

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、所外の分子科学およ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およ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聘のために国際共同研究事業を行っている。特に、東アジア地域での分子科学の急速な発展に対応して、日本学術振興会の支援により分子科学研究所が中心となり、アジアでの分子科学の協力研究体制の拠点ネットワークを作る目的で日本、韓国、中国、台湾の研究者が一堂に会するアジア研究教育拠点事業（Asian CORE プログラム）を行い、新領域創出による共同研究の萌芽を見いだす機会を設けている。

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。大学共同利用機関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。総合研究大学院大学への入学資格は、修士の学位をもつ方、大学を卒業して企業等で研究に従事し、修士の学位と同等と認められる方を対象者とした博士後期課程に加えて、平成18年度より学部卒を対象とした5年一貫制博士課程を導入している。入学試験は原則として毎年4月、10月の2回行っている。

3-1 研究領域

理論・計算分子科学研究領域

研究目的 分子およびその集合体（気相、液相、固相）、さらには生体分子やナノ物質など複雑系や複合系に関する構造および機能を量子力学、統計力学、分子シミュレーションを中心とした理論・計算分子科学の方法により解明する。

理論分子科学第一研究部門

研究目的 分子科学の基礎となる理論的方法の開発及び分子構造、電子状態、反応の理論的研究

研究課題 1, 分子の設計と反応の理論と計算
2, ナノ構造物質における電子・核ダイナミクスの理論的・数値計算的研究
3, 大規模量子化学計算

理論分子科学第二研究部門

研究目的 分子性液体・固体の構造、物性及び非平衡過程に関する理論的研究

研究課題 1, 溶液中の平衡・非平衡過程に関する統計力学的研究
2, 溶液内分子の電子状態と化学反応に関する理論的研究
3, 生体高分子の溶液構造の安定性に関する統計力学的研究
4, 界面における液体の統計力学的研究
5, 分子性物質の電子物性における次元性と電子相関に関する理論的研究
6, 光誘起非線型ダイナミクスと秩序形成過程に関する理論的研究

計算分子科学研究部門

研究目的 分子および分子集合体の構造、動力学、機能および物性に関する理論・計算科学的研究

研究課題 1, 凝縮系のダイナミクスと多次元分光法の理論・計算科学的研究
2, 凝集系における溶質、溶媒の量子動力学シミュレーション
3, 複雑な古典凝集系の分子動力学シミュレーション
4, 界面和周波発生分光の計算手法の開発

理論・計算分子科学研究部門（客員）

研究目的 1, 凝縮系における化学反応ダイナミクスに関する理論的・計算科学的研究
2, 凝縮系における光と分子の相互作用および分子間相互作用に関する理論的研究

研究課題 1, 単一分子伝導理論
2, 固体表面の液体構造と化学反応
3, 和周波発生分光理論と分子系への応用

光分子科学研究領域

- 研究目的 物質に光を照射すると、様々な興味深い性質を現したり、化学反応をおこす。様々な分子物質の構造や性質を光で調べることで、反応や物性を光で制御すること、及びそれに必要となる高度な光源開発を目的として研究を行う。

光分子科学第一研究部門

- 研究目的 主としてレーザー光源を用いた先端的分光法、顕微鏡法等を用いて、分子とその集合体の高精度・高精細な構造を明らかにすると同時に、新たな光機能の開拓や物質特性の光制御を目指した研究を行う
- 研究課題 1, 極めて高い空間分解能を持つ先端的分光法による、分子集団の励起ダイナミクス、微粒子系における励起状態と増強電場の研究
- 2, 高強度かつ高コヒーレント光による分子運動の量子状態操作法の開拓、ならびに、分子構造や反応ダイナミクス研究への適用

光分子科学第二研究部門

- 研究目的 物質の量子論的な性質を、デザインされた光電場で詳細に観察し制御するための新しい方法論と、それを支える高度な光源の開発を目指した研究を行う
- 研究課題 1, 高度にデザインされたレーザー場を用いて、原子・分子およびその集合体の量子ダイナミクスを精密に観測・制御するための研究

光分子科学第三研究部門

- 研究目的 真空紫外光や軟X線を用いた新奇な励起分子ダイナミクスの開拓と、それに関する動的プロセスの解明および制御を目指した研究を行う
- 研究課題 1, 軟X線分光による分子及び分子集合体の光化学・光物性研究
- 2, レーザー光及び放射光を用いた光化学反応の研究
- 3, 極短パルス光による超高速現象の追跡
- 4, 気相分子の光励起と光イオン化のダイナミクス

光分子科学第四研究部門（客員）

- 研究目的 比較的簡単な分子から、固体表面に吸着した分子やナノ構造体、さらに生体内分子までを広く対象とし、高度な時間分解・空間分解分光法、極端紫外光や特殊波長レーザー等を用いた光学測定によりそれらの性質を明らかにする
- 研究課題 1, デコヒーレンスの激しい凝縮系におけるコヒーレント制御法の開発
- 2, 高分解能レーザー分光法による分子構造の精密決定、ならびに、励起状態ダイナミクスおよび分子間相互作用の詳細な探求
- 3, 熱電素子や触媒機能をもつ遷移金属の化合物・合金・ナノ構造の電子構造・物性相関の研究
- 4, パーフフルオロ化合物やフラーレンの多価イオン化と解離機構の研究

光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的 シンクロトロン光源用電子加速器に関する開発研究を行う

- 研究課題 1, 先進的な光源加速器の設計開発研究
2, 相対論的電子ビームを用いた新しい光発生法に関する研究

電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的 シンクロトロン光源・自由電子レーザーなどの高性能化のための電子ビーム制御技術の開発研究を行う

- 研究課題 1, 電子ビーム計測・制御技術に関する開発研究
2, 加速器におけるビーム物理学研究
3, 自由電子レーザーにおけるビーム物理学研究

光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的 固体の新奇物性に関わる電子状態を、新規に開発した放射光赤外・テラヘルツ分光および高分解能三次元角度分解光電子分光により明らかにする

- 研究課題 1, 放射光を用いた固体分光用の観測システムの開発
2, 固体物質の局在から遍歴に至る電子状態の分光研究

光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的 放射光軟X線を利用した新しい分光法の開発とそれを用いた内殻励起における多電子効果の解明を目指した研究を行う

- 研究課題 1, 放射光を用いた光化学実験用の観測システムの開発
2, 原子分子における多電子過程の分光研究

先端レーザー開発研究部門（分子制御レーザー開発研究センター）

研究目的 分子科学研究のためのテラヘルツから軟X線にいたる先端光源の開発

- 研究課題 1, マイクロチップレーザー, セラミックレーザー, 高機能非線形波長変換など, マイクロ固体フォトリソグラフィの研究
2, レーザーと加速器を組み合わせた新光源開発

超高速コヒーレント制御研究部門（分子制御レーザー開発研究センター）

研究目的 高出力超短パルスレーザーを用いた量子制御法の開発

- 研究課題 1, 振幅と位相をデザインしたレーザー場による超精密コヒーレント制御法の開発

極限精密光計測研究部門（分子制御レーザー開発研究センター）

研究目的 高分解能分光法やナノ領域顕微分光法による分子とその集合体の精密構造研究法の開発

- 研究課題 1, 高分解能分光法による分子の精密構造解析
2, ナノ領域顕微分光法による原子・分子集合体の微細光学解析

物質分子科学研究領域

- 研究目的 新たな現象や有用な機能の発見を目指して、新規分子・物質の開発やそれらの高次集積化と、電子・光物性、反応性、触媒能、エネルギー変換などの研究を行う

電子構造研究部門

- 研究目的 新規な構造を有する金属－炭素結合体の開発によるその特異な電子構造特性を生かした機能の発現を実現する。また、磁気光学分光法による薄膜表面磁性の評価を行う。
- 研究課題 1, 金属アセチリドの特性を生かした機能性新規ナノ構造体の開発
2, 放射光やレーザーを用いた新規磁性薄膜の磁気特性評価、表面分子科学的磁化制御、ならびに紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の開発

電子物性研究部門

- 研究目的 分子性固体の化学と物理
- 研究課題 1, 分子性導体の機能探査と電子構造の研究
2, 導電性有機固体の電子物性の研究

分子機能研究部門

- 研究目的 1, 生体分子および分子材料を対象とした固体高分解能 NMR 新規測定法の開発
2, 高分子化学、超分子科学等の分子科学関連分野の諸問題を構造と機能という観点から研究
- 研究課題 1, 脂質結合型水和生体分子を対象とした新規固体 NMR 測定法の開発と適用および分子材料の固体高分解能 NMR による局所構造解析
2, 多核金属集積体を用いたスピン空間の精密構築と新規 π 共役電子系の構築とその機能

物質分子科学研究部門（客員）

- 研究目的 物質分子科学の関連領域との交流を通して新しい先端的研究分野の開拓を目指す
- 研究課題 1, ナノバイオ分子科学の新展開
2, 分子素子の基礎研究
3, 興味ある物性を持つ新物質の開発

ナノ分子科学研究部門（分子スケールナノサイエンスセンター）

- 研究目的 単一分子から少数分子系での物性化学の確立を目指す。また、物質変換・エネルギー変換の為の新規なナノ構造体や分子系の創成と新しいナノ計測手法の開発を行う。
- 研究課題 1, 単一分子で機能を持つ有機分子の設計・合成、およびその電気・光物性の計測
2, 有機トランジスタ用の n 型半導体の開発及び有機太陽電池の材料開発
3, 人工分子を用いた光合成型物質変換系の構築
4, 非平面共役化合物「バッキーボール」の新規合成法の開拓と金属ナノクラスター触媒の開発

ナノ計測研究部門（分子スケールナノサイエンスセンター）

研究目的 光や電子線，X線等を用いた新しいナノ計測手法の開発とそれを用いたナノ分子科学の最先端研究を展開する

研究課題 1, 新しいイメージング計測手法の開発
2, ナノスケールの新しいイメージング手法を用いた新物質系の開拓やナノバイオ研究の新展開を図る

ナノ構造研究部門（分子スケールナノサイエンスセンター）

研究目的 ナノ構造体の電子状態と物性との関連を明らかにして新物質系の開拓を目指すとともに，物質変換の為の新規なナノ構造体／ナノ触媒を創成する

研究課題 1, ナノ構造物質における電子・核ダイナミクスの理論的・数値計算的研究
2, 両親媒性高分子に錯体触媒，ナノ触媒，不斉触媒などを固定化し水中不均一系で機能する触媒の開発
3, 金属クラスターの精密合成と構造解析および金属クラスターの光学特性と触媒機能評価

先導分子科学研究部門（客員）（分子スケールナノサイエンスセンター）

研究目的 タンパク質，複合糖質をはじめとする生体高分子の作動機構を原子分解能で解明する

研究課題 1, 超高磁場 NMR 法の生体高分子高次構造解析への応用，複合糖質およびタンパク質の精密立体構造解析

生命・錯体分子科学研究領域

研究目的 生物が示す多彩な生体機能の発現が，どのような機構で行われているか分子レベルで解明するための研究を行う。中心金属と配位子の組み合わせで金属錯体が発現する多種多彩な機能を生かしてエネルギー・環境問題軽減のための高効率エネルギー変換，水中での有機化合物の分子変換，無機小分子の活性化を行う。

生体分子機能研究部門

研究目的 アミノ酸配列から蛋白質の立体構造が形成される過程（フォールディング）の分子機構を含めて，生物が示す多彩な機能の発現を種々の研究手法を駆使することで，その詳細な分子機構を明らかにするとともに，金属酵素がもつ特色のある反応場を，活性中心モデル錯体から解明し，既知の金属酵素の機能改質や人工酵素，機能性触媒などの新規物質の開発を進める

研究課題 1, 新規な機能を有する金属タンパク質の構造機能相関解明
2, In vitro の蛋白質フォールディングの熱力学と速度論
3, 蛋白質の細胞内フォールディングを介助する分子シャペロンの作用機構
4, 金属酵素による酸素分子活性化機構
5, 窒素循環サイクルに関わる金属酵素の分子機構

生体分子情報研究部門

- 研究目的 神経細胞ネットワーク機能解析素子開発，細胞内プローブ分子開発，細胞膜表面反応解析などの研究をととして，生体内での情報機能分子の構造と機能を調べる
- 研究課題 1, 神経細胞ネットワーク機能解析素子開発
2, 人工細胞膜の構造と物性および関連病原体分子の構造と機能
3, 細胞内情報システムプローブ分子開発

錯体触媒研究部門

- 研究目的 分子間の共同作用的相互作用に立脚した化学反応の駆動，化学反応システムの構築
- 研究課題 1, 水中での疎水的相互作用による有機分子変換触媒システム構築
2, 分子集合挙動に基づく超分子触媒，高次構造触媒の設計と創製

錯体物性研究部門

- 研究目的 金属錯体を反応場とした化学エネルギーと電気エネルギーの相互変換と小分子の新しい反応性の開拓
- 研究課題 1, 電子欠損型ヒドリド錯体の合成研究
2, 配位子設計に基づく金属錯体の反応制御
3, 金属錯体による小分子の活性化
4, 二酸化炭素の6電子還元反応
5, メタノールの6電子酸化反応

生命・錯体分子科学研究部門（客員）

- 研究目的 生物無機化学的な観点から生体系での酸素酸化によるエネルギー代謝機構の解明
- 研究課題 1, 金属－酸素錯体の反応性の解明
2, 酸素添加と酸素呼吸の酵素モデルの合成

3-2 研究施設

極端紫外光研究施設

- 目 的 全国共同利用施設として UVSOR-II 光源加速器（電子蓄積リング）からのシンクロトロン光を国内の大学等の研究者に安定に供給して極端紫外光物性・光化学の共同利用研究を支援するとともに、極端紫外光源の高輝度化、加速器を利用した新しい光源に関する研究や新たな放射光分子科学の開拓的研究を国内外の研究者と共同して推進する。

分子スケールナノサイエンスセンター

- 目 的 分子スケールナノサイエンスセンターは、原子・分子サイズでの物質の構造および形状の解明と制御、さらに新しい機能を備えたナノレベルでの新分子系「分子素子」の開発とその電子物性の解明を行うとともに、このような研究を進展させる新しい方法論の開発を行うセンターである。現在は、平成 19 年度から始まった文部科学省ナノテクノロジー・ネットワークプロジェクトを通して、世界最高性能の 920MHz 核磁気共鳴装置、300kV 透過分析電子顕微鏡、高性能走査電子顕微鏡、集束イオンビーム加工装置などのセンター所有の共通機器に加え、センター専任併任教員所有の最先端機器を、民間を含めた全国共同利用に供している。

分子制御レーザー開発研究センター

- 目 的 本センターは、光分子科学研究領域との連携のもとに、分子科学の新分野を切り拓くための装置、方法論の開発研究を行なう施設である。新たに開発される装置や方法論は、所内外の分子科学者との先端的な共同研究のリソースとして提供される。主な開発研究分野としては、①テラヘルツから軟 X 線にいたる先端光源の開発；②高出力超短パルスレーザーを用いた量子制御法の開発；③高分解能光イメージングとナノ領域顕微分光法の開発などが挙げられる。また、本センターは理化学研究所との連携融合事業であるエクストリームフォトリクスの中核センターとしての役割を果たしている。

機器センター

- 目 的 機器センターは物質開発を行う上で基盤設備となる汎用物性測定機器と汎用分析機器それに液体ヘリウム液化機を管理し、研究所内外の共同利用に資するために設立された。共同利用としては協力研究を通して利用する形態と施設利用の二種類がある。また、平成 19 年度より発足した化学系研究設備有効活用ネットワークの実務を担当している。

装置開発室

- 目 的 多様化する材料の精密加工技術および微細工具を用いたマイクロ加工技術の高度化、ならびに高密度集積回路の設計・製作・評価技術を確立し、所内研究あるいは共同利用研究の技術支援を行う。また、迅速な研究成果が求められる研究者からの要求に応じて装置の設計・製作を行う。

計算科学研究センター（岡崎共通研究施設）

目 的 全国共同利用施設として、超高速分子シミュレータならびに高性能分子シミュレータを国内の大学、研究機関の研究者に提供し、大学の研究室のクラスタ等では不可能な大規模計算に基づいた計算分子科学の共同利用研究を支援するとともに、計算分子科学に必要なライブラリの開発、整備を進め、また、グリッド技術による分子科学VO形成など新しいシステム運用技術の開発を行う。一方で、「次世代スーパーコンピュータプロジェクト」や「巨大計算手法の開発と分子・物質計算科学中核拠点形成」等のプロジェクト研究に対し、研究の場を提供する。

岡崎統合バイオサイエンスセンター（岡崎共通研究施設）

目 的 岡崎統合バイオサイエンスセンターは、分子科学、基礎生物学、生理科学などの学際領域にまたがる諸問題に対し、総合的な観点と方法論を適用、駆使するとともに、生命現象の基本に関する諸問題を分子レベルから、細胞、組織、個体レベルまで統合的に捉えた独創的研究により、新しいバイオサイエンスを切り開くことを目的としている。

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)

(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。

3-3-2 2007 年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名	提案代表者
パルスおよび高周波 ESR を用いたスピン科学研究の新しい展開 生体分子情報システムの研究方法論の構築	城西大学理学部 分子科学研究所 加藤 立久 宇理須恒雄

(2) 協力研究

課 題 名 (前期)	代 表 者
高周期 14 族元素を骨格に有する特異な芳香族系の構築とその電子状態及び物性の解明	埼玉大学大学院理工学研究科 斎藤 雅一
開口フラレン (穴あきフラレン) への小分子封入・排出に関する理論的研究	名古屋大学大学院環境学研究科 岩松 将一
EB 法により作製された金属ナノ構造におけるプラズモンの空間特性 貴金属ナノ配列構造における局在プラズモン励起の空間構造と増強ラマン散乱	北海道大学電子科学研究所 物質・材料研究機構ナノ計測センター 三澤 弘明 北島 正弘
ポリジアセチレン LB 膜の色相転移に関する顕微分光学的研究 シゾフィラン鎖によって組織された微粒子及びナノチューブの近接場測定 溶媒和 Fe イオンの赤外光解離分光 水素結合ネットワーク中における多重プロトン／水素原子リレーに関する研究	埼玉大学大学院理工学研究科 九州大学大学院工学研究院 九州大学大学院理学研究院 九州大学大学院理学研究院 坂本 章 新海 征治 関谷 博 迫田 憲治
パラジウム錯体の電子スペクトルの剪断応力効果 環状拡張ポルフィリン金属錯体の磁気特性の解明 電界による有機分子薄膜へのキャリア注入と電子状態変化 軟 X 線による無機透明物質のアブレーション カーボンナノチューブシート上の細胞培養 シナプス機能センシングのためのマイクロ流体能動素子の研究 計算機実験による液体の相分離ダイナミクス 胆汁酸ミセルの MD シミュレーション 量子光学的手法を用いた量子情報処理のための光源開発に関する研究 常温接合を用いた半導体擬似位相整合波長変換素子の開発 マイクロチップ Nd:YAG レーザーを用いた小型 is-TPG 光源の開発 高共役 π 分子修飾電極の作成と評価 ナノシステムに利用する金属ナノ粒子の単分散化とその質量測定 UVSOR-FEL を用いたアミノ酸の合成および不斉分解 レーザーパンチスライスによるコヒーレント放射光発生基礎研究 テラヘルツコヒーレント放射光の光伝導アンテナを用いた時間領域分光	室蘭工業大学工学部 京都大学大学院理学研究科 東京大学大学院新領域創成科学研究科 筑波大学大学院数理物質科学研究科 横浜国立大学大学院工学研究院 兵庫県立大学高度産業科学技術研究所 東北大学大学院理学研究科 大分大学教育福祉科学部 東京大学大学院工学系研究科 中央大学理工学部 (独)理化学研究所 愛媛大学総合科学研究支援センター 東京大学大学院理学系研究科 横浜国立大学大学院工学研究院 名古屋大学大学院工学研究科 大阪大学大学院基礎工学研究科 城谷 一民 田中 泰央 川合 真紀 牧村 哲也 萩野 俊郎 内海 裕一 福村 裕史 中島 俊男 古澤 明 庄司 一郎 林 伸一郎 宇野 英満 米澤 徹 小林 憲正 高嶋 圭史 芦田 昌明

表面改質処理したリチウム電池用正極活物質粒子の深さ方向分析
 ピーナツ型ナノカーボンの in situ 高分解能光電子分光研究
 超高磁場固体 NMR を用いた新規ラセン高分子の動的構造解析
 920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いたタンパク質・複合糖質の構造解析
 刺激応答性ブロックポリマーを用いた金ナノ微粒子の作製と触媒活性
 白金 (II) 錯体を用いるプロトンと共役した電子移動反応
 ガスソース法により生成したカーボンナノチューブの構造評価
 ナノ粒子のパルスレーザー励起による局所的反応場の化学
 (ET)₂MM'(SCN)₄ [M = K, Rb, Cs, NH₄ M' = Hg, Zn] の遠赤外及び近赤外分光測定
 屈曲型ドナーを用いた磁性伝導体の微小結晶構造解析と磁気的物性解明
 強レーザー場中イオン化における分子配向および分子回転の効果

分子およびクラスターの内殻光電離ダイナミクス研究

フラーレン薄膜及び金属内包フラーレンの磁気物性評価に関する研究
 量子スピン系の強磁場極低温磁化測定

薬剤分子と生体膜の相互作用に関する分子動力学シミュレーションによる研究
 フラーレンの振動子強度測定と総和則による検証
 ランダム媒質中のガラス転移
 パーフルオロシクロブタンの多可イオン化と解離
 蛋白質の構造安定性とフォールディング
 有機／金属ハイブリッドポリマーにおける電子状態解析

課 題 名 (後期)

積分方程式理論を用いた有機溶媒－水混合溶液の相分離に関する研究
 薬剤分子と生体膜の相互作用に関する分子動力学シミュレーションによる研究
 EB 法により作成された金属ナノ構造におけるプラズモンの空間特性
 ポリジアセチレン LB 膜の色相転移に関する顕微分光学的研究
 強レーザー場中イオン化における分子配向および分子回転の効果

分子およびクラスターの内殻光電離ダイナミクス研究

電界による有機分子薄膜へのキャリア注入と電子状態変化
 レーザー場における分子・電子散乱過程
 フラーレンの振動子強度測定と総和則による検証
 高次フラーレンの光イオン化機構と光解離動力学
 遷移金属イオンの電子構造がその溶媒和構造に及ぼす影響
 ラマン分光法による溶液中のクラスターに関する研究
 有機／金属ハイブリッドポリマーにおける電子状態解析
 相転移を示す分子性導体の分光学的研究
 光学スペクトルによる縮合多環芳香族炭化水素 TBP の構造に関する研究
 環状張ボルフィリン金属錯体の磁気特性の解明
 屈曲型ドナーを用いた磁性伝導体の微小結晶構造解析と磁気的物性解明
 量子スピン系の強磁場極低温磁化測定

軟 X 線による無機透明材料のアブレーション
 カーボンナノチューブ表面へのタンパク固定に関する研究
 神経毒性 Aβ 重合体の解析とその中和分子スクリーニング系の開発
 神経細胞機能センサー高機能化のための 3 次元マイクロ流路構成法の検討
 神経細胞機能センサー高機能化のための Si 集積回路構成法の検討
 マイクロチップ Nd:YAG レーザーを用いた小型 is-TPG 光源の開発
 擬似位相整合素子による中赤外超短パルスの発生の最適化
 量子光学的手法を用いた量子情報処理のための光源開発に関する研究
 常温接合を用いた半導体擬似位相整合波長変換素子の開発

(独)産業技術総合研究所
 東京工業大学原子炉工学研究所
 北海道大学大学院工学研究科
 名古屋市立大学大学院薬学研究科
 大阪大学大学院理学研究科
 福島大学共生システム理工学類
 名城大学理工学部
 東京大学大学院総合文化研究科
 東京工芸大学工学部

大阪府立大学大学院理学系研究科
 (独)日本原子力研究開発機構量子ビーム
 応用研究部門
 高エネルギー加速器研究機構物質構造化
 学研究所
 東北大学多元物質科学研究所
 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
 姫路獨協大学薬学部

法政大学文学部
 高知工科大学総合研究所
 広島大学大学院理学研究科
 九州工業大学情報工学部
 (独)物質・材料研究機構ナノ有機センター

小林 弘典
 尾上 順
 平沖 敏文
 山口 芳樹
 青島 貞人
 大山 大
 丸山 隆浩
 真船 文隆
 比江島俊浩

藤原 秀紀
 板倉 隆二
 柳下 明
 秋山 公男
 太田 仁
 吉井 範行
 中島 弘一
 宮崎 州正
 田林 清彦
 入佐 正幸
 池田 太一

代 表 者

熊本電波工業高等専門学校
 姫路獨協大学薬学部

北海道大学電子科学研究所
 埼玉大学大学院理工学研究科
 (独)日本原子力研究開発機構量子ビーム
 応用研究部門
 高エネルギー加速器研究機構物質構造科
 学研究所
 東京大学大学院新領域創成科学研究科
 電気通信大学量子・物質工学科
 法政大学文学部
 岡山大学大学院自然科学研究科
 九州大学大学院理学研究院
 福岡教育大学教育学部
 (独)物質・材料研究機構ナノ有機センター
 京都大学低温物質科学研究センター
 山口東京理科大学基礎工学部
 京都大学大学院理学研究科
 大阪府立大学大学院理学系研究科
 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
 筑波大学大学院数理物質科学研究科
 横浜国立大学大学院工学研究院
 国立長寿医療センター研究所
 兵庫県立大学高度産業科学技術研究所
 中部大学工学部
 (独)理化学研究所中央研究所
 東京大学生産技術研究所
 東京大学大学院工学系研究科
 中央大学理工学部

松上 優
 吉井 範行
 三澤 弘明
 坂本 章
 板倉 隆二
 柳下 明
 川合 真紀
 森下 享
 中島 弘一
 久保園芳博
 大橋 和彦
 小杉健太郎
 池田 太一
 中野 義明
 井口 眞
 田中 泰央
 藤原 秀紀
 太田 仁
 牧村 哲也
 荻野 俊郎
 松原 悦郎
 内海 裕一
 石井 清
 林 伸一郎
 志村 努
 古澤 明
 庄司 一郎

レーザーパンチスライスによるコヒーレント放射光発生の基礎研究	名古屋大学大学院工学研究科	高嶋 圭史
テラヘルツコヒーレント放射光の光伝導アンテナを用いた時間領域分光	大阪大学大学院基礎工学研究科	芦田 昌明
3 原子分子の二価イオン状態における分子変形の解明	新潟大学教育研究院自然科学系	副島 浩一
ピーナツ型ナノカーボンの in situ 高分解能光電子分光研究	東京工業大学原子炉工学研究所	尾上 順
テラヘルツ領域における $\text{Sm}_2\text{Mo}_2\text{O}_4$ の電子状態の研究	神戸大学大学院理学研究科	難波 孝夫
スピנקロスオーバー錯体を含む高分子ミクロスフェアの合成と双安定性挙動	滋賀県立大学工学部	鈴木 厚志
ナノ粒子のパルスレーザー励起による局所的反応場の化学	東京大学大学院総合文化研究科	真船 文隆
キラル化合物認識高分子材料合成に用いる高効率金属触媒の探索	東京農工大学大学院共生科学技術研究院	前山 勝也
配位カルボニル基の反応性に及ぼす隣接基効果	福島大学共生システム理工学類	大山 大
facial 型配位子を有する aminyl radical 錯体の酸化反応性の評価	東京理科大学理学部	宮里 裕二
モリブデン-スルフィド錯体における Mo-S 結合の特性解明	大阪市立大学大学院理学研究科	杉本 秀樹
UVSOR-FEL を用いたアミノ酸の合成および不斉分解	横浜国立大学大学院工学研究院	小林 憲正
DMTTF- $\text{QBr}_x\text{Cl}_{4-x}$ の多周波・パルス ESR	東京大学大学院工学系研究科	岩瀬 文達
ガスソース法により生成したカーボンナノチューブの構造評価	名城大学理工学部	丸山 隆浩
過冷却液体の動的不均一性に由来する種々の輸送異常の研究	東京大学生産技術研究所	古川 亮
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
ヘム依存性制御蛋白質の構造・機能解析	北海道大学大学院理学研究院	石森浩一郎
ヘム分解酵素 (HO) の構造・機能解析	東北大学多元物質科学研究所	齋藤 正男
球状蛋白質のフォールディング機構についての研究	名古屋大学大学院理学研究科	榎 互介
窒化マンガンナノドット周期配列の磁性	東京大学物性研究所	小森 文夫
脂質二重膜表面の曲率とホスホリパーゼ C- $\delta 1$ PH ドメインの立体構造変化の固体 NMR 分光法による解析	兵庫県立大学大学院生命理学研究科	辻 暁

(3) 研究会

① 放射光と表面電子顕微鏡——電顕ナノ材料科学の新しい進展—— 2007 年 9 月 10 日 (月) ～ 11 日 (火) 岡崎コンファレンスセンター

9 月 10 日 (月)

13:00	開会 横山利彦
13:10-	岡本裕巳、井村考平 「近接場光学イメージング：貴金属微粒子系における局在光電場とプラズモン」
14:00-	Laszlo Toth、大門 寛、松田博之、松井文彦 「回転楕円メッシュを用いたエネルギーフィルター付き簡易型 PEEM の開発」
14:20-	新美大伸、嘉藤誠、川崎貴博、宮本剛志、中村元弘、和田敬広、鈴木秀士、田旺帝、工藤政都、河原直樹、堂井真、塚本勝美、朝倉清高 「実験室系 EXPEEM による表面化学マッピング」
14:40-	雨宮健太、佐古恵理香、宮脇淳、阿部仁、酒巻真粧子 「三次元顕微 XAFS 法を用いた薄膜磁性の解析法の開発」
15:10-	京谷 隆 「磁性金属を内包したカーボンナノ試験管」
16:00-	小飼真人、郭方准、谷口雅樹、石松直樹、圓山裕 「MLD-PEEM を用いた鉄隕石の磁区構造観察」
16:20-	鈴木雅彦、橋本道廣、上田将人、安江常夫、越川孝範、Ernst Bauer 「スピン偏極 LEEM (SPLEEM) による磁性薄膜の成長過程の観察」
16:40-	ポスターセッション
18:00-	懇親会

9 月 11 日 (火)

9:00-	坂本尚義 「同位体顕微鏡による太陽系起源論の新展開」
9:50-	池本夕佳、森脇太郎 「Spring-8 BL43IR の赤外顕微分光」
10:10-	山本勇、松浦伸志、三賀森雅和、山本亮太、山田剛司、上野信雄、宗像利明 「レーザー光電子顕微鏡による鉛フタロシアニン薄膜成長と電子状態」
10:40-	京谷 隆 「エネルギー分析型 LEEM による銀表面の電子分光イメージング」
11:00-	藤川安仁、櫻井利夫、J. B. Hannon、R. M. Tromp 「MLD-PEEM を用いた鉄隕石の磁区構造観察」

- 11:20- 永松 伸一、解良 聡、奥平 幸司、藤川 高志、上野信雄
「角度分解光電子分光法の理論研究と有機薄膜系への応用」
- 13:00- 恩田 健
「サブ 10 フェムト秒 2 光子光電子分光とその顕微分光への応用」
- 13:50- 福本恵紀、松下智裕、大沢仁志、中村哲也、室隆桂之、木下豊彦、新井邦明
「フェムト秒レーザーを用いた時間分解 XMCD-PEEM (SPRING-8/BL25SU)」
- 14:10- 安江常夫、中口明彦、橋本道廣、A. Locatelli、T. O. Montes、E. Bauer、越川孝範
「LEEM/PEEM における離散的クーロン効果」
- 14:30- 小谷佳範、谷内敏之、長田実、佐々木高義、秋永広幸、小嗣真人、郭方准、渡辺義夫、久保田正人、小野寛太
「SPELEEM による遷移金属酸化物ナノシートの観察」
- 14:50- 中川剛志、横山利彦、渡邊一也、松本吉泰
「レーザー誘起磁気円二色性による光電子顕微鏡の研究」
- 15:10- 尾嶋正治
「東大放射光アウトステーション計画と 3D ナノ ESCA プロジェクト」
- 15:30- 柿崎明人
「SPRING-8 による東大ビームライン計画におけるスペクトロスコピー研究計画」
- 15:50- 閉会 朝倉清高

10 日 16:40 ポスターセッション

- P1 NiO(100) 表面における反強磁性磁区構造の加熱効果の観察
新井邦明、福本恵紀、奥田太一、郭方准、脇田高德、松下智裕、室隆桂之、中村哲也、蔵 圭司、前田勇樹、孫海林、宮田洋明、為則雄祐、大浦正樹、竹内智之、小林啓介、柿崎明人、木下豊彦
- P2 EXPEEM を利用したデバイス評価装置開発の試み
内藤俊雄、朝倉清高、新美大伸、田澤豊彦、嘉藤誠、武藤正雄、上田映介、菅育正、小高仁重、田谷嘉浩、菅原智明、下野功、高橋志郎、高橋幸悦
- P3 放射光 XPEEM による In/Si(111) 上の Ag の成長過程観察
上田将人、橋本道廣、郭方准、鈴木雅彦、松岡由明、木下豊彦、小林啓介、辛埴、大浦正樹、竹内智之、安江常夫、越川孝範
- P4 In/Si(111) 上の Sb の成長過程の動的観察
橋本道廣、郭方准、鈴木雅彦、上田将人、松岡由明、木下豊彦、小林啓介、辛埴、大浦正樹、竹内智之、斎藤祐児、松下智裕、安江常夫、越川孝範
- P5 XANAM
鈴木秀士、朝倉清高
- P6 Ni₂P 触媒の PEEM 観察
宮本剛士、新美大伸、鈴木秀士、朝倉清高
- P7 生体内必須微量元素（セレン、亜鉛）の分布と状態分析
宇尾基弘、亘理文夫、朝倉清高
- P8 細線上に成長した垂直型カーボンナノファイバーの観察
大南祐介、Quoc Ngo、Alan M. Cassell、Jun Li、朝倉清高、Cary Y. Yang
- P9 磁性金属を内包したカーボンナノ試験管
京谷 隆
- P10 回転楕円メッシュを用いたエネルギーフィルター付き簡易型 PEEM の開発
Laszlo Toth、大門 寛、松田博之、松井文彦
- P11 レーザー誘起磁気円二色性による光電子顕微鏡の研究
中川剛志、横山利彦、渡邊一也、松本吉泰

② 生細胞の分子科学

2007 年 5 月 22 日（火）～ 23 日（水） 岡崎コンファレンスセンター

5 月 22 日（火）

- 9:30～ 開会の挨拶
- セッション 1
- 9:40～9:50 浜口宏夫（東大院理）
イントロダクトリー・トーク
- 9:50～10:20 加納英明（東大院理）
生細胞の非線形ラマン分光イメージング
- 10:20～10:50 藤井正明（東工大資源研）
2 波長ピコ秒赤外超解像顕微鏡の開発と細胞への応用
- 11:10～11:40 小倉尚志（兵庫県立大院生命理）
ミトコンドリアにおける酸素活性化反応の追跡
- 11:40～12:10 神取秀樹（名工大院工）
ロドプシンの赤外分光法：より生理的な測定を目指して

12:10 ~ 12:40	宇理須恒雄（分子研） 神経変性疾患の分子機構解明と単一神経細胞機能解析技術開発
セッション 2	
14:00 ~ 14:10	松永是（東京農工大院） イントロダクトリー・トーク
14:10 ~ 14:40	田中剛（東京農工大院） 生物ナノ磁石の生成機構解析とその応用
14:40 ~ 15:10	中村史（産総研） AFM で動作するナノスケールの針を用いた単一細胞操作と力学解析
15:10 ~ 15:40	春山哲也（九州工大院生命） 多様なアプローチによる細胞バイオセンシング系の構築

セッション 3	
16:00 ~ 16:30	植田充美（京大院農） イントロダクトリー・トーク
16:30 ~ 17:00	福崎英一郎（阪大院工） メタボロミックスの基礎技術開発と応用
17:00 ~ 17:30	梶山慎一郎（阪大院工） レーザーを用いた細胞操作と分析
17:30 ~ 18:00	田丸浩（三重大院生物資源） ゼブラフィッシュにおける生体内分子イメージング
19:00 ~	懇親会

5 月 23 日（水）

セッション 4	
9:20 ~ 9:30	太田信廣（北大電子研） イントロダクトリー・トーク
9:30 ~ 10:00	中林孝和（北大電子研） 蛍光寿命イメージングと用いた細胞内の環境変化の In Vivo 計測
10:00 ~ 10:30	金城政孝（北大電子研） 蛍光相関分光法を利用した In Vivo 分子間相互作用解析
10:30 ~ 11:00	小澤岳昌（分子研） 生体分子を可視化する蛍光・発光プローブの現状と課題
11:20 ~ 11:50	新留康郎（九大院工） 光吸収・散乱プローブとしての金ナノロッド
11:50 ~ 12:20	増原 宏（阪大院工、濱野生命科学研究財団） 単一生細胞の分光イメージングとフェムト秒非線形プロセッシング
12:20 ~ 12:50	三室 守（京大院地球環境学） 単細胞シアノバクテリアを用いた光合成系の解析と生物学的「摂動」による情報の高品位化

③ 若手分子化学研究者のための物理化学研究会
2007 年 6 月 23 日（土） 分子科学研究所 研究棟 201 号室

13:30 ~ 13:35	開会の辞	菱川 明栄（分子科学研究所）
13:35 ~ 14:15	講演	応用生物物理化学 秋山 良（九州大学）
14:15 ~ 14:55	講演	衝突反応過程に波束法を使えるようになるための基礎 島倉 紀之（新潟大学）
14:55 ~ 15:35	講演	分子結晶の励起状態ダイナミクス 朝日 剛（大阪大学）
15:50 ~ 16:30	講演	分子クラスター：過去・現在・未来 藤井 朱鳥（東北大学）
16:30 ~ 17:10	講演	多電子励起分子の物理と化学 河内 宜之（東京工業大学）

（講演 30 分、討論 10 分）

④ 分子情報通信 (Molecular Communication) のサイエンス基盤
2007 年 9 月 28 日 (金) ~ 29 日 (土) 岡崎コンファレンスセンター中会議室

9 月 28 日 (金)

13:00-13:10 開会挨拶 (分子科学研究所 宇理須恒雄)

座長 檜山 聡

13:10-13:35 内海裕一 (兵庫県立大学高度産業科学技術研究所)
放射光を用いたバイオフィクロデバイスの作成

13:35-14:00 服部 渉 (NEC ナノエレクトロニクス研究所)
タンパク質分子を検出するマイクロ流体チップ

14:00-14:25 栗田弘史 (豊橋技術科学大学)
1 分子 DNA 操作技術を用いた DNA - タンパク質間相互作用の解析

座長 住友弘二

14:40-15:05 大岩和弘 (情報通信研究機構未来 ICT 研究センター)
タンパク質モーターを用いたナノメートル・マイクロメートルサイズの情報通信

15:05-15:30 檜山 聡 (NTT ドコモ総合研究所)
モータータンパク質と DNA を利用した分子伝送システム

15:30-15:55 宇理須恒雄 (分子科学研究所)
イオンチャンネルバイオセンサーの開発

座長 大岩和弘

16:10-16:35 秋谷昌宏 (武蔵工業大学生体医工学科)
LB 膜を用いた味覚センサの開発

16:35-17:00 平田孝道 (武蔵工業大学生体医工学科)
カーボンナノチューブを用いたバイオナノセンサの開発

17:00-17:25 奥村幸司 ((株) アイシンコスモス研究所)
バイオアッセイを用いた微量物質検出装置の開発

座長 吉川研一

17:35-18:15 吉村由美子 (名古屋大学環境医科学研究所)
大脳皮質局所神経回路のシナプス伝達様式

18:15-20:30 懇親会

9 月 29 日 (土)

座長 菊池純一

9:00- 9:25 吉川研一 (京都大学大学院理学研究科)
DNA: 塩基配列は長期記憶、それでは短期記憶の機能はどこに?

9:25- 9:50 湊元幹太 (三重大大学大学院工学研究科)
人工細胞モデル構築へ向けて: 膜蛋白質システムをどう組み込むか

9:50-10:15 野村 M. 慎一郎 (東京医科歯科大学生体材料工学研究所)
人工細胞的手法による膜タンパク質機能化リボソームの調製と評価

座長 内海裕一

10:30-10:55 住友弘二 (NTT 物性科学基礎研究所)
細胞間情報伝達機構の解明とデバイス応用への取り組み

10:55-11:20 木賀大介 (東京工業大学大学院総合理工学研究科)
合成生物学: 細胞内と試験管内それぞれにおける人工遺伝子回路の構築

座長 宇理須恒雄

11:25-12:05 松原悦朗 (国立長寿医療センター研究所)
A β クリアランスを標的としたアルツハイマー病治療法開発

座長 奥村幸司

13:00-13:40 佐竹伸一郎 (生理学研究所)
神経伝達物質の拡散により仲介される異種シナプス抑制

座長 萩野俊郎

13:45-14:10 堀 勝 (名古屋大学大学院工学研究科)
プラズマバイオニクスの創成と進展

14:10-14:35	澤田和明（豊橋技術科学大学） イオン情報をリアルタイムに画像化する2次元ダイナミックバイオイメージセンサ
14:35-15:00	浜口智志（大阪大学大学院工学研究科） 大気圧プラズマを用いた液中プラズマプロセス
座長 浜口智志	
15:15-15:40	菊池純一（奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科） 人工細胞をもちいる分子通信
15:40-16:05	手老龍吾（分子科学研究所） 酸化物質基板上での脂質二重膜の熱および光誘起形状変化と脂質膜アレイ形成への応用
16:05-16:30	荻野俊郎（横浜国立大学工学部） 生体関連物質の固体表面への吸着特性
16:30-16:40	閉会挨拶（NTT ドコモ総合研究所 檜山 聡）

⑤ 分子科学における連成シミュレーションの基礎理論と応用
Coupled Simulation in Molecular Science: Theories and Applications
2007年8月29日（水）～31日（金） 分子科学研究所 山手3号館大会議室、中会議室

8月29日	
13:30-14:00	趣旨説明、等
14:00-15:30	基調講演 渡部雅浩（北大） 「マルチスケール系としての気候とそのモデル化」
16:00-17:30	招待講演 諸熊奎治（京都大） 「複雑分子系の複合分子理論によるシミュレーションを目指して」
18:00-20:00	懇親会
8月30日	
09:00-12:00	セッション1 伊藤伸泰（東京大） 「分子運動・熱平衡状態・非平衡現象」 岸本泰明（京都大） 「多階層・複合系としてのプラズマダイナミクスと揺らぎの構造」
13:30-16:30	セッション2 小松崎民樹（神戸大） 「生体分子時系列情報から我々は何を学び取ることができるか？」
16:30-18:00	ポスターセッション（山手3号館2階中会議室）
8月31日	
09:00-12:00	セッション3 森田明弘（東北大、分子研） 「分子軌道計算に基づくモデリングとMD計算の組み合わせによる界面和周波発生分光の第一原理的シミュレーション手法の開発」 柳井 毅（分子研） 「高精度量子化学計算の理論開発：マルチ分解能法と多参照正準変換電子相関理論」
13:30-16:30	セッション4 岡本吉史（理研） 「有限要素法による共振器内部の各種運動を考慮した電磁波・熱伝導連成解析」 松本正和（名古屋大） 「最適化問題としてのシミュレーション物理」
16:30-17:00	事務連絡、等

⑥ 「金属と分子集合」——新領域創生を目指して——
2007年6月1日（金）～3日（日） 分子科学研究所 山手3号館大会議室

6月1日（金）	
13:20-13:30	開会の挨拶
13:30-14:10	講演1 野地博行（阪大産研） 回転分子モーターのナノサイエンス
14:10-14:50	講演2 松尾 豊（ERATO, JST） 金属フラレン複合体の超分子構造制御と光電子機能
14:50-15:10	学生講演1

15:30-16:10	講演 3 横山士吉 (九大院工)	分子スケールから見た dendrimer の光エレクトロニクスへの応用
16:10-16:50	講演 4 樋口昌芳 (物材研)	有機-金属ハイブリッドポリマーの精密合成とデバイス応用
16:50-17:10	学生講演 2	
18:00-20:00	懇親会	

6月2日(土)

9:00- 9:40	講演 5 植村卓史 (京大院工)	錯体ナノ空間と高分子
9:40-10:20	講演 6 竹内正之 (九大院工)	分子情報処理システムの構築：小分子から超分子集合体まで
10:40-11:20	講演 7 奥村光隆 (阪大院理)	貴金属超微粒子の構造と電子状態に関する理論的研究
11:20-12:00	講演 8 川口博之 (分子研)	還元系フェノキシド錯体による小分子活性化
13:30-14:10	講演 9 石田敬雄 (産総研)	自己組織化膜の表面改質・錯形成多層化及びそれを利用したデバイス作製
14:10-14:50	講演 10 吉沢道人 (東大院工)	自己組織化錯体空間を活用した高次π共役集積体の構築
14:50-15:10	学生講演 3	
15:30-16:10	講演 11 吉本惣一郎 (産総研)	電極表面における分子集合体の制御：ナノ構造形成とその機能発現
16:10-16:50	講演 12 高谷 光 (阪大院基礎工)	メタル化ペプチドの合成および自己組織化挙動
16:50-17:10	学生講演 4	
17:10-17:30	記念写真	
17:30-19:30	ポスター発表	

6月3日(日)

9:00- 9:40	講演 5 上野隆史 (名大院理)	蛋白質分子集合体による金属イオン制御
9:40-10:20	講演 6 田中 剛 (東京農工大院)	磁性細菌が生合成するマグネタイトナノ結晶の形成制御機構
10:40-11:20	講演 7 金原 数 (東大院工)	フェロセンを利用した次世代分子機械の設計
11:20-12:00	講演 8 大越慎一 (東大院理)	ナノ構造磁性材料の化学的合成と外場刺激応答性
12:00-12:20	学生講演 5	
12:20-12:30	閉会の挨拶	

⑦ 先端的 ESR 手法による分子性物質の新機能性探索

2007 年 12 月 17 日 (月) ~ 18 日 (火) 岡崎コンファレンスセンター大会議室

12月17日(月)

13:00-13:10	中村敏和 (分子科学研究所物質分子科学研究領域)
	はじめに&事務連絡

座長 中村敏和 (分子科学研究所物質分子科学研究領域)

13:10-13:30	櫻井敬博 (神戸大学研究基盤センター)
	二次元三角格子モット絶縁体 $\text{EtMe}_3\text{P}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ の ESR 測定
13:30-14:00	三野広幸 (名古屋大学大学院理学研究科)
	ESR 法からみた光合成タンパク質の分子進化
14:00-14:30	木俣 基 (物質・材料研究機構)
	有機伝導体の電気的検出 ESR
14:30-15:00	手木芳男 (大阪市立大学大学院理学研究科)
	π共役スピン系の光励起スピン整列と交換相互作用、および励起状態スピンドYNAMIX

座長 生駒忠昭 (新潟大学大学院自然科学研究科)

15:30-16:00	菊池彦光 (福井大学大学院工学研究科)
	二次元三角格子磁性体の ESR
16:00-16:30	神野賢一 (和歌山大学システム工学部)
	自己束縛励起子の緩和配置と時間域磁気共鳴
16:30-17:00	河合明雄 (東京工業大学大学院理工学研究科)
	動的なスピン分極を用いた光物理・光化学過程の時間分解 ESR 観測
17:00-17:30	光藤誠太郎 (福井大学遠赤外領域開発研究センター)
	高出力テラヘルツ波を用いた磁気共鳴装置の開発

18:00-19:00 ポスターセッション（中会議室）
19:00-20:00 自由討論（中会議室）

12月18日（火）

座長 溝口憲治（首都大学東京大学院理工学研究科）
9:00-9:20 神澤恒毅（大阪府立大学理学部）
二次元混合スピン系 BIPNNBNO の ESR
9:20-9:40 大久保晋（神戸大学分子フォトサイエンス研究センター）
幾何学的フラストレーション系の ESR による研究
9:40-10:10 丸本一弘（筑波大学大学院数理物質科学研究科）
分子性デバイスにおける両極性電界注入キャリアの ESR 研究

座長 加藤立久（城西大学理学部）
10:30-11:00 寺崎 亨（豊田工業大学クラスター研究室）
フォントラップ法による捕捉イオン種の磁気光学分光
11:00-11:30 小堀康博（静岡大学理学部）
時間分解 ESR 法によるタンパク質ラジカルの構造と運動の観測
11:30-12:00 松井弘之（東京工業大学・産業技術総合研究所）
ペンタセン薄膜トランジスタの電場誘起 ESR における Motional Narrowing 効果

座長 荒田敏昭（大阪大学大学院理学研究科）
13:30-14:00 細越 裕子（大阪府立大学理学部）
低次元有機磁性体の ESR
14:00-14:30 佐藤和信（大阪市立大学大学院理学研究科）
コヒーレントマイクロ波パルス ELDOR による量子状態制御と分光学への応用
14:30-15:00 萩原政幸（大阪大学極限量子科学研究センター）
 $S=1$ 擬一次元反強磁性体の強磁場多周波 ESR
15:00-15:30 米田忠弘（東北大学多元物質料研究所）
走査トンネル顕微鏡を用いた原子スケールでのスピン計測
15:30-15:40 集合写真

座長 萩原政幸（大阪大学極限量子科学研究センター）
16:00-16:30 加藤 立久（城西大学理学部）
分子内での結合スピン系
16:30-17:00 黒田新一（名古屋大学大学院工学研究科）
有機薄膜デバイス中の電荷キャリアの電子スピン共鳴観測
17:00-17:30 荒田敏昭（大阪大学大学院理学研究科）
スピンラベル ESR 法——機能中の巨大タンパク質複合体の構造と物性
17:30-18:00 野尻浩之（東北大学金属材料研究所）
ナノ磁性多面体の ESR
18:00-20:00 懇親会（中会議室）

12月19日（水）

座長 野尻浩之（東北大学金属材料研究所）
9:00-9:20 八代晴彦（大阪大学極限量子科学研究センター）
整数スピン金属タンパク質の測定が可能な高感度多周波 ESR 装置の開発
9:20-9:40 田中久暁（名古屋大学大学院工学研究科）
擬一次元ハロゲン架橋金属錯体におけるソリトンの光生成と ESR 観測
9:40-10:00 古川 貢（分子科学研究所物質分子科学研究領域）
パルス ESR による有機導体のスピンドYNAMICS 研究

座長 太田 仁（神戸大学分子フォトサイエンス研究センター）
10:20-10:50 太田雅壽（新潟大学工学部）
ESR による X 線照射した黒胡椒の吸収線量評価
10:50-11:20 坂井 徹（日本原子力研究開発機構 SPring-8）
ESR によるスピンギャップ直接観測の選択則とその応用
11:20-11:50 浅野素子（首都大学東京大学院理工学研究科）
二中心で相互作用する励起三重項—二重項系のスピン多重度の磁場依存性

座長 佐藤 和信（大阪市立大学大学院理学研究科）
13:10-13:40 生駒忠昭（新潟大学大学院自然科学研究科）
Peculiarity in the Electronic Structure of Cu(II) Complex Ferromagnetically Coupled with Bisimino Nitroxides

- 13:40-14:10 太田 仁（神戸大学分子フォトサイエンス研究センター）
電子スピン共鳴測定法の新展開——多重極限 ESR 測定装置の開発——
- 14:10-14:40 溝口憲治（首都大学東京大学院理工学研究科）
電子のダイナミクスを見る：温度、周波数、圧力依存性を通して
- 14:40-15:10 中村敏和（分子科学研究所物質分子科学研究領域）
磁気共鳴法による分子性固体の新電子相・新機能探索
- 15:10-15:20 溝口憲治（首都大学東京大学院理工学研究科）
おわりに

ポスタープログラム（岡崎コンファレンスセンター 中会議室）

- P1 神戸高志（岡山大学大学院自然科学研究科）
フラレン磁性体の分子配向秩序と磁気秩序
- P2 脇田源太（名古屋大学大学院理学研究科）
1次元量子系の電子状態に対する境界効果
- P3 山口博則（大阪大学極限量子科学センター）
二次元三角格子磁性体 NiGa_2S_4 の強磁場多周波 ESR
- P4 藤田 渉（首都大学東京大学院理工学研究科）
有機磁性分子結晶が示すラジカルカップリング反応
- P5 兒玉 健（首都大学東京大学院理工学研究科）
金属内包フラレンの内包金属の磁気的性質の研究
- P6 谷 篤史（大阪大学大学院理学研究科）
ガスハイドレートにおけるラジカルゲスト分子間の水素移動
- P7 三宅祐輔（東京工業大学大学院理工学研究科）
イオン液体中におけるニトロキシドラジカルの回転拡散
- P8 木村尚次郎（大阪大学極限量子科学研究センター）
擬一次元 Ising 型反強磁性体 $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ の強磁場 ESR
- P9 岡村久一（新潟大学工学部）
希土類イオンで付活したヒドロキシアパタイトの ESR 特性
- P10 加藤弥生（静岡大学理学部）
ウシ血清アルブミンとキノン類における光誘起電子移動反応
- P11 朽方将登（静岡大学理学部）
レーザー光を用いた KatG における反応初期過程の研究
- P12 神崎祐貴（大阪市立大学大学院理学研究科）
ニトロキシドビラジカル系における Biradical Paradox
- P13 近藤 徹（名古屋大学大学院理学研究科）
Electron transfer in the homodimeric type I reaction center of *Heliobacterium modesticaldum* : Two types of ESP-ESR signals from the light-induced two radical pair species
- P14 永島 舞（首都大学東京大学院理工学研究科）
金属をドーピングした DNA の電子状態
- P15 林 泰之（首都大学東京大学院理工学研究科）
ESR を用いた導電性高分子による活性酸素発生機構の研究

⑧ 分子の視点から見る光合成

2008 年 3 月 10 日（月）～ 11 日（火） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

3 月 10 日（月）（1 日目）

13:30-13:35 開会挨拶

座長 船橋靖博（名工大）

- 13:35-14:10 沈 建仁（岡山大）
「光化学系 II 酸素発生複合体の構造と機能」
- 14:10-14:45 杉浦美羽（大阪府大）
「好熱性ラン藻の遺伝子組換え体を用いた光化学系 II 反応中心の分子構造と機能の研究」
- 14:45-15:20 野口 巧（筑波大）
「光化学系 II における水・キノン酸化還元反応の分子機構：赤外分光法による解析」
- 15:20-15:55 熊崎茂一（京大）
「酸素発生型光合成膜微細構造変化を直接捉える顕微分光法」

座長 熊崎茂一（京大）

- 16:15-16:50 長谷川淳也（京大）
「紅色光合成細菌の反応中心の励起状態と電子移動：電子理論による研究」

16:50-17:25 出羽毅久（名工大）
「光合成細菌由来アンテナ／反応中心複合体の平面脂質二分子膜への組織化と直接観察」
17:25-18:00 林 重彦（京大）
「分子シミュレーションで探るバクテリオロドプシンの光駆動プロトンポンプ」
18:30-20:00 懇親会（職員会館）

3月11日（火）（2日目）

座長 杉浦美羽（大阪府大）

9:00-9:35 栗栖源嗣（東大）
「シトクロム b_6f 複合体周辺の電子伝達とX線構造解析」
9:35-10:10 蘆田弘樹（奈良先端大）
「RuBisCO-like protein の研究から光合成 CO_2 固定酵素 RuBisCO の分子進化の謎にせまる」

座長 永田 央（分子研）

10:30-11:05 船橋靖博（名工大）
「PhotosystemII 酸素発生部位クラスターに対する合成のアプローチ」
11:05-11:40 和田 亨（分子研）
「エネルギー変換を指向した酸素発生錯体の開発」
11:40-12:15 八木政行（新潟大）
「合成金属錯体を用いた光合成酸素発生錯体のモデル化」

座長 八木政行（新潟大）

13:45-14:20 江 東林（分子研）
「マルチポルフィリン・マルチフラレンを用いた超分子巨大車輪の構築」
14:20-14:55 酒井 健（九大）
「白金錯体を触媒活性部位に有する単一分子光水素発生デバイスの開発」
14:55-15:30 石谷 治（東工大）
「金属錯体を中核とした人工光合成系の構築」
15:30-15:40 閉会挨拶

⑨ 光機能性と高選択的反応性の融合が切り拓く新しい錯体光化学
2007年12月4日（火）～5日（水） 分子科学研究所 山手3号館会議室

12月4日（火）

13:00-13:15 開会：趣旨説明 鈴木孝義（阪大院理）
座長：廣津昌和（阪市大院理）
13:15-13:50 稲垣昭子（東工大資源研）
可視光増感ユニットをもつパラジウム錯体による触媒的光反応
13:50-14:25 梶谷正次（上智大理工）
機能発現を目指したメタラジカルコゲノレン錯体の官能基変換
14:25-15:00 桑田繁樹（東工大院理工）
架橋窒素原子をもつ二核錯体の合成とその反応性

座長：近藤 満（静岡大機器セ）

15:15-15:50 小坂田耕太郎（東工大資源研）
有機金属ロタキサンの構造と光機能
15:50-16:25 小幡 誠（奈良女大院人間文化）
Click Chemistry を利用した配位子合成と錯体化学への応用
16:25-17:00 西岡孝訓（阪市大院理）
糖修飾 N -ヘテロ環カルベン錯体

座長：松尾貴史（阪大院工）

17:15-17:50 俣野善博（京大院工）
ハイブリッド型ポルフィリン類縁体を配位子とする金属錯体の合成と反応性
17:50-18:25 古田弘幸（九大院工）
近赤外吸収・発光特性をもつ異種ポルフィリノイドの創製
19:00-21:00 懇親会（職員会館）

12月5日（水）

座長：海老原昌弘（岐阜大工）

9:00-9:35 安里英治（琉球大理）
電子、プロトン移動能を付与した C_6O_6 リガンドベースのクラスター化学

9:35-10:10	林 宜仁（金沢大院自然科学） クラウンエーテル型バナジウムポリオキソ酸配位子の配位化学
10:10-10:45	會澤宣一（富山大院理工） ホスフィンスルフィドを有する低酸化数金属錯体の性質とホスフィン上のカルコゲン原子交換反応
座長：小島隆彦（阪大院工）	
11:00-11:35	柘植清志（北大院理） 鎖状構造を持つ強発光性銅 (I) - 銀 (I) 混合金属錯体
11:35-12:10	馬越啓介（長崎大工） 金属間相互作用により発現する白金および混合金属錯体の興味深い物性
12:10-12:45	石谷 治（東工大院理工） 光機能性レニウム多核錯体の開発
12:45-13:00	閉会：総括 木下 勇（阪市大院理）

(4) UVSOR 施設利用

（前期）

MFI 上の MoO_x 触媒活性種の L-XANES による微細構造解析	埼玉工業大学	有谷 博文
セラミックス材料の X 線照射損傷その場観察 (Si 及び AlK 殻吸収端 X 線の利用)	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
バイオセラミクス中の添加元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
表面改質処理正極電極の長期試験前後での表面の電子状態変化についての検討	産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
Cl および AlKXAFS 測定による各種ナフタロシアニン錯体の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
Pd 添加メソポーラスシリカバルク体の局所構造解析	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
水晶シリコン K 殻の発光 XAFS 測定	神戸大学発達科学部	中川 和道
色素増感太陽電池に用いる複合酸化物電極材料の XAFS 解析	京都大学大学院工学研究科	岩本 伸司
窒化物半導体の Al-K 内殻励起による可視・紫外発光 4	金沢大学工学部	直江 俊一
層状構造を有する遷移金属酸化物の Li 脱離・挿入に伴う XANES 観察	関西大学工学部	荒地 良典
ポリビニルアルコール系化合物・シリカ（チタニア）無機・有機複合体の構造評価	愛知県産業技術研究所	深谷 英世
タングステン及びモリブデン酸塩の異方性反射測定と発光ダイナミックスの研究	信州大学工学部	伊藤 稔
極端紫外光照射による無機蛍光体の励起現象 (4)	新潟大学工学部	太田 雅壽
希土類イオンを添付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
温度可変下での LiYF_4 単結晶中希土類イオンの吸収スペクトルの研究	関西学院大学理工学部	小笠原一禎
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
軌道・電荷秩序を持つ層状ペロブスカイト型酸化物の紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	十倉 好紀
ボロンドープ超伝導ダイヤモンドの真空紫外分光	京都薬科大学	有本 収
真空紫外光用フッ化物蛍光体の発光・励起スペクトル	大阪電気通信大学大学院工学研究科	大野 宣人
誘電体結晶中の Ti^{4+} 型不純物センターの発光特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
アミノ酸および DNA 分子の真空紫外分光	神戸大学発達科学部	中川 和道
複合フッ化物結晶の真空紫外発光・吸収測定	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	猿倉 信彦
極低エネルギー光電子分光機器のためのフィルター特性の吸収による測定	大阪大学大学院基礎工学研究科	菅 滋正
小型斜入射分光システムの絶対検出効率測定	首都大学東京大学院理工学研究科	田沼 肇
極端紫外光を用いたアモルファス半導体光誘起現象の観察	岐阜大学工学部	林 浩司
定在波分光用 Mo/Si 反射多層膜の反射率測定	東北大学多元物質科学研究所	柳原 美広
窒化物半導体系紫外線受光素子の軟 X 線領域での受光特性研究	三重大学大学院工学研究科	元垣内敦司
水星探査衛星搭載用検出器の開発	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一朗
希薄磁性半導体 GaCrN における磁性元素 Cr の d 軌道エネルギー位置の同定	大阪大学産業科学研究所	江村 修一
アミノ酸および DNA 分子の UVU-SX 吸収スペクトル測定	神戸大学発達科学部	中川 和道
EUV-FEL 用ミラーの反射率測定	理化学研究所 XFEL 計画推進本部	永園 充
小型真空紫外分光システムの検出効率測定	首都大学東京大学院理工学研究科	田沼 肇
有機分子- Si 複合ナノ粒子の高分解能価電子帯及び内殻光電子分光	神戸大学大学院工学研究科	田中 章順
Pd 系バルク金属ガラスおよび Fe 基ホイスラー型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
定在波光電子分光による Fe/Si 多層膜界面の価電子帯測定	東北大学多元物質科学研究所	江島 丈雄
2次元電気伝導性材料における巨大熱電能発現機構の解明	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
強相関単結晶薄膜の光電子分光	分子科学研究所	木村 真一
Cu(001) 表面上の Fe 超薄膜の角度分解光電子分光測定	名古屋大学大学院工学研究科	柚原 淳司

Fermi surface variation across the quantum critical point in heavy fermions	Sungkyunkwan University (分子科学研究所)	IM, Hojun
BL5Uにおけるユーザータイム前調整および整備作業	分子科学研究所	伊藤 孝寛
セリウム単結晶における $\alpha-\gamma$ 相転移の角度分解光電子分光研究	分子科学研究所	伊藤 孝寛
超伝導を示す半導体の電子構造の遠赤外分光	東海大学情報理工学部	犬島 喬
InN 薄膜の顕微鏡～遠赤外反射	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
BL6B の整備	分子科学研究所	木村 真一
強相関半導体の圧力下テラヘルツ分光	分子科学研究所	木村 真一
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
高周波誘電体の遠赤外スペクトル	名古屋工業大学しくみ領域環境材料教育類	大里 齊
蛋白質のテラヘルツ領域での吸収スペクトル測定	関西医科大学医学部	木原 裕
FEL と放射光による希ガスの 2 光子イオン化	分子科学研究所	彦坂 泰正
複合フッ化物薄膜の深紫外光伝導特性評価	名古屋工業大学	小野 晋吾
窒化物半導体系紫外線受光素子の受光特性研究	三重大学大学院工学研究科	元垣内敦司
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 スペクトルの測定	明治大学理工学部	松本 皓永
AlN 及び AlGaIn の偏光反射・吸収測定	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
AlN 及び AlGaIn の発光励起と時間分解測定 (IV)	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
蛍光体単結晶の真空紫外吸収スペクトル	福井工業高等専門学校	北浦 守
セラミックス材料の X 線照射損傷その場観察 (OK 殻吸収端 X 線の利用)	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
高出力型リチウム二次電池の正極表面近傍の電子状態の検討 (II)	産業技術総合研究所	小林 弘典
XAFS 法を用いた各種リチウム化合物の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
機能性アモルファスカーボン系薄膜の局所構造解析	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所	神田 一浩
層状構造を有する遷移金属酸化物の Li 脱離・挿入に伴う XANES 観察	関西大学工学部	荒地 良典
フラーレン類の光電子分光	愛媛大学大学院理工学研究科	日野 照純
共役ポリマーへの有機分子の分散による電子構造変化の研究	島根大学	田中 仙君
Li-Ni 系複合酸化物の真空紫外光電子分光	愛媛大学大学院理工学研究科	宮崎 隆文
角度分解紫外光電子分光法による機能性 LB 膜の分子配向評価	千葉大学工学部	奥平 幸司
角度分解光電子分光法による有機配向薄膜のバンド構造	千葉大学大学院自然科学研究科	解良 聡
高配向有機薄膜からの光電子放出強度角度依存性とその散乱因子	千葉大学工学部	上野 信雄
紫外光電子分光によるイオン溶液の電子構造 II	九州シンクロトロン光研究センター	吉村 大介
金属単結晶上のアセン類単分子膜の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	金井 要
UVSOR BL8B2 ビームライン及び末端装置の調整	分子科学研究所	木村 真一
(後期)		
MFI 上の MoO_x 触媒活性種の L-XANES による微細構造解析	埼玉工業大学	有谷 博文
セラミックス材料の X 線照射損傷その場観察 (Si 及び AlK 殻吸収端 X 線の利用)	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
バイオセラミクス中の添加元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
表面改質処理正極電極の長期試験前後での表面の電子状態変化についての検討	産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
Cl および AlKXAFS 測定による各種ナフタロシアン錯体の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
Pd 添加メソポーラスシリカバルク体の局所構造解析	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
色素増感太陽電池に用いる複合酸化物電極材料の XAFS 解析	京都大学大学院工学研究科	岩本 伸司
窒化物半導体の Al-K 内殻励起による可視・紫外発光 4	金沢大学工学部	直江 俊一
層状構造を有する遷移金属酸化物の Li 脱離・挿入に伴う XANES 観察	関西大学工学部	荒地 良典
メソポーラスアルミナバルク体の局所構造解析	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
CVD ダイヤモンドフォトン検出器の軟 X 線領域における特性評価	大阪大学大学院工学研究科	伊藤 利道
タンダステン及びモリブデン酸塩の異方性反射測定と発光ダイナミックスの研究	信州大学工学部	伊藤 稔
極端紫外光照射による無機蛍光体の励起現象 (4)	新潟大学工学部	太田 雅壽
希土類イオンを添付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
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
ボロンドープ超伝導ダイヤモンドの真空紫外分光	京都薬科大学	有本 收
真空紫外光用フッ化物蛍光体の発光・励起スペクトル	大阪電気通信大学大学院工学研究科	大野 宣人
誘電体結晶中の Ti^{4+} 型不純物センターの発光特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
水・イオン液体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
真空紫外励起スペクトル測定による酸化物中 Er イオンの 4f5d 遷移に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	吉野 正人

有機分子－遷移金属複合系における円磁気二色性実験	日本原子力研究機構先端基礎研究センター	松本 吉弘
極端紫外光を用いたアモルファス半導体光誘起現象の観察	岐阜大学工学部	林 浩司
定在波分光用 Mo/Si 反射多層膜の反射率測定	東北大学多元物質科学研究所	柳原 美広
窒化物半導体系紫外線受光素子の軟X線領域での受光特性研究	三重大学大学院工学研究科	元垣内敦司
水星探査衛星搭載用検出器の開発	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一朗
アミノ酸および DNA 分子の UVU-SX 吸収スペクトル測定	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
アミノ酸蒸着膜・滴下乾燥薄膜の UVU-SX 吸収スペクトル測定	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
有機分子－Si 複合ナノ粒子の高分解能価電子帯及び内殻光電子分光	神戸大学大学院工学研究科	田中 章順
Pd 系バルク金属ガラスおよび Fe 基ホイスラー型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
定在波光電子分光による Fe/Si 多層膜界面の価電子帯測定	東北大学多元物質科学研究所	江島 丈雄
2 次元電気伝導性材料における巨大熱電能発現機構の解明	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
強相関単結晶薄膜の光電子分光	分子科学研究所	木村 真一
Cu(001) 表面上の Fe 超薄膜の角度分解光電子分光測定	名古屋大学大学院工学研究科	柚原 淳司
Temperature dependence of the Kondo resonance in magnetic and non-magnetic regimes	Sungkyunkwan University(分子科学研究所)	IM, Hojun
BL5U におけるユーザータイム前調整および整備作業	分子科学研究所	伊藤 孝寛
半導体表面上金属超薄膜のラッシュバ効果とその制御	東京大学物性研究所	松田 巖
超伝導を示す半導体の電子構造の遠赤外分光	東海大学情報理工学部	犬島 喬
BL6B の整備	分子科学研究所	木村 真一
強相関半導体の圧力下テラヘルツ分光	分子科学研究所	木村 真一
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
高周波誘電体の遠赤外スペクトル	名古屋工業大学しくみ領域環境材料教育類	大里 齊
2 次, 3 次構造の異なった種々の蛋白質のテラヘルツ領域での吸収スペクトル測定	関西医科大学医学部	木原 裕
ZnO と MgO の格子振動に及ぼす点欠陥の影響	早稲田大学理工学術院	山本 知之
FEL と放射光による希ガスの 2 光子イオン化	分子科学研究所	彦坂 泰正
複合フッ化物薄膜の深紫外光伝導特性評価	名古屋工業大学	小野 晋吾
窒化物半導体系紫外線受光素子の受光特性研究	三重大学大学院工学研究科	元垣内敦司
AlN 及び AlGaIn の偏光反射・吸収測定	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
AlN 及び AlGaIn の発光励起と時間分解測定 (IV)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
アミノ酸および DNA 分子の真空紫外分光	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
複合フッ化物結晶の真空紫外発光・吸収測定	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	猿倉 信彦
蛍光体単結晶の真空紫外吸収スペクトル	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 スペクトルの測定	明治大学理工学部	松本 皓永
Al 系窒化物半導体量子井戸構造の発光特性評価に関する研究	三重大学大学院工学研究科	元垣内敦司
フラーレン薄膜の光吸収絶対断面積測定	分子科学研究所	見附孝一郎
強相関薄膜の電子状態	分子科学研究所	木村 真一
Angle-resolved Photoemission Spectroscopy Study of $\text{Bi}_2\text{M}_2\text{Co}_2\text{O}_y$ ($M = \text{Ba}, \text{Sr}, \text{Ca}$)	分子科学研究所	木村 真一
極低エネルギー高分解能光電子分光による極相関物質電子状態変化の観測	大阪大学大学院基礎工学研究科	菅 滋正
BL7U におけるユーザータイム前調整および整備作業	分子科学研究所	伊藤 孝寛
低励起エネルギー角度分解光電子分光による擬一次元有機導体におけるラッテンジャー面の直接観測	分子科学研究所	伊藤 孝寛
Character of the Ce 4f-electron weakly hybridized with the conduction electron	Sungkyunkwan University(分子科学研究所)	IM, Hojun
レーザー高次高調波用薄膜フィルターの透過率評価	分子科学研究所	菱川 明栄
セラミックス材料の X 線照射損傷その場観察 (OK 殻吸収端 X 線の利用)	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
高出力型リチウム二次電池の正極表面近傍の電子状態の検討 (II)	産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
XAFS 法を用いた各種リチウム化合物の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
機能性アモルファスカーボン系薄膜の局所構造解析	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所	神田 一浩
層状構造を有する遷移金属酸化物の Li 脱離・挿入に伴う XANES 観察	関西大学工学部	荒地 良典
フラーレン類の光電子分光	愛媛大学大学院理工学研究科	日野 照純
Li-Ni 系複合酸化物の真空紫外光電子分光	愛媛大学大学院理工学研究科	宮崎 隆文
角度分解紫外光電子分光法による機能性 LB 膜の分子配向評価	千葉大学工学部	奥平 幸司
角度分解光電子分光法による有機配向薄膜のバンド構造	千葉大学大学院自然科学研究科	解良 聡
高配向有機薄膜からの光電子放出強度角度依存性とその散乱因子	千葉大学工学部	上野 信雄
放射光を用いた有機薄膜中のフェルミ準位シフトの可能性 2	千葉大学大学院自然科学研究科	小野 正樹
紫外光電子分光によるイオン溶液の電子構造 II	九州シンクロトロン光研究センター	吉村 大介

金属単結晶上のアセン類単分子膜の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	金井 要
UVSOR BL8B2 ビームライン及び末端装置の調整	分子科学研究所	木村 真一
光触媒における酸化還元機構の解明	新潟大学工学部	太田 雅壽
光電子分光による有機半導体単結晶の電子構造の観測	千葉大学先進科学研究教育センター	石井 久夫

(5) 施設利用

① 機器センター

(前期)

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
希土類薄膜磁石の高磁気特性

硫酸転移酵素の生物学的機能解明を目的とした糖鎖合成
有機分子および金属錯体のX線結晶構造解析
核酸化学修飾法の開発

側鎖液晶性エチレン-マレイミド共重合体の構造解析

金属錯体分子磁性体の磁気物性測定

フラーレン誘導体ナノウィスカー結晶の合成と物性研究

フェノチアジンカチオンラジカルをスピン源とする高スピン分子の磁気特性評価

周期的ナノ構造膜の磁気機能の評価に関する実験

ポルフィラジン鉄(III)錯体の磁気物性

ポルフィリンオリゴマーの合成と構造

ゲストとして磁性金属イオンを捕捉した集積化型金属錯体の構築

微小分子性結晶の単結晶構造解析

ESRによるキラル磁性体結晶の研究

液体金属、強磁性体金属、半導体の電流磁気効果に関する厚さとナノ構造の研究

金属錯体の合成と核磁気共鳴法(NMR)による構造決定

金属錯体の結晶構造解析

Tsai型正二十面体相準結晶における遍歴電子磁性の研究

ポルフィリン関連鉄(III)錯体の磁気的性質に関する研究

有機トランジスタの電子スピン共鳴

有機電荷移動錯体の磁性およびそれに対する光照射効果の測定

ヘム蛋白質マトリクス中でのポルフィリン誘導体の反応性および物性評価

(後期)

核酸化学修飾法の開発

フェノチアジンカチオンラジカル誘導体の光および磁気物性の評価

硫酸転移酵素の生物学的機能解明を目的とした糖鎖合成

クレイ層間の極微小空間に拘束された高分子の運動特性と構造解析

ポルフィリンオリゴマーの合成と構造

有機分子および金属錯体のX線結晶構造解析

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

希土類薄膜磁石の高磁気特性

分子導体・磁性体の微小単結晶のX線構造解析

液体金属(強磁性体金属、半導体等も含む)の電流磁気効果に関する厚さとナノ構造の研究

III-V 窒化物半導体の中性欠陥の探索

キラル反強磁性体の ESR 測定

低次元有機磁性体 F_2NNNO の電子スピン共鳴実験による磁気相互作用の解明

コバルト酸化物の単結晶 X 線構造解析

ランタン型ルテニウム(II)(III)二核錯体の磁気物性

3d 遍歴電子と 4f 局在電子が共存した Tsai 型準結晶の磁気特性

ポルフィリン関連鉄(III)錯体の磁気的性質に関する研究

名古屋工業大学大学院工学研究科
名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センター

愛知教育大学

兵庫県立大学大学院工学研究科

岡崎統合バイオサイエンスセンター

名古屋工業大学大学院工学研究科

慶應義塾大学理工学部

法政大学工学部

徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部

秋田工業高等専門学校物質工学科

島根大学総合理工学部

愛媛大学総合科学研究支援センター

名古屋工業大学

東京大学物性研究所

広島大学大学院理学研究科

静岡大学電子工学研究所

愛知県立大学

兵庫県立大学大学院物質理学研究科

北海道大学大学院工学研究科

東邦大学医学部

産業技術総合研究所強相関電子技術研究所センター

北海道大学電子科学研究所

大阪大学大学院工学研究科

自然科学研究機構岡崎統合バイオサイエンスセンター

徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部

愛知教育大学

名古屋工業大学大学院工学研究科

愛媛大学総合科学研究支援センター

兵庫県立大学大学院工学研究科

名古屋工業大学大学院工学研究科

名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センター

東京大学物性研究所

静岡大学電子工学研究所

福井大学工学部

広島大学大学院理学研究科

大阪府立大学大学院理学系研究科

名古屋大学大学院理学研究科

島根大学総合理工学部

北海道大学大学院工学研究科

東邦大学医学部

リチウムイオン二次電池材料の磁気的性質
 希薄磁性半導体の微細組織制御に関する研究
 磁歪性酸化物微細磁性体の磁気特性に関する研究
 キラル分子磁性体における非線形磁気応答検出

関西大学化学生命工学部
 秋田工業高等専門学校
 秋田工業高等専門学校
 九州工業大学工学部

荒地 良典
 丸山 耕一
 丸山 耕一
 美藤 正樹

② 装置開発室

(前期)

配向分子の電子運動量分光装置のための多次元同時計測電子回路の開発
 ミリ波サブミリ波領域でのビーム伝送系に用いる高精度楕円金属鏡の開発

東北大学多元物質科学研究所
 大阪府立大学大学院理学系研究科

高橋 正彦
 小川 英夫

(後期)

ミリ波サブミリ波領域でのビーム伝送系に用いる高精度楕円金属鏡の開発
 電子顕微鏡用位相板および位相板ホルダーの微細加工検討
 ミリ波サブミリ波観測装置に組み込む、高精度ハーメチックウェーブガイドの製作技術の確立
 ドリフトチューブ用の電源の整備
 水熱合成用オートグレーブの制作

大阪府立大学大学院理学系研究科
 自然科学研究機構生理学研究所
 国立天文台先端技術センター
 高知工業高等専門学校
 広島大学大学院理学研究科

小川 英夫
 大河原 浩
 岡田 則夫
 長門 研吉
 秋田 素子

③ 計算機利用

遷移金属錯体の構造と反応機構に関する理論的研究
 金属錯体および生体関連分子の構造・反応・励起状態に関する理論的研究
 理論化学計算を積極的に活用した有機合成反応における選択性発現の解明
 化学反応の ab initio 計算による研究
 環境中および生体内の有機化学反応機構の解明
 時間依存密度汎関数法による機能性色材の光学スペクトルの高精度予測
 多成分分子理論の開発および水素結合系への応用
 蛋白質の動的構造と機能の解析
 界面非線形分光の理論
 非経験的分子軌道法によるクラスターの構造について
 分子軌道法によるインフルエンザ HA とシアロ糖鎖受容体の相互作用解析
 分子動力学法、及び ab initio 法による分子間相互作用の評価
 高分子電解質系における分子シミュレーション
 異核金属原子間に結合をもつランタン型複核錯体の電子状態
 化学反応の分類および分子設計に関する理論的研究
 分子、生物、表面の量子化学：励起状態と化学反応
 複合および非複合理論による複雑分子系の化学反応のシミュレーション
 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
 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
 電子状態計算によるタンパク質・低分子間相互作用解析
 機能性有機材料の電子物性解析に関する理論的研究
 計算科学の超精密化と巨大化
 Rigged QED 理論に基づく局所量に関する研究
 数値シミュレーションによる分光スペクトルの計算
 金属クラスターの原子構造、磁気構造、および磁気異方性に関する第一原理的研究
 ポリ塩化ビフェニルの励起状態のエネルギーおよび構造最適化
 生体分子を含むナノ物質の構造と機能に関する第一原理計算
 酵素系における化学反応に関する量子化学的研究
 分子の電子状態と反応動力学に関する理論的研究
 モデル内殻ポテンシャル法による新規機能分子の電子状態の理論的探求
 固体表面吸着分子と入射イオンとの相互作用による吸着分子解離・脱離過程
 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
 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
 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
 励起状態とその緩和過程に関する理論的研究

お茶の水女子大学
 お茶の水女子大学大学院
 愛知教育大学
 愛媛大学
 茨城大学
 横浜国立大学
 横浜市立大学
 横浜市立大学大学院
 計算科学研究センター
 岡山理科大学
 岐阜大学
 岐阜大学
 岐阜大学工学部
 岐阜大学工学部
 岐阜大学工学部
 京都大学
 京都大学
 京都大学

京都大学大学院
 京都大学大学院
 京都大学大学院
 京都大学大学院工学研究科
 京都大学大学院工学研究科
 京都大学大学院理学研究科
 金沢大学自然科学研究科

金沢大学大学院自然科学研究科
 金沢大学大学院自然科学研究科
 九州大学
 九州大学
 九州大学大学院
 九州大学大学院理学研究院
 慶応義塾大学

慶應義塾大学
 慶應義塾大学
 慶應義塾大学

福田 豊
 鷹野 景子
 赤倉松次郎
 長岡 伸一
 森 聖治
 千住 孝俊
 立川 仁典
 木寺 詔紀
 森田 明弘
 中川 幸子
 橋本 智裕
 桑田 一夫
 寺尾 貴道
 海老原昌弘
 酒井 章吾
 江原 正博
 諸熊 奎治
 石田 俊正
 榊 茂好
 仲西 功
 田中 一義
 福田 良一
 立花 明知
 谷村 吉隆
 小田 竜樹
 徳村 邦弘
 斎藤 峯雄
 吉澤 一成
 南部 伸孝
 三好 永作
 季村 峯生
 ファジャール
 プラディプタ
 光武亜代理
 山内 淳
 藪下 聡

分子シミュレーションによるヒト β -ガラクトシダーゼの反応定数の予測	慶應義塾大学理工学部	柚木 克之
分子の励起状態とその動的挙動の研究	広島大学大学院	岩田 末廣
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	相田美砂子
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	田林 清彦
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	斎藤 稔
擬1次元 1/4 充填有機分子性固体 (EDO-TTF) ₂ PF ₆ の光誘起相転移の第1原理計算による解明	高エネルギー加速器研究機構	岩野 薫
ランダム媒質中のガラス転移	高知工科大学	宮崎 州正
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	佐賀大学理工学部	海野 雅司
シリコンナノ構造体の原子構造および電子状態に関する理論研究	三重大学大学院工学研究科	秋山 亨
ペロブスカイト型遷移金属酸化物の機能発現機構の理論的研究	三重大学大学院工学研究科	大西 拓
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	野々山信二
共役分子の励起状態と光学的性質に関する研究	産業技術総合研究所	下位 幸弘
第一原理分子動力学計算による液体及びアモルファスのポリモルフィズムの研究	産業技術総合研究所	森下 徹也
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	産業技術総合研究所	石田 豊和
色素増感太陽電池用の色素の吸収スペクトルに関する理論的研究	産業技術総合研究所エネルギー技術研究部門	北尾 修
シリコン表面上の水分子を介した生体分子相互作用の解明	分子科学研究所	宇理須恒雄
生体系を規範とする柔軟なナノサイズ分子の分子設計	分子科学研究所	永田 央
積分方程式を用いた溶液内分子の電子状態理論	分子科学研究所	吉田 紀生
ヘテロ環化合物とその分子集合体に関する量子化学的研究	分子科学研究所	戸村 正章
光機能性リガンドの DFT 計算	分子科学研究所	江 東林
金属クラスター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
金属アセチリド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
凝縮系ダイナミクスの多次元測定的解析と生体高分子の構造変化ダイナミクスに関する理論研究	分子科学研究所	斉藤 真司
前周期遷移金属錯体の構造と反応性に関する理論的研究	分子科学研究所	石田 豊
ピロール環を基盤とした超分子集合体の構築	分子科学研究所	前田 大光
ハロゲン架橋金属錯体の電子状態シミュレーション	分子科学研究所	前島 展也
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
金属酵素モデルとしての金属錯体の理論計算	分子科学研究所	藤井 浩
NAD ⁺ /NADH 型配位子を有するルテニウム錯体に関する理論研究	分子科学研究所	木村 将浩
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
共役分子の先進的電子状態モデリングと大規模多参照問題へのチャレンジ	分子科学研究所	柳井 毅
ボウル型共役化合物の物性調査	分子科学研究所	櫻井 英博
マルチドメインタンパク質のダイナミクス解析	分子科学研究所	笹川 拓明
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
ガラス系の遅い動力学的基礎研究	首都大学東京	赤石 暁
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	波田 雅彦
2 自由度系における動的局在とカオスのトンネル効果	首都大学東京大学院理工学研究科	石川 明幸
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	天辰 禎晃
励起状態を生成するペニンギオン化の生成過程	新潟大学	徳江 郁雄
凝縮系における分子ダイナミクス	神戸大学	富永 圭介
分子動力学計算を用いた、RNA 結合タンパク質 Pumilio の塩基認識特異性の研究	神戸大学大学院自然科学研究科	栗崎以久男
分子内および分子間電子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
アントシアニン色素に関する量子化学的研究	星薬科大学	坂田 健
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	鳥居 肇
金属錯体に関する理論的研究	静岡理工科大学	関山 秀雄
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	太田 幸則
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	星野 忠次
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	中井 浩巳
π -d 相互作用によるペプチドナノリングの金属イオン捕捉過程	早稲田大学	武田 京三
1,4-ジヒドロキシナフタレンの 0.5~6 テラヘルツにおける分子間・分子内相互作用のモデル化	大阪大学	猿倉 信彦

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	奥村 光隆
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
実空間差分法に基づくナノ構造の第一原理電子状態・電気伝導特性計算手法の開発	大阪大学大学院工学研究科	小野 倫也
金属含有タンパク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
胆汁酸ミセルの MD シミュレーション	大分大学	中島 俊男
ナノ・バイオ物質の電子状態・構造・機能の相関	筑波大学	押山 淳
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	岡田 晋
次世代 LSI 用ゲート電極材料とゲート絶縁膜の界面物性の第一原理計算による設計	筑波大学大学院数理物質科学研究科	白石 賢二
ハロ酸脱ハロゲン化酵素とシステイン合成酵素の反応機構解析	長浜バイオ大学	中村 卓
階層的電子状態計算理論とナノ構造プロセス	鳥取大学工学部	星 健夫
ポイントフッ素化有機化合物の分子配座と分子間相互作用の関係	鳥取大学工学部物質工学科	早瀬 修一
ナノチューブ・フラーレン・ナノカーボン系の分子物性と固体物性の総合研究	東京工業大学	斎藤 晋
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	櫻井 実
フェノール・希ガスクラスターにおけるイオン化誘起異性化反応～量子化学計算を用いた反応経路～	東京工業大学資源化学研究所	藤井 正明
遷移金属錯体を触媒とするアルキン類の求電子的活性化に基づく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
新規ホウ素求核種ポリリチウムを用いた求核的ホウ素導入法によるポリル金属錯体の合成と性質の解明	東京大学	山下 誠
生体分子の光化学反応とアクチニド錯体の化学反応に関する量子化学計算とシミュレーション	東京大学	常田 貴夫
第一原理電子構造理論の拡張と物質設計	東京大学	藤原 毅夫
コレステロールの有無による膜環境変化の分子動力学シミュレーション	東京大学	藤田 直也
過冷却液体の動的不均一性による種々の輸送異常の研究	東京大学生産技術研究所	古川 亮
電子・負イオンのヘテロ溶媒和構造と安定化メカニズム	東京大学大学院	永田 敬
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	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	大和田智彦
分子軌道法による反応予測を基盤とする新有機合成反応の開発	東京大学大学院	中村 栄一
イオン液体および溶液系の液体構造の研究	東京大学大学院	浜口 宏夫
鎖状化合物の安定性および反応性に関する理論研究	東京大学大学院	友田 修司
ホスフィンスルホン酸／Pd 触媒を用いた酢酸ビニル／一酸化炭素共重合系の反応機構解明	東京大学大学院工学系研究科	野崎 京子
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
SVM を用いた蛋白質のドメインリンカー予測法の開発	東京農工大学工学府	蝦名 鉄平
低振動数モードのラマン強度に関する分子軌道論からの研究	東北大学	山北 佳宏
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	福村 裕史
コンピュータ支援創薬を指向したタンパク質ーリガンド複合体の分子シミュレーション	東北薬科大学	小田 彰史
ホタルの生物発光に関与するジオキセタノン分解反応における酵素ルシフェラーゼの活性部位が及ぼす影響	東洋大学大学院生命科学研究科	酒井 博則
計算化学による有機化学反応の追跡	奈良教育大学教育学部	山邊 信一
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	平井 國友
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
ab initio MO 法による金属イオンー抽出剤錯体の構造研究	日本原子力研究開発機構	佐伯 盛久
薬剤分子と生体膜の相互作用に関する分子動力学シミュレーションによる研究	姫路獨協大学	吉井 範行
生体内素反応過程および分子複合体形成における新規機能性発現に関する量子化学的研究	福岡大学	新矢 時寛
レプリカ交換MDによるペプチドフラグメントのシミュレーション	物質・材料研究機構	西野 正理
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	島 信幸
金属クラスターへの分子吸着・反応過程の解明	豊田工業大学	近藤 保
高分子濃厚系における高分子鎖の動的性質	防衛大学校	萩田 克美
化学反応および生体分子系における選択性と統計性の原理的理解	北海道大学電子科学研究所	小松崎民樹
有機分子の構造と大振幅振動ポテンシャルの分子軌道計算と密度汎関数計算	北里大学一般教育部	江川 徹
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
穴のあいたフラーレンの構造および分子包接特性に関する理論的研究	名古屋大学大学院	岩松 将一

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	古賀 伸明
溶液内化学反応の理論研究	名古屋大学大学院	大峰 巖
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
タンパク質の分子内長距離情報伝達機構の解析	名古屋大学大学院理学研究科	倭 剛久
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	本多 一彦
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	高橋 順子
界面および凝縮相における分子ダイナミクスの理論的解析	理化学研究所	田原 太平
分子軌道計算を基盤とする単核及び二核金属触媒の設計と開発	立教大学	山中 正浩
蛋白質の構造機能相関計算	立命館大学	高橋 卓也
キラルリン酸触媒を用いた不斉反応の立体選択性制御因子の解明と遷移状態構造のデータベース化の試み	琉球大学	安藤 香
非線形量子系におけるソリトンとカオス	鈴鹿国際大学	大野 稔彦

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～'00		'01		'02		'03		'04		'05		'06		'07		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	81	634	7	41	5	36	5	70	3	26	1	13	1	8	2	27	人数： 登録人数
協力研究	3,038	3,602	100	223	125	253	101	246	100	263	96	232	84	208	91	217	〃
招へい 協力研究	188	189	5	6	1	1	1	1	—	—	—	—	—	—	—	—	〃
所長 招へい	2,435	2,435	385	385	313	313	308	308	160	160	100	100	162	162	118	118	人数： 旅費支給者
研究会	249	3,621	6	129	11	332	8	229	13	304	11	206	13	310	9	149	〃
施設利用 I	1,475	3,230	49	139	63	188	54	150	55	154	53	106	47	86	55	106	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)	3,618	11,236	144	584	134	558	120	525	154	587	132	510	142	538	139	607	〃
合計	11,084	24,947	696	1,507	652	1,681	597	1,529	485	1,494	393	1,167	449	1,312	414	1,224	
経費	445,420		30,994		37,986		30,794		—		—		—		—		千円

＊施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用

('07 年度の数値は、2007.12 末現在)

分子科学研究所UVSOR共同利用研究実施一覧

年度 項目	'85～'00		'01		'02		'03		'04		'05		'06		'07		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	0	0	0	0	0	0	—	—	—	—	—	—	—	—	〃
研究会	30	464	1	13	0	0	1	51	1	16	1	59	3	37	2	55	人数： 旅費支給者
施設利用	1,717	8,485	157	707	160	805	129	715	128	582	126	643	113	494	149	670	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	2,169	10,553	158	720	160	805	130	766	129	598	127	702	116	531	151	725	
経費	184,301		16,512		15,780		13,884		—		—		—		—		千円

('07 年度の数値は、2007.12 末現在)

3-4 国際交流と国際共同研究

3-4-1 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 外国人研究者数の推移（過去10年間）

年度	長期滞在者			短期滞在者		
	外国人研究職員*	日本学術振興会招へい外国人研究者	特別協力研究員等	研究会	訪問者	合 計
97	17	17	20	99	19	172
98	18	21	11	84	33	167
99	16	16	16	92	53	193
00	13	9	12	43	23	100
01	16	14	10	69	68	177
02	15	9	13	125	110	272
03	14	8	56	20	22	120
04	15	6	55	16	133	225
05	9	2	46	0	76	133
06	10	4	47	52	150	263
合計	143	106	286	600	687	1,822

* 03 以前は文部科学省外国人研究員

表2 外国人研究者数の国別内訳の推移（過去10年間）

年度	アメリカ	イギリス	ドイツ	フランス	韓国	中国	ロシア	その他	合計
97	41	16	7	7	12	21	15	53	172
98	30	17	13	10	12	12	20	53	167
99	53	16	20	8	15	13	15	53	193
00	26	8	8	7	13	10	7	21	100
01	45	14	20	8	23	13	8	46	177
02	31	8	22	10	45	40	9	107	272
03	27	3	10	8	14	5	6	47	120
04	20	5	7	17	47	45	5	79	225
05	17	9	21	26	18	17	5	20	133
06	44	11	10	24	38	38	1	97	263
合計	334	107	138	125	237	214	91	576	1,822

表3 海外からの研究者（2007年度）

1. 外国人運営顧問			
MILLER, H. William	アメリカ	カリフォルニア大学バークレー校教授	
LAUBEREAU, Alfred	ドイツ	ミュンヘン工科大学教授	
2. 外国人客員研究部門			
ALLAKHVERDIEV, I. Suleyman	アゼルバイジャン	ロシア科学アカデミー基礎生物学研究所主席研究員	18.10. 1-19. 6.30
KIM, Bongsoo	韓国	チャンウォン国立大学	19. 3. 1-20. 2.29
3. 分子科学研究所外国人研究職員			
CHOI, Cheol Ho	韓国	慶北大学助教授	19. 3. 1-20. 1.31
CHAUDHURI, K. Tapan	インド	インド科学技術研究所助教授	19. 7.30-20. 7.29
4. 日本学術振興会招へい外国人研究者等			
ALLAKHVERDIEV, I. Suleyman	アゼルバイジャン	ロシア科学アカデミー基礎生物学研究所主席研究員	20. 1.21-20. 3.20
PAVLOV, Lubomir	ブルガリア	科学アカデミー教授	19. 5.31-20. 3.30
VOLETY, Srinivas	インド	Center for Cellular and Molecular Biology Technical officer	19. 7. 1-20. 4.30
KIMBERG, Victor	ロシア		18. 8. 7-20. 8. 6
KOWALSKA, Aneta	ポーランド	ウッジ工科大学化学者	18.10.24-20.10.23
GUO, Jia	中国	復旦大学博士課程学生	19.10. 1-21. 9.30
5. 国際共同研究			
LU, Jing	中国	北京大学物理学科助教授	19. 4.20-19. 5. 1 19. 7. 8-19. 7.18 19.12. 8-19.12.18
ZHOU, Jing	中国	北京大学物理学科大学院生	19. 4.20-19. 7.18 19.12. 8-19.12.18
SIMON, Marc	フランス	LCPMR, Universite Pierre et Marie Curie 教授	19. 5. 6-19. 5.17
GUILLEMIN, Renand	フランス	CNRS, Laboratoire de Chimie 研究員	19. 5. 6-19. 5.17
VIJAYARAGHABAVAN, Dolly	インド	Indian Institute of Chemical Technology 大学院生	19. 5. 7-19. 7.31
SHAR, Shailesh R	インド	The MS University of Baroda 准教授	19. 5.14-19. 6.30
AKA, Gerard Philippe	フランス	Ecole Nationale Supérieure de Chimie Paris 教授	19. 6. 2-19. 6.16
LOISEAU, Pascal	フランス	Ecole Nationale Supérieure de Chimie Paris 准教授	19. 6. 2-19. 6.23
XU, Ke	フランス	Ecole Nationale Supérieure de Chimie Paris 大学院生	19. 6. 2-19. 6.23
GUO, Jinghua	アメリカ	University of California 主任研究員	19. 6.10-19. 6.21
KWON, Yong Seung	韓国	成均館大学教授	19. 7.17-19. 8. 7
LEE, Kyung Eun	韓国	成均館大学大学院生	19. 7.17-19. 7.25
SONG, Yun Young	韓国	成均館大学大学院生	19. 7.17-19. 8. 7
MUCKERMAN, James	アメリカ	Brookhaven National Laboratory, Senior Chemist	19. 9. 7-19. 9.13
BIELAWSKI, Serge	フランス	Universite des Sciences et Technologies de Lill 教授	19. 9.17-19.10.14
SZWAJ, Christophe	フランス	Universite des Sciences et Technologies de Lill 講師	19. 9.17-19.10.14
ELAND, John Hugh David	イギリス	University of Oxford 名誉教授	19.10. 4-19.11. 4
GUELMOUKHANOV, Faris	イギリス	The Royal Institute of Technology 教授	19.10. 7-19.10.20
SASTRY, Narahari	インド	Indian Institute of Chemical Technology 准教授	20. 1.23-20. 1.30
6. 所長招へい協力研究員			
PAL, Tarasankar	インド	Indian Institute of Technology 教授	19. 9. 3-19. 9. 5
馬 曉東	ドイツ	Max-planck Institut fuer Mikrostruktur physik 博士研究員	19.11.28-19.12.16
7. 特別訪問研究員			
IM, Hojun	韓国		18.10. 1-19. 3.31
THOMAS, Richard D.	スウェーデン		19. 4. 1-19. 5. 3
BOO, Bong Hyun	韓国		19. 7. 1-19. 7.31

8. 招へい研究員			
OLEG, V. Prezhd	アメリカ	University of Washington 教授	19. 4.25–19. 4.27
TOY, Patrick H.	中国	The University of Hong Kong 準教授	19. 6. 7–19. 6. 8
CHEN, Zhongfang	アメリカ	University of Georgia 研究員	19. 7. 2–19. 7. 4
趙 翔	中国	Xi'an Jiaotong University 教授	19. 7.15–19. 8.27
BU, Xian-He	中国	南開大学教授	19. 7.21–19. 8. 6
CASTNER, Edward W.	アメリカ	The State University of New Jersey 教授	19. 8. 1–19. 8. 2
MARTIN, Kotora	チェコ	Charles University 教授	19. 8. 6–19. 8. 9
WANG, Changchun	中国	復旦大学教授	19. 8. 9–19. 8.17
SUTCLIFFE, Brian Terence	ベルギー	Universite Libre de Bruxelles Visiting Professor	19. 8.20–19.11.11
SUBRAMANIAM, Chandramouli	インド	Indian Institute of Technology, Madras 大学院生	19.10.18–19.11.30
MILLER, R. J. Dwayne	カナダ	University of Toronto 教授	19.10.31–19.11.11
SALIKHOV, Kev M.	ロシア	the Russian Academy of Science Kazan Physical-Technical Institute 教授	19.11. 4–19.11.14
CHAMPION, Paul M.	アメリカ	Northeastern University Professor	19.11. 7–19.11.13
WAKER, Robert A.	アメリカ	University of Maryland Professor	19.11. 7–19.11.13
GREEN, Michael T.	アメリカ	The Pennsylvania State University Professor	19.11. 7–19.11.13
HANH, Huynh Boi	アメリカ	Emory University Professor	19.11. 8–19.11.13
WEINKAUF, Rainer	ドイツ	Heinrich Heine University Professor	19.11. 8–19.11.13
GEDROC, David P.	インド	Indiana University Professor	19.11. 9–19.11.14
MANHO, Lim	韓国	Pusan National University Professor	19.11. 9–19.11.13
MYROSLAV, Holovko	ウクライナ	Institute for Condensed Matter Physics National Academy of Sciences of Ukraine 教授	19.11.20–19.12. 1
JUNGWIRTH, Pavel	チェコ	Academy of Sciences of the Czech Republic Organisation 研究グループ主任	19.11.25–19.11.26
JUNGWIRTH, Pavel	チェコ	Academy of Sciences of the Czech Republic Organisation 研究グループ主任	19.11.28–19.11.29
PETROSKY, Yamakoshi Tomio	アメリカ	The University of Texas at Austin 教授	20. 1. 6–20. 2. 8
AKA, Gerard Philippe	フランス	Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris(ENSCP) 教授	20. 1.26–20. 2. 2
SHAKHNOVICH, Eugene	アメリカ	Harvard University 教授	20. 2.18–20. 2.24
TSALLIS, Constantino	ブラジル	Centro Brasileiro de Pesquisas 教授	20. 2.24–20. 2.26
BRADY, John	アメリカ	Temple University 大学院生	20. 3.15–20. 3.30
SMITH, Stanley	アメリカ	Temple University 研究員	20. 3.21–20. 3.30

3-4-2 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ところとなり、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。これに伴い、分子科学研究所主催で「岡崎COEコンファレンス」を開催することになった。一方、所外の分子科学研究者は分子科学研究所に申請するのではなく、所属している各COE機関から文部省に申請することになった。しかし、「岡崎コンファレンス」では可能であった助手クラスを含む若手研究者からは事実上提案できなくなるなど、各COE機関が行う中規模国際研究集会は小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」が果たしてきた役割を発展的に解消するものにはなり得なかった。その後、COEは認定機関だけのものではないなどの考えからいろいろなCOE予算枠が生み出され、その中で国際研究集会は、2004年からの法人化に伴い日本学術振興会において一本化され、全国的に募集・選考が行われることになった。ただし、この枠はシリーズになっている大規模国際会議を日本に誘致したりする際にも申請できるなど、公募内容がかなり異なっている。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。

以上のように、全国の分子科学研究者からの申請に基づく「岡崎コンファレンス」を引き継ぐような小規模国際研究集会の枠組みをこれまで探索してきたが、継続的に開催していくためには分子研独自の事業として運営費交付金を使うしか方策がないことがわかった。その検討結果を受けて、「岡崎コンファレンス」を再開することを決断し、平成18年度に6年半ぶりに第66回岡崎コンファレンスを開催した。また平成19年度は公募方式によって開催課題を募集し、1件を採択して下記の第67回岡崎コンファレンスを開催した。今後、当分の間、申請の中から毎年1件のみ採択して開催し、その実績を踏まえて件数を増やすかどうか再検討する予定である。

会 議 名：第67回岡崎コンファレンス

“Molecular Science and Chemical Biology of Biomolecular Function”

期 間：2007年11月10日～12日

場 所：岡崎コンファレンスセンター

組織委員：水谷泰久（阪大院理、提案代表者）、青野重利（岡崎統合バイオ、所内対応者）、石森浩一郎（北大院理）、斎藤正男（東北大多元研）、関谷博（九大院理）、田原太平（理研）、藤井正明（東工大資源研）

内 容：

分子科学は、化学と物理学の境界領域として誕生し、発展してきた。その拡大したフロンティアのひとつとして、生体機能に代表される自己組織化した分子システムの理解と制御があげられる。他方、化学と生物学との境界領域では、これまでに生化学、生物無機化学などの融合分野が発展してきた。これらは今日ケミカルバイオロジーとして統合的に呼ばれている。分子科学とケミカルバイオロジーはアプローチを異にするものの、そのゴールは「生体機能の

理解」という共通のものである。そこで、それぞれの研究の最前線を紹介し、それらに対する議論を行うためのフォーラムとしてこのコンファレンスを企画した。分子科学からのトピックスでは、個々の蛋白質の各論ではなく、水素結合ネットワークおよびソフトな界面という生体機能発現にかかわる根源的な問題に焦点を当てた。また、生体機能の理解に向けた先端計測法についても議論を行った。ケミカルバイオロジーからは、蛋白質の構造－機能相関、活性部位のモデル化合物および人工設計、細胞での恒常性維持機構など、生体機能についての具体的なトピックスが提供された。

本岡崎コンファレンスでは、以下に示すような合計 31 件の招待講演からなる 5 つのオーラルセッションとポスターセッションを設け、上記トピックスを中心として議論を行った。

November 10

Opening address (Hiroki Nakamura, Director General, IMS)

Introductory talk (Yasuhisa Mizutani, Osaka Univ.)

Session 1. Hydrogen bonding network and proton transfer

Discussion leader: Yasuhiro Ohshima (IMS)

Infrared Spectroscopy of Large-Sized Protonated Clusters: Morphological Development of Hydrogen Bond Network

Asuka Fujii (Tohoku Univ.)

Real-time Observation of Excited State Hydrogen Transfer in H-bonded Clusters by UV-IR-UV Picosecond Time-resolved IR Spectroscopy

Masaaki Fujii (Tokyo Inst. Tech.)

Discussion leader: Kiyokazu Fuke (Kobe Univ.)

Spectroscopic Study on Hydrogen-Bonded Clusters in the Gas Phase: New Aspects of Multiple-Proton Transfer Reactions

Hiroshi Sekiya (Kyushu Univ.)

Electronic properties of isolated open shell and closed shell ions of biomimetic molecules

Rainer Weinkauf (Heinrich-Heine-Univ. Düsseldorf)

The Determinants of Light-Energy and Light-Signal Conversion in Rhodopsins

Hideki Kandori (Nagoya Inst. Tech.)

Session 2. Properties and dynamics of soft interface

Discussion leader: Hiroshi Onishi (Kobe Univ.)

Studies of Solvation at Liquid Interfaces with Nonlinear Optical Spectroscopy

Robert A. Walker (Univ. Maryland)

New Nonlinear Electronic and Vibrational Spectroscopy for Interfaces

Tahei Tahara (RIKEN)

Electronically-Vibrationally doubly resonant SFG spectroscopy; a sensitive and selective probe for aromatic molecules at interfaces

Taka-aki Ishibashi (Hiroshima Univ.)

Discussion leader: Tahei Tahara (RIKEN)

Apply Chemistry to Buried Interfaces: Fourth-order Raman Spectroscopy and Dynamic Force Microscopy

Hiroshi Onishi (Kobe Univ.)

Self-assembly of light-harvesting polypeptide/pigment complexes for construction of an artificial photoenergy conversion system

Mamoru Nango (Nagoya Inst. Tech.)

November 11

Session 3. Protein structure and dynamics: spectroscopy and crystallography

Discussion leader: Shigeichi Kumazaki (Kyoto Univ.)

Spectroscopy of Single Proteins at Liquid Helium Temperature

Michio Matsushita (Tokyo Inst. Tech.)

Investigations of Coherent Motion and Ligand Binding in Heme and Heme Proteins

Paul M. Champion (Northeastern Univ.)

Dynamics of CO rebinding to guanidine HCl-denatured heme proteins

Manho Lim (Pusan National Univ.)

Discussion leader: Yasuhisa Mizutani (Osaka Univ.)

Micro-regulation of oxygenic photosynthesis unveiled by fluorescence microspectroscopy

Shigeichi Kuamazaki (Kyoto Univ.)

Living Cell Molecular Science: A New Frontier
Hiro-o Hamaguchi (Univ. Tokyo)

Discussion leader: Teizo Kitagawa (Toyota Physical and Chemical Research Inst.)

Probing Chemical Reactions in Intact Whole Mitochondria through Analysis of Molecular Vibrations
Takashi Ogura (Univ. Hyogo)

Structure and Function of Fe Centers in Proteins revealed by Mössbauer Investigations
Boi Hanh Vincent Huynh (Emory Univ.)

Understanding C-H Bond Activation in Heme Proteins
Michael T. Green (Penn State Univ.)

Discussion leader: Masao Ikeda-Saito (Tohoku Univ.)

Heme Binding and Heme-mediated Oxidative Modification in Heme-regulated Proteins
Koichiro Ishimori (Hokkaido Univ.)

Molecular Mechanism by Which Heme-Based Sensor Proteins Sense Their Effector Gas Molecules
Shigetoshi Aono (Okazaki Institute for Integrative Bioscience)

Discussion leader: Koichiro Ishimori (Hokkaido Univ.)

Cytochrome P450: Its Variety and Vitality
Yoshitugu Shiro (RIKEN)

Catalytic Mechanism of Heme Oxygenase
Masao Ikeda-Saito (Tohoku Univ.)

Banquet

November 12

Session 4. Design of active sites of proteins and model complexes

Discussion leader: Shunichi Fukuzumi (Osaka Univ.)

Role of Heme-Propionate Side Chains in Cytochrome P450cam: Each Propionate is Essential to Retaining the Enzyme Activity
Takashi Hayashi (Osaka Univ.)

Monooxygenase Activity of Dioxygen Carrier Copper Protein Hemocyanin
Shinobu Itoh (Osaka City Univ.)

Introduction of Metal Cofactors in Protein Cages: Construction of Organometalloproteins
Yoshihito Watanabe (Nagoya Univ.)

Discussion leader: Yoshihito Watanabe (Nagoya Univ.)

Reactivity of Peroxodiiron(III) and Dicopper(II) Complexes: Functional Models for Dioxygen Binding and Activating Diiron and Dicopper Metalloenzymes

Masatatsu Suzuki (Kanazawa Univ.)

Bioinspired Artificial Photosynthesis
Shunichi Fukuzumi (Osaka Univ.)

Session 5. Biomolecular function: from molecules to cells

Discussion leader: Shigetoshi Aono (Okazaki Institute for Integrative Bioscience)

Metal Sensor Proteins: To Switch or not to Switch
David P. Giedroc (Indiana Univ.)

Molecular Machineries for Energy Conversion and Photosynthetic Bio-Assimilation in Chloroplasts
Toshiharu Hase (Osaka Univ.)

Discussion leader: Toshiharu Hase (Osaka Univ.)

Mechanism Underlying the Iron-Dependent regulation of the Iron-Sensing Transcription Factor Aft1p in *Saccharomyces cerevisiae*
Kazuhiro Iwai (Osaka City Univ.)

Carbon monoxide as a guardian for liver injury: A novel mechanism mined out by metabolome analyses
Makoto Suematsu (Keio Univ.)

Closing address (Masao Ikeda-Saito, Tohoku Univ.)

3-4-3 分子科学研究所国際共同研究

分子科学研究所は、創設以来多くの国際共同研究を主催するとともに客員を始めとする多数の外国人研究者を受け入れ、国際共同研究事業を積極的に推進し、国際的に開かれた研究所として高い評価を得ている。近年、科学研究のグローバル化が進み、また、東アジア地区における科学研究の急速な活性化の流れの中で、21世紀にふさわしい国際共同研究拠点としての体制を構築することが急務となっている。

このような状況に鑑み、平成16年度、分子科学研究所は「物質分子科学」、「光分子科学」、「化学反応ダイナミックス」の3つの重点分野について、国際共同研究の推進プログラムを独自の努力により試行し、分子科学研究所を中心とした分子科学分野の国際共同研究の輪を広げる試みを開始した。この新しい国際共同研究のプログラムでは、研究所内の教員による国際共同研究の提案を受け、所内委員による審査を経て、①海外の教授、准教授クラスの研究者の10日間程度の招聘、②分子研側からの共同研究に関わる教員の海外出張、③アジアを中心とする若手外国人研究者の6ヶ月以内の滞在、などを伴う国際共同研究が推進されている。本プログラムによる国際共同研究の採択件数は初年度（平成16年度）7件、平成17年度10件、平成18年度12件、本年度10件と推移しており、分子科学研究所の国際的な研究活動の活性化に大きく寄与している。本年度は、アジアの若手研究者の長期滞在、フランス、韓国、中国、米国、ドイツ、インド、英国等の研究者の招聘および分子科学研究所の研究者の海外訪問などを通して共同研究が推進された。昨年度開始されたアジア研究教育拠点事業とともに、来年度以降も国際共同研究の拠点としての分子科学研究所の活動に寄与することが期待される。

2007年度実施状況

代表者	研 究 課 題 名
小杉 信博	軟X線共鳴分光に関する国際共同研究（UVSOR BL3U）
木村 真一	強相関係の局在から遍歴に至る電子状態変化の光学的・光電的研究
加藤 政博	自由電子レーザー発振のビーム力学的研究
櫻井 英博	バッキーボウルカラム構造に関する研究
繁政 英治	電子・イオン同時計測による共鳴オージェダイナミックスの解明
永瀬 茂	単層カーボンナノチューブの化学修飾と機能化の理論研究
江 東林	光捕集アンテナの分子設計および自己組織化に関する研究
平等 拓範	COB系結晶によるマイクロチップレーザーの高効率波長変換
大森 賢治	振幅と位相をデザインした光パルスによる原子分子の量子制御
田中 晃二	水の光化学的酸化反応と二酸化炭素の多電子還元反応

3-4-4 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え書きが交わされ、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。またこの覚え書きは2004年に更新された。その後の韓国側の組織体制の都合上、2006年に、この覚え書きは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た。今後はこの2者の事業として継続する予定である。

日韓合同シンポジウムは、第1回目を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。最近では、2003年1月に浦項工科大学で第10回合同シンポジウム「理論化学と計算化学：分

子の構造、性質、設計」が、2005年3月に分子科学研究所で第11回合同シンポジウム「分子科学の最前線」が開催された。2005年の第11回合同シンポジウムは、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。2007年7月には済州島で第12回シンポジウム「光分子科学の最前線」が開催された（このシンポジウムの実行にあたっては、日本学術振興会（JSPS）と韓国化学技術財団（KOSEF）による二国間セミナープログラムに申請して採択され、この援助を受けて実施することができた）。次回の日韓分子科学シンポジウムは、2009年に日本で開催する予定（テーマは2008年度から議論の予定）である。これらの継続的なシンポジウムでは、活発な研究発表と研究交流はもとより、両国の研究者間の親睦が高められてきている。

また、1991年以降韓国のさまざまな大学および研究所から毎年3名の研究者を4ヶ月間ずつ招聘して共同研究を実施している。

3-4-5 日中共同研究

日中共同研究は、1973年以来相互の研究交流を経て、1977年の分子科学研究所と中国科学院科学研究所の間での研究者交流で具体的に始まった。両研究所間の協議に基づき、共同研究分野として、（1）有機固体化学、（2）化学反応動力学、（3）レーザー化学、（4）量子化学をとりあげ、合同シンポジウムと研究者交流を実施している。2004年中国科学院化学研究所と覚書きの更新を行い、上記4分野を（1）物質科学、（2）光科学、（3）理論および計算科学の3分野に整理した。有機固体化学では1983年に第1回の合同シンポジウム（北京）以来3年ごとに合同シンポジウムを開催してきた。1995年10月の第5回日中シンポジウム（杭州）では日本から20名が参加し、引き続いて1998年10月22日－25日に第6回の合同シンポジウムを岡崎コンファレンスセンターで開催した。中国からは若手研究者10名をふくむ34名が、日本からは80名が参加し、盛況のうちに終了した。第7回は2001年11月19日－23日に広州の華南理工大学で開催され、日本からは井口洋夫教授や白川英樹教授をふくむ26名が参加し、中国からは90名が参加した。第8回は2004年11月11日－14日に岡崎コンファレンスセンターで開催した。中国からは40名が日本からは70名が参加した。第9回は2007年10月27日－29日に北京友誼賓館で開催され、日本からは52名が参加し、中国からは69名が参加した。

3-4-6 東アジア多国間共同研究

21世紀はアジアの時代と言われている。分子科学においても欧米主導の時代を離れ、新たな研究拠点をアジア地域に構築し、さらにはアジア拠点と欧米ネットワークを有機的に接続することによって、世界的な研究の活性化と新しいサイエンスの出現が期待される。

日本学術振興会は、平成17年度より新たな多国間交流事業として、アジア研究教育拠点事業（以下アジアコア事業）を開始した。本事業は「我が国において先端的又は国際的に重要と認められる研究課題について、我が国とアジア諸国の研究教育拠点機関をつなぐ持続的な協力関係を確立することにより、当該分野における世界的水準の研究拠点の構築とともに次世代の中核を担う若手研究者の養成を目的として（日本学術振興会ホームページより抜粋：http://www.jsps.go.jp/j-bilat/acore/01boshu_acore.html）」実施されるものである。分子科学研究所は、「物質・光・理論分子科学のフロンティア」と題して、分子科学研究所、中国科学院化学研究所、韓国科学技術院自然科学部、台湾科学院原子分子科学研究所を4拠点研究機関とする日本、中国、韓国、台湾の東アジア主要3カ国1地域の交流を、アジアコア事業の一環として平成18年度にスタートさせた。アジアコア事業の特徴の一つとして、互いに対等な協力体制に基づく双方向交流が挙げられる。本事業においても、4拠点研究機関のそれぞれがマッチングファンドを自ら確保し

ており、双方向の活発な研究交流が着実に進展している。また、4 拠点研究機関以外の大学や研究機関が研究交流に参加することも可能である。平成 19 年度の活動の概要を以下にまとめる。

(1) 共同研究

物質分子科学においては、 π 電子系有機分子を基盤とする機能性ナノ構造体の構築と機能開拓、先端ナノバイオエレクトロニクス、自己組織化金属錯体触媒の開発（以上、中国との共同研究）、超高磁場 NMR を用いた蛋白質ーペプチド相互作用の精密解析（韓国との共同研究）、バッキーボウルの合成と物性（台湾との共同研究）に関する研究が進展した。

光分子科学においては、特異なナノ分子システムのナノ光学、テラヘルツ時間領域分光法を用いたジシアノビニル置換芳香族分子の分子間振動および構造（以上、中国との共同研究）、コヒーレントレーザー分光による反応ダイナミックスの解明（台湾との共同研究）に関する研究が進展した。

理論分子科学においては、生体分子中における量子過程の計算機シミュレーション（台湾との共同研究）に関する研究が進展した。

(2) セミナー

「中国・日本機能性分子の合成と自己組織化シンポジウム」（北京）、「日中ナノバイオ若手研究者交流」（北京）、「有機固体の電気伝導と光伝導に関する日中合同セミナー」（北京）、「先端レーザー分光シンポジウム」（神戸）、「次世代触媒創製を目指した機能物質シンポジウム」（北京）、「物質・光・理論分子科学のフロンティア」冬の学校（岡崎）などが開催された。

3-4-7 その他

(1) 日中拠点大学交流事業（加速器科学）

本国際共同研究はアジア地域の加速器分野における交流事業であり、日本学術振興機構の拠点大学方式による学術交流事業として 2000 年度に、日本・中国間の交流事業としてスタートしたが、現在では韓国・インドがこれに加わり多国間事業として継続している。日本の拠点機関は高エネルギー加速器研究機構であり、中国は高能物理研究所、韓国は浦項工科大学附属加速器研究所、インドはラジャ・ラマンナ先端技術センターがそれぞれ拠点機関となっている。本事業に参加している日本側研究機関には、高エネルギー加速器研究機構の他、分子科学研究所など 15 の大学・研究所が含まれている。研究テーマは、(A) 電子加速器に関する研究、(B) 素粒子物理学に関する研究、(C) 放射光科学に関する研究の 3 つであり、電子・陽電子加速器に関する幅広い内容が含まれている。それぞれのテーマで複数の共同研究やセミナーが活発に行われている。分子科学研究所からは極端紫外光研究施設（UVSOR）が、上記 (C) の放射光科学分野での共同研究に参加している。特に、UVSOR と電子エネルギーや規模の似ている中国科学技術大学の放射光施設 NSRL との間で、相互訪問を通じた人的交流を行っている。

3-5 大学院教育

3-5-1 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(年度別)

所 属	1977 ～ 97	98	99	00	01	02	03	04	05	06	07
北海道大学	10							1	1		
室蘭工業大学	2										
東北大学	11	1	1								
山形大学		6									
筑波大学		1		1							
宇都宮大学						2	2				
群馬大学	1										
埼玉大学	2										
千葉大学	1	1	1		1	1					
東京大学	30	1									2
東京工業大学	24				4	6	6	2			
お茶の水女子大学	6										
横浜国立大学	1										
金沢大学	9			1	1						
新潟大学	4									1	1
福井大学	4	1	3	2							
信州大学	3				1						
岐阜大学	2										
名古屋大学	64	3	1	2	6	2	2			3	4
愛知教育大学										1	
名古屋工業大学	6	1	4	3	1			2			
豊橋技術科学大学	30						7	2			
三重大学	4	2	1								
京都大学	32	2	1	3	1	1			2	1	1
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	24			1	1						
神戸大学	1	1	1	1		1					1
奈良教育大学	1										
奈良女子大学	4										
島根大学						1					
岡山大学	11				2	2			1		
広島大学	32		1	1		2	1	1			
山口大学	1										
愛媛大学	3						5	1			
高知大学	2										
九州大学	36	1	1	2	2	2	1				

佐賀大学	13										
長崎大学								2			
熊本大学	6										
宮崎大学			2	4							
琉球大学		1									
北陸先端科学技術 大学院大学						4		2			
首都大学東京	17							2		1	
名古屋市立大学				4					9	8	5
大阪市立大学	3		1								
大阪府立大学					1	1					
姫路工業大学					1						
学習院大学	1										
北里大学	2										
慶應義塾大学	5	1			2	1					
上智大学	1										
東海大学	1				1	1					
東京理科大学		1	1	1	4		1	1			
東邦大学	1			1	1						
星薬科大学	1										
早稲田大学	7	2			1	1	1	1			
明治大学										1	
名城大学	2	2									
岡山理科大学									1		
＊その他											3
計	427	28	19	27	31	28	26	17	14	16	17

＊外国の大学等

3-5-2 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、さらに分子およ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（2007年12月現在） 単位：人

専 攻	教 授	准教授	助 教
構造分子科学専攻	10	7	20
機能分子科学専攻	8	9	16
計	18	16	36

在籍学生数（2007年12月現在）単位：人

入学年度専攻		2003 年度	2004 年度	2005 年度	2006 年度	2007 年度	計	定 員
構造分子科学専攻	5年一貫	0	0	0	1	3	4	2
	博士後期	0	3	9	10	6	28	3
機能分子科学専攻	5年一貫	0	0	0	0	1	1	2
	博士後期	1	1	3	3	3	11	3

2006年度から5年一貫を導入 定員は2005年度まで博士後期6人

学位取得状況 単位：人

（年度別）

専 攻	1991～97	98	99	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	37(6)	8(2)	7(2)	8(1)	3	11	6	3	7	5	0	95(11)
機能分子科学専攻	36(5)	6	6(1)	6	5	5(4)	1	5(4)	4	5	(1)	79(15)

（ ）は論文博士で外数

入学状況（定員各専攻共6） 単位：人

（年度別）

専 攻	1989～97	98	99	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007
構造分子科学専攻	65	12	5	8	5	3	7	7	8	11(1)	9(3)
機能分子科学専攻	63	7	6	0	7	6	6	6	7	4	4(1)

（ ）は5年一貫で内数 定員は2006年度から各専攻共5年一貫2，博士後期3

外国人留学生数（国別，入学者数） 単位：人

	構造分子科学専攻			機能分子科学専攻		
	1989-2005 年度	2006 年度	2007 年度	1989-2005 年度	2006 年度	2007 年度
中 国	10	5	1	4		
フランス				1		
ロシア				1		
バングラディッシュ	6			1	1	
インド	1					

チェコ				1		
韓国	2					
ナイジェリア				1		
ネパール	1					
フィリピン				2		
ベトナム				1		
タイ					1	

大学別入学者数

大学名等	構造分子科学専攻			機能分子科学専攻			計
	'89～'05	'06年度	'07年度	'89～'05	'06年度	'07年度	
北海道大学	1	1		2			4
室蘭工業大学		1		1			2
東北大学	1			1			2
山形大学				2			2
筑波大学	1			1			2
群馬大学				1			1
千葉大学	5			2	1		8
東京大学	6	1		8			15
東京農工大学	1						1
東京工業大学				3			3
お茶の水女子大学	4			1			5
電気通信大学	1			2			3
横浜国立大学	1						1
新潟大学				1			1
長岡技術科学大学	1						1
富山大学	1						1
福井大学				1			1
金沢大学	2			2			4
信州大学	3					1	4
静岡大学	2			1			3
名古屋大学	2			4		1	7
名古屋工業大学	1						1
豊橋技術科学大学	4						4
三重大学	1						1
京都大学	9		2	14		1	26
京都工芸繊維大学	1			1			2
大阪大学	5			4			9
神戸大学	3						3
奈良女子大学				1			1
鳥取大学	1						1
岡山大学	2		1	2			5
広島大学	1			3			4
山口大学	1			1			2
愛媛大学	2			2			4
九州大学	2			2			4
佐賀大学				1			1
熊本大学	2						2
鹿児島大学				1			1
琉球大学	1						1
北陸先端科学技術大学院大学	4			3			7
奈良先端科学技術大学院大学			1				1

東京都立大学				1	1	1	3
名古屋市立大学				2		1	3
大阪市立大学	1						1
大阪府立大学	2			2			4
兵庫県立大学		1	1				1
姫路工業大学	1			1			2
石巻専修大学	1						1
青山学院大学				1			1
学習院大学	4			2			6
北里大学	1						1
慶應義塾大学	1			4			5
国際基督教大学				1			1
中央大学	1			1			2
東京電機大学	1						1
東京理科大学	3			1			4
東邦大学		1(1)		2			3(1)
日本大学				1			1
法政大学	2						2
明星大学	1						1
早稲田大学	3			4			7
静岡理工科大学				1			1
名城大学	2		1				3
立命館大学			1	2			3
龍谷大学	1						1
関西大学	1						1
甲南大学	1						1
岡山理科大学		1		1			2
放送大学			1				1
＊その他	21	5	1	13	2		42

＊外国の大学等

() は5年一貫で内数

修了生の現職身分別進路（2005年12月現在）

現 職 身 分	構造分子科学専攻	機能分子科学専攻
教 授	1	1
准教授	7	13
講 師	3	4
助 教	14	13
大学以外の研究職	4	5
博士研究員等	23	19
企業等（研究職等）	10	13
企業等（研究職以外）	7	3

3-5-3 オープンハウス・分子研シンポジウム

2007年6月8日（金）午後～9日（土）午前まで分子研シンポジウム2007を開催し、引き続き9日（土）午後に第17回分子科学研究所オープンハウスを開催した。本企画は、全国の大学院生を含む若手研究者、学部学生および社会人を対象に、分子科学の先端的な研究や現在、分子研の現場で行なわれている研究の内容を分かり易く解説するとともに、学術研究拠点機関としての研究者養成活動、大学共同利用機関としての共同利用・共同研究活動、総合研究大学院大学の基盤機関としての教育活動等について、外部の方々に広く知って頂くことを目的としている。3月末からホームページで告知をはじめ、広報を通してポスターを大学関係者および生協に掲示を依頼した。今回の所外参加人数は35名で、内訳は下記の表の通りである。なお、分子研シンポジウムは今回から始めた新しい試みで、分子研の4研究領域それぞれで先端的な研究を行っている所外研究者（総合研究大学院大学OB、分子研OB、分子研の共同研究者など）を講師にお願いした。また、今回から、オープンハウスのガイダンス時に、共同利用の説明も行うことにした。

	学部学生	修士課程	博士課程	その他
北海道・東北	2	1	1	0
関東（東京、千葉、群馬）	3	2	0	0
信越・北陸（石川）	0	0	1	0
東海（愛知、静岡、三重）	8	1	0	3
関西（大阪、兵庫）	0	3	0	1
中国（広島）	0	2	0	0
四国	0	0	0	0
九州・沖縄（福岡）	0	5	1	1
合計 35名	13	14	3	5

（参加のあった都道府県名を括弧内に明記）

3-5-4 夏の体験入学

2007年8月7日から10日にわたって、「分子科学研究所夏の体験入学」を行った。全国の大学生・大学院修士課程学生を対象に、分子研での研究活動の体験を通して研究所を基盤とする大学院の特色を知ってもらうことを目的としている。総研大の新入生確保のための広報的事業として総研大本部から特定教育研究経費の予算援助を受け、総研大物理科学研究科の主催行事として2004年から開始し、今回で4回目の開催となった。広報活動等を国立天文台・核融合科学研究所・宇宙航空研究開発機構とともに共同して行い、実際の研究体験は各研究所独自に行った。

分子研での体験入学は、下記のスケジュールに従って進めた。前回の参加者のアンケート結果をもとに、今回からは体験内容をあらかじめ公表して参加申し込みを募った。

8月7日：体験内容紹介、放射光実験施設・計算科学研究センターの見学、集合写真撮影、歓迎会

8月8、9日：二つのキャンパス（明大寺・山手）に分かれて、研究体験

8月10日：全ての参加者による体験内容の報告・発表

参加者の内訳、体験内容、対応教員は以下の通りである。

	所属	学年	体験内容	対応教員
1	立命館大学	学部3年	スピン転移物質の合成	江准教授
2	日本大学	学部3年	光合成モデル化合物の合成	永田准教授
3	新潟大学	学部4年	機能性を持つ単結晶薄膜の育成と電子状態評価	木村准教授
4	近畿大学	学部4年	分子科学応用を目指した全固体新型レーザーの研究	平等准教授
5	日本大学	学部4年	金属錯体の合成実験——フェロセンの合成	川口准教授
6	信州大学	学部3年	量子化学の基礎にふれ、実際にプログラムを使ってみよう	永瀬教授
7	横浜市立大学	修士1年	レーザー、質量分析、超音速分子線、この3つのアイテムを使いこなそう！	大島教授
8	兵庫県立大学	修士1年	固体広幅NMR装置を体験するとともに、最先端のESR装置を使って分子性固体の電子状態（磁性・伝導性）を実測してみよう	中村准教授
9	上智大学	学部3年	同上	中村准教授
10	岡山理科大学	学部4年	結晶中の電子運動についてモデル計算を行い、固体中の電子状態を考えてみよう	米満准教授
11	長崎大学	卒業	計算化学のハッキング体験学習	柳井准教授
12	首都大学東京	学部2年	二酸化炭素の還元反応に関する研究を体験	田中教授
13	首都大学東京	学部2年	同上	田中教授
14	立命館大学	学部3年	固体NMRを用いた生体分子・分子材料の構造研究	西村准教授
15	近畿大学	修士1年	超高真空中での磁性超薄膜の作成と <i>in situ</i> 磁化測定	横山教授
16	日本大学	学部3年	クラスター触媒を用いた反応の一例を体験	櫻井准教授
17	北海道大学	修士2年	ナノの金属ロッドを作って波動関数を見る	岡本教授
18	広島大学	学部4年	金クラスターの合成と評価	佃准教授
19	信州大学	学部4年	スピン転移物質の合成	江准教授
20	東京大学	学部3年	ナノ加工と生体分子情報受信素子の研究	宇理須教授
21	東京大学	学部4年	金属タンパク質を対象とした研究を体験してみよう	青野教授
22	豊橋技術科学大学	学部4年	固体広幅NMR装置を体験するとともに、最先端のESR装置を使って分子性固体の電子状態（磁性・伝導性）を実測してみよう	中村准教授
23	明星大学	学部4年	緑色蛍光蛋白質の巻き戻りを調べてみよう	桑島教授

3-5-5 総研大／アジアコア共催「冬の学校」

総研大と JSPS アジア研究教育拠点 (アジアコア) 事業との共同主催のもとに、2008 年 1 月 24 日 (木)～26 日 (土)、岡崎コンファレンスセンターならびに分子科学研究所にて「アジア冬の学校」が開催された。総研大・物理科学研究科では、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生・大学院生および若手研究者の育成に広く供すべく、2004 年度よりアジア冬の学校を開催してきた。分子研 (構造分子科学専攻・機能分子科学専攻) での開催では、これまでの総計で 150 名を越える学生・若手研究者がアジア各国から参加してきている。一方、JSPS アジアコア事業として、分子研では「物質・光・理論分子科学のフロンティア」と題して、中国・韓国・台湾・日本間での研究教育交流を 2006 年度よりスタートしている。この事業の一環として、2006 年 12 月に北京にて第 1 回の冬の学校を開催し、100 名近い学生・若手研究者が参加した。

本年度は、この 2 つの冬の学校を融合する形で開催し、中国から 18 名、韓国 30 名、台湾 7 名、タイ 4 名、計 59 名の研究者・学生が参加した。国内からは 73 名の参加があり、そのうち総研大生は 23 名であった。さらに米国から 2 名、カナダから 1 名の出席者があったので、参加者は合計 135 名に上った。

当冬の学校では、全体講義、一般講義、選択講義という 3 形態の講義と、ポスター発表ならびに研究所内見学が行なわれた。全体講演では、物質・光・理論の各領域から東アジア地域出身で世界的に活躍している研究者 5 名が、これまでの業績を中心に研究の背景や意義から今後の展望までを紹介した。一般講義では、アジアコア事業の拠点 4 機関からの講師 6 名が、分子科学の各領域における最先端のトピックスや関連事項に関する講義を行なった。選択講義は、同一の時間帯に行なわれる 3 つの講義から受講者が選択するという形式で行なわれた。受講生は 30 名以下に制限して、会場はセミナー室などの比較的小規模の部屋を利用する等、できるだけ interactive な内容となるよう配慮し、さらに、基本事項の解説に十分な時間を割いて講義を行なった。なお、プログラムの詳細は下記のとおりである。

The Winter School of Sokendai/Asian CORE Program
“Frontiers of Material, Photo-, and Theoretical Molecular Sciences”

January 23 (Wednesday)

11:00 – 18:00 Registration
18:00 – 20:00 Reception

January 24 (Thursday)

8:50 – 9:20 Opening Remarks
9:20 – 10:10 Prof. Deqing Zhang (ICCAS, China)
“Molecular switches, machines, and logic gates”

10:30 – 11:20 Dr. Jim Jr-Min Lin (IAMS, Taiwan)
“Probing chemical interactions between two closed-shell molecules with *ab initio* calculations and crossed molecular beam experiments”
11:20 – 12:00 Prof. David Churchill (KAIST, Korea)
“Word reduction editing”
12:00 – 13:20 Lunch
13:20 – 14:10 Prof. YounJoon Jung (Seoul National University, Korea)
“Computational studies of dynamic heterogeneties in supercooled liquids and room temperature ionic liquids”
14:10 – 15:00 Dr. Ying-Cheng Chen (IAMS, Taiwan)
“Laser cooling of atoms”

15:30 – 17:00 Prof. Koichiro Mitsuke (IMS, Japan)
“Electronic structures and electron dynamics of free molecules”
Prof. Toshi Nagata (IMS, Japan)
“How to capture solar energy—molecular aspects of photosynthesis”

Prof. Takeshi Yanai (IMS, Japan)
“Computational and molecular modeling with quantum chemistry”

17:45 – 20:00 Poster Session

January 25 (Friday)

8:50 – 9:40 Prof. David Churchill (KAIST, Korea)
“Metal ions in solution molecular switching and sensing”
9:40 – 10:30 Prof. Chun-Ru Wang (ICCAS, China)
“Novel fullerene molecules, fullerene nanostructures, and fullerene applications as MRI contrast agents”
10:30 – 11:30 Prof. Chao-Jun Li (McGill University, Canada)
“Our future challenges in synthetic chemistry”
11:30 – 12:30 Lunch
12:30 – Visiting

January 26 (Saturday)

8:50 – 10:20 Prof. Cheol Ho Choi (Kyungpook National University, Korea)
“Material studies with hybrid and fast theoretical methods”
Prof. Yunqi Liu (ICCAS, China)
“Design and synthesis of organic semiconductors and their application in organic field-effect transistors”
Prof. Yuh-Lin Wang (IAMS, Taiwan)
“Nanomaterial fabrication by constrained self-organization of atoms and molecules”

10:40 – 12:10 Laboratory tour in IMS
12:10 – 13:30 Lunch
13:30 – 14:30 Prof. Mitsuhiro Shionoya (University of Tokyo, Japan)
“Supramolecular approaches to nanoscopic metal array, space, and motion: artificial metallo-DNA, dynamic nanocapsules, and molecular machines”
14:30 – 15:30 Prof. Mu-Hyun Baik (Indiana University, U.S.A.)
“Understanding water oxidation catalysis: insights from computer simulations”

15:50 – 16:50 Dr. Jun Ye (JILA, NIST and University of Colorado, U.S.A.)
“Cold and ultracold molecules”
16:50 – 17:50 Prof. Sheng-Hsien Lin (IAMS and National Chiao-Tung University, Taiwan)
“Molecular principles of photochemistry and photophysics”
17:50 – 18:00 Closing Remarks
18:00 – 20:30 Dinner Party