境生命の研究者とも協力しながら異分野融合型の研究を進め、生命の本質に迫る研究を展開する。

評価指標	[16-1] 多様な分野の研究者や若手研究者とともに、物質と生命の境界探索、細胞アトラスの編纂、生命体のシミュレーション、ネオ生命体の創成等を目指した研究プロジェクトを4課題以上推進する。また、大学の共同利用・共同研究拠点等との連携による分野融合研究を4課題以上実施する。これらの成果として論文・総説・国際学会招待講演の総数120件以上。
------	--

- [17] 若手研究者比率を維持するとともに、女性研究者・外国人研究者の一層の雇用と研究者の流動性を高めるため、これまで行ってきた研究環境整備を一層進めるとともに、十分に活用する。女性研究者の活躍を推進するため、男女共同参画推進に関するアクションプランを着実に実行する、女性研究者限定公募を実施するなどにより、女性研究者の割合を引上げる。

評価指標	[17-1] 若手研究者比率35%以上を維持する。 [17-2] 外国人研究者比率を第4期中期目標期間末までに12%以上とする。 [17-3] 女性研究者の割合を第4期中期目標期間末までに17%に引上げる。
------	--

- [18] 国内外の大学・研究機関と連携し、国際的に卓越した若手研究者を育成するための支援を強化する。さらに、若手研究者が分野を超えた研究を推進するための事業を実施する。また、現在実施している「自然科学研究機構若手研究者賞」について、対象を共同研究者にも拡大する。

評価指標	[18-1] 若手研究者による分野を超えた共同研究を第4期中期目標期間中に60件以上実施する。 [18-2] 第4期中期目標期間において、若手研究者を国内外の研究機関へ計30名以上派遣する。 [18-3] 若手研究者賞の対象枠を広げ、毎年最大5名の受賞者を顕彰する。
------	--

2 共同利用・共同研究に関する目標を達成するための措置

- [19] 研究設備等の利用の利便性向上のため、大学連携研究設備ネットワーク事業を継続的に実施するとともに、対象とする分野の拡大に向け事業を推進する。さらに、技術職員の育成に向けた研修等を通して、機関の枠を超えた技術者支援を実施し、大学も併せた研究基盤の強化を図る。

評価指標	[19-1] 登録数3,000件以上を維持する。 [19-2] 第4期中期目標期間において、計60回以上の技術講習会（研修動画の活用を含む）を開催する。
------	--

- [20] 各機関・センターにおいて、ユーザーのニーズを把握しつつ、研究設備の高度化、利用の利便性の向上を図ることによって、共同利用・共同研究機能を強化し、優れた研究成果を上げる。

評価指標	[20-1] 本機構において年間2設備以上を高度化する（遠隔化、自動化など）。
------	---

- [21] 生命科学における重要なツールである電子顕微鏡（Cryo-EM・3D-SEM）、光学顕微鏡（二光子・超解像）、MRI（7T・Dual）について、アップデートした機器の提供、国内外ネットワークとの連携による協力、関連機器の複合的利用の促進等により、ユーザーの利便性を高め、分子・細胞レベルから神経回路・個体レベルまでの多階層を総体としてシームレスにカバーするイメージング共同研究を推進する。
- また、動物資源共同利用研究センターについて、動物の飼育に留まらず、多階層生理機能の解析のための場所、装置、技術、及びバイオリソースの提供を行うことによりユーザーの利便性を高め、共同利用研究を新たに実施する。

評価指標	[21-1] 7T-MRI の共同利用率の年平均値 75% を維持する。 [21-2] 3D-SEM をアップデートし、第 4 期中期目標期間中早期にユーザーの利用に供することにより、共同利用研究件数の年平均値 15 件を維持する。 [21-3] 位相差を含む低温電子顕微鏡を用いた共同利用研究の実施件数の年平均値 6 件以上を達成する。 [21-4] 動物資源共同利用研究センターを利用した共同利用研究を開始し、初年度の年間実施件数を基準として、第 4 期中期目標期間の 6 年間で 20% 以上の増加を達成する。
------	---

- [22] 幅広いアプローチ（BA）活動等の国家事業において整備されつつある、時代の先端を行く高度な大型機器を、大学と共同利用することにより、世界最先端の研究を実施するとともに、上記国家事業の成就に貢献する。

評価指標	[22-1] 共同研究の拡充等による、BA 活動等の国家事業に関する共同研究の実施課題数と参加大学数を、第 4 期中期目標期間中に第 3 期中期目標期間末（令和 3 年度実績 7 課題・9 大学）と比べて 1.5 倍以上とする。 [22-2] 共同研究により大学及び核融合科学研究所から BA 活動等の国家事業への貢献を明記した論文の発表数を、第 4 期中期目標期間中に第 3 期中期目標期間末（参考：令和 2 年度実績 5 編）と比べて 1.5 倍以上とする。
------	--

- [23] 共同利用率の高い UVSOR の計測機器や各分野において世界トップクラスの性能を持つ当該分野専用のスーパーコンピュータ等の高度化を通して、共同利用機能の更なる充実を図るとともに大学の研究力強化に資する。

評価指標	[23-1] UVSOR については、世界トップクラスの光電子運動量顕微鏡（スピン状態イメージングを可能とする実機）を開発し、第 4 期中期目標期間終了時までに国際的な協力研究を 3 件以上行う。 [23-2] 分野に特化した専用のスーパーコンピュータについては、第 4 期中期目標期間前半に更新を行い、実アプリケーション実行性能を 2 倍以上とする。 [23-3] スーパーコンピュータの計算資源の共同利用率を第 3 期中期目標期間と同じ高水準（100%）に維持する。
------	---

- [24] 機構内各分野において共同利用・共同研究で得られたデータを収集・保有・維持する方針を決定・運用する。運用に当たっては大学共同利用研究教育アライアンスを通じて情報システム研究機構のデータサイエンス共同利用基盤施設等との連携を図り、分野の特徴にあったデータ解析手法の開発を進める。共同利用・共同研究で得られたデータをもとに、その学術的価値と研究データ管理等を鑑みた保管や公開・提供、利活用等について検討を行い、データ駆動型サイエンスやオープンサイエンスへの活用も含めた運用や体制を整える。

評価指標	[24-1] 令和 5 年度末をめどに機構内各分野において共同利用・共同研究で得られたデータを収集・保有・維持する方針を決定し、収集を開始する。第 4 期中期目標期間終了時までにデータマイニング等による新たな知見を獲得する。
------	--

- [25] 貴重な生物資源の保存活動として大学連携バイオバックアッププロジェクト（IBBP）を運営し、国内外の研究者コミュニティに持続的かつ発展的に共同利用・共同研究の機会を提供する。また、研究者コミュニティの要望に応え、ナショナルバイオリソースプロジェクトを適切に受け入れる。さらに、バイオイメージング技術や次世代シーケンス等より生み出される膨大なデータを格納するサーバーとネットワーク環境等の整備を行い、共同利用・共同研究を推進する。

評価指標	[25-1] IBBP は毎年 80 件の取扱件数を維持する。 [25-2] ナショナルバイオリソースプロジェクトを毎年 4 件受け入れる。
------	---

- [26] 高温核融合プラズマから低温応用プラズマ、天体プラズマ等のあらゆるプラズマ現象の共通基礎過程である原子分子素過程を記述する基礎的な原子分子データを基礎研究による生産と検証によって整備・充実させ、データ登録数が世界トップクラスである衝突断面積等数値データベースを強化する。これらを活用した学際的なプラズマ研究、異分野融合研究を国内・国際的共同研究として展開、推進する。

評価指標	[26-1] 原子分子データベースに登録されているデータ件数を、第 4 期中期目標期間中に第 3 期中期目標期間末（参考：令和 2 年度実績 822,961 件）と比べて 10% 以上増加させる。また、データベースへのアクセス数を、第 3 期中期目標期間の水準（年間平均アクセス数 2,345 回）以上とする。 [26-2] 原子分子データに関連する共同研究課題数及び共同研究による共著論文数を、第 4 期中期目標期間中に第 3 期中期目標期間実績から 5% 以上増加させる。
------	---

- [27] 研究コミュニティの中核として、新たな課題に対応するための研究者グループの組織化等を支援・促進するため、DX プラットフォームを活用したエビデンス（IR）に基づくマッチング方式を導入し、特に、大学との協働による機関・分野を超えた異分野融合・新分野創成研究、他分野との協働による他分野の手法を取り入れた従来にない先端研究を促進する。実施に当たってはオープンラボ、分野融合型共同研究事業等を活用する。

評価指標	[27-1] DX プラットフォームを活用したマッチング方式を導入し、第 4 期中期目標期間中に 20 件のグループを形成する。 [27-2] 同方式により形成されたグループの共同研究を第 4 期中期目標期間中に 10 テーマ以上採択する。
------	---

- [28] 組織的連携の拡充、クロスアポイントメント・サバティカル・在籍出向等による人的交流の拡大等により、大学等との組織間ネットワークを発展させる。特に「自然科学大学間連携推進機構（NICA）」についてはアライアンスのもとで展開し、参画大学数を拡大させる。NICA を含む国内外のネットワーク事業は、各機関において既に形成されたものをベースにその拡充を図る。特にマルチメッセンジャー天文学やバイオイメージングにおいて海外との連携を一層強化する。

評価指標	[28-1] クロスアポイントメント実施件数を第 3 期中期目標期間実績（令和 3 年度実績 18 名）の 1.2 倍以上とする。 [28-2] 現存の国内外のネットワーク事業 9 件について、その参画機関数を第 3 期中期目標期間以上に増加させる。 [28-3] ネットワーク形成に向けた勉強会・ワークショップを第 4 期中期目標期間中に 30 回以上実施する。
------	--

- [29] 異分野融合の促進、強みのある分野の更なる強化等をも視野に入れ、共同利用・共同研究拠点との連携による共同利用・共同研究機能のネットワーク化を推進する。

評価指標	[29-1] 現在は構築されていない、共同利用・共同研究拠点との連携による共同利用・共同研究機能のネットワーク化を、第4期中期目標期間中に2件以上実施する。
------	--

- [30] 国際交流協定等に基づき、国際的な研究者交流事業や共同研究事業を推進するとともに、特に競争力の高い海外の研究機関との連携構築を戦略的に推進している国際連携研究センター（IRCC）において、世界的戦略事業を促進する。海外の研究機関との連携構築の一環として実施しているドイツ学術交流会を介した研究者交流事業を継続し、国際共同研究を支援する。

評価指標	[30-1] 国際共著論文の割合 57.4% 以上。 [30-2] 第4期中期目標期間最終年度における国際共同研究実施件数について、第3期中期目標期間末（参考：令和2年度実績 248 件）での実績を上回る。 [30-3] 第4期中期目標期間における国際協定数について、第3期中期目標期間での実績（参考：令和2年度実績 105 件）を上回る。
------	--

3 教育・人材育成に関する目標を達成するための措置

- [31] 大学共同利用機関が保有する、大学にはない最先端の大型機器やスーパーコンピュータ等、大学共同利用機関でしか供することのできない研究設備・資料、大学では不可能な複数の指導教員、非常に頻繁に行われている国際共同研究・各種の国際研究集会・国際人材交流等、大学にはない優れた研究環境を総合研究大学院大学（総研大）の教育に提供して、総研大の特色ある学位プログラムの遂行を支援し、世界の第一線で活躍できる自立した研究者を育成する。受入れ学生に対し、国際的な研究集会に派遣することなどを実践し、幅広い国際的な視野を持つ人材の育成を図るとともに、リサーチアシスタント制度等により支援する。また、これらの施策について社会に分かりやすく発信し、優秀な総研大生の獲得につなげる。

評価指標	[31-1] 本機構所属総研大生に対し、全ての学生が在籍中に1回以上国際会議・ワークショップ等へ派遣されることを支援する。 [31-2] 国費の支援を受けた学生以外の学生に対するリサーチアシスタント制度の適用率を90%以上に維持する。
------	--

- [32] 大学院教育の充実に貢献するため、特別共同利用研究員制度、連携大学院制度、インターンシップ制度等により、国内外の学生等を積極的に受け入れる。また、総研大生に独自に供しているものと同じ研究環境のもとで教育研究を実施し、世界の第一線で活躍できる若手研究者を育成する。

評価指標	[32-1] 以下の項目に関し、いずれも第4期中期目標期間最終年度において、第3期中期目標期間末での実績を上回ること。 ・特別共同利用研究員制度、連携大学院制度等による受入学生数（令和3年度実績 90 人） ・国外インターンの受入数（参考：令和2年度実績 6 人）
------	--

- [33] ポストドクター等の若手研究人材の育成の一環として、分野を超えた研究を促進するための支援を行う。機構のコアコンピタンスとなる優秀な研究者を育てるとともに、PIとして大学へ輩出することを推奨することで流動化を促進し、大学の研究力強化にも貢献する。また、研究活動を支援する URA など高度専門人材を育成するための研修を行う。

評価指標	[33-1] 若手研究者を PI とした分野を超えた共同研究を第4期中期目標期間中に60件以上実施する。 [33-2] URA など高度専門人材向け研修を第4期中期目標期間中に6回以上実施する。
------	--

4 社会との共創に関する目標を達成するための措置

- [34] 本機構の研究シーズの発信等や産業界等との交流の場を設けることにより、産業界の理解を深めるとともに、産業界との連携を強化する。民間企業等との組織対組織の包括的な協定を締結し、その協定のもとで連携して共同研究及び人材育成を実施する。また、知的財産の戦略的活用を鑑み、研究者に対する産学連携研修を実施する。

評価指標	[34-1] 産業界等との交流の場を第4期中期目標期間中に12回以上実施する。 [34-2] 機構の有する研究成果を活用し、社会実装につなげるため、第4期中期目標期間終了までに、民間企業等との組織対組織の包括的な協定を1件以上締結し共同研究を行う。 [34-3] 第4期中期目標期間において、新たに研究者に対する産学連携研修を実施する（1回以上/年）。
------	--

5 その他教育研究の質の向上に関する重要事項に関する目標を達成するための措置

- [35] 研究活動をグローバル・アジェンダに結びつけるため、学術研究の進化に加え、社会的ニーズや地球規模の課題解決に向けた基礎研究の可能性を強く展開する必要がある。そのため、従来の研究領域の枠組みを越えて新たな研究領域を開拓する新分野創成に加え、共同利用・共同研究で得られたデータの分析等を「知る」から「利活用」へと進化させ、研究課題や社会課題へ対応する基盤の創出、次世代研究への発展に向けた分野融合総合知の検討等を集結することにより、新分野創成センターを改組し、研究の進化展開を推進する。

評価指標	[35-1] 令和4年度に新分野創成センターを再構築し、「知の共創センター（仮称）」として新たな体制を整備する。令和5年度までに、「知の共創センター（仮称）」に「Research Commons 部門（仮称）」を設置し、共通基盤手法の検討を開始する。第4期中期目標期間終了までに、検討・開発を行った共通基盤手法について検証・評価を行う。
------	--

- [36] 4 大学共同利用機関法人と総合研究大学院大学が設立する一般社団法人「大学共同利用研究教育アライアンス」を活用し、大学執行部との対話、異分野融合研究促進、共同利用・共同研究成果の活用、各種研修の共通化、等について取り組む。

評価指標	[36-1] 「大学共同利用研究教育アライアンス」において以下の活動成果を上げること。 ・現在の NICA の事業をアライアンスの「大学連携プラットフォーム」を通じて展開し、参画大学数を13機関から拡大する。 ・異なる分野の研究者の交流の場を年1回企画・実施する。 ・全国の大学の研究者を対象とした「分野融合型共同研究」を実施し、年間10件程度の課題を採択し支援する。 ・機構の共同利用・共同研究で得られた成果等のデータを IR 用としてアライアンスに提供し、その結果をステークホルダーである大学に発信する。 ・4 機構で共通する課題に対する研修をアライアンスのもとで連携して行い業務の効率化を図る。
------	---

II 業務運営の改善及び効率化に関する目標を達成するためにとるべき措置

- [37] 内部統制の機能の実質化を図るため、研究力強化推進本部の体制を充実させ、機構全体として施策の統制された円滑な実施を図る。また、機構内広報誌「NINSBulletin」を充実させ、機構内の情勢の他、機構を取り巻く情勢、機構・機関執行部の方針等を、機構全体に正確に伝達する。常設されている機構長選考・監察会議については、外部の知見を法人経営に生かすための仕組みとする。さらに、学界以外からの人材を法人経営に参画させる。これらにより、機構長のリーダーシップのもとで、内部統制のとれた強靱なガバナンス体制を構築する。

評価指標	[37-1] 機構の研究力強化における機構長のガバナンスを強化するため、機構長が本部長を務める研究力強化推進本部において以下の改変を行う。 ・機構全体の研究の方向性を決定する「企画戦略室」を令和4年度に新たに設置する。 ・同室の下にURAをリーダーとする6つの戦略チーム（共同利用・共同研究、研究・経営戦略分析、ダイバシティ推進、アウトリーチ、外部連携、国際連携）を配置する。（令和5年度までに完了） ・6つの戦略チームは横断的に各機関の戦略室と連携し、機関内の研究戦略に反映、これを支援する。 [37-2] 第4期中期目標期間中に研究者コミュニティに属していない民間企業経験者による外部理事を1名登用する。 [37-3] 機構内広報誌「NINS Bulletin」を第4期中期目標期間中に24回以上発行する。 [37-4] 機構長選考・監察会議の委員は、全員を外部委員とする。
------	---

- [38] 各機関、機構本部が開催する、運営会議、経営協議会、教育研究評議会は、各分野の研究者コミュニティを代表する委員が選出されていることから、これらの会議で、研究者コミュニティの意見を聞き、運営にフィードバックさせる。また、各機関は、関連する学会・主催する研究会等を利用して、研究者コミュニティの各層の意見を聞き、運営に活かす。運営会議、経営協議会、教育研究評議会の活性化に取り組み、これらの議事録を公開する。また、ホームページ、各種パンフレット、市民との対話等を活用して、積極的に運営状況の情報発信を行い、開かれた運営の推進を図る。

評価指標	[38-1] 運営会議等の所内委員割合が1/2以下であること。 [38-2] 運営会議、経営協議会、教育研究評議会の議事録を確定後30日以内に機構ホームページにて公開する。 [38-3] 経営協議会、教育研究評議会及び機構長選考・監察会議の外部委員からの指摘事項等への対応を毎年度5件以上行う。 [38-4] 機構ホームページの閲覧数が第3期中期目標期間の実績を上回ること。
------	---

- [39] 施設・設備の安全性・信頼性を確保し、所要の機能を長期間最大限発揮するため、インフラ長寿命化計画を核とした計画的な維持・保全・整備を行う。また、機構の施設マネジメント・ポリシーに基づき、使用状況・使用状態を把握・評価し、戦略的に、効率的かつ効果的なスペースの確保・運用・再配分を実現する。

評価指標	[39-1] 主要キャンパスの利用状況調査を年1回以上実施し、第4期中期目標期間終了までに共同利用スペースを保有面積の30%以上とする。 [39-2] インフラ長寿命化計画（個別施設計画）に基づき維持・保全・整備が実施されていること。
------	---

III 財務内容の改善に関する目標を達成するためにとるべき措置

- [40] 大きな社会情勢の変化を迎えたポスト・コロナ時代における新たな共同利用・共同研究体制の確立に向け、研究環境のリモート化、DX化を早急に進める。このための財源確保を目指し、機構本部、機関、研究者共に、新たな公的研究資金の提供に積極的に応募し、施設・設備の充実に努めるとともに、研究者の研究資金を確保する。公的資金のほか、産業界からの資金等の受入れを進めるとともに、専任の担当者を配置して、マーケティング調査等を実施し、寄附金の受け入れを促進する。また、効率的な資産運用や研究成果の活用促進のための出資等を通じて、財源の多元化を試み、自主的かつ安定的な資金の確保を目指す。併せて、研究の将来性を見据え、機能強化を図り研究成果を最大化するため、研究基盤戦略会議で策定した方針に従って、法人内及び機関内の資源配分の最適化を進める。

評価指標	[40-1] 令和2年度に立ち上げた基金を活用し、寄附金の獲得に関する専任担当者を配置して戦略的な寄附獲得方針を検討する。第4期中期目標期間終了までに、検討した方針に基づき新たな寄附金（基金創設に伴って可能となる現物寄附や遺贈等）を獲得する。これらにより、第4期中期目標期間中に、第3期中期目標期間実績（参考：令和2年度までの5年平均412,500,601円）を上回る寄附金収入を獲得する。 [40-2] 土地・建物の使用料収入及び寄附金等余裕金を活用した利息収入を第3期中期目標期間比（参考：令和2年度までの5年平均68,917千円）で10%拡大させる。 [40-3] 機構長裁量経費を令和3年度比（令和3年度実績1,375,975千円）で10%拡大させる。 [40-4] コンベンション施設等の保有施設の貸出件数を令和3年度比（参考：令和2年度実績17,756件）で10%拡大させる。
------	--

IV 教育及び研究並びに組織及び運営の状況について自ら行う点検及び評価並びに当該状況に係る情報の提供に関する目標を達成するためにとるべき措置

- [41] 各機関においては、第4期中期目標期間における事業等について、毎年自己点検を実施し、それを受けて国際的な外部評価を実施する。また、機構全体については、毎年中期目標・中期計画の自己点検評価を実施するとともにこれを公表する。さらに、令和7年度には4年間の総合外部評価を実施する。これらの評価により機構・機関の活動状況を可視化するとともに、外部の意見を取り入れ、評価結果等をエビデンスとして機構全体及び各機関の運営に反映させる。

評価指標	[41-1] 各機関において毎年自己点検を実施し、その結果を公表。また、第4期中期目標期間中に、各機関それぞれ1回以上、国際的な外部評価を実施する。 [41-2] 機構では毎年中期目標・中期計画の自己点検評価を実施し、その結果を公表。また、令和7年度に外部委員のみで構成された外部評価委員会にて4年間の総合外部評価を実施し、その結果を公表する。 [41-3] 評価結果等をエビデンスとした運営の改善・反映がされていること。
------	--

[42] 経営・運営方針や計画，その進捗状況，研究教育の成果と社会発展への貢献等は，ホームページや SNS 等のウェブコンテンツを活用することでより積極的に情報を配信する。また，大学・研究所等向け，一般市民向け，共同研究者向け，産業界向け等，各ステークホルダーに応じた情報の発信を行う。海外の研究者には，「EurekAlert!」を活用した海外プレス機関への情報配信を中心に，また，研究者に加えて，海外の市民にはホームページなどのウェブコンテンツ内の英語情報を充実させることで，機構への理解獲得に努める。マスコミへの情報発信は，発表機関が主催するプレス記者会見に加え，機構本部による統括の下，テレビ会議システムを活用したプレス記者会見の配信と，機構長プレス懇談会において最新の研究成果解説とプレス記者との密な質疑の場を設ける。特に社会的影響が大きい研究成果については，機関でのプレス発表後に詳細な成果の内容や，関連した研究成果を説明する講演・解説を実施する。

評価指標	[42-1] 以下の項目において，いずれも第3期中期目標期間での実績（平均値）を上回ること。 ・EurekAlert! 国際プレスリリース数（参考：令和2年度までの5年平均82件） ・EurekAlert! 上の総閲覧数（PageView）（参考：令和2年度までの5年平均174,219件） ・ウェブコンテンツの英語ページへのアクセス数（参考：令和2年度までの5年平均12,645アクセス） ・機構長プレス懇談会の参加記者数（参考：令和2年度までの5年平均11人）
------	--

[43] 近隣の科学館等で，市民との対話の会や講演会等を定期的 to 実施し，法人経営に対する理解・支持を獲得する。また，各機関の出前授業，施設公開等のイベントについても，機構本部が積極的に支援を行い，オンラインの活用などにより，各機関が協力・連携した情報発信を行うことができる体制を構築する。これにより，機構全体で理科教育を推進し，ひいては，市民の機構に対する理解・支持を獲得する。

評価指標	[43-1] 以下の項目において，いずれも第3期中期目標期間での実績（延べ数）を上回ること。 ・自然科学研究機構シンポジウム等機構が主催する講演会における参加者数（参考：令和2年度までの延べ数1,305人） ・オンライン開催のイベントにおけるオンライン視聴者数（参考：令和2年度までの延べ数10,433人） ・機構で公開しているアーカイブ動画の閲覧数（参考：令和3年10月時点の延べ数3,980回）
------	--

V その他業務運営に関する重要事項に関する目標を達成するためにとるべき措置

[44] これまで各機関が独自に進めてきた事務システムの効率化を，機関の枠を超え機構全体として一層推進する。この目標の達成のために，デジタル技術を活用して機構構成員の認証基盤を構築する。この認証基盤を背景に，クラウドソリューション等を用いて業務アプリケーションを機構全体で共通基盤化し，機構本部及び各機関がデジタル化に必要な業務運営体制を整備してアプリケーションの活用を進めることで，一層の事務処理の効率化とセキュリティリスクの低減を図る。

評価指標	[44-1] 既に機構全体で共用されている人事給与，財務会計システムに加え，現在は機関ごとに構築されている決裁，勤怠管理，法人文書管理などの業務システムが，令和6年度までに機構全体で共用できるものに統一化されていること。
------	---

9-9 自然科学研究機構分子科学研究所規則リンク集

自然科学研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則

<https://www.ims.ac.jp/rules/rule-012.pdf>

自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

<https://www.ims.ac.jp/rules/rule-003.pdf>

自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則

<https://www.ims.ac.jp/rules/rule-004.pdf>

分子研リポート 2024

現状・評価・将来計画

2025 年 9 月発行

大学共同利用機関法人 自然科学研究機構

分子科学研究所長 渡辺 芳人

編集責任者 解良 聡

