IMS 50th Anniversary



分子研リポート2025

現状・評価・将来計画

大学共同利用機関法人　自然科学研究機構
分子科学研究所

「分子研リポート 2025」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 11
2-4-9　主幹・施設長会議 12
2-4-10 各種委員会等 12
2-5　研究領域 16
2-6　研究施設 22
2-7　研究部門等 24
2-8　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　2025 年度の実施状況 48
3-1-3　共同利用研究実施件数一覧 63
3-1-4　各種研究会プログラム 64
3-2　国際交流，国際共同研究，研究会 73
3-2-1　外国人客員部門等及び国際交流 73
3-2-2　岡崎コンファレンス 78
3-2-3　日韓共同研究 82
3-2-4　国際共同研究事業の財源 83
3-2-5　分子研国際インターンシッププログラム（IMS-IIP） 84
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） 84
3-2-7　短期外国人研究者招へいプログラム 85
3-2-8　分子研コロキウム 85
3-3　各種事業 87
3-3-1　共創戦略統括本部（自然科学研究機構） 87
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） 88
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） 89
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 89
3-3-5　マテリアル先端リサーチインフラ ARIM（文部科学省） 92
3-3-6　ネットワーク型研究加速事業（自然科学研究機構） 105
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） 106
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） 107

４．研究活動の現状 109
4-1　論文発表状況 110
4-2　メゾスコピック計測研究センター 111
繊細計測研究部門 113
広帯域相関計測解析研究部門 117
4-3　協奏分子システム研究センター 121
階層分子システム解析研究部門 122
機能分子システム創成研究部門 135
4-4　理論・計算分子科学研究領域 140
理論分子科学第一研究部門 140
計算分子科学研究部門 144
4-5　光分子科学研究領域 158
光分子科学第二研究部門 158
光分子科学第三研究部門 168
光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設） 175
電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設） 180
光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設） 183
光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設） 189

4-6　物質分子科学研究領域.....193
電子構造研究部門.....193
電子物性研究部門.....202
分子機能研究部門.....207
4-7　生命・錯体分子科学研究領域.....209
生体分子機能研究部門.....209
錯体触媒研究部門.....222
錯体物性研究部門.....228
4-8　特別研究部門.....231
4-9　社会連携研究部門.....243
4-10 研究施設等.....249
機器センター.....249
計算科学研究センター（ネットワーク担当）.....253
技術推進部及び安全衛生管理室.....255
客員研究部門及び退職・転出後等の成果論文.....256

5．点検評価と課題.....259
5-1　国際諮問委員会による点検評価.....260

6．研究施設の現状と将来計画.....273
6-1　極端紫外光研究施設（UVSOR）.....274
6-2　機器センター.....276
6-3　装置開発室.....279
6-4　計算科学研究センター.....280
6-5　岡崎連携プラットフォーム.....282
6-6　生命創成探究センター.....283

7．大学院教育.....285
7-1　特別共同利用研究員.....286
7-2　総合研究大学院大学二専攻・コース.....287
7-3　オープンキャンパス.....292
7-4　短期インターンシップ.....293
7-5　総研大アジア冬の学校.....296

8．社会活動等.....297
8-1　社会との交流.....298
8-1-1　一般公開.....298
8-1-2　分子科学フォーラム.....298
8-1-3　市民向けシンポジウム.....299
8-1-4　見学者受け入れ.....301
8-1-5　その他.....301

8-2　理科教育への協力 303
8-2-1　スーパーサイエンスハイスクール 303
8-2-2　理数科（旧コスモサイエンスコース） 303
8-2-3　あいち科学技術教育推進協議会 304
8-2-4　国研セミナー 304
8-2-5　小中学校での出前授業 304
8-2-6　職場体験学習 305
8-2-7　その他 305
8-3　情報発信 307
8-4　産学連携 314

9．資　　料 315
9-1　歴代所長 315
9-2　運営顧問 316
9-3　外国人運営顧問 317
9-4　研究顧問 318
9-5　産学連携研究アドバイザー 319
9-6　運営会議委員 320
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 323
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 325
9-9　自然科学研究機構分子科学研究所規則リンク集 332

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。

このリポートには, 2025 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，2025 年度も多くの人事異動がありました。4 月 1 日付けで金安達夫教授（極端紫外光研究施設），清水亮太教授（物質分子科学研究領域）が赴任され，クロスアポイントメントの澤井仁美准教授が大阪公立大学教授昇任，畑中美穂准教授が慶應義塾大学教授昇任に伴い，それぞれ教授に昇任されました。9 月 1 日には Lustikova Jana 特任講師（物質分子科学研究領域）が赴任され，クロスアポイントメントにより 2026 年 1 月 1 日付けで吉田朋子教授（名古屋大学）が赴任されました。また，3 月 31 日付けで岡本裕巳教授（メゾスコピック計測研究センター）と横山利彦教授（物質分子科学研究領域）が定年を迎えられました。。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こられたことに感謝するとともに，新たな職場での活躍を期待し，分子研にも所外から御貢献いただけるようお願い申し上げます。

研究顧問をお勤めいただいている 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ポ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，2025 年 5 月 13 日－ 14 日に開催された IMS Presentations 2025（全ての研究室主宰者から提示される 2025 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と Misha Bonn マックスプランク研究所教授には，2025 年 9 月 30 日－ 10 月 2 日に生命・錯体分子科学研究領域を中心に，物質分子科学，理論・計算科学研究領域および UVSOR に新たに赴任された教員の研究活動評価を実施していただきました。引き続き 10 月 3 日には，両人に加えて菊池 昇博士（トヨタコンポン研所長），James M. Lisy イリノイ大学教授には分子研においで頂き，David A. Leigh マンチェスター大学教授と Matthias Weidemüller ハイデルベルグ大学教授にはオンラインで参加頂き，分子研の研究活動や運営に関する国際諮問会議を開催しました。

2025 年度は 4 月 22 日に分子研創立 50 周年記念式典・祝賀会を開催し，塩見みづ枝文部科学省研究振興局長，杉山直名古屋大学総長をはじめとして 300 名を越える皆様にご参加頂きました。また，昨年ノーベル化学賞を受賞された北川 進京都大学理事・特別教授に，「The Magic of Small Spaces――ナノ空間と材料化学が紡ぐ 50 年の物語――」と題した特別講演をして頂きました。

2026 年 3 月
自然科学研究機構
分子科学研究所　所長
渡辺　芳人

2．分子科学研究所の概要

2-1　研究所の目的

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

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

2-2　沿　　革

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

1965. 12.13　日本学術会議は，「分子科学研究所」（仮称）の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。

1973. 10.31　学術審議会は,「分子科学研究所」（仮称）を緊急に設立することが適当である旨, 文部大臣に報告した。

1974.　4.11　文部大臣裁定により，東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室（室長：井口洋夫前東京大学物性研究所教授，定員 3 名）及び分子科学研究所創設準備会議（座長：山下次郎前東京大学物性研究所長，学識経験者 35 人により構成）が設置された。

1974.　7.　6　分子科学研究所創設準備会議において，研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。

1975.　4.22　国立学校設置法の一部を改正する法律（昭 50 年法律第 27 号）により「分子科学研究所」が創設され，初代所長に赤松秀雄前横浜国立大学工学部長が任命された。同時に，分子構造研究系（分子構造学第一研究部門，同第二研究部門），電子構造研究系（基礎電子化学研究部門），分子集団研究系（物性化学研究部門，分子集団研究部門），機器センター，装置開発室，管理部（庶務課，会計課，施設課，技術課）が設置された。

1975. 12.22　外国人評議員の設置が制度化された。

1976.　5.10　理論研究系（分子基礎理論第一研究部門, 同第二研究部門), 相関領域研究系（相関分子科学研究部門），化学試料室が設置された。

1976. 11.30　実験棟第 1 期工事（5,115 m^2）が竣工した。

1977.　4.18　相関領域研究系相関分子科学研究部門が廃止され，相関領域研究系（相関分子科学第一研究部門，同第二研究部門），電子計算機センター，極低温センターが設置された。

1977.　4.　大学院特別研究学生の受入れが始まる。

1977.　5.　2　国立学校設置法の一部を改正する法律により生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所，生理学研究所）が設置されたことに伴い，管理部を改組して分子科学研究所管理局とし，生物科学総合研究機構の事務を併せ処理することとなった。管理局に庶務課，人事課，主計課，経理課，建築課，設備課，技術課が置かれた。

1978.　3.　7　分子科学研究所研究棟（2,752 m^2）が竣工した。

1978.　3.11　装置開発棟（1,260 m^2），機器センター棟（1,053 m^2），化学試料棟（1,063 m^2）が竣工した。

1978.　4.　1　電子構造研究系に電子状態動力学研究部門，電子構造研究部門が，分子集団研究系に基礎光化学研究部門が設置された。

1979.　3.　1　電子計算機センター棟（1,429 m^2）が竣工した。

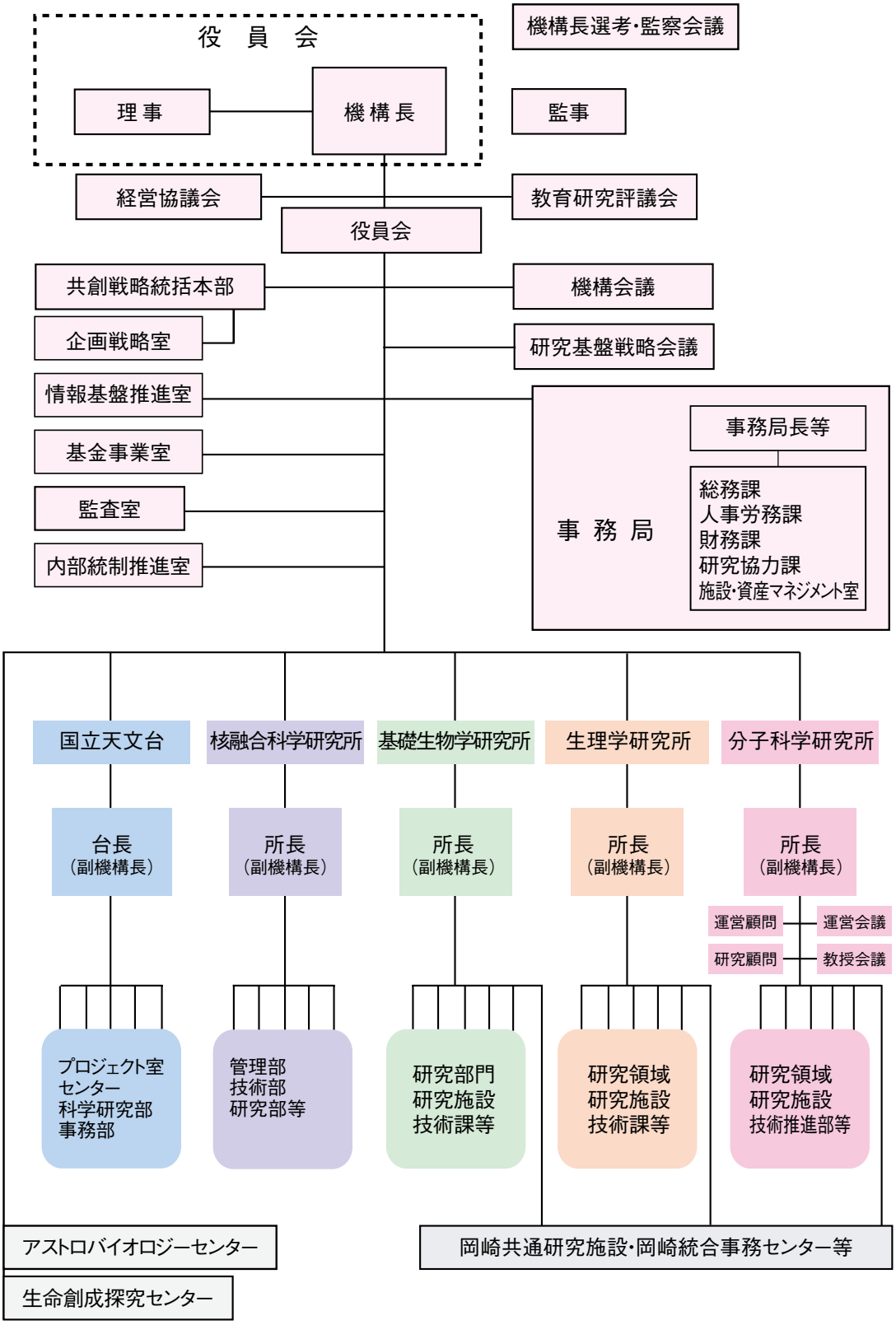
1979.　3.24　実験棟第 2 期工事（3,742 m^2），極低温センター棟（1,444 m^2）が竣工した。

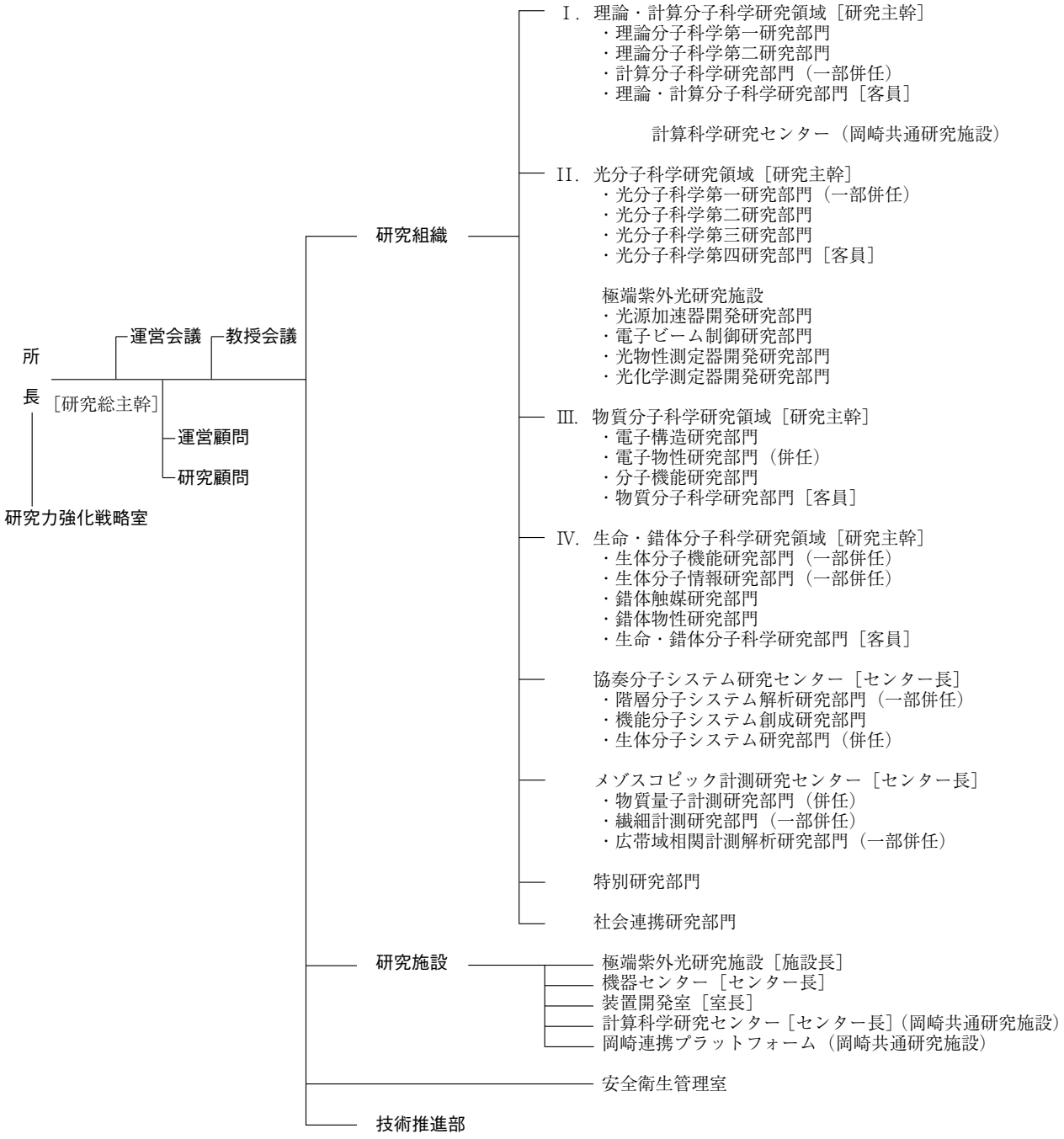
1979. 4. 1　分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され，管理局が総務部（庶務課，人事課，国際研究協力課），経理部（主計課，経理課，建築課，設備課），技術課に改組された。
1979. 11. 8　分子科学研究所創設披露式が挙行された。
1981. 4. 1　第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4.14　国立学校設置法の一部を改正する法律により，分子科学研究所と生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所，生理学研究所）は統合され，岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され，管理局が岡崎国立共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

2004. 3. 1　山手 5 号館（NMR）（664 m^2）が竣工した。
2004. 3. 8　山手 3 号館（統合バイオサイエンスセンターなど）（10,757 m^2）が竣工した。
2004. 4. 1　国立大学法人法により，国立天文台，核融合科学研究所，基礎生物学研究所，生理学研究所，分子科学研究所が統合再編され，大学共同利用機関法人自然科学研究機構が創設された。岡崎国立共同研究機構管理局が，大学共同利用機関法人自然科学研究機構岡崎統合事務センターとなり，総務部（総務課，国際研究協力課），財務部（財務課，調達課，施設課）に改組された。
2004. 4. 1　理論研究系が理論分子科学研究系に改組された。計算分子科学研究系（計算分子科学第一研究部門，計算分子科学第二研究部門，計算分子科学第三研究部門）が設置された。分子スケールナノサイエンスセンターに，先導分子科学研究部門が設置され，界面分子科学研究部門，分子クラスター研究部門が廃止された。極端紫外光実験施設が，極端紫外光研究施設に改組された。安全衛生管理室が設置された。
2004. 4. 1　第六代研究所長に中村宏樹分子科学研究所教授が任命された。
2005. 5.20　分子科学研究所創設 30 周年記念式典が挙行された。
2007. 4. 1　研究系及び錯体化学実験施設が廃止され，理論・計算分子科学研究領域（理論分子科学第一研究部門，理論分子科学第二研究部門，計算分子科学研究部門，理論・計算分子科学研究部門），光分子科学研究領域（光分子科学第一研究部門，光分子科学第二研究部門，光分子科学第三研究部門，光分子科学第四研究部門），物質分子科学研究領域（電子構造研究部門，電子物性研究部門，分子機能研究部門，物質分子科学研究部門），生命・錯体分子科学研究領域（生体分子機能研究部門，生体分子情報研究部門，錯体触媒研究部門，錯体物性研究部門，生命・錯体分子科学研究部門）の４つの研究領域が設置された。極端紫外光研究施設に，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。
2025. 4.22　分子科学研究所創立 50 周年記念式典が挙行された。
2025. 10. 8　分子科学研究所研究顧問北川 進京都大学理事・副学長，高等研究院特別教授がノーベル化学賞を受賞した。

2-3　組　　織

大学共同利用機関法人自然科学研究機構





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

2-4 運　　営

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

2-4-1　運営顧問

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

自然科学研究機構では創設準備の段階から各研究所の自律性を保つことを基本原則として，機構憲章を作成した。その精神に基づき，上記①，②の機能は法律上の組織だけに任せるのではなく，各研究所別に適切な内部組織を置くことになった。ただし，機能①については，所長の諮問組織で審議するのは不適当なため，形式的には機構長の諮問組織的な位置付けで，その都度，各研究所別に大学共同利用機関長選考委員会を設置することにした。その委員は教育研究評議会と経営協議会の機構外委員も候補に加えて，機構外から機構長によって選ばれる。一方，機能②については必要に応じて各研究所で適当な内部組織（所長の諮問組織）を構成することになった。その結果，分子科学研究所では運営顧問制度（外国人評議員に代わる外国人運営顧問も含む）を発足させた。第一期中期計画期間（2004 年度～ 2009 年度）の 6 年間の運営顧問は国内 4 名，海外 2 名で運用，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（2025 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	東北大学副理事／研究推進部ナノテラス共創推進課特任教授
	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（2025 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（2025 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（2025 年度）

菊池　昇	株式会社トヨタコンポン研究所代表取締役所長
福田　伸	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	九州大学先導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
　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
　斉藤　真司　　理論・計算分子科学研究領域教授
　松井　文彦　　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はいるが，法制化された任期があるわけではない。なお，1999 年 1 月から法人化直前の 2004 年 3 月までに採用された助教（2003 年 4 月以前は研究系の助教だけ）には 6 年の任期（法制化された任期）と 3 年ごとの再任が規定されたが，法人化による見直しによって，6 年の任期を越えて勤務を継続する場合は再任手続きを経たのち，任期のない助教に移行した。

人事選考部会委員（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	（京大教授）	◯魚住　泰広	（分子研教授）
須藤　雄気	（岡山大院教授）	斉藤　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）	椴山　儀恵	（分子研准教授）

2-4-7　学会等連絡会議

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

学会等連絡会議構成員（2025 年度）

【所外委員】

（日本化学会推薦）

北川　尚美	（東北大院教授）	佐藤　一彦	（産総研材料・化学領域長補佐）
馬場　嘉信	（量研機構量子生命科学研所長）		

（日本物理学会推薦）

虻川　匡司	（東北大教授）	岡　隆史	（東京大教授）
間瀬　一彦	（高エネルギー加速器研究機構教授）		

（日本放射光学会推薦）

佐藤　友子（-2025.9）	（高エネルギー加速器研究機構特別准教授）	熊井　玲児（2025.10-）	（高エネルギー加速器研究機構教授）

（錯体化学会推薦）

柘植　清志	（富山大教授）

（分子科学会推薦）

加納　英明	（慶應義塾大教授）	根岸　雄一	（東北大教授）
長谷川　淳也	（北海道大教授）	細越　裕子	（大阪公立大院教授）

（日本生物物理学会推薦）

中林　孝和	（東北大院教授）

【所内委員】

秋山　修志	（分子研教授）	山本　浩史	（分子研教授）
解良　聡	（分子研教授）	瀬川　泰知	（分子研准教授）
斉藤　真司	（分子研教授）		

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	2025.5.26
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	2025.8.22, 2026.3.9
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	2025.8.19, 2026.2.24–3.5 （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	2025.12.11, 2026.3.23–27 （メール審議）

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	−
図書委員会	購入図書の選定。他	（原則） 各研究領域から各 1 施設から必要数		−
ネットワーク委員会	情報ネットワークの維持，管理運営。			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 戦略室広報担当 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	2025.4.4, 6.6, 7.25, 10.2, 12.5, 2026.2.6
利益相反委員会	研究所構成員の利益相反に関する事項。	所長，研究領域及び研究施設の研究教育職員若干名，岡崎共通研究施設の研究教育職員若干名，技術推進部長	委員会規則	−
大学院委員会	総合研究大学院大学の運営に関する諸事項，学生に関する諸事項等の調査審議を行い，その結果を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		2025.5.2, 7.4, 10.1, 11.7, 12.5, 2026.1.6, 3.6
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	2025.4.15, 5.20, 6.17, 7.14, 8.28, 9.16, 10.21, 11.18, 12.16, 2026.1.21, 2.17, 3.17
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	2025.7.22（オンライン開催）
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	2025.5.23, 2026.3.23
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	2025.6.20, 2026.3.9

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	2025.7.29, 10.28–11.5 （メール審議）， 2026.1.23
岡崎 3 機関安全衛生委員会	岡崎 3 機関の安全衛生に関し必要な事項について審議する。	安全衛生統括代表者 1 安全衛生管理者 2 職員 2	委員会規則	2025.4.15, 5.20, 6.17, 7.15, 8.19, 9.16, 10.21, 11.18, 12.16, 2026.1.20, 2.17, 3.17 ※ 3.17 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	2025.6.17–23 （メール審議）， 10.20, 2026.2.4
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	2025.7.8, 8.21–27 （メール審議）， 12.3, 2026.2.12, 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	2025.9.5, 2026.3.18
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	2025.7.17, 12.9–18 （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	2025.6.16, 2026.2.27
岡崎連携プラットフォームスピン生命科学コア運営委員会	スピン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	2025.7.9
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	2025.4.1–4 （書面審議）， 4.9–11 （書面審議）， 2025.4.21, 5.14（オンサイト開催）， 2026.1.23 （オンライン開催）， 2026.3.10–17 （書面審議）

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	2026.3.19–30（メール審議）
岡崎山手地区連絡協議会	岡崎山手地区における建物の円滑な管理及び環境整備等を協議する。	教授 2 技術推進部長	協議会規則	2025.4.25, 7.2, 9.3, 11.5, 2026.3.4
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	2025.10.16, 2026.3.3
岡崎情報公開委員会	「独立行政法人等の保有する情報の公開に関する法律」を円滑に実施するため。	所長又は研究総主幹 教授 1	委員会規則	–
生命倫理審査委員会	機構における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	随時持ち回り審議

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，計算・情報科学に基づき，分子および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　　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理論・計算科学的研究

研究課題　1，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，物性や反応を光で制御すること，及びそれに必要となる高度な光源を開発することを目的とする

光分子科学第一研究部門

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

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

光分子科学第二研究部門

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

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

光分子科学第三研究部門

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

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

光分子科学第四研究部門（客員）

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

研究課題　1，電気化学反応や触媒反応の変換場における局所構造と電子状態の研究

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

電子構造研究部門

研究目的　分子・物質材料の物理的・化学的新機能と機構解明

研究課題　1，物質科学・表面科学のための新しい分光学的計測手法の開発

2，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，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，無機薄膜を活用した物質・界面における新奇電子物性・イオン輸送特性の探索

2，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エアの開発

物質分子科学研究部門（客員）

研究目的　物質分子科学のコミュニティ交流を通した新しい先端的研究分野の開拓

研究課題　1，動的電子状態制御に基づく分子スピン Qubit の合理的分子設計

2，炭素資源循環に資する高機能不均一系触媒の開発

3，分子性強相関物質を用いた相転移デバイスの研究

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が示す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，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

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

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タンパク質の構造解析

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，DNA ナノテクノロジー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，高反応性化学種を用いたタンパク質の化学修飾

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

機器センター

目　的　　機器センターは，新規物質開発を行う上で基盤設備となる汎用物性測定装置，汎用化学分析装置，及び汎用分光計測装置を集中管理し，さらに，先端機器の開発と冷媒の供給管理を担当することにより，研究所内外の共同利用に資することを目的としている。共同利用としては協力研究を通して利用する形態と施設利用の二種類がある。また，大学連携研究設備ネットワークの幹事機関を担い，さらには，2021年度からは文部科学省受託研究マテリアル先端リサーチインフラ事業の「マテリアルの高度循環のための技術」領域にスポーク機関として参画し，2022～2024年度の間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を務め，本国家プロジェクトの設備共用・DX拠点を担っている。

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

3，分子科学研究所を定年後も研究継続に十分な研究資源を有しており，研究グループの自走運営が可能な研究者に対して，特任教授として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

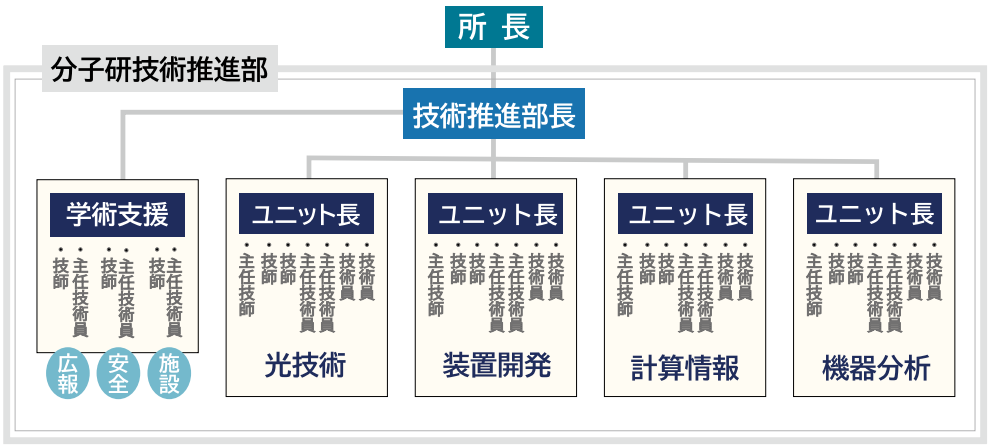
2-8　研究支援部門等

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 2025 年 4 月 1 日現在で 36 名である。技術職員は，主に研究施設に配属され，それぞれの持つ高い専門技術で研究教育職員と協力し，先端的かつ独創的な研究を技術面から支え，大学共同利用機関の使命を果たすために努力している。各施設に配属された技術職員の対応する技術分野は広範囲にわたっている。機械，電気，電子，光学，情報，といった工学知識や各要素技術の技能を基に支援業務として実験機器の開発，システム開発等を行い，物理・化学・生命科学を基に物質の構造解析や化学分析等を支援している。この様に技術職員の持っているスキルを活用し，UVSOR やスパコン，レーザーシステム，X 線回折装置，電子顕微鏡，ESR，SQUID，NMR など大型設備から汎用機器の維持管理, 施設の管理･運用も技術職員の役割としている。さらに, 科学の知識を基に研究所のアウトリーチ活動も職務として担い, 広報に関する業務, 出版物の作成も行っている。所内の共通業務としてネットワークの管理･運用，安全衛生管理も技術推進部の業務として行っている。安全衛生管理では，研究所の性質から毒物・劇物・危険物など薬品知識や低温寒剤等高圧ガスの知識，放射線管理，その他技術的な側面から毎週職場巡視を行い，分子研の安全衛生管理に寄与している。

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



(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，開催日，分科会及び開催方式を示す。

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
2025	埼玉大学	2025 年 9 月 4–5 日	顕微鏡，磁気共鳴，X 線回折，質量分析，有機微量元素分析，分光分析，熱分析，その他分析装置，研究サポート機器，その他	オンサイト開催
	核融合科学研究所	2026 年 3 月 5–6 日	工作技術，装置技術，計測・制御技術，極低温技術，情報・ネットワーク技術	オンサイト開催

(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
2025	8

表 3　2025 年度技術研修受入状況（2025.4.1 ～ 2026.3.31）

氏　　名	所　　属	受入期間	備　　考
太田　紘志	高輝度光科学研究センター	2025.4.10 ～ 11	光技術研修
太田　紘志	高輝度光科学研究センター	2025.7.27	光技術研修
渡辺　壮	東北大学	2026.1.26 ～ 1.30	電子回路技術研修
児玉　孝憲	東北大学	2026.1.26 ～ 1.30	電子回路技術研修
小森　和樹	東北大学	2026.1.26 ～ 1.30	電子回路技術研修
上石　正樹	東北大学	2026.1.26 ～ 1.30	電子回路技術研修
千葉　寿	岩手大学	2026.2.5 ～ 2.6	電子回路技術研修
庄司　愛子	岩手大学	2026.2.5 ～ 2.6	電子回路技術研修

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

今年度，化学物質管理システム CRIS のバージョンアップを実施した。このバージョンアップにより，新しい法規への対応やリスクアセスメント機能が導入された。2016 年に労働安全衛生法が改正され，多くの化学物質について事業場におけるリスクアセスメントが義務付けられたことから，その重要性はますます高まっている。今回，CRIS にリスクアセスメント機能を導入したことにより，より迅速かつ正確に化学物質のリスク見積もりが可能になると期待される。

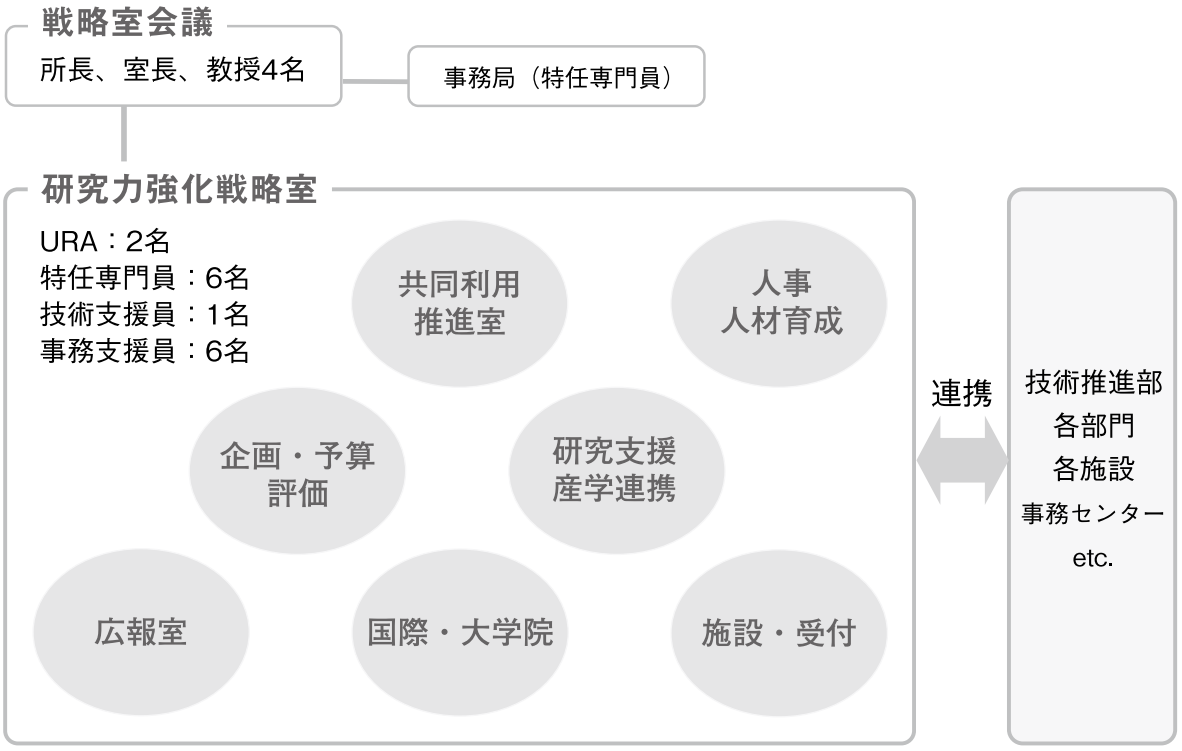
2-8-3　研究力強化戦略室

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，2025 年度現在で URA 職員 2 名，

特任専門員 6 名，事務及び技術支援員 7 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
青野　重利	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
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
藥師　久彌	名誉教授
吉原　經太郎	名誉教授
渡辺　芳人	名誉教授

物故名誉教授
赤松　秀雄
伊藤　光男
井口　洋夫
茅　幸二
北川　禎三
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）　斉藤　真司

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
SHUBHAM, Kumar	特任研究員
松田　定治	大学院生

理論分子科学第二研究部門

畑中　美穂	教授（クロス）（慶應大理工）（特別研究部門）
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）
伊藤　暁	助教
大貫　隼	助教
白男川　貴史	助教
ZHAO, Pei	特任助教
WANG, Yuelin	特任助教
鶴間　稜平	大学院生
森　丈	大学院生
関　健仁	大学院生
GUYOT, Constantin	大学院生
杉本　縁	事務支援員

理論・計算分子科学研究部門（客員研究部門）

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　穣里	客員准教授（東京農工大工）

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
松原　卓也	特任助教
CHAUHAN, Vikas Singh	特任研究員
JAUNET USAGE JAUNET-LAHARY, Titouan Teddy	特任研究員
KUMAR, Pushpander	特任研究員
MAGRO, Valentin Nicolas Walter	特任研究員
SRAKAEW, Kritsana	特任研究員
TIRUMALASETTY, Mahesh	特任研究員
本多　寛太郎	受託研究員
角本　悠輔	受託研究員
岡田　満哉	特別訪問研究員
仲田　公明	特別訪問研究員
犬飼　和久	特任専門員
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
西岡　稚子	特任専門員
越田　陽子	特任専門員
ANTHOINE MILHOMME, Valentin Timothee	特任専門員
KOCIK, Robin Rayane	大学院生
渡部　元輝	大学院生
MAURICIO URBINA, Jorge Antonio	大学院生
DENECKER, Tom	大学院生
HASSANALY, Sapna	大学院生
KECIR, Omar	大学院生
小田川　陽睦	大学院生
新川　聖也	大学院生
鶴田　笑子	技術支援員
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
八幡　菜穂子	事務支援員

光分子科学第三研究部門

解良　聡	教授
長坂　将成	助教
福谷　圭祐	助教
下ヶ橋　龍之介	特任助教
中澤　遼太郎	若手研究者雇用特別研究員
WULIJI TAOGETAO	特任専門員
三浦　直也	特別共同利用研究員

光分子科学第四研究部門（客員研究部門）

松下　智裕	客員教授（奈良先端大院先端科学）
渋田　昌弘	客員准教授（大阪公立大院工）
神谷　美穂	事務支援員

物質分子科学研究領域

研究主幹（併）　横山　利彦

電子構造研究部門

横山　利彦	教授
大西　洋	教授（ク）（神戸大院理）（特別研究部門）
杉本　敏樹	准教授
金井　恒人	特任講師
櫻井　敦教	助教
倉橋　直也	特任助教
佐藤　宏祐	特任助教
斎藤　晃	特任助教
高橋　翔太	特任助教
瀬戸　啓介	特任研究員
林　仲秋	特任研究員
酒井　広文	特別協力研究員
望月　達人	大学院生
吉澤　龍	大学院生
金　成翔	大学院生
常川　響	大学院生
髙原　裕大	大学院生
杉山　研嗣	特別共同利用研究員
手塚　玄惟	特別共同利用研究員
殿元　裕介	特別共同利用研究員
土居　篤史	特別共同利用研究員
北山　拓	特別共同利用研究員
天野　里咲	特別共同利用研究員
吉村　凜士	特別共同利用研究員
榊原　隆之	技術支援員

電子物性研究部門

清水　亮太	教授
山本　浩史	教授（併）
篠北　啓介	准教授
呉　柊斗	大学院生

分子機能研究部門

西村　勝之	准教授

物質分子科学研究部門（客員研究部門）

速水　真也	客員教授（熊本大院先端科学）
三浦　大樹	客員准教授（都立大都市環境）
川椙　義高	客員准教授（東邦大理）
横田　光代 *	事務支援員
栗田　佳子 *	事務支援員
浦野　宏子	事務支援員
野田　彩加	事務支援員

生命・錯体分子科学研究領域

研究主幹（併）　飯野　亮太

生体分子機能研究部門

加藤　晃一	教授（兼）（生命創成探究センター）
飯野　亮太	教授
澤井　仁美	教授(ク)(大阪公立大理)(特別研究部門)
原島　崇徳	助教
立尾　清悟	特任助教
林　成一郎	特任研究員(IMSフェロー)
矢木　真穂	特別訪問研究員
谷中　冴子	特別訪問研究員
大友　章裕	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
梶田　大起	特別共同利用研究員
米山　樹	特別共同利用研究員
高木　励	特別共同利用研究員
SHIM, Jinbo	特別共同利用研究員
磯野　裕貴子	技術支援員
上條　真弘	技術支援員
穂積　知佳子	技術支援員

生体分子情報研究部門

秋山　修志	教授（併）
古池　美彦	助教（併）

錯体触媒研究部門

魚住　泰広	教授
樫山　儀恵	准教授
大塚　尚哉	助教
塚本　兼司	特任助教
松雪　洋恵	特任研究員
田澤　文	研究員
星野　竜青	大学院生
山田　裕輝	大学院生
寺島　悠人	大学院生
中井　愛里	技術支援員
原田　晋子	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
吉田　瑠	大学院生
加納　春華	大学院生
小藤　夏生	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）

佐藤　宗太	客員教授（東大院工）
林　久美子	客員教授（東大物性研）
佐藤　伸一	客員准教授（東北大学際科学フロンティア研）
福富　幸代	事務支援員
谷分　麻由子	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	教授(任)(阪大院基礎工)
岡本　泰典	准教授（兼）（生命創成探究センター）
古池　美彦	助教
小杉　貴洋	助教
米田　勇祐	助教
堀内　滉太	助教
古賀　雅史	特任助教
尾上　靖宏	特任研究員

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
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
鈴木　ひかり	特別共同利用研究員
原多　己暢	特別共同利用研究員
村田　了介	技術支援員

生体分子システム研究部門

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
川口　律子 *	事務支援員

メゾスコピック計測研究センター

センター長（併）　岡本　裕巳

物質量子計測研究部門

大森　賢治	教授（併）
杉本　敏樹	准教授（併）

繊細計測研究部門

岡本　裕巳	教授
江原　正博	教授（併）
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
福富　実	大学院生
鎌田　一輝	特別共同利用研究員
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））
大西　洋	教授（ク）（神戸大院理）（電子構造研究部門）
澤井　仁美	教授(ク)（大阪公立大理）（生体分子機能研究部門）
畑中　美穂	教授(ク)（慶應大理工）（理論分子科学第二研究部門）
HE, Wei	特任研究員
村木　めぐみ	技術支援員
増田　道子 *	事務支援員
栗田　佳子 *	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
CASSOURET, Florent	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
尾高　英穂	特別訪問研究員
長内　昭宏	特別訪問研究員
YAHIA, Vincent	特別訪問研究員
鈴木　昌世	特別訪問研究員
角谷　利恵	特別訪問研究員
殖栗　敦	特別訪問研究員
佐野　雄二	特命専門員
松田　美帆	技術支援員
小林　純	技術支援員
水嶋　一彦	技術支援員
伊吹　剛	技術支援員
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

金安　達夫	教授
加藤　政博	特任教授（ク）（広大 HiSOR）
浅井　佑哉	特別共同利用研究員

電子ビーム制御研究部門

平　義隆	准教授
松田　博之	特任研究員
YANG, Yuxuan	特別共同利用研究員
ZHOU, Weixin	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
大門　寛	研究員
染井　裕貴	大学院生
佐々葉　遼平	特別共同利用研究員
波多江　勇太	特別共同利用研究員
與田　康人	特別共同利用研究員
福田　亮平	特別共同利用研究員
諫山　耀亮	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
泉　雄大	特任講師
片㑹　英樹	助手
木村　真一	特別訪問研究員
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
中本　圭一	特任研究員
太田　康仁	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）　横山　利彦

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
志村　真希	特任専門員
國住　正志	特任専門員
藤川　武敏	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
宇野　明子	技術支援員
近藤　紀子	事務支援員

岡崎連携プラットフォーム

プラットフォーム長（併）　渡辺　芳人

スピン生命科学コア

山本　浩史	教授（併）
加藤　晃一	教授（併）
西村　勝之	准教授（併）
椴山　儀恵	准教授（併）
湊　丈俊	主任研究員（併）
猪股　晃介	特任准教授
加藤　賢	特任助教
中村　敏和	特任研究員（特任部長（研究戦略担当））（併）
鈴木　敏泰	特任研究員（併）

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
古賀　信康	教授（任）（阪大蛋白研）
奥村　久士	准教授
岡本　泰典	准教授
伊藤　暁	助教（兼）
立尾　清悟	特任助教（併）
岡本　早紀	技術支援員
江藤　智子	技術支援員
川口　律子	事務支援員

極限環境生命探査室

加藤　晃一	教授（併）
立尾　清悟	特任助教（併）

技術推進部　　部長　繁政　英治

原田　美幸	技師
内山　功一	主任技術員

光技術ユニット　ユニット長　林　憲志

中村　永研	主任技師
岡野　泰彬	主任技師
林　憲志	主任技師
牧田　誠二	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
清水　康平	技術員
太田　紘志	技術員（任）（阪大院基礎工）
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	主任技術員
木村　幸代	技術員
宮崎　芳野	技術員
磯谷　俊史	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	技師
内藤　茂樹	主任技術員
澤　昌孝	主任技術員
長屋　貴量	主任技術員
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

上田　正	技師
藤原　基靖	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
髙山　敬史	技術支援員

整理日付は 2025 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

2025 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	1[2,0]	3[1,0]	3[1,0]	3[2,1]	4	1
	准教授	0	0[1,0]	2[1,0]	3[2,0]	2[1,0]	0	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	7	0	0
	特任助教	0	2	4	4	3	0	0
	研究員	1	1	7	2	4	1	1
	小計	2	10[3,0]	20[2,0]	15[3,0]	19[3,1]	5	3
研究支援	技術職員	3	0*3					
	特任専門員*2	10	10*3					
	再雇用職員	2	0*3					
	技術支援員	1	12*3					
	事務支援員	6	13*3					
	小計	22	35					
合計		24	107					

区分 / 職名		研究施設			岡崎共通研究施設		自然科学研究機構(分子研)	合　計
		極端紫外光研究施設	機器センター	装置開発室	計算科学研究センター	岡崎連携プラットフォーム	生命創成探究センター *4	所内（女性／外国人） ［客員，兼任］
研究	教　授	3	0	0	1	0	1	21 (2/0) [6,1]
	准教授	2	0	0	2	1	2	15 (1/1) [5,0]
	主任研究員	2	1	0	0	0	0	3 (0/0) [0,0]
	講　師	1	0	0	0	0	0	2 (0/0) [0,0]
	助　教	1	0	0	0	0	0	20 (0/1) [0,0]
	特任助教	0	0	0	0	1	0	14 (3/3) [0,0]
	研究員	2	3	0	0	0	0	22 (2/11) [0,0]
	小計	11	4	0	3	2	3	97 (8/16) [11,1]
研究支援	技術職員	10	8	8	8	0	0	37
	特任専門員*2	1	2	0	1	0	0	24
	再雇用職員	1	1	0	0	0	0	4
	技術支援員	1	3	2	2	0	2	23
	事務支援員	3	4	1	1	0	1	29
	小計	16	18	11	12	0	3	117
合計		27	22	11	15	2	6	214

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・特命専門員を含む。

＊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会に委ねられている。さらに，厳密な選考を経て採用された准教授，助教は分子科学コミュニティと分子科学研究所教員の流動性を保つため原則として内部昇任が禁止されている（例外は創立以来 2 件のみ）。教授，准教授の研究グループの研究活動に関しては，所長および運営顧問，研究顧問によるヒアリング，また研究領域あるいは施設ごとに国内委員と国外委員による点検･評価を受けている。さらに，教授，准教授の個人評価は confidential report の形で所長に報告されるなど，所長は教授，准教授の研究グループの活性化と流動性に心がけている。なお，助教が 6 年を越えて勤務を継続する場合は，毎年，本人の属する研究領域の主幹あるいは施設長が主幹・施設長会議においてそれまでの研究活動と転出の努力の状況を報告し，同会議で承認された後，教授会議では本人の属するグループの教授または准教授によって同様の手続きを行い，研究期間の 1 年延長の承認を得るという手続きをとっている。2011 年度より，特任制度年俸制職員の特任准教授である若手独立フェロー制度を実施している。特任制度年俸制職員の定めに従って任期は 5 年である。対象は，博士号取得 2 年以内（見込み含む），あるいは博士号取得後，海外で研究中の人は帰国後 1 年以内（滞在中含む）であったが，2017 年度に見直しが行われ，国内外を問わず博士号取得 3 年以内を対象とすることとなった。2015 年度より，新規採用の研究教育職員は原則，年俸制に移行することになった。特任制度の年俸制ではなく，任期は定めず，毎年度末に業績評価が実施される。2017 年度より，新たに主任研究員制度の運用を開始したほか，特別研究部門を設けて，世界トップレベルの研究者を招へいすることとした。2019 年より，同部門に大学教員をクロスアポイントメントで招へいする制度の運用を開始した。2026 年より，クロスアポイントメント教員は関連する研究領域に所属することとした。

(2) 創立以来の人事異動状況（2026 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* 2025 年 5 月 1 日現在
年　度	2016 ～ 2021	2022	2023	2024	2025	2022 ～ 2025 計	
教　授	5	1	1	0	3	5	21 (2/0)
准教授	11	1	1	5	0	7	15 (1/1)
主任研究員	2	1	0	0	0	1	3 (0/0)
講　師			1	1	1	3	2 (0/0)
助　教	22	2	2	2	2	8	20 (0/1)
特任助教	8	3	5	3	2	13	14 (3/3)
研究員	88	11	14	11	9	45	22 (2/11)
計	136	19	24	22	17	82	97 (8/16)

＊ (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	2025	2022 ～ 2025 計
教　授	3	0	0	4	3	7
准教授	10	5	0	2	2	9
主任研究員	0	0	0	0	0	0
講　師			0	0	0	0
助　教	32	12	3	1	5	21
特任助教	5	0	1	6	4	11
研究員	88	9	11	12	7	39
計	138	26	15	25	21	87

② 客員教員等

区分	職　名	創立～ 2025 年度	現員数 [*2] 2025 年 5 月 1 日現在
客員研究部門（国内）	教　授	176	6(1)
	准教授	186	5(1)
国外 [*1]	教　授	87	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（教授にカウント）。
＊2　（　）は女性の人数で内数。

2-10 財　　政

収入支出の推移

収入　　（単位：千円）

	FY2023	FY2024	FY2025
運営費交付金	2,779,195	3,001,160	2,785,988
うち繰越分	0	216,745[*1]	89,200[*1]
施設整備費補助金	0	0	0
補助金等収入	15,558	22,921	8,974
大学改革支援・学位授与機構施設費交付金	0	0	0
自己収入（雑収入）	59,348	56,850	69,251
産学連携等研究収入及び寄附金収入等　小計	1,486,635	2,815,402	2,337,519
産学連携等研究収入	1,410,863	2,730,236[*2]	2,254,864[*2]
寄附金収入	25,013	33,902	30,754
その他	50,759	51,264	51,901
目的積立金取崩額	0	0	0
引当特定資産取崩	92,037	280,903	20,573
科学研究費助成事業（直接経費）	409,580	438,607	316,114
合計	4,842,353	6,615,843	5,538,419

支出（経費別）　　（単位：千円）

	FY2023	FY2024	FY2025
業務費　小計	2,703,907	3,163,902	2,523,472
教育研究経費	2,550,030	3,000,142	2,362,810
一般管理費	153,877	163,760	160,662
施設整備費	0	0	0
補助金等	15,558	22,921	8,974
産学連携等研究経費及び寄附金事業費等　小計	1,250,030	1,716,193	2,308,273
産学連携等研究費	1,186,536	1,646,365	2,230,528
寄附金事業費	12,735	18,563	25,844
その他	50,759	51,264	51,901
科学研究費助成事業（直接経費）	315,893	364,396	277,083
合計	4,285,388	5,267,411	5,117,802

支出（使途別）

人件費	1,357,276	1,457,678	1,481,880
物件費	2,918,013	3,808,876	3,604,501
施設費	10,098	857	31,420
合計	4,285,388	5,267,411	5,117,802
繰越額	556,965	1,348,432	420,617
運営費交付金繰越(業務達成基準適用分)	180,000	70,000	35,000
引当特定資産	46,673	105,012	317,340
外部資金執行残	330,292	1,173,420	68,277
直接経費	282,728	791,616[*2]	61,930
間接経費	47,564	381,804[*2]	6,347
支出総額（繰越等を含む）	4,842,353	6,615,843	5,538,419

注）端数処理のため，合計が合わない場合がある。
注）計算科学研究センター及び生命創成探究センター分子研関係を含む。
注）当該年度に前年度以前の繰越分を含んで支出した場合，同額を収入分にも含む。
注）外部資金執行残：受託研究，共同研究，科学研究費助成事業及び寄附金で，翌年度への繰越及び返納した額の合計。
FY2024*1　前年度以前からの繰越分（山手ヘリウム液化機更新費用，新任教員スタートアップ経費など）。
FY2024*2　ムーンショット前倒し分を含む。
FY2025*1　前年度以前からの繰越分（新任教員スタートアップ経費など）。
FY2025*2　ムーンショット前倒し分の繰越を含む。

2025 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	2,083,007	647,399	55,582	2,785,988
施設整備費補助金	0	0	0	0
補助金等収入	8,974	0	0	8,974
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）	69,251	0	0	69,251
産学連携等研究収入及び寄附金収入等　小計	2,263,485	7,333	66,701	2,337,519
産学連携等研究収入	2,181,320	6,843	66,701	2,254,864
寄附金収入	30,264	490	0	30,754
その他	51,901	0	0	51,901
目的積立金取崩額	0	0	0	0
引当特定資産取崩	20,573	0	0	20,573
科学研究費助成事業（直接経費）	268,729	17,332	30,054	316,114
合計	4,714,019	672,064	152,337	5,538,419

支出　（単位：千円）

	人件費	物件費	施設費	計
業務費　小計	1,135,919	1,370,896	16,656	2,523,472
教育研究経費	978,404	1,367,751	16,656	2,362,810
一般管理費	157,516	3,146	0	160,662
施設整備費	0	0	0	0
補助金等	6,924	2,050	0	8,974
産学連携等研究経費及び寄附金事業費等　小計	260,179	2,033,330	14,764	2,308,273
産学連携等研究費	237,857	1,977,907	14,764	2,230,528
寄附金事業費	1,912	23,932	0	25,844
その他	20,410	31,491	0	51,901
科学研究費助成事業（直接経費）	78,858	198,225	0	277,083
合計	1,481,880	3,604,501	31,420	5,117,802
繰越額				420,617
運営費交付金繰越（業務達成基準適用分）				35,000
引当特定資産				317,340
外部資金執行残				68,277
直接経費				61,930
間接経費				6,347
支出総額（繰越等を含む）				5,538,419

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。
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及び科学研究費助成事業（間接経費）の合計で，いずれも当該年度の受入分のほか前年度からの繰越分を含む。ただし，科学研究費助成事業（間接経費）においては，収入と支出を同額（支出額）で計上。（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
科学研究費助成事業（直接経費）：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）
外部資金執行残：受託研究，共同研究，科学研究費助成事業及び寄附金で，翌年度への繰越及び返納した額の合計。

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			2020	2021	2022	2023	2024	2025
寄付金	分子科学研究所	件数（件）	24	16	9	119	128	41
		金額（千円）	37,224	31,394	18,203	20,765	27,823	17,473
	生命創成探究センター・岡崎共通研究施設（分子研分）	件数（件）	1	1	1	0	2	2
		金額（千円）	2,000	1,500	610	0	400	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）	76	74	87	75	68	59
		金額（千円）	479,779	508,495	453,450	406,679	423,131	297,805
	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）	20	19	24	23	14	13
		金額（千円）	80,331	73,515	94,026	86,970	53,560	48,096
共同研究＊	分子科学研究所	件数（件）	9	10	12	13	10	9
		金額（千円）	34,337	40,380	21,761	18,889	22,807	114,094
	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）	21	25	27	26	29	29
		金額（千円）	563,906	859,124	910,486	1,240,159	2,472,740	1,204,626
	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）	2	3	6	7	8	9
		金額（千円）	14,560	17,810	56,861	63,401	100,711	85,411
合計金額（千円）			1,212,137	1,532,218	1,555,397	1,836,863	3,101,172	1,767,905

＊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	7,670	0	0	1	7,670
挑戦的研究（萌芽）	1	2,470	0	0	1	2,470
若手研究	6	10,400	1	1,300	7	11,700
学術変革領域研究 (A)	6	42,510	2	17,160	8	59,670
学術変革領域研究 (B)	1	13,390	0	0	1	13,390
基盤研究 (S)	3	89,401	0	0	3	89,401
基盤研究 (A)	4	30,420	1	13,260	5	43,680
基盤研究 (B)	11	58,898	2	7,280	13	66,178
基盤研究 (C)	6	6,803	2	3,146	8	9,949
研究活動スタート支援	1	1,430	0	0	1	1,430
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	2	6,370	0	0	2	6,370
計	42	269,761	8	42,146	50	311,907

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	390	0	0	2	390
学術変革領域研究 (A)	6	21,528	2	4,000	8	25,528
学術変革領域研究 (B)	1	520	0	0	1	520
基盤研究 (S)	0	0	0	0	0	0
基盤研究 (A)	1	130	0	0	1	130
基盤研究 (B)	5	5,021	2	1,560	7	6,581
基盤研究 (C)	2	455	1	390	2	845
計	17	28,044	5	5,950	22	33,994

間接経費を含む。
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。

受託研究　内訳　　（単位：千円）

事業体	事業名		実施課題数（代表者／分担者）	交付金額
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 /2	64,300
		マテリアル先端リサーチインフラ	0 /1	52,270
		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	1,851
		NMR プラットフォーム	0 /1	2,041
	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	10,086
国立研究開発法人科学技術振興機構	ムーンショット型研究開発事業		1 /4	589,373
	戦略的創造研究推進事業	CREST	1 /2	79,141
		さきがけ	3 /0	39,377
		ACT-X	2 /0	8,509
		ASPIRE	1 /0	28,652
		ERATO	1 /0	29,700
	未来社会創造事業	大規模プロジェクト型	0 /1	17,888
	革新的 GX 技術創出事業	GteX	0 /1	13,000
	創発的創造研究推進事業		5 /0	91,736
	経済安全保障重要技術育成プログラム		0 /1	68,115
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 /2	1,560
	次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発事業		0 /1	7,800
	革新的医療技術研究開発推進事業		0 /2	8,710
	難治性疾患実用化研究事業		0 /1	260
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
国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構	宇宙戦略基金事業		0 /1	164,708
計			15 /23	1,290,037

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約 1,500 種，単行本 97,297 冊（和 13,397，洋 83,900）を所蔵している。

また，学術雑誌の電子ジャーナル化に伴う利用環境の充実に努めており，現在，機構（岡崎 3 機関）として約 5,000 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，国内外の学術会議はもとより研究教育活動にかかる各種行事に利用できる岡崎 3 機関の共通施設として 1997 年 2 月に竣工した。センターは共同利用研究者の宿泊施設である三島ロッジに隣接して建てられている。

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

2-11-3　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：10 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，量子コンピュータや燃料電池用触媒に関する発明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。

2024 年度の発明件数は，個人有としたもの 1 件，機構有としたもの 6 件，2025 年度は，個人有 0 件，機構有 7 件であった（2026 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	2025	2022 〜 2025 計
出願件数	67	92	4	6	9	12	31
国内	37	55	2	6	4	9	21
国外	30	37	2	0	5	3	10
登録件数	59	61	8	5	14	17	44
国内	37	30	6	4	9	6	25
国外	22	31	2	1	5	11	19
総保有件数	66	107	108	107	113	123	451
国内	44	61	63	63	64	64	254
国外	23	46	45	44	49	59	197
特許料収入（千円）国内外合計	1,670	54,548	24,330	24,919	26,874	27,770	103,893

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。2024 年度の受賞件数は 12 件，2025 年度は 16 件であった。

受賞一覧（2024 年度～ 2025 年度）

受賞者名	賞の名称	受賞年月
加藤　晃一	2026 年度日本薬学会賞	2026. 3
西崎　竜平	令和 7 年度日本生化学会中部支部支部長賞	2026. 3
椴山　儀恵	日本化学会東海支部長賞	2026. 3
張本　尚	第 42 回井上研究奨励賞	2026. 2
原島　崇徳	第 20 回わかしゃち奨励賞基礎科学研究部門優秀賞	2026. 1
大峯　巖	瑞宝中綬章	2025. 11
鍋井　庸次	Springer Nature Poster Prize at 16th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets	2025. 10
奥村　久士	日本生物物理学会 第 11 回 Biophysics and Physicobiology Editors' Choice Award	2025. 9
平等　拓範	Research.com Engineering and Technology in Japan, Leader Award (2025)	2025. 9
米田　勇祐	第 18 回分子科学会奨励賞	2025. 9
藤田　誠	The Palladium Global Science Award-Best Scientific Development	2025. 9
小杉　貴洋	2025 年度分子科学研究奨励森野基金研究助成	2025. 9
櫻井　敦教	原子・分子・光科学（AMO）討論会第 12 回ポスター発表賞	2025. 6
小杉　貴洋	第 26 回酵素応用シンポジウム 研究奨励賞	2025. 6
西　信之	瑞宝中綬章	2025. 4
藤田　誠	American Academy of Arts & Sciences 外国人名誉会員	2025. 4
古池　美彦	日本生物物理学会中部支部最優秀発表賞	2025. 3
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	電子スピンサイエンス学会 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
平等　拓範	Research.com Engineering and Technology in Japan, Leader Award (2024)	2024. 8
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

３．大学共同利用機関の取組み

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

共同利用・共同研究においては，所内研究者と所外の分子科学及び関連分野の研究者との共同研究を積極的に推進しており，全国の研究者からの共同研究の提案を共同研究専門部会で審議し，採択された共同研究に対しては旅費及び研究費の一部を支給している。また，海外の研究者との共同研究に対しては，研究者の派遣及び相手国研究者招へいのために国際共同研究事業を行っている。国際交流協定に関しては 3-2-1 項に，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　2025 年度の実施状況

(1) 課題研究

課　題　名（後期）		提案代表者
探針増強和周波発生振動分光法による機能性二分子層膜の電界応答プロトンカップリング物性の開拓	大阪大学	加藤　浩之
プラズモン－量子ドットハイブリッド構造の作製と超高速ナノ顕微分光による光誘起ダイナミクスの解明	大阪公立大学	渋田　昌弘

(2) 協力研究

課　題　名（通年）		提案代表者
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
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
世界最高感度 level の 2 次元電子スピン反射鏡検出器の光電子運動量顕微鏡（PMM）への実装と利用研究	大阪大学	菅　　滋正

マイクロチップレーザによる月惑星探査用 LIBS 計測の実証：真空環境下におけるプラズマ発光強度のパルス幅依存性の検討	東京大学	長　勇一郎
モーター蛋白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
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 II	大阪大学	田中慎一郎
CISS 効果によるスピン偏極と高鏡像体過剰率のキラル化合物を結ぶ不斉自己触媒反応	東京理科大学	川崎　常臣
膵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
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
ハンチントン病原因タンパク質の凝集機構とアルギニン誘導体による凝集阻害機構の理論的解析	久留米工業高等専門学校	谷本　勝一
モメンタムマイクロスコープによる高移動度有機半導体の Mixed-Orbital Transport の研究	筑波大学	山田　洋一
固体担持ポリリン酸の調製と反応系の開発	山形大学	皆川　真規
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

課　題　名（前期）	提案代表者	
波長 2μm 帯 Ho:YAG/Al_2O_3 DFC レーザーの開発	電気通信大学	戸倉川正樹
新奇トポロジーをもつ二次元分子磁石の開発	千葉大学	山田　豊和
様々な有機溶媒を内包するクラスレート結晶の開発と性質解明	総合科学研究機構	杉山　晴紀
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
高速円二色性顕微鏡の開発	大阪大学	山西　絢介
界面分子の非線形応答の偏光依存性と電気化学反応解明への応用	東京大学	峰本紳一郎
光・電子・探針場の協奏による単一分子分光の展開	金沢大学	岡林　則夫
両親媒性高分子担持光酸化還元触媒による水中カルボキシル化反応の開発	京都大学	奥村慎太郎

課　題　名（後期）	提案代表者	
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
遷移金属ダイカルコゲナイドの電子状態の顕微イメージング	東京大学	萩原　健太
光電子運動量顕微鏡によるトポロジカル絶縁体面内 pn 接合の直接観測	大阪大学	中村　拓人
光電子運動量顕微鏡による MXenes 単結晶 V_2CT_z の電子状態の研究	名古屋大学	伊藤　孝寛
真空紫外レーザーシステム内増幅器に用いる Nd:YSAG セラミックの接合技術開発研究	高エネルギー加速器研究機構	大石　　裕
トポロジカル物質におけるスピン偏極電子状態の解明と制御	東北大学	中山　耕輔
金属担持酸化物半導体における金属構造と光触媒機能の相関解明	慶應義塾大学	清水　智子
高効率・高エネルギー分解能のフォノン誘起型超伝導多素子放射線検出器の開拓	理化学研究所	大谷　知行
界面コヒーレントラマン分光法による固体内高イオン伝導界面層の観察	東京大学	小林　　成
糖鎖修飾システムのリモデリングによる糖鎖ネオ細胞の創成	生命創成探究センター	矢木　宏和

（3）研究会

課　題　名（通年）	提案代表者	
森野ディスカッション	公益信託分子科学奨励森野基金	宗像　利明
UVSOR 光物性・計測研究会	東北大学	黒澤　俊介
トライボロジーの分子科学	京都大学	平山　朋子
最先端の実験と理論で迫る分子ダイナミクスの階層性	分子科学研究所	倉持　　光
2050 年の生体分子科学を語る	名古屋工業大学	神取　秀樹
International Workshop for Young Scientists on Crystalline Organic Materials（YSCOM2025）	東北大学	出倉　　駿

（4）若手研究活動支援

課　題　名（通年）	提案代表者	
第 23 回 ESR 夏の学校—学際的な電子スピンサイエンスの理解と応用—	昭和薬科大学	飯塚　直子
分子科学若手の会　分野交流研究会	名古屋大学	黒田　琉奈

（5）岡崎コンファレンス

課　題　名（前期）	提案代表者	
次世代レーザー計測と計算科学が切り拓く表面界面物質分子科学の新展開と展望	東北大学	森田　明弘

（6）施設利用

①　UVSOR 施設利用

課　題　名（通年）	提案代表者	
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-5 搭載装置の評価	国立天文台	成影　典之
炭酸カルシウム結晶の晶出および結晶成長に及ぼす共存異種元素の影響	ファインセラミックスセンター	村田　秀信
メタン芳香族化活性な Ga・In 共修飾 Mo/H-MFI 触媒の Mo 活性種 L 殻 XANES 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 ZrO_2-HfO_2 固溶体の局所構造	九州大学	吉岡　　聰
NEXAFS 分光法を用いた深さ方向分析による水素吸蔵合金表面の活性化の解明	九州シンクロトロン光研究センター	小林　英一
NEXAFS 分光法によるハロゲン化マグネシウム電極のオペランド解析	九州シンクロトロン光研究センター	小林　英一
次期中性 K 中間子稀崩壊測定実験 KOTOII 実験の検出器候補となる有機シンチレータ素材の単一光子計数法による蛍光寿命測定の性能評価	山形大学	田島　靖久
赤色・近赤外発光体を含むシンチレータのエネルギー損失解析と新材料探索	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
光電子－光イオンコインシデンス測定による分子解離過程の解明	東京科学大学	北島　昌史
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の固体デバイス化の検討	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
強磁性ワイル半金属の異方的電子状態	大阪大学	木村　真一
ハイブリッド様三元アルカリ銀ハライド結晶における光学特性の研究	大阪公立大学	河相　武利
VUV スペクトロスコピーによる希土類・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
将来オーロラ観測衛星 FACTORS 搭載の遠紫外線カメラのエンジニアリングモデルの検出器感度試験	東北大学	坂野井　健
アモルファス半導体の光誘起光学バンドギャップ変化に関する研究	岐阜大学	林　　浩司
極端紫外線偏光分光計測のための偏光ビームスプリッタの較正	量子科学技術研究開発機構	川手　朋子
温度可変その場赤外分光測定を用いた層状酸化ボ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
放射光顕微赤外分光法を用いた難分解性ポリマーの構造解析	高エネルギー加速器研究機構	川崎　平康
交代磁性半導体の一軸圧力下電子状態	大阪大学	木村　真一
地球外有機物の 3 次元分布観察を目指した高輝度赤外分光マイクロトモグラフィー開発	広島大学	薮田ひかる
高速シンチレータ材料におけるエネルギー移動と内殻励起の寄与の定量的解析	静岡大学	越水　正典
紫外発光セリウム添加フッ化物ナノ蛍光体の生体応用における発光特性の改善	静岡大学	小南　裕子
高性能サファイア結晶の開発と分光技術による評価	大阪大学	清水　俊彦
微小エナンチオ選択性評価のための高速光電子計測法の開発	広島大学	高口　博志
最小電離粒子を用いた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	
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
雷ガンマ線の観測への応用を目指した MeV ガンマ線観測装置の開発研究	名古屋大学	中澤　知洋
真空紫外光を用いた光電離プラズマ生成実験	核融合科学研究所	小林　政弘
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
紫外照射による PET 酵素分解の高速化	京都大学	田所　大輔
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	高エネルギー加速器研究機構	薮内　　敦
次世代 MeV ガンマ線宇宙観測計画 SMILE に向けたガス TPC における対生成事象の再構成手法の実証	京都大学	高田　淳史
単一電子からの二光子同時放射	広島大学	加藤　政博
光電子円二色性によるキラル電子構造の検証	広島大学	高口　博志
位相制御放射光パルスによる固体及び分子の量子制御・計測	九州シンクロトロン光研究センター	金安　達夫
Study on the Effects of Different Heat Treatment Methods on Sample Defects	Tsinghua University	YANG, Yigang
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
π電子造形を用いた新規液相分離場の構築と評価	帝京科学大学	高谷　　光
金属酢酸塩水溶液の XAS 測定	東京大学	佐々木岳彦
共鳴散乱によるナノ螺旋ネマチック構造の解析	理化学研究所	荒岡　史人
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

オペランド軟Ｘ線分光による光触媒表面の光誘起活性種の観測	分子科学研究所	斎藤　晃
OH リッチな環境調和型イオン液体の軟Ｘ線吸収分光測定	分子科学研究所	倉橋　直也
エポキシ樹脂のナノスケールの不均一性の研究	分子科学研究所	岩山　洋士
脂質二重膜のイオン配位と水和状態についての水中Ｘ線吸収分光法計測	豊橋技術科学大学	手老　龍吾
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
強誘電性と反強誘電性の競合により出現するキラル液晶副次相の共鳴軟Ｘ線共鳴散乱による精密構造解析	京都府立医科大学	高西　陽一
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
アセトニトリル溶媒中の 18-crown-6/ 金属錯体の電子状態観測	山口大学	堀川　裕加
オペランド軟Ｘ線 XAFS による鉄ニッケル水分解触媒上に吸着した炭酸イオンの動的挙動と活性化メカニズムの解明	山口大学	吉田　真明
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
強誘電性液晶の超周期構造解析	九州大学	菊池　裕嗣
Probing the H-Bonding Network in the Vicinity of Aqueous Ammonia by X-Ray Absorption Spectroscopy	Synchrotron SOLEIL	CEOLIN, Denis
Molecular Insights into Clay–Water Interfaces: Probing Surface Structure and Environmental Implications Using X-Ray Spectroscopy	University of Gothenburg	孔　祥瑞
偏光反射分光によるダブルダングステート $NaBi(WO_4)_2$ 結晶における A サイト秩序構造の解明	山形大学	北浦　守
リチウムイオン電池正極／固体電解質界面の反応メカニズムの解明	産業技術総合研究所	細野　英司
パラフィン包埋を行ったアポトーシス単離核における核酸・タンパク質の高精度分布解析	分子科学研究所	荒木　暢
リュウグウの炭酸塩に含まれる無機－有機窒素化合物の分析	京都大学	松本　徹
B 型小惑星ベヌー試料中ナノサイズ有機物の STXM-XANES 分析：比較小惑星学へ	広島大学	薮田ひかる
Chemical Insights at the Arctic Frontier: STXM/NEXAFS Analysis of Aerosol Particles during the ARTofMELT Expedition	University of Gothenburg	孔　祥瑞
STXM Study of a Noble-Metal-Free Oxide Catalyst for High-Performance Oxygen Reduction Reaction	City University of Hong Kong	WANG, Jian
STXM Study of a Noble-Metal-Free Electrocatalyst for Highly-Concentrated Salt Water Electrolysis	City University of Hong Kong	WANG, Jian
STXM Study of the Fast-Charging Cathode Material for the Li-Ion Batteries	City University of Hong Kong	WANG, Jian
Operando Spectroscopic Approaches into the h-BN and the Nanoparticles Membranes	Tamkang University	CHUANG, Cheng-Hao
Catalytically Active Copper-Nanoceria for CO–CO_2 Conversion: An In Situ X-Ray Spectromicroscopic Investigation	Tamkang University	DONG, Chung-Li
微斜面基板における高配向有機分子薄膜の電子状態	筑波大学	長谷川友里
「準ホモエピタキシャル」単結晶有機半導体ヘテロ接合の価電子バンド計測 (III)	東京理科大学	中山　泰生
磁気ボトル型電子分析器を用いた固体試料に対する多電子同時計測	富山大学	彦坂　泰正
白金製剤の XANES スペクトル測定	分子科学研究所	泉　雄大
生体細胞内における Fe^{2+} および F^{3+} イオンの分布計測	分子科学研究所	岩山　洋士
孤立励起分子の遅延解離過程の研究 2	京都大学	間嶋　拓也
高速重イオン照射誘起による ZrO_2–HfO_2 固溶体の局所構造	九州大学	吉岡　聰
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 III	分子科学研究所	福谷　圭祐
共鳴 ARPES による異常熱電特性の起源解明	豊田工業大学	松波　雅治
層状室温強磁性体 $AlFe_2B_2$ の磁気相転移前後における角度分解光電子分光	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
交代磁性半導体の一軸圧力下角度分解光電子分光	大阪大学	木村　真一
原子層近藤格子における非フェルミ液体的挙動の直接観測	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
角度分解光電子分光による二次元三角格子系 $LiVS_2$ の電子状態の研究	岡山大学	横谷　尚睦
集光された放射光ビームで探る角度分解光電子分光による二層系銅酸化物高温超伝導体 Tl2212 の電子構造の研究	広島大学	出田真一郎
Spin-Resolved and Temperature-Dependent ARPES Study on Candidate Dynamic Axion Insulator $(Ge_{1-x}Mn_x)_2Bi_2Te_5$	Southern University of Science and Technology	LIU, Chang
Fragile Magnetic Order of RuO_2	City University of Hong Kong	MA, Junzhang
Photoemission Studies about the Spin Structure of *g*-Wave Type Altermagnet CrSb	Sunchon National University	CHO, Soohyun
Electronic Structure Exploration of Time-Reversal Symmetry Broken Novel Weyl Semimetals at Low Temperature with Spin-Resolved ARPES	Indian Institute of Technology	NAYAK, Jayita
真空紫外光学窓材料の屈折率測定	高エネルギー加速器研究機構	大石　裕
多元系ガーネット酸化物蛍光体の Ce^{3+} 4f–4f 吸収に現れる 1 → 4 吸収線の二重構造の起源	山形大学	北浦　守
トポロジカルノーダルライン・励起子・擬ギャップの競合関係	東京大学	近藤　猛

銅酸化物高温超伝導体“第三のギャップ”の起源解明	東京大学	堀尾　眞史
終端面および膜厚の異なる交代磁性体 MnTe 薄膜の電子状態の温度依存性：磁性とスピン分裂の相関の解明	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-c)	東京理科大学	中山　泰生
FeCo/MgO(100) 薄膜上に成長させた bcc-Cu 薄膜の電子状態評価	物質・材料研究機構	永村　直佳
ゲルマネンのπ軌道の分散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 II	分子科学研究所	解良　聡
ノードライン半金属候補物質 Mg_3Bi_2 の低励起エネルギー角度分解光電子分光	名古屋大学	伊藤　孝寛
原子層近藤格子における混合価数価誘起磁性ディラック半金属相	大阪大学	中村　拓人
高温相転移を示す層状超伝導体 $Bi_2Rh_3(Se_{1-x}S_x)_2$ の角度分解光電子分光	岡山大学	横谷　尚睦
角度分解光電子分光による二層系銅酸化物高温超伝導体 Tl2212 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 $Yb(Ni_{1-x}Pt_x)_3Al_9$ のバンド構造の研究	広島大学	佐藤　仁
ARPES Study on the Electronic Structures of Unconventional Antiferromagnets $CoNb_4Se_8$ and Ce_2CuGe_6	Southern University of Science and Technology	LIU, Chang
Exploring Temperature-Dependent Band Dispersion of $CsPbBr_3$ Crystal upon Polaron and Rashba Effect	Linkoping University	LIU, Xianjie
Low-Energy Excitations of Time-Reversal Symmetry Broken Novel Weyl Semimetals	Indian Institute of Technology Kanpur	NAYAK, Jayita
Yb を含む準結晶および近似結晶の UV-VUV 反射スペクトルと電子状態	徳島大学	岡村　英一
Electronic Band Structures of Crystalline $NiCo_2O_4$ Thin Films	University of Nebraska-Lincoln	米須　尚
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

課　題　名（後期）	提案代表者	
ガンマ線誘起陽電子消滅寿命運動量相関法によって解き明かすガーネットシンチレータ結晶の不純物共添加効果	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の初期実証	量子科学技術研究開発機構	田久　創大
放射光電場波形計測法の研究	豊田工業大学	藤　貴夫
雷ガンマ線の観測への応用を目指した MeV ガンマ線観測装置の開発研究	名古屋大学	中澤　知洋
真空紫外光を用いた光電離プラズマ生成実験	核融合科学研究所	小林　政弘
極紫外領域円偏光によるアミノ酸の光化学反応に関する研究	核融合科学研究所	小林　政弘
UVSOR-BL1U におけるパルスレーザーを用いたレーザーコンプトン散乱ガンマ線発生に関する研究	京都大学	大垣　英明
キラルなアンジュレータ光の生体分子構造解析への応用の開拓	広島大学	松尾　光一
単一電子からの二光子放射における可干渉性	広島大学	加藤　政博
放射光およびレーザー分光によるキラル分子の光電子イメージング	広島大学	高口　博志
珪化マグネシウム環境半導体における浅い格子欠陥のテラヘルツ領域吸収分光	山形大学	北浦　守
高効率水分解金属酸化物担持光触媒の軟Ｘ線吸収分光	名古屋大学	吉田　朋子
共鳴軟Ｘ線散乱による層状ボロフェン酸化物薄膜の液晶相転移メカニズムの解明	東北大学	神永　健一
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
共鳴散乱によるナノ螺旋ネマチック構造の解析－その 2	理化学研究所	荒岡　史人
オペランド軟Ｘ線分光による光触媒表面の反応場と活性種の観測	分子科学研究所	斎藤　晃
共鳴軟Ｘ線散乱法による 3 元系高分子複合材の構造解析法の開発	分子科学研究所	岩山　洋士
脂質二重膜のイオン配位と水和状態についての水中Ｘ線吸収分光法計測	豊橋技術科学大学	手老　龍吾
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
ラセミ体で出現した新奇液晶副次相の共鳴軟Ｘ線共鳴散乱による精密構造解析	京都府立医科大学	高西　陽一
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
ホウ酸イオンにより活性化される Fe・Ni 水電解触媒のメカニズム解明に向けたオペランド軟Ｘ線 XAFS 観測	山口大学	吉田　真明
強誘電性液晶の超周期構造解析	九州大学	菊池　裕嗣
Probing the H-Bonding Network in the Vicinity of Aqueous Ammonia by X-Ray Absorption Spectroscopy	Synchrotron SOLEIL	CEOLIN, Denis
リチウムイオン電池電極材料の劣化状態の可視化	産業技術総合研究所	細野　英司
STXM による円石藻類の 3 次元化学的構造観察	高エネルギー加速器研究機構	大東　琢治
STXM を用いた生体試料における複数の核酸・タンパク質の分布解析のための NEXAFS 高精度測定とそのアポトーシス単離核への応用	分子科学研究所	荒木　暢
天文学への応用を目指した独自の多層グラフェンの紫外線・Ｘ線透過率測定	名古屋大学	三石　郁之
リュウグウの炭酸塩に含まれる無機－有機窒素化合物の分析	京都大学	松本　徹
Chemical Insights at the Arctic Frontier: Extended STXM/NEXAFS Characterization of Additional Aerosol Samples from the ARTofMELT Expedition	University of Gothenburg	孔　祥瑞

Water-Induced Surface Adsorption and Chemical Bonding in Fe_3O_4 and Reduced Graphene Oxide Composite Membranes	Tamkang University	CHUANG, Cheng-Hao
Revealing Local Electronic Structures in Co/MXene Catalysts Using Nanoscale STXM for HER Mechanistic Insights	Tamkang University	WANG, Hsiao-Tsu
Comparison of Polyvinylpyrrolidone 30 and 90 Accumulation in Histiocytosis Tissue Samples	University of Oulu	MANSIKKALA, Leo Tuomas
Chemical Mapping of Extractives in Pine Bark	University of Oulu	MANSIKKALA, Leo Tuomas
Spin-Polarized Redox Interfaces in Co_3O_4–CeO_2 Nanocomposites Probed by *Operando* STXM	Tamkang University	DONG, Chung-Li
磁気ボトル型電子分析器を用いた固体試料に対する多電子同時計測	富山大学	彦坂　泰正
金属をドープした DNA の XANES スペクトル測定	分子科学研究所	泉　雄大
EUV 光照射によるフォトレジストからの光電子・二次電子計測器の開発	分子科学研究所	岩山　洋士
軟X線顕微鏡法による赤血球における Fe^{2+} および Fe^{3+} 原子の分布計測	分子科学研究所	岩山　洋士
結晶相制御のための ZrO_2 中ドーパントの局所構造	大阪公立大学	吉岡　聰
ARPES で探る新奇バンド特異点とトポロジカル超伝導	東北大学	中山　耕輔
ARPES による新奇磁性相の探索と創成	東京大学	萩原　健太
カイラル励起子絶縁体における高次準粒子相互作用の観測	分子科学研究所	福谷　圭祐
共鳴 ARPES による異常熱電特性の起源解明と制御指針の構築	豊田工業大学	松波　雅治
角度分解光電子分光による MAB 相化合物 MAlB (M = Mo, W) の表面電子状態の研究	名古屋大学	伊藤　孝寛
交替磁性半導体の一軸圧力下角度分解光電子分光	大阪大学	木村　真一
単原子層強磁性ディラック半金属物質における価数揺動	大阪大学	中村　拓人
角度分解共鳴光電子分光による Si(001) 表面相転移の研究	大阪大学	田中慎一郎
擬一次元強相関トポロジカル候補物質の電子状態	National Taiwan University	野口　亮
Exploring Electronic Properties of 2D Materials with Planar Hyperbolic Polaritons: $MoOCl_2$ and $NaW_2O_2Br_6$	Linkoping University	LIU, Xianjie
Photoemission Studies about the Spin Texture of Fermi Arc in Altermagnetic Weyl Semimetal CrSb	Sunchon National University	CHO, Soohyun
Spin-ARPES Study on the Exotic Spin Texture of Unconventional Magnet VNb_3S_6	Southern University of Science and Technology	LIU, Chang
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.x nm 用反射多層膜の反射率測定	東北大学	江島　丈雄
テーパー型高感度マイクロチャンネルプレートの光検出効率測定	高エネルギー加速器研究機構	的場　史朗
真空紫外光学窓材料の屈折率測定	高エネルギー加速器研究機構	大石　裕
VUV 放射光と Stark 量子ビート分光を用いた Rydberg 原子による新物理探索の基盤研究	高エネルギー加速器研究機構	神田聡太郎
キラル分子層で挟まれた歪んだ三角格子におけるフラストレーションの研究	愛媛大学	山本　貴
中心対称スキルミオン物質のフェルミオロジー	東京大学	近藤　猛
電子ドープ型銅酸化物高温超伝導体における超伝導発現条件の解明	東京大学	堀尾　眞史
終端面および膜厚の異なる交代磁性体 MnTe 薄膜の電子状態の温度依存性：磁性とスピン分裂の相関の解明	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-d)	東京理科大学	中山　泰生
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 III	分子科学研究所	解良　聡
n 型熱電材料 $Mg_3Sb_{0.5}Bi_{1.5}$ の低励起エネルギー角度分解光電子分光	名古屋大学	伊藤　孝寛
電子ドープ系銅酸化物高温超伝導体における準粒子強度の温度依存性	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 $Yb(Ni_{1-x}Pt_x)_3Al_9$ の伝導電子バンド構造の研究	広島大学	佐藤　仁
Disentangle the “Metallic” Properties of n-Type High-Conductive Polymer: PBFDO	Linkoping University	LIU, Xanjie
Unravelling the Valence Band Resonance in Two-Dimensional Organic Crystal Films and Their Band Dispersion	Linkoping University	LIU, Xanjie
Uncovering the Transition from Flatband Metal to Mott Insulator in 4Hb-TaS_2	City University of Hong Kong	MA, Junzhang
ARPES Study on the Electronic Structures of Unconventional Antiferromagnets $CoNb_4Se_8$ and Ce_2CuGe_6	Southern University of Science and Technology	LIU, Chang
新型スキルミオン物質の低エネルギーバルク敏感高分解能 ARPES	東北大学	中山　耕輔
VUV 光による孤立励起分子の遅延解離過程の研究 2	京都大学	間嶋　拓也
Hydrogen Bonding of Water Confined in Hydrophobic Single Wall Carbon Nanotube with and without Coexistent KCl	信州大学	金子　克美
3d 遷移金属 L2,3 端X線吸収スペクトルの高エネルギー領域に現れる吸収構造の研究	京都工芸繊維大学	今田　早紀
ブリージングパイロクロア型強磁性金属における真空紫外反射分光	筑波大学	藤岡　淳
ライマンアルファ検出器の開発	核融合科学研究所	小林　政弘
フェナントロリン誘導体と窒化鉄子層による有機－無機ハイブリッド構造の新規スピン機能性の観測	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
複合電子系の構造，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 13 族元素化学種と二核後周期金属錯体の性質の解明	東京科学大学	山下　　誠
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
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能解明予測のための理論統合アプローチ	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	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有機デバイスを指向したアニオン性有機金属錯体の設計	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とイオン化 Franck-Condon 因子の見積りによるイオン化誘起原子移動メカニズムの研究	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
有機試薬を用いた分子内および分子間環化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
ヘロナミド類の特異的活性の機構解明と計算分子設計	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
広い熱力学条件下における水－疎水性分子系の振動・拡散・吸着ダイナミクス	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
ジホスフェン錯体および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
三脚巴状分子の凝集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修飾した金属クラスターの幾何構造と励起状態に関する研究	立教大学	三井　正明
粗視化モデルと全原子モデルを相補的に利用したタンパク質の分子内コミュニケーションの新規な同定手法の開発	名古屋大学	寺田　智樹
機能性分子と生体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
生体分子におけるリガンド多価相互作用ならびに結晶内への分子取り込みに関する理論研究	北里大学	能登　　香
軟Ｘ線光科学に関する理論的研究		
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	広島大学	高橋　　修
酢酸金属塩水溶液の XAS シミュレーション	東京大学	尾谷　優子
Irving-Kirkwood/FMM 法の開拓とタンパク質熱輸送物性への応用	東京大学	佐々木岳彦
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	名古屋大学	倭　　剛久
柔らかい分子集合体の分子シミュレーション 2	静岡大学	鳥居　　肇
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	北里大学	渡辺　　豪
アミノ酸の二重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	早稲田大学	中井　浩巳
触媒化学反応機構の理論的解明	金沢大学	川口　一朋
機能性有機分子材料の電子的性質に関する理論的研究	茨城大学	森　　聖治
高精度相対論的量子化学計算にむけた方法論の開発と応用および量子化学計算データベースを用いた機械学習法の開発	三重大学 広島大学	伊藤　彰浩 阿部　穣里
次世代 AI 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	東京科学大学	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
計算化学を用いたタンパク質の多量体化，金属添加や糖化による構造と機能の影響に関する研究	京都府立大学	リントゥルオト正美
液晶の対称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
MD シミュレーションによる β2 アドレナリン受容体の動的分子活性制御機構	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
結晶セルロース，アモルファスセルロース／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
次世代デバイスを目指した有機材料の電子状態解析と設計	日本女子大学	村岡　梓
凝縮系における分子の構造，物性，化学反応に関する理論研究	慶應義塾大学	畑中　美穂
ベンゼン環を構造単位とする板状分子性液体の輸送係数の定式化	新潟大学	大鳥　範和
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
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分子カプセルのキラル光学特性	東京科学大学	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
タンデム質量分析法による有機化合物異性体の識別	産業技術総合研究所	浅川　大樹
フラグメント分子軌道法を活用した大規模分子の物性評価理論と計算手法の開発および応用	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
Computation of an Extensive Dataset of Reliable Molecular Properties of Acid/Base Aerosols for Improved Climate Modelling	Nagasaki University	チエン　バン
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
分子動力学計算を用いた磁場下を流動する溶融塩と流路界面におけるイオン構造評価	東北大学	宍戸　博紀
放射性廃棄物処理における選択的溶媒抽出機構の分子科学研究	広島大学	井口　佳哉
後周期遷移金属ポルフィリン錯体を用いる小分子活性化	理化学研究所	村田　慧
分子動力学シミュレーションを用いた膜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
シミュレーションと機械学習に基づく抗体およびワクチン抗原の分子設計	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
酵素および人工触媒における反応活性点の理解	京都大学	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とその利用，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
表面活性な遷移金属成分を含む溶融酸化物の表面イオン構造の分子シミュレーション	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
機能性 π 共役有機分子と五核合金金属クラスターの電子状態の理論解析	名古屋大学	柳井　毅
水溶液中の巨大分子の拡散挙動に対する分子動力学研究と摩擦の各原子の寄与への分解解析	九州大学	秋山　良
カルボニル化および水素化反応の反応経路探索	愛媛大学	城塚　達也
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
計算化学を用いた複雑分子合成の効率化研究	富山県立大学	深谷　圭介
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
生物由来素材・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
可視光で励起する遷移金属錯体の合成と物性予測	早稲田大学	太田　英介
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
機械学習ポテンシャルを用いた表面・界面の分子シミュレーション	東京大学	中山　哲
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
理論計算とレーザー分光法による生体分子認識の分子論的理解	東京科学大学	平田　圭祐
イオン性色素結晶を含む新規 π 電子系の合成と配列制御	山形大学	山門　陵平
染色体の新規モデル開発と原子間力顕微鏡を用いた計測に関するシミュレーション	金沢大学	炭竈　享司
分子認識により円偏光発光性を示すビナフチル環状多量体の開発	岡山大学	高石　和人
凝縮相中の X 線光化学反応の時間分解 X 線分光法による追跡	理化学研究所	山崎　馨
光渦電磁場による構造形成の反応分子動力学・電磁波伝播シミュレーション	核融合科学研究所	中村　浩章
ポリオキソメタレートと有機分子や金属ナノクラスターからなる分子性複合触媒の開発	東京大学	鈴木　康介

拡張アンサンブル法を用いたタンパク質表面糖鎖ネットワーク構造探索	医薬基盤･健康･栄養研究所	李　秀栄
計算化学と機械学習を用いた生体分子に関する化学反応解析	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
Sim2Real 転移学習によるデータ駆動型材料研究	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
π電子系マクロサイクルの構造・電子特性・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
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
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
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
時間分解赤外分光法によるナノ結晶界面における光化学反応の解明	立命館大学	小林　洋一
計算化学的手法を用いた遷移金属および典型元素錯体の電子構造および反応機構解明	大阪大学	兒玉　拓也
人工力誘起反応法を利用した新規不斉分子探索：高効率円偏光発光材料及び高エナンチオ選択的触媒の開発	北海道大学	長田　裕也
活性化学種の電気化学的発生とその反応性・物性に関する計算化学的研究	岡山大学	光藤　耕一
フッ素化アルキル鎖の構造物性相関の解明	京都工芸繊維大学	水口　朋子
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
新奇炭素物質の創製と機能開拓	名古屋大学	八木亜樹子
理論計算を駆使する第 9 族遷移金属触媒による新規不斉反応の開発と機構解明	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	東京科学大学	中村　雅明
All-Atom Molecular Simulation Studies for Protein-RNA Complex System	早稲田大学	浜田　道昭
アニリン分子の発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
機能性分子材料の電子物性と励起子ダイナミクス	量子科学技術研究開発機構	藤田　貴敏
多成分ガラスの高速シミュレーションのための機械学習ポテンシャル開発	大阪大学	南谷　英美
生体分子のアロステリック部位を同定する解析手法の開発	北里大学	飯田　慎仁
タンパク質分子デザイン技術の開発	大阪大学	古賀　信康
半導体成長メカニズムの自動解明に向けた基礎研究	九州大学	草場　彰
Designing 2D and Heterostructure Materials for Future Application Using Density Functional Theory and Machine Learning	東京理科大学	Arpita Varadwaj
フォトクロミック分子の光学特性に関する量子化学計算	立命館大学	長澤　裕
拡張アンサンブル法を用いた PFAS と生体高分子の相互作用解析	兵庫県立大学	尾嶋　拓
植物ポリフェノールの化学構造，立体配座ならびに反応機構に関する研究	長崎大学	松尾　洋介
高分解能分子分光実験のための計算化学	神戸大学	馬場　正昭
複雑な海洋天然物の構造・配座解析，および新規合成法開発における反応機構解析	中央大学	村田　佳亮
バイオセンシング技術を志向した高輝度円偏光発光分子の作用機序解明	大阪大学	重光　孟
溶質を添加した微小な水液滴の真空中での凍結過程	九州大学	吉岡　拓哉
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
第一原理分子動力学計算と機械学習による水和動力学の研究	お茶の水女子大学	黒木菜保子
液体の統計力学理論と分子動力学法に基づく生体分子中の相互作用に関する理論的研究	筑波大学	藤木　涼
反応自動探索を基盤とした有機合成・触媒デザイン・溶媒和の解析	山口大学	住谷　陽輔
第一原理計算および動的平均場理論によるドープされた DNA の電子状態と新規物性	新潟大学	大野　義章
カーボンナノチューブ内の水－炭素相互作用における多体効果を含む機械学習分子間ポテンシャルの開発	東京大学	LIU, Wenjie
高周期カルボニルメタロイドの合成と有機合成反応への応用	学習院大学	増田　涼介
グライコプロテオミクスのための活性制御を目指した分子動力学と活性測定の連携研究	野口研究所	下山　紘充
水の振動分光マップの作製	埼玉大学	山口　祥一
イオン液体 [C_nMIm][OAc]/DMSO (n = 2~7) のアルキル鎖長とセルロース溶解度の関係に関する分子論的研究	創価大学	菊池　廣大
有機・無機ナノ半導体材料の構造と電子構造の解明	兵庫県立大学	鈴木　航
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
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（継続研究）	徳島大学	熊代　宗弘
分子動力学計算による膜タンパク質の機能発現機構の解明	東京理科大学	森　貴治
Harnessing Simulations to Design Smarter Materials and Improve Drug Development	理化学研究所	RIOUAL, Elisa

RNA 結合タンパク質の凝縮メカニズムの分子基盤の解明	京都大学	関山　直孝
高感度 NMR の実現に向けた光誘起超核偏極材料の開発	東京大学	楊井　伸浩
Molecular Simulations for Designing Ion Batteries and Biomolecules	Waseda University	Aditya Wibawa Sakti
有機金属錯体を触媒としたオレフィン重合反応の理論的研究	名古屋大学	松本健太郎
有機ラジカル結合型イリジウムポルフィリン錯体を利用した抗酸化物質検出用リン光プローブの開発	東京大学	石井　和之
大規模第一原理計算の手法開発と応用	物質・材料研究機構	中田　彩子
触媒および生体分子における反応メカニズムの理論研究	九州大学	川島　恭平
ヘテロ原子の特性を生かした高難度物質変換反応の開発	東京都立大学	土井　良平
分子動力学シミュレーションによる糖鎖ダイナミクスとタンパク質機能発現の連関の探査	東京科学大学	谷中　冴子
フラグメント分子軌道法を利用した活性領域高速自動特定法の開発と糖 … タンパク質間相互作用解析	中央大学	小澤二千夏
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
分子中の電気伝導に伴うスピン渦励起	京都大学	瀬波　大土
分子クラスターに対する分子動画分光法の適用と広帯域スペクトルの帰属	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
非晶質有機半導体薄膜における極性官能基の配向角度分布分析	山形大学	横山　大輔
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
結晶構造データを用いたシッフ塩基金属錯体の DFT 計算と構造活性の統計的考察	東京理科大学	秋津　貴城
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
デュオカルマイシン様分子の化学反応に関する理論的研究	星薬科大学	山下　雄史
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
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
生体分子および溶媒の構造機能相関の解明	立命館大学	髙橋　卓也
生理活性天然有機化合物の量子化学計算	香川大学	柳田　　亮
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
遷移金属錯体を用いた 14 族元素の水素化合物変換反応に関する理論的研究	北里大学	神谷　昌宏
量子化学計算による光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
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
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
新規な典型元素化合物の性質に関する研究	学習院大学	狩野　直和
新奇ナノフープの電子状態	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
典型元素を含む有機化合物の構造計算	東京都立大学	瀬高　　渉
分子動力学シミュレーションによるアミン溶液の相平衡と熱力学量に関する研究	名古屋大学	山口　　毅
放射光 ARPES 実験解析のための固体電子状態第一原理計算	大阪大学	田中慎一郎
13–15 族元素多座配位子またはフラーレン配位子を有する遷移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
典型元素の特性を活用した光機能性開殻分子の開発	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
基底電子状態ゼロ振動準位における trans-Stilbene の非平面性の探求	日本大学	奥山　克彦
積分方程式理論とモンテカルロシミュレーションによる電解質溶液中の荷電粒子間相互作用と相挙動の研究	西日本工業大学	末松安由美
機能性有機色素の開発	岐阜大学	船曳　一正
多重水素結合 ESIPT 色素の理論計算	名古屋工業大学大	高木　幸治
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
Theoretical Study of Light-Matter Strong Coupling in Molecular Systems	京都大学	Nguyen Thanh Phuc
複数の金属種を含む常磁性混合原子価集積体の電子構造および吸収スペクトルの解明	岐阜大学	植村　一広
イオン液体と分子性液体の相互作用が金属イオンの錯形成に与える影響	佐賀大学	高椋　利幸
単粒子解析用クーロンポテンシャル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
有機分子光触媒反応の設計に関する研究	日本工業大学	小池　隆司
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
イナミンの電解酸化による複素環モチーフの合成	富山大学	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

部分フッ素化高分子からなる機能性材料の合成とその物性解明	東京大学	枚山　真史
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
水素化ハロゲンを含む 2 原子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
有機機能性分子の合成と電子構造解明	九州大学	清水　宗治
Maxwell 方程式と結合した半古典電子・分子動力学シミュレーションの開発	防衛大学校	山田　篤志
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
高い酸化力を有する有機光触媒によるシクロブタン類の合成	岡山大学	田中　健太
ポリカーボネート，ポリウレタンのアンモニアやアミン分解に関する研究	千葉大学	青木　大輔
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
高周期典型元素を含む不飽和結合種の結合様式の精査	筑波大学	菅又　　功
光学活性な金属錯体が示す円偏光りん光特性の解析・予測	兵庫県立大学	井上　　僚
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	帝京科学大学	高谷　　光
DFT 計算によるシアノ架橋金属錯体の単分子磁石特性パラメータのデータ蓄積	東京理科大学	中根　大輔
量子化学計算を用いた 3 座ピンサー型ニッケル錯体の触媒反応に関する研究	横浜国立大学	山口　佳隆
化学選択的シリル化反応における反応機構の解明	岐阜医療科学大学	萬代　大樹
DFT 計算によるパドルホイール型複核錯体と銅 (I) ハロゲノ錯体からなる一次元集積体の電子構造の解明	富山大学	高森　敦志
多項式機械学習ポテンシャルの On-the-fly 自動構築技術の開発	京都大学	成瀬　卓弥
溶媒分子の並進エントロピーが駆動する分子認識現象における多成分溶媒の混合効果	九州大学	松尾　美香
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
生体分子シミュレーションによる病気の原因物質形成機構の解明とその阻害	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
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
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
ユビキタス元素レドックスフロー電池用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
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
ペロブスカイトナノ結晶－有機色素複合体に基づく新規エネルギー移動系の構築	関西学院大学	山口　哲生
Lennard-Jones 溶液に対する Martynov-Sarkisov および Kinoshita closure 方程式の精度に関する検討	愛媛大学	宮田　竜彦
有機触媒を用いた化学反応の理論的機構解明及び反応予測	岡山大学	山崎　　賢
新規双極性有機典型元素化合物の創成と親双極子剤との反応	北里大学	内山　洋介
金属クラスターと分子の複合体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
円偏光発光性ねじれ型パイ化合物の創製	岡山理科大学	折田　明浩
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
量子化学計算によるフェノール光触媒の開発と解析	大阪大学	西本　能弘
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
化学反応のトンネル効果に関する理論計算	昭和薬科大学	橋本　善光
ホタル生物発光関連分子の理論的研究	群馬大学	樋山みやび
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
実験・理論研究の協奏研究を促進するための理論的アプローチ	東京大学	横川　大輔
量子化学計算を用いた機能性材料分子の物性解明	慶應義塾大学	東林　修平
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
分子軌道計算による有機分子構造の設計と解析	新潟薬科大学	大和田智彦
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	東京科学大学	山本　雅納
非環状ポルフィリノイド類縁体を基盤とする d–p 共役金属錯体の電子構造解析	東京都立大学	石田　真敏
量子化学計算と機械学習を用いたニトロソアミン類の代謝活性化機構に基づく毒性予測	昭和薬科大学	臼井　一晃
深共晶溶媒の水素結合構造解析	佐賀大学	梅木　辰也
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
金属錯体の分子集合体を基盤とする物質変換反応場の構築	東京科学大学	小杉　健斗
量子化学計算を用いた新規重合反応の設計	名古屋大学	渡邉　大展
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
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
新規生物活性物質の設計・合成・機能評価	九州大学	平井　　剛

有機金属錯体と小分子との反応生成物と反応機構の理論的検討	群馬大学	村岡　貴子
Computational Investigation of Chiral Stability, Aromaticity, and Optoelectronic Properties of a New Class of Heteronanographenes Synthesized *via* Double C–O Insertion	大阪大学	モハメッド サリム ヘフニ
遷移金属錯体に於けるゴーシュ効果の解明	東京都立大学	杉浦　健一
「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
Toxicological Effect of Carbon Black Nanoparticles on Proteins: A Combined Computational and Experimental Study	Tokyo University of Science	Samal Kaumbekova
In situ プローブ合成戦略のための量子化学計算に基づく理論的プローブ設計手法の確立	岐阜薬科大学	河合　寛太
ベンゾチアゾール型発光分子の基底・励起状態解析	茨城大学	盛田　雅人
イリジウム触媒を用いた転移を伴う環化異性化反応による 3- スルホニルインドール合成法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
非共有結合性相互作用に立脚する緩衝液中での化学反応	和歌山県立医科大学	澤崎　鷹
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
光誘起脱芳香族化に基づく光と化学反応剤との協働的化学反応系の開発	東京大学	正井　宏
πクラスター分子の電子物性の解明	大阪大学	西内　智彦
光薬理学リガンドのタンパク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
2,2- 二置換シクロペンタン -1,3- ジオンから誘導した 1,4- ビスシロキシ -1,3- シクロペンタジエンが持つ特異的な反応性に関する計算解析	星薬科大学	池内　和忠
電気化学的原子挿入反応の機構解析	横浜国立大学	信田　尚毅
3 次元π共役構造体の創製	分子科学研究所	瀬川　泰知
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
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
アルカリ金属カチオンによる不飽和炭化水素の還元的官能基化反応における立体選択性制御法の開発	京都大学	黒木　尭
イオン性有機分子光触媒の創成に向けた理論的解析	慶應義塾大学	大松　亨介
リエントラントネマチック相を発現する分子の探索	日本大学	吉田　純
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
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
高原子価銅錯体の中心金属酸化数決定法の確立への挑戦	山陽小野田市立山口東京理科大学	竹山　知志
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
時間分解分光と TDDFT による新規第一周期遷移金属錯体の光励起状態解析	九州大学	小川　知弘
キラル NHC 配位錯体の性質予測に関する研究	東京電機大学	山本　哲也
アセチレン配位に基づく自己集合性金属ナノクラスター集積錯体の構造・物性評価	群馬大学	堂本　悠也
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	東京科学大学	石田　豊
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
有機ケイ素化合物の構造と性質	特殊無機材料研究所	久新荘一郎
理論計算による機能性有機材料の物性評価	東京都立産業技術研究センター	小汲　佳祐
MOF/COF の骨格編集による多次元炭素材料の合成法の開発	東京大学	山田　圭悟
還元的環化・環化異性化反応のスイッチング機構における配位子の影響評価と現象一般化	北海道大学	中村　顕斗
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
三重項励起スルホキシドの挙動シミュレーション	京都大学	前島　咲
分子ラジカル触媒の創生研究	名古屋大学	武藤　慶
ホイスラー化合物の効率的な合成材料候補の探索のための機械学習モデルの構築	名古屋工業大学	宮崎　秀俊
エキシトン量子ゲートの計算分子設計	量子科学技術研究開発機構	米谷　佳晃
メチシリン耐性黄色ブドウ球菌（MRSA）の耐性因子 PBP2a と阻害剤複合体の立体構造解析	城西国際大学	渋谷明日香
多核金属錯体の精密電子移動制御と自在反応性操作に向けた理論的研究	大阪大学	正岡　重行
光励起による分子挙動の予測を目指したアルゴリズムの開発	岐阜薬科大学	山口　英士
柔軟なペプチドの環状金属錯体の環境に応答した物性変換に対する計算科学的アプローチ	お茶の水女子大学	三宅　亮介
(σ+π)– 混合非局在電子系の創製および物性評価	埼玉大学	斎藤　雅一
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
分子性触媒を用いるエナンチオ選択的酸化的反応の遷移状態解析	東北大学	笹野　裕介
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
イオン液体及び高分子の気体透過性の分子動力学シミュレーション	北海道大学	島田　敏宏
機能性開殻分子材料の構造－物性－電子状態相関の解明	大阪大学	草本　哲郎
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	正田浩一朗

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
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
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
芳香環による準安定化を利用した新奇低原子価錯体の創製	岡山大学	畑中　翼
ハイブリッド汎関数を用いたアルコール溶液中の Fe イオンの配位構造計算	茨城大学	井上　大
カチオン性金触媒による分子内環化反応の反応機構に関する理論研究	東京理科大学	石田　健人
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	大阪大学	吉田　将己
有機フッ素化合物の合成	山口大学	川本　拓治
オレフィンメタセシス反応を用いた vic- ジフルオロオレフィン骨格の合成	相模中央化学研究所	上地　達矢
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
反応経路解析と反応動力学解析を活用した化学反応の分子論的理解	北海道大学	堤　拓朗
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 螺旋構造を利用した機能性色素分子の組織化と光機能材料の創出に向けた分子シミュレーション	兵庫県立大学	高田　忠雄
Design and Synthesis of Optically Pure Tri-aza[7], [8], and [9]Helicene Borane Complexes for Enhanced Circularly Polarized Luminescence and Catalytic Applications	大阪公立大学	アハマドサブリアブデルモエティガブラ
キラルなラダー型分子・高分子・分子集合体の光電子物性	東京都立大学	石割　文崇
二次元錯体の分子吸着特性に関する理論研究	芝浦工業大学	土持　崇嗣
反応ネットワークモデルに基づく中規模配位自己集合錯体の反応過程の数値的解明	東京大学	高橋　聡
高い円偏光純度と発光量子収率を兼ね備えた円偏光発光性金属有機構造体の開発	東京大学	原　正宜
ニッケル白金ティアラクラスターの電子状態の解明	東北大学	川脇　徳久
生体高分子の化学変換を志向した有機反応の開拓および理解	千葉大学	笠原　彰友
光反応における分子の構造，安定性に関する研究	学習院大学	奥津　賢一
共役高分子の高次構造解析と光電気特性のシミュレーション	関西大学	三田　文雄
量子化学計算と分子動力学計算による選択的吸着特性の解析	富山大学	大和　直樹
N_2O 還元触媒系の開発	名古屋工業大学	小澤　智宏
高周期元素化学種が配位した遷移金属錯体の電子構造に関する理論的研究	東北大学	橋本　久子
フラビン誘導体触媒を用いる不斉バイヤービリガー反応の反応機構解析	早稲田大学	山本　佳奈
ジヒドロベンゾキノン二核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
新規環状 π 共役分子の構造・電子状態研究	大阪大学	武田　洋平
プロトン／電子応答能をもつ動的反応場が駆動する多プロトン共役多電子移動	立命館大学	桑田　繁樹
典型元素と π 電子系からなる新規化学種および新規材料の開発	相模中央化学研究所	森迫　祥吾
Modeling and Simulation Studies for Peptide and Peptidomimetic Chemistry	名古屋大学	林　剛介
刺激応答性液体材料の光物理化学特性の探索	相模中央化学研究所	磯田　恭佑
ジピリド縮環型カルベンを基盤とする炭素 3 座配位子とその金属錯体の合成と性質	広島大学	水田　勉
新規固定化金属錯体・有機分子・金属クラスター触媒の動作機構の理論的解明	横浜国立大学	長谷川慎吾
不斉触媒反応の立体選択性に関わる遷移状態構造データの創出および利活用	東京大学	坪郷　哲
Alkyl Succinate Synthase の性状解析と構造予測	岐阜大学	高橋三四郎
第一原理計算及び画像処理手法を用いた運動量顕微鏡データ解析フレームワークの構築	分子科学研究所	佐藤　祐輔
縮合環が組み込まれた高歪み環状 π 共役系分子の電子構造解析	東京理科大学	土戸　良高
生理活性分子の創製	東北大学	石川　稔
分子内ジスルフィド結合の環歪みエネルギー計算	東京農工大学	村岡　貴博
正電荷を有する電子受容体の設計に基づく近赤外蛍光色素の開発	名古屋大学	村井　征史
リパーゼが触媒するエステル化反応のエナンチオ選択性	大阪大学	鹿又　喬平
触媒的ヌクレオチド合成反応における反応機構解明及びデータ駆動型新規触媒開発	東京大学	齋藤　由樹
機能性化学を志向した未踏低配位典型元素試薬の設計と合成	東京大学	小池　太智
1,5- 水素移動を伴った触媒的 [2+2+2] 付加環化反応の反応機構解析	早稲田大学	柴田　高範
イオン液体中の金属錯体構造と錯平衡に関する研究	新居浜工業高等専門学校	真瀬田幹生
ドナー・アクセプター型ジフェニルアセチレンの発光特性の解明	京都工芸繊維大学	小林　和紀
金属触媒的高エナンチオ選択的分子変換反応の計算化学的考察	東北大学	長澤　翔太
新規メタルフリー光レドックス触媒の理論計算による光物性の解明	静岡県立大学	岡本　衆資
芳香環と芳香環の間にシリル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
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
アルコール水溶液中における DNA 周囲の分子間相互作用と溶媒和構造の解明	同志社大学	貞包浩一朗
キラルアイソトポマーの理論円二色性スペクトルによる配座解析	東京理科大学	川崎　常臣
ヨードチオフェンの紫外誘起反応における内殻光電子の化学シフトに関する量子化学計算	名古屋大学	伏谷　瑞穂

Protein Engineering of Enzymes Assisted by MD Simulations	名古屋大学	ダムナニョヴィッチ ヤスミナ
超分子カチオンを導入した分子性イオン結晶における分子間力の評価に基づく電気磁気物性の開拓	熊本大学	高橋　仁徳
アザヘリセンキラル配位子の合成と不斉触媒化	分子科学研究所	松雪　洋恵
高感度非線形分光計測と計算化学の融合に基づく埋もれた界面の新奇構造解析基盤の構築	分子科学研究所	高橋　翔太
A DFT Study on Biopolymer-Supported Gold Nanoparticle Catalysts for Homocoupling of Phenylboronic Acid	Tokushima University	Karanjit Sangita
グルタミド超分子組織体表面における機能基のキラル配向構造およびその光特性の解析	熊本大学	桑原　穣
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
Molecular Dynamics Simulations of Protein-DNA and Protein-Glycan Complexes	大阪大学	信夫　愛
分子配向材料の熱伝導特性における異方性発現機構の検討	東京科学大学	森川　淳子

（基礎生物学分野共同利用）

課　題　名（通年）		提案代表者
Exploring the Interconnected Genomic Evolution in Obligate Plant-Insect-Microbe Interactions	理化学研究所	XIN, Tong
ゼノパ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
「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クエンス解析	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	丸山真一朗
魚類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
生物間相互作用（共生，寄生，社会性）に係る分子機構の解明	筑波大学	頼本　隼汰
水産動植物の比較ゲノム・トランスクリプトーム解析	広島大学	豊田　賢治
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	埼玉大学	日原由香子
日本列島における野生植物の種分化ゲノミクス	兵庫教育大学	山本　将也
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
昆虫新奇形質の形成メカニズムの解明	基礎生物学研究所	新美　輝幸
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	基礎生物学研究所	林　亜紀
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
生物進化の分子機構の解明	基礎生物学研究所	瀬上　紹嗣
真社会性昆虫のゲノム解析	慶應義塾大学	林　良信
脂肪組織のゆらぎの生物学	富山大学	小野木康弘
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
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	筑波大学	丹羽　隆介
ナマズ目コリドラス精嚢発現遺伝子の同定	明治大学	河野菜摘子
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
非モデル生物のゲノム及びトランスクリプトーム解析	慶應義塾大学	前田　太郎
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
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
シロアリ類のソシオゲノミクス	富山大学	前川　清人
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
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	東北大学	秦　有輝
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	北海道大学	佐藤　昌直
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
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
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
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
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
奈良公園矮化オオバコの集団ゲノミクス	東北大学	石川　直子
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
草原生植物の集団遺伝学的解析	北海道大学	倉田　正観
ゲノム情報を用いたバイオ農薬の開発 2	岐阜大学	山内　恒生
階層的空間スケールを設けた遺伝構造解析による海藻穿孔性ヨコエビ類コンブノネクイムシの藻場利用生態の解明	東北大学	岨中　夏美
脳の進化の分子基盤を解明するための全能単細胞トランスクリプトーム種間比較	名古屋大学	石川　由希
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	九州大学	高橋　大樹
次世代シークエンサーを用いた種に固有の仙椎－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
日本の野生植物の集団動態解析	京都大学	瀬戸口浩彰

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	鈴木伸之介
新規モデル生物イベリアトゲイモリのゲノム情報整備	琉球大学	松波　雅俊
Unraveling the Mechanisms of Environmental Adaptation in Wild Plants through Population Genomics	京都大学	阪口　翔太
酵母とヒトにおけるゲノム配列解析	東京大学	山下　　朗
ミトコンドリアタンパク質複合体形成に関与するシステイン残基の酸化還元修飾	金沢大学	高山　浩昭
赤潮藻およびそれに影響を受ける生物のトランスクリプトーム	水産研究・教育機構	紫加田知幸
高分解能を備えた新規変異率測定法の開発と評価	国立国際医療研究センター	竹本　訓彦
難読性ゲノムの効率的アセンブリ手法の開発	学習院大学	李　　允求
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	奈良先端科学技術大学院大学	川本　　望
Analysis of *Helicobacter pylori* Synteny	National Institute of Genetics	Kirill Kryukov
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
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	武蔵大学	堀越　正美
脊椎動物の生殖制御に関する分子レベルでの解析	北海道大学	藤森　千加
Analysis of Genetic Information on Morphogenetic Mechanisms Using Fish Fins	鳥取大学	阿部　玄武
Understanding the Mechanisms of Plant Virus Infection and Other Biotic Stress Responses	北海道大学	中原　健二
セリ科などの作物・薬用植物における特化代謝産物の生産機構の解明	京都大学	棟方　涼介
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
日本産トウガラシ 4 品種における乾燥ストレス応答の評価	北海道大学	Rahmadani Primanindita Airlangga
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

（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	和歌山県立医科大学	入江　克雅
4 次元 MRI による脳の機能及び構造解析	生理学研究所	福永　雅喜
2 型糖尿病の病態進展機序の解明	University of Toyama	恒枝　宏史
巨大ボリューム電子顕微鏡画像の 3 次元再構築処理と AI 技術を用いた自動セグメンテーションの技術開発	生理学研究所	Nilton Liuji KAMIJI
二枚貝の環境ストレスによる生理学的影響の解析	金沢大学	端野　開都

（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	
全原子モデルを用いた分子動力学シミュレーションによるハイドロゲル系における物質分配の解析	大阪大学	松林　伸幸
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	関西大学	藤本　和士
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	大阪大学	尾方　成信
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	東京科学大学	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	2025			
						前期	後期	計	登録者数
共同研究	（1）課題研究		2	1	1	2	0	2	15
	（2）協力研究 *1		47	33	39	21	23	44	124
		（マテリアル）*2	40	56	84	35	35	70	238
研究会	（3）分子研研究会		6	6	5	6	0	6	409
	（4）若手研究活動支援		1	0	1	2	0	2	43
	（5）岡崎コンファレンス		0	0	0	1	0	1	27
	所長招へい *3		5	35	4	37	0	37	37
	UVSOR 研究会 *3		1	2	2	0	3	3	86
施設利用	（6）① UVSOR		209	192	220	115	117	232	1,090
		（マテリアル）*2	5	3	2	1	1	2	18
	（6）②機器センター	（マテリアル）*2	136	196	206	97	97	194	670
	（6）③装置開発室		0	0	0	0	0	0	0
		（マテリアル）*2	12	10	12	12	12	24	64
	（6）④計算科学研究センター		298	302	429	441	0	441	1,994

*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】
トライボロジーの分子化学
2025 年 4 月 7 日（月）～ 8 日（火）　岡崎コンファレンスセンター

4 月 7 日（月）

11:00 ～	希望者のみ分子研施設見学（UVSOR，AFM 等）
13:00 ～	招待講演 6 件（発表 30 分＋質疑応答 5 分＋入れ替え 5 分）@ 2F 小会議室
13:00 ～ 13:35	平山 朋子（京大） 境界潤滑の分子論的理解：いま何が求められているか
13:40 ～ 14:15	大西 洋（神戸大，分子研） 表面科学研究者から見たトライボロジー
14:20 ～ 14:55	湊 丈俊（分子研） 原子間力顕微鏡を用いた固液界面のナノ力学計測
15:10 ～ 15:45	伊藤 伸太郎（名大） 潤滑性をもつポリマー薄膜のナノ力学とナノ構造
15:50 ～ 16:25	張 賀東（名大） トライボシミュレーションの進歩と活用
16:30 ～ 17:05	小野寺 拓（ENEOS） AI 技術を活用した分子シミュレーション～トライボロジー現象の解明と潤滑油設計～
17:10 ～	若手研究者による研究紹介（発表 13 分＋入れ替え 2 分）
17:10 ～ 17:25	山下 直輝（京都工芸繊維大） 脂肪酸が形成する自己組織化膜の可視化とナノスケール摩擦特性評価
17:25 ～ 17:40	宋 玉璽（名大） 高分子添加剤の吸着膜構造がしゅう動時の潤滑特性に及ぼす影響
17:40 ～ 17:55	霜降 真希（京大） 単結晶シリコンへき開面ナノギャップ MEMS の開発とその物性評価手法
17:55 ～ 18:10	坂田 秋津（神戸大） 原子間力顕微鏡を用いた潤滑油ー固体界面の計測評価
18:20 ～	集合写真撮影
18:30 ～	意見交換会（90 分程度）@ 1F 中会議室

4 月 8 日（火）

9:00 ～	招待講演 5 件（発表 30 分＋質疑応答 5 分＋入れ替え 5 分）@ 2F 小会議室
9:00 ～ 9:35	佐々木 信也（東京理科大） トライボロジーが拓く新たな表面科学の挑戦
9:40 ～ 10:15	栗原 和枝（東北大） 共振ずり測定による境界潤滑の新しい描像
10:30 ～ 11:05	水上 雅史（東北大） 表面力・共振ずり測定法による高分子潤滑表面の構造・特性評価
11:10 ～ 11:45	宮前 孝行（千葉大） 潤滑剤の摺動条件下での SFG 分光その場計測と分子配向挙動
11:50 ～ 12:25	佐藤 信浩（京大） 量子ビームによるソフトマター構造解析と「もんじゅ」サイト新試験研究炉への展開
12:25 ～	閉会の挨拶 大西 洋
12:30	散会

【ミニ国際シンポジウム】
最先端の実験と理論で迫る分子ダイナミクスの階層性
2025 年 5 月 31 日（土）～ 6 月 1 日（日）　岡崎コンファレンスセンター

5 月 31 日（土）

10:00 – 10:10	Opening Remarks
10:10 – 10:50	Tianquan Lian (Emory University, US) “Identifying the Hot Carrier Effects and Mechanisms in Plasmonic Photocatalysis”
10:50 – 11:30	Jyotishman Dasgupta (Tata Institute of Fundamental Research, India) “Photoredox Transformations in Water using Host–Guest Charge Transfer Chemistry”
11:30 – 12:10	Jooyoung Sung (DGIST, Korea) “fs-Imaging of Charge Carriers in Perovskite Thin Films”

13:50 – 14:30 Toshinori Suzuki (Kyoto University, Japan)
“A New Twist to Electronic Relaxation of Pyrimidine Nucleobases”

14:30 – 15:10 Hong-Guang Duan (Ningbo University, China)
“Unraveling of Wave-packet Dynamics and Associated Quantum Coherences by Two-Dimensional Electronic Spectroscopy”

15:30 – 16:10 Akihito Ishizaki (The University of Tokyo, Japan)
“Atteempt to Explore the Dynamics in Molecular Systems Using Quantum Science and Technology”

16:10 – 16:50 Korenobu Matsuzaki (RIKEN, Japan)
“Spectroscopy Empowered by Entangled Photon Pairs: From Steady-State to Time-Resolved Measurements”

16:50 – 17:30 Minhaeng Cho (IBS, Korea) *Canceled
“Single Photon Interferometry and Quantum Spectroscopy with Entangled Photons”

18:00 – Social gathering for the invited speakers

6 月 1 日（日）

09:00 – 09:40 Wei Xiong (University of California San Diego, US)
“Vibrational Sum-Frequency Generation Imaging to Identify Tissue Alignments in Tumors”

09:40 – 10:20 Toru Kondo (National Institute for Basic Biology, Japan)
“Heterogeneous Ultrafast Energy Transfer in Photosynthetic Light-Harvesting Antenna Unveiled by Single-Particle Transient Absorption Spectroscopy”

10:40 – 11:20 Keiichi Inoue (The University of Tokyo, Japan)
“Apusomonad Rhodopsins: A New Family of UV-Sensitive Anion-Conducting Channelrhodopsins”

11:20 – 12:00 Henrike Müller-Werkmeister (University of Potsdam, Germany)
“Exploring Biomolecular Dynamics by 2D-IR Spectroscopy—From ‘Sweet’ Spectra to Mesoscale Structures and Enzymatic Catalysis”

13:40 – 14:20 Shigehiko Hayashi (Kyoto University, Japan)
“Atomistically Deciphering Functional Activation Processes of Proteins with Hybrid Molecular Simulations”

14:20 – 15:00 Igor Schapiro (Technical University Dortmund, Germany)
“Understanding Photoisomerization—Insights from Hybrid QM/MM Simulations”

15:00 – Closing Remarks

【ミニ国際シンポジウム】
Symposium on Optical Materials and its Measurements in UVSOR
2025 年 6 月 24 日（火）～ 25 日（水） 分子科学研究所研究棟 201 号室

6 月 24 日（火）

Section 1 **Users report (chair : Kurosawa/Matsui)**

10:30 – 10:40 Opening remark
Kurosawa (Tohoku U.)

10:40 – 11:00 Measurement of Luminescence Characteristics of Synthetic Diamond at BL3 of UVSOR
Umemoto (KEK) <Invited>

11:00 – 11:20 Material Search for Red-NIR Emitting Scintillators
Kodama (Saitama U.) <Invited>

11:20 – 11:35 Temperature Dependence of Luminescence Properties of Tl and Sr Co-Doped $Cs_3Cu_2I_5$ Crystal
Urano (Tohoku U.)

11:35 – 11:50 Optical and Electronic Properties of Zero-Dimensional Type Lithium Hafnium Iodide Scintillator
Fujiwara (Tohoku U.)

11:50 – 12:05 VUV Spectroscopy of Pr^{3+}-Doped Blue-to-UV Upconversion Glass
Kitagawa (AIST)

13:30 – 14:00 TBA
V. Pankratov (U. Latvia, Riga) <Invited>

14:00 – 14:20 Photoluminescence Decay Behavior of Plastic Scintillators with VUV Excitation—Contribution of Long Component Originating from Triplet Excited States
Koshimizu (Shizuoka U.) <Invited>

14:20 – 14:35 Low-Temperature Photoluminescence Properties of Ce^{3+}-Doped $Lu_3Al_5O_{12}$ Thick Film Phosphors Grown *via* Chemical Vapor Deposition
Ito (Yokohama N. U.)

14:40 – 15:00 Energy Transfer Mechanism from Localized Exciton States to Other Impurity Centers in Co-Doped NaCl:I^-, X (X = Tl^+, Ce^{3+}, *etc.*) Crystals
Kawai (Osaka M. U.) <Invited>

15:00 – 15:20 Evaluation of the Current Situation of BL3B
Kitaura (Yamagata U.) <Invited>

Break and photo

Section 2 **Potential Users (chair: Kitaura)**

15:50 – 16:20 Luminescence and Scintillation Properties of Ce,Mg:$Lu_2YGa_xAl_{5-x}O_{12}$ Ceramic Scintillators for Fast Timing Application
W. Chewpraditkul (KMUTT) <Invited>

16:20 – 16:35 Temperature Dependence of Photoluminescence Kinetics, Scintillation Properties, and Coincidence Time Resolution of Mo Co-Doped $Y_{1.5}Gd_{1.5}Al_2Ga_3O_{12}$:Ce (Mo = 0, 300, 600 ppm) Multicomponent Garnet Crystals
Warut Chewpraditkul (KMUTT)

Section 3 **Discussion: the next UVSOR，光物性から見た次世代の UVSOR への要望**

16:50 – 17:00 Status Report on Site from Technical Staffs
Iwayama

17:00 – 17:45 Discussion
Kurosawa Ueda (JAIST) <Invited>

6 月 25 日（水）
見学会

【分子研研究会】
森野ディスカッション
2025 年 9 月 1 日（月） 岡崎コンファレンスセンター小会議室（ハイブリッド開催）

15:30 座長挨拶　神取（運営委員）

15:35 – 16:10 電子スピンを制御する――スピン遷移と偏極と緩和の量子化学
京都大学　倉重 佑輝

（質疑 10 分，休息 10 分）

16:30 – 17:05 化学反応の反応経路ネットワーク表現
北海道大　前田　理

（質疑 10 分）

17:15 – 17:45 総合討論

閉会

【ミニ国際シンポジウム】
International Workshop for Young Scientists on Crystalline Organic Materials (YSCOM2025)
2025 年 9 月 26 日（金）～ 28 日（日） 岡崎コンファレンスセンター

9 月 26 日（金）
Chair: Sugiura

13:30 – 13:40 Opening

13:40 – 14:10 [Invited Talk1] Shuhei FUKUOKA
“Systematic Study of Electronic States of λ-Type Organic Conductors Utilizing Chemical Substitution Effects”

14:10 – 14:25 [OS01] Keiju WAKASUGI
“Investigation of 6 K Anomaly in κ-$[(ET)_{0.5}(BEST)_{0.5}]_2Cu_2(CN)_3$”

14:25- – 14:40 [OS02] Shu SHUNDO
“Phase Diagram of the Bilayer-Type Organic Superconductor $(ETTMSTF)_2BF_4$: Superconducting Phase on the Border of the Peierls Phase”

14:40 – 14:55 [OS03] Shusaku IMAJO
“Ultrasonic Study of Fluctuating Superconductivity in κ-Type Organic Superconductors”

Chair: Dekura

15:10 – 16:00 Ice Breaking Session

16:00 – 17:20 Poster Session 1

17:20 – 17:30 Evening Meeting

17:30 – 18:00 Lodge Check-in

18:00 – 20:00 Welcome Party

9 月 27 日（土）

Chair: Imajo

10:00 – 10:10	Morning Meeting
10:10 – 10:40	[Invited Talk2] Alexandre ABHERVÉ “Light and Spin Polarization with Chiral Hybrid Organic–Inorganic Materials Based on Halide Perovskites or Lanthanide(III) Complexes”
10:40 – 10:55	[OS04] Yoshihiko SEKINE “Electron Transfer Tuning by Molecular Arrangement Control”
10:55 – 11:10	[OS05] Hiroshi NISHIMOTO “n-Type Semiconductor Properties of Quinoidal Propylenedioxythiophene Dimers: Molecular Design toward Air Stability, Solution Processability, and Crystallinity”
11:10 – 11:25	[OS06] Nozomi ONODERA “Exploration of Novel Dielectric Properties Based on Rotational and Conformational Degrees of Freedom in Plastic Crystalline Dinitrile”

Chair: Yokomori

13:10 – 13:40	[Invited Talk3] Ryota MATSUOKA “Spin-Correlated Photoluminescence Properties of Organic Multiradical Systems”
13:40 – 13:55	[OS07] Kazuyuki ASAHI “Development and Evaluation of Circularly Polarized Organic Lightemitting Diodes with a Chiral Carrier Transport Layer”
13:55 – 14:10	[OS08] Takuto KOHZUMA “Magnetic Properties of Phenalenyl Radical 1-D Chains”
14:10 – 14:25	[OS09] Shiori HARADA “Crystal Structures and Physical Properties of Bistriazole-p-benzoquinone and Its Metal Complexes”
14:25 – 15:45	Poster Session 2

Chair: Sato

16:00 – 16:15	[OS10] Maria MANIADI “CISS Effect in Chiral 2D Double Halide Perovskites: New Generation of Spintronic Materials”
16:15 – 16:30	[OS11] Takayoshi KOUCHI “Type-II Altermagnetism in $[MnCl_2(H_2O)(S\text{-}HEP)_2]$: ^1H NMR Measurements and Group Theoretical Analysis”
16:30 – 16:45	[OS12] Takumasa OGASAWARA “Effects of Chirality on the Physical Properties in Molecular Assemblies of Rod-Like Tetradecylammonium Camphorsulfonate”
16:45 – 17:00	Evening Meeting

9 月 28 日（日）

Chair: Kameyama

10:00 – 10:10	Morning Meeting
10:10 – 10:25	[OS13] Shun DEKURA “Switching of the Protonic/Electronic Functionalities in 2D Copper(II)–Pyrazolecarboxylate MOFs *via* Vapor Sorpition”
10:25 – 10:40	[OS14] Rikumaru SAITO “^{13}C NMR Study on λ-$(BEDSe\text{-}TTF)_2FeCl_4$ under Pressures”
10:40 – 10:55	[OS15] Tatsuya MIYAMOTO “Electronic Polarization Modulation and Symmetry Breaking Induced by Mid-Infrared Intramolecular Vibration Excitation”
10:55 – 11:10	[OS16] Yuto NAKAMURA “Optical Study of α"-Type BEDT-TTF Salts under Pressure”
11:10 – 11:25	[OS17] Koki MIZUKAMI “6 eV-Laser Based Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy on Molecular superconductors”
11:25 – 11:55	Closing

【分子研研究会】
2050 年の生体分子科学を語る
2025 年 10 月 21 日（火）～ 22 日（水） 岡崎コンファレンスセンター大隈ホール

10 月 21 日（火）

◆座長：田原太平（理研）

13:00 – 13:10　はじめに（神取・名工大）

13:10 – 13:35　八木　清（筑波大）
「生体分子の非調和振動計算：25 年間の歩みと 25 年後」

13:35 – 14:00　井上圭一（東大）
「ロドプシンの鍵はプロトンが握る？—2050 年に向けた問題—」

14:00 – 14:25　柴田幹大（金沢大）
「タンパク質一分子イメージングで切り拓くナノ生命科学」

◆座長：伊東 忍（阪大）

14:50 – 15:15　北岸宏亮（同志社大）
「モデル錯体をつくって考えるヘムタンパク質の分子科学」

15:15 – 15:40　大洞光司（阪大）
「タンパク質化学改変が拓く生命を超克する分子システムへの挑戦」

15:40 – 16:05　庄司光男（筑波大）
「2050 年の生体分子科学の理論研究を予測する」

16:05 –　集合写真，休憩

総合討論 「2050 年の生体分子科学をみんなで語る」

話題提供者：

水谷泰久 （大阪大学）　古賀信康（大阪大学）

石森浩一郎（北海道大学） 伊東　忍（大阪大学）

18:00 – 20:00　懇親会

10 月 22 日（水）

◆座長：久保 稔（兵庫県立大）

9:00 – 9:25　近藤　徹（基生研）
「物理学・化学・生物学の統合：生体分子科学は生体内での分子科学へ」

9:25 – 9:50　梶本真司（東北大）
「マルチスケール細胞内分光イメージング：木を見て森も見る階層網羅的分光法」

9:50 – 10:15　田村朋則（京大）
「生体分子“化学”の未来」

◆座長：重田育照（筑波大）

10:40‐11:05　森　俊文（九大）
「生体分子の動きを読み解き，創り，制御する」

11:05‐11:30　小杉貴洋（分子研）
「創ることと理解することと　～どのように生体分子を設計し何を目指すのか？～」

11:30‐11:55　新津　藍（理研）
「生体分子システムの解体・再構築から予測可能な書き換えへ」

◆座長：古川良明（慶応大）

13:00 – 13:25　梁取いずみ（京大）
「鉄が拓く生命のフロンティア　老いと病を越えて，“鉄制御”が描く未来」

13:25 – 13:50　森本祐麻（東京科大）
「酵素を超えるため酵素から何を学ぶか：分子触媒における構造的拘束のデザイン」

13:50 – 14:15　堀谷正樹（佐賀大）
「明るい EPR で照らす生体分子科学～なぜタンパク質は Fe がお好き？～」

◆座長：高橋　聡（東北大）

14:40 – 15:05　齋尾智英（徳島大）
「生命を原子分解能で垣間見る」

15:05 – 15:30　片山耕大（名工大）
「視覚を化学する 2050 年の分子科学」

15:30 – 15:55　大友章裕（京大）
「生体エネルギー変換の理解と操作」

15:55 – 16:00　おわりに

【分子研若手研究活動支援プログラム】
分子科学若手の会　分野交流研究会
2025 年 6 月 15 日（日）　分子科学研究所研究棟 201 号室

13:00 ~ 13:05　イントロダクション
13:05 ~ 13:30　ショートプレゼンテーション
13:30 ~ 14:30　ポスターセッション（奇数番 30 分，偶数番 30 分）

14:40 ~ 16:40　分野融合ディスカッション

16:50 ~ 17:50　討論内容の発表

【分子研若手研究活動支援プログラム】
第 23 回 ESR 夏の学校—学際的な電子スピンサイエンスの理解と応用—
2025 年 8 月 18 日（月）～ 20 日（水）　岡崎コンファレンスセンター

8 月 18 日（月）
13:00 – 13:15　開講挨拶
13:15 – 14:15　講義　三浦　智明先生

14:30 – 17:30　講義　三宅　祐輔先生
17:30 – 18:30　夕食休憩　参加者自己紹介
18:30 – 19:30　研究紹介（ポスター掲示）
19:30 – 20:30　自由討論・交流会

8 月 19 日（火）
9:30 – 12:30　講義　福成　雅史先生
12:30 – 14:30　昼食休憩　ランチョンセミナー形式　原　英之先生
14:30 – 17:30　講義　兵藤　文紀先生

18:30 – 21:30　懇親会

8 月 20 日（水）
9:00 – 9:30　連絡　アンケート記入
9:30 – 11:30　施設見学
11:30 – 12:00　閉講挨拶

【UVSOR 研究会】
第 2 回 UVSOR 若手の会
2025 年 10 月 29 日（水）　岡崎コンファレンスセンター

13:00 – 13:30　受付
13:30 – 13:35　開会・研究会の趣旨説明
伊藤孝寛（名古屋大学）
13:35 – 14:05　自己紹介セッション①［進行：鈴木崇人（東北大学）］
14:15 – 14:45　自己紹介セッション②［進行：西原快人（大阪大学）］

14:55 – 15:35　招待講演①［座長：浅井佑哉（広島大学）］
「光電子分光のフロンティアとキャリアパスの一例」
角田 一樹（広島大学 放射光科学研究所（HiSOR））
15:55 – 16:35　招待講演②［座長：小野広喜（名古屋大学）］
「放射光施設職員としてのキャリアと新分光法開発への展開」
北村未歩（国立研究開発法人 量子科学技術研究開発機構（QST））

16:55 – 17:15　若手による意見交換会［進行：西野 史（QST）］
17:15 –　閉会
17:30 –　懇親会

【UVSOR 研究会】
UVSOR シンポジウム 2025
2025 年 10 月 30 日（木）～ 31 日（金） 岡崎コンファレンスセンター

10 月 30 日（木）

13:00 – 13:05　開会

13:05 – 13:25　施設報告
解良 聡（分子科学研究所）

座長：松井（分子研）

13:25 – 13:45　元素置換 Ta_2NiSe_5 において現れる二重ギャップ構造
HAN Jiyu（東京大学）

13:45 – 14:15　【招待講演（オンライン）】
ARPES で調べる低次元トポロジカル物質の電子状態
野口 亮（国立台湾大学）

14:40 － 15:30　ポスター　ショートプレゼンテーション

座長：田中（分子研）

15:30 – 16:00　【招待講演】
赤外ビームラインの現状と展望
池本 夕佳（高輝度光科学研究センター）

16:00 – 16:20　H_2Pc/Fe_2N 有機－無機ハイブリッド界面における N 原子の電子状態から明らかにする磁気結合状態
小野 広喜（名古屋大学）

16:20 – 16:40　励起子絶縁体 $TiSe_2$ における電子状態の対称性反転
福谷 圭祐（分子科学研究所）

17:00 – 18:30　ポスターセッション

18:30 – 20:00　情報交換会

10 月 31 日（金）

座長：平（分子研）

9:00 – 9:20　電子キラリティの検証に向けた高精度光電子円二色測定
高口 博志（広島大学）

9:20 – 9:40　TGF 電子加速域の位置推定のための指向性チェレンコフ検出器開発
三輪 聖（名古屋大学）

9:40 – 10:10　【招待講演】
アンジュレータ放射光渦の光子計数領域におけるヤングの二重スリット実験
和田 真一（広島大学）

10:10 – 10:30　CVD グラフェンの方位角ドメイン可視化：光電子顕微鏡技術と AI 技術の融合
田中 慎一郎（大阪大学）

11:00 – 12:00　利用者懇談会

12:00　閉会

ポスターセッション（* は学生発表）

[P01]　西野　史（量子科学技術研究機構）
ガウス過程回帰を用いた 光電子分光スペクトル解析による試料劣化評価

[P02]　佐藤 祐輔（分子科学研究所）
UVSOR BL6U 光電子運動量顕微鏡の現況

[P03*]　西本　海（京都大学）
F-LCS ビームを用いた NRF 収量の定量評価

[P04*]　秋山 亮介（東京科学大学）
交替磁性体候補物質 MnSe の電子状態

[P05]　的場史朗（高エネルギー加速器研究機構）
高感度マイクロチャンネルプレートを用いた粒子検出技術の高度化

[P06]　田中 慎一郎（大阪大学）
UVSOR-BL5U で観測された XAS スペクトルに現れたスパイクノイズの統計解析とその除去

[P07*]　山口 和真（京都大学）
電極界面におけるイオン液体の構造：In-situ 軟 X 線吸収分光法による研究

[P08*] 中尾 友彦（京都大学）
真空紫外光吸収によりエタノール分子から生成する中間体イオンの遅延解離過程

[P09*] 西原 快人（大阪大学）
顕微角度分解光電子分光を用いた CeCoIn_5 の表面電子状態の終端面依存性観測

[P10*] 藤本 一志（名古屋大学）
$tdapO_2$/Co 有機－無機ハイブリッド界面磁気結合による Co の磁気特性変調

[P11*] 三浦 直也（名古屋大学）
原子分解能 STM および XAS による Fe/Ge 界面の構造・電子状態観測

[P12*] 岡本 蓮太朗（大阪大学）
角度分解光電子分光による $SmAg_x$/Ag(111) の電子状態

[P13*] 岡村 尚弥（名古屋大学）
原子スケール表面構造変化が Ni/Cu(001) 超薄膜の電子・磁気状態に及ぼす影響

[P14] 下ヶ橋 龍之介（分子科学研究所）
π 共役系分子の表面吸着による単結晶グラファイトの対称性変化

[P15] 彦坂 泰正（富山大学）
多電子・イオン同時計測による臭化水素 2 価イオン状態の解離の研究

[P16] 北浦　守（山形大学）
マグネシウムシリサイド結晶の赤外分光

[P17] 小林 政弘（核融合科学研究所）
VUV-EUV 光電離プラズマのビームエネルギー依存性

[P18*] 森田 雄晴（東北大学）
高分解能 ARPES / PMM によるワイル半金属 $PtBi_2$ の電子状態の観測

[P19*] 岩井 敦志（名古屋大学）
窒素サーファクタント効果によって作製した Fe/Co 界面の構造と電子・磁気状態の成長順序依存性

[P20*] 村山 瑠渚（広島大学）
残留ガスとの相互作用による放射線発生

[P21] 伏谷 瑞穂（名古屋大学）
ヨードメタン I 3d 内殻イオン化の電子・イオンコインシデンス計測

[P22] 大門　寛（分子科学研究所）
原子ホログラフィー顕微鏡 CoDELMA による菊池電子ホログラフィー解析

[P23*] 一条 悠人（山形大学）
マルチモーダル分光によって解き明かす $LiCaAlF_6$:Ce 結晶の Na 共添加効果

[P24*] 桑原 爽健（山形大学）
広視野 EUV 偏光計の開発に向けたビームライン実験計画

[P25*] 倪　遠致（名古屋大学）
層状室温強磁性体 $AlFe_2B_2$ の角度分解光電子分光

[P26*] 近藤 悠貴（東北大学）
高対称物質 RB_4 におけるトポロジカル線ノード電子状態

[P27*] 橋本 恵里（青山学院大学）
光電子運動量顕微鏡を用いた Ir(001) 単結晶薄膜の評価

[P28*] 福田 亮平（名古屋大学）
角度分解光電子分光による $Mg_3Sb_{0.5}Bi_{1.5}$ 単結晶の 電子状態の研究

[P29] 平野 佳穂（分子科学研究所）
In ドープ Bi_2Se_3 の光電子ホログラフィー

[P30*] 藤原 千隼（東北大学）
ゼロ次元型 Li_2HfI_6 シンチレータの光学特性の温度依存性

[P31*] 福島 祥紘（東京科学大学）
トポロジカル結晶絶縁体薄膜 SnTe への Mn ドープによる表面状態輸送の観測

[P32*] 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 2025

[P33] 加藤 政博（広島大学）
キラルなアンジュレータ光の生体分子構造解析への応用の開拓

[P34] 長谷川 友里（筑波大学）
Au(111) 上の DNTT 単層膜の電子状態における界面の影響

[P35*] 石田 悠人（千葉大学）
角度分解光電子分光によるダイマー Mott 絶縁体の電子構造測定

[P36] 田所 大輔（京都大学）
紫外線照射 PET の酵素分解

[P37*] 山口　広（広島大学）
角度分解光電子分光による電子ドープ型銅酸化物高温超伝導体 $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ の電子状態の研究

【UVSOR 研究会】
VUV-SX 領域の光科学による生命科学
　第 7 回次期施設建設検討会，フォトンバイオロジープラットフォーム事業共催
2025 年 10 月 31 日（金） 岡崎コンファレンスセンター

13:00 – 13:10　開会のあいさつ
解良　聡（分子科学研究所 極端紫外光研究施設　施設長）

セッション 1 （座長：荒木　暢）

13:10 – 13:40　小川　美香子（北海道大学 大学院　薬学研究院）
光化学反応を利用したがん治療法の開発

13:40 – 14:10　藤井　健太郎（量子科学技術研究開発機構 NanoTerasu センター／量子生命科学研究所）
高輝度放射光軟Ｘ線を用いた量子生命科学研究

セッション 2 （座長：岩山　洋士）

14:20 – 14:50　西田　純（分子科学研究所 メゾスコピック計測研究センター）
単一タンパク質の赤外ナノ分光

14:50 – 15:10　泉　雄大（分子科学研究所 極端紫外光研究施設）
放射光円二色性分光による DNA 損傷細胞由来のヒストンタンパク質の構造解析

セッション 3 （座長：泉　雄大）

15:20 – 15:40　佐々葉　遼平（大阪大学／分子研）
UVSOR-III から切り開く生命科学研究における軟Ｘ線利用の開拓
―密着型軟Ｘ線顕微鏡法による鉄元素マッピング―

15:40 – 16:00　荒木　暢（分子科学研究所）
軟Ｘ線顕微分光による生命科学研究

16:00 – 16:30　総合討論

3-2　国際交流，国際共同研究，研究会

3-2-1　外国人客員部門等及び国際交流

分子科学研究所では，世界各国から第一線の研究者を招き外国人研究職員として雇用したり，各種の若手研究者育成プログラムを活用し，諸外国から若手の研究者を受け入れて研究活動に参画させるなど，比較的長期間にわたる研究交流を実施している。また，当研究所で開催される国際研究集会等に参加する研究者や，研究現場，施設・設備の視察に訪れる諸外国行政機関関係者等，多くの短期的な訪問も受けて活発な国際交流が行われている。

表 1　国際交流協定締結一覧

相手方機関名	国名	協定書等名	主な内容	締結年月日	有効期限
フランス国立パリ高等化学学校	フランス	自然科学研究機構分子科学研究所とフランス国立パリ高等化学学校との分子科学分野における共同研究に関する覚書	情報交流，共同研究，研究交流，会議，シンポジウム，セミナーへの研究者派遣	2024.11.13	2029.11.12
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	2024.12.23	2029.12.22
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
中央研究院原子與分子科学研究所	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與分子科学研究所との間の分子科学における協力に関する覚書	共同研究（物質関連分子科学，原子，分子との光科学，理論と計算の分子科学）	2026. 1.12	2029. 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	2022.10.31	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
サバラガムワ大学工学部	スリランカ	自然科学研究機構分子科学研究所とスリランカ・サバラガムワ大学工学部との学術連携に関する覚書	学術交流及び共同研究の実施	2026. 4. 1	2031. 3.31

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	2025	計
外国人研究職員（客員）		1	1	1	0	3
日本学術振興会外国人招へい研究者		2	0	1	0	3
日本学術振興会外国人特別研究員		1	1	0	0	2
国際協力研究員	長期	18	28	30	18	94
	短期	24	37	76	84	221
研究会参加者（オンライン参加者含）		12	31	4	35	82
招へい研究員等		17	38	24	44	123
合　計		75	136	136	181	528

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	2025	計
フランス	19	21	21	14	75
ドイツ	6	10	7	6	29
イギリス	3	2	4	4	13
スウェーデン	7	7	8	8	30
スイス	3	1	5	3	12
アメリカ	9	6	9	27	51
中国	2	9	36	26	72
韓国	0	2	29	11	42
台湾	8	22	13	27	70
タイ	3	23	17	12	55
インド	6	4	6	8	24
その他 *	5	7	9	15	37
合　計	71	114	164	161	510

* 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，イタリア，オーストリア，スリランカ

表 4　海外からの研究者（2025 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ところとなり，大学共同利用機関として行う公募型の「岡崎コンファレンス」は，予算的には新しく認定されるようになった COE 各機関がそれぞれ行う独自企画の中規模の国際シンポジウムの予算に切り替わった。一方，法人化後，各法人で小〜中規模の国際研究集会が独自の判断で開催できるようになり，分子科学研究所が属する自然科学研究機構や総合研究大学院大学でその枠が整備されつつある。ただし，所属している複数の機関がお互い連携して開催するのが主たる目的となっている。

このような背景の下，2006 年には全国の分子科学研究者の立案に基づく先導的な中小規模の国際研究会を開催する枠組みを維持継続するために，運営交付金による分子研独自の事業として「岡崎コンファレンス」を再開した。同年の第 66 回岡崎コンファレンスを皮切りに 2007 年以降は研究会の開催提案を広く公募し，全国共同利用による共同研究の一環として継続的に開催してきたが 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かった。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，2024 年度以降は共同利用全体のアクティビティーが再び活性化してきつつあり，実際に 2025 年度には「岡崎コンファレンス」1 件が採択・開催された。2026 年度にも同コンファレンスを含めた国際的研究集会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再活性化，特に「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。

会 議 名：第 82 回岡崎コンファレンス

“Recent Advances and Perspectives of Interfacial Materials and Molecular Sciences lead by Next-Generation Laser Techniques and Computational Science”

期　　間：2025 年 7 月 28 日（月）～ 31 日（木）

場　　所：岡崎コンファレンスセンター

組織委員：杉本敏樹（分子科学研究所），森田明弘（東北大学）

内　　容：

表面・界面の分子科学は，不均一触媒，分子デバイス，電池，センサー，生体機能界面など，多様な物質機能の発現機構に深く関わる，分子科学の主要な研究対象の一つである。近年，レーザー分光技術や計算科学の急速な発展を背景として，界面の分子構造・ダイナミクス・反応性を分子レベルで解明する研究が大きく進展しており，日本からも国際的に高く評価される成果が数多く生み出されている。とりわけ，界面選択性を原理的に備えた非線形分光は，柔らかい表面，固液界面，埋没界面など，従来の表面科学では解析が困難であった対象へ研究領域を拡張し，界面分子科学の新たな基盤を築いてきた。

本会議では，界面分光学の分野を牽引する海外研究者と，日本の先進的研究を担う研究者が一堂に会し，界面分子科学の新潮流と今後の展望について集中的な議論が行われた。講演内容は，探針増強型近接場和周波発生分光などナノスケール空間分解能を実現する新規計測手法，赤外・テラヘルツ超広帯域光を用いた新たな界面情報の探索，界面成分とバルク成分を統合的に扱う理論計算，放射光Ｘ線を利用した第二高調波発生分光の新展開，和周波散乱分光による微粒子界面解析など，方法論の最前線から，鉱物の固液界面，生体膜・タンパク質界面，電極界面の溶媒構造，有機分子デバイス界面といった応用研究まで，多岐にわたった。

特に，日本はこれまで，和周波分光の理論体系の構築と計算手法の高度化，ブロードバンドヘテロダイン測定法の開発，さらに光の回折限界を大きく超える探針増強型近接場 SFG ナノ振動分光の世界初実証など，理論・実験の両面で本分野を国際的に先導してきた。本会議は，そうした日本の強みを世界に発信するとともに，海外の次世代研究者を含む新たな国際ネットワークを形成し，将来の共同研究と分野創成へつなげる重要な機会となった。

招待講演者として海外から 17 名，国内から 50 名が参加し，口頭発表を行った。さらにポスター発表は 16 件，聴講者を含む参加者は総勢で 67 名（うち所内 14 名）であった。

以下にプログラムを示す。

July 28

12:30–12:55	Registration
12:55–13:00	Opening remarks

Chair: Akihiro Morita

13:00–13:35 (35 min)	Phase-Sensitive Interface-Selective Nonlinear Spectroscopic Study of Charged Oxide Interfaces Satoshi Nihonyanagi (RIKEN, Japan)
13:35–14:10 (35 min)	Nuclear Quantum Effects in Ultrafast Vibrational Relaxation at H_2O, D_2O and HOD/Al_2O_3 Interface Eric Borguet (Temple University, USA)
14:10–14:45 (35 min)	Understanding Interfacial Structures of Functional Materials *via* In Situ Sum Frequency Generation (SFG) Vibrational Spectroscopy Shen Ye (Tohoku University, Japan)
14:45–15:10 (25 min)	Break & Free discussion

Chair : Dennis Hore

15:10–15:45 (35 min)	Interface Nonlinear Optical Spectroscopy in New Spectral Regime Chuanshan Tian (Fudan University, China)

15:45–16:20 (35 min) Chemical Imaging with Phase Resolved Vibrational SFG Microscopy—Elucidation of Molecular Packing Structures at Interfaces
Martin Thämer (Fritz-Haber-Institute of the Max Planck Society, Germany)

16:20–16:55 (35 min) Roles of Quadrupole in Sum Frequency Generation Spectroscopy
Akihiro Morita (Tohoku University, Japan)

16:55–17:15 (20 min) Development of Comprehensive Theory of Local Field for Multipole Effects in Sum Frequency Generation
Tomonori Hirano (Tohoku University,Japan)

July 29

Chair: Chuanshan Tian

09:00–10:00 (60 min) Personal View on Surface Nonlinear Optical Spectroscopy
Yuen-Ron Shen (University of California Berkeley, USA)

10:00–10:35 (35 min) Pushing the Limits for Sensitivity and Signal-To Noise Ratio of Subwavenumber High Resolution Broadband Sum-Frequency Generation Vibrational Spectroscopy (HR-BB-SFG-VS)
Hongfei Wang (Westlake University, China)

10:35–10:50 (15 min) Break & Free discussion

10:50–11:25 (35 min) Vibrational Sum Frequency Generation Using Ultra-Broad Band Infrared Pulses
Shunsuke Tanaka (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Japan)

11:25–12:00 (35 min) HD-VSFG Study of SHG-Active Dyes Interacting with Langmuir Lipid Monolayers
Taka-aki Ishibashi (University of Tsukuba, Japan)

12:00-13:00 Group photo/Lunch

13:00-14:30 (90 min) Poster

Chair : Shen Ye

14:35–15:10 (35 min) Tracking Energy Transport within Photon Conversion Systems
Sean Roberts (University of Texas at Austin, USA)

15:10–15:45 (35 min) Impact of Adding Emulsifiers on Crystallization Processes at Oil Interfaces
Takayuki Miyamae (Chiba University, Japan)

15:45–16:00 (15min) Break&Free discussion

Chair : Satoshi Nihonyanagi

16:00–16:35 (35 min) Getting Underneath the Hood with Aqueous Interfaces: Structure, Spectroscopy, Dielectrics and Reactivity
Ali Hassanali (International Centre for Theoretical Physics, Italy)

16:35–17:10 (35 min) From Phase-Resolved SHG *via* $\chi(2)$ and Total Interfacial Potential to Adsorbed Ion and Net-Aligned H_2O Density
Franz Geiger (Northwestern University, USA)

17:10–17:45 (35 min) pH Evolution of the Electrical Double Layer at Charged Oxide/Electrolyte Interfaces
Juli Gibbs (University of Alberta, Canada)

July 30

Chair : Eric Borguet

09:00–10:00 (60 min) Second Harmonic Light Scattering from Liposomes and Living Biological Cells
Hai-Lung Dai (Temple University, USA)

10:00–10:35 (35 min) Detecting Hydration of Proteins and DNA at Interface
Elsa Yan (Yale University, USA)

10:35–10:50 (15 min) Break&Free discussion

10:50–11:25 (35 min) Vibrational SFG as a Orientation-Independent Probe of Interfacial Hydration
Dennis Hore (University of Victoria, Canada)

11:25–12:00 (35 min) Activation Energy of Ion Desorption at Ionic Liquid/Pt Electrode Interfaces
Takashi Iwahashi (Institute of Science Tokyo,Japan)

Chair : Toshiki Sugimoto

13:00–13:35 (35 min) Water Adsorption on Stepped Pt Surfaces
Kazuya Watanabe (Kyoto University, Japan)

13:35–14:10 (35 min) Post-OPA Enhanced SFG Spectroscopy and Transient Absorption Microscopy
Zefeng Ren (Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, China)

14:20–14:55 (35 min) The Rise of Nonlinear X-Ray Spectroscopy
Iwao Matsuda (Institute for Solid State Physics, Japan)

14:55–15:10 (15min) Break & Free discussion

Chair : Syoichi Yamaguchi

15:10–15:45 (35 min) Surface Structure of Water from Soft X-Ray Second Harmonic Generation
Craig Schwartz (University of Nevada, USA)

15:45–16:20 (35 min)	Probing Interfacial Molecular Structures on Metal Surfaces: Advances in Sum-Frequency Generation from Far-Field to Near-Field Toshiki Sugimoto (Institute for Molecular Science, Japan)
16:20–16:40 (20 min)	Tip-Enhanced Sum Frequency Generation for Detecting Vibrational Signals beyond the Diffraction Limit Atsunori Sakurai (Institute for Molecular Science, Japan)
16:40–17:00 (20 min)	Vibrational Ladder Climbing in Tip-Enhanced Sum Frequency Generation Tatsuto Mochizuki (Institute for Molecular Science, Japan)
17:10–17:50	Shuttle Bus from OCC to Banquet venue (the Garden by Roppongi)
18:00-20:00	Bunquet/Poster Awards

July 31

Chair : Kazuya Watanabe

09:00–10:00 (60 min)	Ultrafast Dynamics at Water Interfaces Tahei Tahara (RIKEN, Japan)
10:00–10:35 (35 min)	Excited-State Dynamics and Vibrational Spectra of OH-Stretch of Water Shoichi Yamaguchi (Saitama University, Japan)
10:35–10:50 (15 min)	Break&Free discussion
10:50–11:25 (35 min)	Molecular Origins of Charge Inversion in Fatty Amine Monolayers Eric Tyrode (KTH Royal Institute of Technology, Sweden)
11:25–12:00 (35 min)	Ultrafast Nano-Spectroscopy of Photo-Induced Dynamics in Low-Dimensional Materials Takashi Kumagai (Institute for Molecular Science, Japan)

Chair : Takayuki Miyamae

13:00–13:35 (35 min)	Anomalous Increase of Sum-frequency Signal From Cationic Langmuir Monolayer upon Salt Addition Doseok Kim (Sogang University,Korea)
13:35–14:10 (35 min)	IV-SFG Studies of Buried Liquid/Liquid and Liquid/Solid Interfaces: Glimpses of Unexplored Systems Yukio Ouchi (Institute of Science Tokyo, Japan)
14:10–14:15	Closing remarks

Poster Presentation (July 29 13:00–14:30)

P-1	Ultra-Broadband Vibrational Sum-Frequency Generation Spectroscopy of Polymer/Metal Interfaces Risako Kameyama (The University of Tokyo)
P-2	Unveiling Solid–Liquid Interface Reactions through Operando Atomic Force Microscopy Taketoshi Minato (Institute for Molecular Science)
P-3	Effects of Chain–Chain Interaction on the Configuration of Short-Chain Alkanethiol Self-Assembled Monolayers on a Metal Surface Chia-Li Liao (National Taiwan University)
P-4	Exploring Molecular Dynamics at the Air/Water Interface: A Femtosecond Time-Resolved HD-ESFG Study Subhadip Roy (RIKEN)
P-5	Orientational Dynamics of Two-Dimensional Ice on Metal Surfaces Studied by Phase-Sensitive VSFG Spectroscopy Yuta Takahara (Graduate Institute for Advanced Studies, SOKENDAI)
P-6	Evaluation of DMSO Interfacial Structures by HD-SFG Spectroscopy Takeru Hiraide (Tohoku University)
P-7	Development of Novel Binders for Lithium-Ion Batteries Based on Adhesion Mechanisms Revealed by Sum Frequency Generation Vibrational Spectroscopy Kousuke Ikuno (Tohoku University)
P-8	Investigation of the Hydrolysis Mechanism of Phospholipid Monolayers by PhosphoLipase A_2 *via* HD-SFG Spectroscopy Yosuke Hatori (Tohoku University)
P-9	Translational Diffusion and Isomerization Reaction at the Solid–Liquid Interface of Ionic Liquids Using Transient Grating Spectroscopy Masaki Fujiwara (Doshisha University)
P-10	Hydroxyl on Stepped Pt Surfaces: A Vibrational SFG Study of Water and Oxygen Coadsorption Naoki Nagatsuka (Kyoto University)
P-11	Theoretical Analysis of Intermolecular Vibrational Motions of Water at the Water–Air Interface Using Molecular Simulations Masaki Kondo (Keio University)
P-12	Angle-Resolved Two-Photon Photoemission Study of Surface and Interface States of Au(111) Covered with ZnPc Thin Films Isamu Yamamoto (Saga University)
P-13	Distinct Molecular Alignment Mechanisms on Polyimide Films: A Comparative SFG Study of Rubbing and Photo-Alignment Ryo Nakano (Chiba University)
P-14	Diffraction-Unlimited Vibrational Nanoscopy for Inhomogeneous Surface Molecular Systems Using Tip-Enhanced Sum-Frequency Generation Shota Takahashi (Institute for Molecular Science)
P-15	Layer-Dependent Molecular Twisting at the Air–Water Interface Revealed through the H–O–H Bending Mode Alexander Fellows (Fritz Haber Institute)
P-16	Hard X-Ray Second Harmonic Generation in Diamond Daniel Schacher (University of Nevada, Las Vegas)

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，当時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 7 月に東京にて開催する予定である。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	大田（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	大田（韓国）
9	2001 年 1 月	気相，凝縮相および生体系の光化学過程：実験と理論の協力的展開	分子科学研究所
10	2003 年 1 月	理論化学と計算化学：分子の構造，性質，設計	浦項工科大学（韓国）
11	2005 年 3 月	分子科学の最前線	分子科学研究所
12	2007 年 7 月	光分子科学の最前線	済州島（韓国）

13	2009 年 7 月	物質分子科学・生命分子科学における化学ダイナミクス	淡路島
14	2011 年 7 月	New Visions for Spectroscopy & Computation: Temporal and Spatial Adventures of Molecular Science	釜山（韓国）
15	2013 年 7 月	Hierarchical Structure from Quantum to Functions of Biological System	神戸
16	2017 年 7 月	Frontiers in Molecular Science: Structure, Dynamics, and Function of Molecules and Complexes	釜山（韓国）
17	2019 年 7 月	Advances in Materials and Molecular Sciences	名古屋
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（2025）」

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。2025 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（2025）」

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（2025）」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，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，2025 年度は 18 名の受入れが可能となった。（2022 年度からは中長期滞在者のみカウント）

3-2-6　分子研アジア国際インターンシッププログラム（IMS-IIPA）

外務省の JENESYS 事業, 分子研の EXODASS 事業を引き継ぐ形で 2015 年度より IMS-IIPA 事業として運用している。JENESYS 事業，EXODASS 事業の各種制限を解消し，欧米を相手に実績のある IMS-IIP 事業と同じ基準で実施するようになったので自由度が増した。今ではアジアと欧米を分ける意味もなくなり IMS-IIP 事業として一括して扱っている。ただし，財源的には未だに区別が残っている。分子研はアジア地区で重点大学・拠点研究機関（タイのチュラロンコン大学・カセサート大学・チェンマイ大学・NANOTEC・VISTEC，マレーシアのマラヤ大学，中国のアモイ大学，インドの IIT Kanpur，韓国科学技術院自然科学部，台湾の国立交通大学・中央研究院原子分子科学研究所等）を選び，

MOU を直接，あるいは，総合研究大学院大学を通して，締結しており，大学院生や若手研究者を一定期間招へいしている。提携先拠点研究機関については，共同研究の有無なども考慮しながら随時入れ換えを行っていく。大学院生の場合は原則として 5 〜 6 ヶ月，若手研究者の場合は 1 〜 6 ヶ月滞在し，ホスト研究室に所属して国際共同研究を担ってもらう。分子研での研究を体験して，総研大への入学を希望する学生がいるほか，分子研にポスドクとして戻ってくる学生もおり，分子研・総研大の研究力強化と国際化に寄与している。今後はダブルディグリー制度などとの組み合わせによって，さらに魅力的な制度となるよう改良していく予定である。

3-2-7　短期外国人研究者招へいプログラム

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

一方，国際協力研究については，海外からの直接申請ではなく，研究所内の教員による国際共同研究の提案を受け，所内委員による審査を経て①海外の教授，准教授クラスの研究者の短期招へい，②若手外国人研究者の短期招へいなどが「分子科学国際共同研究拠点の形成」の主要プログラムとして実施されていた。その実績は 2008 年度 9 件，2009 年度 12 件，2010 年度 13 件，2011 年度 13 件，2012 年度 11 件である。

2013 年度より様々な財源をもとに短期外国人研究者招へいプログラムを始めることで，従来の国際協力研究に加え，国際施設利用（協力研究的であり，単なる設備利用はない）にも拡大した結果，2013 年度 35 件，2014 年度 31 件，2015 年度 40 件，2016 年度 45 件，2017 年度 48 件，2018 年 41 件，2019 年 44 件と推移しており，今や IMS-IIP 事業と合わせて分子科学研究所の国際的な存在感を高めるプログラムとなっている。2020 年度は新型コロナウイルスの感染拡大により，その件数は 30 件にとどまった。また 2021 年度は日本への入国が制限され，短期外国人研究者招へいプログラムによる国際共同研究は 0 件であった。一方，リモートによる研究打合せ，実験等が加速し 2021 年度のリモートによる国際共同研究実施者は 105 名，2022 年度は 73 名であった。2022 年度は，新型コロナウイルスの規制が緩和されたため短期外国人招へいプログラムによる国際共同研究が再開し，その実績は 12 件，2023 年度は 14 件，2024 年度は 19 件，2025 年度は 27 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 996 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，2025 年度は全 9 回 9 名のコロキウムを，全て対面形式で開催した。分子研が関連する研

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「ブレーンストーミング」の場となることが期待される。

以下に，2025 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）
988	2025．7.25	力や光で単一分子の化学反応を操る	塩足　亮隼 （Fritz Haber Institute グループリーダー）	27 (1)
989	2025.11.19	タンパク質凝集研究のための先端超音波技術と神経変性疾患診断への応用	荻　博次 （大阪大学大学院工学研究科栄誉教授）	12 (1)
990	2025．9.26	“水”を標的としたラマン可視化：細胞内・生体高分子の水環境およびタンパク質の液－液相分離・凝集化の理解	中林　孝和 （東北大学大学院薬学研究科教授）	25 (0)
991	2025.11.26 （ハイブリッド）	誘導ラマン散乱顕微法による振動分光イメージング	小関　泰之 （東京大学先端科学技術研究センター教授）	16(14*) (3)
992	2026．1.23	特異な反応場における触媒反応機構	長谷川　淳也 （北海道大学 触媒科学研究所教授）	17 (0)
993	2026．2．9	触媒インフォマティクス： 創成期から黄金期へ	髙橋　啓介 （北海道大学大学院理学研究院教授）	30 (2)
994	2026．2.20	EPOCH メークを目指す先端共用顕微プラットフォーム	瀬藤　光利 （浜松医科大学教授）	10 (0)
995	2026．2.27	電子と水素の自由度に基づく新しい物性化学	北川　宏 （京都大学大学院理学研究科教授）	36 (2)
996	2026．3．6	炭素物質の創製および応用に向けた分子合成手法の開発	八木　亜樹子 （名古屋大学大学院理学研究科教授）	22 (0)

＊オンライン

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

この目的に沿って研究活動を推進する体制として，教授会議を組織し，各機関から 1 名ずつの併任教員（教授または准教授），機構内の教授が併任する分野長（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。2025 年度は，7 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，研究活動を支援した。また教授会議で企画するワークショップとして，2019 年度には“Chiro-Optical Effects in 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，2025 年度末まで研究活動を行った。2018 年度から以上のような活動を行ってきたが，2025 年度末をもって先端光科学研究分野としての活動は終了することとなった。

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･情報セキュリティー･人工知能などに革命を起こし得るため，世界主要各国の科学技術政策において莫大な投資が行われている。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）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。

3-3-3　ムーンショット型研究開発事業（内閣府／科学技術振興機構）

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

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

分子科学研究所では，光分子科学研究領域の大森賢治教授が目標 6 の研究開発プログラム「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」のプロジェクトマネージャー（PM）を務めている。大森教授のプロジェクトでは，光ピンセットを用いて大規模に配列させた冷却原子量子ビットの各々を，自在かつ高速に移動させつつゲート操作，誤り検出･訂正を行う動的量子ビットアレーの実装，および産学連携の下での構成要素の統合･パッケージ化による高い安定性とユーザビリティの達成により，誤り耐性量子コンピュータの実現を目指す。この他，Sylvain de LÉSÉLEUC 特任准教授，富田隆文助教，平等拓範特任教授が，課題推進者として，同事業に寄与している。この他，目標 3「人と融和して知の創造･越境をする AI ロボット」（プロジェクトマネージャー（PM）：牛久祥孝（オムロンサイニックエックス（株））の研究開発プログラム「自動合成実験 AI」の課題推進者として，椴山儀恵准教授が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 769 に上っている。参画機関の外部公開機器の登録台数は，1,484 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 3,209 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 2026 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。

2025 年度は第 4 期中期計画の 4 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。なお，現在の予約・課金システムは運用開始から 8 年が経過しているので，段階的な機能整備と実運用に基づく継続的な改善を通じて，利用実態に即した高度化を図る方針である。

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
2025	205,967	1,092	1,142	3,499	5,733

表 2　2025 年度加速事業課題一覧

大学	部署	代表者	職名	課題名
東京農工大学	学術研究支援総合センター	野口　恵一	教授	複合ビーム加工観察装置メンテナンス
東京農工大学	学術研究支援総合センター	野口　恵一	教授	核磁気共鳴装置の中規模整備による装置性能の改善
山梨大学	研究機器統轄センター	篠塚　郷貴	技術職員	信頼性の高い表面形状測定に求められる機器整備
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	LC-TOFMS（JEOL 製，T100LP）装置の共用推進のための施設整備事業
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
大阪大学	大学院理学研究科	今田　勝巳	教授	CHN コーダー MT-6 点検修理
鳥取大学	技術部	横野　瑞希	技術職員	四重極－飛行時間型液体クロマトグラフ質量分析計の安定的な装置利用の維持と学内外からの相互利用および依頼分析サービスの加速化
岡山大学	自然生命科学研究支援センター	宮地　孝明	研究教授	プロテオーム解析の安定稼働と利用促進のための整備
岡山大学	自然生命科学研究支援センター	砂月　幸成	准教授	核磁気共鳴装置による学外利用向上のための整備事業
岡山大学	自然生命科学研究支援センター	池内　瑶子	技術職員	質量分析システムに関わる装置の修理
広島大学	デジタルものづくり教育研究センター	谷澤　浩樹	特任教授	メルトフローインデクサ導入によるロバストな溶融特性測定システムの構築
広島大学	デジタルものづくり教育研究センター	谷澤　浩樹	特任教授	樹脂の簡易混錬・成形装置導入による混錬成形システムの強化
広島大学	技術センター	網本　智子	契約専門職員	トライブリッド型質量分析計の外部利用促進のための部品整備
高知大学	総合研究センター	坂本　修士	教授	レーザー更新によるフローサイトメーターの安定稼働を介した大学連携研究設備ネットワークの利用推進事業
愛媛大学	学術支援センター	森　　重樹	講師	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	透過型電子顕微鏡整備事業

表 3　2025 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
TEM，STEM，SAD 講習会	分子研	5 月 22 日（木） 5 月 30 日（金）	21
分析装置総覧講習会	分子研	6 月 18 日（水）	60
英語研修～自分の技術力，技術詳細を細部まで伝える～	研究サポート人材バンク（株）	7 月　4 日（金）	9
XPS 解析・解釈セミナー（第 1 回）	研究サポート人材バンク（株）	7 月　9 日（水）	71
XPS 解析・解釈セミナー（第２回）	研究サポート人材バンク（株）	7 月 24 日（火）	51
MS・NMR から単結晶へ：論文レベルを引き上げる構造解析技術	研究サポート人材バンク（株）	8 月 27 日（木） 8 月 28 日（金）	9
ICP-OES による二次電池材料の測定講習会	研究サポート人材バンク（株）	9 月 11 日（木） 9 月 12 日（金）	4
NMR 講習会～三重共鳴（HFX）プローブを用いた測定講習～	研究サポート人材バンク（株）	9 月 12 日（金）	10

NMR 講習会～ NMR の日常メンテナンスおよび多核測定～	研究サポート人材バンク(株)	10 月 9 日(木)	11
質量分析イメージング講習会	研究サポート人材バンク(株)	11 月 14 日(金)	4
令和 7 年度固体 NMR 四重共鳴 Probe 設定講習(REDOR 編)(上級)	研究サポート人材バンク(株)	1 月 21 日(水) 1 月 22 日(木)	5
令和 7 年度質量分析装置維持管理情報交換会	研究サポート人材バンク(株)	2 月 6 日(金)	15
EBSD 技術講習会	研究サポート人材バンク(株)	2 月 10 日(火)	6
初心者向け　オスミウム染色等を用いた TEM 観察の基礎～試料調製，観察手順と安全管理のポイント～	研究サポート人材バンク(株)	2 月 17 日(火) 2 月 18 日(水)	7
共用に関わる若手技術職員向け研修会～機器 DX と共用の問題解決に向けて～	研究サポート人材バンク(株)	2 月 19 日(木) 2 月 20 日(金)	10

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受託研究マテリアル先端リサーチインフラ（Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology in Japan, ARIM）プログラムが始動した。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。さらに，2025 年度補正予算により新たに物理特性測定システム（PPMS）の導入を予定している。2022 年度からは，ナノプラットフォーム実施機関の大部分が本事業のスポーク機関に移行し，実施担当者 50 名規模に加え，本格的に本事業が始動された。また，2022 年度には，７つの重要技術領域間の連携を支援するため３つの横断技術領域が新設され，分子科学研究所は横断技術領域「物質･材料合成プロセス」責任機関として，有機合成のデジタル化，物質･材料合成プロセスのデータ構造化・自動化等を進める体制を構築した。2025 年 7 月からは半導体支援のための ARIM-SETI が新たにスタートし，分子科学研究所は，主に有機半導体，2D 半導体，次世代メモリ，スピントロニクスデバイス，量子デバイス材料の評価・解析支援を精力的に進めている。なお，横断技術領域「物質・材料合成プロセス」責任機関は 2025 年 4 月より奈良先端科学技術大学院大学へ移管された。これまでに構築してきた運営体制および成果を基盤とした円滑な引き継ぎが行われ，今後は同大学を中心に更なる機能強化と発展を進めるための協力を行っていく。

表 1 には 2025 年度の支援装置・プログラム一覧，表 2 には 2025 年度の採択課題一覧，表 3 には 2025 年度採択・実施件数日数（2025 年 4 月 1 日～ 2026 年 3 月 31 日実施分）を示した。

表 1　2025 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	UVSOR 物質分子科学 物質分子科学
マイクロストラクチャー製作・評価支援	マスクレス露光装置（DL-1000/IMC）段差計付き マスクレス露光装置は，任意の形状をフォトマスクなしで直接描画する装置。光源は 405nmLED で，露光範囲 100 mm × 100 mm，最小線幅 1μm の描画が可能。段差計は，150 mm までの領域でステッチングなしで測定可能。その他にも，精密温湿度調整付きのイエロークリーンブースは，フォトリソグラフィーに関する一連の作業（基板洗浄, 各種レジスト塗布, 露光, 現像, アッシング，エッチング）に利用可能。 ［マスクレス露光装置（ナノシステムソリューションズ DL-1000/IMC），段差計（KLA Tencor　P7），スピンコーター（ミカサ社製 MS-A100）］	山本浩史室長 近藤聖彦主任技師 高田紀子主任技術員 木村幸代技術員 石川晶子技術支援員	装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室
	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 m，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ズ _SU6600，BrukerAXS_QUANTAX XFlash 5060FQ+XFlash6|10 コンバインシステム］	横山利彦センター長 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
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　NanoElectochemical］	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 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 物質分子科学 機器センター
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 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
単結晶Ｘ線回折	極低温からの測定（80 K ～ 400 K）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 ～ 0.2 mm で，コリメータはバックグラウンド低減のためビーム径よりやや大きめの 0.3mm のものが取付。 低温測定；ガス吹き付け型の冷却装置で，到達温度は N_2 ガスモードで 100 K，He ガスモードで 24 K（実測）。到達時間は，N_2 で 240 分，He で 150 分かかる。運転モードの切り替えは，He から N_2 には迅速に切り替え可能だが，N_2 から He の場合は，冷凍機を一旦室温に戻す必要。 ［Rigaku_HyPix-AFC］	横山利彦センター長 岡野芳則技術員	機器センター 機器センター
結晶スポンジ法を用いた分子構造解析	単結晶Ｘ線構造解析は，分子の立体構造を決定する上で最も強力な分析方法。しかしながら，この手法を用いるためには，構造を明らかにしたい試料の単結晶が不可欠であり，単結晶作製は時として大きな困難を伴う。藤田らが開発した「結晶スポンジ法」は，細孔性錯体の結晶（結晶スポンジ）を試料の溶液に浸すことで試料分子を結晶スポンジの細孔内に導入し，単結晶Ｘ線構造解析により試料分子の立体構造を明らかにするという「結晶化不要の単結晶Ｘ線構造解析法」。結晶スポンジ法を用いて，提供を受けた試料の立体構造解析の支援を実施。また，結晶スポンジ法に関連した協力研究も広く受付。 ［Rigaku_XtaLAB P200，XtaLAB SynergyCustom］	藤田 誠卓越教授 横山利彦センター長 三橋隆章特任講師 佐藤宗太特任教授	特別研究部門 機器センター 三井　柏の葉 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ペックX線光電子分光システム Scienta光電子分光装置（光電子分析器R4000L1, グローブボックス） エネルギー分解能：1.8meV以下，スポットサイズ：1 × 3 mm^2 光源：Al-K α 単色X線源（MX-650），エネルギー幅200meV，真空紫外光源（VUV5K） 装備機器：中和電子銃，イオン源	横山利彦センター長 湊丈俊主任研究員 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。温度を一定速度で変化させ，試料物質の転移もしくは変性に伴う熱変化を測定。溶液中の生体高分子に特化した仕様。 ［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

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エアで計算によって吸光度を求めており，物質の同定や性質，あるいは濃度（定量分析）を調べることが可能。付属装置によって，半導体･薄膜･ガラスやフィルムなどの固体試料の反射率・透過率測定が可能。［SHIMADZU_UV-3600Plus］	横山利彦センター長 上田 正主任技術員	機器センター 機器センター
絶対 PL 量子収率測定装置	物質に光を照射し励起された電子が基底状態に戻る際に発光する光を観測することで，発光材料の絶対発光量子収率を測定する装置である。PL 量子収率とは，吸収した光のフォトン数に対して分子から放出される発光フォトン数の割合で，発光の効率を表す。［HAMAMATSU Quantaurus-QY C11347-01］	横山利彦センター長 上田 正主任技術員	機器センター 機器センター
円二色性分散	円二色性分散計は光学活性分子の立体構造（相対～絶対配置，立体配座，生体高分子の高次構造）を解析する手段として利用。分光器から出た光は偏光子で直線偏光にされ，円偏光変調器で左右円偏光が交互に作られ試料を通過。この時，試料が光学活性物質であると円偏光の不等吸収が起こり（この現象を円二色性または CD と呼ぶ），その左右円偏光の差吸光度 ΔA（通常は楕円率 θ で表される）が観測。楕円率とは直線偏光を光学活性物質の吸収波長で通過させると楕円偏光になるが，その楕円の短軸長軸の正接角 θ をもって定義され，ΔA が小さいと θ = 33 × ΔA 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
^{1}H 600MHz 固体（高磁場 NMR）	600MHz 固体 NMR による蛋白などの生体分子，有機材料，天然物などの精密構造解析支援。^{1}H-^{13}C-^{15}N 三重共鳴実験まで対応。［Bruker_AVANCE600］	横山利彦センター長 西村勝之准教授	機器センター 物質分子科学

^{1}H 600MHz 溶液（高磁場 NMR）	核磁気共鳴（NMR）とは磁気モーメントをもつ原子核を含む物質を磁場の中におき，これに共鳴条件を満足する周波数の電磁波を加えたときにおこる共鳴現象。核磁気共鳴装置はこの共鳴現象を観測することによって，原子の化学的環境を反映した原子個々の情報（どの原子とどの原子が隣り合っているか，原子間の距離がどの程度かなど）が得られるので，化合物の分子構造や組成，物理化学的性質を分析する方法として様々な分野で日常的に利用。 ［JEOL_JNM-ECA600，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］	椴山儀恵准教授 鈴木敏泰チームリーター	生命･錯体分子科学 機器センター
合成ものづくり支援 （磁性薄膜作製評価）	超高真空中で磁性薄膜等を作成し，in situ 磁気光学 Kerr 効果による評価，ならびに，紫外レーザー磁気円二色性光電子顕微鏡（UV MCD PEEM）によるナノ磁気構造評価を実施。 ［超高真空下での磁性薄膜作成・磁気光学 Kerr 効果によるその場観察評価。紫外レーザー磁気円二色性光電子顕微鏡も利用可］	横山利彦教授	物質分子科学
合成ものづくり支援 （機器センター長協力研究）	機器センター以外の分子研施設利用を実施する際に，機器センター機器（所内専用機器を含む）を補助的に利用するための区分	横山利彦センター長	機器センター

表 2　2025 年度（令和 7 年度）採択課題一覧　分子科学研究所担当分（2026 年 3 月 31 日現在）

（1）協力研究

課　題　名	支援機器等	代　表　者
不凍液体－氷界面のナノ力学計測：分子分解能計測への挑戦	走査プローブ	神戸大学大学院理学研究科　大西　洋
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
全有機熱化学電池の高性能化に向けた開発研究	機器センター長協力研究	関西学院大学工学部　吉川　浩史
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
Analysis of Reaction Mechanism at Electrode/Electrolyte Interface	走査プローブ	Faculty of Engineering, Khon Kaen University　Sutasinee Neramittagapong
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解明	有機 FET	早稲田大学先進理工学部　石井あゆみ
MOF 中における分子性量子ビットの評価	E680	東京大学大学院理学系研究科　楊井　伸浩
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
ピークフォースタッピング法を用いたヤング率計測による石英ガラス溶解過程の解明	走査プローブ	金沢大学理工研究域　荒木　優希
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
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　渋田　昌弘

基板の違いによるナノスケール水滴の構造と電荷の検証	走査プローブ	慶應義塾大学理工学部	清水　智子
走査プローブ顕微鏡像の情報学的処理による表面相互作用の可視化	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
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
有機ラジカルの動的スピン特性に関する研究	E680	大阪大学大学院基礎工学研究科	草本　哲郎
コラニュレン骨格を有するジアリールエテンのフォトクロミック反応に関する量子化学計算	量子計算	奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学領域	山田美穂子
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
スピンクロスオーバー金属錯体を用いたスピン量子ビットの開発	E680	熊本大学大学院先端科学研究部	禅野　光
真空プロセスで作製した層状酸化ボ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
有機系潤滑添加剤が形成する超低摩擦界面の可視化	走査プローブ	京都工芸繊維大学機械工学系	山下　直輝
レドックス活性金属を導入した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機構の解析	走査プローブ	静岡大学工学部	高橋　雅樹
角度分解光電子分光による Fano 共鳴の運動量依存性の解明	ARUPS	筑波大学数理物質系	長谷川友里
大気敏感試料の電子状態解明に向けた試料準備	機器センター長協力研究	東京大学物性研究所	近藤　猛
フラーレンを高圧重合した新奇炭素ネットワーク物質の光電子分光による電子状態研究	ARUPS	茨城大学大学院理工学研究科	中野　岳仁
ハイエントロピー型 GeTe 及び REBCO 超伝導薄膜の電子バンド構造解明	ARUPS	東京都立大学理学部	山下　愛智
フェロアキシャル秩序に由来する新奇輸送現象の開拓	有機 FET	東京大学大学院工学系研究科	永井　隆之
核スピンフリー分子を骨格として持つ $S = 1/2$ 常磁性金属イオンのスピンコヒーレンス現象	E680	東京理科大学理学部	石崎　聡晴
走査プローブ顕微鏡によるオウムガイ殻構造の局所機械特性解析	走査プローブ	高輝度光科学研究センター	竹田　裕介
革新型蓄電池の電極／電解液界面で得られる電気化学走査プローブ顕微鏡データのハイスループット解析技術の開発	走査プローブ	奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	西村　虎太郎 ジェームス
Elucidating the Selective Adsorption Mechanism of Alkanolamines on the Portlandite Crystal Surface	走査プローブ	北海道大学大学院工学院	Qi Zhai
Spin-Dependent Electron Transport of Chiral Polydiacetylene	有機 FET	東京大学生産技術研究所	Zhu Qingzhen
UV レーザー微細加工した $KNbO_3$ 圧電膜の表面形状と圧電応答	走査プローブ	桐蔭横浜大学医用工学部	石河　睦生
Electronic Decoupling of DNTT Molecules by a Phosphorene Buffer Layer	ARUPS	CSIC Centro de Fisica de Materiales CFM	Mattia Bassotti
非磁性金属／キラル分子界面における超高速スピン流電流変換を用いた新奇 THz 光源の開発	ARUPS	量子科学技術研究開発機構 NanoTerasu センター	西野　史
新型スキルミオン物質の低エネルギーバルク敏感高分解能 ARPES	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

(2) 施設利用

課　題　名	支援機器等	代　表　者	
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
フッ素を含有した電極材料の磁性	MPMS-7	追手門学院大学理工学部	高見　剛
開殻分子性物質の創製と構造－物性－電子状態相関の解明	EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3，ラマン，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
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
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	基礎生物学研究所	片岡　研介
フラビンタンパク質の光誘起ラジカルペア生成に関する人工システムの構築	E680，EMX，PEAQ-DSC，蛍光分光，紫外可視近赤外，量子収率，ピコ秒	岩手大学理工学部	岡　芳美
金属酵素モデル錯体の電子構造の研究	EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3，紫外可視近赤外，ECA600，ECZL600G	奈良女子大学研究院自然科学系	藤井　浩
ポリオキソメタレートの酸化還元反応メカニズムの定量的解析	EMX，ECA600	高知大学教育研究部	上田　忠治

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 6	TEM	関西学院大学生命環境学部	増尾　貞弘
燃料電池材料における光照射下極低温パルス ESR 測定	E680，EMX	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ダイナミクス研究	E680，E500，E580	和歌山大学システム工学部	秋元　郁子
超分子集合体と無機微粒子の高秩序複合体の構築と物性解明 1	低 SEM，TEM，オペランド，TG-DTA/DSC	京都大学化学研究所	山内　光陽
低分子糖誘導体を用いた日本脳炎ウイルス感染阻害剤の開発	ECA600，ECZL600G	愛知教育大学自然科学系	中野　博文
多周波 EPR 法を用いた光合成反応過程の解析	E680，EMX，E500，E580PEAQ-DSC	名古屋大学大学院理学研究科	三野　広幸
塩基対配置が DNA 二重らせんの形成・解離に与える熱力学的影響の解析	PEAQ-ITC，円二色性，iTC200	京都大学複合原子力科学研究所	黒川　　南
Fe-S-O 型金属クラスターを持つ酵素の活性部位の保存残基 Lys とその金属クラスター構造の関係性の解明	EMX，E500，E580，円二色性	埼玉大学大学院理工学研究科	藤城　貴史
Sn/Py/Sn 三層膜の電気伝導特性 , Mn-ZnO ナノロッド /rGO ハイブリッドの磁気的性質の解明	TEM，MPMS-7，XL7，MPMS3	岐阜大学工学部	嶋　　睦宏
有機 EL 発光物質の励起ダイナミクス研究	E680，E580，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
酵素への金属イオン結合の状態と運動性	EMX，E580，PEAQ-DSC，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
常磁性異種金属一次元鎖錯体および混合原子価ポリオキソメタレート集積体の物性	シナジー，CCD-1，CCD-2，微小結晶，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3	岐阜大学工学部	植村　一広
Structure Analysis of Battery Materials	低 SEM，TEM，EPMA，オペランド，ESCA，ラマン	Faculty of Engineering, Khon Kaen University	Sutasinee Neramittagapong
有機アミンカチオンを用いた強い水素結合相互作用を有する新規分子性伝導体の開発	シナジー，CCD-1，CCD-2，微小結晶，MPMS-7，XL7，MPMS3	日本大学文理学部	周　　彪
新規ニッケル系高温超伝導体の探索	MPMS-7，XL7，MPMS3	静岡大学学術院工学領域	川口　昂彦
低分子量生体分子を用いた配位高分子錯体の合成と磁気的性質	シナジー，CCD-2，オペランド，XL7，MPMS3，TG-DTA/DSC	東京海洋大学海洋電子機械工学部門	藤田　　渉
キラル分子対を導入した κ 型分子性導体における電子フィリング共存状態のラマン分光研究	ラマン	愛媛大学大学院理工学研究科	山本　　貴
合金ナノ粒子触媒及び複合酸化物触媒の表面構造解析	ESCA	名古屋大学大学院理学研究科	邨次　　智
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	ECA600，ECZL600G	浜松医科大学医学部	黒野　暢仁
単一分子からなるリエントラントネマチック相の発現機構解析	オペランド	日本大学文理学部	吉田　　純
ヨード環化を基軸とした多環式芳香族化合物の合成研究	シナジー，微小結晶	徳島大学社会産業理工学研究部	八木下史敏
新奇貴金属酸化物半導体の磁化測定と構造解析	シナジー，微小結晶，粉末Ｘ線，MPMS-7，XL7，MPMS3	名古屋大学大学院工学研究科	中埜　彰俊
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	シナジー，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
3 回対称性 M-Ln-M 錯体の合成と単分子磁石特性	シナジー，微小結晶，オペランド，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3，TG-DTA/DSC	金沢大学国際基幹教育院	三橋　了爾
$Zn_{1-x}Mg_xFe_2O_4$ フェライトの強磁性に関する研究 2	E500，MPMS-7，XL7，MPMS3	名古屋工業大学先進セラミックス研究センター	安達　信泰
単層カーボンナノチューブ合成における担持体の触媒粒子への影響	TEM	名城大学理工学部	丸山　隆浩
電子スピン共鳴法による金属タンパク質，スピンラベル酵素，モデル錯体の構造学的研究	E680，EMX，E500，E580，円二色性	佐賀大学農学部	堀谷　正樹
1,8- ナフチリジン -2- カルボン酸を架橋配位子とするルテニウム二核錯体の開発	シナジー，CCD-1，CCD-2，微小結晶，オペランド，MPMS-7，XL7，MPMS3，TG-DTA/DSC，ラマン，量子収率	島根大学大学院総合理工学研究科	片岡　祐介
動的電子状態を示す金属錯体の電子状態に関する研究	シナジー，MPMS-7，XL7	熊本大学大学院先端科学研究部	関根　良博

多環芳香族炭化水素化合物を基盤としたメタルフリーの光触媒系の開発	EMX，E500，E580，量子収率，ピコ秒，MALDI	静岡県立大学食品栄養科学部	岡本　衆資
環状π電子系ラジカル化合物におけるスピン挙動	EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3	名古屋市立大学大学院理学研究科	雨夜　徹
パドルホイール型複核錯体と銅 (I) ハロゲノ錯体からなる一次元集積体の電子構造の解明	MPMS-7，XL7，E680，EMX，E580	富山大学理学部	高森　敦志
機能性金属酵素モデル錯体の構造反応性相関に関する研究	ESCA，EMX	山陽小野田市立山口東京理科大学工学部	太田　雄大
シクロブチル骨格をもつ鉄 (II) 錯体分子結晶が示す熱的スピン転移の掃引速度依存性の追跡	シナジー，オペランド，MPMS-7，XL7，MPMS3，TG-DTA/DSC	岐阜大学教育学部	萩原　宏明
層状複水酸化物（LDH）の層間距離の温度依存性とイオン導電性の相関性	オペランド	名古屋工業大学大学院工学研究科	園山　範之
熱分解性に基づく海藻の微生物分解性の評価	TG-DTA/DSC	広島大学瀬戸内 CN 国際共同研究センター	和田　茂樹
メタ磁性体の異方性測定と臨界現象	MPMS-7	岐阜大学工学部	浦田　隆広
新奇レーザー素子の物性および合成・複合構造化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
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	MPMS3	熊本大学大学院先端科学研究部	松田　元秀
弾性π共役結晶の機械的変形に伴う構造変化と電子物性の相関解明	シナジー，微小結晶	香川大学創造工学部	堀井　洋司
様々なベンゾチオールを配位させたポルフィリノイド金属錯体の磁気的性質	EMX，E500，MPMS-7，XL7	島根大学大学院総合理工学研究科	池上　崇久
Brønsted 酸添加により凝集誘起発光・発光性メカノクロミズムを示す蛍光色素分子の機能性評価	蛍光分光，量子収率	山梨大学大学院総合研究部	山本　結生
拡散法 Nb_3Al 超極細線材による撚線縮小導体の超伝導特性評価	MPMS-7，XL7，MPMS3	核融合科学研究所	菱沼　良光
コロイドナノ結晶のテラヘルツ分光	TEM，EPMA，TG-DTA/DSC	大阪大学レーザー科学研究所	江口　大地
フェナントロイミダゾール誘導体を用いた深青色有機 EL 素子の開発	量子収率，蛍光分光	崇城大学工学部	江口敬太郎
超伝導体／強磁性体複合化合物の超伝導近接効果	E580，XL7，MPMS3，E500	神戸大学大学院理学研究科	内野　隆司
エンドサイトーシスを経ない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
NV-Formation by Low Energy Electron Irradiation	E580，ラマン	名城大学理工学部	アブラハペトロス
高温・高安定スピントロニクスデバイスの実現に向けた層状化学ボロフェン無機液晶の基礎物性探索	オペランド，MPMS-7，XL7，MPMS3，ラマン，紫外可視近赤外	東北大学大学院工学研究科	神永　健一
分極構造を持つ BEDT-TTF 塩のスピン機能メカニズム解明	E680，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3	新潟大学研究統括機構	古川　貢
アドバンスド ESR を用いた茶葉含有微量金属の分子化学特性解明	E680，EMX，E500，E580	新潟大学研究統括機構	古川　貢
新規発光錯体群の物性および特性評価	TG-DTA/DSC，量子収率	九州工業大学大学院工学研究院	森口　哲次
DNA オリガミ法に基づく酸化鉄ナノ粒子二量体のギャップ制御	TEM，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3	Faculty of Science, Chulalongkorn University	Wid Mekseriwatta Na
低環境負荷型ナノマテリアルの評価	シナジー，微小結晶，オペランド，EMX，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3，TG-DTA/DSC，MALDI，ラマン，蛍光分光，量子収率，ピコ秒	法政大学生命科学部	緒方　啓典
発光酵素ガウシアルシフェラーゼを利用したタンパク質間相互作用の定量解析	円二色性	愛知学院大学歯学部	福田　信治
近赤外吸収発光特性を持つ安定開殻化合物の性質解明	蛍光分光，紫外可視近赤外	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	吾郷　友宏
イオン液体中における金属イオンの錯形成挙動の解明	ECZL600G	新居浜工業高等専門学校生物応用化学科	真瀬田幹生
核スピンフリー分子を骨格として持つ常磁性金属錯体の磁気特性	MPMS-7，XL7，MPMS3	東京理科大学理学部	石崎　聡晴

細胞内の金属と輸送タンパク質の相互作用解析	PEAQ-ITC，iTC200，円二色性	大阪公立大学大学院理学研究科	澤井　仁美
元素戦略によるキロプティカル材料の開発	MALDI	兵庫県立大学大学院理学研究科	井上　僚
オペランドXRDによるVO_2薄膜の金属－絶縁体相転移制御:酸素分圧依存性とナノスケール観察への統合的アプローチ	オペランド，低 SEM	大阪大学大学院基礎工学研究科	阿部　真之
6-Chloro-2,4-dinitroaniline 会合体の特異な発光過程の研究	蛍光分光, 紫外可視近赤外, ピコ秒	愛知教育大学教育学部	日野　和之
紅色硫黄光合成細菌 LH1–RC タンパク質複合体におけるカルシウムの構造的および機能的役割	PEAQ-DSC，PEAQ-ITC，iTC200	神戸大学大学院農学研究科	木村　行宏
ピロロキノリンキノンラジカルの磁気的性質測定	XL7，MPMS3	新潟大学研究統括機構	古川　貢
テトラド BODIPY 型光増感剤の一重項酸素量子収率	蛍光分光，紫外可視近赤外	長崎大学大学院医歯薬学総合研究科	真木　俊英
極端紫外光照射によるアミノ酸試料の光学活性発現	円二色性	核融合科学研究所	小林　政弘
酸化チタンをベースとする種々の酸化物系電極触媒の形態観察	TEM	名城大学理工学部	才田　隆広
多軌道系分子性固体における軌道混成効果	シナジー，オペランド，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3，ラマン	大阪工業大学工学部	平郡　諭
アデニル酸キナーゼ・モノボディ複合体の構造解析	PEAQ-ITC，iTC200	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
コバルトフェライトと希土類をドープしたセリアの複合化が磁気特性に及ぼす効果	MPMS-7，MPMS3	名古屋工業大学大学院工学研究科	籠 宮　功
マイルドな条件で窒素分子を活性化できる遷移金属錯体の研究開発	シナジー，CCD-1，CCD-2，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3，ECA600，ECZL600G，微小結晶，ラマン	愛知工業大学工学部	梶田　裕二
ブロックコポリマーを用いた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，TEM	名城大学理工学部	西山　桂
脂肪酸の周波数分解能を改善した 2 次元 NMR 計測によるメチレン鎖のケミカルシフト解析	ECA600，ECZL600G	生理学研究所	福永　雅喜
好冷性紅色光合成細菌 LH1-RC における色素間エネルギー移動の測定	蛍光分光	神戸大学大学院農学研究科	木村　行宏
透明キラル磁性体の磁気物性	シナジー，EMX，E500，MPMS-7，XL7，MPMS3，E580	広島大学大学院先進理工系科学研究科	井上　克也
キラル分子を添加した二量体液晶分子のラセン反転現象の評価	オペランド，円二色性	豊橋技術科学大学大学院工学研究科	荒川　優樹
ホウ素結晶と軽元素ドープしたホウ素結晶の SXES を用いた価電子帯分析	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
遅い磁化緩和を示す希土類錯体における磁気特性の精密測定	MPMS-7，XL7，MPMS3	奈良女子大学研究院自然科学系	梶原　孝志
光化学反応のみで合成された金属ナノ粒子の電子顕微鏡観察	TEM	石川工業高等専門学校電気工学科	仲林　裕司
Na 共添加による $LiCaAlF_6$ 中 Ce^{3+} イオンの局所構造変化	EMX，E580	山形大学理学部	北浦　守
環状シクロオレフィン樹脂を製造するタングステン錯体触媒前駆体の溶液 ^{183}W NMR 測定	ECZL600G	岡山大学大学院環境生命自然科学研究科	押木　俊之
ピコ秒レーザーを用いたオウムガイ殻の微細加工と化学処理の効果検証	低SEM, TEM, オペランド，ESCA，ピコ秒	高輝度光科学研究センター分光・イメージング推進室	竹田　裕介
分裂酵母のヘテロクロマチン形成に関する因子の機能解析	PEAQ-ITC	基礎生物学研究所	中村　凛子
スピン液体候補物質 κ-$(ET)_2Cu_2(CN)_3$ 類縁体の 6 K 異常の探索 (II)	E580	埼玉大学研究機構	小林　拓矢
マンガン酸化物強磁性薄膜における磁化ダイナミクスの界面効果	MPMS-7，XL7，MPMS3	名古屋大学大学院理学研究科	谷山　智康
機械学習により予測された新規ホイスラー化合物の高温相安定性の解明と合成プロセス最適化	オペランド	名古屋工業大学大学院工学研究科	宮崎　秀俊
セラミック薄膜の蛍光分光特性の評価	蛍光分光	愛知工科大学工学部	近藤　敏彰
多座配位子を活用した常磁性錯体の合成と光電子機能開拓	EMX，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3	九州大学大学院工学研究院	小野　利和
ISCA1 に結合した鉄イオン・鉄硫黄クラスターの特性解析	E680，EMX，E500，E580，紫外可視近赤外	埼玉大学大学院理工学研究科	長嶋　宏樹
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
フェナントロリン誘導体と窒化鉄子層による有機－無機ハイブリッド構造の新規スピン機能性の観測	XMCD（BL4B）	名古屋大学未来材料・システム研究所	宮町　俊生

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	電子ビーム描画	豊橋技術科学大学大学院工学研究科	八井　崇
アミノ酸薄膜試料表面の形状分布計測	段差計	核融合科学研究所	小林　政弘
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	マスクレス，スピンコーター	基礎生物学研究所	四方　明格
電極調製	スピンコーター，段差計，3 次元	Institute for Molecular Science	Tenaillon Johan
Preparation of Substrate for the Thin-Film Electrode	マスクレス，電子ビーム描画，スピンコーター，段差計，3 次元	Faculty of Engineering, Khon Kaen University	Sutasinee Neramittagapong
がん細胞特異的結合分子探索効率を向上させるマイクロ流路デバイスの開発	マスクレス,スピンコーター，段差計，3 次元	豊田工業高等専門学校機械工学科	神永　真帆
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	マスクレス，電子ビーム描画，スピンコーター，段差計，3 次元	基礎生物学研究所	林　健太郎
分子性物質における非対角熱電効果の研究	マスクレス,スピンコーター，段差計，3 次元	東邦大学理学部	川椙　義高
フラーレン誘導体 LB 薄膜の表面観察と光電気化学測定	3 次元	愛知教育大学教育学部	日野　和之
PET フィルムに対する高強度赤外レーザー照射効果	マスクレス，電子ビーム描画，スピンコーター，段差計，3 次元	京都大学生存圏研究所	田所　大輔
クシクラゲ卵ホルダーの作製	マスクレス,スピンコーター，段差計，3 次元	基礎生物学研究所	内海　秀子
鉱物試料における放射線損傷エッチングピットの表面分析	段差計マスクレス，スピンコーター，3 次元	東邦大学理学部	中　竜大

(3) 所内利用

課　題　名	支援機器等	代　表　者	
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，スピンコーター, 段差計，3 次元	機器センター	高田　紀子
エネルギー材料の構造解析	低 SEM，TEM，EPMA，微小結晶，オペランド，ESCA，ラマン	機器センター	湊　丈俊
エネルギー移動反応の機構解析	走査プローブ	機器センター	湊　丈俊
周期的 3 次元有機構造体の創製	低 SEM，TEM，EPMA，シナジー，CCD-1，CCD-2，微小結晶，オペランド，粉末Ｘ線，ESCA，E680，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3，PEAQ-DSC，PEAQ-ITC，iTC200，TG-DTA/DSC，MALDI，ラマン，蛍光分光，紫外可視近赤外，量子収率，円二色性，ピコ秒，ECA600，ECZL600G	生命・錯体分子科学研究領域	瀬川　泰知
NMR スピン緩和および拡散係数測定による機能性高分子材料の分子運動性解析	ECA600，ECZL600G	物質分子科学研究領域	倉橋　直也
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	PEAQ-DSC，PEAQ-ITC，iTC200，MALDI，円二色性，ECA600，ECZL600G	生命・錯体分子科学研究領域	加藤　晃一
酸化物微粒子の表面観測と物性・機能測定	走査プローブ	物質分子科学研究領域	佐藤　宏祐
Fabrication and Characterization of Plasmonic Chiral Nanostructure	電子ビーム	メゾスコピック計測研究センター	Ahn Hyo-Yong
金ナノレールの作製	マスクレス, 電子ビーム，スピンコーター, 段差計，3 次元	生命・錯体分子科学研究領域	原島　崇徳
環境応答性スピンプローブの開発	低 SEM，TEM，EMX，E500，E580，ECA600，ECZL600G，ICP-OES	岡崎連携プラットフォーム	加藤　賢

鋭利な先端形状をもつ STM 金属探針の開発	低 SEM，TEM，EPMA，シナジー，CCD-1，CCD-2，微小結晶，オペランド，粉末X線，ESCA，E680，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3，PEAQ-DSC，PEAQ-ITC，iTC200，TG-DTA/DSC，MALDI，ラマン，蛍光分光，紫外可視近赤外，量子収率，円二色性，ピコ秒，ECA600，ECZL600G	物質分子科学研究領域	櫻井　敦教
スピン軌道相互作用に立脚しない有機スピントロニクスデバイスの作成	マスクレス, 電子ビーム，スピンコーター, 段差計，3 次元	協奏分子システム研究センター	佐藤　拓朗
スピン軌道相互作用に立脚しない有機スピントロニクスデバイスの評価	低 SEM，TEM，EPMA，シナジー，CCD-1，CCD-2，微小結晶，オペランド，粉末X線，ESCA，E680，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3，PEAQ-DSC，PEAQ-ITC，iTC200，TG-DTA/DSC，MALDI，ラマン，蛍光分光，紫外可視近赤外，量子収率，円二色性，ピコ秒，ECA600，ECZL600G	協奏分子システム研究センター	佐藤　拓朗
スピン軌道相互作用に立脚しない有機スピントロニクスデバイスの局所伝導測定	走査プローブ	協奏分子システム研究センター	佐藤　拓朗
光機能性π共役分子と生体分子の構造・ダイナミクス解析	ラマン，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
低次元物質の構造と光物性の評価	低 SEM，ラマン	メゾスコピック計測研究センター	熊谷　　崇
触媒創製研究	TEM	生命・錯体分子科学研究領域	魚住　泰広
新規機能性タンパク質の開発	低 SEM，TEM，EMX，E500，E580，PEAQ-DSC，PEAQ-ITC，iTC200，MALDI，ラマン，蛍光分光，紫外可視近赤外，量子収率，円二色性，ECA600，ECZL600G	生命創成探究センター	岡本　泰典
顕微画像評価用テストパターン作成	マスクレス, 電子ビーム，スピンコーター, 段差計，3 次元	極端紫外光研究施設	岡野　泰彬
機能性有機分子薄膜の高単結晶化 II	走査プローブ	光分子科学研究領域	福谷　圭祐
無機薄膜材料を利用した新奇電子物性・イオン輸送特性の探索	走査プローブ	物質分子科学研究領域	清水　亮太
無機薄膜材料を利用した新奇電子物性・イオン輸送特性の探索	低 SEM，オペランド，ESCA，ラマン，紫外可視近赤外	物質分子科学研究領域	清水　亮太
無機薄膜材料を利用した新奇電子物性・イオン輸送特性の探索	マスクレス, 電子ビーム，スピンコーター, 段差計，3 次元	物質分子科学研究領域	清水　亮太
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
マイクロストラクチャーを活用した 2 次元半導体の研究	マスクレス, 電子ビーム，スピンコーター, 段差計，3 次元	物質分子科学研究領域	坂田　諒一
時計タンパク質の熱安定性の検証	円二色性	協奏分子システム研究センター	秋山　修志
マイクロストラクチャーを活用した 2 次元半導体の研究	低 SEM，TEM，EPMA，シナジー，CCD-1，CCD-2, 微小結晶, 粉末X線，ESCA，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3, ラマン, 蛍光分光，紫外可視近赤外, 量子収率，円二色性，ピコ秒，ECA600，ECZL600G	物質分子科学研究領域	坂田　諒一

低次元有機分子結晶におけるエネルギーバンド構造と分子振動相互作用の探索	ARUPS	光分子科学研究領域	福谷　圭祐
金属ドープ DNA の分光測定	ESCA，紫外可視近赤外，円二色性	極端紫外光研究施設	泉　　雄大

（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。2025 年度は，EMX　1 件，シナジー　1 件，走査プローブ顕微鏡　1 件，E680　1 件，量子収率　1 件，蛍光分光　1 件が採択された。業種別内訳は大企業 5 件，中小企業 1 件であった。

表 3　2025 年度（令和 7 年度）利用件数一覧（2025 年 4 月～ 2026 年 3 月）

	協力研究	施設利用	所内利用	非公開利用
採択件数	35	111	29	6
実施件数	34	103	28	6
実施日数	941	1487	1370	82

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。

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 13 件開催した。また海外諸機関との共同研究，インターンシップ受入れを継続して行っている。

3-3-7　分子科学研究所所長招へい会議（日本学術会議／日本化学会）

分子科学研究所 所長招へい会議は，我が国の学術の姿，研究力強化，大学及び共同研究機関の変容と変革，大学院教育戦略・国際化，科学政策・評価などについて産官学の意見・考えを基に多角的統括的に討議することを目的に，2001 年からほぼ 1 年に 1 回の頻度で開催されている。日本学術会議 化学委員会，日本化学会 戦略企画委員会と分子科学研究所の共同主催として開催され，日本学術会議 化学委員会の主要活動の一つに位置づけられている。分子科学研究所は運営事務局として参画する。

ここ 10 年ほどは初夏の頃に本会議を開催しており，2025 年度は，「化学の魅力を小中高校生に，社会に，伝える」というタイトルで人材育成に関連する話題を議論した。これまでもこのシリーズのシンポジウムでは何回か，人材育成に関係するテーマ，特に博士課程学生を増加するには何が必要かを議論してきたが，そうした取組の中で，我が国の科学技術水準の源泉となる高度な人材の育成，大学院の活性化には，遡って初等中等教育と，それを取り巻く社会全体の取り組みが必要ではないかという議論に至り，今回の表題のようなテーマ設定となった。中でも，化学は理科系の学術の基盤となる分野の一つであり，物理学，生命科学等にわたる様々な学術分野とも極めて多様な接点がある。また，環境学も化学を抜きにして語ることはできない側面がある。しかしこの身近さ故もあってか，化学を志す学生数は伸び悩んでいる現実があり，この状況は将来の学術全体に影響を及ぼす可能性が危惧される。今回のシンポジウムでは，化学分野にとどまらず，広くサイエンスの重要性と将来性，魅力を，これから進路を決めようとする若い世代に伝えるための方策を考えることを軸として議論した。会議はハイブリッド形式で開催され，現地・オンライン合わせて 120 名ほどの参加があった。社会における科学・化学への興味の障壁となっている，科学に対する恐怖や無関心の実情，それを払拭するために必要な，科学の「キラキラ感」「ワクワク感」を見せることの重要性など，今後の化学・科学のアウトリーチ活動のための指針について，有効な議論がなされた。

なお，2025 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 138 名の参加者があった。

開催テーマ：「化学の魅力を小中高校生に，社会に，伝える」

開催日時：2025 年 6 月 4 日（水）　13:30 〜 17:15

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）

講演

「科学を伝える　文部科学省の取組」
小野 賢志（文部科学省 文部科学広報官・大臣官房総務課広報室長）

「京都大学工学研究科での高校生の訪問受入れと体験実験の紹介」
近藤 輝幸（京都大学教授；日本化学会 化学教育ディビジョン主査）

「科学とともに科学者を伝える」
坂田 薫（化学講師）

「一人ひとりが魅力の伝え手」
杉森 純（読売新聞科学部 記者）

総合討論

司会：玉田 薫（日本学術会議第三部会員，九州大学教授）

主催：日本学術会議 化学委員会,

大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 分子科学研究所,

公益社団法人 日本化学会 戦略企画委員会

運営事務局：分子科学研究所（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（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進めている。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実施し，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活発化させる。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 OML OKAZAKI を本フロンティアハブの実施場所として提供している。

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。2024 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。

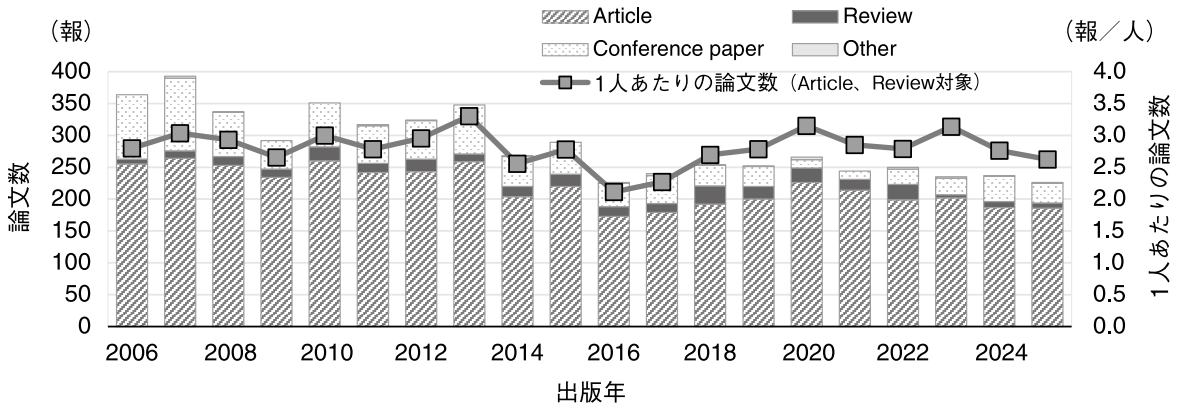
4-1　論文発表状況

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]
2006	255	8	101	0	94
2007	264	12	114	3	91
2008	252	14	69	1	91
2009	234	13	45	0	93
2010	260	22	69	0	94
2011	242	14	59	2	92
2012	243	20	60	1	89
2013	259	12	77	0	82
2014	204	16	47	1	86
2015	220	19	50	0	86
2016	173	15	37	1	89
2017	179	14	44	3	85
2018	192	29	32	1	82
2019	200	20	31	1	79
2020	226	23	13	4	79
2021	214	17	13	0	81
2022	199	24	24	3	80
2023	202	5	26	2	66
2024	187	9	40	1	71
2025	186	8	31	1	74

＊1　Scopus 調べ（2026 年 3 月 31 日現在）。

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

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

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

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

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

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

4 月に豊田工業大学に，それぞれ転出した。これらの研究領域の扱いについては今後の検討となる。一方，2018 年 5 月には杉本敏樹准教授（物質量子計測研究部門）が物質分子科学研究領域からの，また 2019 年 11 月には江原正博教授（繊細計測研究部門）と南谷英美准教授（物質量子計測研究部門）が理論･計算分子科学研究領域からの併任として就任した。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，専任教授を公募し，最終候補者が決定し（2026 年 5 月着任予定），またセンター長業務の後任者への引き継ぎを行った。

以上のような方針で分子システムの計測解析に関する研究を遂行すること，及びそれを通じて我が国の関連研究コミュニティにおける人材育成に寄与することが本センターの主なミッションであるが，同時にここで開発された新しいメゾスコピック計測手法を共同研究に供することも重要な機能の一つである。各研究グループの協力研究やその他のチャネルの共同研究を通じてそれを実施するほか，適宜醸成された計測手法・技術に関するセミナー等を開催する。また，さらに新たな革新的計測手法の開拓を念頭に置いた，萌芽的研究テーマとアイデアの発掘，可能性及び将来構想を議論する研究会等の開催も行っている。旧分子制御レーザー開発研究センターでは，分子科学研究所と理化学研究所の連携融合事業「エクストリーム・フォトニクス」を推進する母体となり，その主な研究活動終了後も，合同シンポジウム等の活動を自主的に継続してきたが，本センターはこの活動の一部を継続して推進した。なお，旧分子制御レーザー開発研究センターは，発足当初，種々の共用機器を保有して施設利用に供していたが，現在ではそれらの機器とその利用は全て機器センターに移っており，それを受けて本センターでは施設利用は想定していない。

繊細計測研究部門

岡本　裕巳（教授）（2000 年 11 月 1 日～ 2026 年 3 月 31 日）*)

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た。ナノレベルの空間分解能での測定が可能な近接場光学顕微鏡による光学活性イメージングでは，主にキラルな構造を持つ金ナノ構造体を対象とし，局所的な円二色性信号が巨視的な円二色性信号に比べて極めて大きくなること，高い対称性を持つアキラルな金属ナノ構造においても局所的には強い光学活性を示すこと，局所的な誘起双極子が局所的な円偏光場の起源になること等，幾つかの基礎的に重要な結果を得た。その成果を基礎として，蛍光分子とキラルな金属ナノ構造の組み合わせにより，高い円偏光度を示す蛍光が得られ，その起源をプラズモンモードとの関連において明らかにした。通常の遠方場の顕微鏡においても光学活性によるイメージングは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た。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た。また，それらの基盤的情報に基づき，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

釈した。これにより，キラル物質の光マニピュレーションの基礎となる知見を得た。更に，キラル金ナノ微粒子の光圧による輸送についても，円偏光の掌性による差があることを実証した。さらに，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った。

B-1) 学術論文

Y. XUAN, D. MIYAZAKI, Y. ISHIKAWA, H. OKAMOTO and M. SADGROVE, “Creation and Detection of Optical Spin in a Coupled Emitter–Plasmon System,” *Nano Lett.* **26(6)**, 2129–2135 (2026). DOI: 10.1021/acs.nanolett.5c05644

H.-T. SU, H. NIINOMI, A.-C. CHENG, Y. Y. TANAKA, K. SASAKI and T. SUGIYAMA, “Enantioselectivity Switch in Chiral Crystallization Using Optical Trapping with Gold Nanoparticles,” *Cell Rep. Phys. Sci.* **5(12)**, 102310 (2024). DOI: 10.1016/j.xcrp.2024.102310.

B-3) 総説，著書

岡本裕巳, 山西絢介, マーク・サッドグローブ,「キラル物質における円偏光による光圧」, *応用物理* , **95(3)**, 152–156 (2026).

岡本裕巳,「ナノ構造物質のキラル光学効果」, フォトニクスニュース , **11(2)**, 56–60 (2025).

L. V. BESTEIRO, Y. LIU and H. OKAMOTO, “Chirality of Plasmonic Structures and Materials,” *J. Chem. Phys.* **161(18)**, 180401 (2024). DOI: 10.1063/5.0244919

B-4) 招待講演

岡本裕巳,「キラル光学顕微イメージングと，キラル近接場－物質相互作用」, 第 73 回応用物理学会春季学術講演会シンポジウム「光とキラリティー：その科学と応用」, 東京 , 2026 年 3 月 .

岡本裕巳,「プラズモン物質のキラル光学効果，キラル近接場相互作用」, 第 29 回プラズモニック化学シンポジウム , 東京 , 2025 年 12 月 .

H. OKAMOTO, “Chiro-optical microscopy to observe chiral fields in micro-/nano-structured samples,” Structured Light and Materials Workshop 2025, Taipei (Taiwan), November 2025.

岡本裕巳,「『ねじれた光』で見る左と右，鏡写しの世界」, 第 144 回分子科学フォーラム , オンライン開催 , 2025 年 11 月 .

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA, H.-Y. AHN and J. YAMANISHI, “Chiro-optical microscopy and chiral near-field interaction between plasmon resonances and molecules,” PIERS2025 (PhotonIcs and Electromagnetics Research Symposium) in Chiba, Chiba (Japan), November 2025.

J. YAMANISHI, H. OKAMOTO and H.-Y. AHN, “Optical Force Nanoscopy of Chiro-Optical Effects in Photoinduced Force Microscopy,” 33rd International Materials Research Congress (IMRC2025), Cancun (Mexico), August 2025.

J. YAMANISHI, H.-Y. AHN and H. OKAMOTO, “Optical Force Nanoscopy of Circular Dichroism in Photoinduced Force Microscopy,” 15th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META2025), Malaga (Spain), July 2025.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA, H.-Y. AHN and J. YAMANISHI, “Chiro-optical microscopy of plasmonic materials and chiral near-field interaction with molecules and materials,” 15th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META2025), Malaga (Spain), July 2025.

H.-Y. AHN, J. YAMANISHI and H. OKAMOTO, "Utilization of strong chiro-optical field near chiral and achiral plasmonic nanostructure: Chiral emission and photofabrication," 15th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META2025), Malaga (Spain), July 2025.

H.-Y. AHN, J. YAMANISHI and H. OKAMOTO, "Plasmonic chiro-optical field for circularly polarized luminescence and chiral structure fabrication," The 11th International Conference on Antennas and Electromagnetic Systems (AES2025), Tangier (Morocco), July 2025.

B-5) 特許出願

登録

EP4300059, "Circularly Polarized Light Illuminator, Analysis Device, and Microscope," H. OKAMOTO and T. NARUSHIMA (National Institutes of Natural Sciences), 2022年.（登録日 2025年5月21日）

40106088, "Circularly Polarized Light Illuminator, Analysis Device, and Microscope," H. OKAMOTO and T. NARUSHIMA (National Institutes of Natural Sciences), 2022年.（登録日 2025年9月5日）

特許第7749245号,「円偏光照射器，分析装置及び顕微鏡」, 岡本 裕巳, 成島 哲也（自然科学研究機構）, 2022年.（登録日 2025年9月26日）

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

プラズモニック化学研究会副会長 (2020–).

学会の組織委員等

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

Pacifichem 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),「アト秒ビームラインII（高繰り返し型）と計測」分科会委員 (2025–2026).

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-10) 競争的資金

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), 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用い，そこからグループの主要な研究内容をキラル物質の局所光学活性のイメージングにシフトした。金属ナノ構造の近接場光学活性イメージングによって，独自の実験的情報を得ることができ，プラズモン由来の強くねじれた局所光場の存在，また対称性の高いアキラルな構造でも局所的に強い光学活性を示すという，ユニークな成果も得られた。これらの研究から得られたプラズモンのキラリティに関する性質を基礎として，キラルプラズモンが分子の特性に及ぼす効果に関する研究にも展開し，高い円偏光度を示す発光物質系を見出しその起源を解明するなど，成果が得られるようになった。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た。円二色性顕微鏡に更に新たなアイデアを導入して，汎用性の高い，ロバストな装置とする開発は継続しており，共同研究者が今後も展開する予定である。また物質および光のキラリティは磁性との相関においても興味が持たれ，ナノ光学の観点からこの方向への研究展開について共同研究も行った。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・輸送に関する新たな成果が得られ，今後その展開にも期待したい。これらを総合した新たな方向への展開として，キラルな光－物質相互作用による，物質キラリティの創出の試みを進める科研費学術変革領域研究(A)が採択されており，その成果の取りまとめを行う予定としている。

＊）2026 年 3 月 31 日定年退職

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）
LEE, Lu-Hsin（大学院生）
福富　実（大学院生）
鎌田　一輝（特別共同利用研究員）
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); *Science Advances* **11**, eadv9584 (2025)］。

B-1) 学術論文

K. KIM, L. HOU, M. ABE and T. KUMAGAI, “Real-Space Observation of Metal–Insulator Transition of Individual Anisotropic Nanodomain in VO_2/TiO_2(110) Thin Films,” *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **23(3)**, 262–269 (2025). DOI: 10.1380/ejssnt.2025-035

J. NISHIDA, K. OTSUKA, T. MINATO, Y. K. KATO and T. KUMAGAI, "Ultrafast Infrared Nano-Imaging of Local Electron–Hole Dynamics in CVD-Grown Single-Walled Carbon Nanotubes," *Sci. Adv.* **11(25)**, eadv9584 (2025). DOI: 10.1126/sciadv.adv9584

A. SHIOTARI, J. NISHIDA, A. HAMMUD, F. SCHULZ, M. WOLF, T. KUMAGAI and M. MÜLLER, "Scattering Near-Field Optical Microscopy at 1-nm Resolution Using Ultralow Tip Oscillation Amplitudes," *Sci. Adv.* **11(24)**, eadu1415 (2025). DOI: 10.1126/sciadv.adu1415

A. SHIOTARI, S. LIU, G. TRENINS, T. SUGIMOTO, M. WOLF, M. ROSSI and T. KUMAGAI, "Picocavity-Enhanced Raman Spectroscopy of Physisorbed H_2 and D_2 Molecules," *Phys. Rev. Lett.* **134(20)**, 206901 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevLett.134.206901

X. ZHANG, R. MATSUO, Y. YAHANO, J. NISHIDA, K. NAMURA and M. SUZUKI, "Configurable Vibrational Coupling in Laser-Induced Microsecond Oscillations of Multi-Microbubble System," *Small* **21(20)**, 2408979 (2025). DOI: 10.1002/smll.202408979

B-3) 総説，著書

T. KUMAGAI, K. MIWA and B. CIRERA, "Point-Contact Tip-Enhanced Raman Spectroscopy: Picoscale Light–Matter Interactions within Plasmonic Cavities," *Nano Lett.* **25(43)**, 15449–15459 (2025). DOI: 10.1021/acs.nanolett.5c04045

J. NISHIDA, "Infrared Nano-Spectroscopy and Imaging on Spatially Confined Nanomaterials," *Jpn. J. Appl. Phys.* **64(4)**, 040802 (2025). DOI: 10.35848/1347-4065/adc26e

B-4) 招待講演

熊谷　崇,「ピコスケールのラマン分光」, 先端光科学研究の新展開, 愛知, 2026年3月.

熊谷　崇,「Frontiers in Surface Science Opened by Advanced Nanometrology」, 現代表面科学の到達点とフロンティアを超えて, 千葉, 2026年2月.

西田　純,「超高速赤外散乱ナノイメージングによる低次元半導体局所ダイナミクスの解明」, 表面・光融合先端計測研究会 SPARC, 岡崎, 2025年12月.

西田　純,「単一タンパク質の赤外ナノ分光」, VUV-SX 領域の光科学による生命科学, 岡崎, 2025年10月.

熊谷　崇,「探針増強近接場分光の最前線 単一原子・単一分子・ナノマテリアルの精密分光」, R7年度第1回合成横断技術領域ワークショップ, 東京, 2025年7月.

T. KUMAGAI, "Point-Contact Tip-Enhanced Raman Spectroscopy: Picoscale Light–Matter Interactions within Plasmonic Cavities," AVS Taiwan Chapter Symposium, Chiayi (Taiwan), January 2026.

J. NISHIDA, "Application of ultrafast infrared nano-imaging to low-dimensional materials," The Physical Society of Japan 2025 Annual Meeting, Hiroshima (Japan), September 2025.

T. KUMAGAI, "Ultrafast Nano-Spectroscopy of Photo-Induced Dynamics in Low-Dimensional Materials," The 2nd Sino-German Workshop on Surface Science of Complex Systems, Changchun (China), September 2025.

J. NISHIDA, "Ultrafast mid-infrared nano-imaging of local electron–hole dynamics in low-dimensional materials," SPIE Optics + Photonics, San Diego (USA), August 2025.

T. KUMAGAI, "Ultrafast Nano-Spectroscopy of Photo-Induced Dynamics in Low-Dimensional Materials," The 82nd Okazaki Conference "Recent Advances and Perspectives of Interfacial Materials and Molecular Sciences lead by Next-Generation Laser Techniques and Computational Science," Okazaki, Aichi (Japan), July 2025.

T. KUMAGAI, "Toward Atomic-Scale Scattering-Type Scanning Near-Field Optical Microscopy," STM'25, Seoul (Korea), June 2025.

T. KUMAGAI, "Atomic-Scale Phonon Studies Using Tip-Enhanced Near-Field Optical Spectroscopy," The 22nd International Conference on Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (TRVS 2025), The 77th Yamada Conference, Shiga (Japan), May 2025.

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–).

理科教育活動

「科学三昧 in あいち 2025」指導助言 (2025).

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–2026年3月.

大阪大学大学院基礎工学研究科, 招へい教員, 2025年4月–2026年3月.

東京大学大学院理学系研究科, 非常勤講師, 2025年4月–2025年9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).

科研費学術変革領域研究(B),「スマートナノ粒子プラズモン共鳴スペクトルの一粒子計測」, 西田　純 (2025年度–2027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ており，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。

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，加藤教授，飯野教授，岡本准教授）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。

2025 年度の特筆すべき研究成果として，シアノバクテリア概日時計システムの進化に関する共同研究（秋山グループ）が科学雑誌「*Nature Communications*」誌に掲載された。その他，機能分子システム創成研究部門からは，キラル有機超伝導体における頑健なスピン運動量結合に関する研究成果が「*Physical Review Research*」誌に（山本グループ）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だすことが求められる。既に一部のグループ間で共同研究が進行中であるが，より多くのセンター構成員で共有できる新しい研究プロジェクトを練り上げていく必要がある。専門から少し離れた分野でのプロジェクト立案には人的交流が何よりも重要であるため，研究グループの居室を南実験棟の 3 階の 1 フロアに集中させ，一部をオープンスペースとして運用しつつ，科学的な議論や交流を活発に進めている。

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

階層分子システム解析研究部門

秋山　修志（教授）（2012 年 4 月 1 日着任）

古池　美彦（助教）
堀内　滉太（助教）
尾上　靖宏（特任研究員）
近藤　貫太（大学院生）
鷲尾　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）
杉坂 かな恵（技術支援員）
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. Nature Commun.* 2025; Furuike *et al. PNAS Nexus* 2025; 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*., *Nature Commun.* 2025）。約 31 億年前，約 26 億年前，約 22 億年前，約 13 億年前，約 1 億年前の時計タンパク質を復元し，それぞれが体内時計の特徴であるリズム反応を示すかどうかを検証した。その結果，約 22 億年前の時計タンパク質が，歴史上で時を刻み始めた最初の体内時計であったことを解明した。本成果は，テレビ報道（知り TIME：2025 年 6 月 5 日），新聞報道（讀賣新聞：2025 年 6 月 2 日），オンラインニュース（20 件以上）等で取り上げられ，広く一般社会の注目を集めることとなった。

二つ目は，KaiC の第一自己リン酸化過程の解明である（Furuike *et all., PNAS Nexus* 2025）。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。本成果は，オンラインニュース（約 10 件）等で取り上げられた。

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 ユーザー協同体）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が，高速で動く生体高分子で構成されているため，全体としての遅さの原因は不明であった。我々は，周期を規定する C1-ATPase の遅さが，加水分解に用いられる水分子の隔離や，高い活性化エネルギーを有するペプチド異性化に起因していることを解明した。本成果は国内外の化学誌（ChemistryWorld June 2015，現代化学 2015），専門家評価コメント（http://smc-japan.org/?p=4072），国内の新聞記事（毎日新聞，日本経済新聞）等で取り上げられ，学術的な新規性が世界的に高く評価されている。

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-1) 学術論文

C. YAMAGUCHI, R. A. KANALY, E. NISHIZAKI, K. YAMASHITA, K. TAKATSUKI, Y. FURUIKE, M. FANG, S. AKIYAMA, S. AOKI, M. TSUKAMOTO, Y. NAKAHIRA, S. GOLDEN and S. KUTSUNA, “Effects of the Signaling Molecule Cyclic-di-GMP on Cyanobacterial Circadian Rhythm in *Synechococcus elongatus* PCC 7942,” *J. Bacteriol.* e00574-25 (2026). DOI: 10.1128/jb.00574-25

K. ITO-MIWA, Y. ONOUE, T. KONDO and K. TERAUCHI, "Effect of pH on the Cyanobacterial Circadian Oscillator In Vitro," *Commun. Biol.* **8(1)**, 828 (2025). DOI: 10.1038/s42003-025-08273-8

A. MUKAIYAMA, Y. FURUIKE, K. ITO-MIWA, Y. ONOUE, K. HORIUCHI, K. KONDO, E. YAMASHITA and S. AKIYAMA, "Evolutionary Origins of Self-Sustained Kai Protein Circadian Oscillators in Cyanobacteria," *Nat. Commun.* **16(1)**, 4541 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-59908-7

Y. FURUIKE, Y. ONOUE, S. SAITO, T. MORI and S. AKIYAMA, "The Priming Phosphorylation of KaiC Is Activated by the Release of Its Autokinase Autoinhibition," *PNAS Nexus* **4(5)**, pgaf136 (2025). DOI: 10.1093/pnasnexus/pgaf136

B-3) 総説，著書

S. AKIYAMA and Y. FURUIKE, "Autonomous Disassembly of Circadian Clock System of Cyanobacteria at Dawn," in *Circadian Clocks in 2024*, 89–97 (2025).

B-4) 招待講演

秋山修志,「最古の体内時計が日の出を知らせた約 22 億年前のある日」, 自然科学研究機構シンポジウム「元素から紐解く宇宙と生命のものがたり」, 岡崎市（ハイブリッド開催）, 2026 年 3 月.

秋山修志,「分子科学研究所のＸ線溶液散乱装置とその利用事例の紹介」, 第 3 回 ARIM マテリアル循環－量子・電子制御領域合同計測セミナー , オンライン開催, 2026 年 3 月.

古池美彦,「古代地球における時計タンパク質 KaiC の構造の進化」, 学術変革領域(A)「時間タンパク質学」領域会議, 福井, 2026 年 1 月.

古池美彦,「Structural Evolution of Clock Protein KaiC on Ancient Earth」, 日本生物物理学会 シンポジウム「ノルウェー・日本二国間シンポジウム」, 奈良, 2025 年 9 月.

古池美彦,「古代 KaiC の構造に刻まれた 概日リズムの起源」, 日本蛋白質科学会年会 シンポジウム「時間タンパク質学：時を生み出すタンパク質分子とその実体」, 姫路, 2025 年 6 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」, 学術変革領域(A)「時間タンパク質学」第三回領域会議, 東京, 2025 年 4 月.

Y. FURUIKE, "Crystallizing Clock Protein KaiC with Planetary Rhythm Across Billions of Years," 国立成功大学生物化学及分子生物学研究所セミナー , Tainan (Taiwan), November 2025.

S. AKIYAMA, "One day about 2.2 billion years ago, cyanobacteria anticipated the timing of the next sunrise," 20th Asian Chemical Congress, Bangkok (Thailand), June 2025.

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 (2023–2026).

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 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, 客員教授（客員研究員）, 2025年7月–2026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」, 2025年11月.（古池美彦）

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」（代表者；秋山修志), 古池美彦（研究分担者）(2022年度–2026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–2025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).

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).

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).

C)　研究活動の課題と展望

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（教授（兼任*））（2025 年 4 月 1 日～ 2026 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）

＊大阪大学大学院基礎工学研究科

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) 新規極短パルス光源の開発

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) コヒーレント多次元分光法は，凝縮系における超高速ダイナミクスを解明するための強力な手法である。なかでも二次元電子分光法は，不均一広がりを有する系のダイナミクスや，複数の発色団を含む分子系におけるエネルギー移動過程を詳細に追跡できるため，線形分光法や従来の過渡吸収分光法では得ることのできない相関情報を与える。一方で，従来の測定装置では観測可能な周波数帯域が限られており，広い周波数領域にわたる分子応答間の相関を，高い時間分解能で測定することは容易ではなかった。そこで我々は，音響光学素子に基づく高速パルス整形器を導入し，超広帯域コヒーレント多次元分光の基盤となるパルス整形技術の開発に取り組んだ。遅延時間掃引，位相反転，回転座標系における遅延時間掃引など，多次元分光の実現に不可欠な波形整形・位相変調技術の開発と実装を進め，これにより，広帯域かつ高時間分解能で分子の電子・振動応答の相関を計測するための実験基盤を構築した。

b) 凝縮相における単純分子系の励起状態ダイナミクスや，DNA・タンパク質の紫外光応答を解明するうえで，紫外極短パルス光は重要なツールである。しかし，分散補償の困難から，空気中での発生はこれまで十分に開拓されてこなかった。本研究では，アクロマティック第二高調波発生によって発生させた紫外広帯域パルスを，Two-Dimensional Spectral Shearing Interferometry（2DSI）による群遅延評価を指標としてフーリエ限界まで圧縮する新規光学系を開発した。光線追跡シミュレーションに基づき，広帯域紫外パルスに含まれる大きな高次分散をプリズム対，および可変形鏡をフーリエ面に配置した 4-f パルス整形器を用いて補償し，スペクトル全域にわたって群遅延をほぼゼロに制御することに成功した。これにより，深紫外および近紫外領域において，フーリエ限界に迫る時間幅 ~3 fs の極短パルス光発生を実現し，凝縮相における高時間分解能紫外分光計測への足がかりを得た。

c) 極短パルスを用いた時間分解分光では，電子基底状態および励起状態に誘起された核波束運動を観測することが可能であり，両状態のダイナミクスに関する有益な知見が得られる。最近我々は，光合成アンテナ複合体 Lhcp を対象として，サブ 10 fs の時間分解能を有する過渡吸収分光測定を行った。その結果，クロロフィルを選択的に励起した条件においても，カロテノイドの振動コヒーレンスが観測され，クロロフィルとカルボニルカロテノイドの間に弱い励起子的混成が存在することを示唆する知見が得られた。これらの結果は，カロテノイドが単なる補助色素ではなく，

集団的な励起状態の形成に寄与することを示しており，天然および人工の集光アンテナ系におけるコヒーレンスの解釈に新たな視点を与えるものである。

B-1) 学術論文

Y. YONEDA, M. KOSUGI, J. MINAGAWA and H. KURAMOCHI, “Upper-State-Assisted Uphill Energy Transfer in a Far-Red Light-Harvesting Antenna from an Antarctic Alga,” *J. Chem. Phys.* **164(8)**, 085101 (2026). DOI: 10.1063/5.0310823

L. LIU, H. KURAMOCHI, M. IWAMURA, K. NOZAKI and T. TAHARA, “Localization of the Au–Au Bond Strength in the Triplet Excited State of the [Au(CN)$_2^-$] Oligomers Revealed by Ultrafast Time-Domain Raman Spectroscopy,” *Chem. Sci.* **17(5)**, 2676–2684 (2026). DOI: 10.1039/D5SC05664K

R. MATSUOKA, Y. YONEDA, H. KURAMOCHI, T. MIURA, T. IKOMA, M. SAIGO, T. EHARA, K. MIYATA, K. ONDA and T. KUSAMOTO, “Spectroscopic Characterization of the Charge-Separated Zwitterionic State Responsible for the Excimer-Like Emission of a Luminescent Diradical,” *J. Am. Chem. Soc.* **148(1)**, 1086–1095 (2026). DOI: 10.1021/jacs.5c17112

K. HIRAMATSU, H. KURAMOCHI, S. TAKEUCHI and T. TAHARA, “Time-Domain Raman Optical Activity Spectroscopy,” *Optica* **12(12)**, 1981–1987 (2025). DOI: 10.1364/OPTICA.575503

M. KOGA, D. H. KANG, Z. N. HEIM, N. HALDAR and D. M. NEUMARK, “Extreme Ultraviolet Time-Resolved Photoelectron Spectrometer with an Ultrathin Liquid Flat Jet,” *Rev. Sci. Instrum.* **96(7)**, 073002 (2025). DOI: 10.1063/5.0272226

T. EHARA, Y. YONEDA, T. YOSHIDA, T. OGAWA, Y. KONISHI, T. ONO, A. MURANAKA, H. KURAMOCHI, K. MIYATA and K. ONDA, “Dynamic Excited-State Localization Induced by Jahn-Teller Distortion Observed by Coherent Vibrational Spectroscopy,” *J. Am. Chem. Soc.* **147(30)**, 26446–26455 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c06020

S. TAHARA, R. KURIHARA, K. KOJIMA, H. KURAMOCHI, S. TAKEUCHI, Y. SUDO and T. TAHARA, “Ultrafast Protein Dynamics Prior to Retinal Photoisomerization in Microbial Rhodopsins,” *J. Phys. Chem. Lett.* **16(23)**, 5732–5738 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpclett.5c00623

Y. YONEDA, T. KONISHI, K. SUGA, S. SAITO and H. KURAMOCHI, “Excited-State Aromatization Drives Nonequilibrium Planarization Dynamics,” *J. Am. Chem. Soc.* **147(14)**, 12051–12060 (2025). DOI: 10.1021/jacs.4c18623

B-3) 総説，著書

米田勇祐,「フェムト秒二次元分光による光化学反応の分析」, ぶんせき , **7**, 187 (2025).

B-4) 招待講演

倉持　光,「先端的超高速・非線形分光で迫る凝縮相分子ダイナミクス」, 第 46 回光化学若手の会 , 札幌 , 2025 年 6 月 .

Y. YONEDA and H. KURAMOCHI, “Unraveling Ultrafast Chemical Reaction Dynamics of Condensed-Phase Complex Molecules through Vibrational Coherence,” The 22nd International Conference on Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (TRVS2025), Shiga (Japan), May 2025.

H. KURAMOCHI, “Visualizing excitonic and primary structural dynamics in photoactive proteins by ultrafast coherent vibrational spectroscopy,” Telluride meeting “Protein dynamics,” Telluride (USA), July 2025.

H. KURAMOCHI, “Mapping ultrafast chemical reaction dynamics in complex molecular systems via vibrational coherence,” Kobe Seminar on Quantum Biology and Technology, Kobe (Japan), October 2025.

Y. YONEDA and H. KURAMOCHI, “Unraveling ultrafast chemical reaction dynamics of condensed-phase complex molecules using few-cycle pulses,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), “Ultrafast Chemical Dynamics,” Honolulu, Hawaii (USA), December 2025.

Y. YONEDA and H. KURAMOCHI, “Mapping ultrafast chemical reaction dynamics through vibrational coherence,” Pacifichem 2025, “Recent Advances in Coherent Multidimensional Spectroscopy,” Honolulu, Hawaii (USA), December 2025.

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).

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.

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).

科研費学術変革領域研究 (A)（公募班),「新規超高速多次元分光による光応答性タンパク質の不均一性と反応初期過程の統合的理解」, 倉持　光 (2025 年度–2026 年度).

科研費基盤研究 (S),「新奇分子研究が切り拓くロドプシン科学のフロンティア」（代表者；井上圭一), 倉持　光（研究分担者）(2025 年度–2029 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，凝縮相における複雑分子系の機能・構造・ダイナミクスの解明に取り組んでいる。特に分子研においては，極短パルス光を用いた独自の超高速コヒーレント振動分光の材料系への応用を進めるとともに，その多次元振動分光への発展や，新規方法論開発を支える極短パルス光源の開発に取り組んできた。さらに，従来のアンサンブル測定では捉えられない自発的揺らぎが，巨大生体分子の電子状態，構造，反応ダイナミクスにどのような影響を及ぼすかを明らかにするため，単一分子計測に基づく新しい蛍光相関分光法の開発も進めてきた。これらの研究はなお端緒にあるものの，今後はその応用をさらに展開し，凝縮相ダイナミクス研究に新たな研究潮流を切り拓きたい。

岡本　泰典（准教授）（2024 年 8 月 1 日着任）

岡本　早紀（技術支援員）
江藤　智子（技術支援員）
川口　律子（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) 生体内での自律構築に向けた人工多核金属酵素の開発

c) 細胞外膜小胞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；連鎖的に結びついた生体内の化学反応ネットワークを通じて，細胞機能は制御されている。この生体内における化学反応ネットワークを再設計し，物質生産や医薬分野への応用を目指す研究が精力的に展開されている。生体内の化学反応ネットワークへ非天然の化学反応を自在に組み込むことができれば，天然の酵素反応のみではアクセスが困難な高付加価値化合物の生産，さらには新たな作用機序に基づく医薬の開発へとつながる。こうした背景を踏まえ，我々は非天然の物質変換能を備えた人工金属酵素を活用し，生体内の化学反応ネットワークへの介入をめざしている。

人工金属酵素は，①ホストとなるタンパク質が有する内部空間へ非天然の合成金属錯体を導入する方法，あるいは②非天然の金属中心をタンパク質のアミノ酸側鎖によって構築する方法で得ることができる。人工金属酵素研究においては，酵素が有する「温和な反応条件下での高選択的な物質変換能」と，金属錯体の持つ「自然界には存在しない強力な化学変換能」の双方を有する触媒が開発がされてきた。加えて，我々は人工金属酵素が示す「生体分子寛容性」にも注目してきた。生体分子寛容性とは，他の生体分子（タンパク質や酵素など）が共存する環境下においても，人工金属酵素の非天然機能が失活しないことを指す。この特性を活かし，我々のグループでは人工金属酵素を通じた生体内化学反応ネットワークの再編成と制御に取り組んでいる。この目標の実現へ向け，以下の３つのプロジェクトを並行して推進している。

a) 光駆動型人工金属酵素の開発と応用；これまでに数多くの人工金属酵素が開発されてきたものの，外部刺激を介して触媒活性の制御が可能なものはほとんど報告されていない。我々は細胞内や生体内での活用を視野に入れ，光を用いた活性制御が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へルテニウム錯体を導入することで，その光化学特性を変化させることに成功した。ここで得られた人工金属酵素は光照射によって活性化し，抗体におけるアミノ酸残基選択的な化学修飾反応を触媒する能力を持つ。現在は，金属錯体の選定ならびにホストタンパク質の改変の両面から，この光駆動型人工金属酵素のさらなる高機能化を進めている。

さまざまな条件検討の結果，これまでに利用してきたホストタンパク質の大腸菌による発現系の構築が難しいことが判明した。そこで来年度は，*in vitro* 翻訳系の利用など他のタンパク質発現系を検討し，ホストタンパク質への変異導入をねらう。また，計算機科学的手法と併用し，新しいホストタンパク質候補の探索を行っていく。

b) 人工多核金属酵素の開発；複数の金属イオンから活性中心を構築する多核金属酵素は，合成化学的に難度の高い物

質変換を低環境負荷型の条件下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再構築することにより,強力な触媒開発に資する設計指針を得ることが可能となる。しかしながら,タンパク質の内部で複数の金属イオンを設計通りに配置することは極めて困難である。こうした背景のもと,我々は独自に開発した計算科学的設計手法を駆使して,多核金属中心の構築に取り組んでいる。

c) 細胞外膜小胞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への展開を念頭に,我々は生物の産生するベシクルのエンジニアリング基盤の確立に取り組んでいる。具体的には,このベシクル内部に複数種類の機能性生体分子を導入するための手法の開発に取り組んでいる。現在までに,ベシクル内外に２つの異なるタンパク質を同時に導入可能であることを示している。

以下では,特に進捗の見られた「b) 人工多核金属酵素の開発」についての成果を記載する。

生体内の化学反応ネットワークへの介入という長期目標の達成に向け,生体内の情報伝達を担っているサイトカインの人工酵素化の研究を進めている。具体的には,サイトカインの一種であるマクロファージ遊走阻止因子（MIF）の内部空間に非天然の多核金属中心を設計した。構築する多核金属中心としては,合成配位子での構築事例のある亜鉛三核錯体をターゲット構造として選定した。まず,独自に立案した計算プログラムを用いた幾何学的な配置探索により,三核亜鉛中心を構築可能な部位の候補を網羅的に割り出した。次に,密度汎関数理論（DFT）計算により,最適な部位を絞り込んだ。得られた設計を基に,実際に MIF 変異体を作製し,亜鉛イオンと混合したところ,X線結晶構造解析により,設計通りに三核亜鉛中心が形成されていることが確認された。設計構造と結晶構造の RMSD は 0.8 Å 以下であり,我々の設計手法の精度の高さを示すことができた。MIF は元来加水分解活性を示さないが,この三核亜鉛中心が形成された MIF,すなわち人工多核亜鉛酵素は外来性機能として高い加水分解活性を発現した。この活性は既報の人工酵素と比較してもトップクラスの値であった。

B-1) 学術論文

A. UENO, F. TAKIDA, T. KITA, T. ISHII, T. HIMIYAMA, T. MABUCHI and Y. OKAMOTO, “A Cytokine-Based Designer Enzyme with an Abiological Multinuclear Metal Center Exhibits Intrinsic and Extrinsic Catalysis,” *Nat. Commun.* **16(1)**, 6781 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-61909-5

B-4) 招待講演

岡本泰典,「タンパク質で金属錯体を合成する。タンパク質で金属錯体の機能を操る」, 錯体化学若手の会九州・沖縄支部勉強会, 福岡, 2025 年 12 月.

Y. OKAMOTO, “Rational Design of a Synthetic Trinuclear Zinc Center in a Protein Scaffold: Combining Non-native Catalysis with Native Protein Activity,” 21st International Conference on Biological Inorganic Chemistry, Long Beach, California (USA), August 2025.

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–), 広報・ホームページ委員 (2025–).

金属の関与する生体関連反応シンポジウム評議委員 (2025–).

理科教育活動

30周年記念式典挨拶「岐阜サマー・サイエンス・スクール」中津川市教育委員会 (2025).

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：分子デザインはじめました, URL: https://t.co/aqYGgPTpK6, 2024年3月31日配信開始, 2026年3月現在で23エピソード) (2025).

B-8) 大学での講義，客員

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), 2025年4月–2026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).

科研費基盤研究(B),「光駆動型タンパク質化学修飾酵素の創成」, 岡本泰典 (2025年度–2028年度).

C) 研究活動の課題と展望

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となる個別の研究課題として上記の３つの研究を進めている。

今後の展望として，この３つのプロジェクトを並行して進めていくが，その中でも，長期目標の達成に向けて中核となる人工多核金属酵素の研究に力点を置く。元来有していない新しい機能をMIFに付与することについては上述のように成功している。これを受け，次なる課題としては①MIF元来の機能が維持されているかの検証，②変異導入による触媒機能の向上，③多核金属中心のレパートリーの拡張が挙げられる。来年度は主に①と②に注力して研究を進める。

小杉　貴洋（助教）（2015 年 6 月 1 日～ 2026 年 2 月 28 日）*)

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。我々は，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に成功した。さらに，その酵素の変性温度は 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，2025 年度に *Protein Science* 誌に論文を出版した。現在は，更なる活性向上を目指しつつ，酵素活性に重要な要素は何か明らかにする研究を続けている。
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。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 複合体の構成タンパク質の組み合わせを合理的に変え，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。現在は，V-ATPase や TOR 複合体を合理的に改造することで，理解するだけでなく，細胞の制御を目指す研究を行っている。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-1) 学術論文

T. KOSUGI, M. TANABE and N. KOGA, “De Novo Design of ATPase Based on a Blueprint Optimized for Harboring the P-Loop Motif,” *Protein Sci.* **34(6)**, e70132 (2025). DOI: 10.1002/pro.70132

B-3) 総説，著書

小杉貴洋,「タンパク質複合体の合理的改造」, *生体の科学*, **76(2)**, 131–135 (2025).

B-4) 招待講演

小杉貴洋,「計算科学による機能的人工蛋白質の設計」, 日本化学会第 106 春季年会, 船橋, 2026 年 3 月.

小杉貴洋,「タンパク質デザインよる機能の設計とその応用」, 発酵と代謝研究会第 2 回勉強会「次世代型の新規タンパク質設計と培養制御」, 東京, 2025 年 12 月.

小杉貴洋,「創ることと理解することと～どのように生体分子を設計し何を目指すのか？～」, 分子研研究会「2050 年の生体分子科学を語る」, 岡崎, 2025 年 10 月.

小杉貴洋,「データと計算でタンパク質をデザインする」, 未来工学セミナー , 相模原, 2025 年 6 月.

小杉貴洋,「タンパク質デザインの 現状と未来について考える」, 未来物質開拓セミナー , 相模原, 2025 年 6 月.

小杉貴洋,「計算によりタンパク質をデザインする？」, 第 478 回生物科学セミナー , 岡山, 2025 年 5 月.

T. KOSUGI, “Toward Rational Control of Concerted Protein Functions through Computational Protein Design,” The 12th Asian Biophysics Association (ABA) Symposium, Hong Kong (China), January 2026.

T. KOSUGI, “Control of protein complexes through computational protein design methods,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), “Polypeptide Folding and Assembly for the Materials Design and Therapeutic Applications,” Honolulu (USA), December 2025.

T. KOSUGI, “Toward rational control of cellular functions through customization of concerted protein functions,” SMART Symposium: 2025 Frontier in Computational Chemistry, Biophysics, and Biological Sciences, Shenzhen (China), October 2025.

T. KOSUGI, “Nature-inspired Computational Design Strategy for Rational Control of Protein Complexes,” 第27回iCeMS国際シンポジウム「Self-Assembly Science for Unlocking Life’s Secrets」, Kyoto, October 2025.

T. KOSUGI, “Protein Design: From Structure to Function—Unlocking Future Applications,” Tsukuba Conference 2025, Tsukuba, October 2025.

T. KOSUGI, “Control of concerted functions exerted by protein complexes using computational protein design,” Korea-Japan International Symposium on Protein Science, Himeji (Japan), June 2025.

T. KOSUGI, “Computational Protein Structure Prediction and Design,” UK-Japan FoS, London (UK), June 2025.

T. KOSUGI, “Control of concerted protein functions using computational protein design,” Protein Science and Engineering in the New Era, Taipei (Taiwan), April 2025.

T. KOSUGI, “Toward controlling energy conversion and signaling proteins using computational protein design,” IPR Seminar 2025 (International), Functions, structures and dynamics of energy conversion and signaling proteins—The latest research and future works from early and mid-career scientists—, Suita (Japan), April 2025.

B-6) 受賞，表彰

小杉貴洋, 第 26 回酵素応用シンポジウム研究奨励賞 (2025).

小杉貴洋, 分子科学研究奨励森野基金 (2025).

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）(2025–2026).

学会の組織委員等

第 63 回日本生物物理学会年会ミニシンポジウム「タンパク質デザインへの誘い」オーガナイザー (2025).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構研究開発領域に関する情報提供 (2025).

学会誌編集委員

生物物理学会誌編集委員 (2025–2026).

日本蛋白質科学会 蛋白質科学会アーカイブ編集委員 (2025–).

B-8) 大学での講義，客員

近畿大学薬学研究科, 非常勤講師,「大学院特別講義」, 2025 年 5 月.

総合研究大学院大学先端学術院,「構造生体分子科学」, 2025 年 12 月.

B-10) 競争的資金

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).

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–2025 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).

（公財）旭硝子財団化学・生命分野研究奨励,「タンパク質デザインと細胞生物学の融合による細胞内タンパク質機能の理解」, 小杉貴洋 (2025 年度–2026 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).

＊）2026 年 3 月 1 日金沢大学医薬保健研究域准教授

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）
鍋井　庸次（助教）
WU, Dongfang（特任研究員）
戸川　欣彦（特別訪問教授）
岸根　順一郎（特別訪問教授）
佐藤　琢哉（特別訪問教授）
加藤　雄介（特別訪問教授）
PERNADI, Niza Lian（インターンシップ）
後藤　拓（大学院生）
竹脇　由佳（大学院生）
楠本　恵子（大学院生）
原多　己暢（特別共同利用研究員）
鈴木　ひかり（特別共同利用研究員）
村田　了介（技術支援員）
石川　裕子（事務支援員）
深田　亮平（特命専門員（ERATO））
坂本　昌代（事務支援員（ERATO））

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)$_2$Cu(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の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が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)$_2$Cu[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

B. CHEN, K. HASHIMOTO, M. KIMATA, T. SASAKI, S. SEKI, H. M. YAMAMOTO and M. SUDA, “Manipulating Quantum Criticality in Light-Induced 2D Superconductivity,” *Commun. Mater.* **7(1)**, 32 (2026). DOI: 10.1038/s43246-025-01014-8

Y. NABEI, C. YANG, H. SUN, H. JONES, T. MAI, T. WANG, R. BODIN, B. PANDEY, Z. WANG, Y. XIONG, A. H. COMSTOCK, B. EWING, J. BINGEN, R. SUN, D. SMIRNOV, W. ZHANG, A. HOFFMANN, R. RAO, M. HU, Z. V. VARDENY, B. YAN, X. LI, J. ZHOU, J. LIU and D. SUN, “Orbital Seebeck Effect Induced by Chiral Phonons,” *Nat. Phys.* **22**, 245–251 (2026). DOI: 10.1038/s41567-025-03134-x

S. MIWA, T. YAMAMOTO, T. NAGATA, S. SAKAMOTO, K. KIMURA, M. SHIGA, W. GAO, H. M. YAMAMOTO, K. INOUE, T. TAKENOBU, T. NOZAKI and T. OHTO, “Spin Polarization Driven by Molecular Vibrations Leads to Enantioselectivity in Chiral Molecules,” *Sci. Adv.* **11(44)**, eadv5220 (2025). DOI: 10.1126/sciadv.adv5220

R. SUN, Y. NABEI, A. MCCONNELL, X. ZHANG, A. COMSTOCK, H. JONES, R. GYAWALI, Y. XIONG, Z. WANG, J. LIU, W. ZHANG and D. SUN, “Determination of Orbital Relaxation in Ti/Ni Heterostructure *via* Orbital Pumping,” *J. Appl. Phys.* **138(12)**, 123905 (2025). DOI: 10.1063/5.0292745

Z. XU, S. SAIEV, P. QIAN, Y. NABEI, Z. WANG, J. M. RINEHART, A. M. ÖSTERHOLM, A. L. JONES, J. H. LEE, C. HWANG, S. WANG, R. SUN, D. SHIN, S. JEON, K. E. ELANGOVAN, J. VURA-WEIS, V. COROPCEANU, J. RODRÍGUEZ-LÓPEZ, J. R. REYNOLDS, D. SUN, J. L. BRÉDAS and Y. DIAO, “Supramolecular Chirality Largely Modulates Chemical Doping of Conjugated Polymers,” *Nat. Commun.* **16(1)**, 8381 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-62915-3

R. GHANBARI, K. P. HARIKRISHNAN, K. PATEL, H. ZHOU, T. ZHOU, R. LIU, L. WU, A. KHANDELWAL, K. J. CRUST, S. HAZRA, J. CARROLL, C. J. G. MEYERS, J. WANG, S. PROSANDEEV, H. QIAO, Y. H. KIM, Y. NABEI, M. CHI, D. SUN, N. BALKE, M. HOLT, V. GOPALAN, J. E. SPANIER, D. A. MULLER, L. BELLAICHE, H. Y. HWANG and R. XU, “Strain-Induced Lead-Free Morphotropic Phase Boundary,” *Nat. Commun.* **16(1)**, 7766 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-63041-w

F. POP, N. MROWEH, P. AUBAN-SENZIER, G. L. J. A. RIKKEN, D. HIROBE, H. M. YAMAMOTO, A. FRĄCKOWIAK, I. OLEJNICZAK, S. PILLET, E. E. BENDEIF, P. ALEMANY, E. CANADELL and N. AVARVARI, “Chiral Metallic DM-EDT-TTF Radical Cation Salts: Anion Size-Dependent Structural and Electronic Transitions, Charge Ordering, and Chirality-Induced Spin Selectivity,” *J. Am. Chem. Soc.* **147(31)**, 27749–27767 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c06549

Y. DAIGO, Y. KAWASUGI, H. M. YAMAMOTO, R. KATO and N. TAJIMA, "Off-Diagonal Thermoelectric Effect and Its Gate Tuning in Molecular Conductor κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu[N(CN)$_2$]Cl," *Appl. Phys. Lett.* **126(26)**, 261901 (2025). DOI: 10.1063/5.0278441

T. SATO, H. GOTO and H. M. YAMAMOTO, "Sturdy Spin-Momentum Locking in a Chiral Organic Superconductor," *Phys. Rev. Res.* **7(2)**, 023056 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.7.023056

B-3) 総説，著書

H. M. YAMAMOTO, "Spin-Induced Chiral Selectivity and Its Possible Application to Asymmetric Synthesis," *Yuki Gosei Kagaku Kyokaishi/Journal of Synthetic Organic Chemistry*, **83(11)**, 1035–1040 (2025). DOI: 10.5059/yukigoseikyokaishi.83.1035

B-4) 招待講演

佐藤拓朗,「キラリティが駆動する有機強相関スピン物性」, 山田研究会「量子液晶概念を基盤とした新奇物性科学の若手学際研究」, 仙台, 2025年11月.

山本浩史,「CISS効果と時間反転対称性」, 第3回ATFコンファレンス, 沼津, 2025年11月.

佐藤拓朗,「構造キラリティと強相関量子物性」, X-TREME新興の学際的課題に向けた探究, 九州大学, 福岡, 2025年10月.

山本浩史,「Chirality and electron spin」, CEMS Colloquium, 理化学研究所, 和光, 2025年9月.

佐藤拓朗,「CISS効果と非線形応答」, キラル若手の会, 静岡大学, 静岡, 2025年9月.

佐藤拓朗,「キラルな有機強相関超伝導における巨大スピン軌道結合」, 第14回酸化物研究の新機軸に向けた学際討論会, 大阪大学, 吹田, 2025年9月.

山本浩史,「CISS効果の現状と 固体CISS効果から分かること」, 近畿大学応用化学科セミナー , 大阪, 2025年7月.

H. M. YAMAMOTO, "Materials' chirality and electrons' spins," Symposium on Molecular Chirality 2025, Nagoya, May 2025.

H. M. YAMAMOTO, "Chirality, Electron Spin, and CISS," The 2nd International Conference on Nano Energy and Technology (ICNEAT-2026), Shantou (China), March 2026.

H. M. YAMAMOTO, "Spin polarization created by chirality," International Workshop on Spins and Molecules, Sicily (Italy), January 2026.

T. SATO, "Giant nonreciprocal superconductivity induced by chirality," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2025), Honolulu, Hawaii (USA), December 2025.

H. M. YAMAMOTO, "Chirality Induced Spin Selectivity in an Chiral Conductors," VISTEC Seminar, Rayon (Thailand), December 2025.

H. M. YAMAMOTO, "Dynamical Chirality, Electron Spin, and CISS," Core-to-core Bordeaux, Bordeaux (France), November 2025.

H. M. YAMAMOTO, "Chirality-Induced Spin Selectivity in chiral solids," PIERS 2025 (PhotonIcs and Electromagnetics Research Symposium), Chiba, November 2025.

H. M. YAMAMOTO, "Spin Selectivity and Non-reciprocal Conductivity in Chiral Superconductors," The 9th Thailand International Nanotechnology Conference (NanoThailand 2025), Bangkok (Thailand), November 2025.

T. SATO, “Chirality: A platform for nontrivial spin-momentum locking in superconductors,” International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets (ISCOM 2025), Toyohashi (Japan), September 2025.

H. M. YAMAMOTO, “Molecular chirality, electron spin, and CISS,” Tornado online, online, September 2025.

H. M. YAMAMOTO, “True and False Chirality and CISS Effect,” Symposion on chiral molecules and organic radicals, Bucharest (Romania), July 2025.

H. M. YAMAMOTO, “Chiral Molecules and Solids for Spintronics,” 20th Asian Chemical Congress (20ACC), Bangkok (Thailand), June 2025.

T. SATO, “Gigantic nonreciprocal superconductivity induced by chirality,” EMERALD core-to-core workshop, Tianjin University, Tianjin (China), April 2025.

B-5) 特許出願

登録

ZL202080036002.X, “Chirality Detection Device, Chirality Detection Method, Separation Device, Separation Method, and Chiral Substance Device,” Y. TOGAWA, H. SHISHIDO and H. M. YAMAMOTO (University Public Corporation Osaka, National Institute of Natural Sciences), 2020年.（登録日 2025年 4月 25日）

特許第 7720582号,「スピン偏極電流を生成する導電性構造体，それを用いた電極及び方法」, 須田理行，山本浩史（自然科学研究機構）, 2021年.（登録日 2025年 7月 31日）

B-6) 受賞，表彰

Y. NABEI, Springer Nature Poster Prize at 16th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets (2025).

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 (2025–2027).

学会の組織委員等

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

出前授業「超伝導に関する講演と実験紹介」岡崎北高等高校 (2025).（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–).

International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets (ISCOM), 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–2028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).

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).

科学技術振興機構ERATO研究,「山本量子キラル変換プロジェクト」, 山本浩史 (2025年度–2030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–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(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).

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

斉藤　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）
松田　定治（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：動的乱れが導く遅延ダイナミクスとイオン輸送
c) 凝縮系ダイナミクスの理論研究：非平衡揺らぎが駆動する特異的拡散現象

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。さらに，LHCII 三量体の量子ダイナミクスを解析し，励起エネルギーの移動がどのような経路をどのような時間スケールで起こっているかが明らかになってきた。
b) 凝縮系ダイナミクスに関する研究として，凝縮系物理学における長年の課題の一つである「温度低下のダイナミクスの遅延化」に対し，時間に依存する反応速度に基づく理論開発を進めてきた。とくに，「動的乱れ」の概念に基づき，過冷却液体における運動の遅延化に関する分子機構の解明を進めている。また，水のように，運動の遅延化の温度依存性が超アレニウス型からアレニウス型に変化する「fragile-strong 転移」も知られているおり，その起源の解明にも取り組んでいる。さらに，我々の理論と機械学習分子動力学を組み合わせ，無機ガラス固体電解質におけるイオン伝導性の解析を海外の共同研究者と行った。その結果，イオン伝導率の非単調な組成依存性の実験結果を再現するとともに，これまで予想されていたものとは異なる機構で Li^+ イオンのイオン伝導が起こっていることも明らかになってきた。
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。重水の発見以来ほぼ 1 世紀が経つが，水の同位体はほとんど同一の物理化学的特性をもつため，その分離は依然として非常に困難なままである。最近，動的なナノポアを持つソフト多孔性結晶では，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，その分離機構の解明については全く進んでいない。そこで，我々は揺らぐエネルギー地形上での拡散現象を解析する理論モデルを開発し，エネルギー揺らぎと障壁越えダイナミクスの共鳴により，平衡系における質量に基づく拡散の違いを大きく上回る分離性能が実現されることを示した。我々の理論枠組みは，実験結果を再現するにとどまらず，その背後にある微視的起源の物理機構を解明し，選択的分離の理解の深化およびその予測を可能にした。その結果，本研究により，材料の固有の構造ゆらぎを調整するか外部刺激を加えることで輸送特性を設計できる動的多孔性材料の新たな設計原理を提案した。この研究と並行して，液体的およびガラス的な環境の間を切り替える二状態系における粒子拡散を記述する理論モデルを開発した。この理論モデルにより，不均一環境においては，均一な環境よりも拡散が増大することを理論・計算により示すとともに，不均一な媒体における粒子輸送の統一的理解に資する簡潔な枠組みを示した。

B-1) 学術論文

A. KONDO, K. J. FUJIMOTO, S.-I. KODA, S. SAITO and T. YANAI, “Osimertinib’s Proton-Catalyzed, Pseudoconcerted EGFR Inhibition Guides Next-Generation Inhibitor Design,” *J. Chem. Inf. Model.* **66(2)**, 1203–1213 (2026). DOI: 10.1021/acs.jcim.5c02787

S. KUMAR, Z. TANG and S. SAITO, “Dynamic Slowdown and Spatial Correlations in Viscous Silica Melt: Perspectives from Dynamic Disorder,” *J. Chem. Phys.* **164(2)**, 024503 (2026). DOI: 10.1063/5.0305680

F. PERAKIS, T. KAWASAKI and S. SAITO, “Enhanced Particle Diffusion in Fluctuating Binary Environments,” *Phys. Rev. Res.* **8(1)**, L012015 (2026). DOI: 10.1103/1rnr-11yb

T. KATO and S. SAITO, “Proof of the Density Variation Equation Conjectured for Exact Density Functional Theory,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **94(11)**, 115002 (2025). DOI: 10.7566/JPSJ.94.115002

S. SENDO, K. J. FUJIMOTO, T. MIYASHITA, S. SAITO and T. YANAI, “Assessment of the Time Correlation Function-Based Approach for Absorption Spectrum Calculations Using Time-Dependent Density Functional Theory and Molecular Dynamics Simulations,” *J. Chem. Phys.* **163(13)**, 134116 (2025). DOI: 10.1063/5.0281605

B. KANG, J. YU, S. SAITO, J. JANG and B. J. SUNG, “Non-Monotonic Ion Conductivity in Lithium-Aluminum-Chloride Glass Solid-State Electrolytes Explained by Cascading Hopping,” *Adv. Sci.* **12(35)**, e09205 (2025). DOI: 10.1002/advs.202509205

G. R. KHAN, S. SAITO and S. DASCHAKRABORTY, “Faster Diffusion of Water along Carbon Nanotubes near the Wall,” *J. Phys. Chem. B* **129(26)**, 6561–6573 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcb.5c02233

T. KATO and S. SAITO, “A Rigorous Expression of the Hohenberg–Kohn Universal Energy Functional Based on the Analysis of the Spatial Scaling Property of the Kohn–Sham Potential,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **94(7)**, 074303 (2025). DOI: 10.7566/JPSJ.94.074303

Y. FURUIKE, Y. ONOUE, S. SAITO, T. MORI and S. AKIYAMA, “The Priming Phosphorylation of KaiC Is Activated by the Release of Its Autokinase Autoinhibition,” *PNAS Nexus* **4(5)**, pgaf136 (2025). DOI: 10.1093/pnasnexus/pgaf136

S.-I. KODA and S. SAITO, “Correlated Flat-Bottom Elastic Network Model for Improved Bond Rearrangement in Reaction Paths,” *J. Chem. Theory Comput.* **21(7)**, 3513–3522 (2025). DOI: 10.1021/acs.jctc.4c01549

B-3) 総説，著書

甲田信一,「変分的反応経路最適化法に基づく高効率の遷移状態探索および尤もらしい反応経路生成」, アンサンブル , **27(1)**, 27–34 (2025).

B-4) 招待講演

斉藤真司,「揺らぎが引き起こすダイナミクス」, テラバイオワークショップ 2025, 京都府木津川市 , 2025 年 9 月 .

S. SAITO, “Fluctuation-Driven Emergent Dynamics in Condensed-Phases: Thermodynamic Anomalies and Dynamic Slowdown,” Kyoto (Japan), March 2026.

S. SAITO, “Fluctuation-Driven Emergent Dynamics in Condensed-Phases: Thermodynamic Anomalies and Dynamic Slowdown,” MCBR2025, Hyderabad 2(India), December 2025.

S.-I. KODA, “Alternative tools for double-ended transition state search,” Telluride Science Workshop 2025 “Computational Materials Chemistry,” Telluride, Colorado (USA), July 2025.

S. SAITO, “Unveiling molecular mechanisms of dynamic slowdown in supercooled liquids,” 2025 GSRC symposium on Chemical dynamics in materials and living systems, Seoul (Korea), May 2025.

S. SAITO, “Unveiling the Role of Dynamic Disorder in the Slowing Down of Supercooled Water Dynamics,” APATCC11, Kobe (Japan), April 2025.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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 (2022–).

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-10) 競争的資金

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

科研費挑戦的研究 (開拓),「凝縮系反応・構造動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」, 斉藤真司 (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 –2025 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」, 斉藤真司 (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ついては，高等植物のLHCIIにおける励起エネルギー移動（EET）の分子機構の解明を進める。EETの分子論的解明には，LHCII系の個々のChl分子の電子状態とダイナミクスを適切に記述することが不可欠である。我々は，これらの物理量を適切に記述するための方法論を開発し，膜中に存在するLHCIIにおけるEET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EETを解析し，LHCIIにおける高速なEETダイナミクスを分子レベルで理解することを目指す。とくに，LHCIIにおけるEETとこれまでに研究を行ってきたFMOタンパク質のEETを比較し，天然光合成系におけるEET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EETの普遍性と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ありふれた現象に思えるが，その分子論的理解は依然として十分ではない。そこで今後，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，より体系的な理解を目指す。

また，拡散過程に関して，簡便な理論モデルに基づき，構造揺らぎが引き起こす非平衡揺らぎにより，静的状態では見られない同位体間での顕著な拡散特性の違いを明らかにした。今後は，この理論モデルの分子論的・定量的な検討を進めるとともに，さらなる拡散特性・分離機能の開拓に向けた理論的基盤の構築を図る。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こなかった新たな視点からのアプローチとして，今後は，イオンチャネルの高速イオン透過がどのような機構によって実現されているのかなどの解明をも目指す。

計算分子科学研究部門

江原　正博（教授）（2008 年 6 月 1 日着任）

白男川　貴史（助教）
ZHAO, Pei（特任助教）
WANG, Yuelin（特任助教）
ZHAO, Yaoxiao（特任研究員）
杉本　縁（事務支援員（派遣））

A-1) 専門領域：量子化学，理論化学，触媒化学，光物性科学

A-2) 研究課題：

a) 銀一原子導入による高核数銀ナノクラスターの発光性能の向上
b) 銀錯体の修飾による銀ナノクラスターの円偏光発光活性の増幅
c) ジハロベンゼンを用いた還元的アリール化による単層カーボンナノチューブの近赤外光発光制御
d) 六方晶窒化ホウ素層におけるモアレポテンシャルの原子スケール観察と理論解析
e) 新規な螺旋状金属クリプタンドによる脂肪族側鎖を有するアミノ酸誘導体のサイズ選択的認識
f) サイズ選択型白金サブナノクラスター触媒：Ni および Co 合金化による酸素還元反応の活性向上

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 金属ナノクラスターは光物性や触媒活性で注目されるが，発光機能はクラスター構造と相関しており，室温での量子収率が低いことが実用化の観点から課題となっている。これまで様々な設計が試みられてきたが，高核数クラスターでは未だ高い発光量子収率は実現していない。本研究では，高核数銀ナノクラスター（Ag_{78}，Ag_{79}）において，銀原子 1 原子を導入し，輻射・無輻射減衰経路の両方を制御することで，室温発光量子収率を 77 倍向上させることに成功した。DFT 計算と理論解析によって，導入した銀 1 原子が電子分布を変化させ，発光特性に影響を与えること，発光機構を改変することを明らかにした。本研究は，高核数銀ナノ粒子の構造－特性相関に関する有用な知見を与え，金属ナノクラスターの実用化に向けた発光効率向上のための戦略を提供するものである。
b) 円偏光発光（CPL）は，励起状態における分子系のキラル光学特性を解析する強力な手法である。本研究では，CPL 測定により銀ナノクラスターの励起状態キラル光学特性の変化を明らかにした。最近，負に帯電した Ag_{29} ナノクラスターの外部ケージにカチオン性銀 (I) 錯体を修飾することで，三重項励起状態が安定化され，近赤外領域の発光強度が増強されることを報告した。本研究では，CPL 活性の非対称性因子（$|g_{lum}|$ 値）が 1×10^{-3} 未満から 6×10^{-3} へと増加し，Ag_{29} ナノクラスターの CPL 特性が向上することを実証した。また，蛍光寿命測定と組み合わせた低温 CPL 測定によって，CPL 活性の変化を計測した。理論解析によって，カチオン性銀 (I) 錯体の修飾によって，銀ナノクラスター内の電荷移動が誘起され，発光波長が低エネルギー側にシフトし，発光強度が増強することを明らかにした。
c) 単層カーボンナノチューブ（SWCNT）の化学修飾は，近赤外発光を制御するのに有効である。これまで系統的な研究を実施してきたが，本研究では，ナフタレンナトリウム，ハロゲン化ベンゼンおよびジハロゲン化ベンゼン誘導体を用いて SWCNT を還元的アリール化することで，その発光特性を制御した。ヨードベンゼンで官能基化された (6,5)

SWCNT は，1100 nm および 1230 nm に２つの新しい発光ピークを示した。DFT 計算を用いて，アリール化 SWCNT のモデル化合物の相対安定性および遷移エネルギーを計算し，結合配置の相対安定性は付加基によって異なることを示し，遷移エネルギーを結合配置によって制御できることを明らかにした。さらに，単離した (6,5) SWCNT に熱処理を行い，透過型電子顕微鏡を用いて，SWCNT 上の化学修飾を初めて観察することに成功した。

d) モアレ超格子は，ファンデルワールス層間のねじれ角や層の相対配置によって電子状態を調整できる新たな二次元機能性材料である。モアレ超格子の特性は，層間結合によって誘起される静電ポテンシャルであるモアレポテンシャルと密接に関連している。本研究では，特別な化学的剥離技術を用いて，特定のねじれを有する六方晶窒化ホウ素（hBN）ナノ層を得る方法を開発した。本方法で作製した hBN ナノ層は原子レベルで清浄かつ歪みがないため，モアレポテンシャルの調査に理想的な単結晶層を与える。ねじれ hBN ナノ層に対する高分解能透過型電子顕微鏡測定（HRTEM）により，フーリエ空間におけるモアレ回折スポットを観測し，逆高速フーリエ変換によりモアレポテンシャルを構築した。DFT 計算によって，局所的な層間原子重なりが，モアレポテンシャルの周期性と分布を決定する上で重要な役割を果たすことを明らかにした。

e) 新しいトリス型メタロクリプタンド LNi_3 を設計・合成した。結晶構造解析により，メソ型ではなく右巻き（P）と左巻き（M）のらせん型エナンチオマー対が存在することが明らかになり，この構造と安定性は DFT 計算でも支持された。この LNi_3 ホストは，アミノ酸誘導体を認識でき，脂肪族側鎖を有するアミノ酸に対して選択性を示した。その形状保持性によりサイズに基づく識別が可能であり，^{1}H NMR 測定によって実証された。一部のゲスト分子の認識は CD シグナルが生じ，LNi_3 の P/M らせん反転平衡が偏っていることが示唆された。３つの脂肪族側鎖ゲスト（Val，Ile，Leu）は M 型優位なシフトを示し，２つのπ含有側鎖ゲスト（Arg，Trp）では P 型が優位であった。理論計算によって，複数の非共有結合的相互作用が作用して，各々の包接化合物の M 型／ P 型の安定性を決めていることを明らかにし，CD スペクトルの詳細な帰属を行った。この金属包接体 LNi_3 は，アルキル側鎖を有する低極性アミノ酸の認識における識別限界を克服し，分子認識，生化学的センシング，エナンチオマーセンシングにおける応用が期待される。

f) プロトン交換膜燃料電池（PEMRC）は，低い作動温度とカーボンニュートラルな性質から，持続可能なエネルギー源として有望視されている。一方，酸素還元反応（ORR）用の従来の白金（Pt）系触媒の高コストと活性が課題である。本研究では，サイズ・組成選択的堆積法で調製した，ニッケル（Ni）またはコバルト（Co）と合金化した原子レベルで精密な Pt 系サブナノクラスターの ORR 活性を，構造に基づく観点から調査した。炭素担持合金サブナノクラスターの系列（Pt_nNi_m：n = 3–7，Pt_nCo_m：n = 4–8）について ORR 質量活性を評価した結果，Pt_5Ni_1，Pt_5Co_1，Pt_6Ni_2，Pt_6Co_2 は市販標準 Pt/C の 2.1 ～ 2.5 倍の活性を示した。EXAFS と DFT 計算を用いた構造解析により，合金化サブ NC 内部での電荷分布を明らかにした。炭素担体への結合は２つの Pt アンカー原子でなされ，Ni および Co 原子はアンカー化されていないことを示した。これらの知見は，原子性制御された合金サブナノクラスターが，活性向上と調整可能な電子構造を備えた次世代 PEMFC 触媒のための合理的な設計基盤を提供することを実証している。

B-1) 学術論文

Z. LEI, P. ZHAO, S. KIKKAWA, X.-L. PEI, W.-T. LIU, H. UBE, S. YAMAZOE, M. EHARA and M. SHIONOYA, “Hypercarbon-Centered Gold(I)-Copper(I) Clusters Exhibiting a Dissolution/Crystallization-Induced Photoluminochromism,” *Chem. Eur. J.* **32(11)**, e00011 (2026). DOI: 10.1002/chem.202600011

T. NAKAJIMA, S. TASHIRO, M. EHARA and M. SHIONOYA, "Entropic Control of the Helicity Inversion Rates of Twisted Metallomacrocycles by Reversible and Regioselective Deprotonation," *J. Am. Chem. Soc.* **148(5)**, 5338–5346 (2026). DOI: 10.1021/jacs.5c18601

A. AKIYAMA, S. HOSSAIN, S. BISWAS, T. SHIRAOGAWA, P. ZHAO, D. ARIMA, T. KAWAWAKI, Y. NIIHORI, M. MITSUI, M. EHARA and Y. NEGISHI, "Ligand-Driven Structural Modulation and Enhanced Photoluminescence in High-Nuclearity Ag_{56} Nanoclusters: Special Collection: Functional Metal Clusters," *Aggregate* **7(2)**, e70270 (2026). DOI: 10.1002/agt2.70270

Y. MAEDA, A. SUWA, K. KAWADA, P. ZHAO, M. EHARA, Y. SUZUKI, Y. IGUCHI, Y. TAKI, Y. KONNO, M. YAMADA, H. KASAI, K. KIMOTO and K. HARANO, "Role of Second Halogen Atoms of Dihalobenzene in Controlling the Photoluminescence Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes by Reductive Arylation," *ACS Nanosci. Au* **6(2)**, 270–280 (2026). DOI: 10.1021/acsnanoscienceau.5c00152

Y. WANG and M. EHARA, "Enhanced Photocatalytic Activity of NH_3-SCR on Sulfur-Doped TiO_2 (101) Surface," *ChemCatChem* **18(2)**, e01345 (2025). DOI: 10.1002/cctc.202501345

W. W. WANG, X. M. MA, X. ZHAO and M. EHARA, "Mechanistic Insights into Regioselective Functionalization of Metallofullerene La@C_{82} under Synergistic External and Built-in Electric Fields," *J. Org. Chem.* **90(48)**, 17121–17127 (2025). DOI: 10.1021/acs.joc.5c02359

B. ZHOU, P. ZHAO, J. GUO, S. HU, X. GUO, J. LIU and C. LI, "Solvent-Additive Cascade Engineering Enables Single-Oriented Perovskite Films with Facet-Driven Performance and Stability," *Energy Environ. Sci.* **18(22)**, 9865–9876 (2025). DOI: 10.1039/D5EE04415D

J. F. YAO, P. ZHAO, F. HU, Y. N. YANG, Z. A. NAN, Q. Q. HUANG, J. Y. LI, J. CHEN, Z. LEI, Q. H. WEI, M. EHARA and Q. M. WANG, "α-Hydroxyalkynyl-Protected Copper(I) Acetelyenediide Nanoclusters with Anion-Dependent Photoluminescence," *Nanoscale* **17(43)**, 25289–25296 (2025). DOI: 10.1039/D5NR03301B

A. AKIYAMA, S. HOSSAIN, S. BISWAS, T. SHIRAOGAWA, P. ZHAO, M. NAKAMOTO, D. OGATA, T. KAWAWAKI, Y. NIIHORI, J. YUASA, M. EHARA and Y. NEGISHI, "Triggering Photoluminescence in High-Nuclear Silver Nanoclusters *via* Extra Silver Atom Incorporation," *J. Am. Chem. Soc.* **147(41)**, 37231–37241 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c10289

W. ISHII, T. SHIRAOGAWA, M. EHARA, H. SOTOME, H. MIYASAKA, T. KAWAI and T. NAKASHIMA, "Evolution of Circularly Polarized Luminescence in Atomically Precise Silver Nanoclusters with Intrinsic Chirality," *Angew. Chem., Int. Ed.* **64(45)**, e202513118 (2025). DOI: 10.1002/anie.202513118

A. OHNUMA, P. ZHAO, K. MATSUNAGA, K. TAKAHASHI, T. MASUBUCHI, T. INOUE, Y. WANG, M. EHARA, N. ICHIKUNI and A. NAKAJIMA, "Size-Selected Platinum Subnanocluster Catalysts Alloyed with Nickel (Pt_nNi_m $n = 3–7$, $m = 1–3$) or Cobalt (Pt_nCo_m $n = 4–6$, $m = 1–2$) for the Oxygen Reduction Reaction," *ACS Appl. Nano Mater.* **8(34)**, 16748–16758 (2025). DOI: 10.1021/acsanm.5c02782

J. WANG, S. HU, Z. CHEN, Z. YUAN, P. ZHAO, A. DASGUPTA, F. YANG, J. YAO, M. A. TRUONG, G. KUSCH, E. Y. H. HUNG, N. R. M. SCHIPPER, L. BELLINI, G. J. W. AALBERS, Z. LIU, R. A. OLIVER, A. WAKAMIYA, R. A. J. JANSSEN and H. J. SNAITH, "Exposing Binding-Favourable Facets of Perovskites for Tandem Solar Cells," *Energy Environ. Sci.* **18(15)**, 7680–7694 (2025). DOI: 10.1039/D5EE02462E

T. SHIRAOGAWA, S. L. KRUG, M. EHARA and O. A. VON LILIENFELD, "Antisymmetry Rules of Response Properties in Certain Chemical Spaces," *J. Chem. Phys.* **163(2)**, 024133 (2025). DOI: 10.1063/5.0271350

S. FIRDAUSIAH, R. IDE, M. EHARA, P. ZHAO, Y. SAKATA and S. AKINE, "Novel Helical Metallocryptand for Size-Selective Recognition of Amino Acid Derivatives with Aliphatic Side Chains," *Chem. –Eur. J.* **31(36)**, e202501277 (2025). DOI: 10.1002/chem.202501277

R. MISHIMA, T. NAGAI, H. SEGAWA, M. EHARA and T. UCHINO, "Atomic-Scale Observation of Moiré Potential in Twisted Hexagonal Boron Nitride Layers by Electron Microscopy," *J. Phys. Chem. C* **129(16)**, 7813–7822 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c00804

B. ZHOU, P. ZHAO, J. GUO, S. HU, X. GUO, J. LIU and C. LI, "Unveiling the Importance of Nondominant Facets in (111)-Dominated Perovskite Films," *ACS Appl. Mater. Interfaces* **17(15)**, 22715–22726 (2025). DOI: 10.1021/acsami.5c01238

Y. HAN, H. ZHENG, J. HE, M. LI, M. EHARA and X. ZHAO, "Stabilities Referring to the f Electron Effect in Erbium-Based Endohedral Metallofullerenes: Revisiting $Er_2@C_{80}$ and the Missing $Er_2C_2@C_{78}$," *Inorg. Chem.* **64(16)**, 8302–8312 (2025). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.5c00661

Y. HAN, M. LI, M. EHARA and X. ZHAO, "Unveiling Fullerene Formation and Interconversion through Molecular Dynamics Simulations with Deep Neural Network Potentials," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **27(18)**, 9767–9773 (2025). DOI: 10.1039/D5CP00837A

S. HU, X. SUN, W. LIU, L. GREGORI, P. ZHAO, J. PASCUAL, A. DALLMANN, A. DASGUPTA, F. YANG, G. LI, M. ALDAMASY, S.-H. TURREN-CRUZ, M. A. FLATKEN, S. FU, Y. IWASAKI, R. MURDEY, A. HOELL, S. SCHORR, S. ALBRECHT, S. YANG, A. ABATE, A. WAKAMIYA, F. DE ANGELIS, M. LI and H. J. SNAITH, "Accessing Metal-Containing Species in Tin–Lead Perovskite Precursor Solutions *via* Molecular Strategies Guided by the Hard–Soft Acid–Base Principle," *Angew. Chem., Int. Ed.* **64(41)**, e202514010 (2025). DOI: 10.1002/anie.2025140100

B-4) 招待講演（* 基調講演）

江原正博,「金属ナノクラスターの光物性と触媒機能：理論計算からのアプローチ」, ナノ学会第 23 回大会, 東京, 2025 年 5 月.*

M. EHARA, "Interaction between Orbital Angular Momentum Light and Molecules using Real-time Kohn-Sham DFT–Maxwell's Equations Approach," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), "New Era of Chiral Light-Matter Interaction Effects [PHYS016]," Honolulu, Hawaii (USA), December 2025.

M. EHARA, "From PCM-SAC-CI to Inverse Design Approach," Molecular Properties & Solvation: Celebrating the Career of Roberto Cammi, Pisa (Italy), September 2025.

M. EHARA, "Theoretical Chemistry for Electronic Resonance States of Molecules," Frontiers and Advances in Chemistry: Theory & Synthesis (FACTS2025), New Delhi (India), August 2025.

M. EHARA, "Photofunctional Metal Clusters and Heterogenous Catalysts: Collaborations with Experiment," 11th Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemistry, Kobe (Japan), April 2025.

T. SHIRAOGAWA, "Antisymmetry rules of response properties in certain chemical spaces," The 13th World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2025), Oslo (Norway), June 2025.

T. SHIRAOGAWA, "Antisymmetry Rules for Relationships of Material Properties in Chemical Compound Space," The 11th Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC-11), Kobe (Japan), April 2025.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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–).

量子化学研究協会理事 (2006–2026).

理論化学会幹事選出委員 (2023–2025).

学会の組織委員等

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

American Chemical Society ACS Fall 2025 Digital Meeting Global Virtual Symposia (GVS), Development of Theoretical Methods, Algorithms and Applications to Relevant Chemical Problems, Symposium Chair (2024–2025).

The 15th International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics, Local Organization Committee (2025–2026).

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計算材料学センター共同利用委員会および採択専門委員会委員 (2021–2027).

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 (2025).（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).

量子化学スクール 世話人 (2023–).（白男川貴史）

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,「基礎物理化学 I」, 2025 年 7 月 .

総合研究大学院大学先端学術院,「基礎物理化学 I」, 2025 年 7 月 .（白男川貴史）

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–2025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」（代表者；塩谷光彦), 江原正博（共同研究者) (2022年度–2027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：CO_2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）
BAMRUNG, Phonphiphat（インターンシップ）
TRUONG, Linh Hoai（インターンシップ）
森　丈（大学院生）
鶴間　稜平（大学院生）
川口　律子（事務支援員）

A-1) 専門領域：理論生物物理学，理論化学物理学

A-2) 研究課題：

a) 流れによるタンパク質凝集促進メカニズムの解明
b) 英国型アミロイドベータ変異体の凝集促進機構の解明
c) カフェインによるタウタンパク質凝集阻害機構の解明
d) エネルギー散逸系におけるシンプレクティック数値解法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 生体内で血液やリンパ液などの流れがあるとタンパク質の凝集が促進される。このようにして生成されたタンパク質凝集体はアルツハイマー病などの病気の原因となる。しかし，流れによるタンパク質凝集促進機構はこれまで分かっていなかった。この問題を解決するため，我々は一昨年度，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。昨年度はこの手法を用いてアミロイド β(16-22) ペプチドの凝集過程のシミュレーションを行い，流れがある場合には流れがない場合よりもペプチドの凝集が促進されることを示した。これは実験と一致する結果である。さらにその理由を以下のように解明した。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早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載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。しかし，これまで仮説として「流れにより分子が変形するからではないか？」あるいは「流れにより分子の向きがそろうかからではないか？」という考えも提唱されていた。今年度，我々は慣性モーメントが流れにより変化しないことから流れによる変形はほとんどないことを見出した。また, 分子の配向も計算し, 向きはそろわず, 単に回転しているだけであることも見出した。結果, これらの仮説を否定し，昨年度我々が発見した機構が正しいことを改めて確認した。
b) アルツハイマー病はアミロイド β ペプチドが凝集し，オリゴマーやアミロイド線維を形成，沈着することが原因で発症する。Aβ うち N 末端付近のアミノ酸が置換された一部の変異体は凝集速度が速く，若年性アルツハイマー病を引き起こすことが知られている。しかし, その凝集加速機構はまだ分かっていない。そこで, 本研究では若年性アルツハイマー病を引き起こす変異体のうち英国型変異体（H6R）についてその単量体構造を調べた。我々がこれまでに開発してきた効率的に構造サンプリングできる手法であるレプリカ置換分子動力学法を用いた。その結果分子内 β シート構造の安定性が英国型では野生型よりも高いことを発見し，その理由も解明した。これまでの我々の研究により分子内 β シート構造が分子間 β シート構造の形成を促進することが分かっている。このため，英国型変異体では分子内 β シート構造の安定性が高まることにより分子間 β シート構造が形成されやすくなり，その結果，凝集性が高まると考えられる。

c) アルツハイマー病の原因タンパク質として，アミロイドβとともに知られているのがタウタンパク質である。アミロイドβが比較的早期に凝集するのに対し，タウタンパク質はアミロイドβが凝集した後に凝集する。タウタンパク質の凝集はカフェインにより阻害されるという実験結果が報告されているが，そのメカニズムは分かっていなかった。そこで，我々はタウタンパク質のアミロイド線維の周辺にカフェイン分子を加えた分子動力学シミュレーションを実行した。その結果，カフェインは既に凝集したタウタンパク質の分子間βシート構造を壊すことはないものの，アミロイド線維の成長末端に多く付着し，タウタンパク質がそれ以上伸長するのを阻害している様子が観察された。この研究により，アルツハイマー病の原因物質の形成をカフェインが阻害するメカニズムを明らかにした。

d) 生体分子系は原子，分子レベルで見れば全エネルギーの保存する保存系である。保存系のシミュレーションではハミルトニアンが存在するので，シンプレクティック数値積分法が存在しうる。シンプレクティック数値積分法に基づくシミュレーションでは影のハミルトニアンが存在するので，長時間数値積分を行ってもハミルトニアンはよく保存する。このため保存系のシミュレーションではよく用いられている。しかし，よりマクロな視点に立ち，粗視化したシミュレーションを行う場合には，各粒子の持つエネルギーは溶媒に吸収され，全エネルギーは保存しない。このようなエネルギー散逸系でのシンプレクティック解法はこれまで存在していなかった。しかし，積分因子を適切に選び，その積分因子がかかった運動方程式を与えるラグランジアンならば存在する。さらに，ルジャンドル変換が可能であれば，このラグランジアンに対応するハミルトニアンも存在する。このハミルトニアンを用いることで，散逸系においてもシンプレクティック解法を導けることを初めて示した。その一例として，減衰振動を取り上げ，そのシンプレクティック解法を導出した。この手法を用いると影のハミルトニアンが存在し，長時間数値積分を行ってもハミルトニアンはよく保存する。本研究で得た知見をもとに今後，より一般的な非保存系に対するシンプレクティック数値積分法の開発が期待される。

B-1) 学術論文

A. I. FARAH, S. G. ITOH and H. OKUMURA, “Molecular Dynamics Simulations of Amyloid-β(29–42) Aggregation in Bulk Water and at the Air–Water Interface,” *Biophys. Physicobiol.* **22(4)**, e220033 (2025). DOI: 10.2142/biophysico.bppb-v22.0033

N. A. SULONG, H. OKUMURA, S. G. ITOH, C. F. CHEE, M. R. JOHAN and V. S. LEE, “Computational Analysis and Molecular Dynamics Simulation of Metformin Derivatives as Potential α-Glucosidase Inhibitors for Type 2 Diabetes,” *Results Chem.* **18**, 102905 (2025). DOI: 10.1016/j.rechem.2025.102905

T. SAITO, T. ISHIYAMA, M. SAKONO, S. G. ITOH and H. OKUMURA, “Oligomerization Mechanism of Amyloid-β Peptides at Hydrophobic Interfaces Revealed by Molecular Dynamics Simulations,” *J. Phys. Chem. B* **129(27)**, 6794–6804 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcb.5c01837

H. X. SUZUKI, H. OKUMURA and S. G. ITOH, “Why Do Histone Monomethylation and Dimethylation Cause a Significant Difference in Binding to LEDGF?” *J. Chem. Phys.* **162(18)**, 185102 (2025). DOI: 10.1063/5.0259337

B-3) 総説，著書

小山宏史，伊藤篤史，奥村久士，藤森俊彦,「多細胞シミュレーションと細胞間のペアポテンシャルの推定」, アンサンブル, **27(2)**, 138–148 (2025).

B-4) 招待講演

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulation of amyloid-β aggregation under equilibrium and nonequilibrium conditions,” The 63rd Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan Symposium “Exploring the reality of biological clusters through information science and advanced imaging,” Nara, 2025年9月.

奥村久士,「Computational physics of disease-related protein aggregates」, 日本物理学会第 80 回年次大会計算物理領域シンポジウム , 東広島市 , 2025 年 9 月 .

奥村久士,「各種統計アンサンブルの生成法」, 第 19 回分子シミュレーションスクール―基礎から応用まで―, 岡崎市（ハイブリッド開催）, 2025 年 9 月 .

奥村久士,「Structural Dynamics of Biological Systems Observed by Molecular Dynamics Simulation: Formation of Amyloid-β Aggregates and Their Destruction by Infrared Laser」, 第 21 回 AMO 討論会「生体系の超高速過程と構造ダイナミクス」, 岡崎市 , 2025 年 6 月 .

H. OKUMURA, “Protein Aggregation Observed by Molecular Dynamics Simulation,” Pure and Applied Chemistry International Conference 2026 (PACCON2026), Phitsanulok (Thailand), February 2026.

H. OKUMURA, “Molecular Dynamics Simulation of Protein Aggregates,” Conference on Modeling Chemical and Biological (Re)Activity 2025 (MCBR2025), Hyderabad (India), December 2025.

H. OKUMURA, “Molecular Dynamics of Amyloid-β Aggregation: Insights into Alzheimer’s Pathogenesis,” Frontier Bioorganization Forum 2025, Okazaki (Japan), November 2025.

H. OKUMURA, “Exploring Alzheimer’s Mechanisms via Molecular Dynamics,” 8th International Conference on Computation for Science and Technology, Jakarta (Indonesia), October 2025.

H. OKUMURA, “Mechanism of Protein Aggregation Revealed by Molecular Dynamics Simulation,” The 28th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 28), Pathum Thani (Thailand), July 2025.

H. OKUMURA, “Molecular Dynamics Simulation of Protein Aggregation,” 20th Asian Chemical Congress, Bangkok (Thailand), June 2025.

B-6) 受賞，表彰

奥村久士, 日本生物物理学会第 11 回 *Biophysics and Physicobiology* Editors’ Choice Award (2025).

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–).

第 39 回分子シミュレーション討論会学生優秀発表賞審査員 (2025).

分子科学討論会 2025「生体関連分子」分野優秀講演賞選考委員 (2025).

第 63 回日本生物物理学会年会学生発表賞審査員 (2025).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

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 (2024–2026).

その他

分子動力学シミュレーションの普及を目的として，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。この動画は公開から約 3年 3 カ月で視聴回数は約 1万回を超えている。全国の学生や若手研究者に広く利用され，分子動力学教育の発展と人材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– .

名古屋市立大学大学院薬学研究科，創薬生命科学特別講義「疾患関連生体分子の分子動力学シミュレーション／Molecular dynamics simulation of disease-related biomolecules」, 2025年 4月.

名古屋大学, GTR 次世代講義「分子動力学シミュレーション 入門と体験」, 2025年 7月.

中京大学, 非常勤講師, 2025年 4月–2026年 3月.（伊藤　暁）

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) 若年性アルツハイマー病を引き起こすアミロイドβ変異体としての英国型変異体（H6R）とともに知られているのが鳥取型変異体（D7N）である。これらの変異体はともに凝集速度が野生型より早いだけでなく，分子構造は互いに異なることも知られている。英国型変異体の凝集体は分子間β シート構造を多く形成する一方，鳥取型変異体の凝集体はあまり分子間β シート構造を形成しない。しかし，構造が違なる理由は分かっていない。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) アミロイドβ（Aβ）ペプチドは神経細胞の表面で凝集し，神経細胞を破壊する。最近の研究でAβ ペプチドの凝集のしやすさは細胞表面の曲率にも依存することが分かってきた。曲率半径が小さいほどAβ ペプチドが凝集しやすい。しかし，その理由はまだ明らかになっていない。そこで，非平衡分子動力学シミュレーションにより曲率の大きい膜モデルを作り，その上にAβ ペプチドを配置した分子動力学シミュレーションを現在行っている。同様に平らな脂質二重膜上でのAβ ペプチドのシミュレーションも行っている。今後，膜の相互作用によるAβ ペプチドの構造変化を解析し，膜の曲率がAβ ペプチドの凝集しやすさに影響を与える機構を解明したい。

c) 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，これまでに我々は 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。

d) タンパク質など多くの自由エネルギー極小状態を持つ系では，自由エネルギー障壁を乗り越え，多くの構造を効率的に探索するためにレプリカ交換法がよく用いられている。我々はこの方法よりもより効率的な構造探索を可能とするレプリカ置換法を開発した。この方法ではメトロポリス法の代わりに諏訪・藤堂法を用いて３つ以上のレプリカ間で温度の置換を行う。さらに，最近この方法を改良したマルチレプリカ置換法を考案した。この手法をプログラムに実装し，タンパク質系に応用することでその性能向上を定量的に議論する。

e) これまでにエネルギー散逸系における初めてのシンプレクティック数値解法として減衰振動におけるシンプレクティック解法を開発した。ここでは調和振動子ポテンシャル中の減衰振動を対象としたが，今後はより一般的なポテンシャルエネルギー系における減衰運動を対象としてシンプレクティック数値解法を開発する。

岡崎　圭一（准教授）(2020 年 12 月 1 日着任)

大貫　隼（助教）
関　健仁（大学院生）
GUYOT, Constantin（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) トランスポーターの基質輸送メカニズムの解明
b) タンパク質が引き起こす細胞膜変形メカニズムの解明
c) 分子モーターの 1 方向性運動メカニズムの解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) トランスポータータンパク質は，構造変化をすることで基質を細胞膜内外へ輸送する。構造予測 AI である AlphaFold や分子動力学（MD）シミュレーションにより,構造変化を介した基質輸送メカニズムの解明を行っている。まず,「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。次に，MD シミュレーションにより，病原性細菌が有する呼吸鎖酵素である Na^+ 輸送性 NADH-キノン酸化還元酵素（Na^+-NQR）における電子伝達と共役した Na^+ 輸送の分子メカニズムを解明した。さらに，MD シミュレーション，AlphaFold による構造予測，マルコフ状態モデルによる解析を組み合わせたアプローチにより，効率的な構造サンプリングを実現し，自由エネルギーや構造遷移パスを解析する手法の開発を行っている。
b) 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，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，チューブ状膜とダイナミンの大規模多量体からなる粗視化シミュレーション系を構築して，ダイナミンの膜切断に関する新たな分子メカニズムを提案した。つまり，ダイナミン多量体のリング構造が GTP 加水分解に伴う構造変化によりゆるむことで結合している場所の膜を膨らませ，離れた部位の膜を収縮させる“indirect”な細胞膜収縮（切断）メカニズムをシミュレーションにより示した。
c) 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 ATP 合成酵素（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動力学（MD）シミュレーションによって解明した。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ると，合成方向に回転させたときのみ阻害因子 IF_1 が構造変化して解離することが分かった。また，阻害因子 IF_1 結合状態における回転のトルク・仕事は通常時より 20% 程度増加することが分かり，阻害状態解除に必要なプロトン駆動力を見積もることができた。

B-1) 学術論文

K. OKADA, K. OKADA, K. OKAZAKI, T. MORI, K. KIM and N. MATUBAYASI, "Deep Learning of Committor for Ion Dissociation and Interpretable Analysis of Solvent Effects Using Atom-Centered Symmetry Functions," *J. Chem. Phys.* **164(9)**, 094101 (2026). DOI: 10.1063/5.0315825

M. ISHIKAWA-FUKUDA, T. SEKI, J. KISHIKAWA, T. MASUYA, K. OKAZAKI, T. KATO, B. BARQUERA, H. MIYOSHI and M. MURAI, "The Redox Driven Na^+-Pumping Mechanism in *Vibrio cholerae* NADH-Quinone Oxidoreductase Relies on Dynamic Conformational Changes," *Nat. Commun.* **17**, 1394 (2026). DOI: 10.1038/s41467-026-69182-w

M. I. MAHMOOD, S. KUBO, H. NOGUCHI and K. OKAZAKI, "Membrane Constriction by Dynamin through GTP-Driven Conformational Changes from Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations," *J. Phys. Chem. Lett.* **16**, 12411–12418 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpclett.5c02867

R. KOBAYASHI and K. OKAZAKI, "Rotation-Direction-Dependent Mechanism of the Inhibitor Protein IF_1 for Mitochondrial ATP Synthase from Atomistic Simulations," *JACS Au* **5(6)**, 2654–2665 (2025). DOI: 10.1021/jacsau.5c00261

B-3) 総説，著書

大貫　隼, 岡崎圭一,「AlphaFold ×分子動力学シミュレーションによるタンパク質構造状態の効率的探索」, *生物物理*, **66(1)**, 6–10 (2026). DOI: 10.2142/biophys.66.6

B-4) 招待講演

岡崎圭一,「V_oモーターおよびトランスポーターによるイオン輸送のMDシミュレーション」, cQUESTシンポジウム「膜タンパク質内部のイオン透過を考える」, 柏, 2025年12月.

岡崎圭一,「Elucidating and Controlling Functional Dynamics of Biomolecular Machines Using Molecular Simulations and Machine Learning」, 信州大学アクア・リジェネレーション機構（ARG）データ駆動型AIセミナー, 長野, 2025年11月.

岡崎圭一,「AlphaFoldと分子シミュレーションで迫るトランスポーターの基質輸送メカニズム」, 第98回日本生化学会大会, AlphaFoldの今――AIが拓く次世代の生命科学, 京都, 2025年11月.

岡崎圭一,「分子シミュレーションとAlphaFoldの統合的アプローチによるトランスポーターの構造変化予測」, 日本薬物動態学会第40回年会, トランスポーターDIS, 京都, 2025年10月.

K. OKAZAKI, "Tubular membrane constriction induced by conformational change of dynamin-1 from coarse-grained molecular dynamics simulations," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), "Lipids on the Move: From Membrane Biophysics to Synthetic Lipid Nanoparticles and Artificial Organelles," Honolulu (USA), December 2025.

K. OKAZAKI, "Molecular Simulation of Functional Motions in Biomolecular Machines Facilitated by AlphaFold and Coarse-Grained Model," SMART Symposium: 2025 Frontier in Computational Chemistry, Biophysics, and Biological Sciences, Shenzen (China), October 2025.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

分子シミュレーションスクール世話人 (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

東京大学大学院農学生命科学研究科, 非常勤講師,「分子シミュレーションによる生体分子マシンの機能発現ダイナミクス解明」, 2025 年 2 月–6 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).

科研費学術変革領域研究(A),「AlphaFold と分子シミュレーションの統合による分子モーターの構造変化制御」, 岡崎圭一 (2025 年度–2026 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求する研究を進めている。トランスポータータンパク質については，従来の手法では困難であったリガンド結合による構造変化を AlphaFold で予測する新手法の開発を行っている。さらに，MD シミュレーション，AlphaFold による構造予測，マルコフ状態モデルによる解析を組み合わせたアプローチをさまざまなトランスポーターへ適用したい。細胞膜変形については，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では結局最後の切断までのシミュレーションは成功しなかったので，現実の細胞環境に近い条件でのシミュレーションを検討する。さらに，ミトコンドリア内膜等の多種多様なタンパク質が関わる細胞内現象への展開も目指す。回転モーター ATP 合成酵素の阻害因子 IF_1 については，AI デザインツール等も取り入れた機械学習手法を開発して，共同研究者による実験結果をフィードバックしながら，強力な阻害因子のデザインを目指している。

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 LÉSÉLEUC, Sylvain（准教授（兼任））
富田　隆文（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）
MAGRO, Valentin Nicolas Walter（特任研究員）
LIENHARD, Vincent（特任研究員）
LORANCA CRUZ, Luisa Fernanda（招へい研究員）
岡田　満哉（特別訪問研究員）
仲田　公明（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）
西岡　稚子（特任専門員）
越田　陽子（特任専門員）
ANTHOINE-MILHOMME, Valentin Timothée（特任専門員）
SCHMID, Maximilian Otto（インターンシップ）
MEMBREZ, Gaetan（インターンシップ）
PINOCHE, Berengere（インターンシップ）
MICAGLIO, Giorgio（インターンシップ）
KAWATA, Shun（インターンシップ）
PARKPROM, Pongpol（インターンシップ）
DESMURS, Fabien（インターンシップ）
VAN-EIMERN, Moritz（インターンシップ）
UDOMMAI, Parinya（インターンシップ）
MARCELINO, Maximilien（インターンシップ）
SENOUCI, Sami（インターンシップ）
VIDOR, Guilhem（インターンシップ）
GODARD, Theo（インターンシップ）
GIANGRECO, Lorenzo（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）
ANTONIO, Jorge（大学院生）
渡部　元輝（大学院生）
小田川　陽陸（大学院生）
新川　聖也（大学院生）
鶴田　笑子（技術支援員（派遣））
佐藤　琢美（技術支援員（派遣））
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 4 件を行っている。

B-1) 学術論文

K. NISHIMURA, H. SAKAI, T. ANDO, T. TOMITA and S. DE LÉSÉLEUC, “Optimization-Based Hologram Design for Fine Optical Tweezer Arrays and Extension of Super-Resolution Criteria,” *Phys. Rev. A* **113(1)**, 013119 (2026). DOI: 10.1103/xhb8-jlxh

V. LIENHARD, R. MARTIN, Y. T. CHEW, T. TOMITA, K. OHMORI and S. DE LÉSÉLEUC, “Generation of Motional Squeezed States for Neutral Atoms in Optical Tweezers,” *Phys. Rev. Lett.* **135(25)**, 253404 (2025). DOI: 10.1103/3kwz-ny2h

M. KUNIMI and T. TOMITA, “Proposal for Realizing Heisenberg-Type Quantum-Spin Models in Rydberg-Atom Quantum Simulators,” *Phys. Rev. A* **112(5)**, L051301 (2025). DOI: 10.1103/c97b-my2w

C. NILL, S. DE LÉSÉLEUC, C. GROß and I. LESANOVSKY, “Resonant Stroboscopic Rydberg Dressing: Electron-Motion Coupling and Multi-Body Interactions,” *Phys. Rev. A* **111(4)**, L041104 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevA.111.L041104

T. DENECKER, Y. T. CHEW, O. GUILLEMANT, G. WATANABE, T. TOMITA, K. OHMORI and S. DE LÉSÉLEUC, “Measurement and Feedforward Correction of the Fast Phase Noise of Lasers,” *Phys. Rev. A* **111(4)**, 042614 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevA.111.042614

B-4) 招待講演（* 基調講演）

大森賢治,「量子スピード限界で動作する中性原子型・超高速量子コンピュータ」, 2026年第73回応用物理学会春季学術講演会, 東京科学大学大岡山キャンパス本館, 東京都目黒区, 2026年3月.

大森賢治,「中性原子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 2026 ～誤り耐性型汎用量子コンピュータの実現を目指して～ , ベルサール秋葉原, HALL A/B, 東京都千代田区, 2026年3月.

大森賢治,「将来への展望」,「アト秒の日」（10月18日）登録記念式典, 東京大学先端科学技術研究センター ENEOS ホール, 東京都目黒区, 2025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」, JASIS2025分析機器・科学機器総合展トピックスセミナー「量子コンピュータ」, 幕張メッセ, 千葉県千葉市, 2025年9月.

大森賢治,「量子力学100年の謎」, 大阪・関西万博スペシャルトーク『攻殻機動隊×量子コンピュータ』（EXPO2025 SPECIAL TALK『GHOST IN THE SHELL』×『QUANTUM COMPUTER』）特別講義, 大阪・関西万博EXPO メッセ「WASSE」「エンタングル・モーメント―［量子・海・宇宙］×芸術」展ステージ, 大阪府大阪市, 2025年8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」, 電子情報通信学会 システムナノ技術に関する特別研究専門委員会主催第6期第2回研究会「量子情報分野におけるナノ構造・制御技術」, オンライン開催, 2025年6月.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Physikalisches Kolloquium, Emmy-Noether-Campus, Universität Siegen, Siegen (Germany), January 2026.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” International Conference on Quantum Information Science and Technology (ICQIST 2025), CQuERE, TCG CREST, Kolkata (India) (Hybrid), December 2025.* (Plenary talk)

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Optica Incubator on Petahertz Electronics, Optica Global Headquarters, Washington D.C. (USA), November 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” JQI (Joint Quantum Institute) Special Seminar, The Physical Sciences Complex at the University of Maryland, College Park (USA), November 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” 2nd Japan-Denmark Symposium On Practical Quantum Computing, Hillside Terrace, Hillside Plaza, Tokyo (Japan), October 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” 2nd International Workshop on Quantum Information Engineering (QIE2025), Okinawa Institute of Science and Technology, Seaside House, Onna, Okinawa (Japan), October 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Quantum Control of Light and Matter Gordon Research Conference (GRC), Salve Regina University, Newport (USA), August 2025.

K. OHMORI, “Large-scale and high-coherence fault-tolerant quantum computer with dynamical atom arrays,” Moonshot Goal 6 Session in Quantum Innovation 2025, Congrès Square Grand Green Osaka, Osaka (Japan), August 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” The Rochester Conference on Coherence and Quantum Science (CQS-12), Sloan Auditorium, University of Rochester, Rochester (USA), June 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Optics & Photonics International Congress 2025, PACIFICO Yokohama, Kanagawa (Japan), April 2025.* (Plenary talk)

B-5) 特許出願

出願

PCT/JP2024/044357,「パルス光出力システム，パルス光出力方法，中性原子励起方法及び量子コンピュータ装置」, 松原卓也，シルヴァン ド レゼルック，富田隆文，素川靖司，大森賢治（自然科学研究機構), 2024年.

登録

US/12580093,「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), 2023年.（登録日 2026年3月17日）

B-6) 受賞，表彰

TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh, レーザー学会学術講演会第46回年次大会論文発表奨励賞 (2026).

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） (2024–).

日本分光学会代議員 (2022–).

欧州研究会議（European Research Council: ERC, EU）パネル評価者／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–).

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–).

経済産業省「ポスト5G情報通信システム基盤強化研究開発事業」,「繰り返し量子誤り訂正を可能とするDual-Yb型量子コンピュータの開発」プロジェクト, 分子研チーム研究開発統括 (2025–).

理科教育活動

科学技術振興機構日本未来館常設展示「量子コンピュータ・ディスコ」監修協力 (2025).（富田隆文）

講演講師「光ピンセット中性原子 量子コンピュータ」文部科学省 第一線の講師陣と量子技術を学ぶサマースクール 2025（OIST）(2025).（富田隆文）

ワークショップ「Focused workshop on atom move」量子コンピュータ関連研究者及び学生の技術交流 (2026).（Sylvain de LÉSÉLEUC，富田隆文）

その他

内閣府・ムーンショット型研究開発事業・目標 6「誤り耐性型汎用量子コンピュータ」第 1 期（2022 年 11 月–2025 年度）および第 2 期（2026–2030 年度）のプロジェクトマネージャーとして，極めて高額の外部資金を獲得（「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．

内閣府・ムーンショット型研究開発事業・目標 6「誤り耐性型汎用量子コンピュータ」のステージゲート審査（2025 年 10 月 6 日）に合格することによって，第 1 期（2022 年 11 月–2025 年度）に引き続き，第 2 期（2026–2030 年度）のプロジェクトマネージャーにも任命され，分子研のプレゼンス向上と研究力アピール，および財政に大きく貢献．

文科省・光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP（2018–2027 年度）の大規模基礎基盤研究の研究代表者として，高額の外部資金を獲得（「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．

文科省「先端国際共同研究推進事業（ASPIRE）」において，日本－ドイツ共同研究「量子技術」領域（2024–2029 年度）の研究代表者に任命され，高額の外部資金を獲得（「B-10) 競争的資金」の項を参照）することで，分子研の国際的なプレゼンス向上と研究力アピール，および財政に大きく貢献．

経産省・ポスト 5G 情報通信システム基盤強化研究開発事業における「繰り返し量子誤り訂正を可能とする Dual-Yb 型量子コンピュータの開発」プロジェクトの分子研チーム研究開発統括（2025–2027 年度）に任命され，高額の外部資金を獲得（「B-10) 競争的資金」の項を参照）することで，分子研のプレゼンス向上と研究力アピール，および財政に大きく貢献．

大森ムーンショットプロジェクト第 1 期の最大の成果の一つとして，日本初・世界でも数少ない中性原子型のフルスタック量子コンピュータを大森が率いる分子研チームが中心となって完成させた。現在，細部の最終調整中であるが，既に社会的に大きな注目を集めており，一般社団法人量子技術による新産業創出協議会 Q-STAR ご一行（2026 年 2 月 27 日）をはじめとして様々な企業や報道機関らが視察に来所された。これらによって，産学官のさまざまな分野における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

文科省，講談社，自然科学研究機構，分子研の共催によって，2025 年 8 月 15 日，大阪・関西万博における大森と押井守監督（映画 GHOST IN THE SHELL ／攻殻機動隊）とのスペシャルトークショー（冒頭で大森による「量子力学 100 年の謎」についての講演）が開催された。当日は立ち見溢れる超満員の盛況となった。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，2023 年 10 月よ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，岡崎信用金庫をはじめとする 13 社，および 1 国立研究所産総研 G-QuAT の参画を得るとともに，会社設立のためのさまざまな議論や準備活動を進め 2025 年 4 月 1 日，国内初となる中

性原子型・量子コンピュータのハード開発を行う株式会社Yaqumoの設立に繋がった（これに伴って同協議体は当初目的達成の上，解散）.

8-3情報発信に記載されている通り，過去1年に限っても日本経済新聞（4度紙面に掲載），中日新聞などをはじ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おり，また，米国科学誌サイエンスの中性原子型・量子コンピュータ特集記事に数少ない世界のリーダーとして取り上げられるなど国際的にも大きく注目されている。さらに，大阪・関西万博における攻殻機動隊・押井守監督とのスペシャルトークショーへの大森の出演など，これらの継続的かつ多様な媒体における報道によって，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.

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（2023–2025），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（2023–2025）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。同審議会での大森の任期は10年ルールにより2025年度で公式には終了したが，その後も文部科学省からの要請で，同省の科学技術政策へのアドバイザーとして貢献を継続している（2026年3月現在）。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.

中性原子型・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，米国Science誌2025年7月10日号の中性原子型・量子コンピュータ特集記事で数少ない世界のリーダーの一人としてハイライトされるなど，関連報道が現在も継続している（webニュース等については，https://ohmori.ims.ac.jp/kenjiohmori/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はもとより，横浜で開催された国際会議Optics & Photonics International Congress 2025（プレナリー講演），ドイツのジーゲン大学コロキウム，インドのTCG CRESTにて開催の International Conference on Quantum Information Science and Technology (ICQIST) 2025（プレナリー講演），米国ロチェスターで開催された6年に1度の伝統ある国際会議CQS-12 Rochester Conference on Coherence and Quantum Science（ボードメンバーとしてアジアから唯一招待），米国RI州ニューポートで開催されたGordon Research Conference on Quantum Control of Light and Matter，米国ワシントンD.C.のOPTICA（米国光学会）本部にて開催されたOptica Incubator on Petahertz Electronics，米国メリーランド大学にて開催のJQI（Joint Quantum Institute）Special Seminar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.

2024年度に3度の政策アクション会議に招かれ，各省・局長級のトップ官僚，あるいは政府系金融機関・幹部を始めとする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った。これを契機に引き続き同幹部との関係が継続，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．

大手新聞社による分子研・大森グループ訪問・取材（2025年4月16日；予備取材5月20日オンライン）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．

米国サイエンス誌のAdrian Cho記者による大森へのオンライン取材（2025年5月2日）に際して，自身の量子コンピュータ研究開発に関するレクチャーを行った。この取材に基づいて，米国サイエンス誌2025年7月10日号の中性原子型・量子コンピュータ特集記事（FEATURE ARTICLE）「Atomic explosion」において，世界でも数少ない中性原子型・量子コンピュータ研究開発のリーダーの一人としてフィーチャーされた。これによって世界的な分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

大手通信会社ご一行の分子研・大森グループ訪問（2025年5月15日）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．

大手報道機関の大森へのオンライン取材（2025年7月18日および9月24日）に際して，大森グループの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．

日本政府量子コンピュータ施策関係者ご一行の分子研･大森グループ訪問（2025年8月18日）に際して，大森グループ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．

日本政府量子コンピュータ施策関係者らの分子研・大森訪問（2025年9月19日）に際して，大森グループ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．

海外の量子コンピュータスタートアップからのリクエストで面談を行い（2025年11月5日）今後の協力関係の要請を受けた。これによって，分子研の世界的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

国際的ベンチャーキャピタルからのリクエストで面談を行い（2025年11月26日）分子研の世界的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

大手新聞会社の取材（2025年12月8日）を受け，分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

ドイツ初の量子コンピュータ・スタートアップ「eleQtron社」（Siegen市）の本社に招かれ，視察・面談を行ない，引き続き創業者Christof Wunderlich氏が教授を務めるSiegen大学でコロキウム講演を行った（2026年1月22日）。これにより，ドイツの産業界およびアカデミアに対して，分子研の世界的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

日本政府量子施策関係者らと面談を行い（2026年3月13日），今後の日本政府の量子技術政策の立案に貢献するとともに，文科省に対する分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

分子研フルスタック量子コンピュータに関して大手報道機関の取材の取材（2026年3月17日）を受け，分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

B-8) 大学等での講義，客員

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

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 LÉSÉLEUC (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–2027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).

経済産業省「ポスト5G情報通信システム基盤強化研究開発事業（量子産業化）／ポスト5G情報通信システムの開発／繰り返し量子誤り訂正を可能とするDual-Yb型量子コンピュータの開発」, 大森賢治（分子研研究総括）(2025年度–2027年度).

B-11) 産学連携

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 (2022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),「Technologies for cold-atom based fault-tolerant quantum computing : Research and development of Quantum Processing Unit (QPU)」, 大森賢治 (2023年度–).

共同研究, キュエル（株),「量子コンピュータの制御装置・ミドルウェアの開発」, 大森賢治 (2024年度–).

共同研究,（株）Yaqumo,「高度光技術を用いた量子コンピュータに関する研究」, 大森賢治 (2025年度–).

共同研究,（株）Yaqumo,「ポスト5G情報通信システム基盤強化研究開発事業（量子産業化）／ポスト5G情報通信システムの開発／繰り返し量子誤り訂正を可能とするDual-Yb型量子コンピュータの開発」, 大森賢治 (2025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（若手研究者雇用特別研究員）
WULIJI TAOGETAO（特任専門員）
三浦　直也（特別共同利用研究員）
神谷　美穂（事務支援員）

A-1) 専門領域：表面物理学，有機薄膜物性

A-2) 研究課題：

a) シンクロトロン放射光・レーザー光励起による弱相互作用系の電子状態計測
b) 配向分子薄膜の光電子放出強度の理論解析と分子軌道撮影法の開発
c) 有機半導体薄膜の電荷輸送機構の研究
d) 有機半導体薄膜の界面電子準位接合機構の研究
e) 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を確立した。分子間相互作用の大きさ，ホール有効質量，バンド伝導移動度の定量的評価と，分子結晶特有の物理モデルの構築を進めている。多体効果による電子構造への影響を検出し，非自明な機能開拓へ向けた研究を進めている。有機半導体結晶における振電相互作用の運動量異方性の検出に成功した。有機半導体の電荷振動結合：配向有機超薄膜の作製に

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

d) 本質的には絶縁物である有機分子が n 型／ p 型半導体として機能する起源を明らかにすべく研究を進めている。極めて高効率に光電子を捕捉し評価可能な高感度紫外光電子分光装置を開発し，バンドギャップに生じる 10ppm レベルの状態密度検出に成功した。価電子帯トップバンドの状態密度分布がガウス型から指数関数型に変化し，基板フェルミ準位まで到達している様子をとらえた。また低エネルギー逆光電子分光装置の導入により，伝導帯構造を合わせて評価することが可能となり，ドナー・アクセプター半導体分子間の弱い vdW 結合から，分子と金属原子の局所的な強い化学結合によるギャップ準位形成までを統括検討し，エネルギー準位接合機構の解明を目指している。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（SPALEED），準安定励起原子電子分光（MAES），X線定在波法（XSW），軟X線吸収分光（NEXAFS）等を用い，基板界面における単分子膜成長から結晶膜成長までの多様な集合状態について構造（分子配向）と成長を観察している。

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. MATSUI, K. HAGIWARA, Y. SATO, R. SAGEHASHI and S. SUGA, “Spin and Orbital Polarizations of Au(111) Surface State Determined by Photoelectron Momentum Microscope,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **94**, 114707 (9 Pages) (2025). DOI: 10.7566/JPSJ.94.114707

L. X. CAO, Y. SHEN, K. ZHANG, Z. H. SU, S. C. FENG, X. M. HU, Y. H. ZHANG, B. F. WANG, Y. Y. LI, X. GAO, W. J. WANG, S. KERA, N. UENO, Y. Q. LI and J. X. TANG, “In Situ Interface Reaction Enables Efficient Deep-Blue Perovskite Light-Emitting Diodes,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64(39)**, e202513617 (2025). DOI: 10.1002/anie.202513617

Y. NAKAYAMA, Y. KOYAMA, S. MIYATA, J. MIYAMOTO, T. HOSOKAI, K. FUKUTANI, S. KERA, R. KUMARA, T. KOGANEZAWA, F. KOBAYASHI and M. TADOKORO, “Epitaxial Molecular Heterojunction with Spontaneous Charge Transfer: A Novel Strong Acceptor, Perfluorotetraazanaphthacene, on Single-Crystal Pentacene,” *Synth. Met.* **314**, 117941 (2025). DOI: 10.1016/j.synthmet.2025.117941

C. DE, K. FUKUTANI, J. SEO, R. STANIA, K. YAJI, K. KURODA, K. SHIMADA, J. S. KIM, H. W. YEOM and S.-W. CHEONG, “Multiple Magnetic Transitions, Anomalous Hall Effect, and Tunable Surface States in $Mn(Bi_{1-x}Sb_x)_4Te_7$,” *Phys. Rev. B* **112**, 085151 (2025). DOI: 10.1103/7swz-xkrt

Y. HASEGAWA, T. YAMAGUCHI, M. MEISSNER, T. UEBA, F. BUSSOLOTTI, S. IDETA, K. TANAKA, S. YANAGISAWA and S. KERA, "Fingerprinting Weak Electronic Interaction at a van der Waals Interface: Fano Signatures in a Pentacene Monolayer on Graphite," *Phys. Rev. B* **112(8)**, 085301 (2025). DOI: 10.1103/2k7h-h8jm

Y. YU, B. F. WANG, Y. SHEN, Y. T. WANG, Y. H. ZHANG, Y. Y. LI, Z. H. SU, L. X. CAO, S. C. FENG, Y. H. WU, X. Y. GAO, S. KERA, N. UENO, J. X. TANG and Y. Q. LI, "Efficient Blue Perovskite LEDs via Bottom-Up Charge Manipulation for Solution-Processed Active-Matrix Displays," *Adv. Mater.* **37(37)**, 2503234 (2025). DOI: 10.1002/adma.202503234

F. NISHINO, P. KRÜGER, C. H. WANG, R. NEMOTO, Y. H. CHANG, T. HOSOKAI, Y. HASEGAWA, K. FUKUTANI, S. KERA, M. HORIE and T. YAMADA, "Reversible Sliding Motion by Hole-Injection in Ammonium-Linked Ferrocene, Electronically Decoupled from Noble Metal Substrate by Crown-Ether Template Layer," *Small* **21(7)**, 2408217 (2024). DOI: 10.1002/smll.202408217

M. KIM, D. MIYAGI, I. TAMAI, Y. MAEYAMA, Y. OGUCHI, S. INOUE, R. NAKAZAWA, J. JIA, H. ISHII and Y. SHIGESATO, "Impact of Nitrogen Doping on Leakage Current of p-Type Cu_2O-Based pn Junctions for Ga_2O_3 Power Device Applications," *Phys. Status Solidi RRL* **19(11)**, 2400396 (2025). DOI: 10.1002/pssr.202400396

R. NAKAZAWA, M. KITAOKA, R. KAIMORI, M. TATENO, R. HOSHIKAWA, Y. TANAKA and H. ISHII, "Determining the Density of In-Gap States in Organic Semiconductors: A Pitfall of Photoelectron Yield Spectroscopy," *J. Phys. Chem. C* **130(9)**, 3418–3427 (2026). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c07058

B-4) 招待講演

解良　聡,「有機材料の光電子分光計測：物性の次元性と階層性」, 分子科学討論会, 広島, 2025年9月.

K. FUKUTANI, "Phonon-dressed quasiparticles and excitonic insulator transition in $TiSe_2$," 1st International Workshop on Advanced Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy, Sapporo (Japan), January 2026.

S. KERA, "Characteristic electronic properties of organic molecular solids," Global conference on condensed matter physics 2025, Praha (Czech), April 2025.

S. KERA, "Deep insight into the characteristic electronic properties of organic molecular solids by spectroscopic view," International conference on emerging technologies (ICET), Sabaragamuwa (Sri Lanka), April 2025.

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

VSX・SX 高輝度光源利用者懇談会会長 (2024–2026).

応用物理学会プログラム編集委員 (2025–).（福谷圭祐）

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)，将来計画検討委員会委員 (2025–2026).

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–).

文部科学省研究振興局科学技術・学術審議会専門委員 (2025–2027).

学会誌編集委員

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

B-8) 大学等での講義，客員

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

千葉大学大学院融合理工学府, 連携客員教授, 2014 年 9 月– .

千葉大学大学院融合理工学府,「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– .

豊田工業大学, 修士・博士一貫教育プログラム学生メンター , 2025 年 4 月–2026 年 3 月.

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).

科研費特別研究員奨励費,「準粒子相互作用による新たな電荷ダイナミクスの開拓と有機光エレクトロニクスへの展開」, 中澤遼太郎 (2025 年度–2027 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電子状態解析

c) 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

d) 複合的な生化学反応のオペランド軟Ｘ線吸収分光計測

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 μm）を独自に開発することで，溶液の XAS 測定を実現した。更に，溶液の状態を詳細に調べるために，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，大規模な分子系の内殻励起計算法を確立した。これにより，りん酸の水和構造，有機溶媒中のシリケートの構造，トリエチルアミン水溶液の相転移現象を調べている。また，高分子鎖の一部を切り出すことで，溶液中の高分子の内殻励起計算を実現して，その相転移現象を調べている。

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により，金属錯体の配位子の窒素 K 吸収端 XAS 測定から，その電子状態やスピン状態を議論できることを見出した。また，中心金属の XAS 測定から中心金属の電子状態が分かり，XAS による金属錯体の中心金属と配位子の電子状態の解析法を確立した。これにより，クロロフィルにおけるフィトール鎖の役割，アルミニウム錯体における溶媒の配位構造，鉄錯体におけるオキソ種の生成などを調べている。

c) 超高速レーザーと放射光から発生する軟Ｘ線パルスを 100 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 法を開発した。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調べた。現在，光緩和過程への溶媒分子，溶液温度などの影響を時間分解 XAS 計測により調べている。更に，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。

d) 生化学反応のオペランド XAS 計測を目指した手法開発を行っている。水溶液中のミオグロビンのヘム鉄のスピン状態の変化を窒素 K 吸収端 XAS 計測により調べた。タンパク質のポリペプチド鎖には大量の窒素原子が含まれるが，ポルフィリン環の窒素に由来するピークとエネルギー位置が異なるため，分離して観測できることを見出した。また，内殻励起計算から，異なる状態のヘム鉄のスピン状態を調べて，室温のミオグロビン溶液にスピン平衡を示す状態があることを見出した。今後は，光化学系 II タンパク質の XAS 測定を行い，将来的にその光合成反応の機構解明を行う予定である。

B-1) 学術論文

H. XU, F. KUMAKI, M. NAGASAKA and T. SASAKI, "N K-Edge XAS Measurements for Ionic Liquids and N-Heterocycle Molecules in Liquid Phase Analyzed by Simulations with Explicit Inclusion of Solvent Molecules," *J. Chem. Phys.* **164(10)**, 104502 (2026). DOI: 10.1063/5.0315131

H. IWAYAMA, H. YUZAWA and M. NAGASAKA, "Phase-Dependent Intermolecular Interactions of Nematic Liquid-Crystal Molecules Probed by Carbon K-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy," *Phys. Rev. E* **113(1)**, 015413 (2026). DOI: 10.1103/17pr-b3wv

F. KUMAKI, S. TSURU, S. YAMASHITA, J. ADACHI and M. NAGASAKA, "Electronic Structures of Chlorophyll a Investigated by Nitrogen K-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy under a Radiation-Induced Effect," *J. Phys. Chem. A* **130(1)**, 222–228 (2026). DOI: 10.1021/acs.jpca.5c07907

R. TAKAHASHI, F. KUMAKI, J. ADACHI, Y. NISHIMOTO, M. YASUDA and M. NAGASAKA, "Soft X-Ray Absorption Spectroscopy for Analysing Aluminium Complexes in Solution," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **27(44)**, 24017–24023 (2025). DOI: 10.1039/D5CP03440J

H. TEDZUKA, H. SAITO, N. MATSUMOTO, M. NAGASAKA, H. SATO, Y. SEKINE and T. SUGIMOTO, "Nonthermal Catalytic Origin in DC-Enhanced Dry Reforming of Methane Unveiled by Multimodal Operando Analyses," *J. Phys. Chem. Lett.* **16**, 12973–12981 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpclett.5c03159

Y. YAMADA, Y. TOYODA, M. NAGASAKA, N. NAKATANI, T. KOITAYA, A. KUZUME and K. TANAKA, "Room-Temperature Direct Spectroscopic Observation of High-Valent Terminal Iron-Oxo Species of a μ-Nitrido-Bridged Iron Phthalocyanine Dimer Deposited on a Highly Oriented Pyrolytic Graphite Surface," *ChemistryEurope* **3(5)**, e202500277 (2025). DOI: 10.1002/ceur.202500277

K. HARADA, A. SAKAI, S. TSUNEKAWA, Y. TAKAKI, M. NAGASAKA, H. YUZAWA, K.-H. WANG, T. INA, H. KONDOH and M. YOSHIDA, "Improved Water Electrolysis Over Cobalt Oxyhydroxide by Carbonate Anion Adsorption: Direct Observation of Active Species Using Operando Hard/Soft X-Ray Absorption Spectroscopy," *ChemSusChem* **18(16)**, e202500559 (2025). DOI: 10.1002/cssc.202500559

S. TSURU and M. NAGASAKA, "Solvatochromism Observed in the X-Ray Absorption Spectrum of Indole Dissolved in Water," *J. Phys. Chem. A* **129(13)**, 3020–3031 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpca.5c00456

B-3) 総説，著書

M. NAGASAKA, F. KUMAKI, Y. YAO, J. ADACHI and K. MOCHIZUKI, "Polymer Cononsolvency Explored Using Soft X-Ray Absorption Spectroscopy," *Photon Factory Highlights*, **2024**, 24–25 (2025).

Y. KUDO, F. KUMAKI, M. NAGASAKA, J. ADACHI, Y. NOGUCHI, N. KOGA, H. ITABASHI and M. HIYAMA, "Core-Electron Excitation of Firefly Luciferin with Carbon XAS Measurements," *Photon Factory Highlights*, **2024**, 18–19 (2025).

長坂将成,「軟Ｘ線吸収分光法による溶液のオペランド計測：錯体化学と高分子化学への展開」, *Vac. Surf. Sci.*, **68(4)**, 226–231 (2025). DOI: 10.1380/vss.68.226

為則雄祐，長坂将成,「軟Ｘ線技術」, *XAFS の基礎と応用 第 2 版*, 179–190 (2025).

B-4) 招待講演

長坂将成,「軟X線吸収分光法による液体と固液界面のオペランド計測」, 第86回応用物理学会秋季学術講演会シンポジウム「ナノバイオテクノロジー分野における実験と分子シミュレーションのインタープレイ」, 名古屋, 2025年9月.

長坂将成,「軟X線吸収分光法による溶液のオペランド計測」, 岩澤コンファレンス2025「持続可能な社会をささえる最先端サイエンス」, 東京, 2025年6月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第3回PF-UAサマースクール「広がる放射光の利用研究」実行委員長 (2025).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

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(B),「複合的な生化学反応のオペランド軟X線吸収分光計測」, 長坂 将成 (2025年度–2027年度).

科研費基盤研究(B),「未利用有機資源の有効利用に資する超分子型難分解性有機物電解酸化触媒システムの開発」(代表者：山田 泰之), 長坂 将成（研究分担者）(2025年度–2027年度).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光共同利用実験S2課題,「軟X線吸収分光法による固液界面上の化学反応のオペランド計測」, 長坂 将成 (2025年度–2028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～ 2026 年 3 月 31 日）

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きた。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きた。
b) 自由電子レーザーや関連技術に関する研究を継続してきた。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きた。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きた。
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た。

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きた。

B-1) 学術論文

T. FUJI, T. TANAKA, T. KANEYASU, Y. KIDA, K. IMAMURA, S. HASHIMOTO, A. GOCHO, K. KANESHIMA, Y. TANAKA and M. KATOH, “Spectral Phase Interferometry for Direct Electric-Field Reconstruction of Chirped Wavepackets Generated from a Tapered Undulator,” *Opt. Lett.* **50(24)**, 7604–7607 (2025). DOI: 10.1364/OL.582624

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トロン光研究センター , 客員教授, 2018 年 4 月– .

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

C) 研究活動の課題と展望

UVSOR は 2000 年以降の継続的な高度化により，低エネルギーのシンクロトロン光源としては世界的にも最高レベルの性能に到達したが，国内外では新しい光源の建設稼働が相次ぎ，更なる競争力の向上が求められている。現在の加速器の更なる高度化の可能性を検討した結果，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トロン光研究センター，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エア技術開発を進めてきた。

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た。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た。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，今後の幅広い応用展開に期待したい。

金安　達夫（教授）（2025 年 4 月 1 日着任）

浅井　佑哉（特別共同利用研究員）
神谷　美穂（事務支援員）
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）

A-1) 専門領域：原子分子物理，加速器科学，放射光科学

A-2) 研究課題：

a) 時空間構造光の利用開拓
b) シンクロトロン光源の高性能化に関する研究
c) 量子ビーム源の開発と応用
d) 放射光計測技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 時空間構造光の利用開拓：UVSOR に設置されたタンデム型アンジュレータを用いて，二連パルスや光渦など，時空間構造を持つシンクロトロン光の生成技術の確立と利用法の開拓を目指した研究を進めている。二連パルスの利用では原子分子を対象として内殻光電子の波束干渉を捉えることに成功した。この手法は超高速現象の時間観測への応用が期待されており，加速器技術を駆使して二連パルスの制御法を高精度化しつつ，様々な物質系への展開を探索している。また二連パルスの干渉性を生かした軟Ｘ線フーリエ分光法の開発や，螺旋波面を持つ光渦ビームの電子分光への応用に着手した。
b) シンクロトロン光源の高性能化に関する研究：UVSOR 光源の性能向上へ向けた研究開発を進めている。とくに放射光実験の遂行に直結する蓄積ビームの安定化やトップアップ入射の効率化へ向けて，UVSOR 加速器群の運転状況の把握や電子ビームの挙動解明を目的としたマシンスタディを行った。また UVSOR のアップグレードに関する設計研究に着手し，挿入光源の更新案やビーム制御・診断装置の増強の検討を進めている。さらに蓄積リングにおける単一電子のダイナミクスや単一電子が発する光の性質の解明を目指した研究に着手した。
c) 量子ビーム源の開発と応用：放射光の高フラックス特性を活用したスピン偏極電子源の開発に着手し，電子源の設計製作を行った。
d) 放射光計測技術の開発：放射光の偏光特性を活用するためには試料位置での偏光評価が欠かせないが，一般的に真空紫外より短い波長域での偏光測定は高度な装置開発を伴う。光と原子の相互作用を利用した簡便な偏光測定装置を開発し，極紫外光の偏光測定に成功した。またシンクロトロン放射の光電場波形の再構築法の開発研究を行い，アンジュレータ放射を測定対象として検証実験に成功した。

B-1) 学術論文

T. FUJI, T. TANAKA, T. KANEYASU, Y. KIDA, K. IMAMURA, S. HASHIMOTO, A. GOCHO, K. KANESHIMA, Y. TANAKA and M. KATOH, "Spectral Phase Interferometry for Direct Electric-Field Reconstruction of Chirped Wavepackets Generated from a Tapered Undulator," *Opt. Lett.* **50(24)**, 7604–7607 (2025). DOI: 10.1364/OL.582624

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, S. WADA, H. OTA, H. IWAYAMA, K. SHIMIZU, M. FUJIMOTO and M. KATOH, "Attosecond Interferometry Experiments at the Tandem Undulator Beamline BL1U of UVSOR-III Synchrotron," *J. Phys.: Conf. Ser.* **3010(1)**, 012086 (2025). DOI: 10.1088/1742-6596/3010/1/012086

Y. IWASAKI, T. KANEYASU, Y. TAKABAYASHI, H. TAKEDA and S. KODA, "Operation of Two Superconducting Wigglers at SAGA Light Source," *J. Phys.: Conf. Ser.* **3010(1)**, 012021 (2025). DOI: 10.1088/1742-6596/3010/1/012021

H. TAKEDA, T. KANEYASU, Y. TAKABAYASHI and Y. IWASAKI, "Twenty Years of Operation of the SAGA Light Source," *J. Phys.: Conf. Ser.* **3010(1)**, 012013 (2025). DOI: 10.1088/1742-6596/3010/1/012013

B-4) 招待講演

金安達夫,「シンクロトロン放射と光渦」,「原子分子素過程研究とプラズマ分光計測の学際的展開」「原子分子データ応用フォーラムセミナー」合同研究会, 土岐, 2025年12月.

金安達夫,「アンジュレータ放射の時空間構造とその応用」, 日本物理学会第80回年次大会領域1，2，10，ビーム物理領域合同シンポジウム, 東広島, 2025年9月.

金安達夫,「シンクロトロン放射の時空間構造制御とその利用」, 東京科学大学理学院化学系講演会, 東京, 2025年8月.

金安達夫,「原子分子科学と放射光源の利用開拓」, 第3回PF-UAサマースクール「広がる放射光の利用研究」, オンライン開催, 2025年8月.

金安達夫,「シンクトロトロン放射のアト秒位相制御とその応用」, 原子衝突学会第50回年会「第50回記念シンポジウム」, 八王子, 2025年8月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

日本加速器学会年会開催地検討委員 (2025–).

ICPEAC2025, the XXXIV International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Local Organizing Committee (2023–2025).

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 (2023–2025).

B-8) 大学等での講義，客員

東京科学大学, 非常勤講師, 2025年8月–9月.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「タンデムアンジュレータの多角的利用法の開発」, 金安達夫 (2025年度–2029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),「フーリエ分光型軟X線顕微鏡の開発へ向けた放射光干渉制御 の基礎研究」, 金安達夫 (2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

UVSOR の極限的な光源性能を生かし，新規光源技術の開発と利用開拓を柱として研究活動を推進していく。タンデムアンジュレータが発する二連パルスや光渦など時空間構造を持つ光の研究では，原子分子系を対象とした実験研究で光と物質の基礎的な相互作用を解明しつつ，新たな放射光計測手法としての応用展開を目指す。時空間構造光の利用には極めて高品質な電子ビームが必須であり，蓄積リングを周回する電子ビームの制御技術や光ビームの操作手法の開発にも取り組む。

UVSOR 光源の高性能化では蓄積ビームの安定化へ向けた研究開発と並行して，現光源の改修による高度化改造や新規光源の可能性についても検討を進める。また単一電子の蓄積技術を活用し，円形加速器における電子ダイナミクスの研究を開拓していく。さらにスピン偏極電子源や二色ビームなどの量子ビーム源の開発研究では，本年度に設計製作した装置を用いてビーム発生試験を行う予定である。偏光測定や光電場測定などの放射光計測技術については適用波長範囲や時間領域を拡大すべく，研究開発を継続していく。

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）

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 6.6MeV 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。また，応力負荷後の緩和過程における欠陥挙動に関するユーザー執筆の論文が *J. Phys.: Conf. Ser.* に掲載された。電子線照射による単原子空孔の導入や水素導入の有無によって緩和過程における欠陥形成が大きく異なる事が分かった。さらに，ガンマ線誘起陽電子寿命測定法の最新の状況についてまとめた論文が *J. Phys.: Conf. Ser.* に掲載された。
ガンマ線誘起陽電子寿命測定法では，厚さ数 cm のバルク試料の測定が可能であるが，現在の測定手法では試料の平均的な情報のみを測定可能であった。近年，がん検査に使われる Time of flight positron emission tomography（TOF-PET）の時間分解能が向上しており，この検出器を利用することでバルク試料内部の欠陥分布をイメージングできる可能性がある。現在，測定システム設計のため，シミュレーションコードを用いた計算や機器の選定を行っている。来年度に原理実証実験を行う事を目指している。

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か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。

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。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。

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，理論計算との比較を行った。直線偏光ガンマ線は，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。一方で，円偏光ガンマ線は，ビーム断面の位置によって偏光が変化し，直径 10 mm に広がっている外側の領域では直線偏光に変化することを実証できた。次に，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た。この方法で発生するガンマ線は，中心軸付近がランダム偏光であり，外側の領域は方位角偏光になることが分かった。この結果は，直線偏光ガンマ線のインコヒーレントな重ね合わせによって理論的に理解できる結果であった。開発した偏光計を用いて，これまで実験的に不明であったガンマ線の偏光特性を明らかにすることができた。偏光計を用いたガンマ線の偏光測定についてまとめた論文が *Phys. Rev. Research* に掲載された。

ガンマ線天文学の分野において，エネルギー MeV 領域はその測定の難しさから感度の高い測定がこれまで行われてこなかった。現在そのエネルギー領域をターゲットにした検出器開発が世界で進められている。UVSOR のガンマ線は最大エネルギーが 6.6 MeV であり，また，コリメータの位置を変えることで 3 MeV までエネルギーを変えられる。さらに，宇宙ガンマ線の偏光検出もガンマ線発生個所の磁場分布の測定にとって重要である。上述したように偏光特性を詳細に測定した UVSOR ガンマ線が，このようなガンマ線天文学の需要に合うと考え，該当するコミュニティに宣伝することで新規ユーザー 2 組が UVSOR ガンマ線を使い始めた。

ガンマ線のエネルギー測定には，高純度ゲルマニウム検出器を使用している。MeV ガンマ線は物質に対する透過力が高いために，厚さ 10 cm 程度のゲルマニウム検出器の内部構造によって測定されるエネルギースペクトルが変わり得る。そのため，内部構造がスペクトルに与える影響を理解する事がガンマ線源のエネルギー特性評価にとって重要である。ゲルマニウム結晶内部に入り込んでいる冷却用ロッドの構造が異なる２つの検出器を用いて同一ガンマ線のエネルギースペクトル測定を行い，内部構造によってスペクトルが変化することを実験的に示し，シミュレーションとの比較を行った。この結果は，ユーザーが論文にまとめ *Radiat. Phys. Chem.* に掲載された。

B-1) 学術論文

M. OMER, T. SHIZUMA, M. KOIZUMI, Y. TAIRA, H. ZEN, H. OHGAKI and R. HAJIMA, “Effect of Coaxial HPGe Detector Structure on γ-Ray Beam Measurements,” *Radiat. Phys. Chem.* **240**, 113467 (2025). DOI: 10.1016/j.radphyschem.2025.113467

Y. TAIRA, Y. YANG, T. SHIZUMA and M. OMER, “Generation and Measurement of Gamma Rays with Axially Symmetric Polarization States via Compton Scattering,” *Phys. Rev. Res.* **7**, 033130 (2025). DOI: 10.1103/pn68-rjd2

F. HORI, S. ARAKI, Q. XU and Y. TAIRA, "In-Situ Measurement of Stress Relaxation Process in Hydrogenated Bulk Fe by Gamma-Ray Induced Positron Annihilation Spectroscopy," *J. Phys.: Conf. Ser.* **3149(1)**, 012018 (2025). DOI: 10.1088/1742-6596/3149/1/012018

Y. TAIRA, Y. OKANO and T. HIRADE, "Gamma-Ray-Induced Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy at UVSOR," *J. Phys.: Conf. Ser.* **3029(1)**, 012022 (2025). DOI: 10.1088/1742-6596/3029/1/012022

B-4) 招待講演

Y. TAIRA, "Development of gamma-ray-induced positron annihilation spectroscopy at UVSOR synchrotron facility," 20th International Conference on Positron Annihilation (ICPA20), Takamatsu (Japan), June 2025.

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–).

学会誌編集委員

日本陽電子科学会会報編集委員 (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– .

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。さらに，PET 検出器を用いた欠陥分布のイメージング測定手法の開発にも取り組む。計算上はパルス幅数ピコ秒のガンマ線が発生していると考えられるが，超短パルスガンマ線のパルス幅計測手法の開発も行う。

光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）
松田　博之（特任研究員）
新井　郁也（特任専門員）
大門　寛（研究員）
染井　裕貴（大学院生）
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と高度化
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，利用コミュニティーの開拓と UVSOR の活性化

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特許化した。上記の PMM は 3 $Å^{-1}$ までの波数空間の一括測定ができるため価電子帯研究で有効な運動エネルギー 36 eV 以下の領域では全天球をカバーすることができるが，原子配列を研究するのに有効な運動エネルギー 500 eV 以上の領域ではせいぜい 15° の領域でしかない。新規分析器は 2 keV でも全天球の放出光電子を取り込むことができ，後段のスピン偏向器でスピンの 3 次元ベクトル解析ができるようになる。①は high-end 型価電子帯光電子分光装置，②は内殻光電子ホログラフィー測定装置である。両者を融合させ，スピン 3 次元ベクトル解析を実・逆空間で自在にマッピングできる唯一無二の装置を構築する。
b) 物性評価に適した光波長帯の連続的なエネルギー可変性が UVSOR の最大の特徴である。BL6U は軟Ｘ線領域（40–700 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。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や Ir の双晶成長，各種相転移・相分離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 $TaSe_2$，$TiSe_2$ の相転移前後の電子状態をとらえた。新たに確立した顕微 ARPES/ARPES 顕微法の論文（*J. Phys. Soc. Jpn.* 2022，*Rev. Sci. Instrum.* 2023）に続き Au 単結晶表面のスピン偏極電子状態の解明の論文（*J. Phys. Soc. Jpn.*）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

K. HAGIWARA, F. NISHINO, D. STELTER, J. PICKER, F. OTTO, R. SAGEHASHI, M. SCHAAL, J. BRANDHOFF, A. TURCHANIN, T. FRITZ, S. KERA and F. MATSUI, "Identifying Antiparallel Twin Domains of Monolayer WS_2/Au(111) by Momentum-Selected PEEM," *Phys. Scr.* **101(8)**, 085915 (2026). DOI: 10.1088/1402-4896/ae3cc8

E. HASHIMOTO, K. HAGIWARA, Y. ONUMA, H. KUROSAKA, Y. NISHIO, T. HAMAMATSU, H. YABE, T. WATANABE, F. MATSUI and S. KOH, "Domain Visualization of Molecular Beam Epitaxy-Grown Ir(111) Thin Films by Momentum-Selected Photoelectron Emission Microscopy," *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **24(1)**, 1–6 (2026). DOI: 10.1380/ejssnt.2026-001

F. MATSUI, K. HAGIWARA, Y. SATO, R. SAGEHASHI and S. SUGA, "Spin and Orbital Polarizations of Au(111) Surface State Determined by Photoelectron Momentum Microscope," *J. Phys. Soc. Jpn.* **94**, 114707 (9 Pages) (2025). DOI: 10.7566/JPSJ.94.114707

B-3) 総説，著書

松井文彦，豊島　遼（編集幹事）,「X線光電子分光法」, 日本表面真空学会編 (2025).

B-4) 招待講演

松井文彦,「表示型光電子分光計測の研究系譜　放射光技術の発展史のなかで」, R026先端計測の将来設計委員会研究会, 名古屋, 2025年 8月.

松井文彦,「多次元・複モード光電子分光計測：その目標とデータ解析技術に期待すること」, 核融合研研究会, 土岐市, 2025年6月.

佐藤祐輔,「光電子運動量顕微鏡：基礎からUVSORでの実例まで」, The Japan Society of Vacuum and Surface Science The 8th Young Members Section Meeting & Kanto Chapter 10th Anniversary Symposium, 新潟県新潟市, 2025年4月.

F. MATSUI, "Breaking the symmetry: a close look at crystal surface symmetry by photoelectron momentum microscope," The 14th International Conference on Advanced Materials and Devices (ICAMD2025), Busan (Korea), December 2025.

F. MATSUI, "Mapping Electronic Phase Transition Domains and Spin-Polarized Bands at the Atomic Frontier with Photoelectron Momentum Microscopy," Hybrid Quantum Systems and Nanotechnologies 2025 (HQSN2025), International Workshop on Hybrid Quantum Materials, Sciences, and Technologies 2025 (HQMST2025), Matsue (Japan), October 2025.

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–).

日本放射光学会評議員 (2025–2026).

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).

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–).

広島大学放射光科学研究所協議会委員 (2024–2026).

日本学術振興会R073先端計測技術の未来創生委員会運営委員及びWGリーダー (2025–2026).

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

東京理科大学, 非常勤講師, 2025年9月–2026年3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」（代表者；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–).

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。運動量分布を一度に観測することで電子状態におけるキラリティや対称性の低下にいち早く気づくことができる利点がある。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。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つ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（R073 先端計測分析技術），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）

福田　亮平（特別共同利用研究員）
諫山　輝亮（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 ビームラインの自動測定開発と高精度化

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) UVSOR BL5U において，高効率イメージスピン分解角度分解光電子分光（スピン ARPES）装置の開発を進めている。今年度は，昨年度開発したスピンターゲットの 2 軸モーター制御と測定プログラムを連動させた自動測定プログラムの開発に成功した。これにより，測定スピン方向の変更時に生じていた煩雑なパラメータ入力や PC を介したスピンターゲットのモーター駆動が完全自動化され，測定の簡便性が飛躍的に向上したことで，ユーザーからも高い評価を得ている。 また，継続課題であった試料面直方向の電子レンズパラメータ調整も概ね完了し，現在は面直スピン検出の実証実験を実施中である。世界初となる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 ARPES 装置の実現に向け，いよいよ最終段階を迎えている。
b) UVSOR BL7U において，三層系銅酸化物高温超伝導体 Bi2213 の角度分解光電子分光（ARPES）測定を実施した。アンダードープ試料において，内部の CuO_2 面におけるドーピング濃度が極めて低いにもかかわらず，アンチノード領域における d 波超伝導ギャップが 80 ～ 100 meV という前例のない大きさに増大していることを発見した。さらに，このギャップがフェルミアークを伴わず，「ノード金属」的な挙動を示すことを明らかにした。 この特異な振る舞いは，最適ドープされた外側の CuO_2 面からの強い近接効果に起因すると考えられ，三層系銅酸化物がすべての多層系銅酸化物ファミリーの中で最も高い超伝導転移温度（T_c）を示す主要な要因であると結論付けた。本研究成果は *Nature Communications* 誌に掲載され，プレスリリースを実施した。
c) 放射光ビームラインにおいて，高精度な実験や測定の自動化を実現するためには，励起光エネルギーとビームスポット位置の高い再現性が不可欠である。BL5U では励起光エネルギーの再現性が課題となっていたが，回折格子の角度制御における機械的挙動の問題を回避するため，特殊なモーター制御システムを開発・導入し，高い再現性の確保に成功した。同様の制御システムを BL7U にも展開し，初期段階では安定したものの，運用開始 1 年後に突如として再現性が低下する事象が発生した。エネルギー再現性は今後の自動測定システム構築における最重要要件であるため，現在，各光学素子制御の確認実験を行い，徹底的な要因究明を進めている。これと並行して，ビームライン全体の測定自動化も強力に推進している。これまでに，各種パラメータ（励起光エネルギー，試料角度，試料位置）に依存した自動

ARPES 測定，スピン分解 ARPES 測定の半自動化，Ar スパッタ・アニール処理の自動化，スピンターゲット製膜用の自動蒸着装置などを構築してきた。現在は「自動試料位置最適化機能」の実装が目前に迫っており，来年度には，一度清浄表面を作製して測定シーケンスを登録すれば，ビームタイム終了まで無人測定が可能な「全自動測定システム」の実装を予定している。 長期的には，試料の自動搬送機構と AI によるスペクトル判定技術を統合し，薄膜試料等の最適な表面条件を完全自動で探索・導出する次世代型ビームラインシステムの構築を目指す。

B-1) 学術論文

S. IDETA, S. ADACHI, T. NOJI, S. YAMAGUCHI, N. SASAKI, S. ISHIDA, S. UCHIDA, T. FUJII, T. WATANABE, W. O. WANG, B. MORITZ, T. P. DEVEREAUX, M. ARITA, C. Y. MOU, T. YOSHIDA, K. TANAKA, T. K. LEE and A. FUJIMORI, "Proximity-Induced Nodal Metal in an Extremely Underdoped CuO_2 Plane in Triple-Layer Cuprates," *Nat. Commun.* **16(1)**, 9470 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-64492-x

D. GOTO, K. KUGA, K. TANAKA, T. TAKEUCHI and M. MATSUNAMI, "Evidence for Energy-Dependent Scattering Dominating Thermoelectricity in Heavy Fermion Systems," *Appl. Phys. Lett.* **127(16)**, 161903 (2025). DOI: 10.1063/5.0291138

K. SASAKI, H. MURAKAMI, K. KAMINAGA, F. TESHIMA, A. KIKUCHI, K. TANAKA, S. MARUYAMA and Y. MATSUMOTO, "Infrared Laser Deposition of High-Quality KBH_4 Epitaxial Thin Films as an Epitaxial Template for Heterostructures of Alkali Borohydrides," *Cryst. Growth Des.* **25(12)**, 4494–4502 (2025). DOI: 10.1021/acs.cgd.5c00396

T. KAWASAKI, A. NAGASE, K. HAYAKAWA, F. TESHIMA, K. TANAKA, H. ZEN, F. SHISHIKURA, N. SEI, T. SAKAI and Y. HAYAKAWA, "Infrared Free-Electron Laser: A Versatile Molecular Cutter for Analyzing Solid-State Biomacromolecules," *ACS Omega* **10(14)**, 13860–13867 (2025). DOI: 10.1021/acsomega.4c07531

T. KAWATE, H. A. SAKAUE, C. SUZUKI, N. NAKAMURA, K. TANAKA, E. NAKAMURA, K. FUJII, D. KATO, A. SASAKI and I. MURAKAMI, "Optical Design and Efficiency Measurement of an Extreme Ultraviolet High-Resolution Spectrometer for Unresolved Transition Array Research," *Rev. Sci. Instrum.* **96(4)**, 043512 (2025). DOI: 10.1063/5.0250066

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

スピン分解ARPES 装置については，自動化により利便性が飛躍的に向上した面内スピン測定に加え，現在実証中の面直方向スピン検出を早期に確立する。これにより，高効率かつ高分解能な全方位スピン分解ARPES 装置を完成させ，一般ユーザーへの本格的な共同利用を開始する。

また来年度は，実装間近である自動試料位置最適化機能を導入し，無人測定に向けた環境整備を進める。さらにAI によるスペクトル判定と試料自動搬送機構を統合した，次世代自律測定システムの構築に向けた技術開発に着手する。

光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

荒木　暢（主任研究員）（2023 年 1 月 1 日着任）

石原　麻由美（事務支援員）
加茂　恭子（事務支援員）
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) 軟Ｘ線分光顕微鏡と試料環境開発

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；クマムシの STXM 観察（ExCELLS 特別研究）；継続課題として，クマムシについて Scanning Transmission X-Ray Microscopy (STXM) による実験を行った。乾眠状態と活動状態のクマムシの超薄切片を作製し，炭素の K 吸収端のＸ線吸収分光イメージングデータを取得・解析を行った。その結果，特徴的な化学種について，その分布様が乾眠と活動状態で異なることを見出した。

夾雑環境生体試料の定量化学状態マッピング；上記のクマムシもこのテーマに関わる研究テーマであるが，共同研究として STXM の顕微分光技術による「生体分子の絶対定量マッピングとその単離核への適用」にも引続き参画した。

b) 軟Ｘ線分光顕微鏡と試料環境開発；液体試料セルの開発；Liquid TEM のために開発されたマイクロ流路液体セルの導入に向けて，海外メーカーと協議した。現在，仕様を決定してプロトタイプの購入を進めている。

軟Ｘ線直接検出のための 2 次元検出器の導入；コヒーレントイメージングの一つである Ptychography や Resonant Soft X-Ray Scattering（RSoXS）の実現に向けて 2 次元検出器を入手し，その既存 STXM 装置への実装のための検討を行い，設計を進めている。

NanoXAS 装置の導入・立ち上げ；Swiss Light Source（SLS）から無償譲渡された NanoXAS は AFM と STXM を合わせた装置であり，同一試料を二つ手法で観察することが可能で，金属コートしたティップによる光電子収量検出を目指した装置である。3 月に搬入・据付を行い，4–5 月に共同研究者の Watts 博士の協力を得て，基本的な動作確認までを完了した。

STXM 測定制御系の更新計画；10 年以上経過した Windows XP 上の制御系の更新を目指して，SLS などの協力も得て，新制御システムへの移行への準備を行った。STXM の各種ステージについては全ての動作を確認出来た。

B-1) 学術論文

C. O. M. MARIANO, K. H. CHEN, J. SHIUE, H. YUZAWA, T. ARAKI, K. T. ARUL, C. L. DONG, T. Y. YUNG, S. C. HSU, X. CAI, S. H. HSIEH and C. H. CHUANG, “Hexagonal BN Membranes Formation by Liquid-Phase Synthesis: Insights from Scanning Transmission X-Ray Microscopy,” *APL Mater.* **13(10)**, 101118 (2025). DOI: 10.1063/5.0289068

T. A. KUMARAVELU, C.-L. PAN, H.-Y. HUANG, H.-W. CHANG, C.-H. LEE, T. T. T. NGA, W.-C. CHOU, S.-C. HAW, T. ARAKI, T. OHIGASHI and C.-L. DONG, "Heterostructured MnO_2/CuO on Cu Wire for Electrochemical Energy Storage: Insights from Spectro-Microscopy," *Adv. Sustainable Syst.* **10(2)**, e00881 (2026). DOI: 10.1002/adsu.202500881

W.-T. CHEN, H. W. SHIU, Y.-X. CHEN, E. BATSAIKHAN, Y.-L. LAI, S. L. CHENG, T. ARAKI, J.-F. LEE, M. HAYASHI and Y.-J. HSU, "Highly Selective toward HER or CO_2RR by Regulating Cu Single and Dual Atoms on g-C_3N_4," *Adv. Funct. Mater.* **36(10)**, e14183 (2026). DOI: 10.1002/adfm.202514183

R. L. JONES, J. R. HAWKINGS, M. P. MEREDITH, M. C. LOHAN, O. W. MOORE, R. M. SHERRELL, J. N. FITZSIMMONS, M. KAZEMIAN, T. ARAKI, B. KAULICH and A. L. ANNETT, "Antarctic Glaciers Export Carbon-Stabilised Iron(II)-Rich Particles to the Surface Southern Ocean," *Nat. Commun.* **16(1)**, 5015 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-59981-y

B-4) 招待講演

荒木　暢,「軟Ｘ線顕微分光法による生体分子・金属の ラベルフリーマッピング」, 分子基盤研究部セミナー , 大府市, 2025年 5月.

荒木　暢,「Soft X-Ray Spectromicroscopy in Life Sciences at UVSOR」, 阪大生命機能研究科セミナー , 大阪, 2025年 4月.

荒木　暢,「Soft X-Ray Microscopy」, AOFSRR School 2025, つくば市, 2025年 10月.

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 (2025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，多くの物性は系特有の構造に由来する。偏光顕微鏡などでは観察が困難な数 nm から数百 nm 程度の構造を調べる手法として，Ｘ線小角散乱法（SAXS）が用いられ，多くの成果を挙げている。しかしながら，SAXS は試料の電子密度変調には敏感であるものの，電子密度が近似した多成分系における特定成分の構造や，ねじれ構造などの観測は容易ではない。これに対し，Ｘ線共鳴過程を利用すれば，元素・分子種・分子配向に対して選択性を有する散乱強度を得ることが可能となる。ただし，ソフトマターの主成分である軽元素（炭素，窒素，酸素など）の共鳴エネルギーは 280 eV ～ 540 eV 程度の軟Ｘ線領域にあり，従来の SAXS で使用される 10 keV 程度の硬Ｘ線とはエネルギー域が大きく異なる。そこで我々は，軟Ｘ線領域の共鳴散乱を観測するための手法として「共鳴軟Ｘ線散乱法（RSoXS）」の開発を行っている。具体的には，分子科学研究所の UVSOR（BL3U）および放射光実験施設 Photon Factory（BL7A）において装置開発を進め，高分子や液晶の構造解析に適用してきた。本年度は，入射エネルギーを走査しながら散乱画像を取得するプログラムを開発した。これにより，炭素・窒素・酸素の K 殻吸収端を利用し，有機薄膜太陽電池のバルクヘテロジャンクション構造や，多成分有機薄膜の成分別解析，キラル液晶のモルフォロジー解析を実施した。また，Photon Factory（BL7A）では，軟Ｘ線検出器の回転機構を活用し，反射率測定による膜厚評価が可能なシステムを構築した。

b) 軟Ｘ線を用いた生体試料内の元素および化学状態の可視化を実現すべく，密着型軟Ｘ線顕微鏡の開発を進めている。本手法では，シンチレーター上で細胞を培養し，厚さ 100 nm の Si_3N_4 メンブレンで封入した状態で軟 X 線を照射する。透過光像をシンチレーターによって可視光へ変換することで，細胞の XAFS イメージングを実現するものである。本年度は，ウシおよびトリの赤血球を対象として，試料内の鉄原子の分布計測に取り組んだ。具体的には，鉄の L 吸収端近傍の軟Ｘ線（700 ～ 740 eV）を用いて XAFS イメージング測定を実施した。鉄原子は炭素・窒素・酸素などの主要元素に比べると含有量は極めて少ないものの，鉄の L 吸収端における明瞭なスペクトルの取得に成功した。現在は，ピーク形状やピークエネルギーの解析から，鉄の価数状態に関する情報の抽出も進めている。

c) Ｘ線自由電子レーザー施設「SACLA」の BL1 において，液体試料を対象とした実験装置の開発を進めている。本年度は，ネバダ大学の Craig Schwartz 氏らと共同で，液体表面からの二次高調波発生（SHG）に関する実験を行った。

一般に，液体表面などの界面では空間対称性が破れているため，二次高調波が発生しうる。この二次高調波を観測することで，表面に対して極めて敏感な測定が可能となる。特に液体表面（気液界面）は重要な反応場であり，その化学状態を特定する手法の確立は極めて重要である。さらに，軟X線の共鳴過程を利用することで，表面に存在する特定の元素の化学状態を選択的に観測できるという利点がある。本実験では，SACLA BL1 から照射される高強度の軟X線パルスを，ジメチルスルホキシド（DMSO）水溶液の超薄膜フラットジェットに照射した。その透過光および発生した二次高調波を，ビームライン下流に設置した斜入射分光器によって分光観測した。

B-1) 学術論文

H. IWAYAMA, H. YUZAWA and M. NAGASAKA, "Phase-Dependent Intermolecular Interactions of Nematic Liquid-Crystal Molecules Probed by Carbon K-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy," *Phys. Rev. E* **113(1)**, 015413 (2026). DOI: 10.1103/17pr-b3wv

T. T. NGUYEN, T. HAYASHI, H. IWAYAMA and K. ISHIKAWA, "Valence Fragmentation Dynamics of a Promising Low Global Warming Etching Gas CF_3CHCF_2," *Sci. Rep.* **15(1)**, 9507 (2025). DOI: 10.1038/s41598-025-94119-6

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, S. WADA, H. OTA, H. IWAYAMA, K. SHIMIZU, M. FUJIMOTO and M. KATOH, "Attosecond Interferometry Experiments at the Tandem Undulator Beamline BL1U of UVSOR-III Synchrotron," *J. Phys.: Conf. Ser.* **3010(1)**, 012086 (2025). DOI: 10.1088/1742-6596/3010/1/012086

B-3) 総説，著書

A. -A. HAGHIGHIRAD, R. ICHIKAWA, T. MIYAMACHI, H. ISHII, S. AKAMATSU, E. MASUI, O. ISHIYAMA, H. IWAYAMA, E. NAKAMURA, T. YOKOYAMA, E. INAMI and T. YAMADA, "STM Imaging and Electronic Correlation in van der Waals Ferromagnet Fe_3GeTe_2," *Jpn. J. Appl. Phys.* **64(4)**, 040805 (2025). DOI: 10.35848/1347-4065/adc7be

B-4) 招待講演

岩山洋士,「Study of Soft X-Ray Nonlinear Optical Effects Using Ultrathin Liquid Jet Sheets」, 第 39回日本放射光学会, 仙台市, 2026年 1月.

H. IWAYAMA, "Development of Polymer Nanostructure and Chemical State Characterization Methods via Resonant Soft X-Ray Scattering and Reflectometry," Optics & Photonics Japan, Tokushima, December 2025.

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–).

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～ 2026 年 3 月 31 日）*)

倉橋　直也（特任助教）
杉山　研嗣（特別共同利用研究員）
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

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) 分子研シンクロトロン放射光施設 UVSOR-III BL4B を用いた高磁場極低温Ｘ線磁気円二色性法（XMCD）を共同利用公開し，様々な磁性薄膜の磁気特性検討について国内外との共同研究を広く実施している。また，磁性薄膜の原子層毎の磁性を解析するべく軟Ｘ線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) 遷移金属リン化物単結晶・薄膜の触媒活性・磁性に関する研究を行っている。

B-1) 学術論文

J. YAHIRO, S. MITSUI, H. SHIMURA, K. OZAKI, M. NAKADA, M. KUNISU, N. KURAHASHI, H. KIUCHI and Y. HARADA, “Hydrogen-Bonded Structure Analysis of Water Molecules in the Subnanoscale Pores of Reverse Osmosis Membrane,” *Langmuir* **41(45)**, 30160–30166 (2025). DOI: 10.1021/acs.langmuir.5c03228

Y. UEMURA, K. YAMAMOTO, Y. NIWA, T. BUTTIENS, H. ELNAGGAR, R. -P. WANG, M. LAZEMI, F. DE GROOT, T. KATAYAMA, M. YABASHI, C. J. MILNE and T. YOKOYAMA, “Electronic and Structural Relaxation of Photoexcited WO_3 Observed by Femtosecond Resonant X-Ray Emission Spectra,” *J. Phys. Chem. Lett.* **16**, 6138–6145 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpclett.5c01062

T. FUJINO, M. HISHIDA, M. ITO, T. NAKAMURA, M. ASADA, N. KURAHASHI, H. KIUCHI, Y. HARADA, K. HARANO, R. MAKIURA, K. J. TAKENO, S. YOKOMORI, H. OIKE and H. MORI, "Macroscopic Structural Transition of Nickel Dithiolate Capsule with Uniaxial Magnetic Anisotropy in Water," *Adv. Sci.* **12(29)**, 2504967 (2025). DOI: 10.1002/advs.202504967

S. NISHIMURA, N. KURAHASHI, S. SHIOMOTO, Y. HARADA and M. TANAKA, "Effects of Hydration Water on Bioresponsiveness of Polymer Interfaces Revealed by Analysis of Linear and Cyclic Polymer-Grafted Substrates," *Soft Matter* **20**, 9454 (2024). DOI: 10.1039/D4SM00977K

B-3) 総説，著書

A. -A. HAGHIGHIRAD, R. ICHIKAWA, T. MIYAMACHI, H. ISHII, S. AKAMATSU, E. MASUI, O. ISHIYAMA, H. IWAYAMA, E. NAKAMURA, T. YOKOYAMA, E. INAMI and T. YAMADA, "STM Imaging and Electronic Correlation in van der Waals Ferromagnet Fe_3GeTe_2," *Jpn. J. Appl. Phys.* **64(4)**, 040805 (2025). DOI: 10.35848/1347-4065/adc7be

横山利彦,「XAFS の理論」,「XAFS の基礎と応用」, 日本XAFS 研究会（太田俊明，朝倉清高，畑田圭介，朝倉博行，片山真祥，阿部　仁）編, 講談社, 2章, 1, 2, 4, 5節, 9–23, 60–75 (2025).

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–).

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).

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等などで成果を上げてきた。2011年度から，SPring-8 の超高輝度硬X線を利用した燃料電池の in situ 雰囲気制御型硬X線光電子分光の開発を行い，2017年度には完全大気圧での光電子分光観測に世界で初めて成功した。光電子分光は，燃料電池中の各構成成分の電位を電極なしに観測可能な有効手法であることを示し，今後もこれを中心課題に据えた研究を推進する。さらに，2013年度からは放射光やX線自由

電子レーザーを用いた（超）高速時間分解Ｘ線吸収法の開発的研究を行ってきた。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。2023年 8月 16日に着任した前島尚行特任助教は 2025年 4月に立命館大に助教として転出した。また，2022年 12月に着任した倉橋特任助教は 2025年 7月にQST NanoTerasu に転出した。2024年 10月から 2025年 9月においては，Ｘ線自由電子レーザー SACLA においてフェムト秒時間分解Ｘ線発光分光・高分解能XAFS の開発とこれを用いた光触媒酸化タングステンのポーラロン形成以前の電子励起状態の解析，ならびに，新報国マテリアル（株）との共同研究としてステンレスインバー合金の局所熱膨張に関する研究で成果が挙がった。後者に関してはさらに関連研究を進めているところである。

＊）2026 年 3 月 31 日定年退職

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（特任助教）
高橋　翔太（特任助教）
佐藤　宏祐（特任助教）
瀬戸　啓介（特任研究員）
林　仲秋（特任研究員）
酒井広文（特別協力研究員）
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）
髙原　裕大（大学院生）
手塚　玄惟（特別共同利用研究員）
北山　拓（特別共同利用研究員）
吉村　凜士（特別共同利用研究員）
土居　篤史（特別共同利用研究員）
天野　里咲（特別共同利用研究員）
殿元　裕介（特別共同利用研究員）
榊原　隆之（技術支援員）
浦野　宏子（事務支援員）
大久保　麻由佳（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：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計測への応用

d) 二次非線形極微分光法の開発と新奇ナノ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し，水素の生成やより高付加価値の分子への返還をエネルギー低消費型の温和な条件で実現する非熱的触媒技術は，持続可能な社会の実現に向けた重要課題である。一般に，酸化物光触媒に担持された金属助触媒は，光誘起電子を補足して還元反応（水素発生）を促進すると考えられてきた。これに対し，我々はメタン・水共存条件下でのオペランド分光により，金属助触媒そのものに注入された光誘起電子ではなく，酸化物と金属助触媒の間の複合界面，特に金属助触媒の縁部にトラップされた光誘起電子こそが高い反応活性を示すことを先駆的に明らかにし，さらに原子間力顕微鏡及びケルビンプローブ力顕微鏡を用いてその活

性電子の存在サイトを実空間で特定すること成功した［Sato *et al.,* , submitted，*J. Am. Chem. Soc.* **146**, 24800 (2024)］。また，担持する金属種及び担持量に応じて，メタン・水混合系における完全酸化生成物・部分酸化生成物の選択性や反応カイネティクスが大きく変調されることを見出した。これは，「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［Sato *et al., 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速度論的観点からさらに強く裏付ける成果である［*Chem. Commun.* **61**, 5942 (2025)］。さらに，近年注目される他の非熱的反応場として，直流電流印加触媒によるメタンドライリフォーミング反応にも着目し，オペランド赤外・可視・軟Ｘ線分光（UVSOR）を先駆的に展開した。その結果，半導体エレクトロニクス（電子･正孔）と固体イオニクス（カチオン－アニオンレドックス）の物理が融合したした新しい化学反応メカニズムを見出した［Sato *et al., J. Phys. Chem. Lett*. **16**, 12973 (2025)］。加えて，表面分子科学の観点からは，水酸基と分子状吸着水の存在量や水素結合状態を系統的に制御させたオペランド分光実験から，水酸基や強い水素結合ネットワークの存在が光触媒や直流電流印加触媒といった非熱的反応を阻害することを見出し，既存の元素戦略・材料戦略の限界を超えて水素発生反応の更なる活性向上を目指す「界面水エンジニアリング」の指針を提示・実証した［Lin *et al.*, *J. Phys. Chem. Lett*., submitted］。

b) 二つの光の差周波の唸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基盤として，時間的に非対称なパルス波形制御とフェムト秒精度の遅延制御を導入した新しい“時間－周波数領域ハイブリットコヒーレント界面非線形分光法”を開発した。本手法により，従来は電子共鳴やプラズモン共鳴を用いて信号増大しなければ観測が不可能であった表面吸着分子系のラマン振動モードを，汎用的かつ高感度に検出可能とした［T. Sugimoto *et al.*, *Nano Lett.*, submitted］。これにより，金属・絶縁体の表面分子系として Pt(111)・Au(111)・SiO_2(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.*, submitted，Seto *et al.*, in preparation，Takahara *et al.*, in preparation］。さらに，本分光手法において重要となる ω3 パルスの時間遅延をフェムト－ピコ秒の超高速領域で系統的に制御することにより，アモルファス材料に特有のブロードで重なり合った振動スペクトルを一意的に成分分解する新たな解析法の開発に成功し，非晶質材料の微視的構造解析と構造機能相関の解明に新しい道を拓いた［特許出願 2025-144216，Yoshizawa *et al.*, in preparation］。さらに本手法をアモルファス氷（H_2O・CO_2）に吸着した水素分子系の量子回転状態検出に発展させ，低次元束縛回転状態の直接観測に成功した［Oyamada *et al.*, in preparation，Furuya *et al.*, *Astrophys. J.* **1001**, 62 (2026)］。

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，空間反転対称性が界面に選択的な強力な計測法である。一方で，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内部の“埋もれた界面”には適用が難しいという本質的制約があった。この課題を克服するため，物質中透過に優れた二つの光の差周波の唸りで分子振動を共鳴励起（強制振動）し，それを第二高調波でコヒーレントにアップコンバートする四次非線形界面分光法を新たに開拓している［Kanai *et al.*, in preparation］。複数のフェムト秒パルスを用いる埋没界面の非線形分光においては，バルク物質由来の白色光の異常発生が界面信号観測の主要な妨害要因であったが，我々は相互位相変調効果に着目することでその妨害光の発生を抑制・制御する方法を新たに確立することに成功した［Kanai *et al*., *Opt. Lett*. **50**, 7087 (2025)］。更に，空間分散を有する広帯域フェムト秒パルスを集光した際の波面回転現象を新たに非線形分光に導入することで，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電極材料系の界面を高感度に観測することに成功すると共に，電気化学条件下での界面状態変化をリアルタイムに捉えるオペランド観測にも成果に先駆けて成功した。これにより，電極の劣化挙動の解析から電極の高耐久性の付与指針の提示や，非自明な固液界面分子ダイナミクスを発見するに至った［Kin *et al.*, in preparation，Kanai *et al.*, in preparation，*CLEO/Europe-EQEC*, *Optica*, EI–2.4. (2025)］。

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，空間反転対称性が破れた表面界面系における極性分子凝集系の機能発現のカギを握る up/down 配向構造を光の回折限界を超えたナノ空間分解能で観測可能とする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成功した［Sakurai *et al*., *Nano Lett*. **25**, 6390 (2025), Takahashi *et al*., *J. Phys. Chem. C* **130**, 373–385 (2026), *Phys. Rev. Lett.* **134**, 206901 (2025)］。更に，本手法の高度化として，STM の局所電場変調によりナノギャップ近接場和周波信号を飛躍的に増大する新技術を開発し［Takahashi *et al*., *Nature Commun*. **17**, 2012 (2026)］，加えてフェムト秒時間分解能を有する局所位相敏感ダイナミクス計測法の構築［Sakurai *et al*., *J. Chem. Phys.* **164**, 074202 (2026)，Featured Article］，及びより高次の非線形信号の探針増強検出に世界初で成功した［Sakurai *et al*., in preparation］。また，従来困難と考えられていた Pt や Ni などの非プラズモニック基板表面上の分子系に対しても本探針増強分光が可能性であることを実証し［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］，探針先端ので生じる極限的な光電場増強現象を分子の量子状態制御へ応用する新しいナノフォトニクス研究にも着手すると共に［Takahashi *et al*., in preparation］，通常の遠隔場分光では達成不可能であった高励起振動状態の生成にも成功した［Mochizuki *et al*., submitted］。

B-1) 学術論文

A. SAKURAI, S. TAKAHASHI, T. MOCHIZUKI, T. HIRANO, A. MORITA and T. SUGIMOTO, “Tip-Enhanced Sum Frequency Generation Spectroscopy Using Temporally Asymmetric Pulse for Detecting Weak Vibrational Signals,” *J. Chem. Phys.* **164(7)**, 074202 (2026). DOI: 10.1063/5.0310824

S. TAKAHASHI, A. SAKURAI, T. MOCHIZUKI and T. SUGIMOTO, “Giant Near-Field Nonlinear Electrophotonic Effects in an Angstrom-Scale Plasmonic Junction,” *Nat. Commun.* **17**, 2012 (2026). DOI: 10.1038/s41467-026-68823-4

S. TAKAHASHI, K. KUMAGAI, A. SAKURAI, T. MOCHIZUKI, T. HIRANO, A. MORITA and T. SUGIMOTO, “Tip-Enhanced Sum-Frequency Vibrational Nanoscopy beyond the Diffraction Limit,” *J. Phys. Chem. C* **130(1)**, 373–385 (2026). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c05411

T. KANAI, C. X. JIN, H. TSUNEKAWA, A. SAKURAI and T. SUGIMOTO, “Dramatic Enhancement of Supercontinuum Generation in H_2O by Non-Harmonic Two-Color Excitation,” *Opt. Lett.* **50(22)**, 7087–7090 (2025). DOI: 10.1364/OL.575734

H. TEDZUKA, H. SAITO, N. MATSUMOTO, M. NAGASAKA, H. SATO, Y. SEKINE and T. SUGIMOTO, “Nonthermal Catalytic Origin in DC-Enhanced Dry Reforming of Methane Unveiled by Multimodal Operando Analyses,” *J. Phys. Chem. Lett.* **16**, 12973–12981 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpclett.5c03159

A. SHIOTARI, S. LIU, G. TRENINS, T. SUGIMOTO, M. WOLF, M. ROSSI and T. KUMAGAI, “Picocavity-Enhanced Raman Spectroscopy of Physisorbed H_2 and D_2 Molecules,” *Phys. Rev. Lett.* **134(20)**, 206901 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevLett.134.206901

A. SAKURAI, S. TAKAHASHI, T. MOCHIZUKI and T. SUGIMOTO, “Tip-Enhanced Sum Frequency Generation for Molecular Vibrational Nanospectroscopy,” *Nano Lett.* **25(16)**, 6390–6398 (2025). DOI: 10.1021/acs.nanolett.4c06065

B-3) 総説，著書

T. SUGIMOTO, “Bridging Ideal Model Surfaces and Practical Material Surfaces: Unveiling Reaction Field of Photocatalytic Water-Splitting Hydrogen Evolution via Operando Infrared Spectroscopy,” *Vac. Surf. Sci.*, **68(4)**, 218–225 (2025). DOI: 10.1380/vss.68.218 (in Japanese)

B-4) 招待講演

杉本敏樹,「次世代表面・界面科学の開拓に向けたオペランド分光の新展開・非線形分光計測の限界突破」, 東京大学物性研究所短期研究会「現代表面科学の到達点とフロンティアを超えて」, 柏, 2026年2月.

杉本敏樹,「非線形分子分光計測の限界突破:遠隔場から近接場へ」, 表面界面スペクトロスコピー , 湘南, 2025年12月.

櫻井敦教,「探針増強非線形分光の開発と和周波発生分光への挑戦」, 新領域開拓課題「一分子の科学」合同合宿セミナー , 長柄町, 2025年10月.

櫻井敦教,「探針増強非線形分光の開拓と振動和周波発生分光法への展開」, 第9回日本表面真空学会若手部会研究会, つくば, 2025年10月.

杉本敏樹,「非線形分子分光分析の限界突破：近接場和周波発生振動分光の新展開」, 日本分析化学会第74年会, 札幌市, 2025年9月.

杉本敏樹,「探針増強型近接場非線形分光の新展開：次世代界面分子観測と巨大非線形ナノエレクトロフォトニクスの開拓」, 第28回プラズモニック化学シンポジウム, 東京, 2025年6月.

T. SUGIMOTO, “Innovations in Sum-Frequency Generation Vibrational Spectroscopy of Interfacial Molecular Systems: From Far-Field to Near-Field,” The 2nd International Symposium on Molecular Materials for Future International Workshop on Molecular Materials, Sendai (Japan), September 2025.

T. SUGIMOTO, “Advancing Second-Order Nonlinear Sum-Frequency Generation Vibrational Spectroscopy from Far-Field to Near-Field,” 15th Asia-Pacific Conference on Near-field Optics, Bali (Indonesia), August 2025.

T. SUGIMOTO, “Probing Interfacial Molecular Structures on Metal Surfaces: Advances in Sum-Frequency Generation from Far-Field to Near-Field,” The 82nd Okazaki Conference “Recent Advances and Perspectives of Interfacial Materials and Molecular Sciences Lead by Next-Generation Laser Techniques and Computational Science,” Okazaki (Japan), July 2025.

A. SAKURAI, “Tip-Enhanced Sum Frequency Generation for Detecting Weak Vibrational Signals Using a Temprally Asymmetric Pulse and Self-Heterodyne Detection,” Spins on Surfaces and Light-Matter Interaction—Satellite Workshop to STM’25, Seoul (Korea), July 2025.

B-6) 受賞，表彰

櫻井敦教, 原子・分子・光科学（AMO）討論会第12回ポスター発表賞 (2025).

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–).

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–2027年3月.

理化学研究所, 客員研究員, 2021年4月–2027年3月.（櫻井敦教）

総合研究大学院大学先端学術院, 講義「基礎光科学」, 2025年7月–2025年10月.

B-10) 競争的資金

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),「ゼプト秒原子・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).

科研費若手研究,「オペランド分光計測に基づく光触媒表面反応の微視的理解と機能創出」, 斎藤　晃 (2025年度–2027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」（代表者; 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)」（代表者；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).

科学技術振興機構経済安全保障重要技術育成プログラム（K Program）研究開発構想（個別研究型）「輸送機等の革新的な構造を実現する複合材料等の接着技術」,「革新的軽量構造を実現する複合材接着技術に関する研究開発とその学理構築」（代表者；岡部朋永), 杉本 敏樹（研究分担者) (2025年度–2030年度).

科学技術振興機構K Program（受託研究),「in-situ非線形分光による界面凝集構造評価」（代表者；田中敬二), 杉本敏樹（研究分担者) (2025年度–2026年度).

C)　研究活動の課題と展望

これまで当研究室では，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３つの課題に真正面から挑戦してきた。第一に,「プラズモン共鳴や電子共鳴に依存せず，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」，第二に「光の回折限界を超えたナノスケール空間で表面・界面分子系を観測する極微非線形分光法の開発」，第三に「オペランド分光法の開拓による光触媒微粒子をはじめとする複雑系・実材料系の表面界面分子科学の開拓」に取り組んできた。2018年5月の当研究室が発足以来，こ

れら３つの基軸に沿って進めてきた分野先導的研究は着実に成果として結実し，現在は，各分野においてさらなる飛躍につながる新現象の発見や新展開のフェーズに移りつつある。その進展は，競争的資金の獲得，国際的な成果発信，若手研究者の育成，共同研究の拡大という形で高いレベルで実を結んできている。

加えて，表面・界面分光分野における国際会議（岡崎コンファレンス）の企画・開催を通じて，国内外の第一線研究者と次世代研究者が集う議論と連携の場を形成し，日本発の研究潮流を発信する当該分野の拠点としての存在感を高めてきている。研究成果の創出にとどまらず，分野全体の発展を牽引する学術コミュニティ形成にも貢献している。

今後は，これまで独立に発展・挑戦してきた上記３つの研究機軸をより高度に融合し，従来の実験手法で開拓が困難であった未踏の表面・界面領域や実材料・複雑系界面における新たな分子科学の創成を力強く推進する。また，こうした先端的計測研究を産学官の緊密な連携のもとで発展・応用し，「表面界面エンジニアリング」および「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・研究潮流を作り出す。これにより，環境・エネルギー分野をはじめとする人類社会が直面する重要課題の解決に貢献していく。

電子物性研究部門

清水　亮太（教授）（2025 年 4 月 1 日着任）

LUSTIKOVA, Jana（特任講師）
野田　彩加（事務支援員）

A-1) 専門領域：無機固体化学，表面・界面科学，固体電気化学，マテリアルズインフォマティクス

A-2) 研究課題：

a) 金属水素化物における固体内水素の科学と荷電状態制御による新奇物性探索

b) 薄膜モデル界面を用いた全固体電池の動作機構解明

c) 実験自動・自律化による研究スタイルの革新

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 金属水素化物だけでなく，水素化物イオンに異種アニオンを複合した複合アニオン水素化物を薄膜状に非平衡合成し，その基礎学理構築と物性の探索を行っている。とりわけ，固体内の水素の荷電状態・結合状態に着目し，現時点で，光・熱による可逆的な物性変調を実現し，さらなる展開に向けて，電場や電気化学的な応答も含めた複合外場応答を探索している。

b) 大気非曝露系における薄膜型全固体 Li 電池の作製と評価を進めてきたが，現在その対象をフッ化物イオン電池に拡張し，その動作機構の解明と電池特性の飛躍的な向上を目指している。電極･固体電解質の薄膜合成技術を確立し，多層膜化によるデバイス動作を進めている。

c) 薄膜材料を対象とし，機械学習とロボット技術を組み合わせた「物質合成・評価・次の候補予測」のサイクルを自律的に繰り返す装置を開発してきた。現在は自動化の技術を拡張し，様々な評価系への導入と統合，新しい合成系の開発を進めている。

B-1) 学術論文

T. OZAWA, R. SHIMIZU, I. HARAYAMA, T. HITOSUGI, D. SEKIBA and K. FUKUTANI, “Observation of Proton Tunneling Correlated with Phonons and Electrons in Pd,” *Sci. Adv.* **11(47)**, 1–7 (2025). DOI: 10.1126/sciadv.ady8495

C. ZHU, S. KOBAYASHI, Y. SUGISAWA, F. WEBER, K. H. LIN, M. KITAMURA, K. HORIBA, H. KUMIGASHIRA, K. NISHIO, R. SHIMIZU, D. SEKIBA, T. HITOSUGI and R. BERGER, “Space Charge Layer Evolution in All-Solid-State Batteries Probed via Operando Kelvin Probe Force Microscopy and Nuclear Reaction Analysis,” *ACS Nano* **19(45)**, 39062–39075 (2025). DOI: 10.1021/acsnano.5c10125

R. UEDA, T. SUDARE, R. SHIMIZU, K. NISHIO, R. NAKAYAMA, Y. MIURA, K. KANEKO, N. YAMADA and T. HITOSUGI, “Anatase TiO_2(112) Epitaxial Thin Films Grown by Mist Chemical Vapor Deposition,” *Cryst. Growth Des.* **25(21)**, 9086–9091 (2025). DOI: 10.1021/acs.cgd.5c00986

N. KISHI, S. SHINOHARA, Y. SUGISAWA, K. YAMAMOTO, S. KOBAYASHI, R. SHIMIZU, T. HITOSUGI and D. SEKIBA, "Application of ^{7}Li(p, α)^{4}He NRA for Thin Film Type All-Solid-State Li Battery; Reinvestigation of ^{7}Li(p, α)^{4}He Cross-Section and Optimization of Experimental Arrangement," *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **566**, 165787 (2025). DOI: 10.1016/j.nimb.2025.165787

K. NISHIO, A. AIBA, K. TAKIHARA, Y. SUZUKI, R. NAKAYAMA, S. KOBAYASHI, A. ABE, H. BABA, S. KATAGIRI, K. OMOTO, K. ITO, R. SHIMIZU and T. HITOSUGI, "A Digital Laboratory with a Modular Measurement System and Standardized Data Format," *Digital Discovery* **4(7)**, 1734–1742 (2025). DOI: 10.1039/d4dd00326h

S. KOBAYASHI, N. ZETTSU, K. NISHIO, R. SHIMIZU, T. IMABORI, Y. SAITO, K. TESHIMA and T. HITOSUGI, "Solid Thin-Film Battery Using a Densely Packed $LiNi_{0.5}Mn_{1.5}O_4$ Crystal Layer," *ACS Omega* **10(16)**, 16073–16078 (2025). DOI: 10.1021/acsomega.4c09393

R. ZHENG, S. KOBAYASHI, M. OGAWA, H. KATSURAGAWA, Y. WATANABE, J. DENG, R. NAKAYAMA, K. NISHIO, R. SHIMIZU, Y. TATEYAMA, M. MORIYA and T. HITOSUGI, "Investigating the Interface of $Li\{N(SO_2F)_2\}(NCCH_2CH_2CN)_2$ Molecular Crystal Electrolytes for 5 V Class Solid-State Batteries," *ACS Appl. Mater. Interfaces* **17(14)**, 21951–21957 (2025). DOI: 10.1021/acsami.4c22076

T. SUDARE, H. XU, R. NAKAYAMA, R. UEDA, R. NAITO, R. SHIMIZU, Y. MIURA, K. KANEKO, N. YAMADA and T. HITOSUGI, "Extremely Low Electrical Contact Resistance at the Interface of Carbon-Fiber-Based Gas Diffusion Layer and Anatase TiO_2 Thin Films," *ACS Appl. Electron. Mater.* **7(7)**, 2785–2792 (2025). DOI: 10.1021/acsaelm.4c02236

B-3) 総説，著書

安藤康伸，清水亮太（分担執筆）,「計測の自動化で拓ける世界」,「走査プローブ顕微鏡／分光法　第 2 版（表面分析技術選書）」,（公社）日本表面真空学会編, 2.4 章 (2025).

B-4) 招待講演

清水亮太,「ラボオートメーションの動向と勘所～表面・真空関連の実例を交えて～」, 表面科学セミナー 2026「実践！インフォマティクスと自律計測の基礎と応用」, 東京, 2026 年 3 月.

清水亮太,「物質科学における オートメーション・オートノマス型実験：現状とクラウドラボ化への展望」, 共創戦略統括本部企画「ラボオートメーションの現在と未来」, 岡崎, 2026 年 2 月.

清水亮太,「大学共同利用機関における AI・ロボット駆動型ラボシステムとは」, JAIMA–CORE 共催シンポジウム 2026, オンライン開催, 2026 年 2 月.

清水亮太,「化学のスマートラボ化：入門編」, CSJ 化学フェスタ 2025, 東京, 2025 年 10 月.

R. SHIMIZU, "Hydrogen Charge-State Tuning in Metal-Hydride Thin Films and Application of an Autonomous Thin-Film Growth System," TACT2025 International Thin Films Conference, Taipei (Taiwan), October 2025.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

データ駆動型材料科学研究会講師 (2026–2027).

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R073先端計測分析技術の未来創成委員会委員 (2025–).

次世代ナノプローブ技術委員会庶務幹事 (2023–).

理科教育活動

「科学三昧in あいち 2025」指導助言 (2025).

その他

講演／パネルディスカッション「オートノマスラボラトリGの成果」JASIS（分析機器･科学技術総合展）2025「MEEP公開シンポジウム」(2025).

B-10) 競争的資金

科研費学術変革領域研究(A),「イオン流の非平衡性と集団運動の理解による材料デザイン変革」（代表者：一杉太郎），清水亮太（研究分担者）(2024年度–2028年度).

科研費学術変革領域研究(A),「イオン渋滞学に基づく新物質創製と機能開拓」（代表者：小林玄器），清水亮太（研究分担者）(2024年度–2028年度).

科研費基盤研究(B),「エピタキシャルフッ化物薄膜電池のモデル界面を活用したフッ素の輸送機構解明」, 清水亮太 (2022年度–2025年度).

科学技術振興機構革新的GX技術創出事業（基金）（GteX受託研究),「ハイスループット成膜装置の立ち上げ」（代表者：齋藤寛之），清水亮太（研究分担者）(2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

2025年4月に着任し，新しくラボを立ち上げている。研究活動a) 水素化物関係においては，小スケールでも物質合成が可能であり物性探索を進めている。水素は電子数が極めて少ないためプローブするのが難しい元素であり，局所構造や結合状態の解明に向けては大規模施設利用における共同研究者との連携を進めている。研究活動b) フッ化物イオン電池においては，大気非曝露が大原則であり，試料の搬送システムやデバイスのパターニングなどを一から再構築している。湊丈俊主任研究員と所内連携を進めており，電池の評価系の構築や，走査型プローブ顕微鏡を駆使した電極反応のin-situ微視的観察を進める予定である。研究活動c) 実験自動・自律化においては，共同研究先となる他機関の大型設備の開発に参画しており，水素吸蔵材料等のハイスループット探索を進めている。自動化が進むことで，原材料を莫大に消費することにも直面しており，少量の原料による大規模実験が可能な合成・評価系の構築を今後進めなければならない。

取り扱う物質系や評価系は大気環境では安定に存在できないものも多く，真空やグローブボックス環境などによる操作を必要とするものが大半である。このことは，直接的な実験操作ではなく，間接的あるいは遠隔的な実験操作が多いことも意味しており，自動化プロセスを導入する契機であると考えている。実験規模に見合ったコストによるプロセスの自動化と，各操作をシームレスに接続した「ボトルネックのない全自動化」を目指す。

篠北　啓介（准教授）（2025 年 1 月 1 日着任）

坂田　諒一（助教）
呉　柊斗（大学院生）
野田　彩加（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) 原子層ナノ材料の精密作製技術をさらに発展させた。PPC や PVC などのポリマーを用いた積層技術を新たに確立し，試料作製の精度と再現性を大幅に向上させた。また，SHG マッピング測定に偏光測定機能を追加し，試料の対称性評価の高度化を実現した。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，原子層材料への分子吸着手法を習得し，対称性制御の新たなアプローチを確立した。さらに，メゾスコピック計測研究センターの熊谷崇准教授グループに高品質な試料を提供し，共同研究を推進した。加えて，クリーンルームにおけるナノ構造のシリコン基板上への作製技術を確立し，ナノ構造と原子層材料を組み合わせた研究の基盤を整えた。

b) シリコンナノ球と原子層材料を組み合わせたハイブリッド構造の SHG 特性を明らかにした。さらに，シリコンナノ球をヘテロ構造に応用し，新たな光学特性の開拓を進めている。また，分子を吸着させた二層遷移金属ダイカルコゲナイド試料の光学測定を行い，分子吸着によって反転対称性が破れ，光学応答が大幅に変化することを見出した。この結果は，分子吸着による対称性制御が非線形光学応答の制御に有効であることを示しており，新たな光機能創出への道を拓くものである。

B-1) 学術論文

S. ASADA, K. SHINOKITA, K. WATANABE, T. TANIGUCHI and K. MATSUDA, “Nonlinear Photovoltaic Effects in Monolayer Semiconductor and Layered Magnetic Material Hetero-Interface with P- and T-Symmetry Broken System,” *Nat. Commun.* **16(1)**, 4827 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-58918-9

F. YANG, W. IDEHARA, K. TANAKA, K. SHINOKITA, H. ZHAO and K. MATSUDA, “Autonomous Robotic Mechanical Exfoliation of Two-Dimensional Semiconductors Combined with Bayesian Optimization,” *ACS Nano* **19(45)**, 39005–39013 (2025). DOI: 10.1021/acsnano.5c08516

H. WANG, K. SHINOKITA, K. WATANABE, T. TANIGUCHI, S. KONABE and K. MATSUDA, “Direct Identification of Valley Coherence and Its Manipulation in Monolayer Two-Dimensional Semiconductor,” *ACS Nano* **19(23)**, 21484–21491 (2025). DOI: 10.1021/acsnano.5c02659

Y. XIANG, K. SHINOKITA, K. WATANABE, T. TANIGUCHI and K. MATSUDA, “Magnetic Brightening and Its Dynamics of Defect-Localized Exciton Emission in Monolayer Two-Dimensional Semiconductor,” *Sci. Adv.* **11(23)**, eadr5562 (2025). DOI: 10.1126/sciadv.adr5562

D. MURASE, K. SHINOKITA, Y. WAKAFUJI, M. ONODERA, T. MACHIDA, K. WATANABE, T. TANIGUCHI, J. BI, Z. ZHOU, S. ZHAO and K. MATSUDA, "All Dry Transfer Processes Utilizing Au Exfoliation for Predetermined Shapes of Transition Metal Dichalcogenide," *Langmuir* **41(16)**, 10099–10107 (2025). DOI: 10.1021/acs.langmuir.4c04629

B-4) 招待講演

篠北啓介,「ナノ構造制御で拓く原子層半導体の光科学」, 2025年度日本分光学会北海道支部シンポジウム, 北海道大学, 札幌, 2026年3月.

篠北啓介,「二次元半導体の光機能制御：モアレ励起子からナノフォトニクス増強」, 2025年度「一分子の科学」研究会, 理化学研究所鈴木梅太郎記念ホール, 和光, 2026年2月.

篠北啓介,「ファンデルワールスエンジニアリングによる二次元半導体の光機能制御」, 日本物理学会第80回年次大会, 東広島, 2025年9月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第38回マイクロプロセス・ナノテクノロジー国際会議（MNC2025）論文委員会委員 (2025).

理科教育活動

出前授業「進路講演会」愛知県立岡崎北高等学校 (2025).（坂田諒一）

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–2025年度).

科研費基盤研究(B),「モアレ超構造による双極子集団制御と新規量子光学現象の開拓」, 篠北啓介 (2025年度–2027年度).

C) 研究活動の課題と展望

a) これまでに確立した積層技術と分子吸着手法をさらに発展させ，原子層ヘテロ構造の対称性をより精密に制御する技術の構築を目指す。特に，分子吸着による反転対称性の制御を体系的に理解し，モアレ周期と対称性を設計した構造の創製に取り組む。また，クリーンルームで確立したナノ構造作製技術を活かし，シリコンナノ構造と原子層材料を組み合わせた新たなハイブリッド構造の作製手法を開拓する。

b) ナノ構造と遷移金属ダイカルコゲナイドを組み合わせ，従来にない光学応答の発現を目指す。シリコンナノ構造による光の閉じ込め効果を活用した非線形光学応答の増強に取り組むとともに，分子吸着による対称性制御を非線形光学測定と組み合わせ，対称性の破れに起因する新奇な光物性の探索を進める。これらを通じて，原子層材料を基盤とした新たな光機能の創出につなげる。

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) 新規 ^{1}H 同種核間磁気双極子相互作用デカップリング法の開発

b) マジック角試料回転下での新規同種核間磁気双極子相互作用リカップリング法の開発

c) 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) 高分解能 ^{1}H スペクトルを得るための新規 ^{1}H 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ている。昨年度までとは異なり，オフレゾナンス照射に基づく既存の ^{1}H 同種核間磁気双極子相互作用デカップリング法に関して，位相変調を適用したモジュールを組み合わせたスーパーサイクルにより，既存の同手法の問題点であったオフセット依存的不完全性の消去を実現した。

b) ^{13}C 核のような希薄核に関して，連続的に位相変調させた低出力パルスを高速 MAS 下で回転周期に同期して照射することにより，同種核間磁気双極子相互作用をリカップリングする新規手法の開発を行い，理論的計算まで完了した。

c) 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。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。昨年度開発を開始した 2.5mm 試料管用独自スピニングモジュールの最適化と並行して，1.9mm 試料管用独自スピニングモジュールの開発を行った。昨年同様，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。

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，最難関のスピニ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 の回転モジュールの開発をほぼ完了し，最適化中である。今後 1.9mm，および 1.3mm の試料管，さらに 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ー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，国際共同研究を開始したが，国際共同研究代表者の他機関への転出により中止を余儀なくされた。2025年度に入り国内共同研究先を確保した。

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本年度はこのサイバー攻撃に用いられている無線電波（同定，解析済み）を遮断するシールドルームを導入した。3日間にわたる作業の最終日に業者と西村双方で性能検証の測定をしたが，室内で3.152 GHzの強い電波が双方の機器で観測された。この為，シールドルーム内への盗聴，盗撮機器の設置，またはシールドルームの一部破壊のどちらかが疑われた。この行為には入室が必要であり，監視カメラの録画映像の改ざんが必要である。同ファイルの専門家による解析により，これまでの犯罪行為の存在も含めて明らかになると期待している。

4-7　生命・錯体分子科学研究領域

生体分子機能研究部門

加藤　晃一（教授）（2008 年 4 月 1 日着任）

立尾　清悟（特任助教）
林　成一郎（特任研究員（IMS フェロー））
矢木　真穂（特別訪問研究員）
谷中　冴子（特別訪問研究員）
沈　晋補（特別共同利用研究員）
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）
米山　樹（特別共同利用研究員）
梶田　大起（特別共同利用研究員）
高木　励（特別共同利用研究員）
近藤　幸子（特任専門員）
磯野　裕貴子（技術支援員）
新美　しおり（技術支援員）
上條　真弘（技術支援員（派遣））
穂積　知佳子（技術支援員（派遣））
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) 生命が多様な機能を発現する背景には，分子間相互作用や化学修飾によって形成される動的な分子秩序が存在する。本研究グループでは，このような生命分子の「動秩序」がどのように創発し生体機能を支えているのかを明らかにすることを目的として研究を推進した。本年度は特に，糖鎖修飾および抗体分子を中心とする糖タンパク質の構造ダイナミクスに着目し，NMR 分光法，質量分析，分子動力学シミュレーションなどを統合した解析を進めた。抗体 IgG の Fc 領域に関する研究では，糖鎖構造の違いが抗体の構造ダイナミクスおよび免疫エフェクター機能に与える影響を解析した。安定同位体標識 NMR 分光法と分子動力学シミュレーションを組み合わせた解析により，Fc 糖鎖のガラクトシル化が C_H2 ドメインの構造安定性を高め，Fcγ 受容体や補体系タンパク質との相互作用に関わる分子ダイナミクスを制御することを明らかにした。また，IgG1 Fc 領域のメチル基 NMR シグナルの部位特異的帰属を確立するとともに，天然同位体存在比の抗体試料にも適用可能な NMR 解析基盤を構築した。さらに，メチオニン酸

化に伴う局所構造変化を NMR と質量分析の統合解析により残基レベルで解明し，抗体医薬の高次構造評価および品質管理に資する分析手法を提示した。抗体分子の構造形成機構に関する研究として，IgG1 ヒンジ領域の構造機能解析も進めた。ヒンジ領域の Pro230 残基の欠失により重鎖間相互作用が失われ，半分子抗体（half-IgG）が形成されることを見出し，この構造変化の分子機構と Fcγ 受容体依存的機能への影響を明らかにした。これらの成果は，抗体分子の柔軟な構造制御機構の理解と次世代抗体医薬設計の基盤となるものである。糖鎖の構造ダイナミクスに関しては，分子動力学シミュレーションと NMR 分光法を組み合わせた解析を行い，糖鎖のコンフォメーション変化を支配する分子内相互作用を明らかにした。さらに非線形相関解析を導入することにより，グリコシド結合の二面角や水素結合ネットワークが糖鎖構造の動的安定性に与える影響を定量的に解析し，糖鎖機能の分子基盤となる構造ダイナミクスの理解を進めた。また，モデル生物として広く用いられるラットを対象として血清糖タンパク質の網羅的グライコミクス解析を行い，血清 *N*- グリカン構造の時間変動および性差を明らかにした。特に *O*- アセチル化シアル酸を含む特徴的な糖鎖構造が存在することを示すとともに，グライコプロテオミクス解析によりこれらの糖鎖を担う糖タンパク質群を同定し，生理条件による糖鎖動態の変化に関する基盤データを提供した。さらに，細胞内オルガネラの構造と分子局在を三次元的に解析するため，免疫電子顕微鏡法と連続切片走査電子顕微鏡を組み合わせた三次元免疫電子顕微鏡法を開発した。本手法によりゴルジ体マトリックスタンパク質の三次元局在を可視化し，オルガネラ構造と分子分布を統合的に解析するための新しい手法基盤を確立した。加えて，国内外の共同研究を通じて糖鎖や糖タンパク質の機能解析を推進し，以下の成果を得た。

①配位ケージの内部空間を利用して糖鎖がタンパク質活性部位に結合する現象を明らかにし，分子空間による糖鎖認識制御の新しい概念を提示した。

②酵素的プレニル化反応を利用して抗菌ペプチドの化学空間を拡張する手法を開発し，生理活性ペプチドの機能改変の可能性を示した。

③糖鎖硫酸化酵素欠損マウスを用いた研究により，脊髄損傷後の運動機能回復に糖鎖修飾が関与することを明らかにした。

以上の研究により，糖鎖修飾や化学修飾，タンパク質間相互作用によって形成される生命分子の動的秩序の理解が進展するとともに，生命分子ネットワークが創発する高次機能の分子基盤の解明が進んだ。

b) 生命が極限環境においてどのように存続し機能しうるのかという根源的な問いに迫ることを目的として，極限環境において生命活動を司る分子集団の構造・動態・機能の解析を進めた。本年度は特に，糖鎖修飾およびタンパク質集合体形成に着目し，極限環境生物，微生物，さらに巨大ウイルスを対象として，生命分子の構造多様性と適応機構の解明に取り組んだ。クマムシの乾眠に関連する糖鎖修飾の研究では，*N* 型糖鎖を対象とした網羅的なグライコミクス解析により，クマムシにおいて paucimannose 型糖鎖が主要な糖鎖構造として存在することを明らかにした。さらに，非還元末端に Fucα1,3-GlcNAc を有する特徴的な糖鎖構造を同定し，これらの糖鎖修飾が酸化ストレス防御や細胞外マトリックス関連タンパク質に付加されていることを示した。これらの結果は，極限環境耐性に関わる分子機構において糖鎖修飾が重要な役割を果たしている可能性を示唆するものである。また，アンモニア酸化古細菌 *Nitrososphaerota* に関する研究では，グライコプロテオミクス解析を通じて，S-layer タンパク質を中心とした *N* 型糖鎖の全体像を明らかにした。その結果，キトビオースコアを有する新規 *N*- グリカン構造を同定するとともに，近縁種間で糖鎖修飾様式が大きく異なることを見出し，極限環境微生物の細胞表層構造の多様性と環境適応機構に関する新たな知見を得た。さらに，巨大ウイルスの糖鎖修飾機構の解明を目的として，*Mimiviridae* および *Marseilleviridae* に属するウイルスの比較グライコミクス解析を行った。その結果，これらの巨大ウイルスは宿主の分

泌経路に依存した *N* 型糖鎖修飾システムに依存するのではなく，独自の糖鎖生合成機構を利用して系統特異的な *O* 型糖鎖を形成していることを明らかにし，ウイルス糖鎖の進化的多様性に関する新たな知見を提示した。加えて，国際宇宙ステーションにおける微小重力環境を利用したタンパク質集合体形成研究を行い，家族性アルツハイマー病関連変異体である Tottori 型 Aβ の線維形成過程を解析した。その結果，微小重力条件下ではアモルファス凝集体の形成が抑制され，構造解析に適した線維が形成されることを見出した。クライオ電子顕微鏡解析により複数のプロトマー構造を有する線維構造を決定し，アミロイド線維形成の自由エネルギー景観の理解に新たな知見をもたらした。これらの研究により，極限環境において生命活動を支える分子集団の構造と機能に関する理解が進展するとともに，生命分子の適応機構や進化的多様性を理解するための基盤的知見が得られた。

B-1) 学術論文

S. YANAKA*, Y. KOSEKI, Y. MIYANOIRI, T. YAMAZAKI, T. TERAUCHI, D. KANEKO, Y. ISONO, K. TOMITA, S. KONDO, M. ONITSUKA, M. YAGI-UTSUMI, H. YAGI, A. ISHII-WATABE and K. KATO*, "Unlabeled NMR Approach with Site-Specific Methyl Assignments for Structural Evaluation of the IgG1 Fc Region," *J. Am. Chem. Soc.* **148(8)**, 8374–8382 (2026). DOI: 10.1021/jacs.5c18997

M. YAGI-UTSUMI, S. YANAKA, N. HASHII, K. TOMITA, T. MISAWA, Y. DEMIZU, A. ISHII-WATABE and K. KATO, "Stereochemical and Structural Characterization of Methionine Oxidation in the IgG1 Fc Region by Integrated NMR and LC-MS Analysis," *Anal. Chem.* **98(7)**, 5316–5322 (2026). DOI: 10.1021/acs.analchem.5c06092

D. KOGA, S. KUSUMI, H. YAGI and K. KATO, "A novel 3D Immuno-Electron Microscopy and Its Application to the Golgi Apparatus," *Biomed. Res.* **47**, 25–34 (2026). DOI: 10.2220/biomedres.47.25

Y. KOSEKI, Y. YAMAGUCHI, M. AOYAMA, K. HIRAKA, M. TADA, A. KODAMA, A. SENOO, A. ISHII-WATABE, T. UCHIHASHI, K. MURATA, S. UCHIYAMA, K. KATO, S. YANAKA and J. M. M. CAAVEIRO, "Key Role of Pro230 in the Hinge Region on the Architecture and Function of IgG1," *J. Med. Chem.* **69**, 3902–3914 (2026). DOI: 10.1021/acs.jmedchem.5c02419

J. SHIM, C. HOZUMI, M. KUROGOCHI, M. YAGI-UTSUMI, J. FURUKAWA, M. TAKEMURA, H. YAGI and K. KATO, "Comparative Glycomic Analysis of Mimiviridae and Marseilleviridae Uncovers Host-Related and Lineage-Specific Glycosylation," *J. Biochem.* **179**, 117–126 (2025). DOI: 10.1093/jb/mvaf072

M. MOROZUMI, T. OZAKI, K. NISHITSUJI, Y. TAKEDA-UCHIMURA, A. MATSUMOTO, S. ITO, S. IMAGAMA, N. ISHIGURO, H. YAGI, K. KATO, T. O. AKAMA, T. KOSUGI, S. MARUYAMA, K. KADOMATSU, S. D. ROSEN, L. J. NOBLE-HAEUSSLEIN and K. UCHIMURA, "Enhanced Locomotor Recovery in Mice Lacking GlcNAc6ST1 and GlcNAc6ST4 Following Spinal Cord Injury," *Life Sci. Alliance* **8**, e202503469 (2025). DOI: 10.26508/lsa.202503469

S. YANAKA, Y. SAKAE, Y. MIYANOIRI, T. YAMAGUCHI, Y. ISONO, S. KONDO, M. IWASAKI, M. ONITSUKAH, H. YAGI and K. KATO, "Exploring Glycoform-Dependent Dynamic Modulations in Human Immunoglobulin G *via* Computational and Experimental Approaches," *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **122**, e2505473122 (2025). DOI: 10.1073/pnas.2505473122

H. YAGI, S. KONDO, R. MURAKAMI, R. YOGO, S. YANAKA, F. UMEZAWA, M. YAGI-UTSUMI, A. FUJITA, M. OKINA, Y. HASHIMOTO, Y. HOTTA, Y. KATO, K. NAKAJIMA, J. FURUKAWA and K. KATO, "Temporal and Sex-Dependent *N*-Glycosylation Dynamics in Rat Serum," *Int. J. Mol. Sci.* **26(15)**, 7266 (2025). DOI: 10.3390/ijms26157266

H. OZAWA, A. MIYATA, S. HAYASHI, N. MIYOSHI, K. KATO, S. ITO and D. FUJINAMI, "Expanding the Chemical Space of Antimicrobial Peptides via Enzymatic Prenylation," *J. Am. Chem. Soc.* **147(29)**, 25642–25651 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c06850

M. YAGI-UTSUMI, S. YANAKA, R. N. BURTON-SMITH, C. SONG, C. GANSER, C. YAMAZAKI, H. KASAHARA, T. SHIMAZU, T. UCHIHASHI, K. MURATA and K. KATO, "Microgravity-Assisted Exploration of the Conformational Space of Amyloid β Affected by Tottori-Type Familial Mutation D7N," *ACS Chem. Neurosci.* **16(14)**, 2682–2690 (2025). DOI: 10.1021/acschemneuro.5c00217

K. KATO, T. WATANABE and T. YAMAGUCHI, "Deciphering Glycan Dynamics through Nonlinear Correlation Analysis," *Chem. Pharm. Bull.* **73(7)**, 639–644 (2025). DOI: 10.1248/cpb.c25-00243

H. YAGI, T. SAITO, S. Y. GUU, N. YAMAKAWA, S. SHIMAMURA, S. KONDO, M. YAGI-UTSUMI, K. TAKAI, J. FURUKAWA, Y. GUÉRARDEL, K. H. KHOO, K. ARAKAWA and K. KATO, "Uncommon *N*-Glycan Structures in Anhydrobiotic Tardigrades," *Mol. Cell. Proteomics* **24(6)**, 100979 (2025). DOI: 10.1016/j.mcpro.2025.100979

S. NAKAGAWA, H. YAGI, T. SUYAMA, S. SHIMAMURA, S. YANAKA, M. YAGI-UTSUMI, S. KATO, M. OHKUMA, K. KATO and K. TAKAI, "Exploring Protein *N*-Glycosylation in Ammonia-Oxidizing *Nitrososphaerota archaea* through Glycoproteomic Analysis," *mBio* **16(6)**, e03859-24 (2025). DOI: 10.1128/mbio.03859-24

T. NAKAMA, M. TADOKORO, R. EBIHARA, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and M. FUJITA, "Proximity-Induced Saccharide Binding to a Protein's Active Site within a Confined Cavity of Coordination Cages," *Chem. Sci.* **16(23)**, 10549–10554 (2025). DOI: 10.1039/d5sc00782h

A. KUMAGAI, K. MAYANAGI, S. HAYASHI, S. NAKANO, S. ITO and D. FUJINAMI, "In Vitro Amyloid Formation by a Bacteriocin From *Bifidobacterium longum* subsp. *infantis*," *Proteins: Struct., Funct., Bioinf.* **93(11)**, 1953–1961 (2025). DOI: 10.1002/prot.70002

D. KOHDA, S. HAYASHI, K. FURUITA and C. KOJIMA, "Projected Volume Method for Accurate Measurement of Cross-Peak Intensity in Two-Dimensional NMR Spectra," *Magn. Reson. Chem.* **64(6)**, 555–567 (2026). DOI: 10.1002/mrc.70095

B-3) 総説，著書

加藤晃一，木川隆則,「AI for Science 時代における NMR 研究基盤の再構築」, *Bulletin of the Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan*, **15**, 93–98 (2026).

H. YAGI, S. TATEO and K. KATO, "Regulation of Glycan Modification by Glycosyltransferases in the Golgi Apparatus," in *The Golgi Network II*, A. Nakano and J. Saraste, Eds., Subcellular Biochemistry, Springer (Cham), **111**, 251–267 (2026). DOI: 10.1007/978-3-032-16833-7_11

加藤晃一,「糖鎖のコンフォメーション解析 (1)」, 未来を創るグライコサイエンス――我が国のロードマップ 2025――（日本糖鎖科学コンソーシアム（JCGG）編）, 248–250 (2026).

加藤晃一，藤田盛久，矢木宏和，立尾清悟，山﨑貴大，木塚康彦,「糖鎖生合成アトラス」, *細胞* , **57**, 925–929 (2025).

H. YAGI, S. KONDO and K. KATO, "Structural Analysis of Glycans Based on HPLC Mapping," *Glycoforum* **28**, A18 (2025). DOI: 10.32285/glycoforum.28A18

K. KATO, S. YANAKA and T. YAMAGUCHI, "The Synergy of Experimental and Computational Approaches for Visualizing Glycoprotein Dynamics: Exploring Order within the Apparent Disorder of Glycan Conformational Ensembles," *Curr. Opin. Struct. Biol.* **92**, 103049 (2025). DOI: 10.1016/j.sbi.2025.103049

K. KATO, S. YANAKA and H. YAGI, "Glycoprotein Preparation by Heterologous Expression," in *Methods in Molecular Biology, NMR of Glycoproteins*, J. Jiménez-Barbero and O.Millet, Eds., Humana; New York, **2961**, 53–67 (2025). DOI: 10.1007/978-1-0716-4722-6_4

B-4) 招待講演

加藤晃一,「ゴルジアトラスに基づく糖鎖修飾プログラムの解読」, 第 666 回難研セミナー第 244 回難治疾患共同研究拠点セミナー第 4 回学際領域展開ハブ形成プログラムセミナー , 東京, 2025 年 12 月.

矢木真穂,「タンパク質の配置を自在にデザインしたい！」, 第 1 回生体分子設計研究会, 東京, 2025 年 12 月.

谷中冴子,「抗体分子の柔構造に学ぶ『柔らかさ』が拓く機能デザイン」, 第 1 回生体分子設計研究会, 東京, 2025 年 12 月.

矢木真穂,「クマムシ由来CAHS1 による非膜オルガネラ形成と乾燥耐性機構の構造・機能的理解」, 第 48 回日本分子生物学会年会, 横浜, 2025 年 12 月.

矢木真穂,「アミロイドβ タンパク質の線維形成の分子機構」, 大阪大学蛋白質研究所セミナー , 吹田, 2025 年 12 月.

加藤晃一,「構造糖鎖生物学の探究：NMR 分光法と計算科学の統合による抗体機能の解明」, 日本分光学会NMR 分光部会「集中講義」, 東京, 2025 年 10 月.

矢木真穂,「動的溶液環境におけるアミロイドβ タンパク質の分子集合」, 第 63 回日本生物物理学会年会, 奈良, 2025 年 9 月.

加藤晃一，矢木宏和,「血液凝固因子の分泌を司るパスポート配列のバイオ医薬生産への応用可能性」, 第 25 回日本蛋白質科学会年会, 姫路, 2025 年 6 月.

谷中冴子，加藤晃一,「NMR を用いた血清環境における抗体の相互作用解析」, 第 25 回蛋白質科学会年会, 姫路, 2025 年 6 月.

S. YANAKA and K. KATO, "The Role of Glycans in Antibody Function: Structural Dynamics and Functional Implications," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), Honolulu (USA), December 2025.

K. KATO, M. YAGI-UTSUMI and S. YANAKA, "Advancing glycoprotein structural analysis: Integrating NMR and computational approaches for therapeutic antibodies," Pacifichem 2025, Honolulu (USA), December 2025.

M. YAGI-UTSUMI, S. G. ITOH, H. OKUMURA, K. YANAGISAWA, K. KATO and K. NISHIMURA, "Double-layered structure of amyloid-β assemblage on GM1 clusters: A catalytic platform for fibrillization in Alzheimer's disease," Pacifichem 2025, Honolulu (USA), December 2025.

K. KATO, "Exploring the Golgi landscape to decipher the glycosylation program," International Symposium on Cellular biology, Tokyo (Japan), September 2025.

K. KATO, "Toward Deciphering the Blueprint of Protein Glycosylation: From Molecular Dynamics to the Sub-Golgi Landscape," AMED International Symposium "Proteostasis in Biology and Medicine," Kyoto (Japan), August 2025.

K. KATO, "Modulating Glycan Dynamics to Enhance Molecular Recognition and Therapeutic Potential," 40th Biennial Meeting of the Spanish Royal Society of Chemistry, Bilbao (Spain), July 2025.

K. KATO, "Decoding Glycan-Driven Dynamics in Antibodies: NMR-Based Structural Insights into Therapeutic Glycoproteins," Joint meeting of 11th Asia Pacific NMR (APNMR) & 30th National Magnetic Resonance Society (NMRS), Pune (India), June 2025.

K. KATO, S. YANAKA and M. YAGI-UTSUMI, "Computational and experimental approaches for antibody dynamics and interactions with amyloid fibrils," Korea-Japan International Symposium on Protein Science, Himeji (Japan), June 2025.

B-6) 受賞，表彰

加藤晃一, 日本薬学会 2026年度日本薬学会賞 (2026).

Shim Jinbo, 矢木宏和, 黒河内政樹, 矢木真穂, 古川潤一, 武村政春, 加藤晃一, 第 26回日本糖質学会ポスター賞 (2025).

矢木真穂, 第 6回日本核磁気共鳴学会進歩賞 (2025).

西崎竜平, 令和 7年度日本生化学会中部支部支部長賞 (2026).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本バイオイメージング学会評議員 (1995–)，理事 (2012–)，会長 (2025–).

日本生化学学会評議員 (2002–).

日本糖質学会評議員 (2003–)，理事 (2013–2025)，監事 (2025–).

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–)，執行役員 (2024–).

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–).

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 (2023–2029).

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–).

京都大学エネルギー理工学研究所在り方検討委員会委員 (2025–2026).

学会誌編集委員

Glycoconjugate Journal, Editorial board member (2009–).

Glycobiology, Editorial board member (2011–).

Scientific Reports, Editorial board member (2015–).

International Journal of Molecular Sciences, Editorial board member (2017–2025).

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–.

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–2026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–2025年度).

AMED 次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発事業,「国際競争力のある次世代抗体医薬品製造技術開発／革新的な次世代抗体医薬品製造基盤技術の開発（分子中に秘められた新規相互作用部位の探査と改変を通じた次世代抗体創成の基盤構築)」（代表者：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)」（代表者；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）

原島　崇徳（助教）
大友　章裕（特別訪問研究員）
BOUISSETE, Tom（インターンシップ）
MEKSERIWATTANA, Wid（インターンシップ）
山本　真由子（技術支援員）
山地　つぐみ（技術支援員）
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，1 分子計測，タンパク質工学，DNA ナノテクノロジー

A-2) 研究課題：

a) 人工 DNA 金ナノ粒子モーターの運動機構の解明，高性能化，高機能化
b) 回転イオンポンプ V-ATPase の可逆的エネルギー変換の実証とイオン選択性の改変
c) リニア分子モーターキネシンの全原子分子動力学シミュレーションによる機構解明
d) 高速 AFM の時間分解能の向上と回転分子モーター F_1-ATPase への適用
e) ２つのキチン結合ドメインを持つリニア分子モーター海洋細菌キチナーゼの 1 分子計測
f) 金属錯体形成駆動の DNA ナノチューブの成長・崩壊ダイナミクスの解析
g) 生細胞内 Na^+ 濃度計測プローブの開発と網羅的 1 細菌計測

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) DNA 修飾金ナノ粒子，RNA 修飾ガラス基板，RNA 分解酵素で構成される人工分子モーター，DNA 金ナノ粒子モーターの幾何学的速度論シミュレーションを開発して運動速度, 運動距離, 運動一方向性の粒径依存性を網羅的に調べ，運動速度が粒径の大きさに依存しない機構，運動距離，運動一方向性に依存する機構を解明し，性能のさらなる改善に必要な因子を特定した（Harashima T. *et al*., *bioRxiv* 2026）。さらに，金ナノロッドの利用によるモーター本体への形状異方性の導入や, DNA ナノテクノロジーを利用した一次元 RNA 修飾 DNA ナノチューブレールの構築に成功し，DNA 金ナノ粒子モーターの完全な一方向性運動を達成することに成功した（Harashima T. *et al.*, Unpublished）。
b) 回転型イオンポンプ V-ATPase（V_oV_1）は，ATP 加水分解反応を触媒する V_1 とイオン輸送を担う V_o の２つの回転分子モーターの複合体である。村田和義博士（ExCELLS 特任教授）との共同研究により，V_o の回転子のイオン結合部位を改変してイオン選択性を Na^+ から水素イオン（H^+）に変えることに成功し，イオン選択性の構造的基盤を解明した（Otomo A. *et al.*, Unpublished）。また，本変異体を活用し，V_o の固定子の２つのイオン透過チャネルの Na^+ 親和性に非対称性が存在することを特定し，電気化学ポテンシャルに抗う能動輸送の構造的基盤を解明した（Otomo A. *et al.*, Unpublished）。さらに野生型では，ATP アナログの AMPPNP を結合した全体構造の分解能の改善に成功し，V_1 のヌクレオチド結合構造および V_o の準安定中間構造を明らかにした（Lee Y. E. *et al.*, Unpublished）。
c) 鄭誠虎博士（熊本大学教授）との共同研究により，スーパーコンピュータ富岳を用いた二量体リニア分子モーターキネシンの全原子分子動力学シミュレーションに取り組み，微小管から解離した後足が微小管に結合した前足の右側を追い越すことを原子レベルで初めて明らかにした（Chong S. H. and Iino R., *Biophys. J.* 2026）。

d) 安藤敏夫博士（金沢大学特任教授）との共同研究により，高速原子間力顕微鏡（高速 AFM）装置の改善で 1 分子計測の時間分解能を 10 倍向上することに成功し，回転分子モーター F_1-ATPase に適用して中間構造の同定と寿命の計測に成功した（Fukuda S. *et al.*, *bioRxiv* 2025）。

e) 中村彰彦博士（静岡大学教授）との共同研究により，２つのキチン結合ドメインを持つリニア分子モーターである海洋細菌由来キチナーゼの生化学計測と 1 分子計測を行い，低濃度キチンに対する親和性と分解効率が向上していることを明らかにし，栄養源が希薄な海洋における細菌の生存戦略の一端を解明した（Tanimoto H. *et al.*, *bioRxiv* 2026）。

f) 竹澤悠典博士（芝浦工業大学教授）との共同研究により，DNA タイルの末端に C–C ミスマッチを導入して Ag^+ との錯形成で形成する DNA ナノチューブを設計した。全反射蛍光顕微鏡を用いた単一ナノチューブ観察により，チューブの形成（重合と連結）と崩壊（脱重合と破断）のダイナミクスを明らかにした（Harashima T. *et al.*, Unpublished）。

g) 蓑島維文博士（大阪大学准教授）との共同研究により，細胞内に共有結合で固定・保持される蛍光性 Na^+ 指示薬を開発および個々の大腸菌内の Na^+ 濃度のハイスループット計測に成功し，大腸菌内 Na^+ 濃度の分布と恒常性を明らかにした（Otomo A., Minoshima M. *et al.*, Unpublished）。

B-1) 学術論文

T. MATSUZAKI, T. SAEKI, F. YAMAZAKI, N. KOYAMA, T. OKUBO, D. HOMBE, Y. OGURA, Y. HASHINO, R. TATSUMI-KOGA, N. KOGA, R. IINO and A. NAKAMURA, "Development and Production of Moderate-Thermophilic PET Hydrolase for PET Bottle and Fiber Recycling," *ACS Sustainable Chem. Eng.* **13(27)**, 10404–10417 (2025). DOI: 10.1021/acssuschemeng.5c01602

A. OTOMO, L. G. HUI ZHU, Y. OKUNI, M. YAMAMOTO and R. IINO, "ATP Synthesis of *Enterococcus hirae* V-ATPase Driven by Sodium Motive Force," *J. Biol. Chem.* **301(4)**, 108422 (2025). DOI: 10.1016/j.jbc.2025.108422

B-4) 招待講演

飯野亮太,「生体・人工分子モーターの性能解析と性能向上」, 理研「一分子の科学」研究発表会, 和光, 2026 年 2 月.

飯野亮太,「自律的に働く分子機械の性能を考える」, ASMat キャンプ 2025, 熱海, 2025 年 12 月.

T. HARASHIMA, "Geometry engineering of DNA artificial molecular motor for perfect unidirectionality," The 63rd Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Nara, 2025年9月.

T. HARASHIMA, "Rational engineering for high-performance DNA artificial molecular motor," The 25th Annual Meeting of the Protein Science Society of Japan, Himeji, 2025年6月.

R. IINO, "Energy conversion mechanism of an ATP-driven rotary ion pump *Enterococcus hirae* V-ATPase," International Workshop on Bacterial Flagella and BioMachineries, Taoyuan (Taiwan), March 2026.

R. IINO, "Rational engineering of high performance artificial molecular motors," East Asian Single Molecule Biophysics Symposium 2025 (EASMB2025), Singapore (Singapore), November 2025.

R. IINO, "Single-molecule imaging and engineering of molecular motors," Colloquium at Institute of Atomic and Molecular Sciences (IAMS), Academia Sinica, Taipei (Taiwan), October 2025.

R. IINO, "Rational Engineering of High Performance Artificial Molecular Motors," Telluride Workshop on Protein Dynamics, Telluride (USA), July 2025.

R. IINO and T. HARASHIMA, "Rational engineering of high performance artificial molecular motors," 20th Asian Chemical Congress (20ACC), Bangkok (Thailand), June 2025.

B-5) 特許出願

登録

特許第 7732636 号,「タンパク質，ポリヌクレオチド，組換えベクター，形質転換体，ポリエチレンテレフタレート分解用組成物，及びリサイクル品の製造方法」, 中村彰彦，飯野亮太（静岡大学，自然科学研究機構）, 2021 年．（登録日 2025 年 8 月 25 日）

B-6) 受賞，表彰

原島崇徳, 第 20 回わかしゃち奨励賞基礎科学研究部門優秀賞 (2026).

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).

日本生物物理学会副会長，理事 (2025–2027).

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).

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

岡崎市小中学校理科作品展「未来の科学者賞」選考委員 (2024–2025).

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理数探究基礎講師 (2025).（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, 講義「構造生体分子科学」, 2025 年 4 月– .

総合研究大学院大学先端学術院, 講義「構造生体分子科学」, 2025 年 12 月 .（原島崇徳）

B-10) 競争的資金

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).

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).

(公財)立松財団A1. 特別研究助成,「世界最速の人工分子モノレールの設計と可視化」, 原島崇徳 (2025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),「DNA 人工分子モーターの一次元レール開発」, 原島崇徳 (2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

ナノサイズの分子モーターは，人間が作ったマクロなモーターと比べてはるかに小さく，ブラウン運動や構造変化の活用等，異なる作動原理で動く。今後も引き続き，天然の生体分子モーターの1分子計測や構造解析でその作動原理を調べるだけでなく,天然に存在しない人工分子モーターを積極的につくることでその設計原理を理解する。また,現在，機械工学やロボット工学の専門家との共同研究を推進中であり，ナノサイズの分子機械とマクロな機械に共通する原理や相違点を明らかにする。これらの取り組みで，天然の生体分子モーターを凌駕する性能や機能を持つ人工分子モーターの創製，および，ナノ～マクロのスケールを飛び越えた分子モーターシステムの創製に繋げる。例えば，ヘテロな塩基配列を有するDNA 金ナノ粒子モーターを二量体化して外部からのDNA 添加で運動速度や運動方向の制御を可能にし，人工分子モーターの動きの変化に基づく高感度センシングを可能にする。また，天然分子では困難な分岐型，網目型DNA ナノチューブレールネットワークを構築し，分子モーターの経路選択に基づく論理回路計算を可能にする。

猪股　晃介（特任准教授）（2025 年 10 月 1 日着任）

福富　幸代（事務支援員）

A-1) 専門領域：NMR 分光学，生化学，生物物理学，タンパク質科学

A-2) 研究課題：

a) In-cell NMR による哺乳動物細胞内におけるタンパク質の拡散解析

b) 細胞内タンパク質を標的とした室温超編極 NMR 法の確立

c) クマムシの乾燥耐性に関わるタンパク質 CAHS1 の in-cell NMR 解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) In-cell NMR を用いて哺乳動物細胞内におけるタンパク質の並進拡散係数（*D*）および回転相関時間（τ_c）を直接計測し，細胞特有の高粘性・高分子密度環境がこれらの動態に及ぼす影響を定量的に明らかにすることを目的とする研究を進めた。本年度は，細胞内におけるタンパク質の並進･回転拡散を評価するための技術基盤の確立を行なった。モデルタンパク質としてユビキチン変異体（L8A，I44A，V70A，D77）を，モデル細胞として HeLa 細胞を用いて，in-cell NMR による並進拡散係数（*D*）および回転相関時間（τ_c）の定量を試みた。その結果，並進拡散係数（*D*）については希薄溶液中（約 2.2×10^{-10} m^2/s）と比較して，細胞内ではおよそ 4.9×10^{-11} m^2/s と約 1/4 まで大きく低下することが確認された。一方，回転相関時間（τ_c）については，希薄溶液中に比べ細胞内では τ_c が増大していることを示唆する初期データが得られているものの，高い定量性を確保することができていない。現在，測定条件や解析パラメータ等を最適化することで解決を試みている。

b) In-cell NMR の高感度化および計測時間の大幅な短縮を狙った室温超編極 NMR 法の確立を目的とする研究を，スピン生命科学コア・スピン細胞生物学研究グループの宮ノ入客員准教授とともに進めた。本年度は，光増感剤を用いる光誘起動的核分極（Photo-CIDNP）に着目し，LED 光源で室温・溶液条件下にラジカルペアを生成して芳香族アミノ酸残基等の信号を高感度化できる特長を活かしつつ，装置メーカーと共同で「LED 照射 NMR システム」を構築し，バイオリアクター型 in-cell NMR へ接続可能な測定基盤を整備した。その実証として，均一 ^{13}C，^{15}N 標識 α シヌクレイン中の Tyr 残基観測で信号感度の 2–3 倍向上を確認した一方，偏極寿命が短いという課題も明確化した。このボトルネックに対し，縦緩和時間（T_1）の短さを RO-SAIL アミノ酸標識で改善する方針を立て，Photo-CIDNP 感度が 100 倍程度向上すること，さらに HeLa S3 抽出液中でも成立することを示し，細胞内適用へ向けた実行可能性を高めた。

c) クマムシの乾燥耐性に関与するタンパク質 CAHS1 について，in-cell NMR 解析に向けた予備検討を実施した。使用した細胞はクマムシ由来細胞ではなく HeLa 細胞（ヒト培養細胞）である。これは，①現時点でクマムシの株化細胞が樹立されていないこと，② HeLa 細胞内においても，クマムシ細胞内と同様に乾燥耐性獲得に関連する CAHS1 の凝縮体形成が確認されていること，以上の 2 点を踏まえた選択である。本年度は，in-cell NMR 計測に供する試料調製条件を確立した。さらに，確立した条件下で ^{15}N 標識 CAHS1 を用いた in-cell NMR 測定を試みたところ，in-cell NMR スペクトルでは多くのピークが顕著な線幅増大により消失した。一方，in-cell NMR 実験後に調製した細胞破砕液（破砕に伴い希釈された溶液）の NMR スペクトルでは，多数のピークが検出された。以上の 2 種のスペクトルの比較から，CAHS1 は HeLa 細胞内で高次構造体（あるいは凝集・凝縮体）を形成している可能性が示唆された。この結果は，既報・事前情報とも整合的であり，今後の in-cell NMR 解析の方向性を支持する所見である。

B-8) 大学等での講義，客員

大阪大学蛋白質研究所, 招へい准教授, 2025年6月–2026年3月.

理化学研究所, 客員研究員, 2026年2月–2027年3月.

C) 研究活動の課題と展望

本年度の課題は，(a)in-cell NMR 拡散解析において並進拡散係数Dの再現性・汎用性を確立するとともに，回転相関時間τ_cを高い定量性で評価できる測定･解析条件（パルス系列，温度制御，フィット手順）の整備を進めること，(b)室温超編極（Photo-CIDNP）で偏極寿命の短さを克服し，in-cell NMR で感度向上と測定時間短縮を両立する実装技術を完成させること，(c)CAHS1 で線幅増大により信号が消失する問題に対し，観測可能な条件設定の確立と測定プロトコル最適化に注力することである。今後は(a)モデル系を複数タンパク質へ拡張しつつ，同一細胞種内の細胞状態（温度，pH，ATP 枯渇など）変化に伴う動態を定量比較し，細胞内粘性・相互作用の寄与を切り分ける。(b)RO-SAIL 標識等によるT_1改善を軸に，抽出液から生細胞へ段階的に実証し，バイオリアクター型 in-cell NMR へ統合し，再現性検証を強化する。(c)測定後の破砕液解析も併用して解釈を確立し，乾燥耐性機構の分子像に迫る。

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））
星野　竜青（大学院生）
山田　裕輝（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きがけて成功した。
b) 新しいピンサー錯体の合成方法論を確立し，それらピンサー錯体分子が自発的に集積することで形成する分子集合体の三次元高次構造に立脚した新しい触媒機能システムの開拓に注力しつつある。
c) 水中での反応加速，連続フローシステムに依る効率化，ピンサー錯体触媒化学における新しい反応形式などに立脚して各種反応の ppm-ppb 触媒化を進めつつある。
d) 超高触媒活性を示す単原子触媒種の発生・発現を見出し，その構造評価および有機分子変換触媒としての適用一般性を確立しつつある。
e) 遷移金属錯体を用いた光触媒反応による新しいカルボニル化合物の活性化と，それに立脚した分子変換反応の開発を遂行しつつある。特に光触媒によるカルボニル基の極性転換に成果を上げつつある。
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に成功した。

B-1) 学術論文

H. OHTA, H. GODA, H. FUJINAGA, Y. SUENAGA, K. KANBARA, A. TAZAWA, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI and M. HAYASHI, “Synthesisof Oligo(Triarylphosphine Sulfide)s for Stabilizing Pd Nanoparticles and Modulating Selective Semihydrogenation of Terminal Aryl Alkynes,” *Asian J. Org. Chem.* **14(8)**, e00361 (2025). DOI: 10.1002/ajoc.202500361

B-4) 招待講演

魚住泰広,「新たな機能性触媒との出会い：不斉触媒，水中機能性触媒，ナノ触媒，光触媒」, 第 37回万有札幌シンポジウム , 札幌, 2025年 7月 .

魚住泰広,「水中機能性高分子担持触媒の創製」, 京都大学物質エネルギー化学学術講演会 , 京都, 2025年 6月 .

B-5) 特許出願

WO2025142930 (A1), “Polycyclic Compound, Method for Reducing Organic Compound, and Method for Coupling Organic Compound,” S. OKUMURA and Y. UOZUMI (National Institute of Natural Sciences), 2024年 .

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 (2023–2027).

学会誌編集委員

SYNLETT 誌アジア地区編集主幹 (2002–)，編集委員 (2025).

SYNFACTS 誌編集委員 (2005–).

B-8) 大学等での講義，客員

京都大学大学院工学研究科 , 非常勤講師 , 2025年 5月 –2026年 3月 .

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。

椴山　儀恵（准教授）（2014 年 6 月 1 日着任）

大塚　尚哉（助教）
松雪　洋恵（特任研究員）
寺島　悠人（大学院生）
中井　愛里（技術支援員）
原田　晋子（技術支援員（派遣））
高野　幸太（技術支援員（派遣））
牛田　妃菜乃（事務支援員（派遣））

A-1) 専門領域：有機合成化学

A-2) 研究課題：

a) 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
b) ハロゲン結合を活用する高分子触媒反応場の開発
c) 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
d) 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
e) 化学反応空間の構築と有機合成反応開発への応用
f) 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

a) 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。
b) 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。
c) エチニルビスピリジンを配位子とするヨードニウム錯体やジアリールヨードニウムトリヨージドの合成と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。椴山グループでは，自動有機合成システムとして Cole-Parmer 社の Integrity-10 に後処理，サンプル搬送，得られた生成物の分析･同定，単離精製機能を連携導入した。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，撹拌速度，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。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と拡張が可能である。さらに，遠隔操作に対応し，データ駆動型研究と本装置の融合研究を精力的に推進している。

B-1) 学術論文

N. OHTSUKA, M. Z. MOHD ARIS, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Data-Guided Rational Design of Additives for Halogenation of Highly Fluorinated Naphthalenes: Integrating Fluorine Chemistry and Machine Learning,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **28**, 6917–6927 (2026). DOI: DOI: 10.1039/d5cp03554f

M. KATO, F. NAKASHIMA, N. OHTSUKA, Y. NISHIOKA, A. IZUMISEKI, T. FUJINAMI, S. OISHI, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Data-Integrated Elucidation of Structure–Activity Relationships toward the Rational Design of Perfluoroiodoarene-Based Halogen-Bond Donor Catalysts,” *J. Org. Chem.* **91(5)**, 2088–2104 (2026). DOI: 10.1021/acs.joc.5c02704

K. TAKEDA, N. OHTSUKA, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Machine Learning-Guided Synthesis of Prospective Organic Molecular Materials: An Algorithm with Latent Variables for Understanding and Predicting Experimentally Unobservable Reactions,” *Artif. Intell. Chem.* **3(2)**, 100096 (2025). DOI: 10.1016/j.aichem.2025.100096

B-4) 招待講演

椴山儀恵,「AI Co-Scientist との協働による 有機合成研究の新展開をめざして」, 令和 7 年度第 2 回合成横断技術領域ワークショップ, 愛知県岡崎市, 2026 年 3 月.

椴山儀恵,「夢の「自動有機合成 AI ロボット」を実現するために―有機合成の技・知を拡張し誰もが分子を創る世界へ―」, 第 3 回研究者をつなぐ研究フォーラム～ライフサイエンスの交差点～, オンライン開催, 2025 年 8 月.

大塚尚哉,「多環芳香族分子の全フッ素ハロゲン化戦略に基づく新規π共役分子の創製」, デジタル有機合成若手セミナー , 岩手県盛岡市, 2025 年 6 月.

大塚尚哉,「多環芳香族分子の全フッ素ハロゲン化戦略に基づく新規π共役分子の創製」, 第2回東海ハロゲン科学研究会, 静岡県静岡市, 2025年6月.

N. MOMIYAMA, "The Reactivity Parameters-enabled Chemical Space of Catalysis: Design of Mono-Pyridyl Iodine(I) Complex Catalysts," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), Honolulu, Hawaii (USA), December 2025.

N. MOMIYAMA, "The Chemical Reactivity-Based Space for Organic Synthesis," The 20th Asian Chemical Congress (20ACC) or ASIACHEM2025, Bangkok (Thailand), June 2025.

B-6) 受賞，表彰

寺島悠人, 日本化学会東海支部長賞 (2026).

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-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」（代表者；椴山儀恵), 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（代表者；大嶋孝志), 椴山儀恵（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」（代表者；鈴木敏泰), 椴山儀恵（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」, 椴山儀恵（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。2025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，1報の論文を*ChemRxiv*で公開し，国際誌に学術論文3報が掲載された。また，執筆途中の論文が多数あり，2026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）
平田　直（特任専門員）
吉田　瑠（大学院生）
加納　春華（大学院生）
小藤　夏生（大学院生）
中野　さち子（技術支援員（派遣））
谷分　麻由子（事務支援員）

A-1) 専門領域：有機合成化学，構造有機化学

A-2) 研究課題：

a) 3 次元幾何構造をもつ機能性有機構造体の合成と機能

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) ２つの平面をねじった形をもつ非平面芳香族分子は，それぞれの平面が分子間で π–π スタックすることで 3 次元的なつながりをもった固体構造を取りうることが知られている。3 次元 π–π スタック構造は配向制御の必要のない半導体材料として有用である一方で，ねじれ構造にはひずみがかかるために平面分子と比較して合成が困難な場合が多い。我々は，チオフェン環およびベンゼン環からなる平面分子に対して合成最終段階で立体障害となるメチル基を導入することで，簡便にねじれ構造を作ることに成功した。得られた分子はねじれ構造によって２つの π 平面が異なる向きに向いており，その中でもジチエノチオフェン誘導体は結晶中で 3 次元的な π–π スタックが見られた。OFET 特性評価によって，この分子が半導体として利用可能であることを明らかにした。本成果は，EurekAlert!，日経テックフォーサイトなど複数のメディアで取り上げられた。

我々は，２つのメシチル（2,4,6- トリメチルフェニル）基を有するテトラシアノジヒドロジピラジノピラジンが，15 種類の有機溶媒とクラスレート結晶を形成することを発見した。理論計算によると，これらのホストネットワークは π–π 相互作用と CN–π 相互作用によって構築されていると示唆された。これらの分子間相互作用は比較的弱いため，ホストネットワークはゲスト分子に応じて柔軟に変化することができる。ゲストフリーの結晶は，溶媒蒸気の吸着・脱着を介した結晶間相転移によって，クラスレート結晶へと可逆的に転移することができる。

B-1) 学術論文

K. NORO, A. TANI, T. TADOKORO, T. HARIMOTO, K. SUGAWARA, T. SUZUKI, T. ONO and Y. ISHIGAKI, “Dual-State Mechano- and Electrochromic Responses Enabled by Sterically Strained Diazaanthraquinodimethanes,” *J. Org. Chem.* **90(36)**, 12727–12733 (2025). DOI: 10.1021/acs.joc.5c01545

M. NAGASE, R. YOSHIDA, S. NAKANO, T. HIROSE and Y. SEGAWA, "Synthesis, Structure, and Properties of Twisted π-Conjugated Molecules Featuring Three-Dimensional π–π Interactions in Solid States," *Chem. Commun.* **61(60)**, 11187–11190 (2025). DOI: 10.1039/D5CC02387D

T. HARIMOTO, M. KIKUCHI, T. SUZUKI and Y. ISHIGAKI, "Diverse Redox-Mediated Transformations to Realize the para-Quinoid, σ-Bond, and ortho-Diphenoquinoid Forms," *Nat. Commun.* **16(1)**, 4088 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-59317-w

K. WATANABE, H. SUGIYAMA and Y. SEGAWA, "Diverse Tetracyanodihydrodipyrazinopyrazine Clathrate Crystals Assembled from Weak Intermolecular Interactions," *CrystEngComm* **27(21)**, 3552–3559 (2025). DOI: 10.1039/D5CE00289C

B-7) 学会および社会的活動

理科教育活動

三重県立津高等学校SSH 課題研究に係る指導・助言 (2025).

三重県立津高等学校 SSH 課題研究に係る指導・助言 (2025).（張本　尚）

B-8) 大学等での講義，客員

名城大学理工学部, 非常勤講師, 2025年 9月–2026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),「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–2025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,「計算化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).

矢崎科学技術振興記念財団一般研究助成,「パドル型π共役分子を用いた高機能有機半導体の開発」, 瀬川泰知 (2025年度).

科研費基盤研究(B),「トポロジカルπ共役化学の 3次元空間展開」, 瀬川泰知 (2025年度–2028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).

科研費若手研究,「3D 集積を実現するπ共役多面体分子の創製」, 張本　尚 (2025年度–2026年度).

C)　研究活動の課題と展望

2025年 4月~2026年 3月の 1年間で，2報の学術論文および 2報のプレプリントを発表した。これらは我々が目指すπ共役ネットワーク構築法の開発や，電子回折結晶構造解析の構造有機化学分野への応用，さらにこれらから派生したクラスレート結晶の発見や非平面π共役半導体分子の開発など多岐に渡る。複数のメディアで取り上げられるなど注目度の高い成果となっている。

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）

HE, Wei（特任助教）
増田　道子（事務支援員）
野川　京子（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) 次世代型結晶スポンジ法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 結晶スポンジ法とは，結晶スポンジと呼ばれる結晶の中で解析対象となる化合物を整列させ，X線回折法によって構造解析を行なう手法である。結晶スポンジ法を用いることで，結晶化しない化合物であってもX線回折法による構造解析が可能になるといった利点があるものの，解析できる化合物は主に分子量 300 程度の疎水性化合物に限定されるという問題があった。そこで本研究課題では，この問題を克服するために，次世代型の結晶スポンジ（第二世代結晶スポンジ）の開発を行なった。第二世代結晶スポンジは，優れた分子捕捉力を持つかご型分子を結晶内に固定するという新しい設計に基づいて開発された。さらに第二世代結晶スポンジを使用した多数の構造解析によって，従来は解析困難であった分子量 1,000 を超える中分子や，高極性分子の構造解析が可能になったことを立証した。

B-1) 学術論文

K. IIZUKA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, “Medium-Sized-Molecule Encapsulation in Coordination Cages *via* Solid-State Mechanochemistry,” *J. Am. Chem. Soc.* **148(4)**, 4588–4598 (2026). DOI: 10.1021/jacs.5c20185

R. EBIHARA, T. NAKAMA, K. MORISHIMA, M. YAGI-UTSUMI, M. SUGIYAMA and M. FUJITA, “Monomer Isolation from Oligomeric Proteins within Coordination Cages to Study Interface Ligand Binding,” *J. Am. Chem. Soc.* **148(1)**, 1872–1880 (2026). DOI: 10.1021/jacs.5c19487

K. TSUKADA, F. SATO, T. MATSUYAMA, R. MATSUDA, T. OZAKI, Y. MORISHITA, S. FURUMURA, Y. HOMMA, H. SEKIYA, A. SUGAWARA, M. KUBOTA, T. MITSUHASHI, Y. YASUNO, T. SHINADA, R. NAGATA, T. KUZUYAMA, T. TANIGUCHI, M. FUJITA, M. UCHIYAMA and T. ASAI, “Vinigrol Tricyclic Scaffold Biosynthesis Employs an Atypical Terpene Cyclase and a Multipotent Cyclization Cascade,” *J. Am. Chem. Soc.* **147(49)**, 45168–45177 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c14400

H. K. LIU, T. NAKAMA, S. FUNAMI, R. EBIHARA, T. MITSUHASHI and M. FUJITA, “Enzyme Immobilization in Porous Crystals via Cage Encapsulation,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64(50)**, e202517027 (2025). DOI: 10.1002/anie.202517027

C. PARK, S. TSUTSUMI, T. MITSUHASHI and M. FUJITA, "Discovery of a New Type of Terpene Synthase Coded by an Orphan Gene in a Giant Virus," *Biochemistry* **64(18)**, 3866–3871 (2025). DOI: 10.1021/acs.biochem.5c00354

R. TANAKA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, "A Visible-Light-Responsive Octahedral Cage for Efficient and Selective Cross-[2 + 2] Cycloadditions," *J. Am. Chem. Soc.* **147(29)**, 25142–25147 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c07355

S. YOSHIDA, S. BABA, N. MIZUNO, Y. NAKAMURA, S. SATO and M. FUJITA, "Micro Crystalline Sponge Method Combined with Small-Wedge Synchrotron Crystallography for Nanogram Scale Molecular Structure Elucidation," *J. Am. Chem. Soc.* **147(27)**, 23917–23922 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c06360

H. TAKEZAWA, Y. TAMURA and M. FUJITA, "Step-by-Step Self-Assembly of a Double-Walled Knotted Cage with Increasing Topological Complexity," *Chem. –Eur. J.* **31(27)**, e202500009 (2025). DOI: 10.1002/chem.202500009

Y. INOMATA, S. OGUMA, N. SAGARA, A. NISHIJIMA, Y. SABUROMARU, S. YOSHIDA, T. KAJITANI, K. SHIMOKAWA, S. SATO, M. YOSHIZAWA, M. FUJITA and T. SAWADA, "An $M_{60}L_{60}$ Metal-Peptide Capsid with a 60-Crossing Woven Network," *Chem* **11(9)**, 102555 (2025). DOI: 10.1016/j.chempr.2025.102555

T. NAKAMA, M. TADOKORO, R. EBIHARA, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and M. FUJITA, "Proximity-Induced Saccharide Binding to a Protein's Active Site within a Confined Cavity of Coordination Cages," *Chem. Sci.* **16(23)**, 10549–10554 (2025). DOI: 10.1039/d5sc00782h

S. OGUMA, Y. INOMATA, A. HAYAKAWA, T. NAKAMA, M. FUJITA and T. SAWADA, "Helical Sense Control of Metal-Peptide Torus Frameworks Leading to the Folding and Assembly of a $Ag_{21}L_{14}$ Braided Peptide Nanotube," *J. Am. Chem. Soc.* **147(11)**, 9098–9102 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c01458

W. HE, H. TAKEZAWA, R. YAKUSHIJI, S. YOSHIDA, S. SATO and M. FUJITA, "Host-Guest Chemistry in a Capillary Applied to the Facilitation of the Crystalline Sponge Method," *Angew. Chem., Int. Ed.* **64(20)**, e202501025 (2025). DOI: 10.1002/anie.202501025

W. HE, Y. YU, K. IIZUKA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, "Supramolecular Coordination Cages as Crystalline Sponges through a Symmetry Mismatch Strategy," *Nat. Chem.* **17**, 653–662 (2025). DOI: 10.1038/s41557-025-01750-x

B-4) 招待講演

M. FUJITA, "Molecular Confinement Effects," Gordon Research Conference Self-Assembly and Supramolecular Chemistry, Vaud (Switzerland), May 2025.

M. FUJITA, "Molecular Confinement Effects by Self-Assembled Cages," ISMSC 2025, Kyoto (Japan), May 2025.

M. FUJITA, "Cavity-controlled photoreactions within self-assemblerd coordination cages," 14th SolTech Conference, Bayreuth (Germany), September 2025.

M. FUJITA, "Molecular Confinement Effects in Self-Assembled Cages," SAOG 40th anniversary meeting, Fribourg (Switzerland), February 2026.

B-6) 受賞，表彰

藤田　誠, American Academy of Arts & Sciences 外国人名誉会員 (2025).

藤田　誠, The Palladium Global Science Award (2025).

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

本年度の研究によって，結晶スポンジ法を用いて構造決定できる化合物の範囲を大幅に拡大することに成功した。分子の正確な構造を決定することは，分子が関わるあらゆる分野で重要である一方，大変な困難が伴うことが多く，仮に構造決定が可能な場合であっても手間と時間がかかる作業であることが知られてきた。今後は結晶スポンジ法によって分子の迅速な構造決定が容易に達成されるようになり，科学の広い分野の研究が大幅に加速すると期待される。

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。液体分子と固体分子が接触する場所（分子論的な界面）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（外界との接続領域）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半導体光触媒（物質変換）と液体潤滑（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。①電子励起状態にあるタンタル酸ナトリウム光触媒の量子化学シミュレーション②氷と不凍液体が接する界面をナノ力学計測するために原子間力顕微鏡を冷却する技術の開発が本年度の主な成果である。

B-1) 学術論文

R. MORIMOTO, H. URATANI, H. ONISHI and H. SATO, “Dopant Distributions and Band-Edge Positions in Sr-Doped $NaTaO_3$: A First-Principles Study,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **28(8)**, 5111–5118 (2026). DOI: 10.1039/D5CP04385A

H. URATANI and H. ONISHI, “Quantum-Chemical Molecular Dynamics Study of Polaron Formation in Perovskite $NaTaO_3$ as a Water-Splitting Photocatalyst,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **27(28)**, 14748–14753 (2025). DOI: 10.1039/D5CP01859E

Z. LU, R. YANAGISAWA, S. MORIGUCHI, T. UEDA, K. NAKAMOTO, T. MINATO and H. ONISHI, “Frequency-Modulation AFM in Sub-Zero Antifreeze Liquid,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **64(5)**, 05SP05 (2025). DOI: 10.35848/1347-4065/adcccc

M. YANAGI, J. CASANOVA-CHÁFER, T. HARA, Y. H. CHEW, T. YOSHIDA, H. ONISHI, C. BITTENCOURT and N. ICHIKUNI, “Calcination-Driven Co^{4+} Incorporation in Hydrothermally Synthesized $NaTaO_3$,” *Chem. Lett.* **54(4)**, upaf053 (2025). DOI: 10.1093/chemle/upaf053

B-4) 招待講演

大西　洋,「半導体光触媒による酸素生成反応：マイクロ電極計測と酸素拡散シミュレーションの融合」, 電気化学会北陸支部秋季大会, 富山大学, 富山, 2025 年 11 月.

大西　洋,「半導体光触媒による水分解反応：どうしてそんなに収率が高いのか？」, 日本学術会議公開シンポジウム「カーボンニュートラルに向けた水素の多面的な利活用～第 1 回水素を作る～」, 東京（ハイブリッド開催）, 2025 年 8 月.

大西　洋,「非水液体中での原子間力顕微鏡（AFM）計測」, 埼玉大学, さいたま, 2025年6月.

大西　洋,「表面科学研究者から見たトライボロジー」, 分子研研究会「トライボロジーの分子科学」, 岡崎, 2025年4月.

H. ONISHI, "High-speed analysis of oxygen evolution kinetics in water using microamperometry," 2nd RIST International Symposium: Carbon Value Science & Technology, Noda, March 2026.

H. ONISHI, "Transient Amperometry for Unveiling the Fundamental Nature of Water-Oxide Interactions in Photocatalysis," 107th Workshop IUVSTA-ZCAM-UNIZAR Oxides for Energy Applications: Bridging Experiment and Theory to Understand Functionality, zaragoza (spain), July 2025.

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–).

学会の組織委員等

33rd International Colloquium on Scanning Probe Microscopy（ICSPM33）実行委員長 (2025–2026).

16th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-16)／34th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy（ICSPM34）プログラム委員会委員長 (2025–2027).

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–).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「半導体光触媒による水の4電子酸化：水中オペランド計測によるミリ秒反応化学の解明」, 大西洋 (2025年度–2028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】液体－固体界面（不凍液－氷界面と潤滑油－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。

澤井　仁美（准教授（クロスアポイントメント*1））（2024年4月1日～2025年3月31日）
（教授（クロスアポイントメント*2））（2025年4月1日着任）

村木　めぐみ（技術支援員）
野村　潤子（事務支援員）

*1 長崎大学大学院総合生産科学研究科
*2 大阪公立大学大学院理学研究科

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) 密着型軟X線顕微鏡を用いた赤血球内の鉄分布イメージング

b) 細胞内鉄輸送タンパク質のヘム鉄との相互作用による細胞内ヘム恒常性制御機構

c) 病原菌のヘムセンサータンパク質を標的とする新規抗菌素材としてのVHH抗体の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 生体内の鉄は主にFe^{2+}の状態で存在するが，Fe^{2+}はフェントン反応を促進し活性酸素種を発生させ，Fe^{2+}依存的細胞死フェロトーシスを引き起こす。近年，フェロトーシスは癌や虚血性疾患の起因となることが明らかになっており，細胞内の鉄の局在と分布を定量的に可視化することは医学的にも有益な情報をもたらす。本研究では，UVSOR-IIIにて岩山グループが開発中の「密着型軟X線顕微鏡」を用いて，非破壊の状態の生細胞に対して鉄の分布を定量的に検出できるイメージング法の確立を目指した。赤血球をモデル細胞として，鉄のL吸収端付近のエネルギー領域の軟X線を用いてエネルギー依存的な軟X線透過像を収集し，それらの画像上の各ピクセルにおけるX線吸収スペクトルを抽出して機械学習によりクラスター解析することで，赤血球中の相対的な鉄濃度分布をイメージングする方法を確立した。

b) 細胞内で鉄イオンの輸送を介助するタンパク質として報告されているPCBPが，Fe^{2+}だけではなくポルフィリン鉄錯体であるヘムを結合する新たな性質を見出した。各種分光解析により，PCBPは1分子あたり3分子までのヘムを結合することがわかった。最近，タンパク質のヘム結合解析のために開発されたヘム修飾プローブを用いてPCBPのヘム結合部位を探索するとともに，部位特異的変異体解析により，PCBPに結合する3分子のヘムはそれぞれ異なる部位に結合し，それらの配位構造が異なることを明らかにした。また，PCBPはヘムを安定に結合できることから，ヘム結合型PCBPがアポ型のヘム分解酵素HO1にヘムを渡し，HO1によるヘム分解過程を介助する「ヘム挿入タンパク質」として機能するかを，各種複合体解析ならびに分光解析により検討した。その結果，ヘム結合型PCBPのみがアポ型HO1と複合体を形成することが明らかになったが，PCBPからアポ型HO1にヘムが移行して挿入される速度は，遊離ヘムがアポ型HO1に挿入される速度よりもかなり遅かった。したがって，PCBPは，アポ型HO1にヘムを挿入するのではなく，鉄栄養素として食物から獲得したり，細胞内で生合成した貴重なヘムがHO1に奪われて分解されないようにするための「ヘム捕捉タンパク質」として機能する新たな可能性を見出した。

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，ヘムセンサータンパク質の機能を阻害する分子は抗菌薬の開発に有用であると考え，ヘムセンサータンパク質に対する抗体を作製した。各種タンパク質間相互作用解析により，作製した抗体の機能を詳細に検討した結果，この抗体はヘムセンサータンパク質に特異的かつ強く結合するだけでなく，ヘム感知能を阻害できることを明らかにした。

B-1) 学術論文

A. HORIKAWA, R. OKUBO, N. HISHIKURA, R. WATANABE, K. KURASHIMA-ITO, P. M. SAYEESH, K. INOMATA, M. MISHIMA, H. KOTEISHI, H. SAWAI, Y. SHIRO, T. IKEYA and Y. ITO, "Backbone and Side Chain ^{1}H, ^{13}C and ^{15}N Resonance Assignments and Secondary Structure Determination of the Rhizobial FixJ," *Biomol. NMR Assignments* **19**, 77–82 (2025). DOI: 10.1007/s12104-025-10221-w

H. SAWAI, "The Importance of Ferric Reductases for Iron Uptake in Humans," *Front. Chem. Biol.* **4**, 1724624 (2025). DOI: 10.3389/fchbi.2025.1724624

B-2) 国際会議のプロシーディングス他

N. HISHIKURA, A. HORIKAWA, K. KURASHIMA-ITO, R. OKUBO, R. WATANABE, P. M. SAYEESH, K. INOMATA, M. MISHIMA, T. MIKAWA, H. KOTEISHI, H. SAWAI, Y. SHIRO, T. IKEYA and Y. ITO, "A Dynamic Homodimer Structure of the Response Regulator FixJ from *Bradyrhizobium japonicum* in Its Phosphorylated State in Aqueous Solution," *SSRN*, 6297199 (2026). DOI: 10.2139/ssrn.6297199

B-3) 総説，著書

Y. SHIRO, H. SAWAI and T. TOSHA, *Iron in Biology: Molecular Structures, Cellular Processes and Living Systems*, RSC book series (Coordination Chemistry Perspective) (2025). ISBN: 978-1-83767-440-4

I. YANATORI and H. SAWAI, "Introduction to Iron Dynamics in Human Cells: Fundamental Mechanisms and Their Updates," in *Iron in Biology: Molecular Structures, Cellular Processes and Living Systems*, RSC book series (Coordination Chemistry Perspective), Chapter 1-1, 1–10 (2025).

H. SAWAI, H. SUGIMOTO and Y. SHIRO, "Iron Absorption in Human Duodenum by Dcytb and DMT1," in *Iron in Biology: Molecular Structures, Cellular Processes and Living Systems*, RSC book series (Coordination Chemistry Perspective), Chapter 2-1, 73–88 (2025).

澤井仁美,「生体鉄の分子科学: 鉄イオンとヘム鉄の生体内における動態と制御」, *人工血液* , **33**, 55–63 (2025).

B-4) 招待講演

澤井仁美,「病原菌のヘム応答センサータンパク質の感知機能を特異的に『操る』抗菌薬の開発」, 第 98回日本生化学会大会, 京都, 2025年 12月.

H. SAWAI, "Heme sensing is a new target for antibiotic development," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), Honolulu (USA), December 2025.

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–).

生命金属科学研究会常任幹事 (2025–).

学会の組織委員等

第 4 回生命金属科学シンポジウムプログラム委員 (2025).

第 49 回日本鉄バイオサイエンス学会学術集会学術奨励賞審査員 (2025).

第 98 回日本生化学会大会若手優秀講演賞審査員 (2025).

14th International Vanadium Symposium, Organizing Committee (2025).

学会誌編集委員

Frontiers in Chemical Biology, Associate Editor (2025–).

理科教育活動

地域連携事業「化学セミナー」大阪公立大学 (2025).

高大連携事業「化学セミナー」大阪公立大学 (2025).

生涯学習公開講座「化学セミナー」大阪公立大学 (2025).

B-8) 大学等での講義，客員

大阪公立大学理学部,「先端研究探索」,「無機化学演習」, 2025 年 10 月– .

大阪公立大学理学部,「化学実験」,「化学卒業研究」,「化学海外卒業研究」, 2025 年 4 月– .

大阪公立大学大学院理学研究科,「化学特別演習」,「研究企画ゼミナール」,「プロポーザルディフェンス」,「無機化学特論」, 2025 年 4 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」, 2025 年 10 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」, 2025 年 4 月– .

奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科,「物質科学特論 B」, 2025 年 10 月– .

Lund Institute of Advanced Neutron and X-ray Science (LINXS), LINXS Core Group Fellow, 2023 年 9 月–2025 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–2025 年).

（公財）上原記念生命科学財団研究助成,「軟 X 線顕微鏡による生細胞内金属の可視化技術の革新」, 澤井仁美 (2026 年–2027 年).

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と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」を追跡するための新しい方法を確立したい。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～2025年3月31日）
（教授（クロスアポイントメント*））（2025年4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) ランタノイド錯体の高励起状態のポテンシャルエネルギー曲面を記述する近似手法の開発

b) 配糖化酵素による *C*- グリコシル化反応の選択性機構の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 近年，遷移金属錯体に続く光触媒として，ランタノイドの一種であるセリウム錯体が注目を集めている。望む機能を有するセリウム錯体の設計には，その機能発現機構の理解が不可欠である。しかし，セリウム系の励起状態のポテンシャルエネルギー曲面（PES）の計算は困難であり，これまでほとんど検討されてこなかった。本研究では，セリウム錯体の低励起状態に加え，高励起状態の PES を近似的に記述する手法（イオンエネルギーシフト法）を開発した。本手法により，セリウム錯体の 4f–5d 励起状態や，4f から配位子への電荷移動型励起状態の PES 上の重要な構造（遷移状態や円錐交差点）の探索が可能になった。さらに，機構解明とデータ駆動型の錯体設計の融合を目指し，セリウム錯体の構造や励起状態に関する計算データのデータベース化も進めている。

b) 近年，医薬品や機能性分子における *C*- 配糖体の重要性が高まり，配糖化酵素を用いた *C*- グリコシル化反応が注目されている。特に糖転移酵素 GgCGT は，フロレチンに対して高い *C*- 配糖化選択性を示すが，その反応機構および選択性発現機構は未解明である。本研究では，GgCGT と UDP グルコースによる配糖化反応を対象に，計算化学的手法を用いた機構解析を行った。その結果，従来説とは異なり，酵素残基ではなく，糖供与体が塩基として機能する新たな機構を提案した。また，従来説においてプロトンを引き抜くと考えられていたヒスチジンと，隣接するアスパラギン酸の二残基が，*C*/*O*- 配糖体の選択性の鍵となることも見出した。

B-1) 学術論文

Y. OSADA, R. SATO, T. NISHIKAWA, M. TOKITA, T. KAMOSHIDA, T. MASUBUCHI, M. SHIBUTA, M. HATANAKA and A. NAKAJIMA, “From Si_{16} to Ge_{16}: Geometric Origins of Robustness in Binary Cage Superatoms on Organic Substrates,” *J. Phys. Chem. C* **130(9)**, 3518–3525 (2026). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c07801

S. IKUTA, T. INAGAKI and M. HATANAKA, “An Approximate Method for Exploring Nonradiative Decay Pathways from Highly Excited States of Lanthanide Complexes: Application to Luminescent Cerium Complexes,” *J. Comput. Chem.* **47(5)**, e70327 (2026). DOI: 10.1002/jcc.70327

D. TERADA, T. INAGAKI and M. HATANAKA, “Mechanistic Origin of *C*- over *O*-Glycosylation in Glycosyltransferase GgCGT: A QM/MM Study,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **99(2)**, uoag026 (2026). DOI: 10.1093/bulcsj/uoag026

T. INAGAKI and M. HATANAKA, “Comprehensive Molecular-Level Understanding of MgO Hydration through Computational Chemistry,” *J. Phys. Chem. C* **130(3)**, 1312–1326 (2026). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c06767

D. TERADA, T. INAGAKI and M. HATANAKA, “Mechanistic Elucidation of Enzymatic *C*-Glycosylation: Facilitation by Proton Transfer to UDP-Glucose,” *RSC Adv.* **15(35)**, 28592–28600 (2025). DOI: 10.1039/d5ra02643a

H. YAMADA, S. TAKASUKA, S. OIKAWA, Y. HARASHIMA, T. TAKAYAMA, A. NAG, A. WAKIUCHI, T. ANDO, T. SUGAWARA, M. HATANAKA, T. MIYAO, T. MATSUBARA, Y. OHNISHI, H. AJIRO and M. FUJII, “Multi-Objective Bayesian Optimization for Experimental Design in Copolymerization and Revealing Chemical Mechanism of Pareto Fronts,” *ACS Appl. Eng. Mat.* **3(8)**, 2402–2415 (2025). DOI: 10.1021/acsaenm.5c00309

B-4) 招待講演

M. HATANAKA, “Theoretical and Data-Driven Approaches to Lanthanide Photofunctional Materials,” The 6th CSJ-TSC Joint Symposium “Precision Chemistry for a Sustainable Future: Carbon Neutrality, AI, and Healthcare,” Taichung (Taiwan), March 2026.

M. HATANAKA, “Development of Feature Descriptors for Machine Learning Guided Design of Functional Materials,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem2025), Honolulu (USA), December 2025.

M. HATANAKA, “Theoretical and Data-Driven Approaches to Lanthanide Photofunctional Materials,” Computational Modeling of Catalysis Symposium, Tianjin (China), October 2025.

M. HATANAKA, “Development of Feature Descriptors for Machine Learning Guided Design of Functional Materials,” The 28th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE28), Bangkok (Thailand), July 2025.

M. HATANAKA, “Theoretical and Data-Driven Approaches to Lanthanide Photofunctional Materials,” The 13th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2025), Oslo (Norway), June 2025.

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 (2022–2025).

日本化学会理論化学・情報化学・計算化学デビジョン幹事 (2025–).

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–).

文部科学省基礎研究振興部会委員 (2025–).

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 (2025).

B-8) 大学等での講義，客員

慶應義塾大学理工学部,「化学A」,「分子量子化学」,「物理化学演習第 1」,「化学実験第 1」, 2025年 4月–7月.

慶應義塾大学理工学部,「量子化学基礎」,「電子状態理論」,「物理化学演習第 2」, 2025年 10月–2026年 1月.

慶應義塾大学大学院理工学研究科,「計算化学特論」, 2025年 10月–2026年 1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」（代表者；栄長泰明), 畑中美穂（研究分担者） (2023年度–2025年度).

日本医療研究開発機構創薬基盤推進研究事業,「未開拓ケミカルスペースを狙う金属錯体創薬の基盤技術確立」（代表者：野田秀俊), 畑中美穂（研究分担者） (2025年度–2027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–2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

ランタノイド系の光機能の理解には, 励起状態のポテンシャルエネルギー曲面（PES）の把握が不可欠である。しかし，従来法であるエネルギーシフト（ES）法では，ランタノイドの 4f–4f 励起状態および配位子の三重項励起状態のPESしか記述できなかった。これに対し，2025年度に新たに提案したイオンエネルギーシフト（IES）法は，4f–5d 励起や電荷移動（CT）型励起状態の記述を可能にする手法である。そのため，本手法はセリウム系にとどまらず，発光材料として広く用いられるユウロピウム系におけるCT 励起状態の役割の解析にも適用可能であると考えられる。このように，ES 法とIES 法を併用することで，幅広いランタノイド光機能材料の理解と設計の進展が期待される。一方で，IES 法には励起エネルギーの明示的な計算が必要であるが，代表的な励起状態計算法であるTDDFT 法では，定性的にも誤った結果を与える場合があるという問題が残されている。したがって，大規模なランタノイド錯体に対して，励起エネルギーおよび励起状態の性質を高精度に評価可能な計算手法の開発が喫緊の課題であると言える。

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～ 2026 年 3 月 31 日）

佐野　雄二（特命専門員）
竹家　啓（特任准教授）
CASSOURET, Florent（特任研究員）
JAMBUNATHAN, Venkatesan（特任研究員）
LIM, Hwanhong（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）
YAHIA, Vincent（特別訪問研究員）
鈴木　昌世（特別訪問研究員）
角谷　利恵（特別訪問研究員）
殖栗　敦（特別訪問研究員）
田村　彰良（特別訪問研究員）
CONNOR, Elsa（インターンシップ）
ROBIN, Hélinand（インターンシップ）
松田　美帆（技術支援員（派遣））
小林　純（技術支援員（派遣））
水嶋　一彦（技術支援員（派遣））
伊吹　剛（技術支援員（派遣））
正入木　由里絵（技術支援員（派遣））
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ニクスの展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

分子科学に関連して重要な波長域にレーザーの高輝度光を展開する為の固体レーザー，非線形波長変換法につき包括的な研究を進めている。特には近年のマイクロ固体フォトニクス［マイクロチップ Nd:YVO_4 レーザー（1990 年），Yb:YAG レーザー（1993 年），セラミックレーザー（1997 年），バルク擬似位相整合（QPM）素子：大口径周期分極反転 MgO:$LiNbO_3$（PPMgLN）（3mm 厚 2003 年，5mm 厚 2005 年，10mm 厚 2012 年）］を先導すると共に，共同研

究を通し赤外域分子分光などにその展開を図っている。国際誌の雑誌編集，特集号企画から国際シンポジウム・会議の企画提案，開催に積極的に参加する事でその成果を内外に発信している。

a) マイクロドメイン構造，界面（粒界面，結晶界面，さらには自発分極界面）を微細に制御する固相反応制御法の研究として，レーザーセラミックス，レーザー素子，分極反転素子の作製プロセスの高度化を図っている。特に，固体レーザーの発光中心である希土類イオンの軌道角運動量を利用したマイクロドメインの配向制御は，これまで不可能だった異方性セラミックスによるレーザー発振を成功させただけでなく原理的にはイオンレベルでの複合構造を可能とする。さらに最近，表面活性接合による異種材料接合に成功し，Distributed Face Cooling（DFC）構造による Tiny Integrated Laser（TILA）なる次世代の高性能な高集積小型レーザーに関するコンセプトが検証された。これより，新たなフォトニクスを創出できるものと期待している。

b) 光の発生，増幅，変換の高度制御を可能とする為の研究として，希土類イオンの発光・緩和機構の解明，固体中の光，エネルギー伝搬，さらにはマイクロドメイン構造と光子及び音子の相互作用機構解明，非線形光学過程の解明，モデル化を進めている。Yb レーザーの機構解明，Nd レーザーの直接励起可能性，希土類レーザーの励起光飽和特性，YVO_4 の高熱伝導率特性の発見，実証に繋がったばかりでなく，マイクロ共振器の高輝度効果，レーザー利得と非線形光学過程の量子相関などの興味深い展開も見せている。特にレーザー科学発展の中で生じたパルスギャップ領域であるサブナノ秒からピコ秒の便利な光源開拓に関する貢献，パルスギャップレーザーによる新現象の解明などが期待できる。

c) 開発した光素子を用いた新規レーザー，波長変換システムの開発と展開を図っている。これまでにもエッジ励起セラミック Yb:YAG マイクロチップレーザーによる高平均出力動作，手のひらサイズジャイアントパルスマイクロチップレーザーからの高輝度温度光発生，マイクロチップレーザーからの UV 光（波長：266 nm）からテラヘルツ波（波長：100 ~ 300 μm），さらには高効率・高出力のナノ秒光パラメトリック発生（出力エネルギー約 1 J，効率約 80%），波長 5~12 μm に至る広帯域波長可変中赤外光発生，1.5 サイクル中赤外光からのコヒーレント軟X線（波長：~5 nm）・アト秒（200 ~ 300 as）発生などをマイクロ固体フォトニクスで実証した。アト秒発生に重要な中赤外 OPCPA では，LA-PPMgLN を用い波長 2.1 μm にてパルス幅 15 fs を平均出力 10 W と，この領域で世界最大出力を達成した。特にマイクロチップレーザーでは，パルスギャップであるサブナノ秒での高輝度光発生が望め，光イオン化過程に有利なため極めて低いエネルギーで効率的なエンジン点火が可能となる。すでに世界ではじめての自動車エンジン搭載，走行実験にも成功している。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。フルーエンスでは，1.12 J/cm^2，1.56 GW/cm^2 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と幅広い展開が期待される。

B-1) 学術論文

Y. SATO, A. KAUSAS and T. TAIRA, “Enhanced Thermal Conductivity of Distributed Face-Cooled Composite Laser Medium Included Thermal Resistance at the Bonding Interface,” *Opt. Express* **33(11)**, 24039–24049 (2025). DOI: 10.1364/OE.554536

Y. SATO and T. TAIRA, “Augmented Spectrum Bandwidth of Nd-Doped Garnet and Bixbyite by Spectrum Tailoring,” *Opt. Express* **33(11)**, 24050–24059 (2025). DOI: 10.1364/OE.554538

T. TAIRA, J. HAYASHI, N. PAVEL and T. SUZUKI, “Tiny Integrated Lasers and Their Application to Industrial Laser Technologies: Feature Issue Introduction,” *Opt. Express* **33(15)**, 31204–31210 (2025). DOI: 10.1364/OE.571207

Y. SATO, T. TAIRA and T. TAKEMASA, "Thermal Conductivity of Transparent Y_2O_3, YAG, YSAG, and YGAG Ceramics Compared to YAG and Sapphire Single Crystals," *Opt. Express* **33(25)**, 53501–53514 (2025). DOI: 10.1364/OE.576716

Y. MIZUTA, T. KATO, S. TAMAKI, T. HOSOKAI, T. TAIRA, Y. SAKINO and Y. SANO, "Fatigue Strength Enhancement of Structural Members *via* In Situ Laser Peening Using TILA for Service Life Extension," *Opt. Express* **33(24)**, 51184–51191 (2025). DOI: 10.1364/OE.576425

K. HIROSAWA, A. KAUSAS, V. YAHIA, H. ODAKA, F. CASSOURET, N. OHATA and T. TAIRA, "High-Energy, Strong-Field Deep-Ultraviolet Based Joule-Class Amplifier with Distributed-Faced-Cooling Chips," *Opt. Lett.* **50(24)**,7456–7459 (2025). DOI: 10.1364/OL.581191

F. CASSOURET, S. RAISSI, P. LOISEAU, J. DEBRAY, P. SEGONDS, T. TAIRA and G. AKA, "Nonlinear Characterization of $Ca_5(BO_3)_3F$ (CBF) for Third Harmonic Generation at 355 nm," *J. Alloy. Compd.* **1050**, 185704 (2025). DOI: 10.1016/j.jallcom.2025.185704

N. MAHARJAN, Y. MIZUTA, K. MASAKI, S. TAMAKI, Y. SANO, T. HOSOKAI and A. ANG, "Improving Fatigue Behaviour of Additively Manufactured Scalmalloy® Using Laser Shock Peening," *J. Mater. Res. Technol.* **37**, 3424–3433 (2025). DOI: 10.1016/j.jmrt.2025.07.033

B-2) 国際会議のプロシーディングス他

K. HIROSAWA, N. OHATA, H. ODAKA, A. KAUSAS, V. YAHIA and T. TAIRA, "Generation of High-Energy Laser Pulses at 266 nm with Sub-Nanosecond Pulse Duration and 20 Hz Repetition Rate," *CLEO/Europe-EQEC 2025*, CA-6.6 (2025). DOI: 10.1109/CLEO/Europe-EQEC65582.2025.11110255

F. CASSOURET, S. RAISSI, P. LOISEAU, J. DEBRAY, P. SEGONDS, T. TAIRA and G. AKA, "Nonlinear Characterization of $Ca_5(BO_3)_3F$ (CBF) for Third Harmonic Generation at 355 nm," *2025 Optica Nonlinear Optics Topical Meeting (NLO)*, M3B.1 (2025). ISBN: 978-1-957171-49-4

F. CASSOURET, Y. SATO and T. TAIRA, "Thermal Properties and Structural Analysis of Room Temperature Bonded Cr:LiSAF/Sapphire Chip Stacks," *Advanced Solid State Lasers Conference (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2025*, JTu2A.6. (2025). DOI: 10.1364/ASSL.2025.JTu2A.6

Y. SATO and T. TAIRA, "Rotating Magnetic Flux Generator for Crystalline Orientation Control and Improved Alignment of Grains in Yb:FAP Ceramics," A*dvanced Solid State Lasers Conference (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2025*, JTu2A.11. (2025). DOI: 10.1364/ASSL.2025.JTu2A.11

Y. SATO, T. TAIRA and T. TAKEMASA, "Thermal Conductivity of YSAG, YGAG, YAG, and Y_2O_3 Ceramics Compared to YAG and Sapphire Single Crystals," *Advanced Solid State Lasers Conference (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2025*, JTu2A.12. (2025). DOI: 10.1364/ASSL.2025.JTu2A.12

V. YAHIA, H. ODAKA, M. YOSHIDA and T. TAIRA, "5J, 8GW Pulses from a Room-Temperature DFC Power Chip Laser," *Advanced Solid State Lasers Conference (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2025, Prague Congress Centre*, JW2A.18. (2025). DOI: 10.1364/ASSL.2025.JW2A.18

F. CASSOURET, H. ROBIN, D. BALITSKI, S. RAISSI, P. LOISEAU, G. AKA and T. TAIRA, "Nonlinear Characterizations of $YAl_3(BO_3)_4$ Crystals for Frequency Conversion in Green and UV Ranges," *Advanced Solid State Lasers Conference (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2025*, ATh3A.1. (2025). DOI: 10.1364/ASSL.2025.ATh3A.1

F. CASSOURET, Y. SATO and T. TAIRA, “Bonding Interface Analysis and Thermal Properties of Cr:LiSAF/Sapphire Composite Chips,” *SPIE Photonics West 2026, Solid State Lasers XXXV: Technology and Devices*, 1387309 (2026). DOI: 10.1117/12.3079507

B-3) 総説，著書

平等拓範,「常温接合DFCパワーチップによる小型集積レーザー」, *特集 溶接学会誌*, **94(4)**, pp. 191–195 (2025). DOI: 10.2207/jjws.94.191

B-4) 招待講演（* 基調講演）

T. TAIRA, “DFC-chip Tiny Integrated Laser,” The 11th Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2025), OPIC 2025, Yokohama (Japan), April 2025.* (Keynote)

G. AKA, S. RAISSI, F. CASSOURET, P. LOISEAU, T. TAIRA, P. SEGONDS, B. BOULANGER and A. PISCH, “Recent progress on nonlinear borate single crystals for the design of solid-state laser in the UV range,” The 11th Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2025), OPIC 2025, Yokohama (Japan), April 2025.

V. YAHIA, A. KAUSAS, H. ODAKA and T. TAIRA, “DFC-PowerChip-Based Multi-Joule Laser Operated up to 50 Hz at Room Temperature,” The 11th Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2025), OPIC 2025, Yokohama (Japan), April 2025.

T. TAIRA, “Tiny Integrated Power Chip towards Extreme High Density Power Laser,” The 13th Asia-Pacific Laser Symposium 2025, Seogwipo KAL Hotel, Jeju (Korea), May 2025.

平等拓範,「小型集積パワーチップレーザー」, レーザー学会夏季講演会「パワーレーザーが拓く新たな産業応用」, マイドームおおさか, 大阪, 2025年7月.

T. TAIRA, “Tiny Integrated Laser for Long and Short Double Pulse LIBS,” The 10th Symposium on Applications of Advanced Measurement Technologies (SAAMT)2025, AOSSA, Tokushima (Japan), September 2025.* (Keynote)

平等拓範,「DFCパワーチップレーザー熱問題の検討」, レーザー学会第601回&602回研究会報告, 宮崎婦人会館, 宮崎, 2025年10月.

平等拓範,「ギガワット小型集積レーザー展望」, 第44回電子材料シンポジウム（EMS-44), グランドメルキュール奈良橿原, 奈良, 2025年10月.

平等拓範,「小型集積レーザー：極限への挑戦とスピンアウト」, JST未来社会創造事業「レーザー駆動による量子ビーム加速器の開発と実証」シンポジウム, オンライン開催, 2025年11月.

B-6) 受賞，表彰

T. TAIRA, Research.com Engineering and Technology in Japan, Leader Award (2025).

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–), 副代表幹事 (2024–).

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–).

光エレクトロニクス産学連携専門委員会学会委員長 (2025–).

学会の組織委員等

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「リアル空間を強靭にするハードウェアの未来」領域アドバイザー (2021–).

学会誌編集委員

"Tiny Integrated Lasers and Their Application to Industrial Laser Technologies (TILA-LIC 2025)," Feature Issue in Optics Express, Lead Editor (2025).

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」（代表者；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).

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).

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」（代表者：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).

宇宙航空研究開発機構宇宙戦略基金,「高出力レーザの宇宙適用による革新的衛星ライダー技術」(代表者：野田　進),「フォトニック結晶レーザと固体結晶融合による革新的衛星ライダー技術の開発」, 平等拓範（研究分担者）(2025 年度–2026 年度).

B-11) 産学連携

共同研究, トヨタ自動車（株),「量子光学センサーの研究」, 平等拓範 (2025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光源研究開発」, 平等拓範 (2022年度–2025年度).

共同研究, ハイティラ（株),「接合型小型集積レーザの研究」, 平等拓範 (2023年度–2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

先端的レーザー光源の中で，特にビーム高品質化（空間特性制御）ならびに短パルス化（時間特性制御）などの高輝度化，そしてスペクトルの高純度化を広い波長領域（スペクトル特性制御）でコンパクト化と同時に実現することは，極めて重要な課題である。一方，極限的な粒子加速が期待されるレーザー加速では，物質の性質を原子・分子レベルで解明し，さらに化学反応などの超高速の動きを捉えることができ，広範な分野の最先端研究に利用される加速器，特にX線自由電子レーザー SACLA をトレーラーサイズにまで小型化できると期待される。しかし，その加速のための高強度レーザーが非常に大型であることが深刻な問題となり，マイクロ固体フォトニクスへの期待が高まっている。今後，レーザー加速による小型加速器の構築を目指すと共に，レーザー加速に資する先端レーザー科学を，別途，社会連携研究，小型集積レーザー（TILA, Tiny Integrated Laser）コンソーシアムにて製造，医療，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による固液界面の構造解析法

b) 電極／電解液界面設計による革新型エネルギー変換反応の研究

c) 電気化学走査プローブ顕微鏡データの解析によるハイスループット解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 固体と液体の界面で起きる特異な現象を解析できる走査プローブ顕微鏡を構築し，潤滑油と金属の界面およびアルコールとグラファイトの界面について物性解明を進めた。まず，潤滑油中で，ステアリン酸が酸化銅表面に形成する金属石けん膜を直接観察し，その特性を解析した。金属石けん膜は速やかに厚く形成され，しかも機械的に除去されにくいことが分かった。また，自己組織化によって形成された金属石けん膜は，ステアリン酸単分子膜よりも低い摩擦を示し，純粋な銅ステアレート膜と同程度の優れた境界潤滑性能を示した。つまり，水分が脂肪酸の脱プロトン化と銅との配位を助け，厚くて滑る膜の形成を促進するということを明らかにした。また，大西 洋教授との共同研究において，氷点下の固液界面で計測可能な走査プローブ顕微鏡システムを用いて，グラファイト表面に吸着したオクタノール分子が形成する構造をナノメートル分解能で観察し，さらに，表面上にオクタノール層が形成されていることを示した。低温では液体の粘度上昇によって探針カンチレバーの共振特性が変化するものの，氷点下の液中においても安定した測定が可能であることを実証した。

b) 次世代の革新型蓄電池であるフッ化物イオンシャトル電池二次電池では，キャリアイオンであるフッ化物イオンが電解液に溶けず，有機物のアニオンアクセプターを加えることで，フッ化物イオンの濃度を高めていた。本研究では，アニオンアクセプターを用いることなく，安定で安価な無機物であるテトラフルオロほう酸カリウムを加えることで，フッ化物イオンの濃度を高め，さらにフッ化物が反応しやすい電解液を調製できる事を初めて示した。これらの結果を基に，フッ化物イオンの活性を調整するという新しいコンセプトの電解液を設計する方針を提案した。

c) 電気化学走査プローブ顕微鏡の測定は，計測速度や反応速度が遅く測定に長時間を要する場合がある。このような系において，効率的に研究を進めるために，実験条件，得られた画像データ，電気化学データの相関を解析することで，これまでよりも高速に解析を進めることが出来る技術を構築した。さらに，画像解析によって人間の目だけでは気付くことが出来ない特徴の抽出，電気化学データの低次元化解析によるハイスループット解析を可能とする技術を構築し，蓄電池の反応解析に応用した。

B-1) 学術論文

N. TABTIMTONG, P. KAISOOK, Y. IMAI, T. UEDA, K.-I. NAKAMOTO, Y. SEGAWA, A. NERAMITTAGAPONG, S. NERAMITTAGAPONG and T. MINATO, "Facilitated Fluorination by Potassium Tetrafluoroborate in Tetraglyme Electrolytes for Fluoride Shuttle Batteries," *ACS Appl. Energy Mater.* **9(7)**, 3690–3696 (2026). DOI: 10.1021/acsaem.5c04132

N. YAMASHITA, H. EGAWA, T. HIRAYAMA and T. MINATO, "In-Lubricant AFM Visualization of Fatty Acid Metal Soap Films: Evaluation of Tribological Properties," *Tribol. Int.* **215(B)**, 111471 (2026). DOI: 10.1016/j.triboint.2025.111471

J. NISHIDA, K. OTSUKA, T. MINATO, Y. K. KATO and T. KUMAGAI, "Ultrafast Infrared Nano-Imaging of Local Electron–Hole Dynamics in CVD-Grown Single-Walled Carbon Nanotubes," *Sci. Adv.* **11(25)**, eadv9584 (2025). DOI: 10.1126/sciadv.adv9584

Z. LU, R. YANAGISAWA, S. MORIGUCHI, T. UEDA, K. NAKAMOTO, T. MINATO and H. ONISHI, "Frequency-Modulation AFM in Sub-Zero Antifreeze Liquid," *Jpn. J. Appl. Phys.* **64(5)**, 05SP05 (2025). DOI: 10.35848/1347-4065/adcccc

N. TABTIMTONG, A. PADUNGWAT, N. LERTNA, P. ATHIKAPHAN, A. NERAMITTAGAPONG, T. MINATO and S. NERAMITTAGAPONG, "Sucrose Conversion to 5-Hydroxymethylfurfural over Commercial Ion-Exchange Resin," *Biomass Bioenergy* **199**, 107940 (2025). DOI: 10.1016/j.biombioe.2025.107940

B-4) 招待講演（* 基調講演）

T. MINATO, "Energy Conversion at Electrode–Electrolyte Interfaces: Insights from Scanning Probe Microscopy," Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025, Tsukuba, October 2025.

佐藤宏祐, 斎藤　晃, 湊　丈俊, 杉本敏樹,「担持金属助触媒の役割解明に向けた光触媒表面の in-situ/operando 分光・顕微観測」, 日本表面真空学会 第 8 回若手部会研究会 & 関東支部 10 周年記念シンポジウム, 新潟, 2025 年 4 月.

湊　丈俊,「原子間力顕微鏡を用いた固液界面のナノ力学計測」, 分子研研究会「トライボロジーの分子科学」, 岡崎, 2025 年 4 月.

T. MINATO, "Exploring the Hidden World at Battery Interfaces: Toward the Energy Technology of Tomorrow," Cambodian Chemical Society International Symposium, Phnom Penh (Cambodia), December 2025.*

T. MINATO, "Reaction Mechanism in Rechargeable Batteries for Next-Generation Energy Technology," The 34th Thai Institution of Chemical Engineering and Applied Chemistry International Conference, Pattaya (Thailand), May 2025.

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–).

Applied Surface Science Division, International Union for Vacuum Science, Technique and Applications (IUVSTA)-Japan, Chair (2025–).

日本表面真空学会 国際連携委員会委員 (2023–).

次世代ナノプローブ技術委員会運営委員 (2024–).

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–).

学会の組織委員等

International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices ’26, Program Committee (2021–).

ICSPM 国際会議プログラム委員 (2021–).

The 34th Thai Institution of Chemical Engineering and Applied Chemistry International Conference, International Scientific Committee (2024–2025).

The 26th International Conference on Non-Contact Atomic Force Microscopy, Program Committee (2025–2026).

ACSIN16国際会議実行委員会プログラム委員 (2025–).

理科教育活動

愛知県サイエンス実践塾体験研究室「未来の物理化学研究者集まれ！　2050年のモビリティエネルギーのナゾに迫る!」愛知県×分子研×トヨタ自動車 (2025).

令和7年度文部科学省マテリアルリサーチインフラ事業学生研修プログラム「走査プローブ顕微鏡を用いたナノレベル物性解析」(2025).

その他

青森県三戸町ふるさと応援大使 (2021–2025).

B-10) 競争的資金

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

Z. LI, S. TAO, M. ADDICOAT, T. NAKAMURA and D. JIANG, "Synthesis of Covalent Organic Frameworks *via* Coupling Polymerization," *Nat. Synth.* **5**, 199–208 (2026). DOI: 10.1038/s44160-025-00895-4

T. FUJINO, M. HISHIDA, M. ITO, T. NAKAMURA, M. ASADA, N. KURAHASHI, H. KIUCHI, Y. HARADA, K. HARANO, R. MAKIURA, K. J. TAKENO, S. YOKOMORI, H. OIKE and H. MORI, "Macroscopic Structural Transition of Nickel Dithiolate Capsule with Uniaxial Magnetic Anisotropy in Water," *Adv. Sci.* **12**, 2504967 (2025). DOI: 10.1002/advs.202504967

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–).

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 (2023–2027).

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 (2023–2029).

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 (2024–2027).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C),「凝縮系のスピンデ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

M. KATO, F. NAKASHIMA, N. OHTSUKA, Y. NISHIOKA, A. IZUMISEKI, T. FUJINAMI, S. OISHI, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, "Data-Integrated Elucidation of Structure–Activity Relationships toward the Rational Design of Perfluoroiodoarene-Based Halogen-Bond Donor Catalysts," *J. Org. Chem.* **91(5)**, 2088–2104 (2026). DOI: 10.1021/acs.joc.5c02704

N. OHTSUKA, M. Z. MOHD ARIS, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, "Data-Guided Rational Design of Additives for Halogenation of Highly Fluorinated Naphthalenes: Integrating Fluorine Chemistry and Machine Learning," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **28**, 6917–6927 (2026). DOI: DOI: 10.1039/d5cp03554f

K. TAKEDA, N. OHTSUKA, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, "Machine Learning-Guided Synthesis of Prospective Organic Molecular Materials: An Algorithm with Latent Variables for Understanding and Predicting Experimentally Unobservable Reactions," *Artif. Intell. Chem.* **3(2)**, 100096 (2025). DOI: 10.1016/j.aichem.2025.100096

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」（代表者；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・アーキティ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。主認証システムの近代化改修を一通り終え，現在は次期 ORION である ORION2027（仮）に向け自然科学研究機構において構築が始まっている統合認証基盤構築との整合性を含め次世代でも通用する認証基盤の検討を行っている。

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て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，機構として導入を行った脆弱性検査システムについてその導入を主導すると共に，現在のリアクティブな体制からプロアクティブな体制へ移行するための基礎を構築した。現在，ORION2027 においても本取り組みを継続発展できるような調査・検討を行っている。

c) a)，b) についてより効果的な利活用が行えるように AI の適用について効果的に活用できる分野がわかってきており，段階的に実システムに対して適用を開始している。

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 (2024–2026).

大学共同利用研セキュリティワークショップ「岡崎 3 機関における最近の取組について」(2026).

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に参画している。

また，機構情報セキュリティ監査責任者として機構の全ての機関に導入を主導し脆弱性検査システムを活用したプロアクティブなサイバーセキュリティ体制の構築・運用や，ORION2027 に向け 2032 年初頭においても可能な限り陳腐化を抑えられるシステム構成や開発，運用について調査検討を行っている。特に AI の利活用に関し，効率的でかつ段階的に実システムへ実装を行う方法もあわせて検討している。

技術推進部及び安全衛生管理室

B-1) 学術論文

K. HARADA, A. SAKAI, S. TSUNEKAWA, Y. TAKAKI, M. NAGASAKA, H. YUZAWA, K.-H. WANG, T. INA, H. KONDOH and M. YOSHIDA, "Improved Water Electrolysis Over Cobalt Oxyhydroxide by Carbonate Anion Adsorption: Direct Observation of Active Species Using Operando Hard/Soft X-Ray Absorption Spectroscopy," *ChemSusChem* **18(16)**, e202500559 (8 pages) (2025). DOI: 10.1002/cssc.202500559

C. O. M. MARIANO, K. H. CHEN, J. SHIUE, H. YUZAWA, T. ARAKI, K. T. ARUL, C. L. DONG, T. Y. YUNG, S. C. HSU, X. CAI, S. H. HSIEH and C. H. CHUANG, "Hexagonal BN Membranes Formation by Liquid-Phase Synthesis: Insights from Scanning Transmission X-Ray Microscopy," *APL Mater.* **13(10)**, 101118 (12 pages) (2025). DOI: 10.1063/5.0289068

H. IWAYAMA, H. YUZAWA and M. NAGASAKA, "Phase-Dependent Intermolecular Interactions of Nematic Liquid-Crystal Molecules Probed by Carbon K-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy," *Phys. Rev. E* **113(1)**, 015413 (6 pages) (2026). DOI: 10.1103/17pr-b3wv

G. GERMER, K. RAJES, T. OHIGASHI, H. YUZAWA, N. KOSUGI, R. FLESCH, R. HAAG, F. RANCAN, A. VOGT and E. RÜHL, "Release of Rapamycin from Core-Multishell Nanocarriers Topically Applied on Ex Vivo Human Skin Probed by Scanning Transmission X-Ray Microscopy," *Eur. J. Pharm. Biopharm.* **223**, 115038 (9 pages) (2026). DOI: 10.1016/j.ejpb.2026.115038

M. ODELIUS, S. D. FOLKESTAD, T. SAISOPA, Y. RATTANACHAI, W. SAILUAM, H. YUZAWA, N. KOSUGI, A. C. PAUL, H. KOCH and DE. CÉOLIN, "Symmetry Breaking around Aqueous Ammonia Revealed in Nitrogen K-Edge X-Ray Absorption," *J. Phys. Chem. Lett.* **16(14)**, 3411–3419 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpclett.4c03625

F. KAGAYA, N. SAITO, Y. MINAMIDA and K. AMITA, "Study on Neutralization of Tamagawa Acidic Water Using Iron and Steel Slags," *Zairyo/Journal of the Society of Materials Science, Japan*, **74(4)**, 267–272 (2025). DOI: 10.2472/jsms.74.267

Y. OKA, F. QUINTES, Y. YOSHIKAWA, M. FUJIWARA, K. MAEDA, S. WEBER and K. INOUE, "Direct Observation of Long-Lived Radical Pair between Flavin and Guanine in Single- and Double-Stranded DNA-Oligomers," *Commun. Chem.* **8(1)**, 203 (2025). DOI: 10.1038/s42004-025-01596-x

Y. MINAMIDA, E. TACHIBANA, F. KAGAYA, N. SAITO, K. SUGIMOTO, Y. YAMAGISHI and H. MATSUURA, "Chemotaxonomic Analysis of *Laurencia* spp. Collected from the Coast of Akita Prefecture, Japan. Part I: Chemical Composition of *L. venusta* and *L. okamurae*," *Biochem. Syst. Ecol.* **124**, 105172 (2026). DOI: 10.1016/j.bse.2025.105172.

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）

A. MATSUMOTO, K. NAKAGAWA, T. NAKANISHI, A. SEKINE, S. KOJO, M. KIRA, S. SATO, N. SHIBATA and T. ASAHI*, "How Temperature Change Affects the Lattice Parameters, Molecular Conformation, and Reaction Cavity in Enantiomeric and Racemic Crystals of Thalidomide," *J. Am. Chem. Soc.* **147(14)**, 11988–11997 (2025). DOI: 10.1021/jacs.4c18394

Y. NODA, N. KATO, F. SATO, Y. SUZUKI, S. TSUBOTA, H. KITAI, S. KOMATSU, A. TANAKA, Y. SATO, K. MAEDA, K. FURUHASHI, T. ISHIMOTO, T. KOSUGI, T. YAMAGUCHI, S. NAGAO, Y. KAMIYA, K. KADOMATSU, H. ASANUMA and S. MARUYAMA, "Ameliorative Effect of an Anti-MicroRNA-21 Oligonucleotide on Animal and Human Models of Cystic Kidney Disease," *Kidney360* **6(6)**, 900–913 (2025). DOI: 10.34067/KID.0000000771

R. TANIFUJI, E. HOSONO, H. KAMAKURA, Y. MURAMATSU, S. YOSHIDA, S. SATO, Y. OHASHI, S. DAN, H. SEIMIYA and H. OGURI, "Strategic Scaffold Redesign of Ecteinascidins: An Approach for Generating Anticancer Macrocycles," *Chem* **11(11)**, 102664 (2025). DOI: 10.1016/j.chempr.2025.102664

K. SUZUKI, D. ASAI, R. J. HERMAN, S. W. NJOROGE, S. YOSHIDA, S. SATO, S. LEE and K. TAHARA, "Synthesis, Structures, and Properties of Dehydrobiphenyleno[12]Annulenes: Carbon-Rich Compounds Comprising Two Different Antiaromatic Units," *Chem. –Asian J.* **20(18)**, e00754 (2025). DOI: 10.1002/asia.202500754

H. MIURA, M. CHIDA and T. SHISHIDO, "C3-Selective C–H Borylation of Indoles by Supported Gold Catalysts," *Tetrahedron Lett.* **171-172**, 155758 (2025). DOI: 10.1016/j.tetlet.2025.155758

Z. WEI, Y. KAMIYA, B. DING, T. SATO, T. HAYASHI, H. MIURA and T. SHISHIDO, "Design of Supported Metal/Metal Oxide Catalysts for Low-Temperature Ethanol Production by CO_2 Hydrogenation," *Appl. Catal., A* **708**, 120586 (2025). DOI: 10.1016/j.apcata.2025.120586

K. NOMOTO, Y. OKUZUMI, T. NAKAGAWA, H. MIURA and T. SHISHIDO, "Low-Temperature CO_2 Hydrogenation to Methanol on Cu-Doped Au/ZrO_2: Effect of Cu Doping on Hydrogen Activation," *Catal. Today* **462**, 115573 (2025). DOI: 10.1016/j.cattod.2025.115573

X. TIAN, M. WANG, X. MA, S. SATO and Z. SUN, "Nor[7]circulenyl Neutral Radical and Its Charged Species: Synthesis, Structures, and Efficient NIR-II Photothermal Conversion for Imaging and Laser Ignition," *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**, e202520605 (2025). DOI: 10.1002/anie.202520605

H. MIURA, K. AMEYAMA, Y. SATO and T. SHISHIDO, "Regioselective Carbosilylation of Allenes by Supported Au Catalysts," *J. Org. Chem.* **90(43)**, 15285–15292 (2025). DOI: 10.1021/acs.joc.5c01882

T. ITO, M. FUKAYA, R. SAWA, M. HIRABAYASHI, Y. YANO, S. YOSHIDA, S. SATO, N. ADACHI, Y. YAMADA, Y. KUBOTA, K. HAYASHI, K. RYU, T. KAWAHARA and M. IINUMA, "Structural Elucidation and Virucidal Properties of Resveratrol Octamers Isolated from *Vatica albiramis*," *J. Nat. Med.* **80(1)**, 26–31 (2026). DOI: 10.1007/s11418-025-01986-4

S. MURAKAMI, T. HONDA, T. FUSHIKI, S. YOSHIDA, S. SATO, N. TORIUMI, M. UCHIYAMA and H. OGURI, "Dynamic Covalent Platform for Chiroptically Tunable Figure-Eight Macrocycles from Preorganized Alkaloidal Scaffolds," *JACS Au* **6(2)**, 1089–1101 (2026). DOI: 10.1021/jacsau.5c01493

R. KAINUMA, K. MATSUMOTO, T. ITO and T. SATOH, "Sub-Millimeter Propagation of Antiferromagnetic Magnons *via* Magnon–Photon Coupling," *npj Spintron.* **2**, 31 (2024). DOI: 10.1038/s44306-024-00034-3

T. TATEISHI, A. KATO and J. KISHINE, "Electron–Chiral Phonon Coupling, Crystal Angular Momentum, and Phonon Chirality," *J. Phys. Soc. Jpn.* **94(5)**, 053601 (5 pages) (2025). DOI: 10.7566/JPSJ.94.053601

K. MIKUNI, T. HIRAOKA, T. KURAMOTO, Y. FUJII, A. KOREEDA, S. PARCHENKO, A. STUPAKIEWICZ and T. SATOH, "Magnetic Resonance Frequency of Two-Sublattice Ferrimagnet with Magnetic Compensation Temperature," *J. Phys. Soc. Jpn.* **94(11)**, 111001 (9 pages) (2025). DOI: 10.7566/JPSJ.94.111001

H. WATANABE, R. OIWA, G. KUSUNO, T. SATOH and R. ARITA, "Symmetry Analysis of Cross-Circular and Parallel-Circular Raman Optical Activity," *Phys. Rev. B* **112(11)**, 115105 (2025). DOI: 10.1103/45jq-j23c

D. M. JURASCHEK, R. M. GEILHUFE, H. ZHU, M. BASINI, P. BAUM, A. BAYDIN, S. CHAUDHARY, M. FECHNER, B. FLEBUS, G. GRISSONNANCHE, A. I. KIRILYUK, M. LEMESHKO, S. F. MAEHRLEIN, M. MIGNOLET, S. MURAKAMI, Q. NIU, U. NOWAK, C. P. ROMAO, H. ROSTAMI, T. SATOH, N. A. SPALDIN, H. UEDA and L. ZHANG, "Chiral Phonons," *Nat. Phys.* **21(10)**, 1532–1540 (2025). DOI: 10.1038/s41567-025-03001-9

T. ARAKAWA, H. SHOJI, Y. SHIMAMOTO, Y. KOUSAKA, J. OHE, S. KON and Y. TOGAWA, "Visualizing the Polarization of Collective Magnetic Excitations in the Chiral Helimagnet $CrNb_3S_6$ by Microwave Circular Dichroism Spectroscopy," *Phys. Rev. Appl.* **24(4)**, 044017 (2025). DOI: 10.1103/vl98-dfpb

M. KUNIMI, Y. KATO and H. KATSURA, "Systematic Construction of Asymptotic Quantum Many-Body Scar States and Their Relation to Supersymmetric Quantum Mechanics," *Phys. Rev. Res.* **7(4)**, 043107 (2025). DOI: 10.1103/zstl-s1y2

H. MUNEKATA, G. KUSUNO, K. MIYAZAKI and T. SATOH, "Polarization-Dependent Photocurrent in a Quadrilateral-Shaped Bulk Crystalline Tellurium Chip with Near-Infrared Light Excitation," *Jpn. J. Appl. Phys.* **64(11)**, 113002 (2025). DOI: 10.35848/1347-4065/ae14c7

I. G. BOSTREM, A. S. OVCHINNIKOV, M. S. MALYUTIN, E. G. EKOMASOV and J. KISHINE, "Whitham's Theory of Envelope Solitary Waves in a Monoaxial Chiral Helimagnet," *Phys. Rev. B* **112(22)**, 224422(2025). DOI: 10.1103/fxcd-trqv

S. IWATA, Y. KANO and H. MATSUZAWA, "Is Counterpoise Method a Proper Procedure for Evaluating the Dispersion Energy?" *J. Comput. Chem.* **47(1)**, e70292 (2026). DOI: 10.1002/jcc.70292

K. MIWA, T. OKAMOTO, Y. KOBORI and A. ISHIZAKI, "Influence of Molecular Orientation and Exciton Transfer Rates on Solid-State Triplet–Triplet Annihilation Photon Upconversion," *J. Phys. Chem. C* **129(28)**, 12904–12915 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c02994

S. KIMURA, "Dirac Fermions Meet Kondo Lattice," *Newton* **2(2)**, 100329 (2026). DOI: 10.1016/j.newton.2025.100329

Y. CHEN, A. MELÉNDEZ-SANS, S. KIMURA, L. H. TJENG and S. G. ALTENDORF, "Epitaxial YbN Thin Films Grown by Nitrogen Plasma-Assisted Molecular Beam Epitaxy," *Phys. Rev. Mater.* **9(12)**, 123403 (2025). DOI: 10.1103/chf5-cc7n

K. NISHIHARA, H. WATANABE, T. NAKAMURA and S. KIMURA, "Evaluation of Space-Charge Effect of Low-Energy Pulsed Electron Beam for Time-Resolved Resonant Electron Energy-Loss Spectroscopy (TR-rEELS)," *Rev. Sci. Instrum.* **97(1)**, 013303 (2026). DOI: 10.1063/5.0298870

M. NAITO, M. TSUKAMOTO, K. GONNAI, H. TAKAYA, S. MIYAGAWA, T. SAKAGUCHI and T. HASHIMOTO, "Synthesis, Structure and Solid State Emission Properties of 6-Alkoxysalicylaldehyde Azines," *J. Mol. Struct.* **1329**, 141322 (2025). DOI: 10.1016/j.molstruc.2025.141322

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(1)**, 1367 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-56381-0

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(1)**, 3758 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-59032-6

I. NODA, S. IKI and K. NARUSE, "From Red Tides to Healthy Ecosystems by Nutrient Management in Enclosed Sea Areas," *ACS ES&T Water* **5(11)**, 6624–6632 (2025). DOI: 10.1021/acsestwater.5c00679

M. KOYAKKAT, T. ISHIDA, K. FUJITA and H. SHIROTA, "Low-Frequency Spectra of Hydrated Ionic Liquids with Kosmotropic and Chaotropic Anions," *J. Phys. Chem. B* **128(17)**, 4171–4182 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcb.4c01255

E. FERRARI, H. UEDA, D. FAINOZZI, T. OSAKA, F. BENCIVENGA, M. BURIAN, P. CARRARA, J. VILA-COMAMALA, R. CUCINI, C. DAVID, A. GESSINI, S. GERBER, A. GOLOBORODKO, A. HRABEC, I. INOUE, Y. INUBUSHI, L. M. DINIZ LEROY, R. MINCIGRUCCI, E. PARIS, B. PEDRINI, B. ROESNER, J. R. ROUXEL, C. SERRAT, V. SCAGNOLI, K. TONO, M. YABASHI, J. YAMADA, K. YAMAMOTO, M. C. ZDORA, M. BEYE, C. MASCIOVECCHIO, M. CHERGUI, U. STAUB and C. SVETINA, "All Hard X-Ray Transient Grating Spectroscopy," *Commun. Phys.* **8(1)**, 257 (2025). DOI: 10.1038/s42005-025-02178-y

A. GREWAL, H. IMADA, K. MIWA, M. IMAI-IMADA, K. KIMURA, R. JACULBIA, K. KUHNKE, K. KERN and Y. KIM, "Single-Molecule Phosphorescence and Intersystem Crossing in a Coupled Exciton Plasmon System," *ACS Nano* **19(26)**, 23796–23805 (2025). DOI: 10.1021/acsnano.5c04193

G. EMPERAUGER, M. QIAO, G. BORNET, C. CHEN, R. MARTIN, Y. T. CHEW, B. GÉLY, L. KLEIN, D. BARREDO, A. BROWAEYS and T. LAHAYE, "Benchmarking Direct and Indirect Dipolar Spin-Exchange Interactions between Two Rydberg Atoms," *Phys. Rev. A* **111(6)**, 062806 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevA.111.062806

G. EMPERAUGER, M. QIAO, G. BORNET, Y. T. CHEW, R. MARTIN, B. GÉLY, L. KLEIN, D. BARREDO, T. LAHAYE and A. BROWAEYS, "Probing Spin–Motion Coupling of Two Rydberg Atoms by a Stern-Gerlach-Like Experiment," *Phys. Rev. A* **112(5)**, 053717 (2025). DOI: 10.1103/jd4l-qy2j

５．点検評価と課題

2025 年 10 月 3 日に国際諮問委員会を開催し，分子研の研究所としての立ち位置，組織構造，研究者数，構成員の多様性，所内研究者間の交流，大学院生の獲得など，多岐に亘る意見交換を行った。委員会の議論を受けて，組織改革に関するワーキンググループを立ち上げると共に，所員の研究交流を促すランチョンセミナーの開催，定年教員の後任人事の加速など，2026 年以降の様々な施策に反映させることとした。なお，諮問委員は以下の方々である。

菊地　昇博士（座長，株式会社トヨタコンポン研究所 代表取締役所長），Mischa BONN 教授（Max Planck Institute for Polymer Research, Germany），David A. LEIG 教授（The University of Manchester, UK），James M. LISY 教授（University of Illinois Urbana-Champaign, USA），David E. MANOLOPOULOS 教 授（University of Oxford, UK），Matthias WEIDEMÜLLER 教授（Heidelberg University, Germany）

（渡辺芳人）

5-1　国際諮問委員会による点検評価

分子科学研究所の現状と将来に関する評価・提言を受けるため，国際諮問委員会を組織し，2025 年 10 月 3 日に，委員が一堂に会して委員会を開催した。評価委員は分子科学の広い領域をカバーするよう委員の専門分野の分布を考慮して，各分野で業績と見識のあるシニアの研究者に依頼した。委員会はハイブリッド形式で実施され，現地参加とオンライン参加の両方で行われた。委員構成は以下の通りである。

諮問委員

菊池 昇	株式会社トヨタコンポン研究所 代表取締役所長（Chair）
Mischa BONN	Director and Professor, Max Planck Institute for Polymer Research, Germany
David A. LEIGH	Royal Society Research Professor & Sir Samuel Hall Chair of Chemistry, The University of Manchester, UK
James M. LISY	Research Professor, University of Illinois Urbana-Champaign, USA
David E. MANOLOPOULOS	Professor of Theoretical Chemistry, University of Oxford, UK
Matthias WEIDEMÜLLER	Full Professor, Physics Institute and Heidelberg Center for Quantum Dynamics, Heidelberg University, Germany

委員会当日には，各研究領域，センター，施設の長がそれぞれの現状と課題等について説明し，質疑を受けた。最後に渡辺所長が研究所の現状と戦略的方向性について説明を行い，包括的な討論が行われた。

Program of IMS Advisory Committee 2025

October 3 (Fri)

SESSION 1: OPENING & PRESENTATION Part1

Research Centers & Departments

13:00–13:05	Greetings from Director General, Opening Remarks Yoshihito WATANABE, Director General Noboru KIKUCHI, Chair
13:05 - 13:15	Center for Mesoscopic Sciences Hiromi OKAMOTO, Director
13:15 - 13:25	Research Center of Integrative Molecular Systems (CIMoS) Shuji AKIYAMA, Director
13:25 - 13:35	Department of Photo-Molecular Science Kenji OHMORI, Director
13:35 - 13:45	Department of Theoretical and Computational Molecular Science Shinji SAITO, Director
13:45 - 13:55	Department of Materials Molecular Science Toshihiko YOKOYAMA, Director
13:55 - 14:05	Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science Ryota IINO, Director

SESSION 2: PRESENTATION Part2

Featured topic, Interdisciplinary research center, Facilities, and SOKENDAI

14:15 - 14:25	Exploratory Research Center on Life and Living Systems (ExCELLS) Koichi KATO, Deputy Director
14:25 - 14:35	Division of Research Innovation and Collaboration Takunori TAIRA, Project Professor
14:35 - 14:45	UVSOR Synchrotron Facility Satoshi KERA, Director
14:45 - 14:55	Research Center for Computational Science Masahiro EHARA, Director

14:55 - 15:05 Instrument Center
Toshihiko YOKOYAMA, Director

15:05 - 15:15 Equipment Development Center
Hiroshi YAMAMOTO, Director

15:15 - 15:25 The Graduate University for Advanced Studies, SOKENDAI
Ryota IINO, Chair of SOKENDAI

SESSION 3: OVERVIEW & COMPREHENSIVE DISCUSSION

15:35 - 15:50 Present status & Future perspective of IMS
Yoshihito WATANABE, Director General

15:50 - 16:50 Comprehensive Discussion
All Committee Members (On-site and Online)
Noboru KIKUCHI, Chair

16:50 - 17:00 Summary & Closing Remarks
Noboru KIKUCHI, Chair

以下に諮問委員会から提出された報告書を掲載する。

Advisory Report

to the

Institute for Molecular Science

Advisory Committee 2025

October 3, 2025

Committee Members:

Professor Noboru KIKUCHI (Chair)
President, Toyota Konpon Research Institute, Inc.

Professor Mischa BONN
Director and Professor, Max Planck Institute for Polymer Research, Germany

Professor David A. LEIGH
Royal Society Research Professor & Sir Samuel Hall Chair of Chemistry, The University of Manchester, UK

Professor James M. LISY
Research Professor, University of Illinois Urbana-Champaign, USA

Professor David E. MANOLOPOULOS
Professor of Theoretical Chemistry, University of Oxford, UK

Professor Matthias WEIDEMÜLLER
Full Professor, Physics Institute and Heidelberg Center for Quantum Dynamics, Heidelberg University, Germany

Introduction

This report presents evaluations and recommendations of the International Advisory Committee for the Institute for Molecular Science, based on its October 3, 2025 meeting in Okazaki, Japan, conducted in hybrid format with both on-site and online participation. The committee evaluates the current state of IMS's research activities, organizational structure, and strategic direction under Director General Yoshihito Watanabe. The assessment draws from presentations by Director General and directors of research departments, centers, and facilities, comprehensive discussions, and additional comments subsequently provided by committee members.

The evaluation coincides with IMS's 50th anniversary, providing an opportunity to assess current strengths and address challenges for continued excellence. The committee's recommendations aim to support IMS in strengthening its position as Japan's premier molecular science research institution.

Report Structure:

- Part I: Assessment and recommendations for 13 research departments, centers, and facilities
- Part II: Institutional Initiatives and Strategic Challenges

Part 1: Assessment of Research Departments, Centers, Divisions, and Facilities

1.1 Center for Mesoscopic Sciences

The Center for Mesoscopic Sciences develops innovative measurement and analysis methods for multi-hierarchical molecular systems, addressing the mesoscopic regime where microscopic and macroscopic properties mutually influence each other.

Assessment

The Center demonstrates world-leading technical capabilities in both chiral optical microscopy and atomic-scale near-field spectroscopy. These achievements represent exceptional research contributions at the forefront of the field.

However, organizational challenges threaten the Center's potential. With only two full-time faculty members overseeing multiple collaborative laboratories, Director Okamoto identified insufficient communication among groups as a significant operational challenge. This isolation prevents achieving critical mass, limits collaborative opportunities, and fails to realize synergistic potential with related groups across IMS.

The committee notes great potential for joint projects with other IMS groups, which should be explored more intensively. The Center clearly demonstrates strong technical competence; articulating a more cohesive scientific mission addressing key scientific challenges or unifying questions would help communicate its importance within IMS and to external partners.

Recommendations

- Reinstate regular internal seminars (biweekly or monthly) and annual mini-workshops to restore communication and promote information sharing within the Center.
- Articulate a unified scientific vision that explicitly connects the Center's technological developments to major scientific challenges.
- Actively pursue joint projects with other IMS groups in optical and spectroscopic domain.

1.2 Research Center of Integrative Molecular Systems (CIMoS)

Established in 2013, CIMoS promotes interdisciplinary research integrating life sciences and materials sciences, analyzing molecular systems to understand the logic behind information sharing and control.

Assessment

Individual research groups produce unquestionably high-quality, internationally competitive scientific output.

However, CIMoS has yet to fully realize synergistic value beyond the sum of individual PI contributions. Director Akiyama acknowledged that while initial large membership provided abundant cross-disciplinary opportunities, current smaller membership makes achieving genuine interdisciplinary synergy difficult. The committee questions what added value the center provides to affiliated researchers beyond what they would achieve independently.

The committee identifies fundamental conceptual challenges. Critical ambiguity exists regarding "integrative"—does it refer to research on complex molecular systems, or to integrative collaborative efforts between groups? This ambiguity may be the source of questions regarding "added value" and whether the center becomes more than its parts. The committee further questions whether

the center's current two research directions—"identifying key molecules governing entire system behavior" and "optimizing hierarchical structures of molecular systems"—effectively promote interdisciplinary collaboration or inadvertently hinder such integration. By further clarifying and aligning its mission and research directions, CIMoS has the opportunity to evolve from a network of excellent individual researchers into a fully integrated, synergistic research entity.

Recommendations

- Review and revise the selection process for affiliated members to actively recruit outstanding researchers, thereby increasing CIMoS's global visibility.
- Redefine the center's mission by resolving the conceptual ambiguity of 'integrative.'

1.3 Department of Photo-Molecular Science

The Department of Photo-Molecular Science comprises three research groups led by Professors Okamoto (concurrent with Center for Mesoscopic Sciences), Ohmori, and Kera (concurrent with UVSOR Synchrotron Facility), plus Assistant Professor Nagasaka.

Assessment

Individual research groups demonstrate exceptional scientific achievements with strong international recognition. The committee recognizes the Ohmori Group as exceptional with far-reaching innovative projects, strong international visibility, and many PhD students and postdocs from worldwide. The group achieved breakthrough advances in neutral atom-based quantum computing featured in Science magazine (July 2025) as one of few world-leading groups in this field.

However, the committee sees a critical opportunity: Articulating a clearer, unifying scientific vision could help connect these excellent individual efforts into a more coherent and visible departmental profile. This fragmentation limits opportunities for collaborative interactions, preventing advances beyond individual achievements.

Recommendations

- Articulate a clear vision for how groups collaborate under the foundation of photo-molecular science to generate synergistic effects.

1.4 Department of Theoretical and Computational Molecular Science

The Department of Theoretical and Computational Molecular Science encompasses five research groups covering quantum chemistry, biophysics, and statistical mechanics.

Assessment

The committee recognizes the department's research as of the highest international quality, with all researchers playing leading roles in their respective fields. The committee notes with appreciation the fruitful application of machine learning and artificial intelligence methods, with Professor Hatanaka's work exemplifying this integration.

However, critical structural challenges exist. Despite scientific excellence, group sizes are viewed as too small (approximately three members each) with few postdocs and PhD students, limiting research capabilities. Director Saito emphasized that long-term sustainable growth and global competitiveness require institute-wide recruitment of top international students and postdocs to form properly-sized groups that will attract promising young faculty.

These challenges are compounded by faculty transitions. Until recently, three professors—Ishizaki, Saito, and Ehara—together spanned the full breadth of theoretical molecular science: Quantum dynamics, statistical mechanics/simulation, and electronic structure

theory. The loss of Professor Ishizaki (transferred to the University of Tokyo) and the approaching retirements of Professors Saito and Ehara create critical gaps across these core competencies.

Recommendations

- Recruit three professors within six years to replace retiring faculty, prioritizing an electronic structure theorist to manage the computer cluster when Professor Ehara retires. Recruitment policy might include seeking PIs with strong international profiles to enhance global competitiveness.
- Expand joint appointment strategies with universities, following Professor Hatanaka's successful model, to provide theoretical groups—which fundamentally depend on graduate students—access to students who spend substantial time at IMS.
- Establish a regular theoretical seminar program with invited speakers from across Japan and internationally to foster student interaction across different topics, essential for theoretical groups to thrive.

1.5 Department of Materials Molecular Science

The Department of Materials Molecular Science comprises three divisions covering electronic structure, electronic properties, and molecular functions, with seven principal investigators plus three visiting members.

Assessment

The committee expresses strong appreciation for the breadth of outstanding, future-oriented science in this department, including the excellent new hires, Professor Shimizu and Associate Professor Shinokita.

However, critical structural challenges threaten sustainability. Professor Yokoyama retires in March 2026, and Professor Onishi leaves in October 2026, while Shimizu and Shinokita establish laboratories. Director Yokoyama identified that group sizes are too small, and the committee raised concerns that this limits capacity to compete effectively with university and international research groups. The committee notes that the Sugimoto group, with its large complement of students and staff, might serve as a role model—alongside the Ohmori group—on strengthening IMS's international research visibility through building substantial research groups. Additionally, no internal promotions are allowed, constraining career advancement pathways.

Regarding recruitment strategy, the department identified the need for a professor in functional material synthesis and molecular fabrication. The committee strongly supports broadening the scientific scope of new appointments to attract excellent talent.

Recommendations

- Seek outstanding researchers who fit the department's scope broadly rather than narrowly defining search criteria around functional material synthesis.
- Share successful strategies for building substantial research groups across the department (see also Section 1.13).

1.6 Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science

The Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science encompasses four divisions with seven principal investigators spanning biomolecular functions, biomolecular sensing, complex catalysis, and functional coordination chemistry.

Assessment

The department achieves outstanding research outputs with equipment and instrumentation exceeding many world-class laboratories in the USA and Europe. The department demonstrates remarkable success in developing talent, with many researchers starting independent careers at IMS before moving to highly successful positions at other universities.

However, the committee identifies a fundamental structural challenge. Director Iino frankly noted that the complicated name itself indicates the department's challenges. The department is divided into two very different fields—life science and chemistry—making the establishment of common goals extremely challenging and preventing truly integrated function.

The committee welcomes the appointment of Professor Sawai as cross-appointment member, noting this excellent hire addresses gender diversity—an issue affecting all IMS departments.

Recommendations

- Explore whether realignment of the department's life science and chemistry components with other IMS departments would benefit both areas by creating more coherent organizational structures that facilitate common goal setting.

1.7 Exploratory Research Center on Life and Living Systems (ExCELLS)

Established in 2018, ExCELLS explores the fundamental question "What is life?" through collaboration across three Okazaki institutes (IMS, National Institute for Physiological Sciences (NIPS), and National Institute for Basic Biology (NIBB)) with many joint appointments.

Assessment

The committee recognizes ExCELLS as an impressive initiative addressing one of science's grand challenges, noting substantial progress despite having been created less than ten years ago. There is significant commonality among research and, while not quite yet visible, strong potential for collaboration and cross-fertilization, particularly studying life under extreme environments (pressure, temperature, radiation, vacuum) that may yield results reshaping our views.

However, the committee raised fundamental questions about operational coherence and added value: How diverse activities focus on the overarching question "What is life?" what mechanisms ensure coherent research rather than an assembly of excellent projects, what concrete added value the center provides, and how researchers concretely achieve cross-fertilization. Deputy-director Kato explained ExCELLS recruits researchers sharing the goal of understanding life and conducts project research bringing experts from different fields together around specific subjects. While this approach demonstrates collaborative intent, clearer integrative frameworks would strengthen coherence.

Recommendations

- Articulate the center's unique added value and why ExCELLS is necessary beyond assembling excellent individual research groups.
- Establish concrete mechanisms for researchers to come together, discuss results, and achieve cross-fertilization that ensures coherent research toward the fundamental question "What is life?"

1.8 Division of Research Innovation and Collaboration

The Division of Research Innovation and Collaboration led by Project Professor Taira, focuses on compact high-power laser technology. The division is scheduled to close at year's end, with activities transitioning to the newly established company TIRA.

Assessment

The committee recognizes impressive technological achievements demonstrating remarkable potential for combining basic research with technological progress. The committee notes the division's tight focus on laser development with substantial commercial and scientific applications.

However, the committee raised fundamental questions about how institutes focused on basic science can effectively transfer innovation

to society by founding companies, and how IMS could support such transfer. Professor Taira noted that starting the company represented one approach but emphasized that discussion is needed on maintaining IMS's advantages in basic science while enabling effective societal transfer. The committee further questions to what extent technology transfer is integral to IMS's genuine institutional strategy.

Recommendations

- Define the strategic role and priority of translating basic science into technological applications and transferring them to society within IMS's core institutional mission.
- Establish institutional frameworks supporting this translation and transfer process from fundamental research to societal application.

1.9 UVSOR Synchrotron Facility

UVSOR-III operates as a compact (53-meter ring) synchrotron facility inaugurated in 1983 with upgrades in 2003 and 2012, providing rare vacuum-ultraviolet radiation to the global community. The facility manages 13 beamlines serving approximately 400 users annually, including 10–15% international and 5–7% industrial users.

Assessment

UVSOR maintains excellent technical capabilities and is well-suited to the size of IMS, being largely operable with local resources, and integrated into the diverse scientific environment of IMS, while providing important added value. All researchers involved in UVSOR make a convincing case that the facility is well positioned in the landscape of synchrotron facilities, with some experiments—particularly in materials science and biological applications—performable exclusively at UVSOR using its exquisite detector infrastructure.

However, UVSOR faces a critical strategic challenge. The synchrotron represents part of IMS's raison d'être, yet it has become increasingly challenging to find the right positioning within domestic synchrotron frameworks. Japan now operates 10 facilities, with the government prioritizing the larger ones, particularly SPring-8 and NanoTerasu.

Even the modest UVSOR-III plus proposal (replacing aged components, USD 9 million) remains under negotiation with no progress, while the larger UVSOR-IV reconstruction (USD 100 million) faces even greater challenges. Director Kera noted the need to change the game with new concepts or evidence, such as international visibility, though acknowledged this remains politically difficult. Without successful funding, activities will shrink year by year.

Securing funding requires developing strategic planning procedures to maintain international importance. The committee emphasized that the foundation of any political strategy must be a compelling science case, suggesting it might be time to recalibrate UVSOR's scientific rationale. Yet current discussions addressing funding challenges remain very technology-driven with physics cases somewhat missing.

Director Kera explained ongoing efforts to develop new methodologies for complicated systems including biology, focusing on functional properties, with workshops already initiated. While this represents a scientific case, it did not appear to be sufficiently specific to demonstrate UVSOR's niche or competitive edge, as there is global interest in functional materials and biology. Instead, a promising direction was identified: IMS demonstrates exceptional strength across centers at the materials–life science interface, exploring how life affects materials and how materials affect life. Articulating this as a clear, forward-looking scientific case, specific to IMS and UVSOR, it could define the facility's unique positioning and give its renewal or upgrade strong momentum. The committee assessed developing this science case as challenging but certainly achievable.

Recommendations

- Define UVSOR's specific niche and competitive advantage among Japan's synchrotrons and why this is absolutely necessary, including exploration of potential direction changes beyond current trajectories to maintain international importance.

- Organize an international workshop on UVSOR, convening leading experts to define how the upgraded facility will maintain competitive status, identify frontier questions and key scientific areas for breakthrough discoveries, and establish scientific considerations from which design parameters should follow, while bringing together current and potential users to demonstrate worldwide interest to funding agencies. This would enhance visibility and build persuasive arguments for continued investment and differentiation, serving dual purposes of generating science case ideas while functioning as a political tool.
- Strengthen industry engagement, leveraging UVSOR's existing industrial user base.

1.10 Research Center for Computational Science (RCCS)

The Research Center for Computational Science serves as a national shared computer center providing computational resources to researchers throughout Japan. From FY2024, the center cooperates with the National Institute for Basic Biology (NIBB)'s Trans-scale Biology Center, sharing utilization programs.

Assessment

The committee expressed strong appreciation for RCCS, noting the center is very impressive and extremely well run. RCCS plays a vital role in providing large-scale computation services free of charge for academic use to researchers throughout Japan, serving 1,737 users and 429 groups in 2024—the largest among research field-based computer centers, with continuing growth in 2025. The center represents a very important asset to IMS's longstanding success.

Current challenges include rising electricity costs, which the center addresses through self-driven energy-saving efforts.

To expand capacity and share resources, collaboration with NIBB involves common interests and joint work, with the expectation that such collaboration should increase. As this collaboration develops, maintaining very high efficiency levels while actively fostering synergies with biological and life science research will be important. Supporting these efficiency goals, Director Ehara expressed interest in whether AI could evaluate the hundreds of computer time proposals, which currently takes considerable time.

Recommendations

- Develop shared utilization programs with NIBB and other Okazaki institutes further, ensuring sustained operational efficiency while enhancing collaborative synergies with biological and life science research.
- Implement AI-based systems for proposal evaluation to reduce administrative burden and improve efficiency.
- Explore opportunities to strengthen industry connections, leveraging RCCS's unique computational capabilities.

1.11 Instrument Center

The Instrument Center provides public usage of advanced instruments, supplies liquid helium and nitrogen, serves as spokesperson for the national ARIM (Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology) project supported by MEXT, and functions as the core organization of the Inter-University Network for Common Utilization of Research Equipment promoting instrument sharing throughout Japan.

Assessment

The committee recognized the Instrument Center as very impressive and important for IMS's success, playing a crucial role in national infrastructure.

Through ARIM program participation, the center accepted 142 external applications achieving 70% external sharing rate in FY2024.

The Inter-University Network program achieved approximately 200,000 equipment reservations annually for 20,000 users in 2024.

Liquid helium supply in 2024 reached 52,000 liters—exceeding Nagoya University's requirements—serving UVSOR, IMS research groups, and the Instrument Center.

Current challenges include enhanced ARIM activities that sometimes overwhelm the division director, requiring additional personnel assistance. Rising helium prices—currently four times higher than eight years ago—create a very severe situation. The center also faces difficulties in recruiting technical staff and managing staff, while needing to advance public use of stored experimental data and AI automation.

From the next fiscal year, the center will charge external users for usage fees as ARIM requires.

Recommendations

- Develop strategic solutions for managing rising helium costs and advancing public utilization of stored experimental data.
- Strengthen staffing through additional ARIM personnel, systematic recruitment approaches, and advancing AI and measurement automation for operational efficiency.

1.12 Equipment Development Center

The Equipment Development Center (EDC), celebrating its 50th anniversary in 2025, comprises approximately 10 staff members organized into four divisions: Machining, Electronics, Lithography, and Digital Engineering.

Assessment

The committee recognized the Equipment Development Center as outstanding and essential for IMS's research capabilities. The center develops custom experimental equipment not commercially available and provides rapid turnaround for research needs. External requests totaling 380 in 2024 from 36 institutions, including 83 from the private sector, demonstrate significant growth and the center's growing reputation and capability.

Current challenges include training and recruitment of engineers, while continuing to meet the challenge of implementing new technologies. Regarding cost recovery, the center receives approximately 2–3 million yen annually from external users based on material and engineer costs, which the director considers fair pricing to encourage continued use.

Recommendations

- Develop systematic training and recruitment programs for talented young engineers rather than ad hoc approaches.
- Consider periodic reassessment of cost recovery models to ensure sustainability while maintaining accessibility for productive scientific collaborations.

1.13 The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI)

SOKENDAI, established in 1988 as Japan's first national graduate university, awards PhD degrees through 20 programs provided by 20 research institutes. IMS provides the Molecular Science Program.

Assessment

The committee commended current recruitment efforts and assessed that proposed recruitment strategies could potentially attract more national and international talents to IMS. Recent stipend increases demonstrate positive effects on application numbers, showing that financial support levels significantly influence recruitment success.

However, the committee identified two critical challenges. First, SOKENDAI's student enrollment remains very limited, with only 33 students in FY2024. Second, this imbalance in distribution among groups is rather striking, with half concentrated in just three research groups.

The most successful groups in graduate student recruitment are the Ohmori Group (8 students), Sugimoto Group (5 students), and Segawa Group (3 students), while many groups have zero to two students. The Ohmori Group established self-sustaining international student communities through strategic use of internship programs, while the Sugimoto Group recruited all current graduate students through prior internship participation.

Recommendations

- Expand current successful recruitment programs, including Open Campus, Short-term Internship, Technical College (Kosen) outreach, and International Internship initiatives.
- Document and systematically share successful recruitment strategies from the Ohmori, Sugimoto, and Segawa groups with all faculty.
- Encourage all faculty to engage actively in graduate student recruitment efforts and outreach activities.
- Consider creating a dedicated administrative position for recruitment support.

Part II: Institutional Initiatives and Strategic Challenges

Part II addresses institutional-level challenges and strategic priorities for IMS's continued development. While Part I evaluated individual research units, this section examines cross-cutting issues affecting collective impact and long-term sustainability.

2.1 Institutional Initiatives and Progress

Since assuming the position in 2022, Director General Watanabe has implemented important strategic initiatives addressing key institutional challenges.

Communication and Collaboration Enhancement

To enhance communication and collaboration across divisions, IMS increased faculty meetings from quarterly to monthly, established Strategy Core Member Meetings with younger directors, and initiated annual IMS Presentations enabling cross-divisional research sharing.

Administrative Support Strengthening

To reduce administrative burden, IMS appointed a senior University Research Administrator in 2023 and added six assistant URAs, establishing a Research Strategic Office to cover institutional research, graduate programs, and congress support. URA support has demonstrated a measurable impact, enabling successful grants such as Professor Yamamoto's ERATO from Japan Science and Technology Agency.

Productivity Enhancement through Automation

To enhance research productivity, initiatives are underway, including automated sample preparation, physical property measurement, and synthesis systems, with the ultimate goal of 24/7 facility operation for UVSOR.

Financial Sustainability

External funding increased substantially, with grants beyond government subsidies and KAKENHI rising from 914 million yen (FY2019) to 2,473 million yen (FY2024), reflecting successful funding diversification.

Diversity Advancement

To improve gender and international diversity, IMS recruited three female professors through cross-appointments and launched a scheme covering 50 percent of personnel costs for female postdoctoral researchers and designated assistant professors. Female researcher representation improved from 8.3 percent to 11.2 percent (target: 17 percent by 2027), while international researcher

representation reached 20.2 percent, exceeding the 12 percent target.

The committee commends Director General Watanabe for successfully leading the institute through these challenging circumstances.

2.2 Strategic Challenges

2.2.1 Faculty Succession and Internal Promotion Policy

Critical retirements concentrate within six years: Professors Yokoyama and Okamoto (March 2026), Uozumi (March 2027), and Ohmori (March 2028). The Department of Theoretical and Computational Molecular Science faces acute challenges, having lost Professor Ishizaki to the University of Tokyo, with Professors Saito and Ehara approaching retirement.

IMS's no-internal-promotion policy presents a paradox. Over 50 years, more than 200 assistant professors were promoted elsewhere, fulfilling its inter-university mission. However, successful young staff must leave for promotion, placing IMS at a disadvantage in citations and awards. While prioritizing faculty mobility, IMS may sacrifice retention of exceptional talent by not allowing internal candidates to compete for positions. Heidelberg University provides precedent: Researchers demonstrating international competitiveness through European Research Council grants or prestigious offers become eligible for internal promotion.

Separately, the committee emphasizes that as the scientific landscape has become increasingly interdisciplinary and competitive, faculty appointments should be strategically coordinated across departments to maximize collaborative potential and ensure research synergies drive selection.

Recommendations

- Develop a strategic recruitment framework to coordinate appointments across departments, maximizing collaborative potential and prioritizing internationally visible PIs with research synergies.
- Complete internal promotion policy review within Director General's remaining term.

2.2.2 Research Group Capacity and Student Pipeline Development

Most IMS research groups have approximately 3 members, excluding the PI, which is significantly smaller than those of international competitors. Although research topics are well-suited for doctoral work, the number of postdocs and graduate students is very small. SOKENDAI enrolled only 33 students in FY2024, with a striking imbalance in distribution. Successful recruitment strategies exist within IMS, particularly through strategic use of internship programs (detailed in Part I Section 1.13).

The committee emphasizes cross-appointment arrangements where IMS faculty hold positions at universities with strong graduate programs. Cross-appointed IMS professors at universities would access larger pools of talented young researchers, providing essential new blood for scientific vitality and filling expertise gaps.

Recommendations

- Study recruitment strategies from leading institutions with similar structures (*e.g.*, physics department) to identify proven solutions that can be adapted to IMS's context.
- Establish proactive interactions with universities through cross-appointments and facility access to build a talent pipeline for excellent staff and students.
- Explore corporate sponsorship models from major United States universities to create sustainable funding for graduate student and postdoctoral researcher support.

See Also: Part I Section 1.13 (SOKENDAI)

2.2.3 Institutional Collaboration and Integration

The committee identifies organizational integration as critical for maximizing scientific impact. Given IMS's small group sizes, building critical mass through enhanced communication and collaboration across divisions could strengthen collective capabilities and enable cross-fertilization of ideas. The central challenge: How can IMS ensure the institute becomes more than the sum of its parts?

Director General Watanabe has implemented communication initiatives described in Section 2.1. However, no formal indicators assess their effectiveness.

IMS possesses outstanding capabilities at the materials–life science interface, a truly promising and internationally attractive area. Fostering stronger coordination among related initiatives—for example, CIMoS, Life and Coordination-Complex Molecular Science, and ExCELLS—could amplify impact and make cross-division collaborations more evident. Strategic focus on well-defined themes may increase international prominence. Creating regular, structured opportunities for interaction could spur new collaborations, integrate diverse expertise, and amplify institutional cohesion.

Recommendations

- Establish formal indicators to assess communication and collaboration initiative effectiveness.
- Establish regular interaction mechanisms—interdisciplinary seminars, lunch discussions, forums for ongoing work sharing, and collaborative project calls.
- Open evaluation presentations (including advisory committee sessions) to all institute members so everyone can see what others are doing and what they are proud of.

2.2.4 Organizational Structure and Strategic Direction

The committee sees an important opportunity to build on IMS's strengths by reflecting on whether the current, historically developed organizational structure remains the best fit for the future and its excellent, increasingly multidisciplinary research portfolio. As science evolves toward more collaborative, cross-disciplinary modes of working, thoughtfully and gradually adapting institutional structures to facilitate stronger interactions among groups can further enhance IMS's collective impact over time.

Looking toward the future requires reexamining IMS's mission, differentiation, and competitive edge to determine how structural evolution can happen while honoring tradition.

Recommendations

- Initiate a comprehensive review of organizational structure, considering IMS's mission, competitive advantages, and optimal configuration for multidisciplinary molecular science.
- Design structural evolution enabling collaborative productivity while maintaining research excellence.
- Consider coordination with NINS for broader structural reforms addressing competitive positioning.

2.2.5 International Engagement and Diversity

IMS has no international principal investigators despite 20 percent of researchers at the postdoc level and above being international. The currently weak yen makes Japanese salaries unattractive at the professorial level. The committee proposed satellite laboratories as an alternative, noting that such arrangements bring diversity not only in scientific approaches but also in institutional perspectives on how research is organized and conducted.

Gender diversity has made progress as described in Section 2.1. The committee expressed strong support for female cross-appointment initiatives and personnel cost support schemes, recognizing gender diversity as a critical issue for all departments.

Recommendations

- Explore satellite laboratory arrangements to attract international PIs.
- Consider participating in or leading World Premier International Research Center Initiative bids to provide funding for cross-national appointments.
- Continue diversity initiatives for female researchers and implement specific support mechanisms women identify as meaningful, such as addressing the no-internal-promotion policy impacts on family planning and providing postdoctoral support during childbirth.

Conclusion

The Institute for Molecular Science maintains outstanding research quality across all units, supported by exceptional facilities including the synchrotron and computing center. Strong leadership under Director General Watanabe and motivated researchers create the foundation for continued excellence. IMS's success in developing young researchers who progress to prestigious positions demonstrates its crucial role in the Japanese molecular science community.

While IMS maintains a strong foundation, several structural aspects could be strengthened to enhance its impact further. Many groups currently operate in relatively small, specialized units, which can limit opportunities for the critical mass and intellectual exchange that drive major advances in contemporary molecular science. Promoting deeper communication and collaboration across divisions will be key to realizing IMS's full potential as an integrated, innovative institution. Addressing interconnected issues such as faculty succession, graduate student recruitment, organizational cohesion, and facility renewal through coordinated strategic planning will help sustain the institute's excellence.

IMS's 50th anniversary provides an opportunity for strategic thinking about institutional development over the next 10–20 years. With bold planning, adequate resources, and sustained commitment to scientific excellence through enhanced collaboration, IMS can address current challenges and remain competitive internationally while building on its strengths as Japan's premier molecular science research institution.

Respectfully submitted,

Noboru KIKUCHI

Chair, IMS Advisory Committee 2025

October 2025

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はなく，共同利用支援業務を滞りなく行うために技術職員を配置した。高度な研究を進めるためには研究開発が不可欠であり，研究職員との密な連携が必須である。

教員の流動性が高い分子科学研究所では，着任後の研究立ち上げスピードの速さが求められる。また，各研究グループサイズが小さいことも補う必要があり，このような観点でも施設を充実させることが重要である。また，分子研転出後もこれらの施設を利用することで研究のアクティビティを維持することが可能である。研究者が開発した優れた装置が転出後も，共同利用設備として施設の管理下でさらに広くの共同利用に供されるケースもある。このように，研究所にとって施設の充実は，研究職員が流動していくシステムそのものを支援する意味もあり，施設の継続的な運営が重要である。高度な施設運営を維持するために施設の技術職員の技術の向上に努め，絶えず技術レベルの高い人材を確保するように留意している。技術職員が研究所外に出かけその高い技術力で研究支援するなどの技術交流も重要である。

現在，極端紫外光研究施設（UVSOR 施設），計算科学研究センター（組織的には岡崎共通研究施設のひとつ）が大型設備を有し，計画的に高度化，更新を行うことで世界的にトップクラスの共同利用を実施している。国内外の超大型の放射光施設やスーパーコンピュータ拠点との連携を図りつつ，差別化・役割分担を行い，機動性を活かした特徴ある共同利用が進んでいる。機器センター（2007 年に旧機器センター，旧極低温センター，旧化学試料室の機能を再構築して設置）は本来の共同利用支援業務を行う一方で，全国規模でナノテクノロジーネットワーク事業や大学連携研究設備ネットワーク事業を推進し，特定分野の重点的な強化，大学等の研究を支えるシステム作りを行ってきた。また，装置開発室は高度な特殊装置・コンポーネント開発にその高い技術力を活かすべく，研究所外からの依頼に対応することで共同利用施設としての役目を果たしている。

分子研では，共同利用をより活性化し，大学の研究活動に貢献する施策として，2018 年に新しい人事交流制度を開始した。これは，かつて法人化前に運用されていた「流動研究部門」制度に準じ，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，①特別研究部門を整備し，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。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 4 名を配置している。なお，クロスアポイントメント教員は当初，特別研究部門に配置していたが，2026 年からは各研究部門やセンターへの配置と変更している。

生理学研究所および基礎生物学研究と共同して新たな学術分野を立ち上げる努力の一環として 2000 年 4 月に発足した岡崎統合バイオサイエンスセンターを，2018 年 4 月に生命創成探究センター（エクセルズ）へと発展的に改組した。さらに，スピン生命科学コアを生理研およびエクセルズと協力して設置している。

（渡辺芳人）

6-1　極端紫外光研究施設（UVSOR）

6-1-1　2025 年度概要

2025 年 3 ～ 5 月をシャットダウン期間とし，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た。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た。入射ビームの電流値は 300 mA に復帰できたが，入射効率の改善余地があり，継続して調整作業を進めている。

施設スタッフとして，加藤特任教授，佐藤助教，水川技術支援員らが転出し，新たに金安教授，高橋技術員，新井特任専門員，池田技術支援員らが着任した。

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。

[BL3B]　木村真一グループ

重い電子がプランキアン時間で運動していることをはじめて観測

――強く相互作用した電子の新たな法則を発見――

[BL7U]　解良聡グループ，田中清尚グループ

分子の運命の赤い糸は，確かにそこにあった

――分子界面に潜む「弱い結びつき」を電子共鳴で可視化

[BL5U]　田中清尚グループ

ダイナミックな電子が効率よく熱を電気に変換する

――近藤効果が熱電材料の性能を向上させるメカニズムを実験的に解明――

[BL7U]　田中清尚グループら

銅酸化物の高温超伝導体で特殊な電子状態「ノード金属」を発見

――三層構造が高い超伝導を実現する仕組みの解明へ――

[BL6U]　松井文彦グループら

光で確かめた金結晶表面のスピンの向き

――新しい 2 次元スピン検出方式で，表面電子のスピンの方向を可視化し決定――

[BL3U]　杉本敏樹グループ

電流で誘起される非熱的触媒反応の駆動原理を解明

――持続可能な温室効果ガス資源化の次世代化学技術に道筋――

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 2024 年より物性研（ISSP_SOR）を加えた 4 機関連携による「放射光学術基盤ネットワーク」事業として「開発研究多機能ビームライン BL-11A，11B」の整備を進めてきた。今年度，2 年弱におよぶ開発が完了し，軟Ｘ線と硬Ｘ線の同位置照射が実現し，放射光 2 ビーム利用が開始された。これにより光の順次利用計測から同時利用計測の道が切り開かれた。

6-1-2　将来構想概要

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施設刷新の将来計画としていくつかの事業計画を立案している。日本学術会議が募集した「未来の学術振興構想」における「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」が，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。今年度，その改訂版として未来の学術振興構想 2026 版を提出した。

まだ光を利活用できていない分野の一つである，バイオやライフサイエンス分野へ啓発活動を継続しており，軟Ｘ線や真空紫外線を用いた斬新な研究成果の発信を狙った事業を開始した。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として 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。OML 事業経費により「ラベルフリーで元素を用いてオルガネラソーティングする技術開発」「構造光による『生命現象のゆらぎ』の摂動と制御技術の開発」について，荒木主任研究員，岩山主任研究員らがそれぞれチームを編成し推進している。また，光源グループによる先端的量子ビーム実験環境･設備の継続的な深化も継続しており，低エネルギー光源施設における国際的な発信力強化につながっている。

2025 年末より，他機関との議論を深め，大学共同利用機関と共同利用／共同研究拠点の連携による事業「量子マルチビーム共創拠点」を共同提案することになった。分子科学研究所に加え，物質構造科学研究所（Photon Factory 施設および低速陽電子施設），広島大学放射光科学研究所（HiSOR），東京大学物性研究所（軌道放射物性研究施設（ISSP-SOR），極限コヒーレント光科学研究センター（LASOR））の 4 機関を軸とした提案である。複数の量子ビームの同時利用による相関計測をはじめとして，計測手法や研究分野の融合による新領域の開拓を推進する。硬Ｘ線大型光源 SPring-8 と軟Ｘ線中型光源 NanoTerasu を補完する真空紫外（VUV）領域の小型高輝度光源に加えて，高強度陽電子源や極短パルスレーザー等を整備し，初期開発や技術人材育成に重点を置くことで，国際競争力と持続発展力を強化するとともに，物質・生命の多様な機能の根源を探究する。ロードマップ 2026 への申請を予定している。

一方で，高輝度放射光リング 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，予算要求を進めている。電子ビーム蓄積リングの電磁石構成を見直し，ビーム位置モニター機構の導入により，蓄積ビームの安定性の向上と，より高精度なビーム制御による 24 時間運転を目標としている。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目論見である。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と期待する。

本報告は，UVSOR 施設運営委員会（2018 年度より年 2 回），UVSOR 将来検討ワーキング・小委員会（2018 年 10 月以降逐次），UVSOR 利用者懇談会（2018 年度より年 1 回），国際諮問委員会や運営顧問会議（2019 年 12 月，2024 年 2 月，2025 年 9 月）における意見交換を基に改訂してきたものである（過去リポート参照）。また継続して外国人運営顧問により意見聴取も行われている（分子研リポート 2016 から 2024 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として参画し，さらに 2022 〜 2024 年度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を務め，本国家プロジェクトの設備共用・DX 拠点を担っている。

2025 年度の機器センターの人員は以下のようである。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，上田 正技師，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萬代恭子技術員が本年度に新たに採用され計 9 名の在籍となった。ユニット長は 2025 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 3 名（高山敬史，伊木志成子，石田向日葵）に加え，技術支援員として内田真理子，久保田亜紀子，今井弓子の 3 名，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 1 名（太田康仁）と ARIM データエンジニア 1 名（岩瀬未空）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，機器センターはその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，2024 年度から運転されている。2026 年度には ARIM 事業 2025 年度補正予算から物理物性測定システムが導入される予定である。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的機器。これらの維持は，特に人事流動の活発な分子研において，各グループが類似の装置をそれぞれ新たに用意する必要がない環境作りの面で最重要である。一方，使用頻度や維持経費の点で負担が大きいと判断されたものは見直しの対象とし，所内特定グループや他機関へも含めた移設などにより有効に利用してもらうことも検討する。
2) 当機器センターとしての特色ある測定機器。汎用機器をベースとしつつ改良を加えることによってオリジナル性の高いシステムを開発し，それを共同利用に供する取り組みを強化する。分子科学研究所の特色として「低温」「オペランド」を柱とした分野強化を進める。その際，技術職員が積極的に関与して技術力を高めることが重要であり，主任研究員制度の適用も視野に含める。所外の研究者の要請・提案を取り込みつつ連携して進めるとともに，所内研究者の積極的な関与も求める。当センター内のみならず，UVSOR をはじめとする所内センター等と共同して取り組むことも効果的である。所内技術職員の連携協力が技術を支えるのに不可欠であるが，コミュニティ全体から提案を求める体制づくりも必要となろう。
3) 国際的な水準での先端的機器。分子科学の発展・深化を強力に推進する研究拠点としての分子研の役割を体現する施設として，UVSOR や計算科学研究センターと同様に，機器センターも機能する必要がある。高磁場 NMR 装置や ESR 装置は，国際的な競争力を有する先端的機器群であり，研究所全体として明確に位置付けを行い，利用・運営体制を整備することによって，このミッションに対応すべきである。国外からの利用にも対応するため，技術職員には国際性が求められる。2) と同様に，所外コミュニティからの要請・提案と，所内研究者の積極的関与が不可

欠である。特に，新規ユーザーの開拓は，分子科学の新領域形成へと繋がると期待されるものであり，これまで分子研との繋がりがあまり深くはなかった研究者層・学協会との積極的な連携を模索することにも取り組む。先端的機器は不断の性能更新が宿命であるが，全ての面でトップたることは不可能であるので，意識して差別化を行い，分子研ならではの機器集合体を構成することに留意する。

2021 年度から 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 500 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 50 年以上が経過し，一部に老朽化，性能不足，精度低下などが進み，設備の更新は急務となっている。2013 年度には，ナノテクノロジープラットフォーム事業の一環として，マイクロストラクチャー製作・評価のための先進設備を導入することができた。また，2019 年度には 5 軸加工機と電子ビームリソグラフィー装置の導入を行った。2020 年度は，附属 3 棟の改修により，工作環境およびクリーンルームの整備を行うこともできた。今後も，装置開発室の将来計画・将来像の検討を進めながら，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。2025 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。

2026 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るための汎用性があるばかりでなく，ユーザーサイドの PC クラスタでは不可能な大規模計算を実行できる性能を有する。

高性能分子シミュレータは，主として HPE 製の Apollo シリーズで構成される 834 ノードの共有メモリ型スカラ計算機クラスタであり，全サーバは全て同一 CPU（AMD EPYC 7763），同一 OS（Rocky Linux 8.10）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 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 Lustre ファイルシステムを共有している。

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，ORCA，Molpro，TURBOMOLE，分子動力学分野では，GROMACS，Amber, LAMMPS 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。さらに生物物理分野で活用される AlphaFold3 も実装している。

共同利用に関しては，2025 年度は 440 研究グループにより，総数 1,988 名（2026 年 2 月現在）におよぶ利用者がこれらのシステムを日常的に利用している。近年，共同利用における利用者数が増加傾向にあり，このことは計算科学研究センターが分子科学分野，物性科学分野，生物物理分野において極めて重要な役割を担っており，特色のある計算機資源とソフトウェアを提供していることを示している。最近は，錯体化学分野や有機化学分野など幅広い分野の研究者の利用も増加している。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, 2025 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「生命科学を加速するバイオインフォマティクスとスーパーコンピュータ」(基礎生物学分野開催) と２つのスクール「第 15 回量子化学スクール」と「第 19 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 R^3 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。

2025 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：NVDIA 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。

この目的のために，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。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。特に，2025 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」を発足し，研究活動を開始した。「生命体のシミュレーション」チームでは，細胞や組織，臓器，個体の生命力を数理モデルや数値計算を用いてコンピューター上で再構成し，細胞の増殖や組織形成，生命体の生と死などをシステムとして解明することを目指している。また，「ネオ生命体の創成」では，天然には存在しない生体分子および生命分子システムを用いることで，自然発生的には達成し得ない高次機能を発現しうる生命体，すなわちネオ生命体の開発を目指して，任意の機能を持つ生体分子の設計法の確立や未知の生体分子の探索，それらを組み合わせた分子システムの開発，開発した分子システムを細胞や個体内に大規模インストールするための方法論開発などを目指している。

また，「物質－生命の境界探査」チーム，「オルガネラの時空間アトラス編纂」チームについても，継続して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。

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」を実施している。この活動を推進する上で，2025 年 4 月に創成研究領域にラボオートメーション研究グループを新たに設置した。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）の活動を実施し，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。加えて，岡崎共通研究施設岡崎連携プラットフォーム オープンミックスラボ（OML OKAZAKI）において，ヒューマングライコームプロジェクトおよびスピン生命フロンティアの研究活動を開始した。

これらの連携活動を推進する上で，2025 年 4 月に研究戦略室を研究力強化戦略室へ組織改編するとともに，URA を配置した。

2025 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，および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，大阪大学蛋白質研究所，北海道大学低温科学研究所，リール大学（フランス）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図したシンポジウムも開催している。特に，アカデミアシニカ（台湾）については，これまで学術交流がある生物科学研究所に加えて，新たに応用科学研究センターとの学術協定を今年度4月に締結した。これらの国際交流事業の一環として，日本・韓国・台湾の研究者にて共同企画した Frontier Bioorganization Forum 2025 を 11 月に岡崎にて開催した。また，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。さらに，大阪大学蛋白質研究所（IPR）と合同で ExCELLS × IPR 合同ファカルティディベロップメントを開催し，国内および国外での競争力強化に向けた今後の共同利用・共同研究のあり方などについて議論した。

分子科学研究所を兼務している教員のうち，加藤晃一教授が副センター長および研究力強化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，岡本泰典准教授が生命分子設計化学研究グループをそれぞれ主宰している。

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），短期インターンシップ生として受け入れ，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 年度以降は，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

（2026 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	2025	2022 ～ 2025 計
北海道大学	0					1	1
東北大学	6				1	1	2
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				3	3
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	5	27
名古屋工業大学	7	1	1			1	2
京都大学	2	5					
大阪大学	6	1		1	1	1	3
広島大学	0	1				1	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	6	15
大阪公立大学	0					1	1
慶応義塾大学						1	1
立教大学	2						
中央大学	1						
早稲田大学	0			2	1	2	5
中部大学		2					
海外機関	28	9			3	2	5
計	151	132	16	13	14	25	68

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）。金沢大学（11 名）。福井大学（10 名）。愛媛大学，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，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，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彩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　　（2025 年 5 月 1 日現在）

		分子科学コース
担当教員	教　授	16
	准教授	11
	助　教	20
	計	47

在籍学生数　単位：人　（2025 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
	2025	−	−	−	−	8	3(1)
	2024	−	−	−	−	6(1)	6(4)
	2023	−	−	−	−	2	2
	2022	2	0	3	0	−	−
	計	2	0	3	0	16(1)	11(5)

（　）は留学生数で内数。
フランス 4 名，ペルー 1 名，アルジェリア 1 名，二専攻・コース合計で 6 名。

入学と学位取得の状況　単位：人　（2026 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	2025	2022 〜 2025 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	8	17
		博士後期	−	−	−	2	6	4	12
	計		63	70	10	5	12	12	39
学位取得者数	構造分子科学専攻	課程博士	20	22	6	4	5	0	15
		論文博士	0	0	0	0	0	0	0
	機能分子科学専攻	課程博士	19	16	3	3	5	0	11
		論文博士	3	1	0	0	0	0	0
	分子科学コース	課程博士	−	−	−	0	0	0	0
		論文博士	−	−	−	1	0	0	1
	計		42	39	9	8	10	0	27

外国人留学生数（国別入学者数）　単位：人　（2026 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	2025	2022 〜 2025 計
フランス		0, 1			3	4	7
ドイツ		1, 0					
カナダ		1, 0					

エルサルバドル		0, 1					
ペルー					1	1	2
中　国	14, 5	0, 5					
韓　国		0, 1					
台　湾						1	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	2
合計	17, 13	4, 15	0, 0	0	5	7	12

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　　（2026 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 〜 2025
北海道大学		3(3)					
室蘭工業大学							1(1)
東北大学		1		1(1)		1	3(2)
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)		
横浜国立大学							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					
静岡大学							1(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)					
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)	3(1)
大阪大学	1(1)						
神戸大学				1(1)			
鳥取大学				1			2(2)

	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 ～ 2025
岡山大学	1				1		
広島大学		1				1(1)	
山口大学							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)		1(1)
立命館大学				1(1)	1(1)		1(1)
関西大学					1(1)		
近畿大学			1				2(2)
福岡大学	1(1)						
海外機関・その他	17(2)	4(1)		12(3)	11(3)		6
合計	35(15)	33(21)	6(2)	28(10)	37(23)	4(3)	29(17)

（ ）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，東京都立大学（3 名）。筑波大学，京都工芸繊維大学，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，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）。

修了生の進路　単位：人　　（2025 年 12 月現在）

		2010 ～ 2024 年度修了生の修了直後の進路状況			1991 ～ 2024 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	27	21	48
	准教授	1	0	1	14	11	25
	講　師	0	0	0	4	3	7
	助　教	1	1	2	14	9	23
	研究職	33	22	55	−	−	−
	小計	35	23	58	−	−	−
民間企業（研究職含む）		8	9	17	−	−	−
その他		11	9	20	−	−	−
合計		54	41	95	−	−	−

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

2025 年 6 月 14 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 ショート動画（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。日本全国から 50 数名の大学生・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 10 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。難しい内容も一部含まれていたが，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。その後，総研大現役大学院生 3 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があり，分子研でどのように研究活動を行っているのか，岡崎でどのように過ごしているのか等についての紹介があった。

お昼休憩時間は，新しくなっている職員会館の 1 階のオープンスペースで約 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さんと分子研の教員・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。今回のランチ交流会では，会場に掲載していた研究室紹介のポスターでの議論も白熱していたことが印象的であった。

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を中心として，様々な形態でラボツアーが実施された。今年は，参加学生に研究室訪問の時間帯を調整してもらうなどのお願いをしていたこともあり，訪問学生の一極集中による混乱をある程度避けられ，訪問学生にもより充実した研究室見学を行ってもらえたのではないかと思う。

次回開催に向けて改善できる余地はありそうだが，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，2025 年度は 52 件の短期インターンシップ（学部学生 39 件，大学院生 9 件，高専生 2 件，会社員 2 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	九州大学	学部生	杉本 G	4 月　2 日～　5 日
2	大阪公立大学	大学院生	解良 G	4 月 21 日～ 25 日
3	大阪公立大学	大学院生	解良 G	4 月 21 日～ 25 日
4	慶應義塾大学	大学院生	杉本 G	5 月 21 日～ 22 日
5	東京大学	学部生	大森 G	7 月　8 日～　9 日
6	東京科学大学	大学院生	熊谷 G	7 月 14 日～ 16 日
7	東京科学大学	大学院生	熊谷 G	7 月 14 日～ 16 日
8	東京科学大学	学部生	飯野 G	8 月 17 日～ 22 日
9	名城大学	学部生	瀬川 G	9 月　5 日
10	名城大学	学部生	瀬川 G	9 月　5 日
11	名城大学	学部生	瀬川 G	9 月　5 日
12	兵庫県立大学	学部生	岡本 G	9 月　8 日～ 12 日
13	名古屋大学	大学院生	瀬川 G	10 月 24 日
14	名古屋大学	大学院生	瀬川 G	10 月 24 日
15	名古屋大学	大学院生	瀬川 G	10 月 24 日
16	名古屋大学	学部生	瀬川 G	10 月 24 日
17	名古屋大学	学部生	瀬川 G	10 月 24 日
18	名古屋大学	学部生	瀬川 G	10 月 24 日
19	名古屋大学	学部生	奥村 G・岡崎 G	10 月 27 日～ 29 日 11 月 13 日～ 14 日
20	DIC 株式会社	社会人	岡本 G	10 月 28 日
21	長浜バイオ大学	学部生	飯野 G	11 月　9 日～ 13 日 2 月　8 日～ 12 日
22	株式会社 ADEKA	社会人	熊谷 G	1 月　5 日

23	福岡大学	学部生	瀬川 G	2 月　5 日～　6 日
24	東京理科大学	学部生	瀬川 G	2 月　6 日～　6 日
25	名古屋大学	学部生	瀬川 G	2 月　6 日
26	早稲田大学	大学院生	奥村 G	2 月　9 日
27	新潟大学	学部生	斉藤 G・松井 G	2 月 16 日～ 19 日
28	東京大学	学部生	岡崎 G・秋山 G	2 月 16 日，18 日
29	名城大学	学部生	瀬川 G	2 月 19 日
30	名城大学	学部生	瀬川 G	2 月 19 日
31	名城大学	学部生	瀬川 G	2 月 19 日
32	名城大学	学部生	瀬川 G	2 月 19 日
33	名城大学	学部生	瀬川 G	2 月 19 日
34	名城大学	学部生	瀬川 G	2 月 19 日
35	名城大学	学部生	瀬川 G	2 月 19 日
36	名城大学	学部生	瀬川 G	2 月 19 日
37	名城大学	学部生	瀬川 G	2 月 19 日
38	岩手大学	学部生	山本 G	2 月 23 日～ 26 日
39	近畿大学	学部生	大森 G	2 月 24 日～ 26 日
40	近畿大学	学部生	大森 G	2 月 24 日～ 26 日
41	近畿大学	学部生	大森 G	2 月 24 日～ 26 日
42	近畿大学	学部生	大森 G	2 月 24 日～ 26 日
43	近畿大学	学部生	大森 G	2 月 24 日～ 26 日
44	近畿大学	学部生	大森 G	2 月 24 日～ 26 日
45	東京大学	学部生	大森 G	2 月 24 日～ 26 日
46	琉球大学	学部生	斉藤 G・岡崎 G・奥村 G	3 月　1 日～　7 日
47	石巻専修大学	学部生	飯野 G・岡崎 G・奥村 G	3 月　1 日～　5 日
48	東京科学大学	学部生	瀬川 G・山本 G	3 月 10 日～ 11 日
49	愛媛大学	学部生	瀬川 G・山本 G	3 月 10 日～ 11 日
50	東北大学	学部生	椴山 G	3 月 10 日～ 12 日
51	東京科学大学	学部生	瀬川 G・山本 G	3 月 10 日
52	秋田大学	学部生	山本 G	3 月 11 日
53	鈴鹿工業高等専門学校	本科生	瀬川 G・椴山 G	3 月 11 日～ 12 日
54	鈴鹿工業高等専門学校	本科生	瀬川 G・椴山 G	3 月 11 日～ 12 日
55	東北大学	学部生	飯野 G	3 月 24 日～ 26 日

56	東京大学	学部生	大森 G	3 月 24 日
57	津山工業高等専門学校	学部生	秋山 G・岡本 G	3 月 24 日～ 25 日
58	九州大学	大学院生	清水 G	3 月 24 日
59	東京大学	学部生	杉本 G	3 月 26 日～ 28 日

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 2026 年 1 月 21 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，国立台湾大学から Ya-Ping CHIU 教授，同じく台湾の国立陽明交通大学から平松弘嗣准教授を招き，生体分子化学，表面化学の実験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。

HIRAMATSU, Hirotsugu
Development of LC-Raman Technique and Application to Molecular Science
CHIU, Ya-Ping
Cross-Sectional STM for Investigating Interface Property in Heterostructures and Future Electronics

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

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

回　数	実施月日	入場者数
第 11 回	2006.10.21	2058 人
第 12 回	2009.10.17	1346 人
第 13 回	2012.10.20	1126 人
第 14 回	2015.10.17	2600 人
第 15 回	2018.10.20	3878 人
第 16 回	2021.10.23 （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。

本年度は新たな試みとして, 従来の配信プラットフォームに加え,「ニコニコサイエンス」での同時配信を導入した。配信チャネルを拡充したことで，視聴者層のさらなる拡大に成功し，当初の想定を大幅に上回る反響を得ることができた。これら一連の成果を踏まえ，来年度以降も豊田理化学研究所の協力を得て，引き続き本体制での配信を継続することとした。

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
143	2025．7.10	観ることで広がる触媒の世界	唯 美津木 （名古屋大学教授（元分子研准教授））	207 名 （アーカイブ配信累計 2197 回；3204 回再生 （2026.3.31 時点））

144	2025.11.13	「ねじれた光」で見る左と右，鏡写しの世界	岡本 裕巳 （分子科学研究所教授）	269 名 （アーカイブ配信 累計 1898 回； 4003 回再生 （2026.3.31 時点））
145	2026. 1.29	分子を使った光電変換の科学 ～革新的発光・発電素子の実現に向けて～	伊澤　誠一郎 （東京科学大学准教授（元分子研助教））	167 名 （アーカイブ配信 累計 1385 回； 4625 回再生 （2026.3.31 時点））
146*	2026. 3.14	僕たちは“星屑”から生まれた？	渡部 潤一 （国立天文台上席教授）	196 名（会場） 110 名 （アーカイブ配信 累計 1511 回； 22775 回再生 （2026.3.31 時点））
		最古の体内時計が日の出を知らせた約 22 億年前のある日	秋山 修志 （分子科学研究所教授）	

アーカイブ配信累計は分子研 YouTube；ニコニコサイエンス

＊自然科学研究機構シンポジウムと同時開催

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



2006 年度より年 2 回のペースで開催されている自然科学研究機構シンポジウムは，本年度で第 41 回を数えた。2025 年度の分子科学研究所の関与は，分子科学研究所の創立 50 周年を記念し，特別シンポジウム「自然科学研究機構シンポジウム×分子科学フォーラム　元素から紐解く宇宙と生命のものがたり」として企画し，2026 年 3 月 14 日（土）に岡崎コンファレンスセンターにて開催した。

本シンポジウムは，宇宙，生命，そしてそれらを構成する「元素」をテーマに掲げ，学術的な専門性と一般市民の関心を高次元で融合させることを目的とした。午前中に次世代育成事業として「小中高生を対象とした元素検定」を併催した結果，午後のシンポジウムには多くの親子連れが継続して参加する形となった。この戦略的なプログラム構成により，専門性の高い学術講演でありながら，会場が満席となる極めて高い動員実績を記録した。講演セッションでは，国立天文台・渡部潤一上席教授および分子科学研究所・秋山修志教授が登壇し，宇宙の進化から生命の体内時計に至るまで，分子科学の視点から紐解く壮大な知見が共有された。また，長谷川美貴教授と中村敏和チームリーダーによる「挑戦！　元素クイズ」では，双方向型のコミュニケーションを通じて参加者の理解を深めるなど，科学コミュニケーションにおける有効な手法が実践された。

本シンポジウムは，50 周年という節目にふさわしい成果を収め，次世代を担う層に対して科学への興味を喚起する重要な機会となった。これは，研究機関が果たすべき社会貢献および科学教育の普及という側面において，極めて意義深いものである。当日の模様は，現在分子研 YouTube およびニコニコサイエンスにてアーカイブ配信を実施しており，時間・場所の制約を超えた広範なアウトリーチ活動を継続している。

第 41 回自然科学研究機構シンポジウム「元素から紐解く宇宙と生命のものがたり」プログラム

12:30　開場

13:30　オープニング　ようこそ自然科学研究機構シンポジウムへ！
渡辺 芳人（分子科学研究所長）

13:35　挑戦！　元素クイズ
実は身近な元素。元素の知識をクイズ形式で楽しくゲット！
出題　元素同好会，解説　長谷川美貴（青山学院大学）中村敏和（分子研）

14:05　講演　渡部 潤一（自然科学研究機構 国立天文台 上席教授）
「僕たちは“星屑”から生まれた？」

14:45　休憩

15:05　最先端の研究が集結！　自然科学研究機構とは？

15:10　講演　秋山 修志（分子科学研究所 教授）
「最古の体内時計が日の出を知らせた約 22 億年前のある日」

15:50　クロージング　閉会のあいさつ
川合 眞紀（自然科学研究機構長）

16:00　終了

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
40	2025. 9.13	命のかけらを探そう ―地球の外に生命が存在する可能性はあるのか？―	日本科学未来館 （ハイブリッド開催）
41	2026. 3.14	元素から紐解く宇宙と生命のものがたり	岡崎コンファレンスセンター （ハイブリッド開催）

(2) 大学共同利用機関シンポジウム

本シンポジウムは，自然科学研究機構を含む 4 つの大学共同利用機関法人を構成する 19 の研究機関と宇宙科学研究所が，総合研究大学院大学と合同で開催している。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。2025 年度（第 15 回）は，2025 年 10 月 4 日（土）に国際日本文化研究センター（京都市）において，「大学共同利用機関そのもの」に焦点を当てた対面とオンラインのハイブリッド形式で開催された。

今回は，研究予算や社会ニーズの変化に伴い，機関同士でも相互に見えにくくなっている各機関の役割や課題を共有し，今後のあり方を議論することを主眼とした。セッション 1「大学共同利用機関の役割と機能」では，生理学研究所の定藤 規弘特任教授が，分子科学研究所・生命創成探究センターと連携した「スピン生命科学コア」の取り組みを例に，組織横断的な新領域研究の展開を紹介した。また，セッション 3「社会とともに歩む大学共同利用機関」においては，分子科学研究所の中村敏和特任部長が「自然科学研究系の大学共同利用機関が為すべきこと」と題し，学術深化と設備高度化が進む現状において，融合学際研究の環境整備や，高額化した研究資源の効率的活用，そして研究マネジメントを担う若手人材の重要性を社会に周知する必要性について提言を行い，大学共同利用機関の将来像について議論を深めた。

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）
16	2025.10. 4	大学共同利用機関ってなに？	国際日本文化研究センター （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	愛知県立高蔵寺高等学校 名古屋市役所経済局　ほか	2	237
2024	8	260	静岡県立浜松南高等学校 愛知県高校理科教員研修　ほか	0	260
2025	11	248	関西学院千里国際高等部，静岡県立浜松南高等学校，山梨県立日川高等学校，三重県立津高等学校・伊勢高等学校，岡崎ぎゃざ，蒲郡市議会議員，愛知県弁護士会，愛知県立春日井高等学校，愛知県立岡崎北高等学校，岡崎市商工会議所青年部，中部環境計量士会	0	248

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

(3) 大阪・関西万博での特別対談イベントの実施

一般向けのイベントとして, 量子力学誕生 100 周年を記念し, 2025 年 8 月 15 日, 大阪･関西万博にてスペシャルトーク『攻殻機動隊×量子コンピュータ』を開催した。本イベントでは，大森賢治教授による特別講義に加え，映画監督の押井守氏を迎えたスペシャル対談を執り行った。SF 作品が描く未来像と最先端科学の融合をテーマに，新たな発想を促す多角的な議論が展開された。会場（EXPO メッセ）は立ち見が続くほどの大盛況となった。また，YouTube によるライブ配信も並行して実施し，幅広い層へ量子力学への関心を喚起する機会となった。なお，本内容は分子研 YouTube でアーカイブ配信を行っており，2026.3 月末時点で 1.3 万回を超えて再生されている。

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。2025 年度は原島崇徳助教より出前授業の実施，坂田諒一助教より進路講演会を実施した。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。また，自然科学研究機構岡崎 3 機関は，同じく SSH 指定校である愛知県立豊田西高等学校の見学受け入れ等を契機に，同校の実施する課題研究への講師派遣を行っている。2025 年度は原島崇徳助教と片柳英樹助手が課題研究への指導を実施した。

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
2025．6.27	原島　崇徳　助教	分子研授業～授業の先に何があるのか～
2025.12．8	坂田　諒一　助教	進路講演会
2026．1.30	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 17 回（2025 年 12 月 26 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分子に関するクイズの出題を行う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
17	2025.12.26	岡崎コンファレンスセンター	950

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
2026．2．4	振り子の仕組みと活用例	豊田　朋範　主任技師	六名小学校	151

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。2025 年度は 3 件 7 名を受け入れた。

（2025 年度）

受入中学校	体験受入施設・グループ等名
豊田市立豊南中学校	計算科学研究センター，広報
岡崎市立竜海中学校	装置開発室
岡崎市立東海中学校	計算科学研究センター

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。2025 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，理科作品展会場で表彰状，トロフィー及び記念賞品の贈呈による表彰を行った。

(3)「分子ポスター」および「3D 分子視聴サイト」の構築



分子研 50 周年事業の一環で，分子科学への理解促進を目的に「分子ポスター」を作成した。本ポスターでは，水や二酸化炭素といった身近な分子から，当研究所で最先端の研究対象となっている分子まで幅広く紹介している。さらに，ポスターと連動して分子を 3D で閲覧できる Web サイトを併せて構築した。教育現場（高等学校等）からの「分子構造を立体的に提示したい」というニーズに応えるものであり，視覚的な情報を補完することで，分子構造の直感的な理解を支援する。今後，市内中学校および全国のスーパーサイエンスハイスクール（SSH）指定校を中心に配布・展開する予定である。

(4) サイエンス実践塾

愛知県と自然科学研究機構岡崎 3 機関の連携により，愛知県経済産業局産業部産業科学技術課の開催するサイエンス実践塾への協力を行っている。「サイエンス実践塾体験研究室」は企業連携に注目した科学技術を県内大学・企業

で体験する授業コースであり，2025 年度は湊　丈俊主任研究員が企業（トヨタ自動車（株））と連携を取り，「未来の物理化学研究者集まれ！　2050 年のモビリティエネルギーのナゾに迫る！」と題したコースを開催した。

(5) 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
2026. 3.22	#QURUWA と暮らす 2026	スライムづくり体験

8-3　情報発信

2025 年 4 月～ 2026 年 3 月は，日本語プレスリリース 41 件，英語プレスリリース 27 件，新聞報道 54 件，その他報道 2 件，客員研究部門及び退職・転出後等の成果論文 34 件であった。

研究成果プレスリリース（共同発表を含む）　（2025 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
2025. 4.16	キラリティと超伝導の協奏が生む巨大な超伝導整流―らせん構造が作るスピン三重項クーパー対―	Physical Review Research	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門		2501*
2025. 4.28	次世代機能性材料「超分子ゲル」の形成メカニズムを分子レベルで解明～薬物送達システムをはじめとする医療材料，環境技術の開発を大幅に加速～	Nature Communication	特別研究部門	明治薬科大学 名古屋大学 静岡大学 千葉大学　他	2502
2025. 5. 2	正十二面体リンクの球殻分子構造の構築に成功―ウイルスキャプシド状分子の化学合成に期待―	Chem	特別研究部門	東京科学大学 東京大学 お茶の水女子大学	2503
2025. 5.12	微小空間に閉じ込められた光を用いて少数分子から生じる和周波発生信号を検出―分子の向きも識別できる次世代のナノ計測技術―	Nano Letters	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門		2504*
2025. 5.19	柔軟性と秩序性を両立した新有機常磁性体を開発―フレキシブルデバイスへの応用に期待―	Advanced Science	機器センター	東京大学 東京理科大学 大阪公立大学 物質・材料研究機構	2505
2025. 5.20	最古の体内時計が日の出を知らせた約 22 億年前のある日	Nature Communication	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	福井県立大学 名古屋大学 大阪大学	2506*
2025. 5.21	ピコキャビティに閉じ込めた水素の分光計測に世界で初めて成功―原子スケールの極微空間における軽分子の精密ラマン分光―	Physical Review Letters	メゾスコピック計測研究センター 広帯域相関計測解析研究部門	フリッツ・ハーバー研究所 マックス・プランク構造動的物質科学研究所	2507*
2025. 6.13	生命がもつ時計の「0.1 ナノメートルの針」が動く瞬間―時計タンパク質 KaiC のリン酸化反応メカニズムの解明―	PNAS Nexus	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	九州大学	2508*
2025. 6.19	カーボンナノチューブと光の局所的な相互作用を可視化―精密ナノ赤外顕微分光で見る励起子の超高速ダイナミクス―	Science-Advances	メゾスコピック計測研究センター 広帯域相関計測解析研究部門	東京大学 理化学研究所 大阪大学	2509*
2025. 6.20	量子輸送ネットワーク解析により光合成を担うクロロフィルの組成の意義が明らかに―「効率よりも安全」植物が選んだ戦略とは―	Science Advances	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門	基礎生物学研究所 韓国エネルギー工科大学	2510
2025. 6.25	宇宙実験が拓くアルツハイマー病研究の新展開～ Tottori 型 Aβ の線維構造を宇宙で初解明～	ACS Chemical Neuroscience	生命創成探究センター 生命分子動秩序創発研究グループ／ 生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	名古屋市立大学 生理学研究所 名古屋大学	2511
2025. 6.25	Add a Twist to π-Molecules! A New Design Strategy for Organic Semiconductor Materials	Chemical Communications	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門	京都大学	2512*
2025. 7. 4	励起状態における対称性の破れが光物理特性を制御～ヤーン・テラー歪みによる励起状態の局在化を 10 フェムト秒の超高速分光で観測～	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	九州大学 理化学研究所	2513*

2025. 7.17	超極小サイズに閉じ込めた光によって物質表面を原子スケールで観察―散乱型近接場光顕微鏡で 1 ナノメートルの分解能を実現―	Science Advances	メゾスコピック計測研究センター 広帯域相関計測解析研究部門	フリッツ・ハーバー研究所 CIC NanoGUNE	2514*
2025. 7.24	Breakthrough Engineered Enzyme for Recycling of PET Bottle and Blended Fibers at Moderate Temperatures	ACS Sustainable Chemistry & Engineering	生命･錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	静岡大学 キリンホールディングス（株） 大阪大学	2515*
2025. 7.31	内在性機能と外来性機能を併せ持つ人工酵素を開発～金属イオンをタンパク質の中で精密に並べて機能を生み出す～	Naure Communications	生命創成探究センター 生命分子設計化学研究グループ／協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門	東北大学 産業技術総合研究所	2516*
2025. 8. 6	抗生物質の活性を高める新酵素を発見 ～ AI を活用した構造最適化により酵素機能強化にも成功～	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グループ／生命･錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	静岡県立大学	2517
2025. 8.20	重い電子がプランキアン時間で運動していることをはじめて観測―強く相互作用した電子の新たな法則を発見―	npj Quantum Materials	特別研究部門	大阪大学 広島大学	2518
2025. 8.28	分子の運命の赤い糸は，確かにそこにあった―分子界面に潜む「弱い結びつき」を電子共鳴で可視化	Physhical Review B	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門	筑波大学 琉球大学 広島大学	2519*
2025. 9.30	Positive charges stabilize instantly in key solar fuel catalyst: New simulations track ultrafast polaron formation in NaTaO3	Physical Chemistry Chemical Physics	特別研究部門		2520*
2025.10. 2	“Nanoreactor” Cage Uses Visible Light for Catalytic and Ultra-Selective Cross-Cycloadditions	Journal of the American Chemical Society	特別研究部門		2521*
2025.10.14	銀ナノクラスターにおける「1 原子の違い」で室温発光効率が 77 倍向上高効率発光材料の開発に道	Journal of the American Chemical Society	理論･計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	東北大学 東京理科大学	2522
2025.10.22	ダイナミックな電子が効率よく熱を電気に変換する―近藤効果が熱電材料の性能を向上させるメカニズムを実験的に解明―	Applied Physics Letters	極端紫外光研究施設	豊田工業大学	2523
2025.10.27	Mapping the Dynamic Glycosylation Landscape of Rat Serum Proteins	International Journal of Molecular Sciences	生命創成探究センター 生命分子動秩序創発研究グループ／生命･錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門		2524*
2025.10.30	電流なしで磁石に吸着！　らせん状キラル分子の新原理を発見―不斉合成や分子生物学への応用に期待―	Sciens Advances	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門	東京大学 産業技術総合研究所 名古屋大学 大阪公立大学	2525
2025.11. 7	銅酸化物の高温超伝導体で特殊な電子状態「ノード金属」を発見～三層構造が高い超伝導を実現する仕組みの解明へ～	Nature Communications	極端紫外光研究施設	広島大学 京都大学 東京大学 弘前大学	2526
2025.11.11	従来よりも 1000 倍強い水の中での「白色光」発生を実現―水中スーパーコンティニューム生成に新原理―	Optics Letters	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門		2527*
2025.11.18	光で確かめた金結晶表面のスピンの向き ―新しい 2 次元スピン検出方式で，表面電子のスピンの方向を可視化し決定―	Journal of the Physical Society of Japan	極端紫外光研究施設	大阪大学	2528*
2025.11.21	AI が「隠れた化学反応」を可視化！ ―有機合成を変える「潜在変数」アルゴリズムを開発―	Artificial Intelligence Chemistry	生命･錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門	静岡大学	2529

2025.12.10	タンパク質「ダイナミン」が細胞膜をしぼって切り離す動作原理をシミュレーションで解明	The Journal of Physical Chemistry Letters	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門		2530*
2025.12.17	電流で誘起される非熱的触媒反応の駆動原理を解明―持続可能な温室効果ガス資源化の次世代化学技術に道筋―	The Journal of Physical Chemistry Letters	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門	早稲田大学	2531*
2026. 1.19	新開発極微非線形分光法で観る 1 億分の 1 メートルの分子集団の世界―不均一な材料表面における分子メカニズムの解明へ―	The Journal of Physical Chemistry C	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門	東北大学	2532*
2026. 1.26	国内最大級，全国の大学共用研究設備を網羅する横断検索サービスを開始 計 4,250 台の高度分析・計測装置を可視化。産学連携による研究開発の加速を支援	－	機器センター		2533*
2026. 2. 2	原子スケール空間の巨大電場で操る非線形な光発生現―超小型光エレクトロニクス技術への基礎的ブレイクスルー―	Nature Communications	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門		2534*
2026. 2.12	抗体の地図を描く：NMR で明らかにする抗体の Fc 領域の構造の秘密～非標識 NMR による高次構造評価の新戦略，抗体医薬の品質管理に革新～	Journal of the Amereican Chemical Society	生命創成探究センター 生命分子動秩序創発研究グループ／ 生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	東京科学大学 名古屋市立大学 大阪大学	2535
2026. 2.12	抗体医薬の“見えなかった劣化状態”を原子レベルで可視化～ NMR と LC-MS の統合解析により，メチオニン酸化の立体化学を解明～	Analitical Chemistry	生命創成探究センター 生命分子動秩序創発研究グループ／ 生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	名古屋市立大学 東京科学大学	2536
2026. 2.13	電子のやりとりに連動した構造変化が鍵！　コレラ菌の生育に必須のナトリウムポンプのはたらく仕組みを解明	Nature Communications	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	京都大学 京都工芸繊維大学 レンセラー工科大学	2537
2026. 2.16	Trapping a Single Protein in a Molecular Cage: A New Path to Drug Discovery for ALS	Journal of the AmericanChemical Society	特別研究部門		2538*
2026. 2.26	誰でも，どこでも，分子をつくる時代へ―有機合成の多様な工程をつなぐ自動化基盤を構築―	－	生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門		2539*
2026. 3.18	Paper on Tip-Enhanced Nonlinear Spectroscopy Selected as a Featured Article in Journal of Chemical Physics	The Journal of Chemical Physics	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門	東北大学	2540*
2026. 3.25	シリコンナノ球で実現するバレーフォトニクスの新戦略―原子 1 層の半導体から生じる光信号を偏光情報を保ったまま大幅に増強―	Nano Letters	物質分子科学研究領域 電子物性研究部門	京都大学 神戸大学	2541*

* 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）　（2025 年度）

EurekAlert! 公開日	タイトル	日本語版 整理番号
2025. 4.16	Chirality Induces Giant Charge Rectification in a Superconductor	2501
2025. 4.28	First Real-Time Visualization of Nanofiber Self-Assembly, Uncovering Key Steps in the Formation of Supramolecular Gels	2502
2025. 5.12	Detecting Vibrational Sum-Frequency Generation Signals from Molecules Confined within a Nanoscale Gap Using a Tightly Confined Optical Near-Field	2504
2025. 5.20	Research Team Traces Evolutionary History of Bacterial Circadian Clock on Ancient Earth	2506
2025. 5.21	Picometric Spectroscopy of Hydrogen Molecules in Atomic-Scale Cavities	2507

2025. 6.12	Scientists Discover the “Ticking” Mechanism Driving Nature’s Simplest Circadian Clock —New Research Reveals that Circadian Clock Protein KaiC Regulates Phosphorylation to Keep Time in Cyanobacteria	2508
2025. 6.18	Catching Excitons in Motion—Ultrafast Dynamics in Carbon Nanotubes Revealed by Nano-Infrared Spectroscopy	2509
2025. 6.24	Space-Based Experiment Opens New Avenues in Alzheimer’s Research—First Structural Analysis of Tottori-Type Amyloid β Fibrils Conducted in Microgravity—	2511
2025. 6.24	Add a Twist to π-Molecules! A New Design Strategy for Organic Semiconductor Materials	2512
2025. 7.17	Pushing the Resolution Limits of Scattering Near-Field Optical Microscopy	2514
2025. 7.24	Breakthrough Engineered Enzyme for Recycling of PET Bottle and Blended Fibers at Moderate Temperatures	2515
2025. 7.31	Human Cytokine Equipped with Abiotic Multinuclear Metal Center Exhibits Intrinsic and Extrinsic Functions	2516
2025. 9.29	Positive Charges Stabilize Instantly in Key Solar Fuel Catalyst: New Simulations Track Ultrafast Polaron Formation in $NaTaO_3$	2520
2025.10. 2	“Nanoreactor” Cage Uses Visible Light for Catalytic and Ultra-Selective Cross-Cycloadditions	2521
2025.10.13	Extra Silver Atom Sparks Breakthrough in Photoluminescence of Silver Nanoclusters	2522
2025.10.24	Mapping the Dynamic Glycosylation Landscape of Rat Serum Proteins	2524
2025.11.10	Breakthrough in Water-Based Light Generation: 1,000-Fold Enhancement of White-Light Output Using Non-Harmonic Two-Color Femtosecond Lasers	2527
2025.11.17	The Gold Standard: Researchers End 20-Year Spin Debate on Gold Surface with Definitive, Full-Map Quantum Imaging	2528
2025.11.25	Unveiling an Anomalous Electronic State Opens A Pathway to Room-Temperature Superconductivity	2526
2025.12. 9	Simulations Reveal Protein “Dynamin” Constricts Cell Membranes by Loosening Its Grip	2530
2025.12.16	Unveiling Non-Thermal Catalytic Origin of Direct Current-Promoted Catalysis for Energy-Efficient Transformation of Greenhouse Gases to Valuable Chemicals	2531
2026. 1.18	Pioneering Second-Order Nonlinear Vibrational Nanoscopy for Interfacial Molecular Systems beyond the Diffraction Limit	2532
2026. 2. 1	Breakthrough in Nonlinear Electrophotonics: 2000%-V^{-1} Electric Enhancement of Nonlinear Light Generation Using an Angstrom-Scale Plasmonic Junction	2534
2026. 2.12	What Drives a Mysterious Sodium Pump?	2537
2026. 2.16	Trapping a Single Protein in a Molecular Cage: A New Path to Drug Discovery for ALS	2538
2026. 3.17	Paper on Tip-Enhanced Nonlinear Spectroscopy Selected as a Featured Article in Journal of Chemical Physics	2540
2026. 3.25	Preserving Polarization While Boosting Light from Atomically Thin Semiconductors with Silicon Nanospheres: Mie Resonances Overcome the Dilemma of signal Enhancement versus Polarization Loss in Valley-Polarized Second-Harmonic Generation	2541

新聞報道　　（2025 年度）

報道日	記事内容	新聞名	該当研究部門
2025. 4. 1	化合物分析「結晶スポンジ法」実用化へ進化	朝日	特別研究部門
2025. 4.24	分子研創立 50 周年　岡崎 式典や講演，施設見学も	東海愛知	分子科学研究所
2025. 4.25	キラル構造の有機超伝導体	科学	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門
2025. 4.29	新型量子計算機が稼働	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. 4.29	春の叙勲受章者	中日	分子科学研究所
2025. 4.29	春の叙勲受章者	朝日	分子科学研究所
2025. 4.29	春の叙勲受章者	毎日	分子科学研究所
2025. 4.29	春の叙勲受章者	読売	分子科学研究所
2025. 4.29	春の叙勲受章者	日本経済	分子科学研究所
2025. 5. 5 5.12	50 周年の歩みと未来と未来への展望 分子研，創立 50 周年記念式典	文教ニュース	分子科学研究所
2025. 5. 5 5.12	とらのもん	文教ニュース	所長
2025. 5.14	50 周年の歩みと未来と未来への展望 自然科学研究機構分子研が創立 50 周年記念式典	文教速報	分子科学研究所
2025. 5.16	「超分子ゲル」形成メカニズム	科学	特別研究部門
2025. 5.30	分子研がハイブリッド公開シンポジウム 「化学の魅力を小中高生，社会に伝える」	文教速報	分子科学研究所
2025. 5.30	極微空間に閉じ込めた水素　分光計測に世界初成功　日独共同　光と物質の相互作用に迫る	科学	メゾスコピック計測研究センター 広帯域相関計測解析研究部門
2025. 6. 1	ようこそ！　分子科学の世界へ	岡崎フリモ	所長
2025. 6. 2	体内時計　22 憶年　脈々と 県大・向山准教授ら　たんぱく質から起源解明	読売	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. 6.23	目耳録　投資	中日	所長
2025. 6.25	アルツハイマー病　原因物質の構造解明	中日	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門
2025. 6.28	「物理っぽい化学」研究支え	中日	所長
2025. 7. 1	街角情報 BOX　分子研フォーラム「観る事で広がる触媒の世界」	岡崎市政だより	分子科学研究所
2025. 7.11	宇宙でアルツハイマー病研究加速 アミロイドβの線維構造解明　ISS の微小重力環境利用　生命創成探究センターなど	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. 8.11	量子コンピューター研究　攻殻機動隊　大森教授×押井監督　15 日対談　万博会場　分子研チャンネルで生配信	中日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2025. 8.19	盆踊りで親睦	東海愛知	分子科学研究所
2026. 9. 5	抗生物質の活性向上　新酵素を発見 静岡県立大など	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. 9.29	周期性と時代性に注目	中日	特別研究部門
2026. 9.30	化学賞　太陽電池など幅広く	日本経済	特別研究部門
2026.10. 3	独創的構想で新聞や開拓　ERATO 研究総括決定	科学	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門
2026.10. 4	世界的研究に吉報は	中日	特別研究部門
2026.10. 5	化学賞・藤田氏らに期待	日本経済	特別研究部門
2026.10. 7	太陽電池の宮坂氏に期待	日本経済	特別研究部門
2025.10. 9	先駆者に光　仲間喚起　恩師からの薫陶　励み	中日	所長
2025.10.10	ノーベル賞・北川さんに関係者喜びの声	毎日	所長
2025.10.10	岡崎にもゆかりあり　ノーベル化学賞の北川さん	東海愛知	所長
2025.10.12	新素材「MOF」の用途広く	日本経済	特別研究部門
2025.10.14	「鉱脈」見つけ新領域　環境問題解決へ	朝日	特別研究部門
2025.10.24	銀ナノクラスター 2 種合成　東北大など成功	科学	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門
2025.10.25	坂口，北川両氏ノーベル賞	毎日	分子科学研究所
2025.11. 3	秋の叙勲受章者	日本経済	元所長
2025.11. 3	秋の叙勲受章者	中日	元所長
2025.11. 3	秋の叙勲受章者	朝日	元所長
2025.11. 3	秋の叙勲　4067 人が受章	毎日	元所長
2025.11. 3	秋の叙勲	読売	元所長
2025.11. 7	令和 7 年　秋の叙勲（文部科学省関係）	科学	元所長
2025.11.12	オンラインで光の性質などを解説　あす分子研	東海愛知	分子科学研究所
2025.12.27	今年も「科学三昧」岡崎高校生が研究発表	東海愛知	分子科学研究所
2026. 1. 7	科学好きが結集　高校生ら研究発表　岡崎高や刈谷高など	中日	分子科学研究所
2026. 1.23	量子コンピューターのヤクモ　シンガポール新興と提携　ソフトウエア共同開発	日経産業	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2026. 1.30	光の回折限界超えて分子構造・配向情報取得に成功　分子研など新手法	科学	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門
2026. 2. 1	自然科学研究機構シンポジウム　分子科学フォーラム 「元素からひも解く　宇宙と生命のものがたり」	岡崎市政だより	分子科学研究所
2026. 2. 2	研究設備を一括検索　全国大学 4250 台対象 分子研が新サービス	日刊工業	機器センター
2026. 2. 9	淵上研究振興局長　自然機構　岡崎 3 研究所等を視察	文教ニュース	分子科学研究所
2026. 2.16	淵上研究振興局長　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
2026. 3. 6	誰でも，どこでも分子をつくる 有機合成を遠隔自動化　分子研がシステム構築	科学	生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門

TV 出演　（2025 年度）

放送日等	内容	放送局名	該当研究部門
2025. 6. 5	【知り TIME】「体内時計は 22 億年前に誕生」	TBS テレビ THE TIME	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
2026. 3.25	「モーニングショー」ヘリウム不足についてインタビュー	テレビ朝日	機器センター

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　荘次（（台湾）国立交通大学講座教授，東京大学名誉教授）'04.5.19 ～ '10.3.31

益田　隆司（電気通信大学長）'04.5.19 ～ '06.3.31

江崎　信芳（京都大学化学研究所長）'06.4.1 ～ '08.3.31

野口　宏（中日新聞編集局文化部長）'06.4.1 ～ '08.7.31

時任　宣博（京都大学化学研究所長）'08.4.1 ～ '10.3.31

田中　宏明（中日新聞編集局文化部長）'08.8.1 ～ '10.3.31

齊藤　軍治（名城大学教授）'13.4.1 ～ '16.3.31

廣田　襄（京都大学名誉教授）'13.4.1 ～ '16.3.31

増原　宏（（台湾）国立交通大学講座教授）'13.4.1 ～ '16.3.31

菊池　昇（豊田中央研究所代表取締役所長）'16.4.1 ～ '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 ～ '26.3.31

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 ～ '26.3.31

谷口　功（国立高等専門学校機構理事長）'23.4.1 ～ '26.3.31

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　荘次　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) トヨタコンポ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　　人－人事選考部会に属する委員
(副)　副議長　　共－共同研究専門委員会に属する委員

氏名・所属（当時）		第 1 期	第 2 期	第 3 期	第 4 期	第 5 期	第 6 期	第 7 期	第 8 期	第 9 期	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							
冨宅　喜代一	神戸大院理名誉教授			○(副)人	○(副)人							
山下　正廣	東北大院理教授			○人	○人							
渡辺　芳人	名大副総長，教授			○	○							
山縣　ゆり子	熊本大院薬教授				○	○						
上村　大輔	神奈川大理教授				○	○						
山内　薫	東大院理教授				○	○						
森　健彦	東工大院理工教授				○人	○人						
佃　達哉	東大院理教授				○人	○人						
朝倉　清高	北大触媒セ教授				○	○	○					
神取　秀樹	名工大院工教授				○	○(副)人	○(副)人					
河野　裕彦	東北大院理教授				○	○共	○					
寺嵜　　亨	九大院理教授				○人	○人	○人					
水谷　泰久	阪大院理教授				○人	○人	○人					
大西　洋	神戸大院理教授						○共	○共				
鈴木　啓介	東工大院理工教授						○	○				
高田　彰二	京大院理教授						○	○				
田原　太平	理研主任研究員						○人	○人				
森　初果	東大物性研教授						○人	○人				
有賀　哲也	京大院理教授							○(副)人	○人			
米田　忠弘	東北大多元研教授							○	○(副)			
高原　淳	九大先導研教授							○	○			
西原　寛	東大院理教授							○人	○人			
山口　茂弘	名大トランス研教授							○人	○人			
解良　聡	分子研教授							○人	○人	○人	○	○人
鹿野田　一司	東大院工教授								○人	○人		
袖岡　幹子	理研主任研究員								○	○		
谷村　吉隆	京大院理教授								○	○		
中井　浩巳	早稲田大理工教授								○人	○人		
藤井　正明	東工大科技創成院教授								○共	○共		
江原　正博	分子研教授								○人	○人	○	○人
秋吉　一成	京大院工教授									○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	
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	○ ~'24.9.30
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，先端的・国際的な共同研究への参加機会を積極的に提供するなど，各大学共同利用機関の特色を活かした教育の充実を図る。⑫

（8）ポストドクター等の若手研究人材について，その育成方針を明確化し，多様な経験機会を付与しつつ実践的な研究指導を行うなど，大学共同利用機関の研究環境を活かした人材育成の充実を図る。また，最先端の研究活動を支援する URA など高度専門人材の育成を図る。これら人材の研究者としてのキャリアパス形成を支援する。⑬

４　社会との共創

（9）産業界との連携による研究開発の推進について，研究者個人ベースでの受託研究・共同研究等に留まらず，組織対組織の連携の強化，オープンイノベーションの推進等に向けた取組を進める。特許等の知的財産の戦略的活用も視野に入れつつ，研究成果を活用する事業者への技術移転等の取組を進める。⑭

５　その他教育研究の質の向上に関する重要事項

（10）社会が大きく変化する中，機関等の垣根を超えた組織体制の見直しを不断に行い，柔軟かつ機動的な組織の改編・整備を推進する。異分野融合による研究力強化や人材育成の充実，運営の効率化などの課題に対し，法人の枠組みを超えた対応を進める。⑯

II　業務運営の改善及び効率化に関する事項

(11) 内部統制機能を実質化させるための措置や外部の知見を法人経営に生かすための仕組みの構築，機構内外の専門的知見を有する者の法人経営への参画の推進等により，機構長のリーダーシップのもとで，強靭なガバナンス体制を構築する。⑰

(12) 大学共同利用機関の運営について，研究者コミュニティの意見を効果的に取り入れるとともに，その運営状況について積極的な情報発信を行うなど，開かれた運営の推進を図る。⑱

(13) 大学共同利用機関等の機能を最大限発揮するための基盤となる施設及び設備について，保有資産を最大限活用するとともに，法人全体のマネジメントによるスペース配分や設備の整備・共用等を戦略的に進めるなど，効率的な整備・運用の推進を図る。⑲

III　財務内容の改善に関する事項

(14) 公的資金のほか，寄附金や産業界からの資金等の受入れを進めるとともに，適切なリスク管理のもとでの効率的な資産運用や，保有資産の積極的な活用，研究成果の活用促進のための出資等を通じて，財源の多元化を進め，安定的な財務基盤の確立を目指す。併せて，目指す機能強化の方向性を見据え，その機能を最大限発揮するため，法人内及び機関内の資源配分の最適化を進める。⑳

IV　教育及び研究並びに組織及び運営の状況について自ら行う点検及び評価並びに当該状況に係る情報の提供に関する事項

(15) 外部の意見を取り入れつつ，客観的なデータに基づいて，自己点検等の活動に取り組み，自らの強み・特色と課題等を可視化するとともに，それを用いたエビデンスベースの法人経営を実現する。併せて，経営方針や計画，その進捗状況等に留まらず，研究教育の成果と社会発展への貢献等を含めて，ステークホルダーに積極的に情報発信を行うとともに，双方向の対話等を通じて法人経営に対する理解・支持を獲得する。また，市民に対するアウトリーチ活動を通じ，科学的リテラシーの涵養を図るとともに我が国の知的基盤の向上を推進する。㉑

V　その他業務運営に関する重要事項

(16) 多様なデジタル技術の適切な活用や，マイナンバーカードの活用等により，業務全般の継続性の確保と併せて，機能を高度化するとともに，事務システムの効率化や情報セキュリティ確保の観点を含め，必要な業務運営体制を整備し，デジタル化を推進する。㉑

9-8　大学共同利用機関法人自然科学研究機構第４期中期計画
（Ⅵ以降を省略）

Ⅰ　教育研究の質の向上に関する目標を達成するためにとるべき措置

1　研究に関する目標を達成するための措置

［1］　自然科学分野の学術研究を先導する中核拠点として，世界最先端の学術研究を推進し，世界最高水準の研究成果を創出して，当該分野における我が国のプレゼンスを高める。

評価指標	［1-1］第 4 期中期目標期間中に 9,000 編以上の論文を発表する。 ［1-2］Top10% 論文の割合 12% 以上を維持する。 ［1-3］国際共著論文の割合 57.4% 以上。

［2］　天文学分野では，宇宙の構造の進化と元素の起源を解明するため，ハワイ島マウナケア山頂に設置した口径 8.2m の大型光学赤外線望遠鏡「すばる」を安定して運用しつつ，機能強化を段階的に行う（「すばる 2」計画）。超広視野多天体分光器（PFS）を用いた本格観測を開始し，超広視野撮像及び多天体分光による大規模サーベイ観測を中心に国際共同利用研究を推進し，高品質なデータを供する。口径 8m 以上の望遠鏡の中で最も広い視野を持つ強みを活かし，世界最先端の衛星プロジェクトや地上望遠鏡プロジェクトと連携し，宇宙の大規模構造の進化や元素の起源について他の追随を許さない研究を展開する。

評価指標	［2-1］すばる望遠鏡全体の高い論文生産性（年平均 145 編以上）を維持するとともに，第 3 期中期目標期間以上の高いインパクト（Top10% 論文の割合 16% 以上）を目指す。 ［2-2］超広視野多天体分光器（PFS）をすばる望遠鏡に搭載して，科学観測を開始し（令和 5 年度），データ解析用ソフトウェアを公開する。第 4 期中期目標期間終了までに，PFS を用いた大規模サーベイ及び共同利用観測を総計 240 夜以上実施する。 ［2-3］超広視野主焦点カメラ（HSC）を用いた大規模銀河探査データより，宇宙における暗黒物質の 3 次元地図をこれまでの約 8 倍以上に拡大し，宇宙論パラメータをより高い精度（推定誤差 2% 以下）で求める。 ［2-4］重力波イベントを含む突発現象を迅速に追跡観測できるように，観測課題の動的割付（キュー観測）システムを拡張し，HSC の共同利用観測時間の 1/2 以上（これまでは 1/4 以下）に適用して運用する。

［3］　天文学分野では国際共同事業として以下を進める。

・惑星誕生の現場と生命素材を含む宇宙における物質の進化を解明するため，日米欧共同で南米チリに設置したアタカマ大型ミリ波サブミリ波干渉計（アルマ望遠鏡）の国際共同運用を継続し，科学観測を推進する。東アジア地域の中核機関として最大限の観測時間を利用可能とし，高品質なデータを供する。並行して，アルマ望遠鏡の機能強化を段階的に行う。

・太陽系外の地球型惑星における生命の存在や宇宙で最初の天体の形成など，天文学における人類のフロンティアを開拓するため，既存の望遠鏡を凌駕する解像力と感度をもつ口径 30m の超大型光学赤外線望遠鏡（TMT）の建設事業を，日本・米国・カナダ・インド・中国の５ヶ国と共同で推進する。日本が分担する研究開発部分について，本格的製造・製作に向けた準備を行い，製造・製作を推進するとともに，運用期に向けた共同利用・共同研究の準備を行う。

評価指標	［3-1］アルマ望遠鏡の運用を継続し，その貢献割合に応じた観測時間割合を東アジアの科学者コミュニティに確保することで，アルマ全体（年平均 300 編以上）及び東アジア（年平均 60 編以上）の論文生産性を維持する。 ［3-2］アルマ望遠鏡の最も低い周波数帯域を観測するバンド 1 受信機（66 台）を国際協力によりアルマ望遠鏡へ搭載し，令和 5 年度までに試験観測を実施，令和 6 年度までに共同利用の募集を開始し，令和 7 年度までに共同利用観測を開始する。 ［3-3］アルマ望遠鏡について，現在より約 2 倍高い解像度（約 5 ミリ秒角）を達成する。 ［3-4］日本が研究開発を分担する TMT の望遠鏡本体構造，主鏡分割鏡，第一期観測装置の３つ全てについて，製造・加工に着手するために必要となる「製造前審査」に第 4 期中期目標期間中に合格する。 ［3-5］2030 年代の TMT 完成後の科学運用期に向けて，第 4 期中期目標期間中に以下を実施する。すばる望遠鏡との一体的運用のあり方を含めた，国立天文台としての TMT の科学運用・観測装置計画について，国立天文台 TMT 科学諮問委員会における審議を踏まえて計画書として取りまとめ，公表する。さらに同計画書の内容を，共同利用運用体制の構築，観測装置の基礎技術開発，データ解析・アーカイブシステムの開発に反映させる。

［4］　核融合科学分野では，高温プラズマの中心的な課題（プラズマ中の乱流・構造形成，電磁流体不安定性，高エネルギー粒子の振る舞い，プラズマとその対向材料との相互作用等）について，特に磁場構造の対称性や 3 次元性に注目して，実験と理論シミュレーションの連携と国内外の研究機関との共同研究により，それらの物理機構の解明を行う。研究者コミュニティの合意形成及び核融合研究の学際化に向け主導的な役割を担い，実験装置，超高速計算機，統合解析システム，シミュレーションコード等を活用・整備・拡張し，世界最先端の学術研究を多角的に推進する。

評価指標	［4-1］核融合科学に関する共同研究・共同利用に基づく学術論文の発表件数を第 4 期中期目標期間中に年間 200 編以上に，及びジャーナルの種類を第 4 期中期目標期間中に年間 40 種類以上に増加させる。

［1］　自然科学分野の学術研究を先導する中核拠点として，世界最先端の学術研究を推進し，世界最高水準の研究成果を創出して，当該分野における我が国のプレゼンスを高める。（再掲）

評価指標	［1-1］第 4 期中期目標期間中に 9,000 編以上の論文を発表する。 ［1-2］Top10% 論文の割合 12% 以上を維持する。 ［1-3］国際共著論文の割合 57.4% 以上。

［5］　本機構がカバーする各分野の特性を踏まえつつ，学術的又は社会的な要請を踏まえた学術研究を戦略的に推進するため，機構直轄センターにおいて，各機関も交え，異分野融合・新分野創成を目指した国際的共同研究を推進する。

評価指標	［5-1］機構直轄センターにおける異分野融合共同研究件数が第 3 期中期目標期間の実績数（参考：令和 2 年度までの延べ数 367 件）を上回ること。

［6］ 天文学の研究を推進するため，中小型望遠鏡，次世代観測装置，超高速計算機等の開発研究，整備及び運用を行う。プロジェクト間の連携も含めた柔軟な組織運営を推進するとともに，研究者コミュニティの合意形成に向けたコーディネート機能を担う。また，宇宙航空研究開発機構（JAXA）宇宙科学研究所主導のもと，日本の科学衛星・探査機の運用を継続するほか，将来の科学衛星や飛翔体に搭載する高度な観測装置の開発，そのための基礎的技術研究を推進し，新たな科学技術の基盤の創成に寄与する。

評価指標	［6-1］天文学専用の共同利用計算機システムの性能向上と定常的かつ安定な運用を行い，論文数 100 編／年を超える水準を維持する。 ［6-2］大型低温重力波望遠鏡 KAGRA の感度向上を進めつつ，国際共同観測に参加し，重力波を検出する。 ［6-3］JAXA 火星衛星探査計画（MMX）において，「測地チーム」を統率し，測地プロダクト（形状モデル等）獲得のための科学観測運用シミュレーションを，高・低高度について各 1 回以上，衛星打上げ前に実施する。取得データの分析から，火星衛星の内部構造探査に貢献する。

［7］ 国立天文台において，日の出・日の入りなど市民生活に直結した暦などの天文情報を提供する。また，天文観測に適した環境を保護するための活動を行う。

評価指標	［7-1］暦を計算し編纂する，すなわち「暦要項」，「暦象年表」を毎年着実に作成・公表する。ウェブページ等を通じて暦に関する情報を提供する。 ［7-2］天文観測環境を保護する「周波数資源保護」業務の着実な実施と，本業務の社会への発信状況。（第 3 期中期目標期間では周波数資源保護業務を開始し，ウェブページで随時活動を報告。第 4 期中期目標期間においてはさらに，本業務に対する社会からのフィードバックを集めるフォームを構築し，受け付けた意見を業務へ反映，社会へ発信する双方向性の流れを作る。）

［8］ 核融合科学分野において，高度な極限技術の複合系である核融合システムの実現に向けた課題について学際化に取り組み，技術の普遍化を図る。そのために，特に，大型高磁場超伝導マグネット，超高熱流プラズマ対向機器，中性粒子ビーム入射加熱等に関わる核融合科学研究所が有する先端的中核試験設備の高度化を進め，国内外の研究機関との共同研究を推進する。これにより，高効率核融合炉の設計に資するとともに，関連研究分野との連携を強化し，広く科学技術の基盤醸成に貢献する。

評価指標	［8-1］核融合科学研究所が有する核融合工学分野の先端的中核試験設備を用いた研究を基にした，核融合科学研究所による論文の発表数について，第 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を解明するために，細胞の構造・機能・組織化・相互作用・情報伝達，発生・分化・再生，神経系の働きや行動の制御，環境適応，多様性，共生，進化等の機構を研究し，基礎生物学のフロンティアを開拓する。

評価指標	［10-1］第 4 期中期目標期間中に，第 3 期中期目標期間を上回る 780 本以上の論文を発表する。

［11］基礎生物学研究分野において，遺伝子やタンパク質解析技術，ゲノム編集技術，シングルセル解析技術，多様な先端顕微鏡によるバイオイメージング技術等の最先端技術の開発導入や新規モデル生物の開発を進めるとともに，AI やビッグデータを活用した人と機械の協働作業による新しい発見，思考を行うプラットフォームを確立する。生物機能解析センター，モデル生物研究センター，新規モデル生物開発センターを超階層生物学センターへ改組し，遺伝子から個体群に至る様々な階層を超えた統合的な解析による「超階層生物学」を推進し，世界を先導する独創的な生物学研究を行う。

評価指標	［11-1］生物機能解析センター，モデル生物研究センター，及び新規モデル生物開発センターを改組し，超階層生物学センターを設立する。 ［11-2］研究費を支給する超階層生物学共同利用研究を新設して公募し，毎年 3 件実施する。 ［11-3］超階層生物学に関する研究会とトレーニングコースをそれぞれ年 1 回開催する。

［12］生理学分野の，分子・細胞・細胞群・器官・システム・個体間の各階層において，機能メカニズム及び構造機能連関に関する研究を推進する。また，階層間の連結，器官間の機能協関，さらには神経系と免疫系など異なる機能システム間の連関を追求することにより，生命機能の成り立ちと恒常性の維持に関する理解を促進する。さらに，基礎生理科学・神経科学の確固たる知見の提供により，臨床医学との架け橋研究の基盤形成に貢献する。

評価指標	［12-1］「生体の各階層における生命現象の機能メカニズム」，「生体の階層間・臓器間・機能システム間の連関に基づく生体恒常性維持のメカニズム」，「生体の機能メカニズムの破綻による病態現象」の３つの範疇において，新知見を論文として発表し，第 4 期中期目標期間全体における全当該論文中の Top10% 論文の割合を 12.8% 以上に，国際共著論文の割合を 36.8% 以上に維持する。

［13］生理学分野において，時系列細胞現象計測等の専門性の高い重要な方法論を継承するとともに，分野間連携等により機能生命科学の新展開を図る。すなわち，理工系分野等との連携により，研究の推進・変革に寄与しうる現象計測・機能操作技術の新しい方法論や研究ツール等を開発し，生命科学研究に適用する。他機関との協力により MRI 脳画像等のデータベース構築の基盤技術を開発する。文理融合を推進すること等により，ヒト及び非ヒト霊長類動物の高次脳機能の理解を促進する。

評価指標	［13-1］「時系列細胞現象解析の専門技術を継承する室の運営と，その技術の共同利用研究への提供」に関して，時系列細胞現象解析室の研究教育職員が貢献した共同利用研究の年平均実施件数 3 件を達成する。 ［13-2］「分野間連携に基づいた，新たな計測技術や機能操作技術等の開発」に関して，第 4 期中期目標期間中に当該技術の原理や方法論に関する論文 3 報以上を発表する。 ［13-3］「MRI 脳画像等のデータベース構築の基盤技術に関する開発」に関して，開発の達成を示す構築したデータベースの設計図，管理システム，及び全体像の概略を提示する。 ［13-4］「ヒト及び非ヒト霊長類動物の高次脳機能のメカニズムやその種間比較等」の新知見を論文として発表し，第 4 期中期目標期間全体における当該論文中の Top10% 論文の割合を 12.8% 以上に，国際共著論文の割合を 36.8% 以上に維持する。

［14］分子科学分野では，計算科学手法の開発と活用，光を用いた先端的な研究手法や光源の開発，そして新規分子・物質の設計やそれらの高度集積化を通して，原子・分子・生命システムが示す多様な構造，物性，反応性，触媒能，エネルギー変換などの高次機能や動的構造を解明するとともに，新たな現象や有用な機能の設計と制御に取り組む。

評価指標	［14-1］先端的学術研究を次の 5 項目にわたって戦略的に推進し，うち 3 項目以上において，原著論文や総説を項目あたり 130 本以上公表する。 ・機能性材料の物性評価と高度な電子状態理論による解析 ・新規物性観測設備と先端的光源・分光法の開発 ・凝縮相原子・分子系が示す量子動力学現象，反応，物性及び秩序形成ダイナミクスの解明 ・有機分子を基盤とした新しい反応システムや機能性デバイスの開拓 ・分子システムの高次機能発現，作動原理，設計原理の探究

［15］アストロバイオロジーセンターでは，第一線の外国人研究者の招へい，若手研究者の海外派遣に取り組むとともに，大学等と連携して国際的かつ先端的な共同研究を推進し，アストロバイオロジー分野の国際的研究拠点を形成し，ハビタブル系外惑星の発見及び特徴づけなどで世界的成果を上げるとともに，生物系との分野融合的研究を推進し，当該研究拠点の国際化を進める。

評価指標	［15-1］観測遂行夜数を毎年 100 夜以上とする。 ［15-2］第 4 期中期目標期間末までに地球型惑星の発見確認数を 10 個以上とする。 ［15-3］外国人研究者割合 20% 以上を維持する。 ［15-4］第 4 期中期目標期間末までに生物系研究者割合を 35% 以上とする。 ［15-5］大学共同利用件数，若手研究者派遣数を毎年それぞれ 30 件以上とする。 ［15-6］アストロバイオロジーセンターにおける Top10% 論文の割合 12% 以上。

［16］生命創成探究センターでは，「みる・よむ・つくる」の３つのアプローチを基軸に，極限環境生命の研究者とも協力しながら異分野融合型の研究を進め，生命の本質に迫る研究を展開する。

評価指標	［16-1］多様な分野の研究者や若手研究者とともに，物質と生命の境界探査，細胞アトラスの編纂，生命体のシミュレーション，ネオ生命体の創成等を目指した研究プロジェクトを 4 課題以上推進する。また，大学の共同利用・共同研究拠点等との連携による分野融合研究を 4 課題以上実施する。これらの成果として論文・総説・国際学会招待講演の総数 120 件以上。

［17］若手研究者比率を維持するとともに，女性研究者･外国人研究者の一層の雇用と研究者の流動性を高めるため，これまで行ってきた研究環境整備を一層進めるとともに，十分に活用する。女性研究者の活躍を推進するため，男女共同参画推進に関するアクションプランを着実に実行する，女性研究者限定公募を実施するなどにより，女性研究者の割合を引上げる。

評価指標	［17-1］若手研究者比率 35% 以上を維持する。 ［17-2］外国人研究者比率を第 4 期中期目標期間末までに 12% 以上とする。 ［17-3］女性研究者の割合を第 4 期中期目標期間末までに 17% に引上げる。

［18］国内外の大学・研究機関と連携し，国際的に卓越した若手研究者を育成するための支援を強化する。さらに，若手研究者が分野を超えた研究を推進するための事業を実施する。また，現在実施している「自然科学研究機構若手研究者賞」について，対象を共同研究者にも拡大する。

評価指標	［18-1］若手研究者による分野を超えた共同研究を第 4 期中期目標期間中に 60 件以上実施する。 ［18-2］第 4 期中期目標期間において，若手研究者を国内外の研究機関へ計 30 名以上派遣する。 ［18-3］若手研究者賞の対象枠を広げ，毎年最大 5 名の受賞者を顕彰する。

2　共同利用・共同研究に関する目標を達成するための措置

［19］研究設備等の利用の利便性向上のため，大学連携研究設備ネットワーク事業を継続的に実施するとともに，対象とする分野の拡大に向け事業を推進する。さらに，技術職員の育成に向けた研修等を通して，機関の枠を超えた技術者支援を実施し，大学も併せた研究基盤の強化を図る。

評価指標	［19-1］登録数 3,000 件以上を維持する。 ［19-2］第 4 期中期目標期間において，計 60 回以上の技術講習会（研修動画の活用を含む）を開催する。

［20］各機関・センターにおいて，ユーザーのニーズを把握しつつ，研究設備の高度化，利用の利便性の向上を図ることによって，共同利用・共同研究機能を強化し，優れた研究成果を上げる。

評価指標	［20-1］本機構において年間 2 設備以上を高度化する（遠隔化，自動化など）。

［21］生命科学における重要なツールである電子顕微鏡（Cryo-EM・3D-SEM），光学顕微鏡（二光子・超解像），MRI（7T・Dual）について，アップデートした機器の提供，国内外ネットワークとの連携による協力，関連機器の複合的利用の促進等により，ユーザーの利便性を高め，分子・細胞レベルから神経回路・個体レベルまでの多階層を総体としてシームレスにカバーするイメージング共同研究を推進する。
また，動物資源共同利用研究センターについて，動物の飼育に留まらず，多階層生理機能の解析のための場所，装置，技術，及びバイオリソースの提供を行うことによりユーザーの利便性を高め，共同利用研究を新たに実施する。

評価指標	［21-1］7T-MRI の共同利用率の年平均値 75% を維持する。 ［21-2］3D-SEM をアップデートし，第 4 期中期目標期間中早期にユーザーの利用に供することにより，共同利用研究件数の年平均値 15 件を維持する。 ［21-3］位相差を含む低温電子顕微鏡を用いた共同利用研究の実施件数の年平均値 6 件以上を達成する。 ［21-4］動物資源共同利用研究センターを利用した共同利用研究を開始し，初年度の年間実施件数を基準として，第 4 期中期目標期間の 6 年間で 20% 以上の増加を達成する。

［22］幅広いアプローチ（BA）活動等の国家事業において整備されつつある，時代の先端を行く高度な大型機器を，大学と共同利用することにより，世界最先端の研究を実施するとともに，上記国家事業の成就に貢献する。

評価指標	［22-1］共同研究の拡充等による，BA 活動等の国家事業に関する共同研究の実施課題数と参加大学数を，第 4 期中期目標期間中に第 3 期中期目標期間末（令和 3 年度実績 7 課題・9 大学）と比べて 1.5 倍以上とする。 ［22-2］共同研究により大学及び核融合科学研究所から BA 活動等の国家事業への貢献を明記した論文の発表数を，第 4 期中期目標期間中に第 3 期中期目標期間末（参考：令和 2 年度実績 5 編）と比べて 1.5 倍以上とする。

［23］共同利用率の高い UVSOR の計測機器や各分野において世界トップクラスの性能を持つ当該分野専用のスーパーコンピュータ等の高度化を通して，共同利用機能の更なる充実を図るとともに大学の研究力強化に資する。

評価指標	［23-1］UVSOR については，世界トップクラスの光電子運動量顕微鏡（スピン状態イメージングを可能とする実機）を開発し，第 4 期中期目標期間終了時までに国際的な協力研究を 3 件以上行う。 ［23-2］分野に特化した専用のスーパーコンピュータについては，第 4 期中期目標期間前半に更新を行い，実アプリケーション実行性能を 2 倍以上とする。 ［23-3］スーパーコンピュータの計算資源の共同利用率を第 3 期中期目標期間と同じ高水準（100%）に維持する。

［24］機構内各分野において共同利用・共同研究で得られたデータを収集・保有・維持する方針を決定・運用する。運用に当たっては大学共同利用研究教育アライアンスを通じて情報システム研究機構のデータサイエンス共同利用基盤施設等との連携を図り，分野の特徴にあったデータ解析手法の開発を進める。共同利用・共同研究で得られたデータをもとに，その学術的価値と研究データ管理等を鑑みた保管や公開・提供，利活用等について検討を行い，データ駆動型サイエンスやオープンサイエンスへの活用も含めた運用や体制を整える。

評価指標	［24-1］令和 5 年度末をめどに機構内各分野において共同利用・共同研究で得られたデータを収集・保有・維持する方針を決定し，収集を開始する。第 4 期中期目標期間終了時までにデータマイニング等による新たな知見を獲得する。

［25］貴重な生物資源の保存活動として大学連携バイオバックアッププロジェクト（IBBP）を運営し, 国内外の研究者コミュニティに持続的かつ発展的に共同利用・共同研究の機会を提供する。また，研究者コミュニティの要望に応え，ナショナルバイオリソースプロジェクトを適切に受け入れる。さらに，バイオイメージング技術や次世代シーケンス等より生み出される膨大なデータを格納するサーバーとネットワーク環境等の整備を行い，共同利用・共同研究を推進する。

評価指標	［25-1］IBBP は毎年 80 件の取扱件数を維持する。 ［25-2］ナショナルバイオリソースプロジェクトを毎年 4 件受け入れる。

［26］高温核融合プラズマから低温応用プラズマ，天体プラズマ等のあらゆるプラズマ現象の共通基礎過程である原子分子素過程を記述する基礎的な原子分子データを基礎研究による生産と検証によって整備・充実させ，データ登録数が世界トップクラスである衝突断面積等数値データベースを強化する。これらを活用した学際的なプラズマ研究，異分野融合研究を国内・国際的共同研究として展開，推進する。

評価指標	［26-1］原子分子データベースに登録されているデータ件数を，第 4 期中期目標期間中に第 3 期中期目標期間末（参考：令和 2 年度実績 822,961 件）と比べて 10% 以上増加させる。また，データベースへのアクセス数を，第 3 期中期目標期間の水準（年間平均アクセス数 2,345 回）以上とする。 ［26-2］原子分子データに関連する共同研究課題数及び共同研究による共著論文数を，第 4 期中期目標期間中に第 3 期中期目標期間実績から 5% 以上増加させる。

［27］研究コミュニティの中核として，新たな課題に対応するための研究者グループの組織化等を支援･促進するため，DX プラットフォームを活用したエビデンス（IR）に基づくマッチング方式を導入し，特に，大学との協働による機関・分野を超えた異分野融合･新分野創成研究, 他分野との協働による他分野の手法を取り入れた従来にない先端研究を促進する。実施に当たってはオープンラボ，分野融合型共同研究事業等を活用する。

評価指標	［27-1］DX プラットフォームを活用したマッチング方式を導入し，第 4 期中期目標期間中に 20 件のグループを形成する。 ［27-2］同方式により形成されたグループの共同研究を第 4 期中期目標期間中に 10 テーマ以上採択する。

［28］組織的連携の拡充，クロスアポイントメント・サバティカル・在籍出向等による人的交流の拡大等により，大学等との組織間ネットワークを発展させる。特に「自然科学大学間連携推進機構（NICA）」についてはアライアンスのもとで展開し，参画大学数を拡大させる。NICA を含む国内外のネットワーク事業は，各機関において既に形成されたものをベースにその拡充を図る。特にマルチメッセンジャー天文学やバイオイメージングにおいて海外との連携を一層強化する。

評価指標	［28-1］クロスアポイントメント実施件数を第 3 期中期目標期間実績（令和 3 年度実績 18 名）の 1.2 倍以上とする。 ［28-2］現存の国内外のネットワーク事業 9 件について，その参画機関数を第 3 期中期目標期間以上に増加させる。 ［28-3］ネットワーク形成に向けた勉強会・ワークショップを第 4 期中期目標期間中に 30 回以上実施する。

［29］異分野融合の促進，強みのある分野の更なる強化等をも視野に入れ，共同利用・共同研究拠点との連携による共同利用・共同研究機能のネットワーク化を推進する。

評価指標	［29-1］現在は構築されていない，共同利用・共同研究拠点との連携による共同利用・共同研究機能のネットワーク化を，第 4 期中期目標期間中に 2 件以上実施する。

［30］国際交流協定等に基づき，国際的な研究者交流事業や共同研究事業を推進するとともに，特に競争力の高い海外の研究機関との連携構築を戦略的に推進している国際連携研究センター（IRCC）において，世界的戦略事業を促進する。海外の研究機関との連携構築の一環として実施しているドイツ学術交流会を介した研究者交流事業を継続し，国際共同研究を支援する。

評価指標	［30-1］国際共著論文の割合 57.4% 以上。 ［30-2］第 4 期中期目標期間最終年度における国際共同研究実施件数について，第 3 期中期目標期間末（参考：令和 2 年度実績 248 件）での実績を上回る。 ［30-3］第 4 期中期目標期間における国際協定数について，第 3 期中期目標期間での実績（参考：令和 2 年度実績 105 件）を上回る。

3　教育・人材育成に関する目標を達成するための措置

［31］大学共同利用機関が保有する，大学にはない最先端の大型機器やスーパーコンピュータ等，大学共同利用機関でしか供することのできない研究設備・資料，大学では不可能な複数の指導教員，非常に頻繁に行われている国際共同研究・各種の国際研究集会・国際人材交流等，大学にはない優れた研究環境を総合研究大学院大学（総研大）の教育に提供して，総研大の特色ある学位プログラムの遂行を支援し，世界の第一線で活躍できる自立した研究者を育成する。受入れ学生に対し，国際的な研究集会に派遣することなどを実践し，幅広い国際的な視野を持つ人材の育成を図るとともに，リサーチアシスタント制度等により支援する。また，これらの施策について社会に分かりやすく発信し，優秀な総研大生の獲得につなげる。

評価指標	［31-1］本機構所属総研大院生に対し，全ての学生が在籍中に 1 回以上国際会議・ワークショップ等へ派遣されることを支援する。 ［31-2］国費の支援を受けた学生以外の学生に対するリサーチアシスタント制度の適用率を 90% 以上に維持する。

［32］大学院教育の充実に貢献するため，特別共同利用研究員制度，連携大学院制度，インターンシップ制度等により，国内外の学生等を積極的に受け入れる。また，総研大生に独自に供しているものと同じ研究環境のもとで教育研究を実施し，世界の第一線で活躍できる若手研究者を育成する。

評価指標	［32-1］以下の項目に関し，いずれも第 4 期中期目標期間最終年度において，第 3 期中期目標期間末での実績を上回ること。 ・特別共同利用研究員制度，連携大学院制度等による受入学生数（令和 3 年度実績 90 人） ・国外インターンの受入数（参考：令和 2 年度実績 6 人）

［33］ポストドクター等の若手研究人材の育成の一環として，分野を超えた研究を促進するための支援を行う。機構のコアコンピタンスとなる優秀な研究者を育てるとともに，PI として大学へ輩出することを推奨することで流動化を促進し，大学の研究力強化にも貢献する。また，研究活動を支援する URA など高度専門人材を育成するための研修を行う。

評価指標	［33-1］若手研究者を PI とした分野を超えた共同研究を第 4 期中期目標期間中に 60 件以上実施する。 ［33-2］URA など高度専門人材向け研修を第 4 期中期目標期間中に 6 回以上実施する。

4　社会との共創に関する目標を達成するための措置

［34］本機構の研究シーズの発信等や産業界等との交流の場を設けることにより，産業界の理解を深めるとともに，産業界との連携を強化する。民間企業等との組織対組織の包括的な協定を締結し，その協定のもとで連携して共同研究及び人材育成を実施する。また，知的財産の戦略的活用を鑑み，研究者に対する産学連携研修を実施する。

評価指標	［34-1］産業界等との交流の場を第 4 期中期目標期間中に 12 回以上実施する。 ［34-2］機構の有する研究成果を活用し，社会実装につなげるため，第 4 期中期目標期間終了までに，民間企業等との組織対組織の包括的な協定を 1 件以上締結し共同研究を行う。 ［34-3］第 4 期中期目標期間において，新たに研究者に対する産学連携研修を実施する（1 回以上／年）。

5　その他教育研究の質の向上に関する重要事項に関する目標を達成するための措置

［35］研究活動をグローバル・アジェンダに結びつけるため，学術研究の進化に加え，社会的ニーズや地球規模の課題解決に向けた基礎研究の可能性を強く展開する必要がある。そのため，従来の研究領域の枠組みを越えて新たな研究領域を開拓する新分野創成に加え，共同利用・共同研究で得られたデータの分析等を「知る」から「利活用」へと進化させ，研究課題や社会課題へ対応する基盤の創出，次世代研究への発展に向けた分野融合総合知の検討等を集結することにより，新分野創成センターを改組し，研究の進化展開を推進する。

評価指標	［35-1］令和 4 年度に新分野創成センターを再構築し，「知の共創センター（仮称）」として新たな体制を整備する。令和 5 年度までに，「知の共創センター（仮称）」に「Research Commons 部門（仮称）」を設置し，共通基盤手法の検討を開始する。第 4 期中期目標期間終了までに，検討・開発を行った共通基盤手法について検証・評価を行う。

［36］4 大学共同利用機関法人と総合研究大学院大学が設立する一般社団法人「大学共同利用研究教育アライアンス」を活用し，大学執行部との対話，異分野融合研究促進，共同利用・共同研究成果の活用，各種研修の共通化，等について取り組む。

評価指標	［36-1］「大学共同利用研究教育アライアンス」において以下の活動成果を上げること。 ・現在の NICA の事業をアライアンスの「大学連携プラットフォーム」を通じて展開し，参画大学数を 13 機関から拡大する。 ・異なる分野の研究者の交流の場を年 1 回企画・実施する。 ・全国の大学の研究者を対象とした「分野融合型共同研究」を実施し，年間 10 件程度の課題を採択し支援する。 ・機構の共同利用・共同研究で得られた成果等のデータを IR 用としてアライアンスに提供し，その結果をステークホルダーである大学に発信する。 ・4 機構で共通する課題に対する研修をアライアンスのもとで連携して行い業務の効率化を図る。

II　業務運営の改善及び効率化に関する目標を達成するためにとるべき措置

［37］内部統制の機能の実質化を図るため，研究力強化推進本部の体制を充実させ，機構全体として施策の統制された円滑な実施を図る。また，機構内広報誌「NINSBulletin」を充実させ，機構内の情勢の他，機構を取り巻く情勢，機構・機関執行部の方針等を，機構全体に正確に伝達する。常設されている機構長選考・監察会議については，外部の知見を法人経営に生かすための仕組みとする。さらに，学界以外からの人材を法人経営に参画させる。これらにより，機構長のリーダーシップのもとで，内部統制のとれた強靭なガバナンス体制を構築する。

評価指標	［37-1］機構の研究力強化における機構長のガバナンスを強化するため，機構長が本部長を務める研究力強化推進本部において以下の改変を行う。 ・機構全体の研究の方向性を決定する「企画戦略室」を令和 4 年度に新たに設置する。 ・同室の下に URA をリーダーとする６つの戦略チーム（共同利用・共同研究，研究・経営戦略分析，ダイバシティー推進，アウトリーチ，外部連携，国際連携）を配置する。（令和 5 年度までに完了） ・６つの戦略チームは横断的に各機関の戦略室と連携し，機関内の研究戦略に反映，これを支援する。 ［37-2］第 4 期中期目標期間中に研究者コミュニティに属していない民間企業経験者による外部理事を 1 名登用する。 ［37-3］機構内広報誌「NINS Bulletin」を第 4 期中期目標期間中に 24 回以上発行する。 ［37-4］機構長選考・監察会議の委員は，全員を外部委員とする。

［38］各機関，機構本部が開催する，運営会議，経営協議会，教育研究評議会は，各分野の研究者コミュニティを代表する委員が選出されていることから，これらの会議で，研究者コミュニティの意見を聞き，運営にフィードバックさせる。また，各機関は，関連する学会・主催する研究会等を利用して，研究者コミュニティの各層の意見を聞き，運営に活かす。運営会議，経営協議会，教育研究評議会の活性化に取り組み，これらの議事録を公開する。また，ホームページ，各種パンフレット，市民との対話等を活用して，積極的に運営状況の情報発信を行い，開かれた運営の推進を図る。

評価指標	［38-1］運営会議等の所内委員割合が 1/2 以下であること。 ［38-2］運営会議，経営協議会，教育研究評議会の議事録を確定後 30 日以内に機構ホームページにて公開する。 ［38-3］経営協議会，教育研究評議会及び機構長選考 ・監察会議の外部委員からの指摘事項等への対応を毎年度 5 件以上行う。 ［38-4］機構ホームページの閲覧数が第 3 期中期目標期間の実績を上回ること。

［39］施設・設備の安全性・信頼性を確保し，所要の機能を長期間最大限発揮するため，インフラ長寿命化計画を核とした計画的な維持・保全・整備を行う。また，機構の施設マネジメント・ポリシーに基づき，使用状況・使用状態を把握・評価し，戦略的に，効率的かつ効果的なスペースの確保・運用・再配分を実現する。

評価指標	［39-1］主要キャンパスの利用状況調査を年 1 回以上実施し，第 4 期中期目標期間終了までに共同利用スペースを保有面積の 30% 以上とする。 ［39-2］インフラ長寿命化計画（個別施設計画）に基づき維持・保全・整備が実施されていること。

III　財務内容の改善に関する目標を達成するためにとるべき措置

［40］大きな社会情勢の変化を迎えたポスト・コロナ時代における新たな共同利用・共同研究体制の確立に向け，研究環境のリモート化，DX 化を早急に進める。このための財源確保を目指し，機構本部，機関，研究者共に，新たな公的研究資金の提供に積極的に応募し，施設・設備の充実に努めるとともに，研究者の研究資金を確保する。公的資金のほか，産業界からの資金等の受入れを進めるとともに，専任の担当者を配置して，マーケティング調査等を実施し，寄附金の受け入れを促進する。また，効率的な資産運用や研究成果の活用促進のための出資等を通じて，財源の多元化を試み，自主的かつ安定的な資金の確保を目指す。併せて，研究の将来性を見据え，機能強化を図り研究成果を最大化するため，研究基盤戦略会議で策定した方針に従って，法人内及び機関内の資源配分の最適化を進める。

評価指標	［40-1］令和 2 年度に立ち上げた基金を活用し，寄附金の獲得に関する専任担当者を配置して戦略的な寄附獲得方針を検討する。第 4 期中期目標期間終了までに，検討した方針に基づき新たな寄附金（基金創設に伴って可能となる現物寄附や遺贈等）を獲得する。これらにより，第 4 期中期目標期間中に，第 3 期中期目標期間実績（参考：令和 2 年度までの 5 年平均 412,500,601 円）を上回る寄附金収入を獲得する。 ［40-2］土地・建物の使用料収入及び寄附金等余裕金を活用した利息収入を第 3 期中期目標期間比（参考：令和 2 年度までの 5 年平均 68,917 千円）で 10% 拡大させる。 ［40-3］機構長裁量経費を令和 3 年度比（令和 3 年度実績 1,375,975 千円）で 10% 拡大させる。 ［40-4］コンベンション施設等の保有施設の貸出件数を令和 3 年度比（参考：令和 2 年度実績 17,756 件）で 10% 拡大させる。

IV　教育及び研究並びに組織及び運営の状況について自ら行う点検及び評価並びに当該状況に係る情報の提供に関する目標を達成するためにとるべき措置

［41］各機関においては，第 4 期中期目標期間における事業等について，毎年自己点検を実施し，それを受けて国際的な外部評価を実施する。また，機構全体については，毎年中期目標・中期計画の自己点検評価を実施するとともにこれを公表する。さらに，令和 7 年度には 4 年間の総合外部評価を実施する。これらの評価により機構・機関の活動状況を可視化するとともに，外部の意見を取り入れ，評価結果等をエビデンスとして機構全体及び各機関の運営に反映させる。

評価指標	［41-1］各機関において毎年自己点検を実施し，その結果を公表。また，第 4 期中期目標期間中に，各機関それぞれ 1 回以上，国際的な外部評価を実施する。 ［41-2］機構では毎年中期目標・中期計画の自己点検評価を実施し，その結果を公表。また，令和 7 年度に外部委員のみで構成された外部評価委員会にて 4 年間の総合外部評価を実施し，その結果を公表する。 ［41-3］評価結果等をエビデンスとした運営の改善・反映がされていること。

［42］経営・運営方針や計画，その進捗状況，研究教育の成果と社会発展への貢献等は，ホームページや SNS 等のウェブコンテンツを活用することでより積極的に情報を配信する。また，大学・研究所等向け，一般市民向け，共同研究者向け，産業界向け等，各ステークホルダーに応じた情報の発信を行う。海外の研究者には，「EurekAlert!」を活用した海外プレス機関への情報配信を中心に，また，研究者に加えて，海外の市民にはホームページなどのウェブコンテンツ内の英語情報を充実させることで，機構への理解獲得に努める。マスコミへの情報発信は，発表機関が主催するプレス記者会見に加え，機構本部による統括の下，テレビ会議システムを活用したプレス記者会見の配信と，機構長プレス懇談会において最新の研究成果解説とプレス記者との密な質疑の場を設ける。特に社会的影響が大きい研究成果については，機関でのプレス発表後に詳細な成果の内容や，関連した研究成果を説明する講演・解説を実施する。

評価指標	［42-1］以下の項目において，いずれも第 3 期中期目標期間での実績（平均値）を上回ること。 ・EurekAlert! 国際プレスリリース数（参考：令和 2 年度までの 5 年平均 82 件） ・EurekAlert! 上の総閲覧数（PageView）（参考：令和 2 年度までの 5 年平均 174,219 件） ・ウェブコンテンツの英語ページへのアクセス数（参考：令和 2 年度までの 5 年平均 12,645 アクセス） ・機構長プレス懇談会の参加記者数（参考：令和 2 年度までの 5 年平均 11 人）

［43］近隣の科学館等で，市民との対話の会や講演会等を定期的に実施し，法人経営に対する理解・支持を獲得する。また，各機関の出前授業，施設公開等のイベントについても，機構本部が積極的に支援を行い，オンラインの活用などにより，各機関が協力・連携した情報発信を行うことができる体制を構築する。これにより，機構全体で理科教育を推進し，ひいては，市民の機構に対する理解・支持を獲得する。

評価指標	［43-1］以下の項目において，いずれも第 3 期中期目標期間での実績（延べ数）を上回ること。 ・自然科学研究機構シンポジウム等機構が主催する講演会における参加者数（参考：令和 2 年度までの延べ数 1,305 人） ・オンライン開催のイベントにおけるオンライン視聴者数（参考：令和 2 年度までの延べ数 10,433 人） ・機構で公開しているアーカイブ動画の閲覧数（参考：令和 3 年 10 月時点の延べ数 3,980 回）

Ⅴ　その他業務運営に関する重要事項に関する目標を達成するためにとるべき措置

［44］これまで各機関が独自に進めてきた事務システムの効率化を，機関の枠を超え機構全体として一層推進する。この目標の達成のために，デジタル技術を活用して機構構成員の認証基盤を構築する。この認証基盤を背景に，クラウドソリューション等を用いて業務アプリケーションを機構全体で共通基盤化し，機構本部及び各機関がデジタル化に必要な業務運営体制を整備してアプリケーションの活用を進めることで，一層の事務処理の効率化とセキュリティリスクの低減を図る。

評価指標	［44-1］既に機構全体で共用されている人事給与，財務会計システムに加え，現在は機関ごとに構築されている決裁，勤怠管理，法人文書管理などの業務システムが，令和 6 年度までに機構全体で共用できるものに統一化されていること。

9-9　自然科学研究機構分子科学研究所規則リンク集

自然科学研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則

https://www.ims.ac.jp/rules/rule-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 2025

現状・評価・将来計画

2026 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

