

2-9 共同研究

2-9-1 共同研究の概要

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、運営協議員会で採択されたテーマには、旅費及び校費の一部を支給する。次の6つのカテゴリーに分類して実施している。(公募は前期・後期(年2回)、関係機関に送付)

- (1) 課題研究：数名の研究者により特定の課題について行う研究で3年間にまたがることも可能。
- (2) 協力研究：所内の教授又は助教授と協力して行う研究。(原則として1対1による)
(平成11年度後期より UVSOR 協力研究は、協力研究に一本化された)
- (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。
- (4) 施設利用：研究施設に設置された機器の個別的利用。
- (5) UVSOR 課題研究：数名の研究者又は複数の研究グループによる開発的な研究で、1年あるいはそれ以上にわたるもの。
- (6) 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。
- (7) ナノサイエンス支援：

今年度からナノサイエンス支援「分子・物質総合合成・解析支援プログラム」による協力研究・施設利用の公募が開始された。以下にその概要を示す。

分子科学研究所では文部科学省のナノテクノロジー総合支援プロジェクトを受託し、その一環として、分子スケールナノサイエンスセンターや関連する研究系を中心として、ナノ物質創製・物性評価・構造決定・ナノスケール分子観察・分子物質操作加工などを行うための6種の装置群の開放と理論計算支援のプログラムを実行している。表1に各装置群とプログラムを示す。支援は、担当研究者と共に研究を進めてゆく協力研究と、装置に関する十分な知識と経験を有する研究者が随時の申し込みによって当該装置を利用する施設利用の何れかの申し込みを通して行われる。研究所ホームページ (<http://www.ims.ac.jp/joint/>) にある公募要領に沿って通常の共同研究と同じように年2回の公募を行い、分子スケールナノサイエンスセンター運営委員会で申請内容を審査し採択課題を決定している。また、施設利用に関しては、施設長の判断で随時実行し、機動性を高めている。平成14年度は実質的には夏以降の活動となり、6月に締め切った後期公募に対しては、31課題・60名の協力研究の申し込みを受け付け、現在実行している。また、施設利用は1月末で44件となっている。

表1 支援装置・プログラム一覧

| 支援装置・プログラム | 装置・プログラムの概要 |
|--------------------------|---|
| 有機エレクトロニクス素子作製・評価システム | 有機半導体を用いた素子の作製と評価を行うための、有機薄膜作製装置、電子物性測定装置から構成される。分光機能付き高分解能透過型電子顕微鏡(JEOL:JEM3100FEF)、集束イオンビーム試料作成装置(JEM-9310FIB)が使用可能である。 |
| 分子スケール素子作製・評価システム | 分子を高度に集積化してナノスケールの素子を構築する基礎研究を行う装置で、走査プローブ顕微鏡、走査型電子顕微鏡(JSM-6700F(1))などを主体とする。また、担当教官が得意とするナノ素子用分子材料の合成に関する共同研究も行っている。 |
| レーザー光誘起反応・極低温トンネル顕微鏡観察装置 | レーザーと超高真空極低温走査型トンネル顕微鏡を組み合わせ、光による分子構造の変化を直接観測したり、レーザー誘起された試料表面の強電場変化による画像を観測する。超高真空極低温走査型トンネル顕微鏡のみの使用も可能である。 |
| ナノクラスター飛行時間型質量分析装置 | 金属クラスターなど種々のクラスターを適切な4種のイオン化源によってイオン化し、その質量を最高質量10万Daの範囲で計測する。 |

| | |
|------------------|--|
| 分子結合状態解析システム | マイクロな領域に配置された分子集合体の結合状態を調べるためのX線光電子分光（マイクロESCA）装置で、元素および化学状態別の2次元画像としての情報が得られる。詳細は、 http://msmd.ims.ac.jp/yokoyama_g/ESCA/ を参照。 |
| 高感度磁気物性測定装置 | 振動式高感度磁化率測定装置（RSO）を装備した、微量試料用7テスラ超低磁場連続低温制御および温度スイープ型磁気物性測定装置。交流磁化率の測定も可能。 |
| 分子設計用大型計算支援プログラム | 大型コンピュータを用いた理論計算によって、分子設計および生成物のスペクトル予測を行い、有機合成の指針を与えるための支援プログラム。専門家の適切な指導により、大型分子設計の理論計算手法を修得する。 |

2-9-2 2002年度の実施状況

(1) 課題研究

| 課 題 名 | 提案代表者 |
|---------------------------------------|--------------------|
| 多自由度複雑系で有効な拡張アンサンブル法の開発 | 分子科学研究所 岡本 祐幸 |
| 高速時間分解分光による孤立分子および分子集合体のフォトクロミック機構の解明 | 九州大学大学院理学研究院 関谷 博 |
| 光スイッチングを組み込んだ超分子化合物の新規光物性 | 九州大学大学院理学研究院 速水 真也 |
| 溶液中でのナノ会合体の自己組織化に関する理論構築 | 分子科学研究所 平田 文男 |
| 末端酸化酵素の高酸化状態反応中間体の構造化学 | 分子科学研究所 北川 禎三 |

(2) 協力研究

| 課 題 名 (前期) | 代 表 者 |
|---|----------------------------|
| RISM によるイオンの水和及び高分子電解質のイオン凝縮に関する研究 | 東京電機大学理工学部 野村 浩康 |
| エネルギー分散の動的緩和過程に対する分子論的解明 | 大阪大学ベンチャー・ビジネス・ラボラトリー 西山 桂 |
| 水 - エタノール系の構造に関する中性子回折および RISM 理論に基づく研究 | 福岡大学理学部 山口 敏男 |
| 共鳴ラマン分光法による脱系銅蛋白質の動的構造解析 | 茨城大学理学部 高妻 孝光 |
| 異常血色素の構造解析：紫外共鳴ラマン分光による研究 | 金沢大学医学部 長井 雅子 |
| W-band ESR による(DMe-DCNQI) ₂ Li のスピンドYNAMIXの研究 | 東京都立大学大学院理学研究科 溝口 憲治 |
| W-band ESR を用いたパルス ELDOR 法の研究 | 名古屋大学大学院理学研究科 三野 広幸 |
| 量子常誘電体のマイクロ波共鳴 | 京都大学大学院理学研究科 白井 正伸 |
| 新規な水溶性 γ -CyD-Bicapped C ₆₀ 多価アニオン及びクラスターの3重項、4重項状態の高磁場/高周波 ESR による同定と超分子量子スピン機能の探索 | 大阪市立大学大学院理学研究科 工位 武治 |
| 高周波 EPR による光合成電子移動機構の研究 | 関西学院大学理学部 河盛阿佐子 |
| 非晶質金属クラスターの電子構造の STS による研究 | 東京大学大学院総合文化研究科 渡邊 一雄 |
| アニリンイオンを含む水素結合クラスター内におけるプロトン移動 | 九州大学大学院理学研究院 大橋 和彦 |
| フラレンクラスターの構造解明に関する研究 | 理化学研究所 田中 秀樹 |
| 金属ナノクラスターの合成と触媒機能に関する研究 | 大阪大学大学院工学研究科 櫻井 英博 |
| 芳香族分子クラスターの ZEKE 光電子スペクトルの測定 | 横浜市立大学大学院総合理学研究科 三枝 洋之 |
| フェムト秒波長可変位相制御光源と光電子画像観測法を用いた分子核波束の可視化と制御 | 東京農工大学 三沢 和彦 |
| 有機薄膜の電子スペクトルの Shear stress 効果 | 室蘭工業大学 城谷 一民 |
| (ET) ₂ [CuN(CN) ₂]X(X = Br, Cl) の赤外・ラマン測定による振動解析 | 東京工芸大学 比江島俊浩 |
| 有機超伝導体の超伝導転移と量子振動 | 名古屋大学大学院工学研究科 伊東 裕 |
| 磁性が共存する分子性伝導体の結晶作成と物性測定 | 大阪電気通信大学工学部 青沼 秀児 |
| Pd(dmit) ₂ 塩の電子状態の研究 | 神戸大学分子フォトサイエンス研究センター 太田 仁 |
| 分子性伝導体の極低温伝導度・磁化率測定 | 東京大学大学院理学系研究科 小林 昭子 |
| FET 構造による有機固体のキャリアー易動性の評価 | 学習院大学理学部 小谷 正博 |
| 和周波発生分光法による有機分子 - シリコン界面の研究 | 財団法人神奈川科学技術アカデミー 大西 洋 |
| 新規な有機 FET の開発 | 東京工業大学大学院総合理工学研究科 西田 純一 |

| | | |
|---|-----------------------|-------|
| エピタキシャル有機薄膜 FET の作成と界面機能 | 京都大学化学研究所 | 磯田 正二 |
| 酸化亜鉛単結晶表面への有機色素吸着構造の観察 | 岐阜大学大学院工学研究科 | 吉田 司 |
| 新規フェルダジラジカルを用いた分子強磁性伝導体の開発 | 愛媛大学理学部 | 向井 和男 |
| 包接体ホストに閉じ込められた CT 錯体の電荷移動相互作用 | 東京大学大学院総合文化研究科 | 錦織 紳一 |
| 星間空間の多原子分子が関与する化学反応の量子化学的研究 | 静岡大学理学部化学科 | 相原 惇一 |
| DNA 鎖の XAS、PES による電子状態測定 | 理化学研究所 | 川合 真紀 |
| 内殻励起の大規模 SCF 計算コードの開発 | 九州女子大学 | 八尋 秀一 |
| 放射光エッチングによる希土類酸化物の機能性微細発光膜の作製 | 東北大学金属材料研究所 | 今泉 吉明 |
| フラーレンの電子状態における界面効果の研究 | 北陸先端科学技術大学院大学材料科学研究科 | 藤原明比古 |
| 軟 X 線リソグラフィーにおけるレジスト露光感度の波長依存性について | 姫路工業大学高度産業科学技術研究所 | 銘苅 春隆 |
| 金属カーボンクラスターをベースにした新しいナノ物質系の構築と物性研究 | 岡山大学理学部化学科 | 川口健太郎 |
| スピנקロスオーバー錯体の顕微光電子分光 | 佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター | 鎌田 雅夫 |
| フラーレンの極端紫外光イオン化 | 岡山大学大学院自然科学研究科 | 吉川 雄三 |
| 局所分析法による長残光蛍光体における残光機構の解明 | 新潟大学工学部 | 太田 雅壽 |
| 水素化脱硫触媒活性サイトの STM 観察 | 島根大学総合理工学部 | 岡本 康昭 |
| 紫外光電子分光による無機 / 高分子界面形成過程の研究 | 産業技術総合研究所ナノテクノロジー研究部門 | 宮前 孝行 |
| ARUPS による GeS 基板上のフタロシアニン薄膜の電子状態および膜構造の定量的解析 | 千葉大学大学院自然科学研究科 | 解良 聡 |
| フラーレン類の光電子分光 | 千葉大学工学部 | 日野 照純 |
| 紫外光電子分光によるイオン液体の電子構造と表面構造の研究 | 名古屋大学物質科学国際研究センター | 関 一彦 |
| メタン活性化触媒の光電子分光法による研究 | 愛媛大学工学部 | 宮崎 隆文 |
| 生体二分子膜中の胆汁酸 - コレステロールミセルの MD シミュレーション | 大分大学教育福祉科学部 | 中島 俊男 |
| 準安定励起原子と分子との反応過程の理論的研究 | 新潟大学理学部化学科 | 徳江 郁雄 |
| 分子軌道法を用いたシリコン表面における吸着反応の研究 | 産業技術総合研究所四国センター | 渡邊 秀和 |
| 化合物半導体波長変換デバイスの開発 | 東京大学大学院工学系研究科 | 近藤 高志 |
| LD 励起マイクロチップレーザーの物性と応用 | 東海大学電子情報学部情報科学科 | 大塚 建樹 |
| Yb:YAG 固体レーザーの高出力化の研究 | 福井大学工学部 | 小林 喬郎 |
| マイクロチップ紫外光源の開発 | 大阪大学大学院工学研究科 | 佐々木孝友 |
| ヘムオキシゲナーゼによるヘム分解反応機構の解明 | 東北大学多元物質科学研究所 | 松井 敏高 |
| TMTSF の ^{13}C 置換体分子の合成 | 北海道大学大学院理学研究科 | 河本 充司 |
| C_{60} を電子供与体とする ($\text{C}_{60}\text{-X}$) 錯体の合成とその物性 | 法政大学工学部 | 丸山 有成 |
| α ヘリックスペプチドをメソゲンとした液晶分子の開発 | 静岡理工科大学理工学部 | 幡野 明彦 |
| 微弱放射光の研究 | 理化学研究所 | 原 徹 |
| 蓄積リング自由電子レーザーのパワー飽和機構の研究 | 佐賀大学 | 江田 茂 |
| P-ドナー型配位子を有する一連のルテニウム(II)錯体の設計と酸化還元特性 | 福島大学教育学部 | 大山 大 |
| 有機超伝導体と金属内包フラーレンの構造と物性 | 東京都立大学大学院理学研究科 | 西川 浩之 |
| 光による不斉誘導の磁気化学的制御 | 金沢大学薬学部 | 中垣 良一 |
| 非線形化学反応の強磁場効果 | 信州大学教育学部 | 勝木 明夫 |
| 高勾配磁場をもつ超伝導磁石を使って作成した重力を弱めた環境における化学反応と拡散現象に関する研究 | 広島大学大学院理学研究科 | 藤原 好恒 |
| 蛋白質表面を認識するクロロフィル類縁体の合成 | 宇都宮大学工学部 | 三部 正大 |

課 題 名 (後期)

代 表 者

| | | |
|--|----------------|-------|
| タンパク質の折り畳みに対する溶媒効果の分子論的研究 | 福岡大学理学部 | 山口 敏男 |
| 準安定励起原子と分子との反応過程の理論的研究 | 新潟大学理学部 | 徳江 郁雄 |
| RISM によるイオンの水和及び高分子電解点のイオン凝縮に関する研究 | 東京電機大学理工学部 | 野村 浩康 |
| エネルギー分散の動的緩和過程に対する分子論的解明 | 大阪大学大学院工学研究科 | 西山 桂 |
| 液体・固体ヘリウム中での原子の分光 | 富山大学理学部 | 森脇 喜紀 |
| 金属錯体型人工 DNA を用いた電子スピン配向集積化 | 東京大学大学院理学系研究科 | 塩谷 光彦 |
| W および Q-band ESR による $(\text{DMe-DCNQI})_2\text{Li}$ などのスピンドイナミクスの研究 | 東京都立大学大学院理学研究科 | 溝口 憲治 |
| W-band ESR を用いたパルス ELDOR 法の研究 | 名古屋大学大学院理学研究科 | 三野 広幸 |
| 芳香族アミンの高スピンカチオンラジカル種の電子状態の解明 | 京都大学大学院工学研究科 | 伊藤 彰浩 |
| アミンおよびアルコールクラスターに対するプロトンの結合様式 | 九州大学大学院理学府 | 迫田 憲治 |

| | | |
|---|-----------------------|--------|
| ラマン分光法によるジオールと水との混合状態に関する研究 | 佐賀大学理工学部 | 高椋 利幸 |
| フェノール化合物の PFI-ZEKE 光電子スペクトルの測定 | 横浜市立大学大学院総合理学研究科 | 三枝 洋之 |
| 有機伝導体単結晶試料の極低温比熱測定 | 東京工業大学大学院理工学研究科 | 中澤 康浩 |
| 有機超伝導体の超伝導転移と量子振動 | 名古屋大学大学院工学研究科 | 伊東 裕 |
| 有機超伝導物質の熱的および磁気的性質 | 大阪大学大学院理学研究科 | 齋藤 一弥 |
| 分子性伝導体の極低温伝導度・磁化率測定 | 東京大学大学院理学系研究科 | 小林 昭子 |
| 光応答性物質の構造評価 | 財団法人神奈川科学技術アカデミー | 佐藤 治 |
| 新規ナノ構造体としてのチューブ状およびカプセル状分子の合成と物性 | 九州大学有機化学基礎研究センター | 新名主輝男 |
| 放射光とイオンビームを組み合わせた 2 ステップエッチングによる希土類酸化物の微細可視発光膜の作製 | 東北大学金属材料研究所 | 今泉 吉明 |
| マイクロチャンネル構造の作製技術開発とその応用 | 豊橋技術科学大学 | 吉田 明 |
| 有機超伝導体を金属内包フラーレンの構造と物性 | 東京都立大学大学院理学研究科 | 西川 浩之 |
| R 行列法による内殻励起過程の研究 | 東京大学大学院総合文化研究科 | 樋山みやび |
| 化学ドーピングした DNA 鎖の XAS・PES による電子状態測定 | 理化学研究所 | 川合 真紀 |
| フラーレンの電子状態における界面効果の研究 | 北陸先端科学技術大学院大学 | 藤原明比古 |
| カーボンナノチューブの光電子分光 | 信州大学工学部 | 伊藤 稔 |
| 金属カーボンクラスターをベースにした新しいナノ物質系の構築と物性研究 | 岡山大学理学部 | 川口建太郎 |
| シリコン表面吸着種の振動分光データの理論的解析 | 独立行政法人産業技術総合研究所四国センター | 大井 健太 |
| スピントロニクス超伝導体の光電子スペクトル | 佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター | 鎌田 雅夫 |
| フラーレンの極端紫外光イオン化 | 岡山大学理学部 | 吉川 雄三 |
| 生体高分子の長時間ダイナミクス：粗視化モデルの構築 | 独立行政法人産業技術総合研究所 | 篠田 渉 |
| 生体二分子膜中の胆汁酸 - コレステロールミセルの MD シミュレーション | 大分大学教育福祉科学部 | 中島 俊男 |
| 化合物半導体波長変換デバイスの開発 | 東京大学大学院工学系研究科 | 近藤 高志 |
| 半導体レーザー励起マイクロチップ固体レーザーの物性と応用 | 東海大学大学院工学研究科 | 大塚 建樹 |
| Yb:YAG 固体レーザーの高出力化の研究 | 福井大学大学院工学研究科 | 川戸 栄 |
| Yb:GdYCOB 単一素子による紫外光発生に関する研究 | 大阪大学大学院工学研究科 | 佐々木孝友 |
| TTF とその類縁体分子の重水素置換分子の作製 | 北海道大学大学院理学研究科 | 河本 充司 |
| C ₆₀ を電子供与体とする (C ₆₀ -X) 錯体の合成とその物性 | 法政大学工学部 | 丸山 有成 |
| 脂質 - ペプチド複合体の液晶挙動 | 静岡理科大学 | 幡野 明彦 |
| 金属ナノクラスターの合成と触媒機能に関する研究 | 大阪大学大学院工学研究科 | 櫻井 英博 |
| 局所分析法による長残光蛍光体における残光機構の解明 | 新潟大学工学部 | 太田 雅壽 |
| 水素化脱硫触媒活性サイトの STM 観察 | 島根大学総合理工学部 | 岡本 康昭 |
| フラーレン類の光電子分光 | 千葉大学工学部 | 日野 照純 |
| ARUPS による π 電子共役系有機薄膜表面および界面の電子状態と膜構造の定量的解析 | 千葉大学大学院自然科学研究科 | 解良 聡 |
| 紫外光電子分光による有機デバイス関連界面の電子構造の解明 | 名古屋大学物質科学国際研究センター | 関 一彦 |
| 紫外光電子分光による紫外光照射した有機物表面構造の研究 | 独立行政法人産業技術総合研究所 | 宮前 孝行 |
| CuGa 系正二十面体準結晶の光電子分光 | 名古屋大学情報文化学部 | 森 昌弘 |
| 光による不育誘導の磁気化学的制御 | 金沢大学大学院自然科学研究科 | 甲谷 繁 |
| 非線形化学反応の強磁場効果 | 信州大学教育学部 | 勝木 明夫 |
| 高勾配磁場をもつ超伝導磁石を使って作成した重力を弱めた環境における化学反応と拡散現象に関する研究 | 広島大学大学院理学研究科 | 藤原 好恒 |
| 星間空間における多環式芳香族の関与する反応の量子化学的研究 | 静岡大学理学部 | 相原 惇一 |
| 超高真空装置用潤滑被膜の評価・開発 | 大同工業大学 | 松居 正夫 |
| 微弱放射光の研究 | 理化学研究所播磨研究所 | 原 徹 |
| 蓄積リング自由電子レーザーのパワー飽和機構の精密研究 | 佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター | 江田 茂 |
| 水素吸蔵錯体の触媒機能の解明 | 筑波大学化学系 | 北川 宏 |
| アゾピリジン誘導体を有するルテニウムカルボニル錯体の合成 | 福島大学教育学部 | 大山 大 |
| タングステン補因子モデルによる無機化合物の酸化反応 | 大阪市立大学大学院理学研究科 | 杉本 秀樹 |
| ヘムオキシゲナーゼによるヘム分解反応機構の解明 | 東北大学多元物質科学研究所 | 松井 敏高 |
| ヘム制御 eIF2 α キナーゼ (HRI) のヘム周辺構造の解明 | 東北大学多元物質科学研究所 | 五十嵐城太郎 |
| 共鳴ラマン分光法による脱室系銅蛋白質の動的構造解析 | 茨城大学理学部 | 高妻 孝光 |
| 異常血色素の構造解析；紫外共鳴ラマン分光による研究 | 金沢大学医学部 | 長井 雅子 |

(3) 研究会

水と生体分子が織り成す生命現象の化学

2002年5月14日(火)～16日(木) 計算科学研究センター大会議室

5月14日(火)

13:20 13:30 Opening address

座長 岡崎 進

13:30 14:00 中原 勝 超臨界水内化学過程の分子論的解析

14:00 14:30 天羽優子 水を含む二成分系における濃度ゆらぎ

14:30 15:00 松岡辰郎 トレハロース水溶液の誘電緩和

座長 中原 勝

15:30 16:00 木下正弘 蛋白質立体構造形成に及ぼす溶媒効果

16:00 16:30 入佐正幸 高分子込み合いにおける排除体積起因平均力ポテンシャルの拡張 scaled particle 理論による計算

16:30 17:00 池口満徳 タンパク質 / 水系に対する部分剛体定温定圧分動力学法の開発と応用

17:30 18:00 松林伸幸 溶質 - 溶媒エネルギー分布関数を用いた自由エネルギー解析

18:00 18:30 加藤 稔 圧力変性は熱変性とどこが違うか？

5月15日(水)

座長 木下正弘

9:00 9:30 曾田邦嗣 アルコール水溶液中でのヒト・カルシトニンの構造と線維化

9:30 10:00 山口敏男 キモトリプシン・インヒビター2のフォールディングにおける水 - アルコールクラスターの役割

10:00 10:30 神取秀樹 ロドプシンにおける内部結合水の役割

座長 神取秀樹

11:00 11:30 水谷泰久 水とタンパク質との動的相関

11:30 12:00 中島 聡 超高速分光法を用いた電子移動タンパク質の揺らぎとダイナミクス

12:00 12:30 寺嶋正秀 蛋白質の反応ダイナミクスと水分子

座長 北尾彰朗

14:00 14:30 桑田一夫 プリオンのフォールディング中間体と創薬

14:30 15:00 後藤祐児 β_2 ミクログロブリンのフォールディングとアミロイド線維形成

15:00 15:30 中迫雅由 蛋白質水と構造への実験面からのアプローチ：現状と問題点

座長 岡本祐幸

16:00 16:30 片岡幹雄 Staphylococcal nuclease に対する C 末欠損の効果と溶媒効果

16:30 17:00 桑島邦博 時間分解 X 線溶液散乱による蛋白質フォールディングの速度論的解

17:00 17:30 上岡龍一 複合脂質膜のみによるがん治療

17:30 18:00 平田文男 生体分子の自己組織化と水

18:30 懇親会 職員会館 2 階

5月16日(木)

座長 池口満徳

9:00 9:30 城地保昌 結晶水の構造変化による蛋白質の応答

9:30 10:00 北尾彰朗 分子動力学による蛋白質のダイナミクスと水和構造変化

10:00 10:30 岡崎 進 水中における脂質二重層膜とペプチドの計算機シミュレーション

座長 桑島邦博

11:00 11:30 高田彰二 蛋白質の設計原理を探る：理論設計と実験的解析

11:30 12:00 福田育夫 Tsallis 統計とその分子動力学への応用

12:00 12:30 岡本祐幸 水と蛋白質分子の相互作用による折り畳み問題

12:30 12:40 Closing remark

分子科学研究シンポジウム

2002年5月17日(金)～18日(土) 葵丘会館

5月17日(金)

10:00 - 10:10 はじめに

- 10:10 - 12:10 セッション(1)「時間領域」
 ディスカッションリーダー：鈴木俊法(分子研)・永田 敬(東大院総合文化)
 スピーカー：小川 晋(日立基礎研) 緑川克美(理研)
- 13:30 - 15:30 セッション(2)「周波数領域」
 ディスカッションリーダー：百瀬孝昌(京大院理)・渋谷一彦(東工大院理)
 スピーカー：天竺堯義(茨城大理) 藪崎 努(京大院理)
- 16:00 - 18:00 セッション(3)「空間領域」
 ディスカッションリーダー：藤井正明(分子研)・山下晃一(東大院工)
 スピーカー：吉信 淳(東大物性研) 福村裕史(東北大院理)
- 18:30 - 20:00 懇親会

5月18日(土)

- 10:00 - 12:00 セッション(4)「生体分子」
 ディスカッションリーダー：寺嶋正秀(京大院理)
 スピーカー：小倉尚志(東大院総合文化) 石井由晴(科技団・1分子過程)
- 13:30 - 15:30 セッション(5)「強光子場」
 ディスカッションリーダー：山内 薫(東大院理)
 スピーカー：河野裕彦(東北大院理) 中村一隆(東工大応セラ研)
- 15:30 - 15:40 おわりに

若手分子科学研究者のための物理化学

2002年6月5日(水) 分子科学研究所研究棟301号室

- | | | |
|---------------|--------------------------------|--------------|
| 13:30 ~ 13:40 | 「開会の辞」 | 佃 達哉(分子研) |
| 13:40 ~ 14:10 | 「生命現象の1分子解析」 | 原田 慶恵(臨床研) |
| 14:10 ~ 14:40 | 「溶液の分子論」 | 松林 伸幸(京大化研) |
| 15:00 ~ 15:30 | 「計算統計力学 古典論と量子論、理論から実践へ」 | 三浦 伸一(東工大総合) |
| 15:30 ~ 16:00 | 「量子光学と高分解能分光」 | 佐々田博之(慶大理工) |
| 16:00 ~ 16:30 | 「ナノケミストリー 単一分子についての化学反応から学ぶこと」 | 米田 忠弘(理研) |

光、電子および重粒子衝突ダイナミクスの現状と展望

2002年7月25日(木) ~ 26日(金) 岡崎コンファレンスセンター2階会議室

7月25日(木)

- 9:30 - 9:40 提案代表者挨拶：高橋正彦
- 9:40 - 10:40 座長：山内 薫
1. 横山 淳(9:40 - 10:10) Photodissociation dynamics of vibrationally excited ammonia
 2. 藤井正明(10:10 - 10:40) Pico-second time-resolved IR spectroscopy on photochemically reactive clusters
- 11:00 - 12:30 座長：John Eland
3. 山内 薫(11:00 - 11:30) Molecular phenomena in intense laser fields: The next frontier
 4. 上田 潔(11:30 - 12:00) Nuclear dynamics of core-excited/ionized polyatomic molecules
 5. Richard Hall(12:00 - 12:30) Probing the dynamics of Auger processes with threshold photoelectrons
- 14:00 - 15:30 座長：田中 大
6. Yugal Khajuria(14:00 - 14:30) (e, 2e) triple differential cross section of helium and argon in the coplanar to perpendicular plane geometry
 7. 高橋正彦(14:30 - 15:00) Probing electron momentum densities of molecular orbitals using a new multichannel (e,2e) spectrometer
 8. 季村峯生(15:00 - 15:30) Positron annihilation and positronium formation in positron scattering from molecules
- 15:50 - 16:50 座長：古屋謙治
9. 酒井康弘(15:50 - 16:20) Dissociative ionization of simple molecules by electron impact
 10. 北島昌史(16:20 - 16:50) Electron-impact-dissociation of molecules into negative and neutral fragments
- 17:10 - 18:10 座長：柳下明
11. 小田切丈(17:10 - 17:40) Dissociative doubly excited molecules in electron-molecule collisions
 12. 古屋謙治(17:40 - 18:10) Fragment ion-photon coincidence investigation of carbon dioxide
- 18:30 懇親会(職員会館2階)

7月26日(金曜日)

8:55 - 9:00 事務連絡: 古屋謙治

9:00 - 10:30 座長: 宇田川康夫

13. 石田俊正 (9:00 - 9:30)

Theoretical study on Penning ionization: Anisotropic and spin-orbit effects

14. 岸本直樹 (9:30 - 10:00)

Steric anisotropy in interaction between a molecule and a He* metastable atom by a highly sensitive two-dimensional Penning ionization electron spectroscopy

15. 笠井俊夫 (10:00 - 10:30)

New resonance-type oscillation appeared in the collision-energy dependence of Penning ionization reactions with oriented molecules

10:50 - 12:20 座長: 笠井俊夫

16. 中村信行 (10:50 - 11:20)

Atomic structure and collision processes of highly charged ions

17. 城丸春夫 (11:20 - 11:50)

Fragmentation of polyatomic molecules induced by collision of highly charged ions

18. 本橋健次 (11:50 - 12:20)

Dissociative excitation of CF₄ and N₂ molecules in collisions with multicharged ions

13:50 - 14:50 座長: Richard Hall

19. Vincenzo Carravetta (13:50 - 14:20)

L2 K-matrix: a theoretical multichannel approach to molecular photoionization

20. 見附孝一郎 (14:20 - 14:50)

Photoion yield spectra of C₆₀ in the region of 23-210 eV

15:10 - 16:40 座長: 高橋正彦

21. 鈴木俊法 (15:10 - 15:40)

Femtosecond pump-probe photoelectron imaging of excited state dynamics

22. 柳下 明 (15:40 - 16:10)

Complete experiments of the molecular shape resonance

23. John Eland (16:10 - 16:40)

Coincidence experiments in physical chemistry, past present and future

16:40 - 17:00 まとめと閉会: 見附孝一郎

複雑凝集系の分子科学 藤山常毅先生没後の歩みと将来への展望

2002年11月8日(金) ~ 10日(日) 岡崎コンファレンスセンター小会議室

8日(金)

13:00-13:10

茅 幸二(分子研)

所長挨拶

13:10-13:40

細矢 治夫

藤山君の思い出とマ - デルング定数

13:40-14:10

加藤 直(都立大院理)

界面活性剤ラメラ相の構造に対するずり流動場の効果

14:10-14:40

西 信之(分子研)

会合性混合溶媒中におけるミクロな相分離について

14:40-15:10

西川 恵子(千葉大)

ゆらぎの構造化学と複雑凝集系への適用

15:10-15:40

平田 文男(分子研)

液体の密度揺らぎと溶媒とダイナミクス

16:00-16:30

岡崎 進(岡機構)

凝集系における溶質分子振動状態緩和の計算機シミュレーション

16:30-17:00

古賀 精方(UBC)

ギブスエネルギーの三次微分からみた水溶液の混ざり方

17:00-17:30

寺嶋 正秀(京大院理)

新しい量で観る蛋白質ダイナミクス

17:30-18:00

志田 忠正(神奈川工科大学)

藤山君のいた頃のことなど

18:30 ~

懇親会(サングリア)

9日(土)

9:00-9:30

湯田坂雅子(科学技術振興事業団)

ナノチューブの化学

9:30-10:00

田路 和幸(東北大院工)

ナノ微粒子配列型ストラティファイド光触媒の開発とその物性

10:00-10:30

山室 修(阪大)

分子ガラスのガラス転移と短距離構造形成

10:50-11:20

三沢 正勝(新潟大理)

複雑水溶液におけるメソスケール構造形成と塩効果: 小角散乱の可視化がもたらす豊富な情報

11:20-11:50

加藤 立久(分子研)

最新の電子スピン共鳴法の凝集系分光学における位置付け

11:50-12:20

中原 勝(京大化研)

凝縮系の分子論へのNMR 分光学の貢献の歴史と展望

13:40-14:10

谷村 吉隆(分子研)

凝縮系の2次元分光: 実験と理論

14:10-14:40

百瀬 孝昌(京大院理)

量子固体の高分解能赤外分光

14:40-15:10

井川 駿一(北大院理)

亜臨界 - 超臨界領域における水 - 炭化水素混合流体の赤外物性

15:10-15:40

富永 圭介(神戸大)

極短パルスレーザーによる遠赤外 - 中赤外領域における分子分光の新展開
テラヘルツ分光と赤外非線形分光について

16:00-16:30

岩田 耕一(東大院理)

時間分解分光法で観測する凝集系での分子間相互作用

16:30-17:00

北川 禎三(分子研)

溶液中での大きな分子の振動緩和とモード依存性

17:00-17:30

浜口 宏夫(東大院理)

振動スペクトルで見た分子の動的構造

17:30-18:00

村田 好正

金属表面での吸着分子の赤外吸収スペクトル強度とレーザー誘起脱離

18:00 ~

free

10日(日)

| | | |
|-------------|---------------|------------------------------------|
| 9:00-9:30 | 林 久史(東北大多元研) | X線非弾性散乱の新展開 |
| 9:30-10:00 | 富永 靖徳(お茶大) | アルコール/水 二成分混合系のラマン分光 |
| 10:00-10:30 | 兵頭 志明(トヨタ中研) | メソスケール構造形成シミュレーションとメソ不均一場下での電子状態計算 |
| 10:50-11:20 | 大峰 巖(名大院理) | 多体化学系のダイナミックス、何を知りたいのか? ; 水を例にして |
| 11:20-11:50 | 野村 浩康(東京電機大学) | 藤山さんの思い出と溶液の濃度ゆらぎ |

赤外放射光の現状と将来計画

2002年11月13日(水)~14日(木) 岡崎コンファレンスセンター小会議室

11月13日

| | | |
|--------------------|--|----------------------|
| 1330-1340 | 提案代表者挨拶 | 難波孝夫(神戸大院自然) |
| 1340-1345 | 事務連絡 | 木村真一(分子研 UVSOR) |
| 1. 赤外ビームラインのアウトライン | | |
| 1345-1405 | UVSOR 赤外ビームライン再構築 | 木村真一(分子研 UVSOR) |
| 1405-1425 | SPring-8 赤外 BL の現況 | 木村洋昭(JASRI/SPring-8) |
| 2. 表面 | | |
| 1425-1455 | 極低温表面における吸着分子の振動(実験室光源を使った IRAS 測定による) | 吉信 淳(物性研) |
| 1455-1515 | SPring-8 での IRAS の現況 | 森脇太郎(JASRI/SPring-8) |
| 3. 時間分解 | | |
| 1540-1610 | 強相関電子系における超高速赤外分光 | 芦田昌明(通総研関西) |
| 1610-1640 | レーザーを使った赤外時間分解分光 | 枝松圭一(阪大院基礎工) |
| 1640-1705 | SPring-8 における時間分解および光照射下での赤外分光 | 岡村英一(神戸大院自然) |
| 1705-1725 | UVSOR における軌道放射光とレーザーを組み合わせた赤外過渡吸収分光実験の現況 | 東純平(分子研 UVSOR) |
| 1725-1730 | 事務連絡 | 木村真一(分子研 UVSOR) |
| 1740-1810 | UVSOR 見学ツアー | |
| 1820- | 懇親会(於 職員会館 2 階) | |

11月14日

| | | |
|-------------------|--|-----------------------------------|
| 4. ミリ波 | | |
| 0900-0920 | 放射光を用いたミリ波分光の現状と将来 | 太田仁(神戸大分子フォト) |
| 0920-0945 | 希土類重い電子系のミリ波分光 | 岡村英一(神戸大院自然) |
| 5. 顕微分光・高圧 | | |
| 0945-1005 | FPA 検出器を用いた FTIR システム | 錦田晃一(Thermo Electron corporation) |
| 1005-1035 | 赤外・テラヘルツ検出器の現状 | 福室雅晴(インフラレッド) |
| 1100-1120 | SPring-8 顕微ステーションの現状とユーザーの声 | 木村洋昭(JASRI/SPring-8) |
| 1120-1140 | SPring-8 における高圧下の固体物性 | 松波雅治(神戸大院自然) |
| 1140-1155 | UVSOR における遠赤外顕微鏡の試み | 木村真一(分子研 UVSOR) |
| 1155-1215 | FT-IR 顕微分光の医学診断応用のための顕微鏡ステージでのサンプル調製オンライン化 | 三好憲雄(福井医大) |
| 6. 他の赤外光源の現状と将来計画 | | |
| 1330-1350 | テラヘルツ光源の現状 | 小野晋吾(分子研) |
| 1350-1415 | 赤外 FEL 開発の現状 | 加藤龍好(阪大産研) |
| 1415-1445 | ERL 放射光源の現状と赤外利用の可能性 | 羽島良一(原研 FEL) |
| 1445-1505 | コヒーレント放射光の現状と ERL への期待 | 高橋俊晴(京大原子炉) |
| 1505-1520 | まとめと事務連絡 | 木村真一(分子研 UVSOR) |

高精度大規模計算が開く新しい分子科学

2002年11月29日(金)~12月1日(日) 岡崎コンファレンスセンター

11月29日

13:30-13:40 趣旨説明

座長 藤原尚 (近畿大理工)

13:40-14:10 小林 郁 (分子研) 金属内包フラレンの理論予測
14:10-14:40 阿波賀邦夫 (東大・総合文化) 単分子磁石と量子効果
14:40-15:10 中野 雅由 (阪大・院理) 特異な構造を持つ分子の超分極率密度解析

座長 山下晃一 (東大工)

15:30-16:00 安田 耕二 (名大・院人情) 密度行列を用いた量子化学
16:00-16:30 天能精一郎 (名大・院人情) 次世代分子軌道法の電子相関理論
16:30-17:00 常田 貴夫 (東大・院工) 大規模理論計算に向けた密度汎関数理論の開発

座長 永瀬茂 (分子研)

17:15-17:45 波田 雅彦 (都立大・院理) 相対論的量子化学の開発:NMR 化学シフトへの適用
17:45-18:15 山口 茂弘 (京大・化研) 典型元素を鍵とする機能性 π 電子系材料の設計
18:15-18:45 後藤 敬 (東大・院理) 高周期ヘテロ元素を含むナノスケール分子空孔の設計応用
19:00-20:30 ポスターセッション

11月30日

座長 榊茂好 (京大工)

9:00-9:30 村橋 哲郎 (阪大・院工) 1次元サンドイッチ型ポリエン - ポリパラジウム錯体
9:30-10:00 信定 克幸 (北大・院理) 金属ナノクラスターの電子ダイナミクス

座長 橋本健朗 (東京都立大理)

10:20-10:50 木村 佳文 (京大・国際セ) 超臨界流体中での色素の電子状態に対する溶媒効果
10:50-11:20 杉本 学 (熊大・院自然) 機能性金属錯体の励起状態と光物性に関する電子論的解析
11:20-11:50 江原 正博 (京大・院工) 精密なスペクトロスコピー : SAC-CI general-R 法の展開

座長 榊茂好 (京大工)

13:30-14:00 野崎 京子 (東大・院工) 不均一系不斉触媒開発が理論化学に期待すること
14:00-14:30 安藤 香織 (琉大・教) 有機合成への理論計算の活用:プロモアレンの分子内アミン化反応による選択的 2-エチルアジリジン合成への応用
14:30-15:00 松原 世明 (京大・福井セ) ONIOM 法の概念と応用

座長 高塚和夫 (東大総合文化)

15:20-15:50 北浦 和夫 (産総研・計科) フラグメント MO 法による巨大分子の量子化学計算
15:50-16:20 古賀 伸明 (名大・院人情) 鉄錯体によるアセトニトリルの C-C 結合活性化の理論的研究
16:20-16:50 中村 恒夫 (東大・院工) 非断熱遷移の化学反応動力学:3,4 原子分子系の高精度計算とその意味

座長 永瀬茂 (分子研)

17:10-18:10 平尾 公彦 (東大・院工) 分子理論 最近の発展
18:30-20:30 懇親会

12月1日

座長 相田美砂子 (広大理)

9:00-9:30 石森浩一郎 (京大・院工) ヘム蛋白質におけるヘムの電子状態制御 ラジカル決めるアミノ酸とその環境

9:30-10:00 佐藤 文俊 (東大・生産研) タンパク質のための次世代量子化学計算システムの開発

10:00-10:30 吉澤 一成 (九大・有機セ) 量子化学計算による生物無機化学へのアプローチ

座長 酒井章吾 (大阪産大情報)

10:45-11:15 藪下 聡 (慶応・理工) スピン軌道 CI 法と簡単な分子への応用

11:15-11:45 橋本 健朗 (都立大・院理) フェノール - アンモニアクラスターにおける励起状態水素移動

11:45-12:15 長岡 正隆 (名大・院人情) 自由エネルギー勾配法による溶液中分子の構造最適化

12:15-12:45 佐藤 啓文 (京大・院工) 溶媒和に伴う分子の電子状態変化

磁気科学の新展開 化学反応と材料プロセスへの磁場効果

2002年12月13日(金) ~ 14日(土) 岡崎コンファレンスセンター 2階会議室

12月13日(金)

1300-1305 山口 益弘 (横浜国大院工) 開会の挨拶

座長 中垣 良一 (金沢大院自然科学)

1305-1330 阿部 晴雄 (物質・材料研究機構・強磁場研究センター)
電子励起分子の動的挙動に対する磁場効果

1330-1355 森田 浩(千葉大工)
有機超微粒子の気相形成反応における外部磁場効果

1355-1420 勝木 明夫(信州大教育)
銀樹成長の強磁場効果

座長 谷本 能文(分子研)

1420-1445 尾関寿美男(信州大理)
無機イオン/有機錯体の磁場による構造制御を経由した無機多孔体調製

1445-1510 青柿 良一(職業能力開発総合大)
磁気通路を用いた微小流体チップ

1510-1620 ポスターとコーヒープレーク

座長 稲場 秀明(千葉大教育)

1620-1645 中林誠一郎(埼玉大理)
コロイド科学と磁場効果

1645-1710 渡會 仁(阪大院理)
磁場中における微粒子の泳動解析と分析法への展開

1710-1735 藤原 昌夫(分子研)
勾配磁場内におけるイオン移動について

座長 坂口 喜生(理研)

1735-1800 若山 信子(産総研つくば中央第5)
磁気力を利用した低重力環境とタンパク質結晶成長

1800-1825 高橋 弘紀(東北大金材研)
東北大金研における磁気浮上実験

1830-2000 懇親会

12月14日(土)

座長 藤尾 克彦(信州大理)

0900-0925 米村 弘明(九大院工)
ドナー-フラレン系の光誘起電子移動反応の磁場効果

0925-0950 手老 省三(東北大多元研)
光導電性高分子薄膜におけるホール移動に対する磁場効果

0950-1015 岡崎 正治(産総研セラミックス研究センター)
セラミックスナノチューブ内溶液光反応における磁場効果

1015-1040 若狭 雅信(埼玉大理)
化学反応の磁場効果 熱反応と超強磁場下での反応

座長 木村 恒久(都立大院工)

1100-1125 植田 千秋(阪大院理)
反磁性酸化物の磁場整列特性を予測するための一般則の構築

1125-1150 福田 隆(阪大院工)
強磁性形状記憶合金におけるマルテンサイトバリエーションの磁場制御と巨大歪

1150-1215 木吉 司(物質・材料強磁場研究センター)
磁気力発生技術の現状

座長 掛下 知行(阪大院工)

1300-1325 浅井 滋生(名大院工)
強磁場印加による結晶配向ハイドロキシアパタイト焼結体の作成

1325-1350 茂木 巖(東北大金材研)
導電性ポリマーの磁気電解重合と修飾電極への応用

座長 尾関寿美男(信州大理)

1350-1415 山本 勲(横浜国大院工)
有機高分子ゲルの磁場効果

1415-1440 木村 恒久(都立大院工)
磁場を用いた高分子材料プロセッシング

1440-1455 コメンテーターのコメント

1455-1500 山口 益弘(横浜国大院工)閉会の挨拶

クラスター・ジャイアントクラスター・ナノ粒子の分子科学：機能デザインを目指した構造・電子物性・磁性研究
2003年2月18日(火)～19日(水)岡崎コンファレンスセンター

2月18日(火)

13:45- 受付

- 14:10-14:20 はじめに 中嶋 敦 (慶大理工)
「ポストナノ科学としてのナノクラスター・ナノ粒子科学」
- 14:20-14:30 参加者の紹介 (講演者、ポスター発表者)
- 14:30-16:00 ナノクラスター孤立系の電子物性と反応素過程 座長: 寺崎 亨 (豊田工大)
井口佳哉、西 信之 (分子研)
「芳香族分子クラスターイオンの電荷共鳴相互作用とその正電荷分布」
美齊津文典 (東北大院理)
「金属原子 - 有機分子系における電子移動誘起クラスター内反応」
寺崎 亨 (豊田工大、コンボン研)
「気相遷移金属クラスターの電子物性とその制御」
- 16:20-17:50 ナノ構造体のデザイン制御、集積化と機能 座長: 米澤 徹 (東京大学院理)
葉師寺啓、三谷誠司、高梨弘毅 (東北大学金材研)
「微細加工したグラニューラー構造膜におけるスピン依存単一電子トンネル伝導」
山元公寿 (慶大理工)
「ナノ触媒を目指した精密金属集積」
米澤 徹 (東京大学院理)
「貴金属ナノ粒子の湿式調製法と構造・物性」
- 18:00-18:30 ポスター発表者によるショートプレゼンテーション
- 18:30-20:00 ポスター発表
- 2月19日 (水)
- 9:00-10:30 ナノクラスター・ナノ粒子の機能素子、機能単位づくり 座長: 佃 達哉 (分子研)
木村啓作、八尾浩史、佐藤井一 (姫工大)
「電子状態設計のための金属、半導体ナノ粒子結晶の構築」
尾上 順 (東工大)
「トポロジカルナノカーボンの創成と電子物性」
佃 達哉 (分子研)
「チオール単分子膜で保護された金属クラスターの調製と構造」
- 10:50-12:20 ナノクラスターと表面科学との接点 座長: 大西 洋 (神奈川科学技術アカデミー)
村上純一 (産総研中部センター)
「担持ナノクラスター上における化学反応」
小原通昭、井上健一郎、土居真吾、中嶋敦、茅幸二 (慶大理工、分子研)
「気相ナノクラスターのソフトランディングの新展開」
石橋孝章・大西洋 (神奈川科学技術アカデミー)
「マルチプレックス和周波分光による有機単分子膜の評価
クラスタのソフトランディングにむけて」
- 14:00-15:30 ナノ構造体の物性研究の化学的アプローチと新展開 真船文隆 (豊田工大)
多田博一 (分子研)
「有機ナノ構造体の構築と電気特性計測」
高木紀明 (総研大)
「表面ナノ構造の構造揺らぎと反応性」
真船文隆 (豊田工大、コンボン研)
「クラスターの高次構造化」
- 15:30-15:45 総括 (ひとことずつ)
西信之 (総括)
木村啓作、村上純一、寺崎 亨、米澤 徹、佃 達哉、大西 洋、真船文隆

分子を構成要素とする新しい電子機能物質

2003年3月3日(月)～5日(水) 岡崎コンファレンスセンター

3月3日

座長: 小林速男

- 12:55 ~ 13:00 小林速男 (分子研) はじめに
- 01 13:00 ~ 13:25 鹿野田一司 (東大工) BEDT-TTF 塩; 型と型の物理
- 02 13:25 ~ 13:50 森 初果 (東大物性研) 水素結合を有する新規有機伝導体の物性制御
- 03 13:50 ~ 14:15 中村敏和 (分子研) (TMTTF)₂X 系の電荷秩序配列: 磁気共鳴測定の見点から
- 04 14:15 ~ 14:35 近藤隆祐 (東大総合) 一軸圧縮法による有機伝導体の電子状態制御
- 05 14:35 ~ 14:55 山本 薫 (分子研) (DI-DCNQI)₂Ag の電荷局在相における電荷分布と格子変調

座長：薬師久弥

| | | |
|------------------|--------------|--------------------------------|
| 06 15:15 ~ 15:40 | 小林昭子 (東大理) | 中性単一成分分子金属の最近の発展 |
| 07 15:40 ~ 16:05 | 御崎洋二 (京大工) | 新規な TTP 系導体の開拓 |
| 08 16:05 ~ 16:30 | 山田順一 (姫理工) | ドナー分子における 結合骨格の拡張：新規有機超伝導体の開発 |
| 09 16:30 ~ 16:50 | 宮崎 章 (東工大理工) | π - d 相互作用を用いた分子磁性伝導体の開発 |
| 10 16:50 ~ 17:10 | 山本浩史 (理研) | ナノ配線材料としての分子性導体 |
| 11 17:10 ~ 17:35 | 大越慎一 (東大先端研) | 強磁性金属錯体における光と磁気相互作用 |
| 12 17:35 ~ 18:20 | 十倉好紀 (東大工) | 有機錯体結晶の量子相転移 |
| 18:30 ~ 20:00 | 懇親会 | |

3月4日

座長：加藤礼三

| | | |
|------------------|-------------|-------------------------|
| 13 9:00 ~ 9:45 | 大坪徹夫 (広大工) | ナノスケール共役分子の設計、創製、物性研究 |
| 14 9:45 ~ 10:10 | 古川行夫 (早大理工) | 有機電界効果トランジスターの電圧誘起赤外吸収 |
| 15 10:10 ~ 10:35 | 鈴木敏泰 (分子研) | アントラセンオリゴマーの合成とトランジスタ特性 |

座長：野上隆

| | | |
|------------------|-------------|------------------------------|
| 16 10:55 ~ 11:20 | 中嶋 敦 (慶応理工) | 一次元有機金属ナノワイヤーの気相生成とその電子物性・磁性 |
| 17 11:20 ~ 11:45 | 多田博一 (分子研) | シリコン - 炭素共有結合性自己組織化膜の作製 |

座長：杉本豊成

| | | |
|------------------|------------|-------------------------------|
| 18 13:15 ~ 13:45 | 山口 兆 (阪大理) | π - d 共役系錯体の電子状態理論による研究 |
| 19 13:45 ~ 14:10 | 井上克也 (分子研) | 光学活性な分子磁性体の合成・構造・物性 |
| 20 14:10 ~ 14:30 | 速水真也 (九大理) | 鉄(III)化合物における新規光スイッチング機能の出現 |
| 21 14:30 ~ 14:55 | 石田尚行 (電通大) | ホストゲスト化学を利用した分子磁性の制御 |
| 22 14:55 ~ 15:15 | 藤原秀紀 (分子研) | 有機ラジカルを有するドナーを用いた磁性伝導体の開発 |

座長：米満賢治

| | | |
|------------------|--------------|---|
| 23 15:30 ~ 16:15 | 秋光 純 (青学理工) | p 電子物理学 |
| 24 16:15 ~ 16:40 | 岩佐義宏 (東北金研) | フラレンをつないで新しい構造体を作る |
| 25 16:40 ~ 17:00 | 榎本真哉 (東大総合) | 非対称配位子を架橋とする Fe 混合原子価錯体の特異な相転移と電子物性 |
| 26 17:00 ~ 17:20 | 岸根順一郎 (分子研) | 電荷移動錯体 TTF-CA 系の圧力下臨界挙動：イオン性常誘電相とイオン性強誘電相 |
| 27 17:20 ~ 17:40 | 芥川智行 (北大電子研) | マクロサイクリック TTF 誘導体が形成する多彩な分子集合体ナノ構造 |
| 19:00 ~ 20:30 | ポスター | |

3月5日

座長：多田博一

| | | |
|-----------------|------------|----------------------|
| 28 9:00 ~ 9:25 | 矢持秀起 (京大理) | エチレンジオキシ置換 TTF 誘導体 |
| 29 9:25 ~ 9:50 | 松本睦良 (産総研) | 新規自己組織化膜の構造と電気物性 |
| 30 9:50 ~ 10:15 | 横山利彦 (分子研) | 表面分子吸着により誘起される薄膜磁気転移 |

座長：中村貴義

| | | |
|------------------|--------------|---------------------|
| 31 10:35 ~ 11:20 | 岩本光正 (東工大理工) | 有機分子膜の電子物性評価とトンネル素子 |
| 32 11:20 ~ 11:45 | 小川琢治 (分子研) | 分子電子素子のための有機合成 |
| 33 11:45 ~ 12:10 | 山下正廣 (都立大理) | ナノワイヤー単分子量子磁石の創製 |
| 34 12:10 ~ 12:15 | 薬師久弥 (分子研) | おわりに |

銅蛋白質の構造・物性の分子科学

2003年3月5日(水)~6日(木)岡崎コンファレンスセンター

March 5

Chair T. Kitagawa (Okazaki National Research Institutes)

| | | |
|-------------|--|--|
| 13:00-13:30 | G. W. Canters (University of Leiden, The Netherland) | Engineering Electron Transfer in Copper Proteins |
| 13:30-13:50 | N. Nakamura (Tokyo University of Agriculture and Technology) | Electrochemical Properties of Poly(ethylene Oxide)-Modified Blue Copper Proteins |
| 13:50-14:10 | S. Hirota (Kyoto Pharmaceutical University) | Structural Change of Apoplastocyanin Studied by Photocleavable Modification |

- Chair K. Tanizawa (Osaka University)
- 14:10-14:30 T. Kohzuma (Ibaraki University)
UV Resonance Raman Spectroscopy of Blue Copper Proteins
- 14:30-15:00 N. Kostic (Iowa State University, USA)
Configurational Fluctuations in Electron-Transfer Reactions of Blue-Copper Proteins
- Chair M. Kodera (Doshisha University)
- 15:20-15:50 A. Vila (University of Rosario, Argentina)
Insights on the Electronic Structure of Electron Transfer Copper Centers in Proteins by Paramagnetic NMR Spectroscopy
- 15:50-16:10 M. Ubbink (University of Leiden, The Netherland)
Complexes of Copper Proteins and Their Redox Partners
- Chair S. Itoh (Osaka City University)
- 16:10-16:40 K. Tanizawa (Osaka University)
Spectrophotometric and Crystallographic Detection of Catalytic Intermediates of Bacterial Copper Amine Oxidase
- 16:40-17:00 K. Kano, N. Fujieda, and T. Ikeda (Kyoto University)
Electron Transfer Property of Quinohemoprotein Aminodehydrogenase
- 17:00-17:30 D. M. Dooley (Montana State University, USA)
Structure and Reactivity of Cofactor Biogenesis in Amine Oxidases and Galactose Oxidase
- 18:00- Small Party (at Sanguria 2F)
- March 6
- Chair H. Masuda (Nagoya Institute of Technology)
- 8:30-8:50 S. Itoh (Osaka City University)
The First Detection of Mononuclear Copper(II)-Peroxo Complex
- 8:50-9:10 M. Kodera (Doshisha University)
Reversible O₂-Binding of Dicopper(I) Complexes of Sterically Hindered Hexapyridine Ligands
- 9:10-9:30 K. Fujisawa (University of Tsukuba)
Artificial Chemical Models Probing the Structures and Functions of Blue Copper Proteins
- Chair A. Odani (Nagoya University)
- 9:30-9:50 I. Kinoshita, R. Miyamoto, A. Hamazawa, J. Teraoka, R. Tanaka, T. Hishioka, K. Isobe (Osaka City University)
A Novel Tripod Systems Producing the Stable μ -Superoxo Dicopper(II) and the Unprecedented Interaction with Porphyrins
- 9:50-10:10 Y. Funahashi (Nagoya Institute of Technology)
Introduction of Tetrahedral Distortion to Copper Complexes and Its Effect on the Oxygen Adduct Formation
- Chair S. Suzuki (Osaka University)
- 10:30-10:50 M. Ullmann (University of Heidelberg, Germany)
The pH Titration of Blue Copper Proteins
- 10:50-11:10 A. Kikuchi (RIKEN Harima Institute/SPring-8)
Ethylene Receptor Protein—A New Biological Function of Copper—
- 11:10-11:30 T. Kurahashi,^{1,3} M. Isobe,¹ H. Kai² (¹Nagoya University, ²Tottori University, ³Institute for Molecular Science)
Molecular Mechanism for Diapause Termination of the silkworm, *Bombyx mori*
- Chair T. Sakurai (Kanazawa University)
- 11:30-11:50 T. Ogura (The University of Tokyo)
Resonance Raman Spectra of Cytochrome *c* Oxidase Reconstituted in Phospholipid Vesicles
- 11:50-12:20 S. Mazumdar (Tata Institute of Fundamental Research, India)
Role of Metal Ion on the Stability of the Dinuclear Copper A Site of Cytochrome *c* Oxidase
- Chair S. Aono (Okazaki National Research Institutes)
- 13:30-13:50 H. Morita (Ehime University)
NMR and Raman Spectral Analyses for the Molecular Mechanism of Metal-Ion Sensing in the Cyanobacterial Cell
- 13:50-14:10 H. Ogata and Y. Higuchi (Himeji Institute of Technology)
High Resolution X-ray Structural Studies of [NiFe]hydrogenase
- Chair O. Yamauchi (Kansai University)
- 14:10-14:30 T. Sakurai (Kanazawa University)
Structure-Function Relationship of Muticopper Oxidases, Japanese lacquer tree Laccase and *Myrothecium verrucaria* Bilirubin Oxidase
- 14:30-14:50 S. Suzuki (Osaka University)
Spectral and Functional Characterization of Multicopper Nitrite Reductase
- 14:50-15:20 L. Banci (University of Florence)
Copper Homeostasis: A Structural Genomics Approach

原子分子のナノ力学 原子・分子の操作と組立

2003年3月19日(水) 岡崎コンファレンスセンター

- 9:30-9:40 はじめに
小宮山政晴(岡崎国立共同研究機構・分子科学研究所)
- 9:40-10:00 「ナノ力学による原子・分子の操作・組立に向けて SPM 技術のさらなる展開」
富取正彦(北陸先端科学技術大学院大学・材料科学研究科)
- 「原子のナノ力学的操作・組立実験」へ向けて
- 10:00-10:20 「半導体・絶縁体表面での力学的原子操作組立」
新井豊子(北陸先端科技大・材料、科技団) 富取正彦
- 10:20-10:50 「半導体原子の力学的原子操作組立」
菅原康弘(大阪大学・大学院工学研究科) 森田清三
- 10:50-11:20 「原子間力制御による原子操作とナノ構造構築」
長谷川幸雄(東京大学・物性研究所) 江口豊明
- 「原子・分子のナノ力学的操作・組立理論」へ向けて
- 11:20-11:50 「電子・原子構造計算による力学的原子操作組立技術の解析」
渡邊聡(東大院工) 塚田捷、佐々木成朗
- 13:00-13:30 「タンパク質1分子操作の計算機シミュレーション」
岩橋建輔(岡崎国立共同研究機構・計算科学研究センター) 岡崎進
- 「生体高分子のナノ力学的操作・組立実験」へ向けて
- 13:30-14:00 「生体高分子および生体高分子・ナノチューブハイブリッド素材の操作・組立」
猪飼篤(東工大) 長田俊哉、荒川秀雄、岡嶋孝治
- 14:00-14:30 「生体用機能化カーボンナノチューブの操作・組立」
秋田成司(大阪府立大学・大学院工学研究科) 吉村成弘、中山喜萬
- 「分子のナノ力学的操作・組立実験」へ向けて
- 14:30-15:00 「ナノプローブによる分子の分極配向・配座の直接制御」
山田啓文(京都大学・大学院工学研究科) 小林圭
- 15:00-15:30 「分子ピンセットによる絶縁体酸化物表面上での力学的分子操作組立」
福井賢一(東京工業大学・大学院理工学研究科) 山越葉子
- 「新しい原子・分子技術」へ向けて
- 15:50-16:10 「ナノプローブ誘起化学変換による有機分子組織体の構築」
杉村博之(名古屋大学院工) 斎藤永宏、高井治
- 16:10-16:40 「力学的原子操作による量子化コンダクタンスの形成と原子移動の観察」
保坂純男(群馬大学・工学部) 曾根逸人
- 16:40-17:10 「力学的手法を用いた表面磁性測定技術の確立と電子スピン操作」
末岡和久(北海道大学・大学院工学研究科) 武笠幸一
- 17:10-17:40 「走査型アトムプローブによる原子操作組立構造の解析」
谷口昌宏(金沢工業大学・工学部) 西川治
- 17:40-18:00 おわりに ナノ力学による原子・分子の操作・組立への期待
森田清三(大阪大学・大学院工学研究科)
- 18:10- 懇親会

(4) 施設利用

機器利用

分子制御レーザー開発研究センター

(前期)

| | | |
|--|--------------|-------|
| 波長可変パルスレーザー光を用いたシリコン単結晶の過度熱超電力効果 | 山形大学理学部 | 佐々木 実 |
| 半導体および絶縁体薄膜の分析評価 | 豊橋技術科学大学 | 吉田 明 |
| 高効率マイクロチップレーザーに関する研究開発 | 和歌山県工業技術センター | 伊東 隆喜 |
| NaV ₂ O ₅ のラマン散乱 | 東京大学物性研究所 | 末元 徹 |
| チタン酸ストロンチウムの発光及びラマン分光 | 東京理科大学理学部 | 樋口 透 |

(後期)

| | | |
|------------------------|--------------|-------|
| 半導体および絶縁体薄膜の分析評価 | 豊橋技術科学大学 | 吉田 明 |
| 高効率マイクロチップレーザーに関する研究開発 | 和歌山県工業技術センター | 伊東 隆喜 |

分子スケールナノサイエンスセンター

(前期)

| | | |
|---|----------------|-------|
| 非平面ポルフィリン鉄(III)錯体におけるスピントロニクスオーバー | 東邦大学医学部 | 中村 幹夫 |
| 新規炭素系物質の構造と電子物性の解明 | 法政大学工学部 | 緒方 啓典 |
| ESCA による金属表面の深さ方向分析 | 石川工業高等専門学校 | 山田 健二 |
| 希土類マンガナイトの物性の研究 | 豊橋技術科学大学 | 亀頭 直樹 |
| 機能性触媒の表面状態 | 豊橋技術科学大学 | 角田 範義 |
| 金属錯体のクロモトローピーと構造制御 | 愛知教育大学 | 中島 清彦 |
| Polystyrene-block-poly(methylacrylate)の局所分子運動性とマイクロ相分離構造の相関 | 名古屋工業大学 | 嶋田 繁隆 |
| 磁性ガーネットおよび Nd-Fe-B 系薄膜の磁気特性 | 名古屋工業大学 | 安達 信泰 |
| イオン会合を用いた結晶構造制御および新規な反応場の開発研究 | 名古屋工業大学 | 小野 克彦 |
| アモルファス合金の磁気特性と電子物性 | 名古屋工業大学 | 山田 正明 |
| 遷移金属錯体分子とその組織的集合体の構造と機能 | 名古屋工業大学 | 山口 修平 |
| 準結晶の磁性 | 名古屋大学情報文化学部 | 松尾 進 |
| 60p 電子系を有するフラレン誘導体をベースにした分子複合系の構築と機能 | 名古屋大学大学院環境学研究所 | 村田 静昭 |
| 放射光を用いたナノ構造体の形成 | 名古屋大学大学院工学研究科 | 堀 勝 |
| 超微粒子磁性 (Co 超微粒子系のスピングラス相転移) | 三重大学教育学部 | 佐光三四郎 |
| 微小有機結晶の構造解析 | 和歌山大学システム工学部 | 山門 英雄 |
| 有機分子および錯体の構造解析 | 姫路工業大学工学部 | 北村 千寿 |
| ピロール環状多量体の合成と構造 | 愛媛大学機器分析センター | 宇野 英満 |
| 半導体および絶縁体薄膜の評価 | 豊橋技術科学大学 | 吉田 明 |
| 金属結合タンパク質の電子顕微鏡下の可視 | 生理学研究所 | 春日井 雄 |
| Li 添加フラレン化合物 Li_xC_{60} の ESR と磁化率 | 姫路工業大学理学部 | 小林 本忠 |
| 高分子固体表面から成長した“孤立”高分子鎖の分子運動性 | 名古屋経済大学短期大学部 | 坂口 真人 |
| ランガサイト型圧電結晶の構造解析に基づく圧電特性の解明 | 名古屋工業大学工学部 | 大里 齋 |
| 金属錯体・タンパク質複合化による人工酵素の構築 | 名古屋大学大学院理学研究科 | 渡辺 芳人 |
| ピリルピンオキシダーゼの構造・機能相関 | 金沢大学理学部化学科 | 櫻井 武 |
| 新規ホスフィン錯体の合成と、金属錯体による中性気体分子の吸着挙動の解明 | 福岡教育大学 | 長澤五十六 |
| 幾何学的競合系の構造相転移 | 筑波大学 | 小野田雅重 |

(後期)

| | | |
|--|-------------------|-------|
| ESCA による半導体表面層の分析 | 石川工業高等専門学校電子情報工学科 | 山田 健二 |
| 生体マルチメタルセンターによる小分子変換機構 | 金沢大学理学部 | 櫻井 武 |
| ポルフィリン異性体 - 鉄(III)錯体の電子状態に関する研究 | 東邦大学医学部 | 中村 幹夫 |
| 半導体および絶縁体薄膜の評価 | 豊橋技術科学大学 | 吉田 明 |
| 機能性金属錯体の構造と反応性の制御 | 愛知教育大学理科室講座 | 中島 清彦 |
| 金属錯体・タンパク質複合化による人工酵素の構築 | 名古屋大学大学院理学研究科 | 渡辺 芳人 |
| 放射光を用いた微細構造体の形成 | 名古屋大学大学院工学研究科 | 堀 勝 |
| ランガサイト型圧電結晶の構造解析に基づく圧電特性の解明 | 名古屋工業大学工学部 | 大里 齋 |
| イオン会合を用いた結晶構造制御および新規な反応場の開発研究 | 名古屋工業大学応用化学科 | 小野 克彦 |
| アモルファス合金の磁気特性と電子構造および結晶化解析 | 名古屋工業大学 | 山田 正明 |
| 有機分子および金属錯体の X 線構造解析 | 姫路工業大学大学院工学研究科 | 北村 千寿 |
| ピロール環状多量体の合成と構造 | 愛媛大学機器分析センター | 宇野 英満 |
| 希土類マンガナイトの物性の研究 | 豊橋技術科学大学 | 亀頭 直樹 |
| 磁性ガーネット薄膜の面内、および垂直磁化特性 | 名古屋工業大学 | 安達 信泰 |
| 新規ナノ炭素系物質の構造と電子物性の解明 | 法政大学工学部 | 緒方 啓典 |
| Co 超微粒子系のスピングラス転移 | 三重大学教育学部 | 佐光三四郎 |
| 準結晶の磁性 | 名古屋大学情報文化学部 | 松尾 進 |
| polystyrene-block-poly(methyl acrylate)のマイクロ相分離構造と局所分子運動性の相関 | 名古屋工業大学 | 嶋田 繁隆 |
| フラレン化合物 $\text{K}_x\text{Rb}_{3-x}\text{C}_{70}(x = 1, 2, 3)$ の ESR と磁化率 | 姫路工業大学大学院理学研究科 | 小林 本忠 |
| 単核非ヘム鉄錯体によるカテコールの酸素添加開裂反応の機構解明 | 京都大学大学院工学研究科 | 人見 穰 |
| スピンドロップ法による水中水分子の運動性の評価 | 名古屋経済大学短期大学部 | 坂口 真人 |

| | | |
|---|----------|----------------|
| グリシンペタインを生合成する形質転換植物の機能ゲノミクスとプロテオミクスによる研究 | 基礎生物学研究所 | RONAN, Sulpice |
| 新規ホスフィン錯体の合成と、金属錯体による中性気体分子の吸着挙動の解明 | 福岡教育大学 | 長澤五十六 |
| 金属酵素活性中心モデル錯体の構造と機能 | 名古屋工業大学 | 山口 修平 |

計算機利用

「固体メタンおよび水の特性」を始め132件

(5) UVSOR 施設利用

(前期)

| | | |
|---|----------------------|-------|
| XANES を用いたモリブデン-バナジウム酸化物負極の電子構造解析 | 東京工業大学大学院理工学研究科 | 脇原 将孝 |
| Si および Al K 殻 XANES によるセラミック多孔体の構造評価 | 埼玉工業大学工学部 | 有谷 博文 |
| AlN 多形およびサイアロンの Al-K 端 XANES による評価 | 京都大学大学院工学研究科 | 田中 功 |
| リチウム二次電池正極材料の構造解析 | 京都大学大学院エネルギー科学研究科 | 小澤 尚志 |
| 固溶型高活性アバタイトの局所構造解析と固溶効果の解明 | 京都工芸繊維大学工学部 | 中平 敦 |
| X 線リソグラフィにおいてのレジスト露光感度の波長依存性について | 姫路工業大学高度産業科学技術研究所 | 内海 裕一 |
| XAFS による金属錯体における硫黄、塩素、および臭素化学種の状態分析 | 福岡大学理学部 | 栗崎 敏 |
| BL1A の整備 | 分子科学研究所 | 繁政 英治 |
| アルキルアンモニウムカドミウムクロライドの光損傷機構 | 山形大学理学部 | 大西 彰正 |
| 遷多金属酸化物の真空紫外反射分光 | 東京大学大学院工学系研究科 | 十倉 好紀 |
| ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸収・発光および寿命測定 | 早稲田大学理工学部 | 大木 義路 |
| スピネル酸化物における固有発光の探索 | 信州大学工学部 | 伊藤 稔 |
| 真空紫外光用フッ化物蛍光材料の光学特性の研究 | 大阪女子大学理学部 | 河相 武利 |
| 高圧下の酸素凝集相の紫外分光と光化学反応 | 姫路工業大学理学部 | 赤浜 裕一 |
| 真空紫外励起蛍光体の吸収スペクトル、PL 励起スペクトル測定 | 鳥取大学工学部 | 田中 省作 |
| 放射光とレーザーの組み合わせによる半導体および絶縁体の変調反射分光 | 岡山大学理学部 | 有本 収 |
| 配向ポリメチレンナフタレートフィルムの蛍光スペクトル | 徳島文理大学工学部 | 大内 伊助 |
| BL1B の整備 | 分子科学研究所 | 繁政 英治 |
| 水素結合型強誘電体の真空紫外分光 | 大阪電気通信大学工学部 | 大野 宣人 |
| LiCAF 系結晶の真空紫外分光 | 分子科学研究所 | 猿倉 信彦 |
| ワイドギャップ半導体材料の高エネルギーバンド構造の評価 | 豊橋技術科学大学 | 若原 昭浩 |
| H ₂ O/Si(100)表面からの電子励起刺激イオン脱離 | 名古屋大学大学院理学研究科 | 田中慎一郎 |
| ZnO(0001)表面へのアンモニア吸着に対する表面ステップの役割の解明 | 東京工業大学大学院理工学研究科 | 小澤 健一 |
| 光誘起相転移物質の光電子分光 | 分子科学研究所 | 高橋 和敏 |
| BL2B1 の整備 | 分子科学研究所 | 高橋 和敏 |
| FEL と SR の同期実験 | 分子科学研究所 | 下條 竜夫 |
| BL3A1 整備 | 分子科学研究所 | 繁政 英治 |
| 1、2 価分子陽イオンの生成と解離過程 | 大阪市立大学大学院工学研究科 | 増岡 俊夫 |
| ポンププローブ分光による価電子過程ダイナミクス | 分子科学研究所 | 見附孝一郎 |
| GaAs 系における Surface Photo-voltage 効果の時間応答性 | 佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター | 鎌田 雅夫 |
| 金属 / 半導体のスピン及び角度分解光電子分光 III | 香川大学教育学部 | 高橋 尚志 |
| 角度分解光電子分光による遷移金属 / GaAs の電子状態の研究 | 分子科学研究所 | 高橋 和敏 |
| BL5A の整備 | 分子科学研究所 | 高橋 和敏 |
| SR 励起した有機物単結晶中の励起子の発光寿命 | 神戸大学発達科学部 | 中川 和道 |
| GaN 系紫外線受光素子の軟 X 線領域での受光特性研究 | 三重大学工学部 | 元垣内敦司 |
| アモルファス半導体の光誘起構造変化に関する研究 | 岐阜大学工学部 | 林 浩司 |
| 水星探査機搭載用多層膜グレーティングの性能評価と光電物質の量子効率の測定 | 宇宙科学研究所 | 吉川 一朗 |
| solar-B X 線望遠鏡のフライト用裏面照射型 CCD の特性評価 | 国立天文台 | 原 弘久 |
| 希ガス固体表面に形成される水クラスターの光励起脱離機構の解明 | 学習院大学理学部 | 荒川 一郎 |
| 磁性多層膜の軟 X 線磁気力 - 回転 | 東北大学多元物質科学研究所 | 江島 丈雄 |
| BL5B の整備 | 分子科学研究所 | 繁政 英治 |
| 遠赤外光領域における表面増強赤外吸収の測定 | 北海道大学触媒化学研究センター | 大澤 雅俊 |

| | | |
|---|---|---|
| 酸化物プロトン導電体 $\text{SrZr}_{1-x}\text{Yb}_x\text{O}_3$ の赤外スペクトル 2次電池材料のミリ波反射測定 | 東北大学多元物質科学研究所 神戸大学分子フォトサイエンス研究センター | 神嶋 修 太田 仁 |
| 遠赤外顕微分光法の開発と有機伝導体の金属・絶縁体転移の電子状態 Investigation on Non-Formi-Liquid behavior in Ce-compounds 価数揺動物質 $\text{YbX}(X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te})$ の赤外スペクトル タングステン酸塩における放射光とレーザーを用いた時間分解過度吸収分光 拡散接合化合物半導体の界面制御 BL6A1 赤外分光器整備 $(\text{RE}_{1-x}\text{AE}_x)\text{MnO}_3$ ($\text{RE} = \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}; \text{AE} = \text{Sr}, \text{Ca}$) の真空紫外反射スペクトル VUV リソグラフィ用光学材料の吸収特性 (II) AlGaN 半導体の発光励起測定とその時間分解 (II) 圧電結晶ランガサイトの反射吸収分光 GaN 系紫外線受光素子の受光特性研究 価数揺動物質 $\text{YbX}(X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te})$ の電子状態 強相関物質の可視 - VUV 反射スペクトル $\text{RPdX}(R = \text{La}, \text{Ce}, X = \text{P}, \text{As}, \text{Sb})$ の真空紫外反射スペクトル II 真空紫外光 CVD で作製した光学薄膜の特性評価 BL7B の整備 シンクロトロン放射光を用いたテルル化亜鉛のエッチング特性 未分光 UVSOR-Bending 軟 X 線照射による可視発光スペクトル 放射光を用いたナノ構造体の形成 SR 照射時の光学デバイスの Carbon Contamination に関するテスト実験 UVSOR 光による PTFE 薄膜の形成過程の評価 UVSOR 光を用いたフッ素系樹脂材料の微細加工技術の開発 メチル基及びハロゲン原子を含む化合物の内殻励起後の超高速解離過程 アモルファスカーボン薄膜中の π 結合含有率の評価 イオン導電性酸化物の格子欠陥と電子構造の評価 リチウム二次電池電極材料の電子状態解析 XANES を用いたモリブデン - パナジウム酸化物負極の結合解析 磁性多層膜の軟 X 線ファラデー回転 BL8B1 分光器の制御系の改造 $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Ir}_2\text{S}_4$ の真空紫外スペクトル (Pb,Sn)/Si 及び ErP/InP ナノ構造の高分解能光電子分光 アルキルニトリル、アルキルイソニトリルの光解離過程 電子・イオン・コインシデンス分光法を用いた表面におけるサイト選択 新型コインシデンス分光器の立ち上げとシリコン単結晶上に吸着した2層目の水とアンモニアの内殻励起イオン脱離の研究 固溶型高活性アパタイトの XAFS による局所改造解析と固溶効果の解明 窒化物半導体の Al-K 内殻励起による可視発光 水素結合型強誘電体の VUV スペクトル | 神戸大学大学院自然科学研究科 神戸大学大学院自然科学研究科 神戸大学大学院自然科学研究科 佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター 分子科学研究所 分子科学研究所 上智大学理工学部 福井大学遠赤外領域開発研究センター 福井大学遠赤外領域開発研究センター 福井工業高等専門学校 三重大学工学部 神戸大学大学院自然科学研究科 神戸大学理学部 神戸大学大学院自然科学研究科 宮崎大学 分子科学研究所 佐賀大学 鳴門教育大学 名古屋大学大学院工学研究科 高エネルギー加速器研究機構 豊橋技術科学大学 豊橋技術科学大学 広島大学大学院理学研究科 姫路工業大学高度産業科学技術研究所 姫路工業大学工学部 京都大学大学院エネルギー科学研究科 東京工業大学大学院理工学研究科 東北大学多元物質科学研究所 分子科学研究所 神戸大学 名古屋大学大学院工学研究科 姫路工業大学高度産業科学技術研究所 愛媛大学理学部 高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 京都工芸繊維大学工学部 金沢大学工学部 大阪電気通信大学工学部 | 木村 真一 木村 真一 難波 孝夫 鎌田 雅夫 庄司 一郎 繁政 英治 桑原 英樹 福井 一俊 福井 一俊 北浦 守 平松 和政 難波 孝夫 岡村 英一 木村 真一 黒澤 宏 繁政 英治 西尾 光弘 松川 徳雄 堀 勝 浦川 順治 吉田 明 岡田 浩 吉田 啓晃 神田 一浩 嶺重 温 八尾 健 内本 喜晴 渡辺 誠 下條 竜夫 難波 孝夫 曾田 一雄 神田 一浩 長岡 伸一 間瀬 一彦 中平 敦 直江 俊一 大野 宣人 |
| (後期) 複合型メタロシリケートの XAFS による構造解析 XANES を用いたルイス酸含有固体電解質の溶媒和構造の解析 窒化物半導体の Al-K 内殻励起による可視・紫外発光 XAFS によるスピネルの照射損傷の評価 生体必須元素を固溶した水酸アパタイトの生体活性への局所構造の影響 ZnO 薄膜中に過飽和固溶した Al および Ga の XANES による評価 MgO-ZnO 多層膜の Mg-K および Zn-L 3 端 XANES による評価 Li イオン二次電池用正極材料のリチウム脱離挿入に伴う電子状態変化 二次電子収量法を用いた Al-K XAFS 測定による Al-EDTA-F 三元錯体の局所構造解析 遷多金属酸化物の真空紫外反射分光 ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸収・発光および寿命測定 種々の方法により育成されたスピネル酸化物の発光特性の研究 | 埼玉工業大学工学部 東京工業大学大学院理工学研究科 金沢大学工学部 名古屋大学大学院工学研究科 京都工芸繊維大学 京都大学大学院工学研究科 京都大学大学院工学研究科 関西大学工学部 福岡大学理学部 東京大学大学院工学系研究科 早稲田大学理工学部 信州大学工学部 | 有谷 博文 脇原 将孝 直江 俊一 吉田 寿雄 中平 敦 田中 功 田中 功 荒地 良典 栗崎 敏 十倉 好紀 大木 義路 伊藤 稔 |

| | | |
|---|----------------------|-------|
| ワイドギャップ半導体材料の高エネルギーバンド構造の評価 | 豊橋技術科学大学 | 若原 昭浩 |
| 希土類イオンを添加したイオン結晶の真空紫外分光 | 岐阜大学工学部 | 山家 光男 |
| 放射光とレーザーを併用したフッ化物の内殻 2 光子分光 | 大阪歯科大学歯学部 | 辻林 徹 |
| 水素結合型強誘電体の真空紫外分光 | 大阪電気通信大学工学部 | 大野 宣人 |
| 高圧下の酸素凝集相の紫外分光と光化学反応 | 姫路工業大学理学部 | 赤浜 裕一 |
| 配向ポリメチレンテレフタレートフィルムの反射および蛍光スペクトル | 徳島文理大学工学部 | 大内 伊助 |
| 水溶液表面での光イオン化 | 九州大学大学院総合理工学研究院 | 旗野 嘉彦 |
| BL1B の整備 | 分子科学研究所 | 蓮本 正美 |
| LLF 系結晶の真空紫外分光 | 分子科学研究所 | 猿倉 信彦 |
| Rh(110)上の N ₂ O 分子の配向測定 | 北海道大学触媒化学研究センター | 松島 龍夫 |
| 電子 - イオン・コインシデンス分光法を用いた表面におけるサイト選択 | 愛媛大学 | 長岡 伸一 |
| TTTA の光電子分光と軟 X 線吸収 | 分子科学研究所 | 高橋 和敏 |
| BL3A 整備 | 分子科学研究所 | 中村 永研 |
| FEL と SR の同期実験 | 分子科学研究所 | 下條 竜夫 |
| 1, 2 価分子陽イオンの生成と解離過程 | 大阪市立大学大学院工学研究科 | 増岡 俊夫 |
| 放射光励起高分解分散分光および振動励起分子の放射光解離 | 分子科学研究所 | 見附孝一郎 |
| GaAs/Ti 系の表面光起電力効果 | 佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター | 鎌田 雅夫 |
| Co/GaAs, Co/NEA-GaAs の光電子分光 | 分子科学研究所 | 高橋 和敏 |
| BL5A の整備 | 分子科学研究所 | 高橋 和敏 |
| 磁性多層膜の軟 X 線磁気力 - 回転 | 東北大学多元物質科学研究所 | 江島 文雄 |
| Solar-BX 線望遠鏡のフライト用裏面照射型 CCD の特性評価 | 国立天文台 | 原 弘久 |
| 希ガス固体表面に形成される水クラスターの光励起脱離機構の解明 | 学習院大学理学部 | 荒川 一郎 |
| 水星探査衛星搭載用多層膜回折格子と光検出器の開発 | 宇宙科学研究所 | 吉川 一郎 |
| EUV 結像光学系光学素子の特性評価 | 名古屋大学大学院理学研究科 | 田原 譲 |
| カルコゲナイドガラスの照射構造変化に関する研究 | 岐阜大学工学部 | 林 浩司 |
| GaN 系紫外線受光素子の軟 X 線領域での受光特性研究 | 三重大学工学部 | 元垣内敦司 |
| 10 ~ 250 eV 励起によるアントラセン単結晶中の励起子生成効率 | 神戸大学発達科学部 | 中川 和道 |
| 軟 X 線多層膜偏光子の開発 III | 姫路工業大学高度産業科学技術研究所 | 新部 正人 |
| 希ガス第 45 次高調波 (17.8 nm) 用多層膜の反射率測定 | 佐賀大学ベンチャービジネスラボラトリー | 近藤 祐治 |
| BL5B の整備 | 分子科学研究所 | 蓮本 正美 |
| 遠赤外光領域での表面増強赤外吸収の測定 | 北海道大学触媒化学研究センター | 大澤 雅俊 |
| Li 2 次電池材料の低波数領域ミリ波反射測定 | 神戸大学分子フォトサイエンス研究センター | 太田 仁 |
| PrFe ₄ P ₁₂ の磁場下赤外スペクトル | 神戸大学 | 難波 孝夫 |
| Investigation on the non-Fermi liquid behavior in CeNiGe _{2-x} Si _x and CeCo _{1-y} Ni _y Ge ₂ | 分子科学研究所 | 木村 真一 |
| レーザーと SR を組み合わせた時間分解赤外過度吸収分光 | 佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター | 鎌田 雅夫 |
| BL6A1 の整備 | 分子科学研究所 | 木村 真一 |
| 有機超伝導体のフェルミ準位近傍の電子状態 | 分子科学研究所 | 木村 真一 |
| 拡散接合化合物半導体の界面制御 | 分子科学研究所 | 庄司 一郎 |
| RE ₂ Mo ₂ O ₇ , LaFeO ₃ , (RE,AE)MnO ₃ (RE = Pr, Nd, Sm, AE = Sr, Ca) の真空紫外スペクトル | 上智大学理工学部 | 桑原 英樹 |
| GaN 系紫外線受光素子の受光特性研究 | 三重大学工学部 | 平松 和政 |
| AlGaN 半導体の発光励起測定とその時間分解 (II) | 福井大学遠赤外領域開発研究センター | 福井 一俊 |
| SrAl ₂ O ₄ : Eu, Dy 単結晶の光吸収スペクトル | 福井工業高等専門学校 | 北浦 守 |
| アミノ酸蒸着膜およびスピコート薄膜の真空紫外分光 | 神戸大学発達科学部 | 蛭名 邦禎 |
| PrFe ₄ P ₁₂ の可視真空紫外スペクトル | 神戸大学大学院 | 難波 孝夫 |
| クラスターのしきい光電子スペクトルの測定 | 分子科学研究所 | 下條 竜夫 |
| BL7B の整備 | 分子科学研究所 | 蓮本 正美 |
| UVSOR 光照射によるフッ素樹脂材料の加工 | 豊橋技術科学大学 | 岡田 浩 |
| SOR 光照射テフロン薄膜堆積プロセスの研究 | 豊橋技術科学大学 | 吉田 明 |
| 放射光を用いた微細構造体の形成 | 名古屋大学工学研究科 | 堀 勝 |
| シンクロトロン放射光を用いたテルル化亜鉛のエッチング特性 | 佐賀大学 | 西尾 光弘 |
| SR ミラーの Carbon Contamination の研究 | 高エネルギー加速器研究機構 | 浦川 順治 |
| 磁性多層膜の軟 X 線ファラデー回転 | 東北大学多元物質科学研究所 | 渡辺 誠 |
| XANES を用いたバナジウム系リチウム電池酸化物負極の結合解析 | 東京工業大学大学院理工学研究科 | 内本 喜晴 |

| | | |
|---|------------------------|-------|
| GaN 系半導体の内殻吸収と内殻励起可視発光測定 (II) | 福井大学遠赤外領域開発研究センター | 福井 一俊 |
| リチウムイオン二次電池正極材料の電子状態解析 | 京都大学大学院エネルギー科学研究科 | 小澤 尚志 |
| Li イオン二次電池用正極材料のリチウム脱離挿入に伴う電子状態変化 | 関西大学工学部 | 荒地 良典 |
| DLC 薄膜の局所構造解析 | 姫路工業大学高度産業科学技術研究所 | 神田 一浩 |
| 混合導電性複合酸化物の電子構造の評価 | 姫路工業大学大学院工学研究科 | 嶺重 温 |
| BL8B1 分光器の調整 | 分子科学研究所 | 下條 竜夫 |
| 表面修飾単分散金属ナノ粒子の光電子分光 | 東北大学大学院理学研究科 | 田中 章順 |
| ErAs/GaAs 薄膜の角度分解光電子分光及び Zr-Al-Cu-Ni アモルファス合金の共鳴光電子分光 | 名古屋大学大学院工学研究科 | 曾田 一雄 |
| X 線シンチレータの評価 | 分子科学研究所 | 猿倉 信彦 |
| 電子、角度分解イオンコインシデンス装置の性能評価とシリコン単結晶表面のフッ化過程の研究 | 高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 | 小林 英一 |
| カーボンナノチューブの赤外吸収 | 信州大学工学部 | 伊藤 稔 |
| 非フェルミ液体系 YbRh ₂ Si ₂ の真空紫外反射スペクトル | 分子科学研究所 | 木村 真一 |

(6) ナノサイエンス支援

協力研究

| 課 題 名 | 代 表 者 | |
|--|----------------------|-------|
| 新規な有機 FET の開発 | 東京工業大学大学院総合理工学研究科 | 西田 純一 |
| 共役高分子電界効果トランジスターの製作と評価 | 早稲田大学理工学部 | 古川 行夫 |
| 和周波発生分光法による有機分子・シリコン界面の研究 | (財) 神奈川科学技術アカデミー | 大西 洋 |
| 電析法による酸化亜鉛 / 色素複合薄膜素子の作製と評価 | 岐阜大学大学院工学研究科 | 吉田 司 |
| エピタキシャル有機薄膜 FET の作成と界面機能 | 京都大学化学研究所 | 磯田 正二 |
| シリコンナノ電極と機能性有機分子を用いた電子素子の研究 | 愛媛大学理学部 | 小川 琢治 |
| 超高真空極低温 STM による共役系分子の光異性化反応のイメージング | 北海道大学電子科学研究所 | 中林 孝和 |
| 固体表面上における金属クラスターの光応答 | 東京大学大学院総合文化研究科 | 渡邊 一雄 |
| フォトクロミック分子のフェムト秒・ピコ秒分光 | 九州大学大学院理学研究院 | 関谷 博 |
| 新規ヘテロフラレンの生成とその反応機構に関する研究 | 理化学研究所 | 田中 秀樹 |
| 金属 - デンドリマーナノコンポジットの組成分析 | 東京理科大学工学部 | 鳥越幹二郎 |
| 質量分析による超微細金属ナノ粒子の構造解析 | 北陸先端科学技術大学院大学材料科学研究科 | 寺西 利治 |
| 気相法および液相法で作製したナノクラスター集合体の構造・物性の比較 | 名古屋工業大学材料工学科 | 隅山 兼治 |
| 湿式法によって調製した単分散ナノ粒子の構造解析 | 名古屋大学大学院工学研究科 | 米澤 徹 |
| 金クラスター、シリコンクラスターの構造評価 | 姫路工業大学大学院理学研究科 | 佐藤 井一 |
| 分子ローター構造を有する[Ni(dmit) ₂]塩の磁性 | 北海道大学電子科学研究所 | 中村 貴義 |
| ナノマグネットの創製 | 筑波大学化学系 | 大塩 寛紀 |
| クラスター錯体集積による低次元磁性体の開発 | 岐阜大学工学部 | 川村 尚 |
| 有機ラジカルカチオン塩の磁性 | 大阪電気通信大学工学部 | 青沼 秀児 |
| 光化学系遷移金属酵素の磁性 | 関西学院大学理工学部 | 河盛阿佐子 |
| 新規フェルダジールラジカルを用いた分子強磁性伝導体の開発 | 愛媛大学理学部 | 向井 和男 |
| 二次元磁性体の外場による磁気秩序相変換 | 九州大学大学院理学研究院 | 大場 正昭 |
| 金属内包フラレンの分子変換 | 筑波大学先端学際領域研究センター | 赤阪 健 |
| フラレンを用いたカルベン生成過程の解明 | 筑波大学先端学際領域研究センター | 若原 孝次 |
| 大規模分子系のシミュレーションとダイナミクス | 東京大学大学院工学系研究科 | 平尾 公彦 |
| 新規なナノスケール分子キャビティを活用した高反応性化学種安定化に関する理論研究 | 東京大学大学院理学系研究科 | 後藤 敬 |
| ナノクラスターの電子状態計算の効率化とその応用 | 早稲田大学理工学部 | 中井 浩巳 |
| 高周波元素の特性を活かした新規ナノスケール分子の開発 | 京都大学化学研究所 | 時任 宣博 |
| 励起状態の量子化学計算 | 岡山理科大学 | 西本 吉助 |
| ナノサイエンスを指向した新 3 座配位子系の分子設計と性質の探求 | 広島大学大学院理学研究科 | 山本 陽介 |
| カーボンナノチューブの構造と性質に関する理論研究 | 琉球大学教育学部 | 安藤 香織 |
| FET 構造による有機固体のキャリアー易動度の評価 | 学習院大学理学部 | 小谷 正博 |

施設利用

| | | |
|--|-----------------|-------|
| ボトム電極とトップ電極の共役高分子 FET の製作 | 早稲田大学理工学部 | 古川 行夫 |
| ナノサイエンスを指向した含ケイ素およびゲルマニウム新規化学種の理論的研究 | 筑波大学化学系 | 関口 章 |
| 大きな置換基を有する含ヘテロ元素ケイ素環状化合物の物性に関する理論的研究 | 群馬大学工学部 | 工藤 貴子 |
| ナノスケール遷移金属錯体の構造と反応の理論的研究 | 京都大学大学院工学研究科 | 榭 茂好 |
| 大規模計算による有機合成反応の解析・支援システム | 大阪大学産業科学研究所 | 山高 博 |
| 大規模分子設計のための電子状態に関する理論的研究 | 大阪産業大学工学部 | 酒井 章吾 |
| Mg を添加したフラレン化合物の ESR と磁化率 | 姫路工業大学大学院理学研究科 | 小林 本忠 |
| 金クラスター, シリコンクラスターの構造評価 | 姫路工業大学大学院理学研究科 | 佐藤 井一 |
| 蛋白質と核酸との特異的相互作用についての理論化学的研究 | 広島大学大学院理学研究科 | 相田美砂子 |
| フタロシアニンをはじめとする大環状 π 共役化合物の電子構造の理論的説明 | 熊本大学理学部 | 藤本 斉 |
| ナノサイズインテリジェント分子クラスターの創製 | 名古屋工業大学大学院工学研究科 | 尾中 証 |
| 分子性磁性体のナノ構造制御と磁気的性質 | 大阪府立大学総合科学部 | 細越 裕子 |
| 透明導電性単結晶薄膜の電気特性評価 | 神戸大学工学部 | 上田 裕清 |

2-9-3 共同研究実施件数一覧

分子科学研究所共同研究実施一覧

| 年度 項目 | '76～'95 | | '96 | | '97 | | '98 | | '99 | | '00 | | '01 | | '02 | | 備考 |
|---------------------------|---------|--------|--------|-------|--------|-------|--------|-------|--------|-------|--------|-------|--------|-------|-----|-------|----------------------------|
| | 件数 | 人数 | 件数 | 人数 | 件数 | 人数 | 件数 | 人数 | 件数 | 人数 | 件数 | 人数 | 件数 | 人数 | 件数 | 人数 | |
| 課題研究 | 72 | 571 | 2 | 18 | 3 | 23 | 1 | 5 | 1 | 5 | 2 | 12 | 7 | 41 | 5 | 35 | 人数： 登録人数 |
| 協力研究 | 2,488 | 2,673 | 92 | 130 | 117 | 181 | 107 | 157 | 115 | 212 | 119 | 249 | 100 | 223 | 124 | 259 | " |
| 招へい 協力研究 | 186 | 186 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 2 | 3 | 5 | 6 | 1 | 1 | " |
| 所長 招へい | 1,492 | 1,492 | 101 | 101 | 118 | 118 | 139 | 139 | 321 | 321 | 264 | 264 | 385 | 3857 | 124 | 124 | 人数： 旅費支給者 |
| 研究会 | 203 | 2,776 | 10 | 171 | 6 | 121 | 5 | 84 | 12 | 194 | 13 | 276 | 6 | 129 | 11 | 240 | " |
| 施設利用 I | 1,220 | 2,485 | 52 | 165 | 50 | 152 | 50 | 151 | 49 | 135 | 54 | 142 | 49 | 139 | 58 | 99 | 件数： 許可件数 人数： 許可人数 |
| 電子計算機 施設利用 (施設利用II) | 2,763 | 8,013 | 170 | 564 | 188 | 694 | 174 | 680 | 167 | 654 | 156 | 631 | 144 | 584 | 132 | 529 | " |
| 協力研究 (ナノ支援) | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | 32 | 67 | 人数： 登録人数 |
| 施設利用 (ナノ支援) | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | 13 | 40 | 件数： 許可件数 人数： 許可人数 |
| 合計 | 8,424 | 18,196 | 427 | 1,149 | 482 | 1,289 | 476 | 1,216 | 665 | 1,521 | 610 | 1,577 | 696 | 1,507 | 500 | 1,394 | |
| 経費 | 315,302 | | 20,390 | | 28,003 | | 18,645 | | 30,898 | | 32,080 | | 30,994 | | - | | 千円 |

* 施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用

('02 年度の数値は、2002.12 未現在)

分子科学研究所UVSOR共同研究実施一覧

| 年度 項目 | '85～'95 | | '96 | | '97 | | '98 | | '99 | | '00 | | '01 | | '02 | | 備考 |
|-------------|---------|-------|--------|-----|--------|-----|--------|-----|--------|-----|--------|-----|--------|-----|-----|-----|----------------------------|
| | 件数 | 人数 | 件数 | 人数 | 件数 | 人数 | 件数 | 人数 | 件数 | 人数 | 件数 | 人数 | 件数 | 人数 | 件数 | 人数 | |
| 課題研究 | 28 | 290 | 3 | 38 | 3 | 43 | 3 | 41 | 1 | 11 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 人数： 登録人数 |
| 協力研究 | 233 | 780 | 24 | 102 | 23 | 88 | 24 | 104 | 8 | 35 | - | - | - | - | - | - | " |
| 招へい 協力研究 | 66 | 66 | 1 | 1 | 1 | 1 | 2 | 2 | 2 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | " |
| 研究会 | 25 | 345 | 1 | 23 | 1 | 18 | 1 | 23 | 1 | 26 | 1 | 29 | 1 | 13 | 0 | 0 | 人数： 旅費支給者 |
| 施設利用 | 950 | 4,817 | 147 | 674 | 153 | 706 | 157 | 769 | 150 | 699 | 160 | 820 | 157 | 707 | 158 | 758 | 件数： 許可件数 人数： 許可人数 |
| 合計 | 1,302 | 6,298 | 176 | 838 | 181 | 856 | 187 | 939 | 162 | 773 | 161 | 849 | 158 | 720 | 158 | 758 | |
| 経費 | 113,535 | | 13,279 | | 14,068 | | 14,027 | | 12,951 | | 16,441 | | 16,512 | | - | | 千円 |

('02 年度の数値は、2002.12 未現在)