

2-10 共同研究

2-10-1 共同研究の概要

大学共同利用機関の重要な機能として、所外の分子科学及び関連分野の研究者との共同利用研究を積極的に推進している。そのために共同利用研究者宿泊施設を用意し、運営会議で採択されたテーマには、旅費及び研究費の一部を支給する。次の5つのカテゴリーに分類して実施している。(公募は前期・後期(年2回)、関係機関に送付)

- (1) 課題研究：数名の研究者により特定の課題について行う研究で3年間にまたがることも可能。
- (2) 協力研究：所内の教授又は助教授と協力して行う研究。(原則として1対1による)
(平成11年度後期より UVSOR 協力研究は、協力研究に一本化された)
- (3) 研究会：分子科学の研究に関連した特定の課題について、所内外の研究者によって企画される研究討論集会。
- (4) UVSOR 施設利用：原則として共同利用の観測システムを使用する研究。
- (5) 施設利用：研究施設に設置された機器の個別的利用。

2-10-2 2004 年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名	提案代表者
内殻励起における交換相互作用とスピン軌道相互作用	分子科学研究所
固体表面上の生体分子認識反応系の構築と構造解析	分子科学研究所
自由電子レーザーの短波長化とその応用	分子科学研究所

小杉 信博
宇理須恆雄
加藤 政博

(2) 協力研究

課 題 名(前期)	代 表 者
ピニルラジカルのポテンシャル曲面と運動の理論的研究	九州大学大学院理学研究院
金属原子・有機分子クラスターイオンの赤外光解離分光	東北大学大学院理学研究科
気相中における金属イオンの溶媒和構造の研究	九州大学大学院理学研究院
ピコ秒時間分解分光による重水素置換された7-アザインドールダイマーの励起状態ダブルプロトン移動反応機構の解明	九州大学大学院理学研究院
パラジウム錯体の電子スペクトルのせん断応力効果	室蘭工業大学工学部
光学スペクトルによるずれ応力効果の検証	山口東京理科大学基礎工学部
極低温微量試料磁気測定法開発	岡山大学大学院自然科学研究科
分子性機能物質の極小結晶による構造決定、および物性測定	(独)産業技術総合研究所
分子性伝導体の極低温伝導度・磁化率測定	東京大学大学院理学系研究科
型有機導体の低温X線構造解析	大阪市立大学大学院理学研究科
折れ曲がった骨格を有するドナーに基づく磁性伝導体の構造と物性	大阪府立大学先端科学研究所
有機強磁性体構成母体のデザインと合成ならびに評価	法政大学工学部
光磁気機能性遷移金属錯体の創製と磁気物性評価	慶應義塾大学理工学部
光応答性部位を対カチオンとして有する分子性導体の合成とその基底状態・準安定状態における結晶構造ならびに電気伝導性質	静岡大学工学部
キラルおよび誘電性を有する金属錯体の磁気特性	九州大学大学院理学研究院
化学ドーブしたDNA鎖の電子状態測定	東京大学大学院新領域創成科学研究科
シリコン表面吸着分子の分光と反応の理論的解析	九州大学情報基盤センター
金属内包フラーレンの極端紫外光吸収	岡山大学理学部
多核種NMRによるシアン配位型ペルオキシダーゼのヘム環境の解析	九州大学大学院生物資源環境科学府
カスケード非線形効果を用いたパルス制御に関する研究	東京大学生産技術研究所
半導体レーザー励起マイクロチップ固体レーザーの物性と応用	東海大学大学院工学研究科
Yb系固体レーザーの分光特性の研究	福井大学大学院工学研究科
Yb:GdYCOB単一素子による紫外光発生に関する研究	大阪大学大学院工学研究科
半導体・金属ナノ界面の制御	北陸先端科学技術大学院大学材料科学研究科

田中 桂一
美齊津文典
大橋 和彦
迫田 憲治
城谷 一民
井口 眞
大嶋 孝吉
田中 寿
小林 昭子
村田 惠三
藤原 秀紀
中村 暢男
秋津 貴城
植田 一正
速水 真也
川合 真紀
青柳 睦
久保園芳博
野中 大輔
芦原 聡
大塚 建樹
川戸 栄
佐々木孝友
三谷 忠興

高共役 分子修飾電極の作成と評価	愛媛大学総合科学研究支援センター	宇野 英満
芳香族化合物の直接官能基化を経る 共役多環式芳香族化合物合成	大阪大学大学院工学研究科	垣内 史敏
生体関連分子巨大クラスター負イオンの質量スペクトルおよび光電子スペクトルの測定	東北大学大学院理学研究センター	前山 俊彦
金属微粒子の微細配列とデバイス構築	東京大学大学院理学系研究科	米澤 徹
電子運動量分光の研究	東北大学多元物質科学研究所	宇田川康夫
散乱電子 - 放出電子 - 生成イオン 3 重同時測定による簡単な分子の電子運動量分布の 3 次元測定	東邦大学理学部	酒井 康弘
近藤半導体 FeSi の電子構造の圧力効果	岡山理科大学	森 嘉久
レドックス活性なアゾ基を有するルテニウム錯体の合成と反応	福島大学教育学部	大山 大
ジオキソモリブデン錯体の酸化能と反応機構の解明	大阪市立大学大学院理学研究科	杉本 秀樹
混合 (貴) 金属クラスター分子の創製と機能開拓	大阪府立大学総合科学部	竹本 真
胆汁酸ミセルの MD シミュレーション	大分大学教育福祉科学部	中島 俊男
計算機実験による液体相分離ダイナミクスに関する研究	東北大学大学院理学研究科	福村 裕史
ヘムセンサー蛋白質 NPAS2 のラマン分光法を用いた構造解析	京都府立大学大学院農学研究科	佐上 郁子
金属錯体による酸素 - 酸素結合の生成と開裂機構の解明	金沢大学理学部	鈴木 正樹
共鳴ラマン分光法を用いたセンサー蛋白質の構造と機能に関する研究	京都大学大学院工学研究科	鶴澤 尊規
ピコ・フェムト秒レーザーを用いたマイクロリアクター中の反応ダイナミクス	東京工業大学大学院理工学研究科	鈴木 正
芳香族分子のピコ、フェムト秒励起状態ダイナミクス	東京工業大学大学院理工学研究科	松下 慶寿
ヘムオキシゲナーゼ反応機構の解明	東北大学多元物質科学研究所	松井 敏高
角度分解紫外光電子分光法によるフッ素化フタロシアン薄膜と電子状態と分子配向	千葉大学大学院自然科学研究科	奥平 幸司
フラウンホーフェン類の光電子分光	千葉大学工学部	日野 照純
シリコン基板上に有機分子配向膜に関する紫外角度分解光電子分光による研究	名古屋大学物質科学国際研究センター	関 一彦
Zn Sc 系正二十面体準結晶の光電子分光	名古屋大学大学院情報科学研究科	森 昌弘
紫外光電子分光法による Li-Ni 系複合酸化物の電子状態の研究	愛媛大学工学部	宮崎 隆文

課 題 名 (後期)

代 表 者

カーボンナノチューブネットワーク上への生体超分子の固定	横浜国立大学大学院工学研究科	荻野 俊郎
極低温強電場中の分子ダイナミクス	東京農工大学大学院共生科学技術研究部	中田 宗隆
放射光を用いたカーボンナノチューブの加工制御に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	今泉 吉明
磁性薄膜における表面気体吸着誘起スピン再配列の磁気光学 Kerr 効果	東京大学大学院理学系研究科	雨宮 健太
ジオキソレン錯体の界面制御と水分子の活性化に関する研究	山形大学大学院理工学研究科	近藤 展征
金属内包フラウンホーフェンの極端紫外光吸収	岡山大学理学部	久保園芳博
電子運動量分光の研究	東北大学多元物質科学研究所	宇田川康夫
散乱電子 - 放出電子 - 生成イオン 3 重同時測定による簡単な分子の電子運動量分布の 3 次元測定	東邦大学理学部	酒井 康弘
芳香族分子のピコ、フェムト秒励起状態ダイナミクス	東京工業大学大学院理工学研究科	松下 慶寿
ピコ・フェムト秒レーザーを用いたマイクロリアクター中の反応ダイナミクス	東京工業大学大学院理工学研究科	鈴木 正
化学ドーピングした DNA 鎖の電子状態測定	東京大学大学院新領域創成科学研究科	川合 真紀
分子定規を用いたナノデバイス作製とその特性評価	(独)物質・材料研究機構	長谷川 剛
分子性伝導体の極低温伝導度・磁化率測定	東京大学大学院理学系研究科	小林 昭子
分子機能物質の極小結晶による構造決定、および物性測定	(独)産業技術総合研究所	田中 寿
光応答性部位を対カチオンとして有する分子性伝導体の合成とその基底状態 - 準安定状態における結晶構造ならびに電気伝導性質	静岡大学工学部	植田 一正
折れ曲がった骨格を有するドナーに基づく磁性伝導体の構造と物性	大阪府立大学先端科学研究所	藤原 秀紀
型有機伝導体の低温 X 線構造解析	大阪市立大学大学院理学研究科	村田 恵三
混合 (貴) 金属クラスター分子の創製と機能開拓	大阪府立大学総合科学部	竹本 真
アルカリ土類金属原子と低温ヘリウムガスとの衝突に関する研究	富山大学理学部	森脇 喜紀
多量体分子クラスターの分子間ポテンシャル	九州大学大学院理学研究科	原田 賢介
金属原子 - 有機分子クラスターイオンの赤外光解離分光	東北大学大学院理学研究科	美齊津文典
溶媒和金属イオンにおけるイオン対状態生成に関する研究	九州大学大学院理学研究科	大橋 和彦
ヘムオキシゲナーゼ反応機構の解明	東北大学多元物質科学研究所	松井 敏高
低原子価前周期金属錯体をユニットとした新規不均一系触媒の開発	静岡大学理学部	近藤 満
固体コヒーレントフォノン励起における光パルス位相制御の効果	(独)物質・材料研究機構	北島 正弘

W および Q-band ESR による有機導体におけるスピンドYNAMICS等の電子状態の研究	東京都立大学大学院理学研究科	溝口 憲治
TDAE-C ₆₀ 単結晶の W バンド ESR	岡山大学大学院自然科学研究科	神戸 高志
常磁性金属を有するポルフィリン類縁体の合成と物性	京都大学大学院理学研究科	大須賀篤弘
化学修飾された金属内包フラーレン単結晶の示す磁気測定	城西大学理学部	加藤 立久
生体関連分子巨大クラスター負イオンの質量スペクトルおよび光電子スペクトルの測定	東北大学高等教育開発推進センター	前山 俊彦
錯体分子内における金属 - カルボニル結合強度の制御	福島大学教育学部	大山 大
NMR によるシアン配位型ペルオキシダーゼのヘム環境の解析	九州大学大学院農学研究院	野中 大輔
しきい電子・オージェ電子同時計測による分子 2 重イオン化の研究	高エネルギー加速器研究機構	青戸 智浩
RISM - モード結合理論を用いて調べる溶媒ゆらぎの時間変化と溶媒和構造変化	大阪大学先端科学イノベーションセンター	西山 桂
化合物半導体擬似位相整合波長変換デバイスの開発	東京大学大学院工学系研究科	近藤 高志
Yb 系固体レーザーの分光特性の研究	福井大学大学院工学研究科	川戸 栄
超小型高出力赤外光源の開発	東北大学電気通信研究所	水津 光司
Yb:YAG を用いた増幅システムの開発	(独) 理化学研究所中央研究所	小川 貴代
積層プレート構造半導体波長変換素子の開発	中央大学理工学部	庄司 一郎
ヘモグロビンの協同的酸素結合の調節機構の解明	筑波大学大学院数理物質科学研究科	長友 重紀
酸素活性種を含む金属錯体の創製と機能制御	金沢大学大学院自然科学研究科	鈴木 正樹
ヘムセンサー蛋白質 NPAS2 のラマン分光を用いた構造解析	京都府立大学大学院農学研究科	佐上 郁子
近藤半導体 FeSi の電子構造の圧力効果	岡山理科大学理学部	森 嘉久
一次元ニッケル錯体の剪断応力効果のその場観察	室蘭工業大学工学部	城谷 一民
(BEDT-TTF) ₂ Cl ₂ ·2H ₂ O の電荷量の決定	北海道大学大学院理学研究科	河本 充司
有機導体における電荷整列と物性についての研究	京都大学低温物質科学研究センター	矢持 秀起
金属錯体液晶の誘電性および非線形光学特性	九州大学大学院理学研究院	速水 真也
芳香族化合物の直接官能基化を経る 共役多環式芳香族化合物合成	大阪大学大学院工学研究科	垣内 史敏
角度分解紫外光電子分光法をもちいた、極性をもつタロシアン分子超薄膜の価電子帯の電子構造に関する研究	千葉大学工学部	奥平 幸司
金属原子内包フラーレンの光電子分光	千葉大学工学部	岩崎賢太郎
紫外光電子分光法による Li-Ni 系複合酸化物の電子状態の研究	愛媛大学工学部	宮崎 隆文
ZnSc 系正二十面体準結晶の光電子分光	名古屋大学大学院情報科学研究科	森 昌弘
シリコン及び電極金属上に成長させた有機薄膜の紫外角度分解光電子分光による研究	名古屋大学大学院理学研究科	金井 要

(3) 研究会

分子機能の物理化学 理論・計算化学と分光学による新展開
2004年7月21日(水)～23日(金) 岡崎コンファレンスセンター

7月21日(水)

13:30-13:40	石田俊正(分子研)	趣旨説明
基調講演(座長:石田俊正)		
13:40-14:10	永瀬 茂(分子研)	分子機能とナノ構造
Session I 分子機能を支配する反応ダイナミクス(座長:石田俊正)		
14:10-14:40	南部伸孝(分子研)	非断熱現象を利用した分子設計
14:40-15:10	田原太平(理化研)	二転三転するアゾベンゼンの光異性化機構:実験と理論の不整合
15:40-16:10	長澤 裕(阪大)	超高速分光法による生物の耐乾燥性・耐凍結性の分子ダイナミクスの研究
16:10-16:40	小松崎民樹(神戸大)	生体分子ダイナミクスの状態空間幾何学:1分子時系列情報からわかること
16:40-17:10	富永圭介(神戸大)	最近の時間分解振動分光について 理論と実験についてのコメント
17:30-19:00	ポスターセッション	

7月22日(木)

Session II 分子機能発現における凝縮系効果(座長:鳥居 肇)		
09:30-10:00	木村佳文(京大)	デザイナー流体中での色素の電子状態に対する溶媒効果
10:00-10:30	谷村吉隆(京大)	凝縮相中にある二重戸系系の2次元分光
11:00-11:30	志賀基之(原研)	経路積分法の基礎理論と理論化学への応用
11:30-12:00	奥村久士(分子研)	液体のマルチパーリック・マルチサーマルアンサンブルシミュレーション
12:00-12:30	鄭 誠虎(分子研)	Mode-coupling theory for liquid-state dynamics

Session III 分子機能制御の電子論 (座長: 杉本 学)

- 14:00-14:30 村田昌樹 (東大) 光・プロトン応答性金属錯体の応答機能と電気的性質
14:30-15:00 野崎浩一 (阪大) 遷移金属錯体の MLCT 状態の構造と光物理
15:30-16:00 中村振一郎 (三菱化学) 工業的有機材料の計算科学による解析と設計 ~ 実用的な分子の励起状態デザインをめざして ~
16:00-16:30 長谷川淳也 (京大) 生体分子の SAC-CI スペクトロスコピー
16:30-17:00 今堀 博 (京大) 人工光合成系構築への実験的アプローチ

7月23日 (金)

Session IV 生体分子における分子機能 (座長: 鳥居 肇)

- 09:30-10:00 海野雅司 (東北大) 振動分光法と量子化学計算で探る光受容タンパク質の動きと機能
10:00-10:30 中島 聡 (阪大) 電子移動反応におけるコヒーレンシー モデル系から蛋白質まで
11:00-11:30 熊崎茂一 (京大) 光合成超高速電子移動に関する知見と課題
11:30-12:00 林 重彦 (京大) ロドプシン光受容タンパク質の分子機能に関する理論的研究
12:00-12:30 田中成典 (神戸大) 核酸および蛋白質系の分子計算からマクロな機能発現へ向けて
12:30-12:40 総括: 鳥居 肇

先端分子科学と境界領域への進展

2004年5月21日 (金) ~ 22日 (土) 岡崎コンファレンスセンター

5月21日 (金)

- 10:00-10:10 はじめに 寺嶋正秀 (京大)
10:10-12:10 セッション・時間分解分光と回析
中村一隆 (東工大), 星名賢之助 (東大), 腰原伸也 (東工大)
13:30-15:30 セッション・生体分子系の電子状態理論
山下晃一 (東大), 佐藤文俊 (東大), 中野達也 (国立医薬品食品衛生研)
16:00-18:00 セッション・分子デバイス
関 一彦 (名大), 塚田 捷 (早大), 小川琢治 (分子研)

5月22日 (土)

- 09:00-11:00 セッション・極限環境下での分子物性
森 健彦 (東工大), 鹿野田一司 (東大), 宇治進也 (ナノマテリアル研)
11:30-13:30 セッション・大気化学と分子科学
梶井克純 (都立大), 高橋けんし (名大), 廣川 淳 (北大)
13:30-13:40 おわりに 鈴木俊法 (理研)

キラル磁性体の磁気構造と磁気光学効果

2004年7月17日 (土) ~ 18日 (日) 岡崎コンファレンスセンター

7月17日 (土)

- 13:00-13:10 井上克也 (広大理) はじめに (趣旨説明)
Session I 座長 井上克也 (広大理)
13:10-13:55 十倉好紀 (東大工) マルチフェロイクスの物質設計と巨大電気磁気応答
13:55-14:40 有馬孝尚 (東北大多元) 多重強秩序系、不斉磁性体の非相対的磁気光学
Session II 座長 藤山茂樹 (東大工)
14:55-15:40 東 正樹 (京大化研) Bi、Pb-3d 遷移金属ペロブスカイト
15:40-16:25 小口多美夫 (広大先端物質) マルチフェロイック BiMnO₃ の第一原理計算
Session III 座長 岸根順一郎 (九工大工)
16:30-17:15 小島憲道 (東大総合文化) スピン構造の空間制御とその光学的性質
17:15-17:45 石川忠彦 (東工大物質科学) 量子常誘電体 SrTiO₃ における光伝導効果
17:45-18:30 福山秀敏 (東北大金研) 分子系と金属イオン

7月18日 (日)

- Session IV 座長 美藤正樹 (九工大工)
09:00-09:30 菊地耕一 (都立大理) キラル磁性体の構造と磁性
09:30-10:10 細越裕子 (大阪府大総合科学) 量子スピン系とキラル磁性 現状と展望

Session V 座長 菊地耕一 (都立大理)

10:30-11:00	神山 崇 (KEK)	TBA
11:00-11:20	中村哲也 (SPring8)	円偏光軟X線によるキラル分子磁性体のMCDおよびMChDの検出
11:20-11:40	大隅寛幸 (SPring8)	キラル磁性体の非共鳴X線磁気散乱
11:40-12:00	朝日 透 (早大生医工研)	ハウブによる強誘電体のキラル光学的研究

Session VI 円卓自由討論 (Round Table Discussion)

若手分子科学研究者のための物理化学研究会

2004年6月2日(水) 分子科学研究所研究棟302号室

14:00-14:10	菱川明栄 (分子研)	開会の辞
14:10-14:40	長岡正隆 (名大院情報科学)	凝縮系化学反応の理論的アプローチ 現状と展開
14:40-15:10	畑中耕治 (東北大院理)	超短パルスX線の発生と応用
15:30-16:00	山口 毅 (名大院工)	液体の流れの分子論
16:00-16:30	長澤 裕 (阪大基礎工)	超高速分光による凝縮相中の分子ダイナミクスの研究
16:30-17:00	梅本宏信 (北陸先端大材料)	CVD過程における気相診断と反応過程の解明

原子・分子反応素過程における粒子相関

2004年6月1日(火)~2日(水) 岡崎コンファレンスセンター

6月1日(火)

13:20-13:30	東 俊行 (都立大院理)	はじめに
13:30-14:00	金安達夫 (都立大院理)	多重同時計測法を用いた多価イオン・分子衝突ダイナミクスの研究
14:00-14:30	高口博志 (理化研)	交差分子線画像法による励起酸素原子の化学動力学
14:30-15:00	星野正光 (理化研)	低速C ⁴⁺ とHe原子の衝突による二電子捕獲機構の研究
15:00-15:30	季村峯生 (九大院理)	多価イオン衝撃による解離分子種生成の相関
16:00-16:30	ヴェシャビゼ ギオルギ (都立大院理)	Dissociation of multiply charged benzene
16:30-17:00	G. V. Milnikov (分子研)	Semiclassical methods in molecular dynamics. Nonadiabatic transition and tunneling
17:00-17:30	森下 亨 (電通大量子・物質工)	超球座標法による原子の多電子励起状態の記述: 基準モードによる分類とアト秒光パルスを用いた実時間分析の試み

6月2日(水)

09:00-09:30	高橋正彦 (分子研)	電子線コンプトン散乱実験の新展開: 二電子系原子分子の(e,2e+M)と(e,3-1e)
09:30-10:00	小田切 丈 (東工大院化)	電子-分子衝突過程における2電子励起分子ダイナミクス研究のための第二世代コインシデンス電子エネルギー損失分光システムの開発
10:00-10:30	中島信昭 (大阪市大院理)	高強度フェムト秒レーザーによるC ₆₀ および有機分子のイオン化・クーロン爆発
11:00-11:30	見附孝一郎 (分子研)	フラレンのイオン化と解離: フラグメントの出現エネルギーに関する統計論的取扱い
11:30-12:00	間嶋拓也 (コンボン研)	高速重イオン-C ₆₀ 分子衝突: 多重電離と多重分解過程の相関測定
13:00-13:30	彦坂泰正 (分子研)	しきい電子とオージェ電子の同時計測に見られるPCI効果
13:30-14:00	穂坂綱一 (東大院理)	同時計測画像分光法による配向分子からの光電子の角度分布測定
14:00-14:30	繁政英治 (分子研)	分子の内殻電離しきい値近傍における多電子励起状態の探索
15:00-15:30	北島昌史 (上智大理工)	高分解能角度分解内殻共鳴オージェスペクトルに現れるドップラー効果
15:30-16:00	菱川明栄 (分子研)	コインシデンス運動量画像法による強光子場中分子過程
16:00-16:20	河内宣之 (東工大院化)	まとめ

分子スケールエレクトロニクス研究会

2004年4月8日(木)~9日(金) 岡崎コンファレンスセンター

4月8日(木)

13:00	小川琢治 (分子研)	開会
13:05-13:40	和田恭雄 (早大ナノテクノロジー研)	分子コンピュータへの道
13:40-14:15	徳本洋志 (北大電子研)	分子デバイス研究開発の動向と将来
14:15-14:25	討論	

- I. 分子ナノスケール構造の構築 座長 古川一暁
- 14:40-15:15 芳賀正明(中央大理工) 錯体分子モジュールを用いる表面ナノ積層系の構築と電子移動過程
- 15:15-15:50 中村貴義(北大電子研) 分子性導体の自己組織化ナノパターンニング
- 15:50-16:25 大川祐司(物材機構ナノマテリアル研) 連鎖重合反応を用いた導電性高分子ナノワイヤーの作成
- 16:25-16:40 池田太一(産総研) 分子テンプレート法を用いた単一分子の配列固定化
- II. 走査プローブ顕微鏡による分子観察, 物性計測 座長 石田敬雄
- 16:55-17:30 藤平正道(東工大院生命理工) 我々の最近の走査プローブ顕微鏡に関する研究の紹介
- 17:30-18:05 桑原裕司(阪大院工) 分子スケール機能計測手法の開発とその応用
- 18:05-18:40 松本卓也(阪大産研) 分子系ナノスケール構造の電気・電子特性計測

4月9日(金)

- III. ナノスケール電気伝導の理論 座長 松本卓也
- 09:00-09:35 塚田 捷(早大理工) 原子細線および分子架橋の量子伝導
- 09:35-10:10 広瀬喜久治(阪大院工) 第一原理計算によるナノスケール構造の電子輸送予測
- 10:10-10:45 渡邊 聡(東大院工) 単分子 - 電極複合系の電気伝導に関連した理論計算のいくつかの話題
- IV. 分子設計と合成 I 座長 谷口正輝
- 11:00-11:35 田中一義(京大工) 分子スピンエレクトロニクスを目指した分子設計
- 11:35-11:50 西長 亨(京大化研) (話題提供) 分子導線の新規被覆法の開発
- 11:50-12:05 小松直樹(滋賀医大) (話題提供) ナノ炭素化合物製造法における産学連携と特許戦略
- V. ポスターセッション
- 13:00-14:20
- VI. 分子設計と合成 II 座長 中村貴義
- 14:20-14:55 大須賀篤弘(京大理) ポルフィリノイド化学の最近の展開
- 14:55-15:30 小夫家芳明(奈良先端大) ポルフィリンのナノ配位組織体
- 15:30-16:05 大坪徹夫(広大院工) ナノ共役分子の開発と機能
- VII. ナノスケール電極を用いた分子の電気伝導計測 座長 桑原裕司
- 16:20-16:55 橋詰富博(日立基礎研) 極微細電極の加工と単分子の電気伝導測定
- 16:55-17:30 小川琢治(分子研) 単一・少数有機分子の電気特性計測のための有機化学的アプローチ
- 17:30-17:45 谷口正輝(阪大産研) (話題提供) 分子ワイヤーの電気伝導とナノ電極上における分子ワイヤーの合成

生体金属分子科学の展望

2004年10月1日(金)~3日(日) 岡崎コンファレンスセンター

10月1日(金)

座長 城 宜嗣

- 13:00 菊地和也(東大院・薬) 生物応用可能な Zn²⁺ 可視化プローブ
- 13:40 浜地 格(九大・先端物質研) 金属錯体によるタンパク質・ペプチド表面分子認識: センシングと制御
- 14:20 塩谷光彦(東大院・理) 金属配列プログラミングのための人工バイオ分子の創製
- 15:00 樋口芳樹(兵庫県立大院・生命理学) ヒドロゲナーゼの Ni-Fe 活性部位の X線結晶構造化学
- 座長 千田俊哉
- 16:10 加藤康夫(富山県立大・工) 新規ヘム酵素「アルドキシム脱水酵素」の発見と有機合成への応用
- 16:50 尾高雅文(東京農工大・工) ニトリルヒドラーゼファミリーの新規酵素: チオシアネート加水分解酵素
- 17:30 植木龍也(広島大院・理) パナジウム結合タンパク質の構造と機能
- 18:00 大久保忠恭(阪大院・薬) 大腸菌 DNA 修復タンパク質 Ada の Zn 配位 Cys38 メチル化による転写制御機構

10月2日(土)

座長 齋藤正男

- 09:20 青野重利(岡崎統合バイオ) ヘムを活性中心とする気体分子センサータンパク質の生物無機化学的研究
- 10:00 清水 透(東北大・多元研) ヘム制御タンパク質の構造と機能: EcDOS、HRI、SOUL 及び NPAS2 について
- 10:40 内田 毅(岡崎統合バイオ) CO 濃度を感知し、遺伝子の発現を制御するセンサー蛋白質 (NPAS2) の制御メカニズムに関する研究
- 11:20 石森浩一郎(京大院・工) ヘムを情報伝達分子とする制御蛋白質のヘム結合特性とその機能発現の分子機構

座長 石森浩一郎

13:45 宇野公之(熊本大・薬) ヒトニューログロビンの外来性配位子結合性に関わるアミノ酸残基
14:25 神取秀樹(名工大・工) 生物における光情報変換の分子科学
15:05 高橋 聡(阪大・蛋白研) 蛋白質の折り畳運動の実時間観察による研究

座長 藤井 浩

16:15 城 宣嗣(理研播磨研究所) ヘム型酸素添加酵素の構造と機能
16:55 渡辺芳人(名大院・理) 蛋白質空間を利用した物質変換系 金属酵素の分子設計
17:35 林 高史(九大院・工) 非天然ヘム再構成によるヘムタンパク質による機能変換

10月3日(日)

座長 渡辺芳人

09:20 伊東 忍(阪市大院・理) チロシナーゼによる酸素の活性化機構
10:00 千田俊哉(産総研) 芳香族化合物分解に関するジオキシゲナーゼ群の構造と機能
10:40 齋藤正男(東北大・多元研) Control Mechanism of Heme Oxygenase Catalysis
11:20 藤井 浩(岡崎統合バイオ) 基質の配向制御による酵素反応選択性の制御

表面磁性の最近の展開

2004年11月5日(金)~6日(土) 岡崎コンファレンスセンター

11月5日(金)

13:00-13:10 太田俊明(東大院・理) はじめに

座長 今田 真(阪大・基礎工)

13:10-13:40 小口多美夫(広大院・先端物質)
X線磁気円二色性の第一原理計算

13:40-14:10 小野寛太(高工研・物構研)
放射光電子顕微鏡を用いたメゾスコピック磁性体の観察

14:10-14:40 永松伸一(千葉大院・自然)
多重散乱理論による Co/Cu 多層膜の Cu K-edge XMCD 解析

座長 奥田太一(東大・物性研)

15:00-15:30 倉橋光紀、鈴木 拓、山内 泰(物材機構)
スピン偏極安定ヘリウム原子ビームによる最表面磁性研究

15:30-16:00 橋爪弘雄(奈良先端大)
X線磁気分光・散乱による磁性/非磁性多層膜の電子構造研究

16:00-16:30 小出常晴(高工研・物構研)
低次元磁性体における Longitudinal/Transverse 配置角度分解軟 X 線内殻磁気円二色性

座長 澤田正博(広大・放射光)

16:50-17:20 小池和幸^{1,2}、松山秀生¹、孝橋照生³、甲野藤真⁴、十倉好紀^{2,4,5}(¹北大理、²CERC-AIST、³日立、⁴ERATO-JST、⁵東大院工)
スピン偏極 SEM

17:20-17:50 今田 真、山崎篤志、菅 滋正(阪大・基礎工)
鉄のナノ構造のスピン偏極 STM と単原子層の XMCD

17:50-18:20 川越 毅(大教大・教養)
スピン偏極トンネル分光法によるエピタキシャル磁性薄膜の磁気ナノ物性

18:20-18:50 木下豊彦(東大・物性研)
放射光による、磁性薄膜と反強磁性基板における磁区観察

座長 木下豊彦(東大・物性研)

19:20-19:50 松村大樹¹、横山利彦²、雨宮健太¹、太田俊明¹(¹東大院・理、²分子研)
磁性薄膜スピン再配列転移に及ぼす分子吸着の効果

19:50-20:20 針谷喜久雄¹、小林陽介²、高井和之²、榎 敏明²(¹産総研、²東工大)
積層ナノグラファイト系における磁性と電子波干渉現象

20:20-20:50 柿崎明人(東大・物性研)
遷移金属薄膜のスピン分解光電子スペクトル

11月6日(土)

座長 倉橋光紀(物材機構)

09:00-09:30 中川剛志、横山利彦(分子研)
磁性薄膜のスピン再配列転移に関する MOKE, XMCD

09:30-10:00 中村哲也(JASRI)
元素選択磁気ヒステリシス測定の磁性研究への応用

10:00-10:30 中辻 寛、小森文夫(東大・物性研)
窒素吸着銅(001)面上コバルトドットの MCD

座長 中村哲也 (JASRI)

10:50-11:20 高梨弘毅^{1,2}、葉師寺啓^{1,2}、F. Ernult¹、三谷誠司^{1,2} (¹ 東北大・金研、²CREST-JST)
磁性ナノ粒子系におけるスピン依存単一電子トンネル現象

11:20-11:50 岸 智弥、中西 寛、笠井秀明 (阪大院・工)
表面スピントロニクス・デバイスデザイン

11:50-12:20 喜多英治、柳原英人 (筑波大・物工)
Co/Rh 多層膜における磁気異方性と界面歪み

座長 柳原英人 (筑波大・物工)

12:50-13:20 奥野拓也、壬生攻 (京大・低温セ)
ナノ磁性体における磁気渦構造および吹き出し磁化の磁気力顕微鏡観察

13:20-13:50 小嗣真人 (広大・放射光)
光電子顕微鏡 (PEEM) を用いた鉄隕石 (FeNi) の局所構造解析と磁区構造解析

13:50-14:20 雨宮健太 (東大院・理)
深さ分解 XMCD による磁性薄膜の表面・界面の研究

14:20-14:50 木村真一 (分子研)
赤外放射光を用いた磁気光学効果

14:50-15:00 横山利彦 (分子研) おわりに

有機固体の電子的物性・機能およびその応用に関する研究会
2004 年 11 月 12 日 (金) ~ 14 日 (日) 岡崎コンファレンスセンター

November 12 (Friday)

9:00 - 9:10 Opening address

Chairperson: Zhu, Daoben (Institute of Chemistry)

9:10 - 9:50 **Inokuchi, Hiroo** (JAXA) and **Liu, Minghua** (Institute of Chemistry)
Memorial Talk for Prof. Renyuang Qian and Prof. Haruo Kuroda

9:50-10:10 **Qin, Jingui** (Wuhan University)
Intercalation approach for molecular conductive magnet

10:10-10:30 **Kobayashi, Akiko** (University of Tokyo)
Recent progress in development of single-component molecular metals

Chairperson: Sugimoto, Toyonari (Osaka Prefecture University)

10:50-11:10 **Liu, Caiming** (Institute of Chemistry, CAS)
The first metallic conducting ET radical cation salt of polyoxoanion containing tris(alkoxo)ligand: $\beta^{2-}(\text{ET})_5\{\text{MnMo}_6\text{O}_{18}[(\text{OCH}_2)_3\text{CCH}_2\text{OH}]_2\}5\text{H}_2\text{O}$

11:10-11:30 **Kobayashi, Hayao** (Institute for Molecular Science)
Single-component molecular metals—Molecular design and characterization of nano-sized crystals

11:30-11:50 **Shi, Huahong** (South China University of Technology)
Synthesis of rigidly dendric β -diketones and their sensitization of lanthanide ions

11:50-12:10 **Enoki, Toshiaki** (Tokyo Institute of Technology)
Alkanethiol-SAM-coated metal nanoparticles and their electronic properties

Chairperson: Seki, Kazuhiko (Nagoya University)

13:40-14:00 **Jiang, Lei** (Institute of Chemistry, CAS)
Super-hydrophobic surfaces; from natural to artificial

14:00-14:20 **Yamada, Junichi** (University of Hyogo)
Development of new organic conductors by destabilization of the stable metallic state

14:20-14:40 **Liu, Minghua** (Institute of Chemistry, CAS)
Functionalization and supramolecular chirality of some interfacially organized molecular films

14:40-15:00 **Murata, Keizo** (Osaka City University)
Band-filling control and its precise measurement in the two-dimensional organic conductor, τ -(EDO-S,S-DMEDT-TTF)₂AuBr₂ by use of an extremely high magnetic field

Chairperson: Yonemitsu, Kenji (Institute for Molecular Science)

15:20-15:40 **Yang, Chunhe** (Institute of Chemistry, CAS)
High efficiency polymer solar cells

15:40-16:00 **Nasu, Keiichiro** (Institute of Materials Structure Science, KEK)
Photogeneration of charged and conductive ferroelectric domains in quantum dielectric SrTiO₃

16:00-16:20 **Guo, Zhixin** (Institute of Chemistry, CAS)
Electrical properties of soluble carbon nanotube/polymer composite films

16:20-16:40 **Hino, Shoju** (Chiba University)
Ultraviolet photoelectron spectroscopy of multiple atoms encapsulated metallofullerenes

Chairperson: Bai, Fenglian (Institute of Chemistry, CAS)

17:00-17:20 **Ma, Yuguang** (Jilin University)
Experimental and theoretical studies of 2,5-diphenyl-1,4-distyrylbenzenes with all cis- and trans-double bonds: Chemical structure determination and optical properties

- 17:20-17:40 **Kojima, Norimichi** (University of Tokyo)
Pressure- and photo-induced charge transfer phase transition in photo-sensitive iron mixed-valence system,
(SP)[Fe^{II}Fe^{III}(dt)₃](SP = spiropyran, dt = C₂O₂S₂)
- 17:40-18:00 **Shi, Gaoquan** (Tsinghua University)
Electrochemical actuator based on anisotropy polypyrrole film
- 18:00-18:20 **Nakamura, Takayoshi** (Hokkaido University)
Molecular systems for novel molecular devices
- November 13** (*Saturday*)
Chairperson: Wang, Fosong (Chinese Academy of Sciences)
- 9:00 - 9:20 **Peng, Junbiao** (South China University of Technology)
Alcohol/water soluble conjugated polymers for light-emitting device and biosensor
- 9:20 - 9:40 **Sato, Naoki** (Kyoto University)
Electronic structure of 2,5-diarylsilole derivative thin films studied with ultraviolet photoemission and inverse photoemission spectroscopies
- 9:40-10:00 **Pei, Jian** (Peking University)
Rigid star-shaped donor-acceptor molecules with multifullerenes
- 10:00-10:20 **Takimiya, Kazuo** (Hiroshima University)
Synthetic chemical approach to novel materials for organic field-effect transistors
- Chairperson:* Furukawa, Yukio (Waseda University)
- 10:40-11:00 **Hu, Wenping** (Institute of Chemistry, CAS)
Self-assembled conjugated polymer nanojunction
- 11:00-11:20 **Yamashita, Yoshiro** (Tokyo Institute of Technology)
Novel organic field-effect transistors based on unusual heterocyclic compounds
- 11:20-11:40 **Shuai, Zhigang** (Institute of Chemistry, CAS)
Theoretical investigation of organic light-emitting materials
- 11:40-12:00 **Yonemitsu, Kenji** (Institute of Molecular Science)
Theory of field effects on one-dimensional organic Mott insulators
- Chairperson:* Nakasuji, Kazuhiro (Osaka University)
- 13:40-14:00 **Wang, Lixiang** (Institute of Chemistry, CAS)
Highly efficient white electroluminescence from a single polyfluorene containing naphthalimide moieties
- 14:00-14:20 **Tokumoto, Madoka** (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)
Nonlinear optical property of carbon nanotubes and its application as saturable absorbing device for optical fiber communication
- 14:20-14:40 **Yan, Donghang** (Changchun Institute of Applied Chemistry)
Organic transistors having a buffer layer of LiPc
- 14:40-15:00 **Kanai, Kaname** (Nagoya University)
Electronic structure of doped organic semiconducting film
- Chairperson:* Li, Yongfang (Institute of Chemistry)
- 15:20-15:40 **Tian, He** (East China University of Science and Technology)
A novel fluorescent naphthalimide chemodosimeter for mercury based on thiourea
- 15:40-16:00 **Yamashita, Masahiro** (Tohoku University)
Gigantic optical nonlinearity in Mott-Hubbard nano-wires
- 16:00-16:20 **Zhang, Deqing** (Institute of Chemistry, CAS)
New molecular switches and logic gates based on TTF and photochromic spiropyrans
- 16:20-16:40 **Shirota, Yasuhiko** (Osaka University)
Amorphous molecular materials for organic electroluminescent devices
- 16:40-17:00 **Li, Yuliang** (Institute of Chemistry, CAS)
Synthesis and properties of one-dimensional organic nanomaterials
- 17:00-17:20 **Naito, Toshio** (Hokkaido University)
A new way of conversion of molecular crystals into molecular devices using optical doping method
- 19:00-21:00 *poster session*
- November 14** (*Sunday*)
Chairperson: Yakushi, Kyuya (Institute for Molecular Science)
- 9:00 - 9:20 **Song, Yanlin** (Institute of Chemistry, CAS)
Organic thin films for ultrahigh density information storage
- 9:20 - 9:40 **Ogawa, Takuji** (Institute for Molecular Science)
Preparation of nano-structures for molecular electronics
- 9:40-10:00 **Chen, Hongzheng** (Zhejiang University)
Organic n-type semiconductor based on fluorinated perylene diimides
- 10:00-10:20 **Tada, Hirokazu** (Institute for Molecular Science)
Visible light emission from polymer-based field-effect transistors

10:20-10:40	Liu, Yunqi (Institute of Chemistry, CAS) Electronic devices based on multiwalled carbon nanotubes
10:40-11:00	Maruyama, Yusei (Hosei University) DNA, fullerene/CNT hybrid materials studied by STM/STS
11:00-11:10	<i>closing remark</i> Zhu, Daoben (Institute of Chemistry, CAS)

(4) UVSOR 施設利用

(前期)

低級炭化水素の脱水素触媒に有効な担持モリブデン触媒活性種の L-XANES による微細構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
窒化学半導体の Al-K 内殻励起による可視・紫外発光 2	金沢大学工学部	直江 俊一
粒子線照射によるシリカの照射損傷過程の解明 (2)	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
岩塩型 MgO-ZnO 固溶体に形成される短範囲秩序の ZnO-L3 端 XANES による評価	京都大学大学院工学研究科	田中 功
ZnO:Al 過飽和固溶体からの相分離過程の XANES	京都大学大学院工学研究科	田中 功
陽極酸化により Ti 表面に生成する低結晶リン酸カルシウムの局所構造解明	京都工芸繊維大学工学部	中平 敦
XAFS 測定によるハロゲン架橋白金混合原子価錯体の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
多孔性シリコン・カーバイドの局所構造に関する研究	佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター	東 純平
ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸収・発光および寿命測定	早稲田大学理工学部	大木 義路
極紫外光照射による無機蛍光体の励起現象	新潟大学工学部	太田 雅壽
希土類イオンを添加したイオン結晶の真空紫外分光	岐阜大学工学部	山家 光男
放射光とレーザーを用いた Cs 化合物の内殻 2 光子励起	大阪歯科大学歯学部	辻林 徹
真空紫外光用蛍光材料の発光・励起スペクトルの測定	大阪女子大学理学部	河相 武利
水素結合型強誘電体の真空紫外分光	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
酸素高圧凝集相の紫外分光と光化学反応	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	赤浜 裕一
タングステン酸塩における励起子帯の微細構造の研究	海上保安大学校	藤田 正実
表面修飾単分散金属ナノ粒子の高分解能光電子分光	神戸大学工学部	田中 章順
Fe-V-Al 合金および Zr-Al-Ni-Cu 合金の価電子帯電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
酸化物高温超伝導体の超伝導遷移温度におよぼす電子構造の次元性に関する研究	名古屋大学難処理人工物研究センター	竹内 恒博
UVSOR 光によるアミノ酸の絶対不斉合成	(独) 科学技術振興機構	井上 佳久
Fe/Cs/GaAs を中心とした金属 / 半導体薄膜の表面状態の研究 II	香川大学教育学部	高橋 尚志
擬一次元有機導体(TMTCF) ₂ X の低エネルギー励起角度分解光電子分光	分子科学研究所	伊藤 孝寛
BL5U におけるビームライン高精度化とそれに伴う整備	分子科学研究所	伊藤 孝寛
広帯域(200 ~ 25 nm)多層膜の熱負荷安定性の評価	東北大学多元物質科学研究所	江島 丈雄
広帯域反射多層膜回折格子の性能評価	秋田県高度技術研究所	近藤 祐治
希ガス固体表面に形成される水クラスターの光励起脱離機構の解明	学習院大学理学部	荒川 一郎
水星探査衛星搭載用多層膜グレーティングと光検出器の開発	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究本部	吉川 一朗
窒化物半導体の内殻励起による可視・紫外発光	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
アモルファス半導体の光誘起透過スペクトル変化に関する研究	岐阜大学工学部	林 浩司
GaN 系紫外線受光素子の軟 X 線領域での受光特性研究	三重大学工学部	元垣内敦司
アミノ酸の XAES スペクトル測定	神戸大学発達科学部	中川 和道
ピスマスクラスタの金属 - 半導体転移	富山大学理学部	池本 弘之
ミリ波分光による Li 2 次電池材料の研究	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	太田 仁
金属絶縁体物質 FeS の赤外スペクトル	神戸大学大学院自然科学研究科	難波 孝夫
量子常誘電体 SrTiO ₃ 及び KTaO ₃ のミリ波分光	神戸大学大学院自然科学研究科	岡村 英一
有機超伝導体のキャリアダイナミクス	分子科学研究所	木村 真一
BL6B の立ち上げ・整備	分子科学研究所	木村 真一
拡散接合化合物半導体の界面制御	分子科学研究所	庄司 一郎
AlN 及び AlGaN の発光励起と時間分解測定	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
ヨウ素酸リチウム結晶における超イオン相転移と発光の温度相関	福井工業高等専門学校	北浦 守
GaN 系紫外線受光素子の受光特性研究	三重大学工学部	平松 和政
紫外光ナノフォトニック結晶の光学的特性評価	三重大学工学部	元垣内敦司
コロジオン法によるアミノ酸の VUV 吸収スペクトル測定	神戸大学発達科学部	蛭名 邦植

金属絶縁体物質 FeS の可視 - 真空紫外スペクトル	神戸大学大学院自然科学研究科	難波 孝夫
希土類強相関物質の真空紫外反射分光	神戸大学大学院自然科学研究科	岡村 英一
イオン運動量観測装置の調整と性能評価	分子科学研究所	彦坂 泰正
SR 光を用いたナノ構造体の形成及び評価	名古屋大学大学院工学研究科	堀 勝
シンクロトロン光を用いた化合物半導体のエッチング特性	佐賀大学理工学部	西尾 光弘
窒化物半導体の N-K 内殻励起による可視・紫外発光	金沢大学工学部	直江 俊一
アモルファスカーボンおよびカーボンナイトライドの局所構造評価	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所	神田 一浩
遷移金属を含む強相関電子系の真空紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	十倉 好紀
VUV 光シンチレーターの評価	分子科学研究所	猿倉 信彦
XAFS 測定によるポルフィリン化合物の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
VUV 光シンチレータの評価	分子科学研究所	猿倉 信彦
高出力型リチウム二次電池の長期試験後の正極材料の表面構造変化の解析	(独) 産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
高出力型リチウム二次電池の長期試験後の正極材料の表面構造変化の解析	(独) 産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
CeNi _{1-x} Co _x Ge ₂ の電子状態の X 依存性	分子科学研究所	KWON, Yong-seung
BL8B1 整備	分子科学研究所	彦坂 泰正
フォトマスク付着物質の真空紫外吸収スペクトル (2)	神戸大学発達科学部	中川 和道
ヨウ素酸リチウム結晶における光キャリアダイナミクス	福井工業高等専門学校	北浦 守
イオン運動量観測装置を用いた分子光イオン化研究	分子科学研究所	彦坂 泰正
Li-Ni-Mn-O 系層状酸化物のリチウム脱離に伴う電子状態変化の解明	(独) 産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
Li-Ni-Mn-O 系層状酸化物のリチウム脱離に伴う電子状態変化の解明	(独) 産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
(後期)		
低級炭化水素の脱水素触媒に有効な担持モリブデン触媒活性種の L-XANES による微細構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
窒化学半導体の Al-K 内殻励起による可視・紫外発光 2	金沢大学工学部	直江 俊一
粒子線照射によるシリカの照射損傷過程の解明 (2)	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
岩塩型 MgO-ZnO 固溶体に形成される短範囲秩序の ZnO-L3 端 XANES による評価	京都大学大学院工学研究科	田中 功
陽極酸化により Ti 表面に生成する低結晶リン酸カルシウムの局所構造解明	京都工芸繊維大学工学部	中平 敦
XAFS 測定によるハロゲン架橋白金混合原子価錯体の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸収・発光および寿命測定	早稲田大学理工学部	大木 義路
極紫外光照射による無機蛍光体の励起現象	新潟大学工学部	太田 雅壽
希土類イオンを添加したイオン結晶の真空紫外分光	岐阜大学工学部	山家 光男
真空紫外光用蛍光材料の発光・励起スペクトルの測定	大阪女子大学理学部	河相 武利
水素結合型強誘電体の真空紫外分光	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
Fe-V-Al 合金および Zr-Al-Ni-Cu 合金の価電子帯電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
酸化物高温超伝導体の超伝導遷移温度におよぼす電子構造の次元性に関する研究	名古屋大学難処理人工物研究センター	竹内 恒博
UVSOR 光によるアミノ酸の絶対不斉合成	(独) 科学技術振興機構	井上 佳久
TM/GaAs(100)(TM = Ti, Cr)における表面光誘起起電力効果	佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター	鎌田 雅夫
擬一次元有機導体(TMTCF) ₂ X の低エネルギー励起角度分解光電子分光	分子科学研究所	伊藤 孝寛
BL5U におけるビームライン高精度化とそれに伴う整備	分子科学研究所	伊藤 孝寛
希ガス固体表面に形成される水クラスターの光励起脱離機構の解明	学習院大学理学部	荒川 一郎
水星探査衛星搭載用多層膜グレーティングと光検出器の開発	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究本部	吉川 一朗
窒化物半導体の内殻励起による可視・紫外発光	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
アモルファス半導体の光誘起透過スペクトル変化に関する研究	岐阜大学工学部	林 浩司
GaN 系紫外線受光素子の軟 X 線領域での受光特性研究	三重大学工学部	元垣内敦司
アミノ酸の XAES スペクトル測定	神戸大学発達科学部	中川 和道
ピスマスクラスターの金属・半導体転移	富山大学理学部	池本 弘之
ミリ波分光による Li 2 次電池材料の研究	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	太田 仁
量子常誘電体 SrTiO ₃ 及び KTaO ₃ のミリ波分光	神戸大学大学院自然科学研究科	岡村 英一
BL6B の立ち上げ・整備	分子科学研究所	木村 真一
AlN 及び AlGaIn の発光励起と時間分解測定	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
GaN 系紫外線受光素子の受光特性研究	三重大学工学部	平松 和政
紫外光ナノフォトニック結晶の光学的特性評価	三重大学工学部	元垣内敦司

コロジオン法によるアミノ酸のVUV吸収スペクトル測定	神戸大学発達科学部	蛭名 邦禎
希土類強相関物質の真空紫外反射分光	神戸大学大学院自然科学研究科	岡村 英一
イオン運動量観測装置の調整と性能評価	分子科学研究所	彦坂 泰正
SR光を用いたナノ構造体の形成及び評価	名古屋大学大学院工学研究科	堀 勝
シンクロトロン光を用いた化合物半導体のエッチング特性	佐賀大学理工学部	西尾 光弘
窒化物半導体のN-K内殻励起による可視・紫外発光	金沢大学工学部	直江 俊一
遷移金属を含む強相関電子系の真空紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	十倉 好紀
XAFS測定によるポルフィリン化合物の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
高出力型リチウム二次電池の長期試験後の正極材料の表面構造変化の解析	(独)産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
高出力型リチウム二次電池の長期試験後の正極材料の表面構造変化の解析	(独)産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
Li-Ni-Mn-O系層状酸化物のリチウム脱離に伴う電子状態変化の解明	(独)産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
Li-Ni-Mn-O系層状酸化物のリチウム脱離に伴う電子状態変化の解明	(独)産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
AlInNの構造解析に関する研究	佐賀大学理工学部	郭 其新
陽極酸化によりTi表面に生成するチタニア中のPの局所構造解明	京都工芸繊維大学工学部	中平 敦
モリブデン酸塩の真空紫外分光	海上保安大学校	藤田 正実
表面修飾単分散Siナノ粒子の高分解能光電子分光	神戸大学工学部	田中 章順
Fe/Cu(001)超薄膜へのK吸着による磁性変化	分子科学研究所	中川 剛志
25~35nm用反射多層膜の耐熱安定性及び経年変化安定性の評価	東北大学多元物質科学研究所	江島 丈雄
回折格子多層膜の評価	佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター	東 純平
反強磁性転移物質GdRu ₄ P ₁₂ の遠赤外スペクトル	神戸大学大学院自然科学研究科	難波 孝夫
高圧下テラヘルツ分光法の開発	分子科学研究所	木村 真一
フォトマスク付着物質の真空紫外吸収スペクトルの絶対値校正	神戸大学発達科学部	中川 和道
PZT薄膜の光学特性計測	静岡大学電子工学研究所	Jan MISTRİK
酸素高圧凝集相の紫外分光と光化学反応	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	赤浜 裕一
金属絶縁体物質CuRh ₂ S ₄ の可視-真空紫外スペクトル	神戸大学大学院自然科学研究科	難波 孝夫
カドミウムハライド結晶における真空紫外領域でのエネルギー緩和過程の研究	福井大学工学部	中川 英之
アパタイト関連化合物の真空紫外分光	福井工業高等専門学校	北浦 守
反応性スパッタリング法により作製した酸化物薄膜のVUV吸収スペクトルの測定	明治大学理工学部	松本 節子
分子ラジカルの内殻励起状態の分光を目指した測定システムの調整	広島大学大学院理学研究科	和田 真一
カーボン含有構造物および薄膜の構造解析	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所	神田 一浩
赤外反射吸収分光によるAlq ₃ 薄膜と金属界面の相互作用の研究	分子科学研究所	櫻井 陽子
InNのフォノンモード測定	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
水溶液表面での光イオン化	九州大学大学院総合理工学研究院	原田 明

(5) 施設利用

分子制御レーザー開発研究センター

(前期)

芳香族有機分子の高分解能超音速ジェット分光 京都大学大学院理学研究科 馬場 正昭

(後期)

芳香族有機分子の高分解能超音速ジェット分光 京都大学大学院理学研究科 馬場 正昭

分子スケールナノサイエンスセンター

(前期)

光学活性なシリルおよびゲルミル置換遷移金属錯体の構造と反応性に関する研究 学習院大学理学部 南条真佐人

電子スピン共鳴による(DMe-DCNQI)₂Aなどのスピンドイナミクス 東京都立大学大学院理学研究科 溝口 憲治

歪んだポルフィリン鉄錯体における磁気的性質に関する研究 東邦大学医学部 中村 幹夫

新規ナノ炭素系物質の構造と電子物性の解明 法政大学工学部 緒方 啓典

複雑系金属酵素の活性中心と反応 金沢大学理学部 櫻井 武

ランガサイト型圧電単結晶の構造解析に基づく圧電特性発現機構の解明 名古屋工業大学大学院工学研究科 大里 齊

アモルファス合金の磁気特性および熱的安定性に関する研究 名古屋工業大学大学院工学研究科 山田 正明

機能性金属錯体の構造決定	愛知教育大学教育学部	中島 清彦
希土類マンガナイトの物性研究	豊橋技術科学大学工学部	亀頭 直樹
ワイドバンドギャップ半導体薄膜の物性評価	豊橋技術科学大学工学部	若原 昭浩
有機分子および錯体のX線結晶構造解析	兵庫県立大学大学院工学研究科	北村 千寿
フラーレン化合物 $K_xCs_{3-x}C_{70}$ ($x = 0, 1, 2, 3$) の ESR と SQUID	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	小林 本忠
新規系拡張ポルフィリン誘導体の合成と構造に関する研究	愛媛大学理学部	小野 昇
Co 超微粒子系の磁性	三重大学教育学部	佐光三四郎
準結晶の磁性	名古屋大学大学院情報科学研究科	松尾 進
金属酵素活性中心モデル錯体の構造と機能	名古屋工業大学大学院工学研究科	山口 修平
相溶性ポリマーブレンド中における動的不均一性	名古屋工業大学大学院工学研究科	嶋田 繁隆
スピンプローブ法による氷中水分子の運動性の評価	名古屋経済大学短期大学部	坂口 真人
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
常磁性金属を有するポルフィリン多量体の合成と物性	京都大学大学院理学研究科	大須賀篤弘
食品に含まれる抗酸化機能成分の精製・単離と構造解析および抗酸化機能評価	名古屋経済大学短期大学部	長島 万弓
高次構造を有する金属錯体の合成とその動的構造に関する研究	静岡大学理学部	近藤 満
有機金属含有タンパク質における金属イオンの構造と電子状態の解析	名古屋大学大学院理学研究科	中島 洋
有機伝導体、有機磁性体、および磁性有機伝導体の磁気的性質の研究	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	坏 広樹
希土類薄膜磁石の磁気特性に関する研究	名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センター	安達 信泰
光合成タンパク質結晶の電子スピン共鳴測定	城西大学理学部	加藤 立久
(R, A)CoO ₃ (R = La, Pr, Nd, Sm; A = Ca, Sr, Ba) および $A_{n+2}Co_{n+1}O_{3n+3}$ (A = Ca, Sr, Ba, $n = 1 \sim 5$) の Co のスピン状態と価数	名古屋大学大学院工学研究科	高見 剛
光合成タンパク質結晶の電子スピン共鳴測定	岡山大学理学部	沈 建仁
水分解酵素 Mn クラスターの構造と磁性の多重周波数 EPR による研究	関西学院大学理工学部	河盛阿佐子
(後期)		
ケイ素およびゲルマニウムを主骨格または配位子に用いた自己集合型分子の構造解析	学習院大学理学部	南条真佐人
(R, A)CoO ₃ (R = La, Pr, Nd, Sm; A = Ca, Sr, Ba) および $A_{n+2}Co_{n+1}O_{3n+3}$ (A = Ca, Sr, Ba) のコバルトスピン状態と熱電特性に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	高見 剛
機能性金属錯体の構造と反応性の制御	愛知教育大学教育学部	中島 清彦
希土類マンガナイトの物性研究	豊橋技術科学大学工学部	亀頭 直樹
有機化合物および金属錯体のX線結晶構造解析	兵庫県立大学大学院工学研究科	北村 千寿
新規系拡張ポルフィリン誘導体の合成と構造に関する研究	愛媛大学理学部	小野 昇
歪んだポルフィリン鉄(III)錯体における $S = 3/2$ 、 $S = 1/2$ 間のスピנקロスオーバーの研究	東邦大学医学部	中村 幹夫
局所的トポロジカル構造を持つ準結晶及びその関連結晶の磁性	北海道大学大学院工学研究科	柏本 史郎
ナノ炭素状物質の合成と構造および物性研究	法政大学工学部	緒方 啓典
マイクロ波材料用磁性ガーネット薄膜の合成と評価	名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センター	安達 信泰
相溶性ポリマーブレンド中における動的不均一性の検出	名古屋工業大学大学院つくり領域	嶋田 繁隆
有機金属含有タンパク質における金属イオンの構造と電子状態の解析	名古屋大学大学院理学研究科	中島 洋
Co 超微粒子の磁性	三重大学教育学部	佐光三四郎
金属酵素活性中心モデル錯体の構造と機能	名古屋工業大学	奥村 健志
ポリフィリンオリゴマーの合成と構造	愛媛大学総合科学研究支援センター	宇野 英満
Q-band EPR 分光器を使用し、紫外レーザーを照射したシリカガラスに生じた点欠陥の EPR シグナルの g 値と超微細構造テンソルを正確に決定する	東京工業大学フロンティア創造共同研究センター	細野 秀雄
アモルファス合金の磁気特性と熱的安定性に関する研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	山田 正明
金属酵素による窒素酸化物の変換メカニズム	金沢大学大学院自然科学研究科	櫻井 武
食品に含まれる機能性成分の精製・単離と構造解析および機能性評価	名古屋経済大学短期大学部	長島 万弓
機能性有機材料の磁化率測定	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	坏 広樹
装置開発室		
(前期)		
有機 EL 変調素子の開発	北陸先端科学技術大学院大学	三谷 忠興

計算機利用

分子内および分子間電荷移動の分子軌道法による研究	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
分子、生物、表面の量子化学：励起状態と化学反応	京都大学大学院工学研究科	中辻 博
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	京都大学大学院工学研究科	榊 茂好
化学反応の分類および分子設計に関する理論的研究	大阪産業大学工学部	酒井 章吾
生体分子の構造と機能に関する理論的研究	広島大学大学院理学研究科	相田美砂子
遷移金属化合物および合金の電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	森永 正彦
ナノ構造体の原子構造と伝導現象	筑波大学物理学系	押山 淳
有機反応の経路と微視的機構	大阪大学産業科学研究所	山高 博
活性アルキル基の反応性の分子軌道法による検討	福岡大学薬学部	新矢 時寛
計算化学による加水分解経路の追跡	奈良教育大学教育学部	山邊 信一
分子の励起状態とその動的挙動の研究	大学評価・学位授与機構評価研究部	岩田 末廣
面選択性に関する理論研究、エノラートのアルキル化反応、求電子付加反応	東京大学大学院総合文化研究科	友田 修司
シクロデキストリンのウラシル系分子の包接効果に関する研究	茨城大学理学部	寺阪 利孝
水溶液中におけるイオンの構造	岡山大学歯学部	正村真佐雄
低次元強相関電子系物質の特異な電子状態に関する数値的研究	千葉大学理学部	太田 幸則
気相および液相における化学反応の理論的研究	京都大学大学院理学研究科	加藤 重樹
DNA 素子自己組織化の第一原理計算	鳥取大学工学部	石井 晃
メゾスコピック系における量子干渉効果及び電子相関	山形大学教育学部	野々山信二
分子の構造、力場と内部回転エネルギーの ab initio 計算	北海道大学大学院理学研究科	竹内 浩
層状人口格子における磁気円二色性	奈良県立医科大学医学部	平井 國友
分子軌道法による反応予測を基盤とする新有機反応の開発	東京大学大学院理学研究科	中村 栄一
熱化学反応及び光化学反応に関する理論的研究	広島大学大学院理学研究科	齊藤 昊
化合反応の量子ダイナミクスに関する理論的研究	東京大学大学院工学研究科	山下 晃一
第一原理電子構造理論の拡張と物質設計	東京大学工学系研究科	藤原 毅夫
分子軌道計算による有機反応設計および分子構造設計のための電子構造予測	東京大学大学院薬学系研究科	大和田智彦
分子磁性体の分子軌道法による理論解析及び新規手法の開発	大阪大学大学院理学研究科	山口 兆
気相及び凝縮相における光化学反応に関する理論的研究	秋田大学工学資源学部	天辰 禎晃
分子の電子状態と化学反応のポテンシャル面の理論的研究	名古屋大学大学院人間情報学研究所	古賀 伸明
溶液内化学反応の理論研究	名古屋大学大学院理学研究科	大峰 巖
フラーレン・ナノチューブ系の分子物性と固体物性の総合研究	東京工業大学理工学研究科	斎藤 晋
励起状態とその緩和過程に関する理論的研究	慶應義塾大学理工学部	藪下 聡
金属原子・分子相互系の幾何構造・電子構造の解明とポテンシャル曲面の解析	東北大学大学院理学研究科	大野 公一
遷移系列イオンを含む化合物の反応制御に関する理論研究	岐阜大学地域科学部	和佐田裕昭
気相および星間空間での多原子分子が関与する化学反応の量子化学的・反応動力学的研究	静岡大学理学部	相原 惇一
超純水と相互作用する材料表面現象の第一原理シミュレーション	大阪大学大学院工学研究科	後藤 英和
新規なケイ素化合物の ab initio 分子軌道法による研究	群馬大学工学部	工藤 貴子
第一原理電子論による新奇量子材料の計算物質探索	早稲田大学理工学部	武田京三郎
種々の分子及び分子集合体の赤外・ラマン強度と電子・振動相互作用および分子間相互作用	静岡大学教育学部	鳥居 肇
金属錯体ナノ空孔内での有機反応に関する理論研究	琉球大学教育学部	安藤 香織
固体触媒および生体分子における励起ダイナミクスと反応メカニズムに関する理論的研究	早稲田大学理工学部	中井 浩巳
単一アミノ酸ポテンシャル (SAAP) 力場の開発	東海大学理学部	岩岡 道夫
ナノネットワーク炭素系物質の構造と電子状態についての第一原理的研究	筑波大学物理学系	岡田 晋
分子動力学シミュレーションに基づく自由エネルギー計算法による蛋白質と核酸の機能と物性の物理化学的研究	弘前大学理工学部	斎藤 稔
アクチノイドイオンの水和反応の量子化学的検討	名古屋大学大学院工学研究科	津島 悟
環境関連有機化学および有機金属化学反応の設計および開発	茨城大学理学部	森 聖治
金属フタロシアニンの分子構造と電子状態に関する理論的研究	熊本大学理学部	藤本 斉
機能性有機材料の電子物性解析に関する理論的研究	京都大学大学院工学系研究科	田中 一義
高分子濃厚系における 1 本の高分子鎖の動的性質	慶應義塾大学理工学部	萩田 克美
開口部にメチレン炭素ユニットを導入した開口 C ₆₀ 誘導体の構造決定、及び物性の予測	名古屋大学大学院環境学研究所	岩松 将一

第一原理計算によるナノクラスターの新しい側面	横浜国立大学工学研究院	大野かおる
拡張アンサンブルシミュレーションによる高分子系の研究	慶應義塾大学理工学部	光武亜代理
シッフ塩基遷移金属錯体を触媒とする反応機構の理論解析	慶應義塾大学理工学部	池野 健人
蛋白質の動的構造と機能の解析	横浜市立大学大学院総合理学研究科	木寺 詔紀
分子軌道計算による不斉活性化機構の解明及び自己集合性不斉活性化触媒の開発	東京工業大学大学院理工学研究科	三上 幸一
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	東京都立大学理学研究科	波田 雅彦
溶液系およびイオン液体の電子および分子構造に関する研究	東京大学大学院理学系研究科	浜口 宏夫
半導体ナノ構造形成機構の解明と新機能ナノ構造体の設計	筑波大学物理学系	白石 賢二
機能性複合化金属錯体の励起状態と光応答機能に関する電子論的研究	熊本大学大学院自然科学研究科	杉本 学
第一原理分子動力学法による液体金属及び液体半導体の物性研究	(独)産業技術総合研究所計算科学研究部門	森下 徹也
フェレドキシンタンパク活性部位の電子状態および磁性	金沢大学理学部	小田 竜樹
Pt(111)上におけるシクロヘキサンの脱水素反応に関する理論的研究	大阪大学大学院工学研究科	津田 宗幸
光酸化還元反応によるプロトントンネルの制御を利用した新規光スイッチ分子の理論設計	九州大学大学院総合理工学研究科	三好 永作
生体超分子の立体構造変化と機能	東京大学分子細胞生物学研究所	北尾 彰朗
半導体ナノ構造における酸化反応の理論的研究	三重大学工学部	秋山 亨
気相(分子)・固相(半導体)界面での分子ヘテロ成長過程の第一原理電子論	早稲田大学理工学部	宮城島 規
第一遷移系金属イオンを中心とする配位化合物の反応におけるd電子の効果に関する理論的研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	和佐田祐子
ベンザインを用いる有機合成反応における機構解明	東京工業大学大学院理工学研究科	鈴木 啓介
低原子価六族金属カルボニル錯体を触媒とする炭素骨格構築反応の機構解明	東京工業大学大学院理工学研究科	岩澤 伸治
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計算科学研究部門	Dmitri Fedorov
分子軌道計算を基盤とする複核金属触媒の設計と開発	東京工業大学大学院理工学研究科	山中 正浩
生体分子の構造と機能に関する理論化学的研究	東京工業大学大学院生命理工学研究科	櫻井 実
固体表面上の生体分子認識反応系の構築と構造解析	分子科学研究所	宇理須恒雄
胆汁酸ミセルのMDシミュレーション	大分大学教育福祉学部	中島 俊男
計算機実験による液体の相分離ダイナミクス	東北大学大学院理学研究科	福村 裕史
シリコン表面吸着分子の分光と反応の理論的解析	九州大学情報基盤センター	青柳 睦
タンパク質の折り畳みに対する溶媒効果の分子論的研究	福岡大学理学部	山口 敏男
ビニルラジカルのポテンシャル曲面と運動の理論的研究	九州大学大学院理学研究院	田中 桂一
分子の電子状態と反応動力学に関する理論的研究	分子科学研究所	南部 伸孝
分子の動的諸過程の理論的研究	分子科学研究所	中村 宏樹
クラスターの電子構造と幾何構造	分子科学研究所	西 信之
導電性有機物質の構造と物性の研究	分子科学研究所	薬師 久弥
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	分子科学研究所	岡本 祐幸
分子性伝導体の構造と電子状態	分子科学研究所	小林 速男
量子および古典凝集系に対する計算機シミュレーション	計算科学研究センター	岡崎 進
内部官能基を持つかご状化合物の分子動力学	分子科学研究所	永田 央
ポウル型共役化合物の物性調査	分子科学研究所	櫻井 英博
界面非線形分光の理論	計算科学研究センター	森田 明弘
偏光赤外吸収分光法を用いたアミロイドフィブリルの分子構造の解明	岡崎総合バイオサイエンスセンター	平松 弘嗣
透過型電子顕微鏡による1分子DNA配列解析のための人工核酸塩基プロープの開発	計算科学研究センター	片岡 正典
近赤外分光顕微鏡と核磁気共鳴画像を用いた、光刺激に対するヘモグロビン濃度とBOLD信号応答の同時計測	生理学研究所	豊田 浩士
金属錯体に関する理論的研究	静岡理工科大学理工学部	関山 秀雄
ヘモグロビンの構造と機能の研究	東海大学総合科学技術研究所	妹尾 康喜
有機ラジカルの電子状態のab initio MO計算	奈良女子大学理学部	竹内 孝江
有機分子を用いた単分子素子の量子輸送特性の理論的研究	東京大学大学院理学系研究科	田上 勝規
励起状態を生成するペニングイオン化の生成過程	新潟大学理学部	徳江 郁雄
電子状態も考慮した分子動力学シミュレーションによる固体物性の研究	慶應義塾大学理工学部	能勢 修一
非線形量子系におけるソリトンとカオス	鈴鹿国際大学国際学部	大野 稔彦
化学反応のab initio計算による研究	愛媛大学理学部	長岡 伸一
表面・薄膜・クラスターの電子状態と反応過程	姫路工業大学理学部	島 信幸

金属クラスターイオンの構造解明と反応性の解釈	豊田工業大学	近藤 保
分子シミュレーションによる分子集合体の研究	名古屋文理大学情報文化学部	本多 一彦
プラズマおよび熱 CVD の非経験的分子軌道法及び実験による研究	横浜国立大学工学部	佐藤 浩太
負イオンラジカル反応における反応試剤と生成物の構造と安定性	東京大学大学院総合文化研究科	永田 敬
炭素系星間分子の分子構造および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
チオキナクリドン誘導体の結晶構造と電子構造	横浜国立大学大学院工学研究院	千住 孝俊
内部回転を持つ分子の回転スペクトルの解析	明治大学理工学部	小田島仁司
ab initio MO 法による芳香族クラスターの研究	日本原子力研究所物質科学研究部	佐伯 盛久
有機単原子層の電子構造	東京農工大学工学部	尾崎 弘行
ピノキシ型ラジカルの励起状態における無輻射遷移機構	(財)産業創造研究所柏研究所	山口 真
ab initio 分子軌道法による - シアル酸、 - ガラクトース、及びシアリル ガラクトースのコンホメーション解析	岐阜大学大学院連合農学研究科	澤田 敏彦
電子状態計算によるタンパク質・低分子間相互作用解析	京都大学大学院薬学研究科	仲西 功
動的クラスター近似を用いた強相関電子系の研究	名古屋大学大学院理学研究科	平島 大
ジオキセタノンの分解に伴うホタルオキシシルシフェリンの高効率電子励起 生成反応素過程の量子化学計算	湖北短期大学情報メディア学科	小田井 圭
芳香族カルボニル分子の回転異性体	宮崎大学医学部	伊藤 隆夫
ナノサイズ・チャンネルを透過する荷電高分子の分子動力学研究	核融合科学研究所研究・企画情報セン ター	田中 基彦
円偏光軟 X 線のアミノ酸への作用に関する理論的研究	神戸大学大学院人間科学研究科	沖山 佳生
固相・液相・ガス相ヘリウム中の原子・イオンの分光	富山大学理学部	森脇 喜紀
分子の電子状態と分子スペクトル	岐阜薬科大学薬学部	宇野 文二
分子のひずみを介した有機固相反応の計算機シミュレーション	慶應義塾大学理工学部	フジヤール 芳代
蛋白質の構造機能相関計算	立命館大学情報理工学部	高橋 卓也
シトクロム c 酸化酵素の P 中間体の電子状態の理論的研究	岡崎統合バイオサイエンスセンター	太田 雄大
シトクロム c 酸化酵素の高原子価中間体に関する理論的研究	岡崎統合バイオサイエンスセンター	バウエル コロアスキー
有機導体の電子物性とスピン構造	分子科学研究所	古川 貢
シトクロム c 酸化酵素 Cu _B サイトモデル錯体の紫外共鳴ラマンスペクトル 生体分子の量子化学的、情報化学的研究	岡崎統合バイオサイエンスセンター	長野 恭朋
大規模系の分子軌道計算法の開発と金属を含む小さな分子の精密非経験的 分子軌道計算	東京大学生産技術研究所	佐藤 文俊
ビニルアントラセンの基底・励起状態における揺れ運動に関する量子化学 計算	(独)産業技術総合研究所グリッド研究 センター	長嶋 雲兵
動的界面の存在する非平衡現象の研究	星薬科大学薬学部	坂田 健
分子内水素結合の研究	名古屋大学大学院情報学研究科	渡辺 宙志
金属錯体の構造・反応・電子遷移に関する理論的研究	弘前大学理工学部	須藤 進
溶媒和クラスターの微視的構造と反応ダイナミックスの研究	お茶の水女子大学理学部	鷹野 景子
数理モデルによる生物の分岐パターン形成機構の解明	神戸大学理学部	富宅喜代一
フラビン酵素の反応機構に関する研究	基礎生物学研究所	遠矢 周作
Tight Binding 分子動力学によるカーボンナノチューブの構造欠陥のシミュ レーション	(独)産業技術総合研究所計算科学部門	崔 隆基
QM/MM 法によるタンパク質全原子計算から振動スペクトルを解析する	横浜市立大学総合理学研究科	若生 啓
数理モデルによる生物の分岐パターン形成機構の解明	東北大学多元物質科学研究所	海野 雅司
密度汎関数法を用いた半導体薄膜の電子状態と輸送特性の第一原理的研究	横浜市立大学総合理学研究科	岡田 勇
多量体分子クラスターの分子間ポテンシャル	慶應義塾大学理工学部	山内 淳
安定な発分化を作り出す遺伝子ネットワーク構造の数理的解明	九州大学理学研究院	原田 賢介
一次元格子熱伝導系における定常速度の漸近的振舞いと局所平衡	基礎生物学研究所	望月 敦史
数値シミュレーションによる分光スペクトルの計算	大阪府立大学大学院工学研究科	上田 彰
	京都大学大学院理学研究科	谷村 吉隆

2-10-3 共同研究実施件数一覧

分子科学研究所共同研究実施一覧

年度 項目	'76~'97		'98		'99		'00		'01		'02		'03		'04		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	77	612	1	5	1	5	2	12	7	41	5	36	5	70	3	33	人数： 登録人数
協力研究	2,697	2,984	107	157	115	212	119	249	100	223	125	253	101	246	100	265	"
招へい 協力研究	186	186	0	0	0	0	2	3	5	6	1	1	1	1	0	0	"
所長 招へい	1,711	1,711	139	139	321	321	264	264	385	3857	313	313	308	308	67	67	人数： 旅費支給者
研究会	219	3,068	5	84	12	194	13	276	6	129	11	332	8	229	13	241	"
施設利用 I	1,322	2,802	50	151	49	135	54	142	49	139	63	188	54	150	50	145	件数： 許可件数 人数： 許可人数
電子計算機 施設利用 (施設利用II)	3,121	9,271	174	680	167	654	156	631	144	584	134	558	120	525	143	556	"
合計	9,333	20,634	476	1,216	665	1,521	610	1,577	696	1,507	652	1,681	598	1,529	376	1,307	
経費	363,695		18,645		30,898		32,080		30,994		37,896		30,794		-		千円

* 施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用

('04 年度の数値は, 2004.12 末現在)

分子科学研究所UVSOR共同研究実施一覧

年度 項目	'85~'96		'98		'99		'00		'01		'02		'03		'04		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	34	371	3	41	1	11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	人数： 登録人数
協力研究	280	970	24	104	8	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
招へい 協力研究	68	68	2	2	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	"
研究会	27	386	1	23	1	26	1	29	1	13	0	0	1	51	0	0	人数： 旅費支給者
施設利用	1,250	6,197	157	769	150	699	160	820	157	707	160	805	129	715	126	586	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	1,659	7,992	187	939	162	773	161	849	158	720	160	805	130	766	126	586	
経費	140,882		14,027		12,951		16,441		16,512		15,780		13,884		-		千円

('04 年度の数値は, 2004.12 末現在)