2-9 共同利用研究

2-9-1 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5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) 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。
- (5) 施設利用:研究施設に設置された機器の個別的利用。

同時計測法による分子2重イオン化のダイナミクスと2価イオン状態の研

2-9-2 2005年度の実施状況

(1) 課題研究

課題名 提案代表者 固体表面上の生体分子認識反応系の構築と構造解析 分子科学研究所 宇理須恆雄

(2) 協力研究

課題名(前期)	代表者		
RISM - モード結合理論を用いて調べる溶媒ゆらぎの時間変化と溶媒和構造変化	島根大学教育学部	西山	桂
金ナノ微粒子膜の近接場光学顕微鏡による光学測定	(独)物質・材料研究機構	北島	正弘
共鳴ラマン分光法を用いたセンサー蛋白質の構造と機能に関する研究	京都大学大学院工学研究科	鵜澤	尊規
SMOKEによる Ru(0001)基板上の Co 薄膜の磁性研究	東京大学大学院理学系研究科	雨宮	健太
純液体及び2成分混合溶液中のクラスター構造	福岡教育大学教育学部	小杉區	建太郎
DNA 塩基誘導体の光反応ダイナミクス	東京工業大学大学院理工学研究科	鈴木	正
ナノキャビティ内の芳香族分子のピコ、フェムト秒励起状態ダイナミクス	東京工業大学大学院理工学研究科	松下	慶寿
$(ET)_2$ MHg $(SCN)_4$ の電荷秩序相に関する振動分光学的研究	東京工芸大学工学部	比江島	易俊浩
光学スペクトルによるずれ応力効果の研究	山口東京理科大学基礎工学部	井口	眞
W および Q-band ESR による有機導体等の電子状態の研究	首都大学東京都市教養学部	溝口	憲治
分子性機能物質の極小結晶による構造決定、および物性測定	(独)産業技術総合研究所	田中	寿
分子性伝導体の微小結晶の構造決定と極低温伝導度・磁化率測定	東京大学大学院理学系研究科	小林	昭子
折れ曲がった骨格を有するドナーに基づく磁性伝導体の構造と物性	大阪府立大学大学院理学系研究科	藤原	秀紀
ヘムオキシゲナーゼ反応機構の解明	東北大学多元物質科学研究所	松井	敏高
化学ドープした DNA 鎖の電子状態測定	東京大学大学院新領域創成科学研究科	川合	真紀
軟X線による無機透明物質のアブレーション	筑波大学大学院数理物質科学研究科	村上	浩一
カーボンナノチューブネットワーク上への生体超分子の固定	横浜国立大学大学院工学研究院	荻野	俊郎
放射光を用いたカーボンナノチューブの加工制御に関する研究	名古屋大学	今泉	吉明
放射光励起表面光化学反応の STM を用いた実空間 " その場 " 観察	日本原子力研究所関西研究所放射光科学 研究センター	吉越	章隆
ZnTe 表面構造の照射による変化	佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター	小川	博司
金属内包フラーレンの極端紫外光吸収	岡山大学大学院自然科学研究科	久保園	圓芳博
胆汁酸ミセルのMDシミュレーション	大分大学教育福祉科学部	中島	俊男
マイクロチップ固体レーザーの紫外高調波発生に関する研究	大阪大学大学院工学研究科	佐々オ	卜孝友
レーザーによって構造・サイズ制御された金属微粒子の反応性	東京大学大学院総合文化研究科	真船	文隆

高エネルギー加速器研究機構物質構造科 伊藤 健二

分子ラジカルの内殻励起状態の分光とその崩壊ダイナミクスの研究	広島大学大学院理学研究科	和田	真一
Fe 基ホイスラー型合金の紫外線角度分解光電子分光	名古屋大学大学院工学研究科	曽田	一雄
テラヘルツ領域における銅スピネル化合物の電子状態の研究	神戸大学大学院自然科学研究科	難波	孝夫
計算機実験による液体の相分離ダイナミクスに関する研究	東北大学大学院理学研究科	福村	裕史
巨大 電子系化合物の効率的合成法の開発	名古屋大学大学院理学研究科	山口	茂弘
芳香族化合物の直接官能基化を経る 共役多環式芳香族化合物合成	慶應義塾大学理工学部	垣内	史敏
ジオキソレン錯体の多電子酸化還元系の構築と水分子の活性化	山形大学大学院理工学研究科	近藤	展征
オキソスルフィドタングステン錯体の生成と同定	大阪市立大学大学院理学研究科	杉本	秀樹
多核 NMR による FixL センサー機構の解明	(独)理化学研究所	城	宜嗣
常磁性 NMR による活性部位近傍変異体ヘムタンパク質の解析	九州大学大学院農学研究院	野中	大輔
赤外振動分光法によるヘムタンパク質補欠分子の変形と配位子結合特性の 解析	千葉大学大学院薬学研究院	根矢	三郎
ヘムセンサー蛋白質 NPAS2 のラマン分光を用いた構造解析と機能相関	京都府立大学大学院農学研究科	佐上	郁子
固体コヒーレントフォノン励起における光パルス位相制御の効果	(独)物質・材料研究機構	石岡	邦江
リチウム二次電池用正極活物質の粒子表面と内部における充放電機構の研究	(独)産業技術総合研究所	小林	弘典
超分子構造体の示すスピン状態スイッチング測定	城西大学理学部	加藤	立久
環拡張ポルフィリン金属錯体の磁気特性の解明	京都大学大学院理学研究科	清水	宗治
α'-(BEDT-TTF) ₂ IBr ₂ の電荷秩序転移に伴う電子状態の変化	岡山大学大学院自然科学研究科	神戸	高志
分子性機能物質の極小結晶による構造決定、および物質測定	(独)産業技術総合研究所	田中	寿
環状チアジルラジカル結晶の構造解析と磁気特性評価	名古屋大学物質科学国際研究センター	藤田	涉
TTP 系分子性導体の合成と構造・物性に関する研究	愛媛大学工学部	御崎	洋二
積層プレート構造半導体波長変換素子の開発	中央大学理工学部	庄司	一郎
テラヘルツコヒーレント放射光の発生と分光研究への応用	京都大学原子炉実験所	高橋	俊晴
The state of the s	3 1417 (3 147) 7 2 (377)	1-511-5	12.11
課 題 名(後期)	代表者		
SMOKEによる Ru(0001)基板上の Co 薄膜の磁性研究	東京大学大学院理学系研究科	雨宮	健太
共鳴ラマン分光法を用いたセンサー蛋白質の構造と機能に関する研究	京都大学大学院工学研究科	鵜澤	尊規
振動分光学的手法による dmit 塩の電荷整列現象の研究、及び、分子性導体の引張り環境下における光学測定の開発	(独)理化学研究所	山本	貴
有機導電体の電荷整列相に対する圧力効果の研究	京都大学大学院理学研究科	前里	光彦
環拡張ポルフィリン金属錯体の磁気特性の解明	京都大学大学院理学研究科	清水	宗治
W および Q-band ESR による有機導体等の電子状態の研究	首都大学東京大学院理学研究科	溝口	憲治
金属内包フラーレン単結晶やウィスカーの示すスピン状態決定	城西大学理学部	加藤	立久
シアノバクテリア由来光化学系 II 複合体の単結晶 W-band EPR 研究	関西学院大学	河盛頭	E佐子
折れ曲がった骨格を有するドナーに基づく磁性伝導体の構造と物性	大阪府立大学大学院理学系研究科	藤原	秀紀
TTP 系分子性導体の合成と構造・物性に関する研究	愛媛大学工学部	御崎	洋二
遷移金属イオンの配位・溶媒和構造に関する研究	九州大学大学院理学研究院	大橋	和彦
ヘムオキシゲナーゼ反応機構の解明	東北大学多元物質科学研究所	松井	敏高
カーボンナノチューブネットワーク上への生体超分子の固定	横浜国立大学大学院工学研究科	荻野	俊郎
放射光を用いたカーボンナノチューブの加工制御に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	今泉	吉明
胆汁酸ミセルのMDシミュレーション	大分大学教育福祉科学部	中島	俊男
計算機実験による液体の相分離ダイナミクスに関する研究			裕史
半導体レーザ励起マイクロチップ固体レーザの物性と応用	東北大学大学院理学研究科	福村	
十等体レーリ励起マイフロテップ回体レーリの物性と心用	東北大学大学院理学研究科 東海大学大学院工学研究科	福村 大塚	建樹
単一縦モードマイクロチップYAGレーザーを用いた小型テラヘルツ波光源の開発			建樹
単一縦モードマイクロチップYAGレーザーを用いた小型テラヘルツ波光源	東海大学大学院工学研究科	大塚	建樹孝幸
単一縦モードマイクロチップYAGレーザーを用いた小型テラヘルツ波光源の開発	東海大学大学院工学研究科 (独)理化学研究所	大塚 渋谷 佐々オ	建樹孝幸
単一縦モードマイクロチップYAGレーザーを用いた小型テラヘルツ波光源の開発 マイクロチップ固体レーザーの紫外高調派発生に関する研究	東海大学大学院工学研究科 (独)理化学研究所 大阪大学大学院工学研究科	大塚 渋谷 佐々オ	建樹孝幸本孝友郎
単一縦モードマイクロチップYAGレーザーを用いた小型テラヘルツ波光源の開発 マイクロチップ固体レーザーの紫外高調派発生に関する研究 積層プレート構造半導体波長変換素子の開発	東海大学大学院工学研究科 (独)理化学研究所 大阪大学大学院工学研究科 中央大学理工学部	大塚 渋谷 佐々才 庄司	建樹孝幸本孝友郎
単一縦モードマイクロチップYAGレーザーを用いた小型テラヘルツ波光源の開発 マイクロチップ固体レーザーの紫外高調派発生に関する研究 積層プレート構造半導体波長変換素子の開発 単結晶二酸化チタンを用いた可視光応答光触媒反応の実現	東海大学大学院工学研究科 (独)理化学研究所 大阪大学大学院工学研究科 中央大学理工学部 東京大学大学院理学系研究科	大海 佐々 左 庄 司 守川	建孝 孝郎雲江
単一縦モードマイクロチップYAGレーザーを用いた小型テラヘルツ波光源の開発 マイクロチップ固体レーザーの紫外高調派発生に関する研究 積層プレート構造半導体波長変換素子の開発 単結晶二酸化チタンを用いた可視光応答光触媒反応の実現 固体コヒーレントフォノン励起における光パルス位相制御の効果	東海大学大学院工学研究科 (独)理化学研究所 大阪大学大学院工学研究科 中央大学理工学部 東京大学大学院理学系研究科 (独)物質・材料研究機構	大 渋 佐 々 司 川 岡	建孝 孝一春邦孝樹幸 友郎雲江夫
単一縦モードマイクロチップYAGレーザーを用いた小型テラヘルツ波光源の開発 マイクロチップ固体レーザーの紫外高調派発生に関する研究 積層プレート構造半導体波長変換素子の開発 単結晶二酸化チタンを用いた可視光応答光触媒反応の実現 固体コヒーレントフォノン励起における光パルス位相制御の効果 テラヘルツ領域における希土類化合物 CeB ₆ の電子状態の研究	東海大学大学院工学研究科 (独)理化学研究所 大阪大学大学院工学研究科 中央大学理工学部 東京大学大学院理学系研究科 (独)物質・材料研究機構 神戸大学大学院自然科学研究科	大渋 佐庄守石難	建孝 孝一春邦孝茂樹幸 友郎雲江夫弘
単一縦モードマイクロチップYAGレーザーを用いた小型テラヘルツ波光源の開発マイクロチップ固体レーザーの紫外高調派発生に関する研究積層プレート構造半導体波長変換素子の開発単結晶二酸化チタンを用いた可視光応答光触媒反応の実現固体コヒーレントフォノン励起における光パルス位相制御の効果テラヘルツ領域における希土類化合物 CeB ₆ の電子状態の研究巨大電子系化合物の効率的合成法の開発	東海大学大学院工学研究科 (独)理化学研究所 大阪大学大学院工学研究科 中央大学理工学部 東京大学大学院理学系研究科 (独)物質・材料研究機構 神戸大学大学院自然科学研究科 名古屋大学大学院理学研究科	大渋 佐庄守石難山	建孝 孝一春邦孝茂史樹幸 友郎雲江夫弘敏
単一縦モードマイクロチップYAGレーザーを用いた小型テラヘルツ波光源の開発 マイクロチップ固体レーザーの紫外高調派発生に関する研究 積層プレート構造半導体波長変換素子の開発 単結晶二酸化チタンを用いた可視光応答光触媒反応の実現 固体コヒーレントフォノン励起における光パルス位相制御の効果 テラヘルツ領域における希土類化合物 CeB ₆ の電子状態の研究 巨大 電子系化合物の効率的合成法の開発 芳香族化合物の直接官能基化を経る 共役多環式芳香族化合物合成	東海大学大学院工学研究科 (独)理化学研究所 大阪大学大学院工学研究科 中央大学理工学部 東京大学大学院理学系研究科 (独)物質・材料研究機構 神戸大学大学院自然科学研究科 名古屋大学大学院理学研究科 慶應義塾大学理工学部	大渋 佐庄守石難山垣塚谷 夕司川岡波口内	建孝 孝一春邦孝茂史樹幸 友郎雲江夫弘敏
単一縦モードマイクロチップYAGレーザーを用いた小型テラヘルツ波光源の開発マイクロチップ固体レーザーの紫外高調派発生に関する研究積層プレート構造半導体波長変換素子の開発単結晶二酸化チタンを用いた可視光応答光触媒反応の実現固体コヒーレントフォノン励起における光パルス位相制御の効果テラヘルツ領域における希土類化合物 CeB6 の電子状態の研究巨大電子系化合物の効率的合成法の開発芳香族化合物の直接官能基化を経る 共役多環式芳香族化合物合成タングステン錯体の可逆的硫黄化反応と金属-硫黄結合の特性解明	東海大学大学院工学研究科 (独)理化学研究所 大阪大学大学院工学研究科 中央大学理工学部 東京大学大学院理学系研究科 (独)物質・材料研究機構 神戸大学大学院自然科学研究科 名古屋大学大学院理学研究科 慶應義塾大学理工学部 大阪市立大学大学院理学研究科	大渋 佐庄守石難山垣杉塚谷 々司川岡波口内本	建孝 孝一春邦孝茂史秀樹幸 友郎雲江夫弘敏樹

兵庫県立大学大学院生命理学研究科 小倉 尚志

長井 雅子

法政大学工学部

紫外共鳴ラマン分光法によるチトクロム c 酸化酵素の反応追跡

共鳴ラマン分光法によるヘモグロビンのヘムの配向に関する研究

ヘムセンサー蛋白質 NPAS2 のラマン分光を用いた構造解析と機能相関 京都府立大学大学院農学研究科 佐上 郁子 様々な酸素活性種を含む金属錯体の構造と反応性相関 金沢大学大学院自然科学研究科 鈴木 正樹 レーザーバンチスライスによるコヒーレント放射光発生の基礎研究 名古屋大学大学院工学研究科 高嶋 圭史 オゾン分子の内殻励起状態の研究 新潟大学教育研究院自然科学系 副島浩一 分子ラジカルの内殻励起状態の分光とその崩壊ダイナミクスの研究 広島大学大学院理学研究科 和田 真一 軟X線による無機透明物質のアブレーション 筑波大学大学院数理物質科学研究科 村上 浩一 溶液中のクラスターに関する研究 福岡教育大学教育学部 小杉健太郎 ESR による複核金属内包フラーレンのスピン状態の研究 首都大学東京都市教養学部 兒玉 健 刺激応答性ブロックポリマーを用いた金ナノ微粒子の作製と触媒活性 大阪大学大学院理学研究科 青島 貞人 フェノール分子の高振動状態ダイナミクスの実時間測定 東京工業大学資源化学研究所 藤井 正明 ベンゼンを含むクラスターのレーザー分光学的研究 東京大学大学院総合文化研究科 住吉 吉英 高出力型リチウム二次電池の正極活物質のナノ界面に関する研究 (独)産業技術総合研究所 小林 弘典 放射光励起シリコン表面化学反応の実空間観察技術の開発 日本原子力研究所関西研究所放射光科学 寺岡 有殿 研究センター アシルフェニルアラニンにより誘起されるリン脂質二分子膜の形態変化 金沢大学大学院自然科学研究科 太田 明雄 シトクロム c 翻訳後修飾酵素の作用機構の解明 北海道大学大学院理学研究科 内田 毅 マイクロリアクターを用いた光反応の研究 東京工業大学大学院理工学研究科 松下 慶寿 光励起した芳香族分子の励起状態ダイナミクス 東京工業大学大学院理工学研究科 鈴木 正 放射光源加速器の超高真空に関する研究 高エネルギー加速器研究機構 堀 洋一郎 誘起導体におけるダイナミックスの ESR による研究 風間 重雄 中央大学大学院理工学研究科 生細胞内におけるミトコンドリア RNA の可視化検出法の開発 東京大学大学院理学系研究科 名取 穣

(3) 研究会

分子科学コア領域と関連領域の最先端 2005年6月4日(土)~5日(日) 岡崎コンファレンスセンター

6月4日(土)

9:00-9:05 はじめに

セッション1:水素結合の物理化学 9:05-11:05

ディスカッションリーダー 橋本健朗(首都大)

藤井朱鳥(東北大) 気相分子クラスターから観る水素結合 ネットワーク構造と新奇性

大峰 巌(名大) 水、水、水 水の多様なすがた

11:05-13:30 セッション2:新しい液体とその科学

ディスカッションリーダー 平田文男(分子研)

浜口宏夫(東大) イオン液体:この不思議なもの

西川恵子(千葉大) ゆらぎが超臨界流体の物性を決める!

6月5日(日)

9:00-11:00 セッション3:より複雑な表面・界面における分子ダイナミックスと反応へのアプローチ

ディスカッションリーダー 松本吉泰(分子研)

大西 洋(神戸大) 二次元開放系の化学反応

渡會 仁(阪大) 液液界面反応の新規計測法と機能解析

12:15-14:15 セッション4:生体分子情報の生成と伝達

ディスカッションリーダー 笹井理生(名大)

田口英樹(東大) 「時計仕掛けのゆりかご」シャペロニン GroEL の作用機構

北尾彰朗(東大) 生体超分子の機能を生み出す分子間相互作用とダイナミクス

14:45-16:45 セッション5:アト秒への道

ディスカッションリーダー 大森賢治(分子研)

鳥塚健二(産総研) 時間領域から見たキャリアエンベロープ位相制御技術

渡部俊太郎(東大) アト秒パルスの発生と今後の展開

ロドプシンの仲間・G蛋白質共役型レセプターの機能と構造 2005年6月15日(水)~17日(金) 岡崎コンファレンスセンター

6月15日(水) 13:25-13:30	開会の挨拶
13:30-13:50	開去の秩存 日下部岳広(兵庫県大) ホヤの新奇光受容器とオプシンファミリーの多様性
13:50-14:10	小島大輔(東大) ゼブラフィッシュ幼生における VAL オプシン遺伝子の役割
14:10-14:30	今井啓雄(京大) ノックインマウスを用いた光情報伝達の解析
14:30-14:50	今元 泰 (奈良先端大) ロドプシンの情報伝達における蛋白質間相互作用の直接観測
15:05-15:25	井上圭一, 寺嶋正秀(京大) レチナールタンパク質のエネルギーと構造変化を観る
15:25-15:45	古谷祐詞 1,2 、寺北明久 2,3 、七田芳則 2,3 、神取秀樹 1,2 ($^{1.}$ 名大、 $^{2.}$ CREST・JST、 $^{3.}$ 京大) 赤外分光法による視物質ロドプシンの情報伝達過程におけるタンパク質の構造変化解析
15:45-16:05	石黒正路(サントリー生物有機研) ロドプシン光活性化モデルによる機能的GPCR構造
16:05-16:25	諏訪牧子(産総研) Computational system for predicting function of Orphan receptors
16:40-17:00	倭 剛久(名大) イエロープロテインの吸収波長制御・光異性化・エネルギー流の解析
17:00-17:20	櫻井 実(東工大) 分子動力学シミュレーションによるロドプシンの活性化機構の研究
17:20-17:40	美宅成樹(名大) 膜貫通へリックス本数分布のシミュレーションから見た7本膜貫通へリックス型膜タンパク質の進化要因
18:00-19:00	レチナールプロテイン国際会議組織委員会
6月16日(木)	
9:00-9:20	針山孝彦(浜松医大) 魚類視物質に存在する 2 種の発色団 淡水が生んだ視覚の多様性?
9:20-9:40	入江俊明(秋田大) 梶原昌五(岩手大) 東 眞美(阪教大) 妹尾春樹(秋田大) 関 隆晴(阪教大) 貯蔵レチノイドとしてのレチナールの生物学的意義:その進化的背景
9:40-10:00	岩佐達郎、浦野和雄、高島大貴(室蘭工大) 岡野恵子、中村 整 (電通大) イモリ嗅上皮に発現するリポカリン類と嗅覚受容体
10:00-10:20	宮下洋子、山田大邦、山田惠子、森谷常生(札幌医大) 皮膚色素細胞の光受容
10:40-11:00	寺北明久(京大) ロドプシンファミリーの多様性:アゴニストとして全トランス型レチナールの結合能を持つロドプシン類
11:00-11:20	津田基之(兵庫県立大) GPCRモデルとしてのタコロドプシン
11:20-11:40	武田茂樹(群馬大) ランダムペプチドライブラリーを用いたGPCRに対するペプチドリガンドの同定
11:40-12:00	斎藤祐見子、丸山 敬(埼玉医大) Structure and functional relationship of melanin-concentrating hormone receptor
13:20-13:40	上田昌宏(阪大) 走化性情報伝達系の細胞内 1 分子可視化解析
13:40-14:00	林 文夫(神戸大) 円板膜におけるロドプシンのブラウン運動
14:00-14:20	中田裕康(東京都神経研) アデノシン受容体と P2 受容体のヘテロダイマー形成
14:20-14:40	黒瀬 等 (九大) アンジオデンシン受容体を介したシグナル伝達
15:00-15:20	佐藤元康(学習院大) Pael受容体による細胞死とmRNAの品質管理
15:20-15:40	齊藤 修(長浜パイオ大) 伊藤政之(東邦大) 久保義弘(生理研) RGS8によるGタンパク質共役受容体系の制御
15:40-16:00	久冨 修(阪大) 魚類のフォスデューシンとGタンパク質
16:00-16:20	深田吉孝 (東大) 網膜視細胞 G タンパク質の脂質修飾の生理的役割
16:20-18:00	ポスターセッション

6月17日(金)

9:00-9:20

神取秀樹(名工大) 古細菌ロドプシンの赤外分光

須藤雄気(名工大) 9:20-9:40

膜蛋白質複合体の分子間認識機構:古細菌ロドプシンと情報伝達蛋白質との相互作用

内藤 晶、川村 出(横国大)、池田陽一、須藤雄気、岩本真幸、下野和美、加茂直樹(北大)斉藤 肇(広大) 9:40-10:00 固体NMRによるセンサリーロドプシン II とトランスデューサーの相互作用にともなう局所構造及び局所運動変

化の検出

10:15-10:35 大谷弘之(東工大)

トランス体ならびにシス体を発色団とするレチナール蛋白類の蛍光特性から見た励起状態緩和過程

佐々木裕次(高輝度研) 10:35-10:55

膜タンパク質分子のピコレベル運動 1 分子計測:バクテリオロドプシンの場合

10:55-11:15 光岡 董(産総研)

pH10.0 でのバクテリオロドプシンの立体構造とプロトン放出機構

11:30-11:50

神山 勉(名大) バクテリオロドプシンのプロトン輸送サイクルにおける水分子の動き

11:50-12:10

前田章夫(イリノイ大) バクテリオロドプシンの分子内水分子の役割

12:10-12:30 加茂直樹、橋 場剛、奈良敏文(北大)菊川峰志、荒磯恒久(北大)井原邦夫(名大)

H.turkmenica の光プロトンポンプ

辻本和雄(北陸先端大) 12:30-12:50

Halorubrum の Na⁺/H⁺ アンチポーター阻害剤耐性を持つ菌株の単離と光学的性質

12:50

多様な水素結合系と量子効果

2005年7月8日(金)~9日(土) 岡崎コンファレンスセンター

7月8日(金)

13:20-13:30 関谷 博(九大院理) Opening remarks

13:30-15:00 座長: 冨宅喜代一

大島康裕(分子研)

ベンゼン・水クラスターの内部運動ダイナミックス: ・水素結合の分子間ポテンシャル決定を目指して

江幡孝之(広島大院理)

水素結合クラスターの X-H 伸縮振動の緩和ダイナミックス 迫田憲治,岡部智絵,西信之,関谷博(九大院理・分子研)

7- アザインドール 2 量体における励起状態 2 重プロトン移動ダイナミクス

15:15-16:45 座長:藤井朱鳥

栗原和枝 (東北大多元研)

固 - 液界面において水素結合により形成する分子マクロクラスター

常行真司,赤木和人(東大院理) 凝集水に見られるプロトンリレー型反応

三枝洋之(横浜市立大)

DNA 塩基の微細水和構造とダイナミクス

17:00-18:30 座長:藤井正明

立川仁典(横浜市立大)

核・電子の量子効果を考慮した水和クラスターの理論的研究

冨宅喜代一(神戸大院理) 溶解過程における水和構造の役割 阿部肇・井上将彦(富山医薬大薬)

糖質との水素結合によりらせんを形成する人工ポリピリジン分子の開発

7月9日(土)

9:00-10:30 座長:大島康裕

池田進(KEK)

中性子プローブの革新と水素量子効果

杉本秀彦(中大理工)

水素結合系プロトンの量子絡み合い状態 牛山浩、高塚和夫 (東大院総合文化) 水素移動反応における多次元・多体効果

10:45-12:45 座長:大橋和彦

田原太平(理研)

水和電子からの共鳴ラマン散乱:e - 水素結合系の振動スペクトル

酒井誠、大森努、藤井正明(東工大資源研)

溶液・気相両面から見た水素結合クラスターの振動緩和

佐藤春実、尾崎幸洋(関西学院大理工)

赤外分光法と量子化学計算法による生分解性ポリマーの C-H···O 水素結合の研究

藤井朱鳥、宮崎充彦、榎本怜子、須原健一郎、水瀬健太、江幡孝之、三上直彦(東北大院理)

大サイズクラスターカチオンにおける3次元水素結合ネットワークの成長

12:45-12:55 藤井正明 (東工大資源研) Closing remarks

若手分子科学研究者のための物理化学研究会

2005年6月8日(水) 分子科学研究所 研究棟302号室

13:20-13:30 挨拶

13:30-17:00 講演

13:30-14:10 「テラヘルツ電磁波の発生・検出とその応用」

大阪大学レーザーエネルギー学研究センター 谷 正彦助教授

14:10-14:50 「有機化学反応の量子化学シミュレーション」

広島大学大学院理学研究科 相田美砂子教授

15:00-15:40 「非平衡物理と分子科学」

九州大学大学院理学研究院 吉森 明助教授

15:40-16:20 「金属クラスター・金属ナノ粒子研究の基礎と最前線」

分子科学研究所 佃 達哉助教授

凝縮系のコヒーレンス制御と超高速ダイナミクス

2006年3月2日(木)~3日(金) 岡崎コンファレンスセンター

3月2日(木)

13:00-13:10 挨拶

セッション1 (13:10-15:10) 座長:香月浩之(分子研)

13:10-13:50 宗像利明(大阪大) 吸着分子の振動励起状態

13:50-14:30 大西 洋(神戸大) 四次元ラマン効果を利用した埋没界面の時間領域振動分光

14:30-15:10 渡邊一也(分子研) 表面吸着種の振動コヒーレンスとコヒーレント表面フォノンのダイナミクス

セッション 2 (15:40-17:40) 座長:渡邊一也(分子研)

15:40-16:20 オリバーライト(北大) 超短光パルスレーザーによるコヒーレントフォノンの発生/検出

16:20-17:00 北島正弘(物材機構) 半導体/半金属におけるコヒーレントフォノンダイナミクス

17:00-17:40 中村一隆(東工大) フェムト秒時間分解×線回折によるコヒーレントフォノン測定

3月3日(金)

セッション3 (9:30-10:50) 座長:石岡邦江(物材機構)

9:30-10:10 菱川明栄(分子研) 極短パルス強光子場による反応イメージング

10:10-10:50 大森賢治(分子研) アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御

セッション4 (11:10-12:30) 座長:長谷宗明(物材機構)

11:10-11:50 大槻幸義(東北大) 凝縮相における分子コヒーレントダイナミクスの最適制御シミュレーション

11:50-12:30 萱沼洋輔(大阪府大) 超高速ポンプ・プローブ分光に見る波束振動と、フォノンの真空に刻む分子メモリー

セッション5 (13:30-14:50) 座長:松田晃孝(分子研)

13:30-14:10 岡本裕巳(分子研) プラズモンモードの光学的可視化とコヒーレンス

14:10-14:50 中野秀俊(NTT) フェムト秒レーザプラズマ軟 X 線による光照射シリコンの時間分解 XAFS 計測

セッション6 (15:10-16:20) 座長:千葉 寿(分子研)

15:10-15:40 恩田 健(東工大) 有機伝導体の超高速光誘起相転移とコヒーレンス制御の可能性 15:40-16:20 岡本 博(東大) 有機半導体の光誘起相転移におけるコヒーレント振動とその制御

16:20-16:30 まとめ

未来型分子触媒の創製

2005年12月6日(火)~7日(水) 岡崎コンファレンスセンター

12月6日(火)

13:00-13:10 澤村正也(北大) 趣旨説明

13:10-14:55 表面分子触媒【part 1】

> 魚住泰広(分子研) 両親媒性高分子担持遷移金属触媒による水中有機変換反応 尾中篤(東大) ゼオライト極性ナノ空間での不安定化学種の安定貯蔵と反応加速

小林修(東大) 高分子カルセランド型触媒の開発

表面分子触媒【part 2】 15:25-17:45

> 海老谷幸喜(阪大) 超効率的化学変換に向けた固体表面への触媒機能の集積 原賢二(北大) 単結晶シリコン表面を基盤とする単分子層触媒の開発 和田健司(京大) シルセスキオキサンを活用した固体触媒の開発

水野哲孝(東大) 構造・機能の精密制御による環境調和型選択酸化触媒反応系の開発

12月7日(水)

9:00-10:10 クラスター分子触媒【part 1】

川口博之(分子研) 前周期金属ヒドリド錯体反応場による分子変換反応の開拓

永島英夫(九大) 高分子ゲル反応場はクラスター触媒のブレークスルーになるか?

クラスター分子触媒【part 2】 10:40-12:25

佃達哉(分子研) 金ナノクラスターの空気酸化触媒作用に対するサイズ効果

蛋白質超分子空間を用いたクラスター触媒制御 上野隆史(名大)

藤原尚(近大) 有機分子機能化金属ナノクラスターの界面制御とキラルナノ分子触媒

13:45-16:05 超分子触媒

> 江東林(分子研) デンドリマーを用いた水の光還元および水素発生 寺田眞浩(東北大) 基質認識型 Brønsted 酸触媒による不斉合成

徳永信(北大) 均一系触媒反応における剛直なナノサイズ配位子の効果

笹井宏明(阪大) 不均一系不斉触媒構築の新機軸

櫻井英博(分子研) 総括・事務連絡 16:05-16:10

金属内包フラレーン研究の新展開 基礎と応用

2005年11月7日(月)~8日(火) 岡崎コンファレンスセンター

11月7日(月)

9:55-10:00 久保園芳博(岡山大院自然) 研究会の主旨説明

10:00-11:00 金属内包フラーレンの生成,構造評価 【座長 加藤立久】

> フラーレン及び単層カーボンナノチューブの生成過程 鈴木信三(首都大東京) 気相移動能法を用いた金属内包フラーレンの構造測定と反応 菅井俊樹 (名大院理)

11:00-12:00 金属内包フラーレンの分光学 | 【座長 赤阪 健】

> 兒玉健(首都大東京) 磁気共鳴分光法からみた金属内包フラーレン

加藤立久(城西大理) 金属内包フラーレンの分子磁性 フラーレン物質の構造・物性・デバイス応用!【座長 斎藤 晋】

13:00-14:00 Valery N. Khabashesku (Rice University) Functionalized fullerene materials: synthesis, characterization and Applications

> 岩佐義宏(東北大金研) 分子性固体としてのフラーレン

フラーレン物質の構造・物性・デバイス応用 || 【座長 篠原久典】 14:00-15:00

> 斎藤 晋(東工大院理) 金属内包ナノチューブ系の電子構造と物性

Kosmas Prassides (University of Durham) Temperature- and pressure-induced negative thermal expansion in rare-earth fullerides

15:30-17:00 新しい内包フラーレンの発見・合成と物性の発現 【座長 岩佐義宏】

> 篠原久典(名大院理) 金属カーバイド内包フラーレンの発見とダイナミックス

内包フラーレン合成への有機化学的アプローチ 村田靖次郎(京大化研)

谷垣勝己(東北大院理) C_{60} および $H_2@C_{60}$ を利用したフォノンと電子物性に関する研究

17:00-18:30 フラーレンの電界効果デバイス応用 【座長 谷垣勝己】

> フラーレン FET の輸送特性:サイズ・温度依存性から 藤原明比古 (北陸先端大)

近松真之(産総研) フラーレン誘導体のデバイス応用

久保園芳博(岡山大院自然) フラーレンを使った電界効果デバイスの可能性

11月8日(火)

金属内包フラーレン, フラーレン誘導体の材料化学 【座長 村田靖次郎】 9:00-10:00

赤阪 健(筑波大 TARA セ) フラーレン科学の新展開:金属内包フラーレンの化学

高口 豊(岡山大院環境) フラロデンドロンを用いた機能性材料開発

金属内包フラーレンの分光学 II 【座長 鈴木信三】 10:30-12:00 金属内包フラーレンの軟 X 線吸収とイオン化 見附孝一郎 (分子研) 日野照純(千葉大工・院自然) 複核金属内包フラーレンの光電子分光 山岡人志(理研播磨研) Pr@C₈₂の Pr L_{III} 吸収端における高分解能共鳴 X 線非弾性散乱 フラーレンの構造,反応,ナノテク利用 【座長 日野照純】 13:00-14:30 永瀬 茂(分子研) 金属内包フラーレンの構造と電子状態 野内 亮 (岡山大理、JST-CREST)フラーレンのナノマニピュレーション 井上 崇(豊田中研) C₂ 分子内包金属内包フラーレン 14:30-15:30 金属内包フラーレンの精密構造と動的特性解明 【座長 永瀬 茂】 下谷秀和(東北大金研) La₂@C₈₀ における La イオンの運動 放射光粉末法による金属内包フラーレン構造研究の現状 西堀英治(名大院工) 15:30-15:40 見附孝一郎 (分子研) 研究会のまとめと事務連絡 第3回分子科学研究所高磁場 NMR フォーラム「超高磁場 NMR によるナノサイエンス研究の最先端と展望」 2005年11月15日(火) 分子科学研究所 山手3号館2階 10:00-10:10 Opening remarks 10:10-10:50 榛葉信久(味の素) ヘルペスウイルスプロテアーゼの二量体形成機構の解析と阻害剤の設計 10:50-11:30 津田正史(北大) LC-NMR と DOSY 法を用いた天然有機分子の構造解析と新規化合物探索ストラテジーの開発 13:00-13:40 菊地 淳(理化研/横浜市立大) 動植物の均一安定同位体標識化に基づく多次元 NMR メタボローム基盤技術構築 13:40-14:20 村田道雄(阪大) 脂質膜中に形成される分子集合体 NMR による立体配座と分子認識機構の解明 14:40-15:20 齋藤公児(新日本製鐵) 超高磁場固体 NMR で益々発展する無機材料分野での展望 15:20-16:20 伊倉光彦(トロント大学) 特別講演「蛋白質 - 蛋白質複合体の NMR 攻略法: 転写制御因子を例として」 16:20-16:30 Closing remarks 生体における金属イオンの役割とその利用 2006年3月18日(土)~20日(月) 岡崎コンファレンスセンター 3月18日(土) 【座長:渡辺芳人(名大院理)】 13:30 - 14:00 田中健太郎(東大院理、JST さきがけ) バイオインスパイアード・テンプレートを利用した金属イオンの精密集積 14:00 - 14:30 山口和也(阪大院理) 金属酵素モデル錯体を利用した亜硝酸イオン還元系の構築 福住俊一(阪大院工) 14:30 - 15:20 特別講演「生体関連電子移動反応における金属イオンの役割とその利用」 【座長:青野重利(岡崎統合バイオ)】 吉澤一成(九大先導物質化学研) 15:40 - 16:10

Enzymatic Function of Dopamine b-monooxygenase Mediated by Cu(III)-oxo Species

伊東 忍(阪市大院理) 16:10 - 16:40

酸素運搬タンパク質ヘモシアニンによるフェノール類の酸素化反応

樋口恒彦(名市大院薬) 16:40 - 17:10

シトクロム P450 中心構造錯体の行う酵素機能に関連した 0-0 結合開裂反応

17:10 - 17:40 小倉尚志 (兵庫県大院生命)

ミトコンドリア中のチトクロム c 酸化酵素の反応機構

3月19日(日)

【座長:城 宜嗣(理研播磨研究所)】

當舎武彦(岡崎統合バイオ) 9:00 - 9:30

珊瑚由来アレンオキサイド合成酵素における構造機能相関:類似した構造をもつカタラーゼとの比較

榊 利之(富山県大工) 9:30 - 10:00

ビタミン D を代謝するシトクロム P450 の構造と機能

松井敏高(東北大多元研) 10:00 - 10:30

ヘムオキシゲナーゼによるヘム分解機構

10:30 - 11:00	小林克彰(岡崎統合バイオ) ヘムを活性中心とするフェニルアセトアルドキシム脱水酵素の反応機構と軸配位子の効果
	【座長:伊東 忍(阪市大院理)】
11:20 - 12:10	鈴木正樹(金沢大自然) 特別講演「金属錯体による酸素分子活性化の化学」
	【座長:齋藤正男(東北大多元研)】
13:30 - 14:00	石森浩一郎(北大院理) 鉄代謝制御蛋白質におけるへム結合様式とその機能発現の分子機構
14:00 - 14:30	小森博文(兵庫県大院生命) 一酸化炭素センサーとして働く転写制御因子 CooA の X 線結晶構造解析
14:30 - 15:20	桜井 弘(京都薬大) 特別講演「生体関連金属による血糖制御 バナジウムやジンク錯体による糖尿病治療は可能か?」
	【座長:林 高史(阪大院工)】
15:40 - 16:10	菊地和也(阪大院工) 錯体化学を応用した生体機能可視化センサー分子のデザイン・合成・応用
16:10 - 16:40	秋山修志(JST さきがけ) 蛋白質の研究に X 線小角散乱が貢献できること
16:40 - 17:10	菊地晶裕(理研播磨研究所) BioXAS による金属タンパク質の構造解析
17:10 - 17:40	高妻孝光(茨城大院理工) Aromatic Ring Interaction in a Blue Copper Protein, Pseudoazurin
3月20日(月)	
	【座長:樋口芳樹 (兵庫県立大院生命)】
9:00 - 9:30	水谷泰久(神戸大・分子フォトサイエンスセンター) リガンド脱離に伴うヘムタンパク質の構造ダイナミクス:時間分解共鳴ラマン分光法による研究
9:30 - 10:00	廣田 俊(京都薬大、JST さきがけ) 一酸化炭素を利用した金属蛋白質の構造 機能相関の研究
10:00 - 10:30	上野隆史(名大・物質科学国際研究センター) 蛋白質複合化による金属錯体の精密反応制御
10:30 - 11:00	林 高史(阪大院工) ミオグロビン及びシトクロム P450cam の補欠分子へムにおけるプロピオン酸側鎖の役割解明

第1回ナノメディスン討論会~分子科学から医学まで(2nd MB-ITR)~ 2006年2月12日(日)~13日(月) 岡崎コンファレンスセンター

2月12日(日)

2/3 12 11 (11)		
13:00-13:10	宇理須恒雄	開会挨拶
13:10-13:50	Chiming Wei (Johns Hopkins Univ.)	Future Development of Nanomedicine: From Basic to Clinical
13:50-14:30	飯島澄男(名城大、NEC)	ナノカーボン材料の科学と応用
14:30-15:10	大内憲明 (東北大院医学)	がん医療を目指した機能性ナノ粒子と一分子可視化技術の開発
15:30-16:00	片岡一則(東大院工学)	ナノバイオテクノロジーが拓く未来医療 ~ ピンポイント診断・治療のためのナノデバイス設計 ~
16:00-16:30	梅澤喜夫(東大院理学)	細胞シグナルの可視化プローブ
16:30-17:00	濱口宏夫(東大院理学)	ラマン分光法による単一酵母生細胞の生物活性と分子イメージング
17:00-17:30	庭野道夫(東北大電通研)	半導体表面赤外分光で見る溶液中の生体分子
17:50-18:20	松本和子(早稲田大)	蛍光性希土類錯体が拓くバイオテクノロジー
18:20-19:00	井原康夫 (東大医学)	セクレターゼの謎
2月13日(月)		
9:00-9:40	和田昭允(理化研ゲノム科学融合研究センター)" 井の中の蛙 " と " 井の外の蛙 "
10:00-10:30	永井健治(北大電子科学研)	生理機能イメージング技術とその医学応用
10:30-11:00	小澤岳昌(分子研)	細胞内オルガネラに局在するタンパク質の新たな可視化技術
11:00-11:30	水野 彰(豊橋技科大)	DNA- 分子を対象とする反応・計測のための要素技術の開発
11:30-12:00	富永真琴(岡崎統合バイオ)	温度感受性 TRP チャネルの構造・機能と生理学的意義
13:00-13:30	塩谷光彦 (東大院理学)	精密金属配列に基づく分子機能創成 人工 DNA から動的ナノカプセル まで
13:30-14:00	江 東林 (分子研)	機能性デンドリティック高分子の設計と医薬分野への応用
14:00-14:30	竹中繁織(九州工大)	ガンを電気チップで調べる
14:30-15:00	湯田坂雅子(JST, NEC 基礎研)	カーボンナノホーンのドラッグキャリアー応用の可能性

15:00-15:30	芝 清隆 (癌研究所)	ナノメディスンにおける人工タンパク質の役目
15:50-16:30	盛 英三(国立循環器病センター)	次世代循環器疾患治療を実現するためのナノメディシンプロジェクトの概 要
16:30-17:00	宇理須恒雄(分子研)	膜タンパクバイオセンサーの開発と応用
17:00-17:30	菅原正雄 (日大)	チャンネル型情報変換と生体分子センシング
17:30-18:00	井出 徹(阪大院生命機能)	チャネルタンパクの光学的、電気生理学的 1 分子測定
18:00-18:30	野田昌晴(基生研)	体液塩濃度恒常性制御の脳内機構
18:30	宇理須恒雄	閉会挨拶

(4) UVSOR 施設利用

(前期)

(111,111)			
Ti 表面に生成する陽極酸化チタニア中の S の局所構造解析	大阪府立大学工学部	中平	敦
軟X線照射誘起発光を利用したセラミックス照射効果に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	吉田	朋子
L 殻XANESによる MFI 担持 Mo 触媒の還元活性種の評価	埼玉工業大学工学部	有谷	博文
リチウムイオン電池正極材料であるポリアニオン系鉄化合物の電子構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	中山	将伸
XAFS測定による金属フタロシアニン錯体の状態分析	福岡大学理学部	栗崎	敏
XANESによる AIN 薄膜中のナノ構造解析	京都大学大学院工学研究科	田中	功
窒化物半導体の Al-K 内殻励起による可視・紫外発光 3	金沢大学工学部	直江	俊一
層状及びスピネル酸化物のアルミニウムの電子状態の解明	(独)産業技術総合研究所	小林	弘典
アミノ酸のイオウ Κ 殻および水晶のシリコン Κ 殻スペクトル測定	神戸大学発達科学部	中川	和道
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
3d 遷移金属酸化物の真空紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	十倉	好紀
極端紫外光照射による無機蛍光体の励起現象(2)	新潟大学工学部	太田	雅壽
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・発光及び寿命 測定	早稲田大学理工学部	大木	義路
真空紫外励起新規蛍光体の発光・励起スペクトル	大阪電気通信大学工学部	大野	宣人
複合フッ化物の真空紫外発光特性評価	分子科学研究所	猿倉	信彦
酸素高圧凝集相の紫外分光と励起状態の圧力効果	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	赤浜	裕一
圧電性 LGS 系物質の反射・発光・励起スペクトルの測定	信州大学工学部	伊藤	稔
誘電体結晶中の T1+ 型不純物センターの光学特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相	武利
窒化物半導体系紫外線受光素子の軟×線領域での受光特性研究	三重大学工学部	元垣内	的敦司
光収量によるアモルファス半導体の光誘起現象に関する研究	岐阜大学大学院工学研究科	林	浩司
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
表面修飾単分散 Si ナノ粒子の高分解能光電子分光 II	神戸大学工学部	田中	章順
アルカリ金属吸着による鉄超薄膜の磁性変化	分子科学研究所	中川	剛志
Electronic structure of CeNiGe $_{2\rightarrow x}Si_x$ studied by Ce 4d-4f resonant and angle-resolved photoemission spectroscopy	分子科学研究所	木村	真一
BL-5U におけるユーザータイム前調整および整備作業	分子科学研究所	伊藤	孝寛
低次元CDW化合物の低励起エネルギー角度分解光電子分光	分子科学研究所	伊藤	孝寛
Fe–V–Al 合金および Zr–Al–Cu–Ni 合金の価電子帯電子構造 II	名古屋大学大学院工学研究科	曽田	一雄
UVSOR(FEL)光によるアミノ酸の絶対不斉合成	(独)科学技術振興機構	井上	佳久
ビスマスクラスターの相転移	富山大学理学部	池本	弘之
誘電体およびf電子系のミリ波分光	神戸大学大学院自然科学研究科	岡村	英一
赤外反射吸収分光による有機 / 金属界面の研究	分子科学研究所	櫻井	陽子
高周波誘電体の遠赤外スペクトル	名古屋工業大学しくみ領域環境材料教育類	大里	齊
高圧下テラヘルツ分光による強相関系のキャリアダイナミクス	分子科学研究所	木村	真一
BL6B の調整とテラヘルツ顕微鏡の設置	分子科学研究所	木村	真一
紫外及び可視用ナノフォトニック結晶の光学的特性評価に関する研究	三重大学工学部	元垣内	的敦司
コロジオン法とサリチル酸ソーダ法併用によるアミノ酸薄膜の吸収スペク トル	神戸大学発達科学部	中川	和道
AIN 及び AIGaN の発光励起と時間分解測定(II)	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井	一俊
反応性スパッタリング法により作成した酸化物薄膜のVUV吸収スペクトルの測定	明治大学理工学部	松本	皓永
Tm 及び Sm カルコゲナイドの可視・真空紫外反射スペクトル	神戸大学大学院自然科学研究科	難波	孝夫
真空紫外光励起による長残光性物質の熱発光・光伝導特性	福井工業高等専門学校	北浦	守
シンクロトロン光を用いた ZnTe 系半導体材料のエッチング特性	佐賀大学理工学部	西尾	光弘
XAFS法を用いた金属酸化物中のリチウムの状態	福岡大学理学部	栗崎	敏

アモルファスカーボン系薄膜の構造解析	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所	神田	一浩
スピネル酸化物の粒子表面における電子構造の解明	(独)産業技術総合研究所	小林	弘典
リチウムイオン電池正極材料であるポリアニオン系鉄化合物の電子構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	中山	将伸
窒化物半導体の N-K 内殻励起による可視・紫外発光 2	金沢大学工学部	直江	俊一
フラーレン類の光電子分光	千葉大学工学部	日野	照純
角度分解紫外光電子分光法を用いたペンタセン分子超薄膜の分子配向と電 子構造に関する研究	千葉大学工学部	奥平	幸司
バンド構造・薄膜構造からみたフタロシアニン薄膜に対するドーピング効果	名古屋大学物質科学国際研究センター	関	一彦
含イオウ平面 共役分子薄膜の角度分解光電子分光による研究	名古屋大学大学院理学研究科	金井	要
金属 / 有機物半導体界面の電子構造研究	島根大学総合科学研究支援センター	田中	仙君
Li-Ni 系複合酸化物の真空紫外光電子分光	愛媛大学工学部	宮崎	隆文
放射光を用いた有機薄膜中のフェルミ準位シフトの可能性	千葉大学大学院自然科学研究科	小野	正樹
角度分解光電子分光法による 6P 薄膜のバンド構造に関する研究	千葉大学工学部	上野	信雄
イオン運動量画像法を用いた分子の光イオン化の研究	分子科学研究所	彦坂	泰正
中性励起フォトフラグメント用検出器の性能評価	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	下條	竜夫
PZT 薄膜の光学特性計画	静岡大学電子工学研究所	MISTR	IK, JAN
クラスレート化合物の真空紫外分光	分子科学研究所	櫻井	陽子
全光電子収量法による反射多層膜の位相評価の試み	東北大学多元物質科学研究所	江島	丈雄
層状 Co 酸化物の 3 次元的電子構造と熱電能	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内	恒博
ラミナー回析格子の回析効率測定	高エネルギー加速器研究機構	伊藤	健二
(後期)			
Ti 表面に生成する陽極酸化チタニア中の S の局所構造解析	大阪府立大学工学部	中平	敦
軟X線照射誘起発光を利用したセラミックス照射効果に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	吉田	朋子
L 殻XANESによる MFI 担持 Mo 触媒の還元活性種の評価	埼玉工業大学工学部	有谷	博文
リチウムイオン電池正極材料であるポリアニオン系鉄化合物の電子構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	中山	将伸
XAFS測定による金属フタロシアニン錯体の状態分析	福岡大学理学部	栗崎	敏
窒化物半導体の Al–K 内殻励起による可視・紫外発光 3	金沢大学工学部	直江	俊一
層状及びスピネル酸化物のアルミニウムの電子状態の解明	(独)産業技術総合研究所	小林	弘典
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
極端紫外光照射による無機蛍光体の励起現象(2)	新潟大学工学部	太田	雅壽
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・発光及び寿命 測定	早稲田大学理工学部	大木	義路
真空紫外励起新規蛍光体の発光・励起スペクトル	大阪電気通信大学工学部	大野	宣人
複合フッ化物の真空紫外発光特性評価	分子科学研究所	猿倉	信彦
圧電性 LGS 系物質の反射・発光・励起スペクトルの測定	信州大学工学部	伊藤	稔
誘電体結晶中の T1+ 型不純物センターの光学特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科		武利
窒化物半導体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	元垣四	内敦司
光収量によるアモルファス半導体の光誘起現象に関する研究	岐阜大学大学院工学研究科	林	浩司
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
アルカリ金属吸着による鉄超薄膜の磁性変化	分子科学研究所	中川	剛志
Electronic structure of CeNiGe $_{2-x}$ Si $_x$ studied by Ce 4d-4f resonant and angle-resolved photoemission spectroscopy	分子科学研究所	木村	真一
BL-5U におけるユーザータイム前調整および整備作業	分子科学研究所	伊藤	孝寛
低次元CDW化合物の低励起エネルギー角度分解光電子分光	分子科学研究所	伊藤	孝寛
Fe-V-Al 合金および Zr-Al-Cu-Ni 合金の価電子帯電子構造 Ⅱ	名古屋大学大学院工学研究科	曽田	一雄
UVSOR(FEL)光によるアミノ酸の絶対不斉合成	(独)科学技術振興機構	井上	佳久
ビスマスクラスターの相転移	富山大学理学部	池本	弘之
誘電体および f 電子系のミリ波分光	神戸大学大学院自然科学研究科	岡村	英一
赤外反射吸収分光による有機 / 金属界面の研究	分子科学研究所	櫻井	陽子
高周波誘電体の遠赤外スペクトル	名古屋工業大学しくみ領域環境材料教育類	大里	齊
高圧下テラヘルツ分光による強相関系のキャリアダイナミクス	分子科学研究所	木村	真一
BL6B の調整とテラヘルツ顕微鏡の設置	分子科学研究所	木村	真一
紫外及び可視用ナノフォトニック結晶の光学的特性評価に関する研究	三重大学工学部	元垣四	内敦司
コロジオン法とサリチル酸ソーダ法併用によるアミノ酸薄膜の吸収スペク	神戸大学発達科学部	中川	和道
トル AIN 及び AIGaN の発光励起と時間分解測定(II)	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井	一俊

Tm 及び Sm カルコゲナイドの可視・真空紫外反射スペクトル	神戸大学大学院自然科学研究科	難波	孝夫
シンクロトロン光を用いた ZnTe 系半導体材料のエッチング特性	佐賀大学理工学部	西尾	光弘
XAFS法を用いた金属酸化物中のリチウムの状態	福岡大学理学部	栗崎	敏
スピネル酸化物の粒子表面における電子構造の解明	(独)産業技術総合研究所	小林	弘典
リチウムイオン電池正極材料であるポリアニオン系鉄化合物の電子構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	中山	将伸
窒化物半導体の N-K 内殻励起による可視・紫外発光 2	金沢大学工学部	直江	俊一
フラーレン類の光電子分光	千葉大学工学部	日野	照純
角度分解紫外光電子分光法を用いたペンタセン分子超薄膜の分子配向と電	千葉大学工学部	奥平	幸司
子構造に関する研究	1 202 (3 = 3 = 3	~ '	,
バンド構造・薄膜構造からみたフタロシアニン薄膜に対するドーピング効果	名古屋大学物質科学国際研究センター	関	一彦
含イオウ平面 共役分子薄膜の角度分解光電子分光による研究	名古屋大学大学院理学研究科	金井	要
Li_Ni 系複合酸化物の真空紫外光電子分光	愛媛大学工学部	宮崎	隆文
放射光を用いた有機薄膜中のフェルミ準位シフトの可能性	千葉大学大学院自然科学研究科	小野	正樹
角度分解光電子分光法による 6P 薄膜のバンド構造に関する研究	千葉大学工学部	上野	信雄
改良型タルサイト年度の局所構造解明	大阪府立大学工学部	中平	敦
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	原田	明
Xe 放電蛍光ランプに適した真空紫外励起用蛍光体 YAI ₃ (BO ₃) ₄ の励起発光	関西学院大学理工学部		京一禎
At 放电虫ルフノブに過じた真土系外伽起用虫ル体 TAI3(BO3)4 の伽起光ル 特性	国内于风入于连上于即	小 <u>五</u> //	示 快
全光電子収量法による反射多層膜の位相評価	東北大学多元物質科学研究所	江島	丈雄
Bi ₂ Sr ₂ CaCu ₂ O ₈₊₆ の電子構造の三次元性の解明	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内	恒博
デンドリマー分子カプセル内包金属ナノクラスターの光電子分光	神戸大学工学部	田中	章順
遠赤外分光法による白金クラスターの電子状態の解明	北陸先端科学技術大学院大学材料科学研	三谷	忠興
医がパガルなによる日本ノンスノ のも」 小窓の軒の	究科		10.34
Optical investigation on Ca ₂ RuO ₄ under pressures	分子科学研究所	木村	真一
反応性スパッタリング法により作成した酸化物薄膜の VUV 吸収スペクト	明治大学理工学部	松本	皓永
ルの測定			
Sr 欠損及び Gd をドープした SrAl₂O₄:Eu セラミックスの長残光特性	福井工業高等専門学校	北浦	守
UV Reflectance Spectroscopy of Ta, Ni and NiFe Films	静岡大学電子工学研究所	青山	満
イオン運動量画像法を用いた分子からの負イオン生成の研究	分子科学研究所	彦坂	泰正
機能性アモルファスカーボン薄膜の構造解析	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所	神田	一浩
有機物半導体 / 金属界面修飾による電子状態への影響の研究	島根大学総合科学研究支援センター	田中	仙君
ラミナー回析格子の回析効率測定	高エネルギー加速器研究機構	伊藤	建二
エピタキシャル磁性薄膜の紫外磁気円二色性測定	分子科学研究所	中川	剛志
HCI 分子の K 殻電離しきい値近傍における PCI 効果	分子科学研究所	繁政	英治
	神戸大学大学院自然科学研究科	岡村	英一
深紫外~低エネルギー軟X線領域におけるダイヤモンド検出器の性能評価	大阪大学大学院工学研究科	伊藤	利道
	JOHN JOHN TO THE THE WINDOWN	IZ DIK	们足
(5) 施設利用			
分子制御レーザー開発研究センター			
(前期)			
芳香族有機分子の高分解能超音速ジェット分光	京都大学大学院理学研究科	馬提	正昭
2 波長蛍光 dip 分光法を用いたローダミン 6G の蛍光消光過程の研究	東京工業大学資源化学研究所		武史
2 版及虫元 dip 万元及を用いたロープミン 00 の虫元府元過程の研究	未尔工来八子真 <i>l</i> 际16子则元/71	灰垣	E(X
(後期)			
芳香族有機分子の高分解能超音速ジェット分光	京都大学大学院理学研究科	馬場	正昭
パルスレーザーと超音速ジェットを用いた多原子分子の振電バンドの分光	神戸大学分子フォトサイエンス研究セン		俊二
ハルスレータ こ起日述フェットを用いた夕原 1月 10版電ハフトの月元	ター	立が	×—
円2色性スペクトルによる立体規則性置換ポリアセチレンの溶液中におけ	北海道大学大学院工学研究科	馬渡	康輝
る高次構造解析			
Nd:YAG レーザーを用いた Z スキャン法による新光学材料の評価	九州大学大学院システム情報科学研究院	中田	芳樹
分子スケールナノサイエンスセンター			
(前期)			
ポルフィリンオリゴマーの合成と構造	愛媛大学総合科学研究支援センター	宇野	英満
金属イオンのホメオスタシスを実現する分子機構	金沢大学大学院自然科学研究科	櫻井	武
正属1770のハスイスランスを実現90万丁機構 アザポルフィリンおよび関連化合物の鉄錯体の磁気特異性の解明	並		三郎
ノッハルノ1ソノのよび国建化ロ物の欧亜仲の熾気付共性の胜明	1 未八十八十沉栄于河九沉	1区大	다

相溶性プロック共重合体の動的不均一性に関する研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	山本	勝宏
希土類マンガナイトの物性研究	豊橋技術科学大学	佐藤	裕久
新規 系拡張ポルフィリン誘導体の合成と構造に関する研究	愛媛大学理学部	小野	昇
希土類置換型磁性薄膜の磁気特性の評価	名古屋工業大学セラミックス基盤研究セ ンター	安達	信泰
有機分子および金属錯体のX線結晶構造解析	兵庫県立大学大学院工学研究科	北村	千寿
有機金属含有タンパク質における金属イオンの構造と電子状態の解析	名古屋大学大学院理学研究科	中島	洋
新規なキャリア輸送材料の合成と電子デバイスへの応用	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野	克彦
金属酵素活性中心モデル錯体の構造と機能	名古屋工業大学大学院工学研究科	奥村	健志
高分子固体表面における無触媒・無溶媒ラジカル重合反応	静岡県立大学環境科学研究所	坂口	眞人
ESRによる複核金属内包フラーレンのスピン状態の研究	首都大学東京都市教養学部	兒玉	健
シアノバクテリア由来光化学系 II 複合体の単結晶EPR研究	関西学院大学理工学部	河盛	可佐子
集積型金属錯体によるナノチャンネルの構築	名古屋工業大学大学院工学研究科	伊藤	光宏
コバルト錯体[Co(C ₁₂ -terpy) ₂](BF ₄) ₂ の相転移現象	九州大学大学院理学研究院	速水	真也
希土類元素を含む Zn 基 P 型正二十面体準結晶及びその関連結晶の磁性	北海道大学大学院工学研究科	柏本	史郎
温度に応答してナノ細孔を変化させる動的ニッケル錯体の合成	静岡大学理学部	近藤	満
食品の加工工程中に生成する機能性成分の精製,単離と構造解析	名古屋経済大学人間生活科学部	長島	万弓
イオン結晶中の希土類イオンの電子スピン共鳴法による電子状態の解明	岐阜大学工学部	山家	光男
有機化合物の構造決定	愛知教育大学教育学部	日野	和之
13 100 100 113.20 00	2,43,413,713,314		1
(後期)			
ポルフィリンオリゴマーの合成と構造	愛媛大学総合科学研究支援センター	宇野	英満
非対称性ABA型トリブロック共重合体の短い端末A鎖のB成分への相溶化 挙動の観察	名古屋工業大学大学院工学研究科	山本	勝宏
高分子固体表面における無触媒・無溶媒ラジカル重合反応および生成物の 分子運動性について	静岡県立大学環境科学研究所	坂口	眞人
温度に応答してナノ細孔を変化させる動的ニッケル錯体の構造変化に関す る研究	静岡大学理学部	近藤	満
有機金属含有タンパク質における金属イオンの構造と電子状態の解析	名古屋大学大学院理学研究科	中島	洋
有機分子及び金属錯体のX線結晶構造解明	兵庫県立大学大学院工学研究科	北村	千寿
有機化合物の構造決定	愛知教育大学教育学部	日野	和之
イオン結晶中の希土類イオンの電子スピン共鳴法による電子状態の解明	岐阜大学工学部	山家	光男
希土類永久磁石薄膜の垂直磁気異方性	名古屋工業大学セラミックス基盤研究セ ンター	安達	信泰
金属含有酵素および蛋白質を模倣したバイオミメティック錯体の合成とそ の機能	名古屋工業大学大学院工学研究科	奥村	健志
Zn–Sc 基正二十面体相準結晶中における 4f 希土類元素の磁性	北海道大学大学院工学研究科	柏本	史郎
集積型金属錯体によるナノチャンネルの構築	名古屋工業大学大学院工学研究科	伊藤	光宏
新規なキャリア輸送材料の合成と電子デバイスへの応用	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野	克彦
可逆な構造変化を示す酸化還元応答性ホストの開発	信州大学理学部	太田	哲
Mn ₁₂ 誘導体の磁気特性の研究	広島大学大学院理学研究科	谷本	能文
ゴマの登熟過程に生成する機能性成分の精製、単離と構造解析	名古屋経済大学人間生活科学部	長島	万弓
装置開発室			
(前期)			
低次元系機能性材料開拓のための固体NMRプローブ技術開発	九州大学大学院理学研究院	北川	宏
(後期)			
レーザー電場により配向した極低温孤立分子の電子運動量分光装置の開発	東北大学多元物質科学研究所	高橋	正彦
複合機能性を有する分子性伝導体の結晶作製のための定電流電源の製作	大阪府立大学大学院理学系研究科	藤原	秀紀
神経軸索の軸索ガイダンス分子に対する応答性の解析	基礎生物学研究所	野田	昌晴
高等植物における表皮細胞の形態形成	基礎生物学研究所	星野	敦
衝突アライメント配向分子ビーム発生用超小型メカニカル速度選択デスク の開発	大阪大学大学院理学研究科	笠井	俊夫
飛行時間型メカニカル速度選択装置の特殊駆動電子回路の開発	大阪大学大学院理学研究科	岡田美	美智雄
新規な交流変調型単色吸光度測定装置に用いる電子回路の開発	大阪大学大学院理学研究所	蔡	徳七
超高真空中で試料交換可能な極低温用保持機構の開発	千葉大学工学部	日野	照純
錯体作成用水熱合成容器の制作	広島大学大学院理学研究科	秋田	素子

計算機利用

	#17 1 1 1 1 1 1 1 -	
フラーレンやカーボンナノチューブの構造欠陥の分子動力学計算	横浜市立大学総合理学研究科	岡田 勇
密度汎関数法を用いた半導体薄膜の電子状態と輸送特性の第一原理的研究	慶応義塾大学理工学部	山内 淳
分子内および分子間電荷移動の分子軌道法による研究 生体分子の機能発現反応に関する理論的研究	神奈川大学理学部 千葉大学大学院薬学研究科	田仲 二朗 星野 忠次
チャカナの機能光境及がに関する理論が が 、 分子,生物,表面の量子化学:励起状態と化学反応	京都大学大学院工学研究科	生野 心从中辻 博
	京都大学大学院工学研究科	神 茂好
複合電子系の構造,電子状態,反応過程,溶媒和構造に関する理論的研究		
化学反応の分類および分子設計に関する理論的研究	岐阜大学工学部	
生体分子の構造と機能に関する理論的研究	広島大学大学院理学研究科	相田美砂子
遷移金属化合物および合金の電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	森永 正彦
ナノバイオ物質の電子状態・構造・機能の相関	筑波大学物理学系	押山淳
量子化学計算によるタンパク質の insilico 構造・機能予測	東京工業大学大学院生命理工学研究科	櫻井 実
有機ラジカルの電子状態の ab initio MO 計算	奈良女子大学理学部	竹内孝江
活性アルキル基の反応性の分子軌道法による検討	福岡大学薬学部	新矢 時寛
分子の励起状態とその動的挙動の研究	広島大学大学院理学研究科	岩田末廣
鎖状化合物の安定化効果に関する理論研究	東京大学大学院総合文化研究科	友田 修司
励起状態を生成するペニングイオン化の生成過程	新潟大学理学部	徳江 郁雄
低次元強相関電子系物質の特異な電子状態に関する数値的研究	千葉大学理学部	太田幸則
気相および液相における化学反応の理論的研究	京都大学大学院理学研究科	加藤 重樹
DNA 素子自己組織化の第一原理計算	鳥取大学工学部	石井 晃
微小半導体における量子干渉効果及び電子相関	山形大学教育学部	野々山信二
層状人工格子における磁気円二色性	奈良県立医科大学医学部	平井 國友
分子軌道法による反応予測を基盤とする新有機反応の開発	東京大学大学院理学系研究科	中村 栄一
熱化学反応及び光化学反応に関する理論的研究	広島大学大学院理学研究科	田林清彦
化合反応の量子ダイナミクスに関する理論的研究	東京大学大学院工学系研究科	山下 晃一
第一原理電子構造理論の拡張と物質設計	東京大学大学院工学系研究科	藤原 毅夫
分子軌道計算による有機反応設計および分子構造設計のための電子構造予測	東京大学大学院薬学系研究科	大和田智彦
気相及び凝縮相における光化学反応に関する理論的研究	秋田大学工学資源学部	天辰 禎晃
分子の電子状態と化学反応のポテンシャル面の理論的研究	名古屋大学大学院情報学研究科	古賀 伸明
フラーレン・ナノチューブ系の分子物性と固体物性の総合研究	東京工業大学大学院理工学研究科	斎藤 晋
励起状態とその緩和過程に関する理論的研究	慶應義塾大学理工学部	薮下 聡
金属原子 - 分子相互系の幾何構造・電子構造の解明とポテンシャル曲面の 解析	東北大学大学院理学研究科	大野 公一
遷移系列イオンを含む化合物の反応制御に関する理論研究	岐阜大学地域科学部	和佐田裕昭
金属錯体の構造・反応・電子遷移に関する理論的研究	お茶の水女子大学理学部	鷹野 景子
新規なケイ素化合物の ab initio 分子軌道法による研究	群馬大学工学部	工藤 貴子
大環状人造蛋白質における両極性イオン捕促機構の第一原理電子論とホスト - ゲスト・ナノ科学	早稲田大学理工学部	武田京三郎
種々の分子及び分子集合体の赤外・ラマン強度と電子 - 振動相互作用およ び分子間相互作用	静岡大学教育学部	鳥居肇
核酸合成における保護・脱保護法の開発	琉球大学教育学部	安藤 香織
二酸化炭素 - 水負イオン系のミクロ溶媒和のメカニズム	東京大学大学院総合文化研究科	永田 敬
量子化学計算によるナノ科学へのアプローチ	九州大学先導物質化学研究所	吉澤 一成
固体触媒および生体分子における励起ダイナミクスと反応メカニズムに関 する理論的研究	早稲田大学理工学部	中井 浩巳
溶媒和クラスターの微視的構造と反応ダイナミクスの研究	神戸大学理学部	富宅喜代一
ナノネットワーク炭素系物質の構造と電子状態についての第一原理的研究	筑波大学物理学系	岡田 晋
分子動力学シミュレーションに基づく自由エネルギー計算法による蛋白質 と核酸の機能と物性の物理化学的研究	弘前大学理工学部	斎藤 稔
環境関連有機化学および有機金属化学反応の設計および開発	茨城大学理学部	森 聖治
機能性有機材料の電子物性解析に関する理論的研究	京都大学大学院工学系研究科	田中 一義
高分子濃厚系における1本の高分子鎖の動的性質	慶應義塾大学理工学部	萩田 克美
穴のあいたフラーレンの構造および分子包接特性に関する理論的研究	名古屋大学大学院環境学研究科	岩松 将一
拡張アンサンブルシミュレーションによる高分子系の研究	慶應義塾大学理工学部	光武亜代理
シッフ塩基遷移金属錯体を触媒とする不斉反応の理論的解析	慶應義塾大学理工学部	池野 健人
蛋白質の動的構造と機能の解析	横浜市立大学大学院総合理学研究科	木寺 詔紀
分子軌道計算による含フッ素有機化合物の反応機構解明	東京工業大学大学院理工学研究科	三上 幸一

次世代 LSI 用高誘電率絶縁膜とそのゲート電極用金属材料の第一原理計算 による設計	筑波大学大学院数理物質科学研究科	白石 賢二
第一原理分子動力学法による液体金属及び液体半導体の物性研究	(独)產業技術総合研究所	森下 徹也
フェレドキシンタンパク活性部位の電子状態および磁性	金沢大学理学部	小田 竜樹
ab initio MO 法による芳香族クラスターの研究	日本原子力研究所	佐伯 盛久
P- セレクチンやヒトインフルエンザ認識される Neu5Aca-3Galb の理論的研究	岐阜大学大学院連合農学研究科	澤田 敏彦
光酸化還元反応によるプロトントンネルの制御を利用した新規光スイッチ 分子の理論設計	九州大学大学院総合理工学研究院	三好 永作
生体超分子の立体構造変化と機能	東京大学分子細胞生物学研究所	北尾 彰朗
半導体ナノ構造における酸化反応の理論的研究	三重大学工学部	秋山 亨
第一遷移系列金属イオンを中心とする配位化合物の反応における d 電子の 効果に関する理論的研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	和佐田祐子
タンパク質・生体関連巨大分子系の量子化学計算に基づくアプローチ	(独)産業技術総合研究所	石田 豊和
分子軌道計算を基盤とする単核及び二核金属不斉触媒の設計と開発	立教大学理学部	山中 正浩
ナノサイズ膜孔を通過する荷電高分子 DNA の分子動力学研究	核融合科学研究所	田中 基彦
低原子価六族金属カルボニル錯体を触媒とする炭素骨格構築反応の機構解明	東京工業大学大学院理工学研究科	岩澤 伸治
拡張アンサンブル法による蛋白質分子の折り畳みシミュレーション	名古屋大学大学院理学研究科	岡本 祐幸
固体表面上の生体分子認識反応系の構築と構造解析	分子科学研究所	宇理須恒雄
胆汁酸ミセルの MD シミュレーション	大分大学教育福祉学部	中島 俊男
計算機実験による液体の相分離ダイナミクス	東北大学大学院理学研究科	福村 裕史
クラスター電子構造と幾何構造	分子科学研究所	西 信之
導電性有機物質の構造と物性の研究	分子科学研究所	薬師 久弥
有機導体の電子物性とスピン構造	分子科学研究所	古川 貢
量子および古典擬集系に対する計算機シミュレーション	分子科学研究所	岡崎 進
偏光赤外吸収分光法を用いたアミロイドフィブリルの分子構造の解明	岡崎統合バイオサイエンスセンター	平松 弘嗣
内部官能基を持つかご状化合物の分子動力学	分子科学研究所	永田 央
ボウル型共役化合物の物性調査	分子科学研究所	櫻井 英博
界面非線形分光の理論	分子科学研究所	森田 明弘
シトクロム c 酸化酵素 Cu _B サイトモデル錯体の紫外共鳴ラマンスペクトル	岡崎統合バイオサイエンスセンター	長野 恭朋
QM/MM 法によるタンパク質全原子計算から振動スペクトルを解析する	東北大学多元物質科学研究所	海野 雅司
数値シミュレーションによる分光スペクトルの計算	京都大学大学院理学研究科	谷村 吉隆
金属錯体に関する理論的研究	静岡理工科大学理工学部	関山 秀雄
分子内水素結合の研究	弘前大学理工学部	須藤 進
有機分子を用いた単分子素子の量子輸送特性の理論的研究	東京大学大学院理学系研究科	田上勝規
ウラシル系分子に対するシクロデキストン包接効果に関する研究	茨城大学理学部	寺阪 利孝
非線形量子系におけるソリトンとカオス	鈴鹿国際大学国際学部	大野 稔彦
化学反応の ab initio 計算による研究	愛媛大学理学部	長岡・伸一
有機分子の電子励起状態における大振幅振動ポテンシャルの分子軌道計算	北海道大学大学院理学研究科	竹内 浩
表面・薄膜・クラスターの電子状態と反応過程	姫路工業大学理学部	島信幸
分子磁性体の分子軌道法による理論解析及び新規手法の開発	大阪大学大学院理学研究科	山口 兆
溶液内化学反応の理論的研究	名古屋大学大学院理学研究科	大峰巌
金属クラスターイオンの幾何・電子構造の反応機構	豊田工業大学	近藤 保
分子シミュレーションによる分子集合体の研究	名古屋文理大学情報文化学部	本多一彦
静電ポテンシャルフィット法を用いた原子電荷パラメーターの自動決定法	北里大学理学部	米田 茂隆
の開発		
モデルペプチドの二次構造安定性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
電子状態計算によるタンパク質・低分子間相互作用解析	京都大学大学院薬学研究科	仲西 功
転写因子 CREB の CRE 配列認識機構におけるマグネシウムイオンの役割	湖北短期大学情報メディア学科	小田井 圭
円偏光軟X線のアミノ酸への作用に関する理論的研究	神戸大学大学院人間科学研究科	沖山 佳生
ベンザインを用いる有機合成反応における機構解明	東京工業大学大学院理工学研究科	鈴木 啓介
分子のひずみを介した有機固相反応の計算機シミュレーション	慶應義塾大学理工学部	ファジャール プラディプタ
蛋白質の構造機能相関計算	立命館大学情報理工学部	高橋卓也
置換アントラセンの基底・励起状態に関する量子化学計算	星薬科大学薬学部	坂田 健
イオンの選択と透過に果たす水のナノ構造と機能の理論的研究	関東学院大学工学部	杉本 徹
タンパク質励起状態計算の新手法	名古屋大学大学院理学研究科	川口 一朋
Photoactive Yellow Protein の時間分解蛍光スペクトルの解析	名古屋大学大学院理学研究科	小池 香奈
ヘモグロビンの構造と機能の研究	東海大学総合科学技術研究所	妹尾 康喜

量子ダイナミクスによる動的物性量の理論的研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	中野	雅由
非経験的分子軌道法によるチタン表面酸化過程	岡山理科大学大学院理学研究科	中川	幸子
古典スピン系の分子動力学計算による物理量の計算	大阪教育大学教育学部	喜綿	洋人
金属タンパク質の性質に関する量子化学計算	岡崎統合バイオサイエンスセンター	北川	禎三
フッ素を含むフェロモン活性物質の分子配座と生理活性との関係	鳥取大学工学部	早瀬	修一
非経験的分子軌道計算による有機ラジカルの電子状態の研究	広島大学大学院工学研究科	太田	信昭
グラフェンシートにおける原子空孔の第一原理計算	金沢大学大学院自然科学研究科	斎藤	峯雄
生命関連星間分子の生成機構に関する理論的研究	明治学院大学法学部	高橋	順子
梯子形ハロゲン架橋白金錯体の光学伝導度の第1原理計算	高エネルギー加速器研究機構	岩野	薫
酸化クロム結晶表面上に吸着した水分子の量子化学計算	岡山理科大学理学部	橘高	茂治
新規ジオキセタンおよびジオキセタノン型化学発光性分子創製のためのモ デリング	東洋大学生命科学部	和田	直久
有機ナノ分子の溶媒中における熱力学的安定性の理論的研究	分子科学研究所	丸山	豊
気相および星間空間での多原子分子が関与する化学反応の量子化学的・反 応動力学的研究	京都大学福井謙一記念研究センター	石田	俊正
有機反応の経路と微視的機構	立教大学理学部	山高	博
Rigged QED 理論および領域密度汎関数理論計算プログラムの開発	京都大学大学院工学研究科	立花	明知
分子衝突の動力学の理論的研究	日本大学理工学部	中村	正人
低配位型ホウ酸アニオン種ボラニドの合成に向けた分子デザインと生成物 の物性解明	東京大学大学院工学系研究科	山下	誠
ハロゲン架橋金属錯体の電子状態シミュレーション	分子科学研究所	前島	展也
アセチレン架橋を有するドナー・アクセプター・ポルフィリンの非線形光 学特性	京都大学大学院理学研究科	勝田	貴之
量子科学計算に基づく分子認識と自己組織化に関する理論的研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	麻田	俊雄
遷移金属錯体触媒反応に関する理論研究	分子科学研究所	木村	将浩
分子の電子状態と反応動力学に関する理論的研究	九州大学情報基盤センター	南部	伸孝
胆汁酸ミセルのMDシミュレーション	大分大学教育福祉学部	中島	俊男
計算機実験による液体の相分離ダイナミクス	東北大学大学院理学研究科	福村	裕史
凝縮系のダイナミクスと化学反応の理論研究	分子科学研究所	斉藤	真司
分子の電子状態とスペクトルについての ab initio 計算	大阪市立大学理学系研究科	西本	吉助
2,9- ジクロロキナクリドンの黒色相の電子構造	横浜国立大学大学院工学研究院	千住	孝俊
分子多体系における量子移動化学過程の理論的研究	京都大学理学部	安藤	耕司

2-9-3 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

年度	'76 ~ '98		'76 ~ '98 '99		'00		'01		'02		'03		'04		'05		備考
項目	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	78	617	1	5	2	12	7	41	5	36	5	70	3	33	1	13	人数: 登録人数
協力研究	2,804	3,141	115	212	119	249	100	223	125	253	101	246	100	265	96	225	"
招へい 協力研究	186	186	0	0	2	3	5	6	1	1	1	1	0	0	0	0	"
所長 招へい	1,850	1,850	321	321	264	264	385	3857	313	313	308	308	160	160	63	63	人数: 旅費支給者
研究会	224	3,152	12	194	13	276	6	129	11	332	8	229	13	304	10	205	"
施設利用	1,372	2,953	49	135	54	142	49	139	63	188	54	150	55	149	53	108	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)	3,295	9,951	167	654	156	631	144	584	134	558	120	525	154	581	132	511	"
合計	9,809	21,850	665	1,521	610	1,577	696	1,507	652	1,681	598	1,529	485	1,492	355	1,125	
経費	382,340		382,340 30,898 32,080		30,	994	37,896		30,794		-		-		千円		

^{*}施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用

('05 年度の数値は, 2005.12 末現在)

分子科学研究所UVSOR共同利用研究実施一覧

年度	'85 ~ '98		5~'98 '99		'00		'01		'02		'03		'04		'05		備考
項目	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	37	412	1	11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	人数: 登録人数
協力研究	304	1,074	8	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
招へい 協力研究	70	70	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	"
研究会	28	409	1	26	1	29	1	13	0	0	1	51	1	16	0	0	人数: 旅費支給者
施設利用	1,407	6,966	150	699	160	820	157	707	160	805	129	715	128	582	125	578	件数: 許可件数 人数: 許可人数
合計	1,846	8,931	162	773	161	849	158	720	160	805	130	766	129	598	125	578	
経費	154,909		4,909 12,951 16,441 16,512		512	15,	780	13,884		_		-		千円			

('05 年度の数値は, 2005.12 末現在)