分子研リポート2023

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 2023」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　構成員 25
2-8-1　構成員 25
2-8-2　現　員 31
2-8-3　人事異動状況 32
2-9　財　　政 34
2-10 岡崎共通施設 39
2-10-1 岡崎情報図書館 39
2-10-2 岡崎コンファレンスセンター 39
2-10-3 岡崎共同利用研究者宿泊施設 39
2-10-4 職員会館 39
2-11 知的財産 40
2-12 受　　賞 41

３．共同研究と大学院教育 43
3-1　共同利用研究 44
3-1-1　共同利用研究の概要 44
3-1-2　2023 年度の実施状況 44
3-1-3　共同利用研究実施件数一覧 55
3-1-4　各種研究会プログラム 56

3-2　国際交流と国際共同研究 63
3-2-1　外国人客員部門等及び国際交流 63
3-2-2　岡崎コンファレンス 68
3-2-3　日韓共同研究 68
3-2-4　国際共同研究事業の財源 69
3-2-5　分子研国際インターンシッププログラム（IMS-IIP） 70
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） 71
3-2-7　短期外国人研究者招へいプログラム 71
3-3　大学院教育 73
3-3-1　特別共同利用研究員 73
3-3-2　総合研究大学院大学二専攻・コース 74
3-3-3　オープンキャンパス 78
3-3-4　体験入学 78
3-3-5　総研大アジア冬の学校 80
3-4　その他 81
3-4-1　分子研コロキウム 81

４．研究支援等 83
4-1　技術推進部 84
4-1-1　技術研究会 85
4-1-2　技術研修 85
4-1-3　人　事 86
4-1-4　受　賞 86
4-2　安全衛生管理室 87
4-3　研究力強化戦略室 88
4-4　社会との交流 89
4-4-1　一般公開 89
4-4-2　分子科学フォーラム 89
4-4-3　市民向けシンポジウム 90
4-4-4　見学者受け入れ 91
4-4-5　その他 91
4-5　理科教育への協力 93
4-5-1　スーパーサイエンスハイスクール 93
4-5-2　コスモサイエンスコース 93
4-5-3　あいち科学技術教育推進協議会 94
4-5-4　国研セミナー 94
4-5-5　小中学校での出前授業 94
4-5-6　職場体験学習 95
4-5-7　その他 95
4-6　情報発信 96

5．各種事業 101
5-1　共創戦略統括本部（自然科学研究機構） 103
5-2　光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP（文部科学省） 105
5-3　ムーンショット型研究開発事業（内閣府／科学技術振興機構） 106
5-4　大学連携研究設備ネットワークによる研究設備共用促進事業 107
5-5　マテリアル先端リサーチインフラ ARIM（文部科学省） 111
5-6　ネットワーク型研究加速事業（自然科学研究機構） 124
5-7　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） 125

6．研究活動の現状 127
6-1　論文発表状況 128
6-2　メゾスコピック計測研究センター 129
繊細計測研究部門 131
広帯域相関計測解析研究部門 135
6-3　協奏分子システム研究センター 138
階層分子システム解析研究部門 139
機能分子システム創成研究部門 150
6-4　理論・計算分子科学研究領域 154
理論分子科学第一研究部門 154
理論分子科学第二研究部門 157
計算分子科学研究部門 161
6-5　光分子科学研究領域 175
光分子科学第二研究部門 175
光分子科学第三研究部門 184
光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設） 190
電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設） 193
光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設） 196
光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設） 203
6-6　物質分子科学研究領域 207
電子構造研究部門 207
分子機能研究部門 215
6-7　生命・錯体分子科学研究領域 217
生体分子機能研究部門 217
錯体触媒研究部門 228
錯体物性研究部門 235
6-8　特別研究部門 241
6-9　社会連携研究部門 250
6-10 研究施設等 256
機器センター 256
計算科学研究センター（ネットワーク担当） 261
技術推進部及び安全衛生管理室 262
客員研究部門及び退職・転出後等の成果論文 264

７．点検評価と課題 269
7-1　運営顧問による点検評価 270
7-2　理論・計算分子科学研究領域の評価 271
7-2-1　Matthias Weidemüller 外国人運営顧問 271
7-3　協奏分子システム研究センターの評価 274
7-3-1　David A. Leigh 外国人運営顧問 274

８．研究施設の現状と将来計画 279
8-1　極端紫外光研究施設（UVSOR） 280
8-2　機器センター 285
8-3　装置開発室 288
8-4　計算科学研究センター 289
8-5　生命創成探究センター 291

９．資　　料 293
9-1　歴代所長 293
9-2　運営顧問（2004 ～） 294
9-3　外国人運営顧問（2004 ～） 295
9-4　運営会議委員（2004 ～） 296
9-5　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 299
9-6　大学共同利用機関法人自然科学研究機構第４期中期計画 301
9-7　自然科学研究機構分子科学研究所規則リンク集 308

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ました。藤田 誠教授は，2023 年 4 月より東京大学とのクロスアポイントメントによる分子科学研究所卓越教授に就任頂いています。これまでの人事制度と併せて，分子研を支える重要な人材を所に迎えることで，研究所のさらなる活性化が期待されます。

このリポートには, 2023 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，2023 年度も多くの人事異動がありました。昨年度新設した特任准教授に 12 月 16 日付けで Sylvain Pierre Charles de Léséleuc de Kerouara 先生と 2024 年 1 月 1 日付けで竹家トーマス啓先生が，特任講師として 2024 年 3 月 1 日付けで金井恒人先生が赴任されました。ここでは講師以上のお名前のみを書かせていただきましたが，多くの助教の方々が着任あるいは転出されました。転出された先生方には，分子研の研究活動を支えてこられたことに感謝するとともに，新たな職場での活躍を期待し，分子研にも所外から御貢献いただけるようお願い申し上げます。

研究顧問をお勤めいただいている, 北川 進京都大学高等研究院副院長･特別教授と James M. Lisy イリノイ大学教授, 産学連携研究アドバイザーをお願いしている菊池 昇，株式会社トヨタコン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，2023 年 5 月 10 日 − 12 日にハイブリッドで開催された IMS Presentations 2023（全ての研究室主宰者から提示される 2023 年度の研究計画の発表会）に参加頂き，その活動への提

言をいただきました。外国人運営顧問の David A. Leigh マンチェスター大学教授には，2023 年 12 月 5 日，6 日に協奏分子システム研究センターの，Matthias Weidemüller ハイデルベルグ大学副学長には，2024 年 2 月 7 日－ 9 日に理論・計算分子科学研究領域の研究活動評価を実施していただきました。

2023 年度は COVID-19 の影響がなくなり，教員・学生の国際会議出席のための海外出張などが再開され，海外からの研究者の訪問も始まりました。研究会やシンポジウムは一部を除き会場参加とオンラインを併用するハイブリッドなどで開催されるなど，多様な運営形態へと移行しています。対面の研究会が研究交流にはベストではあるものの，ハイブリッドにすることで参加できる研究者も多いことから，ケースバイケースで開催形式が選ばれるものと考えています。

2024 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。

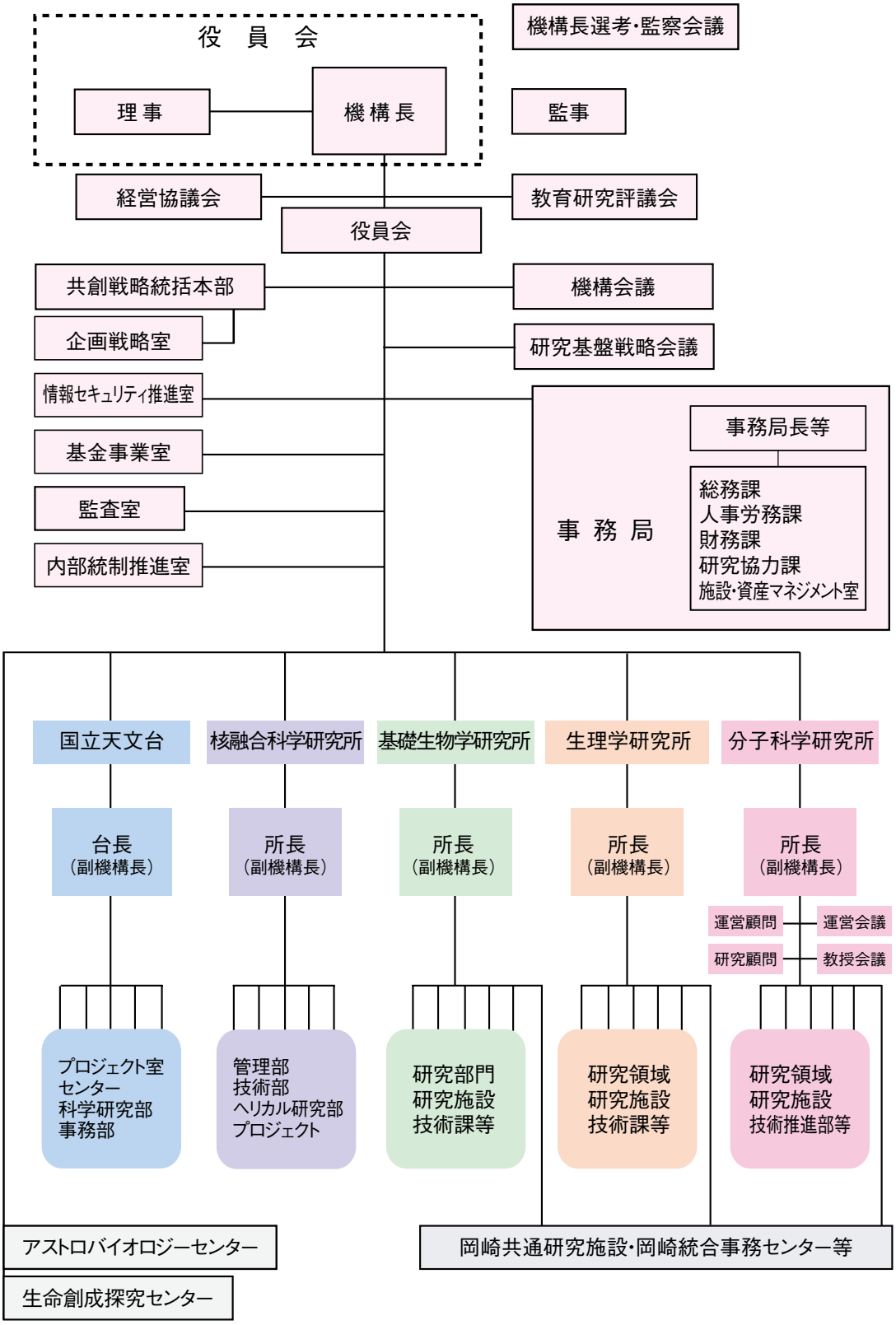
1965. 12.13　日本学術会議は，「分子科学研究所」（仮称）の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
1973. 10.31　学術審議会は,「分子科学研究所」（仮称）を緊急に設立することが適当である旨, 文部大臣に報告した。
1974.　4.11　文部大臣裁定により，東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室（室長：井口洋夫前東京大学物性研究所教授，定員 3 名）及び分子科学研究所創設準備会議（座長：山下次郎前東京大学物性研究所長，学識経験者 35 人により構成）が設置された。
1974.　7.　6　分子科学研究所創設準備会議において，研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
1975.　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。

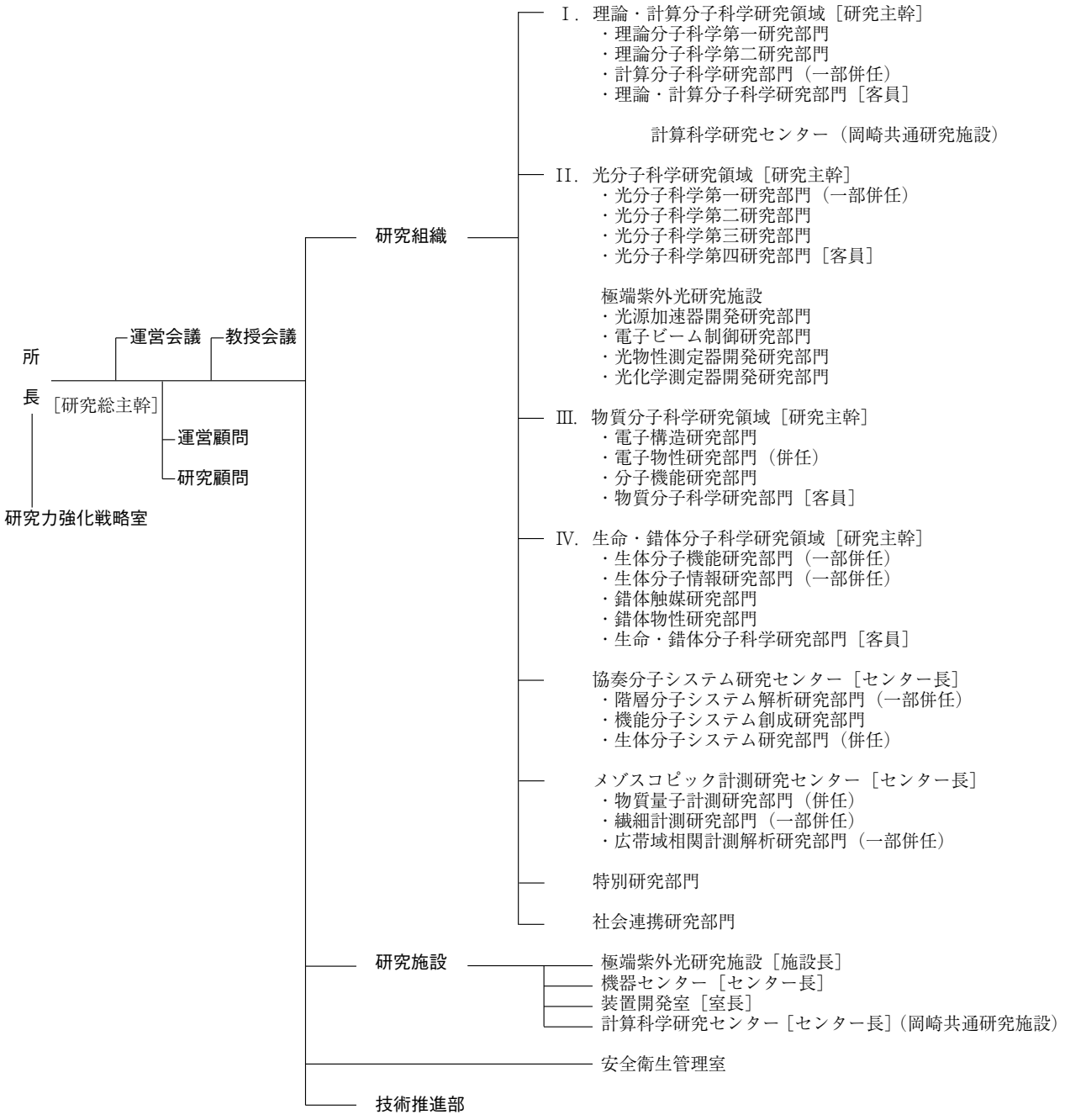
1979. 4. 1　分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され，管理局が総務部（庶務課，人事課，国際研究協力課），経理部（主計課，経理課，建築課，設備課），技術課に改組された。
1979. 11. 8　分子科学研究所創設披露式が挙行された。
1981. 4. 1　第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4.14　国立学校設置法の一部を改正する法律により，分子科学研究所と生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所, 生理学研究所）は総合化され, 岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され，管理局が岡崎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

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

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（2023 年度）

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

外国人運営顧問（2023 年度）

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

2-4-2　研究顧問

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

ら国内外各 1 名で運用している。

研究顧問（2023 年度）

北川　進	京都大学物質－細胞統合システム拠点拠点長，特別教授
LISY, James M.	Research Professor, University of Illinois Urbana-Champaign

2-4-3　産学連携研究アドバイザー

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

産学連携研究アドバイザー（2023 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	株式会社三井化学分析センター技術顧問

2-4-4　運営会議

運営会議は所長の諮問組織として設置され，現在は，所外委員 10 名，所内委員 10 名の合計 20 名の組織である。所外委員は，分子科学研究者コミュニティである関連学会から派遣される委員会組織の学会等連絡会議で候補が選出され，所長が決定する。所内委員は，研究主幹，研究施設・センター長を中心として，所長が決定する。運営会議は教授会議と連携をとりながら所長候補，研究教育職員人事，共同研究，その他の重要事項について審議，検討する。所長候補者の検討は，大学共同利用機関長選考委員会から依頼を受けて運営会議で行われる。研究教育職員人事については，運営会議の中から選ばれた所外委員 5 名，所内委員 5 名で構成される人事選考部会の審議を運営会議の審議と見なす。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 2022.4-2024.3）（◎：議長　○：副議長）

秋吉　一成	京都大学大学院医学研究科特任教授
岩佐　義宏	東京大学大学院工学系研究科教授
忍久保　洋	名古屋大学大学院工学研究科教授
高橋　聡	東北大学多元物質科学研究所教授
唯　美津木	名古屋大学物質科学国際研究センター教授
芳賀　正明	中央大学理工学部名誉教授
福井　賢一	大阪大学大学院基礎工学研究科教授
真船　文隆	東京大学大学院総合文化研究科教授
○村越　敬	北海道大学大学院理学研究院教授
吉澤　一成	九州大学先導物質化学研究所教授
◎秋山　修志	協奏分子システム研究センター教授

飯野　亮太	生命・錯体分子科学研究領域教授
石﨑　章仁	理論・計算分子科学研究領域教授
魚住　泰広	生命・錯体分子科学研究領域教授
江原　正博	理論・計算分子科学研究領域教授
岡本　裕巳	メゾスコピック計測研究センター教授
解良　聡	光分子科学研究領域教授
斉藤　真司	理論・計算分子科学研究領域教授
山本　浩史	協奏分子システム研究センター教授
横山　利彦	物質分子科学研究領域教授

2-4-5　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（2022，2023 年度）（◯：部会長）

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

2-4-6　運営会議共同利用研究部会

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。本部会は昨年まで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ることが期待されている。

運営会議共同利用研究部会委員（2022，2023 年度）（◯：部会長）

大内　幸雄	（東工大院教授）	◯魚住　泰広	（分子研教授）
須藤　雄気	（岡山大院教授）	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）	岡崎　圭一	（分子研准教授）
深澤　愛子	（京大院教授）	倉持　光	（分子研准教授）
村越　　敬	（北大院教授）	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（2023 年度）

【所外委員】

（日本化学会推薦）

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

（日本物理学会推薦）

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

（日本放射光学会推薦）

熊坂　崇 (-2023.9)	（高輝度光科学研究センター室長）	佐藤　友子 (2023.10 -)	（高エネルギー加速器研究機構特別准教授）

（錯体化学会推薦）

馬越　啓介	（長崎大院教授）		

（分子科学会推薦）

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

（日本生物物理学会推薦）

池口　満徳	（横浜市立大院教授）		

【所内委員】

秋山　修志	（分子研教授）	石﨑　章仁	（分子研教授）
解良　聡	（分子研教授）	山本　浩史	（分子研教授）
田中　清尚	（分子研准教授）		

2-4-8　教授会議

分子科学研究所創設準備会議山下次郎座長の申し送り事項に基づいて，分子研に教授会議を置くことが定められている。法人化の際も教授会議を継続することを決めた。所長が議長を務める。同会議は分子研の専任・客員の教授・准教授および主任研究員で構成され，研究及び運営に関する事項について調査審議し，所長を補佐する（一部の議案については，特任教授，特任准教授も教授会議に参画する）。所長候補者の選出に当たっては，教授会議に選挙管理人を置き，その指示に従い，教授会議は運営会議から独立した会議体として独自の見識のもとに候補者を選出し，運

営会議に提案しその審議結果に対し教授会議として了承するかどうかを審議する。また，研究教育職員の任用に際しては人事選考部会からの報告結果を審議し，教授会議としての可否の投票を行う。

2-4-9　主幹・施設長会議

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

2-4-10　各種委員会等

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

(1)　分子科学研究所の各種委員会

会議の名称	設置の目的・審議事項	委員構成	設置根拠等	実施日
点検評価委員会	研究所の設置目的及び社会的使命を達成するため自ら点検及び評価を行い研究所の活性化を図る。	所長，研究総主幹，研究主幹，研究施設の長，本部研究連携室の研究所所属の研究教育職員，技術推進部長，他	点検評価規則	–
将来計画委員会	研究所の将来計画について検討する。	所長，研究総主幹， 教授数名，准教授数名	委員会規則	–
放射線安全委員会	放射線障害の防止に関する重要な事項，改善措置の勧告。	取扱主任者 研究所の職員若干名（放射線発生装置所有グループ及びエックス線発生装置所有グループをそれぞれ1グループ以上含む） 総務部長 技術推進部長 安全衛生管理室長	放射線障害予防規則	2023.9.5–15（メール審議）
極端紫外光研究施設運営委員会	研究施設の運営に関する重要事項。 施設利用の採択に関する調査。	研究施設長 研究施設の教授，准教授及び主任研究員 教授又は准教授4 職員以外の研究者7	委員会規則	2023.8.28, 2024.3.7
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	2023.7.14, 2024.1.10–15（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	2023.5.17–23（メール審議） 12.19

安全衛生委員会	安全衛生管理に関する事項。	（原則） 各研究室から各 1 施設から必要数	委員会規則 管理規則	（メール持ち回り審議） 2023.6.23, 12.21
図書委員会	購入図書の選定。他			–
ネットワーク委員会	情報ネットワークの維持，管理運営。	（原則） 各研究領域から各 1 施設から必要数		随時メールで対応
情報ネットワークセキュリティ委員会	分子研情報ネットワークセキュリティに関する必要な事項。	各研究領域教授各 1 各研究施設教授各 1 技術推進部長 分子研広報委員長 分子研ネットワーク委員長		随時メールで対応
知的財産委員会	研究所における知的財産の管理及び活用に関する事項。	研究教育職員（所長指名）1，研究領域及び研究施設の研究教育職員若干名，岡崎共通研究施設の研究教育職員若干名，技術推進部長が指名するユニット長 1 名	委員会規則	2023.4.7, 6.2, 8.4, 10.6, 12.1, 2024.2.2
利益相反委員会	研究所構成員の利益相反に関する事項。	所長，研究領域及び研究施設の研究教育職員若干名，岡崎共通研究施設の研究教育職員若干名，技術推進部長	委員会規則	2023.11.9 2024.3.21
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		2023.4.7, 7.7, 9.1, 10.6, 11.2, 12.1, 2024.1.5, 3.1–8（メール審議）
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	2023.4.18, 5.16, 6.20, 7.18, 9.19, 10.17, 11.21, 12.19, 2024.1.16, 2.20, 3.19
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	2023.7.14
岡崎情報セキュリティ管理運営委員会	岡崎 3 機関における情報セキュリティの確保及び岡崎情報ネットワークの管理運営に関する必要事項。	研究総主幹，教授 1 計算科学研究センター長 責任担当所長	委員会規則	2024.3.14

岡崎情報セキュリティ管理運営専門委員会	岡崎 3 機関における情報セキュリティと岡崎情報ネットワークの日常の管理。将来における岡崎情報セキュリティ及びネットワークの整備，運用等について調査審議。	教授 1 技術職員 3 室長が必要と認めた者 2	委員会規則	2023.5.24, 8.4, 11.9, 2024.2.26（Web 会議） 2023.7.20, 8.24, 12.22, 2024.2.5（メール審議）
岡崎共同利用研究支援施設運営委員会	岡崎コンファレンスセンター及び宿泊施設（ロッジ）の管理運営に関し必要な事項。	担当責任所長 教授又は准教授 1 国際研究協力課長	委員会規則	2023.8.3, 2024.1.31
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	2023.4.18, 5.16, 6.20, 7.18, 8.15, 9.19, 10.17, 11.21, 12.19, 2024.1.16, 2.20, 3.19 ※ 2024. 3.19 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	2023.5.17–23（メール審議），7.14–21（メール審議），9.20, 2024.3.6
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	2023.5.11, 9.26, 11.29, 12.6–13（メール審議），2024.2.20, 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	2023.8.30, 2024.3.13
動物資源共同利用研究センター運営委員会	センターの管理運営に関する重要事項を審議するため。	教授又は准教授 2	委員会規則	2023.7.3, 12.20–26（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	2023.7.6
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	2023.6.6, 2024.3.25
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	2023.6.13–20（メール審議），2023.8.1（メール開催）

岡崎山手地区連絡協議会	岡崎山手地区における建物の円滑な管理及び環境整備等を協議する。	担当責任所長 教授 2 技術推進部長	協議会規則	2023.4.28, 7.5, 9.6, 11.1, 2024.1.4, 3.6
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	2024.2.7
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	2023.12.21–28（メール審議）
生命倫理審査委員会	機構におけるヒトゲノム・遺伝子解析研究を，倫理的配慮のもとに適正に推進するため。	教授又は准教授 2	委員会規則	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，統計力学などに基づき機能性分子や生体分子などの凝縮系の構造，反応，物性，機能に関する理論・計算分子科学研究による解明

理論分子科学第一研究部門

研究目的　　凝縮系における反応ダイナミクス，物性，機能の解明のための理論および方法論の開発とそれに基づく理論・計算科学的研究

研究課題　1，凝縮系における反応，物性，機能発現の理論研究

2，バリアクロッシングダイナミクスにおける揺らぎの影響に関する理論研究

理論分子科学第二研究部門

研究目的　　主として量子力学・統計力学に立脚した凝縮相分子系における動的現象および機能発現の理論計算研究

研究課題　1，凝縮相化学過程の量子ダイナミクス理論

2，量子科学技術に基づく複雑分子系の観測と制御の理論研究

計算分子科学研究部門

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

研究課題　1，電子状態理論の開発と光物性科学・不均一系触媒への応用

2，生体分子マシンにおける機能発現ダイナミクスの解明

3，分子動力学シミュレーションにおける新しい手法の開発と生体系への応用

理論・計算分子科学研究部門（客員）

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

研究課題　1，凝縮化学系における化学反応・化学過程の分子理論

2，複雑分子系の溶媒和統計力学理論の構築と応用

3，曲率誘導タンパク質による生体膜の形状制御

4，複雑流体のダイナミクス

光分子科学研究領域

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

光分子科学第一研究部門

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

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

光分子科学第二研究部門

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

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

光分子科学第三研究部門

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

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

光分子科学第四研究部門（客員）

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

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

2，極低温リュードベリ原子を用いた超高速量子シミュレータ・量子コンピュータの開発

光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的　シンクロトロン光源用電子加速器に関する開発研究を行う

研究課題　1，先進的な光源加速器の設計開発研究

2，相対論的電子ビームを用いた新しい光発生法とその利用に関する研究

電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的　光源の高性能化あるいは高度利用のための開発研究を行う

研究課題　1，電子または光ビーム計測・制御技術に関する開発

2，放射光を用いた新規分析法の開発研究

光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

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

研究課題　1，放射光を用いた固体分光用の観測システムの開発

2，固体物質の局在から遍歴に至る電子状態の分光研究

光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的　放射光軟Ｘ線を利用した新しい分子分光法の開発研究を行う

研究課題　1，放射光を用いた光化学実験用の観測システムの開発

2，分子固体・液体の化学状態の分光研究

物質分子科学研究領域

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

電子構造研究部門

研究目的　分子・物質材料の物理的・化学的新機能と機構解明

研究課題　1，物質科学・表面科学のための新しい分光学的計測手法の開発

2，新規分光法による固体表面界面における分子集合体の特異的な構造物性・化学機能・量子ダイナミクスの探求

3，多次元分光計測法による新奇物性開拓

4，有限の厚さをもつ固液界面のオペランド分子科学研究

電子物性研究部門

研究目的　分子集合体・生体分子の物性と機能

分子機能研究部門

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

研究課題　1，新しい原理に基づく有機太陽電池とフォトンアップコンバージョンの研究

2，固体 NMR 新規測定法およびハードウエアの開発

3，次世代電気化学デバイスの創出に向けた機能性無機材料の探索

物質分子科学研究部門（客員）

研究目的　　物質分子科学のコミュニティ交流を通した新しい先端的研究分野の開拓

研究課題　1，固体物質からの高次高調波発生

2，有機薄膜太陽電池の高効率化に向けた新規半導体ポリマーの開発

3，バレー自由度をもつ光注入キャリアの磁場下マイクロ波共鳴によるダイナミクス研究

生命・錯体分子科学研究領域

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

生体分子機能研究部門

研究目的　　タンパク質や複合糖質等の生体分子が示す多彩な機能発現の分子機構を明らかにするとともに，生体分子の設計・創成を行う

研究課題　1，新規な機能を有する金属タンパク質の構造機能相関解明

2，複合糖質およびタンパク質の構造・ダイナミクス・相互作用に関する研究

3，生体分子モーターのエネルギー変換機構の解明，新規設計と実証

4，結晶性高分子を分解する酵素の機構解明と創出

生体分子情報研究部門

研究目的　　先端計測技術により，生体分子や凝縮相分子の分子機構を解明する

研究課題　1，溶液散乱と結晶構造解析を相補的に駆使した動的構造解析

2，先端的分光法よる凝縮相分子の機能・構造・ダイナミクスの解明

錯体触媒研究部門

研究目的　　分子間の共同作用的相互作用に立脚した化学反応の駆動，化学反応システムの構築

研究課題　1，水素結合・疎水性相互作用・静電的相互作用といった非共有結合性相互作用による有機分子変換触媒システム構築

2，分子集合挙動に基づく超分子触媒，高次構造触媒の設計と創製

錯体物性研究部門

研究目的　　機能性金属錯体，集積化芳香族化合物の設計と合成，新規な物性，機能の開拓

研究課題　1，3 次元幾何構造をもつ有機共有結合結晶の合成と機能解明

生命・錯体分子科学研究部門（客員）

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

研究課題　1，結晶スポンジ法，拡張スポンジ法の開発と産業応用

2，1 分子操作法を用いた分子モーターのエネルギー変換機構の解明

3，非天然型核酸の合成と機能・構造解析

協奏分子システム研究センター

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

階層分子システム解析研究部門

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

研究課題　1，生物時計タンパク質が 24 時間周期のリズムを奏でる仕組みの解明

2，先端的分光法による複雑分子系の機能・構造・ダイナミクスの解明

3，タンパク質分子構造および機能の合理デザイン

4，生体分子系における反応および階層的構造変化の解明

機能分子システム創成研究部門

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

研究課題　1，機能性分子の多重集積化による新規機能性分子デバイス

生体分子システム研究部門

研究目的　生物が示す多彩な生命現象の分子レベルでの解明

研究課題　1，新規な機能を有する金属タンパク質の構造と機能

2，超高磁場 NMR を機軸とする生命分子のダイナミクスの探究

3，タンパク質分子が相互作用する際の認識，情報伝達，機能制御及びそのための実験・理論的手法の開発

4，生体分子モーターのエネルギー変換機構の解明

メゾスコピック計測研究センター

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

物質量子計測研究部門

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

研究課題　1，振幅と位相をデザインしたレーザー場による超精密コヒーレント制御法の開発

2，固体表面における分子集合体の特異的量子ダイナミクスの探究

繊細計測研究部門

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

研究課題　1，ナノ領域顕微分光法による原子・分子集合体の微細光学解析

2，ナノ構造体の光応答理論開発と多階層系の特性解析，光・電子機能物質の理論設計

広帯域相関計測解析研究部門

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

研究課題　1，生体分子モーターのエネルギー変換機構解明のための新計測法開発

2，表面ナノ構造とその機能を解明するプローブ顕微鏡の開発

2-6　研究施設

極端紫外光研究施設

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

機器センター

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

装置開発室

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

計算科学研究センター（岡崎共通研究施設）

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

生命創成探究センター（自然科学研究機構）

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

2-7　研究部門等

特別研究部門

研究目的　1，分子科学分野において最先端の科学を切り拓く世界的研究者を「卓越教授」として招へいし，研究に専念できる環境を提供する。分子科学分野のトップレベル研究を支援する

2，分子科学分野において独創的な研究を行っている大学教員をクロスアポイントメントで招へいし，分子研の先端設備を使った研究に集中的に取り組む場を提供する

社会連携研究部門

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

2-8 構成員

2-8-1 構成員

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

物故名誉教授

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

理論・計算分子科学研究領域

研究主幹（併）　石崎　章仁

理論分子科学第一研究部門

斉藤　真司	教授
甲田　信一	助教
TANG, Zhiye	助教
ZHU, Zhe	大学院生

理論分子科学第二研究部門

石崎　章仁	教授
三輪　邦之	助教
布能　謙	特任助教
坂本　想一	特任研究員

計算分子科学研究部門

江原　正博	教授（兼）（計算科学研究センター）
奥村　久士	准教授（兼）（計算科学研究センター） （生命創成探究センター）
岡崎　圭一	准教授（兼）（計算科学研究センター）
伊藤　暁	助教
大貫　隼	助教
ZHAO, Pei	特任助教
大多和　克紀	大学院生
杉本　縁	事務支援員

理論・計算分子科学研究部門（客員研究部門）

佐藤　啓文	客員教授（京大院工）
吉田　紀生	客員教授（名大院情報）
野口　博司	客員准教授(東大物性研)
千葉　史朱香	事務支援員
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	助教
富田　隆文	特任助教
BHARTI, Vineet	特任研究員
CHAUHAN, Vikas Singh	特任研究員
周 鳥居　諭来	特任研究員
松原　卓也	特任研究員
岡田　満哉	特別訪問研究員
犬飼　和久	特任専門員
川本　美奈子	特任専門員

酒井　志帆	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
TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh	大学院生
田中　愛登	大学院生
越田　陽子	技術支援員
西岡　稚子	技術支援員
中井　愛里	技術支援員
片岡　賢輔	技術支援員

光分子科学第三研究部門

解良　聡	教授
長坂　将成	助教
福谷　圭祐	助教
PALASSERY ITHIKKAL, Jaseela	大学院生
西野　史	大学院生

光分子科学第四研究部門（客員研究部門）

間瀬　一彦	客員教授(高エネ研物構)
福原　武	客員教授（理研量子コンピュータ研）
中山　泰生	客員准教授(東理大理工)
神谷　美穂	事務支援員

物質分子科学研究領域

研究主幹（併）　横山　利彦

電子構造研究部門

横山　利彦	教授
木村　真一	教授（ク）（阪大院生命機能）（特別研究部門）
大西　洋	教授（ク）（神戸大院理）（特別研究部門）
杉本　敏樹	准教授
櫻井　敦教	助教
市井　智章	特任助教
倉橋　直也	特任助教
斎藤　晃	学振特別研究員
高橋　翔太	学振特別研究員
佐藤　宏祐	学振特別研究員
小山田　伸明	特任研究員
泉　善貴	大学院生
林　仲秋	大学院生
望月　達人	大学院生
吉澤　龍	大学院生
金　成翔	大学院生
常川　響	大学院生
松本　宜樹	特別共同利用研究員
手塚　玄惟	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

山本　浩史	教授（併）

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）

尾坂　格	客員教授（広大院先進理工）
田中　耕一郎	客員教授（京大院理）
秋元　郁子	客員准教授（和歌山大システム工）
横田　光代 *	事務支援員
志村　真希	事務支援員
栗田　佳子 *	事務支援員

生命・錯体分子科学研究領域

研究主幹（併）　飯野　亮太

生体分子機能研究部門

青野　重利	教授（兼）（生命創成探究センター）
加藤　晃一	教授（兼）（生命創成探究センター）
飯野　亮太	教授
中村　彰彦	准教授（ク）(静岡大農)（特別研究部門）
大友　章裕	助教
神田　智哉	助教
原島　崇徳	助教
NAM, Dayeon	特任研究員(IMS フェロー)
岩﨑　美雪	研究員
矢木　真穂	特別訪問研究員
谷中　冴子	特別訪問研究員
磯野　裕貴子	特任専門員
関　健仁	大学院生
保科　明	特別共同利用研究員
中野　里音	特別共同利用研究員
大国　泰子	技術支援員
山本　真由子	技術支援員

生体分子情報研究部門

秋山　修志	教授（併）
倉持　光	准教授（併）
古池　美彦	助教（併）

錯体触媒研究部門

魚住　泰広	教授
椴山　儀恵	准教授
奥村　慎太郎	助教
大塚　尚哉	助教
田澤　文	研究員
ZHANG, Kaili	大学院生
高橋　輝気	大学院生
服部　修佑	大学院生
大石　峻也	大学院生
加藤　雅之	大学院生
西岡　雪奈	技術支援員
原田　晋子	技術支援員
丸山　莉央	技術支援員
牛田　妃菜乃	事務支援員

錯体物性研究部門

草本　哲郎	教授（任）（阪大院工）
瀬川　泰知	准教授
松岡　亮太	助教
水野　麻人	学振特別研究員
塚本　兼司	学振特別研究員
杉山　晴紀	特別訪問研究員
壬生　託人	特任専門員
竹脇　由佳	大学院生
長瀬　真依	大学院生
廣田　宗士	大学院生
渡邊　幸佑	大学院生
吉田　瑠	大学院生
中貝　梢	技術支援員
中野　さち子	技術支援員
平田　直	技術支援員

生命・錯体分子科学研究部門（客員研究部門）

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

協奏分子システム研究センター

センター長（併）　秋山　修志

階層分子システム解析研究部門

秋山　修志	教授
斉藤　真司	教授（併）
古賀　信康	教授（任）（阪大蛋白研）（兼）（生命創成探究センター）
倉持　光	准教授
古池　美彦	助教
小杉　貴洋	助教
米田　勇祐	助教
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
谷浦　愛子	技術支援員
蜂須賀　円	技術支援員

機能分子システム創成研究部門

山本　浩史	教授
佐藤　拓朗	助教
WU, Dongfang	特任研究員
加藤　雄介	特別訪問研究員
戸川　欣彦	特別訪問研究員
佐藤　琢哉	特別訪問研究員
岸根　順一郎	特別訪問研究員
楠瀬　博明	特別訪問研究員
MALATONG, Ruttapol	大学院生
URBAN, Adrian Joe	大学院生
楠本　恵子	大学院生

生体分子システム研究部門

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

メゾスコピック計測研究センター

センター長（併）　岡本　裕巳

物質量子計測研究部門

大森　賢治	教授（併）
杉本　敏樹	准教授（併）

繊細計測研究部門

岡本　裕巳	教授
江原　正博	教授（併）
山西　絢介	特任助教
AHN, Hyo-Yong	特任助教（併）（新分野創成センター）
成島　哲也	特別訪問研究員

広帯域相関計測解析研究部門

飯野　亮太	教授（併）
熊谷　崇	准教授
西田　純	助教
LIU, Shuyi	学振外国人特別研究員
伊藤　敦子	事務支援員

特別研究部門

藤田　誠	卓越教授（ク）（東大国際高等研））
木村　真一	教授（ク）（阪大院生命機能）（電子構造研究部門）
大西　洋	教授（ク）（神戸大院理）（電子構造研究部門）
髙谷　光	教授（任）（帝京科学大生命環境）
中村　彰彦	准教授（ク）（静岡大農）（生体分子機能研究部門）
三橋　隆章	特任助教
増田　道子 *	事務支援員
神谷　美穂 *	事務支援員
栗田　佳子 *	事務支援員
中根　香織 *	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	特任研究員
YAHIA, Vincent	特任研究員
LIM, Hwanhong	特任研究員
鈴木　昌世	特任研究員
CASSOURET, Florent	特任研究員
川瀬　晃道	特別訪問研究員
佐藤　庸一	特別訪問研究員
石月　秀貴	特別訪問研究員
吉田　光宏	特別訪問研究員
村手　宏輔	特別訪問研究員
瀧上　浩幸	特別訪問研究員
田村　彰良	特別訪問研究員
KAUSAS, Arvydas	特別訪問研究員
尾高　英穂	特別訪問研究員
角谷　利恵	特任専門員
殖栗　敦	特任専門員
佐野　雄二	特命専門員
松田　美帆	技術支援員
小林　純	技術支援員
水嶋　一彦	技術支援員
伊吹　剛	技術支援員
小野　陽子	事務支援員
山崎　美鈴	事務支援員
奥原　紀恵	事務支援員

極端紫外光研究施設

施設長（併）　解良　聡

光源加速器開発研究部門

加藤　政博	特任教授（ク）（広大 HiSOR）

電子ビーム制御研究部門

平　義隆	准教授
松田　博之	特任研究員
小澤　舜ノ介	特別共同利用研究員
塩原　慧介	特別共同利用研究員

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
萩原　健太	特任研究員（IMS フェロー）
大門　寛	特別協力研究員
小山　正太郎	特別共同利用研究員
三田　愛也	特別共同利用研究員

光化学測定器開発研究部門

荒木　暢	主任研究員
岩山　洋士	助教
金安　達夫	准教授（任）（九州シンクロトロン光研究センター）
SALEHI DERAKHTANJANI, Elham	特任研究員
枚本　泰伸	特任専門員
水口　あき	技術支援員
石原　麻由美	事務支援員
加茂　恭子	事務支援員

機器センター　センター長（併）　横山　利彦

湊　丈俊	主任研究員
中村　敏和	特任研究員
鈴木　敏泰	特任研究員
石山　修	特任研究員
中本　圭一	特任研究員
太田　康仁	特任研究員
賀来　美恵	特任研究員
伊木　志成子	特任専門員
大原　三佳	特別協力研究員
藤川　清江	技術支援員
今井　弓子	技術支援員
久保田　亜紀子	技術支援員
兵藤　由美子	事務支援員
内田　真理子	事務支援員
船木　弓子	事務支援員
栗田　佳子	事務支援員
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）　田中　彰治

戸村　正章	助手
田中　彰治	特任研究員

研究力強化戦略室　室長（併）　山本　浩史

片㑚　英樹	助手
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
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
横田　光代	事務支援員
小倉　康子	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）
石田　干城	助手
小林　稜平	学振特別研究員
中谷　佳萌	学振特別研究員
稲井　直人	特任研究員
MAHMOOD, Md Iqbal	特任研究員
宇野　明子	技術支援員
近藤　紀子	事務支援員
浦野　宏子	事務支援員

生命創成探究センター（分子科学研究所関連）

創成研究領域

加藤　晃一	教授
青野　重利	教授
古賀　信康	教授（任）（阪大蛋白研）
奥村　久士	准教授
伊藤　暁	助教（兼）
小杉　貴洋	助教（兼）
神田　智哉	助教（兼）
谷本　勝一	学振特別研究員
東田　怜	学振特別研究員
中根　香織	事務支援員
川口　律子	事務支援員

極限環境生命探査室

加藤　晃一	教授（併）
神田　智哉	助教（兼）

技術推進部　　部長　繁政　英治

原田　美幸　　技師
内山　功一　　主任技術員

光技術ユニット　ユニット長　林　憲志

中村　永研　　主任技師
林　憲志　　技師
牧田　誠二　　技師
岡野　泰彬　　技師
矢野　隆行　　主任技術員
酒井　雅弘　　主任技術員
近藤　直範　　主任技術員
手島　史綱　　主任技術員
湯澤　勇人　　主任技術員
太田　紘志　　技術員
清水　康平　　技術員
水川　哲徳　　技術支援員
山崎　潤一郎　　技術支援員

装置開発ユニット　ユニット長　近藤　聖彦

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

計算情報ユニット　ユニット長　岩橋　建輔

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

機器ユニット　ユニット長　繁政　英治

髙山　敬史　　主任技師
藤原　基靖　　主任技術員
上田　正　　主任技術員
浅田　瑞枝　　主任技術員
賣市　幹大　　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

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

整理日付は 2023 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。

2-8-2 現　員

2023 年 5 月 1 日現在

区分 / 職名		研究力強化戦略室・安全衛生管理室等	研究領域 *1				研究部門	
			理論・計算分子科学	光分子科学	物質分子科学	生命・錯体分子科学	特別	社会連携
研究	教　授	1	2[2,0]	3[2,0]	2[2,0]	3[3,2]	3[0,1]	1
	准教授	0	0[1,0]	1[1,0]	2[1,0]	3[0,0]	1	0
	主任研究員	0	0	0	0	0	0	0
	講　師	0	0	0	0	0	0	0
	助　教	0	5	4	2	9	0	0
	特任助教	0	2	1	2	0	1	0
	研究員	1	1	5	4	1	0	5
	小計	2	10[3,0]	14[3,0]	12[3,0]	16[3,2]	5[0,1]	6
研究支援	技術職員	3	0*3					
	特任専門員*2	9	11*3					
	再雇用職員	3	0*3					
	技術支援員	1	10*3					
	事務支援員	6	12*3					
	小計	22	33					
合計		24	96					

区分 / 職名		研究施設			岡崎共通研究施設	自然科学研究機構(分子研)	合　計		
		極端紫外光研究施設	機器センター	装置開発室	計算科学研究センター	生命創成探究センター *4	所内	(女性／外国人)	[客員, 兼任]
研究	教　授	2	0	0	1	2	20	(0/0)	[9,3]
	准教授	2[0,1]	0	0	2	1	12	(1/0)	[3,1]
	主任研究員	1	1	0	0	0	2	(0/0)	[0,0]
	講　師	0	0	0	0	0	0	(0/0)	[0,0]
	助　教	1	0	0	0	0	21	(0/2)	[0,0]
	特任助教	0	0	0	0	0	6	(1/1)	[0,0]
	研究員	3	6	0	2	0	28	(4/9)	[0,0]
	小計	9[0,1]	7	0	5	3	89	(6/12)	[12,4]
研究支援	技術職員	11	9	8	8	0	39		
	特任専門員*2	1	1	0	1	0	23		
	再雇用職員	1	0	2	2	0	8		
	技術支援員	1	3	2	1	0	18		
	事務支援員	2	5	0	1	0	26		
	小計	16	18	12	13	0	114		
合計		25	25	12	18	3	203		

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

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

＊2　助手を含む。

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

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

2-8-3　人事異動状況

(1)　分子科学研究所の人事政策

分子科学研究所では創立以来，研究教育職員（教授，准教授，助教，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。

(2)　創立以来の人事異動状況（2023 年 5 月 1 日現在）

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

着任人数

中期計画区分	第 3 期							第 4 期			現員数* 2023 年 5 月 1 日現在
年　度	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2016 ～ 2021 計	2022	2023	2022 ～ 2023 計	
教　授	1	0	0	2	1	1	5	1	1	2	20 (0/0)
准教授	2	0	2	3	3	1	11	1	1	2	12 (1/0)
主任研究員	0	0	1	0	1	0	2	1	0	1	2 (0/0)
講　師									1	1	0 (0/0)
助　教	2	4	5	4	3	4	22	2	2	4	21 (0/2)
特任助教	1	1	1	2	3	0	8	3	5	8	6 (1/1)
研究員	14	18	15	23	10	8	88	11	14	25	28 (4/9)
計	20	23	24	34	21	14	136	19	24	43	89 (6/12)

＊ (A/B) は，女性 (A) と外国人 (B) 研究者人数で内数

転出人数

中期計画区分	第 3 期							第 4 期		
年度	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2016 ～ 2021 計	2022	2023	2022 ～ 2023 計
教　授	0	1	1	0	0	1	3	0	0	0
准教授	1	2	4	1	1	1	10	5	0	5
主任研究員	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
講　師									0	0
助　教	5	4	5	9	5	4	32	12	3	15
特任助教	1	2	0	1	1	0	5	0	1	1
研究員	8	14	22	19	15	10	88	9	11	20
計	15	23	32	30	22	16	138	26	15	41

② 客員教員等

区分	職　名	創立～ 2023 年度	現員数 *2 2023 年 5 月 1 日現在
客員研究部門（国内）	教　授	171	9(1)
	准教授	181	3(1)
国外 *1	教　授	85	0
	准教授	51	0

＊1　外国人客員研究部門および外国人客員人数。外国人客員研究部門は 2006 年度をもって廃止。2007 年より外国人研究職員。
＊2　（　）は女性の人数で内数。

2-9 財　　政

2023 年度

収入　　（単位：千円）

運営費交付金	2,096,544
施設整備費補助金	0
補助金等収入	13,386
大学改革支援・学位授与機構施設費交付金	0
自己収入（雑収入）	59,348
産学連携等研究収入及び寄附金収入等　小計	1,433,401
産学連携等研究収入	1,359,385
寄附金収入	23,257
その他	50,759
目的積立金取崩額	0
引当特定資産取崩	92,037
合計	3,694,716

支出　　（単位：千円）

	人件費	物件費	施設費	計
業務費　小計	995,561	1,015,598	10,098	2,021,256
教育研究経費	848,513	1,010,009	10,098	1,868,620
一般管理費	147,047	5,589	0	152,636
施設整備費	0	0	0	0
補助金等	4,344	9,042	0	13,386
産学連携等研究経費及び寄附金事業費等　小計	202,637	994,386	0	1,197,023
産学連携等研究費	180,511	954,774	0	1,135,285
寄附金事業費	1,490	9,489	0	10,979
その他	20,636	30,123	0	50,759
合計	1,202,541	2,019,026	10,098	3,231,665

2018 年度～ 2022 年度

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

外部資金獲得状況の推移（実施課題数と交付金額）

区　分 ＼ 年　度			2018	2019	2020	2021	2022	2023
寄付金	分子科学研究所	件数（件）	17	20	24	16	9	119
		金額（千円）	25,483	37,505	37,224	31,394	18,203	20,765
	生命創成探究センター・岡崎共通研究施設（分子研分）	件数（件）	4	3	1	1	1	0
		金額（千円）	4,500	3,100	2,000	1,500	610	0
文部科学省科学研究費助成事業＊	分子科学研究所	件数（件）	97	81	76	74	87	75
		金額（千円）	492,319	453,118	479,779	508,495	453,450	406,679
	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）	16	15	20	19	24	23
		金額（千円）	50,439	104,130	80,331	73,515	94,026	86,970
共同研究＊	分子科学研究所	件数（件）	6	8	9	10	12	13
		金額（千円）	36,374	35,396	34,337	40,380	21,761	18,889
	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	0	0	0	0	0
		金額（千円）	3,457	0	0	0	0	0
受託研究＊	分子科学研究所	件数（件）	25	25	21	25	27	26
		金額（千円）	1,523,539	914,065	563,906	859,124	910,486	1,240,159
	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	1	2	3	6	7
		金額（千円）	28,660	16,250	14,560	17,810	56,861	63,401
合計金額（千円）			2,077,715	1,440,084	1,115,246	1,439,393	1,403,900	1,686,492

＊間接経費，産学官連携推進経費を含む。

科学研究費助成事業

代表者課題　（単位：千円）

研究種目	分子科学研究所		生命創成探究センター・岡崎共通研究施設		合計	
	件数	交付金額	件数	交付金額	件数	交付金額
特別推進研究	1	123,500	0	0	1	123,500
新学術領域研究	0	0	1	11,960	1	11,960
挑戦的研究（開拓）	2	6,240	0	0	2	6,240
挑戦的研究（萌芽）	4	11,570	1	1,300	5	12,870
若手研究	14	19,500	3	5,460	17	24,960
学術変革領域研究 (A)	5	51,220	1	13,130	6	64,350
学術変革領域研究 (B)	0	0	0	0	0	0
基盤研究 (S)	2	72,410	0	0	2	72,410
基盤研究 (A)	5	55,770	0	0	5	55,770
基盤研究 (B)	7	31,460	1	4,680	8	36,140
基盤研究 (C)	7	8,450	1	130	8	8,580
研究活動スタート支援	1	2,470	0	0	1	2,470
国際共同研究（帰国発展）	1	1,430	0	0	1	1,430
国際共同研究強化 (B)	1	0	0	0	1	0
特別研究員奨励費	8	12,224	7	14,560	15	26,784
計	58	396,244	15	51,220	73	447,464

間接経費を含む。交付金額は分担者への配分金額を含む。

分担者課題　（単位：千円）

研究種目	分子科学研究所		生命創成探究センター・岡崎共通研究施設		合計	
	件数	交付金額	件数	交付金額	件数	交付金額
特別推進研究	0	0	1	13,000	1	13,000
新学術領域研究	0	0	1	520	1	520
挑戦的研究（開拓）	2	390	0	0	2	390
学術変革領域研究 (A)	2	2,427	3	18,330	5	20,757
学術変革領域研究 (B)	0	0	0	0	0	0
基盤研究 (S)	0	0	1	3,900	1	3,900
基盤研究 (A)	2	1,547	0	0	2	1,547
基盤研究 (B)	5	3,120	0	0	5	3,120
基盤研究 (C)	3	351	2	0	5	351
計	14	7,835	8	35,750	22	43,585

間接経費を含む。

受託研究　内訳　　（単位：千円）

事業体	事業名		実施課題数（代表者／分担者）	交付金額
文部科学省	科学技術試験研究委託事業	光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP	0 /4	80,901
		マテリアル先端リサーチインフラ	0 /2	162,636
		スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム	0 /1	2,000
		NMR プラットフォーム	0 /1	2,041
	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	22,466
資源エネルギー庁	廃炉・汚染水対策事業費補助金（燃料デブリの分析精度の向上，熱挙動の推定及び簡易分析のための技術開発）		0 /1	41,778
防衛装備庁	令和 2 年度安全保障技術研究推進制度における委託事業		0 /1	102,864
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 /3	570,223
	戦略的創造研究推進事業	CREST	1 /2	78,152
		さきがけ	2 /0	11,375
		ACT-X	1 /0	260
	未来社会創造事業	大規模プロジェクト型	0 /1	71,189
	創発的創造研究推進事業		4 /0	115,895
国立研究開発法人日本医療研究開発機構	創薬基盤推進研究事業		0 /1	1,300
	次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発事業		0 /2	19,160
独立行政法人日本学術振興会	学術研究動向調査研究		2 /0	3,120
株式会社トヨタコンポン研究所	物質，生命，コンピュータ科学の融合領域における光科学視点の調査研究		1 /0	8,800
計			12 /21	1,303,560

間接経費を含む。

2-10　岡崎共通施設

2-10-1　岡崎情報図書館

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

現在（2024.3）岡崎情報図書館は雑誌 1,521 種（和 291，洋 1,230），単行本 96,977 冊（和 13,358，洋 83,619）を所蔵している。

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

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

2-10-2　岡崎コンファレンスセンター

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

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

2-10-3　岡崎共同利用研究者宿泊施設

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

三島ロッジ	室数　シングル：60 室　ツイン：14 室　ファミリー：12 室
	共同設備：炊事場，洗濯室，公衆電話，情報コンセント
明大寺ロッジ	室数　シングル：14 室　ファミリー：3 室

2-10-4　職員会館

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

地下	トレーニングルーム
1 階	飲食・談話スペースおよび生協
2 階	大会議室，特別食堂，和室

2-11　知的財産

分子科学研究所では，特許出願，特許権の帰属等に関する実質的な審議を行うため，知的財産委員会を設けている。委員会は，概ね各領域から教員 1 名，装置開発室ユニット長，国際研究協力課長，財務課長から構成されている。この分子科学研究所知的財産委員会での議決を機構長に報告し，機構として特許出願等を行うことになる。法人化によって知的財産の研究機関による保有が円滑に行われるようになり，独創的な技術や物質開発に対する権利が相応に保証されるシステムが確立され，知的財産権の保有に対する評価が根付いてきたため，研究所における特許保有件数は着実に増加している。内容は，レーザー装置，ヘテロ環を有する有機光応答分子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。

2022 年度の発明件数は，個人有としたもの 0 件，機構有としたもの 4 件，2023 年度は，個人有 0 件，機構有 5 件であった（2024 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	2022 〜 2023 計
出願件数	67	92	4	6	10
国内	37	55	2	6	8
国外	30	37	2	0	2
登録件数	59	61	8	5	13
国内	37	30	6	4	10
国外	22	31	2	1	3
総保有件数	66	107	108	107	107
国内	44	61	63	63	63
国外	23	46	45	44	44
特許料収入（千円）国内外合計	1,670	54,548	24,330	24,919	49,249

2-12 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。2022 年度の受賞件数は 13 件，2023 年度は 12 件であった。

受賞一覧（2022 年度～ 2023 年度）

受賞者名	賞の名称	受賞年月
佐藤　宗太	日本化学連合 化学コミュニケーション賞	2024. 3
佐藤　拓朗	日本物理学会 若手奨励賞	2024. 3
原島　崇徳	第 7 回分子ロボティクス年次大会 若手研究奨励賞	2024. 3
長尾　春代	マテリアル先端リサーチインフラ令和 5 年度技術支援貢献賞	2024. 2
米田　勇祐	日本化学会 英国王立化学会 PCCP Prize	2024. 2
平　義隆	日本陽電子科学会 奨励賞	2023. 12
古池　美彦	化学情報協会 JAICI 賞	2023. 12
小林　稜平	日本生物物理学会 若手奨励賞	2023. 11
奥村　久士	日本シミュレーション学会 ベストオーサー賞	2023. 11
小林　速男	瑞宝中綬章	2023. 11
Sylvain de Léséleuc	自然科学研究機構 第 12 回若手研究者賞	2023. 7
中村　宏樹	瑞宝中綬章	2023. 5
原島　崇徳	日本生物物理学会 中部支部講演会 最優秀発表賞	2023. 3
中村　永研	第 10 回日本放射光学会 功労報賞	2023. 1
藤田　誠	朝日賞	2023. 1
古池　美彦	日本結晶学会 進歩賞	2022. 11
藤田　誠	化学の家財団 国際賞	2022. 10
米田　勇祐	日本生物物理学会 若手奨励賞	2022. 9
古池　美彦	日本生物物理学会 若手奨励賞	2022. 9
古池　美彦	SPRUC 2022 Young Scientist Award	2022. 9
伊澤　誠一郎	2022 年度分子科学研究奨励 森野基金研究助成	2022. 8
瀬川　泰知	宇部興産学術振興財団 第 62 回学術奨励賞	2022. 6
伊澤　誠一郎	自然科学研究機構 第 11 回若手研究者賞	2022. 6
伊澤　誠一郎	Journal of Materials Chemistry A - Emerging Investigators	2022. 5
秋山　修志	長瀬科学技術振興財団 長瀬研究振興賞	2022. 4

3．共同研究と大学院教育

大学共同利用機関としての分子科学研究所は，所外の分子科学及び関連分野の研究者との共同研究を積極的に推進しており，全国の研究者からの共同研究の提案を共同研究専門部会で審議し，採択された共同研究に対しては旅費及び研究費の一部を支給している。また，海外の研究者との共同研究に対しては，研究者の派遣及び相手国研究者招へいのために国際共同研究事業を行っている。国際交流協定に関しては 3-2-1 項に，東アジアや ASEAN 諸国との国際交流や国際インターンシッププログラムに関しては 3-2-4 〜 3-2-7 の項に詳述する。

分子科学研究所は，従来より大学共同利用機関を基盤機関とする総合研究大学院大学に属する二つの大学院専攻を持ち，大学院教育を行ってきた（設立時は博士課程後期 3 年のみ；2006 年度より 5 年一貫制博士課程）。2023 年度において総合研究大学院大学の大幅な改組に伴い従来の二専攻を「分子科学コース」としての一つの教育コースに統合した。分子科学コースでは他の大学院では整備されていない各種の高度な大型の研究施設・実験設備を活用して特色のある大学院教育を行っている。本コースでは，分子科学における最先端の基礎研究を行うとともに，学生の研究課題に応じて，複数指導体制を採用し，研究活動に密着した学生セミナー，国際シンポジウム，共同研究等を通して若手研究者育成のための大学院教育を行っている。またこれまで年 2 回だった学位審査を 4 回に増やし，より柔軟な学位研究指導が実施できる体制へと変革された。さらに，他大学の大学院生や学部学生に対しても，それぞれ受託大学院生（特別共同利用研究員制度による），体験入学者として受け入れ，先端的な研究施設を用いて積極的な教育研究活動を行っている。

2020–2022 年度の 3 年間はコロナ禍により，外部からの研究者の出入りが伴う共同利用，多くの人が集う研究会，海外との往来が不可欠な国際インターンシップ，院生の研究教育に資する学会参加・発表，外部との研究交流，全てが低調に陥ってしまった。コロナ禍が一定の収束を迎えた 2023 年度においては，研究会や国際共同研究，国際インターンシップに関しては従来の活力を取り戻しつつある。一方で大学院への留学進学者は 3 年に亘ってほぼシャットダウンしており，人材の掘り起こしは急務であろう。

いつの時代にも，どのような体制下・環境下でも自然科学研究の本質が変わるものではない。分子科学研究所はポスト・コロナにおいてますます，全国共同利用機関として，アジアの研究ハブとして，また高度専門的な大学院教育の場としての役割を発展的に担っていく。

3-1　共同利用研究

3-1-1　共同利用研究の概要

大学共同利用機関の重要な機能として，所外の分子科学及び関連分野の研究者との共同利用研究を積極的に推進している。そのために共同利用研究者宿泊施設を用意し，運営会議で採択されたテーマには，旅費及び研究費の一部を支給する。次のカテゴリーに分類して実施している。（関係機関に通知して，前期・後期の年 2 回の課題公募を行っており（前期には通年の課題も受付け），また随時申請を受付けている。）

(1)　課題研究：所内および複数の所外研究機関に所属する数名の研究者により，特定の課題について行われる研究。最長 3 年にわたって継続することが可能。

①「課題研究（一般）」申請者が設定した研究課題で申請するもの

②「課題研究（新分野形成支援）」分子科学に関連した新しい研究分野開拓のための準備研究

(2)　協力研究：所内の教授又は准教授等と協力して行う研究。（原則として 1 対 1 による）。

①一般

②マテリアル先端リサーチインフラ事業（5-5 参照）

(3)　研 究 会：分子科学の研究に関連した特定の課題について，所内外の研究者によって企画される研究討論集会。

①「分子研研究会（一般分）」国内の研究者が集まるもの

②「アジア連携分子研研究会」アジア地区の研究者が数名含まれるもの

③「ミニ国際シンポジウム」欧米など海外の研究者を含めたもの

④「学協会連携分子研研究会」分子科学関連学協会が共催するもの

⑤「分子研研究会（on-web）」Zoom 等による web 開催を前提とするもの

(4)　若手研究活動支援：大学院生が主体的に企画する分子科学に関連する研究会や勉強会等。

(5)　岡崎コンファレンス：将来展望，研究の新展開の議論を主旨とする小規模な国際研究集会。

(6)　施設利用

① UVSOR 施設利用：原則として共同利用の観測システムを使用する研究。

②機器センター施設利用：機器センターに設置された機器の個別的利用。

③装置開発室施設利用：装置開発室に設置された機器の個別的利用。

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

3-1-2　2023 年度の実施状況

(1)　課題研究

課　題　名（通年）	提案代表者	
キラル物質におけるマルチスケール量子機能の統一描像の確立	放送大学	岸根順一郎

(2)　協力研究

課　題　名（通年）	提案代表者	
イリジウム単結晶薄膜上に化学気相成長したグラフェン膜の評価	青山学院大学	黄　　晋二
Momentum Microscopy 装置による 3D フェルミ面計測手法の確立とその応用 (II)	大阪大学	田中慎一郎
超薄膜グラフェンを用いた独自の高効率電子収量用液体セルの開発	名古屋大学	三石　郁之
ポリグルタミン病原因遺伝子のリピート関連性非 ATG 依存性翻訳産物へのレーザー照射後の凝集解離の分子シミュレーション	群馬大学	中村　和裕
チェレンコフ位相整合高出力テラヘルツ波光源の開発	名古屋大学	村手　宏輔

広帯域 2 光子光電子分光による内包フラーレン超原子集積体の電子ダイナミクス計測	大阪公立大学	渋田　昌弘
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
溶液から成長させた単結晶性有機半導体薄膜の電子構造計測	東京理科大学	中山　泰生
固体担持型ビスマストリフラートの調整と不均一触媒反応系への展開	山形大学	皆川　真規
糖タンパク質修飾糖鎖の構造決定と糖鎖認識受容体との相互作用解析	東北医科薬科大学	山口　芳樹
多様な複合糖質を活用した糖鎖機能メカニズムの解析	北陸先端科学技術大学院大学	山口　拓実
モータータンパク質キネシンの全原子分子動力学シミュレーション	熊本大学	鄭　誠虎
バナジウム酸化物薄膜における相転移現象のナノスケールイメージング	大阪大学	阿部　真之
高効率スピン偏極測定用 2 次元スピンフィルターの実用化と利用最先端研究	大阪大学	菅　滋正

課　題　名（前期）	提案代表者	
垂直磁気異方性を有する薄膜界面の作製と電子状態の精密計測への応用	東京大学	岡林　潤
包接型 P,N 含有多座配位子保護による金属クラスター触媒の開発	愛媛大学	太田　英俊
トポロジカル物質におけるスピン偏極局所電子状態の解明	東北大学	佐藤　宇史

課　題　名（後期）	提案代表者	
包接型 P,N 含有多座配位子保護による金属クラスター触媒の開発	愛媛大学	太田　英俊
時間分解インパルシブ誘導ラマン分光を用いた機能性発光有機りん光分子・卑金属錯体の励起状態構造ダイナミクスの観測	九州大学	宮田　潔志

(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
イオン液体インフォマティクスの発展にむけて	東京大学	北田　敦
化学・工学・環境学を例とした持続可能な社会のための産学官民連携のあり方	早稲田大学	所　千晴
明日の放射光光電子分光研究展開のシーズとニーズ	分子科学研究所	松井　文彦
溶液の化学現象の軟Ｘ線分光測定のフロンティア	分子科学研究所	長坂　将成
UVSOR-SPring8 赤外ビームライン合同ユーザーズミーティング	分子科学研究所	田中　清尚

(6)　施設利用

①　UVSOR 施設利用

課　題　名（通年）	提案代表者	
テラヘルツ吸収分光による高移動度有機半導体単結晶の分子間フォノン計測	東京理科大学	中山　泰生
軟Ｘ線吸収分光法による金属酸化物をドーピングした有機半導体層の電子状態解析	千葉大学	奥平　幸司
メタン芳香族化に活性なベータ型炭化モリブデン触媒活性種の L 殻 XANES 構造解析	埼玉工業大学	有谷　博文
日米共同・太陽フレアＸ線集光撮像分光観測ロケット実験 FOXSI-4 搭載装置の評価	国立天文台	成影　典之
層状複水酸化物の層間への陰イオンの挿入・脱離に伴う局所環境変化の分析	大阪公立大学	村田　秀信
$ZnFe_2O_4$ の高速重イオン照射誘起による Zn 局所構造変化	九州大学	吉岡　聰
試料搬送装置を用いた軟Ｘ線吸収分光法による電池材料のオペランド測定の開発	九州シンクロトロン光研究センター	小林　英一
中性 K 中間子稀崩壊実験で使用するシンチレーター類の単一光子係数法による蛍光寿命測定による性能評価	山形大学	田島　靖久
赤色・近赤外発光シンチレータとバンド構造	東北大学	黒澤　俊介
暗黒物質直接探索でのダイヤモンドシンチレーティングボロメータの実用化に向けた低温での発光応答理解	筑波大学	梅本　篤宏
自己発光ハロゲン化物シンチレータにおける電荷遷移移動発光の調査	埼玉大学	小玉　翔平
深紫外発光アルミン酸亜鉛薄膜の基板界面領域の結晶性の評価	静岡大学	小南　裕子
VUV スペクトロスコピーによる遷移金属イオン電荷移動遷移の包括的理解	北陸先端科学技術大学院大学	上田　純平
ビームライン整備（リモート測定）	分子科学研究所	岩山　洋士
プラズマエッチングガスの解離過程の解明	名古屋大学	石川　健治
擬カゴメ格子強相関系の電子状態	大阪大学	木村　真一
NaCl:I^-,Ce^{3+} 結晶における I^- イオンから Ce^{3+} イオンへのエネルギー移動の研究	大阪公立大学	河相　武利
合金を用いた多層膜反射鏡の特性調査	東京大学	吉川　一朗

熱処理によるアモルファス半導体薄膜の内殻吸収スペクトル変化の観察	岐阜大学	林　浩司
中～遠赤外吸収分光によるチエノアセン系高移動度有機半導体単結晶の分子振動計測	東京理科大学	中山　泰生
時間分解遠赤外ブロードバンド分光による光誘起キャリアの原子・格子との相互作用の解明	分子科学研究所	西田　純
一軸圧力下の強相関半導体の電子構造	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
多環芳香族炭化水素の紫外特性調査	東京大学	吉川　一朗
多角入射 ATR 紫外分光によるイオン液体／電極界面の電子状態解析	立教大学	田邉　一郎
高速シンチレータ材料におけるエネルギー移動と内殻励起の寄与の定量的解析	静岡大学	越水　正典
中性子シンチレーターとして期待される Li-glass の真空紫外特性評価	大阪大学	清水　俊彦
高融点キラル化合物の高分解能光電子スペクトル測定	広島大学	高口　博志
最小電離損失粒子を用いた原子核乾板の感度評価	名古屋大学	中野　敏行

課　題　名（前期）

課　題　名（前期）	提案代表者	
熱電材料への不純物添加に伴う電荷補償機構の解明	山形大学	北浦　守
透過型 NRF を用いた非破壊核種分析法の高精度化に関する研究	量子科学技術研究開発機構	静間　俊行
水素添加応力負荷オペランド陽電子消滅測定による不安定欠陥の検出	千葉大学	藤浪　眞紀
γ線偏光検出用コンプトンカメラの基礎研究	東京大学	島添　健次
ガンマ線誘起陽電子消滅分光法の整備	分子科学研究所	平　義隆
真空紫外域円偏光照射によるアミノ酸分子のキラリティ発現に関する研究	核融合科学研究所	小林　政弘
BL1U アンジュレータを用いた f-LCS ガンマ線の発生と同位体イメージングへの応用に関する研究	京都大学	大垣　英明
ガンマ線誘起陽電子寿命測定法を用いたタングステンの水素誘起空孔その場観測	京都大学	薮内　敦
触媒反応条件下における酸化セリウムのガンマ線誘起陽電子消滅寿命測定	大阪産業技術研究所	道志　智
単一電子蓄積を利用した放射光の時空間特性の研究	広島大学	加藤　政博
光電子円二色性を示す新規キラル系分子の探索	広島大学	高口　博志
超高速光電子分光による内殻電子ダイナミクスの実時間観測	九州シンクロトロン光研究センター	金安　達夫
シアシックニング溶液における凝集ポリマーの電子状態解明	筑波大学	赤田　圭史
軟Ｘ線による共鳴散乱と XAFS を利用した液晶性超分子キラル構造体の解析	理化学研究所	荒岡　史人
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
金表面上における生体分子のＸ線吸収分光	横浜国立大学	大野　真也
水中での脂質二重膜内の親水性基の電子状態とそのイオン種依存性	豊橋技術科学大学	手老　龍吾
溶液光化学反応の軟Ｘ線吸収分光測定	分子科学研究所	長坂　将成
ビームライン整備	分子科学研究所	長坂　将成
発光性ラジカル配位子を含む銀 (I) 錯体の溶液状態における発光特性及び軟Ｘ線吸収分光法による構造決定	分子科学研究所	壬生　託人
軟Ｘ線共鳴散乱および分光によるキラル液晶の層間分子間相互作用と極性構造の相関に関する研究	京都大学	高西　陽一
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
軟Ｘ線共鳴散乱による機能性フッ素ポリマーの構造分析	大阪大学	山ノ井航平
酢酸 /1- メチルイミダゾール混合液の分子構造と電子状態研究	山口大学	堀川　裕加
半導体光触媒による人工光合成反応の中間体検出：水中軟エックス線 XAFS を用いたオペランド計測	神戸大学	大西　洋
Probing the Effect of Surface Charge, Nanoparticle Size and Specific Counter Ions on the Water Structure at the Nanosilica–Solution Interface	University of Gothenburg	孔　祥瑞
Probing the H-Bonding Network in the Vicinity of Aqueous Ammonia and Ammonium Ion by X-Ray Absorption Spectroscopy	Synchrotron SOLEIL	CEOLIN, Denis
SBR/BR ブレンドによる凝集シリカ間の化学結合状態	東北大学	江島　丈雄
全固体リチウムイオン電池の活物質／固体電解質界面の劣化解析	産業技術総合研究所	朝倉　大輔
レドックスフロー電池電解液の溶液と沈殿物の電子状態解析	産業技術総合研究所	細野　英司
走査型透過Ｘ線顕微鏡のための引っ張り応力印加セルの開発と応用	高エネルギー加速器研究機構	大東　琢治
ビームラインおよび STXM の整備	高エネルギー加速器研究機構	大東　琢治
アポトーシス誘発細胞核内における複数のタンパク質の STXM による分布解析	東海大学	伊藤　敦
彗星有機物の初期水質変成条件を STXM で決定する試み	広島大学	薮田ひかる
SO_2 Uptake and Transformation on Natural Salt Aerosol under Light and Dark Conditions	University of Gothenburg	孔　祥瑞
In-Situ Water Environment to Modify the Surface Oxidation and Structure of rGO and BN membranes	Tamkang University	Cheng-Hao Chuang
STXM Imaging of Salla Disease Fibroblasts	University of Oulu	Minna Patanen

Transition Metal Dopants on Graphitic Carbon Nitride (g-C_3N_4) for Electrocatalytic Carbon Dioxide Reduction Reaction	National Synchrotron Radiation Research Center	Yao-Jane Hsu
高品位内包フラーレン薄膜の光電子角度分布計測	筑波大学	山田　洋一
軟X線吸収分光法による金属をドープした金属酸化物ナノ粒子の伝導帯電子構造解析	千葉大学	奥平　幸司
「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	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多電子・イオン同時計測	富山大学	彦坂　泰正
光電子多次元分光による分子キラリティ誘導スピン選択機構の解明	分子科学研究所	福谷　圭祐
整備課題	分子科学研究所	岩山　洋士
紫外光励起中半導体光触媒の軟X線吸収分光	大阪公立大学	吉田　朋子
白色発光特性を有する炭素含有多孔質シリカ中の炭素の局所構造解析	大阪産業技術研究所	道志　智
$ZnFe_2O_4$ の高速重イオン照射誘起による Fe 局所構造変化	九州大学	吉岡　聰
高空間分解能 ARPES で探るカゴメ超伝導体の対称性の破れ	東北大学	佐藤　宇史
Ag 上に成長した単層ゲルマネンの角度分解光電子分光	日本原子力研究開発機構	寺澤　知潮
垂直磁気異方性を示す Mn 基合金のスピン分解・軌道分解光電子分光	東京大学	岡林　潤
位置分解 ARPES による銅酸化物高温超伝導体の不均一な超伝導状態の研究	東京大学	堀尾　眞史
角度分解光電子分光による π 電子と d 電子の相互作用の研究	東京工業大学	一ノ倉　聖
BL5U 光電子エンドステーションの整備と開発	分子科学研究所	田中　清尚
新奇低次元カイラル半導体の電子構造と多体相互作用	分子科学研究所	福谷　圭祐
i-MAX 相化合物 $(Mo_{1/3}Yb_{2/3})_2AlC$ の角度分解光電子分光	名古屋大学	伊藤　孝寛
角度分解光電子分光による LPSO 型 Mg-Y-Zn 合金の相安定性機構の解明	名古屋工業大学	宮崎　秀俊
鋭いエッジをもつ原子制御した高密度シリコン立体ファセット構造からの光電子分光	奈良先端科学技術大学院大学	服部　賢
$TiSe_2$ 表面の CDW 転移の研究 : アルカリ金属吸着による転移温度の変化	大阪大学	田中慎一郎
キャリアドープされた強相関半導体における電子・正孔対凝縮相の電子構造	大阪大学	中村　拓人
極端紫外線高分散分光器の感度較正	核融合科学研究所	川手　朋子
放射光顕微赤外分光法を用いたアミロイドオリゴマーの構造解析	高エネルギー加速器研究機構	川崎　平康
低エネルギー高分解能 ARPES による新奇電子液晶状態の解明	東北大学	佐藤　宇史
高い正孔移動を示す可溶化ベンゾポルフィリン誘導体単結晶性薄膜の価電子バンド計測	東京理科大学	中山　泰生
高分解角度分解光電子分光による磁性トポロジカル絶縁体サンドイッチ構造の電子状態測定 II	東京工業大学	平原　徹
分子固体における遍歴電子バンドと電子フォノン相互作用の異方性	分子科学研究所	解良　聡
BL7U 光電子エンドステーションの整備と開発	分子科学研究所	田中　清尚
ガーネット型固体電解質 $Li_{6.5}La_3Zr_{1.5}Ta_{0.5}O_{12}$ バルク単結晶の角度分解光電子分光	名古屋大学	伊藤　孝寛
強相関 Yb 化合物の熱電特性と電子構造の関係に関する研究	豊田工業大学	松波　雅治
高分解能低エネルギー角度分解光電子分光を用いた原子層近藤格子における重い電子状態の観測	大阪大学	中村　拓人
銅酸化物高温超伝導体におけるコヒーレンスピークのスペクトル強度の波数依存性 II	広島大学	出田真一郎
ARPES Study of Anomalous Secondary Photoemission from $SrTiO_3$(100)	Westlake University	Ruihua He
放射光源を用いた光電離による核融合プラズマ，星間プラズマの模擬実験	核融合科学研究所	小林　政弘
C 型小惑星リュウグウにおける有機物の宇宙風化	京都大学	松本　徹
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
配位数変調が与える (AE,Sn)S; (AE = Mg, Ba, Ca, Sr) の電子構造評価	産業技術総合研究所	永井　武彦
新規なホウ化水素シート電子状態の精密評価	東京大学	松田　巌
界面磁気近接効果を利用した Pd 薄膜の電子状態変調	名古屋大学	宮町　俊生

課　題　名（後期）	提案代表者	
GiPALS 実験および DFT 計算によって解き明かす As 添加 CdTe 結晶における補償欠陥の格子構造	山形大学	北浦　守
ガンマ線偏光測定電子飛跡カメラの開発	東京大学	島添　健次
真空紫外域円偏光照射によるアミノ酸分子のキラリティ発現に関する研究	核融合科学研究所	小林　政弘
超短パルスガンマ線を用いた陽電子消滅法による材料欠陥評価の研究	名古屋大学	高嶋　圭史
ガンマ線誘起陽電子寿命測定法を用いたタングステンの水素誘起空孔その場観測	京都大学	藪内　敦
触媒反応下における酸化セリウムのガンマ線誘起陽電子消滅寿命測定	大阪産業技術研究所	道志　智
超高速光電子分光による内殻電子ダイナミクスの実時間観測	九州シンクロトロン光研究センター	金安　達夫
シアシックニング溶液における凝集ポリマーの電子状態解明 II	筑波大学	赤田　圭史
Operando 軟X線 XAFS を用いた酸性水溶液電解時における γ-MnO_2 電極触媒上での酸素発生反応機構の解明	理化学研究所	足立　精宏
軟X線による共鳴散乱と XAFS を利用した液晶性超分子キラル構造体の解析 その 2	理化学研究所	荒岡　史人

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
金表面上における生体分子のX線吸収分光	横浜国立大学	大野　真也
水中での脂質二重膜のX線吸収スペクトル計測そのイオン種依存性	豊橋技術科学大学	手老　龍吾
溶液光化学反応の軟X線吸収分光測定	分子科学研究所	長坂　将成
共鳴軟X線共鳴散乱による樹脂素材の架橋構造の解析	分子科学研究所	岩山　洋士
電気化学オペランド軟X線分光による電解生成メタン酸化活性種の観測	名古屋大学	山田　泰之
界面選択的な軟X線吸収分光法を用いるイオン液体の電極界面におけるイオン層構造の解析	京都大学	西　直哉
軟X線共鳴散乱および軟X線分光によるキラルスメクチック液晶の層間分子間極性相互作用と微細構造の相関	京都府立医科大学	高西　陽一
エラストマー混合材料における応力印可時の微小領域化学結合状態	東北大学	江島　丈雄
走査型透過X線顕微鏡に応力印加セルを用いたタイヤゴムの研究	高エネルギー加速器研究機構	大東　琢治
レドックスフロー電池電解液の溶液と沈殿物の電子状態解析	産業技術総合研究所	細野　英司
リチウムイオン電池の単結晶板状粒子活物質の価数変化マッピング解析	産業技術総合研究所	朝倉　大輔
アポトーシス誘発細胞核内における複数のタンパク質の STXM による分布解析	東海大学	伊藤　敦
小惑星リュウグウの有機物における宇宙風化に起因する構造変化の解明	京都大学	松本　徹
Enhancing the Electrocatalytic Activity of Mo-Doped Co_3O_4 Nanowires for the Oxygen Evolution Reaction: An X-Ray Spectro-Microscopic Investigation	Tamkang University	Chung-Li Dong
SO_2 Uptake and Transformation on Natural Salt Aerosol under Light and Dark Conditions	University of Gothenburg	孔　祥瑞
二次元金属有機フレームワーク THPB/Cu(111) の電子構造の直接観測	東京理科大学	金井　要
「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 (II)	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多電子・イオン同時計測	富山大学	彦坂　泰正
光電子多次元分光による分子キラリティ誘導スピン選択機構の解明 II	分子科学研究所	福谷　圭祐
共添加二酸化チタン中の 3d 遷移金属元素による可視光吸収機構の解明	大阪公立大学	村田　秀信
水を 4 電子酸化する半導体光触媒の軟エックス線吸収分光	大阪公立大学	吉田　朋子
マイクロ ARPES による新型カゴメ超伝導体の電子状態解明	東北大学	佐藤　宇史
異元素置換した Mn 基の規則合金におけるスピン分解・軌道分解光電子分光	東京大学	岡林　潤
グラフェン層間化合物の超伝導における d 軌道の役割	東京工業大学	一ノ倉　聖
キャリアドープされた強相関半導体における電子・正孔対凝縮相の電子構造	大阪大学	中村　拓人
カイラル強誘電半導体の電場制御と電子構造解明	分子科学研究所	福谷　圭祐
強相関 Ce 化合物における異常熱電特性に対する電子構造からのアプローチ	豊田工業大学	松波　雅治
偏光依存角度分解光電子分光による Zr_2SnC の電子状態の研究	名古屋大学	伊藤　孝寛
角度分解光電子分光による LPSO 型 Mg-Y-Zn 合金の相安定性機構の解明 II	名古屋工業大学	宮崎　秀俊
鋭いエッジをもつ原子制御した高密度シリコン立体ファセット構造からの光電子分光	奈良先端科学技術大学院大学	服部　賢
過剰ドープ Bi2201 における電子状態の三次元性とフェルミ面対称性の破れの観測 II	広島大学	出田真一郎
放射光顕微赤外分光法を用いたアミロイドオリゴマーの構造解析	高エネルギー加速器研究機構	川崎　平康
純粋液晶状態と共存する超伝導状態の超伝導ギャップ対称性の解明：低エネルギー高分解能 ARPES	東北大学	佐藤　宇史
Ag 上に成長した単層ゲルマネンの高分解能角度分解光電子分光	日本原子力研究開発機構	寺澤　知潮
高分解能角度分解好電子分光による表面モット絶縁体相およびドーピングによる超伝導発現の検証	東京工業大学	平原　徹
高い正孔移動度を示す可溶化有機半導体の単結晶性薄膜の価電子バンド計測	東京理科大学	中山　泰生
分子固体における遍歴電子バンドと電子フォノン相互作用の異方性 II	分子科学研究所	解良　聡
層状 MAB 相化合物 MoAlB の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重い電子状態の制御	大阪大学	中村　拓人
アルカリ金属蒸着による TiSe2 表面における CDW 転移の改質	大阪大学	田中慎一郎
不足ドープ三層系銅酸化物高温超伝導体の電子構造の研究	広島大学	出田真一郎
放射光源を用いた光電離による核融合プラズマ，星間プラズマの模擬実験	核融合科学研究所	小林　政弘
極端紫外線高分散分光器の感度較正	核融合科学研究所	川手　朋子
ノーダルライン半金属候補物質 IrO_2 の電子構造の解明	名古屋大学	平井大悟郎
銀基板上におけるゲルマニウムを含んだ有機分子構造体の電子状態	物質・材料研究機構	川井　茂樹
放射光アンジュレータを用いた紫外光渦－生体分子相互作用の初観測	広島大学	松尾　光一
可視域発光観測による真空紫外光の偏光評価 III	九州シンクロトロン光研究センター	金安　達夫
界面磁気近接効果を利用した Pd 薄膜の電子状態変調 II	名古屋大学	宮町　俊生
原子層磁石と磁性金属単原子膜との層間磁気結合	千葉大学	山田　豊和

④　計算科学研究センター施設利用

課　題　名（通年）	提案代表者	
生体分子の機能発現反応に関する理論的研究	千葉大学	星野　忠次
触媒分子系および生体分子系の量子化学と反応動力学	北海道大学	長谷川淳也
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
キラル分子内における電子カイラリティの非対称性と自然界のホモキラリティ	京都大学	瀬波　大土
高反応性のジボラン (4) と Al アニオンの性質の解明および多座配位子を有する均一系触媒設計へ向けた理論計算	名古屋大学	山下　誠
金属蛋白質の電子構造制御に関する理論的研究	広島市立大学	鷹野　優
自己集合過程とエネルギー変換材料の計算科学	横浜市立大学	立川　仁典
複雑分子系におけるマイクロ波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
密度汎関数法計算の新たな展開と半導体中の欠陥の電子物性解明	名古屋大学	押山　淳
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
フラグメント電子状態理論を基とした大規模第一原理分子シミュレーションと電子状態インフォマティクスによる機能材料の熱力学・光物性の迅速設計	中央大学	森　寛敏
溶液界面の構造と機能の計算化学	東北大学	森田　明弘
シクロペンタジエノン金属錯体による金属配位子協働的結合切断反応の開発と有機デバイスを指向した芳香族化合物の設計	東京大学	野崎　京子
赤外分光によるエキサイプレックスの構造と電荷分布，および多環芳香族分子（PAHs）の水和構造の研究	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
分子動力学シミュレーションを用いた機能性分子の選択的膜会合と機能発現の解明	北陸大学	齋藤　大明
構造多糖材料および関連タンパク質の分子シミュレーション研究	宮崎大学	湯井　敏文
全原子分子動力学計算の高分子研究への展開	東京大学	岡崎　進
表面・界面の物性・動態・機能の分子動力学解析	徳島大学	吉田　健
光合成酸素発生中心 $CaMn_4O_5$ クラスターの構造，電子・スピン状態および反応性に関する理論的研究	大阪大学	山口　兆
三脚巴状分子の凝集誘起発光についての理論的研究	千葉工業大学	山本　典史
様々なタンパク質の構造転移の統一的描像の確立に向けた自由エネルギーランドスケープ計算手法の改良	名古屋大学	寺田　智樹
生体分子と分子集合体の分子機能の理論計算	京都大学	林　重彦
蛋白質による DNA 加水分解における溶媒の役割	九州工業大学	入佐　正幸
水，氷，クラスレートハイドレートの相転移の理論研究	岡山大学	松本　正和
量子分子科学計算ソフトウェア NTChem によるナノサイズ分子の分子機能の解明・設計	理化学研究所	中嶋　隆人
生体分子のマルチコピーマルチスケールシミュレーション	大阪公立大学	森次　圭
発光性金属錯体および集合体の電子状態に関する計算科学的アプローチ	関西学院大学	加藤　昌子
リガンド多価結合における相互作用に関する理論的研究	北里大学	能登　香
軟Ｘ線光科学に関する理論的研究	広島大学	高橋　修
分子軌道計算による有機反応および有機分子構造の設計と解析	東京大学	大和田智彦
Molecular Mechanism of Protein Function Studied by Site-Selective Heat Current Analysis	名古屋大学	倭　剛久
液体・生体分子および関連分子系の構造・ダイナミクス・分子間相互作用と振動スペクトル	静岡大学科	鳥居　肇
機能性ソフトマテリアルの全原子分子動力学シミュレーション II	北里大学	渡辺　豪
ナノマテリアル及び生体分子の機能・物性・反応性に関する理論的研究	早稲田大学	中井　浩巳
アミノ酸変異によるタンパク質複合体の結合自由エネルギーシフト	金沢大学	川口　一朋
触媒を用いた化学反応機構の理論的解明	茨城大学	森　聖治
機能性有機分子材料の電子的性質に関する理論的研究	三重大学	伊藤　彰浩
重元素分子の高精度な相対論的量子化学計算にむけた方法論の開発と応用	広島大学	阿部　穣里
現代社会のインフラとなっている半導体技術の基礎となる半導体／アモルファス絶縁体界面の第一原理計算による研究	名古屋大学	白石　賢二
生体超分子の立体構造変化と機能	東京工業大学	北尾　彰朗
計算科学的手法による半導体ナノ構造の形成と機能に関する研究	三重大学	秋山　亨
理論計算による触媒機能の解明	東邦大学	坂田　健
クラスターイオンの幾何構造，反応性および衝突断面積の計算	東北大学	大下慶次郎
蛋白質の機能発現と構造に関する理論的研究	京都府立大学	リントゥルオト正美

分子運動に起因する動的分子間相互作用を活用した液晶の機能開発	大阪大学	内田　幸明
分子性導電・磁性材料に関する理論的研究	京都大学	中野　義明
ソフトマター系における遅いダイナミクスの理論・シミュレーション研究	大阪大学	金　鋼
シグナル伝達を制御する巨大タンパク質複合体の分子動力学シミュレーションによる動的制御機構解明	近畿大学	米澤　康滋
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
天然紫外線防御物質マイコスポリン様アミノ酸の高速脱励起と水溶媒和の働きについて	山陽小野田市立山口東京理科大学	畠山　允
水表面における OH 伸縮振動のスペクトル拡散ダイナミクスに関する理論研究	富山大学	石山　達也
有機光電変換物質の電子状態の解明	日本女子大学	村岡　梓
不均一界面系における静的および動的物性の理論的研究	慶應義塾大学	畑中　美穂
3 体相互作用に基づく Lennard-Jones 液体の体積粘性率の定式化と流体力学極限における動的構造因子の定量的評価	新潟大学	大鳥　範和
ボウル型共役化合物の物性調査，および金属クラスター触媒の活性評価研究	大阪大学	櫻井　英博
新奇ナノカーボン・共役ラダー分子群創出に向けた合理的な分子・反応・機能デザイン	名古屋大学	伊藤　英人
Photochemistry and Electronic Trapping in TiO_2 Nanostructures	東京工業大学	Gergely Juhasz
高熱電特性を示す有機金属分子素子の開発	東京工業大学	田中　裕也
多機能配位子をもつ金属錯体の構造および反応性に関する理論研究	理化学研究所環	浅子　壮美
計算分子分光学：分子の構造および反応に関する計算化学	お茶の水女子大学	平野　恒夫
気相イオンの温度計測のための温度計イオンの開発	産業技術総合研究所	浅川　大樹
酸解離定数計算の新しい展開とその応用	筑波大学	松井　亨
液体の統計力学理論による生体分子の機能解析	名古屋大学	吉田　紀生
荷電 π 電子系の設計・合成を基軸とした超分子集合体の創製	立命館大学	前田　大光
学際的研究のための気相中原子・分子電子励起状態精密量子化学計算	東洋大学	田代　基慶
タンパク質に結合する人工オリゴアミドのインシリコ設計	東京大学	森本　淳平
コンビナトリアル化学によるジグリコールアミド系有機配位子の合成と，その配位子を用いたアクチノイドイオンの選択的抽出に関する分子科学研究	広島大学	井口　佳哉
3d 遷移金属錯体の有機ケイ素化合物に対する反応性に関する理論的研究	北里大学	神谷　昌宏
量子化学計算による光化学系 II の構造・反応機構解析	名古屋大学	野口　巧
アリルロジウムフタロシアニン錯体による赤色光アンケージング反応の開発	東京大学	村田　慧
第一原理計算と熱流体計算による化学気相蒸着反応の解明と最適化	北海道大学	島田　敏宏
分子動力学シミュレーションを用いたタンパク質の機能解析	東京大学	篠田　恵子
シミュレーションに基づく抗体・ワクチン・治療薬の分子設計	国立感染症研究所	黒田　大祐
反応自動探索法の開発と応用	北海道大学	前田　理
分子性光触媒および固体電極触媒の反応過程の調査および触媒系の最適化	九州大学	伊勢川美穂
実験と計算による有機反応機構解析	静岡県立大学	滝田　良
光回復酵素による光応答機構の解明	大阪大学	山元　淳平
新規不斉触媒の開発研究とベイズ最適化・機械学習への適用	名古屋工業大学	中村　修一
酸化物結晶および融体表面における構造緩和を駆動力とした不規則錯体構造の自発的形成過程の解析	大阪大学	鈴木　賢紀
分子動力学計算による高接着蛋白質の接着メカニズムの解明	名古屋大学	鈴木　淳巨
Computational Innovation of Novel Catalysts for Ammonia Synthesis	名古屋大学	Pradeep Risikrishna Varadwaj
五核鉄クラスターの電子状態と反応性の理論解析	名古屋大学	柳井　毅
基本セルのサイズ依存性を考慮した巨大分子の不均一水和と拡散係数分割の分子動力学シミュレーション研究	九州大学	秋山　良
分子金属錯体および多核クラスターの精密制御と電子状態の解明	東北大学	長田　浩一
新規合成反応，新機能の創出を志向した理論化学的研究	東京農業大学	斉藤　竜男
ナノカーボンと有機物を用いた機能材料の計算化学シミュレーション	高度情報科学技術研究機構	手島　正吾
ケージ状共役有機構造体の構造と電子物性の解明	早稲田大学	加藤　健太
気相分子クラスターの構造と分子間相互作用の理論的解析とレーザー分光研究	東北大学	松田　欣之
工業原料を利用した精密化学変換反応の開発	大阪大学	星本　陽一
生体分子集合及び電池電解質系の分子シミュレーション	岡山大学	篠田　渉
機能性分子集合体の分子動力学研究：ナノ構造形成における分子輸送挙動の解析	兵庫県立大学	鷲津　仁志
巨大分子のイオン選択性の起源：構造論とエネルギー論	東京工業大学	平田　圭祐
イオン性色素を含む新規 π 電子系の合成と配列制御	山形大学	山門　陵平
配向制御された高分子集合体の動的特性と物性相関解析	東京工業大学	古屋　秀峰

生体物質における凝集現象と枯渇効果の寄与	九州産業大学	末松安由美
染色体の新規モデル開発と種々の分子の原子間力顕微鏡像の理論計算	JST さきがけ	炭竈　享司
ビナフチル – ピレン環状体色素の立体構造と光学特性	岡山大学	高石　和人
有機分子水溶液の X 線誘起超高速反応動力学	理化学研究所	山崎　馨
星間でのアミノ酸前駆体生成を模擬する有機分子合成シミュレーション	核融合科学研究所	中村　浩章
Ag 置換ゼオライトにおけるプロパン／プロピレン分離メカニズムの解明	信州大学	田中　秀樹
ポリオキソメタレートを基盤としたハイブリッド分子触媒の開発	東京大学	鈴木　康介
タンパク質 – リン酸化ペプチドの結合自由エネルギー評価	医薬基盤・健康・栄養研究所	李　秀栄
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
生体内で起こる疾患およびウイルス感染の分子論的メカニズムの解明および創薬に関する理論的研究	筑波大学	堀　優太
新しい治療法の確立を目指した新規触媒の開発	東京大学	三ツ沼治信
溶液内および生体分子内で起こる化学反応と構造ダイナミクスの理論的解明	九州大学	森　俊文
界面活性剤凝集挙動の理論モデリング	岡山大学	甲賀研一郎
データ駆動型高分子材料研究のためのデータプラットフォーム基盤の創出	統計数理研究所	林　慶浩
マルチドメインタンパク質の分子シミュレーションによる動態解析	量子科学技術研究開発機構	田口　真彦
グルタミド誘導体の超分子組織体構造と修飾官能基の配向による機能発現の解析	熊本大学	桑原　穣
量子化学計算による有機分子触媒の精密設計	東北大学	寺田　眞浩
理論計算を利用したラジカルメカノフォアの解析および新規分子骨格の開発	東京工業大学	杉田　一
ラジカル解離型フォトクロミック分子を配位子とした新規フォトクロミック金属錯体の創製と光機能探索	立命館大学	小林　洋一
人工力誘起反応法を利用したヘテロ元素含化合物の新規合成法の開発とその円偏光発光材料への応用	北海道大学	長田　裕也
電気化学的に発生させた活性化学種の反応挙動の理論化学的考察	岡山大学	光藤　耕一
分子集合体への分子分配および集合構造に関する研究	京都工芸繊維大学	水口　朋子
高分子 P4MP1 とカーボンナノチューブをホストとする長鎖アルカン選択的吸蔵現象の解明	慶應義塾大学	千葉　文野
アダマンタン縮環アレーン類の生成反応機構解明および新奇 π 共役系分子の構造物性解明	名古屋大学	八木亜樹子
有機触媒及び有機金属触媒を用いた新規反応の理論的機構解明及び反応予測	岡山大学	山崎　賢
DFT 計算を用いる新規 C–H 官能基化反応の機構解明	名古屋大学	安井　猛
粘弾性体と粉体の静摩擦の法則の包括的解明	大阪大学	岩下　航
ホスフィン保護 Au_{11} クラスターの超高速緩和ダイナミクスの配位子効果	関西学院大学	江口　大地
Exploiting Weak Interactions in Apolar Ices. Phase II. CO_2 Ice Formation, Explicit Determination of Binding Energies on CO_2 Ices, and Mixtures CO/CO_2	東京大学	German Molpeceres de Diego
タンパク質 –RNA 複合体系の全原子分子シミュレーション研究	早稲田大学	浜田　道昭
遷移金属複合系の構造，電子状態，反応の理論的研究	東京都立大学	中谷　直輝
バイオ系・材料系におけるエネルギー変換過程の解析	量子科学技術研究開発機構	藤田　貴敏
アモルファス物質における電子・格子状態シミュレーション	大阪大学	南谷　英美
分子動力学法を用いた，貴ガスによる隠れた薬剤結合部位の探索	産業技術総合研究所	飯田　慎仁
第一原理計算による金属間化合物表面の化学的特性の研究	鹿児島大学	野澤　和生
導電性ワイドギャップ材料の探索	九州大学	寒川　義裕
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
Computational Investigation 2D and/or 2D+*n*D Materials for Future Application in Energy Conversion and Storage	東京理科大学	Arpita Varadwaj
計算機および生化学実験によるタンパク質分子デザイン	大阪大学	古賀　信康
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
拡張アンサンブル法による分子シミュレーション	名古屋大学	岡本　祐幸
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
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
クーロン爆発イメージングに基づく高分解能分光を用いた分子クラスターの構造とダイナミクスの研究	北里大学	水瀬　賢太
薬物あるいは生理活性物質と大環状化合物との相互作用解析	福岡大学	池田　浩人
低分子非晶質有機半導体薄膜における官能基配向と膜物性との相関理解	山形大学	横山　大輔
分子動力学及び量子化学計算を用いた生体高分子および機能材料の構造と機能に関する研究	横浜国立大学	上田　一義
アミノ酸シッフ塩基銅 (II) 錯体とリゾチームの複合体における動力学および QM/MM 計算	東京理科大学	秋津　貴城
二原子分子溶媒モデルの相関関数を正確に求める方法論の開発	愛媛大学	宮田　竜彦
優れた円偏光発光特性を示す π 共役系化合物の探索	北里大学	長谷川真士
含リン三次元パイ共役分子の構造と物性	大阪公立大学	津留崎陽大

ナノ炭素・アミノ酸・クラスターの反応動力学の量子化学的研究	電気通信大学	山北　佳宏
溶液 XAS 解析のための第一原理計算	東京大学	佐々木岳彦
天然由来のリード化合物の構造と反応に関する量子化学的研究	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
多元素クラスターの赤外解離分光のための赤外スペクトルの予測	東京大学	工藤　　聡
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
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
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
振動円二色性分光法の超分子キラリティへの応用	愛媛大学	佐藤　久子
発光性金属錯体の励起状態の研究	日本工業大学	大澤　正久
歪んだ多環芳香族化合物の構造と性質	東邦大学	渡邊総一郎
キノイド型分子の電子励起状態および構造の量子化学計算	室蘭工業大学	飯森　俊文
新規な典型元素化合物の構造と反応性に関する研究	学習院大学	狩野　直和
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
細胞内における超硫黄分子の振動解析	東北大学	影山　莉沙
機能性有機材料の性能評価のための理論計算	東京都立産業技術研究センター	小汲　佳祐
典型元素を含む化合物の構造物性理論計算	東京都立大学	瀬高　　渉
第一原理計算による CDW 下の遷移金属ダイカルコゲナイドの電子状態の研究	大阪大学	田中慎一郎
典型元素の特性を活用した発光体および光触媒の開発	茨城大学	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
DFT 計算に基づいた固体酸化物／液相界面の局所構造解析	東京大学	中山　　哲
新規機能性有機色素の開発	岐阜大学	船曳　一正
新規双極性有機典型元素化合物の創成と双極子付加反応への応用	北里大学	内山　洋介
高周期元素を含む電荷移動型有機光触媒の探索	名古屋工業大学	高木　幸治
計算科学の援用による高機能なレドックス活性分子の探索	横浜国立大学	信田　尚毅
Theoretical Studies of Strong Light-Matter Interactions in Molecular Systems	京都大学	Nguyen Thanh Phuc
統計学的解析に基づくフェノール光触媒の最適化	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
空間的軌道相互作用に基づくπ共役に関する研究	名古屋市立大学	雨夜　　徹
非対称大環状分子をビルディングブロックとした超分子金属錯体の機能化	東京大学	田代　省平
DFT 計算による異種金属混合原子価集積体の電子構造の解明	岐阜大学	植村　一広
量子化学計算と量子回路のシミュレーションによる量子多体系の理論的研究	大阪大学	吉田悠一郎
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
塩基性陰イオンを含むイオン液体中での遷移金属イオンの溶媒和構造	佐賀大学	高椋　利幸
電場中における分子・イオンの反応の研究	学習院大学	奥津　賢一
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
網羅的な構造検索と直感的な手法によるタンパク質構造の新規設計	名古屋大学	佐久間航也
有機分子光触媒の設計と反応性解析に関する研究	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
古典および量子シミュレータを用いた量子化学計算	東京大学	山崎　雅人
安定ジラジカル分子を用いた光化学の未開拓領域の探索	京都大学	清水　大貴
異常拡散現象の時間分解計測と分子動力学計算	青山学院大学	柏原　　航
複数の金属中心の協同効果を利用した重合反応の機構解明	弘前大学	竹内　大介
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
凝縮系における緩和および反応ダイナミクスの理論研究	分子科学研究所	斉藤　真司
複雑系の量子状態理論の開発と不均一系触媒および光機能システム系への応用	分子科学研究所	江原　正博
病気に関わるタンパク質の分子動力学シミュレーション	生命創成探究センター	奥村　久士
分子動力学計算と量子化学計算による液体の分子間相互作用の研究	分子科学研究所	長坂　将成
抗体分子の構造ダイナミクスの探査	分子科学研究所	谷中　冴子
生体分子マシンにおけるマルチスケールな機能発現ダイナミクスの分子シミュレーション	分子科学研究所	岡崎　圭一
周期的 3 次元有機構造体の創製	分子科学研究所	瀬川　泰知
先端的コヒーレント振動分光による機能性複雑分子の超高速構造ダイナミクスの観測と解明	分子科学研究所	倉持　　光
Conformation and Electronic Sturctures of Metal Tetraarylbilatrienones on Au(111) and Ag(111)	分子科学研究所	ウルバン アドリアン ジョー
イオンチャネルのイオン選択性機構の解析のための分子動力学シミュレーション	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
外場からの摂動下にある分子およびその集合体の計算化学的検討	東京大学	伊藤　喜光
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
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
配位ネットワークを形成するアルキル保護銀ナノクラスターの構造解明	東京大学	堂本　悠也
新規なケミカルリサイクル反応機構の計算化学的解明	長崎大学	重光　保博
π クラスター分子の電子物性の解明	大阪大学	西内　智彦
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
単分子磁石によるトロイダルモーメントの制御	広島大学	井上　克也
Isolatable Paramagnetic and Anionic Transition Metal Complexes Stabilized by Heterocyclic Ligands for Redox and Photoredox Active Functional Materials	広島大学	Shang Rong
量子化学計算を用いた有機合成反応機構および物性の解明	慶應義塾大学	東林　修平
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
特異な構造パラメータを有する高歪化合物の創出	北海道大学	島尻　拓哉
新規生物活性物質の設計・合成・機能評価	九州大学	平井　　剛
クロミック分子の光物性に関する量子化学計算	立命館大学	長澤　　裕
三重項媒介配位子保護金属クラスターの計算科学的研究	立教大学	三井　正明
三重項エネルギー移動を利用するアルキナールの立体発散型還元的環化反応	北海道大学	中村　顕斗
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
新規パイ共役化合物の構造－物性相関の解明に関する理論研究	大阪大学	山下　健一
量子力学に基づく分子シミュレーション研究	法政大学	数納　広哉
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
単層カーボンナノチューブの構造制御合成に向けた合金触媒を用いた分子動力学シミュレーション	東京大学	丸山　茂夫
ペプチド金属錯体の環状金属イオン配列における分子間相互作用とキラリティの評価	お茶の水女子大学	三宅　亮介
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
金属クラスター連結体の創製	東京理科大学	新堀　佳紀
新規キラル分子・分子集合体のキロプティカル特性の理論計算	大阪大学	石割　文崇
金属カーバイド種を用いた増炭反応の開発	京都大学	黒木　　堯
ゲスト包接能を有するカラムナー液晶の開発：2 量体構造の解明	日本大学	吉田　　純
β シート性ペプチド構造の安定性評価	東京大学	恒川　英介
人工光合成開発に向けた金属錯体触媒および分子変換反応の理論的研究	大阪大学	渡部　太登
スルースペース型電荷移動を活用する新規 TADF 分子設計研究	大阪大学	武田　洋平
典型元素による新規超原子価化合物の創製とその特異な物性開発	和歌山大学	林　　聡子
有機ケイ素化合物の構造と性質	群馬大学	久新荘一郎
電池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
量子化学計算による金属カルベノイド化学種の安定性および反応性探索	北海道大学	岡本　和紘
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
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
理論計算による酸化物固定化キラル Tb 錯体の表面構造の解明	名古屋大学	邨次　　智
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
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
電気陽性 13・14 族元素配位子またはフラーレンが結合した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
DFT 計算と TD-DFT 計算	大阪大学	モハメッド サリム ヘフニ
リパーゼ触媒 O- アシル化による軸不斉ビアリール化合物の動的速度論的光学分割	大阪大学	鹿又　喬平
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
1,4-Diphenylbutajiyne および *trans*-Stilbene の分子内 π 電子共役の強さについて	日本大学	奥山　克彦
チイルラジカルを利用した分子触媒反応の開発	東京工業大学	山本　雅納
水和フェノールカチオンの微視的水素結合構造に対する重水素置換効果	北里大学	石川　春樹
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
NHC 配位シクロメタル化錯体を用いた触媒反応に関する研究	東京電機大学	山本　哲也
骨格多様性を持つビブサニン類のプロテインキナーゼ C 活性化剤としての構造最適化	香川大学	柳田　　亮
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
ペプチド系有機化合物の構造解析と反応機構の解明	北海道大学	勝山　　彬
金属表面上の生体分子の構造と電子状態	横浜国立大学	大野　真也

セルロースナノファイバーのネットワーク形成に関する非平衡ダイナミクスシミュレーション	東京農工大学	坂本　道昭
イリジウム触媒を用いる異性化／環化異性化／芳香環化マルチタスク触媒システムと sp^3 炭素 -sp^2 炭素 [1,5]- シリル転位反応の開発	大阪大学	佐古　　真
待ち行列理論を用いた気相中におけるイオン誘起核生成プロセスのモデル化	金沢大学	玉舘　知也
タンニンの MMP-1 結合様式の解明	岐阜大学	山内　恒生
金属－酸化物複合クラスターと小分子の相互作用	国立科学博物館	林　　峻
キラルアイソトポマーの安定配座探索と円二色性に関する研究	東京理科大学	川崎　常臣
銅 (III) 錯体の配位子場逆転に誘起される光化学・酸化還元挙動の解明	山陽小野田市立山口東京理科大学	竹山　知志
機械学習を用いた低熱伝導率と高強度を同時に実現するホイスラー化合物の探索	名古屋工業大学	宮崎　秀俊
RCCS システムにおけるバイオインフォマティクス解析環境の構築	基礎生物学研究所	内山　郁夫
ラジカル反応およびイオン反応を用いた反応開発と材料科学への展開	山口大学	川本　拓治
金属表面吸着分子の振動スペクトル計算	分子科学研究所	櫻井　敦教
高濃度電解質溶液の分子動力学シミュレーション	岐阜大学	寺尾　貴道
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
高反応活性な遷移金属錯体及び典型元素化合物の構造と反応に関する理論計算	東京工業大学	石田　　豊
光と酸を用いた協働的結合開裂反応の反応機構解析	東京大学大学	正井　　宏
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
機械学習を用いた脳機能画像解析	生理学研究所	郷田　直一
ビスセミキノンコバルト錯体における縮退電子配置と擬縮退分子振動の結合状態	岡山理科大学	山本　　薫
生体高分子中の結合分子および残基間相互作用の量子化学的解析	産業技術総合研究所	山崎　和彦
高還元力を有する新規光酸化還元触媒の創製	分子科学研究所	奥村慎太郎
量子化学計算と超高速時間分解分光による機能性分子の光物性解析	九州大学	小川　知弘
イミノエステルを用いる不斉 1,3- 双極子環化付加反応における，2,5-trans ジアステレオ選択性の解明	中央大学	古屋　翔平
分子動力学法ソフトウェアから得られる物理的性質・性能情報の違いについての解析	理化学研究所	小林　千草
ガウシアンによる機能性有機分子の振動解析	兵庫県立大学	相賀　則宏
固定化金属錯体，有機分子および金属ナノ粒子による新奇触媒作用の理論的解明	横浜国立大学	長谷川慎吾
Theoretical Prediction of Time-Resolved Pump–Probe Photoelectron and IR Spectra of Nucleobases in Solution via GPU-Accelerated Non-Adiabatic Molecular Dynamics Simulation	京都大学	Alexander Konstantin Humeniuk
植物ポリフェノールの立体化学および反応機構に関する研究	長崎大学	松尾　洋介
巨大ボリューム電子顕微鏡画像位置合わせ処理	生理学研究所	Nilton Liuji KAMIJI
遷移金属内包シリコンケージ超原子の C_{60} 錯体形成過程の研究	慶應義塾大学	中嶋　　敦
高分解能分子分光実験のための計算化学	京都大学	馬場　正昭
全合成による全立体配置決定を指向した複雑な海洋マクロリド iriomoteolide-1b の構造・配座解析	中央大学	村田　佳亮
分子認識能を有する高輝度円偏光発光分子を利用したバイオセンシング技術の開拓	大阪大学	重光　　孟
真空中でのポリオール水溶液の凍結過程	九州大学	吉岡　拓哉
「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
システイニルプロリルペプチドにおける 2,5 ジケトピペラジンチオエステル形成の反応機構研究	名古屋大学	中津　幸輝
タンパク質の生産性向上とフォールディングを両立させるアミノ酸変異の探索	名古屋大学	中野　秀雄
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
拡張アンサンブル法を用いたタンパク質－リガンド結合の自由エネルギー解析	兵庫県立大学	尾嶋　　拓
アニリン分子の分光特性に対する溶媒効果の研究	九州大学	大橋　和彦
安定的に核酸医薬を内包する高分子ナノキャリアの開発	国立精神神経医療研究センター	水野　隼斗
遷移金属を用いた炭素－水素および炭素－ヘテロ元素結合活性化反応の機構解明	大阪大学	兒玉　拓也

（計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業利用枠）

課　題　名（通年）	提案代表者	
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	東京工業大学	神谷　利夫
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
全原子モデル自由エネルギー計算を用いた液晶性高分子の熱力学的安定性解析	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

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			
				前期	後期	計	登録者数
共同研究	(1) 課題研究		2	1	1	1	12
	(2) 協力研究 *1		47	17	16	33	114
		（マテリアル）*2	40	28	28	56	172
研究会	(3) 分子研研究会		6	6	0	6	398
	(4) 若手研究活動支援		1	0	0	0	0
	(5) 岡崎コンファレンス		0	0	0	0	0
	所長招へい *3		5	35	0	35	35
	UVSOR 研究会 *3		1	0	2	2	167
施設利用	(6) ① UVSOR		209	105	87	192	1,034
		（マテリアル）*2	5	1	2	3	26
	(6) ②機器センター	（マテリアル）*2	136	98	98	196	640
	(6) ③装置開発室		0	0	0	0	0
		（マテリアル）*2	12	5	5	10	60
	(6) ④計算科学研究センター		298	302	0	302	1,329

*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】
化学・工学・環境学を例とした持続可能な社会のための産学官民連携のあり方
2023 年 6 月 14 日（水）～ 15 日（木）　分子科学研究所研究棟 201 号室（ハイブリッド開催）

6 月 14 日（水）

13:00-13:05　開会の挨拶
早稲田大学理工学術院／東京大学大学院工学系研究科　所　千晴

1. サイエンスコミュニケーションと SDGs

13:05-13:35　環境保全に関連する越境的アウトリーチの取り組み：アートと科学の融合「植物の一年時計」ほか
東京大学大学院農学生命科学研究科　安田仁奈

13:35-14:15　知識から行動へ：自然を活用した課題解決の研究と実践
東京大学大学院農学生命科学研究科　吉田丈人

14:15-14:55　フューチャー・デザイン：私たちの存続可能性をめざして
京都先端科学大学国際学術研究院　西條辰義

2. 化学・化学工学における産学官民連携

15:20-15:50　アクションリサーチと社会実装：種子島の事例
東北大学大学院工学研究科　北川尚美

15:50-16:20　市民との対話と若者との協働：全員参加型シンポジウムとボトムアップ研究提案
早稲田大学理工学術院　野田優・慶應義塾大学理工学部　藤岡沙都子

16:20-17:00　Efficiency も Sufficiency も
東京大学先端科学技術研究センター　平尾雅彦

6 月 15 日（木）

3. 持続可能な社会のための化学・化学工学・環境学の方向性

9:00-9:40　持続可能な社会における化学・化学工学のあり方
東北大学材料科学高等研究所 阿尻雅文

9:40-10:20　持続可能な社会への転換をめざした環境学の協働
東洋大学情報連携学部　花木啓祐

10:20-10:55　総合討論「Well-being を念頭においた持続可能な社会のための化学・化学工学のあり方」
モデレータ　慶應義塾大学理工学部　藤岡沙都子

10:55-11:00　閉会の挨拶
東北大学大学院工学研究科　北川尚美

【分子研研究会】
明日の放射光光電子分光研究展開のシーズとニーズ
2023 年 7 月 29 日（土）～ 30 日（日）　岡崎コンファレンスセンター

13:00-13:20　reception

13:20-13:30　opening

13:30-14:45　（Session 1）Deepening of Condensed Matter Physics 物性物理の深化

S. Ideta 出田真一郎［Hiroshima U. 広島大］Invited
ARPES Studies and Its Developments at HiSOR: Towards HiSOR-II Projects

S. Ichinokura 一ノ倉聖［Tokyo Inst. Tech. 東工大］Invited
Intercalation-Driven Superconductivity in Graphene

M. Horio 堀尾眞史［U. Tokyo 東大物性研］Invited
Space-Resolved ARPES on Strongly Correlated Materials

15:05-17:55　（Session 2）PEEM & Momentum Microscopes 光電子運動量顕微鏡の展開

K. Fukumoto 福本恵紀［KEK 高エ研］Invited
Operando Observation of Organic Transistors Using Femtosecond PEEM

M. K. Man［OIST］Invited
Imaging in Real and Momentum Space with Ultrafast XUV Light Source

S. Ito［Marburg Univ.］Invited
Momentum-Space Movies of Electrons at Surfaces and Interfaces

M. Hoesch［DESY PETTRA-III］Invited
Active Sites of Te-Hyperdoped Silicon

T. H. Chuang［TPS］Invited
Transition of Soft X-Ray Photoelectron Microscopy from TLS to TPS

F. Matsui 松井文彦［IMS-UVSOR 分子研］
Multimodal Valence Stereography for Cutting-Edge Spin Materials Science

18:00-21:00　Poster session ポスター・意見交換会

【学協会連携分子研研究会】
森野ディスカッション
2023 年 8 月 31 日（木） 岡崎コンファレンスセンター中会議室（ハイブリッド開催）

1. 2023 年度研究助成金贈呈式

14:10-15:10 石井邦彦（理研）
「二次元蛍光寿命相関分光法の開発」
江波進一（筑波大）
「新規質量分析法を用いた大気マルチフェーズ反応機構の解明」
今田 裕（理研）
「走査プローブ顕微鏡を用いた単一分子フォトニクス」

2. 森野ディスカッション

15:30-17:45 講演 A 北海道大学低温研究所 渡部直樹 教授
「低温氷表面での物理化学過程～宇宙における分子進化の鍵～」
講演 B 東京大学大学院理学系研究科 橘 省吾 教授
「「はやぶさ 2」探査機が持ち帰った小惑星リュウグウの石」
総合討論

【分子研研究会】
金属酸化物：イオン液体インフォマティクスの発展にむけて
2023 年 9 月 13 日（水）～ 14 日（木） 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）

9 月 13 日（水）

13:30-13:45 「はじめに」
北田 敦（東京大）
13:45-14:45 「イオン液体・柔粘性結晶の実測データベースの構築と機械学習を用いた物性予測」
畠山 歓（東工大）
15:00-16:00 「第一原理計算と機械学習を用いた無機材料における原子間相互作用のモデリングとその応用」
世古敦人（京都大）
16:00-17:00 「データ駆動型材料研究の諸問題：統計的機械学習による予測・発見・理解」
吉田 亮（統計数理研）
17:00-17:30 全体討議
18:00-20:00 現地ポスター＆意見交換会
【岡崎コンファレンスセンター 中会議室】

9 月 14 日（木）

09:00-10:00 「凝縮系の電子状態計算を用いたイオン液体の分子モデリングと大規模系への応用展開」
石井良樹（北里大）
10:15-11:15 「濃厚電解液中の Li イオン伝導機構」
篠田 渉（岡山大）
11:15-12:00 全体討議
12:00-12:05 閉会の挨拶
解良 聡（分子研）

【分子研研究会】
UVSOR–SPring8 赤外ビームライン合同ユーザーズミーティング
2023 年 9 月 29 日（金） 分子科学研究所研究棟 201 号室（ハイブリッド開催）

9:30- 9:45 趣旨説明と UVS0R 赤外 BL 紹介
田中清尚（分子研 UVSOR）
9:45-10:00 SPring-8 赤外利用の展望
池本夕佳（JASRI）
10:00-10:20 赤外ナノ・超高速分光の現状と赤外放射光の可能性
西田 純（分子研）
10:20-10:40 皮膚角層赤外吸収特性の解析と製剤開発への応用
小幡誉子（星薬科大学）
10:55-11:15 顕微 FT-IR イメージングによる薬物粉末の異同識別
瀬戸康雄（理化学研究所）
11:15-11:35 Visualization of Glyoxylic Acid in Human Hair by Using BL43IR
宇山允人（株式会社資生堂）

11:35-11:50 The neaSCOPE as a Tool for Near-Field Imaging and Spectroscopy at the Synchrotron
Aina Reich（neaSpec/attocube）

13:00-13:20 放射光赤外顕微鏡を用いた毛髪の分析と製品への応用
伊藤　廉（株式会社ミルボン）

13:20-13:40 マイクロビーム FT-IR を用いたポリ乳酸表面における水分子の吸着の評価
松葉　豪（山形大学）

13:40-14:00 赤外分光法による PEG および PEG 修飾デンドリマーの水和状態の解析
児島千恵（大阪公立大学）

14:00-14:20 赤外波長選択的振動励起による生体関連物質の化学変換
川崎平康（高エネルギー加速器研究機構）

14:55-15:15 フォノンが関わるプロトン移動機構
松井広志（東北大学）

15:15-15:35 BL43IR における赤外磁気光学スペクトル測定：円 2 色性と旋光性
井口　敏（東北大学）

15:35-15:55 SPring-8 BL43IR を用いた高圧での分光実験
岡村英一（徳島大学）

15:55-16:15 UVSOR での先端赤外分光の試みと今後の期待
木村真一（大坂大学）

16:25- UVSOR 見学

【分子研研究会】
溶液の化学現象の軟Ｘ線分光測定のフロンティア
2023 年 10 月 2 日（月）～ 4 日（水） 岡崎コンファレンスセンター

10 月 2 日（月）

13:00 - 13:10 Welcome message
Masanari Nagasaka (Institute for Molecular Science, Japan)

13:10 - 14:50 Session A

13:10 - 13:35 Soft X-Ray Absorption Spectroscopy to Investigate Artificial Biomembranes in Aqueous Solution
Ryugo Tero (Toyohashi University of Technology, Japan)

13:35 - 14:00 Photon-in-Photon-out Spectroscopy and Synchrotron Radiation Project in Shenzhen
Yitao Cui (Institute of Advanced Science Facilities, Shenzen, China)

14:00 - 14:25 XAS Study for Aqueous Cellobiose: Experiment and Theory
Takehiko Sasaki (The University of Tokyo, Japan)

14:25 - 14:50 Measurements with Utilizing Soft X-Ray Pulse at the Photon Factory 2.5 GeV Ring
Jun-ichi Adachi (High Energy Accelerator Research Organization, Japan)

15:05 - 16:00 Session B, Chair: Satoru Suzuki (University of Hyogo, Japan)

15:05 - 15:30 Small Angle X-Ray Scattering Experiments at the 3 GeV Diffraction-Limited Storage Ring at MAX IV Laboratory: Recent Results and New Opportunities
Tomás S. Plivelic (MAX IV Laboratory, Lund University, Sweden)

15:30 - 15:45 (Hot Topic, P09) Study of Chirality Emergence and Structural Change of Organic Molecules by Circularly Polarized Lyman-Alpha (121.6 nm) Irradiation in UVSOR-III
Masahiro Kobayashi (National Institute for Fusion Science, Japan)

15:45 - 16:00 (Hot Topic, P02) Electronic Structure Analysis of Square Planer Ni Complex Bearing Tris(pentafluorophenyl)borane as a Z-Type Ligand
Yuta Uetake (Osaka University, Japan)

16:00 - 18:00 Poster presentations

10 月 3 日（火）

09:00 - 10:40 Session C

09:00 - 09:25 Time Resolved Soft X-Ray Absorption Spectroscopy System for Liquid Sample in Photon Factory
Fumitoshi Kumaki (High Energy Accelerator Research Organization, Japan)

09:25 - 09:50 Very Sharp Diffraction Peak in Liquids and Glasses
Shinji Kohara (National Institute for Materials Science, Japan)

09:50 - 10:15 UVSOR BL4U STXM Beamline: Status and Future Outlook
Tohru Araki (Institute for Molecular Science, Japan)

10:40 - 11:55 Session D

10:40 - 11:05 Structure of Aqueous Ethanol Solution: Soft X-Ray Emission Spectroscopy Measurements and Theoretical Calculations
Osamu Takahashi (Hiroshima University, Japan)

11:05 - 11:30 Acetic Acid in 1-Methylimidazole Observed by Soft X-Ray Emission Spectroscopy
Yuka Horikawa (Yamaguchi University, Japan)

11:30 - 11:55 Mechanistic Investigation of Homogeneous Iron-Catalyzed Organic Reactions Based on Solution-Phase XAS Analysis
Hikaru Takaya (Teikyo Science University & Institute for Molecular Science, Japan)

13:30 - 15:35 Session E

13:30 - 13:55 Operando Soft X-Ray Absorption Spectroscopy for Observing Chemical Processes in Solutions
Masanari Nagasaka (Institute for Molecular Science, Japan)

13:55 - 14:20 Direct Observation of Electrochemically Generated High-Valent Iron-Oxo Species Applicable to CH_4 Oxidation Reaction
Yasuyuki Yamada (Nagoya University, Japan)

14:20 - 14:45 Soft X-Ray Spectroscopy for Semiconductor Photocatalysts
Hiroshi Onishi (Kobe University & Institute for Molecular Science, Japan)

14:45 - 15:10 Transition Metal L-Edge Operando RIXS Studies of Electrode Materials for Li-Ion Batteries
Daisuke Asakura (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Japan)

15:10 - 15:35 Tracking Chemical Dynamics through Soft X-Ray Spectroscopy
Zhong Yin (Tohoku University, Japan)

15:35 - 15:45 Conference Photo

16:10 - 17:30 Session F

16:10 - 16:25 (Hot Topic, P13) Development of Structural Analysis in Solution by Combining Soft X-Ray Absorption and Raman Spectroscopies
Morihisa Saeki (National Institutes for Quantum Science and Technology, Japan)

16:25 - 16:40 (Hot Topic, P12) Observation of Interactions between Functional Polymers and Water Molecules Using Soft X-Ray Emission Spectroscopy under Real Atmospheric Conditions
Naoya Kurahashi (Institute for Molecular Science, Japan)

16:40 - 17:05 (Online) Liquid Jet Photoemission at FlexPES Beamline, MAX IV
Gunnar Öhrwall (MAX IV Laboratory, Lund University, Sweden)

17:05 - 17:30 (Online) Soft X-Ray Operando Characterization of Electrochemical Interfaces by Ambient Pressure Photoelectron Spectroscopy at MAX IV
Andrey Shavorskiy (MAX IV Laboratory, Lund University, Sweden)

18:00 - 20:00 Banquet

10 月 4 日（水）

09:00 - 10:40 Session G

09:00 - 09:25 Geometry Sampling and Modeling Methods to Simulate Transient X-Ray Absorption Spectra of Molecules Dissolved in a Solvent
Shota Tsuru (RIKEN Center for Computational Science, Japan)

09:25 - 09:50 A New Perspective for Understanding the Thermodynamics of Liquids: Mesoscopic Fluctuation
Yukio Kajihara (Hiroshima University, Japan)

09:50 - 10:15 Time-Resolved and Nonlinear Soft X-Ray Absorption, Reflection and Fluorescence Spectroscopy at SACLA BL1 by Using Ultrathin Flat Jets
Hiroshi Iwayama (Institute for Molecular Science, Japan)

10:15 - 10:40 Veritas: A Versatile Beamline for High Resolution Soft X-Ray Resonant Inelastic Scattering at the MAX IV Laboratory
Conny Såthe (MAX IV Laboratory, Lund University, Sweden)

11:05 - 12:20 Session H

11:05 - 11:30 New Resonant Inelastic Soft X-Ray Scattering Facility at NanoTerasu
Jun Miyawaki (National Institutes for Quantum Science and Technology, Japan)

11:30 - 11:55 Photoelectron Spectroscopy of Liquids: Accessing Electronic Energetics and Surface Properties
Stephan Thürmer (Kyoto University, Japan)

11:55 - 12:20 Operando Observation for Water Splitting Electrocatalysts Using Hard/Tender/Soft X-Ray Absorption Spectroscopy
Masaaki Yoshida (Yamaguchi University, Japan)

12:20 - 12:30 Closing remarks

13:00 - 17:00 Optional tour to Okazaki castle and Daijuji temple

【UVSOR 研究会】
放射光の量子性・干渉性に基づく革新的計測手法の探索
2023 年 11 月 17 日（金）～ 18 日（土） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

11 月 17 日（金）

＜趣旨説明＞

14:00 - 14:30 加藤政博（広島大／分子研）

＜セッション 1　超高速・超短パルス＞

14:30 - 15:00 位相制御 2 色レーザーパルスを用いた分子のイオン化・解離過程の制御
遠藤友随（QST）

15:00 - 15:30 高次高調波を用いた真空紫外から軟Ｘ線領域の超高速分光
水野智也（東大物性研）

15:30 - 16:00 単一サイクル自由電子レーザー基本原理の実証
田中隆次（理研）

＜セッション 2　量子計測・時間構造化光＞

16:15 - 16:45　量子測定の新展開―定量的な量子測定の可能性―
飯沼昌隆（広島大）

16:45 - 17:15　光周波数コムの基礎と標準や分光への応用
和田雅人（産総研）

17:15 - 17:45　タンデムアンジュレータによる極紫外ダブルパルスの発生とその利用
金安達夫（佐賀 LS）

17:45 - 18:15　SPIDER 法による放射光電場波形計測
藤　貴夫（豊田工大）

18:45 -　交流会 @UVSOR 棟 3 階セミナー室

11 月 18 日（土）

＜セッション 3　量子計測・超高速分光＞

9:00 - 9:30　光コムの使い方
安井武史（徳島大学）

9:30 - 10:00　数サイクルパルスを用いた複雑分子系の極限時間分解分光
倉持　光（分子研）

10:00 - 10:30　static な内殻励起分光から探る高速電子緩和
和田真一（広島大）

＜セッション 4　顕微・イメージング＞

10:45 - 11:15　赤外近接場分光によるキャリア・励起子の局所ダイナミクスの解明
西田　純（分子研）

11:15 - 11:45　光干渉断層計測（光コヒーレンストモグラフィー）OCT
西澤典彦（名古屋大）

11:45 - 12:15　X 線用中空ファイバー光学系の開発と放射光実験への応用の展望
田中義人（兵庫県立大）

＜セッション 5　偏光・空間構造光＞

13:15 - 13:45　軟 X 線励起による STED とその顕微応用
江島丈雄（東北大）

13:45 - 14:15　高強度レーザーによるボルテックス電子ビームの生成とその応用
森下　亨（電通大）

14:15 - 14:45　高速離散円偏光変調を用いた局所分光イメージング分析の展望
成島哲也（文科省）

14:45 - 15:15　分割型アンジュレータによる偏光制御と軟 X 線分光
大坪嘉之（QST）

＜まとめと展望＞

15:15 - 15:30　加藤政博（広島大／分子研）

＜施設見学＞

15:45 -　UVSOR など

【UVSOR 研究会】
UVSOR シンポジウム 2023・第 6 回次期施設建設検討会
2023 年 12 月 2 日（土）～ 3 日（日）　岡崎コンファレンスセンター（ハイブリッド開催）

12 月 2 日（土）

開式の挨拶　09:00 – 09:05
岩山洋士　分子科学研究所

Session 1　09:05 – 11:35

09:05 - 09:15　2024 年度施設運転方針
解良 聡　分子科学研究所

09:15 - 09:35　単一電子によるタンデムアンジュレータ光の観測
浅井佑哉　広島大学

09:35 - 10:05　【招待講演】微小ビームを活用した線形・非線形 X 線分光
堀尾眞史　東京大学

10:25 - 10:55　【招待講演】Exploring Nano Properties in Deep-Sea Hydrothermal Vents: Clues to Life's Origins
Hye-Eun Lee　理化学研究所

10:55 - 11:15　高分解能 ARPES による不足ドープ三層系銅酸化物高温超伝導体 Bi222 のノード金属の観測
出田真一郎　広島大学

11:15 - 11:35　二本のアンジュレータ光源を駆使した光電子運動量顕微鏡
松井文彦　分子科学研究所

ポスターショートプレゼンテーション　11:35 – 12:10

特別企画講演「バイオ系における光科学の展開」　13:00 – 18:10

13:00 - 13:05　趣旨説明
解良 聡　分子科学研究所

13:05 - 13:20　軟Ｘ線バイオイメージング：現状と将来展望
荒木 暢　分子科学研究所

13:20 - 13:50　光融合科学から創生する「命をつなぐ早期診断・予防技術」研究イニシアティブ
三沢和彦　東京農工大学

13:50 - 14:20　レーザー光ビームの波面制御による多光子顕微鏡の高度化
根本知己　生理学研究所

14:20 - 14:50　基礎生物学研究所超階層生物学センターにおける光を使った共同利用
亀井保博　基礎生物学研究所

14:50 - 15:20　トランススケールスコープが拓く生命科学研究の新たな潮流
永井健治　大阪大学

15:35 - 16:05　先端軟Ｘ線光源を活用した細胞イメージング技術の開発とその応用に向けた取り組み
木村隆志　東京大学物性研究所

16:05 - 16:20　密着Ｘ線顕微鏡によるバイオイメージング
岩山洋士　分子科学研究所

16:20 - 16:35　軟Ｘ線吸収分光法によるバイオ研究の現状と展望
長坂将成　分子科学研究所

16:35 - 17:05　真空紫外放射光によるキラル分光と生体分子構造研究
松尾光一　広島大学

17:05 - 17:35　材料表面に機能を付与する界面水を探る
原田慈久　東京大学

17:40 - 18:10　パネル討論
（司会）荒木 暢　分子科学研究所

ポスターセッション　18:20 –

意見交換会　18:20 – 20:00

12 月 3 日（日）

Session 2　09:00 – 10:50

09:00 - 09:30　【招待講演】時間分解Ｘ線分光学的手法による光化学反応のダイナミクス研究
野澤俊介　高エネルギー加速器研究機構

09:30 - 09:50　STXM によるアクティブトレッドゴムの機能可視化
金子房恵　住友ゴム工業株式会社

10:10 - 10:30　酸化セリウムのガンマ線誘起陽電子消滅寿命に及ぼす粒子径の影響
道志 智　大阪産業技術研究所

10:30 - 10:50　有機－無機ハイブリッド界面磁気結合に及ぼす分子間相互作用の影響の評価
小野広喜　名古屋大学

利用者懇談会　10:50 – 12:00

閉会　12:00

ポスターセッション（* は学生発表）

P-01　全 炳俊　京都大学
Generation of Flat-Laser Compton Scattering Gamma-Ray Beam for Multi-Isotope Imaging in UVSOR-III

P-02　Elham Salehi IMS
Q-Scan Measurement for the UVSOR Booster Ring

P-03　金安達夫　九州シンクロトロン光研究センター
極端紫外ダブルパルスによる光電子波束の干渉

P-04*　西原快人　大阪大学
時間・スピン分解電子散乱法の開発

P-05* 伊吹 駿　大阪公立大学
Ag^+ イオンを含む三元化合物結晶 $CsAg_2I_3$ の光学特性の研究

P-06* 堀 健太　山口大学
炭酸緩衝溶液中で機能する Ni・Fe 水分解触媒のオペランド XAFS 測定

P-07* 三田愛也　名古屋大学
層状 MAX 相化合物 Zr_2SnC の角度分解光電子分光

P-08* 西野 史　分子科学研究所
WS_2 単層膜上のキラル分子薄膜の角度分解光電子分光

P-09* 石田 洸　大阪大学
赤外・ARPES 測定用の一軸圧力セルの試作

P-10 前島尚行　分子科学研究所
Au(111) 上の 2 次元金属－リンネットワークの電子状態解析

P-11* 山内 要　東京理科大学
ジナフトチエノチオフェン単結晶の異方的な振動状態の探索

P-12* 隅 琢磨　山形大学
GiPALS 実験によって解き明かす Mg_2Sn 結晶における不純物添加効果

P-13* 菅原知佳　広島大学
アセトン水溶液の軟 X 線吸収スペクトルから水和水を同定する新しいアイデア

P-14* 小山正太郎　名古屋大学
リチウム固体電解質 $Li_{3x}La_{2/3-x}TiO_3$ 単結晶の角度分解光電子分光

P-15* 河野健人　名古屋大学
層状 MAB 相化合物 MoAlB の角度分解光電子分光

P-16 大門 寛　分子科学研究所
電子線励起の原子分解能ホログラフィー

P-17 川﨑平康　高エネルギー加速器研究機構
難分解性生体材料の放射光顕微赤外分光解析

P-18* 陳 奕同　大阪大学
ARPES によるエピタキシャル YbSb(001) 薄膜表面の電子状態

P-19 矢木真穂　名古屋市立大学
乾眠するクマムシの微視的解剖学に向けて

P-20 長谷川友里　立命館大学
弱い相互作用が pentacene/graphite 界面の電子状態に及ぼす影響

P-21 福谷圭祐　分子科学研究所
有機単結晶ルブレンの温度依存電子構造観測

P-22 平 義隆　分子科学研究所
UVSOR-III BL1U におけるガンマ線誘起陽電子消滅分光法の開発

P-23 菅 滋正　大阪大学
Extensive Potential of SX-RIXS and Spin-Momentum Resolved Photoelectron Microscopy

P-24* 杉原弘基　大阪大学
$YbCu_2$/Cu(111) 単原子層合金における重い電子状態

P-25 杉本泰伸　分子科学研究所
ヘムタンパク質溶液の軟 X 線吸収分光

P-26 岩山洋士　分子科学研究所
共鳴軟 X 線散乱法の開発

P-27* 大西祐輝　広島大学大学院
角度分解光電子分光および逆光電子分光により検証する銅酸化物高温超伝導体の量子電荷揺らぎによる電子自己エネルギーへの影響

P-28* 宮井雄大　広島大学
超過剰ドープ Bi2201 の高分解能角度分解光電子分光：電子状態の対称性の評価

P-29* 坪田悠希　広島大学
角度分解光電子分光による銅酸化物高温超伝導体 $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ の電子相図の再検討

P-30 萩原健太　分子科学研究所
直入射光電子運動量顕微鏡による Au(111) の軌道電子構造解析

P-31 下ヶ橋龍之介　分子科学研究所
温度変化に伴う C_{80} フラーレン内単分子磁石の配向推定

3-2　国際交流と国際共同研究

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

そこで，2012 年度に国際共同の在り方を大きく見直し，2013 年から外国人研究者に関わる諸手続や渉外事務を担当する専門員（現在は URA）を雇用し，国際的に分子科学研究所の存在感を示せるようなシステム作りを始めている。現在，以下のような財源を利用して国際共同を活性化しているが，それぞれの財源の制約に合わせた国際共同研究事業を個々に行うのではなく，分子科学研究所として自由度の高い国際共同研究体制をアジアと欧米を区別することなくグローバルに構築しながら各種財源を混合して実施するように工夫している。

3-2-1　外国人客員部門等及び国際交流

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

表 1　国際交流協定締結一覧

相手方機関名	国名	協定書等名	主な内容	締結年月日	有効期限
フランス国立パリ高等化学学校	フランス	自然科学研究機構分子科学研究所とフランス国立パリ高等化学学校との分子科学分野における共同研究に関する覚書	情報交流，共同研究，研究交流，会議，シンポジウム，セミナーへの研究者派遣	2019.10.23	2024.10.22
ベルリン自由大学	ドイツ	自然科学研究機構分子科学研究所とベルリン自由大学との分子科学分野における日独共同研究プロジェクトに関する協定	放射光施設における分子科学分野の学術推進と共同研究の実施	2022. 6.21	2025. 6.20
ペーター・グリュンベルグ研究所	ドイツ	ユーリヒ総合研究機構ペーター・グリュンベルグ研究所と自然科学研究機構分子科学研究所との間の分子・材料科学における共同研究プロジェクトに関する覚書	放射光施設における分子科学分野の学術推進と共同研究の実施	2023. 8.22	2028. 8.21
マックス - プランク協会フリッツ - ハーバー研究所（物理化学領域）	ドイツ	分子科学研究所とマックス - プランク協会フリッツ - ハーバー研究所（物理化学領域）との協定	学術交流及び共同研究等の実施	2021. 4. 1	2026. 3.31
オウル大学	フィンランド	自然科学研究機構分子科学研究所とオウル大学との学術連携に関する覚書	分子科学及び物質物理学の学術連携及び共同研究等の実施	2021. 5.10	2024. 5. 9
廈門大学固体表面物理化学国家重点実験室	中国	分子科学研究所と固体表面物理化学国家重点実験室との協定	分子科学の学術推進と共同研究の実施	2019.12.23	2024.12.22
成均館大学	韓国	自然科学研究機構分子科学研究所と成均館大学化学科との分子科学分野における共同研究に関する覚書	分子科学分野における学術交流及び共同研究等の実施	2022. 3.23	2026. 3.22

韓国化学会物理化学ディビジョン	韓国	自然科学研究機構分子科学研究所と韓国化学会物理化学ディビジョンとの日韓分子科学合同シンポジウムに関する覚書	日韓の分子科学分野の先導的研究者が集まるシンポジウムを定期的に開催し，両国の分子科学の発展に資する	2022. 9.28	2026. 9.27
中央研究院原子與分子科学研究所	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）	2023. 1.12	2026. 1.11
国立陽明交通大学	台湾	自然科学研究機構分子科学研究所と国立交通大学理学部との学術連携に関する覚書	学術交流及び共同研究等の実施	2023. 6. 1	2028. 5.31
タイ国立ナノテクノロジー研究センター	タイ	自然科学研究機構分子科学研究所とタイ国立科学技術開発庁ナノテクノロジー研究センターとの分子科学分野における共同研究に関する覚書	分子科学分野における学術交流及び共同研究等の実施	2022.10.30	2027.10.29
インド工科大学カンプール校	インド	自然科学研究機構分子科学研究所とインド工科大学カンプール校との分子科学分野における共同研究に関する覚書	学術交流及び共同研究等の実施	2020. 4. 1	2024. 3.31
中国国家留学基金管理委員会	中国	分子科学研究所と中国国家留学基金管理委員会との協定	分子研と中国の大学／研究機関間の研究協力の構築	2023. 1. 4	2028. 1. 3

総合研究大学院大学提携校

相手方機関名	国名	協定書等名	主な内容	締結年月日	有効期限
チュラロンコーン大学理学部	タイ	・Memorandum on Student Exchange between Faculty of Science, Chulalongkorn University and School of Physical Sciences, the Graduate University for Advanced Studies ・Agreement on Academic Exchange between Faculty of Science, Chulalongkorn University and School of Physical Sciences, the Graduate University for Advanced Studies	学生交流	2010. 4. 1	2027.10.24
カセサート大学理学部	タイ	・Memorandum on Student Exchange between School of Physical Sciences, the Graduate University for Advanced Studies, Sokendai and Faculty of Science, Kasetsart University ・Agreement on Academic Exchange between School of Physical Sciences, the Graduate University for Advanced Studies, Sokendai and Faculty of Science, Kasetsart University	学生交流	2011. 3.29	2026. 3.28
マラヤ大学理学部	マレーシア	・Memorandum of Understanding between Sokendai (the Graduate University for Advanced Studies), Japan and University of Malaya, Malaysia ・Student Exchange Programme Agreement between Sokendai (the Graduate University for Advanced Studies), Japan and University of Malaya, Malaysia	学生交流	2014. 3.24	2025. 3.17
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	2010. 7.17	2028. 7.16

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	計
外国人研究職員（客員）		1	1	2
日本学術振興会外国人招へい研究者		2	0	2
日本学術振興会外国人特別研究員		1	1	2
国際協力研究員	長期	18	28	46
	短期	24	37	61
研究会参加者（オンライン参加者含）		12	31	43
招へい研究員等		17	38	55
合　計		75	136	211

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	計
フランス	19	21	40
ドイツ	6	10	16
イギリス	3	2	5
スウェーデン	7	7	14
フィンランド	2	2	4
スイス	3	1	4
アメリカ	9	6	15
中国	2	9	11
台湾	8	22	30
タイ	3	23	26
インド	6	4	10
その他 *	3	7	10
合　計	71	114	185

* その他に含まれる国は，ルーマニア，カナダ，韓国，マレーシア

表 4　海外からの研究者（2023 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。しかしながら 2020 年以降は世界的コロナ禍のため岡崎コンファレンスとしての国際研究会の提案・採択が無く，本コンファレンスは 2019 年の第 80 回を最後に開催されていない。一方で，2020–2021 年度には岡崎コンファレンスの枠組みとは別に分子研 PI が主導的に関与する web を利用した幾つかの国際研究会や産学連携研究集会が開催されており，分子研研究会の新たな可能性を切り拓きつつある。2022 年以降はいわゆる with-/after-corona の世界において国際研究集会のあり方も良くも悪くも変わらざるを得ないと考えられ，分子研共同利用においても web 会議の環境整備・開催支援に注力しつつある。今後は研究会開催形式の変化にも柔軟に対応し with-/after-corona における「岡崎コンファレンス」を始めとする分子研研究会の有効な実施方法を試行しつつ新たな活性化を目指したい。

3-2-3　日韓共同研究

分子科学研究所と韓国科学技術院（KAIST，Korea Advanced Institute of Science and Technology）の間で，1984 年に分子科学分野での共同研究プロジェクトの覚書が交わされ，日韓合同シンポジウムや韓国研究者の分子科学研究所への招へいと研究交流が行われてきた。またこの覚書は 2004 年から 4 年ごとに更新を行っている。なお，韓国側の組織体制の都合上，この覚書の中の日韓合同シンポジウムに関しては，2006 年に分子科学研究所と韓国化学会物理化学ディビジョン（Physical Chemistry Division, The Korean Chemical Society）との間のものに変更して更新されている。

日韓合同シンポジウムは第 1 回を 1984 年 5 月に分子科学研究所で開催して以来，2 年ごとに日韓両国間で交互に実施している。これまでの開催履歴は一覧表のとおりである。第 11 回シンポジウム「分子科学の最前線」（分子科学研究所，2005 年 3 月）は，文部科学省の「日韓友情年 2005（進もう未来へ，一緒に世界へ）」記念事業としても認定された。第 16 回シンポジウムは，当初 2015 年 7 月に釜山にて開催予定であったが，時に流行した MERS（中東呼吸器症候群）の懸念により開催が直前に断念され，運営スタッフの交代とともに開催延期となり 2017 年 7 月に釜山にて IBS（Institute for Basic Science）特別セッションなどを含めた通例より大規模な会議が開催された。第 17 回シンポジウム「Advances in Materials and Molecular Sciences」は，2019 年 7 月に名古屋にて，新学術領域研究「光合成分子機構の学理解明と時空間制御による革新的光－物質変換系の創製」との共催で実施された。日本側 11 件，韓国側 12 件の

講演と 19 件のポスターセッションがあった。2020 年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開催を数年間延期せざるを得なくなったが，次回の第 18 回を 2024 年韓国・釜山において開催する運びとなった。今後も日韓両国の研究者による活発な研究・人材交流が進むことが期待される。

開催一覧

回	開催年月	主テーマ	開催場所
1	1984 年 5 月	理論化学	分子科学研究所
2	1986 年 5 月	NA	ソウル（韓国）
3	1988 年 6 月	化学反応	分子科学研究所
4	1991 年 3 月	凝縮系の分子科学	ソウル（韓国）
5	1993 年 1 月	分子及び分子集合体の動的過程	分子科学研究所
6	1995 年 2 月	Molecular Science on Solid and Solid Surface	テジョン（韓国）
7	1997 年 1 月	Molecular Spectroscopy of Clusters and Related Compounds	分子科学研究所
8	1999 年 1 月	Molecular Spectroscopy and Theoretical Chemistry	テジョン（韓国）
9	2001 年 1 月	気相，凝縮相および生体系の光化学過程：実験と理論の協力的展開	分子科学研究所
10	2003 年 1 月	理論化学と計算化学：分子の構造，性質，設計	浦項工科大学（韓国）
11	2005 年 3 月	分子科学の最前線	分子科学研究所
12	2007 年 7 月	光分子科学の最前線	済州島（韓国）
13	2009 年 7 月	物質分子科学・生命分子科学における化学ダイナミクス	淡路島
14	2011 年 7 月	New Visions for Spectroscopy & Computation: Temporal and Spatial Adventures of Molecular Science	釜山（韓国）
15	2013 年 7 月	Herarchical Structure from Quantum to Functions of Biological System	神戸
16	2017 年 7 月	Frontiers in Molecular Science: Structure, Dynamics, and Function of Molecules and Complexes	釜山（韓国）
17	2019 年 7 月	Advances in Materials and Molecular Sciences	名古屋

3-2-4　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「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（2023）」が採択。

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。

2023 年度は，若手研究者 3 名を国際学会へ派遣，アジアを相手とする IMS-IIPA（Institute for Molecular Science International Internship Program in Asia）事業や共同研究を支援。

(2) 自然科学研究機構「ネットワーク型研究加速事業」

自然科学分野において，国内外の大学や研究機関との幅広い連携による共同研究を推進し，異分野連携による新たな学問分野の開拓や，自然現象シミュレーションや新技術の開発を生かした創造的研究活動を推進する，国際的にも評価される機関間連携ネットワークを構築し，分野融合型や国際的共同利用・共同研究拠点を形成することを目的とする（5-6参照）。

【分野融合ネットワーク型研究加速】

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

分子科学研究所として「対称性の破れに基づく分子科学の深化（2023）」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) 総合研究大学院大学

【I. 新入生確保のための広報的事業】

2023 年度は，アジアを相手とする IMS-IIPA 事業の支援として，タイ，台湾，マレーシアからインターンシップ生 5 名を招へい。また，タイのチュラロンコン大学，台湾の国立陽明交通大学，マレーシアのマラヤ大学からの総研大アジア冬の学校参加者 4 名の支援を行った。

(4) 分子科学研究所経常経費

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

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・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 件であった。

3-3　大学院教育

3-3-1　特別共同利用研究員

分子科学研究所は，分子科学に関する研究の中核として，共同利用に供するとともに，研究者の養成についても各大学の要請に応じて，大学院における教育に協力し，学生の研究指導を行っている。また，特別共同利用研究員の受入状況は以下の表で示すとおりであり，研究所のもつ独自の大学院制度（総合研究大学院大学）と調和のとれたものとなっている。

特別共同利用研究員（1991 年度までは受託大学院生，1992 年度から 1996 年度までは特別研究学生）受入状況

（2024 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	2022 ～ 2023 計
東北大学	6				
山形大学	1				
茨城大学	2				
筑波大学	1				
千葉大学	1	1			
東京大学	5	21			
東京工業大学	5	3			
横浜国立大学	2				
信州大学	1	1		1	1
静岡大学	4				
名古屋大学	59	60	10	7	17
名古屋工業大学	7	1	1		1
京都大学	2	5			
大阪大学	6	1		1	1
広島大学	0	1			
香川大学	0	1			
九州大学	3				
北陸先端科学技術大学院大学	1				
奈良先端科学技術大学院大学	0	1			
総合研究大学院大学	0	1			
名古屋市立大学	14	24	5	2	7
立教大学	2				
中央大学	1				
早稲田大学	1			2	2
中部大学		2			
海外機関	28	9			
計	151	132	16	13	29

第 1 期（2009 年度）以前の受入があった大学を以下に示す。
豊橋技術科学大学（40 名）。首都大学東京（20 名）。岡山大学（16 名）。佐賀大学（13 名）。北海道大学（12 名）。金沢大学（11 名）。福井大学（10 名）。愛媛大学，慶應義塾大学，東京理科大学（9 名）。三重大学（7 名）。お茶の水女子大学，新潟大学，京都工芸繊維大学，神戸大学，熊本大学，宮崎大学（6 名）。宇都宮大学，奈良女子大学，大阪市立大学，名城大学（4 名）。東海大学，東邦大学（3 名）。室蘭工業大学，埼玉大学，岐阜大学，高知大学，長崎大学，大阪府立大学，北里大学（2 名）。群馬大学，愛知教育大学，奈良教育大学，島根大学，山口大学，琉球大学，姫路工業大学，学習院大学，上智大学，星薬科大学，明治大学，岡山理科大学（1 名）。

3-3-2　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　　（2023 年 5 月 1 日現在）

		分子科学コース
担当教員	教　授	15
	准教授	10
	助　教	21
	計	46

在籍学生数　単位：人　　（2023 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
	2023	−	−	−	−	3	2
	2022	2	4	3	1	−	−
	2021	1	1	0	1	−	−
	2020	0	2(2)	1(1)	1(1)	−	−
	2019	1(1)	0	2	1(1)	−	−
	2018	0	0	0	1(1)	−	−
	計	4(1)	7(2)	6(1)	5(3)	3	2

（ ）は留学生数で内数。
ドイツ 1 名，中国 3 名，タイ 1 名，インド 2 名，二専攻・コース合計で 7 名。

入学と学位取得の状況　単位：人　　（2024 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	2022 〜 2023 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	3
		博士後期	−	−	−	2	2
	計		63	70	10	5	15
学位取得者数	構造分子科学専攻	課程博士	20	22	6	4	10
		論文博士	0	0	0	0	0
	機能分子科学専攻	課程博士	19	16	3	3	6
		論文博士	3	1	0	0	0
	分子科学コース	課程博士	−	−	−	0	0
		論文博士	−	−	−	1	1
	計		42	39	9	8	17

外国人留学生数（国別入学者数） 単位：人 （2024 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	2022 ～ 2023 計
フランス		0, 1			
ドイツ		1, 0			
カナダ		1, 0			
エルサルバドル		0, 1			
中　国	14, 5	0, 5			
韓　国		0, 1			
タイ	2, 3	1, 3			
インド	0, 2	0, 3			
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			
合計	17, 13	4, 15	0, 0	0	0, 0

構造分子科学専攻 (A) と機能分子科学専攻 (B) の入学者数を A, B で表す。
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 （2024 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 ～ 2022	2010 ～ 2015	2016 ～ 2021	2022 ～ 2022	2023
北海道大学		3(3)					
東北大学		1		1(1)		1	1(1)
山形大学				1			
筑波大学						1(1)	
千葉大学	1(1)	1	1				
東京大学							1(1)
東京農工大学		1(1)					
東京工業大学	3(3)				1(1)		
新潟大学					1(1)		
長岡技術科学大学		1(1)					
金沢大学				1			
山梨大学			1(1)				
信州大学		1					
岐阜大学			1(1)	1	1(1)		
名古屋大学	3(3)	6(5)	1	2	4(3)		
愛知教育大学		1(1)					
名古屋工業大学					2(2)		
豊橋技術科学大学				1(1)			
京都大学	3	2(1)		1	2(1)	1(1)	1

大阪大学	1(1)						
神戸大学				1(1)			
鳥取大学				1			
岡山大学	1				1		
広島大学		1				1(1)	
徳島大学					1(1)		
九州大学	1(1)				1		
熊本大学		1(1)					
群馬工業高等専門学校	1(1)						
奈良工業高等専門学校				1(1)	1(1)		
宇部工業高等専門学校					1(1)		
北九州工業高等専門学校		1(1)					
名古屋市立大学				1	3(3)		
大阪府立大学		1					
兵庫県立大学		1(1)					
いわき明星大学				1			
城西大学		1(1)					
北里大学		1(1)					
東海大学				1(1)			
東京電機大学					1(1)		
東京理科大学	1(1)	1		1(1)			1
東邦大学		1(1)					
日本大学		1			1		
法政大学	1(1)						
立教大学	1						
神奈川大学		1(1)					
愛知工業大学					1(1)		
名城大学		1(1)	1		2(1)		
立命館大学				1(1)	1(1)		1(1)
関西大学					1(1)		
近畿大学			1				
福岡大学	1(1)						
海外機関・その他	17(2)	4(1)		12(3)	11(3)		
合計	35(15)	33(21)	6(2)	28(10)	37(23)	4(3)	5(3)

（ ）は 5 年一貫で内数。

第 1 期（2009 年度）以前の入学者があった大学を以下に示す。

北陸先端科学技術大学院大学，早稲田大学（7 名）。学習院大学，慶應義塾大学（6 名）。お茶の水女子大学（5 名）。愛媛大学（4 名）。電気通信大学，静岡大学，東京都立大学（3 名）。室蘭工業大学，筑波大学，京都工芸繊維大学，山口大学，鹿児島大学，大阪市立大学，姫路工業大学，中央大学，岡山理科大学（2 名）。群馬大学，横浜国立大学，富山大学，福井大学，三重大学，奈良女子大学，佐賀大学，琉球大学，奈良先端科学技術大学院大学，石巻専修大学，青山学院大学，国際基督教大学，明星大学，静岡理工科大学，龍谷大学，甲南大学，放送大学（1 名）。

修了生の進路　単位：人　　（2023 年 12 月現在）

		2010 ～ 2022 年度修了生の修了直後の進路状況			1991 ～ 2022 年度修了生の現在の状況		
専攻		構造分子科学	機能分子科学	計	構造分子科学	機能分子科学	計
大学・公的機関等	教　授	0	0	0	24	19	43
	准教授	1	0	1	14	12	26
	講　師	0	0	0	4	3	7
	助　教	1	1	2	14	9	23
	研究職	29	20	49	−	−	−
	小計	31	21	52	−	−	−
進学				0	−	−	−
民間企業（研究職含む）		5	8	13	−	−	−
その他		10	6	16	−	−	−
合計		46	35	81	−	−	−

修了直後は 1 年以内の就職・進学先等。
各項目には海外の機関・団体等を含む。

3-3-3　オープンキャンパス

2023 年 4 月 22 日（土），zoom を用いたオンライン形式で分子研オープンキャンパスを開催した。COVID-19 の影響で 2020 年度からオンラインで行っており，オンライン化によって入学を検討する参加者の割合が増えたこと，全国どこからでも参加できるメリットが大きいのではないかとの判断から，今年もオンラインとした。本年度は総研大先端学術院の初年度であり出願や大学院入試が早まる可能性があったため，例年より 1 ヶ月半ほど早い 4 月下旬の開催となった。

周知は，分子研 twitter の活用，ポータルサイト（chem-station.com，tayo.jp）への出稿，各教育機関へのポスター送付などを通じて広報活動を 1 ヶ月間行なった。当日は午前 10 時に開始し，所長と大学院委員長による分子研・総研大の説明ののち，研究室紹介を各 5 分でリアルタイムもしくは事前撮影動画を流す形式で行った。今回は新たな試みとして，昼食休憩の 1 時間を使い，参加者が在学生 4 名とラフに話すことのできる座談会を開催した。午後はブレイクアウトルームを使用したラボツアーを行い，3 もしくは 4 研究室並列の 4 回制（1 研究室 40 分）として，最大 4 研究室を回れるようにした。また, 在学生からの「進学先を探す際に, 研究室紹介動画のアーカイブが揃っていると良かった」という意見を踏まえて，5 分紹介動画を 8 研究室分，および総研大の説明動画を YouTube にアップロードした。

事前登録 22 名，実際の参加者 15 名と，例年より少ない人数となった。これは，年度の替わり目のため周知が十分に届かなかったことや，分子研・総研大を進学先候補に考えるタイミングとしては少し早い可能性もあった。開催時期や開催方法について，世の中の流れに合わせた効果的な方法を今後とも探っていく必要がある。

3-3-4　体験入学

本事業は，他大学の学部学生・大学院生に対して，実際の研究室での体験学習を通じて，分子科学研究所（総研大物理科学研究科構造分子科学専攻・機能分子科学専攻）における研究環境や設備，大学院教育，研究者養成，共同利用研究などを周知するとともに，分子研や総研大への理解促進を目的としている。本事業は，総研大本部から「新入

生確保のための広報事業」として例年，特定教育研究経費の予算補助を受けており，総研大物理科学研究科の主催行事として2004年から毎年開催している。本年度も昨年度と同様，新型コロナウイルス感染拡大に伴い，例年8月の第2週に受け入れてきた体験入学を中止し，感染者数が落ち着いている時期に，各研究室個別に見学者や体験入学者を受け入れる対応をとった（受入時期と感染症対策は岡崎三機関の規則に従った。）。選考の結果，本年度は35名の学生（学部学生28名，大学院生7名）を受け入れ，うち2名については2回受け入れた。実施スケジュールは以下のとおりである。

2023年4月22日（土）：分子研オープンキャンパス大学院説明会・体験入学説明会（オンライン開催）

参加者の内訳，受入研究室，受入期間は以下の通りである。

	所属	身分	訪問先	受入期間
1	東京工業大学	学部生	杉本G	4月5日
2	東京工業大学	学部生	杉本G	4月5日
3	東京工業大学	学部生	杉本G	4月5日 3月6日～9日
4	信州大学	大学院生	奥村G	4月17日
5	早稲田大学	学部生	秋山G	6月15日
6	明治大学	学部生	杉本G	6月9日～10日
7	東京理科大学	学部生	椴山G	6月30日
8	名古屋大学	学部生	魚住G	8月1日
9	鳥取大学	大学院生	秋山G	8月1日～3日
10	東京工業大学	大学院生	大森G，倉持G	8月7日～8日
11	北海道大学	学部生	秋山G	8月8日～10日
12	名古屋大学	学部生	大森G	8月27日～29日
13	東京工業大学	学部生	瀬川G	8月31日～9月1日
14	早稲田大学	学部生	岡崎G，奥村G	9月19日～22日
15	広島大学	学部生	大森G	9月27日～29日
16	奈良先端科学技術大学院大学	大学院生	瀬川G	9月29日
17	山形大学	学部生	瀬川G	10月12日～13日
18	名城大学	学部生	瀬川G	10月18日
19	名城大学	学部生	瀬川G	10月18日
20	東京大学	大学院生	大森G	11月2日
21	中央大学	大学院生	瀬川G	12月22日
22	神戸大学	学部生	杉本G	2月1日～2日
23	東京大学	学部生	大森G	2月13日～14日

24	東京大学	学部生	大森 G，杉本 G	2 月 13 日～ 15 日 3 月 27 日～ 30 日
25	九州大学	学部生	石崎 G	2 月 21 日
26	東京理科大学	学部生	瀬川 G	3 月 1 日
27	東京工業大学	学部生	瀬川 G	3 月 1 日
28	近畿大学	学部生	大森 G	3 月 5 日～ 6 日
29	近畿大学	学部生	大森 G	3 月 5 日～ 6 日
30	近畿大学	学部生	大森 G	3 月 5 日～ 6 日
31	東京大学	学部生	大森 G	3 月 5 日～ 6 日
32	中央大学	学部生	大森 G	3 月 5 日～ 6 日
33	東京工業大学	学部生	杉本 G	3 月 6 日～ 9 日
34	筑波大学	学部生	瀬川 G	3 月 13 日
35	早稲田大学	大学院生	杉本 G	3 月 15 日

3-3-5　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 2024 年 1 月 10 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，分子研の奥村准教授と，タイの連携校であるチュラロンコン大学の Kittikhunnatham Preecha 博士，Narupai Benjaporn 博士を招き，生体分子の理論研究と金属有機構造体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。

OKUMURA, Hisashi
Introduction to Biomolecular Dynamics Simulation
KITTIKHUNNATHAM, Preecha
Exploring Metal-Organic Frameworks as Simultaneous Reactive-Gas Deliver System and Catalyst
NARUPAI, Benjaporn
3D Printing of Ionic Liquid Polymer Networks for Stretchable Conductive Sensors

3-4　その他

3-4-1　分子研コロキウム

分子研コロキウムは，所長をはじめ，所内全ての教授，准教授，研究者が集い，各人の専門分野を越えて学問的な刺激を享受することを趣旨とする。本年度で 978 回を数える歴史あるセミナーであり，各々の専門分野で講師を招き開催する部門公開セミナーとは一線を画す。

現行のコロキウムは，各領域からの講師の推薦と，ホストとなる各教員からの講師の推薦に基づき，毎月一回程度の頻度で年間を通し開催している。各領域からの推薦は，近年推進されているコロキウムの改革の一貫であり，講師の選出に各領域の全教員が関わることで所全体としてコロキウムへの関心を高めつつ，分子科学に関連する各研究分野のトップランナーである研究者を招き，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，2023 年度は計 13 回のコロキウムを，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，4 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，2023 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 （オンライン）
966	2023．4.17	Manipulating Matter by Strong Coupling to the Vacuum Field	Prof. Thomas Ebbesen （Université de Strasbourg）	28
967	2023．5.15	Insights into Transmembrane Ion Transport by Ionophores; Selectivity and Mechanisms	Prof. James M. Lisy （University of Illinois Urbana-Champaign）	25
968	2023．6．2	The Water-Graphene Interface: A Quaint Quantum Couple	Prof. Mischa Bonn （Max Planck Institute for Polymer Research）	21
969	2023．7.14 （ハイブリッド）	Buidling Quantum Processors and Quantum Networks Atom-By-Atom	Prof. Hannes Bernien （University of Chicago）	26 (46)
970	2023．8.28	Molecular Simulations in the Era of AI and Exascale Computing	Prof. Gerhard Hummer （Max Planck Institute of Biophysics）	23
971	2023．9.20	What is Life? Can we Measure it?	Prof. R. J. Dwayne Miller （University of Toronto）	15
972	2023．9.21 （ハイブリッド）	Optical Cycling of Arenes for Single-Molecule Quantum State Preparation and Readout	Prof. Wes Campbell （University of California, Los Angeles）	22 (18)
973	2023.11.10	時間分解走査プローブ顕微鏡法とナノ科学 Time-Resolved Scanning Probe Microscopy and Nanoscience	重川　秀実 （筑波大学数理物質系教授）	25
974	2023.12.11	Putting Molecular Clusters to Work in Analytical Chemistry: Quantitative Chiral Analysis Using the Chiral Tag Method	Prof. Brooks H. Pate （University of Virginia）	14
975	2024．1.15	Helical Aromatics in Flatland: Magneto-Chiral Selectivity, Electron Spin-Filtering, Kondo Physics and Molecular Motoring on Surfaces	Prof. Karl-Heinz Ernst （University of Zurich）	18

976	2024．1.23	大気からの直接的 CO_2 回収を実現する分離ナノ膜の創製と分離膜高度化に向けた分子設計 Development of Free-Standing Nanomembranes for Direct CO_2 Capture from the Atmosphere, and Their Molecular Design	藤川　茂紀 （九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所教授）	25
977	2024．2．7 （ハイブリッド）	Shaping the Hamiltonian of Quantum Many-Body Spin Systems	Prof. Matthias Weidemüller （Ruprecht-Karl University Heidelberg）	26 (14)
978	2024．2.27 （ハイブリッド）	Ultracold Molecules for Quantum Science and Particle Physics	Prof. John Doyle （Harvard University）	22 (19)

４．研究支援等

ここに記載しているのは，直接研究活動を行わないが研究を遂行する上でなくてはならない研究支援業務であり，主に技術職員が担当・支援しているものである。特に法人となってからは，全国の分子科学コミュニティの連帯を強めるために研究支援部門を強化してきた。法人化後に新設された部門には，「安全衛生管理室」，「 広報室 」，「史料編纂室」があり，引き続き活発な活動を行っている。また，2013 年度から自然科学研究機構は「研究大学強化促進事業」の支援対象機関となり，分子研もこの事業の一環で「研究力強化戦略室」が設置され，広報室と史料編纂室は研究力強化戦略室に発展的に含まれることになった。2021 年度より，技術課は技術推進部に改組されたが，引き続き技術推進部と戦略室が連携して研究支援業務を進めている。

技術推進部は，研究支援組織の中核になる大きな集団を構成している。分子科学研究所では，法人化後，技術職員を公募で選考採用したり，研究室配属の技術職員を研究施設に配置転換したりすることによって，大型の研究施設を維持管理する部門や共同利用を直接支援する部門を増強した。2007 年度に組織編成を大きく見直したが，新しい研究センターの設置や研究所の構想により即した体制を整えるため，2013 年 7 月に 7 技術班を 6 技術班に再編し一部の人員配置換えも行った。更に，2021 年度より技術推進部に改組し，スタッフ制による所長直属の技術者組織とし，各附属施設をユニット化した上で，マネジメント役のユニット長を配置している。これにより，各個人のもつ高い専門的技術をより効率的に発揮し，研究者が研究に専念できるように技術支援する体制を構築している（「2-8 構成員」を参照）。

安全衛生管理室は，法人化に伴い，研究所の総括的な安全衛生が労働安全衛生法という強制力を持つ法律によって規制されるようになったため，その法律の意図するところを積極的かつ効率的に推進するために設置された。それまでは，設備・節約・安全委員会という意思決定のための委員会が存在していたが，安全衛生の実際の執行は技術課が一部を担当したものの，専門に執行する組織はなかった。現在，安全衛生管理室には，専任の特任研究員と助手，十名弱の併任の職員を配置し，執行組織として多くの施策を実行している。部分的に，2002 年 3 月に廃止した研究施設の「化学試料室」の機能も有している。担当職員は安全衛生を維持するのに必要な資格を全て取得し任務にあたっている。

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

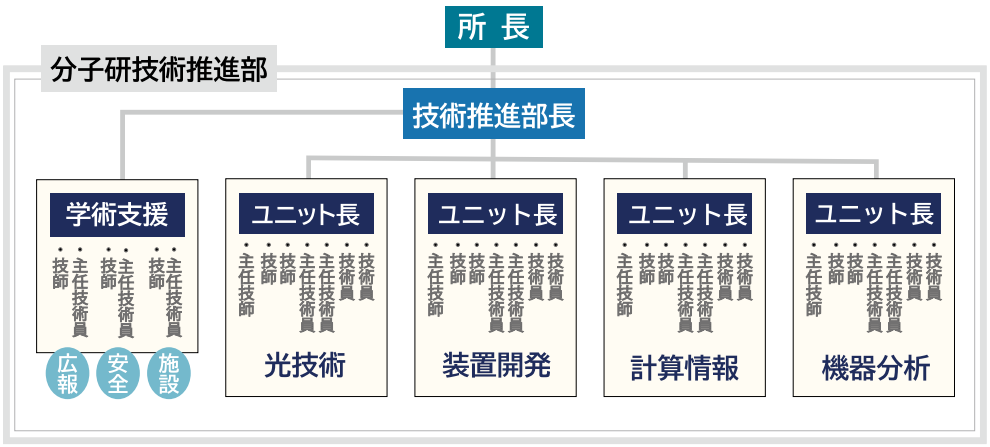
史料編纂室は，法人化後に設置された支援組織としては一番新しい。法人化後まもなく迎えた創立 30 周年記念行事の中で分子研設立の経緯を残すことの重要性が認識された。このため，総研大葉山高等研究センターを中心に発足した「大学共同利用機関の歴史」研究プロジェクトに参加する形で史料編纂室を発足させた。分子研設立の経緯と共に，過去に所員が行ってきた研究，分子科学コミュニティの形成過程などの歴史を整理・記録してきた。広報資料や研究活動等評価資料（ IR 資料）という観点で，研究力強化戦略室の中に位置付けられている。

4-1　技術推進部

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

技術推進部は，以前の技術課と同様に所長直属の組織であり，技術職員を統轄する技術推進部長の下，光技術ユニット，装置開発ユニット，計算情報ユニット，機器分析ユニットの 4 つのユニット，及び学術支援担当職員により構成される。構成員は 2023 年 4 月 1 日現在で 38 名である。技術職員は，主に研究施設に配属され，それぞれの持つ高い専門技術で研究教育職員と協力し，先端的かつ独創的な研究を技術面から支え，大学共同利用機関の使命を果たすために努力している。各施設に配属された技術職員の対応する技術分野は広範囲にわたっている。機械，電気，電子，光学，情報，といった工学知識や各要素技術の技能を基に支援業務として実験機器の開発，システム開発等を行い，物理・化学・生命科学を基に物質の構造解析や化学分析等を支援している。この様に技術職員の持っているスキルを活用し，UVSOR やスパコン，レーザーシステム，X 線回折装置，電子顕微鏡，ESR，SQUID，NMR など大型設備から汎用機器の維持管理，施設の管理･運用も技術職員の役割としている。さらに，科学の知識を基に研究所のアウトリーチ活動も職務として担い，広報に関する業務，出版物の作成も行っている。所内の共通業務としてネットワークの管理･運用，安全衛生管理も技術推進部の業務として行っている。安全衛生管理では，研究所の性質から毒物・劇物・危険物など薬品知識や低温寒剤等高圧ガスの知識，放射線管理，その他技術的な側面から毎週職場巡視を行い，分子研の安全衛生管理に寄与している。

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



4-1-1　技術研究会

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

表 1　技術研究会開催機関（中期計画第 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

4-1-2　技術研修

1995 年度より，施設に配属されている技術職員を対象として，他研究所・大学の技術職員を一定期間，分子研の附属施設に受け入れ技術研修を行っている。分子研のような大学共同利用機関では，研究者同士の交流が日常的に行われているが，技術者同士の交流はほとんどなかった。他機関の技術職員と交流が行われれば，組織の活性化，技術の向上が図れるであろうという目的で始めた。この研修は派遣側，受け入れ側ともに好評だった。そこで，一歩進めて，他研究機関に働きかけ，受け入れ研修体制を作っていただいた。そうした働きかけの結果，1996 年度より国立天文台が実施し，1997 年度には高エネルギー加速器研究機構，1998 年度からは核融合科学研究所が受け入れを開始し現在も続いている。法人化後は，受け入れ側の負担や新しい技術の獲得には大きく寄与していないため，実施件数は少なくなってきた。そこで，2007 年度からセミナー形式で外部より講師を招き，併せて他機関の技術職員も交えて「技術課セミナー」を行ってきた。技術推進部に改組後も，様々な技術分野のトピックを中心に開催する予定である。また，従来の受け入れ研修も小規模ながら続けている。なお，2020 年度は新型コロナウイルス感染症の感染拡大の影響により実施できなかった。

表 2 に分子研での受け入れ状況を示す。

表 2　技術研修受入状況（中期計画第 4 期）

年　度	受　入　人　数（延）
2022	3
2023	5

表 3　2023 年度技術研修受入状況（2023.4.1 〜 2024.3.31）

氏　　名	所　　属	受入期間	備　　考
渡邊　雄亮	名古屋大学	2023.7.26 〜 7.28	電子回路技術研修
後藤伸太郎	名古屋大学	2023.7.26 〜 7.28	電子回路技術研修
柴田晃太朗	東北大学	2024.2.14 〜 2.16	光技術研修
後藤伸太郎	名古屋大学	2024.2.14，2.20	電子回路技術研修
後藤伸太郎	名古屋大学	2024.3.21 〜 3.22	電子回路技術研修

4-1-3　人　事

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

4-1-4　受　賞

高度で専門的な技術支援業務を通じて，分子科学研究の発展や研究成果の創出に顕著な貢献を行った技術職員に対して，その功績を讃えるために，日本化学会を始めとする学協会等が表彰制度を創設している。分子研創設以来の技術職員の受賞は，日本化学会化学技術有功賞 15 件，低温工学協会功労賞 1 件，日本放射光学会功労報賞 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 件である。今年度の受賞は 6 章参照のこと。

4-2　安全衛生管理室

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

また安全衛生管理室では，分子科学研究所全職員に対する安全衛生教育も行っており，そのための資料作成，各種資格取得の促進，専門家の養成などを行っている。雇い入れ時の安全衛生教育は年度初旬に定例として行うほか，講習テキストと講習会ムービーを用意し，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。

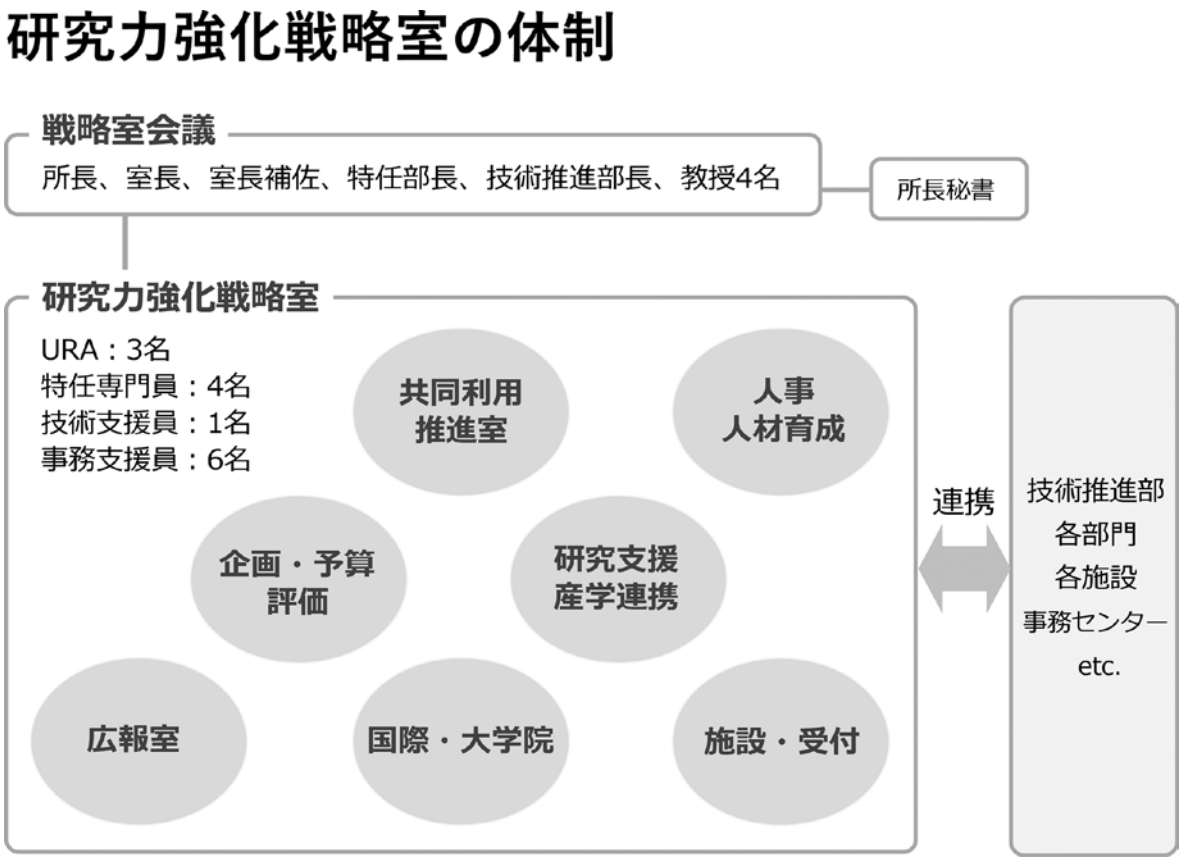
また長期滞在する外国人研究者に対しては，英文の安全衛生講習会テキストならびに英語版講習会ムービーを作成し，これらの教材を用いた安全衛生教育を行っている。安全衛生に必要な情報は，安全衛生管理室の WEB ページ（http://info.ims.ac.jp/safety/）にまとめて掲載しており，必要な規則や書式に即座にアクセス可能である。また，安全衛生管理室員全員のメールアドレスが登録されたメーリングリスト（safety@ims.ac.jp）も設定しており，各種の質問などに機動的に対応できる体制になっている。年に数回，分子研安全衛生委員会（岡崎 3 機関の「安全衛生委員会」に相当）と合同で連絡会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

今年度は，労働安全衛生法の改正に基づく「化学物質の自律的管理を基軸とする規制への改正・移行」に対応するため，作業環境評価について以下の改善を行った。①従来の検査対象である化学物質に加え，試薬管理システムにより「2022 年度に購入されたすべての化学物質において，使用量が特に多い有害性物質」を六品目選別し，それらについても作業環境測定を実施した。②検査対象となった各研究グループは，該当する化学物質のリスクアセスメントをコントロールバンディング法により実施し，結果を安全衛生管理室まで報告することとした。

4-3　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，2023 年度現在で URA 職員 3 名，特任専門員 4 名，事務及び技術支援員 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。



4-4　社会との交流

一般市民の方々に科学の面白さ・意義を伝えるとともに，科学コミュニティの健全な発展を促すような相互交流を醸成するための取り組みは，ますます重要性を増している。分子科学研究所では，このようなアウトリーチ活動の一環として，他機関との連携・共同により国内の広い範囲をカバーする事業，および，岡崎の地域性を重視した事業という２つのタイプを実施している。前者としては，自然科学研究機構シンポジウムならびに大学共同利用機関シンポジウムがあり，後者は一般公開，分子科学フォーラム，岡崎市民大学講座等である。また，全国の中学・高等学校の団体から，個人の申し込みまで，見学者を受け入れている。

4-4-1　一般公開

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

回　数	実施月日	入場者数
第 11 回	2006.10.21	2058 人
第 12 回	2009.10.17	1346 人
第 13 回	2012.10.20	1126 人
第 14 回	2015.10.17	2600 人
第 15 回	2018.10.20	3878 人
第 16 回	2021.10.23	YouTube 再生回数；2618 回 ニコニコ動画来場者数；26,964 人 （10/23 一般公開終了時点）

4-4-2　分子科学フォーラム

当フォーラムは「分子科学の内容を他の分野の方々や一般市民にも知らせ，また，幅広い科学の話を分子研の研究者が聞き自身の研究の展開に資するように」との趣旨のもとに，1996 年より実施されている。豊田理化学研究所と共催となっており，年度毎に年間計画を豊田理化学研究所の理事会に提出している。2008 年度よりは，一般市民の方々に科学の面白さ・楽しさを伝える「市民一般公開講座」として新たに位置づけられ，2009 年度には，一元的で効率的な活動の展開を目指して，広報室を中心とした実施体制の整備を進めた。この際，講演回数をこれまでの年 6 回から 4 回に変更し，密度の高い講座を開講することで，より魅力的な『分子科学フォーラム』の実現を図った。COVID-19 感染拡大後はオンライン開催に切り替えたが, 開催時間, 広報活動をターゲットに合わせ変更した結果, 全国の社会人, 大学生，高校生に参加いただけるようになり，参加人数もリアル開催よりオンライン開催の方が多い結果となった。

本年度の実施状況は以下の通り。（すべてオンライン開催）

回	開催日	テーマ	講演者	参加人数
136	2023. 6. 2	Think Hybrid ～異分野融合で近づく SF の世界～	竹内　昌治 （東京大学大学院教授）	約 250 名 （累計 522 名）
137	2023.10.20	パズルのように分子を作る ～曲がった炭素分子の有機合成～	瀬川　泰知 （分子科学研究所准教授）	約 230 名 （累計 2322 名）
138	2023.12.15	光格子時計が拓く新たな時空間計測	香取　秀俊 （東京大学大学院教授／理化学研究所主任研究員，チームリーダー）	約 170 名 （累計 787 名）

4-4-3　市民向けシンポジウム

(1)　自然科学研究機構シンポジウム

当シンポジウムは 2006 年より年 2 回のペースで実施され，下記のようにこれまでに計 35 回開催されている。

本シンポジウムに対する分子科学研究所の関与は次の通りである。第 1 回において，「21 世紀はイメージング・サイエンスの時代」と銘打ったパネルディスカッション中で，岡本裕巳教授が「ナノの世界まで光で見えてしまう近接場光学」というタイトルで講演を行った。第 2 回目は，講演会全体の企画を分子科学研究所が中心となって行った（詳細は「分子研リポート 2006」を参照）。第 7 回では，加藤晃一教授が自らの体験に基づいて「研究の醍醐味とは何か」を伝える講演を行った。第 11 回では，大峯巖所長（当時）が「水の揺らめきの世界；揺らぎと反応と生命」というタイトルで講演を行った。第 14 回は，再び講演会全体の企画を分子科学研究所が中心となって行った（詳細は「分子研レターズ 68 号」を参照）。第 21 回では，正岡重行准教授（当時）が「人工光合成への挑戦～植物に学ぶ分子デザイン～」というタイトルで講演を行った。2020 年度の第 30 回は分子科学研究所が企画し，機構と名古屋市科学館の主催で「宇宙科学と生命科学の深～いつながり」と題したシンポジウムをオンラインで開催した。2021 年度の第 33 回では，古賀信康准教授が「創って理解する　生命現象をつかさどる分子『タンパク質』」と題したオンライン講演を行った。2023 年度の第 37 回では，藤田 誠卓越教授が「生物構造に見られる幾何学定理：化学の力で『逆手にとる』『破る』」というタイトルで講演を行った。

今年度の実施状況は以下の通り。

回	開催日	テーマ	開催方法
36	2023. 9.24	データ蒐集家と散策する ――ビッグデータと人はどのように寄り添って生きていくか――	多摩六都科学館 （ハイブリッド開催）
37	2024. 2.23	生物界にも分子や数学によって生成される秘密のルールがあるのだろうか!?	国立科学博物館日本館講堂 （ハイブリッド開催）

(2)　大学共同利用機関シンポジウム

本シンポジウムは，自然科学研究機構を含む 4 つの大学共同利用機関法人を構成する 19 の研究機関と宇宙科学研究所が，総合研究大学院大学と合同で開催したものである。各研究機関が「知の拠点群」として果たしている役割と，研究の推進を通じて切り拓かれた科学の広大なフロンティアの現状について，広く一般市民の方に紹介することを目指している。分子科学研究所はブース展示に参加し，先端的研究成果や分子科学に関連する基本事項の解説を行っている。例えば，常

設展示室に設置されている 920MHz NMR の半立体模型（第 2 回），大型スクリーンに投影したスーパーコンピューターによるシミュレーション CG（第 3 回～第 9 回），および各種の大型分子模型（第 4 回～第 10 回），研究者トーク（第 6 回～第 9 回）等を通じて研究活動に関する詳しい説明を行った。第 11 回，第 12 回はオンライン開催となり，分子科学研究所は研究所紹介 CM 動画を配信し，またシンポジウム特設サイト内に分子研紹介ページを掲載した。第 13 回は分子研が主体となり企画･運営を行った。「科学の時代。見えてきた未来」と題し，大学共同利用機関の教員 10 名が講演，パネルディスカッションを行った。ハイブリッド開催だったが，名古屋市科学館に共同主催になっていただき，名古屋市科学館サイエンスホールを講演会場とした。午前・午後とも会場はほぼ満席，視聴者数も過去最高の約 30,000（累計）となり，大変盛況なシンポジウムとなった。第 14 回は秋山修志教授が「概日時計のこれまでとこれから」というタイトルで講演を行った。

実施状況は以下の通り。（中期計画第 4 期）

回	開催日	テーマ	会場／開催方法
13	2022.10.24	科学の時代。見えてきた未来	名古屋市科学館 （ハイブリッド開催）
14	2023.10.22	現代の社会問題に挑む日本の科学	日本科学未来館 （ハイブリッド開催）

4-4-4　見学者受け入れ

自然科学研究機構岡崎 3 機関の見学者の受け入れは，岡崎統合事務センター総務部総務課企画評価係が窓口になって行われており，その中で分子科学研究所の見学分については，研究力強化戦略室が中心となってその対応にあたっている。2010 年 5 月に展示室を開設し，個人の見学受け入れを開始した。年間およそ 300 名が来訪している。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	11	242	愛知県弁護士会，岡崎商工会議所，山梨県立日川高等学校，静岡県立浜松南高等学校，大阪府立富田林高等学校，三重県立伊勢高等学校，中部経済連合会，愛知県立高蔵寺高校，愛知県立春日井高等学校，名古屋市役所経済局，名古屋市立大学	2	244

4-4-5　その他

(1)　岡崎商工会議所（岡崎ものづくり推進協議会）との連携

岡崎商工会議所は，産学官連携活動を通じて地元製造業の活性化と競争力向上を目的に「岡崎ものづくり推進協議会」を設立し，多くの事業を行っている。この協議会と自然科学研究機構岡崎 3 研究所との連携事業の一環で，協議会の会員である市内の中小企業との交流会を 2007 年度に開催し，この交流会によって出来あがった協力体制は現在

も継続している。また岡崎商工会議所主催で隔年開催される「岡崎ものづくりフェア」へ大学･研究機関として展示ブースを設けて参加している。

(2) 岡崎市観光協会との連携

2018 年より岡崎市観光協会と連携を開始し，各種市民向けのイベント等で相互に協力することで，市民への広報活動がより活発に行えるようになっている。

実施日	内容
2018.10.20	一般公開　キッチンカーのご提供
2019. 6.13	岡さんぽ（岡崎市観光協会主催のイベント）への協力
2019.10.11	岡さんぽ（岡崎市観光協会主催のイベント）への協力

4-5　理科教育への協力

分子科学研究所は，愛知県や岡崎市という地域性を重視して，小学校から高等学校までの様々なレベルで理科教育への協力を行ってきている。岡崎市内の高等学校には，文部科学省に応募して採択されたスーパーサイエンスハイスクール（以下 SSH と略す）研究指定校，愛知県教育委員会より指定を受けた愛知スーパーハイスクール研究校や，あいち STEM ハイスクール研究指定校，さらに，科学技術振興機構（JST）のサイエンスパートナーシッププロジェクト（SPP）に応募して採択された SPP 実施校など，理科教育の充実を目指して独自の取り組みを行っているところも多い。分子研は，岡崎の 3 研究所で連携しつつ，もしくは単独で，これらの高校の活動に協力している。一方，小中学校を対象とした事業としては，出前授業，岡崎市のスーパーサイエンススクール推進事業（SSS），職場体験などが挙げられる。また，教員対象の支援も行っている。各事業について，本年度に実施されたものを中心として，以下に記載する。

4-5-1　スーパーサイエンスハイスクール

愛知県立岡崎高等学校が 2002 ～ 2005 年度に SSH 指定校となったことを契機として，分子科学研究所は同校の SSH 事業に協力してきた。2007 年度には，再度，指定を受け，5 年間にわたる第二次 SSH 事業がスタートしている。これまでは，スーパーサイエンス部の支援が主な活動であったが，2011 年度に同校が「コア SSH」としての指定を受けたのに際して，他校も含む理科教員の研修をお願いしたいとの依頼が分子研に寄せられた。これに対応して，2012 年 2 月 4 日には NMR の原理と応用に関する研修会を実施し，県内から 8 名の高校教員が参加して午前・午後を費やして講義ならびに実習を受講した。2013 年 3 月 9 日には，「分子を探る，放射光の科学」として UVSOR において研修会を実施した（5 校 7 名が参加）。2014 年 2 月 10 日には SSH 進路オリエンテーション（2 年生理系対象の講演会）の講師対応も行った。また，魚住グループ，山本グループによる「国際化学オリンピック」に参加された同校生徒さんに対する実験指導・支援（見事，銀メダルを受賞された）も行った。尚，山本グループは海陽中等教育学校の生徒さんの実験指導･支援も行った（見事，金メダルを受賞された）。岡崎高校への支援としてはその他に，イングリッシュコミュニケーション研修に対して当研究所の外国人博士研究員が講師として参加した。岡崎高校は 2018 年度に 4 回目となる SSH 指定を受け，新たに「SSH の日」を設定して生徒の成果発表を行うなど，新規の活動を展開しており，分子科学研究所はこれに協力している。

4-5-2　コスモサイエンスコース

分子科学研究所では，2008 年度に愛知県立岡崎北高等学校が国際的に活躍できる科学技術者の育成を目的に新たに設置した，コスモサイエンスコースへの協力を，岡崎市にある基礎生物学研究所，生理学研究所とともに開始した。一時期中断したが，2015 年より総合的学習の時間（研究者の講話）に講師を派遣している。同校は 2020 年度より 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。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。

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

4-5-3　あいち科学技術教育推進協議会

SSH 研究指定校，愛知スーパーハイスクール研究校，さらに，SPP 実施校である愛知県下の 16 高校が，2009 年度に「あいち科学技術教育推進協議会」を立ち上げた。これは，文部科学省指定 SSH 中核拠点育成プログラムの一貫として，SSH で得た知識や組織力を活用し，全県的な取り組みとして理数教育の推進を目指したものである。当協議会は，毎年「科学三昧 in あいち」というイベントを開催している。当イベントには，県内の多数の高校から総数 300 名以上の参加者が集い，科学や技術についての先進的教育活動の紹介が行われる。第 15 回（2023 年 12 月 27 日）は岡崎コンファレンスセンターでのオンサイト開催となった。分子科学研究所からは無人ブース出展および生徒のポスター発表指導を行った。

今期（中期計画第 4 期）開催された「科学三昧 in あいち」は以下の通りである。

回	開催日	会　場	参加者数
14	2022.12.27	岡崎コンファレンスセンター	533
15	2023.12.27	岡崎コンファレンスセンター	767

4-5-4　国研セミナー

このセミナーは，岡崎 3 機関と岡崎南ロータリークラブとの交流事業の一つとして行われているもので，岡崎市内の小･中学校の理科教員を対象として，岡崎 3 機関の研究教育職員が講師となって 1985（昭和 60）年 12 月から始まり，毎年行われている。

4-5-5　小中学校での出前授業

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

分子科学研究所が今年度担当したものは以下の通りである。

開催日	テーマ	講　師	対象校	聴講生徒数
2023.10.31	おもしろい形の分子を作る	鈴木　敏泰　ﾁｰﾑﾘｰﾀﾞｰ	矢作南小学校	130
2023.12．5	振り子の仕組みと活用例	豊田　朋範　主任技師 菊地　拓郎　技 術 員	小豆坂小学校	89

4-5-6　職場体験学習

岡崎市内及び近隣の中学校及び高等学校の要請により，職職場体験学習として中・高生の受け入れに協力している。2018 年度より，研究グループによる受け入れを開始した。2023 年度は 4 件 5 名を受け入れた。

（2023 年度）

受入中学校	体験受入施設・グループ等名
豊田市立高橋中学校	杉本 G，UVSOR
岡崎市立岩津中学校	椵山 G
豊田市立益富中学校	
豊田市立豊南中学校	機器センター，飯野 G

4-5-7　その他

(1)　岡崎市小中学校理科作品展

岡崎の 3 研究所は，岡崎市小中学校理科作品展に輪番（原則として 3 年に 1 回）でブース出展を行っている。2023 年は岡崎中央総合公園で開催され，無人ブース出展を行った。

(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。2023 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，2023 年 10 月 28 日の生理学研究所一般公開日に表彰状，トロフィー及び記念賞品の贈呈による表彰を行った。

(3)　地域連携「生徒作品表彰」

愛知教育大学附属岡崎中学校による写生会が毎年度，岡崎 3 機関において，「建物の配置や組み合わせの美しい自然科学研究機構を写生する」ことを目的として行われ，同校の生徒に対して岡崎 3 機関と触れる機会を提供している。この写生会は，2004 年度の自然科学研究機構の創設以前より，毎年度受け入れている。この写生会をきっかけに，岡崎 3 機関を地域において身近な存在として感じてもらう機会として，2011 年度から，同校の教育活動の一部である写生会における優秀者を岡崎 3 機関として表彰し，同校における生徒の教育の賛助となるよう，同校の協力の下，賞状等を贈呈している。2023 年度は実施していない。

(4)　イベント出展

下記イベントに出展し，理科教育への協力を行った。

開催日	イベント名	出展タイトル
2023. 8. 3	令和 5 年度こども霞が関見学デー	虹を使って，モノの性質を調べてみよう
2023.11.25	岡崎商工会議所主催 Okazaki Craft Fes	スライムを作ろう！
2024. 3. 9	とよた科学体験館ワークショップ	めざせ科学者！　実験と学会発表を体験しよう

4-6　情報発信

2023 年 4 月～ 2024 年 3 月は，日本語プレスリリース 30 件，英語プレスリリース 18 件，新聞報道 33 件，その他報道 7 件，客員研究部門及び退職・転出後等の成果論文 53 件であった。

研究成果プレスリリース（共同発表を含む）　（2023 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
2023. 4. 3	回転分子モーターの動きをコントロールする「留め金」は モーターの回転方向に依存して外れる ―ATP 合成酵素の制御機構の解明―	Nature Communications	理論･計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	東京大学	2301
2023. 4. 4	尿路結石形成を防ぐ腸内細菌で働く鍵分子・シュウ酸輸送体の立体構造解明	Nature Communications	理論･計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	岡山大学 京都大学 理化学研究所	2302
2023. 4.21	小惑星リュウグウ粒子の微小断層から読み解く天体衝突	Nature Astronomy	極端紫外光研究施設	海洋研究開発機構 国立極地研究所 高輝度光科学研究センター 神奈川大学　他	2303
2023. 6.14	磁場で発光色が変わる特性をジラジカル一分子で実現	Journal of the American Chemical Society	生命･錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門	東北大学 新潟大学	2304*
2023. 7. 4	室温以上で金属化する高伝導オリゴマー型有機伝導体を開発―電子機能性を制御する新コンセプトによる有機電子デバイス開発の技術革新に期待―	Journal of the American Chemical Society	機器センター	東京大学 （株）リガク	2305
2023. 7. 7	進化の過程で失った機能を復活させ，回転型分子モーターの加速に成功～タンパク質複合体の協奏的機能を制御する新手法～	Nature Chemistry	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 / 生命創成探究センター 生命分子創成研究グループ， 生命･錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	高エネルギー加速器研究機構	2306*
2023. 7.12	自然が見出していない未踏のタンパク質トポロジー―新規 αβ 型トポロジーを持つタンパク質分子のデザイン―	Nature Structural and Molecular Biology	生命創成探究センター 生命分子創成研究グループ／ 協奏分子システム研究センター 階層分子システム解析研究部門	理化学研究所 名古屋大学 大阪大学	2307
2023. 7.13	常温常圧での非熱的触媒反応における担持金属助触媒の新たな役割・選択性の起源を解明！	Angewandte Chemie, International Edition	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門		2308*
2023. 7.28	ナノスケールの極微空間における超広帯域な非線形光学応答の増強効果を解明―新奇ナノ非線形分光法の発展に向けて―	The Journal of Pysical Chemistry Letters	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門		2309*
2023. 7.31	回転式ナトリウムイオンポンプの６つの中間構造すべてを立体構築することに成功 ～動力部とポンプ部をつなぐ回転子は不均一な回転挙動を示し，大きなイオン輸送リングをかきまぜるように回転させる～	Communications Biology	生命･錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	生理学研究所 東京大学 千葉大学	2310
2023. 7.31	Selectivity Effect of Molecular Chirality May Have Universal Applications, Researchers Find	Nature Communications	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	2311*
2023. 8. 1	カーボンナノチューブから生じる近赤外発光を，広範囲・高選択的に波長制御する有機化学的方法を開発	Commuinications Chemistry	理論･計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	東京学芸大学 東北大学 長崎大学	2312

2023. 8. 7	アミロイドβの線維形成が神経細胞膜上で加速するしくみ～アルツハイマー病の解明に向けて～	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， 物質分子科学研究領域 分子機能研究部門， 生命創成探究センター 生命分子動態シミュレーション研究グループ／ 理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	名古屋市立大学 筑波大学	2313
2023. 9.21	世界最小電圧で光る青色有機 EL の開発に成功～有機 EL ディスプレイの省エネ化・長寿命化に向けた大きな一歩～	Nature Communications	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門	東京工業大学 大阪大学 富山大学 静岡大学	2314
2023. 9.28	大規模な“量子もつれ”の超高速量子シミュレーションに成功―超高速量子コンピュータの手法を量子シミュレータへ応用―	Physical Review Letters	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門	Universität Heidelberg Shanxi University	2315*
2023.10. 6	微細な光の力で，ナノスケールの左右を観察	Nano Letters	メゾスコピック計測研究センター 繊細計測研究部門		2316*
2023.10.20	室温で作動する H^- 導電性固体電解質の開発―電気陰性度の低いカチオンの導入が電解質作動を可能に―	Advanced Energy Materials	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門	理化学研究所 高エネルギー加速器研究機構 ファインセラミックスセンター	2317
2023.11. 1	光エネルギーで新しい化学修飾核酸を合成―核酸リン原子の第三級アルキル化に成功―	Nature 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 武田薬品工業(株)	2318
2023.11. 8	左手型分子を右手型に変える：変換の速さを 1000 倍変えることに成功！	Science Advances	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	金沢大学	2319
2023.11.20	反強磁性体に隠れた質量ゼロの電子を初めて観測―省エネルギー技術や量子デバイスへの応用を拓く―	Nature Communications	極端紫外光研究施設	東北大学 大阪大学 ケルン大学 高エネルギー加速器研究機構 他	2320
2023.12. 4	量子コンピューター開発への応用などにも期待二次元に閉じ込めた重い電子をはじめて実現―近藤効果と低次元性が絡んだ新たな物性発現へ―	Nature Communications	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門／ 特別研究部門	大阪大学 量子科学技術研究開発機構 高エネルギー加速器研究機構 東北大学	2321
2023.12. 7	分子のねじれの強さを調節して分子運動を制御する―より複雑な動作機構を示す新たな分子機械の設計に期待―	Nature Communications	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	東京大学	2322
2024. 1. 5	複雑な形状を持つタンパク質をゼロから人工設計することに成功	Nature Structural and Molecular Biology	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／ 生命創成探究センター 生命分子創成研究グループ	理化学研究所 大阪大学 千葉大学	2323*
2024. 1.10	赤外光で単一のタンパク質を見る新技術―未踏の超高感度・超解像赤外イメージングへの一歩―	Nano Letters	メゾスコピック計測研究センター 広帯域相関計測解析研究部門， 生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門	フリッツ・ハーバー研究所	2324*
2024. 1.18	ヤングの干渉実験で，光の粒「光子」の渦巻の観測に成功	Scientific Reports	極端紫外光研究施設	広島大学 名古屋大学	2325
2024. 1.26	分子シミュレーション× AI でトランスポータータンパク質の未解明構造を明らかにする	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	岡山大学	2326*

2024. 2.27	国産初「冷却原子（中性原子）方式」量子コンピュータ開発へ 産業界の 10 社と事業化に向けた連携を開始	−	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門		2327*
2024. 3. 1	同じだと考えられていた 2 種のトア複合体は異なる役割を持っていた～複合体の構造を予測し合理的に改造することで発見～	Journal of Cell Science	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 / 生命創成探究センター 生命分子創成研究グループ	基礎生物学研究所 長浜バイオ大学 名古屋大学	2328*
2024. 3.14	光アップコンバージョンには中間体の回転が重要だった！―高効率な光エネルギー変換デバイスの実現へ―	The Journal of Physical Chemistry Letters	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門	神戸大学 東京工業大学	2329
2024. 3.22	化学反応の“峠”を高い成功率で効率よく見つけ出す計算手法を開発～従来法比 5 ～ 7 割の計算削減～	Jounal of Chemical Theory and Computation	理論･計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門		2330*

* 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）　（2023 年度）

EurekAlert! 公開日	タイトル	日本語版 整理番号
2023. 7. 6	Scientists Develop Strategy to Engineer Artificial Allosteric Sites in Protein Complexes	2306
2023. 7.11	Beyond Nature’s Imagination: Scientists Discover Extensive Array of Protein Folds Unexplored in Nature	2307
2023. 7.12	Beyond Reduction Cocatalysts: A New Paradigm for the Role of Metal Cocatalysts in Photocatalysis	2308
2023. 7.27	Broadband Tip-Enhanced Nonlinear Optical Response in a Plasmonic Nanocavity	2309
2023. 7.28	The Structures of Six States of a Rotary Sodium Ion Pump Are Revealed	2310
2023. 7.28	Selectivity Effect of Molecular Chirality May Have Universal Applications, Researchers Find	2311
2023. 8. 7*	Unraveling Alzheimer’s Catalysts as Weavers of Amyloid β Fibrils ~Molecular Mechanism of Accelerated Formation of Amyloid β Fibrils on Neuronal Cell Membranes~	2313
2023. 9.20	Novel Organic Light-Emitting Diode with Ultralow Turn-on Voltage for Blue Emission	2314
2023. 9.29	Ultrafast Quantum Simulation of Large-Scale Quantum Entanglement —Applying Ultrafast Quantum Computer Scheme to a Quantum Simulator	2315
2023.10. 5	Observation of Left and Right at Nanoscale with Optical Force	2316
2023.11.16	Researchers Tune the Speed of Chirality Switching	2319
2023.12. 7*	Twisting Molecules to Design New Molecular Machines that Show Complex Operations	2322
2024. 1. 4	Breakthrough in Designing Complicated All-α Protein Structures	2323
2024. 1. 9	Observing Single Protein with Infrared Nanospectroscopy—Milestone toward Ultra-High Sensitivity and Super-Resolution Infrared Imaging	2324
2024. 1.23	Molecular Simulation × AI Reveals Unresolved Structure of Transporter Protein	2326
2024. 2.29	Groundbreaking Study Unveils Unique Roles of Yeast Protein Complexes in Cellular Lifespan and Environmental Response by Rationally Engineering Based on the Predicted Three-dimensional Structures	2328
2024. 3.12	IMS Developing Japan’s First “Cold (Neutral) Atom” Quantum Computers: New Collaboration with 10 Industry Partners toward Commercialization	2327
2024. 3.22	A Reliable and Efficient Computational Method for Finding Transition States in Chemical Reactions	2330

*EurekAlert! 未公開のためホームページ公開日

新聞報道　　（2023 年度）

報道日	記事内容	新聞名	該当研究部門
2023. 4. 2	「原子」で量子計算機開発に挑戦　大森賢治さん	読売	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2023. 4.29	瑞宝中綬章　科学の不思議を研究　元自然科学研究機構分子科学研究所長　中村　宏樹さん(82)	東海愛知	分子科学研究所
2023. 4.29	瑞宝中綬章	中日	分子科学研究所
2023. 4.29	瑞宝中綬章	読売	分子科学研究所
2023. 4.29	春の叙勲受章者　瑞宝中綬章	毎日	分子科学研究所
2023. 4.29	春の叙勲受章者　瑞宝中綬章	日本経済	分子科学研究所
2023. 5. 1	春の叙勲受章者　文部科学省関係 740 名が受章	文教ニュース	分子科学研究所
2023. 5. 7	量子研究　ニーズと結びつくか	読売	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2023. 5.12	春の叙勲（文部科学省関係）	科学	分子科学研究所
2023. 5.29	中村元分子科学研究所長	文教ニュース	分子科学研究所
2023. 6.12	（今日の話題）第 12 回若手研究者賞記念講演 自然機構，10 年度の科学予測パネル討論も	文教ニュース	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2023. 7. 5	有機材料で金属状態	日刊工業	機器センター
2023. 8. 3	金探針の光増強効果　分子研が波長拡大実正表面分析に活用	日刊工業	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門
2023. 9.11	人間発見　シン量子計算機に挑む①	日本経済	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2023. 9.12	人間発見　シン量子計算機に挑む②	日本経済	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2023. 9.13	人間発見　シン量子計算機に挑む③	日本経済	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2023. 9.14	人間発見　シン量子計算機に挑む④	日本経済	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2023. 9.15	人間発見　シン量子計算機に挑む⑤	日本経済	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2023.10. 1	ノーベル賞あすから発表	中日	特別研究部門
2023.10. 4	「アト秒」観測に物理学賞　「実用化へ発展必要」分子研　大森教授	中日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2023.10. 6	磁性材料の特性再現　分子研，量子技術を活用	日本経済	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2023.10. 6	アト秒レーザー　高性能光触媒など期待	日刊工業	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2023.10.11	「量子シミュレーション」で再現	日経産業	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2024. 1.19	単一のタンパク質観察　赤外線使った新手法開発	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
2024. 2. 9	光渦を構成する粒も渦の性質　ヤングの干渉実験で観測成功	科学	極端紫外光研究施設

2024. 2.27	量子計算機で新会社　富士通・日立など 10 社　産学で商用化	日本経済	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2024. 2.28	新方式の量子計算機事業化　分子研，10 社と連携　開発会社設立へ	日刊工業	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2024. 2.28	量子コンピューター商業化　分子研新会社設立へ	中日	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2024. 3. 1	レーザー　日米で量子研究	日刊工業	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2024. 3. 3	「冷却原子型」の量子 C 実用化へ	赤旗	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2024. 3. 8	冷却原子方式の量子コンピューター	科学	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2024. 3.17	冷却原子方式の量子コンピューター	産経	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2024. 3.29	量子計算機で主役交代か 「冷却原子型」で高い性能	日本経済	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門

その他報道　（2023 年度）

発行日等	記事等内容	掲載誌等名	該当研究部門
2023. 4.25	フロントランナー挑む：第 136 回「冷却原子で 2 量子ビットの高速演算操作を実現」	日経サイエンス 2023 年 6 月号	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2023. 4.27	5 大方式が競う国産量子コンピューター「冷却原子方式　高速ゲート操作で一躍有力に」	日経コンピュータ 2023 年 4 月 27 日号	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2023. 5.28 8:28 ～ 8:58 【再放送】 2023. 6. 4 8:28 ～ 8:58	「ガリレオ X」第 291 回 国産超伝導量子コンピュータ初号機始動！	BS フジ	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門
2023.6.20 18:10 ～ 19:00 (18:20頃予定)	まるっと！	NHK(G)	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2023.6.26 7:45 ～ 8:00	おはよう東海	NHK(G)	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門
2023.9.13 22:00 ～ 22:55	居間からサイエンス	BS テレ東	特別研究部門
2023.12.22	第 2 部第 6 章「冷却原子で 2 量子ビットの高速演算操作を実現」	日経サイエンス 別冊 265	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門

5．各種事業

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

分子科学研究所が行う事業には，『先端的な研究を推進する拠点事業』，『国内の研究者への共同研究・共同利用支援に関する事業』，『研究者の国際ネットワーク構築に関する事業』，『研究力強化推進事業』がある。予算的には運営費交付金の一般経費・特別経費，文部科学省の委託事業，日本学術振興会等の競争的資金で実施している。運営費交付金の一般経費以外はいずれも期間が定められており，運営費交付金一般経費も毎年削減を受けている。

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

（2）『国内の研究者への共同研究・共同利用支援に関する事業』のうち，実験研究のための共同利用は機器センターが担当している。研究設備ネットワーク事業（2007 年度から「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」，2010 年度より「大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用と共同研究の促進」）を進めている。また，2011 年度までは文科省の研究施設共用イノベーション創出事業「ナノテクノロジーネットワーク」の「中部地区ナノテク総合支援」プロジェクトの幹事機関として，2012 年度より文科省「ナノテクノロジープラットフォーム」事業の「分子・物質合成プラットフォーム」の代表機関（機器センター内にナノテクノロジープラットフォーム運営室を設置）として，共同利用設備の共用を推進している。この事業は 2021 年度で終了し，後継事業として文科省「マテリアル先端リサーチインフラ」が 2021 年度から開始することとなり，分子科学研究所はそのスポーク機関として参画している。2022 年度からはこの事業が本格稼働した。前述の大学連携研究設備ネットワーク事業については，当初の３つの目的である，全国的設備相互利用，設備復活再生，最先端設備重点配置のうち，第 2 期中期計画期間では，最初のものだけが生き残り実施されることになったが，2015 年度には 2016 年度以降（第 3 期中期計画期間）の事業の方向性を見直した。一方，後 2 者については，共同利用設備の安定的な運営を勘案し，旧分子スケールナノサイエンスセンターの共同利用設備をすべて機器センターに集約し，予算面では「マテリアル先端リサーチインフラ」事業予算（外部資金）を主な財源とし，運営費交付金一般経費も用いながら運用している。

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

5-1　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（現在分子研が担当），新分野創成センター長，及び数名の所外からの客員教授・准教授で構成することとなった。また先端光科学研究分野で独自の研究活動を推進するために，専任の特任助教を雇用することとなった。

このような体制を構築した上で，新たな分野融合的発想に基づく光技術の適用法や新技術開発につながる先駆的・挑戦的な萌芽研究を開拓・推進する「共同研究」，およびそれらを探索する「研究会」のプロジェクト提案を広く機構内外から公募し，教授会議での審査を経て，採択課題を推進することとなった。2023 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，研究活動を支援している。また教授会議で企画するワークショップとして，2019 年度には“Chiro-Optical Effects in Nanomaterials”を，2020 年度にはオンラインで「先端光科学研究分

野勉強会」を開催した。2021 年度は，日本学術会議と分子科学研究所で共同主催で開催された「アト秒レーザー科学研究施設（ALFA）計画の現状と展望」に共催として加わる形とした。2022 年度は，学術変革領域研究 A「キラル光物質科学」との共催として，ワークショップ「キラルな光とキラルな物質」を開催した。専任の特任助教は 2018 年度に公募によって広く人材を募集し，教授会議構成員の内の 5 名で構成される選考委員会で選考が行われて候補者が決定し，2018 年度末に着任して研究活動を行っている。

5-2　光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP（文部科学省）

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

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

5-3　ムーンショット型研究開発事業（内閣府／科学技術振興機構）

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

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

分子科学研究所では，光分子科学研究領域の大森賢治教授が目標 6 の研究開発プログラム「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」のプロジェクトマネージャー（PM）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。

5-4　大学連携研究設備ネットワークによる研究設備共用促進事業

大学連携研究設備ネットワークは，化学系の教育研究組織を持つ全国の機関が連携し，老朽化した研究設備の復活再生，及び，最先端研究設備の重点的整備を行い，大学間での研究設備の有効活用を図ることを目的として，文部科学省特別経費「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」事業として 2007 年度よりスタートした。分子科学研究所が事務局を担当するこの事業は，2010 年度から「大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用と共同研究の促進」事業として経常経費化され，2017 年度からは「大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用の促進」事業，2022 年度からは「大学連携研究設備ネットワークによる研究設備共用促進」事業（以下「本事業」という）として運営が行われている。

現在，本事業では国立大学ばかりでなく公立大学や高等専門学校を含む 77 機関が参画して機器共用を実施し，利用機関数は私立大学や企業も含めて約 660 に上っている。参画機関の外部公開機器の登録台数は，1,280 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 3,437 台であり，登録ユーザー数は約 18,000 名に達している（数値は 2024 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。

2023 年度は第 4 期中期計画の 2 年目にあたるが，引き続き，設備の学外利用を促進するために，外部利用が期待される設備の補修やコンポーネント追加による高機能化等の提案を支援する研究設備共用加速事業（表 2）を実施した。また，外部利用促進に向け参画機関同士や外部機関との交流を促進する形式の講習会・研修会を開催した（表 3)。これらの講習会･研修会の事業の実施においては，文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ事業，国立大学法人機器･分析センター協議会，等とも連携しながら，企画，運営を行っている。本事業に対しては，2017 年度より，機構本部の自然科学大学間連携推進（NICA）事業，2022 年度からも機構本部の研究大学コンソーシアム（RUC）事業においても運営マネージャー人件費予算が継続的に措置されている。これまでは研究者間のつながりで運営されていたネットワーク型共同研究について，機関間の組織的な関係を強化し一層の発展を目指すことを目的に，連携の強化や集約による分野別予算の確保や人的・物的資源の有効活用等（マネージャー人件費や予約課金システム更新費，講習会強化費用等）が可能となった。これらの施策は本事業の安定運営に大きく寄与している。今後も引き続き，①予約・課金システム等の安定運用と改善，②研究設備の共用加速事業の実施，③講習会・研修会の開催，④他の設備共用事業等との連携継続，⑤広報活動，等を行い更に事業を推進していく予定である。

表 1　大学連携研究設備ネットワーク利用実績一覧

年度	学内利用	学外利用			
		国立大	公私大等	民間企業	計
2007	5,570	158	-	-	158
2008	7,081	122	-	-	122
2009	10,520	183	-	-	183
2010	48,833	354	6	4	364
2011	73,997	438	38	2	478
2012	85,128	490	63	25	578
2013	88,516	576	149	162	887

2014	108,863	682	254	241	1,177
2015	113,063	757	329	228	1,314
2016	111,728	798	448	298	1,544
2017	119,077	1,005	698	594	2,297
2018	143,789	1,154	671	658	2,483
2019	169,051	1,005	820	966	2,791
2020	146,621	962	701	948	2,611
2021	169,617	1,053	738	1,282	3,073
2022	175,491	1,121	810	1,870	3,801
2023	185,837	1,112	1,097	3,264	5,473

表 2　2023 年度加速事業課題一覧

大学	部署	代表者	職名	課題名
千葉大学	千葉ヨウ素資源イノベーションセンター	荒井　孝義	教授	シームレスな分光分析システムの提供による共用利用加速
千葉大学	共用機器センター	桝　飛雄真	准教授	X線回折装置における中低温チャンバーの修理とソフトウェアの強化
東京農工大学	学術研究支援総合センター	野口　恵一	教授	測定システムのアップグレードによる固体核磁気共鳴装置の設備共用加速
山梨大学	工学部附属ものづくり教育実践センター	勝又まさ代	技術専門職員	電子スピン共鳴装置の学内移設及び各種オプションの整備
名古屋工業大学	産学官金連携機構設備共用部門	山本　義哉	特任助教	EPMA の保守整備による依頼利用促進
奈良先端大	マテリアル研究プラットフォームセンター	河合　　壯	教授	共同利用者の利用促進のための多機能走査型X線光電子分光分析装置におけるイオン銃・中和銃，チラー関連およびステージの修繕，予備用ロータリーポンプの購入
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
広島大学	技術センター	網本　智子	契約専門職員	直接導入プローブのエミッター交換及び定量解析ソフト導入による GC-TOFMS の外部利用促進
広島大学	技術センター	網本　智子	契約専門職員	UHPLC 及び nanoLC の修理による質量分析計の外部利用促進
岡山大学	自然生命科学研究支援センター	多田　宏子	教授	質量分析サービス総合整備事業
高知大学	総合研究センター実験実習機器施設	坂本　修士	教授	フローサイトメーターの「レーザー更新」による安定稼働促進事業
愛媛大学	学術支援センター物質科学研究支援部門	谷　　弘幸	准教授	単結晶X線構造解析装置の相互利用促進事業
長崎大学	研究開発推進機構設備共同利用部門	真木　俊英	准教授	二重収束型質量分析装置不良部品交換事業
長崎大学	研究開発推進機構設備共同利用部門	真木　俊英	准教授	光電子分光装置メンテナンス事業
長崎大学	研究開発推進機構設備共同利用部門	真木　俊英	准教授	GCMS 省資源化および遠隔利用促進事業
鹿児島大学	先端科学研究推進センター	澤田　　剛	准教授	X線光電子分光装置の整備事業

表 3　2023 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
AFM 試料物性測定実技講習会	分子科学研究所	4 月 14 日（金）	30
第 1 回質量分析初歩講習会	質量分析技術者研究会	4 月 21 日（金）	62
技術職員のための英語研修～ガイダンス～	英語研修 WG	4 月 25 日（火）	72
質量分析講習会前処理＆測定（LC-MS 編）	質量分析技術者研究会	5 月 18 日（木）	46
ラマン分光講習会	分子科学研究所	5 月 22 日（月）	38
分析装置総覧講習会	分子科学研究所	5 月 23 日（火）	68
技術職員のための英語研修 1（Speaking）	英語研修 WG	5 月 25 日（木） 5 月 26 日（金）	12
マススペクトル解析演習 1	質量分析技術者研究会	5 月 26 日（金）	35
異分野技術交流セミナー　地球惑星科学と ESR	分子科学研究所	5 月 30 日（火）	64
ラマン分光実技講習会	分子科学研究所	6 月　8 日（木）	4
固体 NMR 講習	NMR Club	6 月 15 日（木） 6 月 16 日（金）	19
異分野技術交流セミナー　創薬リード探索の先端と計測技術	分子科学研究所	6 月 23 日（金）	72
クリーンルーム維持・管理情報交換会	分子科学研究所	6 月 28 日（水）	31
技術職員のための英語研修 2（Writing）	英語研修 WG	6 月 29 日（木） 6 月 30 日（金）	13
XRD 見学会研修	大阪大学	7 月　6 日（木）	6
XPS 講習会	北海道大学	7 月 14 日（金）	55
技術職員のための英語研修 3（Writing）	英語研修 WG	7 月 19 日（水） 7 月 20 日（木）	12
異分野技術交流セミナー　定量 NMR の利用と応用	分子科学研究所	7 月 25 日（火）	55
生態系 NMR 実習	NMR Club	7 月 26 日（水） 7 月 27 日（木）	10
NMR・MS 構造解析演習	NMR Club 質量分析技術者研究会	7 月 28 日（金）	21
EPMA 講習会	分子科学研究所	8 月 10 日（木）	57
マススペクトル解析演習 2	質量分析技術者研究会	8 月 25 日（金）	25
異分野技術交流セミナー　固液界面における分子反応の解明と最先端解析技術	分子科学研究所	8 月 25 日（金）	57
技術職員のための英語研修 4	英語研修 WG	9 月 14 日（木） 9 月 15 日（金）	15
ゲル系 NMR 実習 _ 分析装置リモート化講習会	NMR Club	9 月 21 日（木） 9 月 22 日（金）	11
FT-IR 実技講習会	静岡大学	10 月 19 日（木）	23
異分野技術交流セミナー　分子構造解析の NMR 活用	分子科学研究所	10 月 20 日（金）	63
技術職員のための英語研修 5（Speaking）	英語研修 WG	10 月 23 日（月） 10 月 24 日（火）	13
粉末 X 線回折講習会	分子科学研究所	10 月 26 日（木）	50
異分野技術交流セミナー　有機合成 DX への期待	分子科学研究所	11 月　2 日（木）	65
SEM-EDS（走査形電子顕微鏡中級講習会）	分子科学研究所	11 月 28 日（火）	55
Python を用いたケモメトリックス入門	分子科学研究所	12 月　1 日（金）	81
第 1 回 NMR 構造解析講習会	NMR Club	12 月 15 日（金）	35
薄膜 X 線回折講習会	分子科学研究所	1 月 25 日（木）	46

マススペクトル解析の応用 -1-	質量分析技術者研究会	2 月　2 日（金）	39
第 2 回 NMR 構造解析講習会	NMR Club	2 月　9 日（金）	31
電子顕微鏡講習会	電子顕微鏡技術情報交流会	2 月 13 日（火）	72
技術職員のための英語研修 6（英語勉強法）	英語研修 WG	2 月 16 日（金）	60
マススペクトル解析の応用 -2-	質量分析技術者研究会	2 月 26 日（月）	22
技術職員のための英語研修 in 浜松	英語研修 WG	2 月 28 日（水）	13
Python を用いたケモメトリックス演習講習会 I	分子科学研究所	3 月　1 日（金）	10

5-5　マテリアル先端リサーチインフラ ARIM（文部科学省）

2021 年度から文部科学省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 年度から稼働予定である。2022 年度からは，ナノプラットフォーム実施機関の大部分が本事業のスポーク機関に移行し，実施担当者 50 名規模に加え，本格的に本事業が始動された。また，2022 年度には，７つの重要技術領域間の連携を支援するため３つの横断技術領域が新設され，分子科学研究所は横断技術領域「物質・材料合成プロセス」責任機関として，有機合成のデジタル化，物質・材料合成プロセスのデータ構造化・自動化等を進める体制を構築しつつあるところである。

表 1 には 2023 年度の支援装置・プログラム一覧，表 2 には 2023 年度の採択課題一覧，表 3 には 2023 年度採択・実施件数日数（2023 年 4 月 1 日～ 2024 年 3 月 31 日実施分），表 4 には 2023 年度合成横断領域活動一覧，表 5 には 2023 年度異分野技術交流セミナー開催実績（大学連携研究設備ネットワーク事業と共催）を示した。

表 1　2023 年度支援装置・プログラム一覧（分子科学研究所担当分）

支援装置・プログラム	装置・プログラムの概要	支援責任者	所属
X 線磁気円二色性分光（XMCD）	UVSOR BL4B を用いた極低温高磁場Ｘ線磁気円二色性測定システム。薄膜作製用試料準備槽つき。利用エネルギー 200–1000 eV，試料温度 5–60 K，磁場 ±5 T（±7 T まで一応可能）。作成した薄膜等を大気に曝すことなくそのまま元素選択磁性測定したい場合に有効。 ［UVSOR-III BL4B（100–1000 eV 円偏光），超伝導磁石：JANIS 社製 7THM-SOM-UHV（±7 T, 5 K），試料作製槽 LEED/AES，蒸着などを装備］	解良 聡施設長 横山利彦教授 倉橋直也特任助教 前島尚行特任助教 石山 修特任研究員	UVSOR 物質分子科学 物質分子科学 物質分子科学 機器センター
マイクロストラクチャー製作・評価支援	マスクレス露光装置（DL-1000/IMC）段差計付き マスクレス露光装置は，任意の形状をフォトマスクなしで直接描画する装置。光源は 405nmLED で，露光範囲 100 mm × 100 mm，最小線幅 1μm の描画が可能。段差計は，150 mm までの領域でステッチングなしで測定可能。その他にも，精密温湿度調整付きのイエロークリーンブースは，フォトリソグラフィ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 菊地拓郎技術員 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
電解放出形走査電子顕微鏡	走査電子顕微鏡を提供。主に施設利用に対応。 ［JEOL JSM-6700F(1)（試料 2 インチまで）］	横山利彦センター長 石山 修特任研究員 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
低真空分析走査電子顕微鏡	幅広い試料に対する，SEM 観察と EDS 元素分析の環境を提供。SEM 本体は，日立ハイテクノロジー社製 SU6600。10 ～ 300Pa の低真空観察に対応し，絶縁性試料を導電処理なしで観察可能。分解能は，高真空 1.2 nm (30 kV)，低真空 3.0 nm (30 kV)。EDS 分析装置は，BrukerAXS 社製 XFlash5060FQ 及び XFlash6|10。表面凹凸の影ができにくく高感度な EDS 検出器を搭載。温度を –20 ～ 50℃程度で変えられるステージも利用可能。 ［日立ハイテクノロジーズ _SU6600，BrukerAXS_QUANTAX XFlash 5060FQ+XFlash6|10 コンバインシステム］	横山利彦センター長 石山 修特任研究員 上田 正主任技術員 平野佳穂技術員 今井弓子技術支援員	機器センター 機器センター 機器センター 機器センター 機器センター
電界放出形透過電子顕微鏡	高輝度で高い干渉性の電子線が得られるフィールドエミッション電子銃（FEG）を搭載した電子顕微鏡。ナノスケールオーダーの超高分解能の像観察や分析が可能。エネルギー分散型Ｘ線分析装置（EDS）による微小部の元素分析，組成マップを測定可能。STEM 機能により走査透過像測定が可能。 ［JEOL_JSM-2100F（試料 3 mm φ以内）］	横山利彦センター長 伊木志成子特任専門員 上田 正主任技術員 賣市幹大技術員 平野佳穂技術員	機器センター 機器センター 機器センター 機器センター 機器センター
走査プローブ顕微鏡	形状測定，機械特性測定，電気特性測定，ケルビンプローブ測定に特化した走査プローブ顕微鏡を用いた共同研究が可能。 ［Bruker Dimension XR Icon　NanoElectrical］ 電気化学測定に特化した走査プローブ顕微鏡を用いた共同研究が可能。 ［Bruker Dimension XR Icon　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	機器センター 機器センター 機器センター 物質分子科学
単結晶Ｘ線回折	単結晶試料にＸ線を入射すると，結晶構造を反映した回折点が得られる。この回折点の位置および強度から，結晶構造解析が行われる。構造解析により，原子の三次元座標（立体構造）や原子間距離・結合距離，三次元の電子密度などの情報が得られる。数十～数百 mm サイズの単結晶試料が作成出来れば，3 時間程度で測定～解析が可能。 ［Rigaku_MERCURY CCD-1・R-AXIS IV，MERCURY CCD-2］	横山利彦センター長 岡野芳則技術員	機器センター 機器センター

単結晶X線回折（微小結晶用）	高輝度X線；光学系にコンフォーカルミラーを用いており，CCD-1，-2 に比べ，約 10 倍の高輝度X線ビームが得られ，測定が難しかった微小結晶でも測定が可能。ビーム径はφ 0.1～0.2 mm で，コリメータはバックグラウンド低減のためビーム径よりやや大きめの 0.3mm のものが取付。 低温測定;ガス吹き付け型の冷却装置で, 到達温度はN_2ガスモードで 100 K，He ガスモードで 24 K（実測）。到達時間は，N_2 で 240 分，He で 150 分かかる。運転モードの切り替えは，He から N_2 には迅速に切り替え可能だが，N_2 から He の場合は，冷凍機を一旦室温に戻す必要。 ［Rigaku_HyPix-AFC］	横山利彦センター長 岡野芳則技術員	機器センター 機器センター
結晶スポンジ法を用いた分子構造解析	単結晶X線構造解析は，分子の立体構造を決定する上で最も強力な分析方法。しかしながら，この手法を用いるためには，構造を明らかにしたい試料の単結晶が不可欠であり，単結晶作製は時として大きな困難を伴う。藤田らが開発した「結晶スポンジ法」は，細孔性錯体の結晶（結晶スポンジ）を試料の溶液に浸すことで試料分子を結晶スポンジの細孔内に導入し，単結晶X線構造解析により試料分子の立体構造を明らかにするという「結晶化不要の単結晶X線構造解析法」。結晶スポンジ法を用いて，提供を受けた試料の立体構造解析の支援を実施。また, 結晶スポンジ法に関連した協力研究も広く受付。 ［Rigaku_XtaLAB P200，SuperNova，XtaLAB SynergyCustom］	藤田 誠卓越教授 横山利彦センター長 三橋隆章特任助教 佐藤宗太特任教授	特別研究部門 機器センター 特別研究部門 三井　柏の葉
オペランド多目的X線回折	試料にX線を照射し，回折・反射・散乱されたX線を観測することで，化合物の同定･定量･配向性，薄膜の膜厚･粗さ，粒径･空孔径分布などの情報が得られる。本装置では，各種ミラー・ステージ・オプションにより，様々な測定に対応可能である。 ［Panalytical Empyrean］	横山利彦センター長 藤原基靖主任技術員 宮島瑞樹技術員	機器センター 機器センター 機器センター
粉末X線回折	粉末試料にX線を照射し，回折されたX線の角度および強度を測定。主な利用法は定性分析（同定）である。既知試料の回折パターン（PDF：Powder Diffraction File）と照合することで測定試料の同定を行う。その他にも，ピークの有無や強度による結晶性や配向評価，ピーク幅による結晶子サイズ評価，小角領域の測定による粒子径の評価などにも用いられる。また測定精度によっては未知構造解析も可能。 ［Rigaku_RINT-UltimaIII］	横山利彦センター長 藤原基靖主任技術員 宮島瑞樹技術員	機器センター 機器センター 機器センター
X線溶液散乱計測システム	X線小角散乱による溶液状試料（タンパク質，ミセル，コロイドなど）の構造解析･生体高分子試料の状態診断支援（回転半径，形状，分子質量，距離分布関数など） 溶液散乱データの解析・解釈支援 放射光施設での実験に向けた試料の前評価，計画立案支援 ［Rigaku_ NANO-Viewer］	横山利彦センター長 秋山修志教授 古池美彦助教	機器センター 協奏分子センター 協奏分子センター
機能性材料バンド構造顕微分析システム	静電半球型アナライザーを用いた機能性材料の価電子バンド構造測定システム。ディフレ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，Al-Kα 単色X線源 MX-650, 真空紫外光源 VUV5k, 中和電子銃, グローブボックス） 光電子分析器；エネルギー分解能 1.8meV 以下，スポットサイズ 1×3mm^2 単色X線源；エネルギー幅 300 meV	横山利彦センター長 石山 修特任研究員 伊木志成子特任専門員 平野佳穂技術員	機器センター 機器センター 機器センター 機器センター

電子スピン共鳴（E680）	電子スピンの分布や相互作用，ダイナミクスの解析支援。Bruker 社製 E680 では，通常の X-band CW-ESR 以外にも，多周波数（Q-, W-band），多種測定（パルス，多重共鳴）が可能。 ［Bruker_E680］	横山利彦センター長 中村敏和チームリーダー 浅田瑞枝主任技術員 上田 正主任技術員 藤原基靖主任技術員 宮島瑞樹技術員 伊木志成子特任専門員	機器センター 機器センター 機器センター 機器センター 機器センター 機器センター 機器センター
電子スピン共鳴（EMX Plus，E500，E580）	電子スピン共鳴（ESR）装置は，不対電子（電子スピン）をプローブとした分光装置。静磁場中に置かれた電子スピンはエネルギー準位が分裂し，一定のマイクロ波を加えながら静磁場を掃引すると，このエネルギー差に相当する磁場で共鳴が起こる。この共鳴磁場や吸収強度などの観測から，電子スピンを持つ原子や分子の量，構造，電子状態などに関する情報が得られる。ESR 装置は，有機ラジカルや遷移金属などを含む物質の物性研究の他にも，放射線や酸化などにより不対電子が生じた岩石や食品の評価，触媒や重合反応などのプロセス追跡にも利用。 ［Bruker_ EMX Plus, E500，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，MPMS-3］	横山利彦センター長 中村敏和チームリーダー 藤原基靖主任技術員 宮島瑞樹技術員 伊木志成子特任専門員	機器センター 機器センター 機器センター 機器センター 機器センター
示差走査型カロリメーター（溶液）	熱分析装置では物質を温度制御しながら，その熱変化などを測定。示差走査型カロリメーター（DSC）による分子の構造変化時の熱変化を直接測定する方法や，等温滴定型カロリメーター（ITC）による分子間の結合時の熱変化を直接測定する方法などが可能。 ［MicroCal_VP-DSC］	横山利彦センター長 賣市幹大技術員 長尾春代技術員	機器センター 機器センター 機器センター
等温滴定型カロリメーター（溶液）	熱分析装置では物質を温度制御しながら，その熱変化などを測定。示差走査型カロリメーター（DSC）による分子の構造変化時の熱変化を直接測定する方法や，等温滴定型カロリメーター（ITC）による分子間の結合時の熱変化を直接測定する方法などが可能。温度一定下の条件において，リガンド滴下により２種の分子が相互作用する時に生じる反応熱を測定する。溶液中の生体高分子に特化した仕様。 ［MicroCal_PEAQ-ITC，iTC200］	横山利彦センター長 賣市幹大技術員 長尾春代技術員	機器センター 機器センター 機器センター
熱分析装置（固体，粉末）	熱分析とは，物質の温度を一定のプログラムによって変化させながら，その物質のある物理的性質を温度の関数として測定する分析法。熱流差を検出する示差走査熱量測定（DSC）による融解・結晶化や比熱の測定，質量（重量変化）を検出する熱重量測定（TGA）による脱水・熱分解の測定などが可能。 ［Rigaku_DSC8231，TG-DTA8122］	横山利彦センター長 藤原基靖主任技術員 宮島瑞樹技術員	機器センター 機器センター 機器センター
MALDI-TOF 質量分析	イオン化部はマトリックス支援レーザー脱離イオン化（MALDI），質量分離部が飛行時間型の質量分析計（TOF-MS）。MALDI はマトリックスと呼ばれるイオン化を促進する試薬を試料と共にサンプルプレート上に結晶化させ，そこにレーザー光を照射する。マトリックスはレーザー波長に対して吸収を持っているので急速に加熱され試料と共に気化。試料は気相反応（プロトン移動など）によってイオン化し，TOF-MS と呼ばれるイオン源で発生したイオンがフライトチューブ内を飛行し検出器まで到達する時間によって質量を測定する装置により分離，検出。MALDI によるイオン化は穏和で試料分子の分解が起こりにくく，TOF-MS は分子量が数万～十数万のタンパク質のような高分子を測定することが可能であり，発生したイオンの大部分が検出器に到達するため感度も高い点が挙げられる。 ［Bruker Daltonics_microflex LRF］	横山利彦センター長 賣市幹大技術員 藤川清江技術支援員	機器センター 機器センター 機器センター

顕微ラマン分光	顕微ラマン分光システムによる分子構造，局所結晶構造解析を支援。コンフォーカル光学系＋冷却 CCD による高空間分解能，高感度観測。488 nm から 785 nm までの励起波長選択，ヘリウム温度までの試料冷却が可能。 ［RENISHAW_inVia Reflex］	横山利彦センター長 賣市幹大技術員	機器センター 機器センター
FT 遠赤外分光	FT-IR 分光器による遠赤外スペクトル測定支援。格子フォノン，分子ねじれ振動などの集団運動や分子間水素結合，配位結合等の弱い結合による光学モードを検出。 ［Bruker_IFS66v/S］	横山利彦センター長 賣市幹大技術員	機器センター 機器センター
蛍光分光	蛍光分光光度計は，励起光を試料に当て，放出される蛍光強度やスペクトルを測定して物質の定量，定性分析を行う装置で，吸光分析である分光光度計よりも非常に高い感度で測定が可能。観測側（蛍光側）の分光器の波長を蛍光波長に固定し，励起側の分光器の波長をスキャンすると励起スペクトルが得られる。励起側の波長を固定（最も強い蛍光を生じる励起波長）し，観測側の分光器の波長をスキャンすると蛍光スペクトルが得られる。また，励起側分光器と観測側分光器の両方の波長をスキャンさせて測定できる装置もあり，簡単に蛍光励起スペクトルの測定が可能。 ［HORIBA_SPEX Fluorolog 3-21］	横山利彦センター長 上田 正主任技術員	機器センター 機器センター
紫外・可視・近赤外分光光度計	測定する物質がどの程度光を吸収するかを波長分布として測定する装置。実際は，透過率を測定しソフトウ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 藤川清江技術支援員	機器センター 機器センター 機器センター
ピコ秒レーザー	超短パルスレーザーでは，不確定性原理によってパルスの時間幅と波長幅（バンド幅）を同時に狭くすることは相反するが，ピコ秒のレーザーはその両者，つまり時間分解能とエネルギー分解能の両方において高い分解能が得られるとされている。そのためピコ秒レーザーは，物理化学分光研究における超高速時間分解実験の分光用光源として用いられ，超高速時間分解吸収，或いは蛍光スペクトルを高い分解能で観測するための最も重要なツール。また，ピコ秒レーザーは，パルス幅が短くピークパワーが高いため，熱影響の少ない精密微細加工を実現できるツールとしても応用。 ［Spectra-Physics，Quantronix_Millennia-Tsunami，TITAN-TOPAS］	横山利彦センター長 上田 正主任技術員	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－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 （金属錯体）	金属錯体の設計，合成，構造解析および物性評価を支援。光学特性および電気化学特性の評価が可能。 ［金属錯体の設計，合成，単結晶および粉末Ｘ線回折による構造解析，AFM 観察，電気化学測定ならびに紫外－可視－近赤外吸光分光光度計，分光蛍光光度計，発光スペクトル－寿命測定システム，フーリエ変換赤外分光光度計による各種光物性測定が可能］	草本哲郎准教授 松岡亮太助教	生命･錯体分子科学 生命･錯体分子科学
合成ものづくり支援 （機器センター長協力研究）	機器センター以外の分子研施設利用を実施する際に，機器センター機器（所内専用機器を含む）を補助的に利用するための区分	横山利彦センター長	機器センター

表 2　2023 年度（令和 5 年度）採択課題一覧　分子科学研究所担当分（2024 年 3 月 31 日現在）

(1)　協力研究

課　題　名	支援機器等	代　表　者
有機溶媒と接する氷界面のナノ力学応答の計測評価	SPM	東神戸大学大学院理学研究科　大西　洋
ナノ水滴形成の基板依存性の観測	SPM	金沢大学理工学研究域　荒木　優希
分子性量子ビットの開発	E680	九州大学大学院工学研究院　楊井　伸浩
コハク酸の吸着様式の違いによるカルサイトの溶解促進，阻害効果の解明	SPM	立命館大学理工学部　中田　俊隆
濃厚電解液が形成する電極被膜構造の in-situ 解析	SPM	名古屋工業大学大学院工学研究科　本林　健太
アルマニルアニオンを配位子とする金属錯体群の高周波電子スピン共鳴法による電子状態解析	E680	名古屋大学大学院工学研究科　森本　祐麻
多形により機械的柔軟性が異なる錯体分子結晶の結晶表面状態の観察と機械特性の定量化	SPM	岐阜大学教育学部　萩原　宏明
タンパク質への酸化修飾がもたらすミスフォールディングと神経変性疾患の発症メカニズム	SAXS	慶應義塾大学理工学部　古川　良明
低摩擦特性を有する有機系境界潤滑層の断面摩擦力マップの取得	SPM	京都大学大学院工学研究科　平山　朋子
二酸化チタンの局所構造の特徴と電子状態の関係	SPM	九州工業大学大学院工学研究院　河野　翔也
最先端計算機科学・材料評価手法の融合による加速器科学を革新するタングステン合金の開発	SPM	高エネルギー加速器研究機構素粒子原子核研究所　牧村　俊助
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
光制御人工タンパク質複合体の構造解析	SAXS	大阪大学大学院理学研究科　石川　春人
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
糸状菌 F8203 株が生産する抗真菌活性物質の絶対立体配置の決定	結晶スポンジ法	玉川大学農学部　大塚みゆき
糖鎖脂質含有二重膜表面で誘起されるアミロイドβ会合状態の固体 NMR を用いた構造解析	600NMR 固体	名古屋市立大学大学院薬学研究科　矢木　真穂
ダイヤモンド中における常磁性欠陥の NV センターへのデコヒーレンス効果の研究	E680	物質・材料研究機構電子・光機能材料研究センター　眞榮　力
$S = 1/2$ 第一遷移金属イオンを持つポリオキソメタレートのスピンコヒーレンス現象	E680	日本大学文理学部　石崎　聡晴
結晶スポンジ法による放線菌由来新規有機ヒ素天然物の構造決定	結晶スポンジ法	学習院大学理学部　星野翔太郎
コラニュレン骨格を有する錯体の合成と性質に関する量子化学計算	量子計算	奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学領域　山田美穂子
黒鉛上に担持したナノ粒子の電気化学挙動のその場観察	SPM	豊田工業大学大学院工学研究科　原　正則
ナノらせん構造体におけるスピン偏極状態の評価	有機 FET	京都大学大学院エネルギー科学研究科　岡崎　豊
Cr(V) 錯体を基盤とする分子 Qubit の開発	E680	九州大学大学院理学研究院　大場　正昭
有機半導体「準ホモエピタキシャル」結晶成長を実現する分子材料の合成	有機合成 DX	東京理科大学理工学部　中山　泰生
界面振動分光用ナノ構造電極基板のキャラクタリゼーション	SPM	名古屋工業大学大学院工学研究科　本林　健太
アミノ酸薄膜試料の微細構造解析	SPM	核融合科学研究所　小林　政弘
Analysis of Reaction Mechanism of Electrodes in New Rechargeable Battery	SPM	Khon Kaen University　Sutasinee Neramittagapong

(2)　施設利用

課　題　名	支援機器等	代　表　者
電子スピン共鳴測定による金属タンパク質の分光測定	EMX，E500，E580	北海道大学大学院工学研究院　押木　守
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 4	TEM	関西学院大学生命環境学部　増尾　貞弘
FeS クラスター集積・貯蔵タンパク質の Fe–S 結合過程と FeS 分子種の解明	EMX，E500，E580，円二色性	埼玉大学大学院理工学研究科　藤城　貴史
電子スピン共鳴による酵素の構造学的研究	E680，EMX，E500，E580	佐賀大学農学部　堀谷　正樹
フッ素含有複合アニオン正極の磁性 I	MPMS-7	京都大学大学院人間･環境学研究科　高見　剛

Sn/Mn 多層膜の電気伝導特性，Cr-ZnO ナノロッドの磁気的性質の解明	MPMS-7，XL7，MPMS3	岐阜大学工学部	嶋　睦宏
多周波 EPR 法による光合成タンパク質の構造及び機能の解析	E680，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7	名古屋大学大学院理学研究科	三野　広幸
T 細胞活性化シグナル伝達タンパク質の制御機構解析	PEAQ-ITC，iTC200，円二色性	京都府立大学大学院生命環境科学研究科	織田　昌幸
高周波 ESR による Bilayer 型分子磁性体の磁気特性機構の解明	微小結晶，E680，EMX，E500，E580	理化学研究所開拓研究本部	大島　勇吾
金属ドープ型 $BiFeO_3$ ナノ粒子の磁性に関する研究	MPMS-7，XL7	山形大学大学院理工学研究科	有馬ボシールアハンマド
無脊椎動物の生殖腺刺激ホルモンペプチドの探索と解析	MALDI	基礎生物学研究所	大野　薫
InP 系コアシェル型ナノ結晶の界面双極子が及ぼす励起子素過程の調査	TEM, 粉末Ｘ線, ラマン，紫外可視近赤外，量子収率，低 SEM	関西学院大学理工学部	江口　大地
常温常圧で機能する高原子価窒素固定触媒の開発	CCD-1, CCD-2, 微小結晶，MPMS-7，XL7，600NMR 溶液	愛知工業大学工学部	梶田　裕二
遷移金属－アンチモン化合物における回転・反転対称性の破れが生む磁気伝導物性開拓	MPMS-7，XL7，MPMS3	名古屋大学大学院工学研究科	浦田　隆広
四面体型コバルト (II) 錯体の結晶中における配列制御と磁気的性質	CCD-1, CCD-2, 微小結晶，粉末Ｘ線，オペランド，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3，TG-DTA/DSC	金沢大学国際基幹教育院	三橋　了爾
MMX 型鎖状高分子錯体の構造解析と磁化率測定	CCD-1, CCD-2, 微小結晶，ESCA，MPMS-7，XL7，MPMS3，TG-DTA/DSC	島根大学大学院総合理工学研究科	片岡　祐介
新しいキラル磁性体の磁気物性	EMX，E500，MPMS-7，XL7，MPMS3，TG-DTA/DSC，ラマン，FT，紫外可視近赤外，円二色性	広島大学大学院先進理工系科学研究科	井上　克也
単層カーボンナノチューブの生成メカニズムの解明	TEM	名城大学理工学部	丸山　隆浩
ジエチレンで結合された多様な COF のヨウ素ドープ効果	E680，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3	National University of Singarore	JIANG, Donglin
光注入キャリアのサイクロトロン共鳴法によるダイナミクス研究	E680，E500	和歌山大学システム工学部	秋元　郁子
ESR イメージングによる低エネルギーＸ線照射で生成するアラニンラジカル分布の測定	E580	東京都立産業技術研究センター計測分析技術グループ	中川　清子
金属酵素モデル錯体の電子構造と磁性の研究	CCD-1, CCD-2, 微小結晶，EMX，E500，E580，紫外可視近赤外，600NMR 溶液，600NMR 溶液 600G	奈良女子大学研究院自然科学系	藤井　浩
有機配位子修飾複合酸化物，及び電極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
超伝導体ナノ微粒子分散複合化合物の超伝導近接効果	MPMS-7，XL7，MPMS3，EMX，E500，E580	神戸大学大学院理学研究科	内野　隆司
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
強い水素結合を有する新規分子性伝導体の開発	MPMS-7，XL7，MPMS3	日本大学文理学部	周　彪
キラリティーを有する分子性導体の物性研究	微小結晶，XL7，MPMS3，TG-DTA/DSC，MALDI	愛媛大学大学院理工学研究科	藤崎　真広
特異な磁気特性を発現する逆ペロブスカイト型マンガン基窒化物に関する研究	MPMS-7，XL7，MPMS3，TG-DTA/DSC	静岡大学学術院工学領域	川口　昂彦
アドバンスド ESR 法による植物性食品による環境計測	E680，EMX，E500，E580	新潟大学研究推進機構	古川　貢
水素結合を有する遷移金属錯体における磁気的性質の重水素置換効果	CCD-1, CCD-2, 微小結晶，粉末Ｘ線，MPMS-7，XL7，MPMS3，FT，TG-DTA/DSC	東京海洋大学海洋電子機械工学部門	藤田　渉
複数種の金属からなる混合原子価集積体中の磁気物性およびスピンダイナミクス	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
Ｘ線結晶構造解析による新規合成有機化合物の構造決定	CCD-1，CCD-2，微小結晶	豊橋技術科学大学応用化学・生命工学系	藤沢　郁英

スピン転移とサーモサリエント特性が連動する錯体分子結晶の芳香族置換基効果の解明	オペランド，MPMS-7，XL7，TG-DTA/DSC，紫外可視近赤外	岐阜大学教育学部	萩原　宏明
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，600NMR 溶液	高知大学教育研究部	上田　忠治
スピン液体候補物質 κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu$_2$(CN)$_3$ 類縁体の 6K 異常の探索	E500	埼玉大学研究機構	小林　拓矢
溶液中で自発的に積層する有機色素の合成とその積層様式の解明	CCD-1，CCD-2，微小結晶	静岡大学学術院工学領域	植田　一正
6-chloro-2,4-dinitroaniline 会合体の特異な発光過程の研究	ピコ秒	愛知教育大学教育学部	日野　和之
フラビンタンパク質の光誘起ラジカルペア生成に関する人工システムの構築	E680, VP-DSC, 蛍光分光, 紫外可視近赤外, ピコ秒, 量子収率	広島大学持続可能性に寄与するキラルノット超物質国際研究所	岡　芳美
電子供与基を有するチオールを配位させた非平面ポルフィリン鉄 (III) 錯体の磁気的性質	E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3，紫外可視近赤外	島根大学大学院総合理工学研究科	池上　崇久
金属酸化物の構造解析	SEM，低 SEM，TEM，オペランド，ESCA	信州大学繊維学部	浅尾　直樹
ペロブスカイト関連酸化物が示す高温での酸素放出時の結晶構造解析	オペランド	高知大学教育研究部	藤代　史
アセン架橋配位子を有するパドルホイール型銅二核骨格を基盤とする新規配位高分子錯体の開発	CCD-1, CCD-2, 微小結晶, ESCA，MPMS-7，XL7，MPMS3，TG-DTA/DSC	島根大学総合理工学部	矢野なつみ
マグネシウムフェライ薄膜およびその置換系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
キラルな金属錯体液晶の内部構造解析	オペランド	日本大学文理学部	吉田　純
燃料電池材料における光照射下極低温パルス ESR 測定	E680	和歌山大学システム工学部	秋元　郁子
バナジウム酸化物薄膜表面の単結晶 X 線回折測定	CCD-1, CCD-2, 微小結晶, オペランド	大阪大学大学院基礎工学研究科	金　庚民
Ca 結合型光合成タンパク質における耐熱化メカニズムの解明	VP-DSC，PEAQ-ITC，iTC200	神戸大学大学院農学研究科	木村　行宏
遷移金属で置換したゼオライト粒子の磁気特性の解明	XL7	熊本大学大学院先端科学研究部	松田　元秀
金属相と超伝導相の境界に位置する β” 型 BEDT-TTF 塩の格子揺らぎの探索	ラマン	愛媛大学大学院理工学研究科	山本　貴
芳香環の立体制御配列に基づく新規 π 共役系分子の創製と機能開拓	EMX，E500，E580，MALDI，円二色性	名古屋市立大学大学院理学研究科	雨夜　徹
新奇レーザー素子の物性および作製プロセスに関する学術基盤構築	低 SEM，粉末 X 線，オペランド，TG-DTA/DSC，紫外可視近赤外	理化学研究所放射光科学研究センター	平等　拓範
フェノキシド架橋多核錯体の磁気的相互作用に及ぼす構造因子についての研究	MPMS-7，XL7，MPMS3	島根大学大学院総合理工学研究科	半田　真
ポリオキソメタレートを骨格として持つ金属錯体の磁気物性	MPMS-7，XL7，MPMS3	日本大学文理学部	石崎　聡晴
光エネルギー変換物質のスピンダイナミクス研究	E680，蛍光分光，量子収率，ピコ秒，紫外可視近赤外	北海道教育大学（釧路校）教育学部	松岡　秀人
天然型酸性リン脂質および非天然型脂質が形成する二重膜の相転移観測	VP-DSC	徳島大学大学院社会産業理工学研究部	後藤　優樹
カーボンナノチューブの自発的集積化メカニズムの解明	低 SEM，ラマン，FT，蛍光分光	早稲田大学理工学術院	安倍　悠朔
気体試料の ESR 測定	EMX，E500	産業技術総合研究所物質計測標準研究部門	松本　信洋
KI 結晶中の貴金属ヨウ化物ナノ結晶の電子顕微鏡観察	SEM，低 SEM，TEM，蛍光分光	大阪公立大学大学院理学研究科	河相　武利
多孔性配位高分子を用いた安定な光励起ラジカル生成の研究	EMX，E500	京都大学高等研究院物質－細胞統合システム拠点	大竹　研一
蛍光分子を内包するジャイロイド MOF の磁気構造決定	MPMS-7	名古屋大学大学院理学研究科	水津　理恵
金属錯体の光励起状態の時間分解 ESR による電子・スピン構造解析	E680，EMX，E500，E580，蛍光分光，紫外可視近赤外	群馬大学大学院理工学府	浅野　素子
シグナル伝達に伴うベシクル型人工細胞組織の集団挙動発現	PEAQ-ITC，iTC200	慶應義塾大学大学院理工学研究科	小島　知也
生体に含まれる脂質分析のための脂肪酸 NMR 情報の収集	600NMR 溶液，600NMR 溶液 600G	生理学研究所	福永　雅喜

溶液状態および固体状態での高効率光を実現するヘキサアリールベンゼン誘導体の創製および構造解明	CCD-1，CCD-2，微小結晶	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	王　逸舟
断層すべりにおける石英中捕獲電子の挙動に関する基礎的研究	低 SEM，TG-DTA/DSC	日本原子力研究開発機構東濃地科学センター	田中　桐葉
超分子錯体を用いた新たなタンパク質構造解析手法の開発	VP-DSC，PEAQ-ITC，iTC200，MALDI，円二色性，600NMR 溶液	東京大学大学院工学系研究科	JUNG, Youngcheol
量子ドット三次元超格子の構造解析	オペランド，蛍光分光，紫外可視近赤外	名古屋工業大学大学院工学研究科	濱中　泰
リン脂質ポリマーを用いた凍結保護液の開発	TG-DTA/DSC	名古屋大学大学院工学研究科	金子　真大
新規な人工金属酵素の開発	PEAQ-ITC	東北大学学際科学フロンティア研究所	岡本　泰典
糖質分解酵素及びプラスチック分解酵素の活性及び基質親和性計測	PEAQ-ITC，TG-DTA/DSC，MALDI	分子科学研究所	中村　彰彦
低分子糖誘導体を基本構造とする日本脳炎ウイルス感染阻害剤の開発	600NMR 溶液，600NMR 溶液 600G	愛知教育大学自然科学系	中野　博文
先端電子スピン共鳴法を用いた酵素ダイナミクスの実測	E680，EMX，E500，E580	鹿児島大学大学院連合農学研究科	矢埜　紅音
有機素材における蛍光寿命・スペクトルに関する調査	蛍光分光	東京理科大学総合研究院 / 東京大学情報基盤センター	早川　智彦
ターピリジン系配位子が配位したシクロメタレート型イリジウム錯体の開発	CCD-1, CCD-2, 微小結晶，蛍光分光，紫外可視近赤外，量子収率	島根大学総合理工学部	矢野なつみ
電子ドープされた有機半導体の構造と磁性	オペランド，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3	大阪工業大学工学部	平郡　諭
スピン依存的な光化学特性を示す開殻電子系の創製	EMX，TG-DTA/DSC	京都大学大学院工学研究科	清水　大貴
次世代低環境負荷型ナノ構造体の構造と物性の解明	微小結晶，粉末Ｘ線，オペランド，EMX，E500，MPMS-7，XL7，MPMS3，TG-DTA/DSC，MALDI，ラマン，FT，蛍光分光，紫外可視近赤外，量子収率，ピコ秒	法政大学生命科学部	緒方　啓典
中空金属錯体への包接によるタンパク質構造解析	MALDI，円二色性	東京大学大学院工学系研究科	中間　貴寛
精密無機材料合成を通じた固液界面の高機能化	SEM，低 SEM	神戸大学大学院工学研究科	南本　大穂
分子の不斉識別を目指したキラルな大環状ホストの開発	PEAQ-ITC，iTC200，量子収率，円二色性	福井大学学術研究院工学系部門	内藤　順也
二酸化炭素還元を指向した銅錯体の合成と構造解析	CCD-1，CCD-2，微小結晶	名城大学理工学部	永田　央
有機分子の構造解析によるホモキラリティ起源の探求	ESCA，円二色性	核融合科学研究所	小林　政弘
高温 ESR 測定を用いたインダンジオン二量体結晶中の C–C 結合開裂評価	EMX	大阪大学大学院工学研究科	焼山　佑美
ESR 測定による鉄クラスター錯体の電子状態解析	E680，E500，E580	京都大学化学研究所	檜垣　達也
カブトムシ外骨格の観察及び元素分析	低 SEM	基礎生物学研究所	森田　慎一
超分子光触媒と有機半導体を複合化したハイブリッド光触媒における界面電子移動の調査	EMX	東京工業大学理学院	榊原　教貴
対称性の低い電子供与性分子を成分とする有機導電性材料の構造と物性	微小結晶，XL7	愛媛大学大学院理工学研究科	白旗　崇
Unveiling of Morphological Change of Electrodes in Rechargeable Battery Systems	SEM，低 SEM	Khon Kaen University	Sutasinee Neramittagapong
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応用化学科	村田　剛志
錯体触媒等開発のための低周波核溶液 NMR と遠赤外スペクトルの測定	FT，600NMR 溶液，600NMR 溶液 600G	岡山大学大学院自然科学研究科	押木　俊之
Clarification of Change of Crystal Structure and Electronic Structure of Electrodes in Rechargeable Battery Systems	オペランド，ESCA，ラマン	Khon Kaen University	Sutasinee Neramittagapong
酸化物超伝導体とマンガン磁性酸化物の界面における交換相互作用に関する研究	MPMS-7，XL7，MPMS3	名古屋大学大学院理学研究科	小森　祥央
生物の磁気受容候補タンパク質の ESR 研究	E680，EMX，E500	埼玉大学大学院理工学研究科	長嶋　宏樹
鉄配位高分子の構造と磁性に与える溶媒吸脱着効果の解明	オペランド，MPMS3	神戸大学大学院理学研究科	高橋　一志
ジラジカル分子のスピン特性評価	EMX，E500，E580	九州大学大学院工学研究院	楊井　伸浩
Chemodenitrification の検討	EMX，E580，600NMR 溶液，600NMR 溶液 600G	愛知県環境局環境調査センター	野田　一平
オリゴマー型伝導体の単量体ユニットの構造とそのスピン物性との相関研究	EMX，E500	東京大学物性研究所	藤野　智子

新奇磁性半導体 $PbPdO_2$ の結晶構造解析	CCD-1，CCD-2	名古屋大学大学院理学研究科	中埜　彰俊
界面磁気近接効果を利用した Pd 薄膜の電子状態変調	XMCD(BL4B)	名古屋大学未来材料・システム研究所	宮町　俊生
原子層磁石と磁性金属単原子膜との層間磁気結合	XMCD(BL4B)	千葉大学大学院工学研究院	山田　豊和
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，3 次元	豊田工業高等専門学校機械工学科	神永　真帆
分裂酵母ライブイメージングとデバイス内部からの選択的回収	マスクレス，3 次元	生命創成探究センター	杉山　博紀
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
界面選択的な振動分光を実現するナノ構造電極基板の開発	3 次元，EB	名古屋工業大学大学院工学研究科	本林　健太
高出力極限固体レーザー実現に向けた結晶表面形態観察	3 次元	理化学研究所放射光科学研究センター	平等　拓範
培養型プレーナーパッチクランプのセンサーチップ微細加工	マスクレス，EB	（株）NANORUS	宇理須恒雄

(3)　所内利用

課　題　名	支援機器等	代　表　者
溶液光化学反応の励起ダイナミクスの研究	蛍光分光，紫外可視近赤外	光分子科学研究領域　長坂　将成
開殻分子性物質の創製と機能創出	低 SEM，CCD-1，CCD-2，微小結晶，オペランド，ESCA，E680，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3，TG-DTA/DSC，MALDI，ラマン，FT，蛍光分光，紫外可視近赤外，量子収率，円二色性，ピコ秒	生命・錯体分子科学研究領域　草本　哲郎
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，3 次元，EB	装置開発室　高田　紀子
金属をスパッタコートした AFM カンチレバ探針の評価	低 SEM，ラマン，ESCA	機器センター　中本　圭一
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
Phase Noise Cancellation System の研究開発	マスクレス，3 次元，EB	光分子科学研究領域　富田　隆文
金電極の反応解析	SPM	機器センター　湊　丈俊
金電極の反応解析	SEM，低 SEM，TEM，CCD-1, CCD-2, 微小結晶，粉末X線，オペランド，ESCA，E680，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3，VP-DSC，PEAQ-ITC，iTC200，TG-DTA/DSC，MALDI，ラマン，FT，蛍光分光，紫外可視近赤外，量子収率，円二色性，ピコ秒，600NMR 溶液	機器センター　湊　丈俊
種々の分子性導体の開発と電子状態解明	E680，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3	機器センター　中村　敏和
有機分子変換を駆動・制御する新しい反応システムの構築	TEM，MALDI	生命・錯体分子科学研究領域　奥村慎太郎
固体 NMR による 2 次元および 3 次元共有結合構造体の構造解析	600NMR 固体	生命・錯体分子科学研究領域　瀬川　泰知
周期的 3 次元有機構造体の創製	SEM，低 SEM，TEM，CCD-1, CCD-2, 微小結晶，粉末X線，オペランド，ESCA，E680，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3，VP-DSC，PEAQ-ITC，iTC200，TG-DTA/DSC，MALDI，ラマン，FT，蛍光分光，紫外可視近赤外，量子収率，円二色性，ピコ秒，600NMR 溶液，600NMR 溶液 600G	生命・錯体分子科学研究領域　瀬川　泰知

金属センサータンパク質の機能解明	PEAQ-ITC，iTC200，蛍光分光，円二色性	生命創成探究センター	南　多娟
キラリティーと結合した局所量子伝導の検出	SPM	協奏分子システム研究センター	佐藤　拓朗
キラリティーと結合した新奇量子伝導の検出とデバイス応用	SEM，低 SEM，TEM，CCD-1, CCD-2, 微小結晶，粉末X線，オペランド，ESCA，E680，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3，VP-DSC，PEAQ-ITC，iTC200，TG-DTA/DSC，MALDI，ラマン，FT，蛍光分光，紫外可視近赤外，量子収率，円二色性，ピコ秒，600NMR 溶液	協奏分子システム研究センター	佐藤　拓朗
有機鉛ペロブスカイトの蛍光寿命の測定	ピコ秒	メゾスコピック計測研究センター	西田　純
キラリティーと結合した新奇量子伝導ナノデバイスの作成	マスクレス，3 次元，EB	協奏分子システム研究センター	佐藤　拓朗
酸化物微粒子の表面観測と物性・機能測定	SPM	物質分子科学研究領域	佐藤　宏祐
超分子化学のツールを用いたタンパク質の構造・機能に関する研究	微小結晶，VP-DSC，PEAQ-ITC，iTC200，TG-DTA/DSC，MALDI，蛍光分光，円二色性，600NMR 溶液	特別研究部門	三橋　隆章
有機・無機協奏物質系における電子構造決定	ARUPS	光分子科学研究領域	福谷　圭祐
鋭利な先端形状をもつ STM 金属探針の開発	SEM，低 SEM，TEM，CCD-1, CCD-2, 微小結晶，粉末X線，オペランド，ESCA，E680，EMX，E500，E580，MPMS-7，XL7，MPMS3，VP-DSC，PEAQ-ITC，iTC200，TG-DTA/DSC，MALDI，ラマン，FT，蛍光分光，紫外可視近赤外，量子収率，円二色性，ピコ秒，600NMR 溶液	物質分子科学研究領域	櫻井　敦教
走査プローブ顕微鏡で得られる画像解析用のナノデバイスの作成	マスクレス，3 次元，EB	機器センター	湊　丈俊
真空窓の透過率・反射率測定	紫外可視近赤外	極端紫外光研究施設	平　義隆
シリコンナノ構造の作製	マスクレス，3 次元，EB	メゾスコピック計測研究センター	熊谷　崇
金属センサータンパク質の NMR 構造研究	600NMR 溶液，600NMR 溶液 600G	生命創成探究センター	南　多娟
シングル nm スケールでの物質の円偏光応答の解明	低 SEM	メゾスコピック計測研究センター	山西　絢介
有機分子の構造解析および機能解明	SEM，600NMR 溶液，低 SEM	生命・錯体分子科学研究領域	椴山　儀恵
生命分子システムの動的秩序形成と高次機能発現の仕組みの探究	VP-DSC，PEAQ-ITC，iTC200，MALDI，円二色性，600NMR 溶液	生命創成探究センター	加藤　晃一
新奇光機能性π共役分子の構造・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
窓付き圧空バルブのガラス窓素材調査	紫外可視近赤外	極端紫外光研究施設	牧田　誠二
放射光光渦用光学素子の開発	マスクレス，3 次元，EB	極端紫外光研究施設(広島大学)	加藤　政博
金属材料をスパッタコートしたカンチレバの作製	マスクレス，3 次元，EB	機器センター	中本　圭一
一方向に運動するロッド型人工 DNA モーターの開発	SEM，低 SEM，TEM，ESCA，ラマン，紫外可視近赤外	生命・錯体分子科学研究領域	原島　崇徳
走査プローブ顕微鏡による機能性ナノ物質の研究	SPM	メゾスコピック計測研究センター	熊谷　崇
顕微ラマン分光によるナノ物質の振動分光イメージング	ラマン	メゾスコピック計測研究センター	熊谷　崇
キラル強誘電酸化物の表面構造・分極評価	SPM	光分子科学研究領域	福谷　圭祐
加熱生成による有機分子薄膜の表面結晶性の評価	SPM	光分子科学研究領域	福谷　圭祐
一分子計測用アルミミラーの製作	マスクレス，3 次元，EB	協奏分子システム研究センター	小杉　貴洋
単結晶モデル光触媒のX線光電子分光による表面組成分析	ESCA	特別研究部門	大西　洋
導電性透過石英基板の作製	マスクレス，3 次元，EB	メゾスコピック計測研究センター	山西　絢介

(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。2023 年度は，SAXS　1 件，600MHz 溶液　1 件，ラマン　1 件，蛍光分光　2 件，オペランド　1 件が採択，走査プローブ　2 件が共同研究された。業種別内訳は大企業 5 件，中小企業 3 件であった。

表 3　2023 年度（令和 5 年度）利用件数一覧（2023 年 4 月～ 2024 年 3 月）

	協力研究	施設利用	所内利用	非公開利用
採択件数	27	106	40	8
実施件数	22	96	35	8
実施日数	604	1385	932	83

マテリアル先端リサーチインフラ事業では，同一申請者から前期後期に別々に申請があっても通年申請と読み替え 1 件と数える。研究課題が変わっても同一申請者からの申請は年間 1 件とする。

表 4　2023 年度（令和 5 年度）合成横断領域活動一覧（2023 年 4 月～ 2024 年 3 月）

		活動実績
人材育成	講習会	技術スタッフ向けの講習会を設備ネットワークと共催し 35 回開催 1,192 名参加
	異分野交流セミナー	異分野交流セミナー 6 回開催　376 名参加
広報活動	学会展示子学会展示	4 件（高分子，天然有機，応用物理，農芸化学）
	出張説明会	12 機関訪問　ARIM ミニセミナー開催（明治大，MORESCO（株），神戸大，大阪電通大，阪大，滋賀県大，農工大，九大，東洋大，岡山大，埼玉大，徳島大）計 103 名参加
	リーフレット	横断領域のリーフレット，パネル作成
機関交流	第 1 回合成横断領域ワークショップ	2023 年 11 月 16 日　分子研開催　18 名参加
	第 2 回合成横断領域ワークショップ	2024 年 2 月 22 日　東京大学開催　23 名参加
	合成各機関訪問	3 件（千歳科技大，九大，信州大）
	横断領域連携ミーティング	6 回開催

表 5　2023 年度（令和 5 年度）異分野技術交流セミナー開催実績（大学連携研究設備ネットワーク事業と共催）

講習会・研修会名	開催場所	開催日	参加人数
地球惑星科学と ESR	分子研（ハイブリッド）	5 月 30 日（火）	64
創薬リード探索の先端と計測技術	分子研（ハイブリッド）	6 月 23 日（金）	72
定量 NMR の利用と応用	分子研（ハイブリッド）	7 月 25 日（火）	55
固液界面における分子反応の解明と最先端解析技術	分子研（ハイブリッド）	8 月 25 日（金）	57
分子構造解析の NMR 活用	分子研（オンライン）	10 月 20 日（金）	63
有機合成 DX への期待	分子研（ハイブリッド）	11 月　2 日（木）	65

5-6　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 7 件開催した。また海外諸機関との共同研究，インターンシップ受入れを継続して行っている。

5-7　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，2023 年度は，「次世代型元素戦略を考える」というタイトルで，化学分野における重要課題の一つである「元素戦略」について議論した。元素戦略は，資源の枯渇・偏在リスク，産出国による資源の取り込みなどの危機感から，我が国の化学分野を中心に 2004 年にその重要性，必要性が世界に先駆けて提唱された。その後，文科省，JST，経産省を中心とした幾つかのプロジェクトを経て，2012 年から文科省「元素戦略プロジェクト（研究拠点形成型）」がスタートし，2022 年 3 月に終了した。その活動においては，磁性材料，触媒･電池材料，電子材料，構造材料の 4 拠点を中心に，減量，代替，循環，規制，新機能の５つのキーワードのもと，幾つかの革新的材料の創製に成功してきた。今後は多様な元素の高度利用，新機能創成，元素の再循環という元素戦略の基本理念に立ち返り，「元素戦略」をさらに発展させる必要がある。今回は 3 名の講師を招き，これまでの元素戦略の成果を総括するとともに，さらなる発展の可能性について議論した。

なお，2023 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 126 名の参加者があった。

開催テーマ：「次世代型元素戦略を考える」

開催日時：2023 年 6 月 15 日（木）　13:10 ～ 16:50

プログラム：

開会挨拶　渡辺芳人（分子科学研究所 所長）

趣旨説明　茶谷直人（大阪大学 名誉教授）

講演

「新概念「元素科学」から国家基盤「元素戦略」へ――創成期 20 年の成果と今後への期待――」
玉尾皓平（豊田理化学研究所 所長，京都大学 名誉教授）

「元素戦略 2.0 ～全元素の活用と循環に向けて」
依光英樹（京都大学 教授）

「今求められる大学発イノベーションと元素戦略」
坂本修一（内閣府科学技術・イノベーション推進事務局長補）

総合討論
司会：所 千晴（早稲田大学 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）

６．研究活動の現状

分子科学研究所は，現在，理論・計算分子科学，光分子科学，物質分子科学，生命・錯体分子科学の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。さらに，極端紫外光研究施設（UVSOR）を始めとする研究施設を擁し，分子の構造と反応と機能についての先鋭的な基礎研究を進め分子の新たな可能性を探っている。

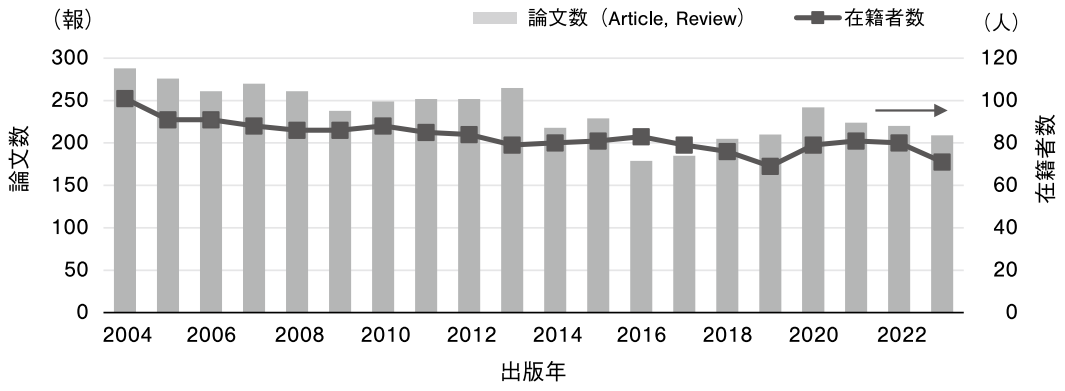
「特別研究部門」では，分子科学分野を世界的に牽引することが期待される卓越教授による研究，分子研の共同利用の施設や設備の高度な利用を進める研究者や，各研究領域の研究を発展的に展開する研究者のクロスアポイントメントによる招へいを開始した。「社会連携研究部門」では，産学官の連携研究の推進を目指している。ここでは，コンソーシアムを作り所外からのニーズを反映するオープンイノベーションの拠点として研究室を運営している。「小型集積レーザーコンソーシアム」は，平等拓範特任教授をリーダーとして，民間企業を中心に 41 機関の会員とともに研究を推進している。

6-1　論文発表状況

分子研では毎年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数の推移を示すが，両者は概ね比例関係にあり，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	在籍者数[*2]
2004	285	3	101
2005	269	7	91
2006	254	7	91
2007	264	6	88
2008	252	9	86
2009	233	5	86
2010	242	7	88
2011	242	10	85
2012	243	9	84
2013	259	6	79
2014	204	14	80
2015	219	10	81
2016	172	7	83
2017	178	7	79
2018	190	15	76
2019	199	11	69
2020	226	16	79
2021	211	13	81
2022	201	19	80
2023	207	2	71

＊1　Scopus 調べ（2024 年 3 月 21 日現在）。
＊2　教授，准教授・助教授，主任研究員，助教・助手の総計。教授，准教授は，卓越・特任・クロスアポイントメント・客員教員を含む。



論文数と在籍者数の推移

6-2　メゾスコピック計測研究センター

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

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

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

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

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

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

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

4 月に豊田工業大学に，それぞれ転出した。これらの研究領域の扱いについては今後の検討となる。一方，2018 年 5 月には杉本敏樹准教授（物質量子計測研究部門）が物質分子科学研究領域からの，また 2019 年 11 月には江原正博教授（繊細計測研究部門）と南谷英美准教授（物質量子計測研究部門）が理論･計算分子科学研究領域からの併任として就任した。南谷准教授は 2022 年 9 月に大阪大学に転出した。2021 年 4 月からは，熊谷 崇准教授が広帯域相関計測解析研究部門に専任で就任した。

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

繊細計測研究部門

岡　本　裕　巳（教授）（2000 年 11 月 1 日着任）

山西　絢介（特任助教）
AHN, Hyo-Yong（特任助教（新分野創成センター））
CHENG, An-Chieh（特任助教）
成島　哲也（特別訪問研究員）
石川　晶子（技術支援員）
伊藤　敦子（事務支援員）

A-1) 専門領域：ナノ光物理化学

A-2) 研究課題：

a) キラルナノ・マイクロ物質における局所的なキラル光学効果とその応用

b) 光によるナノ物質の力学操作手法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 光学活性分光手法と顕微イメージングを組み合わせた新手法を開発し，それらを用いたナノ・マイクロ物質の局所光学活性に関する基礎研究，及び応用研究を推進している。ナノレベルの空間分解能での測定が可能な近接場光学顕微鏡による光学活性イメージングでは，主にキラルな構造を持つ金ナノ構造体を対象とし，局所的な円二色性信号が巨視的な円二色性信号に比べて極めて大きくなること，高い対称性を持つアキラルな金属ナノ構造においても局所的には強い光学活性を示すこと，局所的な誘起双極子が局所的な円偏光場の起源になること等，幾つかの基礎的に重要な結果を得た。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ている。キラルな構造を持つ金属有機構造体（MOF）微結晶の掌性同定に成功しており，多数の微結晶の掌性同定に有効であることを示した。液晶分子集合体をテンプレートとした螺旋状金微粒子集合体では，螺旋の掌性による円二色性信号の差を検出することに成功した。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。この他に主として所外の研究者と共同で，様々なキラルナノ物質の観察・同定に用いる研究を推進し，また円二色性イメージングの医療応用を想定した基礎研究も，医科学分野の研究者と共同で開始している。更に感度や測定速度を向上させる試み，波長範囲を拡張する試み等を推進している。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ている。

b) レーザー光を強く集光すると，その焦点に微粒子がトラップされる（光トラッピング）。非線形効果，共鳴効果，偏光を有効利用することで，このような光による力学的マニピュレーションの自由度が格段に広がることが予想される。この研究展開を図ることを，現在の研究活動の今一つの柱としている。キラルな物質においては，左右円偏光に対する力学的な作用が異なることが期待され，我々はキラル金ナノ微粒子の円偏光による光トラッピングを行いその挙動を調べた。その結果，光トラッピングに関する従来知られている機構では説明困難な部分が見いだされ，理論的

に解釈した。これにより，キラル物質の光マニピュレーションの基礎となる知見を得た。また現在，このような光の力学作用を利用した，原子間力顕微鏡の原理に基づく顕微イメージング法（光誘起力顕微鏡）でナノ構造上のキラルな光場を可視化する手法の開発も行っている。

B-1) 学術論文

K. ENDO, S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA, Y. TOGAWA and H. OKAMOTO, “Circular Dichroism of Pseudo-Two-Dimensional Metal Nanostructures: Rotational Symmetry and Reciprocity,” *J. Chem. Phys.* **159(23)**, 234706 (2023). DOI: 10.1063/5.0178943

J. YAMANISHI, H.-Y. AHN and H. OKAMOTO, “Nanoscopic Observation of Chiro-Optical Force,” *Nano Lett.* **23(20)**, 9347–9352 (2023). DOI: 10.1021/acs.nanolett.3c02534

B-2) 国際会議のプロシーディングス

J. YAMANISHI, H.-Y. AHN and H. OKAMOTO, “Nanoscopic Visualization of Chiro-Optical Field in Photoinduced Force Microscopy,” *Proc. SPIE* **12606**, 126060P (2023). DOI: 10.1117/12.3008343

B-4) 招待講演

H.-Y. AHN, “Chiroplasmonic nanoparticle for strong chiral light emission,” 物質・デバイス領域共同研究セミナー , 札幌, 2023年 11月.

岡本裕巳,「キラルな光−物質相互作用によるイメージング計測，物理的・化学的効果」, 第 84回応用物理学会秋季学術講演会 , 熊本 , 2023年 9月.

岡本裕巳,「局所的なキラル光学効果を観測する顕微イメージング」, 第 24回プラズモニック化学シンポジウム , 東京 , 2023年 6月.

H. OKAMOTO, “Chiro-Optical Effects of Nano-/Micro-Materials: Microscopic Imaging and Chiral Light-Matter Interaction,” 19th International Conference on Chiroptical Spectroscopy (CD2023), Hiroshima (Japan), September 2023.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA and T. NARUSHIMA, “Chiro-Optical Microscopic Imaging of Nano-/Micro-Materials,” International Conference on Materials Science, Engineering and Technology, Singapore 2023, Singapore (Singapore), September 2023.

H. OKAMOTO, “Chiro-optical effects of plasmonic materials: Microscopic imaging and chiral near-field interaction with molecules,” The 31st International Conference on Photochemistry (ICP2023), Sapporo (Japan), July 2023.

H. OKAMOTO, J. YAMANISHI and H.-Y. AHN, “Chiro-optical gradient forces in chiral nanomaterials,” 13th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META2023), Paris (France), July 2023.

H. OKAMOTO, “Imaging with Local Chiro-Optical Effects and Chiral Light-Matter Interaction,” Department Seminar, Department of Materials Science and Engineering, Seoul National University, Seoul (Korea), July 2023.

J. YAMANISHI, T. TORIMOTO, H. ISHIHARA, H. OKAMOTO and Y. SUGAWARA, “Nanospectroscopy of Optical Force,” The 14th Asia-Pacific Conference on Near-Field Optics (APNFO14), Busan (Korea), June 2023.

H. OKAMOTO, “Imaging with Local Chiro-Optical Effects and Chiral Light-Matter Interaction,” Open Seminar, The University of Glasgow, Glasgow (U. K.), June 2023.

H. OKAMOTO, “Chiro-optical microscopic imaging of plasmonic materials and chiral near-field interaction with molecules,” 9th International Conference on Antennas and Electromagnetic Systems (AES2023), Torremolinos (Spain), June 2023.

B-5) 特許出願

特願 2022-120944,「光誘起力測定装置，光誘起力顕微鏡及び光誘起量測定方法」, 山西 絢介，岡本 裕巳（自然科学研究機構）, 2022 年.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

プラズモニック化学研究会副会長 (2020–).

学会の組織委員等

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

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

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

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

日本学術会議会員 (2020–2026)，化学委員会幹事 (2020–2023)，化学委員会物理化学・生物物理化学分科会委員長 (2020–2023)，化学委員会分析化学分科会世話人 (2020–2023)，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 連携協議会委員 (2023–2024).

B-8) 大学等での講義，客員

早稲田大学理工学術院, 客員教授,「先端ナノ光物理化学特論」, 2023 年 9 月–2024 年 3 月.

早稲田大学理工学術院, オムニバス講義のコマ担当,「理工文化論」, 2023 年 4 月– .

B-10) 競争的資金

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

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

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

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

C) 研究活動の課題と展望

着任以来，ナノ構造物質の観察と，特徴的な光学的性質，励起状態の超高速ダイナミクス等を探るための，近接場分光イメージング装置を開発し，試料の測定を行ってきた。その中で近接場光学活性イメージング法を開発して金属ナノ構造の局所光学活性，キラルな光場の空間構造の解析に用い，そこからグループの主要な研究内容をキラル物質の局所光学活性のイメージングにシフトした。金属ナノ構造の近接場光学活性イメージングによって，独自の実

験的情報を得ることができ，プラズモン由来の強くねじれた局所光場の存在，また対称性の高いアキラルな構造でも局所的に強い光学活性を示すという，ユニークな成果も得られた。これらの研究から得られたプラズモンのキラリティに関する性質を基礎として，キラルプラズモンが分子の特性に及ぼす効果に関する研究にも展開し，高い円偏光度を示す発光物質系を見出しその起源を解明するなど，成果が得られるようになってきた。通常の（遠方場）顕微鏡で精度の高い円二色性イメージングを可能とする装置開発も行い，これは物質開発，生物科学，結晶学等の様々な分野の研究者から興味を持って頂いている。これらの近接場及び遠方場円二色性イメージングは，今後様々なナノ構造光学活性物質の機能解明のための有力な実験手法になることを期待しており，国内外との共同研究を数件行っている。円二色性顕微鏡を更に汎用性の高い装置とする開発を継続し，企業との協力も視野に入れている。また物質および光のキラリティは磁性との相関においても興味が持たれ，ナノ光学の観点からこの方向への研究展開について実際の共同研究も行っている。更に，円二色性イメージングの医療応用に関する共同研究も開始している。微粒子の光による力学的マニピュレーションについても，キラル微粒子の光トラッピングに関する新たな成果が得られ，その展開も進めたい。これらを総合した新たな方向への展開として，キラルな光－物質相互作用による，物質キラリティの創出の試みを進める科研費学術変革領域研究(A)が今般採択され，これに貢献していきたい。

広帯域相関計測解析研究部門

熊　谷　　崇（准教授）（2021 年 4 月 1 日着任）

西田　純（助教）
WANG, Yu（特任研究員）
伊藤　敦子（事務支援員）

A-1) 専門領域：物理化学，走査プローブ顕微鏡，近接場分光

A-2) 研究課題：探針増強顕微分光の先端計測を基軸としたナノ科学の研究

a) 超高真空・低温探針増強顕微分光を応用したプラズモニックナノ接合における光と物質の相互作用についての研究

b) 超短パルスレーザーを用いた探針増強顕微分光に基づく時空間極限における顕微分光の開発と超高速非平衡ダイナミクスについての研究

c) 超高速・超広帯域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についての研究

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（プラズモン増強場）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顕微分光の開発を行っている。具体的には，科研費・帰国発展研究に採択された研究課題として，低次元物質におけるフォノンダイナミクスを原子スケールで直接観測する研究に取り組んでいる。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，超高速・超広帯域パルスレーザーとを組み合わせた多次元・多変量ナノ顕微分光の開発を行っている。この新しい先端計測技術によって，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くことを目指している。これは分子科学研究所への着任に伴い新しく開始した研究課題であり，JST 創発的研究支援事業に採択されている内容である。最近の成果として，強相関物質である二酸化バナジウムのナノ粒子を計測し，その特徴的な絶縁体－金属相転移の微視的機構を解明した研究を報告している［*J. Phys. Chem. C* **127**, 16485 (2023)］。

B-1) 学術論文

J. NISHIDA, A. OTOMO, T. KOITAYA, A. SHIOTARI, T. MINATO, R. IINO and T. KUMAGAI, "Sub-Tip-Radius Near-Field Interactions in Nano-FTIR Vibrational Spectroscopy on Single Proteins," *Nano Lett.* **24(3)**, 836–843 (2024). DOI: 10.1021/acs.nanolett.3c03479

C. LIN, F. KRECINIC, H. YOSHINO, A. HAMMUD, A. PAN, M. WOLF, M. MÜLLER and T. KUMAGAI, "Continuous-Wave Multiphoton-Induced Electron Transfer in Tunnel Junctions Driven by Intense Plasmonic Fields," *ACS Photonics* **10(10)**, 3637–3646 (2023). DOI: 10.1021/acsphotonics.3c00714

K. NISHIKAWA, J. NISHIDA, M. YOSHIMURA, K. NAKAMOTO, T. KUMAGAI and Y. WATANABE, "Metastability in the Insulator–Metal Transition for Individual Vanadium Dioxide Nanoparticles," *J. Phys. Chem. C* **127(33)**, 16485–16495 (2023). DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c02151

S. LIU, F. P. BONAFE, H. APPEL, A. RUBIO, M. WOLF and T. KUMAGAI, "Inelastic Light Scattering in the Vicinity of a Single-Atom Quantum Point Contact in a Plasmonic Picocavity," *ACS Nano* **17(11)**, 10172–10180 (2023). DOI: 10.1021/acsnano.3c00261

R. WILCKEN, J. NISHIDA, J. F. TRIANA, A. JOHN-HERPIN, H. ALTUG, S. SHARMA, F. HERRERA and M. B. RASCHKE, "Antenna-Coupled Infrared Nanospectroscopy of Intramolecular Vibrational Interaction," *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **120(20)**, e2220852120 (2023). DOI: 10.1073/pnas.2220852120

J. NISHIDA, P. T. S. CHANG, J. Y. YE, P. SHARMA, D. M. WHARTON, S. C. JOHNSON, S. E. SHAHEEN and M. B. RASCHKE, "Nanoscale Heterogeneity of Ultrafast Many-Body Carrier Dynamics in Triple Cation Perovskites," *Nat. Commun.* **13**, 6582 (2022). DOI: 10.1038/s41467-022-33935-0

B-2) 国際会議のプロシーディングス

J. NISHIDA, A. OTOMO, R. IINO and T. KUMAGAI, "Sub-Tip-Radius Near-Field Interactions in Nano-FTIR Vibrational Spectroscopy on Single Protein Particles," *Enhanced Spectroscopies and Nanoimaging 2023*, 1265403 (2023). DOI: 10.1117/12.2676631

B-4) 招待講演

西田　純,「赤外ナノ分光で挑むバルク物性とナノ物性の境界線」, 日本物理学会 2024春季大会, オンライン開催, 2024年3月.

熊谷　崇,「Atomic-Scale Spectroscopy in Plasmonic Tunneling Junction」, 一般社団法人レーザー学会学術講演会第44回年次大会, 東京, 2024年1月.

熊谷　崇,「Exploring Atomic and Molecular Scale Structures and Dynamics by Tip-Enhanced Raman Spectroscopy」, 表面界面スペクトロスコピー 2023［ISSP ワークショップ］, 東京, 2023年12月.

西田　純,「赤外近接場分光によるキャリア・励起子の局所ダイナミクスの解明」, 自然科学研究機構先端光科学研究分野プロジェクト研究会, 岡崎, 2023年11月.

西田　純,「赤外ナノ・超高速分光の現状と赤外放射光の可能性」, UVSOR–SPring-8赤外ビームライン合同ユーザーズミーティング, 岡崎, 2023年9月.

J. NISHIDA, “Probing local carrier and exciton dynamics in spatially confined nanomaterials with infrared nano-spectroscopy,” Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2023 (JVSS 2023), Nagoya (Japan). November 2023.

T. KUMAGAI, “Atomic-Scale Optical Spectroscopy at Surfaces,” SPIE Nanoscience + Engineering, San Diego (USA), August 2023.

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 (2023–).

B-8) 大学等での講義，客員

北海道大学, 客員准教授, 2020年4月– .

京都大学大学院理学研究科, 客員准教授, 2023年4月–2024年3月.

B-10) 競争的資金

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

科学技術振興機構創発的研究支援事業（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).

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

光科学技術研究振興財団研究助成,「超高速赤外ナノイメージングによる励起子・キャリアの局所ダイナミクス」, 西田　純 (2023年度).

C)　研究活動の課題と展望

探針増強顕微分光の先端計測を研究室の柱として物理化学，分子科学，物質科学，そしてナノ科学にまたがる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していきたいと考えている。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・超広帯域探針増強分光については，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。国際的な研究活動として，2021年に研究協力協定を締結したフリッツ・ハーバー研究所（ベルリン，ドイツ）との共同研究や学術交流についても積極的に推進していきたいと考えている。

6-3　協奏分子システム研究センター

6-3-1　経緯と現状，将来構想

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

このような目的の達成に向けて，微細なナノスケールの分子科学からタンパク質や細胞のようなマクロで不均一な分子科学まで研究者を幅広く募り，「階層分子システム解析研究部門」，「機能分子システム創成研究部門」，「生体分子システム研究部門」の 3 部門体制で研究活動を展開している。現在，専任 PI が 3 名（秋山教授，山本教授，倉持准教授），併任 PI が 5 名（斉藤教授，青野教授，加藤教授，飯野教授，古賀准教授）の計 8 名となっている。未踏の領域に切り込む若手研究者から，分野をリードするシニア研究者まで，異なる学問領域の研究者が集う，幅広くも層の厚いメンバー構成となっている。

2023 年度の特筆すべき研究成果として，CISS 効果に基づいたエナンチオ選択性に関する共同研究（山本グループ）が科学雑誌「*Nature Communications*」誌に掲載された。その他，階層分子システム解析研究部門からは，タンパク質デザインに関する共同研究成果が「*Nature Chemistry*」誌に（古賀グループ）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）
BOUDRIAH, Nihad（インターンシップ）
ABDULLA, Farida（インターンシップ）
鷲尾　みどり（技術支援員）
杉坂　かな恵（技術支援員）
大原　さとみ（技術支援員）
山本　優里桂（技術支援員）
谷浦　愛子（技術支援員（派遣））
蜂須賀　円（技術支援員（派遣））
鈴木　博子（事務支援員）

A-1) 専門領域：生物物理学，時間生物学

A-2) 研究課題：

a) タンパク質時計が奏でる概日リズムの分子科学的解明

b) X線溶液散乱による生体分子システムの動的構造解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) シアノバクテリアをモデル系とした概日時計研究に取り組み，独自性の高い数々の研究（Furuike *et al*., *Sci. Adv.* 2022; Furuike *et al., Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2022; Furuike *et al., Commun. Phys.* 2022; ; Mukaiyama *et al., Biochem. J.* 2022; Simon *et al., Biophys. Physicobiol.* 2022; Ito-miwa *et al., Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2020; Mukaiyama *et al., Sci. Rep.* 2018; Abe *et al., Science* 2015）や国際基調講演（SRBR 2022; 5th Asian Forum on Chronobiology 2021; ELSI Symposium 2020; V-WCC 2019）をとおして，「概日時計システムの周波数特性が，ごく限られた種類の構成因子にエンコードされている」という新概念を提示した（長瀬研究振興賞 2022；日本学術振興会賞 2016；文部科学大臣表彰若手科学者賞 2008；日本生物物理学会若手奨励賞 2007；2006 SAS Young Scientist Prize from IUCr）。その間，複数の研究プロジェクト（さきがけ研究［2005 〜 2008 年度］，若手研究 (A)［2010 〜 2012 年度］，基盤研究 (B)［2013 〜 2015 年度］, 基盤研究 (S)［2017 〜 2021 年度］, 基盤研究 (S)［2022 〜 2026 年度］等）で代表者を務め, 国内外の研究コミュニティの拡大に尽力するとともに（S. Akiyama, *Biophys. Physicobiol.* 2021; S. Akiyama, *Circadian Rhythms in Bacteria and Microbiomes* 2021; S. Akiyama, *Biophys. Rev.* 2020; Mukaiayma *et al*., *Biol. Rhythms* 2019; Akiyama *et al*., *Biol. Clocks* 2017; S. Akiyama, *Cell. Mol. Life. Sci.* 2012），直近では以下に詳述する波及効果の高い成果（5 件）を輩出してきた。

一つ目は，KaiC に隠されたアロステリック制御の解明である（Furuike *et al*., *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。

二つ目は，KaiC の構造変化を液中で実時間検出できる蛍光プローブの開発である（Mukaiyama *et al.*, *Biochem. J.* 2022）。時間分解 Trp 蛍光分光法を用いることにより，概日リズムの特定の位相で，KaiC の CII リングの内径側に顕著な構造変化が起こることを解明した。X線結晶構造解析の結果，419 番目の Trp 側鎖がヘリックス－コイル転移を起こすリン酸化スイッチの方向に向いていることが明らかになった。開発された Trp 蛍光プローブは，周期決定に関わる KaiC 準安定状態の捕捉に大きく貢献することが見込まれる。

三つ目は，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。

四つ目は, 超短周期（0.6 d = 15 h）から超長周期（6.6 d = 158 h）にわたる多様なリズムを表出せしめる同一サイト（Y402）点変異群の発見である（Ito-miwa *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2020）。温度補償された 600% に及ぶ周期長変化を説明する発振モデルは皆無であり, 本発見を機に, 既存モデルの根本的な書き換えを迫られるであろう。本発見は，概日リズムの基本設計を原点に立ち返って議論しなおすきっかけを世界中の研究者に与え得るだけでなく，概月リズム（海洋生物の産卵，人間の月経周期）や概年リズム（動物の冬眠／繁殖，植物の花芽形成）の設計原理にも指針を与え得るもので，関連分野でも相当の関心を集めている。

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。

B-1) 学術論文

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," *bioRxiv* 2024.03.21.584037 (2024). DOI: 10.1101/2024.03.21.584037

Y. FURUIKE, E. YAMASHITA and S. AKIYAMA, "Structure-Function Relationship of KaiC around Dawn," *Biophys. Physicobiol.* **21**, e210001 (2023). DOI: 10.2142/biophysico.bppb-v21.0001

B-3) 総説，著書

Y. FURUIKE, A. MUKAIYAMA and S. AKIYAMA, "Master Allostery in Clock Protein KaiC Orchestrates Circadian Rhythm," *SPring-8/SACLA Research Frontiers 2022*, 26–27 (2023).

古池美彦,「生命は「アロステリー」でリズムを奏でる」, *生物物理*, **63(3)**, 173–174 (2023). DOI: 10.2142/biophys.63.173

古池美彦,「時計タンパク質KaiC の構造にみる概日リズムの起源」, *日本結晶学会誌*, **65(2)**, 113–121 (2023). DOI: 10.5940/jcrsj.65.113

B-4) 招待講演

秋山修志,「概日時計の これまでとこれから」, 大学共同利用機関シンポジウム 2023「現代の社会問題に挑む日本の科学」, 東京, 2023年 10月.

古池美彦,「概日時計タンパク質のアロステリックな律動を捉える構造生物化学」, 第 94回SPring-8先端利用技術ワークショップ／大阪大学蛋白質研究所セミナー「SPring-8 における蛋白質構造生物学研究の現状と将来について」, 大阪, 2023年 9月.

古池美彦,「時刻情報を生成／統合／伝達するシアノバクテリア時計タンパク質KaiC の分子構造」, 日本時間生物学会年会シンポジウム「ポスト転写イベントに潜む計時分子ダイナミクス」, 横浜, 2023年 9月.

B-6) 受賞，表彰

古池美彦, 化学情報協会JAICI 賞 (2023).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会理事 (2023–2025).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

日本学術会議連携会員 (2020–2024).

SPring-8長期利用分科会委員 (2019–).

日本学術振興会学術システム研究センター研究員 (2023–2026).

名古屋大学大学院理学研究科卓越大学院プログラム運営委員会・拡大実行委員会委員 (2024).

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

理化学研究所, 客員研究員, 2021年4月–2024年3月.

理化学研究所, 客員技師, 2021年4月–2024年3月.（古池美彦）

東京理科大学, 講義「一般教養科目」, 2023年.（古池美彦）

B-10) 競争的資金

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

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

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).

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

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

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

C) 研究活動の課題と展望

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

古　賀　信　康（教授（兼任*））（2022 年 10 月 1 日～ 2023 年 9 月 30 日）

小杉　貴洋（助教）
鈴木　規子（技術支援員）
鈴木　博子（事務支援員）

＊大阪大学蛋白質研究所

A-1) 専門領域：生物物理学，タンパク質分子デザイン

A-2) 研究課題：

a) 計算機および生化学的アプローチによるタンパク質分子デザイン

A-3) 研究活動の概略と主な成果

望みの機能を持ったタンパク質分子を自在にデザインすることが可能になれば，細胞の制御・設計や医療への貢献，加えて新規酵素やマテリアル開発による産業への応用が期待される。我々は，タンパク質分子を主鎖構造から完全にゼロからデザインすること，更には自然界のタンパク質分子を改造することで，望みのタンパク質分子を創製する理論と技術の開発を行う。

a) 回転対称多量体タンパク質のデザイン；多くのタンパク質は 3 次構造を形成した後に 4 次構造を形成することで機能を発現する。これまでにデザインしたタンパク質をビルディングブロックとして組み合わせることで，多様な形状の新規回転対称多量体をデザインする技術を開発する。これまでに開発した技術を用いて，2 量体および 5 量体の設計に成功し，6 量体に関してもデザインしたタンパク質のひとつが，6 量体を形成していることを示唆する結果を得ている。

b) ヘム結合タンパク質のデザイン；これまでにデザインしたタンパク質をビルディングブロックとして組み合わせることで，望みの小分子に結合するタンパク質分子をデザインする手法の開発を行う。特に，ヘム結合タンパク質を例として研究を行っている。これまでにデザインしたタンパク質を，2 量体のコイルドコイルを形成する α ヘリックスの NC 末端それぞれに連結させることで，連結したドメイン間に小分子結合サイトを構築し，ヘム結合タンパク質をデザインした。デザインしたタンパク質５つを発現，精製したところ，１つについて収量が多く，また 2 量体を形成しているものがあり，ヘム滴定を行ったところ，ヘム結合を示唆する結果が得られている。

c) ATP 結合タンパク質のゼロからのデザイン；自然界には ATP を加水分解して動的機能を発現するタンパク質が存在する。タンパク質が ATP を加水分解するためのミニマムな装置を明らかにすることを目的とし，まず ATP を結合するタンパク質のゼロからのデザインを行った。これまでに発見した３つのルールとヌクレオチド結合に重要とされる P-loop モチーフを用いることで，計算機上で ATP 結合タンパク質のデザインを行った。生化学実験により，デザインしたタンパク質は安定な構造を形成し，ATP に対して 800uM くらいの結合親和性を示した。さらに，結晶化して構造を解くことにより，設計通りの構造をしていることを確認した。今後は，より活性を向上させることを目指す。

d) 動的機能を発現する自然界のタンパク質 V-ATPase の改造；自然界には，ATP 加水分解のエネルギーを利用して構造変化することで機能を発現するタンパク質が存在する。このようなタンパク質がどのようにして動的機能を発現しているのか，回転モータータンパク質である V-ATPase を改造することで，そのメカニズムに迫った。V-ATPase の非触

媒活性部位に，ヌクレオチド結合サイトを設計することで，V-ATPase に新規アロステリック機構を付与し，V-ATPase の回転を加速することに成功した。さらに，ここで設計した V-ATPase と天然の V-ATPase を比較することで，天然の V-ATPase の複合体状態に関する知見も得られている。

e) タンパク質構造の合理安定化法の開発；タンパク質の耐熱性を向上させることは，タンパク質を産業利用する上で重要である。タンパク質をゼロからデザインする技術を応用して，自然界のタンパク質を合理的に安定化する手法の開発を行った。開発した手法を用いて，PET 製品のバイオリサイクルに重要な PET 分解酵素の安定化に成功した。

f) α ヘリカルタンパク質構造のゼロからのデザイン；α ヘリカル構造を自在にデザインするための手法の開発を行った。まず自然界のタンパク質構造を解析し，ヘリックス同士をつなぐ典型的なループパターン 18 種を明らかにしている。これらのループパターンを組み合わせることで，計算機上で疎水性コアパッキングを形成し，加えて表面形状が多様な α ヘリカル構造を構築する手法を開発した。さらに，これら α ヘリカル構造に対して，側鎖－側鎖もしくは主鎖－側鎖水素結合が形成されるよう側鎖設計の手法を開発した。また，これまでは 5，6 本の α ヘリックス構造しか設計することができなかったが，それ以上の本数の α ヘリックスからなる α ヘリカル構造を設計するための手法を開発した。

B-1) 学術論文

T. KOSUGI, T. IIDA, M. TANABE, R. IINO and N. KOGA, “Design of Allosteric Sites into Rotary Motor V_1-ATPase by Restoring Lost Function of Pseudo-Active Sites,” *Nat. Chem.* **15**, 1591–1598 (2023). DOI: 10.1038/s41557-023-01256-4

S. MINAMI, N. KOBAYASHI, T. SUGIKI, T. NAGASHIMA, T. FUJIWARA, R. TATSUMI-KOGA, G. CHIKENJI and N. KOGA, “Exploration of Novel αβ-Protein Folds through De Novo Design,” *Nat. Struct. Mol. Biol.* **30(8)**, 1132–1140 (2023). DOI: 10.1038/s41594-023-01029-0

K. SAKUMA, N. KOBAYASHI, T. SUGIKI, T. NAGASHIMA, T. FUJIWARA, K. SUZUKI, N. KOBAYASHI, T. MURATA, T. KOSUGI, R. TATSUMI-KOGA and N. KOGA, “Design of Complicated All-α Protein Structures,” *Nat. Struct. Mol. Biol.* **31**, 275–282 (2024). DOI: 10.1038/s41594-023-01147-9

Y. KAMADA, C. UMEDA, Y. MUKAI, H. OHTSUKA, Y. OTSUBO, A. YAMASHITA and T. KOSUGI, “Structure-Based Engineering of Tor Complexes Reveals that Two Types of Yeast TORC1 Produce Distinct Phenotypes,” *J. Cell Sci.* **137**, jcs261625 (2024). DOI: 10.1242/jcs.261625

B-3) 総説，著書

小杉貴洋,「タンパク質設計技術で分子モーターを加速する」, *現代化学*, 2023 年 11 月号 **(632)**, 24–27 (2023).

小杉貴洋,「失われた機能を復活させてアロステリック部位を設計する方法：回転型分子モーター V_1-ATPase で実証」, *蛋白質科学会アーカイブ*, **16**, エッセイ 013 (2023).

B-4) 招待講演

小杉貴洋,「蛋白質複合体が生み出す協奏的な機能の合理的な制御を目指して」, 第 23 回日本蛋白質科学会年会シンポジウム「加速するタンパク質デザイン」, 名古屋, 2023 年 7 月.

古賀信康,「De novo design of proteins with novel folds: How many possible folds exist?」, 生体機能関連化学部会若手の会第 34 回サマースクール, 愛知, 東浦町, 2023 年 7 月.

古賀信康,「De novo design of proteins with topologies not found in nature」, 理研シンポジウム：Synthetic Biology—生物学の新たな潮流—, 理化学研究所, 和光, 2023 年 8 月.

小杉貴洋,「タンパク質設計技術による細胞内回転型分子モーターの制御を目指して」, 第 12 回分子モーター討論会, 仙台, 2023 年 9 月.

小杉貴洋,「計算機設計技術を用いたスーパー酵素の創出」, 第 96 回日本生化学会大会シンポジウム「情報計算科学にもとづく酵素の創成と応用～スーパー酵素が切り拓く生化学の新時代～」, 福岡, 2023 年 11 月.

小杉貴洋,「Toward understanding roles of yeast Tor complexes by structure-based engineering approach」, 第 61 回日本生物物理学会 シンポジウム「トア複合体による細胞応答の仕組みを理解する」, 名古屋, 2023 年 11 月.

小杉貴洋,「Toward developing a new field of biology based on protein design」, The 2157th NIG Biological Symposium, 三島, 2023 年 11 月.

古賀信康,「Basis for Protein Design」, 計算生命科学の基礎 10——融合する AI，データサイエンス，生命科学，そして次の 10 年を見据えて——，オンライン開催，2023 年 11 月.

小杉貴洋,「タンパク質設計技術による定量生物学を目指して」, 定量生物学の会第十一回年会, 東京, 2024 年 1 月.

小杉貴洋,「Allosteric control of rotary molecular motor by using protein design method」, OIST-JST Joint Meeting, 沖縄, 2024 年 1 月.

小杉貴洋,「構造解析が導くタンパク質の設計・改造とその理解」, 2023 年度量子ビームサイエンスフェスタ, 水戸, 2024 年 3 月.

小杉貴洋,「タンパク質設計技術は単細胞生物研究に役立つのか？」, 2023 年度国立遺伝学研究所研究会「微生物の細胞複製システムから紐解く生命のデザイン」, 三島, 2024 年 3 月.

古賀信康,「合理デザインによる新規タンパク質の創製」, 新潟大学コアステーション「ユビキタスグリーンケミカルエネルギー（UGCE）連携教育研究センター」主催第 14 回研究シンポジウム, 新潟, 2024 年 3 月.

N. KOGA, “Design of protein structures from scratch: The number of possible topologies ?” The 20th ABC-InFO Lecture and Networking, Online, February 2024.

N. KOGA, “Exploration of novel protein folds through de novo design,” The molecular organization of living systems, Aarhus University, Aarhus (Denmark), September 2023.

T. KOSUGI, “Allosteric control of rotary molecular motor V_1-ATPase by redesigning pseudo-active sites,” The East Asia Single-Molecule Biology Symposium 2023, Wenzhou (China), September 2023.

N. KOGA, “Exploration of novel protein folds through de novo design: How many possible folds exist?” The 21st KIAS Conference on Protein Structure and Function, Seoul (Korea), October 2023.

N. KOGA, “Laboratory for Protein Design,” IPR Retreat 2023, 大阪大学銀杏会館, Osaka (Japan), November 2023.

T. KOSUGI, “Control of functions exerted by protein complexes using protein design methods,” 16th Eurasia Conference on Chemical Sciences 2023, Bangkok (Thailand), December 2023.

N. KOGA, “Exploration of novel protein topologies through de novo design,” The 27th SANKEN International Symposium: Science Chat in AI and Metaverse, The Awaji Yumebutai, Awaji (Japan), January 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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

学会の組織委員等

第 23 回日本蛋白質科学会年会ワークショップ「高次構造体のはたらきを観る！」オーガナイザー (2023).（小杉貴洋）

第 61 回日本生物物理学会年会実行委員 (2023).（小杉貴洋）

第 61 回日本生物物理学会年会シンポジウム「トア複合体による細胞応答の仕組みを理解する」オーガナイザー (2023).（小杉貴洋）

学会誌編集委員

生物物理学会誌編集委員 (2022–).

B-10) 競争的資金

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

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),「新規タンパク質デザインによる糖鎖修飾ルールの解明」, 古賀信康 (2023 年度).

科学技術振興機構さきがけ研究,「タンパク質複合体を合理的に改造し，細胞内機能を理解・制御する」, 小杉貴洋 (2020 年度–2023 年度).

自然科学研究機構 ExCELLS 若手奨励研究,「人工設計タンパク質を多量体化することでヘム結合部位を創る」, 小杉貴洋 (2021 年度–2023 年度).

B-11) 産学連携

共同研究, キリンホールディングス（株),「PET 分解酵素の開発」, 古賀信康 (2022 年–2023 年).

C) 研究活動の課題と展望

これまでの研究活動により様々な形状のタンパク質構造を設計する技術の開発に成功した。蛋白研では，これらの技術を用いて機能タンパク質を設計するとともに，設計したタンパク質構造をビルディングブロックとして組み合わせ，より巨大かつ複雑な形状のタンパク質を設計する技術開発に取り組む。

倉　持　　光（准教授）（2020 年 4 月 1 日着任）

米田　勇祐（助教）
BADARAU, Adrian（インターンシップ）
落合　奎介（大学院生）
神谷　美穂（事務支援員）

A-1) 専門領域：物理化学，超高速分光，非線形分光，超短パルス発生

A-2) 研究課題：

a) 新規超高速非線形分光法の開発と応用

b) 単一分子レベルでの新規分光法の開発と応用

c) 先端的超高速分光による凝縮相複雑分子の機能・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) 凝縮相多原子分子の化学反応は多次元的に表現される複雑なポテンシャルエネルギー曲面（PES）上で進行する。近年我々が初めて報告した励起状態の共鳴 2 次元ラマン分光は，振動モード間のカップリングの観測を通じて励起状態 PES の性質に迫ることができる強力な手法である。しかし，その実験は困難を極め，応用は限定されていた。そこで我々は，遅延時間の高速掃引に基づく新しい励起状態選択的共鳴 2 次元インパルシブ誘導ラマン分光装置を構築することで，計測時間を劇的に短縮し，これまでに無い高い信号雑音比での 2 次元ラマンスペクトル測定を実現した。開発した装置を用いることで，一重項励起子分裂を示す典型分子である TIPS-pentacene の励起状態 2 次元ラマンスペクトルを取得し，電子励起状態における振動モード間のカップリングを明瞭に可視化することに成功した。

b) 室温・溶液中にある分子の励起エネルギー揺らぎの観測を目的として，単一分子検出感度を有する励起発光分光装置の開発を行った。この手法では，広帯域極短パルス対を励起光として用い，パルス間の遅延時間を掃引しながら分子が発する蛍光を検出する。この信号をフーリエ解析することにより，蛍光励起スペクトルを得る。典型色素に対して得られた励起スペクトルは，バルク溶液に対して得られた蛍光励起スペクトルや吸収スペクトルと良い一致を示しており，広帯域極短パルスを用いた蛍光検出に基づくフーリエ分光によって励起スペクトルが得られることを実証した。また，得られた光子列の相関解析から単一分子検出感度が達成できていることが確認された。より高度な光子相関解析による励起スペクトルの時間揺らぎの可視化に向けた基盤技術を確立した。

c) 所内外の研究者と共同で，先端的な超高速分光法を用いた新規光機能性分子の励起状態ダイナミクスの研究を推進している。本年は，フェムト秒時間分解インパルシブ誘導ラマン分光法を用いることで，ペリレンビスイミドが表面に配位した半導体ナノ粒子において光励起直後に起こる超高速電荷移動を，構造学的知見を基に明らかにした。また，10 fs 時間分解吸収分光を用いることで，シクロオクタテトラエン（COT）で繋がれたペリレンビスイミドダイマーの励起状態において起こる超高速な symmetry-breaking charge separation（SBCS）を観測し，その機構を電荷分離状態のエネルギー準位の計算に基づき明らかにした。

B-1) 学術論文

H. KURAMOCHI, T. TSUTSUMI, K. SAITA, Z. WEI, M. OSAWA, P. KUMAR, L. LIU, S. TAKEUCHI, T. TAKETSUGU and T. TAHARA, "Ultrafast Raman Observation of the Perpendicular Intermediate Phantom State of Stilbene Photoisomerization," *Nat. Chem.* **16(1)**, 22–27 (2024). DOI: 10.1038/s41557-023-01397-6

R. KIMURA, Y. YONEDA, H. KURAMOCHI and S. SAITO, "Environment-Sensitive Fluorescence of COT-Fused Perylene Bisimide Based on Symmetry-Breaking Charge Separation," *Photochem. Photobiol. Sci.* **22**, 2541–2552 (2023). DOI: 10.1007/s43630-023-00468-4

D. YOSHIOKA, Y. YONEDA, I. Y. CHANG, H. KURAMOCHI, K. HYEON-DEUK and Y. KOBAYASHI, "Quasi-Reversible Photoinduced Displacement of Aromatic Ligands from Semiconductor Nanocrystals," *ACS Nano* **17(12)**, 11309–11317 (2023). DOI: 10.1021/acsnano.2c12578

Y. YONEDA and H. KURAMOCHI, "Rapid-Scan Resonant Two-Dimensional Impulsive Stimulated Raman Spectroscopy of Excited States," *J. Phys. Chem. A* **127(24)**, 5276–5286 (2023). DOI: 10.1021/acs.jpca.3c02489

B-3) 総説，著書

米田勇祐,「先端的非線形分光によって明らかにする光化学系 II の複雑なダイナミクス」, *生物物理*, **63(3)**, 171 (2023). DOI: 10.2142/biophys.63.171

B-4) 招待講演

倉持　光,「数サイクルパルスを用いた複雑分子系の極限時間分解分光」, 自然科学研究機構先端光科学研究分野プロジェクト研究会「放射光の量子性・干渉性に基づく革新的計測手法の探索」, 岡崎, 2023 年 11 月.

米田勇祐,「先端的非線形分光を用いた電子－構造ダイナミクスの解明」, 第 44 回光化学若手の会, 淡路, 2023 年 6 月.

H. KURAMOCHI, T. TSUTSUMI, K. SAITA, Z. WEI, M. OSAWA, P. KUMAR, L. LIU, S. TAKEUCHI, T. TAKETSUGU and T. TAHARA, "Catching the Phantom State of Photoisomerization," Asian Spectroscopy Conference 2023, Niigata (Japan), Sepember 2023.

Y. YONEDA, "Exploring complex reaction dynamics using multidimensional vibrational spectroscopy," 38th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Fukuoka (Japan), June 2023.

B-6) 受賞，表彰

米田勇祐, PCCP Prize (2024).

B-7) 学会および社会的活動

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).

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

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

文部科学省研究振興局学術調査官 (2023–2025).

理科教育活動

出前授業「超短パルスレーザー光で観る分子の世界」愛知県立岡崎北高等学校 (2023).

B-8) 大学等での講義，客員

理化学研究所, 客員研究員, 2022年5月–2024年4月.

B-10) 競争的資金

科研費挑戦的研究（開拓),「揺らぐ単一光応答性タンパク質の超高速分光」, 倉持　光 (2021年度–2023年度).

科研費基盤研究(B),「先端的コヒーレント振動分光による反応性ポテンシャルエネルギー曲面形状の実験的探究」, 倉持　光 (2021年度–2023年度).

科学技術振興機構創発的研究支援事業（受託研究),「室温・溶液中における単一分子の極限時間分解分光」, 倉持光 (2021年度–2023年度).

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

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),「先端的単一分子分光による光合成保護機能の進化戦略の解明」, 米田勇祐 (2023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用いることで，凝縮相分子の機能・構造・ダイナミクスの解明に取り組んでいる。特に，（アンサンブル平均を観る）バルク溶液･固体に対する先端的な超高速分光法と，新たに開発を進めている室温･溶液中の単一分子レベルでの各種分光法を相補的に用いることで，複雑分子系の反応ダイナミクス研究に新たな途を拓くことを目指している。最近，我々は単一分子検出感度による励起発光分光を実現したが，今後は本手法をさらに発展させることで，マイクロ～ミリ秒スケールで起こる励起スペクトル揺らぎの可視化を実現する。光合成系をはじめとする光応答性タンパク質に応用し，これらタンパク質の色素（発色団）分子の電子状態が，タンパク質特有の遅い自発的構造揺らぎといかに連関しているのか紐解く。さらに, 単一分子レベルでの振動分光法, ポンプ－プローブ分光法の開発に取り組み，電子状態・局所構造・超高速反応ダイナミクスの観点から，揺らぎが光応答性タンパク質の光－エネルギー変換に果たす役割の本質的理解を目指す。

機能分子システム創成研究部門

山　本　浩　史（教授）（2012 年 4 月 1 日着任）

AVARVARI, Narcis（外国人研究職員）
佐藤　拓朗（助教）
WU, Dongfang（特任研究員）
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）
DRESSOUNDIRAM, Elodie（インターンシップ）
相澤　洋紀（大学院生）
URBAN, Adrian（大学院生）
MALATONG, Ruttapol（大学院生）
楠本　恵子（大学院生）
村田　了介（技術支援員）
石川　裕子（事務支援員）

A-1) 専門領域：分子物性科学

A-2) 研究課題：

a) キラル有機超伝導体を用いたスピントロニクス
b) キラル分子によるスピン偏極の理論構築
c) 有機半導体らせん結晶の磁性基板によるキラル分割

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，磁性電極上に偏極スピンが蓄積することが見出された。これは超伝導結晶のキラルな空間群に基づくスピン流生成が原因であると考えられるが，その大きさを見積もると，有機超伝導体が有するスピン軌道相互作用エネルギーから得られるスピン偏極の 1000 倍以上に達する巨大なスピン蓄積が生じていることが明らかとなった。また, シグナルの磁場角度依存性から，スピン蓄積が結晶の上下で反転していることが明らかとなった。（BEDT-TTF = Bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene）
b) CISS（Chirality-Induced Spin Selectivity）効果はキラル分子に対してトンネル電流を流すと，分子を通過してきた電子のスピンが電流と平行あるいは反平行に偏極する現象であり，近年新たな有機スピントロニクス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) CISS 効果の適用範囲はスピン偏極電流を生み出すことに限定されず，キラルな構造を有する材料のキラル分割にも拡張可能であることが明らかとなりつつある。我々はコバルトフタロシアニン錯体が PVD（Physcial Vapor Deposition）によってメゾスケールのらせん結晶を生成することに着目し，CISS 効果によるそのキラル分割を試みた。その結果，垂直磁化した磁性基板上で結晶成長を行い，磁化の向きによってらせんの右巻き・左巻きの比を逆転させることに成功した。この成果は，共有結合によらないキラリティであっても，CISS 効果による左右の区別が可能であることを示している。

B-1) 学術論文

Y. OSHIMA, T. TAKENOBU, J. PU, K. ISHIGURO, R. KATO, H. M. YAMAMOTO and T. KUSAMOTO, "A Memristive Oscillator," *Adv. Phys. Res.* **3**, 2300117 (2023). DOI: 10.1002/apxr.202300117

H. AIZAWA, T. SATO, S. MAKI-YONEKURA, K. YONEKURA, K. TAKABA, T. HAMAGUCHI, T. MINATO and H. M. YAMAMOTO, "Enantioselectivity of Discretized Helical Supramolecule Consisting of Achiral Cobalt Phthalocyanines via Chiral-Induced Spin Selectivity Effect," *Nat. Commun.* **14(1)**, 4530 (2023). DOI: 10.1038/s41467-023-40133-z

A. J. URBAN and H. M. YAMAMOTO, "Strong and Tunable Near-Infrared Circular Dichroism in Helical Tetrapyrrole Complexes," *Chem. –Eur. J.* **29(43)**, e202300940 (2023). DOI: 10.1002/chem.202300940

R. MALATONG, T. SATO, J. KUMSAMPAO, T. MINATO, M. SUDA, V. PROMARAK and H. M. YAMAMOTO, "Highly Durable Spin Filter Switching Based on Self-Assembled Chiral Molecular Motor," *Small* **19(32)**, 2302714 (2023). DOI: 10.1002/smll.202302714

Y. KAWASUGI, H. SUZUKI, H. M. YAMAMOTO, R. KATO and N. TAJIMA, "Strain-Induced Massless Dirac Fermion State of the Molecular Conductor α-(BEDT-TTF)$_2$I$_3$," *Appl. Phys. Lett.* **122(12)**, 123102 (2023). DOI: 10.1063/5.0141023

R. YAMADA, J. FUJIOKA, M. KAWAMURA, S. SAKAI, M. HIRAYAMA, R. ARITA, T. OKAWA, D. HASHIZUME, T. SATO, F. KAGAWA, R. KURIHARA, M. TOKUNAGA and Y. TOKURA, "Field-Induced Multiple Metal–Insulator Crossovers of Correlated Dirac Electrons of Perovskite CaIrO$_3$," *npj Quantum Mater.* **7(1)**, 13 (2022). DOI: 10.1038/s41535-021-00418-2

T. SATO, W. KOSHIBAE, A. KIKKAWA, Y. TAGUCHI, N. NAGAOSA, Y. TOKURA and F. KAGAWA, "Nonthermal Current-Induced Transition from Skyrmion Lattice to Nontopological Magnetic Phase in Spatially Confined MnSi," *Phys. Rev. B* **106(14)**, 144425 (2022). DOI: 10.1103/physrevb.106.144425

B-4) 招待講演

山本浩史,「キラリティ誘起スピン選択制（CISS）とスピントロニクス」, 応用物理学会シンポジウム「ハイブリッド材料・システムによる革新的光・スピン計測」, 第 71 回応用物理学会春季学術講演会, 東京, 2024 年 3 月.

山本浩史,「分子性量子デバイスにおける時空間反転対称性の破れ」, 物理学会シンポジウム「物質科学が拓く新原理デバイス」, 日本物理学会 2024 年春季大会, オンライン開催, 2024 年 3 月.

山本浩史,「有機強相関電子デバイスの現状と今後の展開」, 応用物理学会クロスオーバーシンポジウム「有機エレクトロニクスの開拓と未来展望」, 第 84 回応用物理学会秋季学術講演会, 熊本, 2023 年 9 月.

H. M. YAMAMOTO, "Engineering of crystals directed toward molecular science," 分子性固体科学研究会, 松山, 愛媛（日本）, March 2024.

H. M. YAMAMOTO, "Chirality and its relation to time-reversal symmetry breaking," OML workshop "Chirality in its shape and motion at quantum levels," Okazaki, Aichi (Japan), March 2024.

H. M. YAMAMOTO, "Chiral metals and superconductors for novel spintronics," The 426th Zhong-Guan-Cun Forum on Condensed Matter Physics, Beijing (China), February 2024.

H. M. YAMAMOTO, "Chiral metals and superconductors for novel spintronics," Molecular Science Frontier Lecture, Beijing (China), February 2024.

H. M. YAMAMOTO, "Chiral metals and superconductors for novel spintronics," The Joint Symposium on Spin, Chirality, Superconductivity, and Related Phenomena, Tianjin (China), February 2024.

H. M. YAMAMOTO, "On the definition of chirality and enantioselective fields—from experimental point of view—," MRM2023, Kyoto (Japan), December 2023.

H. M. YAMAMOTO, "Magnetic Enantioseparation and Chirality-Induced Spin Selectivity," Nano Thailand 2023, Pattaya (Thailand), November 2023.

H. M. YAMAMOTO, "Supramolecular machines and chiral spintronics," ChePhyMoSS: Symposium celebrating 75+ birthday of Patrick Batail, Angers (France), November 2023.

H. M. YAMAMOTO, "Chirality at the quantum scale," hirality@The Nanoscale 2023, Angers (France), October 2023.

H. M. YAMAMOTO, "Truly chiral superconductors for novel spintronics," Superconducting spintronics 2023, Online, September 2023.

H. M. YAMAMOTO, "Giant spin polarization and a pair of antiparallel spins in a chiral superconductor," KUJI QMAT Online Journal Club, Online, July 2023.

H. M. YAMAMOTO, "T-even chirality and T-odd chirality," Gordon Research Conference, Electron Spin Interactions with Chiral Molecules and Materials "Chiral Spin Filtering and its Manifestations From Molecules to Devices," Manchester (USA), July 2023.

B-5) 特許出願

登録

1698360, "Chirality Detection Device, Chirality Detection Method, Separation Device, Separation Method, and Chiral Substance Device," Y. TOGAWA, H. SHISHIDO and H. YAMAMOTO (University Public Corporation Osaka; National Institutes of Natural Sciences)（登録日2023年7月11日）.

B-6) 受賞，表彰

佐藤拓朗, 日本物理学会若手奨励賞 (2024).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子科学会幹事 (2020–)，総務委員長 (2022–2024).

学会の組織委員等

分子科学会運営委員 (2018–).

MRM2023 セッションオーガナイザー (2023).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

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

日本学術会議事務局連携会員 (2023–2027).

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–).

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.

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

B-9) 学位授与

友田美沙,「Development of Pentanuclear Metal Complexes with Sterically Isolated Brønsted Acid/Base Sites and Their Functions」, 2023年3月, 博士（理学）.

相澤洋紀,「磁性基板によるCo(II) フタロシアニン螺旋超分子のキラル分割について」, 2023年9月, 博士（理学）.

MALATONG, Ruttapol, “Development of Switchable Spin Selectivity Based on Controllable Organic Chirality,” 2023年9月, 博士（理学）.

URBAN, Adrian Joe, “Towards Benchmarking Chirality-Induced Spin Selectivity: The Case of Chiral Tetrapyrroles,” 2023年9月, 博士（理学）.

B-10) 競争的資金

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

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

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

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

三菱財団自然科学研究助成,「キラル超伝導体を用いたスピントランジスタの開発」, 山本浩史 (2023年度–2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

キラリティによるスピン流生成は，近年益々注目されるようになっている。どちらかと言うと化学分野で注目されているCISSのみならず，物性物理分野でも反転対称性を失った物質構造に基づく新たな物性発現が盛んになされており，両者の共通点と相違点を検討しながら実験を進めていく必要があると考えられる。本年の成果により，キラル分子の量子状態が本質的にスピン構造を内包した電気トロイダルモノポールによって表現されることが明らかとなってきた。このようなキラル物質特有の性質と，CISS効果との関係性解明を進めると同時に，様々な外場によるスピン流の制御に取り組むなど，より広い視点での展開を実現していきたい。

6-4　理論・計算分子科学研究領域

理論分子科学第一研究部門

斉　藤　真　司（教授）（2005 年 10 月 1 日着任）

甲田　信一（助教）
TANG, Zhiye（助教）
ZHU, Zhe（大学院生）
千葉　史朱香（事務支援員）

A-1) 専門領域：物理化学，理論化学

A-2) 研究課題：

a) 生体機能ダイナミクスの理論研究：天然光合成系における効率的励起エネルギー移動

b) 凝縮系ダイナミクスの理論研究：顕著な構造変化を伴わない過冷却液体の運動の遅延化

c) 凝縮系ダイナミクスの理論研究：揺らぐ環境下での反応・拡散過程

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 生体機能ダイナミクスに関する研究として，高等植物の光化学系 II の光捕集アンテナ複合体 LHCII における励起エネルギー移動（EET）の解析を進めている。LHCII 中の EET の解明には，クロロフィル（Chl）分子の励起エネルギーやその揺らぎ（スペクトル密度）の知見が不可欠である。最近，我々は TDDFT 計算におけるパラメータの調整を行い，異なる誘電率をもつ複数の溶液中での Chl 分子の励起エネルギーを適切に記述することに成功した。さらに，これらの適切な電子状態計算の結果を再現する分子動力学（MD）計算における Chl 分子のパラメータの開発にも成功した。これらの成果をもとに，膜中に存在する LHCII の長時間の MD 計算を実施し，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 内の異なる環境下にある Chl 分子の励起エネルギーレベルや揺らぎの分子機構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，温度低下による過冷却液体のダイナミクスの遅延化の分子起源の解明に取り組んでいる。過冷却液体状態は，構造的には通常の液体状態と類似しているが，ダイナミクスに関しては，液体状態のものに比べ遅くなっていくという特徴をもつ。液体から結晶への変化のような顕著な構造変化を伴わない過冷却液体の運動の遅延化の機構解明は，凝縮系物理学における長年の課題の一つである。我々は，反応速度論において提案された「動的乱れ」の概念に基づき，過冷却水における運動の遅延化における分子機構を明らかにした。

c) 凝縮系ダイナミクスに関する研究として，我々は，反応・拡散過程に関する課題にも取り組んでいる。その研究の一つとして，揺らぎが引き起こす‘異常’質量依存拡散現象について解析を進めている。軽水と重水はそれらの質量や化学的・熱力学的性質が類似しているため，同位体水を分離することは極めて困難である。しかし，最近，北川らにより開発された多孔質配位高分子（PCP）を用いることにより，従来にない高効率で同位体水の分離が可能であることが実験的に明らかにされた。同位体水の分離機構として，PCP 内の配位子の構造揺らぎが考えられている。

しかし, その理論的な裏付けは未だ明らかにされていない。そこで我々は, 実験系を簡単化した理論モデルを構築し, ‘異常’ 質量依存の拡散現象の機構解明に取り組んでいる。

B-1) 学術論文

S.-I. KODA and S. SAITO, “Locating Transition States by a Variational Minimum Energy Path Search with an Energy-Derivative-Free Objective Function,” *J. Chem. Theory Comput.* **20(7)**, 2798–2811 (2024). DOI: 10.1021/acs.jctc.3c01246

J. ONO, Y. MATSUMURA, T. MORI and S. SAITO, “Conformational Dynamics in Proteins: Entangled Slow Fluctuations and Nonequilibrium Reaction Events,” *J. Phys. Chem. B* **128(1)**, 20–32 (2023). DOI: 10.1021/acs.jpcb.3c05307

T. INAGAKI, M. HATANAKA and S. SAITO, “Anisotropic and Finite Effects on Intermolecular Vibration and Relaxation Dynamics: Low-Frequency Raman Spectroscopy of Water Film and Droplet on Graphene by Molecular Dynamics Simulations,” *J. Phys. Chem. B* **127(26)**, 5869–5880 (2023). DOI: 10.1021/acs.jpcb.3c02109

B-4) 招待講演

S. SAITO, “Unraveling collective orientation relaxation in aqueous solution: Effects of ion and finite-size,” Asian Research Network for Terahertz Molecular Science, Kobe (Japan), March 2024.

S. SAITO, “Uncovering the secrets of water: Hidden structures and dynamics,” Theoretical Chemistry Symposium, Chennai (India), December 2023.

S. SAITO, “Structural change dynamics in molecular systems,” Structure and Dynamics of Chemical and Biomolecular Systems, Kanpur (India), October 2023.

S. SAITO, “Structural change dynamics in molecular systems,” Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC) 2023, Sapporo (Japan), Sepember 2023.

S. SAITO, “Conformational Dynamics of Biomolecules Revealed by Molecular Simulations,” 11th International Conference on Biological Physics (ICBP) 2023, Seoul (Korea), August 2023.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子科学会運営委員 (2022–2024).

日中韓理論化学ワークショップ幹事 (2013–).

学会の組織委員等

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

学会誌編集委員

日本化学会速報誌編集委員会委員 (2023–).

その他

森野基金 運営委員会委員 (2020–).

計算物質科学協議会 運営委員会委員 (2020–).

B-8) 大学等での講義，客員

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

神戸大学, 非常勤講師, 2024年1月.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「高等植物の光捕集アンテナタンパク質における効率的励起エネルギー移動の理論研究」, 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–2024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。

生体分子機能に関するダイナミクスに関しては，高等植物のLHCIIにおける励起エネルギー移動の分子機構の解明をさらに進める。励起エネルギー移動の分子論的解明には，LHCII系の個々のChl分子の適切な電子状態とダイナミクスの記述が不可欠である。我々は，これらの物理量を適切に記述する方法論の開発に成功し，膜中に存在するLHCIIにおける励起エネルギー移動ダイナミクスの解析を可能にした。今後，LHCII内の不均一な環境下でのChl分子の励起子ダイナミクスを解析し，LHCIIにおける効率的なEETダイナミクスを分子レベルで解明することを目指す。これまでに我々は，緑色硫黄細菌のFMOタンパク質における励起エネルギー移動を解析し，各色素分子のエネルギー揺らぎがFMOタンパク質中の効率的な励起エネルギー移動に重要な役割を果たしていることを明らかにしてきた。そこで，LHCIIにおける励起エネルギー移動の解析を進め，LHCIIとFMOタンパク質の励起エネルギー移動を比較することにより，天然光合成系における励起エネルギー移動の理解を深めていく。さらに，バクテリアと高等植物の異なる進化段階における励起エネルギー移動の普遍性や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，凝縮系における構造変化や反応・拡散過程がどのように進行するかについて，さらに研究を進める。構造変化ダイナミクスに関しては，（過冷却）液体におけるガラス転移に向かう運動の遅延化の分子機構に関する研究を展開させる。系によりエネルギー地形が異なっており，エネルギー地形の違いは，fragility（すなわち，ダイナミクスの時間スケールの温度依存性）の違いに反映されることが知られている。そこで，今後は，異なるfragilityをもつ液体における運動の遅延化がどのように異なるのかについても明らかにしていきたい。また，反応・拡散過程に関する課題としては，多孔質配位高分子系により同位体水の高効率分離の分子機構の解明に向けた研究をさらに進める。構造変化ダイナミクスや拡散ダイナミクスの研究で明らかにしたように，動的乱れ，すなわち，揺らぎを露わに考慮しなければいけない環境下での反応・構造変化・拡散ダイナミクスは，従来の結果には見られない複雑なダイナミクスの様相を示す。そこで，新たな研究の方向性として，揺らぐ環境下の酵素反応や核形成過程がどのように進行するかなどについても，これまでとは異なる新しい分子論的観点から明らかにしていきたい。

理論分子科学第二研究部門

石　﨑　章　仁（教授）（2016 年 4 月 1 日着任）

三輪　邦之（助教）
布能　謙（特任助教）
坂本　想一（特任研究員）
増田　道子（事務支援員）

A-1) 専門領域：理論物理化学

A-2) 研究課題：

a) 光・量子科学技術に基づく複雑分子系の観測と制御の理論研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 着目する量子系が環境自由度によってゆらぎ・散逸・デコヒーレンスの影響を受ける状況を一般的に記述する，量子開放系の理論的枠組の構築に取り組んだ。特に，先行研究では環境の影響がガウスゆらぎで与えられる場合の解析が大部分であった。しかしながら，スピン環境，固体物性量子デバイスにおける二準位間ノイズ，電荷キャリアダイナミクスにおける格子振動の非調和性といった状況はガウスゆらぎで表すことができず，非ガウスゆらぎの理論構築が量子科学から材料科学といった幅広い分野から要請されている。そこで，本研究では非ガウスゆらぎの効果を解明すべく，確率過程の分野における Lévi-Itô の分解定理に着目した。この定理によると，すべての白色ノイズは白色ガウスノイズと白色ポアソンノイズの組み合わせで表すことができる。ノイズに時間相関がないような白色ノイズ領域における非ガウス環境の一般論の構築に向けて，その基礎となる，ポアソンノイズを発生させるような環境のモデル化を行い，マスター方程式の導出を行った。具体例として，複数の二準位系が環境と相互作用する状況を考え，基底状態へのエネルギー緩和レートの解析を行った。ガウス環境の場合は，緩和レートが二準位系の数に比例して大きくなるのに対し，ポアソン環境の場合は，緩和レートの上限がノイズの発生頻度によって与えられることを見出した。この結果は，環境の統計性の違いによって，散逸現象の性質が大きく異なることを強く示唆する。さらに，非ガウス環境を記述する量子開放系の一般理論の構築に向けて，古典確率過程で知られているノイズの数学的性質を量子ダイナミクスへ取り入れる手法の開発に取り組んでいる。また，環境自由度との相互作用によって着目する量子系にフィードバック制御が働くような状況を探索し，自律デーモンの数理モデルとの対応関係を探索している。より具体的には，自律デーモンを散逸量子ビット系でモデル化し，そのフィードバック動作の解析を行った。ガウス環境における，緩和によるエネルギー再配置過程との比較を行い，環境の非ガウス性が顕著に現れる状況を探索中である。

b) 格子の柔軟性が電荷に及ぼす効果は，凝縮系物質の様々な物理的性質や機能の発現において重要な役割を果たす。このような観点から近年盛んに研究されている物質の例として，電荷キャリアの長寿命性や優れた欠陥耐性を有する高機能な太陽電池材料として注目されている，有機無機ハイブリッドペロブスカイト物質が挙げられる。最近では，これらの機能の発現に格子振動の 4 次の非調和性が重要な寄与をはたしている可能性が示唆され，ペロブスカイト物質の顕著な機能と格子の非調和性の関連について精力的な研究が行われている。しかし，非調和な格子振動に由来する非ガウス揺らぎに曝された電荷の量子ダイナミクスについては未だ十分な理解が得られていない。さらに，物

質における電荷の輸送過程では，電荷に対する揺動だけでなく，電荷輸送に伴う格子歪みのダイナミクスが枢要であり，電荷に対する揺動と格子歪みダイナミクスの両者の記述が肝要となる。そこで本研究では，4 次の非調和性を有する格子振動を粗視化・記述するために２つの安定状態を有する環境（双安定環境）を用い，双安定環境と結合する量子系のダイナミクスを記述する理論を構築した。理論解析および数値計算を用いた実証により，本理論は，双安定環境によってシステムにもたらされる揺動および散逸の影響を効果的に記述できることを確認した。また，これらの影響は，開放量子系の研究で広く用いられている Gauss 環境の場合とは異なる温度依存性を示し，特に散逸項の寄与は温度上昇とともに減少する振る舞いを示すことがわかった。この温度依存性の起源を環境のダイナミクス，すなわち再配置過程の観点から解析し，物理的意味を明らかにした。

c) 昨年度までの研究により，CW レーザーを用いたパラメトリック下方変換によって生成される量子もつれ光子対の非古典相関を利用した時間分解分光理論を開発した。しかし，一対のもつれ光子を分子系に照射して誘起される非線形光学応答は非常に弱いため，それを検出することは困難であることが予想される。この課題を克服する解決策の一つはスクイーズド光を利用することであると考える。この背景から，2023 年度前半では，単一量子もつれ光子対の代わりに 2 モード真空スクイーズド状態を光源として時間分解分光計測が可能であるかどうかを理論的に検討した 。その結果，もつれ時間が分子系のダイナミクスの時間スケールに比べて十分短い場合であれば，2 モード真空スクイーズド状態を用いて時間分解スペクトルの情報を取得できることを理論的に示すことができた。2023 年度後半では，もつれ光子対の二光子同時計数に基づく時間分解分光計測の可能性を検討した。時間分解分光法は，複雑分子系の動的過程を研究できる強力な実験手法の一つである。しかし，光合成光捕獲タンパク質のように多くの色素分子を含む分子系では，複数の非線形光学的寄与が存在するため，スペクトルが複雑となり，解釈が困難となることがある。この問題を解決するため，量子もつれ光子対の二光子同時計数に基づく時間分解分光法を理論的に提案した 。解析の結果，もつれ光子対の二光子計数検出を利用することで特定の非線形光学的寄与を選択的に除去できることを理論的に明らかにした。この選択的除去は古典的なコヒーレント光では実現できず，光の非古典的相関がもたらす有用性を理論的に示した。提案する分光法は，光合成光捕獲タンパク質などの複雑分子系におけるスペクトルの解釈を単純化するのに役立つと考えられる。

d) 2023 年度は，光化学系 II 超複合体全体でのエネルギー移動ダイナミクスとクロロフィル分子の配置との関係性に着目し，エネルギー移動を記述するモデルを構築，解析を行った。年度の前半では，このモデルに対して量子動力学とネットワーク解析を組み合わせたシミュレーションを実施した。先行研究では光合成タンパク内部でのエネルギー移動の解析が中心的に調べられてきた。一方光捕集機能や光防御機能といった光合成反応が高効率で起こる原理を理解するためには，複数のタンパクにまたがるエネルギー移動の解析が必要であり，その詳細なメカニズムは分かっていない。本研究では，近年クライオ電顕により解明された高精度の構造を用いた光化学系 II 超複合体のモデルを考え，上記の問題に取り組んだ。計算の結果，励起状態寿命と電荷分離収率に関して先行研究の実験で報告された値とシミュレーション結果が良く一致し，本研究で用いた手法と構築したモデルが妥当であることを示した。2023 年度の後半では，上記の研究をさらに前進させ，光合成反応中心タンパクへとエネルギーが輸送される経路について詳細な解析を行った。シミュレーションによると，エネルギーがある特定のクロロフィル分子を通過し，それらは先行研究で過剰な光エネルギーを散逸させるサイトの可能性が指摘されているクロロフィルであることを見出した。本研究により，緑色植物は過剰な光エネルギーを受けて初めて光防御反応に切り替えるというよりもむしろ，前もって光防御反応に備えたエネルギー移動ネットワークを構築していることを示唆する結果を得た。

B-1) 学術論文

Y. FUJIHASHI, A. ISHIZAKI and R. SHIMIZU, "Pathway Selectivity in Time-Resolved Spectroscopy Using Two-Photon Coincidence Counting with Quantum Entangled Photons," *J. Chem. Phys.* **160**, 104201 (2024). DOI: 10.1063/5.0189134

J. Y. DONG, Y. KITAHAMA, T. FUJITA, M. ADACHI, Y. SHIGETA, A. ISHIZAKI, S. TANAKA, T. H. XIAO and K. GODA, "Manipulation of Photosynthetic Energy Transfer by Vibrational Strong Coupling," *J. Chem. Phys.* **160**, 045101 (2024). DOI: 10.1063/5.0183383

B-3) 総説，著書

藤橋裕太, 石崎章仁,「第 3 章第 2 節 量子もつれ光による時間分解分光手法の開発」, *量子生命科学ハンドブック*, (株) エヌ・ティー・エス (2024).

B-4) 招待講演

石﨑章仁,「Quantum biophysical chemistry: Old roots, new shoots」, 特別講演会, 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻, 京都府京都市, 2024 年 1 月.

石﨑章仁,「光化学系 II 超複合体の量子開放系＋ネットワークモデリング」, Q-LEAP Flagship プログラム「量子生命技術の創製と医学・生命科学の革新」第 7 回領域会議, 東京都千代田区, 2024 年 1 月.

石﨑章仁,「量子散逸系としての光捕集系ダイナミクス」,「1000 テスラ超強磁場による化学的カタストロフィー：非摂動磁場による化学結合の科学」第 2 回領域会議, 東京都調布市, 2023 年 12 月.

石﨑章仁,「Quantum biophysical chemistry: Old roots, new shoots」, 物理化学特別セミナー , 東京大学大学院理学系研究科化学専攻, 東京都文京区, 2023 年 11 月.

石﨑章仁,「量子生物物理学における誤り訂正」, Q-LEAP 量子 AI ×量子生命交流会, 大阪大学基礎工学国際棟, 大阪府豊中市, 2023 年 10 月.

A. ISHIZAKI, "Probing exciton dynamics with spectral selectivity through the use of quantum entangled photons," Les Houches School of Physics Workshop on Quantum Dynamics and Spectroscopy of Functional Molecular Materials and Biological Photosystems, Les Houches (France), September 2023.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

量子生命科学会 学術委員会委員 (2019–2024).

学会の組織委員等

第 61 回生物物理学会年会実行委員 (2023).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

文部科学省科学技術・学術政策研究所科学技術動向研究センター専門調査員 (2015–).

東京大学物性研究所協議会委員 (2022–2024).

学会誌編集委員

日本物理学会会誌編集委員 (2023–2025).

B-8) 大学等での講義，客員

京都大学大学院工学研究科, 非常勤講師, 2023年10月–2024年3月.

B-10) 競争的資金

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

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

科研費若手研究,「非マルコフ領域における有限時間量子制御手法と量子熱力学への応用」, 布能　謙 (2023年度–2026年度).

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

C)　研究活動の課題と展望

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

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）
稲井　直人（特任研究員）
杉本　縁（事務支援員（派遣））

A-1) 専門領域：量子化学，理論化学，触媒化学，光物性科学

A-2) 研究課題：

a) アニオンテンプレート銀クラスターの構造，電子状態，電子スペクトルの解析

b) 多元素金属イオンクラスター CAu_6Ag_n (n = 2–4) の発光量子収率の制御

c) NHC 配位子制御による CAu^I_6 クラスターのベイポ・メカノルミノクロミズム

d) 三重螺旋ニッケル三核メタロクリプタンドの P/M 異性体の変換ダイナミクスの制御

e) 異なるねじれ構造をもつ環状パラジウム三核錯体の創成とねじれ反転速度の制御

f) 通信波長の発光を示す修飾単層カーボンナノチューブの開発

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発光機能や触媒活性を示し，近接場の化学事象でも注目されている。近年，数種のアニオンをテンプレートとした金属クラスターが開発されているが，その構造や電子状態については十分研究されていない。硫黄および塩素アニオンを核とする新規なアニオンテンプレート銀クラスター（$S@Ag_{17}$，$S@Ag_{18}$，$Cl@Ag_{18}$）を創成し，その構造や電子スペクトルの理論解析を実施した。理論計算はこれらの金属クラスターの構造の対称性を再現し，中心アニオンと包接銀クラスターが静電相互作用で安定化することを解明した。電子状態はアニオンフリーの金属クラスターにみられる超原子構造ではなく配位子に非局在化した軌道が混在することを明らかにした。理論計算は電子スペクトルを良く再現し，詳細な帰属を与えた。$Cl@Ag_{18}$ の場合はイオン対との計算から broken-symmetry 解が安定であることが示され，開殻電子構造が安定であることを示した。

b) 多核金クラスターは，金原子間の Aurophilicity に基づく構造特異的な光物性を示す。また，金属クラスターの表面設計は，金属アレイ特有の化学的特性を開発する重要な手法である。1–2 個のピコリル基を持つ *N*- ヘテロ環状カルベン（NHC）配位子を用いて，特定数の銀 (I) 原子を持つ $CAu^I_6Ag^I_n$ (n = 2–4) 合金クラスターの開発に成功した。クラスターのリン光発光強度は銀のシェル構造に大きく依存し，$CAu^I_6Ag^I_2$ の発光量子収率は 0.86 であるが，$CAu^I_6Ag^I_3$ では 0.04 まで著しく低下する。さらに Ag^I イオンの数を増やす（$CAu^I_6Ag^I_4$）と量子収率は 0.40 に回復した。理論解析から，Ag^I イオンと NHC 配位子によってクラスターの構造と電子構造の制御がなされており，これらが要因となり発光の量子収率が制御されていることを明らかにした。本研究により，異種金属クラスターの原子レベルでの表面構造と光物性の関係が明らかになった。

c) ルミノクロミック金クラスターは，その構造に起因するユニークな光学応答特性により，分析化学への応用が期待されている。しかし，可逆的な刺激応答特性を付与することは容易ではない。本研究では N,N'- ジベンジルベンズイミ

ダゾリリデン配位子（BIBn）で保護された CAu^{I}_{6} クラスターが可逆的なマルチ刺激応答ルミノクロミズムを示すことを見出した。溶媒の添加と乾燥により，青色とターコイズ色の発光色を示す 2 種類の結晶が得られ，相互変換可能であることを示した。理論計算から，BIBn 配位子のコンフォメーションの違いが光物性に影響し，CAu^{I}_{6} コアに結合した BIBn 配位子の柔軟性がルミノクロミズムの要因であることを明らかにした。さらにこれらの結晶を粉砕すると，結晶性が部分的に失われ，緑色発光することが分かった。ベイポ・メカノルミノクロミズムの両方を示す顕著な例であり，金属クラスターの刺激応答性を支配する原理を理解するためのモデル化合物として期待される。

d) キラル分子の左手型と右手型の変換を動的に制御することは近年の分子技術で注目されている。しかし，変換速度を制御することは容易ではない。本研究では，三重螺旋構造をもつニッケル三核メタロクリプタンドを合成し，アルカリイオンを導入することによって，左手型（M 体）から右手型（P 体）の変換速度を 1000 倍制御することに成功した。理論計算によって，アルカリイオンが存在しない場合は，左手型（M 体）が安定であることを示し，円二色性スペクトルを 8 種類の構造異性体からシミュレートした。カリウムイオンが導入された場合は，P/M 変換速度が半減期 11 秒であるのに対して，セシウムイオンの場合は約 3 時間になる。アルカリイオンが包接されたときの酸素原子の配位構造の違いと P/M 変換の遷移状態の構造により，変換速度の違いを考察した。

e) 分子機械は分子の運動を外部刺激によって制御できるが，最近では，より複雑な分子運動を制御する研究が注目されている。本研究では，錯体形成反応を駆使して，2 種類のねじれ異性体をもつ環状パラジウム三核錯体を選択的に合成し，ねじれの度合いの違いのみで運動速度を制御することに成功した。弱くねじれた異性体では，反転速度は 3.31 s^{-1} であるのに対して，強くねじれた異性体では，反転が観測されないほど遅くなること，強くねじれた異性体から弱くねじれた異性体に緩和することが見出された。理論計算では，2 種類の異性体の局所安定構造を確認し，安定構造では C–H と Pd の相互作用が重要であることを示した。また，DFT 計算の汎関数の依存性を確認した上で，2 種類の異性体の円二色性スペクトルを再現し，帰属することに成功した。

f) 修飾 SWNT は，化学修飾により局所的バンドギャップを調整して近赤外発光を誘起することができる。しかし，発光波長を通信波長（1300 nm 以上）に制御することは，依然として困難であった。本研究では，(6,5)-SWNT を環状フルオロアルキル化することで，最長発光波長 1320 nm の近赤外発光を選択的に発現させることに成功した。さらにこの手法は５つの異なるキラル角を持つ SWNT でも有効であることを示した。理論計算を用いて局所的なバンドギャップの変調機構を系統的に調査し，最長波長発光には環状置換体およびフルオロ化による局所構造変化と電子状態が関与していることが示された。これらの知見は，修飾 SWNT の構造と局所バンドギャップの制御法に関する理解を深めるものであり，発光・励起波長を拡張した近赤外発光材料の開発と応用に貢献することが期待される。

B-1) 学術論文

S. MURATSUGU, K. SAWAGUCHI, T. SHIRAOGAWA, S. CHIBA, Y. SAKATA, S. SHIRAI, H. BABA, M. EHARA, S. AKINE and M. TADA, “Induced Chirality at Surface: Fixation of a Dynamic *M/P* Invertible Helical Co_3 Complex on SiO_2,” *Chem. Commun.* **60(15)**, 2094–2097 (2024). DOI: 10.1039/D3CC05534E

B. BOEKFA, T. MAIHOM, M. EHARA and J. LIMTRAKUL, “Investigation of the Suzuki-Miyaura Cross-Coupling Reaction on Palladium H-Beta Zeolite with DFT Calculations,” *Sci. Rep.* **14(1)**, 611 (2024). DOI: 10.1038/s41598-023-51116-x

Y. SHUI, D. LIU, P. ZHAO, X. ZHAO, M. EHARA, X. LU, T. AKASAKA and T. YANG, “Element Effects in Endohedral Metal−Metal-Bonding Fullerenes $M_2@C_{82}$ (M = Sc, Y, La, Lu),” *J. Chem. Phys.* **159(24)**, 244302 (2023). DOI: 10.1063/5.0180309

T. NAKAJIMA, S. TASHIRO, M. EHARA and M. SHIONOYA, "Selective Synthesis of Tightly- and Loosely-Twisted Metallomacrocycle Isomers Towards Precise Control of Helicity Inversion Motion," *Nat. Commun.* **14(1)**, 7868 (2023). DOI: 10.1038/s41467-023-43658-5

S. A. IKBAL, P. ZHAO, M. EHARA and S. AKINE, "Acceleration and Deceleration of Chirality Inversion Speeds in a Dynamic Helical Metallocryptand by Alkali Metal Ion Binding," *Sci. Adv.* **9(44)**, eadj5536 (2023). DOI: 10.1126/sciadv.adj5536

J. L. JIN, S. F. ZHANG, P. ZHAO, Y. L. SHEN, J. J. FANG, Z. LIU, M. EHARA, L. W. MI, Y. P. XIE and X. LU, "$Ag_6Cu_8(C{=}CAr)_{14}(DPPB)_2$: A Rigid Ligand Co-Protected Bimetallic Silver(I)-Copper(I) Cluster with Room-Temperature Luminescence," *Chem. –Asian J.* **18(22)**, e202300844 (2023). DOI: 10.1002/asia.202300844

W. W. WANG, X. ZHAO and M. EHARA, "Mechanistic Studies of Regiocontrolled Bisaddition of Fullerenes Driven by Oriented External Electric Fields," *J. Org. Chem.* **88(22)**, 15783–15789 (2023). DOI: 10.1021/acs.joc.3c01850

Y. HORITA, S. HOSSAIN, M. ISHIMI, P. ZHAO, M. SERA, T. KAWAWAKI, S. TAKANO, Y. NIIHORI, T. NAKAMURA, T. TSUKUDA, M. EHARA and Y. NEGISHI, "Clarifying the Electronic Structure of Anion-Templated Silver Nanoclusters by Optical Absorption Spectroscopy and Theoretical Calculation," *J. Am. Chem. Soc.* **145(43)**, 23533–23540 (2023). DOI: 10.1021/jacs.3c07194

L. H. FOIANESI-TAKESHIGE, X.-L. PEI, P. ZHAO, H. UBE, Z. LEI, M. EHARA and M. SHIONOYA, "Reversible Luminochromism of an *N*-Heterocyclic Carbene-Protected Carbon-Centered Hexagold(I) Cluster by Solvent and Mechanical Stimuli," *Adv. Opt. Mater.* **11**, 2301650 (2023). DOI: 10.1002/adom.202301650

Y. MAEDA, R. MOROOKA, P. ZHAO, M. YAMADA and M. EHARA, "Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotube Photoluminescence via Competition between Thermal Rearrangement and Elimination," *Chem. Commun.* **59**, 11648–11651 (2023). DOI: 10.1039/d3cc02965d

Y. MAEDA, Y. SUZUKI, Y. KONNO, P. ZHAO, N. KIKUCHI, M. YAMADA, M. MITSUISHI, A. T. N. DAO, H. KASAI and M. EHARA, "Selective Emergence of Photoluminescence at Telecommunication Wavelengths from Cyclic Perfluoroalkylated Carbon Nanotubes," *Commun. Chem.* **6(1)**, 159 (2023). DOI: 10.1038/s42004-023-00950-1

Z. LEI, P. ZHAO, X. L. PEI, H. UBE, M. EHARA and M. SHIONOYA, "Photoluminescence Control by Atomically Precise Surface Metallization of *C*-Centered Hexagold(I) Clusters Using *N*-Heterocyclic Carbenes," *Chem. Sci.* **14(23)**, 6207–6215 (2023). DOI: 10.1039/d3sc01976d

T. SHIRAOGAWA and J. HASEGAWA, "Optimization of General Molecular Properties in the Equilibrium Geometry Using Quantum Alchemy: An Inverse Molecular Design Approach," *J. Phys. Chem. A* **127(19)**, 4345–4353 (2023). DOI: 10.1021/acs.jpca.3c00205

Y. LIU, K. YUAN, M. LI and P. ZHAO, "Nanoscale Saturn Systems Based on $C_{60/70}$ Bucky Ball and a Newly Designed [4]Cyclopara-1,2-diphenylethylene Hoop: A Strategy for Fullerene Encapsulation Release and Selective Recognition for C_{70}," *Inorg. Chem.* **62(23)**, 8993–9004 (2023). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.3c00665

B-3) 総説，著書

Y. MAEDA, P. ZHAO and M. EHARA, "Recent Progress in Controlling the Photoluminescence Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes by Oxidation and Alkylation," *Chem. Commun.* **59(98)**, 14497–14508 (2023). DOI: 10.1039/D3CC05065C

前田　優，江原正博,「解説：化学修飾でカーボンナノチューブの近赤外発光特性を制御――バイオイメージングや光量子デバイスの光源としての活用を目指して」, *化学*, **79**, 37–40 (2024).

秋山　葵，Sakiat Hossain，新堀佳紀，川脇徳久，緒方大二，Pei Zhao，湯浅順平，江原正博，根岸雄一,「解説：スルフォネート保護銀ナノクラスターの合成と発光特性評価」, *ナノ学会誌*, **22**, 13–19 (2023).

B-4) 招待講演

M. EHARA, "Nanocluster and Heterogeneous Catalysis: Interplay between Theory and Experiment," The 16th Eurasia Conference on Chemical Sciences 2023, Bangkok (Thailand), December 2023.

M. EHARA, "Aggregation Induced Photoluminescence of Metal Complexes and Nanoclusters," Chimie ParisTech, Paris (France), November 2023.

M. EHARA, "Photofunctions of Complex Systems and Nanoclusters," Chimie ParisTech, Paris (France), November 2023.

M. EHARA, "Photofunctions of Complex Systems and Nanoclusters Focusing on Inverse Design Approach," IIIT Hyderabad, Hyderabad (India), October 2023.

M. EHARA, "Photofunctions of Complex Systems and Nanoclusters Focusing on Inverse Design Approach," The 26th Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXVI), Jaipur (India), October 2023.

M. EHARA, T. SHIRAOGAWA and P. ZHAO, "Photofunctions of Complex Systems and Nanoclusters Focusing on Inverse Design Approach," Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023), Sapporo (Japan), September 2023.

M. EHARA, "Nanocluster and Heterogeneous Catalysis: Interplay between Theory and Experiment," Taiwan International Conference on Catalysis (TICC-2023), Tainan (Taiwan), June 2023.

江原正博,「計算科学研究センターの施設紹介：超階層生物学で有効利用いただくために」, 生命と情報の新たなる融和：超階層生物学とAI・数理, 岡崎, 2024年2月.

江原正博,「量子逆設計理論による機能設計および分子研・計算センターのデータ科学への取組み」, データ連携部会第5回意見交換会, 物性研オンライン, オンライン開催, 2023年7月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子科学会運営委員 (2020–2024).

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

触媒学会界面分子変換研究会世話人会委員 (2015–)，コンピュータの利用研究会世話人会委員 (2018–)，元素循環触媒研究会委員 (2022–2024).

量子化学研究協会理事 (2006–2024).

日本化学会東海支部常任幹事 (2022–2024)，会計幹事 (2023–2024).

計算物質科学協議会, 運営委員会委員 (2020–2024).

学会の組織委員等

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

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

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会学術システム研究センター専門研究員 (2020–2024).

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

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

東北大学金属材料研究所イノベーション創出人材育成委員会委員 (2015–2024).

東京大学物性研究所データ創出活用型マテリアル研究開発プロジェクトデータ連携部会委員 (2022–2024).

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 (2023).（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–).

B-8) 大学等での講義，客員

大阪大学工学部, 非常勤講師,「計算機化学」, 2023年4月–2024年3月.

総合研究大学院大学,「基礎物理化学I」, 2023年7月.

B-10) 競争的資金

日本学術振興会学術動向等に関する調査研究（受託研究),「基礎物理化学関連分野に関する学術研究動向—複雑系の理論・計算科学の新たな潮流と展開—」, 江原正博 (2020年度–2023年度).

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

科研費特別研究員奨励費,「電子状態理論に基づく理論触媒設計法の開発と高機能分子触媒設計・開発への応用」, 白男川貴史 (2021年度–2023年度).

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

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

C)　研究活動の課題と展望

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

奥　村　久　士（准教授）（2009 年 5 月 1 日着任）

伊藤　暁（助教）
谷本　勝一（学振特別研究員）
SULONG, Nor Akmalyati（インターンシップ）
大多和　克紀（大学院生）
鈴木　日奈子（特別共同利用研究員）
川口　律子（事務支援員）

A-1) 専門領域：理論生物物理学，理論化学物理学

A-2) 研究課題：

a) アミロイドβペプチドの凝集過程を解明する大規模分子動力学シミュレーション
b) 粗視化モデルによるアミロイド線維形成のモンテカルロシミュレーション法の開発
c) アルギニンによるポリグルタミンタンパク質の凝集阻害効果の解明
d) 生体膜上の流れを再現する分子動力学シミュレーション手法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) アルツハイマー病はアミロイドβ（Aβ）ペプチドの凝集体が原因で発症する。Aβには 42 残基からなる Aβ42 と 40 残基からなる Aβ40 の 2 種類がある。我々は昨年度までに 2 本の Aβ42 からなる系および 2 本の Aβ40 からなる系の分子動力学シミュレーションを実行し，① Aβが β ヘアピン構造を形成している時に凝集しやすいこと，② Aβ42 の方が Aβ40 よりも β ヘアピン構造を形成しやすいため凝集しやすいこと，③ 5 番目のアミノ酸残基であるアルギニンが凝集のカギとなっていることを解明してきた。これらの成果によりタンパク質の凝集に関する理論研究で世界をリードしている。現在はより大規模な凝集過程を解明するために 32 本の Aβ42 および Aβ40 からなる系の分子動力学シミュレーションを実行している。これまでに 1.8 マイクロ秒のシミュレーションが完了し，12 量体などより大きなオリゴマーの形成を再現することに成功した。今後より詳細な凝集メカニズムを解明する。
b) アミロイド線維が伸長する過程は全原子モデルによるシミュレーションの時間スケールよりはるかに長い。そこでアミロイド線維伸長過程をシミュレーションするための粗視化モデルを提唱した。このモデルではタンパク質 1 分子を１つの球で表し，格子点上を移動する。一次元方向にこの球が吸着することでアミロイド線維の伸長を表す。この手法を用いて，Aβペプチドのアミロイド線維が一方向にしか伸長しないこと，伸長する局面と一時停止する局面があること，などの実験結果を再現することができた。
c) ポリグルタミンタンパク質はグルタミンの繰り返しが異常に拡張したもので，ハンチントン病などのポリグルタミン病を引き起こす。これまでの実験研究から，アルギニンがポリグルタミンタンパク質の凝集を抑制することが明らかになっている。我々は，アルギニンだけが持つポリグルタミンタンパク質の凝集抑制機構を明らかにするために，アルギニンと 1 本のポリグルタミンからなる系およびリジンと 1 本のポリグルタミンからなる系のレプリカ置換分子動力学シミュレーションを行った。その結果，①アルギニンは同じく正電荷を持つリジンに比べてポリグルタミンタンパク質とよく水素結合を形成すること，②このためアルギニンが存在するとポリグルタミンは凝集の核となるβヘアピン構造を形成しにくくなること，③この効果はリジンでは見られないことを明らかにした。このようにアルギニン

の有無がポリグルタミンの分子内構造に大きな違いを生じさせていることを明らかにした。これはポリグルタミンタンパク質の凝集抑制効果の解明につながる発見である。

d) 我々は昨年度生体膜表面上で溶液の流れを発生させるための非平衡分子動力学シミュレーション法を開発した。この手法では生体膜の重心をラグランジュ未定乗数法で固定しながら，生体膜上の溶液には一定の加速度を加えることで生体膜上の流れを作り出している。この手法を用いると生体膜に挟まれた領域のポアズイユ流を作り出すことができる。生体膜上のポアズイユ流を再現できる計算手法はこれが最初で唯一である。今年度はこの手法を使った脂質二重膜上の流れのシミュレーションを数多く行うことで統計量を増やし，その流れの性質を詳細に解析した。その結果，膜から離れた領域では剛体平板上のポアズイユ流と同様に放物線状の流れが作られる一方，膜との境界近くでは放物線状にならないことを発見した。その理由は界面が揺らぎ凸凹していることに起因することも解明した。

B-1) 学術論文

S. TANIMOTO and H. OKUMURA, "Theoretical Analysis of the Aggregation-Inhibition Effect of Arginine on Polyglutamine Protein by the Generalized-Ensemble Method," *J. Comput. Chem., Jpn.* **22(2)**, 18–20 (2023). DOI: 10.2477/jccj.2023-0020

D. FUKUHARA, S. G. ITOH and H. OKUMURA, "Inhibition of Amyloid-β(16–22) Aggregation by Polyphenols Using Replica Permutation with Solute Tempering Molecular Dynamics Simulation," *Biophys. Physicobiol.* **20(4)**, e200045 (2023). DOI: 10.2142/biophysico.bppb-v20.0045

H. OKUMURA, S. G. ITOH, H. ZEN and K. NAKAMURA, "Dissociation Process of Polyalanine Aggregates by Free Electron Laser Irradiation," *PLoS One* **18**, e0291093 (2023). DOI: 10.1371/journal.pone.0291093

M. YAGI-UTSUMI, S. G. ITOH, H. OKUMURA, K. YANAGISAWA, K. KATO and K. NISHIMURA, "The Double-Layered Structure of Amyloid-β Assemblage on GM1-Containing Membranes Catalytically Promotes Fibrillization," *ACS Chem. Neurosci.* **14(15)**, 2648–2657 (2023). DOI: 10.1021/acschemneuro.3c00192

H. KOYAMA, H. OKUMURA, A. M. ITO, K. NAKAMURA, T. OTANI, K. KATO and T. FUJIMORI, "Effective Mechanical Potential of Cell–Cell Interaction Explains Three-Dimensional Morphologies during Early Embryogenesis," *PLoS Comput. Biol.* **19(8)**, e1011306 (2023). DOI: 10.1371/journal.pcbi.1011306

B-3) 総説，著書

H. OKUMURA, "Perspective for Molecular Dynamics Simulation Studies of Amyloid-β Aggregates," *J. Phys. Chem. B* **127(51)**, 10931–10940 (2023). DOI: 10.1021/acs.jpcb.3c06051

伊藤　暁，奥村久士，矢木真穂，加藤晃一,「アミロイドベータペプチドの凝集初期過程の分子シミュレーション」, *月刊「細胞」*, **55(10)**, 784–788 (2023).

奥村久士,「分子シミュレーションによるタンパク質のフォールディング／ミスフォールディング」, タンパク質の構造解析手法と In silico スクリーニングへの応用事例, 第 4 章（第 5 節）, 254–262 (2023).

奥村久士,「超音波と赤外線レーザーによるアミロイド線維の破壊を分子動力学シミュレーションで見る」, *高圧力の科学と技術*, **33(2)**, 76–82 (2023).

B-4) 招待講演

奥村久士,「アミロイドβ凝集体の分子動力学シミュレーション」, 学術変革B「動的溶液環境」zoom セミナー , オンライン開催, 2024年 2月.

奥村久士,「中赤外レーザーによるアミロイドβ凝集体の選択的破壊」, 多元技術融合光プロセス研究会, 東京, 2023年 8月.

奥村久士,「コンピュータシミュレーションで見るアルツハイマー病原因物質の分子動画」, 第 32回高速分子動画オンラインセミナー , オンライン開催, 2023年 8月.

伊藤　暁,「分子シミュレーションを用いたアミロイド線維形成初期過程の解明」, 第 23回日本蛋白質科学会年会, 名古屋, 2023年 7月.

奥村久士,「各種統計アンサンブルの生成法」, 第 17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, 2023年 9月.

S. G. ITOH, "Molecular dynamics simulation of amyloid-β peptides in bulk water and at hydrophilic/hydrophobic interfaces," Telluride Science Winter Workshop "The Role of Fluctuations and Dynamics in Biomolecular Function," Telluride (USA), January 2024.

H. OKUMURA, "Molecular dynamics simulation for the causative substance of Alzheimer's disease," 5th International Conference on Materials Research and Innovation, Bangkok (Thailand), December 2023.

S. G. ITOH, "Early process of oligomer formation of amyloid-β peptides using the Coulomb replica-permutation method," The 16th Eurasia Conference on Chemical Sciences, Bangkok (Thailand), December 2023.

H. OKUMURA, "Amyloid-fibril dissociation observed by nonequilibrium molecular dynamics simulation," The 16th Eurasia Conference on Chemical Sciences, Bangkok (Thailand), December 2023.

S. G. ITOH, "Generalized-ensemble algorithms for protein oligomerization processes," ACS Global Innovation Imperatives —7th International Conference on Computation for Science and Technology, Kuala Lumpur (Malaysia), December 2023.

H. OKUMURA, "Disease-related proteins studied by molecular dynamics simulations," ACS Global Innovation Imperatives —7th International Conference on Computation for Science and Technology, Kuala Lumpur (Malaysia), December 2023.

H. OKUMURA, "All-atom molecular dynamics simulations for the formation and dissociation of amyloid-β aggregates," The 61st Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Liquid–liquid phase separation and amyloid formation driven by dynamic solution environments, Nagoya (Japan), November 2023.

H. OKUMURA, "Key factors for aggregation and disaggregation of amyloid-β peptides revealed by molecular dynamics simulations," 19th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering, Heraklion (Greece), September 2023.

H. OKUMURA, "Aggregation and disaggregation of amyloid-β peptides observed by all-atom molecular dynamics simulations," The 26th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering, Pattaya (Thailand), July 2023.

H. OKUMURA, "Molecular dynamics simulations for disease-related proteins," Theoretical Physics Seminar, Warsaw (Poland), June 2023.

H. OKUMURA, "Replica-permutation and nonequilibrium molecular dynamics simulations for protein aggregates," Biomolecules and Nanostructures 8, Krakow (Poland), June 2023.

B-6) 受賞，表彰

谷本勝一，伊藤　暁，奥村久士, 日本シミュレーション学会ベストオーサー賞 (2023).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会名古屋支部役員 (2017–).

学会の組織委員等

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

日本生物物理学会第 61 回日本生物物理学会年会実行委員 (2023–2024).

日本蛋白質科学会第 23 回日本蛋白質科学会年会ワークショップオーガナイザー (2023–2024).

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「病気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」, 2023 年 5 月.

総合研究大学院大学先端学術院, 集中講義「生体分子シミュレーション」, 2023 年 12 月.

中京大学, 非常勤講師, 2023 年 09 月–2024 年 3 月.（伊藤　暁）

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C),「レーザー照射によるアミロイド線維の破壊機構を分子動力学シミュレーションで解明する」, 奥村久士 (2021 年度–2023 年度).

科研費基盤研究(C),「計算機シミュレーションによる脂質膜上でのアミロイドベータペプチドの凝集過程の解明」, 伊藤　暁 (2021 年度–2023 年度).

科研費若手研究,「アルギニンによるポリグルタミンタンパク質の凝集阻害過程の理論研究」, 谷本勝一 (2021 年度–2023 年度).

C)　研究活動の課題と展望

a) 我々は最近，アミロイドβペプチドの凝集の鍵が 5 番目の残基・アルギニンの持つ正電荷にあることを明らかにした。この研究では二量体について調べたが，さらに大きな凝集体の形成メカニズムを明らかにするため，現在 32 本の Aβ42 および Aβ40 からなる大規模系の分子動力学シミュレーションを実行している。この系の二次構造，分子揺らぎ，溶媒和などの解析を行い，大きなオリゴマーの形成において何が重要な働きをするのかを明らかにし，詳細な凝集メカニズムを解明する。

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

c) アルギニンによるポリグルタミンタンパク質凝集抑制機構を解明するため，これまでアルギニンまたはリジンと 1 本の

ポリグルタミンからなる系の分子動力学シミュレーションを行ってきた。今後はアルギニンまたはリジンと2本のポリグルタミンからなる系の分子動力学シミュレーションを実行し，アルギニンがポリグルタミンタンパク質の凝集抑制効果を持ち，同じく正電荷を持つリジンではその効果がない理由を解明する。

d) 生体内は血液や細胞間液，細胞内液などの液体で満たされ，これらの液体は常に流動している。この流れがタンパク質のアミロイド線維化を促進していることが最近明らかになった。しかし，流れ場がアミロイド線維化を促進する機構はまだ分かっていない。そこで，我々が最近開発した生体膜上の流れを再現する非平衡分子動力学シミュレーション手法を用いて，流れによりアミロイド線維化が促進される理由を解明する。

岡　崎　圭　一（准教授）(2020 年 12 月 1 日着任)

大貫　隼（助教）
小林　稜平（学振特別研究員）
MAHMOOD, Md Iqbal（特任研究員）
GUYOT, Constantin（インターンシップ）
関　健仁（大学院生）
千葉　史朱香（事務支援員）

A-1) 専門領域：理論生物物理学

A-2) 研究課題：

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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 分子モーターは，生体内で ATP 加水分解エネルギーなどの化学エネルギーを消費して，1 方向性の運動をするタンパク質である。また，このような運動を阻害する因子が存在することが知られている。一例として，回転モーター F_1-ATPase の回転運動を阻害する IF_1 があるが，興味深いことに，阻害状態を解除するには合成方向に回転させる必要があり，ここで再び 1 方向性の運動が必要になる。この 1 方向性の阻害状態解除メカニズムを分子シミュレーションによって解明する。シミュレーション中に，回転子にトルクをかけて加水分解・合成方向のそれぞれに回転させて，阻害因子・回転子の相互作用，回転に伴う仕事等の観点から解析を行なっている。
b) シュウ酸は多量に摂取すると，体内で尿管結石等の症状を引き起こす。このシュウ酸は腸内細菌により分解され制御されているが，その際にシュウ酸を細菌内に輸送するのがシュウ酸トランスポーターである。このシュウ酸トランスポーターの原子レベル構造が岡山大・山下敦子教授のグループで解かれた。我々は，山下教授のグループとの共同研究により，シュウ酸トランスポーターによる基質輸送の際の基質結合やトランスポーター構造ダイナミクスを量子化学・分子動力学計算を用いて取り組んだ。まず，基質結合サイトの量子化学計算により結合したシュウ酸がねじれた構造をしていることを明らかにした。次に，トランスポーターの全原子分子動力学シミュレーションにより，閉塞状態から外向き開状態へ構造遷移する際に基質結合に関わる特定のアミノ酸残基とゲートの役割をしているアミノ酸残基の動きが重要でスイッチになっていることを同定した。さらに，構造変化に重要な部位の相互作用を人工的に弱めたシミュレーションにより，これまで未知であった内向き開構造が解明され，構造予測 AI である AlphaFold2 により内向き開構造を安定化する変異を予測した。
c) 細胞膜は，多種多様なタンパク質と相互作用して，ダイナミックに変形する。例えば，エンドサイトーシスなどで見られるように一部切り離されて袋状構造（ベシクル）を作って細胞内外の物質輸送に使われる。このような細胞膜変形に関わるタンパク質が，膜を曲げる Pacsin1 や，GTP 加水分解エネルギーを用いて膜を切断するダイナミンである。我々は，大規模で長時間のシミュレーションが可能な粗視化 Gō-MARTINI モデルの開発を行って，Pacsin1 に応

用することで，その構造揺らぎが正しく再現できることを示した。さらに，チューブ状膜とダイナミンの大規模多量体からなるシミュレーション系を構築して，ダイナミンによる膜切断の分子メカニズムに迫ろうとしている。

B-1) 学術論文

J. OHNUKI, T. JAUNET-LAHARY, A. YAMASHITA and K. OKAZAKI, "Accelerated Molecular Dynamics and AlphaFold Uncover a Missing Conformational State of Transporter Protein OxlT," *J. Phys. Chem. Lett.* **15(3)**, 725–732 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpclett.3c03052

M. YAGI-UTSUMI, H. MIURA, C. GANSER, H. WATANABE, M. HIRANYAKORN, T. SATOH, T. UCHIHASHI, K. KATO, K. OKAZAKI and K. AOKI, "Molecular Design of FRET Probes Based on Domain Rearrangement of Protein Disulfide Isomerase for Monitoring Intracellular Redox Status," *Int. J. Mol. Sci.* **24(16)**, 12865 (2023). DOI: 10.3390/ijms241612865

J. OHNUKI, Y. ARIMURA, T. KONO, K. KINO, H. KURUMIZAKA and M. TAKANO, "Electrostatic Ratchet for Successive Peptide Synthesis in Nonribosomal Molecular Machine RimK," *J. Am. Chem. Soc.* **145(29)**, 15963–15970 (2023). DOI: 10.1021/jacs.3c03926

T. JAUNET-LAHARY, T. SHIMAMURA, M. HAYASHI, N. NOMURA, K. HIRASAWA, T. SHIMIZU, M. YAMASHITA, N. TSUTSUMI, Y. SUEHIRO, K. KOJIMA, Y. SUDO, T. TAMURA, H. IWANARI, T. HAMAKUBO, S. IWATA, K. OKAZAKI, T. HIRAI and A. YAMASHITA, "Structure and Mechanism of Oxalate Transporter OxlT in an Oxalate-Degrading Bacterium in the Gut Microbiota," *Nat. Commun.* **14(1)**, 1730 (2023). DOI: 10.1038/s41467-023-36883-5

R. KOBAYASHI, H. UENO, K. OKAZAKI and H. NOJI, "Molecular Mechanism on Forcible Ejection of ATPase Inhibitory Factor 1 from Mitochondrial ATP Synthase," *Nat. Commun.* **14(1)**, 1682 (2023). DOI: 10.1038/s41467-023-37182-9

B-4) 招待講演

岡崎圭一,「Conformational dynamics of transporter proteins revealed by molecular simulation and AlphaFold2」, 第 61 回日本生物物理学会年会, 名古屋, 2023 年 11 月.

岡崎圭一,「分子シミュレーションと反応速度論・マルコフモデル」, 第 17 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, 2023 年 9 月.

K. OKAZAKI, "Molecular Simulation of functional motions in biomolecular machines," The 6th International Conference on Molecular Simulation, Taipei (Taiwan), October 2023.

K. OKAZAKI, "Accelerated Molecular Dynamics and AlphaFold Discover a Conformational State of Transporter Protein OxlT," 9th Annual CCPBioSim Conference: Biomolecular Simulations for a Better World, Leeds (U.K.), July 2023.

B-6) 受賞，表彰

小林稜平, 日本生物物理学会若手奨励賞 (2023).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会代議員 (2023–2025).

学会の組織委員等

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

分子シミュレーションスクール世話人 (2016–).

日本生物物理学会第 61 回年会実行委員 (2023).

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

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

総合研究大学院大学先端学術院, 集中講義「生体分子シミュレーション」, 2023 年 12 月.

B-10) 競争的資金

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

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

C) 研究活動の課題と展望

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

6-5　光分子科学研究領域

光分子科学第二研究部門

大　森　賢　治（教授）（2003 年 9 月 1 日着任）

DE LÉSÉLEUC, Sylvain（特任准教授）
富田　隆文（助教）
周 鳥居　諭来（特任助教）
松原　卓也（特任助教）
田村　光（特任助教）
BHARTI, Vineet（特任研究員）
CHAUHAN, Vikas Singh（特任研究員）
JAUNET-LAHARY, Titouan（特任研究員）
岡田　満哉（特別訪問研究員）
藤川　武敏（特命専門員）
川本　美奈子（特任専門員）
鈴井　光一（特任専門員）
牧野　茜（特任専門員）
松尾　友紀子（特任専門員）
犬飼　和久（特任専門員）
酒井　志帆（特任専門員）
伊神　賢人（特任専門員）
POITRINAL, Martin（インターンシップ）
TETTEKPOE, Jean-Samuel（インターンシップ）
MARTIN, Romain（インターンシップ）
VILLELA ESCALANTE, Rene Alejandro（インターンシップ）
DENECKER, Tom（インターンシップ）
栂岡　雅人（インターンシップ）
PRAVONGVIENGKHAM, Methkam（インターンシップ）
北出　聡太（インターンシップ）
渡部　元輝（インターンシップ）
GUILLEMANT, Oscar（インターンシップ）
DUBON, Joaquin（インターンシップ）
GANESAN, Karthikeyan（インターンシップ）
MAITY, Arnab（インターンシップ）
CHAUHAN, Anjali（インターンシップ）
STAINER, Lea-Marina（インターンシップ）
WEDOWSKI, Roxana（インターンシップ）
KOCIK, Robin（インターンシップ）
KETAIAM, Kittisak（インターンシップ）
SIRIWORAKOONCHAI, Phatwarach（インターンシップ）
BRAUN, Eduard（インターンシップ）
TRAUTMANN, Arno（インターンシップ）

WEBER, Sebastian（インターンシップ）
ROUSSEL, Mathis（インターンシップ）
LERICHE, Axel-Ugo（インターンシップ）
TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh（大学院生）
田中　愛登（大学院生）
中井　愛里（技術支援員（派遣））
片岡　賢輔（技術支援員（派遣））
西岡　稚子（事務支援員）
越田　陽子（事務支援員）
山岸　芽衣（事務支援員）

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 3 件を行っている。

B-1) 学術論文

V. BHARTI, S. SUGAWA, M. MIZOGUCHI, M. KUNIMI, Y. ZHANG, S. DE LÉSÉLEUC, T. TOMITA, T. FRANZ, M. WEIDEMÜLLER and K. OHMORI, “Picosecond-Scale Ultrafast Many-Body Dynamics in an Ultracold Rydberg-Excited Atomic Mott Insulator,” *Phys. Rev. Lett.* **131**, 123201 (12 pages) (2023). DOI: 10.1103/PhysRevLett.131.123201

V. BHARTI, S. SUGAWA, M. KUNIMI, V. S. CHAUHAN, T. P. MAHESH, M. MIZOGUCHI, T. MATSUBARA, T. TOMITA, S. DE LÉSÉLEUC and K. OHMORI, “Strong Spin-Motion Coupling in the Ultrafast Quantum Many-Body Dynamics of Rydberg Atoms in a Mott-Insulator Lattice,” *arXiv* 2311.15575 (2023). DOI: 10.48550/arXiv.2311.15575

B-3) 総説，著書

富田隆文, シルヴァン ド レゼルック, 大森賢治,「単一原子をレーザー制御する超高速量子コンピューター 特集 “2022 年日本の光学研究”」, *光学*, **52(6)**, (2023).

富田隆文，松原卓也，シルヴァン ド レゼルック，大森賢治,「冷却リュードベリ原子列の超高速レーザー制御　超高速量子コンピュータへの展開」, *応用物理*, **93(2)**, 89–95 (2024).

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冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, 第 3 回量子コンピューティング EXPO（春), 東京ビッグサイト , 東京都江東区, 2023 年 5 月 .

大森賢治,「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, 第 7 回 SEMI 量子コンピューター協議会 , SEMI Japan, 東京都千代田区, 2023 年 5 月 .

大森賢治,「Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit」, 13th RIKEN QUANTUM COMPUTING（RQC）Colloquium, 理化学研究所, 埼玉県和光市, 2023年6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」, マイクロフォトニクス研究会 第10回レーザー学会「小型集積レーザー」専門委員会, 分子科学研究所, 愛知県岡崎市, 2023年9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」, あいちモノづくりエキスポ2023, Aichi Sky Expo, 愛知県常滑市, 2023年10月.

大森賢治,「量子力学に残された100年の謎に迫る」, 真和中学・高等学校文化記念講演会, 真和中学校・高等学校, 熊本県熊本市, 2023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」, VACUUM2023真空展併設真空フォーラム・シンポジウム, 東京ビッグサイト, 東京都江東区, 2023年12月.

大森賢治,「量子力学100年の謎と超高速量子コンピュータへの挑戦」, 第32回豊田理研懇話会, 豊田理化学研究所井口洋夫記念ホール, 愛知県長久手市, 2023年12月.

大森賢治,「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」, 光・量子飛躍フラッグシッププログラム（Q-LEAP）第6回シンポジウム, 伊藤国際学術研究センター, 東京都文京区, 2024年2月.

大森賢治,「世界に羽ばたく大森量子コンピュータ・スタートアップいよいよ始動へ」, 三菱UFJ銀行, 麹町ガーデンタワー, 東京都千代田区, 2024年3月.

大森賢治,「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」, ムーンショット目標6公開シンポジウム2024, ベルサール秋葉原, 東京都千代田区, 2024年3月.

K. OHMORI, “Ultrafast Quantum Computing with Ultracold Atom Arrays at Quantum Speed Limit,” 17th International Conference on Squeezed States and Uncertainty Relations (ICSSUR 2023), Taipei (Taiwan), June 2023.*（オープニングセレモニープレナリー講演）

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Colloquium Lecture, Institute of Atomic and Molecular Sciences (IAMS), Taipei (Taiwan), June 2023.

K. OHMORI, “Japan’s Policy on Quantum Technology and Innovation,” Online Training: Quantum Technology for Policymakers, EU Quantum Flagship, Online, July 2023.

K. OHMORI, “Large-scale and high-coherence fault-tolerant quantum computer with dynamical atom arrays,” Moonshot Goal 6 International Symposium 2023, Tokyo (Japan), July 2023.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” ICPEAC (International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions)2023, Ottawa (Canada), July 2023.*（オープニングセレモニープレナリー講演）

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” The 15th Femtochemistry Conference—Dynamics of Complex Molecular Processes in Chemistry, Biology & Physics (FEMTO15), Berlin (Germany), August 2023.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” 11th Bonn Humboldt Award Winners’ Forum 2023 “Quantum Science: from Foundations to Instrumentation,” The Wolfgang Paul Lecture Hall, Kranz Parkhotel Siegburg, Bonn, Siegburg (Germany), October 2023.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Friedrich-Alexander-Universität Physics Colloquium, Friedrich-Alexander-Universität, Erlangen (Germany), November 2023.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Extraordinary invited talk, Peter Grünberg Institut Forschungszentrum Jülich, Jülich (Germany), November 2023.

B-5) 特許出願

US2023/0281498A1,「量子シミュレーターおよび量子シミュレーション方法（Quantum Simulator and Quantum Simulation Method）」, 酒井寛人（浜松ホトニクス）, 大森賢治（自然科学研究機構）, 安藤太郎（浜松ホトニクス）, 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）, 2021年.（公開日 2023年9月7日）

US2023/0317309A1,「量子シミュレーターおよび量子シミュレーション方法（Quantum Simulator and Quantum Simulation Method）」, 酒井寛人（浜松ホトニクス）, 大森賢治（自然科学研究機構）, 安藤太郎（浜松ホトニクス）, 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）, 2021年.（公開日 2023年10月5日）

B-6) 受賞，表彰

Sylvain de LÉSÉLEUC, 第12回自然科学研究機構若手研究者賞 (2023).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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

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

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

日本分光学会代議員 (2022–).

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–).

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

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

文部科学省 科学技術・学術審議会 専門委員 (2015–).

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

文部科学省 研究計画・評価分科会 臨時委員 (2023–).

科学技術振興機構・戦略的創造研究推進事業（CREST）研究領域「量子状態の高度な制御に基づく革新的量子技術基盤の創出」（研究総括：荒川泰彦）領域事後評価委員 (2023–2024).

日本学術振興会 特別研究員等審査会委員等 (2022–2023).

学会誌編集委員

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

競争的資金等の領域長等

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

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「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–).

理科教育活動

講演講師「量子力学に残された 100 年の謎に迫る」真和中学・高等学校文化記念講演会 (2023).

その他

大森賢治個人で年額（換算）およそ 17 億円にも上る極めて高額の外部資金を獲得（上記の「競争的資金等の領域長等」および下記「B-10) 競争的資金」の項を参照）することで，分子研の財政に多大な貢献をもたらすとともに，分子研の世界的な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の量子コンピュータ開発の成果を用いた事業化のニュースが日本経済新聞・朝刊（2024 年 2 月 27 日）1 面トップ記事，および日本経済新聞・電子版（2024 年 2 月 27 日）トップ記事としてハイライトされるとともに，同日の日本経済新聞・電子版のアクセスランキング「総合」および「朝刊・夕刊から」の両方で首位にランクされた。その他にも読売新聞，中日新聞，産経新聞，FNN ニュースなど，多くのメディアで大々的に報道された。また，欧米中等，海外の多くのメディアでも大々的に報道された。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.

自然科学研究機構本部と分子科学研究所が中心となり，分子研大森グループの量子コンピュータ開発の成果を用いた事業化のための協議体「事業化検討プラットフォーム」を立ち上げ，日本政策投資銀行（DBJ），日立製作所，富士通，NEC，浜松ホトニクス，豊田通商，岡崎信用金庫をはじめとする 12 社の参画を得ている。これによって，国内外の産業界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

4-6 新聞報道に記載されている通り，NHK，読売新聞，日本経済新聞などを始めとする全国区の主要なニュースメディアに度々露出している。特に最近は，研究成果だけでなく，読売新聞，日本経済新聞，NHK，日経サイエンスなど主要メディアの「人もの記事」に次々に登場している。つい最近にも日本経済新聞の名物インタヴュー記事「人間発見」において，大森の半生を辿った 5 回連載記事が掲載され，全国的に大きな反響を呼んだ。これらの極めて頻繁な全国区の報道によって，一般社会に対する分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.（web ニュース等については，https://ohmori.ims.ac.jp/kenjiohmori/ を参照）

文部科学省 科学技術・学術審議会 量子科学技術委員会の主査代理 専門委員（2015–2023），同委員会の主査（2023–現在），ならびに文部科学省 研究計画・評価分科会 臨時委員（2023– 現在）として，量子テクノロジー開発および分子研 UVSOR を含む量子ビーム（放射光施設・大型レーザー施設）利用推進に関する政策検討に大きく貢献.

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

冷却原子型・量子コンピュータ開発において従来技術を一気に 2 桁上回る超高速 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（2023年10月以降～現在も継続）でハイライトされが，この報道は2023年10月以降も継続している。これらの報道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．

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

上記の超高速2量子ビットゲートの成果を受けて，応用物理学会機関誌「応用物理」や日本光学会誌「光学」に解説記事が掲載された他，「日本物理学会誌」，自動車技術会誌「自動車技術」などからも，次々に解説記事を依頼されるなど，物理学，光学，自動車技術など様々な研究分野に強烈なインパクトを与え，分子研の全国的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

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– ），米国の産業界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

NHKより量子をテーマにした取材を継続的に受け，この過程で大森を主役としたNHKテレビ番組（大森グループの超高速量子コンピュータの開発秘話・特集：2023年6月26日おはよう東海「愛知発！　量子コンピューター」／2023年6月20日まるっと「Google超え超高速コンピューター　岡崎発！量子コンピューター技術」）に出演するなど，一般社会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．

東京ビッグサイトで開催された第3回量子コンピューティングEXPO（春）（2023年5月11日）において，大森グループの超高速量子コンピュータに関する特別講演を行うことによって，日本の産業界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

2023年5月17日にSEMI Japan（東京・千代田区）に招かれ，大森グループの超高速量子コンピュータに関する招待講演を行うことによって，日本の産業界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

経済産業省からの依頼で，量子コンピュータ開発の現状と展望に関するインタヴュー（2023年5月29日）を受けることによって，経済産業省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．

理研量子コンピュータセンター（RQC）コロキウム（2023年6月21日）に日本人として初めて招かれ，コロキウム講演を行うことによって，日本の学術界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

EU量子フラッグシッププログラムが主催する各国の政策立案者を対象にした研究会（2023年7月6日）において，米国ホワイトハウスOSTP代表者と共に，日本政府代表者として招かれ，日本の量子技術政策に関する招待講演とパネル討論を行うことによって，世界の量子技術関係者に対する分子研のプレゼンス向上に大きく貢献．

自然科学研究機構･研究基盤戦略会議メンバーに対して，大森グループの超高速量子シミュレータ･量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー（2023年9月14日）を行うことによって，自然科学研究機構全体に対する分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

文部科学省・基礎基盤研究課に対して，大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー（2023年9月19日）を行うことによって，日本政府に対する分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

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–)（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予定）として，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．

あいちモノづくりEXPO（2023年10月5日）で招待講演（特別講演）を行うことによって，東海地方の産業界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

熊本市の真和中学校・高等学校で「量子力学100年の謎と超高速量子コンピュータへの挑戦」に関する招待講演を行うことによって，小中高生世代の啓蒙と分子研の知名度向上に貢献．

中部経済連合会と北海道経済連合会に対して大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー（2023年10月11日）を行うことによって，中部地方と北海道の産業界・財界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

名古屋市経済局に対して大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー（2023年11月29日）を行うことによって，名古屋市行政における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

日本表面真空学会と日本真空工業会が主催するVACUUM2023真空展「真空フォーラム・シンポジウム」（東京ビッグサイト, 2023年12月1日）において招待講演を行うことによって，国内の真空関連業界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献．

豊田理研懇話会において招待講演（2023年12月12日）を行い，史上最多の354名の聴講者に対して「量子力学100年の謎と超高速量子コンピュータへの挑戦」に関する招待講演を行うことによって，トヨタグループをはじめとする産業界における分子研の知名度向上に大きく貢献．

特許庁からの依頼で，量子コンピュータ開発の現状と展望に関するインタヴュー（2024年1月2日）を受けることによって，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．

真空工業会技術フォーラムに対して，大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー（2024年2月15日）を行うことによって，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．

ムーンショット目標6の国際的な知名度向上，世界の研究者への広報活動強化のため，Natureにムーンショット目標6の特集記事が掲載された。その中で，ムーンショット事業の認知度向上に大きく貢献し，注目を浴びている大森プロジェクトは，独立して2ページにわたり取り上げられ（「Orchestrating a quantum leap using cold atoms」, Focal Point on Quantum Computing in Japan, *Nature*, **Vol. 626**, No. 8001, 雑誌及びオンライン掲載2024年2月29日），ムーンショット目標6及び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．

三菱UFJ銀行に対して，大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャー（2024年3月15日）を行うことによって，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–2028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 (2016年–).

（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–).

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

C) 研究活動の課題と展望

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

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

②量子散逸系でのコヒーレント制御の実現：①で得られる知見をもとにデコヒーレンスの激しい凝縮系でのコヒーレント制御法を探索する。

③原子・分子ベースの量子情報科学の開拓：アト秒精度の超高速コヒーレント制御技術によって，原子・分子内の電子・振動固有状態を用いるユニタリ変換とそれに基づく量子情報処理の確立を目指す。さらに，単一原子・分子の操作・読み出し技術の開発を進める。

④超高速量子シミュレータの開発：ほぼ絶対零度（~50ナノケルビン）まで冷やした極低温のルビジウム原子をミクロンレベルで整列させた人工原子結晶とアト秒精度の超高速コヒーレント制御技術を組み合わせた世界唯一・最速の「超高速量子シミュレータ」のさらなる高機能化を目指す。

⑤超高速量子コンピュータの開発：極低温のルビジウム原子をミクロンレベルで整列させた人工原子結晶とアト秒精度の超高速コヒーレント制御技術を組み合わせた世界唯一・最速の「超高速量子コンピュータ」の開発を進める。

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

光分子科学第三研究部門

解　良　　聡（教授）（2014 年 4 月 1 日着任）

福谷　圭祐（助教）
下ヶ橋　龍之介（特任助教）
WONGKANYA, Ratchada（インターンシップ）
西野　史（大学院生）
PALASSERY ITHIKKAL, Jaseela（大学院生）
神谷　美穂（事務支援員）

A-1) 専門領域：表面物理学，有機薄膜物性

A-2) 研究課題：

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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

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

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

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

e) 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。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

T. YAMADA, S. KANAZAWA, K. FUKUTANI and S. KERA, “Growth of Transition-Metal Cobalt Nanoclusters on 2D Covalent Organic Frameworks,” *J. Phys. Chem. C* **128(3)**, 1477–1486 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c07435

S. KERA, F. MATSUI, K. TANAKA, Y. TAIRA, T. ARAKI, T. OHIGASHI, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, H. MATSUDA, E. SALEHI and M. KATOH, “Prospects Required for Future Light-Source Facilities: A Case of UVSOR Synchrotron Facility,” *Electron. Struct.* **5(3)**, 034001 (2023). DOI: 10.1088/2516-1075/acdf32

F. MATSUI, K. HAGIWARA, E. NAKAMURA, T. YANO, H. MATSUDA, Y. OKANO, S. KERA, E. HASHIMOTO, S. KOH, K. UENO, T. KOBAYASHI, E. IWAMOTO, K. SAKAMOTO, S. TANAKA and S. SUGA, “Soft X-Ray Photoelectron Momentum Microscope for Multimodal Valence Band Stereography,” *Rev. Sci. Instrum.* **94(8)**, 083701 (2023). DOI: 10.1063/5.0154156

Z. G. MA, Y. SHEN, K. ZHANG, L. X. CAO, H. REN, W. S. CHEN, H. X. WEI, Y. Q. LI, S. KERA and J. X. TANG, “Regulated Crystallization with Minimized Degradation for Pure-Red Lead-Free Perovskite Light-Emitting Diodes,” *J. Mater. Chem. C* **11(29)**, 9916–9924 (2023). DOI: 10.1039/d3tc01743e

O. ENDO, F. MATSUI, S. KERA, W.-J. CHUN, M. NAKAMURA, K. AMEMIYA and H. OZAKI, "Hole Doping to Perylene on Au(110): Photoelectron Momentum Microscopy," *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **21(3)**, 236–240 (2023). DOI: 10.1380/ejssnt.2023-024

B-3) 総説，著書

解良　聡,「有機半導体の電子構造における多体効果」, 有機半導体の開発と最新動向, 第 23 章 (2024).

B-4) 招待講演

S. KERA, "Many body effects define the material properties of molecular solids," Nanospec FY2023, Okazaki (Japan), March 2024.

S. KERA, "Deep insight into organic semiconductors by itinerant characteristics of the electronic structure," International conference on Materials science, engineering and technology, Singapore (Singapore), September 2023.

S. KERA, "Impact of vibronic coupling on the electronic structure of organic semiconductor crystals," 41st International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics, Campinas (Brazil), July 2023.

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–).

学会の組織委員等

第 36 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム 組織委員会委員 (2023–2024).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

SPring-8 ユーザー協同体（SPRUC）機関代表者 (2019–).

KEK 加速器・共通基盤研究施設運営会議委員 (2021–2024).

KEK 物質構造科学研究所運営会議委員 (2021–2024).

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

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

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

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科学研究科, 連携客員教授, 2014年9月– .

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

蘇州大学, 客員教授, 2014年4月– .

B-10) 競争的資金

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

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

C) 研究活動の課題と展望

機能性分子の高配向試料作製法と精密電子状態計測で蓄積したノウハウを集結し，分子集合体における「電子の真の姿を見出すこと」でその機能・物性の根源を理解することを主眼とし，様々な放射光利用先端分光法や独自に開発した分光装置群を駆使して多角的に研究を進めている。2021年度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。2023年度後期より下ヶ橋特任助教を採用し，科研費基盤(S)課題による研究推進を強化した。40周年記念事業を遂行し，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) 軟Ｘ線吸収分光法の生物化学分野への展開

c) 溶液の軟Ｘ線吸収分光法の低エネルギー領域への開拓

d) 時間分解軟Ｘ線吸収分光法によるエネルギー・電子移動のオペランド計測

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 2 keV 以下の軟Ｘ線領域には炭素，窒素，酸素の K 吸収端や遷移金属の L 吸収端が存在するため，軟Ｘ線吸収分光（XAS）法は溶液の局所構造を元素選択的に調べることができる有用な手法である。我々は液体層の精密厚さ制御法（20 ~ 2000 nm）を独自に開発することで，溶液の XAS 測定を実現した。更に，XAS スペクトルのエネルギーシフトの高精度測定と量子化学に基づく内殻励起計算から，異なる元素ごとに溶液中の分子間相互作用を調べる手法を確立した。最近では，PNIPAM 高分子が純水や純メタノールでは溶解するのに対して，メタノールと水の混合溶液では溶解しなくなる，共貧性溶媒効果のメカニズムを O-K 吸収端 XAS 測定から調べた。

b) XAS 法を生物化学分野へ展開するには，生体試料が機能を発現する状態で測定すると共に，生体試料とその周りの溶媒分子を考慮した比較的大きな分子系での内殻励起計算が必要である。我々が開発した液体セルは実環境下で XAS 測定が行えるため，生体試料の測定に適している。現在，ミオグロビン溶液の N-K 吸収端 XAS 測定を目指して，溶液調製を行っている。また，溶液中の生体分子の内殻励起計算を実現するために，分子動力学計算により得た複数の分子配置を基にして，その内殻励起計算を行う方法論を開発した。これにより，液体エタノールの C-K 吸収端 XAS スペクトルが，実験で得られたスペクトル形状を良く再現することを確かめた。

c) 200 eV 以下の低エネルギー領域には，Li，B の K 吸収端や Si，P，S，Cl の L 吸収端が存在するため，化学研究において重要である。しかしながら，低エネルギー領域では，目的の一次回折光の透過率が極端に小さくて，一次回折光の強度変化が高次回折光の寄与に埋もれてしまうため，XAS 測定は不可能であった。そこで，Si が含まれていない高分子ナノ膜を開発すると共に，液体セルを満たすアルゴン光路長を 2.6 mm にできる超薄型液体セルを開発することで，低エネルギー領域の溶液の XAS 測定の実現を目指している。最近では，高分子ナノ膜の軟Ｘ線透過測定を行い，Si-L 吸収端においても十分な軟Ｘ線透過率を示すことを実証した。

d) 超高速レーザーと放射光から発生する軟Ｘ線パルスを 70 ps の時間分解能で同期するシステムを構築して，溶液光化学反応のオペランド XAS 測定を実現した。これにより，鉄フェナントロリン水溶液の N-K 吸収端 XAS スペクトルにおいて，光励起後の高スピン状態から低スピン状態に緩和する過程の経時変化を，金属錯体の配位子の電子状態変化から観測することに成功した。現在，異種金属錯体間での蛍光共鳴エネルギー移動や，二元分子系における光電子移動の機構解明に，時間分解 XAS 法を適用するための実験条件の検討を行っている。

B-1) 学術論文

Y. KUDO, F. KUMAKI, M. NAGASAKA, J. ADACHI, Y. NOGUCHI, N. KOGA, H. ITABASHI and M. HIYAMA, "Experimental and Theoretical Study for Core Excitation of Firefly Luciferin in Carbon K-Edge Spectra," *J. Phys. Chem. A* **128(3)**, 611–617 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpca.3c07504

B-3) 総説，著書

長坂将成,「軟Ｘ線吸収分光法による液体の分子間相互作用の解明」, *放射光*, **36(4)**, 176–184 (2023).

B-4) 招待講演

長坂将成,「軟Ｘ線吸収分光法によるバイオ研究の現状と展望」, UVSOR シンポジウム 2023 特別企画講演「バイオ系における光科学の展開」, 岡崎, 2023 年 12 月.

M. NAGASAKA, "Chemical Processes in Solutions Probed by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy," International Symposium on X-Ray Spectroscopies of Synchrotron Radiation, Toyama (Japan), March 2024.

M. NAGASAKA, "Operando Soft X-Ray Absorption Spectroscopy for Observing Chemical Processes in Solutions," UVSOR-III + MAX IV International Workshop: Frontier of Soft X-Ray Spectroscopy for Chemical Processes in Solutions, Okazaki (Japan), October 2023.

M. NAGASAKA, "Time-Resolved Soft X-Ray Absorption Spectroscopy for Observing Photochemical Reactions in Solutions," Conference on Laser and Synchrotron Radiation Combination Experiment 2023 (LSC 2023), OPTICS & PHOTONICS International Congress 2023, Yokohama (Japan), April 2023.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

日本放射光学会放射光 60 周年記念シンポジウム現地実行委員 (2023).

UVSOR-III + MAX IV International Workshop: Frontier of Soft X-Ray Spectroscopy for Chemical Processes in Solutions, Chair (2023).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究 (B),「励起キャリア移動の指向性制御による高効率光触媒表面の構築」（代表；吉田真明), 長坂将成（研究分担者）(2021 年度–2023 年度).

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

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

光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

加　藤　政　博（特任教授（クロスアポイントメント*））(2019 年 4 月 1 日着任)

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

*広島大学放射光科学センター

A-1) 専門領域：ビーム物理学，加速器科学，放射光科学

A-2) 研究課題：

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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

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

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

B-1) 学術論文

S. KERA, F. MATSUI, K. TANAKA, Y. TAIRA, T. ARAKI, T. OHIGASHI, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, H. MATSUDA, E. SALEHI and M. KATOH, "Prospects Required for Future Light-Source Facilities: A Case of UVSOR Synchrotron Facility," *Electron. Struct.* **5(3)**, 034001 (2023). DOI: 10.1088/2516-1075/acdf32

M. KATOH, H. OTA, J. YAMAZAKI, K. HAYASHI, Y. OKANO, E. SALEHI, Y. TAIRA, A. MANO, M. FUJIMOTO, Y. TAKASHIMA, M. HOSAKA, F. SAKAMOTO, T. KANEYASU and H. ZEN, "Light Source Developments at UVSOR BL1U," *J. Phys.: Conf. Ser.* **2687**, 032005 (2024). DOI: 10.1088/1742-6596/2687/3/032005

E. SALEHI and M. KATOH, "Bayesian Optimization of the Dynamic Aperture in UVSOR-IV Design Study," *J. Phys.: Conf. Ser.* **2687**, 032030 (2024). DOI: 10.1088/1742-6596/2687/3/032030

S. WADA, H. OHTA, A. MANO, Y. TAKASHIMA, M. FUJIMOTO and M. KATOH, "Young's Double-Slit Experiment with Undulator Vortex Radiation in the Photon-Counting Regime," *Sci. Rep.* **13**, 22962 (2023). DOI: 10.1038/s41598-023-49825-4

Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU, S. WADA, H. KOHGUCHI, H. OTA, E. NAKAMURA, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, M. HOSAKA and M. KATOH, "Frequency-Domain Interferometry for the Determination of Time Delay between Two Extreme-Ultraviolet Wave Packets Generated by a Tandem Undulator," *Sci. Rep.* **13**, 10292 (2023). DOI: 10.1038/s41598-023-37449-7

E. SALEHI, M. HOSAKA and M. KATOH, "Time Structure of Undulator Radiation," *J. Adv. Simulat. Sci. Eng.* **10(1)**, 164–171 (2023). DOI: 10.15748/jasse.10.164

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, S. WADA, M. FUJIMOTO, H. OTA, H. IWAYAMA and M. KATOH, "Time Domain Double Slit Interference of Electron Produced by XUV Synchrotron Radiation," *Sci. Rep.* **13**, 6142 (2023). DOI: 10.1038/s41598-023-33039-9

B-4) 招待講演

M. KATOH, "Spatiotemporally structured synchrotron radiation," SPIE Nanoscience + Engineering 2023, UV and Higher Energy Photonics: From Materials to Applications 2023, San Diego (USA), August 2023.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本加速器学会評議員 (2020–).

日本放射光学会評議員 (2022–).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

高エネルギー加速器研究機構教育研究評議会評議員 (2021–2023).

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 – .

核融合科学研究所, 客員教授, 2022 年 4 月 – .

B-10) 競争的資金

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

C) 研究活動の課題と展望

UVSOR は 2000 年以降の継続的な高度化により，低エネルギーのシンクロ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ている。基礎設計は概ね完了し，概念設計レポートの作成を行った。今後は詳細設計レポートの作成を進める。また，高エネルギー加速器研究機構や名古屋大学シンクロトロン光研究センター，広島大学放射光科学研究センターなどと連携し，持続可能な加速器施設を目指した省エネルギー化や運転の自動化などを念頭に，次期光源に必要とされるハードウエア技術開発を進める。

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

電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）

平　　義　隆（准教授）（2020 年 4 月 1 日着任）

小澤　舜ノ介（特別共同利用研究員）
塩原　慧介（特別共同利用研究員）
脇田　幸哉（特別共同利用研究員）
石原　麻由美（事務支援員）
加茂　恭子（事務支援員）
横田　光代（事務支援員）

A-1) 専門領域：ガンマ線計測，陽電子計測，光渦計測

A-2) 研究課題：

a) 超短パルスガンマ線の発生と利用研究

b) 軸対称偏光レーザーを用いたガンマ線の発生と計測技術開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 世界の放射光施設でも UVSOR の独自技術である超短パルスガンマ線を用いた陽電子消滅分光法によるバルク材料の原子スケール欠陥分析に関する研究である。超短パルスガンマ線は，フェムト秒レーザーと 750MeV 電子ビームの 90 度衝突逆トムソン散乱によって発生し，そのパルス幅はサブピコ秒からピコ秒オーダーである。この超短パルス性とバックグラウンドの低さを活かしたガンマ線の利用研究として，陽電子消滅分光法による材料中の欠陥分析をユーザーに提供している。陽電子は，対生成と呼ばれる現象によって材料内部でガンマ線から発生し，材料中の欠陥に捕獲される。欠陥の大きさによって陽電子の寿命が変化するために，陽電子寿命を測定することで材料中の欠陥を非破壊で分析することができる。さらに，ガンマ線は物質に対する透過率が高いために厚さ数 cm のバルク材料の欠陥分析を行うことが可能である。陽電子寿命測定法のユーザー利用が現在行われており，放射性同位元素から発生する陽電子を直接試料に照射する従来の方法では実施困難な金属材料の応力負荷及び水素脆化時の欠陥形成のその場測定手法の開発を進めている。応力負荷時の測定については論文の執筆を開始している。また，逆トムソン散乱では，円偏光レーザーを使うことで円偏光ガンマ線が発生する。円偏光ガンマ線の円偏光度はガンマ線ビームの断面で一様ではなく，散乱角度によって変化する。原子力機構，量研機構，名古屋大学，及び京都大学の研究者らと共同で磁気コンプトン散乱を用いたガンマ線の偏光測定を行った。理論計算通り，ガンマ線の散乱角によって偏光が変化することを実測することができた。この結果を論文にまとめ *Phys. Rev. A* に発表した。一方で，パルスではない連続ガンマ線を用いたユーザー利用も行っており，ユーザー執筆の論文が発表された。

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。軸対称偏光レーザーは，Altechna 社の S-waveplate を用いて直線偏光のレーザーから変換する。最初の実験として，ガンマ線の空間分布を 2 次元検出器（AdvaPIX TPX3）で測定した。軸対称偏光レーザーを用いると，直線偏光及び円偏光のガンマ線とは異

なる空間分布になることが確認された。今後，ガンマ線の偏光分布の測定手法の開発を進める。具体的には，直径 1 mm の鉛コリメータを用いて空間的に広がったガンマ線の一部を切り出し，鉄ターゲットに照射する。ガンマ線が直線偏光の場合，コンプトン散乱ガンマ線の断面積が方位角方向に変化し，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い。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偏光軸を測定できる。現在シミュレーションを進めており，検出器の固定治具を製作した後に実験を行う。

B-1) 学術論文

H. OHGAKI, K. ALI, T. KII, H. ZEN, T. HAYAKAWA, T. SHIZUMA, M. FUJIMOTO and Y. TAIRA, "Generation of Flat-Laser Compton Scattering Gamma-Ray Beam," *Phys. Rev. Accel. Beams* **26**, 093402 (2023). DOI: 10.1103/physrevaccelbeams.26.093402

S. KERA, F. MATSUI, K. TANAKA, Y. TAIRA, T. ARAKI, T. OHIGASHI, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, H. MATSUDA, E. SALEHI and M. KATOH, "Prospects Required for Future Light-Source Facilities: A Case of UVSOR Synchrotron Facility," *Electron. Struct.* **5(3)**, 034001 (2023). DOI: 10.1088/2516-1075/acdf32

Y. TAIRA, S. ENDO, S. KAWAMURA, T. NAMBU, M. OKUIZUMI, T. SHIZUMA, M. OMER, H. ZEN, Y. OKANO and M. KITAGUCHI, "Measurement of the Spatial Polarization Distribution of Circularly Polarized Gamma Rays Produced by Inverse Compton Scattering," *Phys. Rev. A* **107(6)**, 063503 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevA.107.063503

平　義隆,「UVSOR-III におけるガンマ線誘起陽電子消滅分光法の開発」, *陽電子科学*, **20**, 3 –9 (2023).

B-4) 招待講演

Y. TAIRA, "Development of gamma-ray-induced positron annihilation spectroscopy at UVSOR-III," 16th International Workshop on Slow Positron Beam Techniques & Applications (SloPos-16), Orleans (France), July 2023.

B-6) 受賞，表彰

平　義隆, 日本陽電子科学会奨励賞 (2023).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

ビーム物理研究会 若手の会 幹事 (2020–).

日本加速器学会組織委員 (2022–2023).

B-8) 大学等での講義，客員

理化学研究所, 客員研究員, 2018 年 9 月– .

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究 (B)（一般),「超短パルスガンマ線を用いた陽電子寿命運動量相関測定法の開発と利用研究の推進」,
平　義隆 (2021 年度–2023 年度).

C) 研究活動の課題と展望

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

光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

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

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

A-1) 専門領域：表面物性物理学，電子分光計測技術，放射光科学

A-2) 研究課題：

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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) ① UVSOR オリジナルの Momentum Microscope（MM）拠点構築を主務とする。MM は空間・波数空間・エネルギーの幅広い範囲での高分解能測定を可能にするユニークな分析器である。電子物性研究に適した VUV/EUV 領域での高強度・可偏光などといった UVSOR の光源特性を活かした測定機能を実装する MM の導入を実現し，論文・プレスリリースを通じて成果発信を続けている。②並行して全天球電子レンズ及び電子エネルギー・スピン分析器を考案し国際特許出願した。上記の MM は 3 $Å^{-1}$ までの波数空間の一括測定ができるため価電子帯研究で有効な運動エネルギー 36 eV 以下の領域では全天球をカバーすることができるが，原子配列を研究するのに有効な運動エネルギー 500 eV 以上の領域ではせいぜい 15° の領域でしかない。新規分析器は 2 keV でも全天球の放出光電子を取り込むことができ，後段のスピン偏向器でスピンの 3 次元ベクトル解析ができるようになる。①は high-end 型価電子帯光電子分光装置，②は内殻光電子ホログラフィー測定装置である。両者を融合させ，スピン 3 次元ベクトル解析を実・逆空間で自在にマッピングできる唯一無二の装置を構築する。
b) 物性評価に適した光波長帯の連続的なエネルギー可変性が UVSOR の最大の特徴である。BL6U は軟Ｘ線領域（45–700 eV）をカバーする直線偏光ビームラインである。③分子科学で重要となる CNO 吸収端の光を用い，元素選択的な共鳴励起によって価電子帯の原子軌道構成を解明できる共鳴光電子分光の実験を成功させた。特に，吸収端にてグラファイトの π バンドが選択的に励起される様子を波数空間上で可視化したが，共鳴 Auger 電子スペクトルに価電子帯分散が重なる現象の発見は重要である。グラフェンから π 共役系分子への展開に歩を進め，お家芸としての共鳴光電子回折法を確立しつつある。本年は「運動量分解光電子顕微鏡法」を新たに確立しグラファイトの単原子層ステップの可視化に成功し，プレスリリースを行った。④光エネルギー可変性を活かした k_z 分散測定による全

Brillouin 域価電子帯分散マッピングや偏光特性を活かした原子軌道波動関数解析技術は BL6U での共同研究推進の基盤であるが，さらに精緻な測定を行い，表面特有の電子状態や現象の情報を引き出す研究展開を進めている。

c) 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 展開について解説した論文が受理された（プレスリリース準備中）。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（2024.01 放射光学会にて発表）。

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。graphite 表面の単原子ステップの顕微像の撮影に成功した（*Phys. Rev. B* 2022）は大きな前進である。新たに確立した顕微 ARPES/ARPES 顕微法の論文（*J. Phys. Soc. Jpn.* 2022）および（*Rev. Sci. Instrum.* 2023）は両方とも Editor's Choice に選定された。劈開試料表面の局所部分の精密分析の成功は今後の共同研究を呼び込む重要な成果である。共同研究先から Ir 単結晶薄膜の電子状態評価の依頼を受け，バンド分散の測定に成功した。この薄膜は新しいスピン 2 次元フィルターとして有望な材料であり，上記で述べたスピン 3 次元ベクトル解析への応用展開につながるものである。

B-1) 学術論文

T. UCHIYAMA, H. GOTO, E. UESUGI, A. TAKAI, L. ZHI, A. MIURA, S. HAMAO, R. EGUCHI, H. OTA, K. SUGIMOTO, A. FUJIWARA, F. MATSUI, K. KIMURA, K. HAYASHI, T. UENO, K. KOBAYASHI, J. AKIMITSU and Y. KUBOZONO, "Semiconductor–Metal Transition in Bi_2Se_3 Caused by Impurity Doping," *Sci. Rep.* **13(1)**, 537 (2023). DOI: 10.1038/s41598-023-27701-5

S. KERA, F. MATSUI, K. TANAKA, Y. TAIRA, T. ARAKI, T. OHIGASHI, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, H. MATSUDA, E. SALEHI and M. KATOH, "Prospects Required for Future Light-Source Facilities: A Case of UVSOR Synchrotron Facility," *Electron. Struct.* **5(3)**, 034001 (2023). DOI: 10.1088/2516-1075/acdf32

F. MATSUI, K. HAGIWARA, E. NAKAMURA, T. YANO, H. MATSUDA, Y. OKANO, S. KERA, E. HASHIMOTO, S. KOH, K. UENO, T. KOBAYASHI, E. IWAMOTO, K. SAKAMOTO, S. TANAKA and S. SUGA, "Soft X-Ray Photoelectron Momentum Microscope for Multimodal Valence Band Stereography," *Rev. Sci. Instrum.* **94(8)**, 083701 (2023). DOI: 10.1063/5.0154156

O. ENDO, F. MATSUI, S. KERA, W.-J. CHUN, M. NAKAMURA, K. AMEMIYA and H. OZAKI, "Hole Doping to Perylene on Au(110): Photoelectron Momentum Microscopy," *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **21(3)**, 236–240 (2023). DOI: 10.1380/ejssnt.2023-024

B-4) 招待講演

松井文彦,「光電子運動量顕微鏡による電子状態研究：『観察・ミル』から『解明・ワカル』へ」, 2023年度物質科学研究討論会, 土岐, 2024年3月.

松井文彦,「放射光研究の最近の動向 光電子分光法を中心に」, R026先端計測技術の将来設計委員会第12回研究会, 東京, 2023年6月.

B-5) 特許出願

US2024-0047190, “Electrostatic Deflection Convergence-Type Energy Analyzer, Imaging-Type Electron Spectroscopic Device, Reflecting Imaging-Type Electron Spectroscopic Device, And Spin Vector Distribution Imaging Device,” H. MATSUDA and F. MATSUI (National Institutes of Natural Sciences), 2021年.

4170694, “Electrostatic Deflection Convergence-Type Energy Analyzer, Imaging-Type Electron Spectroscopic Device, Reflecting Imaging-Type Electron Spectroscopic Device, And Spin Vector Distribution Imaging Device,” H. MATSUDA and F. MATSUI (National Institutes of Natural Sciences), 2021年.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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

日本放射光学会庶務幹事 (2021.9–2023).

学会の組織委員等

表面構造に関する国際学会ICSOS 国際アドバイザー委員 (2017–).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

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

学会誌編集委員

日本表面真空学会出版委員 (2013–).

B-10) 競争的資金

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

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

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

B-11) 産学連携

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

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

MM 開発の先駆者がいるForschungszentrum Jülich（FZJ）の電子物性部門（PGI-6）と学術協定を結び，表面電子物性の共同研究を進めてきたおかげで,UVSOR でもMM が順調に立ち上がった。時間分解型のMM 開発を進めるドイツ・DESY のM. Hoesch らとも共同研究を密にし，こちらからスピン研究に関して相手から時間分解測定法に関して経験技術交流を進めている。本装置を活かした実験を積極的に進めるユーザーコミュニティ構築のための第 1 回（2019）・第 2 回（2020.10）国際ワークショップ・第 3 回（2022.10）国際会議特別セッション共催，第 4 回（2023.7）分子研研究会と継続的に開催し，東アジア圏でのMM 開発グループの萌芽のネットワークが密になった。今年はDESY にて招待講演を行った。UVSOR の国内外からのビジビリティを高めるとともに，他のビームラインにも先端拠点を目指す機運と風土の定着を活動指針として進めている。

各種分光研究で取得されるデータを有効活用するためのデータフォーマット策定や公開のためのインフラ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（R026先端計測），計測コミュニティー（XAFS）などでデータフォーマット整備の活動に加わっている。UVSOR 放射光利用を産業界を含めた広い潜在的ユーザーに拡大する機会ととらえている。

田　中　清　尚（准教授）（2014 年 4 月 1 日着任）

ZHU, Yupeng（特別訪問研究員）
小山　正太郎（特別共同利用研究員）
三田　愛也（特別共同利用研究員）
河野　健人（特別共同利用研究員）
増田　圭亮（特別共同利用研究員）
石原　麻由美（事務支援員）
加茂　恭子（事務支援員）
横田　光代（事務支援員）

A-1) 専門領域：物性物理学，放射光科学

A-2) 研究課題：

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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) UVSOR BL5U では高効率スピン分解角度分解光電子分光測定の開発を進めている。これまで試料の面内 1 軸方向ではあるが Au(111) 表面バンドのラッシュバ分裂をスピン分解してイメージスペクトルを取得することに成功し，運動量空間分解能や検出効率なども既存システムを大きく上回ることも確認できている。ただし，測定時には頻繁にスピンターゲットの磁化操作をする必要があり，このままではユーザー利用を開始することは困難であることが判明した。スピンターゲットの磁化操作を不要とするために, スピンの向きをあらゆる方向に変更できるスピンマニピュレータを導入したが，スピンマニピュレータのパラメータ整備が必要となっている。2023 年度にこれまで整備された 1 軸方向に加えて，特定の励起光エネルギーのみではあるがもう 1 軸の整備をした。その結果，試料面内方向の完全なスピン情報を得ることができるようになり，Au(111) のフェルミ面において，直行する 2 軸方向のスピン成分が連続的に変化する様子の観測に成功した。
b) UVSOR BL7U において，銅酸化物高温超伝導体 Bi2213 の角度分解光電子分光測定を行った。超伝導転移温度の上下でのスペクトルを比較することで，超伝導によるスペクトラルウェイト変化の運動量空間依存性とホール濃度依存を導出することに成功した。これまで長い間有効とされてきたフェルミアーク描像を否定する結果が得られており，高温超伝導が超伝導ギャップよりも超流動密度に強く影響を受けていることを示唆している。
c) 放射光のビームラインでは使用する励起光エネルギーを設定したときに，毎回エネルギーとビームスポット位置が再現されることが，高精度な実験，あるいは測定の自動化を実現する上で欠かせない。BL5U では励起光スキャン，空間スキャンプログラムなど早くから測定の自動化に取り組んできたが，エネルギーの再現性があまりよくないことが問題となっていた。そこでレイトレースシミュレーションも駆使しながら，再現性を悪化させる原因を調査する実験を行ったところ，回折格子の角度制御において，機械的な動作の問題があることが判明した。そこでこの問題を回避するための特別なモーター制御を開発・導入し，再現性を確保することに成功した。今後は同様の整備を他の光電子ビームライン（BL7U）でも予定している。

B-1) 学術論文

P. RAN, B. LIN, C. HONG, B. WANG, X. XIE, C. JIANG, K. TANAKA and R. H. HE, "Observation of Novel In-Gap States on Alkali Metal Dosed Ti_2O_3 Film," *J. Appl. Phys.* **135(9)**, 095303 (2024). DOI: 10.1063/5.0191245

R. NAKAZAWA, A. MATSUZAKI, K. SHIMIZU, I. NAKAMURA, E. KAWASHIMA, S. MAKITA, K. TANAKA, S. YASUNO, H. SATO, H. YOSHIDA, M. ABDI-JALEBI, S. D. STRANKS, S. TADANO, P. KRÜGER, Y. TANAKA, H. TOKAIRIN and H. ISHII, "Reliable Measurement of the Density of States Including Occupied In-Gap States of an Amorphous In-Ga-Zn-O Thin Film via Photoemission Spectroscopies: Direct Observation of Light-Induced In-Gap States," *J. Appl. Phys.* **135(8)**, 085301 (2024). DOI: 10.1063/5.0185405

Y. P. ZHU, X. CHEN, X. R. LIU, Y. LIU, P. LIU, H. ZHA, G. QU, C. HONG, J. LI, Z. JIANG, X. M. MA, Y. J. HAO, M. Y. ZHU, W. LIU, M. ZENG, S. JAYARAM, M. LENGER, J. DING, S. MO, K. TANAKA, M. ARITA, Z. LIU, M. YE, D. SHEN, J. WRACHTRUP, Y. HUANG, R. H. HE, S. QIAO, Q. LIU and C. LIU, "Observation of Plaid-Like Spin Splitting in a Noncoplanar Antiferromagnet," *Nature* **626(7999)**, 523–528 (2024). DOI: 10.1038/s41586-024-07023-w

T. ITO, T. OUISSE, M. MITA, K. TANAKA, L. JOUFFRET, H. PAZNIAK and S. QUESSADA, "Electronic Structure of the Surface States of the Zr_3SnC_2 MAX Phase," *Phys. Rev. B* **108(23)**, 235145 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevB.108.235145

T. NAKAMURA, H. SUGIHARA, Y. CHEN, R. YUKAWA, Y. OHTSUBO, K. TANAKA, M. KITAMURA, H. KUMIGASHIRA and S. KIMURA, "Two-Dimensional Heavy Fermion in a Monoatomic-Layer Kondo Lattice $YbCu_2$," *Nat. Commun.* **14(1)**, 7850 (2023). DOI: 10.1038/s41467-023-43662-9

A. HONMA, D. TAKANE, S. SOUMA, K. YAMAUCHI, Y. WANG, K. NAKAYAMA, K. SUGAWARA, M. KITAMURA, K. HORIBA, H. KUMIGASHIRA, K. TANAKA, T. K. KIM, C. CACHO, T. OGUCHI, T. TAKAHASHI, Y. ANDO and T. SATO, "Antiferromagnetic Topological Insulator with Selectively Gapped Dirac Cones," *Nat. Commun.* **14(1)**, 7396 (2023). DOI: 10.1038/s41467-023-42782-6

K. YANAGIZAWA, K. SUGAWARA, T. KAWAKAMI, R. ANDO, K. YAEGASHI, K. NAKAYAMA, S. SOUMA, K. TANAKA, M. KITAMURA, K. HORIBA, H. KUMIGASHIRA, T. TAKAHASHI and T. SATO, "Switching of Charge-Density Wave by Carrier Tuning In Monolayer $TiTe_2$," *Phys. Rev. Mater.* **7(10)**, 104002 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.7.104002

S. KERA, F. MATSUI, K. TANAKA, Y. TAIRA, T. ARAKI, T. OHIGASHI, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, H. MATSUDA, E. SALEHI and M. KATOH, "Prospects Required for Future Light-Source Facilities: A Case of UVSOR Synchrotron Facility," *Electron. Struct.* **5(3)**, 034001 (2023). DOI: 10.1088/2516-1075/acdf32

M. HORIO, X. PEIAO, M. MIYAMOTO, T. WADA, K. ISOMURA, J. OSIECKI, B. THIAGARAJAN, C. M. POLLEY, K. TANAKA, M. KITAMURA, K. HORIBA, K. OZAWA, T. TANIGUCHI, M. FUJITA and I. MATSUDA, "Influence of Oxygen Coordination Number on the Electronic Structure of Single-Layer La-Based Cuprates," *Phys. Rev. B* **108(3)**, 035105 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevB.108.035105

H. TANAKA, A. V. TELEGIN, Y. P. SUKHORUKOV, V. A. GOLYASHOV, O. E. TERESHCHENKO, A. N. LAVROV, T. MATSUDA, R. MATSUNAGA, R. AKASHI, M. LIPPMAA, Y. ARAI, S. IDETA, K. TANAKA, T. KONDO and K. KURODA, "Semiconducting Electronic Structure of the Ferromagnetic Spinel $HgCr_2Se_4$ Revealed by Soft-X-Ray Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy," *Phys. Rev. Lett.* **130(18)**, 186402 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevLett.130.186402

C. HONG, W. ZOU, P. RAN, K. TANAKA, M. MATZELLE, W.-C. CHIU, R. S. MARKIEWICZ, B. BARBIELLINI, C. ZHENG, S. LI, A. BANSIL and R.-H. HE, "Anomalous Intense Coherent Secondary Photoemission from a Perovskite Oxide," *Nature* **617**, 493–498 (2023). DOI: 10.1038/s41586-023-05900-4

B-4) 招待講演

K. TANAKA, "Angle-resolved photoemission study in UVSOR synchrotron radiation," International Workshop on Advanced Spectroscopy in Materials Science, Jinhua (China), November 2023.

K. TANAKA, "Development of spin-resolved ARPES at UVSOR," MBS Workshop 2023, Norrtälje (Sweden), June 2023.

C) 研究活動の課題と展望

開発中のスピン分解ARPESシステムは，目標としていたイメージでのスピン分解スペクトルの取得に成功し，運動量空間分解能や検出効率なども既存システムを大きく上回ることも確認できている。ユーザー利用を目指して，スピンの向きをあらゆる方向に変更できるスピンマニピュレータを導入したが，電子レンズ系のパラメータ整備に時間がかかっている。*xyz* 軸のうち2軸まで整備が完了しつつあるが，できるだけ早期にパラメータの整備を完了してユーザー利用開始を目指す予定である。

光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

荒　木　　暢（主任研究員）（2023 年 1 月 1 日着任）

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

A-1) 専門領域：放射光科学

A-2) 研究課題：

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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

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

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

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

Ｘ線のコヒーレンスを生かしたイメージングについて現在の UVSOR および次期リングでの実現を検討するために，先行する海外施設での装置見学および実験を年度末に行い，計画を立案する。

b) 液中観察のためのＸ線分光顕微鏡と試料環境開発；Diamond Light Source において硬Ｘ線顕微分光によって液中セルを使ったバクテリアに金ナノ粒子が担持されたポリマー粒子を添加した試料の観察を行った。金の酸化状態を XAS スペクトル測定から決定した。今後，軟Ｘ線領域での STXM でも同様の試料の観察を計画している。Transmission Electron Microscopy（TEM）用に開発されたセルを利用した実験であり，今後の STXM 実験の参考になるものであった。TEM 用の液体セルの活用または，独自セルの開発の２つの観点で計画を進める。試料自体を走査する STXM の場合，液中セル自体を揺さぶることになるため，今後，集光Ｘ線の走査または結像型による試料を固定した状態での測定を模索する。また，液体エタンなどを冷媒に用いた急速凍結による試料準備のオプションも併せて検討する。

c) 夾雑環境生体試料の定量化学状態マッピング；実際の細胞中の測定について，軟X線を使って行うことの実現性と他の手法と比べた利点を検討するため，様々な試料システムについて岡崎 3 機関や外部の共同研究者と議論を行ってきた。来年度からはバイオプロジェクトして UVSOR のビームタイムを確保し，フィージビリティ研究を STXM や共鳴散乱法を使って行う計画である。細胞中の「夾雑環境」で，これまで高分子研究や皮膚への薬剤の浸透などで発揮された化学状態弁別性とメソスケールの空間分解能を生かした定量分析をどう実現するかを検討する。軟X線と組み合わせる手法の選択が重要となる。

B-1) 学術論文

C. VOLLMER, D. KEPAPTSOGLOU, J. LEITNER, A. B. MOSBERG, K. EL HAJRAOUI, A. J. KING, C. L. BAYS, P. F. SCHOFIELD, T. ARAKI and Q. M. RAMASSE, "High-Spatial Resolution Functional Chemistry of Nitrogen Compounds in the Observed UK Meteorite Fall Winchcombe," *Nat. Commun.* **15(1)**, 778 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-45064-x

E. HARDING, T. ARAKI, J. ASKEY, M. HUNT, A. VAN DEN BERG, D. RAFTREY, L. ABALLE, B. KAULICH, E. MACDONALD, P. FISCHER and S. LADAK, "Imaging the Magnetic Nanowire Cross Section and Magnetic Ordering within a Suspended 3D Artificial Spin-Ice," *APL Mater.* **12(2)**, 021116 (2024). DOI: 10.1063/5.0176907

K. EUSTERHUES, J. THIEME, S. NARVEKAR, T. ARAKI, M. KAZEMIAN, B. KAULICH, T. REGIER, J. WANG, J. LUGMEIER, C. HÖSCHEN, T. MANSFELDT and K. UWE TOTSCHE, "Importance of Inner-Sphere P-O-Fe Bonds in Natural and Synthetic Mineral-Organic Associations," *Sci. Total Environ.* **905**, 167232 (2023). DOI: 10.1016/j.scitotenv.2023.167232

S. KERA, F. MATSUI, K. TANAKA, Y. TAIRA, T. ARAKI, T. OHIGASHI, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, H. MATSUDA, E. SALEHI and M. KATOH, "Prospects Required for Future Light-Source Facilities: A Case of UVSOR Synchrotron Facility," *Electron. Struct.* **5(3)**, 034001 (2023). DOI: 10.1088/2516-1075/acdf32

B-4) 招待講演

T. ARAKI, "UVSOR BL4U STXM Beamline: Status and Future Outlook," UVSOR-III + MAX IV International Workshop Frontier of Soft X-Ray Spectroscopy for Chemical Processes in Solutions, Okazaki, 2023年10月.

荒木　暢,「Soft X-Ray Spectromicroscopy: Current Status and Future Perspectives」, 第 15 回日本放射光学会若手研究会「放射光と顕微鏡技術・機械学習との交差点」, 吹田市 , 2023 年 9 月 .

B-8) 大学等での講義，客員

Diamond Light Source, Visiting Scientist, 2023年– .

岩　山　洋　士（助教）（2010 年 4 月 1 日着任）

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

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

A-2) 研究課題：

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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 高分子，液晶，コロイドなどのソフトマターは，メゾスコピック領域に特徴的な構造を持ち，多くの物性はその構造に由来する。偏光顕微鏡などで観察できない数 nm から数 100nm 程度のメゾスコピック領域の構造をしらべる手法として，Ｘ線小角散乱法が用いられ，多くの成果が挙げられている。しかしながら，Ｘ線小角散乱は試料の電子密度の変調に対して敏感であるが，電子密度の近い多成分系における特定の成分の構造や，ねじれ構造などの観測は難しい。Ｘ線共鳴過程を用いることで元素・分子種・分子配向に選択制を有する散乱光をえることができる。しかしソフトマターの主成分である軽元素（炭素，窒素，酸素など）のＸ線共鳴エネルギーは，0.1 eV ~ 1 keV の軟Ｘ線領域であり，Ｘ線小角散乱法で使用する 10 keV 程度のＸ線とは一致しない。そのため，我々は軟Ｘ線領域の共鳴散乱光を観測できるための手法（共鳴軟Ｘ線散乱法）を行っている。我々は UVSOR のビームライン BL3U において，共鳴軟Ｘ線散乱装置の開発し，高分子や液晶の構造解析を行っている。本年度は，炭素，窒素，酸素の K 殻吸収端の内殻共鳴に相当する軟Ｘ線を用いて，エポキシ樹脂の架橋構造の解析や，多成分系の有機薄膜の成分ごとの解析，キラル液晶のモルフォロジーの解析を行った。また，放射光施設 Photon Factory との共同研究開発事業にも参画し，より高機能な共鳴軟Ｘ線散乱装置の開発を進め，真空槽の組み上げおよび検出器の動作試験を行った。
b) 2023 年度より，軟Ｘ線による生体試料の可視化を実現すべく密着型軟Ｘ線顕微鏡の開発を始めた。本研究では，口腔上皮細胞の炭素 K 殻吸収端領域の密着型Ｘ線顕微鏡による XAFS イメージングを行った。露光時間 10 秒で，光エネルギー 280 eV ~ 320 eV まで 0.1 eV 刻みで 400 枚撮像した。画像のエネルギー依存性を調べることで，画素 1 pixel ごとの XAFS スペクトルを得ることに成功した。機械学習法を用いて，スペクトルを７つに分類し，細胞外，細胞膜，細胞核，小胞体に由来する構造などが無染色で観測できた。このように XAFS イメージングおよび機械学習によるスペクトル分類により，染色することなく生体試料を観測することができることを示した。
c) Ｘ線自由電子レーザー SACLA BL1 を利用した液体試料を対象とした実験装置の開発を進めている。本年度は，Nevada 大の Craig Schwartz らと液体表面からの二次高調波発生の実験を行った。液体表面などの界面においては，空間対称性の破れより，二次高調波が発生する。そのため，二次高調波を観測することで表面敏感な実験を行うことができる。特に液体表面は気液界面であるため，反応場として重要であり，その化学状態を測定する手法は重要である。また軟Ｘ線の共鳴過程を利用することで，表面の特定の元素の化学状態を選択的に観測できる長所がある。

そのため，SACLA BL1 を利用して，高強度の軟Ｘ線パルスを鉄硝酸水溶液の超薄膜フラットジェットに照射しその反射光を，斜入射分光器で分光観測した。現在解析中である。

B-1) 学術論文

H. ONO, Y. UMEDA, K. YOSHIDA, K. TSUTSUI, K. YAMAMOTO, O. ISHIYAMA, H. IWAYAMA, E. NAKAMURA, T. YOKOYAMA, M. MIZUGUCHI and T. MIYAMACHI, "Intermolecular Interaction Induced Magnetic Decoupling at an Organic-Inorganic Interface," *J. Phys. Chem. C* **127(49)**, 23935–23940 (2023). DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c05966

Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU, S. WADA, H. KOHGUCHI, H. OTA, E. NAKAMURA, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, M. HOSAKA and M. KATOH, "Frequency-Domain Interferometry for the Determination of Time Delay between Two Extreme-Ultraviolet Wave Packets Generated by a Tandem Undulator," *Sci. Rep.* **13(1)**, 10292 (2023). DOI: 10.1038/s41598-023-37449-7

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, S. WADA, M. FUJIMOTO, H. OTA, H. IWAYAMA and M. KATOH, "Time Domain Double Slit Interference of Electron Produced by XUV Synchrotron Radiation," *Sci. Rep.* **13(1)**, 6142 (2023). DOI: 10.1038/s41598-023-33039-9

F. ALLUM, Y. KUMAGAI, K. NAGAYA, J. HARRIES, H. IWAYAMA, M. BRITTON, P. H. BUCKSBAUM, M. BURT, M. BROUARD, B. DOWNES-WARD, T. DRIVER, D. HEATHCOTE, P. HOCKETT, A. J. HOWARD, J. W. L. LEE, Y. LIU, E. KUKK, J. W. MCMANUS, D. MILSESEVIC, A. NIOZU, J. NISKANEN, A. J. ORR-EWING, S. OWADA, P. A. ROBERTSON, A. RUDENKO, K. UEDA, J. UNWIN, C. VALLANCE, T. WALMSLEY, R. S. MINNS, D. ROLLES, M. N. R. ASHFOLD and R. FORBES, "Direct Momentum Imaging of Charge Transfer Following Site-Selective Ionization," *Phys. Rev. A* **108(4)**, 043113 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevA.108.043113

S. KERA, F. MATSUI, K. TANAKA, Y. TAIRA, T. ARAKI, T. OHIGASHI, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, H. MATSUDA, E. SALEHI and M. KATOH, "Prospects Required for Future Light-Source Facilities: A Case of UVSOR Synchrotron Facility," *Electron. Struct.* **5(3)**, 034001 (2023). DOI: 10.1088/2516-1075/acdf32

B-7) 学会および社会的活動

学会誌編集委員

原子衝突学会学会誌編集員 (2020–).

B-11) 産学連携

共同研究, 三菱ケミカル（株), 岩山　洋 (2023年度).

6-6　物質分子科学研究領域

電子構造研究部門

横　山　利　彦（教授）（2002 年 1 月 1 日着任）

倉橋　直也（特任助教）
前島　尚行（特任助教）
泉　善貴（大学院生）
栗田　佳子（事務支援員）

A-1) 専門領域：表面磁性，Ｘ線分光学

A-2) 研究課題：

a) 雰囲気制御型硬Ｘ線光電子分光法の開発と不均一触媒その場観察への応用
b) Ｘ線磁気円二色性などを用いた磁性薄膜の磁気構造解析
c) Ｘ線吸収分光を用いた機能合金の局所構造と熱的性質
d) Ｘ線発光分光による固体高分子形燃料電池の電解質に関する研究
e) 遷移金属リン化物単結晶・薄膜の触媒活性・磁性に関する研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) SPring-8 BL36XU で我々が開発した雰囲気制御型硬Ｘ線光電子分光装置により不均一触媒の反応進行中のオペランド観測を行っている。本設備は NEDO 燃料電池プロジェクトにより導入され，固体高分子形燃料電池（PEFC）電極触媒の in situ 測定を行っていたが，NEDO 終了後は，より一般的な不均一触媒等について対象を拡げて研究を遂行しているものである。
b) 分子研シンクロトロン放射光施設 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) Ｘ線発光分光による固体高分子形燃料電池の電解質に関する研究を始めた。
e) 遷移金属リン化物単結晶・薄膜の触媒活性・磁性に関する研究を始めた。

B-1) 学術論文

H. ONO, Y. UMEDA, K. YOSHIDA, K. TSUTSUI, K. YAMAMOTO, O. ISHIYAMA, H. IWAYAMA, E. NAKAMURA, T. YOKOYAMA, M. MIZUGUCHI and T. MIYAMACHI, “Intermolecular Interaction Induced Magnetic Decoupling at an Organic-Inorganic Interface,” *J. Phys. Chem. C* **127(49)**, 23935–23940 (2023). DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c05966

T. KOITAYA, K. YAMAMOTO, T. URUGA and T. YOKOYAMA, "Operando Characterization of Copper-Zinc-Alumina Catalyst for Methanol Synthesis from Carbon Dioxide and Hydrogen by Ambient-Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy," *J. Phys. Chem. C* **127(27)**, 13044–13054 (2023). DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c02785

T. KAWAWAKI, Y. MITOMI, N. NISHI, R. KUROSAKI, K. OIWA, T. TANAKA, H. HIRASE, S. MIYAJIMA, Y. NIIHORI, D. J. OSBORN, T. KOITAYA, G. F. METHA, T. YOKOYAMA, K. IIDA and Y. NEGISHI, "Pt_{17} Nanocluster Electrocatalysts: Preparation and Origin of High Oxygen Reduction Reaction Activity," *Nanoscale* **15**, 7272–7279 (2023). DOI: 10.1039/d3nr01152f

B-3) 総説，著書

高木康多，横山利彦,「大気圧硬X線線光電子分光によるオペランド計測の現状と展望」, *表面と真空 特集「準大気圧, 大気圧光電子分光法の最近の進展」*, **67(3)**, 123–128 (2024). DOI: 10.1380/vss.67.123

小板谷貴典，山本　達，松田　巌，吉信　淳，横山利彦,「準大気圧光電子分光法による二酸化炭素水素化のオペランド観測」, *表面と真空 特集「準大気圧, 大気圧光電子分光法の最近の進展」*, **67(3)**, 117–122 (2024). DOI: 10.1380/vss.67.117

横山利彦,「大気圧光電子分光の世界初観測と燃料電池の硫黄被毒過程追跡」, *SPring-8詳細パンフレット 2023*, 18 (2023).

T. YOKOYAMA, "World's First Photoelectron Spectroscopy under Atmospheric Pressure and Tracking of Sulfur Poisoning Process of Fuel Cells," *SPring-8 Detailed Brochure*, 18 (2023).

B-4) 招待講演

横山利彦,「物質科学のための放射光X線分光」, 第 26 回 XAFS 討論会, 滋賀県草津市, 2023 年 9 月.

T. YOKOYAMA, "Operando ambient pressure hard x-ray photoelectron spectroscopic studies of working fuel cells and CO_2 reduction catalyst," 16th Eurasia Conference on Chemical Sciences 2023, Frontiers in Chemical Sciences for Sustainability, Bangkok (Thailand), December 2023.

T. YOKOYAMA, "Thermal vibration and expansion from the view point of local structure," 4th International Symposium on Negative Thermal Expansion, Padova (Italy), July 2023.

倉橋直也,「様々な光で解析する高分子電解質膜と水の関係」, 水素・燃料電池材料研究会, 上智大学, 東京, 2024 年 1 月.

倉橋直也,「広範な波長をフレキシブルに活用した分光分析」, Menicon Future Device Laboratory 講演会, 名古屋工業大学, 名古屋, 2023 年 9 月.

倉橋直也,「放射光ことはじめ～使ってみるから結果の解釈まで～」, 第 3 回溶液化学夏期講演会, オンライン開催, 2023 年 8 月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会会長 (2021.10–2023.9).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

広島大学 放射光科学研究センター協議会委員 (2020–).

未来工学研究所「宇宙・海洋・地球・科学基盤分科会」委員 (2023–2024).

名古屋工業大学人事部会外部委員 (2023).

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

科研費基盤研究(A),「液体を反応場とした動的オペランド硬X線光電子分光システムの開発」, 横山利彦 (2021年度–2023年度).

C) 研究活動の課題と展望

2002年1月着任以降，磁性薄膜の表面分子科学的制御と新しい磁気光学分光法の開発を主テーマとして，高磁場極低温X線磁気円二色性（UVSOR）や紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の発明，広域X線吸収微細構造（EXAFS）法と経路積分法によるインバー等磁性合金の熱膨張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。2022年8月に小板谷助教が転出，2023年4月に山本助教が転出，2022年12月に倉橋特任助教が着任，公募中であったもう1名の特任助教として2023年8月16日に前島尚行特任助教が着任した。退職まで2年半であるが，X線発光分光による固体高分子形燃料電池の電解質に関する研究，遷移金属リン化物単結晶・薄膜の触媒活性・磁性に関する研究を新たに展開し始めた。

杉　本　敏　樹（准教授）（2018 年 5 月 1 日着任）

櫻井　敦教（助教）
金井　恒人（特任講師）
市井　智章（特任助教）
斎藤　晃（学振特別研究員）
高橋　翔太（学振特別研究員）
佐藤　宏祐（学振特別研究員）
小山田　伸明（特任研究員）
林　仲秋（大学院生）
望月　達人（大学院生）
金　成翔（大学院生）
吉澤　龍（大学院生）
常川　響（大学院生）
松本　宜樹（特別共同利用研究員）
手塚　玄惟（特別共同利用研究員）
榊原　隆之（技術支援員）
志村　真希（事務支援員）

A-1) 専門領域：物理化学，分光学，機能物性化学，表面界面科学

A-2) 研究課題：

a) メタン活性化光触媒反応系における新奇な水・金属助触媒効果の発見

b) 高感度ラマン分光計測法の開発と電子非共鳴・表面プラズモン共鳴から脱却した表面分子吸着系の汎用的ラマン観測の実現

c) 高次非線形分光法の開発と埋没界面フォノン・分子観測への応用

d) 二次非線形極微分光法の開発と金属ナノギャップにおける局所・非局所非線形光学応答現象の発見

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 天然ガス中に豊富に含まれる資源であるメタンを光により活性化させ，化学的により付加価値が高い分子に変換させる光触媒技術は持続可能な社会の実現に向けて重要な化学技術である。我々は，水蒸気圧力を制御して水分子の吸着量を第一層吸着から多層吸着（10 層程度）まで系統的に変化させながら光触媒によるメタン転換反応を調べたところ，水分子吸着層の厚さが二分子層程度の時にメタンの非酸化カップリング（$2CH_4 \rightarrow C_2H_6 + H_2$）によるエタン生成効率が顕著に増大することを見出した［Amano *et al.*, *Catalysis Today* **426**, 114375 (2023)］。このメタンカップリングの反応式には水分子が露わには関与しないため，この現象の分子起源を探るべく，水分子同位体（D_2O）を用いたメタン転換光触媒過程のオペランド赤外分光測定を行った。その結果，吸着水分子は光触媒反応中に水酸基ラジカルとなり，それがメタンから水素をバリアレスに引き抜きメチルラジカルを効率的に生成させ（$CH_4 + OD \rightarrow CH_3 + HDO$），そのメチルラジカル同士のカップリングによりエタン生成反応が誘起されている（$2CH_3 \rightarrow C_2H_6$）事を突き止めた［Sato *et al.*, *Communications Chemistry* **6**, 8 (2023)］。また，我々は，Pt や Pd などの種々の金属助触媒を用いてメタン活性化光触媒反応を系統的に調べ，更に表面反応場のオペランド赤外分光計測を行うことにより，担持する金属種に依存し

てメタンと水の混合系における完全酸化種・部分酸化種の生成（反応選択性）が大きく変調され，さらに金属助触媒が正孔を補足し酸化されることを明らかにした。一般に，光触媒分野において金属助触媒は光誘起電子を補足し還元反応を促進することが想定されている。したがって，我々は，還元反応場としての従来の定説を超えて金属助触媒が酸化反応場としても機能していることを世界初で見出した［Sato *et al., Angew. Chem., Int. Ed.* **62**, e2023060 (2023)］。

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ベースとして時間的に非対称なパルス波形の成形とパルス遅延の精密制御を導入することで，電子共鳴あるいはプラズモン共鳴を用いて信号増大させることができない表面吸着分子系についても汎用的かつ高感度にラマン活性モードの観測を可能とする新しい界面非線形分子分光法を開発した。この新規方法論により，三次非線形ラマン分光法を表面界面系に適用する際に問題となるバルク由来の非共鳴バックグラウンド信号を数桁以上低減させることが可能となった。これにより，我々は代表的な金属・絶縁体の表面分子系として Pt(111)・Au(111)・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［論文 2 報準備･投稿中, Haruyama *et al.*, *Vac. Surf. Sci.* **65**, 355 (2022)］。とりわけ, 水分子超薄膜系においては, 協同的な水素結合揺らぎに起因するラマン活性モードの観測・解析から 100 K ~ 150 K の温度領域においてアモルファスの水素結合ネットワークが結晶化する挙動を捉えることに成功し［Tsuruoka *et al.*, 論文準備中，Noguchi *et al.*, 論文準備中］，自己組織化単分子膜においても集合構造の違いに起因した低振動数・高振動数ラマン活性モードを捉えることにも成功した［Ichii *et al.*, 論文投稿中］。

c) 和周波発生振動分光法に代表される二次非線形分光法は空間反転対称性が破れたドメインに選択的な計測手法であり，表面界面観測に広く用いられている。しかし，振動励起に赤外光を用いるため，赤外光が透過しない“物質に埋没した界面”の観測には適用できない。これを克服するため，物質中を透過する二つの光の差周波の唸りで分子振動を共鳴励起（強制振動）させ，それを第二高調波でコヒーレントにアップコンバージョンさせる四次非線形光学過程に基づく振動分光法を展開し始めている。特に，この手法を用いて，空間反転対称性が無い水晶（SiO_2）薄膜の観測に透過配置と反射配置でそれぞれ成功し，その強度比から，その信号光が二次と三次のカスケード過程に由来するものではなく，四次非線形光学過程に由来するものであることの確証を得た。また，バルク水晶に埋没した界面振動モードの観測に成功した［Yoshizawa *et al.*, 論文準備中］。

d) 走査トンネル顕微鏡（STM）と和周波発生振動分光法を組み合わせ，水分子吸着系の水素結合ネットワークにおいて機能発現のカギを握る重要な構造情報である“水分子の配向（水素の H-up・H-down 配置）”を高い空間分解能で観測する二次非線形極微分光法（探針増強和周波発生振動分光法）の開発に世界に先駆けて取り組んでいる。その要素技術として，①先端形状を制御したプラズモニック Au ナノ探針の作成［Mochizuki *et al.*, 論文準備中］，及び②光の回折限界以下のナノ探針先端領域からの第二高調波発生（SHG）信号の検知, に成功してきた。特に我々は, 数 10MHz オーダーの高繰り返しレーザー光源を用いた赤外波長可変 OPO システムを新たに光学系に組み込むことで，可視域から中赤外領域にわたる幅広い波長領域において Au ナノ探針－ Au(111) 基板間のナノギャップにおける SHG 二次非線形光学応答の計測に成功するに至った。これにより，プラズモン共鳴に有利な可視域よりもむしろ赤外領域の光入射においてナノギャップから強く第二高調波が発生するという特異な近接場非線形光学応答を見出した［Takahashi *et al., J. Phys. Chem. Lett.* **14**, 6919 (2023)］。この特異な近接場非線形光学応答を把握し制御・高度利活用することにより，現在, Au ナノ探針－ Au(111) 基板間ナノギャップに配置した種々のモデル分子の探針増強和周波発生（振動共鳴）信号の検出にも成功した［Sakurai *et al.*, 論文投稿中］。現在は，STM の電場変調でナノギャップからの近接場和周波発生を飛躍的に増大させる新技術の構築［Takahashi *et al.*, 論文準備中］，ならびに Pt や Ni などの非プラズモニックな基板表面の分子系に対する探針増強和周波発生振動分光にも成功してきている［Mochizuki *et al.*, 論文準備中］。

B-1) 学術論文

J. HARUYAMA, T. SUGIMOTO and O. SUGINO, “First-Principles Study of Water Adsorption Monolayer on Pt(111): Adsorption Energy and Second-Order Nonlinear Susceptibility,” *Phys. Rev. Mater.* **7**, 115803 (2023). DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.7.115803

F. AMANO, A. ISHIKAWA, H. SATO, C. AKAMOTO, S. P. SINGH, S. YAMAZOE and T. SUGIMOTO, “Facilitating Methane Conversion and Hydrogen Evolution on Platinized Gallium Oxide Photocatalyst through Liquid-Like Water Nanofilm Formation,” *Catal. Today* **426**, 114375 (2023). DOI: 10.1016/j.cattod.2023.114375

S. TAKAHASHI, A. SAKURAI, T. MOCHIZUKI and T. SUGIMOTO, “Broadband Tip-Enhanced Nonlinear Optical Response in a Plasmonic Nanocavity,” *J. Phys. Chem. Lett.* **14(30)**, 6919 (2023). DOI: 10.1021/acs.jpclett.3c01343

H. SAITO, H. SATO, T. HIGASHI and T. SUGIMOTO, “Beyond Reduction Cocatalysts: Critical Role of Metal Cocatalysts in Photocatalytic Oxidation of Methane,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **62(33)**, e2023060 (2023). DOI: 10.1002/anie.202306058

B-3) 総説，著書

T. SUGIMOTO, “Pioneering Interfacial Molecular Science for Realistic Catalyst under Reaction Condition : Molecular-Level Insights into the Critical Impacts of Interfacial Water on C–H Activation in Photocatalytic Methane Conversion,” *Vac. Surf. Sci.* **66(10)**, 580 (2023). DOI: https://doi.org/10.1380/vss.66.580

B-4) 招待講演

杉本敏樹,「非線形振動分光の限界突破への挑戦～表面界面系の次世代分子科学の開拓を目指して～」, 東北大学物理化学コロキウム特別セミナー , 仙台, 2024年 2月.

杉本敏樹,「固体表面界面低次元系における新規物性開拓＆非線形分光計測の限界突破」, 京都大学光物性セミナー , 京都, 2024年 1月.

杉本敏樹,「非線形振動分光で迫る物質表面界面における水分子の集団的挙動」, レーザー学会学術講演会第 44回年次大会, 東京, 2024年 1月.

杉本敏樹,「固体表面界面低次元系における新規物性開拓＆非線形分光計測の限界突破」, 2023年日本分光学会年次講演会, 神戸市, 2023年 10月.

T. SUGIMOTO, “Sum-frequency generation vibrational spectroscopy for pioneering many-body physicochemical properties of interfacial molecular systems,” EAWCD 2024 The 24th East Asia Workshop on Chemical, Taipei (Taiwan), March 2024.

T. SUGIMOTO, “Pioneering near-field tip-enhanced SFG nanoscopy of interfacial molecular systems beyond the diffraction limit of light,” 9th SFG workshop, Tokyo (Japan), November 2023.

T. SUGIMOTO, “Tip-enhanced second-order nonlinear nanoscopy of interfacial molecular systems beyond the diffraction limit of light,” 8th Asian Spectroscopy Conference (ASC) 2023, Atema Kogen, Tokamachi, Niigata (Japan), September 2023.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面真空学会若手部会幹事 (2018–).

分子科学会運営委員 (2020–).

学会の組織委員等

8th Asian Spectroscopy Conference (ASC2023), Organizing committee (2019–2024).

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

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

文部科学省学術調査官 (2021–2023).

理科教育活動

職場体験学習「非線形光学効果を用いた物質・分子の観測研究を体験してみよう！」豊田市立高橋中学校 (2023).

その他

分子科学若手の会夏の学校分子科学研究所対応者 (2018–).

B-8) 大学等での講義，客員

理化学研究所, 客員研究員, 2021年4月–2024年3月.

理化学研究所, 客員研究員, 2021年4月–2024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」, 2023年4月–2024年3月.

B-10) 競争的資金

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

科研費基盤研究(B),「探針増強を用いた振動和周波発生分光法の実現と表面分子科学の開拓」, 櫻井 敦教 (2023年度–2026年度).

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

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

科学技術振興機構創発的研究支援事業（受託研究),「次世代アクアナノ界面機能化学を拓く高次非線形分子分光」杉本 敏樹 (2023年度–2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

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

今後は，これまで独立に挑戦してきたこれら３つの取り組みをさらに高度に融合させていくことにも注力し，従来の

実験手法で開拓・解明が困難であった未踏の表面界面系領域や実材料系・複雑系界面の分子科学を力強く開拓する。また，それと同時並行的に，このような先端的な計測研究を産学官緊密連携の下で大きく発展・応用させることにより，『表面界面エンジニアリング』・『界面分子戦略』に基づく革新的な材料創製・新技術創出に向けた大きな原動力・研究潮流を作り出し，環境・エネルギー分野をはじめとし人類が直面する重要な社会課題の解決に貢献する。

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

b) 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

c) 固体 NMR による有機分子材料の解析

d) 独自固体 NMR プローブのための要素技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 生体膜中の脂質分子など高い分子運動性を示す安定同位体非標識分子の ^{13}C 信号帰属に資する新規固体 NMR 測定法の開発を試みた。炭素核に化学結合した水素核数に応じて高度に ^{13}C 核を区別する新規スペクトル編集固体 NMR 測定法を 2 種類に関して理論的検討を完了した。

b) 高分解能 ^{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た。考案した複数種の内，1 種について国際共同研究先の施設を用いてテスト測定まで行った。

c) 分子科学研究所の瀬川泰知准教授のグループで独自に合成された有機分子の状態解析を固体 NMR を用いて行っている。^{1}H 核が少ないことから天然存在比同位体観測による構造同定は有効な手法が限られていたが，残留不純物の同定，および ^{13}C 核の暫定的信号帰属を達成した。現状の解析結果から目的化合物の合成が達成されていることを強く示唆する十分な情報を得た。

d) 現在使用している Bruker 社製分光器, および周辺機器と完全互換性を有する独自の固体 NMR プローブの開発を行ってきた。この目的の為, 4mm 試料管を対象とした自作のスピニングモジュールを開発してきた。第 4 世代の同モジュールは，メーカー純正の最高回転周波数を大幅に超越する回転周波数を達成した。しかし，そのような回転周波数ではメーカー製ジルコニア試料管では強度不足であることが判明した。このため，市販品と互換であるが独自構造の試料管を窒化ケイ素を用いて製作することに成功した。現在，Bruker 社製プローブに設置可能な互換型モジュールと性能を優先した設計でエアラインが異なる高性能型の 2 種類の第 5 世代モジュールを開発している。さらに，これらモジュールに最適化した独自の 600MHz 固体 NMR プローブを開発している。

B-1) 学術論文

M. YAGI-UTSUMI, S. G. ITOH, H. OKUMURA, K. YANAGISAWA, K. KATO and K. NISHIMURA, “The Double-Layered Structure of Amyloid-β Assemblage on GM1-Containing Membranes Catalytically Promotes Fibrillization,” *ACS Chem. Neurosci.* **14(15)**, 2648–2657 (2023). DOI: 10.1021/acschemneuro.3c00192

B-4) 招待講演

K. NISHIMURA, “Characterizations of Biomolecules and Molecular Materials Based on Solid-State NMR,” ICCT seminar International Chemistry Theory Center, University of Science and Technology of China, Hefei (China), February 2024.

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，これら小外径試料管に関して市販の装置を大きく超越した回転能力を有する回転モジュールの開発が可能であると考えている。4mm 試料管用モジュール開発は第 5 世代を最終版として，今後，より小外径の試料管のモジュール開発にシフトしたいと考えている。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，測定法開発テスト時にプログラムのバグでは説明の付かない誤作動として，デバッガーで一切のエラーが表示されないにも関わらず，まったく異なる位相，強度でパルス照射される分光器の誤作動が問題となっている。これは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，中国の University of Science and Technology of China の研究者と国際共同研究を開始した。これにより最新の設備を用いた測定の継続可能な研究体制を確保できた。今後，基本的に全ての固体NMR 測定は共同研究先で行い，日本ではハードウエア開発に専念する予定である。

6-7　生命・錯体分子科学研究領域

生体分子機能研究部門

青　野　重　利（教授）（2002 年 5 月 1 日着任）

NAM, Dayeon（特任研究員（IMS フェロー））
東田　怜（学振特別研究員）
中根　香織（事務支援員）
野村　潤子（事務支援員）
川口　律子（事務支援員）

A-1) 専門領域：生物無機化学

A-2) 研究課題：

a) バクテリアの走化性制御系における酸素センサーシステムの構造機能相関解明

b) 鉄イオンセンサータンパク質の構造機能相関解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) HemAT は細菌の酸素に対する走化性制御系を担っている酸素センサータンパク質である。細菌の走化性制御系は，外部シグナルである誘引／忌避物質のセンサーとして機能するシグナルトランスデューサータンパク質（methyl-accepting chemotaxis protein（MCP））と，シグナル伝達・制御に関与する Che タンパク質（CheA，CheW，CheY 等）から構成されている。本研究では，HemAT による酸素センシングおよび，酸素に応答したシグナル伝達反応の分子機構解明を目的として研究を行なった。これまでの研究で，HemAT，CheA，CheW が安定な三者複合体（HemAT/CheA/CheW 複合体）を形成することを明らかにした。生成した HemAT/CheA/CheW 複合体を用い，クライオ電子顕微鏡単粒子解析による複合体の構造解析を行なった。その結果，7.6 Å 分解能で HemAT/CheA/CheW 複合体の構造解析に成功した。現在，より高分解能での構造決定に向けて，各種実験条件の検討を行っている。また，HemAT 単独でのクライオ電子顕微鏡単粒子解析も合わせて実施するとともに, HemAT センサードメインの結晶構造解析を行った。HemAT センサードメインについては，酸化型，還元型，酸素結合型の結晶構造解析に成功した。現在，それらの構造を詳細に比較検討することにより，酸素センシングに伴うヘム周辺の構造変化とシグナル伝達経路の解析を進めている。

b) 鉄は，全ての生物に必須の微量元素である。しかし，過剰な鉄は細胞毒性を示すため，細胞内の鉄の濃度は厳密に調節する必要がある。生物が最適な鉄濃度を感知するためには，外部環境および細胞内の鉄濃度をセンシングするためのシステムが必要である。本研究では，細胞内鉄濃度の制御に関与する新規な二成分制御系（VgrR-VgrS）を研究対象として，その構造機能相関解明を目的として研究を行なった。本系でレスポンスレギュレータとして機能する VgrR は，VgrS によるリン酸化のみならず，細胞内の鉄イオンによっても機能制御されると推定されている。本研究では，鉄イオンによる VgrR- 標的 DNA 複合体形成への影響を確認した。DNA 結合能を有する，リン酸化 VgrR を DNA に結合した後，鉄を加え相互作用解析を行った。鉄の濃度が上昇するにつれ，VgrR-DNA 複合体形成が阻

害されることが確認できた。また，ICP 測定の結果，鉄センサーとして機能する VgrS には，Fe(III) が 2 当量結合することが分かった。現在，VgrS，VgrR の結晶構造解析のため，結晶化条件の検討を行っている。また，前年度までの研究に引き続き，イネの細胞内鉄イオンセンサーとして機能すると考えられているユビキチンリガーゼ HRZ による鉄イオンセンシング機構，および鉄イオンによる HRZ の機能制御機構の解明を目的とした研究も進めている。

B-1) 学術論文

H. MATSUURA, N. SAKAI, S. TOMA-FUKAI, N. MURAKI, K. HAYAMA, H. KAMIKUBO, S. AONO, Y. KAWANO, M. YAMAMOTO and K. HIRATA, "Elucidating Polymorphs of Crystal Structures with Intensity-Based Hierarchical Clustering Analysis on Multiple Diffraction Datasets," *Acta Crystallogr., Sect. D: Biol. Crystallogr.* **79**, 909–924 (2023). DOI: 10.1107/S2059798323007039

B-4) 招待講演

S. AONO, "Structural basis for CO biosynthesis to assemble the active site in NiFe-hydrogenase," 20th International Conference on Biological Inorganic Chemistry, Adalaide (Australia), July 2023.

B-7) 学会および社会的活動

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構創発的研究支援事業事前評価外部専門家 (2023–2025).

その他

豊田理化学研究所審査委員会委員 (2019–2024).

B-10) 競争的資金

科研費新学術領域研究（研究領域提案型）「生命金属科学」（計画研究),「生命金属動態を鍵反応とするセンサー分子システムの構築と生理機能制御」, 青野重利 (2019 年度–2023 年度).

科研費新学術領域研究「生命金属科学」（研究領域提案型）（総括班),「「生命金属科学」分野の創成による生体金属動態の統合的研究」（代表；津本浩平), 青野重利（研究分担者）(2019 年度–2023 年度).

C) 研究活動の課題と展望

生物は，様々な外部環境変化にさらされながら生育するため，外部環境変化に応答して細胞内の恒常性を維持する精緻なシステムを有している。このような外部環境変化に応答した恒常性維持システムには，外部環境の変化を感知するためのセンサータンパク質が必要不可欠である。我々の研究グループでは，遷移金属が関与するセンサータンパク質の構造機能相関解明, および遷移金属の細胞内恒常性維持機構の解明を目指して研究を進めている。今後は，構造生物学的，ならびに生化学・分子生物学的な実験手法を活用し，遷移金属含有型センサータンパク質の構造機能相関解明のみならず，これら新規金属タンパク質の生合成反応機構解明に関する研究も進めて行きたいと考えている。

加　藤　晃　一（教授）（2008 年 4 月 1 日着任）

神田　智哉（助教）
立尾　清吾（特任研究員）
斉藤　泰輝（特任研究員）
岩﨑　美雪（研究員（派遣））
矢木　真穂（特別訪問研究員）
谷中　冴子（特別訪問研究員）
ARCHAPRADITKUL, Chanya（インターンシップ）
関　健仁（大学院生）
保科　明（特別共同利用研究員）
中野　理音（特別共同利用研究員）
磯野　裕貴子（特任専門員）
西尾　美穂（技術支援員）
笠原　裕子（事務支援員）
福富　幸恵（事務支援員）

A-1) 専門領域：構造生物学，タンパク質科学，糖鎖生物学，NMR 分光学

A-2) 研究課題：

a) 生命分子ネットワークが創発する高次機能のメカニズム探査と設計と制御

b) 生命体を構成する多様な分子素子がダイナミックに秩序形成する仕組みの探究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 多ドメインタンパク質は，それを構成するドメインの空間的な再配置によって，協調的な分子間相互作用とアロステリックな活性調節を達成し，複雑な機能を発現している。本年度は，タンパク質ジスルフィドイソメラーゼ（PDI）のドメイン配置の変化を利用して細胞内の酸化還元環境を反映する FRET バイオセンサーを設計・創成した（ExCELLS・青木一洋博士，計算科学研究センター・岡崎圭一博士との共同研究）。また，高速原子間力顕微鏡を用いて抗体医薬と Fcγ レセプターの相互作用を定量評価する方法を確立した（ExCELLS･内橋貴之博士との共同研究）。さらに，以下の国際共同研究を展開し，成果発信を行った。ヒト由来のヒストンシャペロンの動的構造解析を通じたサブユニット間のコミュニケーション機構の解明（韓国科学技術院・Ji-Joon Song 博士，ExCELLS・内橋貴之博士との共同成果），高密度に糖鎖修飾を受けた受容体型タンパク質チロシンホスファターゼ α の構造ダイナミクスの解明（中央研究院，糖鎖構造機能解析グループ，ExCELLS・内橋貴之博士との共同成果），抗菌ペプチドの膜破壊作用の直接可視化による抗菌メカニズムの解明（中央研究院･Rita P.-Y. Chen 博士，ExCELLS･内橋貴之博士との共同成果），HIV-1 逆転写酵素との阻害剤の複合体の高次構造の評価（カセサート大学・Kiattawee Choowongkomon 博士との共同成果）。

b) 糖鎖修飾の舞台としてのゴルジ体に着目し，その微細構造の時空間ダイナミクスと糖タンパク質の輸送経路を探査するための研究を行っている。本年度はこの目的に向けて，ExCELLS 糖鎖構造機能解析グループとの連携のもとで，以下の技術基盤を構築した。 走査電子顕微鏡技術によるゴルジ体の微細形態の観察と糖転移酵素のマッピング（旭

川医科大学･甲賀大輔博士との共同研究），超解像顕微鏡による糖転移酵素のゴルジ体内の局在解析（理化学研究所･戸島拓郎博士との共同研究）。さらに，ヒトの糖鎖修飾に関する網羅的・体系的な情報取得を目指す「ヒューマングライコームプロジェクト」に参画して，糖鎖の精密構造解析と生合成アトラスの構築に着手した。

B-1) 学術論文

S. YANAKA, H. WATANABE, R. YOGO, M. KONGSEMA, S. KONDO, H. YAGI, T. UCHIHASHI and K. KATO, "Quantitative Analysis of Therapeutic Antibody Interactions with Fcγ Receptors Using High-Speed Atomic Force Microscopy," *Biol. Pharm. Bull.* **47**, 334–338 (2024). DOI: 10.1248/bpb.b23-00751

C. CHO, C. GANSER, T. UCHIHASHI, K. KATO and J.-J. SONG, "Structure of the Human ATAD2 AAA+ Histone Chaperone Reveals Mechanism of Regulation and Inter-Subunit Communication," *Commun. Biol.* **6**, 993 (2023). DOI: 10.1038/s42003-023-05373-1

S. SEETAHA, N. KAMONSUTTHIPAIJIT, M. YAGI-UTSUMI, Y. SEAKO, T. YAMAGUCHI, S. HANNONGBUA, K. KATO and K. CHOOWONGKOMON, "Biophysical Characterization of p51 and p66 Monomers of HIV-1 Reverse Transcriptase with Their Inhibitors," *Protein J.* **42(6)**, 1–12 (2023). DOI: 10.1007/s10930-023-10156-y

E. H.-L. CHEN, C.-H. WANG, Y.-T. LIAO, F.-Y. CHAN, Y. KANAOKA, T. UCHIHASHI, K. KATO, L. LAI, Y.-W. CHANG, M.-C. HO and R. P.-Y. CHEN, "Visualizing the Membrane Disruption Action of Antimicrobial Peptides by Cryo-Electron Tomography," *Nat. Commun.* **14**, 5464 (2023). DOI: 10.1038/s41467-023-41156-2

M. YAGI-UTSUMI, S. G. ITOH, H. OKUMURA, K. YANAGISAWA, K. KATO and K. NISHIMURA, "The Double-Layered Structure of Amyloid-β Assemblage on GM1-Containing Membranes Catalytically Promotes Fibrillization," *ACS Chem. Neurosci.* **14(15)**, 2648–2657 (2023). DOI: 10.1021/acschemneuro.3c00192

M. YAGI-UTSUMI, H. MIURA, C. GANSER, H. WATANABE, M. HIRANYAKORN, T. SATOH, T. UCHIHASHI, K. KATO, K. OKAZAKI and K. AOKI, "Molecular Design of FRET Probes Based on Domain Rearrangement of Protein Disulfide Isomerase for Monitoring Intracellular Redox Status," *Int. J. Mol. Sci.* **24(16)**, 12865 (2023). DOI: 10.3390/ijms241612865

Y.-C. CHIEN, Y.-S. WANG, D. SRIDHARAN, C.-W. KUO, C.-T. CHIEN, T. UCHIHASHI, K. KATO, T. ANGATA, T.-C. MENG, S.-T. DANNY HSU and K.-H. KHOO, "High Density of N- and O-Glycosylation Shields and Defines the Structural Dynamics of the Intrinsically Disordered Ectodomain of Receptor-Type Protein Tyrosine Phosphatase Alpha," *JACS Au* **3(7)**, 1864–1875 (2023). DOI: 10.1021/jacsau.3c00124

T. NAKAMA, A. ROSSEN, R. EBIHARA, M. YAGI-UTSUMI, D. FUJITA, K. KATO, S. SATO and M. FUJITA, "Hysteresis Behavior in the Unfolding/Refolding Processes of a Protein Trapped in Metallo-Cages," *Chem. Sci.* **14(11)**, 2910–2914 (2023). DOI: 10.1039/D2SC05879K

B-3) 総説，著書

伊藤　暁，奥村久士，矢木真穂，加藤晃一,「アミロイドベータペプチドの凝集初期過程の分子シミュレーション」, *月刊「細胞」*, **55(10)**, 784–788 (2023).

谷中冴子，加藤晃一,「抗体医薬の作動メカニズムの分子基盤」, *生物工学会誌*, **101**, 347–349 (2023). DOI: 10.34565/seibutsukogaku.101.7_347

B-4) 招待講演

加藤晃一,「糖鎖の生命分子科学とバイオ創薬科学」, 神戸薬科大学特別研究セミナー , 神戸, 2024年 3月.

K. KATO, "NMR Characterization of Antibodies as Biopharmaceutical Glycoproteins," The 7th bilateral Taiwan-Japan Symposium (TJNMR2024), Hiroshima (Japan), March 2024.

K. KATO, "NMR characterization of conformational dynamics of oligosaccharides and glycoproteins for evaluating and improving their functionality," GlycoNMR Summit, online, December 2023.

矢木真穂,「アミロイドβ タンパク質の構造変化と分子集合」, 第 96回日本生化学会大会, 福岡, 2023年 11月.

谷中冴子, 加藤晃一,「構造ダイナミクスの観点からの抗体の機能解読と改変」, 第 96回日本生化学会大会, 福岡, 2023年 11月.

矢木真穂, 加藤晃一,「Unraveling the Mechanisms of Desiccation Tolerance: Insights from Anhydrobiotic Tardigrade CAHS1 Fibrous Condensates」, 第 61回日本生物物理学会年会, 名古屋, 2023年 11月.

加藤晃一,「生命科学の未来探究」, 九州大学 2023年度第 2回薬学部局FD 講演会「機関間連携」, 福岡, 2023年 11月.

加藤晃一,「糖タンパク質のNMR ～抗体への応用～」, 第 40回Bruker NMR ユーザーズミーティング, 大阪, 東京, 2023年 10月.

K. KATO, "Exploring Dynamic Biomolecular Assembly in Physiological, Pathological, and Extremotolerant Contexts," International collaboration symposium iNANO/IMS ExCELL "The molecular organization of living systems," Aarhus (Denmark), September 2023.

K. KATO and S. YANAKA, "NMR Characterization of Immunoglobulin G Glycoproteins for Evaluation and Development of Therapeutic Antibodies," Asia-Pacific Nuclear Magnetic Resonance Symposium (APNMR2023), Taipei (Taiwan), September 2023.

矢木真穂,「アミロイドβ 線維の形成促進および形成阻害の分子機構の解明」, 第 23回日本蛋白質科学会年会, 名古屋, 2023年 7月.

谷中冴子, 加藤晃一,「構造ダイナミクスに着目した抗体の隠された機能の探査」, 第 23回日本蛋白質科学会年会, 名古屋, 2023年 7月.

加藤晃一,「バイオ医薬品の高機能化に向けた糖鎖の生命分子構造学」, 2023年度分子研異分野技術交流セミナー（第 2回）～創薬リード探索の先端と計測技術～ , 岡崎, 2023年 6月.

K. KATO and S. YANAKA, "Dynamic Structures and Interactions of Immunoglobulin G Glycoproteins as Therapeutic Antibodies," 14th AFMC International Medicinal Chemistry Symposium (AIMECS2023), Seoul (Korea), June 2023.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本バイオイメージング学会評議員 (1995–), 理事 (2012–), 副会長(2021–) .

日本生化学学会評議員 (2002–).

日本糖質学会評議員 (2003–), 理事 (2013–).

日本核磁気共鳴学会幹事 (2020–), 評議員 (2022–) .

日本蛋白質科学会執行役員 (2023–).

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–).

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–).

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–).

理科教育活動

日本科学振興協会（JAAS）年次大会 2023「会いに行ける科学者フェス」展示ブース (2023).

B-8) 大学等での講義，客員

名古屋市立大学薬学部，大学院薬学研究科, 特任教授, 2008年4月– .

名古屋市立大学薬学部, 講義「構造生物学」「薬学物理化学II」「生命薬科学研究入門」「一般教養科目　創薬と生命」「創薬科学・知的財産活用論」「 物理系実習II」, 2015年– .

名古屋市立大学大学院薬学研究科, 講義「創薬生命科学基礎II」「生命分子構造学特論」, 2015年– .

京都大学複合原子力科学研究所, ユニット研究員, 2022年4月–2025年3月.

大阪大学蛋白質研究所, 客員フェロー , 2023年4月–2024年3月.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構CREST 研究,「ゴルジ体の動態解明に基づく糖鎖修飾の制御」, 加藤晃一 (2021年度–2025年度).

日本学術振興会学術国際交流事業二国間交流事業,「ヌクレオソームダイナミクスに関わるATPase の動的構造解析」, 加藤晃一 (2021年度–2023年度).

科研費基盤研究(C),「 スピン脱塩カラムと二次元NMR による変性蛋白質残存構造の解析 」（代表：桑島邦博), 加藤晃一（研究分担者）(2020年度–2023年度).

AMED 次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発事業,「国際競争力のある次世代抗体医薬品製造技術開発／革新的な次世代抗体医薬品製造基盤技術の開発（分子中に秘められた新規相互作用部位の探査と改変を通じた次世代抗体創成の基盤構築）」（代表：谷中冴子), 加藤晃一（研究分担者）(2021年度–2025年度).

AMED 次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発事業,「国際競争力のある次世代抗体医薬品製造技術開発／次世代抗体医薬品の実用化に向けた物性・品質評価及び管理手法に関する技術的研究（次世代抗体医薬品の実用化に向けた品質評価及び管理手法に関する技術的研究）」（代表：石井明子), 加藤晃一（研究分担者）(2021年度–2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

これまでの成果をさらに発展させて，複雑な生命分子システムを舞台とする分子科学を開拓する。すなわち，生命分子システムの中における各構成要素のダイナミックな振る舞いを「みる」アプローチ法を発展させるとともに，得られたデータを情報科学的に「よむ」ためのアプローチ法を開拓する。さらに，階層横断的な機能解析を実施し，外部環境の変動の中で秩序創発していくロバストな生命の本質を統合的に理解することを目指す。生命体を構成する多様な分子素子がダイナミックに秩序創発する仕組みを理解するためには，生命分子を取り巻く不均一かつ複雑な環境因子の影響を考慮することが必要である。微小重力環境下において形成したアミロイド線維の構造解析を継続するとともに，極限環境において生命活動を司る分子集団の構造・動態・機能の解析を通じて生命の環境適応の機構を理解することを目指した研究を展開する。さらに，第 3 の生命鎖とよばれる糖鎖の構造・機能・形成に関する統合的な研究を推進する。

飯　野　亮　太（教授）（2014 年 6 月 1 日着任）

大友　章裕（助教）
原島　崇徳（助教）
GRAHAM, Rosie（特任研究員）
ZHU, Lucy（インターンシップ）
大国　泰子（技術支援員）
山本　真由子（技術支援員）
中根　香織（事務支援員）
川口　律子（事務支援員）
野村　潤子（事務支援員）

A-1) 専門領域：生物物理学，分子モーター，分子機械，1 分子計測，タンパク質工学

A-2) 研究課題：

a) 回転分子モーター V-ATPase のエネルギー変換機構の解明，機能創成，特性解析
b) 人工 DNA ナノ粒子モーターの運動機構解明，高性能化，運動制御能の付与
c) リニア分子モーターキネシンとレールの改変・ハイブリッド化による運動制御と特性解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) V-ATPase（V_oV_1）は，ATP の化学エネルギーを利用して細胞膜を介するイオンの能動輸送を行う回転型イオンポンプであり，ATP 加水分解反応を触媒する V_1 とイオン輸送を担う V_o の２つの回転分子モーターの複合体である。我々が研究対象としている腸球菌由来 V_oV_1（EhV_oV_1）はナトリウムイオン（Na^+）を輸送する。我々は，EhV_oV_1 が脂質二重膜を介する Na^+ の電気化学ポテンシャルにより，高い熱力学的効率で ATP を合成することを明らかにし，エネルギー変換の可逆性を実証した。さらに，EhV_oV_1 のイオン結合部位を改変することで，イオン選択性を Na^+ から水素イオン（H^+）に変えることに成功し，クライオ電顕単粒子解析でその構造的基盤を解明した。
b) タンパク質分子モーターに触発されて開発された DNA 人工分子モーターの運動速度は数 nm/s 程度であり，10–1000 nm/s で動くタンパク質分子モーターに比べて大きく劣る。我々は，DNA 修飾金ナノ粒子，RNA 修飾足場，DNA 依存的 RNA 分解酵素で構成される DNA ナノ粒子モーターの運動機構と律速過程を高速高精度 1 粒子追跡と速度論シミュレーションで特定し，タンパク質分子モーターに匹敵する 100 nm/s の運動速度を達成した。しかしながら，運動速度と運動距離の間にトレードオフが存在し，運動速度の上昇とともに運動距離が低下することも明らかになった。そこで，シミュレーションによる予測に基づき DNA 塩基配列を改良し，高速運動と長距離運動を両立することに成功した。
c) 2 本足で歩く分子モーターキネシン - 1 は，後足が前足を常に追い越すいわゆるハンドオーバーハンド機構で，レールである微小管上を直進運動する。我々は，人工分子 PEG でキネシンの二つの足を繋いだ生体－人工ハイブリッドキネシンが天然型と同様のハンドオーバーハンド機構で正確に直進運動することを明らかにした。また，剛直で長いタンパク質リンカーで２つの足を繋ぐと，微小管上を短いピッチでらせん運動することを明らかにした。さらに，3 本もしくは 6 本の足を持つ多脚型キネシンを創成し，野生型と異なり多脚型は微小管上の欠陥（穴）を迂回して運動し続けることが可能なことを明らかにした。

B-1) 学術論文

J. NISHIDA, A. OTOMO, T. KOITAYA, A. SHIOTARI, T. MINATO, R. IINO and T. KUMAGAI, "Sub-Tip-Radius Near-Field Interactions in Nano-FTIR Vibrational Spectroscopy on Single Proteins," *Nano Lett.* **24(3)**, 836–843 (2024). DOI: 10.1021/acs.nanolett.3c03479

Y. MATSUMOTO, S. YAMASAKI, K. HAYAMA, R. IINO, H. NOJI, A. YAMAGUCHI and K. NISHINO, "Changes in the Expression of *mexB*, *mexY*, and *oprD* in Clinical *Pseudomonas aeruginosa* Isolates," *Proc. Jpn. Acad. Ser. B* **100(1)**, 57–67 (2024). DOI: 10.2183/pjab.100.006

R. N. BURTON-SMITH, C. SONG, H. UENO, T. MURATA, R. IINO and K. MURATA, "Six States of Enterococcus hirae V-Type ATPase Reveals Non-Uniform Rotor Rotation during Turnover," *Commun. Biol.* **6(1)**, 755 (2023). DOI: 10.1038/s42003-023-05110-8

T. KOSUGI, T. IIDA, M. TANABE, R. IINO and N. KOGA, "Design of Allosteric Sites into Rotary Motor V_1-ATPase by Restoring Lost Function of Pseudo-Active Sites," *Nat. Chem.* **15**, 1591–1598 (2023). DOI: 10.1038/s41557-023-01256-4

B-2) 国際会議のプロシーディングス

J. NISHIDA, A. OTOMO, R. IINO and T. KUMAGAI, "Sub-tip-radius near-field interactions in nano-FTIR vibrational spectroscopy on single protein particles," *Proc. SPIE 12654, Enhanced Spectroscopies and Nanoimaging 2023*, 1265403 (2023). DOI: 10.1117/12.2676631

B-3) 総説，著書

David A. Leigh，**飯野亮太**，**金原　数**,「インタビュー：分子マシン研究をリードする David A. Leigh 博士」, *現代化学*, 10月号, 28–32 (2023).

B-4) 招待講演

R. IINO, "Single-molecule imaging and engineering of biological and synthetic molecular motors," CU-MU-IMS Faculty Exchange Meeting 2024, Okazaki, 2024年3月.

飯野亮太,「生体発動分子の展望と課題」, シンポジウム～発動分子科学の展望と課題～, 横浜, 2023年12月.

R. IINO, "Autonomous unidirectional motions of biomolecular motors: The roles of structures and chemical fuels," Okazaki Workshop on Molecular Machines 2023, Okazaki, 2023年12月.

大友章裕,「1分子散乱イメージングによる回転分子モーター V-ATPase の回転機構の解明」, 第9回バイオダイナミクス研究会, 2023年12月.

R. IINO, "Single-molecule imaging and engineering of molecular motors," Syposium "Biophysicochemical methods and techniques drive the observation and manipulation of the biological phenomena," 61th Annual Meeting of the Biophysical Society, Nagoya, 2023年11月.

原島崇徳,「生体分子モーターに匹敵する人工DNA 分子モーターの設計を目指して」, 第12回分子モーター討論会, 仙台, 2023年9月.

T. HARASHIMA, A. OTOMO and R. IINO, "Acceleration of artificial DNA-nanoparticle motor toward 100 nm/s," 16th Eurasia Conference on Chemical Sciences, Bangkok (Thailand), December 2023.

R. IINO, “Single-molecule detection, imaging, and analysis of proteins,” 16th Eurasia Conference on Chemical Sciences, Bangkok (Thailand), December 2023.

R. IINO, “Single-molecule imaging and engineering of biological and synthetic molecular motors,” Seminar at Fritz Haber Institute of the Max Planck Society, Berlin (Germany), November 2023.

R. IINO, “Single-molecule imaging and engineering of biological and synthetic molecular motors,” Seminar at Wuhan University, Wuhan (China), October 2023.

R. IINO, “Single-molecule imaging and engineering of biological and synthetic molecular motors,” Seminar at School of Pharmacy, Tongji Medical College, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan (China), October 2023.

R. IINO, “Single-molecule imaging and engineering of molecular motors,” The symposium “The molecular organization of living systems,” iNANO, Aarhus University, Aarhus (Denmark), September 2023.

R. IINO, “Direct observation of elementary processes enables acceleration of DNA-nanoparticle motor up to 100 nm/s,” Seminar at Department of Physics, Simon Fraser University, Vancouver (Canada), July 2023.

R. IINO, “Single-molecule analysis and engineering of molecular motor proteins,” The TSRC Workshop on Protein Dynamics, Telluride (USA), July 2023.

R. IINO, “Single-molecule analysis and engineering of molecular motor proteins,” Seminar at Department of Chemistry, Indiana University, Bloomington (USA), July 2023.

B-5) 特許出願

特願 2021-168388,「タンパク質，ポリヌクレオチド，組換えベクター，形質転換体，ポリエチレンテレフタレート分解用組成物，及びリサイクル品の製造方法」, 中村彰彦，飯野亮太（静岡大学，自然科学研究機構）, 2021 年.

B-6) 受賞，表彰

原島崇徳, 第 7 回分子ロボティクス年次大会若手研究奨励賞 (2024).

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，代議員 (2019.6–2023.6).

学会の組織委員等

日本生物物理学会第 61 回年会実行委員 (2022–2023).

日本生物物理学会第 61 回年会実行委員 (2022–2023).（大友章裕）

日本生物物理学会第 61 回年会実行委員 (2022–2023).（原島崇徳）

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会国際事業委員会書面評価員 (2023).

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

職場体験学習, 豊田市立豊南中学校 (2023).

岡崎市小中学校理科作品展「未来の科学者賞」選考委員 (2023).（大友章裕）

B-8) 大学等での講義，客員

総合研究大学院大学先端学術院,「機能生体分子科学」, 2022年4月– .

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「バクテリアべん毛モーター固定子複合体の「回転モデル」を1分子計測で実証する」, 飯野亮太 (2021年度–2023年度).

科研費学術変革領域研究(A),「生体分子モーターに匹敵する速さで動き制御可能な人工分子モーターをつくる」, 飯野亮太 (2023年度–2024年度).

科研費若手研究,「一分子計測法で明らかにするV-ATPaseの機能と構造の相関」, 大友章裕 (2021年度–2023年度).

自然科学研究機構OPEN MIX LAB（OML）公募研究プログラム（若手支援型),「新しい分子モータータンパク質の創生を目指したボトムアップアプローチ」, 大友章裕 (2023年度–2025年度).

科研費若手研究,「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).

B-11) 産学連携

共同研究, キリンホールディングス（株),「PET分解酵素の開発」, 飯野亮太 (2021年度–2024年度).

共同研究, ポリプラスチックス（株), 静岡大学,「ポリブチレンテレフタレート（PBT）分解酵素の創出」, 飯野亮太 (2023年度–2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

生体分子モーター等のナノサイズの生体分子機械は，人間が作ったマクロなサイズの機械と比べてはるかに小さく，ブラウン運動の活用等，全く異なる作動原理で働く。今後も引き続き，天然の分子モーターを1分子計測して機構を調べるだけでなく，天然に存在しない分子モーターを積極的につくることで，その作動原理と設計原理をさらに深く理解し, 機能向上や制御に繋げる。例えば, 1回転で2倍のイオンを輸送するV_oV_1をつくることで, ATP加水分解モーターV_1とイオン輸送モーターV_oのエネルギー変換の共役機構の理解を深めるだけでなく，イオン輸送速度や電気化学ポテンシャル形成能を制御する。また，ヘテロな塩基配列を有するDNAナノ粒子モーターを二量体化して外部からのDNA添加で運動方向の制御を可能にし，センサー機能とアクチュエーター機能を兼ね備えた高速高制御人工分子モーターを創成する。さらに，非天然型キネシンだけでなく非天然型のレール（微小管）を創成して組み合わせ，選別輸送，速度変調輸送，大規模一方向輸送等を実現する。

錯体触媒研究部門

魚　住　泰　広（教授）（2000 年 4 月 1 日着任）

奥村　慎太郎（助教）
田澤　文（研究員（派遣））
FAN, Lisa（インターンシップ）
ZHANG, Kaili（大学院生）
高橋　輝気（大学院生）
服部　修佑（大学院生）
谷分　麻由子（事務支援員）

A-1) 専門領域：有機合成化学，有機金属化学

A-2) 研究課題：

a) 不均一反応メディア中での触媒反応システムの構築
b) 光触媒を利用した分子変換反応の開発
c) 新しい遷移金属錯体触媒・ナノ構造触媒の創製

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) パラジウム，ロジウム，銅錯体触媒などを両親媒性高分子に固定化するとともに機能修飾することで，これら遷移金属錯体触媒有機変換工程の多くを完全水系メディア中で実施することに成功した。水中不均一での高立体選択的触媒反応の開発を世界にさきがけて成功した。
b) 新しいピンサー錯体の合成方法論を確立し，それらピンサー錯体分子が自発的に集積することで形成する分子集合体の三次元高次構造に立脚した新しい触媒機能システムの開拓に注力しつつある。
c) 水中での反応加速，連続フローシステムに依る効率化，ピンサー錯体触媒化学における新しい反応形式などに立脚して各種反応の ppm-ppb 触媒化を進めつつある。
d) 超高触媒活性を示す単原子触媒種の発生・発現を見出し，その構造評価および有機分子変換触媒としての適用一般性を確立しつつある。
e) 遷移金属錯体を用いた光触媒反応による新しいカルボニル化合物の活性化と，それに立脚した分子変換反応の開発を遂行しつつある。特に光触媒によるカルボニル基の極性転換に成果を上げつつある。

B-1) 学術論文

S. OKUMURA, T. TAKAHASHI, K. TORII and Y. UOZUMI, “Photocatalytic 1,4-Addition of Aromatic Aldehydes or Ketones via Umpoled Carbinol Anions,” *Synlett* **35**, 303–306 (2024). DOI: 10.1055/a-2122-8631

S. OKUMURA, T. TAKAHASHI, K. TORII and Y. UOZUMI, “Photocatalytic Cross-Pinacol Coupling Promoted by Carbon Dioxide**,” *Chem. –Eur. J.* **29(44)**, e202300840 (2023). DOI: 10.1002/chem.202300840

M. KAWASE, R. SUZUKI, K. KOBAYASHI, T. SHINAGAWA, A. TAZAWA, Y. UOZUMI, Y. MATSUMURA, O. SHIMOMURA and A. OHTAKA, "Oxidation of Primary Amines to Nitriles Catalyzed by Polystyrene-Stabilized Ru Nanoparticles in Water," *Chem. Lett.* **52(7)**, 553–555 (2023). DOI: 10.1246/cl.230186

S. OKUMURA, K. TORII and Y. UOZUMI, "Electrophilic 1,4-Addition of Carbon Dioxide and Aldehydes to Enones," *Org. Lett.* **25(28)**, 5226–5230 (2023). DOI: 10.1021/acs.orglett.3c01675

T. SAKAGUCHI, T. SHIBATA, Y. FUKUDA, A. TAZAWA, Y. UOZUMI, Y. MATSUMURA, O. SHIMOMURA and A. OHTAKA, "An Effective Additive for Copper-Catalyzed Hydroxylation of Aryl Iodides," *Appl. Organomet. Chem.* **37(7)**, e7111 (2023). DOI: 10.1002/aoc.7111

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

有機合成化学協会支部幹事 (1998–).

日本化学会理事 (2022–2023).

学会の組織委員等

名古屋メダル実行委員 (2000–).

有機金属討論会組織委員 (2012–).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構CREST 研究「革新的触媒」領域アドバイザー (2015–).

京都大学ゼロエミッション研究拠点運営委員 (2022–).

京都大学エネルギー理工学研究所共同利用運営委員会委員 (2023–2025).

学会誌編集委員

SYNLETT 誌アジア地区編集主幹 (2002–).

SYNFACTS 誌編集委員 (2005–).

SYNFACTS 誌編集委員 (2020–).（奥村慎太郎）

理科教育活動

出前授業「理数探究自然科学研究機構による授業「研究職への進路と有機光反応」」愛知県立岡崎北高等学校 (2023).（奥村慎太郎）

B-9) 学位授与

高橋輝気,「Development of Electrophilic Addition Reactions to Carbonyl Compounds through the Photocatalytic Carbinol Cation/Anion Umpolung」, 2024年3月, 博士（理学）.

B-10) 競争的資金

科研費挑戦的研究（萌芽),「カルボニル化合物を求核剤とした分子変換反応の開拓」, 魚住泰広 (2021年度–2023年度).

科研費若手研究,「カルボニル化合物の二電子還元による極性転換とカルボニルへの付加反応の開発」, 奥村慎太郎 (2021年度–2023年度).

有機合成化学協会第34回富士フイルム研究企画賞研究助成,「二酸化炭素による活性化を利用したカルボニル化合物の光触媒的極性転換」, 奥村慎太郎 (2022年度–2023年度).

科学技術振興機構ACT-X研究（受託研究),「プラスチックを還元分解する革新的光触媒の創製」, 奥村慎太郎 (2023年度–2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

2000年にゼロからのスタートを切った精密有機分子変換反応のaqueous-switching，heterogeneous-switchingの試みも十分な成果と蓄積を得てきた。理想の有機分子変換を標榜した当研究室の歩みの中で多くの水中機能性固定化錯体触媒，水中機能性固定化ナノ金属触媒を開発し，その幾つかは汎用性ある触媒として市販されるに至っている。これらの研究は科学研究費補助金（基盤研究, 新学術研究など）にくわえ, 多くの競争的外部研究費を得て推進してきた。即ちこれまでに水中機能性固定化触媒に関する「グリーンナノ触媒」CREST研究（2002年10月－2008年3月），続いてその成果を実践的に発展させるMETI-NEDOプロジェクト（2008年9月－2012年2月），稀少元素の元素循環・元素減量・元素代替に焦点を当てた「元素戦略」CREST研究（2011年10月－2017年3月）を展開してきた。さらに2014年12月からACCEL研究（2014年－2020年）に採択され「超活性固定化触媒開発に立脚した基幹化学プロセスの徹底効率化」研究を進めつつある。また自己集積錯体触媒研究は2007年以降，理化学研究所フロンティア研究に指名され，現在同研究所・環境資源科学研究センターにて展開した（2007年－2019年）。現在，魚住の本拠地である分子科学研究所に於いては，次の研究の萌芽を見いだし育てる研究にも大いに注力しており，幾つかの新機軸候補課題の中から大きな発展に繋がる新課題を見いだしつつある。なかでも最近は未開拓元素群の触媒反応性（とくにCu, Fe，Ag）の探索と確立，さらには分子の自己集積化に立脚した触媒機能の自発的獲得など目指した研究開発を推進しつつある。また分子研内外の研究者とチームで取り組み遷移金属触媒カップリング反応の極端紫外光分光を利用したオペランド観察による反応機構解析，企業との産学連携による基幹的有機化合物の工業生産プロセスへの展開研究などの共同研究に取り組みつつある。さらに，基礎研究として，これまでの高活性触媒の設計概念と駆動原理を駆使し，従来パーセント量の利用が常識であった化学変換触媒をppm-ppb量のレベルへと転換すべく研究に取り組んでいる。これは触媒活性の10^4–10^7向上を意味し「改善」を凌駕する「飛躍」が要求される圧倒的な高活性化であり，学術的にも大きなチャレンジである。また特にグループ内での奥村博士との協働による遷移金属錯体光触媒の開発を推進し，従来にないカルビノール基の極性転換反応を開発・展開しつつある。本課題は今後の魚住グループの大きな潮流となる。

楾　山　儀　恵（准教授）（2014 年 6 月 1 日着任）

大塚　尚哉（助教）
LEE, Jia Yen（インターンシップ）
大石　峻也（大学院生）
加藤　雅之（大学院生）
西岡　雪奈（技術支援員（派遣））
原田　晋子（技術支援員（派遣））
丸山　莉央（技術支援員（派遣））
牛田　妃菜乃（事務支援員（派遣））

A-1) 専門領域：有機合成化学

A-2) 研究課題：

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ロニウム錯体触媒の開発
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) 化学反応性空間の構築と有機合成反応開発への応用

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。本年度内の掲載決定に向け，追加実験をもとに論文の改訂と実験項の作成を進めている。
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中島チーム長および田中主任研究員と共同研究を実施し，固体 DNP-NMR 測定により高分子触媒中の DMAP とそのハロゲン結合供与能を検証した。分光学的に触媒活性中心となる DMAP を同定することに初めて成功した。機能性モノマーの合成について，反応実験の詳細と実験結果の相関分析を学術誌に報告した。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。本年度中の論文発表を目指し，現在，追加実験を実施中である。
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。開発したハロニウム錯体触媒反応で

は，触媒の一価ヨウ素と反応基質の電子豊富な化学種との三中心四電子ハロゲン結合の形成が反応駆動力となっていることを見出した。向山型反応については，追加実験および追加計算，論文改訂作業を完了して，2 報の学術論文として掲載に至った。細見－櫻井反応については，データ整理を行い，論文を執筆中である。

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。ナフタレンに関して合成と構造に関する論文の執筆を完了し，学術誌に投稿間近である。ペリレンについては，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。

B-1) 学術論文

N. OHTSUKA, H. OTA, S. SUGIURA, S. KAKINUMA, H. SUGIYAMA, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Perfluorohalogenated Naphthalenes: Synthesis, Crystal Structure, and Intermolecular Interaction,” *CrystEngComm* **26**, 764–772 (2024). DOI: 10.1039/D3CE01124K

T. HORI, S. KAKINUMA, N. OHTSUKA, T. FUJINAMI, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Synthesis of Halogen-Bond-Donor-Site-Introduced Functional Monomers through Wittig Reaction of Perfluorohalogenated Benzaldehydes: Toward Digitalization as Reliable Strategy in Small-Molecule Synthesis,” *Synlett* **34(20)**, 2455–2460 (2023). DOI: 10.1055/a-2118-6813

M. HIRANYAKORN, M. YAGI-UTSUMI, S. YANAKA, N. OHTSUKA, N. MOMIYAMA, T. SATOH and K. KATO, “Mutational and Environmental Effects on the Dynamic Conformational Distributions of Lys48-Linked Ubiquitin Chains,” *Int. J. Mol. Sci.* **24(7)**, 6075 (2023). DOI: 10.3390/ijms24076075

S. OISHI, T. FUJINAMI, Y. MASUI, T. SUZUKI, M. KATO, N. OHTSUKA and N. MOMIYAMA, “Protocol for Efficient Dearomatization of *N*-Heteroaromatics with Halogen(I) Complex Catalyst,” *STAR Protoc.* **4(1)**, 102140 (2023). DOI: 10.1016/j.xpro.2023.102140

B-4) 招待講演

椴山儀恵,「バッチ型自動反応実験装置の活用と化学反応空間の構築」, 日本化学会第 104 春季年会（2024）化学における情報・AI の活用, 船橋市, 2024 年 3 月.

椴山儀恵,「ハレニウム錯体触媒の創成：デジタル有機合成による反応開発への挑戦」, 第 9 回千葉大学キラリティーネットワーク研究会（WCCU）シンポジウム, 千葉市, 2024 年 2 月.

椴山儀恵,「有機合成のデジタル化に基づく分子性ハロゲンの科学――有機合成DXへの挑戦――」, セミナー“化学千一夜”「あすの科学への夢を語ろう」, 徳島市, 2023年6月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

日本プロセス化学会東海地区フォーラム幹事 (2021–).

東海コンファレンス2023 in 岡崎(2024年1月10日(水)13:30~18:00日本化学会東海支部主催)開催担当 (2023–2024).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2023).

理科教育活動

職場体験学習, 岡崎市立岩津中学校，豊田市立益富中学校 (2023).

その他

2023年度分子研異分野交流技術セミナー（第6回）～有機合成DXへの期待～(2023年11月2日(木)13:00~17:00)講師 (2023).

豊田理化学研究所審査委員会委員 (2019–2024).

B-9) 学位授与

堀　達暁,「ヨウ化テトラフルオロボリスチレン誘導体の合成と不均一系求核触媒反応への応用：4- アミノピリジンペンダント型高分子触媒の開発」, 2023年12月, 博士(理学).

大石峻也,「三中心四電子ハロゲン結合を基盤とする非金属錯体触媒の設計とMannich型反応への応用」, 2024年3月, 博士(理学).

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；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；大嶋孝志), 椴山儀恵(研究支援) (2021年度–2025年度).

科研費基盤研究(C),「フッ素化ペリレン化合物の合成とデバイスへの応用」(代表:鈴木敏泰), 椴山儀恵(研究分担者) (2023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。2022年度前期から2023年度前期にかけて，投稿論文の審査コメントをもとに追加実験を実施し，論文3報が学術誌に掲載された。また，2022年度後期は，所内外研究者との共同研究成果がまとまり，学術誌2報に掲載された。その内

1報は，プレスリリースを行った。尚，現在，3報の論文を*ChemRxiv*で公開中である。引き続き，修正および追加実験を依頼されている論文の改訂作業を行い，2023年度中の論文掲載を目指す。また，執筆途中の論文が6報あり，2024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汎用されることを目標に，引き続き研究を遂行する。

錯体物性研究部門

草　本　哲　郎（教授（兼任*））(2023 年 4 月 1 日～ 9 月 30 日)

松岡　亮太（助教）
水野　麻人（学振特別研究員）
壬生　託人（特任専門員）
竹脇　由佳（総研大生）
久保田亜紀子（技術支援員）
中貝　梢（技術支援員（派遣））
川口　律子（事務支援員）

＊大阪大学大学院基礎工学研究科

A-1) 専門領域：分子物性化学，錯体化学

A-2) 研究課題：

a) ラジカルの多重項に基づくスピン－発光相関機能の創出とメカニズム解明

b) 三回対称構造を有するラジカルに基づく物質開拓

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 光安定ラジカル PyBTM を 10wt% ドープした分子結晶は，極低温において磁場に応答する発光挙動（magneto-luminescence）を示す。これまでの研究により，MagLum 発現にはラジカルの集積化により新たに生まれるスピン自由度が本質的な役割を果たしている可能性があることを見出している。本研究では，MagLum のメカニズムの理解にむけて，いくつのラジカル（あるいは $S = 1/2$ スピン）が集まれば MagLum を実現することができるのか，という点を解明することを目的として，分子骨格内に二つの $S = 1/2$ スピンをもつ分子＝ジラジカルを合成した。このジラジカルを単分散させたジラジカルドープポリマーに対し，発光スペクトルならびに発光寿命の磁場および温度依存性を詳細に調べたところ，このポリマーが MagLum を示すことを見出した。これは孤立したジラジカルが示す特性であり，単分子 MagLum の初実現である。この結果は，MagLum を実現するために必要な $S = 1/2$ のスピンの数（ラジカルユニット数）は 2 であることを世界で初めて示したという点で画期的である。

b) 二次元系物質は，構造の低次元性や幾何対称性に基づき特徴的なバンド分散や機能を示す。我々はなかでも二次元ハニカムおよびカゴメ－ハニカムハイブリッド格子構造を有する開殻錯体配位高分子に着目し，新規物質開発及び機能創出を進めている。本研究では，三回対称構造を有するラジカルと金属イオンとの配位結合形成により二次元カゴメ－ハニカム格子構造を有する結晶性配位高分子を創製し，その構造や物性を調べた。特に磁気モーメントを有する銅イオンを用いた場合，銅イオンとラジカルの不対電子間に働く非対称な強磁性的相互作用により，スピンフラストレーションが生じている可能性があること，加えてこれが物質の長距離磁気秩序化を抑制している可能性を見出した。一般にスピンフラストレーションはスピン間の反強磁性相互作用を基とするが，本物質では強磁性的相互作用を基としており，スピンフラストレーションの実現にあたり新たな戦略を与える可能性がある。

B-1) 学術論文

R. MATSUOKA, S. KIMURA, T. MIURA, T. IKOMA and T. KUSAMOTO, "Single-Molecule Magnetoluminescence from a Spatially Confined Persistent Diradical Emitter," *J. Am. Chem. Soc.* **145(25)**, 13615–13622 (2023). DOI: 10.1021/jacs.3c01076

B-3) 総説，著書

草本哲郎,「大気安定な発光性ポリクロロトリアリールメチルラジカルの開発と機能創出」, *有機合成化学協会誌*, **81(5)**, 501–509 (2023). DOI: 10.5059/yukigoseikyokaishi.81.501

B-4) 招待講演

T. KUSAMOTO, "Magnetoluminescence from Assembled Organic Radicals," Magnetoluminescence from Assembled Organic Radicals (SPIN-2023), Mita (Japan), September 2023.

T. KUSAMOTO, "Spin-correlated luminescence of radicals," The 73rd JSCC Conference, Mito (Japan), September 2023.

T. KUSAMOTO, "Interplay Between Spin and Luminescence in Assembled Organic Radicals," CEMS Topical Meeting, Wako (Japan), July 2023.

T. KUSAMOTO, "Spin-correlated photoluminescence of assembled open-shell molecules," 10th Pacific Symposium on Radical Chemistry (PSRC-10), Uji (Japan), June 2023.

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 (2019–)，ホームページ委員長 (2019–)，理事 (2022–).

錯体化学若手の会中部・東海支部世話人 (2019–2023).（松岡亮太）

学会誌編集委員

Journal of Materials Chemistry C, Royal Society of Chemistry, Advisory Board (2022–).

Materials Advances, Royal Society of Chemistry, Advisory Board (2022–).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究,「三回対称ラジカルを基とするカゴメ－ハニカムハイブリッド格子の構築と機能開拓」, 草本哲郎 (2020年度–2023年度).

科研費基盤研究(B),「発光開殻分子集合体によるスピンフォトニクス機能の創出と理解」, 草本哲郎 (2023年度–2025年度).

科研費挑戦的研究（萌芽),「カゴメ－ハニカム格子構造を有する分子性超薄膜結晶の創製と物性探究」, 草本哲郎 (2023年度–2024年度).

科研費基盤研究(C),「発光性マルチラジカルのスピン多重度依存的励起状態ダイナミクスの解明」, 松岡亮太 (2023年度–2025年度).

科研費若手研究,「ドナー・アクセプター型発光性ラジカルにおけるマグネトルミネッセンス発現機構の解明」, 水野麻人 (2023年度–2024年度).

科研費学術変革領域研究(A)（計画研究),「1000 T 化学反応の探索と解明」（代表者：木村尚次郎), 草本哲郎（研究分担者）(2023年度–2027年度).

C) 研究活動の課題と展望

有機ラジカルや磁性金属錯体に代表される開殻電子系分子は，不対電子に基づき，通常の閉殻分子とも無機物質とも異なる物性を発現する。我々の研究グループでは，開殻電子系分子を用いてユニークな光・電気・磁気相関物性を創製・解明することで，物性科学に新概念と革新をもたらすことを目指して研究を進めている。今年度は，(a) 単分子MagLumを示す物質系の創製，(b) 二次元カゴメ−ハニカムハイブリッド格子構造を有する開殻配位高分子の合成と磁気特性の調査，の研究を推進し，それぞれにおいて重要な成果を得ることができた。今後は，(a) では，化学構造の異なる複数のジラジカルのMagLum特性を調べ比較することで，発光開殻分子のMagLumにおける普遍性と非普遍性，ならびに分子特有のパラメータを明らかにし，メカニズムの全容解明に繋げる。(b) については，有機化合物の高い分子設計性や金属錯体の特長である金属イオン及び幾何構造の多様性を基に，新しい配位高分子を開発し，光・磁気相関機能あるいは励起状態特性の創出を目指す。

瀬　川　泰　知（准教授）（2020 年 4 月 1 日着任）

塚本　兼司（学振特別研究員）
杉山　晴紀（特別訪問研究員）
長瀬　真依（大学院生）
廣田　宗士（大学院生）
渡邊　幸佑（大学院生）
吉田　瑠（大学院生）
中野　さち子（技術支援員（派遣））
平田　直（技術支援員（派遣））
谷分　麻由子（事務支援員）

A-1) 専門領域：有機合成化学，構造有機化学

A-2) 研究課題：

a) 3 次元幾何構造をもつ機能性有機構造体の合成と機能
b) トポロジカルπ共役分子の創製
c) 電子回折結晶構造解析の有機機能性材料開発への活用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 湾曲構造をもったπ共役有機分子の合成と構造解析を行った。大環状にπ共役がつながった分子「シクロ -3,4- チエニレン」について, 初の環状 5 量体および 6 量体の合成に成功した。合成の鍵はチオフェンの 3,4- 位のホウ素化反応, および環状構造に起因するひずみを乗り越える環化反応の開発である。得られた環状 5 量体および 6 量体は非平面構造を取ることをX線結晶構造解析によって確認し，溶液中の熱力学的挙動は環状 5 量体および 6 量体で大きく異なることを実験的・計算化学的に明らかにした。
b) 松永教授，吉野准教授（北海道大学・京都大学）らとの共同研究により，電子不足イリジウム錯体の開発を行った。X線結晶構造解析より，電子求引基をもつシクロペンタジエニルが配位したイリジウム 2 核錯体の構造を決定し，本錯体が芳香環の C-H アミド化の触媒として効率的に作用することを明らかにした。
c) ひずみをもつ幾何学構造である正方形分子の合成過程において, 予期しない 4 員環結合形成反応を発見した。[8] サーキュレン誘導体合成の際にカルボニル化剤として炭酸ジメチルを用いると 4 員環が形成された新たなπ共役分子が生成した。X線結晶構造解析によって構造を同定し，分光学的･電気化学的測定と量子化学計算を用いた解析によって，4 員環と 8 員環の両方に反芳香族性をもつ分子であることを明らかにした。
d) 3 回対称分子トリフェニレンのベイ領域全てにフッ素を導入する手法を開発した。合成したペンタフルオロペンタエトキシトリフェニレンの構造・性質を調査したところ，フルオロ基による立体反発によって非平面構造となり，さらにフルオロ基の高い電子求引性によって電子受容性が向上していることを明らかにした。

B-1) 学術論文

K. OTA, K. NAGAO, D. HATA, H. SUGIYAMA, Y. SEGAWA, R. TOKUNOH, T. SEKI, N. MIYAMOTO, Y. SASAKI and H. OHMIYA, "Synthesis of Tertiary Alkylphosphonate Oligonucleotides through Light-Driven Radical-Polar Crossover Reactions," *Nat. Commun.* **14(1)**, 6856 (2023). DOI: 10.1038/s41467-023-42639-y

S. HIROTA, S. NAKANO, H. SUGIYAMA and Y. SEGAWA, "Synthesis of Polycyclic Arenes Composed of Four-, Five-, Six-, and Eight-Membered Rings via an Unexpected Four-Membered Ring Formation Reaction," *Org. Lett.* **25(45)**, 8062–8066 (2023). DOI: 10.1021/acs.orglett.3c03039

H. SHUDO, M. KUWAYAMA, Y. SEGAWA, A. YAGI and K. ITAMI, "Half-Substituted Fluorocycloparaphenylenes with High Symmetry: Synthesis, Properties and Derivatization to Densely Substituted Carbon Nanorings," *Chem. Commun.* **59(90)**, 13494–13497 (2023). DOI: 10.1039/d3cc04887j

M. NAGASE, S. NAKANO and Y. SEGAWA, "Synthesis of penta- and hexa(3,4-thienylene): Size-Dependent Structural Properties of Cyclic Oligothiophenes," *Chem. Commun.* **59(74)**, 11129–11132 (2023). DOI: 10.1039/d3cc03508e

E. TOMITA, M. KOJIMA, Y. NAGASHIMA, K. TANAKA, H. SUGIYAMA, Y. SEGAWA, A. FURUKAWA, K. MAENAKA, S. MAEDA, T. YOSHINO and S. MATSUNAGA, "An Electron-Deficient CpE Iridium(III) Catalyst: Synthesis, Characterization, and Application to Ether-Directed C−H Amidation," *Angew. Chem., Int. Ed.* **62(21)**, e202301259 (2023). DOI: 10.1002/anie.202301259

B-4) 招待講演

瀬川泰知,「パズルのように分子を作る～曲がった炭素分子の有機合成～」, 第 137 回分子科学フォーラム , オンライン開催 , 2023 年 10 月 .

瀬川泰知,「湾曲構造とトポロジーを芳香族炭化水素に付与する有機合成戦略」, 第 54 回構造有機化学若手の会夏の学校 , 北海道札幌市 , 2023 年 8 月 .

瀬川泰知,「Synthesis of Highly Strained and Topologically Unique Aromatic Hydrocarbons」, 錯体化学会第 73 回討論会 , 茨城県水戸市 , 2023 年 9 月 .

Y. SEGAWA, "Strategies for strain-induced synthesis of topologically unique aromatic hydrocarbons," CEMS Topical Meeting on Chemistry of π-Conjugated Materials, Wako, July 2023.

B-7) 学会および社会的活動

理科教育活動

三重県立伊勢高等学校見学対応 (2023).

B-8) 大学等での講義, 客員

名城大学理工学部 , 非常勤講師 , 2023 年 9 月 –2024 年 3 月 .

B-9) 学位授与

長瀬真依,「Study on the Nonplanar π-Conjugated Molecules Fused by Multiple Thiophene Rings」, 2024 年 3 月 , 博士 (理学).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「トポロジカルπ共役構造体の創製」瀬川泰知 (2022年度–2024年度).

科学技術振興機構創発的研究支援事業（受託研究),「革新的有機半導体を指向した周期的3次元π共役構造体の創製」, 瀬川泰知 (2022年度–2024年度).

科研費挑戦的研究（萌芽),「有機半導体の配向配列問題を解決する3次元πスタック分子の創製」, 瀬川泰知 (2022年度–2023年度).

C) 研究活動の課題と展望

本年度は3次元的な分子設計による特異なトポロジーをもった有機構造体の創製に向けて研究を行った。チオフェン環状多量体は単純な構造でありながらこれまでに合成例がなかったものであり，ボリル化反応，環化反応といった各反応段階において高活性なチオフェンα位を保持しながら進行させる工夫が必要であった。本成果は*Chem. Commun.* 誌に掲載され，高い注目度を得ている。予期しない4員環形成反応の発見と当該化合物の反芳香族性の調査については*Organic Lettes* 誌に掲載された。トリフェニレンのフッ素化によるヘキサフルオロトリフェニレンの合成については*Chemistry Letters* 誌に掲載された。また，松永教授，吉野准教授らとの共同研究により，芳香環のC-Hアミド化の触媒となる電子不足イリジウム錯体の開発を行い論文として発表した。

今後は複雑なトポロジーをもつ有機分子や3次元ネットワーク高分子の合成および機能開拓を行い，既存の有機合成の限界を突破した物質創製研究を遂行していく。3次元敷き詰め可能な対称性をもつユニットの設計と合成は順調に進んでおり，目的とする3次元フレームワークの構造解析・結晶性の向上・各種物性測定を行う。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。

6-8　特別研究部門

藤　田　　誠（卓越教授（クロスアポイントメント*））（2018 年 4 月 1 日着任）

三橋　隆章（特任助教）
増田　道子（事務支援員）

＊東京大学国際高等研究所（2023 年 4 月 1 日～）

A-1) 専門領域：錯体化学，有機化学，超分子化学

A-2) 研究課題：

a) 結晶スポンジ法の二次代謝酵素の機能解析への応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 結晶スポンジ法は，信頼性の高い構造決定手法として知られるＸ線結晶構造解析を，解析対象物自体の単結晶化を行うことなく達成する技術である。近年，我々は結晶スポンジ法を用い，二次代謝酵素の機能解析を行なっている。二次代謝酵素の機能解析においては，酵素が作り出す酵素産物の構造決定の困難さが研究を進める上でボトルネックとなっており，この問題の解決に結晶スポンジ法の利用が有効であると考えた。特に今期は，巨大ウイルスと呼ばれるウイルスが持つ二次代謝酵素の機能解析を達成した。また，本研究を遂行する中で，酵素産物やその分解物の構造解析に結晶スポンジ法が威力を発揮した。

B-1) 学術論文

H. TAKEZAWA, K. IIZUKA and M. FUJITA, “Selective Synthesis and Functionalization of an Acyclic Methylene-Bridged-Arene Trimer in a Cage,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **63(6)**, e202319140 (2023). DOI: 10.1002/anie.202319140

B. ZHOU, S. UTJAPIMUK, K. K. YAN, R. DUBEY, T. KIKUCHI, T. MITSUHASHI and M. FUJITA, “Rapid Analysis of Trace Amounts of Amino Acid Derivatives by a Formyl Group-Installed Crystalline Sponge,” *Chem. –Asian J.* **19(3)**, e202300969 (2023). DOI: 10.1002/asia.202300969

Y. JUNG, T. MITSUHASHI, S. SATO, M. SENDA, T. SENDA and M. FUJITA, “Function and Structure of a Terpene Synthase Encoded in a Giant Virus Genome,” *J. Am. Chem. Soc.* **145(48)**, 25966–25970 (2023). DOI: 10.1021/jacs.3c10603

K. IIZUKA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, “Chemical Site-Differentiation of Calix[4]arenes through Enforced Conformations by Confinement in a Cage,” *J. Am. Chem. Soc.* **145(48)**, 25971–25975 (2023). DOI: 10.1021/jacs.3c10720

G. R. GENOV, H. TAKEZAWA, H. HAYAKAWA and M. FUJITA, “Tetradehydro-Diels-Alder Reactions of Flexible Arylalkynes via Folding Inside a Molecular Cage,” *J. Am. Chem. Soc.* **145(31)**, 17013–17017 (2023). DOI: 10.1021/jacs.3c06301

E. TSUNEKAWA, Y. OTSUBO, Y. YAMADA, A. IKEDA, N. ADACHI, M. KAWASAKI, A. TAKASU, S. ARAMAKI, T. SENDA, S. SATO, S. YOSHIDA, M. FUJITA and T. SAWADA, “X-Ray and Electron Diffraction Observations of Steric Zipper Interactions in Metal-Induced Peptide Cross-β Nanostructures,” *J. Am. Chem. Soc.* **145(29)**, 16160–16165 (2023). DOI: 10.1021/jacs.3c04710

G. TAY, T. WAYAMA, H. TAKEZAWA, S. YOSHIDA, S. SATO, M. FUJITA and H. OGURI, "Synthetic Modulation of an Unstable Dehydrosecodine-Type Intermediate and Its Encapsulation into a Confined Cavity Enable Its X-Ray Crystallographic Observation," *Angew. Chem., Int. Ed.* **62(32)**, e202305122 (2023). DOI: 10.1002/anie.202305122

Y. DOMOTO, M. ABE, G. R. GENOV, Z. YU and M. FUJITA, "Interconversion of Highly Entangled Polyhedra into Concave Polyhedra by Nitrate-Induced Ternary Coordination," *Angew. Chem., Int. Ed.* **62(33)**, e202303714 (2023). DOI: 10.1002/anie.202303714

T. NAKAMA, A. ROSSEN, R. EBIHARA, M. YAGI-UTSUMI, D. FUJITA, K. KATO, S. SATO and M. FUJITA, "Hysteresis Behavior in the Unfolding/Refolding Processes of a Protein Trapped in Metallo-Cages," *Chem. Sci.* **14(11)**, 2910–2914 (2023). DOI: 10.1039/D2SC05879K

B-4) 招待講演

M. FUJITA, "Coordination Self-Assembly: From Origins to the Latest Advances," Barré Lecturer, Université de Montréal, Montréal (Canada), April 2023.

M. FUJITA, "Polymerisation-Induced Self-Assembly (PISA): A Platform Technology for Bespoke Polymer Particles," The 19th Asian Chemical Congress, Istanbul (Turkey), July 2023.

M. FUJITA, "Coordination Self-Assembly: From Origins to the Latest Advances," IOCB Invited Lecture, Prague (Czech), September 2023.

M. FUJITA, "Molecular Confinement Effects in Self-assembled Cages," 9th Asian Conference on Coordination Chemistry (ACCC9), Bangkok (Thailand), February 2024.

B-6) 受賞，表彰

藤田　誠, 2022 Natta Award (2023).

B-7) 学会および社会的活動

学会誌編集委員

Chemical Science 誌, Editorial Board (2018–).

Acc. Chem. Soc. 誌, Editorial Board (2018–).

B-10) 競争的資金

科研費特別推進研究,「空間捕捉によるタンパク質の構造・機能制御および高効率構造解析」, 藤田　誠 (2019年度–2023年度).

C) 研究活動の課題と展望

今期，我々は巨大ウイルスの二次代謝酵素の機能解析を世界に先駆けて行った。この研究結果は，巨大ウイルスが二次代謝産物の生産者であることを示唆しているが，何故巨大ウイルスが二次代謝産物を生産しているのかについては未だ明らかでは無く，今後明らかにする必要がある。また，これまでのところ一つの巨大ウイルス由来二次代謝酵素について機能解析を達成したに過ぎず，さらに多くの酵素について機能解析を進める必要がある。今後はこれらの課題に取り組んでいきたい。

木　村　真　一（教授（クロスアポイントメント*））（2020 年 4 月 1 日着任）

栗田　佳子（事務支援員）

*大阪大学大学院生命機能研究科

A-1) 専門領域：物性物理学，量子ビーム科学

A-2) 研究課題：

a) 機能性固体・薄膜の電子状態の分光研究
b) 物質科学に向けた新しい放射光分光法の開発
c) 新しい量子ビームを使った分析技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 機能性固体・薄膜の電子状態の分光研究：磁性と伝導が複雑に絡み合うことにより新しい機能性が現れる固体・薄膜について，低温・高圧・高磁場下の赤外・テラヘルツ分光と高分解能三次元角度分解光電子分光および時間分解分光により，機能性の起源である電子状態を詳細に決定している。また，それらの実験条件に合わせた第一原理電子状態計算を組み合わせることで，機能性固体・薄膜の電子状態の総合的な情報を得ている。
b) 物質科学に向けた新しい放射光分光法の開発：UVSOR や次世代放射光で用いることを想定した新たな分光法を開発する。特に，電子構造のダイナミクスを可視化することを目標に，新たな光電子分光法と赤外分光法の開発を進めており，物質科学への応用を図る。
c) 新しい量子ビームを使った分析技術の開発：スピン偏極高輝度電子源を用いた高エネルギー分解能スピン・角度分解共鳴電子エネルギー損失分光法の開発を進めている。

B-1) 学術論文

S. KIMURA, H. WATANABE, S. TATSUKAWA, T. NAKAMURA, K. IMURA, H. SUZUKI and N. K. SATO, “Current-Induced Metallization and Valence Transition in Black SmS,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **93(1)**, 013701 (2024). DOI: 10.7566/jpsj.93.013701

T. NAKAMURA, H. SUGIHARA, Y. CHEN, R. YUKAWA, Y. OHTSUBO, K. TANAKA, M. KITAMURA, H. KUMIGASHIRA and S. KIMURA, “Two-Dimensional Heavy Fermion in a Monoatomic-Layer Kondo Lattice $YbCu_2$,” *Nat. Commun.* **14(1)**, 7850 (2023). DOI: 10.1038/s41467-023-43662-9

S. KIMURA, H. WATANABE, S. TATSUKAWA and H. TANIDA, “Observation of Electronic Structure Modification in the Hidden Order Phase of CeCoSi,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **92(4)**, 043704 (2023). DOI: 10.7566/JPSJ.92.043704

H. J. IM, M. IWATAKI, M. TSUNEKAWA, T. WATANABE, H. SATO, M. NAKATAKE and S. KIMURA, “Variation of Strong Correlation Effects in A-Site Ordered Perovskites $CaCu_3Ti_{4-x}Ru_xO_{12}$: Photoemission and Inverse Photoemission Studies,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **92(4)**, 044701 (2023). DOI: 10.7566/JPSJ.92.044701

B-4) 招待講演

木村真一,「アインシュタインの光量子仮説を使った最先端物性研究」, 来日 100 周年記念アインシュタインの日本講演旅行展@ 阪大豊中記念講演会, 豊中市, 2023 年 10 月.

S. KIMURA, "Two-dimensional heavy fermion in a monoatomic-layer Kondo lattice $YbCu_2$," HiSOR seminar, Higashi-Hiroshima (Japan), November 2023.

S. KIMURA, "Two-dimensional heavy fermion in a monoatomic-layer Kondo lattice $YbCu_2$," The 10th International Workshop on the Dual Nature of f-Electrons, Himeji (Japan), June 2023.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会評議員 (2021.9–2023.9).

日本物理学会第 79–80 期受賞候補等推薦委員会委員 (2023–2025).

学会の組織委員等

国際ワークショップ「The 10th International Workshop on the Dual Nature of f-Electrons」組織委員 (2023).

国際ワークショップ「12th International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources」国際諮問委員 (2024).

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 (2018.4–2024.3).

SPring-8/SACLA 成果審査委員会「査読者」(2016.4–2024.3).

東京大学放射光アウトステーション実験課題審査委員会委員 (2023–2025).

佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター評価専門委員 (2022–2024).

B-8) 大学等での講義，客員

大阪大学大学院生命機能研究科, 教授, 2013 年 7 月– .

大阪大学理学部, 講義「光物理学」, 2023 年 4 月–9 月.

大阪大学理学研究科, 講義「光物性物理学」, 2023 年 4 月–9 月.

大阪大学大学院生命機能研究科, 講義「基礎物理学 I」, 2023 年 4 月–5 月.

大阪大学生命機能研究科, 講義「生体ダイナミクス概論 III」, 2023 年 10 月–2024 年 3 月.

大阪大学全学教育推進機構, 講義「力学詳論 II」, 2023 年 10 月–2024 年 3 月.

大阪大学大学院生命機能研究科, 実習「基礎物理学実習 I」, 2023 年 6 月–7 月.

広島大学先進理工系科学研究科, 客員教授,「物理学特別講義 D「放射光を用いた広帯域分光研究：分光法から利用研究まで」」, 2023 年 10 月–2024 年 3 月.

大阪大学理学部, 講義「生命理学基礎演習 1」, 2023 年 4 月–9 月.

大阪大学理学部, 講義「先端物理学・宇宙地球科学輪講」, 2023 年 10 月–2024 年 3 月.

B-10) 競争的資金

研費基盤研究(A),「時間・スピン分解共鳴電子散乱法の確立と光励起電子・格子・スピン相関の直接観測」, 木村真一 (2023年度–2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

物質機能の起源である電子構造を明確にすることは，物性の理解を深め，新しい機能性を創りだすのに重要である。そのため，準粒子を観測するための手段として，これまで放射光を使った角度分解光電子分光と赤外・テラヘルツ分光を推進してきた。現在は，準粒子とともに重要な素励起である集団励起の観測を行うために，内殻共鳴電子エネルギー損失分光法（rEELS）の開発を進めている。クロスアポイントメントの５年間で，rEELS をスピン分解，角度分解，時間分解に拡張するとともに，スピン・角度分解共鳴逆光電子分光法の開発も行っていく。

大　西　　洋（教授（クロスアポイントメント*））（2021 年 11 月 1 日着任）

栗田　佳子（事務支援員）

＊神戸大学大学院理学研究科

A-1) 専門領域：界面分子科学，触媒科学

A-2) 研究課題：

a) 有限厚さをもつ固液界面のオペランド計測：創／省エネルギーを支えるサイエンスの構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 創エネルギーと省エネルギーという社会ニーズに応えるために，高収率の半導体光触媒と低摩擦の潤滑油が最近 20 年のあいだに次々と開発されてきた。これら新材料をオペランド計測する手法に工夫をこらして有限の厚さ（1 μm–1 nm）をもつ液体－固体界面が機能を発現するしくみを理解する。分子論的な界面（液体分子と固体分子が接触する場所）でおきる現象と，分子論的な界面へ物質とエネルギーを入出力する場所でおきる現象を同時に計測し一体として理解することの重要性を光触媒（物質変換）と潤滑油（力学的エネルギー散逸）というケーススタディをとおして世界へ発信することを目的とする。①電子励起状態にある光触媒の軟エックス線分光と全反射光学分光の手法開発②潤滑油界面のナノ力学計測と単一分子蛍光追跡の手法開発が本年度の成果である。

B-1) 学術論文

M. BUESSLER, S. MARUYAMA, M. ZELENKA, H. ONISHI and E. H. G. BACKUS, “Unravelling the Interfacial Water Structure at the Photocatalyst Strontium Titanate by Sum Frequency Generation Spectroscopy,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **25(45)**, 31471–31480 (2023). DOI: 10.1039/D3CP03829G

Z. FU and H. ONISHI, “Photocatalytic Reaction in Aqueous Suspension: FTIR Spectroscopy with Attenuated Total Reflection in Diamonds,” *ACS Omega* **8**, 33825 (2023). DOI: 10.1021/acsomega.3c04330

B-4) 招待講演

H. ONISHI, “Artificial Photosynthesis Driven by Polarons Photoexcited in Semiconductor Photocatalysts,” Surface Science Colloquium in Chinese Academy of Science, Beijing (China), Janurary 2024.

H. ONISHI, “Atomic force microscopy in organic solvents,” Seminar in Peking University, Beijing (China), Janurary 2024.

H. ONISHI, “Soft x-ray spectroscopy for semiconductor photocatalysts,” UVSOR-III + MAX IV International Workshop: Frontier of Soft X-Ray Spectroscopy for Chemical Processes in Solutions, Okazaki (Japan), October 2023.

H. ONISHI, “Transient Amperometry of O_2 Evolution Reaction on Metal-Oxide Photocatalysts under Water,” IUVSTA-ZCAM Workshop: Metal-Oxide Ultrathin Films and Nanostructures: Experiment Meets Theory, Zaragoza (Spain), July 2023.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

（社）応用物理学会薄膜・表面物理分科会幹事 (2006–).

日本表面真空学会理事 (2022–).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

触媒科学計測共同研究拠点課題等審査専門委員会委員長 (2022–).

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教員候補者選考委員会委員 (2023).

学会誌編集委員

日本表面真空科学会電子ジャーナル委員 (2002–).

B-10) 競争的資金

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

科研費挑戦的研究（萌芽),「固体に挟まれた潤滑油分子の並進運動計測：単一蛍光分子追跡」, 大西　洋 (2021 年度–2023 年度).

C) 研究活動の課題と展望

【光触媒】水－光触媒界面ですすむ物質変換に焦点を絞った研究を展開していく。従来の光触媒ダイナミクス研究はフェムト秒からマイクロ秒で進む電子のうごき（電子励起と電荷分離）に注目してきた。有限厚の水－光触媒界面で物質輸送を含むミリ秒の反応化学の解明をめざす。

【潤滑油】潤滑油－固体界面におけるエネルギー散逸の鍵となる分子運動性を定量評価するために原子間力顕微鏡を駆使したナノ力学計測と, 生体膜研究に常用される単一蛍光分子追跡を潤滑油界面計測に転用する研究を進めていく。

中　村　彰　彦（准教授（クロスアポイントメント*））（2022 年 8 月 1 日着任）

川口　律子（事務支援員）
野村　潤子（事務支援員）

＊静岡大学農学部

A-1) 専門領域：生化学，生物物理学

A-2) 研究課題：

a) ポリエチレンテレフタレート加水分解酵素の改良

b) ポリエチレンテレフタレート吸着酵素の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 昨年度作成した PET 分解酵素活性スクリーニング系で取得した，活性中心面を正電荷にした変異体及び活性中心と反対の面を負電荷にした変異体の酵素を生産精製し，PET フィルム分解活性を比較した。その結果，負電荷導入酵素ではフィルム分解活性の向上はみられなかったが正電荷を導入した変異体では鋳型とした変異体と比較して 1.2 倍の分解活性の向上が確認された。さらに微粉末 PET を用いて酵素の吸着性能を比較したところ，変異体酵素は鋳型酵素よりも 1.7 倍高い PET への吸着親和性を示した。よって PET 分解活性の向上は表面に導入した正電荷により吸着親和性が向上したことに起因すると考えられた。

b) 作成した PET 吸着ドメインの吸着特性を調べるため，半結晶微粉末 PET を用いて吸着試験を行ったところ，鋳型の吸着ドメインと比較して吸着親和性に変化はなかったが，最大吸着量が 1.8 倍に増加していた。対して鋳型の天然基質であるキチンへの吸着親和性は 1/25 に減少しており，PET 吸着ドメインに進化していることが確認できた。さらに PET への親和性を向上させキチンへの親和性を低下させるため，キチン吸着に重要とされているアミノ酸残基に変異を導入したが，得られた変異体は大量生産時に凝集してしまうことが多いことがわかった。そこでファージディスプレイでのライブラリ濃縮後に小スケールでの可溶化酵素スクリーニングを組み合わせる系の構築を始めた。

B-1) 学術論文

T. MORI, S. SUGIMOTO, S. ISHII, J. WU, A. NAKAMURA, H. DOHRA, K. NAGAI, H. KAWAGISHI and H. HIRAI, “Biotransformation and Detoxification of Tetrabromobisphenol A by White-Rot Fungus *Phanerochaete sordida* YK-624,” *J. Hazard. Mater.* **465**, 133469 (2024). DOI: 10.1016/j.jhazmat.2024.133469

Y. TANAKA, T. UCHIHASHI and A. NAKAMURA, “Product Inhibition Slow Down the Moving Velocity of Processive Chitinase and Sliding-Intermediate State Blocks Re-Binding of Product,” *Arch. Biochem. Biophys.* **752**, 109854 (2024). DOI: 10.1016/j.abb.2023.109854

B-4) 招待講演

A. NAKAMURA, “Development and single-molecule binding-analysis of plastic hydrolase enzyme for recycling,” MRM2023/IUMRS ICA2023 Symposium E-1 Precise Material Science for Degradation and Stability, Kyoto, December 2023.

A. NAKAMURA, “Improvement of activity and thermostability of a PET hydrolase,” 16th Eurasia Conference on Chemical Sciences 2023 Frontiers in Chemical Sciences for Sustainability, Bangkok (Thailand), December 2023.

A. NAKAMURA, “Development and Characterization of Highly Heat Tolerant and Active Plastic Degrading Enzymes,” International Conference for Green Science and Technology , Kuala Lumpur (Malaysia), December 2023.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構創発的研究支援事業,「プラスチックを探して壊すバイオマイクロドローンの創出」, 中村彰彦 (2022年度–2025年度).

科研費基盤研究(B),「自然界に学ぶ「バイオマス分解機構」の解明」（代表；金子　哲), 中村彰彦（研究分担者）(2021年度–2023年度).

科研費挑戦的研究（萌芽),「高活性リグニン分解菌を用いた新規リグニンリファイナリー技術の構築」（代表者；平井浩文), 中村 彰彦（研究分担者）(2023年度–2024年度).

B-11) 産学連携

共同研究, キリンホールディングス（株),「PET 分解酵素の開発」, 中村彰彦 (2022年度–2023年度).

共同研究, キリンホールディングス（株),「結晶性PET 分解活性の高い酵素の開発」, 中村彰彦 (2023年度–2024年度).

C)　研究活動の課題と展望

PET 分解酵素変異体では親和性向上に由来する活性の上昇が確認できた。そこで蛍光標識した変異体を用いて1分子計測を行うことで吸着速度定数の向上か脱着速度定数の減少のどちらが親和性向上に寄与しているのか明らかにする。また吸着ドメインの開発では，可溶化スクリーニングにより鋳型とした変異体と同等の溶解性を持つ変異体が7種取得できた。そこでこれらの酵素が本当に大量生産後に安定して可溶化するか確認する。また鋳型酵素と比較してPET 吸着能及びキチンへの親和性の低下が達成できているか検証を進める。これによりさらに進化したPET 吸着ドメインの開発を行い，プラスチック特異的に染色できる酵素の開発を進める。

6-9　社会連携研究部門

平　等　拓　範（特任教授（クロスアポイントメント*））（2019 年 4 月 1 日着任）

佐野　雄二（特命専門員）
竹家　啓（特任研究員）
YAHIA, Vincent（特任研究員）
LIM, Hwanhong（特任研究員）
鈴木　昌世（特任研究員）
角谷　利恵（特任専門員）
殖栗　敦（特任専門員）
CASSOURET, Florent（特任研究員）
BRUNETEAU, Baptiste（特任研究員）
花村　諭志（共同研究員）
川瀬　晃道（特別訪問教授）
吉田　光宏（特別訪問准教授）
石月　秀貴（特別訪問研究員）
佐藤　庸一（特別訪問研究員）
瀧上　浩幸（特別訪問研究員）
KAUSAS, Arvydas（特別訪問研究員）
田村　彰良（特別訪問研究員）
FLAMENT, Aliénor（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））
小野　陽子（事務支援員）
山崎　美鈴（事務支援員（派遣））
奥原　紀恵（事務支援員（派遣（理研）））

＊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。また，この高輝度光は光パラメトリック過程によるテラヘルツ（THz）波発生にも有利である。また，LA-PPMgLN を用いてピコ秒領域で mJ に至る狭線幅 THz 波発生も可能となった。マンレー・ローによる量子限界を超える効率である。今後，分子の振動状態についてのより詳細な分光学的情報を得ることから，THz 波による電子加速までと幅広い展開が期待される。

B-1) 学術論文

B. BRUNETEAU, B. FAURE, J. DEBRAY, G. SOUHAITÉ, P. SEGONDS, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and B. BOULANGER, “Widely Tunable Near-Infrared Optical Parametric Oscillator Based on a 5%MgO:PPLN Partial Cylinder Pumped at 1064 nm by a 1-kHz Sub-Nanosecond Microchip Laser,” *Opt. Lett.* **48(14)**, 3669–3672 (2023). DOI: 10.1364/OL.492778

R. MIYAGAWA, T. OHGAI, S. YOSHIKAWA, H. H. LIM, SA. REZVANI, T. TAIRA and O. ERYU, “Effects of Laser Pulse Duration on the Formation Dynamics of Laser-Induced Periodic Nanostructures,” *Opt. Express* **32(7)**, 11863–11872 (2024). DOI: 10.1364/OE.520565

B-2) 国際会議のプロシーディングス

F. CASSOURET and T. TAIRA, “Cr:LiSAF DFC Chip for High Power and Broadband Tiny Integrated Laser,” *Proc. of SPIE, vol. 12864, Solid State Lasers XXXIII: Technology and Devices* (2024). DOI: 10.1117/12. 3003293

B-3) 総説，著書

平等拓範,「常温直接接合による小型集積ハイパワーレーザー」, 特集ヘテロジニアス集積技術と光デバイス応用, *OPTRONICS*, **42(503)**, 128–132 (2023). ISSN0286-9659

平等拓範,「マイクロチップレーザー開発の最前線：小型集積パワーチップレーザー」, マイクロチップレーザの開発とその応用, *スマートプロセス学会誌*, **13(2)**, 38–45 (2024). ISSN2186-702X

大場弘則，若井田育夫，平等拓範,「原子炉廃炉措置に向けたマイクロチップレーザーによる遠隔分析技術の開発」, マイクロチップレーザの開発とその応用, *スマートプロセス学会誌*, **13(2)**, 51–58 (2024). ISSN2186-702X

B-4) 招待講演

A. KAUSAS and T. TAIRA, “Advancing Laser Systems through Optimal Direct Bonding: Insights into Laser-Induced Damage Threshold Variability,” Advanced Solid-State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2023, Greater Tacoma Convention Center Tacoma, WA, Tacoma (USA), October 2023.

平等拓範,「中赤外レーザー Cr:ZnSe の常温接合」, Q-LEAP 第 30 回 ATTO 懇談会, 東京, 2023 年 9 月.

平等拓範,「新寄光源とその応用――加工, 計測から医療まで――」, 第 2 回光材料･応用技術研究会, 東京（ハイブリッド開催）, 2023 年 9 月.

T. TAIRA, “Tiny Integrated Laser for Big Science,” Siegman International School on Lasers, Dublin (Ireland), June 2023.

T. TAIRA, “Micro Solid-state Photonics for Ubiquitous Power Laser,” Siegman International School on Lasers, Dublin (Ireland), June 2023.

T. TAIRA, “Tiny Integrated Lasers toward Ubiquitous Power Lasers,” The 9th International Symposium on Organic and Inorganic Electronic Materials and Related Nanotechnologies (EM-NANO2023), Ishikawa, June 2023.

平等拓範,「小型集積高強度な極限固体レーザー」, OPIC セミナー , OPTICS & PHOTONICS International Congress 2023, 横浜, April 2023.

T. TAIRA, “Tiny Integrated Lasers towards Giant Micro-photonics,” Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2023), OPIC 2023, Yokohama, April 2023.

B-5) 特許出願

特願 2021-181857,「光学素子，光学装置および光学素子の製造方法」, 平等拓範（自然科学研究機構）, 2021 年.

WO2023080242,「光学素子，光学装置および光学素子の製造方法」, 平等拓範（自然科学研究機構）, 2022 年.

WO2023080205,「光学素子，レーザ装置および光学素子の製造方法」, 平等拓範，KAUSAS, Arvydas，吉田光宏（自然科学研究機構）, 2022年.

20230137277, “Optical Oscillator, Method for Designing Optical Oscillator, and Laser Device,” T. TAIRA and H. H. LIM, 2021年.

B-6) 受賞，表彰

K. TAMURA, M. SAEKI, T. TAGUCHI, H. H. LIM, T. TAIRA and I. WAKAIDA, 第56回（2023年度）日本原子力学会賞（論文賞）(2024).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

レーザー学会研究会委員 (1999–),「小型集積レーザー」技術専門委員会主査 (2021–2025).

光産業技術振興協会光材料・応用技術研究会幹事 (2004–)，多元技術融合光プロセス研究会幹事 (2009–).

日本光学会レーザーディスプレイ技術研究グループ実行委員 (2015–)，光エレクトロニクス産学連携専門委員会学会委員及び主査 (2020.4–)，生体ひかりイメージング産学連携専門委員会委員及び幹事 (2022–2026).

米国光学会The Optical Society (OSA) フェロー (2010–).

国際光工学会The International Society for Optical Engineering (SPIE)（米国）フェロー (2012–).

米国電気電子学会The Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE) フェロー (2014–).

The International Academy of Photonics and Laser Engineering (IAPLE) フェロー (2018–).

OPTICA(Formerly OSA), OPTICA Fellow Members Committee 委員 (2021–2023)，委員長 (2022)，副委員長 (2023)，会議評議員（Meetings Council）(2023–).

SPIE Maiman Laser Award Subcommittee 委員 (2020–2023).

科学技術交流財団「ジャイアント・マイクロフォトニクス」研究会座長 (2021–2023).

（公財）天田財団理事 (2023–).

学会の組織委員等

SPIE Photonics West, LASE, 国際会議委員会共同議長（米国，サンフランシスコ）(2019–2024).

Mid-Infrared Coherent Sources (MICS) 2022, テクニカル・プログラム委員会委員 (2021–2023).

OPTICS & PHOTONICS International Congress 2022 (OPIC2022), 国際会議組織委員会委員 (2021–2023).

CLEO/Europe 2023，Solid-State Lasers, 国際会議プログラム委員会委員（ドイツ，ミュンヘン）(2022–2023).

9th International Symposium on Optical Materials (IS-OM'9), 国際会議諮問委員（スペイン，タラゴナ）(2023–).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）事前書面審査 (2013–2024.3).

科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業ACT-X 研究領域「リアル空間を強靭にするハードウェアの未来」領域アドバイザー (2021–).

学会誌編集委員

Applied Sciences (https://www.mdpi.com/journal/applsci, ISSN 2076-3417), MDPI, 編集委員会委員 (2021–2024).

理科教育活動

OPTICA, Siegman International Summer School on Lasers 講師（June 18–25, Dublin City University, Dublin, Ireland）.（Hosted by Optica Foundation and Dublin City University）

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

三重大学, 非常勤講師, 2022年–2023年.

核融合科学研究所, 客員教授, 2023年– .

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構未来社会創造事業（大規模プロジェクト型）「レーザー駆動による量子ビーム加速器の開発と実証」（代表；公益財団法人高輝度光科学研究センター熊谷教孝(2017年度–2020年度)，自然科学研究機構佐野雄二(2021年度–2026年度)), 平等拓範（再委託）(2017年度–2026年度).

安全保障技術研究推進制度,「ジャイアント・マイクロフォトニクスによる高出力極限固体レーザ」, 平等拓範 (2020年度–2024年度).

文部科学省平成30年度科学技術試験研究委託事業（Q-LEAP）「先端レーザーイノベーション拠点「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」部門」,「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」（②a.10KHz 赤外OPCPA 光源の開発), 再委託（東京大学), 平等拓範 (2018年度–2027年度).

安全保障技術研究推進制度,「超小型ロバストテラヘルツ波イメージング装置の研究開発」（代表；南出泰亜), 平等拓範（研究分担者）(2020年度–2024年度).

科学技術振興機構ムーンショット型研究開発事業,「2050年までに，経済・産業・安全保障を飛躍的に発展させる誤り耐性型汎用量子コンピュータを実現」（代表；大森賢治),「高安定・高強度小型集積レーザーシステムの研究開発」, 平等拓範（研究分担者）(2023年度–2025年度).

日本原子力研究開発機構廃炉･汚染水対策事業費補助金,「燃料デブリの性状把握のための分析･推定技術の開発」(代表；若井田育夫),「DFC 型高出力マイクロチップレーザーの開発に関する研究」, 平等拓範（研究分担者）(2023年度–2024年度).

B-11) 産学連携

受託研究,（株）コンポン研究所,「物資，生命，コンピューター科学の融合領域における光科学視点の調査研究」, 平等拓範 (2023年度).

共同研究, 東芝エネルギーシステムズ（株),「マイクロチップレーザを用いた非接触超音波検査」, 平等拓範 (2023年度).

共同研究, 東海光学（株),「透明樹脂内部へのレーザー加工にかかる研究開発」, 平等拓範 (2023年).

共同研究, 東海光学（株),「高出力密度レーザ材料に適した表面処理法の開発」, 平等拓範 (2023年).

共同研究, トヨタ自動車（株),「量子LiDAR や量子イメージング向けに，高輝度レーザーとPPLN 等の多機能非線形光学材料を用いた量子光源の研究を行う」, 平等拓範 (2022年度–2023年度).

共同研究, 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–2023年度).

共同研究, (株) ハナムラオプティクス, 「ジャイアントパルス・マイクロチップレーザーによる波長変換」, 平等拓範 (2023年度–2024年度).

共同研究, ハイティラ (株), 「小型集積レーザの研究」, 平等拓範 (2023年度–2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

先端的レーザー光源の中で，特にビーム高品質化（空間特性制御）ならびに短パルス化（時間特性制御）などの高輝度化，そしてスペクトルの高純度化を広い波長領域（スペクトル特性制御）でコンパクト化と同時に実現することは，極めて重要な課題である。一方，極限的な粒子加速が期待されるレーザー加速では，物質の性質を原子・分子レベルで解明し，さらに化学反応などの超高速の動きを捉えることができ，広範な分野の最先端研究に利用される加速器，特にX線自由電子レーザー SACLA をトレーラーサイズにまで小型化できると期待される。しかし，その加速のための高強度レーザーが非常に大型であることが深刻な問題となり，マイクロ固体フォト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。

6-10　研究施設等

機器センター

湊　　丈　俊（主任研究員）（2020 年 6 月 1 日着任）

兵藤　由美子（事務支援員）

A-1) 専門領域：表面界面科学，エネルギー変換，物理化学

A-2) 研究課題：

a) 走査プローブ顕微鏡の高度化と物性・反応機構の解明

b) 表面界面におけるエネルギー変換の機構解明

c) ナノレベルでの分子物性解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 電気化学反応中の電極電解液界面の物性や機構を解析することが出来る電気化学走査プローブ顕微鏡システムをこれまで構築してきた。このシステムを，二酸化炭素の還元反応などの反応ガスを電解液に飽和させる反応に適用する場合，探針や電極への反応ガスの気泡の吸着により，解析が不可能になる問題があった。この問題を克服するために，ガスの流路にメッシュ状の電極を設置する事によって気泡を分散させ，探針や電極への気泡の吸着を軽減するセルを開発した。このセルにより，二酸化炭素を飽和させた電解液中での還元反応中の電極の変化を解析することに成功した。また，走査プローブ顕微鏡で得られた画像を解析し，特徴を抽出する事で，物理的な意味を明らかにする新しい方法を開発した。

b) 現在，リチウムイオン電池は最も優れた蓄電池として，小型電子デバイスなどに広く使用されている。今後，持続可能な社会を発展させていくために，これまでの蓄電池の性能を越える新しい原理に基づく蓄電池の開発が期待されている。本研究では，アニオンの移動により起電力を得る新しい蓄電池の開発と反応機構解明を行っている。本年度は，新しい特徴を備えた電解質と電極を発見し，種々の手法を用いて，反応機構を調べた。

c) 日本原子力研究開発機構英知事業の国際協力型廃炉研究プログラム（日英）の中で信州大学，東北大学，Diamond Light Source（英国），The University of Sheffield（英国）との共同研究を進め，放射性汚染水を浄化する反応の機構を明らかにした。また，山本浩史教授（分子研），佐藤拓朗助教（分子研）らとの共同研究において，分子構造にはキラリティーを持たない分子がキラリティーを有する結晶構造を形成した時に電子スピン選択制が出現するという事実を明らかとし，熊谷崇准教授（分子研），西田　純助教（分子研），飯野亮太教授（分子研），大友章裕助教（分子研）らとの共同研究において，単一たんぱく質の物性計測を達成した。

B-1) 学術論文

J. NISHIDA, A. OTOMO, T. KOITAYA, A. SHIOTARI, T. MINATO, R. IINO and T. KUMAGAI, “Sub-Tip-Radius Near-Field Interactions in Nano-FTIR Vibrational Spectroscopy on Single Proteins,” *Nano Lett.* **24(3)**, 836 (2024). DOI: 10.1021/acs.nanolett.3c03479

M. ANDO, M. KOYAKKAT, T. UEDA, T. MINATO and H. SHIROTA, "Wettability and Surface Tension of Imidazolium, Ammonium, and Phosphonium Bis(fluorosulfonyl)amide Ionic Liquids: Comparison between Pentyl, Ethoxyethyl, and Ethylthioethyl Groups," *Langmuir* **39**, 12090–12098 (2023). DOI: 10.1021/acs.langmuir.3c01375

H. AIZAWA, T. SATO, S. MAKI-YONEKURA, K. YONEKURA, K. TAKABA, T. HAMAGUCHI, T. MINATO and H. M. YAMAMOTO, "Enantioselectivity of Discretized Helical Supramolecule Consisting of Achiral Cobalt Phthalocyanines via Chiral-Induced Spin Selectivity Effect," *Nat. Commun.* **14(1)**, 4530 (2023). DOI: 10.1038/s41467-023-40133-z

R. MALATONG, T. SATO, J. KUMSAMPAO, T. MINATO, M. SUDA, V. PROMARAK and H. M. YAMAMOTO, "Highly Durable Spin Filter Switching Based on Self-Assembled Chiral Molecular Motor," *Small* **19(32)**, 2302714 (2023). DOI: 10.1002/smll.202302714

B-4) 招待講演

湊　丈俊,「エネルギー移動界面の物性と反応機構」, 第 84 回応用物理学会秋季学術講演会シンポジウム：薄膜・表面物理における研究手法技術の最新動向, 熊本市, 2023 年 9 月.

湊　丈俊,「格子欠陥と表面界面科学」, 第 32 回格子欠陥フォーラム, 仙台市, 2023 年 9 月.

湊　丈俊,「表面界面科学的手法を用いた固液界面におけるエネルギー移動の反応機構解析」, 2023 年度分子研異分野技術交流セミナー（第 4 回）～固液界面における分子反応の解明と最先端解析技術～, 岡崎市, 2023 年 8 月.

T. MINATO, "Energy conversions at solid/liquid interfaces clarified by scanning probe microscopy," Seminar at Institute of Experimental and Applied Physics, Kiel University, Kiel (Germany), December 2023.

T. MINATO, "Surface and Interface Sciences of Energy Conversion Systems Studied by SPM," Joint Workshop Fritz Haber Institute (FHI) and Institute for Molecular Science (IMS), Emerging Techniques of Nanospectroscopy Based on Scanning Probe Microscopy, Berlin (Germany), December 2023.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会 代議員 (2023–2025).

日本表面真空学会 国際連携委員会委員 (2023–).

Applied Surface Science Division, International Union for Vacuum Science, Technique and Applications (IUVSTA)-Japan, Vice Chair (2023–).

学会の組織委員等

International Colloquium on Scanning Probe Microscopy 国際会議プログラム委員 (2021–2025).

日本表面真空学会 ISSS-10 プログラム委員会委員 (2022–2025).

ALC' 24 国際会議 組織委員会，プログラム委員 (2023–2025).

その他

青森県三戸町ふるさと応援大使 (2021–2023).

B-10) 競争的資金

自然科学研究機構Open Mix Lab（OML）公募研究プログラム（テーマ設定型),「アニオン移動型革新型蓄電池反応の研究」, 湊　丈俊 (2023年度–2024年度).

自然科学研究機構産学連携支援事業,「極高エネルギー材料の開発」, 湊　丈俊 (2023年度).

科研費基盤研究(C),「ガラス上のナノ水滴の構造観察による微視的ぬれの解明」（代表者；荒木優希), 湊　丈俊（研究分担者）(2023年度–2025年度).

中　村　敏　和（チームリーダー）
（研究力強化戦略室特任部長（研究戦略担当））

B-1) 学術論文

S. NAKAGAWA, A. YOKOYA, M. OHARA, N. USAMI, M. ASADA, M. FUJIWARA, T. NAKAMURA and K. ISHIKAWA, "High Linear Energy Transfer (LET) Nature of Alanine Radical Yield by Soft X-Ray Irradiations Studied by Electron Spin Resonance (ESR) Applications," *Radiat. Phys. Chem.* **214**, 111304 (2024). DOI: 10.1016/j.radphyschem.2023.111304

K. ORIHASHI, A. YAMAUCHI, S. FUJIWARA, M. ASADA, T. NAKAMURA, J. K.-H. HUI, N. KIMIZUKA, K. TATEISHI, T. UESAKA and N. YANAI, "Spin-Polarized Radicals with Extremely Long Spin-Lattice Relaxation Time at Room Temperature in a Metal-Organic Framework," *J. Am. Chem. Soc.* **145(50)**, 27650–27656 (2023). DOI: 10.1021/jacs.3c09563

K. ORIHASHI, A. YAMAUCHI, M. INOUE, B. PARMAR, S. FUJIWARA, N. KIMIZUKA, M. ASADA, T. NAKAMURA and N. YANAI, "Radical Qubits Photo-Generated in Acene-Based Metal-Organic Frameworks," *Dalton Trans.* **53(3)**, 872–876 (2023). DOI: 10.1039/d3dt03959e

Y. HORITA, S. HOSSAIN, M. ISHIMI, P. ZHAO, M. SERA, T. KAWAWAKI, S. TAKANO, Y. NIIHORI, T. NAKAMURA, T. TSUKUDA, M. EHARA and Y. NEGISHI, "Clarifying the Electronic Structure of Anion-Templated Silver Nanoclusters by Optical Absorption Spectroscopy and Theoretical Calculation," *J. Am. Chem. Soc.* **145(43)**, 23533–23540 (2023). DOI: 10.1021/jacs.3c07194

K. ONOZUKA, T. FUJINO, R. KAMEYAMA, S. DEKURA, K. YOSHIMI, T. NAKAMURA, T. MIYAMOTO, T. YAMAKAWA, H. OKAMOTO, H. SATO, T. OZAKI and H. MORI, "Metallic State of a Mixed-Sequence Oligomer Salt That Models Doped PEDOT Family," *J. Am. Chem. Soc.* **145(28)**, 15152–15161 (2023). DOI: 10.1021/jacs.3c01522

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

電子スピンサイエンス学会代議員 (2018–2024).

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 (2023–2025).

科学技術振興機構創発的研究支援事業事前評価，外部専門家 (2023–2025).

（公財）未来工学研究所（文部科学省委託）「大学及び大学共同利用機関の研究力強化に必要な課題及び対策に関する調査業務」ワーキンググループ委員 (2024).

鈴　木　敏　泰（チームリーダー）

B-1) 学術論文

T. HORI, S. KAKINUMA, N. OHTSUKA, T. FUJINAMI, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, "Synthesis of Halogen-Bond-Donor-Site-Introduced Functional Monomers through Wittig Reaction of Perfluorohalogenated Benzaldehydes: Toward Digitalization as Reliable Strategy in Small-Molecule Synthesis," *Synlett* **34(20)**, 2455–2460 (2023). DOI: 10.1055/a-2118-6813

S. OISHI, T. FUJINAMI, Y. MASUI, T. SUZUKI, M. KATO, N. OHTSUKA and N. MOMIYAMA, "Protocol for Efficient Dearomatization of *N*-Heteroaromatics with Halogen(I) Complex Catalyst," *STAR Protoc.* **4(1)**, 102140 (2023). DOI: 10.1016/j.xpro.2023.102140

B-7) 学会および社会的活動

理科教育活動

出前授業「おもしろい形の分子を作る」岡崎市立矢作南小学校 (2023).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C),「フッ素化ペリレン化合物の合成とデバイスへの応用」, 鈴木敏泰 (2023年度–2025年度).

科研費学術変革領域研究(A),「デジタル化による高度精密有機合成の新展開」（代表；大嶋孝志), 鈴木敏泰（研究分担者）(2021年度–2025年度).

計算科学研究センター（ネットワーク担当）

大　野　人　侍（准教授）（1996 年 4 月 1 日着任，2019 年 10 月 1 日昇任）

A-1) 専門領域：情報科学，ネットワーク運用技術及びサイバーセキュリティ

A-2) 研究課題：

a) ソフトウェアを用いたネットワークの自動制御

b) ログ解析等によるネットワーク／サイバーセキュリティの自動最適化及び認証

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。現在，ORION2022 運用期間中の安全なシステム利用継続のための近代化改修を行っている。更に，自然科学研究機構における統合認証基盤構築を行う機構ワーキンググループの一員としてシステム化のための調査研究を行っている。

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。

B-7) 学会および社会的活動

その他

「自然科学研究機構岡崎 3 機関等の LAN における MFA 及び認証連携について」, 令和 5 年度国立大学法人等情報化発表会 (2023).

「ORION2022 の現状について」, SWS2023 in RCNP (2023).

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各機関担当者と共に調査研究を行っている。

技術推進部及び安全衛生管理室

B-1) 学術論文

T. NAKANO, S. KONTANI, M. HIRAISHI, K. MITA, M. MIYAJIMA and T. KAMBE, "Antiferromagnetic Structure with Strongly Reduced Ordered Moment of p-Electron in CsO_2", *J. Phys.: Condens. Matter* **35**, 435801 (6 pages) (2023). DOI: 10.1088/1361-648X/acea14

F. MATSUI, K. HAGIWARA, E. NAKAMURA, T. YANO, H. MATSUDA, Y. OKANO, S. KERA, E. HASHIMOTO, S. KOH, K. UENO, T. KOBAYASHI, E. IWAMOTO, K. SAKAMOTO, S. TANAKA and S. SUGA, "Soft X-Ray Photoelectron Momentum Microscope for Multimodal Valence Band Stereography," *Rev. Sci. Instrum.* **94(8)**, 083701 (10 pages) (2023). DOI: 10.1063/5.0154156

Y. TAIRA, S. ENDO, S. KAWAMURA, T. NAMBU, M. OKUIZUMI, T. SHIZUMA, M. OMER, H. ZEN, Y. OKANO and M. KITAGUCHI, "Measurement of the Spatial Polarization Distribution of Circularly Polarized Gamma Rays Produced by Inverse Compton Scattering," *Phys. Rev. A* **107(6)**, 063503 (10 pages) (2023). DOI: 10.1103/PhysRevA.107.063503

M. KATOH, H. OTA, J. YAMAZAKI, K. HAYASHI, Y. OKANO, E. SALEHI, Y. TAIRA, A. MANO, M. FUJIMOTO, Y. TAKASHIMA, M. HOSAKA, F. SAKAMOTO, T. KANEYASU and H. ZEN, "Light Source Developments at UVSOR BL1U," *J. Phys.: Conf. Ser.* **2687**, 032005 (6 pages) (2024). DOI: 10.1088/1742-6596/2687/3/032005

W. ZHANG, E. HOSONO, D. ASAKURA, H. YUZAWA, T. OHIGASHI, M. KOBAYASHI, H. KIUCHI and Y. HARADA, "Chemical-State Distributions in Charged $LiCoO_2$ Cathode Particles Visualized by Soft X-Ray Spectromicroscopy," *Sci. Rep.* **13**, 4639 (8 pages) (2023). DOI: 10.1038/s41598-023-30673-1

C. O. M. MARIANO, J. S. D. RODRIGUEZ, R. H. CLEMENTE, T. OHIGASHI, H. YUZAWA, W.-H. HSU, J. SHIUE and C.-H. CHUANG, "Scanning Transmission X-Ray Microscopy of Hydrogen Evolution Electrocatalysts on Reduction Graphene Oxide Membranes," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **265**, 147332 (7 pages) (2023). DOI: 10.1016/j.elspec.2023.147332

W. ZHANG, E. HOSONO, D. ASAKURA, H. YUZAWA, T. OHIGASHI, M. KOBAYASHI, H. KIUCHI and Y. HARADA, "Visualization of Air-Induced Oxidation in Single Crystalline $LiFe_{0.6}Mn_{0.4}PO_4$ Nanowires with Carbon Sheath Using Soft X-Ray Spectromicroscopy," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **266**, 1473338 (6 pages) (2023). DOI: 10.1016/j.elspec.2023.147338

G. GERMER, T. OHIGASHI, H. YUZAWA, N. KOSUGI, R. FLESCH, F. RANCAN, A. VOGT and E. RÜHL, "Soft X-Ray Scanning Transmission Microscopy as a Selective Probe of Topical Dermal Drug Delivery: The Role of Petrolatum and Occlusion," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **266**, 147343 (7 pages) (2023). DOI: 10.1016/j.elspec.2023.147343

B-5) 特許出願

登録

特許第 7341426 号,「通知システム，通知システムにおける制御装置，及び通知システムにおける制御方法」, 千葉寿, 豊田朋範，古舘守通，藤崎聡美（自然科学研究機構，岩手大学）（登録日 2023 年 9 月 1 日）.

B-6) 受賞，表彰

長尾春代, マテリアル先端リサーチインフラ令和 5 年度技術支援貢献賞 (2024).

B-7) 学会および社会的活動

理科教育活動

出前授業「振り子の仕組みと活用例」岡崎市立小豆坂小学校 (2023).（豊田朋範）

B-8) 大学等での講義，客員

岡野泰彬, 中部大学非常勤講師,「基礎力学」および「力学」, 2023 年度春学期,「基礎電磁気学」, 2023 年度秋学期.

客員研究部門及び退職・転出後等の成果論文
（所属に分子科学研究所を含む）

T. HONDA, D. OGATA, M. TSURUI, S. YOSHIDA, S. SATO, T. MURAOKA, Y. KITAGAWA, Y. HASEGAWA, J. YUASA and H. OGURI, "Rapid Synthesis of Chiral Figure-Eight Macrocycles Using a Preorganized Natural Product-Based Scaffold," *Angew. Chem., Int. Ed.* **63(9)**, e202318548 (2024). DOI: 10.1002/anie.202318548

K. YAMANOMOTO, K. YAMAMOTO, S. YOSHIDA, S. SATO and T. AKIYAMA, "Enantioselective Synthesis of 3-(*N*-indolyl) Quinolines Containing Axial and Central Chiralities," *Chem. Commun.* **60(5)**, 582–585 (2024). DOI: 10.1039/d3cc05142k

C. ONO-OGASAWARA, S. YAMAMOTO, Y. OGURA, H. OKAMURA, K. TAKABA, S. YOSHIDA, S. SATO, K. YONEKURA and H. TAKIKAWA, "Synthesis of (±)-Zeapyranolactone, a Noncanonical Strigolactone Isolated from Maize, and Determination of Its Overall Relative Configuration," *Tetrahedron Lett.* **127**, 154695 (2023). DOI: 10.1016/j.tetlet.2023.154695

Y. KAMIYA, S. LAO, J. ARIYOSHI, F. SATO and H. ASANUMA, "Unexpectedly Stable Homopurine Parallel Triplex of SNA:RNA*SNA and L-*a*TNA:RNA*L-*a*TNA," *Chem. Commun.* **60(10)**, 1257–1260 (2024). DOI: 10.1039/d3cc05555h

H. NARITA, J. ISHIZUKA, D. KAN, Y. SHIMAKAWA, Y. YANASE and T. ONO, "Magnetization Control of Zero-Field Intrinsic Superconducting Diode Effect," *Adv. Mater.* **35(40)**, 2304083 (2023). DOI: 10.1002/adma.202304083

I. NODA, M. ASADA and H. NAGAO, "Elucidation of the Mechanism of Greenhouse Gas Generation by Abiotic Transformation of Nutrient Ions Flowing into Closed Water Areas with Little Phytoplankton," *ACS ES&T Water* **4(2)**, 436–443 (2024). DOI: 10.1021/acsestwater.3c00455

K. SAITO, S. NISHIO, M. ASADA, H. MINO and H. ISHIKITA, "Insights into the Protonation State and Spin Structure for the $g = 2$ Multiline Electron Paramagnetic Resonance Signal of the Oxygen-Evolving Complex," *PNAS Nexus* **2(8)**, pgad244 (2023). DOI: 10.1093/pnasnexus/pgad244

H. ABE, S. KOBAYASHI, K. OGAWA, K. IMAI, K. KOSHIJI, M. HOSHINO, T. HIRANO, Y. HATA, H. KISHIMURA and M. URUICHI, "Asymmetric Anion Effects of Anions in Ionic Liquids: Crystal Polymorphs and Magnetic Properties," *Chem. Phys.* **570**, 111872 (2023). DOI: 10.1016/j.chemphys.2023.111872

H. ABE, H. KISHIMURA, M. URUICHI and H. SAGAYAMA, "Crystal Polymorphs and Molecular Conformations of Fluorinated Ionic Liquid: 1-Ethyl-3-methylimidazolium Perfluorobutanesulfonate," *Chem. Phys.* **575**, 112063 (2023). DOI: 10.1016/j.chemphys.2023.112063

K. KUROI, T. TSUKAMOTO, N. HONDA, Y. SUDO and Y. FURUTANI, "Concerted Primary Proton Transfer Reactions in a Thermophilic Rhodopsin Studied by Time-Resolved Infrared Spectroscopy at High Temperature," *Biochim. Biophys. Acta, Bioenerg.* **1864(3)**, 148980 (2023). DOI: 10.1016/j.bbabio.2023.148980

N. I. P. AYU, F. TAKEIRI, T. OGAWA, A. KUWABARA, M. HAGIHALA, T. SAITO, T. KAMIYAMA and G. KOBAYASHI, "A New Family of Anti-Perovskite Oxyhydrides with Tetrahedral GaO_4 Polyanions," *Dalton Trans.* **52(42)**, 15420–15425 (2023). DOI: 10.1039/d3dt01555f

Y. SASAHARA, T. HIROSE, M. YOSHIMOTO, N. MATSUI, S. KOBAYASHI, H. UBUKATA, F. TAKEIRI, K. SUZUKI, M. HIRAYAMA, K. NISHIO, R. SHIMIZU, R. KANNO, G. KOBAYASHI and T. HITOSUGI, "High H^- Conductivities along the *ab*-Planes of La_2LiHO_3 Epitaxial Thin Films," *Cryst. Growth Des.* **23(10)**, 7103–7108 (2023). DOI: 10.1021/acs.cgd.3c00376

Y. IZUMI, F. TAKEIRI, K. OKAMOTO, T. SAITO, T. KAMIYAMA, A. KUWABARA and G. KOBAYASHI, "Electropositive Metal Doping into Lanthanum Hydride for H^- Conducting Solid Electrolyte Use at Room Temperature," *Adv. Energy Mater.* **13(43)**, 2301993 (2023). DOI: 10.1002/aenm.202301993

Y. HATTORI, R. KITAJIMA, A. BABA, K. YAMAMOTO, R. MATSUOKA, T. KUSAMOTO and K. UCHIDA, "Effects of Hydrocarbon Substituents on Highly Fluorescent Bis(4-phenylphenyl)pyridylmethyl Radical Derivatives," *Mater. Adv.* **4(21)**, 5149–5159 (2023). DOI: 10.1039/d3ma00469d

A. MIZUNO, R. MATSUOKA, T. MIBU and T. KUSAMOTO, "Luminescent Radicals," *Chem. Rev.* **124(3)**, 1034–1121 (2023). DOI: 10.1021/acs.chemrev.3c00613

E. MINAMITANI, I. OBAYASHI, K. SHIMIZU and S. WATANABE, "Persistent Homology-Based Descriptor for Machine-Learning Potential of Amorphous Structures," *J. Chem. Phys.* **159(8)**, 84101 (2023). DOI: 10.1063/5.0159349

H. TAKEKUMA, R. SATO, K. IIDA, T. KAWAWAKI, M. HARUTA, H. KURATA, K. NOBUSADA and T. TERANISHI, "Intrinsic Visible Plasmonic Properties of Colloidal $PtIn_2$ Intermetallic Nanoparticles," *Adv. Sci.* **11(10)**, 2307055 (2024). DOI: 10.1002/advs.202307055

A. KATO and J. KISHINE, "Note on Angular Momentum of Phonons in Chiral Crystals," *J. Phys. Soc. Jpn.* **92(7)**, 75002 (2023). DOI: 10.7566/jpsj.92.075002

A. D. LYAKHOV, A. S. OVCHINNIKOV, I. G. BOSTREM and J. KISHINE, "Rotational Symmetry Breaking of Nuclear Motion in the Jahn-Teller X_3 Molecule due to Casimir-Polder Interaction," *Phys. Rev. B* **108(11)**, 115429 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevB.108.115429

H. SHISHIDO, Y. HOSAKA, K. MONDEN, A. INUI, T. SAYO, Y. KOUSAKA and Y. TOGAWA, "Spin Polarization Gate Device Based on the Chirality-Induced Spin Selectivity and Robust Nonlocal Spin Polarization," *J. Chem. Phys.* **159(6)**, 64502 (2023). DOI: 10.1063/5.0156505

C. ZHANG, T. SHISHIDOU, R. AMANO, K. MIYAMOTO, T. SAYO, C. SHIMADA, Y. KOUSAKA, M. WEINERT, Y. TOGAWA and T. OKUDA, "Spiral Band Structure Hidden in the Bulk Chiral Crystal $NbSi_2$," *Phys. Rev. B* **108(23)**, 235164 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevB.108.235164

K. OHE, H. SHISHIDO, M. KATO, S. UTSUMI, H. MATSUURA and Y. TOGAWA, "Chirality-Induced Selectivity of Phonon Angular Momenta in Chiral Quartz Crystals," *Phys. Rev. Lett.* **132(5)**, 56302 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevLett.132.056302

T. HIRAOKA, R. KAINUMA, K. MATSUMOTO, K. T. YAMADA and T. SATOH, "Sublattice-Selective Inverse Faraday Effect in Ferrimagnetic Rare-Earth Iron Garnet," *J. Phys. Soc. Jpn.* **93(2)**, 23702 (2024). DOI: 10.7566/JPSJ.93.023702

M. SUZUKI, T. NOMOTO, E. V. MOROOKA, Y. YANAGI and H. KUSUNOSE, "High-Performance Descriptor for Magnetic Materials: Accurate Discrimination of Magnetic Structure," *Phys. Rev. B* **108(1)**, 14403 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevB.108.014403

S. HAYAMI, R. OIWA and H. KUSUNOSE, "Unconventional Hall Effect and Magnetoresistance Induced by Metallic Ferroaxial Ordering," *Phys. Rev. B* **108(8)**, 85124 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevB.108.085124

S. HAYAMI and H. KUSUNOSE, "Time-Reversal Switching Responses in Antiferromagnets," *Phys. Rev. B* **108(14)**, L140409 DOI: 10.1103/PhysRevB.108.L140409

S. HAYAMI and H. KUSUNOSE, "Chiral Charge as Hidden Order Parameter in URu_2Si_2," *J. Phys. Soc. Jpn.* **92(11)**, 113704 (2023). DOI: 10.7566/JPSJ.92.113704

T. MURAOKA, K. FUJIWARA, H. FURUKAWA, M. IKEDA, K. KOBAYASHI, T. KUDO, K. UENO, Y. SUNADA, H. TAKAYA, Y. IKEMOTO and T. MORIWAKI, "Ten-Membered Cyclodecatetraene Derivatives Including Two Gallium Atoms: Experimental and Theoretical Studies on Synthesis, Structures, and Their Transformations to Nine- and Five-Membered Gallacycles," *Organometallics* **42(10)**, 982–994 (2023). DOI: 10.1021/acs.organomet.3c00145

M. NAITO, N. TANIGUCHI, S. MIYAGAWA, H. TAKAYA and Y. TOKUNAGA, "Solvent-Dependent Isomerization of a Chromogenic Trefoil-Shaped Salicylaldehyde Azine Derivative," *Results Chem.* **6**, 101164 (2023). DOI: 10.1016/j.rechem.2023.101164

H. FUJIHARA, M. NAITO, T. YASHIMA, Y. OKADA, N. KOBAYASHI, S. MIYAGAWA, H. TAKAYA and Y. TOKUNAGA, "Synthesis of Cross-Chain Bridging Cryptands and Induction of Molecular Chirality," *Org. Lett.* **25(50)**, 8959–8964 (2023). DOI: 10.1021/acs.orglett.3c03007

I.-Y. HSIAO, Y. TERANISHI and H. NAKAMURA, "Classically Forbidden Nonadiabatic Transitions in Multidimensional Chemical Dynamics," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26(5)**, 3795–3799 (2024). DOI: 10.1039/d3cp04794f

Y. MAEDA, S. AKITA, M. SUZUKI, M. YAMADA, T. AKASAKA, K. KOBAYASHI and S. NAGASE, "Controlling the Reactivity of La@C_{82} by Reduction: Reaction of the La@C_{82} Anion with Alkyl Halide with High Regioselectivity," *Beilstein J. Org. Chem.* **19**, 1858–1866 (2023). DOI: 10.3762/bjoc.19.138

F. HIRATA, "A Theory of Chemical Reactions in Biomolecules in Solution: Generalized Langevin Mode Analysis (GLMA)," *J. Chem. Phys*. **158(14)**, 144108 (2023). DOI: 10.1063/5.0143849

F. HIRATA, "Generalized Langevin Mode Analysis (GLMA) for Local Density Fluctuation of Water in an Inhomogeneous Field of a Biomolecule," *J. Mol. Liq.* **381**, 121752 (2023). DOI: 10.1016/j.molliq.2023.121752

F. HIRATA, "Structural Fluctuation, Relaxation, and Folding of Protein: An Approach Based on the Combined Generalized Langevin and RISM/3D-RISM Theories," *Molecules* **28(21)**, 7351 (2023). DOI: 10.3390/molecules28217351

F. HIRATA, "Structural Transition Induced by a Local Chemical/Mechanical Perturbation in Biomolecules," *Condens. Matter Phys.* **26(4)**, 43803 (2023). DOI: 10.5488/CMP.26.43803

Y. UEHASHI, S. IZAWA, Y. YAMADA, Y. MIWA, T. INUZUKA, Y. KUBOTA, M. HIRAMOTO and K. FUNABIKI, "Synthesis of Highly Photostable Benzoindolenine-Based Squaraine Dyes Using Aromatic Fluorine Atoms," *ChemistrySelect* **8**, e202300309 (2023). DOI: 10.1002/slct.202300309

J. PALASSERY ITHIKKAL, S. IZAWA and M. HIRAMOTO, "Doped Lateral Organic Photovoltaic Cells," *Phys. Status Solidi A* **220(24)**, 2300108 (2023). DOI: 10.1002/pssa.202300108

H. KOBAYASHI, S. IZAWA, C. KITAMURA, M. HIRAMOTO and K. ONO, "Dioxaborin Compounds with Terminal Carbazole Groups: Enhancing Electron Acceptor in Organic Photovoltaics," *Asian J. Org. Chem.* **12(10)**, e202300377 (2023). DOI: 10.1002/ajoc.202300377

M. NAKAMURA, H. KOJIMA, R. ABE, Y. CHO, S. HAYASHI and M. HIRAMOTO, "Giant Seebeck Effect over 0.1 V K^{-1} — Is This an Intrinsic Phenomenon in Organic Semiconductors?" *Faraday Discuss.* **250**, 361–376 (2024). DOI: 10.1039/d3fd00127j

S. IZAWA, M. MORIMOTO, K. FUJIMOTO, K. BANNO, Y. MAJIMA, M. TAKAHASHI, S. NAKA and M. HIRAMOTO, "Blue Organic Light-Emitting Diode with a Turn-On Voltage at 1.47 V," *Nat. Commun.* **14(1)**, 5494 (2023). DOI: 10.1038/s41467-023-41208-7

Y. NAKAYAMA, K. ITO, R. TAKEUCHI, R. TSURUTA, K. YAMAUCHI, S. IZAWA, M. HIRAMOTO, R. KUMARA and T. KOGANEZAWA, "Well-Ordered Molecular Heterojunction of Epitaxial C_{60} on Single-Crystal Dinaphtho[2,3-*b*:2′,3′-*f*]thieno[3,2-*b*] thiophene (DNTT)," *Appl. Phys. Express* **16(10)**, 101001 (2023). DOI: 10.35848/1882-0786/ad0021

K. FUJIMOTO, S. IZAWA, K. YAMADA, S. YAGI, T. INUZUKA, K. SANADA, M. SAKAMOTO, M. HIRAMOTO and M. TAKAHASHI, "Wavily Curved Perylene Diimides: Synthesis, Characterization, and Photovoltaic Properties," *ChemPlusChem* e202300748 (2024). DOI: 10.1002/cplu.202300748

T. OKAMOTO, S. IZAWA, M. HIRAMOTO and Y. KOBORI, "Efficient Spin Interconversion by Molecular Conformation Dynamics of a Triplet Pair for Photon Up-Conversion in an Amorphous Solid," *J. Phys. Chem. Lett.* **15(11)**, 2966–2975 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpclett.3c03602

N. KUMAGAI, T. SHIMIZU, H. MINODA, M. KATAYAMA, S. NAKAO and T. KAJI, "Visualization of Tens of Nanometers Spaced Donor: Acceptor Bulk Heterojunctions across Submicrometer-Square Cross Sections of Organic Photovoltaic Cells," *ACS Appl. Energy Mater.* **6(18)**, 9363–9370 (2023). DOI: 10.1021/acsaem.3c01262

Y. C. HUANG, Y. LI, K. T. ARUL, T. OHIGASHI, T. T. THUY NGA, Y. R. LU, C. L. CHEN, J. L. CHEN, S. SHEN, W. F. PONG, C. L. DONG and W. C. CHOU, "Atomic Nickel on Graphitic Carbon Nitride as a Visible Light-Driven Hydrogen Production Photocatalyst Studied by X-Ray Spectromicroscopy," *ACS Sustainable Chem. Eng.* **11(14)**, 5390–5399 (2023). DOI: 10.1021/acssuschemeng.2c06497

Y. C. HUANG, J. CHEN, Y. R. LU, K. T. ARUL, T. OHIGASHI, J. L. CHEN, C. L. CHEN, S. SHEN, W. C. CHOU, W. F. PONG and C. L. DONG, "Single-Atom Cobalt-Incorporating Carbon Nitride for Photocatalytic Solar Hydrogen Conversion: An X-Ray Spectromicroscopy Study," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **264**, 147319 (2023). DOI: 10.1016/j.elspec.2023.147319

N. TOMIOKA, A. YAMAGUCHI, M. ITO, M. UESUGI, N. IMAE, N. SHIRAI, T. OHIGASHI, M. KIMURA, M. C. LIU, R. C. GREENWOOD, K. UESUGI, A. NAKATO, K. YOGATA, H. YUZAWA, Y. KODAMA, K. HIRAHARA, I. SAKURAI, I. OKADA, Y. KAROUJI, K. OKAZAKI, K. KUROSAWA, T. NOGUCHI, A. MIYAKE, M. MIYAHARA, Y. SETO, T. MATSUMOTO, Y. IGAMI, S. NAKAZAWA, T. OKADA, T. SAIKI, S. TANAKA, F. TERUI, M. YOSHIKAWA, A. MIYAZAKI, M. NISHIMURA, T. YADA, M. ABE, T. USUI, S. WATANABE and Y. TSUDA, "A History of Mild Shocks Experienced by the Regolith Particles on Hydrated Asteroid Ryugu," *Nat. Astron.* **7(6)**, 669–677 (2023). DOI: 10.1038/s41550-023-01947-5

T. OHIGASHI and N. KOSUGI, "Developments in Sample Environment for a Scanning Transmission X-Ray Microscope at UVSOR-III Synchrotron," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **266**, 147356 (2023). DOI: 10.1016/j.elspec.2023.147356

T. MANSIKKALA, T. OHIGASHI, M. H. SALO, A. E. HILTUNEN, R. VUOLTEENAHO, P. SIPILÄ, S. KUURE, M. HUTTULA, J. UUSIMAA, R. HINTTALA, I. MIINALAINEN, S. KANGAS and M. PATANEN, "Scanning Transmission Soft X-Ray Spectromicroscopy of Mouse Kidney and Liver," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **266**, 147368 (2023). DOI: 10.1016/j.elspec.2023.147368

L. BONAL, E. QUIRICO, G. MONTAGNAC, M. KOMATSU, Y. KEBUKAWA, H. YABUTA, K. AMANO, J. BAROSCH, L. BEJACH, G. D. CODY, E. DARTOIS, A. DAZZI, B. DE GREGORIO, A. DENISET-BESSEAU, J. DUPRAT, C. ENGRAND, M. HASHIGUCHI, K. KAMIDE, D. KILCOYNE, Z. MARTINS, J. MATHURIN, S. MOSTEFAOUI, L. NITTLER, T. OHIGASHI, T. OKUMURA, L. REMUSAT, S. SANDFORD, M. SHIGENAKA, R. STROUD, H. SUGA, Y. TAKAHASHI, Y. TAKEICHI, Y. TAMENORI, M. VERDIER-PAOLETTI, S. YAMASHITA, T. NAKAMURA, H. NARAOKA, T. NOGUCHI, R. OKAZAKI, H. YURIMOTO, S. TACHIBANA, M. ABE, A. MIYAZAKI, A. NAKATO, S. NAKAZAWA, M. NISHIMURA, T. OKADA, T. SAIKI, K. SAKAMOTO, S. TANAKA, F. TERUI, Y. TSUDA, T. USUI, S. WATANABE, T. YADA, K. YOGATA and M. YOSHIKAWA, "The Thermal History of Ryugu Based on Raman Characterization of Hayabusa2 Samples," *Icarus* **408**, 115826 (2024). DOI: 10.1016/j.icarus.2023.115826

H. TSUKAMOTO and Y. KUBO, "A Self-Inactivating Invertebrate Opsin Optically Drives Biased Signaling toward Gβγ-Dependent Ion Channel Modulation," *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **120(21)**, e2301269120 (2023). DOI: 10.1073/pnas.2301269120

L. D. ANH, M. KOBAYASHI, T. TAKEDA, K. ARAKI, R. OKANO, T. SUMI, M. HORIO, K. YAMAMOTO, Y. KUBOTA, S. OWADA, M. YABASHI, I. MATSUDA and M. TANAKA, "Ultrafast Subpicosecond Magnetization of a 2D Ferromagnet, "*Adv. Mater.* **35(40)**, 2301347 (2023). DOI: 10.1002/adma.202301347

7．点検評価と課題

2022 年 4 月から研究顧問をお引き受けいただいている James M. Lisy 教授（イリノイ大学）と北川　進教授（京都大学），産学連携研究アドバイザーに就任いただいている菊池　昇博士（(株) トヨタコンポン研究所所長）と福田　伸博士（(株) 三井化学分析センター技術顧問）に 2023 年 5 月開催の IMS Presentations 2023 に現地参加頂き，所全体の研究評価，研究体制，産業界の視点からの研究評価などについての提言をいただいた。

マンチェスター大学 David A. Leigh 教授が 2023 年 12 月に来所し，協奏分子システム研究センターを中心に，関連する研究分野の 2 名を加えてヒアリングが実施され，各グループの研究内容の評価をいただいた。また，2024 年 2 月，ハイデルベルグ大学の Matthias Weidemüller 教授に来所いただき，理論･計算分子科学研究領域と計算科学研究センターを中心にヒアリングが実施され，各グループの研究内容の評価をいただいた。

2023 年 4 月，新たに石田　美織博士（三菱ケミカル（株）Science & Innovation Center 所長），高田　昌樹教授（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），谷口　功博士（国立高等専門学校機構理事長）の 3 名が運営顧問に就任されたことに伴い，2024 年 2 月に開催された運営顧問会議では分子科学研究所全体の活動の詳しい紹介を行い，研究活動の状況や運営上の課題について議論頂いた。

（渡辺芳人）

7-1　運営顧問による点検評価

運営顧問から第 4 期中期計画期間での運営方針のためのアドバイスをいただくことを目的として，3 名の運営顧問を招いて運営顧問会議を開催した。

分子科学研究所の第 3 期中期計画期間の活動については，2019 年 12 月から 2021 年 7 月にかけて一連の機関点検・評価が行われた。その結果については，分子研リポート 2019 において，7-1 国際諮問委員会による点検評価，また分子研リポート 2020 において，7-1 大学共同利用機関の教育研究等の検証，7-2 国際諮問委員会の答申リポートとして公開されている。これらを踏まえ，分子科学研究所の抱える課題とそれらへの対応状況を，渡辺所長から運営顧問に説明した。会議当日には，第 4 期中期計画期間での研究所機能強化に向けた機関運営方針の提案・検討事項について運営顧問から意見をいただき，分子研が行っている研究の卓越性や人材育成・共同利用への貢献などが高く評価された。また，そうした活動を外に向けて発信していくことの重要性などのアドバイスが表明された。

1. 日　時：2024 年 2 月 6 日（火）14:00 ～ 2 月 7 日（水）11:30
2. 会　場：研究棟 201，202，各研究施設
3. 出席者：

運営顧問

石田　美織（三菱ケミカル株式会社 Science & Innovation Center 所長）
高田　昌樹（東北大学国際放射光イノベーション・スマート研究センター 教授）
谷口　功（国立高等専門学校機構 理事長）

分子科学研究所

渡辺　芳人　所長
山本　浩史　教授（研究総主幹，装置開発室長）
石﨑　章仁　教授（理論・計算分子科学研究領域主幹）
大森　賢治　教授（光分子科学研究領域主幹）
横山　利彦　教授（物質分子科学研究領域主幹，機器センター長）
飯野　亮太　教授（生命・錯体分子科学研究領域主幹）
解良　聡　教授（極端紫外光研究施設長）
秋山　修志　教授（協奏分子システム研究センター長）
岡本　裕巳　教授（メゾスコピック計測研究センター長）
江原　正博　教授（計算科学研究センター長）

4. 議論内容：

研究活動・共同利用・人材育成の現状について
大学院生・技術職員の人材獲得・人材育成について
分子研の活動の「見せ方」について

7-2　理論・計算分子科学研究領域の評価

7-2-1　Matthias Weidemüller 外国人運営顧問

Report on the visit to the Institute for Molecular Science (IMS), Okazaki

7–9 February 2024

Matthias Weidemüller (Heidelberg University)

This report is based on a visit to the Institute for Molecular Science from 7 to 9 February 2024. On 7 February, Director General Professor Watanabe provided me with general information, in particular concerning latest developments after my first visit in spring 2023. This year's focus was on the activities of the Department of Theoretical and Computational Molecular Science at IMS. The first meeting with Professor Saito and Associate Professor Okazaki was on the same day. On 8 February, I had meetings with Professors Okumura, Ishizaki and Ehara. Each of the meetings took about one hour, starting with presentations by the researchers followed by vivid and very insightful discussions on the research topics. We also briefly touched other issues related, *e.g.*, to the research environment offered by IMS. The scientists shared the files of their presentations with me, and they provided me with their most important publications from the last five years. The visit was closed by a review meeting with the Director General on 9 February. Further information for this report was extracted from IMS's Annual Report 2023.

General remarks

After having mainly met experimentally oriented researchers during my visit of last year, I now had the pleasure to discuss with five leading theoretical scientists at IMS. As a general impression, their research is of highest quality on an international scale. It addresses fundamental questions with regard to the emergence of complex dynamics in large molecular aggregates or condensed-matter systems. As far as I can judge, all researchers play a leading role in their respective fields of research. The research topics do not necessarily follow general mainstream, but indicate a large degree of independent scientific judgement of these outstanding scientists. Yet, all scientists consistently envisage applications of their research for, *e.g.*, material design or quantum control using external fields. The approaches are generally based on sophisticated theoretical and computational approaches well adapted to the intricacy of the systems under investigation. Providing insightful answers to subtle questions concerning the nature of complex molecular systems and the role of their environment is a characteristic, unique feature of IMS in general, and the research within the Department of Theoretical and Computational Molecular Science not only strongly supports this mission, but also positively contributes to IMS' outstanding reputation nationwide as well as internationally.

Unanimously, the important role of IMS' Research Center for Computational Science, headed by Professor Ehara, was emphasized by all researchers. The supercomputer facility and related infrastructure provide outstanding opportunities which are unmatched worldwide. They can be considered one important key element to the success of the theoretical groups at IMS.

All groups maintain broad collaborations with groups from other academic institutions in Japan or abroad. In most cases, theory and experiment work hand in hand. As a general feature, the theory groups at IMS are rather small in size, consisting essentially of the group leader and a small number of research staff including postdoctoral fellows. The number of graduate students in the groups is

rather small, in particular compared to the composition of typical research groups at a university. This feature is particularly striking as the topics of the research would, in my view, be ideally suited for successful PhD theses.

The following assessment follows the order of the presentations as given during the visit.

Shinji SAITO

The focus of Professor Shinji Saito and his group lies on the dynamics of condensed matter systems, especially with biological relevance. The studies comprise the excitation transport in light-harvesting complexes for photosynthesis, as well as structural and dynamical properties of supercooled water and other liquids. By using advanced computational methods including quantum chemical and molecular dynamics calculations, the research bridges the gap between microscopic models and macroscopic response functions. In this way, general conclusions on the nature of condensed matter and biophysical processes could potentially been drawn from the specific model systems under investigation, addressing the big question on how function follows structure. I was particularly impressed by his studies on the structure and dynamical slowdown of supercooled water, shedding new light on the largely unexplored region around 200 K.

Kei-ichi OKAZAKI

The group of Associate Professor Kei-ichi Okazaki addresses the fundamental processes of biomolecular machines in the cell with the goal to device possible control scenarios. In order to access long time scales, the group uses advanced molecular dynamics simulations and has develops novel methods such as coarsegrained models. These are applied to, *e.g.*, elucidate condition-dependent inhibitions mechanisms in ATP synthase. Modern techniques involving artificial intelligence such as structure predictions via AlphaFold are combined with molecular dynamics simulations to gain deeper insights into conformations in transporter proteins and other processes of biophysical relevance. The results on the conformational dynamics of oxalate transporters nicely highlight the added value of merging state-of-the-art approaches, including machine learning, with molecular structure calculations. In order to validate predictions of the theoretical models, the group maintains various cooperations with experimental groups at other places.

Hisashi OKUMURA

Associate Professor Hisashi Okumura and his group study the structure and dynamics of disease-related biomolecules, in particular aggregated amyloid-β (Aβ) peptides. Calculations are based on advanced replica molecular dynamics methods developed by the group. As a particular highlight, predictions concerning the Aβ peptide aggregation and behavior at interfaces extracted from these simulations are tested and validated in a cooperations with Prof. Kato's group at IMS. This successful internal collaboration impressively indicates the great potential of IMS's bundled expertise in theoretical as well as in experimental molecular science. The group also theoretically investigates possible scenarios for the breaking of amyloid fibrils in water solution through external ultrasonic or laser fields.

Akihito ISHIZAKI

The research of Professor Akihito Ishizaki and his group applies theoretical concepts from modern quantum optics and quantum open systems to a large variety of complex systems. Recent examples of such cross-disciplinary investigations are time-resolved

spectroscopy with entangled photons, a quantum-theoretical approach to processes in photosynthesis, non-Markovian effects in organic photovoltaic systems, or control of electron transfer reactions via techniques from cavity-QED. A characteristic feature of his research is that the chemical, condensed matter or biomolecular systems under investigation are not oversimplified, but relevant degrees of freedom are carefully selected and included into the models. In this way, one can identify which of these degrees of freedom are essential for certain dynamical processes in complex systems. Thus, this research offers an intriguing approach to the fundamental question how complexity arises from microscopic principles. A nice example is the cooperative effort with Prof. Minagawa's group at the National Institute for Basic Biology (next door to IMS) showing how advanced graph methods from network science and quantum dynamics of open systems can be combined with sophisticated analyses of molecular structure to gain deeper insights into the functionality of light-harvesting complexes in photosynthesis. At the same time, the unique approach of Prof. Ishizaki combining methodologies from different fields allows one to devise novel ways to use quantum techniques to control complex many-body systems.

Masahiro EHARA

Professor Masahiro Ehara and his group develop theoretical approaches to accurately describe large molecular aggregates. It was fascinating to see, that the group not only applies state-of-the-art computational approaches to tackle important problems, but also plays a leading role in developing new computational methods with large impact also in other fields of research. As a prime example, they devised an innovative inverse design method which was demonstrated by developing functional 1D molecular aggregates and moleculenanoparticle systems. The activities also comprise applications of advanced computational methods to an impressive breadth of studies on electronic structure to better understand and control technologically relevant materials and photo-induced processes. These include functional materials, such as modified single-wall carbon nanotubes, metal nano clusters, and heterogeneous catalysts. The investigations are performed in a larger framework of national and international collaborations.

Conclusion

In conclusion, the Department of Theoretical and Computational Molecular Science at IMS performs science at the highest international level. Each of the different research groups have achieved impressive results in the past years, contributing to a better understanding how functionality of complex molecules emerges from their microscopic structure, how these aggregates interact with their environment or with external fields, and how a deeper understanding of the underlying principles can be used for applications in material design and quantum control. The research environment offered by IMS to these scientific activities is truly exceptional, one the one hand side due to the critical density of exceptional researchers in theory and experiment at IMS, but also by the available infrastructure, in particular the supercomputer facility. The research of the theory groups is embedded into larger national and international collaborative networks, and there is even a nice example of an internal theory-experiment collaboration within IMS. Overall, my visit at IMS was outermost enjoyable and offered ample positive intellectual impressions to me as a non-expert in most of the presented research areas. Like last year, my warm thanks go to Director General, the scientists and the organizational team for the hospitality and for making my stay such a pleasant one.

Heidelberg, 8 May 2024

7-3　協奏分子システム研究センターの評価

7-3-1　David A. Leigh 外国人運営顧問

Prof. Dr. Yoshihito Watanabe

Director General

Institute for Molecular Science

Okazaki

Japan

14th December 2023

Dear Director Watanabe,

Evaluation of Various Groups of the NINS Institute for Molecular Science, Okazaki, Japan

Many thanks for the warm and kind hospitality of you and your colleagues during my on-site visit to the NINS Institute for Molecular Science on 3–8 December 2023. During my visit I discussed with you the response to my previous Report (April 2023) and was given in-depth presentations by Prof. Shuji Akiyama, Director of CIMoS, and other members of CIMoS and other parts of IMS. I also attended an excellent interdisciplinary workshop on molecular machines with leading researchers from all over Japan (and online from Strasbourg), organized by Prof. Iino.

1. Response to my Previous (April 2023) Report

I note the significant steps you have taken in response to the recommendations of my April 2023 report. These include:

1. To address the relatively small size of IMS groups compared to international competitors you are (i) allowing PIs to hire (through funding from their own grants) associate and/or junior associate professors for research; and (ii) the SOKENDAI (graduate school) is being reorganised which you hope will make it more attractive to PhD applicants.

   I hope that these measures prove successful. I believe that the best way to get access to potential graduate schools is to foster closer relationships with universities, as I outlined in my previous Report. But I accept there are practical, and perhaps institutional, reasons why this may be difficult to achieve.

2. To address the substantial gender imbalance amongst PIs I was delighted to learn that you are making three cross-appointment positions at Associate/Full Professor level and that two of these have already been agreed upon. That is a fantastic response and I'm sure will provide role models that will demonstrate to female PhDs and postdocs that a career for them is possible in academic research. I hope that in time that you might also reconsider the removal of the 'no internal promotion' rule for female scientists, in recognition of the unique burden of women in bearing children, as recommended in my previous report. I'm aware that female PhD students and postdocs have mentioned the importance of stability during their late-20s and 30s, when they would (or could) be starting and raising young families. Knowing that they would have to change institution to be promoted is a reason they may not seek a position at IMS.

3. I was also delighted to hear that you intend to offer a PI position to a foreign colleague to establish a satellite lab at IMS. This is a great initiative to bring cultural diversity in the way of thinking at PI level to IMS. I think it will be great for Japanese science generally. I am sure that leading scientists in Europe and the US will follow this development closely!

4. The cross-appointment with the University of Tokyo of Prof. Makoto Fujita, one of the world's leading scientists, is certainly a boost for the international recognition of IMS.

5. I was also impressed with the new multidisciplinary projects you are proposing to bring strengths from different parts of IMS (and elsewhere) together to tackle major scientific problems: Spin-Bioscience—which ranges from the development of novel molecular probes for MRI to magnetic resonance imaging on living organisms— and a project that seeks to leverage IMS's great strengths in photonics and bioscience.

2. Overall impressions

My overall impression of IMS in two visits has been over-whelmingly positive: It is an influential and highly respected institute in the field of the molecular sciences. It is globally renowned for carrying out high quality innovative research, its strong faculty, an excellent research environment, and collaborations with other institutions and universities, all of which make it a leading centre for research internationally. The Institute and Department strengths include that the staff are well motivated and perform at the highest level. The leadership is outstanding. The level of equipment and instrumentation is well above that of many world class laboratories in the USA and Europe. This gives the groups at IMS a significant advantage over competitors worldwide in terms of their ability to tackle the toughest problems in science today. I will not repeat here the other observations discussed in my previous Report.

3. Evaluation of Various Individual Groups of the NINS Institute for Molecular Science

On this visit I had research presentations from 3 members of CIMoS and 2 from other parts of IMS. Two were primarily associated with studies on the molecular basis and mechanisms of biological systems (Akiyama, Okazaki), one working on aspects of materials (Yamamoto) and two working on the application of state-of-the-art spectroscopy to molecular problems (Kuramochi, Kumagai). All of these groups are of very high quality; they tackle important fundamental problems in creative ways and publish their findings in the best international journals.

Prof. Shuji AKIYAMA

PProfessor Akiyama's research focuses on the Circadian clock system in cyanobacteria, in particular the atomic-scale origin of slowness of the cycle and its rhythm, structure and diversity. He is a world leader in these areas, seeking answers to deeply fundamental questions from molecular mechanism to how these extraordinary systems evolved. The group is trying to answer profound scientific questions regarding the way that biology works at the molecular level. The breadth of science being undertaken is remarkable for a single research group, as they seek an understanding of (i) the self-sustained 24 hour oscillation of the system, (ii) the temperature compensation observed, and (iii) the synchronization of the clock. Recent highlights include "*Atomic-scale origins of Slowness in the cyanobacterial Circadian clock*," *Science* **349**, 312–316 (2015), "*Regulation mechanisms of the dual ATPase in KaiC*," *Proc.*

Natl. Acad. Sci. USA **119**, e2119627119 (2022) and "*Elucidation of master allostery essential for Circadian clock oscillation in cyanobacteria*," *Sci. Adv.* **8**, eabm8990 (2022).

Prof. Hiroshi YAMAMOTO

Professor Yamamoto is an international leader in the development of electronics based on π-systems in soft matter. In recent years he has exploited the low dimensionality of the π-electrons to generate materials with a range of different characteristics to silicon. The potential applications of this research range from nano-scale devices to superconductivity and quantum computing. Recent highlights include "*Giant spin polarization and a pair of antiparallel spins in a chiral superconductor*," *Nature* **613**, 479–484 (2023) and "*Highly durable spin filter switching based on self-assembled chiral molecular motor*," *Small* **19**, 2302714 (2023).

Assoc. Prof. Hikaru KURAMOCHI

Associate Professor Kuramochi is an exciting, relatively new, appointment (April 2020) who uses ultrafast spectroscopy to study chemical reaction dynamics. This includes ultrafast spectroscopy at the single molecule level, the development of novel light sources, and the use of advanced ultrafast spectroscopy to study ensembles. Recent highlights include "*Rapid-Scan Resonant Two-Dimensional Impulsive Stimulated Raman Spectroscopy of Excited States*," *J. Phys. Chem. A* **127**, 5276–5286 (2023) and "*Environment-Sensitive Fluorescence of Cot-Fused Perylene Bisimide Based on Symmetry-Breaking Charge Separation*," *Photochem. Photobiolo. Sci.* **22**, 2541–2552 (2023).

Assoc. Prof. Kei-ichi OKAZAKI

Associate Professor Okazaki was a Project Associate Professor at IMS from 2016–2020 and since 2020 has been an Associate Professor at the Research Center for Computational Science. Okazaki's group elucidate the dynamics of biomolecular machines through molecular simulations and other theoretical/computational methods. His growing standing in the field is reflected in his recent co-authorship of an opinion piece on protein folding and folds, from experts in the field ["*Opinion: Protein folds vs. protein folding: Differing questions, different challenges*," *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **120**, e2214423119 (2023)]. Other recent highlights include "*Molecular mechanism on forcible ejection of ATPase inhibitory factor 1 from mitochondrial ATP synthase*," *Nat. Commun.* **14**, 1682 (2023) and "*Structure and mechanism of oxalate transporter OxlT in an oxalate-degrading bacterium in the gut microbiota*," *Nat. Commun.* **14**, 1730 (2023).

Assoc. Prof. Takashi KUMAGAI

Associate Professor Kumagai is another recent appointment, arriving at IMS in 2020. His research focuses on advanced nano-spectroscopy with time- and spatially-confined light. While he continues to build new instruments in his lab, he has made good use of instruments from his previous post in Berlin. Recent highlights include "*Inelastic Light Scattering in the Vicinity of a Single-Atom Quantum Point Contact in a Plasmonic Picocavity*," *ACS Nano* **17**, 10172 (2023) and "*Nanoscale coherent phonon spectroscopy*," *Sci. Adv.* **8**, eabq5682 (2022).

I hope that this short report and my previous longer one are useful to you and your colleagues in thinking about how to continue to develop IMS. It is a truly fantastic institute with excellent scientists doing world class research. It has been a pleasure to visit and

interact with such inspiring people, from the young researchers to the thoughtful generous leadership. I hope to visit again and to collaborate with some of the groups there. I wish you and your colleagues much continued success!

Best wishes,

David A. Leigh FRS

Royal Society Research Professor & Sir Samuel Hall Chair of Chemistry, University of Manchester, UK

14 December 2023

8．研究施設の現状と将来計画

共同利用設備を充実させ，大学等の共同利用研究者の研究支援を行うことは大学共同利用機関の主要な役目のひとつである。1975 年の研究所発足当初から装置開発室と機器センターを設置し，1976 年に化学試料室，1977 年に極低温センターを設置した。さらに 1979 年には電子計算機センターに大型計算機を導入し，1983 年から極端紫外光実験施設（UVSOR 施設）で放射光源装置が運転を開始した。これらの施設では単に設備を設置するだけではなく，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，特別研究部門に以下の 2 つの制度を整備し，分子科学分野のトップレベルの研究推進と研究者層の増強を図っている。(1) 2023 年 4 月より，分子科学分野において最先端の科学を切り拓く世界的研究者である東京大学の藤田　誠卓越教授をクロスアポイントメントで分子科学研究所卓越教授として招へいし，研究に専念できる環境を提供している。(2) 分子科学分野において独創的な研究を行っている教員に対してクロスアポイントメントで分子研教員ポジションを提供し，分子研の先端設備を使った研究に集中的に取り組む時間を提供することとし，現在 3 名を配置している。2023 年度は女性研究者を積極的にクロスアポイントメント教員として受け入れる事を決定し，2024 年 4 月以降，2 名の着任を予定している。

（渡辺芳人）

8-1　極端紫外光研究施設（UVSOR）

8-1-1　はじめに

UVSOR 施設は 1983 年 11 月 10 日に「初点」を発してから 40 年が経過した。その間, 2003 年度の第一期高度化（低エミッタンス化，直線部増強 4→8 か所），2012 年度の第二期高度化（TOP-UP 運転，挿入光源追加，エミッタンス 27→17 nm rad）のように，新規光源開発と先端計測の専門家のコラボレーションにより，UVSOR では 2 度の光源加速器高度化に成功した。1 GeV 以下の低エネルギー放射光施設としては, 回折限界光源に迫る世界最高性能を達成し（電子ビーム低エミッタンス），真空紫外光から軟 X 線領域をカバーする国際競争力をもつ放射光施設として運用している。国際研究力の維持には高い光源性能に見合う実験設備の整備が不可欠であるが, UVSOR-III として 11 年目を迎え，全 13 ビームラインのうち 6 基の先端計測放射光ビームライン設備が成熟し，主として材料科学，光化学，環境エネルギー分野の先端的実験成果の収穫期に入った。また UVSOR の高い光源性能とコンパクトな運転体制の特徴を活かした，独自性の高い特徴的な研究開発が行われており，新規量子ビーム源の開発や回折限界光源の特性を利用したコヒーレント放射光科学も推進している。その他の標準共同利用ビームライン（7 基）においても，国際的に唯一無二の可視光から真空紫外光まで連続した波長可変な分光システムが稼働しており，材料開発研究にて貴重な成果が発信されている。高度化で生まれ変わった現在の UVSOR-III は，国際的にみても特に 10 eV 付近をカバーする真空紫外光領域では希少な第三世代放射光施設で，今後も国際共同研究の持続的な発展を目指す。また中型放射光施設 NanoTerasu と大型放射光施設 SPring-8 とともに国際的な先端放射光施設としての相補的運用と研究主導が求められる。大型･中型･小型の先端放射光施設を国内に有するというコミュニティ総合力は，我が国の国際的にみた優位性である。各施設における光源の波長帯域の相補性だけでなく，ゼロをイチにする学術開拓，研究の厚みを創る学術発展から社会実装までのニーズとシーズの相関とその研究時間スケールの違いによる相補性も重要な因子である。

これまで 40 年来にわたり積み重ねられた貴重な学術資産と，共同利用環境の継続的支援を視野に入れると，次期施設の建設計画（UVSOR-IV：仮）を算段する時期にあり，2018 年度より具体的な検討を進めている。現状の先端研究の活動力を維持すると同時に，今後の放射光利用において先端分析を利活用できるユーザーを育成することや，コミュニティ全般強化へ向けた組織間連携や，未活用分野への支援による研究領域の拡張が重要であり，特に歴史的に放射光利用が普及していない化学・バイオ系への分野展開が国際的な命題である。こうした潜在的放射光利用者となりうる当該分野を長年にわたり支えてきた分子科学研究所への期待は高い。

次期施設は小型放射光を軸としつつも，あらゆる光源（高輝度放射光，自由電子レーザー，高次高調波レーザー等）を多彩に活用できる実験設備を一元集約して提供することで，光計測が研究連携の横串となって多くの異分野を融合し，未踏の学術を広く開拓する「分子機能・量子物性などの複雑不均一系の光計測拠点」としての先端施設と位置付けた。また今後の技術的成熟に応じて，高出力小型レーザー光を新規に入射加速器として用いる計画も検討した。この技術は相補的に VUV 波長帯における自由電子レーザーの併用など，時間・空間軸で極限化されたコヒーレント光源を利用した未踏の新規計測による学術開拓の場としての展開が視野に入る。先端サイエンス分野の細分化の時代においての真の異分野融合は容易ではない。各分野が緻密化・専門化されるに従い多くの専門用語が生成され，独自のコミュニティにおける集中的な議論体制の形成もあり，分野の垣根を超えた議論は極めて難しい時代となった。もはや卓越した俯瞰的視野と大局観を有するような研究者がいたとしても，分野横断による新分野創発の作業は，一個人の能力を超えてしまっている感がある。こうした時代においては，横串として適切な規模の設備・人員を整備した拠点センターが総合的な体制として不可欠である。また光科学は，放射光施設の実績と在り方を見れば明らかなように，あらゆる分野における利便性と拡張性を持ち合わせている。今まさに未開拓の分野に「光」をあて，国際的に見て爆

発的にコミュニティ拡大に繋がるような光利用実験のロールモデルを作り上げることが不可欠である。分子研が設置当初にケミストリー分野への放射光利用学術展開を意識してUVSORを建設し，分野育成に貢献したと同じように，次なる学術開拓を意識した計画を検討している。大学共同利用機関のユーザー支援ノウハウの蓄積と共同研究の実績により，各関連センターと連携した多面的な支援による自由度の高い「高度研究支援環境パッケージ」を提供することができる。特にバイオ系（生物学，農学，薬学，生命科学等）の実験手順では，放射光を利用した実験の前後の評価や試料調製環境の充実が不可欠である。光科学の設備を軸としつつも，周辺の汎用分析器も一元集約する新センターが不可欠である。

こうした背景に基づき，本計画の関連提案を日本学術会議が募集した「未来の学術振興構想」の策定に向けた「学術の中長期研究戦略」の施設計画に提案した。我々の「複雑・不均一系の分子ダイナミクスに挑む量子光科学拠点の構築」は，2023年10月にグランドビジョン「量子ビームを用いた極限世界の解明」の一計画に策定された。また，文部科学省のロードマップ2023へ提案「自律型機能の解明に向けたテーラーメイド光科学研究拠点」を申請した（不採択）。また2023年12月にはUVSOR設立40周年記念事業を開催し，これまでのUVSORを振り返りつつ，持続的に未来へ向けて次期施設の目指すべき姿について議論した。そこでは40周年記念冊子を発行するとともに，コンセプトデザインレポートを執筆した。その概要については後述する。現UVSOR-IIIは次施設建設までへの研究活動の持続性を担保することが責務であるが，同時に，次期施設へ繋ぐための軟X線や真空紫外線を用いたバイオ系の斬新な研究成果の発信を狙い，着実な需要開拓を目指したい。岡崎三機関の基礎生物学研究所，生理学研究所の各研究グループとの共同研究を開始しており，相互連携を強化する政策を進めている。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重要で，低エネルギー帯施設における国際的な発信力を強化したい。こうした計画の経緯は過去の分子研リポート2018 〜 2022もご参照いただきたい。

8-1-2　光源加速器の現状と老朽化対策

現在の光源加速器については，従来の15 〜 20年の設備更新サイクルを鑑みると，2030年付近で大規模な更新が想定され，特に建設当初1983年来，未更新の基本設備への対応が緊迫した課題である。設備トラブルによる不測の運転停止をさけ，国際的にも希少かつ競争力のある貴重な極端紫外放射光源を安定供給し続けることで，多彩な分野の学術発展に資する大学共同利用機関の使命を果たす責務がある。このうち数億円規模の高額設備以外については逐次更新を行ってきているが，過去の履歴から計画的に更新可能な老朽設備（電磁コイル，シンクロコンデンサ，ストレージコンデンサ，クライストロン，シンクロ偏向ダクト真空ベローズの一部）は，今後10年間を目安に所長裁量経費によりその約6割について更新完了させることを2019年度に決定し順次進めている。2022年度からは電力料金の高騰問題から節電対策を検討し，昨年度比で同月毎2~10%の使用量削減に成功した。2023年度も継続して節電に努めている。そんな中，2023年1月頃から入射効率が減少し始め，2023年3月末の運転において入射効率が10%を切る事例が発生した。2023年4月から5月のシャットダウンや調整運転の期間に様々な調査や調整作業を行ったが，明確な原因は特定できなかった。その後も調整作業により入射効率が25%程度まで回復したが，1週間に入射できる電子数に制限があるため300mAの運転を継続できない。そのため2023年度は蓄積電流値を200mAに下げて運転した。現時点でも原因の特定には至っておらず，2024年度も200mAの運転を継続する。低電流運転は，低ノイズ計測や易損傷系の試料を扱うユーザーなど一部には歓迎する声があるものの，大多数のユーザーは300mA運転を切望している。今後は，シンクロトロンパートを大気開放して内部を確認できれば原因究明に向けて大きく前進できるが，偏向部ダクトが真空漏れを起こしており，大気開放によって深刻な真空漏れを誘発する恐れがあるため，現時点では大気開放

ができない。リスク低減のために新たな偏向部ダクトを製作しており，2025 年初めに納品予定である。2025 年 4 月のシャットダウン期間に偏向部ダクトを全て新品に交換し，異常原因の特定に結びつけたいと考えている。そのほかの老朽化対策の状況については割愛する（第 82，83 回運営委員会資料を参照）。

他機関連携については，マスタープラン 2020 での協力体制方針を継承し，2023 年度から KEK-PF，UVSOR，HiSOR さらに名古屋大 SR センターの光源部門が共同で SR 加速器情報交換会を月一回程度の間隔で開催し，研究者から技術職員までが参加し，それぞれの施設の運転状況や技術開発への取り組みなどを報告している。技術情報の交換による各施設職員のレベルアップ，要素技術・保守部品などの共通化による維持管理コスト低減，将来計画へ向けた共同技術開発などを狙いとしている。

一方，開発研究の視点で新規光源探査や量子ビーム開発とその利用にかかる研究は，今や UVSOR の独創性の代名詞とも呼べるもので，多彩な学術利用あるいは産業利用の展開が期待されている。こうした研究は，大型施設では通常の放射光ユーザーのための定常運転への影響があるため困難であるが，小型施設ならではのメリットとして，光源パラメータ操作の自由度が高いことや，週末実験などで定期的な実験環境が与えられていることがあげられる。2020 年度に，平 准教授が着任し，パルスガンマ線発生と陽電子消滅によるビーム利用研究を推進している。前述のように特殊運転が必要な実験は，ユーザー利用の無い週末あるいは特定の専用運転週をユーザー利用週の間に設定して運営してきた。今後の需要バランスを鑑みて，ガンマ線利用実験が通常のビームタイムで実施できるように，2022 年春に蓄積リングの電子バンチ軌道を新たに設計し，新軌道で定常運転することに成功した。その他，ここ 1–2 年は，加藤特任教授（クロアポ）らによるタンデムアンジュレータの特性を活用した斬新な光干渉実験等も行われているが，通常の放射光利用と大きくパラメータが異なるために，他ユーザーの影響がない週末に限定して実施している。助教 2 名の転出等により加速器関連のスタッフ不足に陥っている。共同研究者であるパワーユーザーに兼任職を依頼することで人的補填とし，こうした先駆的な独自研究への対応として特殊運転業務を運用している。安定な加速器運転は全ての放射光利用研究に関わるため，中長期的な持続性担保のために早急にスタッフ補強のための人事を進めたい。

8-1-3　ビームラインと観測系利用状況

ユーザーニーズの観点から 2023 年度に BL2B（分子固体用光電子分光）をシャットダウンし，現在ビームラインは 13 基が稼働している。海外からの第一線の研究者が利用に来るような競争力のあるアンジュレータビームライン 6 基を中心に実験設備の重点整備を進めている。特に真空紫外分光，光電子分光，軟Ｘ線吸収分光は物性・機能研究の点で世界的競争力がある。ビームライン実験設備については，国際的な動向を鑑みて 10 年程度の先端開発研究サイクルに後れを取らぬように，各ビームラインの利用状況等を踏まえた設備の高度化が必要で，分子研予算と外部研究費等により開発研究を継続してきた。開発が終了したビームラインからユーザー利用が開始されているが，今後は国際利用率を増加させる方針である。

軟Ｘ線 BL6U では，2020 年から立ち上げ中の光電子運動量顕微鏡の調整を進めつつ，デモンストレーション実験を協力研究により推進している。2022 年度に二次元スピン検出ユニットを導入し，スピン分解機能を付加した同顕微鏡装置の最終設備開発が始まった。さらに，低エネルギー VUV の BL7U の光源をブランチ化して同顕微鏡に導入する機構を立ち上げ，直入射光源による偏光依存実験に成功している。

また汎用設備であるベンディングラインにおいても，国際的に唯一無二の波長帯をカバーする光反射・吸収測定設備を提供しており，貴重な材料物性評価の成果が発信され続けている。ベンディングラインは設備の希少性と稼働率を鑑みて将来計画を立て，アンジュレータ光源の先端ビームラインとのバランスを取りつつ運用を継続していく。最

近の成果として以下の 6 点を取り上げる。いずれもこれまで見えなかったものを「観る」ことにより「解る」につなげた研究である。

[BL1U]　蓄積リング内の電子数を漸次減らし，１つだけの電子からの放射光発生に成功

単一電子からの放射光観測により放射光発生原理の実証的な理解が進展した

[BL3U]　UVSOR オリジナルの液中軟Ｘ線 XAFS による糖類の水和構造の温度依存性精密計測

理論計算と組み合わせセロビオースと溶媒の相互作用を解明，バイオマス変換技術の進展に寄与

[BL4U]　走査透過Ｘ線顕微鏡（STXM）を核とした複合分析によるハヤブサ２帰還試料の解析

小惑星中で有機物を含有する鉱物環境を特定，宇宙からの生体分子の経路解明の重要な知見

[BL4U]　STXM による全天候タイヤ（アクティブトレッドゴム）の機能可視化

SiO_2 周囲に吸着する水を可視化し，最適な吸湿状態を形成するイオン化技術確立の決定的知見に

[BL6U]　光電子運動量顕微鏡（PMM）によるカゴメ超伝導体 CsV_3Sb_5 の Fermi 面計測

V と Sb が協力し超伝導状態となることを解明，従来説（V が主体）を覆す

[BL3B]　ベンディングビームラインにおけるシンチレータなどの材料評価計測

福島第一原子力発電所事故における内部調査委に使われる新規材料開発で有効活用されている

2023 年前期の申請件数は 106 件（うち有償利用 12 件，キャンセル 5 件を含む）で，2023 年後期の申請件数は 104 件（うち有償利用 12 件，協力研究 3 件，キャンセル 1 件を含む）であった。2023 年度は，シャットダウン 10 週，調整運転 2 週，マシンスタディ 4 週，ユーザータイム 36 週（うちシングルバンチモード 2 週）であった。マスタープラン 2020 での協力体制方針から HiSOR-UVSOR 合同セミナーを月 1 回ペースで開催している。また技術職員が主導して「開発研究多機能ビームライン検討会（月 1 回定例開催）」による機関間の連携活動を強化している。

8-1-4　中長期計画（次期施設計画）

本施設規模（小型リング型高輝度放射光施設）の光源加速器技術と性能は，UVSOR-III にて実証されたように既に成熟期にあり概ね極限化されている。そこで現状のリング型光源加速器性能を基本骨格とし，利用ニーズに即した組織体制の在り方に重点を置く計画とした。近代サイエンスにおいて欠かせない異分野融合を真に具現化するために必要な拠点スタイルとインフラストラクチャー設備群を検討した。これは奇しくも分子科学研究所の設立時の理念として，ケミストリー分野のための放射光施設を建設する必要性を提示したコンセプトと合致する。つまり光科学を軸とする新たな学術創成計画の第二弾と捉えていただければ幸いである。

光源技術の発展により，今や放射光のみならずレーザー光源（自由電子レーザー FEL や高次高調波 HHG レーザー）を自在に利用できる施設が求められている。特に EUV 領域（100 eV 程度以下）の波長帯は現時点では放射光よりもレーザー光源の方が多面的に高性能である。これまで HHG レーザーは安定性や技術的な困難さから汎用的に普及するには至っていないが，今後は世界に先駆けて我が国の共同利用施設が主導することで，広く HHG レーザーを活用するフェーズに移行する必要がある。一方で，より短波長の光源としては放射光の優位性は揺るぎなく，物性や機能を研究するために不可欠な広帯域の光の利用には，これらの光源（SR, FEL, HHG）を網羅する設備が欠かせない。

2023 年度は 40 周年事業に合わせ，次期計画を明文化し各実験手法を軸として次期施設コンセプトデザインレポートをまとめる作業を行った。そのために必要な手法や分野毎の研究会を以下のように可能な限り開催した。

2023. 7：Seeds and Needs for Tomorrow’s Synchrotron Radiation Photoelectron Spectroscopy Research

2023. 9：イオン液体インフォマティクスの発展に向けて

2023. 9：UVSOR–SPring8 赤外ビームライン合同ユーザーズミーティング

2023.10：Frontier of Soft X-Ray Spectroscopy for Chemical Processes in Solutions（MaxLab 共催）

2023.11：NINS 先端光科学研究分野プロジェクト研究会「放射光の量子性・干渉性に基づく革新的計測手法の探索」

2023.12：UVSOR40 周年行事，第 6 回次期施設建設検討会（バイオ系における光科学の展開）

コンセプトデザインレポート全容は web 開示しているのでご高覧いただきたい。リング型放射光の仕様は，UVSOR-III よりも一回り大きな省エネ小型の高輝度光源 UVSOR-IV を新地に刷新する。光源のテーラーメイド利用のために，運営自由度のある小型施設規模が不可欠で，成熟した各先端技術を導入しオペランド・イメージング手法への適用に耐えうる安定性を重視した設計である。SX，VUV の長波長帯域では回折限界性能の高輝度光源となりレーザーを組み合わせたコヒーレント特性を利用する最先端研究が行える。また次世代の最新技術である小型レーザー加速器による入射器を世界に先駆けて導入し，50 年後も持続可能な長期的な展開を視野に入れる。次期計画のコンセプト概要の詳細はリンク先をご高覧いただきたい。以下にミッションおよび目標とタスクを記す。

ミッション：先端光計測による生命と物質の謎の解明

Knowledge innovation by seeing the unseen“観るから解るへ”

戦略目標：

省エネ／高輝度小型リング放射光源設備による新センター建設

サイエンスニーズ視点で光のテーラーメイド利用による未開拓分野の啓発

ゼロをイチにする学術開拓的・異分野融合型研究の推進

次世代への技術伝承と人材育成

研究者・技術者の相補性強化“技術職員の待遇改善”

https://www.uvsor.ims.ac.jp/uvsor4/

タスク：

SR，HHG，FEL の自在提供による先端開発と最新技術の協奏

付帯分析機器群によるマルチモーダル実験設備の複合研究支援

ワンルーフ集約された研究環境による融合型研究の促進

知識・技術を持ち寄り新しい発想を生み出す異分野交流の潮流

シニアと若手が切磋琢磨する光道場による相互作用の仕掛け

本報告は，UVSOR 施設運営委員会（2018 年度より年 2 回），UVSOR 将来検討ワーキング・小委員会（2018 年 10 月以降逐次），UVSOR 利用者懇談会（2018 年度より年 1 回），国際諮問委員会や運営顧問会議（2019 年 12 月，2024 年 2 月）における意見交換を元に改訂してきたものである（過去リポート参照）。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 2022 参照）。

8-2　機器センター

機器センターは，先端機器の開発・維持・管理・運用，汎用的な物性・分析・分光機器の維持・管理・運用，所員ならびに所外の協力研究・施設利用者への技術支援を主な業務としている。先端機器開発に関しては，研究所内外の共同利用者と協力して，特色ある測定装置の開発とその共同利用を行っている。また，汎用的な化学分析機器，構造解析機器，物性測定機器，分光計測機器，および液体窒素・ヘリウム等の寒剤供給装置等の多様な機器の維持・管理を行い，全国の共同利用者が分子科学研究を推進するための研究支援を担っている。一方，大学連携研究設備ネットワーク（設備 NW）の幹事機関として，機器センター所有の多くの機器を設備ネットワークに登録・公開し，この事業の運営を主導し事務局を担当している。また，2021 年度からは文部科学省受託研究マテリアル先端リサーチインフラ（Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology in Japan, ARIM）事業の「マテリアルの高度循環のための技術」領域のスポーク機関，2022 年度からは同事業運営機構横断領域物質・材料合成プロセス技術分野の責任機関として本国家プロジェクトの設備共用・DX 拠点を務めている。

2023 年度の機器センターの人員は以下のようである。センター長は 2018 年度から横山利彦が務め，分析チームリーダー･中村敏和（2019~, 2023 年 11 月から研究力強化戦略室･特任部長が主務），合成チームリーダー･鈴木敏泰（2019~），主任研究員･湊丈俊（2020~）の 3 名が先端的な共同利用を推進している。この 3 名は，先端的･開発的な共同利用（協力研究並びに施設利用）の推進に加え，俯瞰的視野に立った機器センターの運営，設備の維持・管理・開発・更新を行い，さらには，大学共同利用機関法人としての大学等への組織的な機能強化貢献をミッションとする。専任技術職員は，高山敬史主任技師，藤原基靖主任技術員，上田正主任技術員，浅田瑞枝主任技術員，岡野芳則技術員，賣市幹大技術員，宮島瑞樹技術員，長尾春代技術員に加えて，2023 年 4 月より平野佳穂技術員が新たに採用され，計 9 名が在籍している。ユニット長は 2023 年度も繁政英治技術推進部長が兼任する体制とした。

さらに，技術系特任専門員 1 名（伊木志成子），技術支援員 1 名（藤川清江），事務支援員 1 名（兵藤由美子）が配置されていたが，2024 年 2 月に藤川清江が退職し，2024 年 3 月から技術系特任専門員として石田向日葵が新たに採用された。また，育児休暇中の事務支援員･内田真理子を 2024 年 4 月の復帰以降技術支援員に配置換することとした。以上に加えて，設備 NW と ARIM の 2 事業において，運営マネージャー 4 名［石山修，中本圭一，太田康仁，賀来美恵］が配置され，事務支援員は，2023 年 4 月から育休中の内田真理子の補填として遠山 遊が復帰しており，計 3 名（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，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を導入した。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 年度初頭に完成予定である。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。

8-3　装置開発室

装置開発室は，分子科学分野の研究者と協力し最先端の研究に必要となる装置や技術を開発することと，日常の実験研究において必要となる装置や部品類の設計・製作に迅速に対応する，という二つの役割を担っている。製作依頼件数は年間 400 件超に及ぶ。新しい装置の開発では技術職員が研究者と密接に連携し，また，日常の実験研究で必要となる工作依頼などについては，機械加工技能を持つ技術支援員が中心となり，対応している。

2021 年度より新たに有償利用制度を設けることで，分子研外部からの製作・開発依頼受付を持続可能なシステムとして運用開始し，海外からの依頼も含めて対応できる体制を整えつつある。また従来からある施設利用については，他の施設と同様の形で継続している。

装置開発室は大きく機械工作を担当するメカトロニクスセクションと電子回路工作を担当するエレクトロニクスセクションに分かれている。メカトロニクスセクションでは従来の機械加工技術の超精密化に向けた取り組みに加え，近年では，リソグラフィなど非機械加工による超微細加工技術の習得に取り組んでいる。エレクトロニクスセクションでは，高速化や多機能化が進む電子回路の需要にこたえるために，プログラマブル論理回路素子を用いたカスタム IC の開発等に取り組んでいる。これに加えて，3D プリンタ，CAM やシミュレーションなどのデジタルエンジニアリングの導入を進めている。

装置開発室の設備については，創設から 40 年以上が経過し，老朽化，性能不足，精度低下などが進み，設備の更新は急務となっている。2013 年度には，ナノテクノロジープラットフォーム事業の一環として，マイクロストラクチャー製作・評価のための先進設備を導入することができた。また，2019 年度には 5 軸加工機と電子ビームリソグラフィー装置の導入を行った。2020 年度は，附属 3 棟の改修により，工作環境およびクリーンルームの整備を行うこともできた。今後も，装置開発室の将来計画・将来像の検討を進めながら，その方向性を強く意識しつつ，日常の実験研究を支えるための基盤的設備，先端技術習得のための先進設備，双方の更新・導入を進める。また，他機関との連携や，他機関共用設備の利用も積極的に検討する。

8-4　計算科学研究センター

計算科学研究センターは，2000 年度に分子科学研究所の電子計算機センターから岡崎共通研究施設の計算科学研究センターへの組織改組が行われ，現在は分子科学研究所，基礎生物学研究所，生理学研究所の 3 研究所により運営されている。従来の共同利用に加えて，理論，方法論の開発等の研究，さらに，研究の場の提供，ネットワーク業務の支援, 人材育成等に取り組んでいる。2023 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 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 E7763），同一 OS（Rocky Linux 8.7）を有し，バイナリ互換性を保ち一体的に運用される。システム全体として総演算性能 6.68 Pflops で総メモリ容量 224 TB である。主力の演算サーバは Type C と呼ぶもので，2.45 GHz のクロック周波数をもつ 128 コア，256 GB メモリ構成の 804 台である。仮想ノード単位とコア単位の利用形態のジョブの大半は Type C で実行される。Type F はメモリを 1 TB に強化した 14 台であり，他は Type C と同一である。多くのメモリを必要とするジョブが仮想ノード単位で実行される。Type G は 1 ノードあたり 8 GPU を有する 16 台であり，筐体が違うものの他は Type C と同一である。インターコネクトは InfiniBand アーキテクチャを採用し，全台数を 100 Gb/s で接続しており，大規模な分子動力学計算などノードをまたがる並列ジョブを高速で実行することができる。これらクラスタ演算サーバは 14.8 PB の容量を持つ外部磁気ディスクを共有し，Lustre ファイルシステムを構成している。

ハードウェアに加え，利用者が分子科学の計算をすぐに始められるようにソフトウェアについても整備を行っている。量子化学分野においては，Gaussian，GAMESS，Molpro，TURBOMOLE，分子動力学分野では，Lammps，GROMACS，Amber などがインストールされている。これらを使った計算は全体の 1/3 強を占めている。

共同利用に関しては，2023 年度は 297 研究グループにより，総数 1,302 名（2024 年 2 月現在）におよぶ利用者がこれらのシステムを日常的に利用している。近年，共同利用における利用者数が増加傾向にあり，このことは計算科学研究センターが分子科学分野，物性科学分野，生物物理分野において極めて重要な役割を担っており，特色のある計算機資源とソフトウェアを提供していることを示している。また最近は，錯体化学分野や有機化学分野など幅広い分野の研究者の利用も増加している。

計算科学研究センターは，国家基幹技術の一つとして位置づけられているスーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム，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, 2023 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「シミュレーション，インフォマティクス，AI によ

る生体分子科学の最前線」と２つのスクール「第 13 回量子化学スクール」と「第 17 回分子シミュレーションスクール―基礎から応用まで―」を開催した。また，東北大学金属材料研究所，東京大学物性研究所，大阪大学エマージングサイエンスデザイン R3 センターと協力し，我が国の最先端の計算物質科学技術を振興し，世界最高水準の成果創出と，シミュレーション技術，材料情報科学技術の社会実装を早期に実現するため，計算物質科学協議会を設立・運営し，分野振興を行っている。

2023 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）

8-5　生命創成探究センター

生命創成探究センター（Exploratory Research Center on Life and Living Systems = ExCELLS）は，自然科学研究機構の更なる機能強化を目指すために，岡崎統合バイオサイエンスセンターを中核として機構の組織を再編・統合して2018年4月に設置された機構直轄の組織である。本センターでは，「生きているとは何か？」という人類の根源的な問いの解明に向けて，生命の仕組みを観察する新たな技術を開発するとともに，蓄積されていく多様な情報の中に隠されている意味を読み解き，さらに合成・構成的アプローチを通じて生命の基本情報の重要性を検証する活動を行っている。こうした「みる・よむ・つくる」のアプローチを基軸に，極限環境生命の研究者とも協力しながら異分野融合型の研究を進め，生命の設計原理を探究する。この目的のもとに，国内外の大学・研究機関の連携によりコミュニティ横断型の共同利用・共同研究を推進する。

2022年度からは，新たに先端共創プラットフォーム及び連携強化プラットフォームを実施し，共同利用・共同研究の活性化を図っている。この２つのプラットフォームにより，国内外の大学・研究機関との共同利用・共同研究を一層強化するとともに，産業界との共創の推進も目指している。

先端共創プラットフォームでは，センターに所属する教員と外部の研究機関が一体となって研究チームを構成し，設定された研究課題に共創的に取り組むExCELLSプロジェクト研究を実施している。2022年度に始動した「物質－生命の境界探査」チームに加え，2023年度からは新たに「オルガネラの時空間アトラス編纂」チームを立ち上げ，本格的に活動を開始した。「物質－生命の境界探査」チームでは，生命機能を維持するために必要となる，本質的あるいは最小の機構や原理を解き明かすために，極限環境に生きる生物，ウイルス等における生物間相互作用や環境応答に関する分子複合体の形態･機能･動態を観測し，物質－生命の境界の体系的理解を目指す研究を実施している。また，「オルガネラの時空間アトラス編纂」チームでは，膜オルガネラに加え，近年の非膜オルガネラ同定に伴い拡張しつつあるオルガネラ研究を推進し，その構成を明らかにすると共に，様々な要因によって引き起こされる再編成，ダイナミクス変換や機能発現制御を解き明かす研究を実施している。各チームはExCELLSの研究者が中心となって進めるサブチームと，外部の大学の研究者から提案された研究課題を進めるサブチームで構成されており，互いに共創しながら研究を進めることで，新たな研究者コミュニティの創出や，広い視野を持つ若手研究者の育成を目指している。

連携強化プラットフォームでは，国内外の大学・研究機関との組織間のネットワークの強化を図り，連携構築を戦略的に推進している。糖鎖生命科学ユニットでは，共同利用・共同研究拠点である「糖鎖生命科学連携ネットワーク型拠点（J-GlycoNet）」の活動を東海国立大学機構糖鎖生命コア研究所及び創価大学糖鎖生命システム融合研究所と連携して進めている。さらに，このネットワーク型拠点を基盤として，文部科学省 大規模学術フロンティア促進事業「ヒューマングライコームプロジェクト」を開始した。また，先端創薬科学ユニットでは，文部科学省・先端研究基盤共用促進事業（先端研究設備プラットフォームプログラム）NMRプラットフォームの活動を分子科学研究所より引き継ぐとともに，日本医療研究開発機構 生命科学・創薬研究支援基盤事業（BINDS）の活動を開始し，名古屋市立大学の創薬基盤科学技術開発研究拠点とも連携して，先端的な創薬基盤技術等の創出を目指す活動に取り組んでいる。

さらに，今年度より，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）」に参画することとなり，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の新規ユニットとして，「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，活動を開始した。

これらの連携活動を推進する上で，研究戦略室に広報担当の特任准教授 1 名を新たに配置し，広報･IR のみならず，共同利用・共同研究拠点や MOU 締結先研究機関等との連携の強化，及びセンター全体のマネジメント・統制体制の強化を図った。

2023 年度も前年度に引き続き，本センター以外の研究機関に所属する複数の研究者が研究グループを構成したうえで，新規な研究手法・測定手法の開発等を通じて分野横断的な研究を推進する連携研究グループの活動，並びに機構外の研究者がセンター内の複数のグループとともに異分野融合研究に取り組む ExCELLS 課題研究（一般･シーズ発掘）を実施した。

一方，極限環境生命探査室では深海，地下，極地，大気圏外などにおける生命体の活動を探査・解析することを目指して生命の始原形態と環境適応戦略を理解する研究を実施する。海洋研究開発機構と連携した深海・地下生命研究グループ，慶應義塾大学先端生命科学研究所と連携した極限環境耐性研究グループと極限環境生命分子研究グループ，物質－生命境界領域研究グループが活動している。加えて，京都大学複合原子力科学研究所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，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を 4 月に締結し，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。分野横断型の研究集会（ExCELLS シンポジウム）や若手が主体的に企画運営する研究集会（ExCELLS 若手交流リトリート）をオンライン開催し，海外の研究者との研究交流を図った。また，学術交流協定を締結しているアカデミアシニカ（台湾）の研究者との共同利用研究を実施した。デンマーク政府の International Network Program の支援を受けている学術交流の一環として，Aarhus University の Interdisciplinary Nanoscience Center（iNANO）を訪問し，シンポジウムを開催した。デンマークと日本の学術交流の発展に向けて，iNANO と分子研・ExCELLS の研究活動紹介と今後の共創活動に関する意見交換を行った。さらに，韓国科学技術院生命科学技術大学（KAIST）と新たに学術交流協定を締結し，11 月に韓国にてキックオフのミニシンポジウムを開催した。

分子科学研究所を兼務している教員のうち，青野重利教授が副センター長をつとめるとともに金属生命科学研究グループを主宰し，加藤晃一教授が研究戦略室長をつとめるとともに生命分子動秩序創発研究グループと極限環境生命分子研究グループ，奥村久士准教授が生命分子動態シミュレーション研究グループ，古賀信康教授が生命分子創成研究グループをそれぞれ主宰している。

9．資　　料

9-1　歴代所長

初　代　　赤松　秀雄（1975.4.22 ～ 1981.3.31）

第二代　　長倉　三郎（1981.4.1 ～ 1987.3.31）

第三代　　井口　洋夫（1987.4.1 ～ 1993.3.31）

第四代　　伊藤　光男（1993.4.1 ～ 1999.3.31）

第五代　　茅　幸二（1999.4.1 ～ 2004.3.31）

第六代　　中村　宏樹（2004.4.1 ～ 2010.3.31）

第七代　　大峯　巖（2010.4.1 ～ 2016.3.31）

第八代　　川合　眞紀（2016.4.1 ～ 2022.3.31）

第九代　　渡辺　芳人（2022.4.1 ～　　）

9-2　運営顧問（2004 ～）

2004 年度以前は評議員による諮問を行った。

（https://www.ims.ac.jp/publications/report2020/920.pdf）

（https://www.ims.ac.jp/publications/report2020/930.pdf）

加藤　伸一（豊田中央研究所代表取締役）'04.5.19 ～ '10.3.31

小間　篤（高エネルギー加速器研究機構理事物質構造科学研究所長）'04.5.19 ～ '06.3.31

土屋　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 ～ '25.3.31

高田　昌樹（東北大学国際放射光イノベーション・スマート研究センター教授／光科学イノベーションセンター理事長）'23.4.1 ～ '25.3.31

谷口　功（国立高等専門学校機構理事長）'23.4.1 ～ '25.3.31

9-3　外国人運営顧問（2004 ～）

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

9-4　運営会議委員（2004 ～）

1975 ～ 1981 年は運営に関する委員会委員

(https://www.ims.ac.jp/publications/report2020/970.pdf)

1981 ～ 2004 年は運営協議員による諮問を行った。

(https://www.ims.ac.jp/publications/report2020/980.pdf)

◎　議長　　人－人事選考部会に属する委員
（副）　副議長　　共－共同研究専門委員会に属する委員

氏名・所属（当時）		第 1 期	第 2 期	第 3 期	第 4 期	第 5 期	第 6 期	第 7 期	第 8 期	第 9 期	第 10 期
阿久津　秀雄	阪大たんぱく質研所長	○共									
阿波賀　邦夫	名大院理教授	○人	○人								
太田　信廣	北大電子科研教授	○人									
加藤　隆子	核研研究・企画情報セ教授	○									
榊　茂好	京大院工教授	○人									
田中　健一郎	広大院理教授	○人	○（副 ）人								
寺嶋　正秀	京大院理教授	○人	○人								
西川　恵子	千葉大院自然教授	○（副）									
藤田　誠	東大院工教授	○	○								
前川　禎通	東北大金材研教授	○	○								
宇理須　恆雄	分子研教授	○共	○共	◎共							
小川　琢治	分子研教授	○	○ ~'07.9.30								
北川　禎三	分子研教授（岡崎統合バイオ）	○ ~'05.3.31									
岡本　裕巳	分子研教授	○ '05.4.1~	○人	○人	○共	○共	◎人・共	◎人	○	○	○人
小杉　信博	分子研教授	○人	○	○人	◎人・共	◎共	○共	○共			
小林　速男	分子研教授	◎共	○共 ~'07.3.31								
大森　賢治	分子研教授		○ '07.4.1~	○	○人	○人	○	○	○		
田中　晃二	分子研教授	○人・共	○人・共	○共	○						
永瀬　茂	分子研教授	○人	○人	○	○						
西　信之	分子研教授	○共	○人・共	○人・共							
平田　文男	分子研教授	○	○	○人	○						
松本　吉泰	分子研教授	○人	○人 ~'07.3.31								
横山　利彦	分子研教授		○人 '07.4.1~	○人	○人	○	○	○	○人	○人	○共
薬師　久彌	分子研教授	○人	◎共 '07.4.1~	○共							
斉藤　真司	分子研教授				○人	○人	○人	○共	◎共	○共	○共
大島　康裕	分子研教授				○	○人	○				
魚住　泰広	分子研教授				○共	○人・共	○人・共	○共	○共	○共	○共
青野　重利	分子研教授				○人・共	○人・共	○共	○共	○人・共		
加藤　晃一	分子研教授					○	○人	○人	○	○	

氏名・所属（当時）		第 1 期	第 2 期	第 3 期	第 4 期	第 5 期	第 6 期	第 7 期	第 8 期	第 9 期	第 10 期
加藤　政博	分子研教授					○					
山本　浩史	分子研教授					○	○人	○人	○共	○共	○人
秋山　修志	分子研教授						○	○人	○人	◎共	◎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	○
鹿野田一司	東大院工教授								○人	○人	
袖岡　幹子	理研主任研究員								○	○	
谷村　吉隆	京大院理教授								○	○	
中井　浩巳	早稲田大理工教授								○人	○人	
藤井　正明	東工大科技創成院教授								○共	○共	
江原　正博	分子研教授								○人	○人	○
秋吉　一成	京大院工教授									○人	○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
福井　賢一	阪大院基礎工教授									○人	○人
村越　敬	北大院理教授									○(副)	○(副)共
飯野　亮太	分子研教授									○人	○人
石崎　章仁	分子研教授									○人	○人
岩佐　義宏	東大院工教授										○
高橋　聡	東北大多元研教授										○共
唯　美津木	名大物科国際研教授										○共
真船　文隆	東大院総合文化教授										○
吉澤　一成	九大先導研教授										○人

第 1 期　；'04. 4. 1 ～　'06. 3.31

第 2 期　；'06. 4. 1 ～　'08. 3.31

第 3 期　；'08. 4. 1 ～　'10. 3.31

第 4 期　；'10. 4. 1 ～　'12. 3.31

第 5 期　；'12. 4. 1 ～　'14. 3.31

第 6 期　；'14. 4. 1 ～　'16. 3.31

第 7 期　；'16. 4. 1 ～　'18. 3.31

第 8 期　；'18. 4. 1 ～　'20. 3.31

第 9 期　；'20. 4. 1 ～　'22. 3.31

第 10 期；'22. 4. 1 ～　'24. 3.31

9-5　大学共同利用機関法人自然科学研究機構第４期中期目標

（前文）法人の基本的な目標

学術研究は，真理の探究と文化の創造を目指して行われる知的創造活動であり，科学技術や産業，経済，教育，社会などの発展の基盤となるものである。大学共同利用機関法人自然科学研究機構（以下「本機構」という）は，宇宙，エネルギー，物質，生命等に関わる自然科学分野の中核的研究機関（大学共同利用機関，以下「機関」という）を設置・運営することにより，自ら国際的・先導的な学術研究を進めるとともに，保有する最先端設備の共同利用や先導的共同研究の場を全国の大学･研究機関（以下「大学等」という）の研究者に提供し，我が国の大学等の自然科学分野を中心とした学術研究の発展に貢献する。

具体的には，本機構が分野の異なる機関を複数持つ強みを活かし，各々の分野を超えて広範な自然の構造と機能の解明に取り組み，自然科学の新たな展開となる新しい学問分野の創出とその発展を図るとともに，これらをリードする若手研究者を育成する。また，最先端研究の現場を大学院教育にも広く開放し，次世代の学術研究を担う人材を育成する。加えて，自然科学研究が明らかにした自然が持つ多彩かつ深遠な世界を社会に向けて発信し，市民の広い関心と学術研究への理解を得る。さらに，若い世代の理科への関心を促す出前授業を行うなど，社会的な貢献も積極的に実施する。

本機構は以上を基本的なミッションとし，機構長のリーダーシップの下，急速に進む世界の研究状況下にあって先導的な役割を果たすべく，不断の組織改革や DX による研究システム改革等を通じて，新しい時代に向けた共同利用・共同研究機能強化を図る。

特に，第４期中期目標期間においては，国内外における異分野連携活動の促進，これらを支える研究者の多様性の確保，大学との組織的連携ネットワークを通じた大学研究力強化への貢献，IR による共同利用・共同研究の戦略的推進，研究データの集約化によるデータ駆動型サイエンスへの展開，等を重点的に進める。

これらを推進する体制整備のひとつとして，新分野創成センターの役割を見直し，各機関の枠を超えた異分野連携による新分野の創成に加え，基礎研究から生まれた新たな「知」の持つ社会貢献への可能性を追求する。また，異分野連携研究を国際的に展開するため，国際連携研究センターの活動を更に推進するとともに，機関に研究者が互いに触発する交流空間を形成する。

さらに，本機構は，他の３つの大学共同利用機関法人及び国立大学法人総合研究大学院大学とともに「一般社団法人 大学共同利用研究教育アライアンス」（以下「アライアンス」という。）を設立し，同アライアンスが企画する取組に参画することにより，異分野融合による研究力の強化や人材育成の充実，運営の効率化などの課題に対して，法人の枠組みを超えた取組を一層推進する。

◆　中期目標の期間

中期目標の期間は，令和４年４月１日から令和 10 年３月 31 日までの６年間とする。

Ⅰ　教育研究の質の向上に関する事項

１　研究

（１）各分野の学術研究を先導する中核拠点として，国際的な研究競争の激化や国際協力の進展等の動向を踏まえながら，大規模プロジェクトをはじめとした世界最先端の学術研究プロジェクト等の推進を図り，世界最高水準の研究成果を創出して，当該分野における我が国のプレゼンスを高める。①

（２）各分野の特性を踏まえつつ，学術的又は社会的な要請を踏まえた学術研究を戦略的に推進し，その卓越性を強化する。時代の変化にかかわらず，継承・発展すべき学問分野に対して必要な資源を確保する。②

（３）若手，女性，外国人など研究者の多様性を高めることで，知の集積拠点として，また各分野の研究者コミュニティの中核として，持続的に新たな価値を創出し，発展し続けるための基盤を構築する。⑤

２　共同利用・共同研究

（４）実験施設，研究設備，情報インフラ・データ基盤等の研究基盤について，ユーザーのニーズを的確に把握し，かつ，関係機関との連携・分担等を考慮した上で，高度化，利用の利便性向上，研究の DX への対応等を適切に進め，共同利用機能の充実を図る。⑥

（５）文献，標本，バイオリソース等をはじめとした学術資料について，学術的価値を踏まえた適切な保存・維持管理を行うとともに，関係機関との連携・分担を考慮しつつ，強みを持つ分野の資料，利用ニーズの高い資料等の収集・整備を戦略的に進めるなど，共同利用機能の充実を図る。

各分野における共同利用・共同研究体制の中核機関として，データ駆動型サイエンス・オープンサイエンスの基盤となるデータの収集，公開・提供，利活用等への対応について，方針を明確化し，戦略的な対応を図る。⑦

（６）各分野における研究コミュニティの中核として，新たな課題に対応するための研究者グループの組織化等を支援・促進するとともに，組織的連携の拡充，クロスアポイントメントによる人的交流の拡大など，大学等との組織間ネットワークの強化を図る。さらに，これらのネットワークを活用し，本機構が包含する自然科学分野における大学の研究力強化にも貢献する。また，競争力の高い海外の研究機関等との連携構築を戦略的に推進し，これら機関との研究者交流等を促進する。

異分野融合の促進等をも視野に入れ，大学の共同利用・共同研究拠点との連携による共同利用・共同研究機能のネットワーク化を推進する。⑩

３　教育・人材育成

（７）総合研究大学院大学との緊密な連係･協力による大学院教育について，大学共同利用機関が有する優れた研究環境を活用し，他大学の大学院教育との差別化，個々の学生のニーズへのきめ細かな対応等により，その強みを伸ばし，優秀な学生の獲得につなげる。連携大学院制度，特別共同利用研究員制度等による大学院教育への協力について，受入れ学生に対し，先端的・国際的な共同研究への参加機会を積極的に提供するなど，各大学共同利用機関の特色を活かした教育の充実を図る。⑫

（８）ポストドクター等の若手研究人材について，その育成方針を明確化し，多様な経験機会を付与しつつ実践的な研究指導を行うなど，大学共同利用機関の研究環境を活かした人材育成の充実を図る。また，最先端の研究活動を支援する URA など高度専門人材の育成を図る。これら人材の研究者としてのキャリアパス形成を支援する。⑬

４　社会との共創

（９）産業界との連携による研究開発の推進について，研究者個人ベースでの受託研究・共同研究等に留まらず，組織対組織の連携の強化，オープンイノベーションの推進等に向けた取組を進める。特許等の知的財産の戦略的活用も視野に入れつつ，研究成果を活用する事業者への技術移転等の取組を進める。⑭

５　その他教育研究の質の向上に関する重要事項

（10）社会が大きく変化する中，機関等の垣根を超えた組織体制の見直しを不断に行い，柔軟かつ機動的な組織の改編・整備を推進する。異分野融合による研究力強化や人材育成の充実，運営の効率化などの課題に対し，法人の枠組みを超えた対応を進める。⑯

II　業務運営の改善及び効率化に関する事項

(11) 内部統制機能を実質化させるための措置や外部の知見を法人経営に生かすための仕組みの構築，機構内外の専門的知見を有する者の法人経営への参画の推進等により，機構長のリーダーシップのもとで，強靭なガバナンス体制を構築する。⑰

(12) 大学共同利用機関の運営について，研究者コミュニティの意見を効果的に取り入れるとともに，その運営状況について積極的な情報発信を行うなど，開かれた運営の推進を図る。⑱

(13) 大学共同利用機関等の機能を最大限発揮するための基盤となる施設及び設備について，保有資産を最大限活用するとともに，法人全体のマネジメントによるスペース配分や設備の整備・共用等を戦略的に進めるなど，効率的な整備・運用の推進を図る。⑲

III　財務内容の改善に関する事項

(14) 公的資金のほか，寄附金や産業界からの資金等の受入れを進めるとともに，適切なリスク管理のもとでの効率的な資産運用や，保有資産の積極的な活用，研究成果の活用促進のための出資等を通じて，財源の多元化を進め，安定的な財務基盤の確立を目指す。併せて，目指す機能強化の方向性を見据え，その機能を最大限発揮するため，法人内及び機関内の資源配分の最適化を進める。⑳

IV　教育及び研究並びに組織及び運営の状況について自ら行う点検及び評価並びに当該状況に係る情報の提供に関する事項

(15) 外部の意見を取り入れつつ，客観的なデータに基づいて，自己点検等の活動に取り組み，自らの強み・特色と課題等を可視化するとともに，それを用いたエビデンスベースの法人経営を実現する。併せて，経営方針や計画，その進捗状況等に留まらず，研究教育の成果と社会発展への貢献等を含めて，ステークホルダーに積極的に情報発信を行うとともに，双方向の対話等を通じて法人経営に対する理解・支持を獲得する。また，市民に対するアウトリーチ活動を通じ，科学的リテラシーの涵養を図るとともに我が国の知的基盤の向上を推進する。㉑

V　その他業務運営に関する重要事項

(16) 多様なデジタル技術の適切な活用や，マイナンバーカードの活用等により，業務全般の継続性の確保と併せて，機能を高度化するとともに，事務システムの効率化や情報セキュリティ確保の観点を含め，必要な業務運営体制を整備し，デジタル化を推進する。㉒

9-6　大学共同利用機関法人自然科学研究機構第４期中期計画
（Ⅵ以降を省略）

Ⅰ　教育研究の質の向上に関する目標を達成するためにとるべき措置

１　研究に関する目標を達成するための措置

［１］自然科学分野の学術研究を先導する中核拠点として，世界最先端の学術研究を推進し，世界最高水準の研究成果を創出して，当該分野における我が国のプレゼンスを高める。

評価指標	［1-1］第４期中期目標期間中に 9,000 編以上の論文を発表する。 ［1-2］Top10% 論文の割合 12% 以上を維持する。 ［1-3］国際共著論文の割合 57.4% 以上。

［２］天文学分野では，宇宙の構造の進化と元素の起源を解明するため，ハワイ島マウナケア山頂に設置した口径 8.2m の大型光学赤外線望遠鏡「すばる」を安定して運用しつつ，機能強化を段階的に行う（「すばる２」計画）。超広視野多天体分光器（PFS）を用いた本格観測を開始し，超広視野撮像及び多天体分光による大規模サーベイ観測を中心に国際共同利用研究を推進し，高品質なデータを供する。口径 8m 以上の望遠鏡の中で最も広い視野を持つ強みを活かし，世界最先端の衛星プロジェクトや地上望遠鏡プロジェクトと連携し，宇宙の大規模構造の進化や元素の起源について他の追随を許さない研究を展開する。

評価指標	［2-1］すばる望遠鏡全体の高い論文生産性（年平均 145 編以上）を維持するとともに，第３期中期目標期間以上の高いインパクト（Top10% 論文の割合 16% 以上）を目指す。 ［2-2］超広視野多天体分光器（PFS）をすばる望遠鏡に搭載して，科学観測を開始し（令和５年度），データ解析用ソフトウェアを公開する。第４期中期目標期間終了までに，PFS を用いた大規模サーベイ及び共同利用観測を総計 240 夜以上実施する。 ［2-3］超広視野主焦点カメラ（HSC）を用いた大規模銀河探査データより，宇宙における暗黒物質の３次元地図をこれまでの約８倍以上に拡大し，宇宙論パラメータをより高い精度（推定誤差 2% 以下）で求める。 ［2-4］重力波イベントを含む突発現象を迅速に追跡観測できるように，観測課題の動的割付（キュー観測）システムを拡張し，HSC の共同利用観測時間の 1/2 以上（これまでは 1/4 以下）に適用して運用する。

［３］天文学分野では国際共同事業として以下を進める。

・惑星誕生の現場と生命素材を含む宇宙における物質の進化を解明するため，日米欧共同で南米チリに設置したアタカマ大型ミリ波サブミリ波干渉計（アルマ望遠鏡）の国際共同運用を継続し，科学観測を推進する。東アジア地域の中核機関として最大限の観測時間を利用可能とし，高品質なデータを供する。並行して，アルマ望遠鏡の機能強化を段階的に行う。

・太陽系外の地球型惑星における生命の存在や宇宙で最初の天体の形成など，天文学における人類のフロンティアを開拓するため，既存の望遠鏡を凌駕する解像力と感度をもつ口径 30m の超大型光学赤外線望遠鏡（TMT）の建設事業を，日本・米国・カナダ・インド・中国の５ヶ国と共同で推進する。日本が分担する研究開発部分について，本格的製造・製作に向けた準備を行い，製造・製作を推進するとともに，運用期に向けた共同利用・共同研究の準備を行う。

評価指標	［3-1］アルマ望遠鏡の運用を継続し，その貢献割合に応じた観測時間割合を東アジアの科学者コミュニティに確保することで，アルマ全体（年平均 300 編以上）及び東アジア（年平均 60 編以上）の論文生産性を維持する。 ［3-2］アルマ望遠鏡の最も低い周波数帯域を観測するバンド１受信機（66 台）を国際協力によりアルマ望遠鏡へ搭載し，令和５年度までに試験観測を実施，令和６年度までに共同利用の募集を開始し，令和７年度までに共同利用観測を開始する。 ［3-3］アルマ望遠鏡について，現在より約２倍高い解像度（約 5 ミリ秒角）を達成する。 ［3-4］日本が研究開発を分担する TMT の望遠鏡本体構造，主鏡分割鏡，第一期観測装置の３つ全てについて，製造・加工に着手するために必要となる「製造前審査」に第４期中期目標期間中に合格する。 ［3-5］ 2030 年代の TMT 完成後の科学運用期に向けて，第４期中期目標期間中に以下を実施する。すばる望遠鏡との一体的運用のあり方を含めた，国立天文台としての TMT の科学運用・観測装置計画について，国立天文台 TMT 科学諮問委員会における審議を踏まえて計画書として取りまとめ，公表する。さらに同計画書の内容を，共同利用運用体制の構築，観測装置の基礎技術開発，データ解析・アーカイブシステムの開発に反映させる。

［４］核融合科学分野では，高温プラズマの中心的な課題（プラズマ中の乱流・構造形成，電磁流体不安定性，高エネルギー粒子の振る舞い，プラズマとその対向材料との相互作用等）について，特に磁場構造の対称性や３次元性に注目して，実験と理論シミュレーションの連携と国内外の研究機関との共同研究により，それらの物理機構の解明を行う。研究者コミュニティの合意形成及び核融合研究の学際化に向け主導的な役割を担い，実験装置，超高速計算機，統合解析システム，シミュレーションコード等を活用・整備・拡張し，世界最先端の学術研究を多角的に推進する。

評価指標	［4-1］核融合科学に関する共同研究・共同利用に基づく学術論文の発表件数を第４期中期目標期間中に年間 200 編以上に，及びジャーナルの種類を第４期中期目標期間中に年間 40 種類以上に増加させる。

［１］自然科学分野の学術研究を先導する中核拠点として，世界最先端の学術研究を推進し，世界最高水準の研究成果を創出して，当該分野における我が国のプレゼンスを高める。（再掲）

評価指標	［1-1］第４期中期目標期間中に 9,000 編以上の論文を発表する。 ［1-2］Top10% 論文の割合 12% 以上を維持する。 ［1-3］国際共著論文の割合 57.4% 以上。

［５］本機構がカバーする各分野の特性を踏まえつつ，学術的又は社会的な要請を踏まえた学術研究を戦略的に推進するため，機構直轄センターにおいて，各機関も交え，異分野融合・新分野創成を目指した国際的共同研究を推進する。

評価指標	［5-1］機構直轄センターにおける異分野融合共同研究件数が第３期中期目標期間の実績数（参考：令和２年度までの延べ数 367 件）を上回ること。

［6］天文学の研究を推進するため，中小型望遠鏡，次世代観測装置，超高速計算機等の開発研究，整備及び運用を行う。プロジェクト間の連携も含めた柔軟な組織運営を推進するとともに，研究者コミュニティの合意形成に向けたコーディネート機能を担う。また，宇宙航空研究開発機構（JAXA）宇宙科学研究所主導のもと，日本の科学衛星・探査機の運用を継続するほか，将来の科学衛星や飛翔体に搭載する高度な観測装置の開発，そのための基礎的技術研究を推進し，新たな科学技術の基盤の創成に寄与する。

評価指標	［6-1］天文学専用の共同利用計算機システムの性能向上と定常的かつ安定な運用を行い，論文数 100 編／年を超える水準を維持する。 ［6-2］大型低温重力波望遠鏡 KAGRA の感度向上を進めつつ，国際共同観測に参加し，重力波を検出する。 ［6-3］JAXA 火星衛星探査計画（MMX）において，「測地チーム」を統率し，測地プロダクト（形状モデル等）獲得のための科学観測運用シミュレーションを，高・低高度について各１回以上，衛星打上げ前に実施する。取得データの分析から，火星衛星の内部構造探査に貢献する。

［7］国立天文台において，日の出・日の入りなど市民生活に直結した暦などの天文情報を提供する。また，天文観測に適した環境を保護するための活動を行う。

評価指標	［7-1］暦を計算し編纂する，すなわち「暦要項」，「暦象年表」を毎年着実に作成・公表する。ウェブページ等を通じて暦に関する情報を提供する。 ［7-2］天文観測環境を保護する「周波数資源保護」業務の着実な実施と，本業務の社会への発信状況。（第３期中期目標期間では周波数資源保護業務を開始し，ウェブページで随時活動を報告。第４期中期目標期間においてはさらに，本業務に対する社会からのフィードバックを集めるフォームを構築し，受け付けた意見を業務へ反映，社会へ発信する双方向性の流れを作る。）

［8］核融合科学分野において，高度な極限技術の複合系である核融合システムの実現に向けた課題について学際化に取り組み，技術の普遍化を図る。そのために，特に，大型高磁場超伝導マグネット，超高熱流プラズマ対向機器，中性粒子ビーム入射加熱等に関わる核融合科学研究所が有する先端的中核試験設備の高度化を進め，国内外の研究機関との共同研究を推進する。これにより，高効率核融合炉の設計に資するとともに，関連研究分野との連携を強化し，広く科学技術の基盤醸成に貢献する。

評価指標	［8-1］核融合科学研究所が有する核融合工学分野の先端的中核試験設備を用いた研究を基にした，核融合科学研究所による論文の発表数について，第４期中期目標期間中における論文数を累計 60 編以上（年間 10 編程度），国際共著論文，累計６編以上，Top10% 論文，累計６編以上に増加させる。 ［8-2］超高熱流プラズマ対向機器の技術開発を推進し，１平方メートルあたり３万キロワット以上の定常（10 分以上）熱負荷に耐える高熱流束機器を設計・製作する。また，製作した機器の性能を検証することで，先進材料の極限性能を解明する。

［9］核融合科学分野において，発電のみならず，大規模・安定な水素製造も可能とする核融合炉の概念の構築とそれに必要な技術の高度化を進めるとともに，水素の効率的利用に関連する学術研究を推進するなど，エネルギーの高効率利用に核融合極限技術を適用し，広くエネルギー科学研究を展開することにより，水素エネルギー社会・カーボンフリー社会の実現に貢献する。

評価指標	［9-1］定常核融合炉設計や水素がキーワードとなる研究を基に，核融合科学研究所による論文の発表数について，第４期中期目標期間中に年間６編以上に増加させる。 ［9-2］液体水素を用いた高温超伝導システムの安定な冷却の原理検証のため，マグネットの過渡的熱負荷増大に対する液体水素の冷却応答特性を詳細に調べ，超伝導技術の高度化を進める。

［10］基礎生物学研究分野において，生命現象の基本原理を解明するために，細胞の構造・機能・組織化・相互作用・情報伝達，発生・分化・再生，神経系の働きや行動の制御，環境適応，多様性，共生，進化等の機構を研究し，基礎生物学のフロンティアを開拓する。

評価指標	［10-1］第４期中期目標期間中に，第３期中期目標期間を上回る 780 本以上の論文を発表する。

［11］基礎生物学研究分野において，遺伝子やタンパク質解析技術，ゲノム編集技術，シングルセル解析技術，多様な先端顕微鏡によるバイオイメージング技術等の最先端技術の開発導入や新規モデル生物の開発を進めるとともに，AI やビッグデータを活用した人と機械の協働作業による新しい発見，思考を行うプラットフォームを確立する。生物機能解析センター，モデル生物研究センター，新規モデル生物開発センターを超階層生物学センターへ改組し，遺伝子から個体群に至る様々な階層を超えた統合的な解析による「超階層生物学」を推進し，世界を先導する独創的な生物学研究を行う。

評価指標	［11-1］生物機能解析センター，モデル生物研究センター，及び新規モデル生物開発センターを改組し，超階層生物学センターを設立する。 ［11-2］研究費を支給する超階層生物学共同利用研究を新設して公募し，毎年３件実施する。 ［11-3］超階層生物学に関する研究会とトレーニングコースをそれぞれ年１回開催する。

［12］生理学分野の，分子・細胞・細胞群・器官・システム・個体間の各階層において，機能メカニズム及び構造機能連関に関する研究を推進する。また，階層間の連結，器官間の機能協関，さらには神経系と免疫系など異なる機能システム間の連関を追求することにより，生命機能の成り立ちと恒常性の維持に関する理解を促進する。さらに，基礎生理科学・神経科学の確固たる知見の提供により，臨床医学との架け橋研究の基盤形成に貢献する。

評価指標	［12-1］「生体の各階層における生命現象の機能メカニズム」，「生体の階層間・臓器間・機能システム間の連関に基づく生体恒常性維持のメカニズム」，「生体の機能メカニズムの破綻による病態現象」の３つの範疇において，新知見を論文として発表し，第４期中期目標期間全体における全当該論文中の Top10% 論文の割合を 12.8% 以上に，国際共著論文の割合を 36.8% 以上に維持する。

［13］生理学分野において，時系列細胞現象計測等の専門性の高い重要な方法論を継承するとともに，分野間連携等により機能生命科学の新展開を図る。すなわち，理工系分野等との連携により，研究の推進・変革に寄与しうる現象計測・機能操作技術の新しい方法論や研究ツール等を開発し，生命科学研究に適用する。他機関との協力により MRI 脳画像等のデータベース構築の基盤技術を開発する。文理融合を推進すること等により，ヒト及び非ヒト霊長類動物の高次脳機能の理解を促進する。

評価指標	［13-1］「時系列細胞現象解析の専門技術を継承する室の運営と，その技術の共同利用研究への提供」に関して，時系列細胞現象解析室の研究教育職員が貢献した共同利用研究の年平均実施件数３件を達成する。 ［13-2］「分野間連携に基づいた，新たな計測技術や機能操作技術等の開発」に関して，第４期中期目標期間中に当該技術の原理や方法論に関する論文３報以上を発表する。 ［13-3］「MRI 脳画像等のデータベース構築の基盤技術に関する開発」に関して，開発の達成を示す構築したデータベースの設計図，管理システム，及び全体像の概略を提示する。 ［13-4］「ヒト及び非ヒト霊長類動物の高次脳機能のメカニズムやその種間比較等」の新知見を論文として発表し，第４期中期目標期間全体における当該論文中の Top10% 論文の割合を 12.8% 以上に，国際共著論文の割合を 36.8% 以上に維持する。

［14］分子科学分野では，計算科学手法の開発と活用，光を用いた先端的な研究手法や光源の開発，そして新規分子・物質の設計やそれらの高度集積化を通して，原子・分子・生命システムが示す多様な構造，物性，反応性，触媒能，エネルギー変換などの高次機能や動的構造を解明するとともに，新たな現象や有用な機能の設計と制御に取り組む。

評価指標	［14-1］先端的学術研究を次の５項目にわたって戦略的に推進し，うち３項目以上において，原著論文や総説を項目あたり 130 本以上公表する。 ・機能性材料の物性評価と高度な電子状態理論による解析 ・新規物性観測設備と先端的光源・分光法の開発 ・凝縮相原子・分子系が示す量子動力学現象，反応，物性及び秩序形成ダイナミクスの解明 ・有機分子を基盤とした新しい反応システムや機能性デバイスの開拓 ・分子システムの高次機能発現，作動原理，設計原理の探究

［15］アストロバイオロジーセンターでは，第一線の外国人研究者の招へい，若手研究者の海外派遣に取り組むとともに，大学等と連携して国際的かつ先端的な共同研究を推進し，アストロバイオロジー分野の国際的研究拠点を形成し，ハビタブル系外惑星の発見及び特徴づけなどで世界的成果を上げるとともに，生物系との分野融合的研究を推進し，当該研究拠点の国際化を進める。

評価指標	［15-1］観測遂行夜数を毎年 100 夜以上とする。 ［15-2］第４期中期目標期間末までに地球型惑星の発見確認数を 10 個以上とする。 ［15-3］外国人研究者割合 20% 以上を維持する。 ［15-4］第４期中期目標期間末までに生物系研究者割合を 35% 以上とする。 ［15-5］大学共同利用件数，若手研究者派遣数を毎年それぞれ 30 件以上とする。 ［15-6］アストロバイオロジーセンターにおける Top10% 論文の割合 12% 以上。

［16］生命創成探究センターでは，「みる・よむ・つくる」の３つのアプローチを基軸に，極限環境生命の研究者とも協力しながら異分野融合型の研究を進め，生命の本質に迫る研究を展開する。

評価指標	［16-1］多様な分野の研究者や若手研究者とともに，物質と生命の境界探査，細胞アトラスの編纂，生命体のシミュレーション，ネオ生命体の創成等を目指した研究プロジェクトを４課題以上推進する。また，大学の共同利用・共同研究拠点等との連携による分野融合研究を４課題以上実施する。これらの成果として論文・総説・国際学会招待講演の総数 120 件以上。

［17］若手研究者比率を維持するとともに，女性研究者･外国人研究者の一層の雇用と研究者の流動性を高めるため，これまで行ってきた研究環境整備を一層進めるとともに，十分に活用する。女性研究者の活躍を推進するため，男女共同参画推進に関するアクションプランを着実に実行する，女性研究者限定公募を実施するなどにより，女性研究者の割合を引上げる。

評価指標	［17-1］若手研究者比率 35% 以上を維持する。 ［17-2］外国人研究者比率を第４期中期目標期間末までに 12% 以上とする。 ［17-3］女性研究者の割合を第４期中期目標期間末までに 17% に引上げる。

［18］国内外の大学・研究機関と連携し，国際的に卓越した若手研究者を育成するための支援を強化する。さらに，若手研究者が分野を超えた研究を推進するための事業を実施する。また，現在実施している「自然科学研究機構若手研究者賞」について，対象を共同研究者にも拡大する。

評価指標	［18-1］若手研究者による分野を超えた共同研究を第４期中期目標期間中に 60 件以上実施する。 ［18-2］第４期中期目標期間において，若手研究者を国内外の研究機関へ計 30 名以上派遣する。 ［18-3］若手研究者賞の対象枠を広げ，毎年最大５名の受賞者を顕彰する。

２　共同利用・共同研究に関する目標を達成するための措置

［19］研究設備等の利用の利便性向上のため，大学連携研究設備ネットワーク事業を継続的に実施するとともに，対象とする分野の拡大に向け事業を推進する。さらに，技術職員の育成に向けた研修等を通して，機関の枠を超えた技術者支援を実施し，大学も併せた研究基盤の強化を図る。

評価指標	［19-1］登録数 3,000 件以上を維持する。 ［19-2］第４期中期目標期間において，計 60 回以上の技術講習会（研修動画の活用を含む）を開催する。

［20］各機関・センターにおいて，ユーザーのニーズを把握しつつ，研究設備の高度化，利用の利便性の向上を図ることによって，共同利用・共同研究機能を強化し，優れた研究成果を上げる。

評価指標	［20-1］本機構において年間２設備以上を高度化する（遠隔化，自動化など）。

［21］生命科学における重要なツールである電子顕微鏡（Cryo-EM・3D-SEM），光学顕微鏡（二光子・超解像），MRI（7T・Dual）について，アップデートした機器の提供，国内外ネットワークとの連携による協力，関連機器の複合的利用の促進等により，ユーザーの利便性を高め，分子・細胞レベルから神経回路・個体レベルまでの多階層を総体としてシームレスにカバーするイメージング共同研究を推進する。
また，動物資源共同利用研究センターについて，動物の飼育に留まらず，多階層生理機能の解析のための場所，装置，技術，及びバイオリソースの提供を行うことによりユーザーの利便性を高め，共同利用研究を新たに実施する。

評価指標	［21-1］7T-MRI の共同利用率の年平均値 75% を維持する。 ［21-2］3D-SEM をアップデートし，第４期中期目標期間中早期にユーザーの利用に供することにより，共同利用研究件数の年平均値 15 件を維持する。 ［21-3］位相差を含む低温電子顕微鏡を用いた共同利用研究の実施件数の年平均値６件以上を達成する。 ［21-4］動物資源共同利用研究センターを利用した共同利用研究を開始し，初年度の年間実施件数を基準として，第４期中期目標期間の６年間で 20% 以上の増加を達成する。

［22］幅広いアプローチ（BA）活動等の国家事業において整備されつつある，時代の先端を行く高度な大型機器を，大学と共同利用することにより，世界最先端の研究を実施するとともに，上記国家事業の成就に貢献する。

評価指標	［22-1］共同研究の拡充等による，BA 活動等の国家事業に関する共同研究の実施課題数と参加大学数を，第４期中期目標期間中に第３期中期目標期間末（令和３年度実績７課題・９大学）と比べて 1.5 倍以上とする。 ［22-2］共同研究により大学及び核融合科学研究所から BA 活動等の国家事業への貢献を明記した論文の発表数を，第４期中期目標期間中に第３期中期目標期間末（参考：令和２年度実績５編）と比べて 1.5 倍以上とする。

［23］共同利用率の高い UVSOR の計測機器や各分野において世界トップクラスの性能を持つ当該分野専用のスーパーコンピュータ等の高度化を通して，共同利用機能の更なる充実を図るとともに大学の研究力強化に資する。

評価指標	［23-1］UVSOR については，世界トップクラスの光電子運動量顕微鏡（スピン状態イメージングを可能とする実機）を開発し，第４期中期目標期間終了時までに国際的な協力研究を３件以上行う。 ［23-2］分野に特化した専用のスーパーコンピュータについては，第４期中期目標期間前半に更新を行い，実アプリケーション実行性能を２倍以上とする。 ［23-3］スーパーコンピュータの計算資源の共同利用率を第３期中期目標期間と同じ高水準（100%）に維持する。

［24］機構内各分野において共同利用・共同研究で得られたデータを収集・保有・維持する方針を決定・運用する。運用に当たっては大学共同利用研究教育アライアンスを通じて情報システム研究機構のデータサイエンス共同利用基盤施設等との連携を図り，分野の特徴にあったデータ解析手法の開発を進める。共同利用・共同研究で得られたデータをもとに，その学術的価値と研究データ管理等を鑑みた保管や公開・提供，利活用等について検討を行い，データ駆動型サイエンスやオープンサイエンスへの活用も含めた運用や体制を整える。

評価指標	［24-1］令和５年度末をめどに機構内各分野において共同利用・共同研究で得られたデータを収集・保有・維持する方針を決定し，収集を開始する。第４期中期目標期間終了時までにデータマイニング等による新たな知見を獲得する。

［25］貴重な生物資源の保存活動として大学連携バイオバックアッププロジェクト（IBBP）を運営し，国内外の研究者コミュニティに持続的かつ発展的に共同利用・共同研究の機会を提供する。また，研究者コミュニティの要望に応え，ナショナルバイオリソースプロジェクトを適切に受け入れる。さらに，バイオイメージング技術や次世代シーケンス等より生み出される膨大なデータを格納するサーバーとネットワーク環境等の整備を行い，共同利用・共同研究を推進する。

評価指標	［25-1］IBBP は毎年 80 件の取扱件数を維持する。 ［25-2］ナショナルバイオリソースプロジェクトを毎年４件受け入れる。

［26］高温核融合プラズマから低温応用プラズマ，天体プラズマ等のあらゆるプラズマ現象の共通基礎過程である原子分子素過程を記述する基礎的な原子分子データを基礎研究による生産と検証によって整備・充実させ，データ登録数が世界トップクラスである衝突断面積等数値データベースを強化する。これらを活用した学際的なプラズマ研究，異分野融合研究を国内・国際的共同研究として展開，推進する。

評価指標	［26-1］原子分子データベースに登録されているデータ件数を，第４期中期目標期間中に第３期中期目標期間末（参考：令和２年度実績 822,961 件）と比べて 10% 以上増加させる。また，データベースへのアクセス数を，第３期中期目標期間の水準（年間平均アクセス数 2,345 回）以上とする。 ［26-2］原子分子データに関連する共同研究課題数及び共同研究による共著論文数を，第４期中期目標期間中に第３期中期目標期間実績から 5% 以上増加させる。

［27］研究コミュニティの中核として，新たな課題に対応するための研究者グループの組織化等を支援･促進するため，DX プラットフォームを活用したエビデンス（IR）に基づくマッチング方式を導入し，特に，大学との協働による機関・分野を超えた異分野融合･新分野創成研究，他分野との協働による他分野の手法を取り入れた従来にない先端研究を促進する。実施に当たってはオープンラボ，分野融合型共同研究事業等を活用する。

評価指標	［27-1］DX プラットフォームを活用したマッチング方式を導入し，第４期中期目標期間中に 20 件のグループを形成する。 ［27-2］同方式により形成されたグループの共同研究を第４期中期目標期間中に 10 テーマ以上採択する。

［28］組織的連携の拡充，クロスアポイントメント・サバティカル・在籍出向等による人的交流の拡大等により，大学等との組織間ネットワークを発展させる。特に「自然科学大学間連携推進機構（NICA）」についてはアライアンスのもとで展開し，参画大学数を拡大させる。NICA を含む国内外のネットワーク事業は，各機関において既に形成されたものをベースにその拡充を図る。特にマルチメッセンジャー天文学やバイオイメージングにおいて海外との連携を一層強化する。

評価指標	［28-1］クロスアポイントメント実施件数を第３期中期目標期間実績（令和３年度実績 18 名）の 1.2 倍以上とする。 ［28-2］現存の国内外のネットワーク事業９件について，その参画機関数を第３期中期目標期間以上に増加させる。 ［28-3］ネットワーク形成に向けた勉強会・ワークショップを第４期中期目標期間中に 30 回以上実施する。

［29］異分野融合の促進，強みのある分野の更なる強化等をも視野に入れ，共同利用・共同研究拠点との連携による共同利用・共同研究機能のネットワーク化を推進する。

評価指標	［29-1］現在は構築されていない，共同利用・共同研究拠点との連携による共同利用・共同研究機能のネットワーク化を，第４期中期目標期間中に２件以上実施する。

［30］国際交流協定等に基づき，国際的な研究者交流事業や共同研究事業を推進するとともに，特に競争力の高い海外の研究機関との連携構築を戦略的に推進している国際連携研究センター（IRCC）において，世界的戦略事業を促進する。海外の研究機関との連携構築の一環として実施しているドイツ学術交流会を介した研究者交流事業を継続し，国際共同研究を支援する。

評価指標	［30-1］国際共著論文の割合 57.4% 以上。 ［30-2］第４期中期目標期間最終年度における国際共同研究実施件数について，第３期中期目標期間末（参考：令和２年度実績 248 件）での実績を上回る。 ［30-3］第４期中期目標期間における国際協定数について，第３期中期目標期間での実績（参考：令和２年度実績 105 件）を上回る。

３　教育・人材育成に関する目標を達成するための措置

［31］大学共同利用機関が保有する，大学にはない最先端の大型機器やスーパーコンピュータ等，大学共同利用機関でしか供することのできない研究設備・資料，大学では不可能な複数の指導教員，非常に頻繁に行われている国際共同研究・各種の国際研究集会・国際人材交流等，大学にはない優れた研究環境を総合研究大学院大学（総研大）の教育に提供して，総研大の特色ある学位プログラムの遂行を支援し，世界の第一線で活躍できる自立した研究者を育成する。受入れ学生に対し，国際的な研究集会に派遣することなどを実践し，幅広い国際的な視野を持つ人材の育成を図るとともに，リサーチアシスタント制度等により支援する。また，これらの施策について社会に分かりやすく発信し，優秀な総研大生の獲得につなげる。

評価指標	［31-1］本機構所属総研大院生に対し，全ての学生が在籍中に１回以上国際会議・ワークショップ等へ派遣されることを支援する。 ［31-2］国費の支援を受けた学生以外の学生に対するリサーチアシスタント制度の適用率を 90% 以上に維持する。

［32］大学院教育の充実に貢献するため，特別共同利用研究員制度，連携大学院制度，インターンシップ制度等により，国内外の学生等を積極的に受け入れる。また，総研大生に独自に供しているものと同じ研究環境のもとで教育研究を実施し，世界の第一線で活躍できる若手研究者を育成する。

評価指標	［32-1］以下の項目に関し，いずれも第４期中期目標期間最終年度において，第３期中期目標期間末での実績を上回ること。 ・特別共同利用研究員制度，連携大学院制度等による受入学生数（令和３年度実績 90 人） ・国外インターンの受入数（参考：令和２年度実績６人）

［33］ポストドクター等の若手研究人材の育成の一環として，分野を超えた研究を促進するための支援を行う。機構のコアコンピタンスとなる優秀な研究者を育てるとともに，PI として大学へ輩出することを推奨することで流動化を促進し，大学の研究力強化にも貢献する。また，研究活動を支援する URA など高度専門人材を育成するための研修を行う。

評価指標	［33-1］若手研究者を PI とした分野を超えた共同研究を第４期中期目標期間中に 60 件以上実施する。 ［33-2］URA など高度専門人材向け研修を第４期中期目標期間中に６回以上実施する。

４　社会との共創に関する目標を達成するための措置

［34］本機構の研究シーズの発信等や産業界等との交流の場を設けることにより，産業界の理解を深めるとともに，産業界との連携を強化する。民間企業等との組織対組織の包括的な協定を締結し，その協定のもとで連携して共同研究及び人材育成を実施する。また，知的財産の戦略的活用を鑑み，研究者に対する産学連携研修を実施する。

評価指標	［34-1］産業界等との交流の場を第４期中期目標期間中に 12 回以上実施する。 ［34-2］機構の有する研究成果を活用し，社会実装につなげるため，第４期中期目標期間終了までに，民間企業等との組織対組織の包括的な協定を１件以上締結し共同研究を行う。 ［34-3］第４期中期目標期間において，新たに研究者に対する産学連携研修を実施する（１回以上／年）。

５　その他教育研究の質の向上に関する重要事項に関する目標を達成するための措置

［35］研究活動をグローバル・アジェンダに結びつけるため，学術研究の進化に加え，社会的ニーズや地球規模の課題解決に向けた基礎研究の可能性を強く展開する必要がある。そのため，従来の研究領域の枠組みを越えて新たな研究領域を開拓する新分野創成に加え，共同利用・共同研究で得られたデータの分析等を「知る」から「利活用」へと進化させ，研究課題や社会課題へ対応する基盤の創出，次世代研究への発展に向けた分野融合総合知の検討等を集結することにより，新分野創成センターを改組し，研究の進化展開を推進する。

評価指標	［35-1］令和４年度に新分野創成センターを再構築し，「知の共創センター（仮称）」として新たな体制を整備する。令和５年度までに，「知の共創センター（仮称）」に「Research Commons 部門（仮称）」を設置し，共通基盤手法の検討を開始する。第４期中期目標期間終了までに，検討・開発を行った共通基盤手法について検証・評価を行う。

［36］４大学共同利用機関法人と総合研究大学院大学が設立する一般社団法人「大学共同利用研究教育アライアンス」を活用し，大学執行部との対話，異分野融合研究促進，共同利用・共同研究成果の活用，各種研修の共通化，等について取り組む。

評価指標	［36-1］「大学共同利用研究教育アライアンス」において以下の活動成果を上げること。 ・現在の NICA の事業をアライアンスの「大学連携プラットフォーム」を通じて展開し，参画大学数を 13 機関から拡大する。 ・異なる分野の研究者の交流の場を年１回企画・実施する。 ・全国の大学の研究者を対象とした「分野融合型共同研究」を実施し，年間 10 件程度の課題を採択し支援する。 ・機構の共同利用・共同研究で得られた成果等のデータを IR 用としてアライアンスに提供し，その結果をステークホルダーである大学に発信する。 ・４機構で共通する課題に対する研修をアライアンスのもとで連携して行い業務の効率化を図る。

Ⅱ　業務運営の改善及び効率化に関する目標を達成するためにとるべき措置

［37］内部統制の機能の実質化を図るため，研究力強化推進本部の体制を充実させ，機構全体として施策の統制された円滑な実施を図る。また，機構内広報誌「NINSBulletin」を充実させ，機構内の情勢の他，機構を取り巻く情勢，機構・機関執行部の方針等を，機構全体に正確に伝達する。常設されている機構長選考・監察会議については，外部の知見を法人経営に生かすための仕組みとする。さらに，学界以外からの人材を法人経営に参画させる。これらにより，機構長のリーダーシップのもとで，内部統制のとれた強靭なガバナンス体制を構築する。

評価指標	［37-1］機構の研究力強化における機構長のガバナンスを強化するため，機構長が本部長を務める研究力強化推進本部において以下の改変を行う。 ・機構全体の研究の方向性を決定する「企画戦略室」を令和４年度に新たに設置する。 ・同室の下に URA をリーダーとする６つの戦略チーム（共同利用・共同研究，研究・経営戦略分析，ダイバシティー推進，アウトリーチ，外部連携，国際連携）を配置する。（令和５年度までに完了） ・６つの戦略チームは横断的に各機関の戦略室と連携し，機関内の研究戦略に反映，これを支援する。 ［37-2］第４期中期目標期間中に研究者コミュニティに属していない民間企業経験者による外部理事を１名登用する。 ［37-3］機構内広報誌「NINS Bulletin」を第４期中期目標期間中に 24 回以上発行する。 ［37-4］機構長選考・監察会議の委員は，全員を外部委員とする。

［38］各機関，機構本部が開催する，運営会議，経営協議会，教育研究評議会は，各分野の研究者コミュニティを代表する委員が選出されていることから，これらの会議で，研究者コミュニティの意見を聞き，運営にフィードバックさせる。また，各機関は，関連する学会・主催する研究会等を利用して，研究者コミュニティの各層の意見を聞き，運営に活かす。運営会議，経営協議会，教育研究評議会の活性化に取り組み，これらの議事録を公開する。また，ホームページ，各種パンフレット，市民との対話等を活用して，積極的に運営状況の情報発信を行い，開かれた運営の推進を図る。

評価指標	［38-1］運営会議等の所内委員割合が 1/2 以下であること。 ［38-2］運営会議，経営協議会，教育研究評議会の議事録を確定後 30 日以内に機構ホームページにて公開する。 ［38-3］経営協議会，教育研究評議会及び機構長選考 ・監察会議の外部委員からの指摘事項等への対応を毎年度５件以上行う。 ［38-4］機構ホームページの閲覧数が第３期中期目標期間の実績を上回ること。

［39］施設・設備の安全性・信頼性を確保し，所要の機能を長期間最大限発揮するため，インフラ長寿命化計画を核とした計画的な維持・保全・整備を行う。また，機構の施設マネジメント・ポリシーに基づき，使用状況・使用状態を把握・評価し，戦略的に，効率的かつ効果的なスペースの確保・運用・再配分を実現する。

評価指標	［39-1］主要キャンパスの利用状況調査を年１回以上実施し，第４期中期目標期間終了までに共同利用スペースを保有面積の 30% 以上とする。 ［39-2］インフラ長寿命化計画（個別施設計画）に基づき維持・保全・整備が実施されていること。

Ⅲ　財務内容の改善に関する目標を達成するためにとるべき措置

［40］大きな社会情勢の変化を迎えたポスト・コロナ時代における新たな共同利用・共同研究体制の確立に向け，研究環境のリモート化，DX 化を早急に進める。このための財源確保を目指し，機構本部，機関，研究者共に，新たな公的研究資金の提供に積極的に応募し，施設・設備の充実に努めるとともに，研究者の研究資金を確保する。公的資金のほか，産業界からの資金等の受入れを進めるとともに，専任の担当者を配置して，マーケティング調査等を実施し，寄附金の受け入れを促進する。また，効率的な資産運用や研究成果の活用促進のための出資等を通じて，財源の多元化を試み，自主的かつ安定的な資金の確保を目指す。併せて，研究の将来性を見据え，機能強化を図り研究成果を最大化するため，研究基盤戦略会議で策定した方針に従って，法人内及び機関内の資源配分の最適化を進める。

評価指標	［40-1］令和２年度に立ち上げた基金を活用し，寄附金の獲得に関する専任担当者を配置して戦略的な寄附獲得方針を検討する。第４期中期目標期間終了までに，検討した方針に基づき新たな寄附金（基金創設に伴って可能となる現物寄附や遺贈等）を獲得する。これらにより，第４期中期目標期間中に，第３期中期目標期間実績（参考：令和２年度までの５年平均 412,500,601 円）を上回る寄附金収入を獲得する。 ［40-2］土地・建物の使用料収入及び寄附金等余裕金を活用した利息収入を第３期中期目標期間比（参考：令和２年度までの５年平均 68,917 千円）で 10% 拡大させる。 ［40-3］機構長裁量経費を令和３年度比（令和３年度実績 1,375,975 千円）で 10% 拡大させる。 ［40-4］コンベンション施設等の保有施設の貸出件数を令和３年度比（参考：令和２年度実績 17,756 件）で 10% 拡大させる。

Ⅳ　教育及び研究並びに組織及び運営の状況について自ら行う点検及び評価並びに当該状況に係る情報の提供に関する目標を達成するためにとるべき措置

［41］各機関においては，第４期中期目標期間における事業等について，毎年自己点検を実施し，それを受けて国際的な外部評価を実施する。また，機構全体については，毎年中期目標・中期計画の自己点検評価を実施するとともにこれを公表する。さらに，令和７年度には４年間の総合外部評価を実施する。これらの評価により機構・機関の活動状況を可視化するとともに，外部の意見を取り入れ，評価結果等をエビデンスとして機構全体及び各機関の運営に反映させる。

評価指標	［41-1］各機関において毎年自己点検を実施し，その結果を公表。また，第４期中期目標期間中に，各機関それぞれ１回以上，国際的な外部評価を実施する。 ［41-2］機構では毎年中期目標・中期計画の自己点検評価を実施し，その結果を公表。また，令和７年度に外部委員のみで構成された外部評価委員会にて４年間の総合外部評価を実施し，その結果を公表する。 ［41-3］評価結果等をエビデンスとした運営の改善・反映がされていること。

［42］経営・運営方針や計画，その進捗状況，研究教育の成果と社会発展への貢献等は，ホームページや SNS 等のウェブコンテンツを活用することでより積極的に情報を配信する。また，大学・研究所等向け，一般市民向け，共同研究者向け，産業界向け等，各ステークホルダーに応じた情報の発信を行う。海外の研究者には，「EurekAlert!」を活用した海外プレス機関への情報配信を中心に，また，研究者に加えて，海外の市民にはホームページなどのウェブコンテンツ内の英語情報を充実させることで，機構への理解獲得に努める。マスコミへの情報発信は，発表機関が主催するプレス記者会見に加え，機構本部による統括の下，テレビ会議システムを活用したプレス記者会見の配信と，機構長プレス懇談会において最新の研究成果解説とプレス記者との密な質疑の場を設ける。特に社会的影響が大きい研究成果については，機関でのプレス発表後に詳細な成果の内容や，関連した研究成果を説明する講演・解説を実施する。

評価指標	［42-1］以下の項目において，いずれも第３期中期目標期間での実績（平均値）を上回ること。 ・EurekAlert! 国際プレスリリース数（参考：令和２年度までの５年平均 82 件） ・EurekAlert! 上の総閲覧数（PageView）（参考：令和２年度までの５年平均 174,219 件） ・ウェブコンテンツの英語ページへのアクセス数（参考：令和２年度までの５年平均 12,645 アクセス） ・機構長プレス懇談会の参加記者数（参考：令和２年度までの５年平均 11 人）

［43］近隣の科学館等で，市民との対話の会や講演会等を定期的に実施し，法人経営に対する理解・支持を獲得する。また，各機関の出前授業，施設公開等のイベントについても，機構本部が積極的に支援を行い，オンラインの活用などにより，各機関が協力・連携した情報発信を行うことができる体制を構築する。これにより，機構全体で理科教育を推進し，ひいては，市民の機構に対する理解・支持を獲得する。

評価指標	［43-1］以下の項目において，いずれも第３期中期目標期間での実績（延べ数）を上回ること。 ・自然科学研究機構シンポジウム等機構が主催する講演会における参加者数（参考：令和２年度までの延べ数 1,305 人） ・オンライン開催のイベントにおけるオンライン視聴者数（参考：令和２年度までの延べ数 10,433 人） ・機構で公開しているアーカイブ動画の閲覧数（参考：令和３年 10 月時点の延べ数 3,980 回）

Ⅴ　その他業務運営に関する重要事項に関する目標を達成するためにとるべき措置

［44］これまで各機関が独自に進めてきた事務システムの効率化を，機関の枠を超え機構全体として一層推進する。この目標の達成のために，デジタル技術を活用して機構構成員の認証基盤を構築する。この認証基盤を背景に，クラウドソリューション等を用いて業務アプリケーションを機構全体で共通基盤化し，機構本部及び各機関がデジタル化に必要な業務運営体制を整備してアプリケーションの活用を進めることで，一層の事務処理の効率化とセキュリティリスクの低減を図る。

評価指標	［44-1］既に機構全体で共用されている人事給与，財務会計システムに加え，現在は機関ごとに構築されている決裁，勤怠管理，法人文書管理などの業務システムが，令和６年度までに機構全体で共用できるものに統一化されていること。

9-7　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 2023

現状・評価・将来計画

2024 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