

3. 共同研究と大学院教育

大学共同利用機関としての分子科学研究所は、所外の分子科学及び関連分野の研究者との共同研究を積極的に推進しており、全国の研究者からの共同研究の提案を運営会議で審議し、採択された共同研究に対しては旅費及び研究費の一部を支給している。また、海外の研究者との共同研究に対しては、研究者の派遣及び相手国研究者招へいのために国際共同研究事業を行っている。国際交流協定に関しては3-2-1項に、東アジアやASEAN諸国との国際交流や国際インターンシッププログラムに関しては5-6項に詳述する。

分子科学研究所は、また大学共同利用機関を基盤機関とする総合研究大学院大学・物理科学研究科に属し、構造分子科学専攻と機能分子科学専攻の二つの大学院専攻を持ち、他の大学院では整備されていない各種の高度な大型の研究施設・実験設備を活用して特色のある大学院教育を行っている（設立時は博士課程後期3年のみ；2006年度より5年一貫制博士課程）。総合研究大学院大学（総研大）としての分子科学研究所の2専攻では、分子科学における最先端の基礎研究を行うとともに、学生の研究課題に応じて、複数指導体制を採用し、研究活動に密着した学生セミナー、国際シンポジウム、共同研究等を通して若手研究者育成のための大学院教育を行っている。さらに、他大学の大学院生や学部学生に対しても、それぞれ受託大学院生（特別共同利用研究員制度による）、体験入学者として受け入れ、先端的な研究施設を用いて積極的な教育研究活動を行っている。2023年度には分子科学2専攻は総研大の改組によって分子科学コースとして統合されるが、教育面で本質的に大きな変更はない。

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

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

3-1 共同利用研究

3-1-1 共同利用研究の概要

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

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

- ①「課題研究(一般)」申請者が設定した研究課題で申請するもの
- ②「課題研究(新分野形成支援)」分子科学に関連した新しい研究分野開拓のための準備研究

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

- ①一般
- ②マテリアル先端リサーチインフラ事業(5-5参照)

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

- ①「分子研研究会(一般分)」国内の研究者が集まるもの
- ②「アジア連携分子研研究会」アジア地区の研究者が数名含まれるもの
- ③「ミニ国際シンポジウム」欧米など海外の研究者を含めたもの
- ④「学協会連携分子研研究会」分子科学関連学協会が共催するもの
- ⑤「分子研研究会(on-web)」Zoom等によるweb開催を前提とするもの

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

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

(6) 施設利用

- ① UVSOR 施設利用：原則として共同利用の観測システムを使用する研究。
- ② 機器センター施設利用：機器センターに設置された機器の個別的利用。
- ③ 装置開発室施設利用：装置開発室に設置された機器の個別的利用。
- ④ 計算科学研究センター施設利用：計算科学研究センターに設置されたスーパーコンピュータを利用する研究。

3-1-2 2022年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名 (通年)		提案代表者
CO ₂ の水中電気還元 to 有効な金属錯体-炭素電極の高耐久性を目指した不活性化機構の解析と解明	名古屋大学	斎藤 進
溶液軟X線吸収分光法による檜山クロスカップリング反応機構の解明	九州大学	藤川 茂紀

(2) 協力研究

課 題 名 (通年)		提案代表者
高分解能モメンタムマイクロスコブによる実用有機半導体材料の軌道トモグラフィー	筑波大学	山田 洋一
ナノスケール蓄光材料の新規開発と有機・無機媒体への分散	名城大学	西山 桂
スポット分析型高分解能電子線回折(SPA-LEED)によるツイスト2層グラフェンの構造解析	九州大学	田中 悟

トポロジカル物質におけるスピン偏極局所電子状態の解明	東北大学	佐藤 宇史
垂直磁気異方性を有する薄膜界面の作製と電子状態の精密計測への応用	東京大学	岡林 潤
脊椎動物の季節適応を制御する分子の生化学的解析	名古屋大学	吉村 崇
単結晶有機半導体「準ホモエピタキシャル」接合の太陽電池応用への試み	東京理科大学	中山 泰生
超低電圧駆動有機 EL デバイスの開発および性能評価	富山大学	森本 勝大
有機ホウ素化合物による非フラレン n 型半導体の開発と太陽電池の作製評価	名古屋工業大学	小野 克彦
Momentum Microscopy 装置による 3D フェルミ面計測手法の確立とその応用	大阪大学	田中慎一郎
超薄膜グラフェンを用いた独自の高効率電子収量用液体セルの開発	名古屋大学	三石 郁之
ジスルフィド (S-S) 結合の触媒的開裂と再構築による非対称ジスルフィドの合成	山形大学	皆川 真規
高次非線形分光計算による界面水物性の分子論的解析	慶應義塾大学	稲垣 泰一
ポリグルタミン病原因遺伝子のリピート関連性非 ATG 依存性翻訳産物へのレーザー照射後の凝集解離の分子シミュレーション	群馬大学	中村 和裕
シュタウディングーライゲーション法を用いた N 結合型糖鎖構造構築反応の開発	青森大学	鈴木 達哉
BL6U の Momentum Microscope でのスピン物性科学の展開	大阪大学	菅 滋正
六方晶格子を持つ水素化物ハライド Ba ₂ H ₃ X (X = Cl, Br, I) のヒドリド導電特性	京都大学	生方 宏樹

課 題 名 (前期)

提案代表者

Chirality-Induced Spin Selectivity の基礎理論研究	放送大学	岸根順一郎
PyBTM 及び F ₂ PyBTM 安定発光性ラジカルのパラ置換体の開発	龍谷大学	服部 陽平
イリジウム単結晶薄膜上に化学気相成長したグラフェン膜の評価	青山学院大学	黄 晋二
分子動力学計算を用いた準安定な超分子構造体のダイナミクス解析	京都府立大学	沼田 宗典
光機能性分子材料の電子と振動の自由度が協奏する光化学初期過程の測定	九州大学	宮田 潔志

課 題 名 (後期)

提案代表者

イリジウム単結晶薄膜上に化学気相成長したグラフェン膜の評価	青山学院大学	黄 晋二
光電子運動量顕微鏡による MXenes 単結晶の電子状態の研究	名古屋大学	伊藤 孝寛
蓄積リング自由電子レーザーの広帯域化とそれを用いたエネルギー可変準単色ガンマ線源開発	京都大学	全 炳俊
高い時間コヒーレンスを持つ高輝度 EUV 光を実現するコヒーレント高調波発生とその特性評価	秋田工業高等専門学校	坂本 文人
電子不足高原子価イリジウム触媒の開発と C-H 官能基化反応への応用	北海道大学	吉野 達彦
チェレンコフ位相整合高出力テラヘルツ波光源の開発	名古屋大学	村手 宏輔
広帯域 2 光子光電子分光による内包フラレン超原子集積体の電子ダイナミクス計測	大阪公立大学	渋谷 昌弘
クーロン相互作用で不斉反応場を構築した金属酸化物クラスター触媒の新合成と評価	東京都立大学	山添 誠司

(3) 研究会

課 題 名 (前期)

提案代表者

森野ディスカッション	公益信託分子科学奨励森野基金	宗像 利明
イオン液体の構造と物性予測のデータ解析技術	防衛大学校	阿部 洋
金属酸化物表面と薄膜の構造化学	神戸大学	大西 洋

課 題 名 (後期)

提案代表者

UVSOR-III における多様な量子ビームの発生と先端利用に関する研究会	分子科学研究所	平 義隆
軟 X 線共鳴散乱・反射率	Diamond Light Source	荒木 暢
ソフトマテリアル・ソフトマターのナノ～メソスケール構造解析		
生体分子材料を探る：発動分子のさらなる理解と設計に向けて	東京工業大学	上野 隆史

(4) 若手研究活動支援

課 題 名 (前期)

提案代表者

第 20 回 ESR 夏の学校：ESR 装置の基礎と原理・生体応用	神奈川大学	平野 弘樹
-----------------------------------	-------	-------

(6) 施設利用

① UVSOR 施設利用

課 題 名 (前期)	提案代表者
ドーパント周囲に潜む空隙型欠陥の検出を目指した可視光ガンマ線同時照射陽電子消滅寿命分光の開発	山形大学 北浦 守
透過型 NRF を用いた非破壊核種分析における温度の影響に関する研究	日本原子力研究開発機構 小泉 光生
γ線偏光検出用コンプトンカメラの基礎研究	東京大学 島添 健次
ガンマ線誘起陽電子消滅分光法の整備	分子科学研究所 平 義隆
BL1U アンジュレータを用いた Flat-LCS ガンマ線の特性と NRF 反応断面積絶対値測定に関する研究	京都大学 大垣 英明
バルク金属中の水素-欠陥相互作用の動的挙動解明のための LCS ガンマ線入射-陽電子消滅測定	大阪公立大学 堀 史説
温度およびガス雰囲気を制御したガンマ線誘起陽電子消滅寿命測定法の開発	大阪産業技術研究所 道志 智
単一電子蓄積を利用した放射光の時空間特性の研究	広島大学 加藤 政博
放射光の時間干渉性を利用した新奇な放射光利用法の開拓	広島大学 加藤 政博
イオン化終状態を分離した高分解能光電子円二色性の測定	広島大学 高口 博志
軟X線ダブルパルスによる多電子波束の量子干渉	九州シンクロトロン光研究センター 金安 達夫
軟X線吸収分光法による高効率有機太陽電池のための金属ドーピング金属酸化物の伝導帯電子構造解析	千葉大学 奥平 幸司
H-MFI ゼオライト上の炭化モリブデン活性種の XANES による MTB 触媒反応時の炭化進行の構造解析	埼玉工業大学 有谷 博文
X線吸収分光による金属原子を内包した0次元シリコンケージ構造体のシリコン原子の構造解析	慶應義塾大学 中嶋 敦
日米共同・太陽フレアX線集光撮像分光観測ロケット実験 FOXSI-4 搭載装置の開発と評価	国立天文台 成影 典之
希土類元素含有複合酸化物の局所構造と M-edge XANES スペクトルに関する基礎的研究	京都大学 朝倉 博行
共添加二酸化チタンにおける添加元素の局所環境解析	大阪公立大学 村田 秀信
ダブルスピネル構造中カチオンの局所構造	九州大学 吉岡 聰
NEXAFS 分光用試料搬送装置を用いた電池材料の大気非暴露分析	九州シンクロトロン光研究センター 小林 英一
紫外光電子分光法による金属をドーピングした金属酸化物ナノ粒子/有機薄膜界面の電子状態評価	千葉大学 奥平 幸司
液相中一重項酸素の生成ダイナミクスの軟X線吸収分光法による研究 II	高エネルギー加速器研究機構 足立 純一
軟X線散乱によるネマチック液晶におけるナノクラスター構造と強誘電性の相関探索	理化学研究所 荒岡 史人
金属カルボニル化合物液体試料についての XAS 測定	東京大学 佐々木 岳彦
金表面上における生体分子のX線吸収分光	横浜国立大学 大野 真也
水中での脂質二重膜の電子状態とイオン配位構造	豊橋技術科学大学 手老 龍吾
溶液光化学反応の軟X線吸収分光測定	分子科学研究所 長坂 将成
ビームライン整備	分子科学研究所 長坂 将成
共鳴軟X線散乱法によるポリマーの構造解析	分子科学研究所 岩山 洋士
【審査免除】電解生成型メタン酸化触媒活性種の軟X線分光法による直接観測	名古屋大学 山田 泰之
軟X線共鳴散乱による自発形成長周期構造液晶の精密構造解析	京都大学 高西 陽一
軟X線共鳴散乱による機能性フッ素ポリマーの構造分析	大阪大学 山ノ井 航平
CK 端 XAS 計測によるスマネンの溶液中でのスタッキング挙動の観測	大阪大学 植竹 裕太
人工光合成をめざす半導体光触媒の水中 XAFS 測定：金属カチオン外殻電子遷移の計測	神戸大学 大西 洋
水・DMSO 2成分溶液系における水の電子構造変化	広島大学 岡田 和正
オペランド軟X線 XAFS 観測による炭酸 Co-Ni 水分解触媒の活性化メカニズムの解明	山口大学 吉田 真明
Temperature Dependence of the Interaction of Calcium Dication with Water Probed by X-Ray Absorption Spectroscopy	Synchrotron SOLEIL CEOLIN, Denis
次世代中性 K 中間子稀崩壊実験に向けたシンチレーター類の単一光子計数法による蛍光寿命測定による詳細評価	山形大学 田島 靖久
バンド構造・発光起源と結晶構造の包括的理解による赤色発光シンチレータの創成	東北大学 黒澤 俊介
自己発光ハロゲン化物シンチレータにおける電荷遷移移動発光の調査	埼玉大学 小玉 翔平
深紫外発光アルミン酸亜鉛薄膜の成長方位と結晶性の評価	静岡大学 小南 裕子
整備課題 (リモート測定にむけた整備)	分子科学研究所 岩山 洋士
プラズマエッチングガスの解離過程の解明	名古屋大学 石川 健治
強相関半導体の電流誘起金属化の電子状態	大阪大学 木村 真一
三元化合物・アルカリ銀ハライド結晶の光学特性の研究	大阪公立大学 河相 武利

パイロクロア型酸化物中希土類イオンの存在位置の広がり真空紫外・紫外・可視域遷移スペクトル形状に与える影響の解析	名古屋大学	吉野 正人
アポトーシスのクロマチン凝集過程における DNA リン酸結合状態の可視化	東北大学	江島 丈雄
レドックスフロー電池の窒素ドーパカーボン触媒のオペランド電子状態解析	産業技術総合研究所	細野 英司
高電位型 Li-Fe-Mn-Co 系ポリアニオン正極材料の酸化還元反応分布の観測	産業技術総合研究所	朝倉 大輔
STXM による細胞核内の核酸およびタンパク質分布解析の高精度化	東海大学	伊藤 敦
走査型透過 X 線顕微鏡を用いたポリマーの湿度制御下における化学状態変化	分子科学研究所	大東 琢治
ビームラインおよび STXM の整備	分子科学研究所	大東 琢治
グラフェン超薄膜を用いた高機能汎用型光学素子の開発	名古屋大学	三石 郁之
小惑星リュウグウに記録される分子多様性に記録される真の地球外有機物進化の決定 ～「はやぶさ 2」初期分析固体有機物チームが STXM で解読する、揮発性物質の形成過程および初期地球への供給機構	広島大学	藪田ひかる
多機関連携分析を駆使したリュウグウ試料に含まれる有機物の全容解明への挑戦	海洋研究開発機構	伊藤 元雄
Hunting for Organosulfur and Organonitrogen Content in Aged Dust Aerosol Particles Transported by Extreme Dust Storms	University of Gothenburg	KONG, Xiangrui
STXM in Characterizing Lysosomal Storage Materials in Salla Disease Mouse Model	University of Oulu	MINNA, Patanen
Probing, of Drugs and Nanocarriers in the Viable Parts of Human Skin	Freie Universität Berlin	RÜHL, Eckart
Understanding Interface Kinetics between Primary Battery Particles (LiCoO ₂) and Solid Electrolyte via Operando STXM	Seoul National University	LIM, Jongwoo
Interfacial Engineered Nanostructural Photoelectrodes for Efficient Water Decomposition	Tamkang University	PONG, Way-faung
有機-無機界面磁気結合を利用した原子層物質の磁気状態制御	名古屋大学	宮町 俊生
XMCD を用いた β -Mn 型カイラル磁性体 Fe _{2-x} Pd _x Mo ₃ N および Co _{2-x} Pd _x Mo ₃ N エピタキシャル薄膜における磁気状態の研究	名古屋大学	伊藤 孝寛
原子分解能・電界電子放出顕微鏡の開発	東京大学	柳沢 啓史
磁気ボトル型電子分析器を用いた電子同時計測	富山大学	彦坂 泰正
易損傷試料用光電子分光設備の設置へむけたビームラインおよびシステム評価 II	分子科学研究所	解良 聡
反射率磁気円二色性測定でみる磁性体薄膜の立体構造	分子科学研究所	山本 航平
整備課題（高精度標準計測のための整備）	分子科学研究所	岩山 洋士
アモルファス半導体薄膜の光照射及び熱処理効果に関する研究	岐阜大学	林 浩司
グラフェン超薄膜の紫外・X線透過率測定	名古屋大学	三石 郁之
高効率水分解水素生成光電極設計に向けた高濃度 3d 遷移金属添加 AlN の光照射下の電子構造解明	京都工芸繊維大学	今田 早紀
白色発光特性を有する炭素含有多孔質シリカ中の炭素の局所構造の解明	大阪産業技術研究所	道志 智
軟 X 線内殻吸収分光で明らかにするスピントロニクスオーバー現象に関連する鉄配位高分子の配位子場効果	沖縄科学技術大学院大学	山神 光平
高分解能 ARPES で探る新奇カゴメ超伝導体への元素置換効果	東北大学	佐藤 宇史
高分解能角度分解光電子分光法による二次元単層ホウ化銅の電子状態の研究	東京大学	堀尾 眞史
垂直磁気異方性を示す Mn 合金のスピン分解・軌道分解光電子分光	東京大学	岡林 潤
角度分解光電子分光によるグラフェン層間化合物の界面効果の研究	東京工業大学	一ノ倉 聖
BL5U 光電子エンドステーションの整備と開発	分子科学研究所	田中 清尚
【審査免除】狭ギャップ半導体・半金属における自発的励起子の探索	分子科学研究所	福谷 圭祐
偏光依存角度分解光電子分光による Zr ₃ SnC ₂ の表面電子状態の研究	名古屋大学	伊藤 孝寛
原子制御した 3 次元立体構造シリコン (111) フェセット表面上に作製した超薄膜からの光電子分光	奈良先端科学技術大学院大学	服部 賢
層状希土類化合物における電荷密度波転移	大阪大学	中村 拓人
角度分解光電子分光による新奇トポロジカル相の開拓	岡山大学	横谷 尚睦
ARPES による銅酸化物高温超伝導相図の再考 II	広島大学	出田真一郎
合金を用いた多層膜反射鏡の特性調査	東京大学	吉川 一朗
探査機搭載用光学フィルタの性能評価	東京大学	吉岡 和夫
惑星探査に向けた紫外線吸収フィルタの性能評価	立教大学	桑原 正輝
可視域発光観測による真空紫外光の偏光評価 II	九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫
中～遠赤外吸収分光による高移動度有機半導体単結晶の分子・格子振動の探索 (III)	東京理科大学	中山 泰生
時間分解遠赤外分光による光電変換物質の電子-格子相互作用とポーラロンダイナミクスの解明	分子科学研究所	西田 純
強相関半導体の光誘起局在・非局在転移の空間分布の観測	大阪大学	木村 真一
放射光顕微赤外分光法を用いた難分解性有機化合物の構造解析	高エネルギー加速器研究機構	川崎 平康

低エネルギー高分解能 ARPES による強誘電ワイル半金属の探索	東北大学	佐藤 宇史
T* 型銅酸化物高温超伝導体の擬ギャップの特性解明	東京大学	堀尾 眞史
高分解角度分解光電子分光による磁性トポロジカル絶縁体サンドイッチ構造の電子状態測定	東京工業大学	平原 徹
層状化合物上の有機単層膜界面における新奇二次元電子構造の探査 III	分子科学研究所	解良 聡
BL7U 光電子エンドステーションの整備と開発	分子科学研究所	田中 清尚
固体電解質 $\text{La}_{(1-x)/3}\text{Li}_x\text{NbO}_3$ ($x = 0, 0.08$) および $\text{Li}_{3x}\text{La}_{2/3-x}\text{TiO}_3$ バルク単結晶の角度分解光電子分光	名古屋大学	伊藤 孝寛
低次元トポロジカル物質における Lifshitz 転移へのドーピング効果	大阪大学	中村 拓人
層状窒化塩化物超伝導体の電子構造の直接観測	岡山大学	横谷 尚睦
高分解能角度分解光電子分光による三層系銅酸化物高温超伝導体の電子構造研究	広島大学	出田真一郎
多角入射減衰全反射型紫外分光法による有機半導体/イオン液体界面の電子状態深さ分解研究	大阪大学	田邊 一郎
高速シンチレータ材料におけるエネルギー移動と内殻励起の寄与の定量的解析	東北大学	越水 正典
隕石と有機物の紫外反射スペクトル測定	東京大学	吉川 一朗
隕石および黒色サンプルにおける紫外線反射率の定量評価	東京大学	吉岡 和夫
ワイドバンドギャップ半導体の可視-真空紫外複素屈折率スペクトル	福井大学	福井 一俊
深紫外分光的手法による資源探索のための鉱物分析	大阪大学	清水 俊彦
最小電離損失粒子を用いた原子核乾板の感度評価	名古屋大学	中村 光廣

課 題 名 (後期)

提案代表者

可視光ガンマ線同時照射陽電子消滅寿命分光による共賦活不純物の光誘起価数転移の観測	山形大学	北浦 守
その場陽電子消滅測定による鉄試料における加工誘起空孔形成	千葉大学	藤浪 眞紀
γ 線偏光検出用コンプトンカメラの基礎研究	東京大学	鳥添 健次
ガンマ線誘起陽電子消滅分光法の整備	分子科学研究所	平 義隆
真空紫外域円偏光照射によるアミノ酸分子のキラリティ発現に関する研究	核融合科学研究所	小林 政弘
BL1U アンジュレータを用いた Flat-LCS ガンマ線の特性と NRF 反応断面積絶対値測定に関する研究	京都大学	大垣 英明
電解水素チャージで純鉄中に形成される原子空孔のガンマ線誘起陽電子寿命法を用いたその場計測	京都大学	藪内 敦
バルク金属中の水素-欠陥相互作用の動的挙動解明のための LCS ガンマ線入射-陽電子消滅測定	大阪公立大学	堀 史説
新規キラル化合物の孤立系光電子円二色性の研究	広島大学	高口 博志
【審査免除】 軟X線ダブルパルスによる多電子波束の量子干渉	九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫
単一電子からのアンジュレータ放射の観測	広島大学	加藤 政博
軟X線吸収分光法による高効率有機太陽電池のための金属ドーピング金属酸化物の伝導帯電子構造解析	千葉大学	奥平 幸司
H-MFI ゼオライト上の炭化モリブデン活性種の XANES による MTB 触媒反応時の炭化進行の構造解析	埼玉工業大学	有谷 博文
X線吸収分光による金属原子を内包した0次元シリコンケージ構造体のシリコン原子の構造解析	慶應義塾大学	中嶋 敦
日米共同・太陽フレアX線集光撮像分光観測ロケット実験 FOXSI-4 搭載装置の開発と評価	国立天文台	成影 典之
希土類元素含有複合酸化物の局所構造と M-edge XANES スペクトルに関する基礎的研究	京都大学	朝倉 博行
共添加二酸化チタンにおける添加元素の局所環境解析	大阪公立大学	村田 秀信
ダブルスピネル構造中カチオンの局所構造	九州大学	吉岡 聡
NEXAFS 分光法による試料搬送装置を用いた固体電解質の分析	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
紫外光電子分光法による金属をドーブした金属酸化物ナノ粒子/有機薄膜界面の電子状態評価	千葉大学	奥平 幸司
各種共鳴状態を利用した軟X線散乱によるソフトマター超分子構造の探索	理化学研究所	荒岡 史人
金属カルボニル化合物液体試料についての XAS 測定	東京大学	佐々木 岳彦
金表面上における生体分子のX線吸収分光	横浜国立大学	大野 真也
水中での脂質二重膜の電子状態とイオン配位構造	豊橋技術科学大学	手老 龍吾
溶液光化学反応の軟X線吸収分光測定	分子科学研究所	長坂 将成
ビームライン整備	分子科学研究所	長坂 将成
整備課題 (共鳴軟X線散乱測定)	分子科学研究所	岩山 洋士
軟X線分光法を利用した電解生成型メタン酸化触媒活性種の電子状態解析	名古屋大学	山田 泰之
軟X線共鳴散乱による自発形成長周期構造液晶の精密構造解析 (II)	京都大学	高西 陽一

人工光合成をめざすチタン酸ストロンチウム (SrTiO ₃) 光触媒の水中 XAFS 測定 水・DMSO 2 成分溶液系における水の電子構造変化 Understanding the Inter-Ion Interactions in Natural Salt Brines from a Martian Analogue Site	神戸大学 広島大学 University of Gothenburg	大西 洋 岡田 和正 KONG, Xiangrui
次世代中性 K 中間子稀崩壊実験に向けたシンチレーター類の単一光子計数法による蛍光 寿命測定による詳細評価 バンド構造・発光起源と結晶構造の包括的理解による赤色発光シンチレータの創成 自己発光ハロゲン化物シンチレータにおける電荷遷移移動発光の調査 深紫外発光アルミン酸亜鉛薄膜の成長方位と結晶性の評価 整備課題 (リモート測定にむけた整備) プラズマエッチングガスの解離過程の解明 強相関半導体の電流誘起金属化の電子状態 三元化合物・アルカリ銀ハライド結晶の光学特性の研究 六方晶窒化ホウ素膜の紫外から軟 X 線に至る広エネルギー帯域における発光収量の評価 暗黒物質探索実験に向けたダイヤモンドシンチレータの発光特性評価 フィルター粒子間バウンドラバー構造の化学結合状態 走査型透過 X 線顕微鏡を用いたポリマーの劣化による化学状態変化 ビームラインおよび STXM の整備 レドックスフロー電池のカーボン触媒のオペランド電子状態解析 【審査免除】 STXM による細胞核内の核酸およびタンパク質分布解析の高精度化 彗星有機物の初期水質変成条件を STXM で決定する試み 【審査免除】 他機関連携分析を駆使したリュウグウ試料に含まれる有機物の全容解明への 挑戦 【審査免除】 Probing of Drugs and Nanocarriers in the Viable Parts of Human Skin	山形大学 東北大学 埼玉大学 静岡大学 分子科学研究所 名古屋大学 大阪大学 大阪公立大学 山形大学 筑波大学 東北大学 高エネルギー加速器研究機構 高エネルギー加速器研究機構 産業技術総合研究所 東海大学 広島大学 海洋研究開発機構	田島 靖久 黒澤 俊介 小玉 翔平 小南 裕子 岩山 洋士 石川 健治 木村 真一 河相 武利 北浦 守 梅本 篤宏 江島 丈雄 大東 琢治 大東 琢治 細野 英司 伊藤 敦 藪田 ひかる 伊藤 元雄
【審査免除】 Interfacial Engineered Nanostructural Photoelectrodes for Efficient Water Decomposition The Investigation of Concentration and Chemical Composition of Ice-Nucleating Particles from Biomass Burning Emissions レドックスフロー電池電解液のオペランド電子状態解析 有機-無機界面磁気結合を利用した原子層物質の磁気状態制御 XMCD を用いた β -Mn 型カイラル磁性体 Fe _{2-x} Pd _x Mo ₃ N および Co _{2-x} Pd _x Mo ₃ N エピタキシャ ル薄膜における磁気状態の研究 磁性ヘテロ薄膜構造の磁化方向制御に関する研究 原子分解能・電界電子放出顕微鏡の開発 磁気ボトル型電子分析器を用いた電子同時計測 易損傷試料用光電子分光設備の設置へむけたビームラインおよびシステム評価 II 反射率磁気円二色性測定でみる磁性体薄膜の立体構造 整備課題 (高精度標準計測のための整備) グラフェン超薄膜の紫外・X 線透過率測定 六方晶窒化ホウ素膜の紫外から軟 X 線に至る広エネルギー帯域における発光収量の評価 軟 X 線吸収分光法による遷移金属酸化物ナノ粒子の表面電子状態解析 高収率で水を 4 電子酸化する半導体光触媒の軟 X 線吸収分光 【審査免除】 高分解能 ARPES で探る新奇カゴメ超伝導体への元素置換効果 T' 型銅酸化物高温超伝導体の本質的な電子ドーピング効果の検証 垂直磁気異方性を示す Mn-Co 合金のスピン分解・軌道分解光電子分光 角度分解光電子分光による π 電子と d 電子の相互作用の研究 遷移金属リニ化合物薄膜の電子状態および化学状態観察 BLSU 光電子エンドステーションの整備と開発 磁性 i-MAX 相化合物 (Mo _{1/3} RE _{2/3}) ₂ AIC の終端面ドメイン選択角度分解光電子分光 熱電特性と電子構造の関係に関する光電子分光研究 原子制御した 3 次元立体構造シリコン (111) ファセット表面上に作製した超薄膜からの光 電子分光 TiSe ₂ の 3D フェルミ面の CDW 転移による形態変化 原子層強相関物質の角度分解光電子分光 ノーダルライン半金属 LaTe _{1+x} Sb _{1-x} の角度分解光電子分光 過剰ドーピング Bi2201 における電子状態の三次元性とフェルミ面対称性の破れの観測 合金を用いた多層膜反射鏡の特性調査	Freie Universität Berlin Tamkang University University of Gothenburg 産業技術総合研究所 名古屋大学 名古屋大学 名古屋大学 東京大学 富山大学 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 名古屋大学 山形大学 千葉大学 大阪公立大学 東北大学 東京大学 東京大学 東京工業大学 立教大学 分子科学研究所 名古屋大学 豊田工業大学 奈良先端科学技術大学院大学 大阪大学 大阪大学 岡山大学 広島大学 東京大学	RUEHL, Eckart PONG, Way-faung KONG, Xiangrui 朝倉 大輔 宮町 俊生 伊藤 孝寛 宮町 俊生 柳沢 啓史 彦坂 泰正 解良 聡 山本 航平 岩山 洋士 三石 郁之 北浦 守 奥平 幸司 吉田 朋子 佐藤 宇史 堀尾 真史 岡林 潤 一ノ倉 聖 前島 尚行 田中 清尚 伊藤 孝寛 松波 雅治 服部 賢 田中慎一郎 中村 拓人 横谷 尚陸 出田真一郎 吉川 一朗

探査機搭載用光学フィルタの性能評価	東京大学	吉岡 和夫
惑星探査に向けた紫外線吸収フィルタの性能評価	立教大学	桑原 正輝
テーパ型高感度マイクロチャネルプレートの光検出効率測定	高エネルギー加速器研究機構	の場 史朗
グラフェン超薄膜の紫外・X線透過率測定	名古屋大学	三石 郁之
中～遠赤外吸収分光による高移動度有機半導体単結晶の分子・格子振動の探索 (III)	東京理科大学	中山 泰生
時間分解遠赤外分光による光電変換物質の電子-格子相互作用とポーラロンダイナミクスの解明	分子科学研究所	西田 純
強相関半導体の光誘起局在・非局在転移の空間分布の観測	大阪大学	木村 真一
放射光顕微赤外分光法を用いた難分解性有機化合物の構造解析	高エネルギー加速器研究機構	川崎 平康
地球外有機物の3次元分布観察を目指した高輝度赤外分光マイクロトモグラフィ開発	広島大学	藪田ひかる
低エネルギー高分解能 ARPES による強磁性原子層薄膜の研究	東北大学	佐藤 宇史
光電子分光によるアモルファス p 型透明酸化半導体の電子構造探索	千葉大学	石井 久夫
【審査免除】 高分解角度分解光電子分光による磁性トポロジカル絶縁体サンドイッチ構造の電子状態測定	東京工業大学	平原 徹
層状化合物上の有機単層膜界面における新奇二次元電子構造の探査 IV	分子科学研究所	解良 聡
BL7U 光電子エンドステーションの整備と開発	分子科学研究所	田中 清尚
角度分解光電子分光によるリチウム固体電解質バルク単結晶における光照射スペクトル変調効果のイオン伝導度依存性	名古屋大学	伊藤 孝寛
TiSe ₂ における低エネルギー領域での ARPES の励起光波長依存性の研究	大阪大学	田中慎一郎
極低キャリア CDW 物質における偏光依存 ARPES	大阪大学	中村 拓人
銅酸化物高温超伝導体におけるコヒーレンスピークのスペクトル強度の波数依存性	広島大学	出田真一郎
多角入射減衰全反射型紫外分光法による有機半導体/イオン液体界面の電子状態深さ分解研究	立教大学	田邊 一郎
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	静岡大学	越水 正典
隕石と有機物の紫外反射スペクトル測定	東京大学	吉川 一朗
隕石および黒色サンプルにおける紫外線反射率の定量評価	東京大学	吉岡 和夫
ワイドバンドギャップ半導体の可視-真空紫外複素屈折率スペクトル	福井大学	福井 一俊
深紫外分光学的手法による資源探索のための鉱物分析	大阪大学	清水 俊彦
Yb を含む準結晶の UV-VUV 反射スペクトルと電子状態	徳島大学	岡村 英一
新規キラル化合物の円偏光特性評価のための高分解能光電子スペクトル測定	広島大学	高口 博志
放射光源を用いた光電離による核融合プラズマ、星間プラズマの模擬実験	核融合科学研究所	小林 政弘
多角入射 ATR 紫外分光法による有機半導体/イオン液体界面の電子状態研究: イオン液体依存性	立教大学	田邊 一郎
最小電離損失粒子を用いた原子核乾板の感度評価	名古屋大学	中村 光廣

④ 計算科学研究センター施設利用

課 題 名 (通年)	提案代表者	
生体分子の機能発現反応に関する理論的研究	千葉大学	星野 忠次
触媒分子系および生体分子系の量子化学と反応動力学	北海道大学	長谷川 淳也
d 電子複合系の構造, 電子状態, 反応過程に関する理論的研究	京都大学	榊 茂好
量子ダイナミクスによる動的物性量の理論的研究	大阪大学	北河 康隆
局所物理量を用いたイオンとスピンのダイナミクス解析	京都大学	瀬波 大土
高反応性のジボラン (4) と AI アニオンの性質の解明およびメタンの C-H 結合活性化へ向けた均一系触媒設計	名古屋大学	山下 誠
金属蛋白質の電子構造制御に関する理論的研究	広島市立大学	鷹野 優
生体分子の構造と機能に関する理論的研究	広島大学	赤瀬 大
歯車状両親媒性分子 (GSA) の熱力学的安定性及び発光スペクトルに対する溶液効果の理論的研究	横浜市立大学	立川 仁典
複雑分子系におけるテラヘルツ帯から紫外領域におけるスペクトル解析	神戸大学	富永 圭介
量子力学 (QM) / 分子力学 (MM) 法と分子動力学計算によるハロ酸脱ハロゲン化酵素の反応機構解析	長浜バイオ大学	中村 卓
革新的量子科学と大規模シミュレーション科学の創造	量子化学研究協会研究所	中辻 博
人工光合成に関する計算化学的研究	産業技術総合研究所	草間 仁
生体分子複雑系の全原子・粗視化シミュレーション研究	神戸大学	田中 成典
フラグメント電子状態理論を基とした大規模第一原理分子シミュレーションと電子状態インフォマティクスによる機能材料の熱力学・光物性の迅速設計	中央大学	森 寛敏
溶液界面の構造と機能の計算化学	東北大学	森田 明弘

シクロペンタジエノン金属錯体による金属配位子協働的結合切断反応の開発と有機デバイス指向した芳香族化合物の設計	東京大学	野崎 京子
多環芳香族分子 (PAHs) の水和構造の赤外分光による研究	お茶の水女子大学	宮崎 充彦
第一原理反応ダイナミクスと先進的電子状態理論の多角的展開	北海道大学	武次 徹也
分子動力学及び量子化学計算を用いた生体高分子および機能材料の構造と機能に関する研究	横浜国立大学	上田 一義
量子化学と統計力学に基づく複雑化学系の理論的研究	京都大学	佐藤 啓文
ヘロナミド類の抗真菌作用メカニズムの解明のための計算分子設計技術の開発	北陸大学	齋藤 大明
構造多糖材料および関連タンパク質の分子シミュレーション研究	宮崎大学	湯井 敏文
全原子分子動力学計算の高分子研究への展開	東京大学	岡崎 進
ナノ制限空間における溶媒和と動態の解析	徳島大学	吉田 健
光合成酸素発生中心 CaMn_4O_5 クラスターの構造, 電子・スピン状態および反応性に関する理論的研究	大阪大学	山口 兆
三次元パイ共役分子の構造と物性	大阪府立大学	津留崎陽大
ナノ炭素・アミノ酸・クラスターの反応動力学の量子化学的研究	電気通信大学	山北 佳宏
三脚巴状分子の凝集誘起発光についての理論的研究	千葉工業大学	山本 典史
カメレオンモデルによるタンパク質構造転移をともなう機能発現機構の自由エネルギーランドスケープ解析	名古屋大学	寺田 智樹
生体分子と分子集合体の分子機能の理論計算	京都大学	林 重彦
蛋白質による DNA 加水分解における溶媒の役割	九州工業大学	入佐 正幸
水, 氷, クラスレート・ハイドレート構造相転移の理論研究	岡山大学	松本 正和
量子分子科学計算ソフトウェア NTChem によるナノサイズ分子の分子機能の解明・設計	理化学研究所	中嶋 隆人
生体分子のマルチコピーマルチスケールシミュレーション	横浜市立大学	森次 圭
発光性金属錯体および集合体の電子状態に関する計算化学的アプローチ	関西学院大学	加藤 昌子
細菌感染の付着因子の糖鎖認識に関する理論研究	北里大学	能登 香
軟X線光科学に関する理論的研究	広島大学	高橋 修
エネルギー変換材料の計算科学	京都大学	山下 晃一
分子軌道計算による有機反応および有機分子構造の設計と解析	東京大学	大和田智彦
部位選択的熱流解析によるタンパク質分子機能の探索	名古屋大学	倭 剛久
液体・生体分子および関連分子系の構造・ダイナミクス・分子間相互作用と振動スペクトル	静岡大学	鳥居 肇
機能性ソフトマテリアルの全原子分子動力学シミュレーション	北里大学	渡辺 豪
ナノマテリアル及び生体分子の機能・物性・反応性に関する理論的研究	早稲田大学	中井 浩巳
新型コロナウイルス感染阻害の分子機構の解明	金沢大学	川口 一朋
触媒を用いた化学反応機構の理論的解明	茨城大学	森 聖治
機能性有機材料の電子物性解析に関する理論的研究	三重大学	伊藤 彰浩
多元素クラスターの赤外解離分光のための赤外スペクトルの予測	東京大学	工藤 聡
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	東京都立大学	波田 雅彦
次世代カーボンニュートラル社会の基礎となる半導体/絶縁体界面の第一原理計算による研究	名古屋大学	白石 賢二
生体超分子の立体構造変化と機能	東京工業大学	北尾 彰朗
第一原理計算手法による半導体ナノ構造および原子層物質の形成と機能に関する研究	三重大学	秋山 亨
理論計算による触媒機能の解明	東邦大学	坂田 健
クラスターイオンの幾何構造, 反応性および衝突断面積の計算	東北大学	大下慶次郎
蛋白質の機能発現と構造に関する理論的研究	京都府立大学	リントゥルオト正美
分子運動に起因する動的分子間相互作用を活用した液晶の機能開発	大阪大学	内田 幸明
分子性導電・磁性材料に関する理論的研究	京都大学	中野 義明
ソフトマター系における遅いダイナミクスの理論・シミュレーション研究	大阪大学	金 鋼
有機分子における光化学過程の理論的研究	弘前大学	山崎 祥平
シグナル伝達を制御する巨大タンパク質複合体の分子動力学シミュレーションによる動的制御機構解明	近畿大学	米澤 康滋
金属クラスターの構造とその反応性	東京大学	小安喜一郎
天然紫外線防御物質マイコスポリン様アミノ酸の高速脱励起機構に関する理論的研究	山陽小野田市立山口東京理科大学	畠山 允
第一原理分子動力学シミュレーションによる水の変角振動緩和ダイナミクスの理論研究	富山大学	石山 達也
光起電力デバイスの電荷移動メカニズム	日本女子大学	村岡 梓
振電相互作用に関する理論的研究	京都大学	佐藤 徹
不均一界面系における静的および動的物性の理論的研究	慶應義塾大学	畑中 美穂

水の輸送係数に対する構造規則性の寄与と相互作用モデルの関係	新潟大学	大鳥 範和
ボウル型共役化合物の物性調査, および金属クラスター触媒の活性評価研究	大阪大学	櫻井 英博
新奇ナノカーボン・共役ラダー分子群創出に向けた合理的な分子・反応・機能デザイン	名古屋大学	伊藤 英人
Electronic Trapping and Surface Protonation in TiO ₂ Nanostructures	東京工業大学	JUHASZ, Gergely
ラジカルカチオン性有機金属分子ワイヤーとスイッチの開発	東京工業大学	田中 裕也
多機能配位子をもつ金属錯体の構造および反応性に関する理論研究	理化学研究所	浅子 壮美
計算分子分光学: 分子の構造および反応に関する計算化学	お茶の水女子大学	平野 恒夫
気相イオンの温度計測に関する研究	産業技術総合研究所	浅川 大樹
フラグメント分子軌道法による FIV プロテアーゼと HIV-1 プロテアーゼ阻害剤の相互作用解析	筑波大学	松井 亨
液体の統計力学理論による生体分子の機能解析	九州大学	吉田 紀生
荷電π電子系の設計・合成を基軸とした超分子集合体の創製	立命館大学	前田 大光
学際的研究のための気相中原子・分子電子励起状態精密量子化学計算	東洋大学	田代 基慶
タンパク質に結合する人工オリゴアミドのインシリコ設計	東京大学	森本 淳平
DFT 分子動力学計算を用いた熔融塩中の放射性廃棄物の溶解度評価	東北大学	穴戸 博紀
単層カーボンナノチューブの構造制御合成に向けた分子動力学シミュレーション	東京大学	丸山 茂夫
ジグリコールアミド系有機配位子によるランタノイド/マイナーアクチノイドイオンの選択的抽出に関する理論的研究	広島大学	井口 佳哉
キノリン骨格ピンスー配位子を有する遷移金属錯体に関する理論的研究	北里大学	神谷 昌宏
量子化学計算による光化学系 II の構造・反応機構解析	名古屋大学	野口 巧
有機イリジウムポルフィリン錯体による赤色光アンケーシング反応の開発	東京大学	村田 慧
理論計算を利用した有機半導体材料の開発	相模中央化学研究所	花村 仁嗣
計算化学を用いた触媒の理論設計および有機材料の発光物性と分子運動の解析	北海道大学	伊藤 肇
分子動力学と第一原理計算を用いた有機結晶および液体の熱物性および熱電効果の計算科学的研究	北海道大学	島田 敏宏
分子動力学シミュレーションを用いた膜タンパク質の構造, 機能, ダイナミクス解析	東京大学	篠田 恵子
曲げ変形に関する液晶安定性の分子動力学による研究	東京農工大学	坂本 道昭
シミュレーションに基づく分子モダリティの理解・制御・設計	東京大学	黒田 大祐
反応自動探索法の開発と応用	北海道大学	前田 理
3d 遷移金属からなる均一系及び不均一系触媒による CO ₂ 還元反応機構の調査	九州大学	伊勢川 美德
実験と計算による有機反応機構解析	東京大学	滝田 良
光回復酵素による光応答機構の解明	大阪大学	山元 淳平
新規高機能性の不斉触媒研究とベイズ最適化・機械学習への適用	名古屋工業大学	中村 修一
酸化物結晶および融体における構造緩和を駆動力とした不規則錯体構造の自発的形成過程の解析	大阪大学	鈴木 賢紀
分子動力学計算による高接着蛋白質の水中接着メカニズムの解明	名古屋大学	鈴木 淳巨
Computational Investigation of Colossal Dielectric Permittivity Materials and Chemical Bonding Features of Transition Metal Dioxides	名古屋大学	VARADWAJ, Pradeep Risikrishna
五核鉄クラスターの電子状態と反応性の理論解析	名古屋大学	柳井 毅
粘度の基本セルサイズ効果をも踏まえた分子動力学シミュレーションによる巨大分子の流体力学半径と水和の関係	九州大学	秋山 良
分子金属錯体および多核クラスターの精密制御と電子状態の解明	東北大学	長田 浩一
新規合成反応, 新機能の創出を志向した理論化学的研究	東京農業大学	斉藤 竜男
ナノカーボンと有機物を用いた機能材料の計算化学シミュレーション	(財)高度情報科学技術研究機構	手島 正吾
含ヘテロ非平面多環芳香族炭化水素の構造および性質	早稲田大学	加藤 健太
気相分子クラスターの構造と分子間相互作用の理論的解析とレーザー分光研究	東北大学	松田 欣之
工業原料を利用した精密化学変換反応の開発	大阪大学	星本 陽一
生体分子自己集合系の分子シミュレーション	岡山大学	篠田 渉
機能性分子集合体の分子動力学研究: 親水性界面における水分子の機能解析	兵庫県立大学	石井 良樹
イオン(分子)認識における微視的水和効果と温度効果の解明	東京工業大学	平田 圭祐
イオン性色素を含む新規π電子系の合成と配列制御	山形大学	山門 陵平
分子動力学シミュレーションによる高分子液晶および配向樹脂材料の熱伝導特性解析	東京工業大学	古屋 秀峰
2次元と3次元シミュレーションから明らかにするタンパク質の凝集	九州産業大学	末松安由美
染色体の新規モデル開発と種々の分子の原子間力顕微鏡像の理論計算	金沢大学	炭竈 享司
キラルナフタレン四量体色素の励起状態構造	岡山大学	高石 和人

Disruption Mechanism of the *Toxoplasma gondii* Parasitophorous Vacuole by IRGB6

放射性壊変や電磁波相互作用による生体分子の構造変化
 Ag 置換ゼオライト X におけるプロパン／プロピレン分離メカニズムの解明
 金属酸化物クラスターを利用した分子状複合体の設計と機能開拓
 SH₂ ドメインとリン酸化ペプチドの結合自由エネルギー解析
 低分子を認識・活性化する新規錯体に関する研究
 高電位鉄硫黄タンパク質の活性中心の構造と電子状態についての理論的解析
 溶液内および生体分子内で起こる化学反応と構造ダイナミクスの理論的解明
 界面活性剤凝集挙動の理論モデリング
 高分子インフォマティクスのための分子動力学計算による高分子物性データベースの構築と高機能性高分子の探索
 マルチドメインタンパク質の分子シミュレーションによる機能解析
 量子化学計算による有機分子触媒の精密設計
 ヘテロラジカルからなる新奇フォトクロミック分子の創製と光機能分子の励起状態探索
 人工力誘起反応法を活用したヘテロ元素含有新反応剤と新規円偏光発光材料の開発
 電気化学的に発生させた活性種の反応における反応機構と反応選択性の理論化学的考察
 分子の構造, ESR スペクトルの計算
 イオンチャネルのイオン選択性機構の解析のための分子動力学シミュレーション
 両親媒性分子集合体への物質輸送機構の解明
 高分子破壊に関する分子シミュレーション
 CNT へのアルカン混合溶媒からの長鎖選択的吸蔵とその理解
 Antibody-Antigen Complex Prediction Optimized by Alpha Fold
 分子間電子移動を伴う化学反応と分子間相互作用の研究
 クロコン酸結晶における中赤外光による強誘電分極増強の理論的解明
 金属錯体に関する理論的研究
 薬物あるいは生理活性物質と大環状化合物との相互作用解析
 低分子非晶質有機半導体薄膜中の官能基配向評価に関する計算
 第一原理計算によるプラズマドライエッチングの局所的環境変化によるフロロカーボン膜の誘電膜における性質変化の予測
 円偏光発光を示す π 共役系化合物の開発
 金属カルボニル化合物の XAS スペクトルシミュレーション
 クラスター複合体の構造と反応性
 天然由来のリード化合物の構造と反応に関する量子化学的研究
 分子シミュレーションによる分子集合体の研究
 分子配列によって制御された有機ホウ素錯体の発色機構の解明
 光化学反応の制御と応用に関する理論的研究
 生体分子および溶媒の構造機能相関の解明
 フッ素化ポラタアントラアセンアニオンの電子的特性が配位重合に及ぼす影響
 半導体 MOF 開発のための含硫黄配位子設計
 新奇機能性分子材料の構造-物性相関に関する理論研究
 振動円二色性分光法の超分子キラリティへの応用
 発光性金属錯体の励起状態の研究
 歪んだ多環芳香族化合物の構造と性質
 新規な典型元素化合物の構造と反応性に関する研究
 新奇な π 共役構造の電子状態
 新規機能性 π 共役分子の合成と物性に関する研究
 細胞内における超硫黄分子の振動解析
 高周期 14 族元素を含む化合物の構造物性理論計算
 第一原理計算による層状物質の角度分解光電子分光の解析
 計算科学を用いた希薄溶液中で近赤外光を吸収する π 共役部位の開発
 典型元素の特性を活用した発光体および光触媒の開発
 DFT 計算を用いた反応機構の解明による効率的有機合成反応の開発
 第一原理シミュレーションによる固体酸化物触媒の機能解明
 アルキルシラン化合物を受容体とした二水素結合クラスターの構造解明
 高周期元素を基盤とするレドックス活性有機触媒の探索
 高性能電極メディアータ開発における計算化学の援用

大阪大学 van EERDEN, Floris
 核融合科学研究所 中村 浩章
 信州大学 田中 秀樹
 東京大学 鈴木 康介
 医薬基盤・健康・栄養研究所 李 秀榮
 東京電機大学 山本 哲也
 筑波大学 堀 優太
 九州大学 森 俊文
 岡山大学 甲賀研一郎
 統計数理研究所 林 慶浩
 量子科学技術研究開発機構 田口 真彦
 東北大学 寺田 眞浩
 立命館大学 小林 洋一
 北海道大学 長田 裕也
 岡山大学 光藤 耕一
 東北大学 奥津 賢一
 和歌山県立医科大学 入江 克雅
 京都工芸繊維大学 水口 朋子
 名古屋大学 藤本 和士
 慶應義塾大学 千葉 文野
 大阪大学 徐 子暢
 神奈川大学 田仲 二郎
 高エネルギー加速器研究機構 岩野 薫
 静岡理工科大学 関山 秀雄
 福岡大学 池田 浩人
 山形大学 横山 大輔
 横浜国立大学 RAEBIGER, Hannes
 北里大学 長谷川真士
 東京大学 佐々木岳彦
 豊田工業大学 市橋 正彦
 埼玉医科大学 土田 敦子
 名古屋文理大学 本多 一彦
 名古屋工業大学 小野 克彦
 量子科学技術研究開発機構 黒崎 讓
 立命館大学 高橋 卓也
 広島大学 田中 亮
 関西学院大学 田中 大輔
 大阪大学 谷 洋介
 愛媛大学 佐藤 久子
 日本工業大学 大澤 正久
 東邦大学 渡邊総一郎
 学習院大学 狩野 直和
 東京工業高等専門学校 井手 智仁
 大阪大学 清水 章弘
 東北大学 影山 莉沙
 東京都立大学 瀬高 渉
 大阪大学 田中慎一郎
 静岡大学 植田 一正
 茨城大学 吾郷 友宏
 奈良教育大学 山崎 祥子
 東京大学 中山 哲
 静岡大学 松本 剛昭
 名古屋工業大学 高木 幸治
 横浜国立大学 信田 尚毅

マイクロフロー反応場を用いて創製される準安定超分子構造の解析 Theoretical Studies of Light-Matter Interactions in Molecular Systems	京都府立大学 京都大学	沼田 宗典 NGUYEN, Thanh Phuc
第一列遷移金属触媒の光応答に関する理論化学的検証 グルタミド超分子ナノ構造体の機能発現における官能基配向構造の解析 空間的軌道相互作用に基づく π 共役に関する研究 大環状多核金属錯体の動的特性と触媒活性の探索 遷移金属錯体等の分子の電子状態に関する理論的研究および量子計算の古典シミュレーション研究 新規キノイド系分子の合成と応用 イオン液体-分子性液体溶液中で働く相互作用と混合状態の解明 第一原理計算を用いた物質表面及び界面の研究 アレエン類のアダマンタン縮環反応の反応機構解明および新奇 π 共役系分子の構造物性解明 半合理的手法により構築された主鎖構造による人工タンパク質設計 マイナーアクチノイド回収用抽出剤 HONTA の電子構造及び電荷移動に係る研究 超短寿命核種アスタチン化合物に関する量子化学計算 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 複雑系の量子状態理論の開発と不均一系触媒および光機能システム系への応用 分子動力学シミュレーションによるタンパク質の凝集と凝集阻害 分子動力学計算と量子化学計算による液体の分子間相互作用の研究 計算機および生化学実験によるタンパク質分子デザイン 生体分子マシンにおけるマルチスケールな機能発現ダイナミクスの分子シミュレーション 分子系・凝縮系における磁性およびフォノン物性の第一原理計算 機能性開殻分子材料の構造-物性-電子状態相関の解明 3次元 π 共役構造体の創製 新規高分子担持光酸化還元触媒の創製 α チューブリン C 末端領域の翻訳後修飾が微小管構造集団に与える影響の分子ダイナミクス解析 4次元 MRI による脳の機能及び構造解析 機械学習を用いた脳機能画像解析 拡張アンサンブル法による分子シミュレーション 選択的反応における溶媒効果と反応機構に関する理論研究 イオン種に対する高分解能振動回転分光による分子間相互作用の研究 外場からの摂動下にある分子およびその集合体の計算化学的検討 分光法と分子動力学計算/量子化学計算を用いた生体関連分子の動的構造解析 還元反応によるカルボアニオン種の発生法の開拓と金属-炭素結合種の構造解明 計算化学による有機触媒及び有機金属触媒を用いた新規反応の機構解明 炭素-ヘテロ原子結合の切断および形成を伴う骨格転位反応の計算化学による機構解明 長波長領域での蛍光発現を可能とする電子受容体の設計 質量分析におけるイオン化条件及び観測イオンの安定構造に関する理論的検討 モデル溶融塩からなる溶媒の相関関数を正確に求める方法論の開発 π クラスター分子の電子物性の解明 キノイド分子の電子励起状態エネルギーレベルおよび構造の量子化学計算 新規機能性有機色素の開発 量子化学計算による反応機構の解明 熱活性化遅延蛍光材料の仮想スクリーニング 4d または 5d 金属を含む多核金属錯体の電子状態 QTAIM 二元関数解析法による結晶および不安定物質中における弱い相互作用の解析 新規双極性有機典型元素化合物の創成と双極子付加反応 アミノ酸シッフ塩基金属錯体の立体構造と電子構造 新規パイ共役化合物の構造-物性相関の解明に関する理論研究 有機分子光触媒の理論的分子設計法に関する研究 多座配位子で構造規制された遷移金属クラスターの構造, 電子状態および反応性 短寿命種や界面化学種の振動スペクトル解析 DFT 計算による複数の金属種からなる多核金属錯体の電子構造の解明 抗生物質耐性分子メカニズムの理論的研究	北海道大学 熊本大学 名古屋市立大学 東京大学 大阪大学 茨城大学 佐賀大学 九州工業大学 名古屋大学 名古屋大学 日本原子力研究開発機構 大阪大学 分子科学研究所 計算科学研究センター 生命創成探究センター 分子科学研究所 生命創成探究センター 計算科学研究センター 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 信州大学 生理学研究所 生理学研究所 名古屋大学 高知大学 北里大学 東京大学 佐賀大学 京都大学 岡山大学 大阪大学 名古屋大学 東邦大学 愛媛大学 大阪大学 室蘭工業大学 岐阜大学 産業技術総合研究所 大阪大学 岐阜大学 和歌山大学 北里大学 東京理科大学 大阪大学 日本工業大学 奈良女子大学 筑波大学 岐阜大学 城西国際大学	小島 正寛 桑原 穰 雨夜 徹 田代 省平 吉田悠一郎 近藤 健 高椋 利幸 河野 翔也 八木亜樹子 佐久間航也 宮崎 康典 寺本 高啓 斉藤 真司 江原 正博 奥村 久士 長坂 将成 古賀 信康 岡崎 圭一 南谷 英美 草本 哲郎 瀬川 泰知 奥村慎太郎 梅澤 公二 福永 雅喜 近添 淳一 岡本 祐幸 金野 大助 水瀬 賢太 伊藤 喜光 海野 雅司 黒木 堯 山崎 賢 鹿又 喬平 村井 征史 岡 真悠子 宮田 竜彦 西内 智彦 飯森 俊文 船曳 一正 栢沼 愛 相澤 直矢 海老原昌弘 林 聡子 内山 洋介 秋津 貴城 山下 健一 小池 隆司 浦 康之 石橋 孝章 植村 一広 額賀 路嘉

統計的手法による超原子価ヨウ素試薬の置換基効果の解明	大阪大学	西本 能弘
原子核の量子効果を考慮した理論計算手法による水素結合系の解析	岐阜大学	宇田川太郎
イオン・原子及びイオン・分子衝突の理論的研究	宮崎大学	五十嵐明則
量子化学計算によるペプチド形成過程の解明	早稲田大学	稲葉 知士
新規生物活性物質の設計・合成・機能評価	九州大学	平井 剛
イソシアニドの挿入数制御に基づくロジウム触媒による含窒素複素環化合物の多様性志向型合成反応の機構研究	京都大学	新林 卓也
配位子保護貴金属クラスターの三重項性に関する計算科学研究	立教大学	三井 正明
量子化学計算を用いた有機合成反応機構および物性の解明	慶應義塾大学	東林 修平
光・磁気・電気的特性を複合的に示す新規分子性物質の開発	大阪公立大学	酒巻 大輔
遷移系イオンを含む化合物の反応制御に関する理論的研究	岐阜大学	和佐田裕昭
機能性有機材料の開発のための量子化学計算	東京都立産業技術研究センター	小汲 佳祐
新しい治療法の確立を目指した新規触媒の開発	東京大学	三ツ沼治信
分子動力学計算による抗体の分子内ネットワークの探索	分子科学研究所	谷中 冴子
新規キラル分子のキロプティカル特性の理論計算	大阪大学	石割 文崇
固定化分子触媒による新規触媒作用の理論的解明	横浜国立大学	長谷川慎吾
新規金属クラスターの電子状態の解明	東京理科大学	新堀 佳紀
光反応中間体のエネルギー解析	大阪大学	大久保 敬
大環状系のラジカルカチオン π ダイマーの芳香族性	東京都立大学	西長 亨
有機ケイ素化合物の構造と性質	群馬大学	久新莊一郎
DFT 計算を用いた新規 C-H 活性化反応の機構研究	名古屋大学	平子 直洋
第一原理計算による LPSO 型 Mg 合金における局所クラスターと相安定性に関する研究	名古屋工業大学	宮崎 秀俊
有機典型元素を用いた合成化学, 構造化学	広島大学	吉田 拓人
量子化学に基づく生体分子の機能に関する計算科学研究	法政大学	数納 広哉
量子化学計算とインフォマティクスの融合研究	早稲田大学	清野 淳司
第一原理計算手法に基づくナノ電子材料のプロセス/機能制御に関する研究	島根大学	影島 博之
金属錯体を基盤とした人工光合成反応の開発に向けた理論的研究	大阪大学	小杉 健斗
微細構造を認識する超分子複合系の構築と構造解析	新潟大学	岩本 啓
特異な構造を有する複素芳香族化合物の理論研究	就実大学	山本 浩司
Benzene-CH ₄ van der Waals 錯体における 6 次元モデルポテンシャル計算と分子間振動波束観測	東京工業大学	中村 雅明
有機半導体分子 TIPS-ペンタセンのガウシアンによる振動解析	兵庫県立大学	相賀 則宏
分子内芳香族ラジカルカチオンクロスカップリング反応の機構解析	横浜国立大学	岡本 一央
新規熱活性化遅延蛍光分子の構造ならびに励起状態の理論計算	大阪大学	武田 洋平
14 族元素を配位原子とする多座配位子・クラスターが結合した遷移金属錯体に関する理論的研究	東北大学	小室 貴士
Search for Saddlepoints in the syn-/antiperiplanar Isomerism of 5,10,15-Triaryl-19-arylbilatrien-abc-onato Nickel (II)	分子科学研究所	ウルバン アドリアンジョー
先端的コヒーレント振動分光による機能性複雑分子の超高速構造ダイナミクスの観測と解明	分子科学研究所	倉持 光
理論計算を利用したラジカルメカノフォアの解析および新規分子骨格の開発	東京工業大学	杉田 一
深層学習によるキラルらせん構造の左右カウント	分子科学研究所	山本 浩史
水和フェノールカチオンにおける微視的水素結合構造: 複環構造の探索	北里大学	石川 春樹
DTE 結合型プレンステッド酸触媒の光照射による pKa 調節機能解明	北海道大学	中村 顕斗
遷移金属錯体触媒を用いる有機反応の反応機構研究	分子科学研究所	高谷 光
エネルギー変換分子触媒の分子構造・電子状態と反応性の相関の解明	山陽小野田市立山口東京理科大学	太田 雄大
理論計算による酸化物固定化キラル Tb 錯体の表面構造解明	名古屋大学	邨次 智
縮合多環芳香族化合物に基づく有機発光材料の開発	東京農工大学	中野 幸司
3次元粉体ポアズイユ流の連続体解析と数値計算	大阪大学	吉井 究
トランの電子状態	日本大学	奥山 克彦
アルツハイマー病の治療薬を目的としたアミロイド β 分解活性を有するペプチドの特性評価と投与方法に関する研究	東北大学	幡川 祐資
円偏光発光特性を有するヘリセン分子の設計と合成	大阪大学	佐古 真
不斉増幅を伴う光学活性含窒素 8 員環の合成研究	大阪大学	滝澤 忍
Al ₂ O ₃ 表面上における炭素膜の成長過程に関する研究	岡山大学	QIANG, Yue
含金属共役高分子の設計	関西大学	三田 文雄

光増感剤利用に向けた発光性セリウム錯体の開発	東京理科大学	倉持 悠輔
フラットバンドを有する有機分子-金属ハイブリッド系における高温超伝導の理論	新潟大学	関川 卓也
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	中村 栄一
光と化学的な添加剤を用いた協働的な Si-C 結合開裂反応の反応機構探索	東京大学	正井 宏
ホスフィン保護 Au ₁₁ クラスタのキャリアダイナミクスに与える配位子効果	関西学院大学	江口 大地
新規 π 共役系の物性化学研究	京都大学	関 修平
量子化学計算を用いた環状金属イオン配列における分子間相互作用およびキラリテイの評価	お茶の水女子大学	三宅 亮介
金属表面上の生体分子の構造と電子状態	横浜国立大学	大野 真也
クロス β 構造における量子化学計算を用いた Steric zipper の相互作用エネルギーの算出	東京大学	恒川 英介
古典および量子シミュレータを用いた量子化学計算	東京大学	山崎 雅人
ゲスト包接能を有するカラムナー液晶の開発	日本大学	吉田 純
C1 カルベノイド化学種の理論および実験に基づく計算化学的解明	北海道大学	岡本 和紘
アニリン分子の分光特性に対する溶媒効果の研究	九州大学	大橋 和彦
エネルギー材料の分子シミュレーション	産業技術総合研究所	崔 隆基
非極性水中の弱い相互作用 I : CO, CO ₂ 氷上の H 原子の挙動	東京大学	相川 祐理
タンパク質-RNA 複合体系の全原子分子シミュレーション研究	早稲田大学	浜田 道昭
遷移金属触媒および有機触媒を用いた不飽和結合への付加反応における位置および立体選択性の解明	大阪大学	兒玉 拓也

(計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業利用枠)

課 題 名 (通年)

提案代表者

次世代二次電池・燃料電池開発による ET 革命に向けた計算・データ材料科学	物質・材料研究機構	館山 佳尚
革新的光触媒材料の第一原理設計	神戸大学	天能精一郎
省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション	名古屋大学	押山 淳
バイオ分子における X 線誘起非断熱反応動力学の実時間イメージング理論	理化学研究所	山崎 馨
大規模電子状態計算ベースとした有機光デバイス材料の励起子ダイナミクス解析	量子科学技術研究開発機構	藤田 貴敏

3-1-3 共同利用研究実施件数一覧

分子科学研究所共同利用研究実施一覧

分類		中期計画区分	第4期			
		年度	2022			
			前期	後期	計	登録者数
共同研究	(1) 課題研究		2	2	2	18
	(2) 協力研究 *1		22	25	47	175
	(マテリアル)*2		15	25	40	112
研究会	(3) 研究会		3	3	6	482
	(4) 若手研究活動支援		1	0	1	70
	(5) 岡崎コンファレンス		0	0	0	0
	所長招へい *3		5	0	5	5
	UVSOR 研究会 *3		1	0	1	14
施設利用	(6) ① UVSOR		104	105	209	1,010
	(マテリアル)*2		2	3	5	35
	(6) ② 機器センター (マテリアル)*2		61	75	136	397
	(6) ③ 装置開発室 (マテリアル)*2		0	0	0	0
	(6) ④ 計算科学研究センター		298	0	298	1,252

*1 一部課題では UVSOR 利用あり (1999 年度後期より UVSOR 協力研究は、協力研究に一本化された)。

*2 マテリアル先端リサーチインフラ事業は 2022 年度から開始。それ以前はナノテクノロジープラットフォーム事業。

*3 公募以外の研究会。

年度ごとの実績として、共同研究と施設利用の分類では課題件数を示す。(1) 課題研究, (6) ④ 計算科学研究センターは、通年で 1 課題を 1 件のまま計数, それ以外の通年課題は前期と後期の 2 期分として, 1 課題を 2 件として年度計に表す。研究会の分類では開催件数を示す。ただし、所長招へいは旅費支給者人数を示す。

右端列にある登録者数は、共同研究と施設利用の分類では課題登録者数, 研究会の分類では参加人数を示す。

3-1-4 分子研研究会プログラム

【学協会連携分子研研究会】

森野ディスカッション

2022年8月31日（水）（オンライン開催）

1. 2022年度研究助成金贈呈式

- 14:35 伊澤誠一郎（分子研）講演 10分
「有機半導体界面での光電変換特性の解明と新機能開拓」
- 14:50 近藤 徹（東工大）講演 10分
「分子分光法を用いた光合成タンパク質の動的な光反応制御機構および機能的なロバスト性の解明」

2. 森野ディスカッション

- 15:30 講演 A 池田勝佳（名工大）講演 35分
「表面増強分光で探る帯電界面の構造とダイナミクス」
- 16:25 講演 B 岡本裕巳（分子研）講演 35分
「光学遷移の選択律を破るナノ分光」

【分子研研究会】

金属酸化物：表面と薄膜の構造化学

2022年9月26日（月） 分子科学研究所研究棟 301号室（ハイブリッド開催）

- 15:00-16:00 “Surface Structures Drive the Growth of Perovskite Oxide Films”
Michele Riva (TU Wien) ※オンライン
- 16:00-17:00 “Physical Properties of Defects on Metal Oxide Surfaces Analyzed by Scanning Probe Microscopy”
Taketoshi Minato (Institute for Molecular Science)
- 17:00-18:00 “Pulsed Laser Deposition of Compositionally Graded Sr-Doped NaTaO₃ Thin Films and Their Photoexcited Carrier Dynamics”
Shingo Maruyama (Tohoku University)
- 18:00-19:00 “Toward Excited-State Molecular Dynamics Analyses of Metaloxide Photocatalysts: Computational Method Developments and Applications”
Hiroki Uratani (Waseda University)

【分子研研究会】

イオン液体の構造と物性予測のデータ解析技術

2022年9月28日（水）～29日（木） 岡崎コンファレンスセンター中会議室（ハイブリッド開催）

9月28日（水）

- 13:30-13:45 「はじめに」
阿部 洋（防衛大）
- 13:45-14:45 「イオン液体の更なる機能開拓に必要な理論化学的手法の拡張」
森 寛敏（中央大）
- 15:00-16:00 「情報化学によるガス分離吸収性イオン液体の迅速探索と実験検証」
黒木 菜保子（中央大）
- 16:00-17:00 「実験データ駆動型の情報科学に基づく有機イオン伝導体の物性予測」
畠山 歆（早稲田大）
- 17:00-17:30 全体討議

9月29日（木）

- 09:00-10:00 「イオン液体の低融点を理解する」【ZOOM】
遠藤太佳嗣（同志社大）
- 10:15-11:15 「情報科学を用いた物性評価の自動化」
小野寛太（大阪大）
- 11:15-12:00 全体討議
- 12:00-12:05 閉会の挨拶
解良 聡（分子研）

【分子研研究会】

軟X線共鳴散乱・反射率

ソフトマテリアル・ソフトマターのナノ～メソスケール構造解析

2022年11月8日(火) (オンライン開催)

- 10:00-10:10 Welcome & Introduction
荒木 暢 (Diamond Light Source)
- 10:10-11:00 *Keynote Lecture*
Probing Morphology and Chemistry in Complex Soft Materials with In Situ Resonant Soft X-Ray Scattering
Cheng Wang (Advanced Light Source)
- 11:15-11:40 ニューズバルにおけるフォトレジストの軟X線共鳴散乱/反射率測定
原田哲男 (兵庫県立大学)
- 11:40-12:05 UVSOR および Photon Factory における共鳴軟X線散乱装置の開発
岩山洋士 (分子科学研究所)
- 12:05-12:30 軟X線反射率/吸収分光による wet 環境対応薄膜解析装置の検討
～中性子や陽電子を組み合わせたマルチプローブ解析を目指して
山田悟史 (高エネルギー加速器研究機構)
- 13:30-13:55 Tender X-Ray 領域での合金の ASAXS 測定
奥田浩司 (京都大学)
- 13:55-14:25 BL15A2 におけるテンダーX線による散乱・反射率法による高分子構造解析
山本勝宏 (名古屋工業大学)
- 14:25-14:50 中性子を用いた固体高分子形燃料電池の解析
原田雅史 (豊田中央研究所)
- 15:05-15:30 共鳴軟X線散乱による液晶相精密構造解析への試み
高西陽一 (京都大学)
- 15:30-15:55 屈曲液晶における超分子カイラル多型ナノ構造
荒岡史人 (理化学研究所)
- 15:55-16:20 DDS ナノ粒子の構造解析
櫻井和朗 (北九州市立大学)
- 16:30-17:10 Discussion
- 17:10-17:15 Closing
解良 聡 (分子科学研究所)

【分子研研究会】

UVSOR-III における多様な量子ビームの発生と先端利用に関する研究会

2022年11月28日(月) 岡崎コンファレンスセンター (ハイブリッド開催)

- 08:50 ~ 09:00 趣旨説明
(分子研: 平義隆)
- 09:00 ~ 09:30 UVSOR 光源開発ビームラインの歴史
(広島大学/分子研: 加藤政博)
- 09:30 ~ 10:00 自由電子レーザーの開発と利用・今後の展開
(京都大学: 全炳俊)
- 10:00 ~ 10:30 UVSOR でのコヒーレント高次高調波光源の開発
(秋田高専: 坂本文人)
- 10:40 ~ 11:10 タンデムアンジュレータによるアト秒制御ダブルパルスの発生と原子分子実験への応用
(SAGA-LS: 金安達夫)
- 11:10 ~ 11:40 放射光の時空間構造の制御とその利用の可能性
(広島大学/分子研: 加藤政博)
- 11:40 ~ 12:10 紫外円偏光照射による有機物分子のキラリティの発現に関する研究
(核融合研: 小林政弘)
- 13:30 ~ 14:00 UVSOR-III におけるガンマ線源の開発と利用及び今後の展開
(分子研: 平義隆)
- 14:00 ~ 14:30 ニューズバル γ 線ビームライン BL01 の現状
(兵庫県立大学: 橋本 智)
- 14:30 ~ 15:00 ガンマ線を用いた原子核物理実験とその応用
(京都大学: 大垣英明)
- 15:10 ~ 15:40 偏光検出コンプトンカメラの開発と応用
(東京大学: 島添健次)
- 15:40 ~ 16:10 陽電子消滅法の基礎とパルス γ 線誘起陽電子発生装置への期待
(千葉大学: 藤浪真紀)
- 16:10 ~ 16:40 原子空孔を見て発光材料への不純物添加効果を探る
(山形大学: 北浦守)

【分子研研究会】

生体分子材料を探る：発動分子のさらなる理解と設計に向けて
2023年3月29日（水）～30日（木） 分子科学研究所山手3号館大会議室

3月29日（水）

(1) 生体分子材料と人工分子材料の境界を探る手法_01

- 13:00-13:10 挨拶
(東工大：上野隆史)
- 13:10-13:40 生体の分子機構を利用してつくる機能性材料
(東工大：芹澤 武)
- 13:40-14:10 金属連結ペプチド鎖が創り出すナノトポロジー
(東工大：澤田知久)
- 14:20-14:50 *de novo* 設計膜ペプチドを基盤とした人工イオンチャネルの創出
(理研：新津 藍)
- 14:50-15:20 無機ナノシートの集合構造制御による機能性ソフトマテリアル
(信州大：佐野航季)

(2) 生体分子材料と情報・理論をつなぐ手法

- 15:30-15:45 植物の構造と機能に学ぶバイオメテックス
(秋田県立大：津川 暁)
- 15:45-16:00 ロボット機構学によるタンパク質の理解
(神奈川工大：有川敬輔)
- 16:00-17:00 ポスター発表
- 17:00-18:00 総合討論 01

3月30日（木）

(1) 生体分子材料と人工分子材料の境界を探る手法_02

- 9:30- 9:50 生体材料の自律的合成——静から働の機能へ向けて
(東工大：上野隆史)
- 9:50-10:20 生体・人工ハイブリッド分子モーターの創出と特性解析
(分子研：飯野亮太)
- 10:20-10:50 人工的な DNA レール上を走るタンパク質モーターの創出
(情報研：古田健也)
- 11:00-11:30 動態イメージングで探る生命分子材料と人工分子材料の境界
(名大：内橋貴之)

(2) 生体分子材料と社会をつなぐ将来

- 11:30-12:00 生体分子材料の社会実装, 何をする? 何ができる?
——ライフサイエンス・ニューロサイエンスからの示唆——
(東通大：福土珠美)
- 13:00-13:55 総合討論 02
- 13:55-14:00 挨拶
(分子研：飯野亮太)

3-2 国際交流と国際共同研究

3-2-1 外国人客員部門等及び国際交流

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

表1 国際交流協定締結一覧

相手方機関名	国名	協定書等名	主な内容	締結年月日	有効期限
フランス国立パリ高等化学学校	フランス	自然科学研究機構分子科学研究所とフランス国立パリ高等化学学校との分子科学分野における共同研究に関する覚書	情報交流、共同研究、研究交流、会議、シンポジウム、セミナーへの研究者派遣	2019.10.23	2024.10.22
ベルリン自由大学	ドイツ	自然科学研究機構分子科学研究所とベルリン自由大学との分子科学分野における日独共同研究プロジェクトに関する協定	放射光施設における分子科学分野の学術推進と共同研究の実施	2019. 6.21	2022. 6.20
ペーター・グリュンベルグ研究所	ドイツ	ユーリヒ総合研究機構ペーター・グリュンベルグ研究所と自然科学研究機構分子科学研究所との間の分子・材料科学における共同研究プロジェクトに関する覚書	放射光施設における分子科学分野の学術推進と共同研究の実施	2018.10. 1	2023. 9.30
マックス・プランク協会フリッツ・ハーバー研究所（物理化学領域）	ドイツ	分子科学研究所とマックス・プランク協会フリッツ・ハーバー研究所（物理化学領域）との協定	学術交流及び共同研究等の実施	2021. 5.10	2024. 5. 9
オウル大学	フィンランド	自然科学研究機構分子科学研究所とオウル大学との学術連携に関する覚書	分子科学及び物質物理学の学術連携及び共同研究等の実施	2021. 5.10	2024. 5. 9
固体表面物理化学国家重点実験室	中国	自然科学研究機構分子科学研究所と固体表面物理化学国家重点実験室との協定	分子科学の学術推進と共同研究の実施	2019.12.23	2024.12.22
成均館大学	韓国	自然科学研究機構分子科学研究所と成均館大学化学科との分子科学分野における共同研究に関する覚書	分子科学分野における学術交流及び共同研究等の実施	2018. 4. 1	2022. 3.31
韓国化学会物理化学ディビジョン	韓国	分子科学研究所と韓国化学会物理化学ディビジョンとの日韓分子科学合同シンポジウムに関する覚書	日韓の分子科学分野の先導的研究者が集まるシンポジウムを定期的に開催し、両国の分子科学の発展に資する	2018.10.22	2022.10.21
中央研究院原子と分子科学研究所	台湾	分子科学研究所と中央研究院原子と分子科学研究所との間の分子科学における協力に関する覚書	共同研究（物質関連分子科学、原子、分子との光科学、理論と計算の分子科学）	2020. 1.12	2023. 1.11
国立陽明交通大学	台湾	自然科学研究機構分子科学研究所と国立交通大学理学部との学術連携に関する覚書	学術交流及び共同研究等の実施	2018. 6. 1	2023. 5.31
タイ国立ナノテクノロジー研究センター	タイ	自然科学研究機構分子科学研究所とタイ国立科学技術開発庁ナノテクノロジー研究センターとの分子科学分野における共同研究に関する覚書	分子科学分野における学術交流及び共同研究等の実施	2017.10.30	2022.10.29
インド工科大学カンプール校	インド	自然科学研究機構分子科学研究所とインド工科大学カンプール校との分子科学分野における共同研究に関する覚書	学術交流及び共同研究等の実施	2020. 4. 1	2024. 3.31

表2 外国人研究者数の推移 (単位：人)

中期計画区分	第4期	
年度	2022	
外国人研究職員（客員）	1	
日本学術振興会外国人招へい研究者	2	
日本学術振興会外国人特別研究員	0	
国際協力研究員	長期	18
	短期	24
研究会参加者（オンライン参加者含）	12	
招へい研究員等	17	
合計	74	

国際協力研究員＝短期：施設利用者等（学生含む）、長期：インターンシップ生等

表3 外国人研究者の延べ来所人数の国別内訳推移 (単位：人)

中期計画区分	第4期
年度	2022
フランス	19
ドイツ	5
イギリス	3
スウェーデン	7
フィンランド	2
スイス	3
アメリカ	9
中国	2
台湾	8
タイ	3
インド	6
その他*	3
合計	70

*その他に含まれる国は、チェコ、カナダ、マレーシア

表4 海外からの研究者（2022年度）（web版は削除）

3-2-2 岡崎コンファレンス

分子科学研究所では、1976年（1975年研究所創設の翌年）より2000年まで全国の分子科学研究者からの申請を受けて小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」を年2～3回、合計65回開催し、それぞれの分野で世界トップクラスの研究者を数名招へいし、情報を相互に交換することによって分子科学研究所における研究活動を核にした当該分野の研究を国際的に最高レベルに高める努力をしてきた。これは大学共同利用機関としての重要な活動であり、予算的にも文部省から特別に支えられていた。しかし、1997年以降、COEという考え方が大学共同利用機関以外の国立大学等にも広く適用されることとなり、大学共同利用機関として行う公募型の「岡崎コンファレンス」は、予算的には新しく認定されるようになったCOE各機関がそれぞれ行う独自企画の中規模の国際シンポジウムの予算に切り替わった。一方、法人化後、各法人で小～中規模の国際研究集会が独自の判断で開催できるようになり、分子科学研究所が属する自然科学研究機構や総合研究大学院大学でその枠が整備されつつある。ただし、所属している複数の機関がお互い連携して開催するのが主たる目的となっている。

このような背景の下、2006年には全国の分子科学研究者の立案に基づく先導的な中小規模の国際研究会を開催する枠組みを維持継続するために、運営交付金による分子研独自の事業として「岡崎コンファレンス」を再開した。同年の第66回岡崎コンファレンスを皮切りに2007年以降は研究会の開催提案を広く公募し、全国共同利用による共同研究の一環として継続的に開催してきた。しかしながら2020年以降は世界的コロナ禍のため岡崎コンファレンスとしての国際研究会の提案・採択が無く、本コンファレンスは2019年の第80回を最後に開催されていない。一方で、2020-2021年度には岡崎コンファレンスの枠組みとは別に分子研PIが主導的に関与するwebを利用した幾つかの国際研究会や産学連携研究集会が開催されており、分子研研究会の新たな可能性を切り拓きつつある。2022年以降はいわゆるwith-/after-coronaの世界において国際研究集会のあり方も良くも悪くも変わらざるを得ないと考えられ、分子研共同利用においてもweb会議の環境整備・開催支援に注力しつつある。今後は研究会開催形式の変化にも柔軟に対応しwith-/after-coronaにおける「岡崎コンファレンス」を始めとする分子研研究会の有効な実施方法を試行しつつ新たな活性化を目指したい。

3-2-3 日韓共同研究

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

日韓合同シンポジウムは第1回を1984年5月に分子科学研究所で開催して以来、2年ごとに日韓両国間で交互に実施している。これまでの開催履歴は一覧表のとおりである。第11回シンポジウム「分子科学の最前線」（分子科学研

究所，2005年3月）は，文部科学省の「日韓友情年2005（進もう未来へ，一緒に世界へ）」記念事業としても認定された。第16回シンポジウムは，当初2015年7月に釜山にて開催予定であったが，時に流行したMERS（中東呼吸器症候群）の懸念により開催が直前に断念され，運営スタッフの交代とともに開催延期となり2017年7月に釜山にてIBS（Institute for Basic Science）特別セッションなどを含めた通例より大規模な会議が開催された。第17回シンポジウム「Advances in Materials and Molecular Sciences」は，2019年7月に名古屋にて，新学術領域研究「光合成分子機構の学理解明と時空間制御による革新的光-物質変換系の創製」との共催で実施された。日本側11件，韓国側12件の講演と19件のポスターセッションがあった。次回第18回は2023年韓国にて開催予定で，今後も日韓両国の研究者による活発な研究・人材交流が進むことが期待される。

開催一覧

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

3-3 大学院教育

3-3-1 特別共同利用研究員

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

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

（2023年3月31日現在）

中期計画区分	第2期	第3期	第4期
年度	2010～2015	2016～2021	2022
北海道大学	0		
室蘭工業大学	0		
東北大学	6		
山形大学	1		
茨城大学	2		
筑波大学	1		
宇都宮大学	0		
群馬大学	0		
埼玉大学	0		
千葉大学	1	1	
東京大学	5	21	
東京工業大学	5	3	
お茶の水女子大学	0		
横浜国立大学	2		
金沢大学	0		
新潟大学	0		
福井大学	0		
信州大学	1	1	
岐阜大学	0		
静岡大学	4		
名古屋大学	59	60	10
愛知教育大学	0		
名古屋工業大学	7	1	1
豊橋技術科学大学	0		
三重大学	0		
京都大学	2	5	
京都工芸繊維大学	0		
大阪大学	6	1	
神戸大学	0		
奈良教育大学	0		
奈良女子大学	0		
鳥根大学	0		
岡山大学	0		
広島大学	0	1	
山口大学	0		
香川大学	0	1	

愛媛大学	0		
高知大学	0		
九州大学	3		
佐賀大学	0		
長崎大学	0		
熊本大学	0		
宮崎大学	0		
琉球大学	0		
北陸先端科学技術 大学院大学	1		
奈良先端科学技術 大学院大学	0	1	
総合研究大学院大学	0	1	
首都大学東京	0		
名古屋市立大学	14	24	5
大阪市立大学	0		
大阪府立大学	0		
姫路工業大学	0		
学習院大学	0		
北里大学	0		
慶應義塾大学	0		
上智大学	0		
立教大学	2		
中央大学	1		
東海大学	0		
東京理科大学	0		
東邦大学	0		
星薬科大学	0		
早稲田大学	0		
明治大学	0		
名城大学	0		
中部大学		2	
岡山理科大学	0		
海外機関	28	9	
計	151	132	16

3-3-2 総合研究大学院大学二専攻

総合研究大学院大学は、1988年10月1日に発足した。分子科学研究所は、同大学院大学に参加し、構造分子科学専攻及び機能分子科学専攻を受け持ち、1991年3月には6名の第一回博士課程後期修了者を誕生させた。なお、所属研究科は2004年4月より数物科学研究科から物理科学研究科に再編された。

その専攻の概要は次のとおりである。

構造分子科学専攻

詳細な構造解析から導かれる分子および分子集合体の実像から物質の静的・動的性質を明らかにすることを目的として教育・研究を一体的に行う。従来の分光学的および理論的な種々の構造解析法に加え、新しい動的構造の検出法や解析法を用いる総合的構造分子科学の教育・研究指導を積極的に推進する。

機能分子科学専攻

物質の持つ多種多様な機能に関して、主として原子・分子のレベルでその発現機構を明らかにし、さらに分子及び分子集合体の新しい機能の設計、創製を行うことを目的として教育・研究を一体的に行う。新規な機能測定法や理論的解析法の開発を含む機能分子科学の教育・研究指導を積極的に推進する。

大学開設以来の分子科学2専攻の入学者数、学位取得状況等及び各年度における入学者の出身大学の分布等を以下に示す。

担当教員と在籍学生数 単位：人

(2022年5月1日現在)

専攻		構造分子科学		機能分子科学	
担当教員	教授	8		8	
	准教授	7		7	
	助教	13		18	
	計	28		33	
学生数	入学年度	5年一貫 〈定員2〉	博士後期 〈定員3〉	5年一貫 〈定員2〉	博士後期 〈定員3〉
	2022	2	4	3	1
	2021	1	1	2(1)	1
	2020	0	5(2)	1(1)	2(1)
	2019	1(1)	1	2	2(2)
	2018	3	0	2	1(1)
	2017	0	0	0	1
	計	7(1)	11(2)	10(2)	8(4)

() は留学生数で内数。

フランス1名、ドイツ1名、エルサルバドル1名、中国3名、タイ1名、インド2名、二専攻合計で9名。

入学と学位取得の状況 単位：人 (2023年3月31日現在)

区分	専攻	中期計画区分	第2期	第3期	第4期
		年度	2010～2015	2016～2021	2022
入学者数	構造分子科学	5年一貫	15	21	2
		博士後期	20	12	4
	機能分子科学	5年一貫	10	23	3
		博士後期	18	14	1
	計		63	70	10
学位取得者数	構造分子科学	課程博士	20	22	6
		論文博士	0	0	0
	機能分子科学	課程博士	19	16	3
		論文博士	3	1	0
	計		42	39	9

外国人留学生数(国別入学者数) 単位：人 (2023年3月31日現在)

中期計画区分	第2期	第3期	第4期
年度	2010～2015	2016～2021	2022
フランス		0, 1	
ドイツ		1, 0	
ロシア			
チェコ			
カナダ		1, 0	
エルサルバドル		0, 1	
中国	14, 5	0, 5	
韓国		0, 1	
タイ	2, 3	1, 3	
インド	0, 2	0, 3	
バングラディッシュ			
パキスタン		1, 0	
ネパール	0, 2		
マレーシア	1, 0		
ベトナム	0, 1		
フィリピン			
エジプト		0, 1	
ナイジェリア			
合計	17, 13	4, 15	0, 0

構造分子科学専攻(A)と機能分子科学専攻(B)の入学者数をA,Bで表す

大学別入学者数 単位：人

(2023年3月31日現在)

専攻	構造分子科学			機能分子科学		
	第2期	第3期	第4期	第2期	第3期	第4期
中期計画区分	2010～2015	2016～2021	2022	2010～2015	2016～2021	2022
年度	2010～2015	2016～2021	2022	2010～2015	2016～2021	2022
北海道大学		3(3)				
東北大学		1		1(1)		1
山形大学				1		
筑波大学						1(1)
千葉大学	1(1)	1	1			
東京農工大学		1(1)				
東京工業大学	3(3)				1(1)	
新潟大学					1(1)	
長岡技術科学大学		1(1)				
金沢大学				1		
山梨大学			1(1)			
信州大学		1				
岐阜大学			1(1)	1	1(1)	
名古屋大学	3(3)	6(5)	1	2	4(3)	
愛知教育大学		1(1)				
名古屋工業大学					2(2)	
豊橋技術科学大学				1(1)		
京都大学	3	2(1)		1	2(1)	1(1)
大阪大学	1(1)					
神戸大学				1(1)		
鳥取大学				1		
岡山大学	1				1	
広島大学		1				1(1)
徳島大学					1(1)	
九州大学	1(1)				1	
熊本大学		1(1)				
群馬工業高等専門学校	1(1)					
奈良工業高等専門学校				1(1)	1(1)	
宇部工業高等専門学校					1(1)	
北九州工業高等専門学校		1(1)				
名古屋市立大学				1	3(3)	
大阪府立大学		1				
兵庫県立大学		1(1)				
いわき明星大学				1		
城西大学		1(1)				
北里大学		1(1)				
東海大学				1(1)		
東京電機大学					1(1)	
東京理科大学	1(1)	1		1(1)		
東邦大学		1(1)				
日本大学		1			1	
法政大学	1(1)					
立教大学	1					
神奈川大学		1(1)				
愛知工業大学					1(1)	

名城大学		1(1)	1		2(1)	
立命館大学				1(1)	1(1)	
関西大学					1(1)	
近畿大学			1			
福岡大学	1(1)					
海外機関・その他	17(2)	4(1)		12(3)	11(3)	
合計	35(15)	33(21)	6(2)	28(10)	37(23)	4(3)

() は5年一貫で内数。

第1期(2009年度)以前の入学者があった大学を以下に示す。

東京大学(16名)。北陸先端科学技術大学院大学, 早稲田大学(7名)。学習院大学, 慶應義塾大学(6名)。お茶の水女子大学(5名)。愛媛大学(4名)。電気通信大学, 静岡大学, 東京都立大学(3名)。室蘭工業大学, 筑波大学, 京都工芸繊維大学, 山口大学, 鹿児島大学, 大阪市立大学, 姫路工業大学, 中央大学, 岡山理科大学(2名)。群馬大学, 横浜国立大学, 富山大学, 福井大学, 三重大学, 奈良女子大学, 佐賀大学, 琉球大学, 奈良先端科学技術大学院大学, 石巻専修大学, 青山学院大学, 国際基督教大学, 明星大学, 静岡理工科大学, 龍谷大学, 甲南大学, 放送大学(1名)。

修了生の進路 単位:人

(2022年12月現在)

		2010～2021年度修了生の 修了直後の進路状況			1991～2021年度修了生の 現在の状況		
専攻		構造分子科学	機能分子科学	計	構造分子科学	機能分子科学	計
大学・ 公的機関等	教授	0	0	0	24	19	43
	准教授	1	0	1	17	13	30
	講師	0	0	0	4	2	6
	助教	0	0	0	16	11	27
	研究職	27	19	46	—	—	—
	小計	28	19	47	—	—	—
進学				0	—	—	—
民間企業(研究職含む)		3	8	11	—	—	—
その他		9	5	14	—	—	—
合計		40	32	72	—	—	—

修了直後は1年以内の就職・進学先等。
各項目には海外の機関・団体等を含む。

3-3-3 オープンキャンパス

2022年6月4日(土), zoomを用いたオンライン形式で分子研オープンキャンパスを開催した。COVID-19の影響で2020年度からオンラインで行っており, 今年度は現地開催も不可能ではない社会情勢ではあったものの, オンライン化によって入学を検討する参加者の割合が増えたこと, 全国どこからでも参加できるメリットが大きいことから, 今年もオンラインとした。

まずは周知が必要と考え, 分子研twitterの活用や所員へのretweetのお願い, ポータルサイト(chem-station.com, tayojp)への出稿などを通じて広報活動を1ヶ月間行った。結果として, 北は北大から南は九大まで, 過去2年間を上回る34名の参加登録があった。

当日は午前10時に開始し, 所長と大学院委員長による分子研・総研大の説明ののち研究室紹介を各5分で行った。事前に撮影した5分動画の提出も可としたが, リアルタイムでの説明が多く, ライブ感のある研究室紹介となった。

午後はブレイクアウトルームを使用したラボツアーを行った。前回参加者の「質問時間がもっと欲しかった」との意見を参考に、5研究室並列の3回制（1研究室50分）、かつ希望する学生がいれば追加対応可、とした。「ブレイクアウトルーム内ではカメラON」をお願いしたこともあり、実際に研究室見学に来たような臨場感を出すことができた。説明時間後に残って質問をしていた学生が見受けられたので、目当ての研究室が明確にある学生にとっては良かった一方で、登録時の「興味のある研究室」で分野をまたがって多数選択する学生が予想よりも多かったため、最大3研究室にしか参加できない今回の形式には改善の余地がありうる。

オープンキャンパス参加者のうち見学・体験入学申込者は6名であった。見学をもっと気軽にできるように、日程と行程が決まったラボツアーをあらかじめ設定しておくなど、今後さらに検討する余地はあるかと思われる。また、入学の検討を始めるには6月開催は遅いため、開催を早める、効果的なPRを行う、参加者が総研大在学生の話を聴く機会を設けるなど、今後改善していきたい。

3-3-4 体験入学

本事業は、他大学の学部学生・大学院生に対して、実際の研究室での体験学習を通じて、分子科学研究所（総研大物理科学研究科構造分子科学専攻・機能分子科学専攻）における研究環境や設備、大学院教育、研究者養成、共同利用研究などを周知するとともに、分子研や総研大への理解促進を目的としている。本事業は、総研大本部から「新入生確保のための広報事業」として例年、特定教育研究経費の予算補助を受けており、総研大物理科学研究科の主催行事として2004年から毎年開催している。本年度も昨年度と同様、新型コロナウイルス感染拡大に伴い、例年8月の第2週に受け入れてきた体験入学を中止し、感染者数が落ち着いている時期に、各研究室個別に見学者や体験入学者を受け入れる対応をとった（受入時期と感染症対策は岡崎三機関の規則に従った。）。選考の結果、本年度は28名の学生（学部学生22名、大学院生5名、社会人1名）を受け入れ、うち4名については2回受け入れた。実施スケジュールは以下のとおりである。

6月4日(土)：分子研オープンキャンパス大学院説明会・体験入学説明会（オンライン開催）

1月6日(金)：体験入学WEB説明会

参加者の内訳、受入研究室、受入期間は以下の通りである。

	所属	身分	訪問先	受入期間
1	(公財)相模中央化学研究所	社会人	古賀 G	6月27日～28日
2	東京理科大学	学部生	杉本 G	6月15日
3	慶応義塾大学	大学院生	熊谷 G・杉本 G 杉本 G	8月3日～5日 3月22日～24日
4	九州大学	学部生	奥村 G・魚住 G	9月1日～2日
5	立命館大学	学部生	倉持 G・草本 G	8月1日～5日
6	東北大学	学部生	杉本 G	7月20日～23日 8月24日～27日
7	東京大学	学部生	杉本 G	9月9日～10日 3月1日～4日
8	信州大学	学部生	奥村 G・秋山 G	9月14日～15日

9	東京大学	学部生	大森 G	9月5日～9日
10	明治大学	学部生	杉本 G	9月16日～17日 3月28日～30日
11	京都大学	学部生	杉本 G	9月27日～29日
12	京都大学	学部生	杉本 G	9月27日～29日
13	北海道大学	大学院生	瀬川 G	12月2日～4日
14	東京大学	大学院生	瀬川 G	12月2日～3日
15	同志社大学	学部生	斉藤 G	3月27日
16	東京理科大学	学部生	魚住 G	2月2日～3日
17	近畿大学	学部生	大森 G	2月20日～22日
18	東京大学	学部生	秋山 G	2月28日～3月2日
19	北海道大学	学部生	杉本 G	2月8日～11日
20	北海道大学	学部生	杉本 G	2月8日～11日
21	京都大学	大学院生	熊谷 G	2月2日
22	近畿大学	学部生	青野 G	3月9日～10日
23	東京都立大学	大学院生	草本 G・瀬川 G	2月3日
24	九州大学	学部生	杉本 G	2月16日～17日
25	室蘭工業大学	学部生	斉藤 G	3月27日～28日
26	東北大学	学部生	杉本 G	3月2日～3日
27	関西学院大学	学部生	奥村 G	3月1日～2日
28	関西学院大学	学部生	奥村 G	3月1日～2日

3-3-5 総研大アジア冬の学校

総研大「アジア冬の学校」が、2022年12月21日（水）に分子科学研究所研究棟2階において開催された。アジア冬の学校は、物理科学研究科内の5専攻で行っている研究・教育活動をアジア諸国の大学院生及び若手研究者の育成に広く供するために2004年度に始まった。新型コロナウイルス感染拡大の影響により、2020年と2021年は開催が中止されたため、3年ぶりの開催となった。アジア全域から参加者を募り、今年度はインターンシップ生（IIPA：分子研アジア国際インターンシッププログラム）4名、マレーシアのマラヤ大学から2名、総研大生13名、広島大学1名、講演者2名、若手研究者を含めた教職員5名の計27名で実施された。今年度のテーマは、昨年度に引き続き「Challenges for New Frontiers in Molecular Science: From Basic to Advanced Researches」とし、参加者によるフラッシュトークおよびポスター発表、斉藤真司教授と熊谷崇准教授による講義が行われた。講義やポスター発表、休憩時間においても活発な議論が行われ、インターンシップ生や総研大生、参加者にとって有意義な国際交流の場になったと思われる。

SAITO, Shinji (IMS, SOKENDAI)

“Dynamics in Condensed Phase Systems: Basic Concepts and Applications”

KUMAGAI, Takashi (IMS, SOKENDAI)

“Physical Chemistry at the Bottom: Real-Space Study of Hydrogen-Bond Dynamics”

3-3-6 統合生命科学教育コース群

総研大では、2019年度より総合的な教育の視点から、研究領域に関連する問題や課題に応じて、各研究科・専攻が開設する授業科目群をグループとしてまとめ、狭義の専門分野を超えて広く本学の学生に履修を促す「コース群」を設置している。

「統合生命科学教育コース群」としては、これからの生物学に寄与することの出来る研究者を育成するために、生物科学のみならず、物理科学、数理科学、情報科学などに通じる学際的かつ統合的な生命観を育てることを目的とする授業科目群を提供している。

講義は原則英語で行われ、Zoom（Web会議システム）を利用して現地、遠隔地専攻に差がなく受講できるようにしている。本年度は、8科目（①統合生命科学入門、②イメージング科学、③発生生物学Ⅱ、④進化ゲノム生物学、⑤遺伝学、⑥生体分子シミュレーション入門（中止）、⑦機能発生生物学Ⅳ、⑧統合進化学）が実施された。②イメージング科学はPC演習が含まれるため、対面のみでの実施を計画していたが、新型コロナウイルス感染症拡大の影響により2名が急遽Zoomでの参加となった。前日での決定となったが、講師の尽力によりハイブリッドでの演習を実施することができた。

2023年4月より、現在の6研究科から、先端学術院のもとに20コースを設置する体制へ移行するため、「統合生命科学教育コース群」はその役目を終えることが決定している。一部は科目として存続するため、これからも学生の学びの一助となることを期待したい。

3-4 その他

3-4-1 分子研コロキウム

分子研コロキウムは、所長はもとより、所内全ての教授、准教授、研究者が集い、各人の専門分野を越えて学問的な刺激を享受することを趣旨とし、各々の専門分野で講師をお招きして開催する部門公開セミナーとは一線を画す。今年度 965 回を数える歴史あるセミナーであるが、近年、コロキウムに参加する所員は減少する一途にあり、コロキウム本来の趣旨が所員に正しく理解されているかは疑わしい状況にあった。1988 年「総合研究大学院大学」の設立、2003 年「国立大学法人法」の制定にともない、所長、教授、准教授が、研究所・大学院の運営により多くの時間を割かざるを得なくなるなど、コロキウムが始まった 1976 年当時と現在とでは研究所を取り巻く状況が大きく異なってきた事実はあるが、コロキウム本来の趣旨に立ち返り、その存在意義を高めるべく、2010 年度からコロキウムの改革が進められている。

現行の開催要領では、(i) 各領域による講師の推薦と、(ii) ホスト（各教員）による講師の推薦に基づき、(iii) 4 月から翌年 3 月まで通年開催する、という 3 点を骨子としている。(i)(ii) は、講師の選出に複数の教員が関わることで所全体としてコロキウムへの関心を高めつつ、分子科学に関連する各研究分野のトップランナーである研究者をお招きし、最先端の話題を提供していただくことが主な狙いである。また、(iii) はコロキウムの開催が年末から年度末にかけて集中してしまうここ数年の傾向を考慮しての対策である。これらの開催方針は次年度にも引き継がれることとなった。

上記開催要領に基づき、2022 年度は計 10 件のコロキウムを開催し、8 件を対面形式で（うち 1 件はオンラインを併用したハイブリッド形式）、他 2 件をオンライン形式で行った。前年度は新型コロナウイルス感染症の拡大により全てのコロキウムがオンラインで開催されるなど、対面形式でのコロキウム開催は久々であった。しかしながら、いずれの回も多くの聴講者が集まり活発な議論が行われるなど盛況で、対面形式による議論の良い面をあらためて認識した。なお、コロナ禍対策として整備されたオンライン開催のための設備・技術を活用し、より多くの聴講者に参加していただけるように、ハイブリッド形式での開催および所外への公開が検討・実施された。感染状況が一定程度に収まってきていることから次年度のコロキウムも主に対面形式で開催される予定であるが、開催形式にこれらの新しい選択肢が加わったことで、今後コロキウムが講演者と所内外の研究者を広く巻き込んだ、より活発な「ブレインストーミング」の場となることが期待される。

以下に、2022 年度に行われた分子研コロキウム一覧を示す。

回	開催日	テーマ	講演者
956	2022. 6.28	Quantum Technology at 100 Billionths of a Degree Above Absolute Zero	Prof. Dana Anderson (JILA fellow/UC Boulder)
957	2022. 7.12	金属-有機構造体 (MOF) の融解とガラス化、およびその機能	堀毛 悟史 (京都大学准教授)
958	2022. 8. 1 (オンライン)	Dynamic and Thermodynamic Performance Bounds for Collective Motor-Driven Transport	Prof. David Sivak (Simon Fraser Univ., Canada)
959	2022. 8. 2 (オンライン)	臨界現象とスケーリング：切り紙の伸長から滴の融合・分離まで	奥村 剛 (お茶の水女子大学教授)
960	2023. 1.13	エネルギー応答型精密 Ir 錯体触媒が拓くバイオマス資源と CO ₂ の還元	斎藤 進 (名古屋大学教授)
961	2023. 2.10	固体の真空状態を破壊する——固体の高次高調波発生の物理	田中耕一郎 (京都大学教授)

962	2023. 2.13	The Business of Quantum Computing: Market Dynamics, Funding and Future Prospects	Mr. Paul Lipman (ColdQuanta, Inc.)
963	2023. 3. 7 (オンライン・ オンサイト併用)	Giving Chemistry Direction	Prof. David A. Leigh (The University of Manchester, UK)
964	2023. 3.20	Organic Semiconductors—from Flexible Displays and Solar Cells to the Artificial Brain	Prof. Karl Leo (Technische Universität Dresden, Germany)
965	2023. 3.22	Does an Isolated Quantum Spin System Thermalize?	Prof. Matthias Weidemüller (Ruprecht-Karl University Heidelberg, Germany)