

3-3 共同利用研究

3-3-1 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8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)

また、分子科学研究所では、平成23年3月11日の東日本大震災で研究の継続が困難となった大学及び国・公立研究所等の研究機関の研究者を支援するため、平成23年3月17日から「共同利用研究特別プロジェクト」を開始し、共同利用研究の利用枠の提供を行っている。平成24年度は、協力研究の特別枠に東北大学をはじめ、4研究室、19人の利用があった。

- (A) 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。
- (B) 協力研究：所内の教授又は准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)
- (C) 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。
 - (ア)「分子研研究会(一般分)」国内の研究者が集まるもの。
 - (イ)「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。
 - (ウ)「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。
 - (エ)「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。
- (D) 若手研究会等：院生が主体的に企画する分子科学に関連する研究会等。
- (E) 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。
- (F) 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。
- (G) 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利用。
- (H) 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利用。

3-3-2 2013年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名	提案代表者
偏極量子ビーム源の開発とその分子科学への応用	分子科学研究所 加藤 政博
波長選択型有機太陽電池の開発研究	中部大学工学部 田中 基彦

(2) 協力研究

課 題 名(通年)	代 表 者
DMRG 法による化学反応過程の理論的研究	京都大学福井謙一記念研究センター 諸熊 奎治
凝縮相中の炭素骨格および芳香環の電子励起状態の研究	関西学院大学理工学部 尾崎 幸洋
概日リズムの分子機構の説明を目指した非線形結合系の数理	北海道大学大学院情報科学研究科 井上 純一
弱測定を用いた波動関数のダイナミクスと量子相関の直接観測	高知工科大学システム工学群 小林 弘和
金属ナノ構造体の増強光電場によるジアセチレン LB 膜の二光子重合反応の検討とナノスケール光導波路の試作	青山学院大学理工学部 坂本 章
金ナノ粒子・シリコンナノポア複合構造によるナノ局在・増強光電場の発生と蛍光分子励起特性の評価	慶應義塾大学理工学部 斎木 敏治
重水素置換ベンゼンの高分解能レーザー分光	京都大学大学院理学研究科 馬場 正昭
生体内銅イオンの輸送を担うタンパク質間相互作用の制御メカニズム	慶應義塾大学理工学部 古川 良明
ピコ秒パルスレーザーによるレーザー誘起ブレイクダウンを用いた点火に関する研究	大阪大学大学院工学研究科 赤松 史光

高分解能電子分光による内殻励起状態の崩壊過程の研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
オージェ終状態を選別した内殻励起 cis-ヘキサフルオロシクロブタンの解離過程	広島大学大学院理学研究科	岡田 和正
赤外分光法を用いた新規熱電変換材料 Fe ₂ VAl 化合物の電子構造に関する研究	名古屋工業大学若手研究イノベータ養成センター	宮崎 秀俊
希土類 - 有機ハイブリッド集光アンテナのナノスペース配列	島根大学教育学部	西山 桂

課 題 名 (前 期)

代 表 者

水，水溶液，および生体高分子における動的相互作用の解明	神戸大学自然科学系先端融合研究環分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
腸管出血性大腸菌 (O-157) 感染症に対する薬剤の開発にかかわる分子動力学シミュレーション	国立国際医療研究センター医療社会学研究室	尾又 一実
気相イオンの極低温冷却と NMR 分光への応用	神戸大学	富宅喜代一
有機磁性体の低温構造と磁性の相関	大阪府立大学大学院理学系研究科	細越 裕子
3 原子分子を対象にした準安定多価分子イオンの生成機構解明	新潟大学理学部	副島 浩一
アルカリドープしたエキゾチックナノカーボンの in situ 高分解能光電子分光	東京工業大学原子炉工学研究所	尾上 順
赤外分光法による固体電子状態の研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
バッキーボウルとその誘導体の構造と機能の研究	東邦大学理学部	菅井 俊樹
ポルフィリン単分子磁石による光誘起磁気スイッチングデバイス開発	大阪大学大学院理学研究科	田中 大輔
複合パルスを用いたスピン・エコー法の改良	近畿大学大学院総合理工学研究科	坂東 将光
偏光 NEXAFS を用いた窒素ドープ酸化チタンの構造に関する研究	慶應義塾大学大学院理工学研究科	紋谷 祐爾
砂田格子を用いたメタマテリアル設計	京都大学大学院工学研究科	中田 陽介
光捕集アンテナにおける励起エネルギー移動ダイナミクスの分子論的機構に関する理論的研究	琉球大学理学部	東 雅大
開放系電子状態理論による光機能界面の基礎研究	放送大学教養学部	安池 智一
ZnO ナノロッド中のプロトンの固体 NMR による評価 2	大阪工業大学工学部	佐々 誠彦
分子性伝導体の単結晶広幅 NMR による電子状態の微視的研究	学習院大学理学部	開 康一
A サイト秩序型ペロブスカイト CaCu ₃ Ti _{1-x} Ru _x O ₁₂ の電子構造	弘前大学大学院理工学研究科	任 皓駿
ヒト IgG 抗体の酸性 pH により誘導された分子種の構造解析に関する研究	鹿児島大学大学院理工学研究科	伊東 祐二
赤外フェムト秒パルスレーザーの開発	福井大学大学院工学研究科	川戸 栄

課 題 名 (後 期)

代 表 者

テトラセニミドジスルフィドと各種ドーパントを用いた有機薄膜太陽電池の膜構造制御	東京大学大学院理学系研究科	松尾 豊
マンノーストリミングを介した糖タンパク質品質管理機構の研究	京都大学再生医科学研究所	細川 暢子
電気化学軟 X 線吸収分光法によるホウ酸ニッケル酸素生成触媒の研究	慶應義塾大学理工学部	吉田 真明
ポルフィリン単分子磁石の炭素材料上分子配列制御と光誘起磁気スイッチングデバイスの開発	大阪大学大学院理学研究科	田中 大輔
高原子価金属・フェノラート錯体の性質と反応性	茨城大学理学部	島崎 優一
9.9 - ジアリール - 2.7 - フルオレンジイル骨格を有する高屈折性芳香族ポリケトンの開発	山形大学大学院理工学研究科	前山 勝也
非線型量子ウォークの極限確率分布の解明	茨城大学工学部	和田 達明
腸管出血性大腸菌 (O-157) 感染症に対する薬剤の開発にかかわる分子動力学シミュレーション	国立国際医療研究センター医療社会学研究室	尾又 一実
グラフェン薄膜のエッジ状態の角度分解光電子分光	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
光捕集アンテナにおける励起エネルギー移動ダイナミクスの分子論的機構に関する理論的研究	琉球大学理学部	東 雅大
気相イオンの極低温冷却と NMR 分光への応用	神戸大学	富宅喜代一
パルス圧縮を用いた大強度短パルス放射光発生に関する研究	京都大学エネルギー理工学研究所	全 炳俊
常温接合を用いた高機能固体レーザーの開発	中央大学理工学部	庄司 一郎
クマル酸誘導体とその水和系の非断熱緩和ダイナミクス	広島大学大学院理学研究科	江幡 孝之
Electronic structure of hexagonal Ge multilayers	北陸先端科学技術大学院大学マテリアルサイエンス研究科	FRIEDLEIN, Rainer
極限電子ビーム源としてのマルチアルカリカソード生成条件の最適化研究	広島大学大学院先端物質科学研究科	栗木 雅夫
二酸化炭素の酸素 1s 内殻励起時の低エネルギー光電子スペクトル測定	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	下條 竜夫
アンジュレタ高次光が持つ新奇な性質の解明	広島大学放射光科学研究センター	佐々木茂美
赤外フェムト秒パルスレーザーの開発	福井大学大学院工学研究科	川戸 栄

(3) 研究会

【ミニ国際シンポジウム】

レーザーフィラメンテーション技術の基礎と応用

Fundamentals and Applications of Laser Filaments

2013年4月4日(木)～6日(土) 岡崎コンファレンスセンター

April 4 (Thursday)

- 9:30- 9:45 A. Terasaki (Kyushu University, Japan)
Opening address
- 9:45-10:30 L. Wöste (Freie Universität Berlin, Germany)
Fundamentals and applications of plasma filaments: An overview of achievements from the Teramobile project
- 10:30-11:00 Coffee break
- 11:00-11:45 T. Fujii (Central Research Institute of Electric Power Industry, Japan)
Interaction of femtosecond-laser-induced filament plasma with external electric field in atmosphere and its application
- 11:45-12:15 T. Siebert (Max-Born-Institut Berlin, Germany)
Methodology for applications in supercontinuum spectroscopy: Pulse compression, shaping, and analysis
- 12:15-12:45 K. Yoshihara (Emeritus Professor of Institute for Molecular Science, Japan)
UV-light assisted water droplet/aerosol formation in air
- 12:45-14:15 Lunch
- 14:15-15:00 T. Leisner (Karlsruher Institut für Technologie, Germany)
Laser filament–cloud interactions
- 15:00-15:30 T. Fuji (Institute for Molecular Science, Japan)
Coherent control of mid-infrared pulse generation by using four-wave mixing through filamentation
- 15:30-16:00 A. Baltuska (Technische Universität Wien, Austria)
Femtosecond mid-infrared filamentation and remotely-induced gas lasing
- 16:00-16:30 Coffee break
- 16:30-17:15 T. Suzuki (Kyoto University, Japan)
Ultrafast photoelectron spectroscopy in gas and liquid phases
- 17:15-17:45 L. Shah (University of Central Florida, U.S.A.)
Prospects of femtosecond fiber lasers for filamentation applications
- 17:45-18:15 S. Utsunomiya (Kyushu University, Japan)
Radioactive contamination derived from the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant accident
- 18:15-20:00 Welcome party and Poster session

April 5 (Friday)

- 9:00- 9:45 S. L. Chin (Laval University, Canada)
Molecular lasing inside a filament
- 9:45-10:30 T. Kobayashi (University of Electro-Communications, Japan)
Proposal of a novel pulse cleaning method for the generation of stable filamentation
- 10:30-11:00 Coffee break
- 11:00-11:45 S. Tzortzakis (IESL-FORTH Heraklion, Greece)
Taming filaments and strong THz fields
- 11:45-12:15 A. Nakajima (Keio University, Japan)
Ultrafast laser spectroscopy for surface photoemission via two-photon probing
- 12:15-12:45 L. Gallmann (ETH Zürich, Switzerland)
Engineered QPM based OPCPA for few-cycle pulse compression in the mid-infrared
- 12:45-13:30 Lunch
- 13:30-17:45 Excursion
- 17:45-19:45 Conference dinner

April 6 (Saturday)

- 9:00- 9:45 U. Keller (ETH Zürich, Switzerland)
High average power pulse compression into the few cycle regime—different options and trade-offs
- 9:45-10:30 S. Minemoto (University of Tokyo, Japan)
Imaging atomic and molecular orbitals with high-order harmonic spectroscopy
- 10:30-11:00 Coffee break
- 11:00-11:45 M. Richardson (University of Central Florida, U.S.A.)
Recent studies of air filamentation
- 11:45-12:15 N. Nakashima (Toyota Physical and Chemical Research Institute)
Change of M(III) to M(II): M = Eu, Sm, Yb, Fe in solution by femtosecond laser excitation accompanied by generation of white-light laser

12:15-12:45	G. Steinmeyer (Max-Born-Institut Berlin, Germany) Rogue waves in multi-filaments: A rough optical sea
12:45-14:15	Lunch
14:15-15:00	E. Rühl (Freie Universität Berlin, Germany) Interactions of short pulse laser radiation with gases and nanoscopic matter
15:00-15:30	A. Hishikawa (Nagoya University, Japan) Ultrafast dissociative ionization in few-cycle intense laser fields
15:30-15:50	A. Terasaki (Kyushu University, Japan) Concluding remarks

【ミニ国際シンポジウム】

分子ダイナミクスの階層性——超高速分光から一分子測定による解析まで——
Hierarchical Molecular Dynamics: From Ultrafast Spectroscopy to Single Molecule Measurements
2013年5月25日(土)～26日(日) 岡崎コンファレンスセンター

May 25

9:15-10:00	Registration
<i>Session 1</i>	<i>Chair: Shinji Saito (IMS)</i>
10:00-10:10	Iwao Ohmine (IMS) Opening Address
10:10-10:45	Shaul Mukamel (Univ. California, Irvine) Coherent Multidimensional Stimulated X-Ray Raman Spectroscopy of Molecules
10:45-11:20	Satoshi Takeuchi (RIKEN) Femtosecond Raman Tracking of Initial Structural Evolution in Reacting Molecules
11:20-11:55	R. J. Dwayne Miller (Max Plank Institute Hamburg) Do We Live in a Quantum World?—A New Twist
<i>Session 2</i>	<i>Chair: Yasuhisa Mizutani (Osaka Univ.)</i>
13:30-14:05	Yasuhiro Ohshima (IMS) Coherent Excitation of Molecular Motions by Intense Ultrashort Pulses
14:05-14:40	Peter Hamm (Univ. Zurich) Two-Dimensional Raman-THz Spectroscopy of Water
<i>Session 3</i>	<i>Chair: Akihito Ishizaki (IMS)</i>
15:00-15:35	Takayuki Uchihashi (Kanazawa Univ.) Single-Molecule Imaging of Proteins at Work with High-Speed Atomic Force Microscopy
15:35-16:10	Philipp Kukura (Univ. Oxford) Interferometric Scattering Microscopy: A New Look into the Nano-World
16:10-16:45	Shuji Akiyama (IMS) Circadian Pacemaker of Cyanobacteria by Intra-Molecular Feedback Regulation of KaiC ATPase
16:45-18:00	Poster Presentation
18:30	Banquet (at Okazaki New Grand Hotel)

May 26

<i>Session 4</i>	<i>Chair: Yuji Furutani (IMS)</i>
9:00- 9:35	Hideki Kandori (Nagoya Institute of Technology) Microbial Rhodopsins from the Ocean
9:35-10:10	Joachim Heberle (Freie Universität Berlin) Transient Protonation Changes in Channelrhodopsin-2 and Their Relevance to Channel Gating
<i>Session 5</i>	<i>Chair: Kumihiko Ishii (RIKEN)</i>
10:30-11:05	Shoji Takada (Kyoto Univ.) Large-Scale Functional Dynamics of p53 Studied by Multi-Scale Molecular Simulations
11:05-11:40	Gilad Haran (Weizmann Institute of Science) Single-Molecule FRET Studies of Multi-State Protein Folding
<i>Session 6</i>	<i>Chair: Tahei Tahara (RIKEN)</i>
13:30-14:05	Satoshi Takahashi (Tohoku Univ.) Microsecond-Resolved Tracking of the Unfolded State of BdpA by a Line Confocal Detection of Single Molecule Fluorescence
14:05-14:40	Akinori Kidera (Yokohama City Univ.) Hierarchical Dynamics of Protein Molecules Revealed by Molecular Dynamics Simulations
14:40	Closing Remark

【アジア連携分子研研究会】

日中合同若手シンポジウム——革新的配位材料

Japan-China Joint Coordination Chemistry Symposium for Young Scientists on Advanced Coordination Materials

2013年6月13日(木)~15日(土) 分子科学研究所 実験棟 301 - 303号室

June 13 (Thursday) Registration and Welcome banquet (Okazaki Grand Hotel)

June 14 (Friday)

8:50- 9:00 Opening remarks (Chairperson: Tetsuro Murahashi)
Jing-Lin Zuo & Takafumi Ueno

Session I Chairperson: Tetsuro Murahashi

9:00- 9:30 Sigeyuki Masaoka (Institute for Molecular Science)
Water Oxidation by Mono- and Multinuclear Metal Complexes

9:30-10:00 Yujie Xiong (University of Science and Technology of China)
Surface and Interface Modulation for Tuning Catalytic Performance of Inorganic Nanocrystals

10:00-10:30 Photo and Coffee break

Session II Chairperson: Wen-Ping Hu

10:30-11:00 Masayoshi Higuchi (National Institute for Materials Science)
Electro- and Photo-Chemical Devices with Organic-Metallic Hybrid Polymers

11:00-11:30 Masayuki Takeuchi (National Institute for Materials Science)
Functional Supramolecular Materials Based on Designed π -Conjugated Molecules

11:30-12:00 Jun-Hua Luo (Fujian Institute of Research on the Structure of Matter)
Polar Molecular Optoelectronic Crystalline Materials

12:00-13:30 Lunch

Session III Chairperson: Teppei Yamada

13:30-14:00 Yutaka Matsuo (The University of Tokyo)
Precise Synthesis of Co_8S_{15} Cluster inside the Bowl-Shaped Templating Fullerene Ligand

14:00-14:30 Wen-Ping Hu (Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences)
Organic Field-Effect Transistors

14:30-15:00 Ryota Sakamoto (The University of Tokyo)
Coordination Programming of Photo- and Electro-Functional Molecular Assemblies

15:00-15:30 Soichiro Yoshimoto (Kumamoto University)
Formation and Nanoscale Characterization of 2D Molecular Assembly at Solid-Liquid Interface

15:30-15:50 Coffee break

Session IV Chairperson: Guang-Shan Zhu

15:50-16:20 Tetsuro Murahashi (Institute for Molecular Science)
Dynamic Structural Changes of Multinuclear Sandwich Complexes

16:20-16:50 Jing-Lin Zuo (Nanjing University)
Giant Metallo-Supramolecular Cages Encapsulating Single-Molecule Magnets

16:50-17:00 Coffee break

Session V Chairperson: Jing-Lin Zuo

17:00-17:30 Michito Yoshizawa (Tokyo Institute of Technology)
Micelle-Like Molecular Capsules as Photoactive Hosts

17:30-18:00 Zhi-Yong Tang (National Center for Nanoscience and Technology)
Inorganic Nanoparticle-Metal Organic Framework Core-Shell Nanostructures: A Novel Multifunctional Platform

19:00 Dinner

June 15 (Saturday)

Session VI Chairperson: Michito Yoshizawa

9:00- 9:30 Teppei Yamada (Kyushu University)
Proton Conductivity of Acidic Metal-Organic Frameworks

9:30-10:00 Jie-Peng Zhang (Sun Yat-Sen University)
Porous Metal Azolate Frameworks

10:00-10:30 Takashi Uemura (Kyoto University)
Polymer Chemistry in Coordination Nanospaces

10:30-11:00 Coffee break

Session VII Chairperson: Xun Wang

11:00-11:30 Yan-Zhen Zheng (Xi'an Jiaotong University)
Coordination Chemistry as a Key Engine for Magnetic Cooling

11:30-12:00 Yuichi Negishi (Tokyo University of Science)
Precise Synthesis and Functionalization of Magic Gold Clusters

12:00-13:30 Lunch

<i>Session VIII</i>	<i>Chairperson: Hikaru Takaya</i>
13:30-14:00	Guang-Shan Zhu (Jilin University) Constructing Porous Materials for Gas Storage and Separation
14:00-14:30	Takane Imaoka (Tokyo Institute of Technology) Precise Synthesis of Monodisperse Subnanoparticles
14:30-15:00	Xun Wang (Tsinghua University) Inorganic Nanostructure with Sizes down to 1nm: A Macromolecule Analogue
15:00-15:20	Coffee break
<i>Session IX</i>	<i>Chairperson: Jun-Long Zhang</i>
15:20-15:50	Koji Harano (The University of Tokyo) Surface Programming of Sub-100 nm-Sized Fullerene Bilayer Vesicles
15:50-16:20	Hikaru Takaya (Kyoto University) Metal Array Fabrication Based on Metalated Amino Acids and Peptides: Emerging Function on Multi-Metal Supramolecular Assembly
16:20-16:50	Jun-Long Zhang (Peking University) Design of Luminescent ZnSalens for Molecular Imaging
16:50-17:00	Coffee break
<i>Session X</i>	<i>Chairperson: Koji Harano</i>
17:00-17:30	Akira Onoda (Osaka University) Programmed Hierarchical Assemblies of Hemoproteins toward Functional Biodevices
17:30-18:00	Takafumi Ueno (Tokyo Institute of Technology) Expanding Coordination Chemistry from Protein to Protein Assembly
18:00-18:10	Closing remarks
18:30	Dinner

【ミニ国際シンポジウム】

最先端分光で切り拓く強相関電子系の未来

IMS Workshop on Advanced Spectroscopy of Correlated Materials (ASCM 13)

2013年8月2日(金)～4日(日) 岡崎コンファレンスセンター

August 2nd (Friday) Place: 3rd floor of UVSOR Facility, Institute for Molecular Science

17:00 Registration

18:00-20:00 Welcome Reception

August 3rd (Saturday)

10:00-10:10 Opening remarks: Hidetoshi Miyazaki (Nagoya Institute of Technology, Japan)

1. Heavy Fermion systems (Chair: M. Matsunami, UVSOR)

10:10-10:35 [Invited] Global k-space perspective of temperature-dependent U 5f-states in URu₂Si₂
Jonathan Denlinger (Lawrence Berkeley National Laboratory, USA)

10:35-11:00 [Invited] Soft X-ray ARPES study of uranium compounds
Shin-ichi Fujimori (Japan Atomic Energy Agency, Japan)

11:00-11:25 [Invited] Optical study of archetypical valence-fluctuating Eu systems
Jörg Sichelschmidt (MPI Chemische Physik fester Stoffe, Germany)

11:25-11:50 [Invited] Low-energy optics of uranium-based heavy Fermions: Drude response of slow and fast electrons
Marc Scheffler (Universität Stuttgart, Germany)

11:50-13:00 Group Photo + Lunch

2. Molecular solids and Novel technical aspects including new synchrotron beam lines (Chair: R. Gemma, NIT)

13:00-13:25 [Invited] Time-resolved ARPES of graphite using femtosecond pulsed light in the deep-to-extreme UV region
Yukiaki Ishida (University of Tokyo, Japan)

13:25-13:45 [Contributed] Electron-phonon coupling investigation via phonon dispersion measurement in graphite by angle-resolved photoelectron spectroscopy
Shin-ichiro Tanaka (Osaka University, Japan)

13:45-14:05 [Contributed] Angle-resolved photoemission study of quasi-one-dimensional organic conductor
Takahiro Ito (Nagoya University, Japan)

14:05-14:20 Coffee Break

14:20-14:45 [Invited] Angle resolved photoemission spectroscopy of two dimensional organic metal
Takayuki Kiss (Osaka University, Japan)

14:45-15:15 [Invited] SOR-ARPES studies on π -electronic interaction in organic films and interfaces
Hiroyuki Yamane (Institute for Molecular Science, Japan)

15:30-16:30 UVSOR Site Tour

- 16:30-18:30 Check-in and Free Time
 18:45-21:00 Open-air Banquet at IMS (Okazaki fireworks festival)

August 4th (Sunday) Place: Conference room C, Okazaki Conference Center

3. Rare-earth and transition metal oxides (Chair: H. Miyazaki, NIT)

- 9:00- 9:25 [Invited] Observation of laser-induced magnetization precession in ferromagnetic EuO
 Takayuki Makino (University of Fukui, Japan)
 9:25- 9:50 [Invited] Investigating the Spin-Polarized Metal-Insulator Transition in Carrier Doped Eu_{1-x}Gd_xO Thin Films and Heterostructures by ARPES
 Kyle Shen (Cornel University, U.S.A.)
 9:50-10:15 [Invited] Quantum confinement of strongly correlated electrons in oxide artificial structures
 Kohei Yoshimatsu (Tokyo Institute of Technology, Japan)
 10:15-10:40 Coffee Break

4. Topological insulators (Chair: S. Kimura, Osaka Univ. and UVSOR)

- 10:40-11:05 [Invited] Theoretical proposal of topological insulator for a Kondo insulator SmB₆
 Tetsuya Takimoto (Hanyang University, Korea)
 11:05-11:30 [Invited] Topological phase transitions in ultrathin films
 Toru Hirahara (University of Tokyo, Japan)
 11:30-11:55 [Invited] Spin- and angle- resolved photoemission as a direct probe of spin textures in topological insulators
 Akio Kimura (Hiroshima University, Japan)
 11:55-12:20 [Invited] Local orbital angular momentum and circular dichroism ARPES
 Changyoung Kim (Yonsei University, Korea)
 12:20-12:30 Closing remarks: Shin-ichi Kimura (Osaka University and UVSOR, Japan)

【分子研研究会（一般）】

光による分子性伝導体の電子相制御

2013年10月3日（木）～4日（金） 岡崎コンファレンスセンター

10月3日（木）【一日目】

- 13:30-13:35 はじめに
 山本 浩史（分子研）

I. 新物質

- 13:35-14:00 「紫外光にตอบสนองして磁性と金属的伝導性を可逆的に発現する分子結晶」
 内藤 俊雄（愛媛大）
 14:00-14:25 「スピנקロスオーバー伝導体とその関連物質の外場応答」
 高橋 一志（神戸大）
 14:25-14:50 「分子性導体を用いた光駆動型超伝導トランジスタの開発」
 須田 理行（分子研）
 14:50-15:15 「パイ共役ポリマーの自己組織化による球状構造体形成と特異な発光特性」
 山本 洋平（筑波大）
 15:15-15:25 <休憩>

II. 分光測定とその理論（1）

- 15:25-15:50 「極超短パルス光で見る，操る，強相関電子・スピン・格子～モノサイクル制御を目指して～」
 岩井 伸一郎（東北大）
 15:50-16:15 「電子型強誘電転移を示す有機伝導体の探索」
 山本 薫（岡山理科大）
 16:15-16:40 「ダイマーモット絶縁体の光誘起相転移の初期過程」
 高橋 聡（名工大）
 16:40-17:05 「分子性導体の第一原理計算に基づくモデル化と多様な電子相図」
 妹尾 仁嗣（理研）
 17:05-17:30 「分子性導体の光誘起相転移における電子と構造の異なるダイナミクス」
 恩田 健（東工大）

10月4日（金）【二日目】

III. デバイスと電気的測定

- 9:00- 9:25 「色素ドーパナノ粒子 SET の光誘起スイッチング特性」
 野口 裕（千葉大）
 9:25- 9:50 「電気伝導と磁化からみた分子性導体の光応答」
 飯森 俊文（室蘭工大）
 9:50-10:15 「二次元高分子による 電子構造の制御」
 江 東林（分子研）

- 10:15-10:40 「光による α -(BEDT-TTF)₂I₃ の絶縁破壊」
田嶋 尚也 (東邦大)
- 10:40-10:50 <休憩>
- IV. 分光測定とその理論 (2)
- 10:50- 「光・テラヘルツ波による電子型強誘電体の超高速分極制御」
岡本 博 (東大)
- 11:15-11:40 「dmit 錯体における光誘起相転移の探索」
石川 忠彦 (東工大)
- 11:40-12:15 「電荷秩序系の光照射効果の理論」
橋本 博志 (東北大)
- 12:15-12:20 閉会の辞

【分子研研究会 (一般)】

造形科学：複学理インテグレーションによる未来材料開拓
2013年10月25日(金)～26日(土) 分子科学研究所 山手4号館3階会議室

10月25日

- 13:30 開会の挨拶 磯部寛之 (東北大)
- 13:35 第1部： 造形科学における合成化学の進歩 (座長 櫻井英博)
「バッキーボウルを基盤とした 分子造形イノベーション」
櫻井英博 (分子科学研究所)
「安定な反芳香族化合物の創成と三次元芳香族性の実現」
忍久保 洋 (名古屋大学)
「 造形のための新しい触媒的芳香環構築反応の開発と応用」
田中 健 (東京農工大学)
「開殻 電子系分子の新奇造形技術と新物性の開拓」
鈴木修一 (大阪市立大学)
「典型元素を用いたボウル型 造形と革新的物性の発掘」
斉藤雅一 (埼玉大学)
- 14:55 休憩
- 15:10 第2部： 造形集積科学が目指すもの (座長 芥川智行)
「強誘電性・強弾性機能の発現を目指したソフト 集積システム造形」
芥川智行 (東北大学)
「大規模分子集積化による巨視的 造形システムの構築と新機能開拓」
福島孝典 (東京工業大学)
「 共役系高分子の集合状態造形」
竹内正之 ((独)物質・材料研究機構)
「溶液デバイスの実現に向けた動的複合 アセンブリー造形」
矢貝史樹 (千葉大学)
- 16:30 第3部： 造形科学を支える物理学 (座長 杉本学)
「 造形科学のための理論設計・解析手法の開発と応用」
杉本学 (熊本大学)
「 造形システム集合体の物性制御」
竹延大志 (早稲田大学)
「発達 電子系を有する分子の複合電磁波分光法と電子機能予測」
佐伯昭紀 (大阪大学)
- 17:30 初日の議論の感想 佐藤 健太郎 (サイエンスライター)
- 18:00 懇親会

10月26日

- 9:30 フリーディスカッション
- 11:50 閉会の挨拶 福島孝典
- 12:00 解散

【分子研研究会 (一般)】

ロドプシン研究の故きを温ねて新しきを知る
2013年11月18日(月)～19日(火) 岡崎コンファレンスセンター

11月18日(月)

- 13:00 - 13:05 はじめに 今元 泰 (京都大学)

I. 生物の多彩な光受容 座長：菊川峰志（北海道大学）

- 13:05 - 13:25 井上圭一（名古屋工業大学大学院工学研究科）
光駆動ナトリウムポンプの発見と展開
- 13:25 - 13:50 岡野俊行（早稲田大学理工学術院）
青色光による遺伝子発現の制御と青色光受容分子の解析
- 13:50 - 14:10 山崎洋一（奈良先端科学技術大学院大学）
PYPの分光学的性質の多様性獲得機構
- 14:10 - 14:30 斉藤圭亮（大阪大学大学院理学研究科）
ロドプシンの機能に違いを生み出す水素結合強度の違い

II. 細胞の光応答の分子基盤 座長：佐藤恵太（京都大学）

- 14:50 - 15:10 小島大輔（東京大学大学院理学系研究科）
動物の背地適応を制御する光受容分子の探索
- 15:10 - 15:35 寺北明久（大阪市立大学大学院理学研究科）
松果体関連器官の波長識別の分子基盤
- 15:35 - 15:55 佐藤慎哉（大阪大学大学院理学研究科）
コイ錐体での視物質再生に関与する 11- シスレチナール生成反応，AL-OL 反応の解析
- 15:55 - 16:05 集合写真
- 16:05 - 18:00 ポスター発表
- 18:00 - 20:00 懇親会

11月19日（火）

III. レチナール蛋白質の光構造変化 座長：筒井 圭（京都大学）

- 9:00 - 9:20 古谷祐詞（分子科学研究所）
微生物型ロドプシンから様々な膜タンパク質研究へ—時間分解フーリエ変換赤外分光法による構造変化解析—
- 9:20 - 9:40 今元 泰（京都大学大学院理学研究科）
構造ダイナミクスからみたロドプシンの活性化機構
- 9:40 - 10:05 内藤 晶（横浜国立大学大学院工学研究院）
光照射固体 NMR による光受容膜タンパク質の活性中間体の捕捉と構造変化の解明

IV. レチナール蛋白質研究の新規アプローチ 座長：片山耕大（名古屋工業大学）

- 10:25 - 10:45 神谷基司（京都大学大学院理学研究科）
レチナールの化学
- 10:45 - 11:10 水谷泰久（大阪大学大学院理学研究科）
ロドプシン研究に共鳴ラマン分光法が寄与したもの、そしてこれから
- 11:10 - 11:35 田原太平（理化学研究所）
光受容蛋白質のフェムト秒ダイナミクスの観測と理解
- 11:35 - 11:55 川村 出（横浜国立大学大学院工学研究院）
固体 MAS NMR によるフォボロドプシンのレチナール-タンパク質間相互作用の解析

V. レチナール蛋白質と G 蛋白質共役型受容体の多様性 座長：石北 央（大阪大学）

- 13:00 - 13:20 山下高廣（京都大学大学院理学研究科）
脊椎動物非視覚オプシン Opn5 グループの多様な分子特性
- 13:20 - 13:40 今井啓雄（京都大学霊長類研究所）
霊長類味覚受容体の機能解析
- 13:40 - 14:05 神山 勉（名古屋大学大学院理学研究科）
古細菌型ロドプシンの構造比較

VI. レチナール蛋白質研究の将来にむけて 座長：和田昭盛（神戸薬科大学）

- 14:25 - 14:50 山中章弘（名古屋大学環境医学研究所）
ロドプシンを用いて神経活動を操作し、個体行動を制御する
- 14:50 - 15:10 須藤雄気（名古屋大学大学院理学研究科）
微生物型レチナールタンパク質の非常識で未来を拓く
- 15:10 - 15:35 神取秀樹（名古屋工業大学大学院工学研究科）
ロドプシン研究の現状と我々のアプローチ
- 15:35 - 16:00 七田芳則（京都大学大学院理学研究科）
脊椎動物ロドプシンの分子構築を自然から学ぶ
- 16:00 - 16:05 おわりに 古谷祐詞（分子研）

【アジア連携分子研研究会】

日韓生体分子科学セミナー——実験とシミュレーション

6th Japan-Korea Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation

2013年11月25日(月)～27日(水) 岡崎コンファレンスセンター

November 25 (Mon)

【Chair: Yuji Furutani (IMS)】

- 10:00-10:25 Akihito Ishizaki (IMS)
QUANTUM DYNAMIC ASPECTS IN PHOTOSYNTHETIC LIGHT HARVESTING—OLD ROOTS, NEW SHOOTS
- 10:25-10:50 Young Min Rhee (POSTECH)
INTERPOLATED MECHANICS/MOLECULAR MECHANICS STUDIES ON THE DYNAMICS OF FLUORESCENT PROTEINS
- 10:50-11:10 coffee break

【Chair: Shigetoshi Aono (IMS)】

- 11:10-11:35 Yuji Furutani (IMS)
STIMULUS-INDUCED DIFFERENCE FTIR SPECTROSCOPY ON ION-CHANNEL AND ION-PUMP PROTEINS
- 11:35-12:00 Osami Shoji (Nagoya Univ.)
GASEOUS ALKANE HYDROXYLATION CATALYZED BY CYTOCHROME P450BM3 BY TRICKING ITS SUBSTRATE RECOGNITION USING DECOY MOLECULES
- 12:00-13:30 lunch

【Chair: Young Min Rhee (POSTECH)】

- 13:30-13:55 Jinwoo Lee (Kwangwoon Univ.)
A NOVEL APPROACH TO NON-EQUILIBRIUM THERMODYNAMICS
- 13:55-14:20 Nam Ki Lee (POSTECH)
SINGLE-VESICLE FRET ASSAY FOR THE NEUROTOXICITY OF A-SYNUCLEIN OLIGOMERS IN PARKINSON'S DISEASE: INHIBITING NEURONAL SNARE-MEDIATED VESICLE FUSION
- 14:20-14:45 Naoyuki Inagaki (Nara Inst. of Sci. & Tech.)
SIGNAL-FORCE TRANSDUCTION IN AXON OUTGROWTH AND GUIDANCE
- 14:45-15:05 coffee break

【Chair: Yuji Furutani (IMS)】

- 15:05-15:30 Jaehoon Yu (Seoul National Univ.)
A PEPTIDE MIMETIC OF APOLIPOPROTEIN A-I THAT CONTAINS 2-NAPHTHYLAMINE RESIDUES ENHANCES CHOLESTEROL EFFLUX AND SEQUESTERS OXIDIZED LDL FROM MACROPHAGE CELLS
- 15:30-15:55 Changbong Hyeon (KIAS)
UREA-INDUCED DENATURATION OF RNA
- 15:55-16:20 Chaok Seok (Seoul National Univ.)
GALAXY 2013 TESTED ON RECENT COMMUNITY-WIDE PREDICTION EXPERIMENTS
- 16:20-16:40 coffee break

【Chair: Hisashi Okumura (IMS)】

- 16:40-16:55 Balachandran Manavalan (KIAS)
RANDOM FOREST-BASED PROTEIN MODEL QUALITY ASSESSMENT (RFMQA) USING STRUCTURAL FEATURES AND POTENTIAL ENERGY TERMS
- 16:55-17:10 Takumi Yamaguchi (IMS)
PARAMAGNETISM-ASSISTED NMR EVALUATION OF MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS FOR CONFORMATIONAL CHARACTERIZATION OF OLIGOSACCHARIDES
- 16:55-17:10 Takumi Yamaguchi (IMS)
PARAMAGNETISM-ASSISTED NMR EVALUATION OF MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS FOR CONFORMATIONAL CHARACTERIZATION OF OLIGOSACCHARIDES
- 17:10-17:25 Tadashi Satoh (Nagoya City Univ. & JST PRESTO)
STRUCTURAL BASIS FOR PROTEASOME FORMATION MEDIATED BY ASSEMBLY CHAPERONE NAS2
- 17:25-17:40 Min-Kyu Kim (KIOST)
CRYSTAL STRUCTURES OF COLD-ACTIVE β -MANNANASE AND ITS MANNOPENTAOSE COMPLEXES FROM ANTARCTIC SPRINGTAIL, *Cryptopygus antarcticus*
- 18:00 Free Discussion/Mixer

November 26 (Tue)

【Chair: Jooyoung Lee (KIAS)】

- 9:30- 9:55 Julian Lee (Soongsil Univ.)
EXACT PARTITION FUNCTION ZEROS OF THE WAKO-SAITÔ-MUÑOZ-EATON PROTEIN MODEL
- 9:55-10:20 Fumio Hirata (Ritsumeikan Univ.)
ROLE OF WATER TO CONVERT "NON-BIOLOGICAL" FLUCTUATION TO THE "BIOLOGICAL" ONE
- 10:20-10:40 coffee break

【Chair: Seokmin Shin (Seoul National Univ.)】

- 10:40-11:05 Jooyoung Lee (KIAS)
HIGH-ACCURACY PROTEIN STRUCTURE MODELING AND ITS APPLICATION TO MOLECULAR REPLACEMENT OF CRYSTAL PHASING
- 11:05-11:30 Hisashi Okumura (IMS)
REPLICA-PERMUTATION METHOD FOR PROTEIN SIMULATIONS AND PRESSURE-INDUCED DENATURATION
- 11:30-11:55 Sun Choi (Ewha Womans Univ.)
COMPUTER-AIDED DRUG DESIGN AND MOLECULAR MODELING STUDIES FOR THE DISCOVERY OF COVALENT INHIBITORS
- 11:55-13:30 lunch

【Chair: Sun Choi (Ewha Womans Univ.)】

- 13:30-13:55 Seokmin Shin (Seoul National Univ.)
UNDERSTANDING AMYLOID FORMATION
- 13:55-14:20 Hirofumi Sato (Kyoto Univ.)
MOLECULAR THEORIES OF SOLVATION, FLUCTUATION AND DIFFUSION IN AQUEOUS SOLUTION
- 14:20-14:45 Weontae Lee (Yonsei Univ.)
STRUCTURE AND DYNAMICS OF C-TERMINAL REGULATORY DOMAIN OF *Vibrio vulnificus* EXTRACELLULAR METALLOPROTEASE
- 14:45-15:05 coffee break

【Chair: Kunihiro Kuwajima (SOKENDAI)】

- 15:05-15:30 Sung-il Yoon (Kangwon National Univ.)
CONSERVED, BUT DISTINCT, ACTIVATION OF TOLL-LIKE RECEPTOR 5 BY FLAGELLIN
- 15:30-15:55 Keehyoung Joo (KIAS)
NMR STRUCTURE DETERMINATION BY CONFORMATIONAL SPACE ANNEALING
- 15:55-16:10 Chihiro Kitatsuji (IMS)
MOLECULAR MECHANISM FOR HEME-MEDIATED INHIBITION OF THE 5-AMINOLEVULINIC ACID SYNTHASE I
- 16:10-16:30 coffee break

【Chair: Koichi Kato (IMS)】

- 16:30-16:45 Norifumi Muraki (IMS)
STRUCTURAL BASIS FOR PROTOCHLOROPHYLLIDE REDUCTION IN THE CHLOROPHYLL BIOSYNTHESIS
- 16:45-17:00 In Suk Joung (KIAS)
A SIMPLE STRUCTURE-BASED MODELING FOR EXPLORING MACRO-MOLECULAR CONFORMATIONAL CHANGES
- 17:00-17:15 Sim Jun (Soongsil Univ.)
GRAPH-THEORY BASED COMPUTATION OF PROTEIN RIGID BLOCKS
- 18:00 Banquet

November 27 (Wed)

【Chair: Shingo Nagano (Tottori Univ.)】

- 9:30- 9:55 Hironari Kamikubo (Nara Inst. of Sci. & Tech.)
FUNCTIONAL MODIFICATION OF A PROTEIN BY USING ELEMENT IMPLANTATION
- 9:55-10:20 Shuji Akiyama (IMS)
KaiC AS CIRCADIAN PACEMAKER OF CYANOBACTERIAL CIRCADIAN CLOCK
- 10:20-10:40 coffee break

【Chair: Soo Hyun Eom (GIST)】

- 10:40-11:05 Genji Kurisu (Osaka Univ.)
STRUCTURAL STUDIES OF THE CYTOPLASMIC DYNEIN MOTOR DOMAIN
- 11:05-11:30 Koichi Kato (IMS)
AN ARCHAEL HOMOLOGY OF PROTEASOME ASSEMBLY CHAPERONE FORMS A HOMOTETRAMER AND FUNCTIONS AS PROTEASOME ACTIVATOR

11:30-11:55 Sun-Shin Cha (KIOST)
ZINC-BINDING TO THE SURFACE OF PROTEINS AND ITS APPLICATION TO EXPERIMENTAL PHASING
11:55-13:30 lunch

【Chair: Fumio Hirata (Ritsumeikan Univ.)】

13:30-13:55 Soo Hyun Eom (GIST)
CRYSTAL STRUCTURE OF THE CORE DOMAIN OF HUMAN SWIPROSIN-1, CALCIUM DEPENDENT ACTIN
BUNDLING PROTEIN
13:55-14:20 Kunihiro Kuwajima (SOKENDAI)
IRREVERSIBLE DENATURATION OF *Escherichia coli* MALTODEXTRIN GLUCOSIDASE
14:20-14:45 Shun Hirota (Nara Inst. of Sci. & Tech.)
OLIGOMERIZATION OF HEME PROTEINS BY DOMAIN SWAPPING
14:45-15:05 coffee break

【Chair: Shun Hirota (Nara Inst. of Sci. & Tech.)】

15:05-15:30 Toshitaka Matsui (Tohoku Univ.)
UNIQUE REACTION MECHANISMS OF IsdG-TYPE HEME DAGRADING ENZYMES FROM PATHOGENIC
BACTERIA
15:30-15:55 Shingo Nagano (Tottori Univ.)
STRUCTURE AND HEME ACQUISITION MECHANISM OF A HEMOPHORE HasA HAVING UNUSUAL
5-COORDINATED HEME
15:55-16:20 Shigetoshi Aono (IMS)
STRUCTURAL BASIS FOR THE TRANSCRIPTIONAL REGULATION OF HEME HOMEOSTASIS IN LACTOCOCCUS
LACTIS

【分子研研究会（一般）】

先端スピン計測技術による分子性物質研究の現状と展望
2013年12月18日（水）～19日（木） 分子科学研究所 研究棟201号室

12月18日

13:00 はじめに
太田仁（神戸大分子フォトサイエンス研究センター）

第1セッション 座長：中村敏和（分子研）

磁気共鳴法による生理機能イメージング装置開発
市川和洋（九大先端融合医療創成センター）
同位体でスピララベルされたキラルなニトロキシラジカルのEPRイメージング
平田拓（北大情報科学）
14:00 CWとパルス-ESRとスピララベルを使ってタンパク質についてわかること（仮題）
荒田敏昭（阪大理）
PELDOR, ENDORでみる酸素発生系マンガクラスターの磁気構造
三野広幸（名大理）
生体内ラジカル検出のためのプローブ剤開発
山田健一（九大薬）
15:00 休憩

<第2セッション 座長：大和真由実（九大先端融合医療レドックスナビ）

15:20 有機ラジカル単結晶ESRと分子間磁気相互作用（仮題）
細越裕子（大府大理）
分子性物質研究に向けた多周波数ESRの可能性
大久保晋（神戸大分子フォトサイエンス研究センター）
16:00 有機半導体素子に対する電流検出ESR
鐘本勝一（大市大理）
パルスESRによる照射食品の計測と解析
亀谷宏美（農研機構食品総合研究所）
9GHz EPRイメージング法の医科学への応用：皮膚疾患と皮膚構造の解析
中川公一（弘前大保健）
17:00 総合討論
18:30 懇親会

12月19日

8:00 ラボツアー

第3セッション 座長：平田 拓（北大情報科学）

9:00 自己ドープ型有機導体に対する磁気共鳴研究
中村敏和（分子研）

Qバンドパルス ESR を用いたプリオン凝集体構造の解析（仮題）
稲波 修（北大獣医）

任意波形マイクロパルスを用いたスピン制御 技術と新しい ESR 分光手法への展開
佐藤和信（大市大理）

10:00 有機薄膜の磁気伝導効果の現状
生駒忠昭（新潟大自然科学）

光誘起伝導性ドナー・アクセプター型 COF のスピンダイナミクス
古川 眞（新潟大機器分析センター）

10:40 休憩

第4セッション 座長：稲波 修（北大 獣医）

11:00 高磁場動的核分極多重共鳴の装置開発と実験
藤原敏道（阪大蛋白質研）

チエノチオフェン系分子材料を用いた高移動度有機トランジスタにおけるキャリアダイナミクス
田中久暁（名大工）

高周波 ESR を用いた分子性導体の研究—— d 系および量子スピン液体物質への応用
大島勇吾（理研）

12:00 終わりに

市川和洋（九大先端融合医療創成センター）

【分子研研究会（一般）】

金属クラスター錯体・高分子状金属錯体を舞台とした構造・機能化学の最前線
2014年3月12日（水）～13日（木） 分子科学研究所 研究棟201号室

3月12日（水）

13:00-13:10 研究会趣旨説明 野呂 真一郎（北海道大学電子科学研究所）

セッション I：座長 唯 美津木（名古屋大学）

13:10-13:40 牧浦 理恵（大阪府立大学）
「液相界面における高配向性分子膜の形成」

13:40-14:20 阿部 正明（九州大学）
「共役系遷移金属錯体の配位集積に基づく分子性巨大クラスターの構築と電子特性」

14:20-14:45 写真撮影，コーヒープレイク

セッション II：座長 中沢 浩（大阪市立大学）

14:45-15:35 石谷 治（東京工業大学）
「直鎖状およびリング状 Re(I) 多核錯体の合成と光機能」

15:35-16:15 大久保 貴志（近畿大学）
「配位高分子の構造・キャリア制御と薄膜太陽電池への展開」

セッション III：座長 久枝 良雄（九州大学）

16:15-16:45 小門 憲太（北海道大学）
「多孔性結晶を鋳型とした特殊構造ネットワーク高分子」

16:45-17:35 宮坂 等（東北大学金属材料研究所）
「Functional MOFs：電子・スピン・化学反応を制御する」

18:00-20:00 懇親会

3月13日（木）

セッション IV：座長 西原 寛（東京大学）

9:30-10:00 志賀 拓也（筑波大学）
「特異な幾何構造をもつ多核金属錯体の物性研究」

10:00-10:30 近藤 篤（東京農工大学）
「柔軟な高分子状金属錯体の特異的吸着現象」

10:30-10:45 コーヒープレイク

セッション V : 座長 田所 誠 (東京理科大学)
 10:45-11:25 正岡 重行 (分子科学研究所)
 「金属錯体を用いた多電子酸化還元反応」
 11:25-12:05 植村 卓史 (京都大学)
 「錯体サブナノ空間を用いた精密高分子集積」
 12:05-12:10 閉会挨拶 黒田 孝義 (近畿大学)

(4) 若手研究会等

課 題 名	提案代表者
第 2 回分子科学若手シンポジウム	上智大学大学院理工学研究科 村上 龍大

(5) 岡崎コンファレンス

課 題 名	提案代表者
波束ダイナミクス ; コヒーレンスとインコヒーレンス	分子科学研究所 大森 賢治

(6) UVSOR 施設利用

(前期)

超イオン導電体におけるコヒーレントイオン伝導の研究	東北学院大学工学部	淡野 照義
BL1B の整備	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
コヒーレントシンクロトロン放射光を用いた固体電子物性研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
Si 系廃棄物から合成した Y 型ゼオライトの局所構造評価	東北大学金属材料研究所附属研究施設関西センター	佐藤 充孝
抗菌性ハイドロキシアパタイトにおける P-K 端および Ag-L 端の局所構造解析	東北大学金属材料研究所附属研究施設関西センター	佐藤 充孝
ゼオライトに修飾した MoOx 触媒活性種の L 殻 XANES 解析による還元構造の解明	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
希土類元素添加酸化物蛍光体における希土類元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
AlGaN の Al1s 及び Gd3d 内殻からの発光・励起スペクトル測定 (II)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
He プラズマ照射により発現する樹枝状ナノタングステンの XAFS による構造・電子状態解析	名古屋大学エコトピア科学研究所	吉田 朋子
LTA 型ナノゼオライトの微粉碎処理過程での Si 局所構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
軟 X 線吸収分光法による立方晶 AlN 薄膜の構造解析	九州大学大学院総合理工学研究院	富永 亜希
軟 X 線吸収分光法による加熱処理した金属酸化物薄膜の研究	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
真空紫外励起による酸化物結晶の固有発光と励起子から希土類イオンへのエネルギー移動	秋田大学工学資源学研究科	小玉 展宏
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	早稲田大学理工学術院	大木 義路
太陽光励起レーザ材料の光学特性	岐阜大学工学部	山家 光男
アルカリハライド結晶中の不純物イオン間のエネルギー移動の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
アミノ酸全 20 種 核酸塩基全 5 種の広域吸収スペクトル測定完結計画(3-30 eV)	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
高分解能多電子同時計測による分子のオージェ過程の研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
希薄磁性体における磁性元素の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
BL4B ビームライン整備	分子科学研究所	岩山 洋士
Li イオン二次電池高容量正極材料での反応機構解明に向けた表面・バルクの電子構造解析	産業技術総合研究所	奥村 豊旗
磁性薄膜と接合したトポロジカル絶縁体の電子構造	東京大学大学院理学系研究科	平原 徹
BL5U 光電子エンドステーションの整備	分子科学研究所	松波 雅治
非化学量論組成ホイスラー合金およびパイライト型遷移金属二硫化物固溶体の電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
Sm _{1-x} Y _x S における化学圧力下金属 - 絶縁体転移に伴う電子状態変化の直接観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
高分解能角度分解光電子分光を用いたキャリアドープ希土類酸化物の電子状態の直接観測	名古屋工業大学若手研究イノベータ養成センター	宮崎 秀俊
極端紫外光領域における岩石の反射スペクトル測定	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一朗
アモルファス半導体における光誘起欠陥評価	岐阜大学工学部	林 浩司

アミノ酸全 20 種、核酸塩基全 5 種の広域吸収スペクトル測定完結計画 (30-250 eV)	神戸大学大学院人間発達環境学研究所	中川 和道
シリコン材料中の新不純物中心の電子構造	東北学院大学工学部	淡野 照義
BL6B の顕微分光の整備	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
放射光赤外イメージングによる電子相分離の直接観測	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
鉛フリー圧電体の遠赤外線スペクトル	名古屋工業大学工学研究科	柿本 健一
高輝度放射光を用いた赤外顕微分光による固体電子状態の研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
新型トポジカル物質の低エネルギー高分解能 ARPES	東北大学原子分子材料科学高等研究機構	高橋 隆
パイ電子共役系有機半導体における電子格子相互作用	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
High-resolution photoemission spectroscopy studies on iron-pnictide superconductors	東京大学物性研究所	WALID, Malaeb
微小ギャップ半導体中の表面電子構造	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
ARPES studies of electronic nematicity and pseudogap-like phase in iron-pnictides	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
Polarization dependent ARPES study on three recently found superconductors	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
Studies on the electronic anisotropy in Ba(Fe,Ru) ₂ As ₂	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
BL7U 光電子エンドステーションの整備	分子科学研究所	松波 雅治
強相関 Tm 化合物の 3 次元角度分解光電子分光	分子科学研究所	松波 雅治
低励起エネルギー偏光依存型角度分解光電子分光による擬一次元有機導体における分子鎖間相互作用の研究	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
巨大 Seebeck 効果を示す FeSb ₂ における近藤半導体的電子構造の解明とその利用方法の確立	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
電荷密度波・磁性競合系と多段磁性・構造転移系の角度分解光電子分光	立命館大学理工学部	今田 真
カーボンナノマテリアルの低エネルギー光電子分光	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
新規オージェ・フリー発光の寿命特性	山形大学理学部	大西 彰正
高速シンチレ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	東北大学大学院工学研究科	越水 正典
太陽ライマン 線偏光観測ロケット実験 CLASP のフライト品評価	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所	成影 典之
ポロンドープダイヤモンドに見られるバンド端近傍発光の時間分解	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
VUV エリプソメトリーの整備	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
価数揺動を示す強相関電子系における可視・真空紫外反射分光	名古屋大学大学院理学研究科	井村敬一郎
真空紫外透明光学素子開発に向けたガラス中希土類イオンの電子状態研究	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	清水 俊彦
パイ共役分子 / 金属界面に現れる界面準位の起源および形成機構の解明	岩手大学工学部	細貝 拓也
角度分解紫外光電子分光法による高伝導度を示す PEDOT-PSS 薄膜の分子配向評価	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
有機半導体・無機半導体界面のエネルギー準位接合	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
熱励起遅延蛍光色素を用いた有機 EL 素子の電子構造	千葉大学先進科学センター	石井 久夫
有機・有機ヘテロ界面における界面電荷と分子間電荷移動との相関	千葉大学先進科学センター	中山 泰生
Development and maintenance of the BL-8B	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga rasika
Electronic structure of amino acids assembly studies by UPS	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga rasika
有機固体のエネルギー領域 0 から 20 eV での電子平均自由行程の精密測定	京都大学化学研究所	吉田 弘幸
金属修飾した有機薄膜からの電子放出現象と電子構造との相関に関する研究	近畿大学理工学部	田中 仙君
光電子分光法による金属内包フラーレンの電子状態の研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮崎 隆文
Ultraviolet-Vacuum ultraviolet reflectance and photoluminescence studies on LaAlO ₃ /SrTiO ₃ films	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
LiTi ₂ O ₄ 透明超伝導体の低温での透過率測定	分子科学研究所	許斐 太郎
高次高調波取出用フッ化物誘電体多層膜ミラーの真空紫外反射率測定	(独)情報通信研究機構未来 ICT 研究所	和久井健太郎
立方晶窒化ホウ素中の硫黄の局所構造解析	(独)物質・材料研究機構	村田 秀信
有機固体対応ビームラインの再構築: BL2B の立ち上げおよび BL8B の整備	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
真空紫外発光分光による固体光励起状態の包括的研究	山形大学理学部	北浦 守
(後期)		
超イオン導電体におけるコヒーレントイオン伝導の研究	東北学院大学工学部	淡野 照義
BL1B の整備	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
コヒーレントシンクロトロン放射光を用いた固体電子物性研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
ゼオライトに修飾した MoOx 触媒活性種の L 殻 XANES 解析による還元構造の解明	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
希土類元素添加酸化物蛍光体における希土類元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之

AlGdN の Al1s 及び Gd3d 内殻からの発光・励起スペクトル測定 (II)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
He プラズマ照射により発現する樹枝状ナノタングステンの XAFS による構造・電子状態解析	名古屋大学エコトピア科学研究所	吉田 朋子
軟 X 線吸収分光法による立方晶 AlN 薄膜の構造解析	九州大学大学院総合理工学研究院	富永 亜希
真空紫外励起による酸化物結晶の固有発光と励起子から希土類イオンへのエネルギー移動	秋田大学工学資源学研究所	小玉 展宏
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	早稲田大学理工学術院	大木 義路
太陽光励起レーザ材料の光学特性	岐阜大学工学部	山家 光男
アルカリハライド結晶中の不純物イオン間のエネルギー移動の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
アミノ酸全 20 種 核酸塩基全 5 種の広域吸収スペクトル測定完結計画(3-30 eV)	神戸大学大学院人間発達環境学研究所	中川 和道
高分解能多電子同時計測による分子のオージェ過程の研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
希薄磁性体における磁性元素の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
BL4B ビームライン整備	分子科学研究所	岩山 洋士
Li イオン二次電池高容量正極材料での反応機構解明に向けた表面・バルクの電子構造解析	(独)産業技術総合研究所	奥村 豊旗
BL5U 光電子エンドステーションの整備	分子科学研究所	松波 雅治
非化学量論組成ホイスラー合金およびパイライト型遷移金属二硫化物固溶体の電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
中間バンド型太陽電池における周期及び組成偏重がバンド構造に及ぼす影響	名古屋大学大学院工学研究科	宇治原 徹
$Sm_{1-x}Y_xS$ における化学圧力下金属 - 絶縁体転移に伴う電子状態変化の直接観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
高分解能角度分解光電子分光を用いたキャリアドープ希土類酸化物の電子状態の直接観測	名古屋工業大学若手研究イノベータ養成センター	宮崎 秀俊
極端紫外光領域における岩石の反射スペクトル測定	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一朗
アモルファス半導体における光誘起欠陥評価	岐阜大学工学部	林 浩司
アミノ酸全 20 種, 核酸塩基全 5 種の広域吸収スペクトル測定完結計画 (30-250 eV)	神戸大学大学院人間発達環境学研究所	中川 和道
シリコン材料中の新不純物中心の電子構造	東北学院大学工学部	淡野 照義
BL6B の顕微分光の整備	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
放射光赤外イメージングによる電子相分離の直接観測	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
鉛フリー圧電体の遠赤外線スペクトル	名古屋工業大学工学研究科	柿本 健一
高輝度放射光を用いた赤外顕微分光による固体電子状態の研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
新型トポロジカル物質の低エネルギー高分解能 ARPES	東北大学原子分子材料科学高等研究機構	高橋 隆
パイ電子共役系有機半導体における電子格子相互作用	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
微小ギャップ半導体中の表面電子構造	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
Polarization dependent ARPES study on three recently found superconductors	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
Studies on the electronic anisotropy in $Ba(Fe,Ru)_2As_2$	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
BL7U 光電子エンドステーションの整備	分子科学研究所	松波 雅治
低励起エネルギー偏光依存型角度分解光電子分光による擬一次元有機導体における分子鎖間相互作用の研究	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
巨大 Seebeck 効果を示す $FeSb_2$ における近藤半導体的電子構造の解明とその利用方法の確立	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
新規オージェ・フリー発光の寿命特性	山形大学理学部	大西 彰正
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	東北大学大学院工学研究科	越水 正典
太陽ライマン 線偏光観測ロケット実験 CLASP のフライト品評価	自然科学研究機構国立天文台	成影 典之
VUV エリプソメトリーの整備	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
パイ共役分子 / 金属界面に現れる界面準位の起源および形成機構の解明	岩手大学工学部	細貝 拓也
角度分解紫外光電子分光法による高伝導度を示す PEDOT-PSS 薄膜の分子配向評価	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
有機半導体・無機半導体界面のエネルギー準位接合	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
熱励起遅延蛍光色素を用いた有機 EL 素子の電子構造	千葉大学先進科学センター	石井 久夫
有機 - 有機ヘテロ界面における界面電荷と分子間電荷移動との相関	千葉大学先進科学センター	中山 泰生
Development and maintenance of the BL-8B	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga rasika
Electronic structure of amino acids assembly studies by UPS	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga rasika
有機固体のエネルギー領域 0 から 20 eV での電子平均自由行程の精密測定	京都大学化学研究所	吉田 弘幸

金属修飾した有機薄膜からの電子放出現象と電子構造との相関に関する研究	近畿大学理工学部	田中 仙君
光電子分光法による金属内包フラーレンの電子状態の研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮崎 隆文
スラグおよびスラグ酸処理溶液から合成した Ca 系化合物の局所構造評価	東北大学金属材料研究所附属研究施設関西センター	佐藤 充孝
新規圧電用ニオブ酸カリウム系セラミックスの構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
軟 X 線領域の蛍光収量法を用いた材料のその場観察	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
アルカリハライド微結晶によるシンチレーション機能の研究	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
酸素発生電極触媒を示す高原子価金属酸化物における LMCT 状態の解析	北海道大学大学院工学研究院	青木 芳尚
CaCu ₃ Ti _{4-x} Ru _x O ₁₂ における d 電子の二重性	弘前大学理工学研究科	任 皓駿
軟 X 線光電子分光によるリン化ニッケル表面の電子状態の解明	立教大学理学部	枝元 一之
低エネルギー高分解能角度分解光電子分光法による Bi 超薄膜の半金属半導体転移の研究 2	東京大学大学院理学系研究科	平原 徹
Angle-resolved photoemission of Cu-doped NaFeAs and SrFe ₂ As ₂	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
鉄ニクタイト超伝導体における角度分解光電子分光	大阪大学大学院理学研究科	田島 節子
イリジウム酸化物の真空紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	藤岡 淳
真空紫外励起による無機蛍光体の発光特性と発光機構の解明	学習院大学理学部	稲熊 宜之
真空紫外領域における YF ₃ 薄膜の光伝導特性評価	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 晋吾
真空紫外透明光学素子開発に向けたガラス中希土類イオンの電子状態研究	大阪大学レーザーエネルギー学研究中心	清水 俊彦
真空紫外反射による亜鉛リン酸塩ガラス中ビスマスの電子状態の研究	(独)産業技術総合研究所	北村 直之
Study exotic quantum properties at LaAlO ₃ /SrTiO ₃ interface using ultraviolet-Vacuum ultraviolet reflectance and photoluminescence	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
第三周期元素 K 端 XAS プリエッジの微細構造解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
有機固体対応ビームラインの再構築: BL2B の立ち上げおよび BL8B の整備	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
真空紫外発光分光による固体光励起状態の包括的研究	山形大学理学部	北浦 守

(7) 施設利用

機器センター

(通年)

新規な有機半導体の構造解明	東京工業大学大学院理工学研究科	芦沢 実
分子内電荷移動錯体の結晶構造解析による分子配列の解明と分子間相互作用の解明	静岡大学工学部	植田 一正
新規な多核金属錯体の合成と X 線結晶構造解析	静岡大学理学部	仁科 直子
シクロデキストリン類と低分子薬物の包接複合体結晶の単結晶 X 線構造解析	愛知学院大学薬学部	小川 法子

(前期)

サイズ・組成制御した銅カルコゲナイド半導体ナノ粒子の発光特性の研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	濱中 泰
X 線結晶構造解析による分子構造の決定	豊橋技術科学大学大学院工学研究科	藤沢 郁英
シアニン J 会合体の蛍光特性に関する研究	早稲田大学理工学術院	井村 考平
アゾ金属錯体の円偏光紫外光誘起キラル秩序の CD 分光	東京理科大学理学部	秋津 貴城
新奇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
紅色光合成細菌由来光捕集膜蛋白質複合体における耐熱化の分子機構	神戸大学大学院農学研究科	木村 行宏
バイオマス利用に向けた糖化関連タンパク質の解析	農業・食品産業技術総合研究機構畜産草地研究所	横山 浩
側鎖に分岐アルキル基を有する 共役系ラセン高分子の溶媒及び温度に対する光学特性	室蘭工業大学大学院工学研究科	馬渡 康輝
哺乳類トランスポーター蛋白質と基質・阻害剤の分子間相互作用の解析	京都大学大学院医学研究科	野村 紀通
一次元ロジウム - ジオキソレン錯体の結晶構造解析 2	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔
協同転移を示す複合機能錯体の低温構造解析	神戸大学大学院理学研究科	高橋 一志
ベンゼン重水素置換体の分子構造精密決定	九州大学稲盛フロンティア研究センター	石元 孝佳

(後期)

エネルギー有効利用のためのアニオンドープ酸化物 - 有機物ナノコンポジットの可能性研究	自然科学研究機構核融合科学研究所	高山 定次
サイズ・組成制御した銅カルコゲナイド半導体ナノ粒子の光学特性の研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	濱中 泰
X 線結晶構造解析による分子構造の決定	豊橋技術科学大学大学院工学研究科	藤沢 郁英
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
紅色光合成細菌の光捕集膜タンパク質複合体における耐熱化の分子機構	茨城大学理学部	大友 征宇

キレート型プロトン性イオン液体中での錯形成と構成成分の拡散	奈良女子大学大学院人間文化研究科	飯田 雅康
多孔性ポリフィリン亜鉛錯体の結晶構造解析	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔
イオン性ブロック共重合体の熱分析	岐阜大学工学部	三輪 洋平
光合成膜蛋白質耐熱化の熱力学的解析	神戸大学大学院農学研究科	木村 行宏
新規な光センサータンパク質の生化学的解析	日本大学生物資源科学部	高野 英晃
BEDT-TTF 銀錯体の極低温構造解析	名城大学農学部	平松 孝章
¹⁸³ W 核磁気共鳴法によるタングステン錯体の構造研究	岡山大学大学院自然科学研究科	押木 俊之
金属間結合形成転移を示す機能性金属錯体の構造解析	神戸大学大学院理学研究科	高橋 一志

装置開発室

(前期)

時間分解電子運動量分光装置のための超音速分子線源および画像観測イオン検出器の開発	東北大学多元物質科学研究所	山崎 優一
神経細胞ネットワークハイスループットスクリーニング素子のセンサー基板とマイクロ流路開発	名古屋大学革新ナノバイオデバイス研究センター	宇理須恒雄
先進超伝導線材における引張歪印加機構プローブの開発	自然科学研究機構核融合科学研究所	菱沼 良光
人工脂質膜上の脂質クラスターの可視化と脂質プローブの検出感度推定	名古屋大学大学院医学系研究科	深澤 有吾

(後期)

形彫放電加工機による透過型電子顕微鏡部品製作	名古屋大学全学技術センター	松下 幸司
神経細胞ネットワークハイスループットスクリーニング素子のセンサー基板とマイクロ流路開発	名古屋大学革新ナノバイオデバイス研究センター	宇理須恒雄
高電圧高速パルススイッチング回路の製作	新潟薬科大学薬学部	星名賢之助

計算機利用

半導体における不純物電子状態の第一原理的研究	慶應義塾大学理工学部	山内 淳
分子内および分子間電子・電荷移動の研究	神奈川大学理学部	田仲 二郎
生体分子の機能発現反応に関する理論的研究	千葉大学大学院薬学研究院	星野 忠次
生体分子および触媒分子系の量子化学	北海道大学触媒化学研究センター	長谷川淳也
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
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	京都大学福井謙一記念研究センター	榊 茂好
Rigged QED 理論に基づく局所量に関する研究	京都大学大学院工学研究科	立花 明知
金属蛋白質の反応制御機構に関する理論的研究	大阪大学蛋白質研究所	鷹野 優
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
複雑分子系の化学反応のシミュレーション	京都大学福井謙一記念研究センター	諸熊 奎治
ナノ・バイオ物質の電子状態・構造・機能の相関	東京大学大学院工学系研究科	押山 淳
階層的電子状態計算理論とナノ構造プロセス	鳥取大学大学院工学研究科	星 健夫
革新的量子計算科学の創造と大規模シミュレーション	量子化学研究協会研究所	中辻 博
生体内におけるアミノ酸の D-化機構の解明と D-化が及ぼす影響の検討	金沢大学医薬保健研究域	小田 彰史
色素増感太陽電池に関する理論的研究	(独)産業技術総合研究所	北尾 修
ナノ・バイオ物質群の構造・機能・電子状態の相関関係の計算科学的解析	筑波大学数理物質系	神谷 克政
相対論的分子軌道法と実験のコラボレーションによる機能性金属錯体の電子状態設計：有機 EL・分子スイッチングを中心に	お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科	森 寛敏
界面和周波発生分光の理論	東北大学大学院理学研究科	森田 明弘
遷移金属触媒をもちいた二酸化炭素変換反応の機構解析	東京大学大学院工学系研究科	野崎 京子
有機デバイスへの応用に向けた非晶質有機半導体材料の幾何・電子構造計算と膜の屈折率計算	山形大学大学院理工学研究科	横山 大輔
バクテリア ATP 合成酵素の サブユニットを基にした GTP センサーの理論設計	京都大学大学院理学研究科	高田 彰二
分子間相互作用理論とその分子クラスター研究への応用	分子科学研究所	岩田 末廣
第一原理反応ダイナミクスの多角的展開	北海道大学大学院理学研究院	武次 徹也
真空及び固体中における分子とナノ構造の磁性理論	横浜国立大学大学院工学研究院	Raebiger Hannes
超球面探索法を用いた結晶構造の予測	和歌山大学システム工学部	山門 英雄
分子動力学及び量子化学計算を用いたセルロース関連分子の構造と機能の研究	横浜国立大学大学院工学研究院	上田 一義
カーボンナノリングの構造と物性研究	名古屋大学物質科学国際研究センター	瀬川 泰知

有機化学反応における求電子性および求核性についての理論的研究	高知大学大学院総合人間自然科学研究科	金野 大助
脂質膜へのタンパク質埋め込みのための分子シミュレーション技術の確立	金沢大学理工研究域	齋藤 大明
セルロース結晶の溶媒和ダイナミクス挙動と結晶性セルロース結合タンパク質との相互作用	宮崎大学工学教育研究部	湯井 敏文
水中における脂質分子集団系の構造形成と機能	名古屋大学大学院工学研究科	岡崎 進
柔らかい相互作用系のガラス転移	筑波大学数理物質系	宮崎 州正
MD/3D-RISM法を用いた自由エネルギー計算による自己組織化の動的側面に関する研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮田 竜彦
光合成酸素発生中心 CaMn_4O_5 クラスタの構造, 電子 - スピン状態および反応性に関する理論的研究	大阪大学ナノサイエンス教育研究センター	山口 兆
分子クラスターの構造と化学反応経路の量子化学的研究	電気通信大学大学院情報理工学研究科	山北 佳宏
キラル超分子集合体の理論的検討	東京大学大学院工学系研究科	伊藤 喜光
大規模複雑系の基底状態並びに励起状態に関する量子化学シミュレーション	名古屋大学大学院理学研究科	Irle Stephan
反応経路自動探索法を用いた触媒反応および酵素反応機構の量子化学的系統解析	北海道大学大学院理学研究院	前田 理
コンピューターシミュレーションによる核酸構造安定性の解析	甲南大学先端生命工学研究所	杉本 直己
分子モーターの動作機構解析シミュレーション	名古屋大学大学院工学研究科	笹井 理生
新型リチウムとナトリウムイオン電池材料の第一原理計算	東京大学大学院工学系研究科	山田 淳夫
タンパク質の酵素反応と機能の分子シミュレーション	京都大学大学院理学研究科	林 重彦
水, 氷, クラスレートハイドレートの構造相転移の理論研究	岡山大学大学院自然科学研究科	田中 秀樹
高精度量子化学計算によるナノサイズ分子の分子機能の解明	(独)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	横浜市立大学大学院生命医科学研究科	森次 圭
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	高橋 修
化学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
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
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	藪下 聡
金属錯体・触媒・生体関連分子の構造・物性・反応に関する理論的研究	お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科	鷹野 景子
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	早稲田大学大学院先進理工学研究科	中井 浩巳
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	弘前大学大学院理工学研究科	斎藤 稔
環境中および生体内の有機化学反応機構の解明	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研究科	田中 一義
第一原理量子論による次世代新原理メモリの設計指針の獲得	筑波大学計算科学研究センター	白石 賢二
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
第一原理的手法によるナノ・バイオ関連物質の形成と機能に関する研究	三重大学大学院工学研究科	秋山 亨
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
ナノカーボンの光誘起転位・解離反応の動力学シミュレーション	東北大学大学院理学研究科	河野 裕彦
フッ化物イオン認識によるウレア基修飾ポリ(パラ-フェニレン)レセプターからくる蛍光出力の振電スイッチング	北海道大学大学院工学研究科	佐藤信一郎
剪断流下の脂質膜系における構造形成	東京大学物性研究所	芝 隼人
タンパク質と基質分子の結合自由エネルギー解析	金沢大学理工研究域	川口 一朋
簡単な分子の光化学過程の理論的研究	新潟大学自然科学系	徳江 郁雄
QM/MM法による量子化学計算から生体分子の動的構造を解明する	佐賀大学大学院工学系研究科	海野 雅司
有機化合物における置換基効果の微視的起源	鳥取大学大学院工学研究科	早瀬 修一
6員環構造を持つナノ物質の第一原理計算	金沢大学理工研究域	斎藤 峯雄
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	酒井 章吾
分子性結晶における光誘起相転移の理論的研究	高エネルギー加速器研究機構	岩野 薫
低酸化数ホウ素化合物の酸化還元挙動および含ホウ素 PBP 配位子を有する金属錯体群の反応性の解明	中央大学理工学部	山下 誠
金属錯体に関する理論的研究	静岡理科大学理工学部	関山 秀雄
分子性液体に関する計算機シミュレーション	岐阜大学工学部	寺尾 貴道
5d 金属を含む多核金属錯体の電子状態	岐阜大学工学部	海老原昌弘
有機ラジカルの電子状態の ab initio MO 計算	奈良女子大学大学院自然科学系	竹内 孝江
薬物と飲食物に含まれる生理活性物質との相互作用解析	福岡大学薬学部	池田 浩人
芳香族アルコール溶媒和クラスターにおける励起状態プロトン移動反応の振動分光による構造論的研究	東京工業大学資源化学研究所	宮崎 充彦
強相関電子系における光誘起ダイナミクスのシミュレーション	筑波大学数理物質系	前島 展也
大気エアロゾル生成に関する分子シミュレーション	(独)海洋研究開発機構	河野 明男

薬物リード化合物創出のための分子シミュレーション	(独)産業技術総合研究所	亀田 倫史
特異な機能を有する結晶分子の量子化学的研究	横浜国立大学大学院工学研究院	河野 雄次
化学反応および分子特性に関する理論研究	神奈川大学理学部	松原 世明
量子化学と統計力学に基づく複雑化学系の理論的研究	京都大学大学院工学研究科	佐藤 啓文
ドーピングされたグラフェンの構造とその性質	東京大学大学院理学系研究科	今村 岳
超臨界水の振動スペクトル解析	徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部	吉田 健
微細構造を認識する超分子複合系の構築と構造解析	新潟大学大学院自然科学研究科	岩本 啓
理論計算からみた孤立分子・クラスターの高エネルギー光化学	広島大学放射光科学研究センター	田林 清彦
酸化還元ユニットを有するキラルバイ共役系分子の開発	北里大学理学部	長谷川真士
三次元ケイ素クラスターの構造と物性研究	群馬大学大学院工学研究科	津留崎陽大
かさ高い芳香族アジド基が有する高いクリック性に関する研究	東京医科歯科大学生体材料工学研究所	吉田 優
シクロデキストリンによる β -ラクタム系抗生物質の包接現象のエネルギー解析	近畿大学生物理工学部	藤澤 雅夫
分子および金属クラスターの構造と電子状態の理論研究	千葉工業大学工学部	松澤 秀則
実験的手法, 分子動力学シミュレーションと量子化学計算とを用いたタンパク質の構造変化の解析	名古屋大学大学院理学研究科	榎 互介
push-pull 型スターバースト発色団の構造と電子状態の解明	静岡大学理学部	三井 正明
異方的な場における, 分子の磁場や光応答機構の解析, および新規理論の構築	東京工業大学大学院生命理工学研究科	中田 浩弥
光受容タンパク質反応初期過程における超高速構造ダイナミクスの解明	(独)理化学研究所	倉持 光
量子力学/分子力学混合法(QM/MM法)及び量子化学計算(ab initio 分子軌道法及び密度汎関数法)を用いた生体関連分子の構造, 物性及び反応機構の解明	筑波大学システム情報系	栢沼 愛
化学反応の ab initio 計算による研究	愛媛大学理工学研究科	長岡 伸一
微小半導体における量子干渉効果及び電子相関	山形大学地域教育文化学部	野々山信二
大規模第一原理計算のための KKR グリーン関数法の開発	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
表面・薄膜・クラスターの電子状態と反応過程	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	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	奥村 光隆
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科学研究科	古賀 伸明
タンパク質中のアミノ酸間情報伝達経路の解析	名古屋大学大学院理学研究科	倭 剛久
金属クラスターの構造および反応過程の理論的解析	豊田工業大学クラスター研究室	市橋 正彦
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メディア学部	本多 一彦
液体・生体分子および関連分子系の構造・ダイナミクス・分子間相互作用と振動スペクトル	静岡大学教育学部	鳥居 肇
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
重原子を含む化合物の基底・励起電子状態と分子物性に関する量子化学計算	首都大学東京大学院理工学研究科	波田 雅彦
第一原理及び古典分子動力学計算による Si ナノシートの構造形成プロセスと電子物性の解明	(独)産業技術総合研究所	森下 徹也
光解離反応の量子制御に関する理論的研究	(独)日本原子力研究開発機構	黒崎 譲
生体分子および溶媒の構造機能相関の解明	立命館大学生命科学部	高橋 卓也
理論計算による触媒機能の解明	星薬科大学薬学部	坂田 健
非古典的相互作用を含むタンパク質 - 薬物間相互作用の FMO-D 法を用いた解析計算スキームの開発	近畿大学薬学部	中村 真也
ペプチドの水溶液中における安定性の圧力依存性	立命館大学薬学部	加藤 稔
有機ケイ素化合物の特異な反応性の解明と予測	東京工業大学大学院理工学研究科	川内 進
酵素加水分解における酵素 - 基質相互作用に関する研究	明星大学理工学部	松本 一嗣
大規模系の高精度電子状態計算手法の開発と応用	早稲田大学高等研究所	小林 正人
糖質の構造解析	(財)野口研究所	山田 一作
創薬を指向する生体分子系の分子動力学計算	東京大学先端科学技術センター	山下 雄史
腸管出血性大腸菌(O-157)感染症に対する薬剤の開発にかかわる分子動力学シミュレーション	国立国際医療研究センター	尾又 一実
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
凝縮重電子系の量子化学計算: 共役系および生体金属化合物の電子状態解析	分子科学研究所	柳井 毅
ナノ構造体の電子構造と電子ダイナミクスの理論計算	分子科学研究所	信定 克幸
高精度電子状態理論による分子の励起状態と化学反応に関する研究	計算科学研究センター	江原 正博
タンパク質折りたたみの拡張アンサンブル分子動力学シミュレーション	計算科学研究センター	奥村 久士
両親媒性ピンサー型パラジウム錯体から成るベシクルの分子動力学計算	分子科学研究所	浜坂 剛

フェムト秒レーザー電場をもちいた気相分子クラスターにおけるダイナミクスの研究	分子科学研究所	水瀬 賢太
大規模量子化学エネルギー微分計算プログラムの開発	分子科学研究所	石村 和也
ポ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	分子科学研究所	櫻井 英博
リガンドのタンパク質への結合過程のマルチスケールシミュレーション	東京大学大学院農学生命科学研究科	寺田 透
タンパク質 - リガンド複合体形成の自由エネルギー計算	(独)日本原子力研究開発機構	河野 秀俊
シトクロム酸化酵素におけるリガンドの結合様式および相互作用機構の理論解析	兵庫県立大学大学院生命理学研究科	舘野 賢
2- ハロ酸脱ハロゲン化酵素と耐熱性システイン合成酵素の反応機構解析	長浜バイオ大学バイオサイエンス学部	中村 卓
ホタルルシフェラーゼの発光波長予測	兵庫県立大学大学院工学研究科	加藤 太郎
4 量体型サルコシン酸化酵素の基質と生成物のチャネルの動力学的解析 2	北里大学理学部	米田 茂隆
対イオンによる DNA の局所構造変化がタンパク質との相互作用や凝集に及ぼす影響	大分大学医学部	谷川 雅人
カリウムチャネルでのイオン透過におけるタンパク質と水分子の役割, およびイオン選択性の発現機構の解明	福井大学医学部	老木 成稔
KODA による開花のメカニズムについて	名城大学情報センター	寺田 幸正
キラル秩序を有するシッフ塩基金属錯体の CD スペクトルの解釈	東京理科大学理学部	秋津 貴城
縮合多環芳香族化合物に基づく有機発光材料および有機半導体材料の開発	東京農工大学大学院工学研究科	中野 幸司
計算科学的アプローチによる肺炎球菌ケトライド耐性における構造学的メカニズムの解明	千葉大学大学院薬学研究院	佐藤 慶治
非平面有機半導体の分子設計	分子科学研究所	鈴木 敏泰
アミノ酸の準安定平衡状態の研究	早稲田大学国際教養学部	稲葉 知士
水, 水溶液, および生体高分子における動的相互作用の解明	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
金属錯体触媒の電子構造制御と機構解明	分子科学研究所	正岡 重行
イオン性分子及び糖類の水和状態に関する分子動力学計算	東京大学大学院工学系研究科	川辺 駿佑
高分子電解質膜の分子シミュレーション	(独)産業技術総合研究所	崔 隆基
Hras-GTP 複合体における GTP の加水分解のメカニズムを分子動力学法により解明しようとする研究	東京薬科大学生命科学部	宮川 毅
量子化学計算に基づく錯体触媒の構造および反応性解明とその改良	東京大学大学院総合文化研究科	増井 洋一
芳香族分子と金属イオン・極性分子における電子状態と光誘起反応の量子化学計算ならびに生体分子系における分子認識の分子動力学及び大規模量子化学計算による解析	北里大学一般教育部	江川 徹
動的螺旋分子における螺旋反転反応の理論的研究	明治大学理工学部	村岡 梓
水, 氷, クラステート水和物の相転移メカニズムに関する理論研究	分子科学研究所	望月 建爾
多孔性窒化炭素表面と有機分子の相互作用に関する理論研究	東京大学大学院総合文化研究科	尾中 篤
有機ケイ素化合物の構造と性質	群馬大学理工学研究院	久新 荘一郎
多元素クラスターの赤外分光のための基礎研究における赤外スペクトルの検討	東京大学大学院総合文化研究科	工藤 聡
第一原理分子動力学法の開発と種々の分光スペクトルのシミュレーション	京都大学大学院理学研究科	谷村 吉隆
有機金属錯体の結合性の解明	分子科学研究所	村橋 哲郎
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
新規超原子価および低配位典型元素化合物の構造と反応	広島大学大学院理学研究科	山本 陽介
低原子価ゲルマニウム化学種の結合した遷移金属錯体の合成と構造	東北大学大学院理学研究科	渡邊 孝仁
小分子活性化を可能とする遷移金属錯体の分子設計及び構造に関する理論計算	東京工業大学大学院理工学研究科	石田 豊
ランタノイド錯体の溶液中構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	奥村 森
DFT 計算によるジメチルジヒドロピレン共役遷移金属錯体の基底および励起状態に関する研究	名古屋大学大学院理学研究科	邨次 智
量子化学計算による金属酵素モデル錯体の反応機構の解析	九州大学先端物質化学研究所	太田 雄大
非線形, 非対称単一分子電気特性研究のための構造物性相関の研究	大阪大学大学院理学研究科	小川 琢治
クラスタイオンの幾何構造および移動度計算	東北大学大学院理学研究科	大下 慶次郎
電子系新規有機材料の物理・化学的性質に関する理論計算	東京大学大学院理学系研究科	松尾 豊
時計タンパク質複合体の構造解析	名古屋大学遺伝子実験施設	石浦 正寛
光化学系 II におけるキノン電子受容体の酸化還元電位制御機構	名古屋大学大学院理学研究科	野口 巧
光触媒の理論的研究	(独)物質・材料研究機構	梅澤 直人
緩和モード解析を用いた高分子溶融体の線形粘弾性の評価手法の開発	慶應義塾大学大学院理工学研究科	岩岡 伸之
量子化学計算によるイオン伝導解析	三重大学大学院工学研究科	大西 拓
クラウンエーテルおよびペプチドナノリングを用いたアミノ酸キラリティー認識機構の第一原理電子論	早稲田大学理工学術院	武田京三郎

Julia-Kocienski 反応の反応機構の解明と立体選択的オレフィン化試薬の開発	岐阜大学工学部	安藤 香織
腸管出血性大腸菌 (O-157) 感染症に対する薬剤の開発にかかわる分子動力	国立国際医療研究センター	尾又 一実
学シミュレーション		
酸化還元電位に依存したプロテインジスルフィドイソメラーゼのドメイン	分子科学研究所	加藤 晃一
再配向機構の解明		
大規模分子動力学シミュレーションによる脂質膜とタンパク質の相互作用	京都大学化学研究所	松林 伸幸
の研究		
水素結合性液体中における振動ダイナミクス	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
光誘起機能性物質の機能性解明研究	新潟大学研究推進機構	古川 貢
鉄触媒によるオレフィン重合反応の機構解析	東京大学大学院工学系研究科	伊藤 慎庫
量子多成分系分子理論の開発とその応用	横浜市立大学大学院生命ナノシステム科	立川 仁典
	学研究科	
銅含有亜硝酸還元酵素に関する計算化学研究	京都府立大学大学院生命環境科学研究科	リントゥルト 正美
近接場光と分子の相互作用	慶應義塾大学大学院理工学研究科	岩佐 豪
有機ラジカル液晶の分子間磁気相互作用の起源	大阪大学大学院基礎工学研究科	内田 幸明
分子性導電・磁性材料に関する理論的研究	京都大学低温物質科学研究センター	中野 義明
量子化学文献データベースの開発	首都大学東京大学院理工学研究科	波田 雅彦
GEMB (Generalized-Ensemble Molecular Biophysics) プログラムの開発	分子科学研究所	奥村 久士
界面分光計算ソフトウェア Calnos の開発	東北大学大学院理学研究科	森田 明弘
(計算物質科学イニシアティブ利用枠)		
分子における電子の動的過程と多体量子動力学	東京大学大学院総合文化研究科	高塚 和夫
凝縮分子科学系における揺らぎとダイナミクス	名古屋大学大学院工学研究科	笹井 理生
密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究	東京大学大学院工学系研究科	押山 淳
ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション	名古屋大学大学院工学研究科	尾形 修司
全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開	名古屋大学大学院工学研究科	岡崎 進
拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明	名古屋大学大学院理学研究科	岡本 祐幸
太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化	東京大学大学院工学系研究科	山下 晃一
にむけた大規模数値計算		
バイオマス利用のための酵素反応解析	九州大学理学部	吉田 紀生
合金凝固組織の高精度制御を目指した dendro ライト組織の大規模数値計算	北海道大学大学院工学研究院	大野 宗一
超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化	東北大学金属材料研究所	西松 毅

3-3-3 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 項目	'76 ~ '06		'07		'08		'09		'10		'11		'12		'13		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	103	828	2	29	2	22	1	28	0	0	1	13	1	21	2	27	人数： 登録人数
協力研究	3,644	5,027	91	219	90	200	119	412	122	316	108	292	123	329	64	173	"
招へい 協力研究	195	197	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
所長 招へい	3,863	3,863	132	132	159	159	148	148	148	148	78	78	93	93	96	96	人数： 旅費支給者
研究会	311	5,131	9	198	4	105	5	110	6	137	4	105	10	207	10	154	"
若手研究会等	-	-	-	-	1	12	1	10	1	14	1	11	1	19	1	21	"
岡崎コンファ レンス	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	29	1	18	"
施設利用 I	1,796	4,053	59	120	72	177	60	179	66	166	98	266	60	254	36	105	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)	4,444	14,538	145	595	147	656	171	676	170	666	190	668	190	813	185	711	"
協力研究 (ナノプラット)	333	677	41	107	55	130	36	86	35	94	25	64	15	51	50	123	"
施設利用 (ナノプラット)	162	343	19	69	31	103	39	107	25	89	20	35	52	150	132	395	"
合計	14,851	34,657	498	1,469	561	1,564	580	1,756	573	1,630	525	1,532	546	1,966	577	1,823	
経費	545,194		-		-		-		-		-		-		-		千円

* 施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用

('13 年度の数値は, 2014.1.31 現在)

* ナノプラット (ナノテクノロジープラットフォーム事業) は '13 年度から実施。'02 年度から '06 年度はナノテクノロジー総合支援事業, '07 年度から '12 年度までナノテクノロジー・ネットワーク事業。

分子科学研究所 UVSOR 共同利用研究実施一覧

年度 項目	'85 ~ '06		'07		'08		'09		'10		'11		'12		'13		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	38	423	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	人数： 登録人数
協力研究	312	1,109	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
招へい 協力研究	72	72	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
施設長 招へい	-	-	14	14	1	1	0	0	0	0	4	4	6	6	2	2	人数： 旅費支給者
研究会	34	640	2	55	2	18	2	44	1	1	2	68	4	63	0	0	"
施設利用	2,530	12,431	145	678	156	708	147	660	140	659	139	682	136	706	141	732	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	2,989	14,675	161	747	159	727	149	704	141	660	145	754	146	775	143	734	
経費	230,477		-		-		-		-		-		-		-		千円

('13 年度の数値は、2014.1.31 現在)