

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。また、分子科学研究所は21世紀東アジア青少年大交流計画（JENESYS; Japan-East Asia Network of Exchange for Students and Youths）に積極的に参画し、毎年、ASEAN諸国の拠点大学および公募で選考された若手研究者と大学院学生を招勝し人材の育成に努めている。

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と分子構造，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 ,ナノ構造体における電子・核・電磁場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
4 ,高精度多参照理論の手法開発と計算

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 ,生体高分子の溶媒和構造および分子認識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 ,光誘起非線型現象，秩序形成および融解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電子状態，物性，ダイナミクスに関する理論・計算科学的研究
- 研究課題 1 ,高精度電子状態理論の開発と理論精密分光・光物性科学への応用
2 ,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
3 ,分子動力学シミュレーションにおける新しい手法の開発と生体系への応用

理論・計算分子科学研究部門（客員）

- 研究目的 1 ,多状態ダイナミクスに関する理論的研究
2 ,次世代分子理論とそのソフトウェアの開発
3 ,生体分子機能の分子機構に関する理論的・計算化学的研究
- 研究課題 1 ,QM/MM 法に基づく凝縮系光反応ダイナミクス
2 ,スピン - 軌道結合を考慮した重原子開殻系の多状態ダイナミクス
3 ,大規模分子理論の開発と化学現象への適用
4 ,高精度な相対論的分子理論の開発
5 ,量子化学プログラムパッケージ「NTChem」の開発

- 6 ,酵素反応の自由エネルギー経路と反応動力学に関する理論的研究
- 7 ,タンパク質分子機能に関わるタンパク質ダイナミクスの理論的研究

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 ,アト秒光パルスを用いた超高速分子ダイナミクスの研究
 - 2 ,非線形・超高速・振動分光法による凝縮相分子の動的挙動の研究

- 3 ,有機固体，有機界面・表面の電子構造・物性相関の研究
- 4 ,光化学測定放射光ビームラインの開発研究

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ーの研究
- 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 ,グラフェン壁を持つ多孔性電気伝導体の開発
 - 3 ,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
 - 4 ,高効率分子変換を実現する新規触媒表面の設計と触媒作用の解明

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 ,分子クラスター電池の基礎科学と応用展開
 - 2 ,分子性磁性体・伝導体の低温熱測定による電子物性研究
 - 3 ,水素結合および金属溶媒和クラスターの分子間相互作用とダイナミクスの分光学的研究

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
 - 5 ,有機半導体の物性物理学の確立と高効率有機薄膜太陽電池の開発

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おり、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 ,配位子設計に基づく金属錯体の反応制御
2 ,金属錯体による小分子の活性化
3 ,二酸化炭素の6電子還元反応
4 ,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，テラヘルツから軟 X 線にいたる先端光源の開発；高出力超短パルスレーザーを用いた量子制御法の開発；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装置，汎用化学分析装置，汎用分光計測装置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・ナノ加工技術の高度化，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ー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6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) 若手研究会等：院生が主体的に企画する分子科学に関連する研究会等。
- (5) 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。
- (6) 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 2009 年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名	提案代表者
生体分子情報システムの研究方法論の構築	分子科学研究所 宇理須恒雄

(2) 協力研究

課 題 名 (前期)	代 表 者
ナノギャップ金構造の電場増強空間分布の可視化	北海道大学電子科学研究所 三澤 弘明
金属ナノ構造体を用いたポリジアセチレン LB 膜の近接場光励起光重合反応の検討	埼玉大学大学院理工学研究科 坂本 章
高温超伝導体のコヒーレント制御	東京工業大学応用セラミックス研究所 中村 一隆
分子デバイス研究のための有機薄膜における内部電子状態観測	東京大学大学院新領域創成科学研究科 川合 真紀
新規な太陽電池の開発とその性能評価	法政大学文学部 中島 弘一
ヘキサフルオロシクロブタンの多価イオン化	広島大学大学院理学研究科 岡田 和正
イオン液体中における金属ナノクラスターの創製	愛知教育大学教育学部 日野 和之
マイクロ波選択加熱による非平衡動的過程を応用したナノ物質創成実験研究	自然科学研究機構核融合科学研究所 高山 定次
銀 (I) イオンの溶媒和構造の温度依存性に関する研究	九州大学大学院理学研究院 迫田 憲治
低振動数ラマン分光法による2成分溶液系の微視的混合に関する研究	福岡教育大学教育学部 小杉健太郎
機能性スピンドロスオーバー錯体の光学的性質の解明と構造物性相関	東京大学物性研究所 高橋 一志
カーボンナノチューブ低温成長におけるバッファ層の効果	名城大学理工学部 丸山 隆浩
(Me ₆ EDO-TTF) ₂ PF ₆ 系電荷移動錯体の分光学的研究	京都大学低温物質科学研究センター 中野 義明
CW 及びパルス ESR 法を用いた有機導体のスピンドダイナミクス	首都大学東京大学院理工学研究科 溝口 憲治
環拡張ポルフィリン金属錯体の磁気特性の解明	京都大学大学院理学研究科 齊藤 尚平
光機能性部位を有するドナーの微小結晶構造解析と光電変換機能性の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科 藤原 秀紀
TMTTF 系有機導体の圧力下における電子状態の解明	神戸大学自然科学系先端融合研究環分子フォトサイエンス研究センター 太田 仁
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	弘前大学大学院医学研究科 松原 悦郎
EUV 光による PDMS のエッチング	筑波大学大学院数理物質科学研究科 牧村 哲也
人工生体膜構造の計算機シミュレーション解析	千葉大学大学院薬学研究科 星野 忠次
ナノ構造固体表面と細胞表面との相互作用の研究	横浜国立大学大学院工学研究院 荻野 俊郎
低温プラズマによる生体高分子パターンニング	大阪大学大学院工学研究科 浜口 智志
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	東京大学大学院工学系研究科 古澤 明
マイクロチップレーザーのモードロック化に関する研究	静岡大学工学部 杉田 篤史
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
自由電子レーザーのシーディングの研究	名古屋大学大学院工学研究科 保坂 将人

コヒーレント放射光の光伝導アンテナによる時間領域分光
 3 原子分子に関する多価イオン分子状態の安定性解明
 アルカリドープ 1 次元ピーナツ型ナノカーボンの in situ 高分解能光電子分光
 高次元希土類ナノ構造体の開発と構造ゆらぎに伴う光物性測定
 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
 レドックスに駆動される錯体分子内メタラサイクル形成反応
 ルテニウム錯体のレドックスに伴う物質変換反応
 アニリノラジカルを持つルテニウム錯体の反応性の検討
 プテリンジチオレンモリブデン錯体の合成と電子状態の解明
 高効率有機・無機ハイブリッド太陽電池に関する研究
 新しい高分子修飾金ナノ粒子の合成
 水溶性高分子を用いたブーメラン型触媒の開発
 高分解能レーザー分光による励起分子の構造とダイナミクスの研究
 環境調和型固体担持金属触媒の創成
 イリジウムダイマー固定化触媒の開発
 刺激応答性星型ポリマーの合成とそれを用いた金属ナノ微粒子触媒の作製
 高精度量子化学計算によるポリエチン分子の π - π^* 励起状態の理論的研究
 2 次元紫外・可視分光法の理論的研究
 強磁性半導体薄膜における電子、スピン構造のその場観測による研究
 磁気的手法によるフェロセン系電荷移動錯体の電子状態研究
 In-situ FT-IR によるニッケル担持酸化物固溶体触媒の構造解析
 高精度量子化学計算による金属錯体の電子状態に関する理論的研究
 RISM 理論を用いたタンパク質の水和構造についての研究
 アミド水溶液の分子間ダイナミクスに関する理論的研究
 新規不斉 Nd-Na ヘテロバイメタリック錯体の XAFS による構造解析
 球状蛋白質のフォールディング機構についての研究 (3)
 静電ポテンシャルの揺らぎの非線形性と電極反応
 強レーザー場における光電子散乱過程
 イオン輸送蛋白質の構造・機能相関研究
 霊長類の視覚ではたらく光受容体の構造・機能相関研究
 フォトクロミックセンサー SRI の構造・機能相関研究
 固体高分解 NMR を用いたヒト M- フィコリンの構造解析
 酵素の構造ダイナミクスと機能相関の研究
 積分方程式理論を用いた液・液相分離現象に関する研究

課 題 名 (後期)

RISM 理論を用いたタンパク質の水和構造についての研究
 溶液中における動的揺らぎに関する実験と理論の対応
 金属ナノ構造体を用いたポリジアセチレン LB 膜の近接場光励起光重合反応の検討
 分子デバイス研究のための有機薄膜における内部電子状態観測
 強レーザー場における光電子散乱過程
 オクタフルオロシクロペンテンの多価イオン化と解離
 イオン液体中における金属ナノクラスターの創製
 マイクロ波選択加熱による非平衡動的過程を応用したナノ物質創成実験研究
 2 成分溶液のラマンスペクトルの温度依存性に関する研究
 赤外光解離分光による溶媒和 Co イオンの配位構造の解明
 イリジウムダイマー固定化触媒の開発
 機能性分子性物質の単結晶反射スペクトルと構造解析
 半導体基板上へのカーボンナノチューブ配向成長
 R_xEDO-TTF 系電荷移動錯体の分光学的研究
 ずれ応力によるクロミズムに関する研究
 CW 及びパルス ESR 法を用いた有機導体のスピンドイナミクス
 環拡張ポルフィリンおよびその金属錯体の磁気特性の解明
 光機能性部位を有するドナーの微小結晶構造解析と光電変換機能性の解明

大阪大学大学院基礎工学研究科
 新潟大学理学部
 東京工業大学原子炉工学研究所
 島根大学教育学部
 山形大学大学院理工学研究科
 福島大学共生システム理工学類
 上智大学理工学部
 東京理科大学理学部
 大阪大学大学院工学研究科
 豊橋技術科学大学生産システム工学系
 京都大学化学研究所
 大阪工業大学工学部
 京都大学大学院理学研究科
 琉球大学理学部
 金沢大学理工研究域
 大阪大学大学院理学研究科
 広島大学大学院総合科学研究科
 早稲田大学理工学術院
 名古屋大学大学院工学研究科
 神戸大学大学院理学研究科
 電気通信大学
 京都大学大学院理学研究科
 慶應義塾大学理工学部
 京都大学大学院理学研究科
 東京大学大学院薬学系研究科
 名古屋大学大学院理学研究科
 九州大学大学院理学院
 電気通信大学電気通信学部
 名古屋工業大学大学院工学研究科
 京都大学霊長類研究所
 名古屋大学大学院理学研究科
 (株)三菱化学生命科学研究所
 広島大学大学院理学研究科
 熊本電波工業高等専門学校

芦田 昌明
 副島 浩一
 尾上 順
 西山 桂
 前山 勝也
 大山 大
 長尾 宏隆
 宮里 裕二
 杉本 秀樹
 伊崎 昌伸
 山子 茂
 大高 敦
 馬場 正昭
 鈴鹿 俊雅
 中井 英隆
 青島 貞人
 伊藤 隆夫
 中井 浩巳
 伊藤 孝寛
 持田 智行
 岩澤 康裕
 藤元 栄介
 光武亜代理
 小野 純一
 柴崎 正勝
 横 互介
 秋山 良
 森下 亨
 神取 秀樹
 今井 啓雄
 須藤 雄気
 谷生 道一
 大前 英司
 松上 優

代 表 者

慶應義塾大学理工学部
 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
 埼玉大学大学院理工学研究科
 東京大学大学院新領域創成科学研究科
 電気通信大学電気通信学部
 広島大学大学院理学研究科
 愛知教育大学教育学部
 自然科学研究機構核融合科学研究所
 福岡教育大学教育学部
 九州大学大学院理学院
 金沢大学理工研究域
 東京大学物性研究所
 名城大学理工学部
 京都大学低温物質科学研究センター
 山口東京理科大学工学部
 首都大学東京大学院理工学研究科
 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

光武亜代理
 富永 圭介
 坂本 章
 川合 真紀
 森下 亨
 岡田 和正
 日野 和之
 高山 定次
 小杉健太郎
 大橋 和彦
 中井 英隆
 高橋 一志
 丸山 隆浩
 石川 学
 井口 眞
 溝口 憲治
 小出 太郎
 藤原 秀紀

TMTTF 系有機導体の圧力下における電子状態の解明	神戸大学自然科学系先端融合研究環分子フォトサイエンス研究センター	太田 仁
磁気的手法によるフェロセン系電荷移動錯体の電子状態研究	神戸大学大学院理学研究科	持田 智行
固体高分解 NMR を用いたヒト M- フィコリンの構造解析	(株)三菱化学生命科学研究所	谷生 道一
水和クラスターイオンにおける水分子マイグレーションに関する研究	九州大学大学院理学研究院	迫田 憲治
EUV 光による PDMS のエッチング	筑波大学大学院数理物質科学研究科	牧村 哲也
グラフェン基板の作製とバイオテクノロジーへの応用	横浜国立大学大学院工学研究院	荻野 俊郎
低温プラズマによる生体高分子パターンニング	大阪大学大学院工学研究科	浜口 智志
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	東京大学大学院工学系研究科	古澤 明
常温接合を用いた高効率・高出力擬位相整合波長変換素子の開発	中央大学理工学部	庄司 一郎
マイクロチップレーザーのモードロック化に関する研究	静岡大学工学部	杉田 篤史
磁性フォトリック結晶を用いたマイクロチップレーザーの開発	豊橋技術科学大学電気・電子工学系	井上 光輝
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
電子蓄積リングトップアップ運転による自由電子レーザー大強度化の研究	名古屋大学大学院工学研究科	保坂 将人
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 原子分子に関する多価イオン分子状態の安定性解明	新潟大学理学部	副島 浩一
強磁性半導体薄膜における電子、スピン構造のその場観測による研究	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
赤外顕微鏡を用いた多元極限化での固体電子状態の研究	神戸大学自然科学系先端融合研究環	入澤 明典
高次元希土類ナノ構造体の開発と構造ゆらぎに伴う光物性測定	島根大学教育学部	西山 桂
新しい高分子修飾金ナノ粒子の合成	京都大学化学研究所	山子 茂
環境調和型固体担持金属触媒の創成	琉球大学理学部	鈴鹿 俊雅
ジメトキシフェニル置換基を有するタービリジルルテニウム錯体系の構築	福島大学共生システム理工学類	大山 大
球状蛋白質のフォールディング機構についての研究 (4)	名古屋大学大学院理学研究科	榎 互介
酵素の構造ダイナミクスと機能相関の研究	広島大学大学院理学研究科	大前 英司
高分解能レーザー分光による励起分子の構造とダイナミクスの研究	京都大学大学院理学研究科	馬場 正昭
アルカリドープ 1 次元ピーナツ型ナノカーボンの in situ 高分解能光電子分光	東京工業大学原子炉工学研究所	尾上 順
積分方程式理論を用いた液-液相分離現象に関する研究	熊本電波工業高等専門学校	松上 優
(ET) ₂ X [X = ReO ₄ , ClO ₄ , BF ₄] の遠赤外及び近赤外振動分光測定	東京工芸大学工学部	比江島俊浩
放射光チョッパーを組み合わせた多電子同時計測手法の開発	新潟大学理学部	彦坂 泰正
アミド水溶液の分子間ダイナミクスに関する理論的研究	京都大学大学院理学研究科	小野 純一
2 次元紫外・可視分光法の理論的研究	早稲田大学理工学術院	中井 浩巳
高精度量子化学計算による金属錯体の電子状態に関する理論的研究	京都大学大学院理学研究科	藤元 栄介
酸化触媒のアルコール選択酸化反応における時間分解構造解析	東京大学大学院理学系研究科	大越 慎一
グループ II 型シャペロニンの構造変化及びタンパク質フォールディングの速度論的解析	東京農工大学大学院共生科学技術研究院	養王田正文
高温超伝導体のコヒーレント制御	東京工業大学応用セラミックス研究所	中村 一隆
数サイクル強レーザーパルスによるイオンコア-光電子コヒーレント相関	(独)日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門	板倉 隆二
色素増感太陽電池の作製プロセスと界面現象の解明	名古屋大学大学院工学研究科	森 竜雄
単一巨大リボソーム法のための新しい実験方法の開発	静岡大学創造科学技術大学院	山崎 昌一
高効率有機・無機ハイブリッド太陽電池に関する研究	豊橋技術科学大学生産システム工学系	伊崎 昌伸
静電ポテンシャルの揺らぎの非線形性と電極反応	九州大学大学院理学研究院	秋山 良
イオン輸送蛋白質の構造・機能相関研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	神取 秀樹
フォトリックセンサー SRI の構造・機能相関研究	名古屋大学大学院理学研究科	須藤 雄気

(3) 研究会

生体分子イメージングの技術開発とシステムズバイオロジー
2009 年 11 月 6 日(金) 岡崎コンファレンスセンター

Opning Remarks

10:30-10:40 Takeaki Ozawa (Graduate School of Sciences, University of Tokyo, Japan)

Keynote Lectures

10:40-11:20 Michael R. H. White (School of Biological Sciences, University of Liverpool, UK)
“Spatial and temporal information coding by the NF-κB system”

11:20-12:00 Robert E. Campbell (Department of Chemistry, University of Alberta, Canada)
“Moulding fluorescent proteins into new biotools: engineering of protein surfaces, topology, and chromophores”

Session 1: Fluorescence and MRI Imaging

- 13:00-13:30 Takeharu Nagai (Research Institute for Electronic Science, Hokkaido University, Japan)
“Toward understanding biological phenomena by genetically-encoded molecular spies”
- 13:30-14:00 Fu-Jen Kao (Institute of Biophotonics Engineering, National Yang-Ming University, Taiwan)
“Visualizing Cellular Metabolism with Fluorescence Lifetime of Reduced Nicotinamide Adenine Dinucleotide”
- 14:00-14:30 Mingyuan Gao (Institute of Chemistry, the Chinese Academy of Sciences, China)
“Magnetic Nanocrystals: from Preparations to Bioapplications”
- 14:30-14:50 Muhammad Awais (School of Biological Sciences, University of Liverpool, UK)
“Measuring dynamic protein interactions in living cells over time”

Session 2: Systems Biology

- 15:10-15:40 Hiroyuki Takeda (Graduate School of Sciences, University of Tokyo, Japan)
“Coupling cellular oscillators in vertebrate segmentation: analysis with high-resolution imaging of gene transcription”
- 15:40-16:10 Atsushi Mochizuki (Theoretical Biology Laboratory, RIKEN Advanced Science Institute, Japan)
“Structure of regulatory networks and dynamics of bio-molecules: Predicting unknown from known”
- 16:10-16:30 Yuichi Ozaki (Graduate School of Sciences, University of Tokyo, Japan)
“High throughput quantification of single cellular signaling events by use of immunostaining and image cytometry”

Session 3: Bioluminescence Imaging

- 16:50-17:20 Yoshihiro Ohmiya (Research Institute of Genome-based Biofactory, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Japan)
“Application of luciferases for in vivo bioluminescence imaging”
- 17:20-17:50 Michitaka Ozaki (Department of Molecular Surgery, Hokkaido University School of Medicine, Japan)
“Bio-imaging of Surgical Stress, dynamic analysis of liver oxidative stress and damage”
- 17:50-18:10 Akira Kanno (Graduate School of Sciences, University of Tokyo, Japan)
“Bioluminescent Probes to Visualize Biological Functions in Living Cells”

Closing Remarks

- 18:10-18:20 Tsuneo Urisu (Institute for Molecular Science)

新規な誘電体最前線——電子と強誘電性——

2009年10月30日(金)～31日(土) 岡崎コンファレンスセンター

10月30日(金)

- 12:50-13:00 池田(岡山大)
はじめに

Session I：酸化物

- 13:00-13:25 池田(岡山大)
三角格子鉄複電荷酸化物 RFe_2O_4 の極的な電荷秩序について
- 13:25-13:45 野田(東北大)
電子分極と原子変位——いくつかのケーススタディ——
- 13:45-14:15 吉井(原研)
電子強誘電体 RFe_2O_4 (R: 希土類) とその置換系の合成・構造・物性
- 14:15-14:45 有馬(東北大)
マルチフェロイクにおける電気磁気結合

Session II：有機物

- 15:00-15:20 妹尾(理研)
分子性導体で見られる二量体化と電荷秩序の共存による誘電性
- 15:20-15:40 山本(分子研)
SHG 顕微鏡観測による α -(BEDT-TTF) $_2\text{I}_3$ および α' -(BEDT-TTF) $_2\text{IBr}_2$ の強誘電相転移
- 15:40-16:00 高橋(一)(物性研)
分子性導体の電荷秩序転移近傍における磁気抵抗効果

Session III：有機物

- 16:15-16:35 岩井(東北大)
電子強誘電体における光誘起相転移
- 16:35-16:55 高橋(聡)(奈良先端)
 α 型, κ 型 ET 塩における光励起状態
- 16:55-17:15 岸田(名古屋)
有機強誘電体 TTF-CA の電場変調分光

10月31日(土)

Session IV：酸化物

- 9:00- 9:30 木村(大阪大)
希土類金属バナジウム酸化物における Jahn-Teller 転移に伴う誘電異常

- 9:30-10:00 藤村（大阪府大）
YbFe₂O₄ エピタキシャル薄膜の作成とその物性
- 10:00-10:20 森（大阪府大）
三角格子系誘電体 LuFeMO₄ (M = Co, Cu) の局所構造解析

Session V：有機物

- 10:35-10:55 佐々木（東北大）
スピン液体系 κ -(BEDT-TTF)₂Cu₂(CN)₃ 研究の現状と問題点——電荷自由度の観点から——
- 10:55-11:25 寺崎（早稲田）
量子電気双極子——dimer Mott 絶縁体を示す誘電異常
- 11:25-11:30 岩井（東北大）
 κ -(ET)₂Cu₂(CN)₃ のテラヘルツ分光
- 11:30-11:50 堀田（京産大）
強相関量子誘電体

Session VI：酸化物

- 12:40-13:00 加倉井（原研）
偏極中性子を活用した複雑磁気構造の研究
- 13:00-13:20 久保田（高工研）
LuFe₂O₄ の電場効果観測
- 13:20-13:40 水牧（JASRI）
YbFe₂O₄ の電荷ドーブと電荷三倍格子の安定性
- 13:40-14:00 石井（原研）
共鳴非弾性X線散乱による電荷ダイナミクスの観測
- 14:00-14:20 石原（東北大）
電子強誘電体と電荷揺らぎ電荷フラストレーション
- 14:20-14:30 石原（東北大）
おわりに

拡がるロドプシンの仲間から “何がわかるか” “何をもたらすか”
2010年3月23日（火）～24日（水） 岡崎コンファレンスセンター

3月23日（火）

- 13:00～13:05 はじめに：須藤雄気（名大）
- セッション1：古細菌型ロドプシンの構造と機能 座長：須藤雄気（名大）
- 13:05～13:30 神取秀樹（名工大・院工）
ロドプシンの赤外分光：赤外線から機能が見える？
- 13:30～13:55 神山 勉（名大・院理）
古細菌の光駆動イオンポンプ：反応中間体の構造解析からなにが分かるか
- 13:55-14:20 佐々木純（テキサス大）
MCP 様蛋白質（Htr）のサブドメインとして働く微生物型ロドプシン——バクテリオロドプシンの構造変化から正負光走性に関わる Htr 活性調節を理解できるか？
- 14:20～14:45 角田 聡（フンボルト大）
チャネルロドプシンの機能解析から “何がわかるか”, “何をもたらすか”

セッション2：真核生物ロドプシンの構造と機能 座長：古谷祐詞（分子研）

- 15:05～15:30 七田芳則（京大・院理）
ロドプシン類の変異体解析からなにがわかるか
- 15:30～15:55 村上 緑（名大・院理）
イカロドプシンの光化学反応：バソ中間体の構造解析から何がわかるか
- 15:55～16:20 橘木修志（阪大・生命機能）
錐体と桿体の応答の違いをもたらす分子メカニズム：錐体と桿体の比較から何がわかるか？

セッション3：ロドプシンの利用と生命科学 座長：寺北明久（大阪市大）

- 16:40～17:05 小泉 周（生理学研究所）
メラノプシン遺伝子導入法と光による神経操作
- 17:05～17:30 太田 淳（奈良先端大・物質創成）
人工視覚デバイスの現状と課題 ～網膜細胞刺激がもたらす視覚再建への道～
- 17:30～17:55 宇理須恒雄（分子研）
チャネルロドプシンを組み込んだ神経細胞ネットワーク素子の開発と応用——光受容体チャネルが新しい脳神経科学研究手法をもたらす——
- 17:55～18:20 八尾 寛（東北大・生命科学）
チャネルロドプシン：構造 - 機能関連研究が何をもたらすか

18:30 ~ 19:30 ポスターセッション

3月24日(水)

セッション4：古細菌型ロドプシンの構造と機能 座長：神取秀樹(名工大)

- 9:00 ~ 9:25 須藤雄気(名大・院理)
微生物の走光性：センサリーロドプシンの機能理解から何がわかるか、何をもたらすか
- 9:25 ~ 9:50 藤本和宏(京大・院理)
レチナールタンパク質の吸収波長制御から何がわかるか、タンパク質場やカロテノイド結合が何をもたらすか
- 9:50 ~ 10:15 出村 誠(北大・院理)
ハロロドプシンと構造と構造変化

セッション5：真核生物ロドプシンの構造と機能 座長：七田芳則(京大)

- 10:35 ~ 11:00 寺北明久(大阪市大・院理)
動物の多様なロドプシンとシグナル伝達系の比較解析から何がわかるか
- 11:00 ~ 11:25 小島大輔(東大・院理)
ゼブラフィッシュの体色変化を制御する光センサーの探索
- 11:25 ~ 11:50 今井啓雄(京大・霊長研)
霊長類苦味受容体から何がわかるか

セッション6：機能解明へのアプローチ 座長：出村 誠(北大)

- 13:00 ~ 13:25 児嶋長次郎(阪大・蛋白研/奈良先端大・バイオ)
バクテリア走光性トランスデューサーの構造研究：溶液 NMR・EPR・固体 NMR から何がわかるか
- 13:25 ~ 13:50 内藤 晶(横浜国大・院工)
光照射固体 NMR を用いた古細菌由来ロドプシンの光応答機構
- 13:50 ~ 14:15 柴田幹大(金沢大・理工)
バクテリオロドプシンの高速 AFM 観察：バクテリオロドプシンの直接観察から何がわかるか、何をもたらすか
- 14:15 ~ 14:40 古谷祐詞(分子研)
X-H, X-D 伸縮振動領域の赤外分光法から何がわかるか？

セッション7：機能解明へのアプローチ 座長：内藤 晶(横浜国大)

- 15:00 ~ 15:25 寺嶋正秀(京大・院理)
ロドプシン類の光反応解析：分子拡散から何がわかるか
- 15:25 ~ 15:50 上久保裕生(奈良先端大・物質創成)
分子内プロトン移動：Photoactive Yellow Protein の水素結合構造から何がわかるのか
- 15:50 ~ 16:15 水谷泰久(阪大)
分子科学者の視点からみたロドプシン研究：構造ダイナミクス研究から何がわかるか
- 16:15 ~ 16:20 おわりに：古谷祐詞

ポスター発表

- P-1: 細菌型センサーロドプシンにおける吸収波長制御機構の変異体解析
○湯浅恭史¹, 鈴木大介¹, 柴田 巡¹, 本間道夫¹, 須藤雄気^{1,2} (1 名大・院理, 2JST/PRESTO)
- P-2: 細菌の緑色光受容体, センサリーロドプシン I に重要な Cl⁻ 結合の影響
○鈴木大介¹, 本間道夫¹, 須藤雄気^{1,2} (1 名大・院理, 2JST/PRESTO)
- P-3: 古細菌ロドプシンのピコ秒タンパク質ダイナミクス
○水野 操¹, 柴田幹大², 山田純也², 神取秀樹², 須藤雄気³, 稲田誠亮⁴, 水谷泰久¹ (1 阪大・院理, 2 名工大・院工, 3 名大・院理, 4 阪大・理)
- P-4: センサーロドプシンを用いたプロトンポンプ研究
○川鍋 陽¹, 古谷祐詞^{1,2}, Kwang-Hwan Jung³, 神取秀樹¹ (1 名工大・院工, 2 分子研, 3Sogang 大学・韓国)
- P-5: アナベナセンサリーロドプシンの光誘起反応と蛋白質間相互作用：過渡回折格子法による解析と検討
○近藤正人¹, 井上圭一², 佐々木 純³, Spudich J. L.³, 寺嶋正秀¹ (1 京大・院理, 2 名工大, 3 テキサス大)
- P-6: 固体 NMR によるバクテリオロドプシンの Tyr の信号帰属と構造解析
○川村 出^{1,2}, 堀籠美也子¹, 辻 暁³, 内藤 晶¹ (1 横浜国大, 2 グエルフ大学, 3 兵庫県大)
- P-7: 固体 NMR を用いた圧力印加によるバクテリオロドプシン中のレチナール異性化機構の解析
○西川大英¹, 田島可奈¹, 川村 出¹, 和田昭盛², 辻 暁³, 内藤 晶¹ (1 横浜国大・院, 2 神戸薬大, 3 兵庫県大)
- P-8: 固体 NMR による光受容タンパク ppR とその変異体 T204A の局所構造変化の解析
○日高徹郎¹, 川村 出¹, 西尾拓道¹, 大澤一弘¹, 加茂直樹², 内藤 晶¹ (1 横浜国大・院工, 2 松山大・薬)
- P-9: pharaonis halorhodopsin の光誘起構造変化～高圧力下の flashphotolysis による解析～
○柴崎宏介¹, 菊川峰志¹, 神谷昌克¹, 相沢智康¹, 河野敬一², 加茂直樹³, 出村 誠¹ (1 北大・院先端生命, 2 北大・院理, 3 松山大・薬)
- P-10: ハロロドプシンの固体 NMR 法による構造解析——クロライド結合による BC ループの構造変化——
○田巻 初¹, 樋口真理花¹, 江川文子², 藤原敏道², 神谷昌克¹, 菊川峰志¹, 相沢智康¹, 河野敬一³, 出村 誠¹ (1 北大・院先端生命, 2 阪大・蛋白研, 3 北大・院理)

- P-11: Natronomonas pharaonis 由来光駆動塩素イオンポンプ halorhodopsin 光反応中間体の X 線結晶構造解析
 ○金田創運¹, 井原邦夫², 神山 勉¹ (1 名大・院理, 2 名大・遺伝子実験)
- P-12: 低障壁水素結合の発見とその可能性
 ○上久保裕生, 山口繁雄, 片岡幹雄 (奈良先端大・物質創成)
- P-13: 2 種類の PYP における発色団の機能変調
 ○山崎洋一, 上久保裕生, 片岡幹雄 (奈良先端大・物質創成)
- P-14: リジン側鎖選択的メチルラベルを用いた NMR 法の開発と膜タンパク質への応用
 ○服部良一¹, 大木 出¹, 古板恭子¹, 児嶋長次郎^{1,2} (1 奈良先端大・バイオ, 2 阪大・蛋白研)
- P-15: 自己会合抑制型 GFP: 膜蛋白質の立体構造解析に向けて
 ○小佐見謙一¹, 古板恭子¹, 児嶋長次郎^{1,2} (1 奈良先端大・バイオ, 2 阪大・蛋白研)
- P-16: 霊長類色覚視物質の赤外分光解析
 ○片山耕大¹, 古谷祐詞^{1,2}, 今井啓雄³, 神取秀樹¹ (1 名工大・院工, 2 分子研, 3 京大・霊長研)
- P-17: ロドプシンは単量体でアレスチンと相互作用するか?
 ○塚本寿夫^{1,2}, Abhinav Sinha², David Farrens² (1 大阪市大・生物地球, 2 Oregon Health & Science University)
- P-18: 高速原子間力顕微鏡によるロドプシンの動態観察——ロドプシンの直接観察から何が分かるか, 何をもたらすか——
 ○山下隼人¹, 柴田幹大¹, 内橋貴之^{1,5}, 古谷祐詞^{1,4}, 山下高廣³, 神取秀樹¹, 七田芳則³, 安藤敏夫^{1,5} (1 金沢大・理工, 2 分子研, 3 京大・理, 4 名工大・院工, 5 JST-CREST)
- P-19: 脊椎動物型ロドプシンと G タンパク質の相互作用の構造変化解析
 ○木股直規, 山下高廣, 今元泰, 七田芳則 (京大・院理)
- P-20: ロドプシン活性状態の pH 依存性と Gt ペプチドとの相互作用解析
 ○佐藤恵太, 森住威文, 山下高廣, 七田芳則 (京大・院理)
- P-21: Crystallization of octopus rhodopsin
 ○ J. Zhang¹, S. Kanada¹, M. Tsuda², T. Iwasa³, T. Gotoh¹, M. Murakami¹, T. Kouyama¹ (1 Department of Physics, Graduate School of Science, Nagoya University, 2 Kagawa School of Pharmaceutical Sciences, Tokushima Bunri University, and 3 Muroran Institute of Technology)
- P-22: 錐体型ロドプシンキナーゼに高い活性をもたらす領域の特定
 瀬野亜希¹, 竹本訓彦¹, Lalida Sirianant^{1,2}, ○橋本修志¹, 河村 悟¹ (1 阪大・院生命機能, 2 タイ国立マヒドン大)
- P-23: げっ歯類網膜組織培養法の確立とメラノプシン遺伝子発現のバイオアッセイ
 森藤 暁¹, 田中謙二², 小泉 周¹ (生理学研究所 1 機能協関, 2 分子神経生理)
- P-24: 受容体の多型解析による味覚変異ニホンザルの発見
 ○鈴木南美¹, 菅原 亨¹, 松井 淳¹, 郷 康広², 平井啓久¹, 今井啓雄¹ (1 京大・霊長研, 2 京大・院理)
- P-25: 苦味受容体の多様性探索
 ○菅原 亨¹, 郷 康広², 鷗殿俊史³, 森村成樹⁴, 友永雅己^{1,4}, 平井啓久^{1,2}, 今井啓雄^{1,2} (1 京大・霊長研, 2 京大・院理・グローバル COE, 3 三和化学・CSU, 4 京大・野生研)
- P-26: Channelrhodopsin-2 発現細胞を用いた培養型プレーナリーイオンチャネルバイオセンサ内での興奮誘発の光学制御
 ○宇野秀隆¹, 石塚 徹³, 八尾 寛³, 宇理須恒雄^{1,2} (1 総研大, 2 分子研, 3 東北大)
- P-27: ロドプシンを用いた光神経回路網解析デバイスの開発
 ○浅野豪文¹, 深澤有吾², 重本隆一², 石塚 徹³, 八尾 寛³, 宇理須恒雄¹ (1 分子研, 2 生理研, 3 東北大・院生命)
- P-28: バイオメディカルフォトリック LSI による培養神経細胞のオンチップ電位イメージング
 Time-lapse imaging of neuronal activity of brain's cortical neurons using biomedical photonic LSI
 ○小林琢磨^{1,3}, 野田俊彦^{1,3}, 笹川清隆^{1,3}, 徳田 崇^{1,3}, 塩坂貞夫^{2,3}, 太田 淳^{1,3} (1 奈良先端大・物質創成, 2 奈良先端大・バイオ, 3 JST CREST)

分子集合系におけるポテンシャル空間の制御～その錯体化学的アプローチ～
 2010 年 2 月 19 日 (金) ～ 20 日 (土) 分子科学研究所 山手 3 号館大会議室

2 月 19 日 (金)

- 12:30–12:40 張 浩徹 (北大院工)
 開会の辞・趣旨説明
- 座長: 張 浩徹 (北大院理)
- 12:40–13:30 芳賀 正明 (中大理工)
 特別講演 1
- 13:30–14:00 高石 慎也 (東北大院理)
 一般講演 1
- 14:00–14:30 北浦 良 (名大院理)
 一般講演 2
- 座長: 鈴木 孝義 (岡山大理)
- 14:45–15:15 久米 晶子 (東大院理)
 一般講演 3
- 15:15–15:45 小林 厚志 (北大院理)
 一般講演 4
- 15:45–16:15 速水 真也 (熊大院理)
 一般講演 5

座長：大場 正昭（京大院工）
 16:30-17:00 西川 浩之（茨城大理）
 一般講演 6
 17:00-17:30 宮坂 等（東北大院理）
 一般講演 7
 17:30-18:20 北川 宏（京大院理）
 特別講演 2

2月20日（土）

座長：宮坂 等（東北大院理）
 9:00- 9:50 林 高史（阪大院工）
 特別講演 3
 9:50-10:20 大胡 恵樹（東邦大医）
 一般講演 8
 10:20-10:50 杉本 秀樹（阪大院理）
 一般講演 9
 座長：加藤 昌子（北大院理）
 11:05-11:35 梅山 有和（京大院工）
 一般講演 10
 11:35-12:05 邨次 智（分子研）
 一般講演 11
 12:05-12:35 酒井 健（九大院理）
 一般講演 12
 12:35-12:45 田中 晃二（分子研）
 講評・閉会の辞

シンクロトロン光源技術の現状と展望

2010年2月19日（金）～20日（土） 分子科学研究所 研究棟301号室

2月19日（金）

12:55-13:00 加藤 政博（分子研）
 開会のあいさつ
 13:00-13:30 加藤 政博（分子研）
 UVSOR-IIの現状
 13:30-14:00 後藤 公德（広島大）
 HISORの現状
 14:00-14:30 本田 融（KEK）
 PF/PF-ARの現状
 14:30-15:00 島田 美帆（KEK）
 KEK-ERL計画の現状
 15:15-15:45 原田 健太郎（KEK）
 PFのトップアップ運転
 15:45-16:15 全 炳俊（KEK）
 UVSOR-IIのトップアップ運転
 16:15-16:45 庄司 善彦（兵庫県立大）
 New SUBARUのトップアップ運転
 17:00-17:30 高木 宏之（東大物性研）
 パルス多極電磁石によるビーム入射
 17:30-18:00 飛山 真理（KEK）
 ビームフィードバック技術の現状と展望
 18:00-18:30 谷本 育律（KEK）
 PF-ARにおけるダストトラッピング
 18:30-19:00 UVSOR 見学会

2月20日（土）

9:00-9:30 帯名 崇（KEK）
 PFにおけるビーム診断
 9:30-10:00 田村 和宏（SP8/JASRI）
 SPring-8における可視光ビーム診断とビーム診断ラインの現状

10:00-10:30	持箸 晃 (SP8/JASRI) SPRing-8 における X 線ストリークカメラの性能評価
10:30-11:00	藤田 貴弘 (SP8/JASRI) SPRing-8 における電気的手法を主としたビーム診断
11:15-11:45	阿達 正浩 (分子研) UVSOR-II における光源開発の現状
11:45-12:15	江田 茂 (SAGA-LS) SAGA-LS の現状と今後の計画
12:15-12:45	山本 尚人 (名大) 中部シンクロトロン光利用施設の現状と光源加速器
12:45-13:00	春日 俊夫 (KEK) 閉会のあいさつ

(4) 若手研究会等

課 題 名	提案代表者
分子科学夏の学校の講義内容検討会	京都大学大学院理学研究科 田中 翠

(5) UVSOR 施設利用

(前期)

X 線照射により生成する欠陥の発光測定 (2)	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
XAFS 法を用いたハнтаイト中のカルシウムの状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
スピネル型磁性酸化物における cation-disorder の解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
プラグインハイブリッド自動車用リチウムイオン電池の Al 及び P 含有表面皮膜成分の分析	(独) 産業技術総合研究所関西センター	鹿野 昌弘
プロトン伝導性 α -Zr _n P _{1-n} O _x 薄膜におけるリン酸クラスターの状態分析	北海道大学大学院工学研究科	青木 芳尚
透過法によるアミノ酸, DNA 塩基の X 線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
ハイドロタルサイトの再水和時の Mg と Al の局所構造解明	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
L 殻 XANES によるメタン脱水素芳香族化活性 Mo 種の還元局所構造変化の検討	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
高エネルギー光励起によるカーボン・ナノチューブの発光測定	信州大学工学部	伊藤 稔
真空紫外領域における Ti ⁴⁺ 型不純物センターの光学特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
極端紫外光照射による無機蛍光体の母結晶励起現象	新潟大学工学部	太田 雅壽
ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸収・発光および寿命測定	早稲田大学理工学術院	大木 義路
高効率希土類蛍光体の発光・励起スペクトル	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
希薄磁性半導体 GaCrN 並びに GaGdN における磁性元素エネルギー位置の探索	大阪大学産業科学研究所	江村 修一
希薄磁性半導体における磁性元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
プラグインハイブリッド自動車用リチウムイオン電池の正極活物質の表面分析	(独) 産業技術総合研究所関西センター	鹿野 昌弘
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
「水の窓」域軟 X 線超格子ミラーの反射率測定	大阪市立大学大学院工学研究科	熊谷 寛
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
アミノ酸, DNA 塩基の VUV-SX 吸収スペクトル測定と TRK 総和則の検証 (2)	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
アモルファス半導体における光劣化現象の極端紫外光による評価	岐阜大学工学部	林 浩司
Electronic structure of surface Kondo resonance in Co adatoms on Ag(111)	弘前大学大学院理工学研究科	IM, Hojun
共鳴光電子分光法による N-doped TiO ₂ および Ba ₃ Co ₂ O ₆ (CO ₃) _{0.7} の電子構造の研究	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
超高分解能光電子分光法による Pb 超薄膜のフェルミ準位近傍の微細電子構造測定	東京大学大学院理学系研究科	平原 徹
アルカンチオレート表面修飾金属ナノ粒子の量子サイズ効果	神戸大学大学院工学研究科	保田 英洋
酸化イウロピウム単結晶薄膜の光電子分光	分子科学研究所	木村 真一
鉛フリー圧電体の遠赤外線スペクトル	名古屋工業大学	柿本 健一
超伝導を示す半導体の電子構造の解明	東海大学工学部	犬島 喬
基底または励起状態のルテニウム色素の赤外吸収分光	分子科学研究所	見附孝一郎
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
赤外顕微分光による新奇パイロクロア型 Ir 酸化物 Nd ₂ Ir ₂ O ₇ の電子状態	神戸大学自然科学系先端融合研究環	入澤 明典
InN 系薄膜の赤外反射	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
強相関電子系の圧力下テラヘルツ分光	分子科学研究所	木村 真一

BL6B の整備	分子科学研究所	木村 真一
重い電子系物質の VUV 反射分光	神戸大学大学院理学研究科	岡村 英一
有機太陽電池のエネルギー変換効率と光電変換効率の測定	分子科学研究所	見附孝一郎
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
太陽ライマン α 光観測用偏光解析素子の開発	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究本部	坂尾 太郎
機能性有機薄膜および酸化物薄膜の VUV スペクトルの測定	明治大学理工学部	松本 皓永
アミノ酸, DNA 塩基の VUV 吸収スペクトル測定と TRK 総和則の検証 (2)	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
新奇パイロクロア化合物 $R_2Mo_2O_7$ と $A_2Ir_2O_7$ の可視・真空紫外反射スペクトル	神戸大学自然科学系先端融合研究環	入澤 明典
III-V 窒化物半導体の発光・励起と時間分解測定 (II)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
真空紫外反射分光による無機 EL 蛍光体母材の電子状態解析	福井工業高等専門学校	北浦 守
ワイド・バンドギャップ半導体フォトダイオードの特性評価	(独)産業技術総合研究所計測標準研究部門	齋藤 輝文
鉄系及び銅酸化物高温超伝導体の低エネルギー角度分解光電子分光	東北大学大学院理学研究科	高橋 隆
強い電子相関で特徴づけられる物質群の電子輸送現象	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
Systematic studies of many-body effects in 4d transition metal oxides	分子科学研究所	木村 真一
TiO ₂ 中に注入された素子の局所構造解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
プラグインハイブリッド自動車用リチウムイオン電池の Li 及び F 含有表面皮膜成分の分析	(独)産業技術総合研究所関西センター	鹿野 昌弘
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
角度分解紫外光電子分光法による有機 / 有機ヘテロ界面の分子配向評価	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
単結晶上の金属錯体分子薄膜における分子基板間相互作用と光電子強度分布	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
光電子分光法による有機電荷移動錯体の研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮崎 隆文
光触媒における酸化還元機構の解明 (2)	新潟大学工学部	太田 雅壽
有機単結晶上に形成したヘテロ界面電子構造の角度分解光電子分光	千葉大学先進科学センター	中山 泰生
有機薄膜太陽電池関連物質の表面・界面電子状態の測定	島根大学総合理工学部	田中 仙君
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
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
真空紫外励起による Y 複合酸化物中希土類イオンの 4f5d および 4f 殻内遷移に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	吉野 正人
VUV 発光分光ライン化に向けた整備	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
セリウム単結晶の共鳴角度分解光電子分光; 4f バンド構造の α - γ 相転移	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
BL5U におけるユーザータイム前調整および整備作業	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
局在・非局在競合系の相転移メカニズム解明のための電子状態測定	立命館大学理工学部	寺嶋 健成
擬 2 次元 CDW 系化合物における 3 次元フェルミ面ネスティングの系統研究; 低励起エネルギー角度分解光電子分光	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
BL7U におけるユーザータイム前調整および整備作業	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
鉄砒素系超伝導体の電子状態	分子科学研究所	木村 真一
経年変化による原子核乳剤の感度低下の研究	岐阜大学教育学部	仲澤 和馬
原子核乾板の電子線に対する感度向上のための実験	名古屋大学大学院理学研究科	中村 光廣
プロトン伝導性 α -Zr _n P _{1-n} O _x 薄膜におけるリン酸クラスターの状態分析	北海道大学大学院工学研究科	青木 芳尚
銅含有酸化物の酸化・還元反応に伴う電子構造変化	関西大学化学生命工学部	荒地 良典
(後期)		
X 線照射により生成する欠陥の発光測定 (2)	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
XAFS 法を用いたハントタイト中のカルシウムの状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
スピネル型磁性酸化物における cation-disorder の解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
プラグインハイブリッド自動車用リチウムイオン電池の Al 及び P 含有表面皮膜成分の分析	(独)産業技術総合研究所関西センター	鹿野 昌弘
プロトン伝導性 α -Zr _n P _{1-n} O _x 薄膜におけるリン酸クラスターの状態分析	北海道大学大学院工学研究科	青木 芳尚
透過法によるアミノ酸, DNA 塩基の X 線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
ハイドロタルサイトの再水和時の Mg と Al の局所構造解明	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
L 殻 XANES によるメタン脱水素芳香族化活性 Mo 種の還元的局所構造変化の検討	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
高エネルギー光励起によるカーボン・ナノチューブの発光測定	信州大学工学部	伊藤 稔
真空紫外領域における TI* 型不純物センターの光学特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
極端紫外光照射による無機蛍光体の母結晶励起現象	新潟大学工学部	太田 雅壽
ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸収・発光および寿命測定	早稲田大学理工学術院	大木 義路
高効率希土類蛍光体の発光・励起スペクトル	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
希薄磁性半導体 GaCrN 並びに GaGdN における磁性元素エネルギー位置の探索	大阪大学産業科学研究所	江村 修一

希薄磁性半導体における磁性元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
プラグインハイブリッド自動車用リチウムイオン電池の正極活物質の表面分析	(独)産業技術総合研究所関西センター	鹿野 昌弘
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
「水の窓」域軟X線超格子ミラーの反射率測定	大阪市立大学大学院工学研究科	熊谷 寛
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
アミノ酸・DNA塩基のVUV-SX吸収スペクトル測定とTRK総和則の検証(2)	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
アモルファス半導体における光劣化現象の極端紫外光による評価	岐阜大学工学部	林 浩司
Electronic structure of surface Kondo resonance in Co adatoms on Ag(III)	弘前大学大学院理工学研究科	IM, Hojun
共鳴光電子分光法による N-doped TiO ₂ および Ba ₃ Co ₂ O ₆ (CO ₃) _{0.7} の電子構造の研究	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
超高分解能光電子分光法による Pb 超薄膜のフェルミ準位近傍の微細電子構造測定	東京大学大学院理学系研究科	平原 徹
アルカンチオレート表面修飾金属ナノ粒子の量子サイズ効果	神戸大学大学院工学研究科	保田 英洋
酸化イウロピウム単結晶薄膜の光電子分光	分子科学研究所	木村 真一
鉛フリー圧電体の遠赤外線スペクトル	名古屋工業大学	柿本 健一
超伝導を示す半導体の電子構造の解明	東海大学工学部	犬島 喬
基底または励起状態のルテニウム色素の赤外吸収分光	分子科学研究所	見附孝一郎
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
InN 系薄膜の赤外反射	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
強相関電子系の圧力下テラヘルツ分光	分子科学研究所	木村 真一
BL6B の整備	分子科学研究所	木村 真一
有機太陽電池のエネルギー変換効率と光電変換効率の測定	分子科学研究所	見附孝一郎
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
アミノ酸, DNA 塩基の VUV 吸収スペクトル測定と TRK 総和則の検証(2)	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
III-V 窒化物半導体の発光・励起と時間分解測定(II)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
ワイド・バンドギャップ半導体フォトダイオードの特性評価	(独)産業技術総合研究所計測標準研究部門	齋藤 輝文
鉄系及び銅酸化物高温超伝導体の低エネルギー角度分解光電子分光	東北大学大学院理学研究科	高橋 隆
強い電子相関で特徴づけられる物質群の電子輸送現象	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
Systematic studies of many-body effects in 4d transition metal oxides	分子科学研究所	木村 真一
TiO ₂ 中に注入された窒素の局所構造解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
プラグインハイブリッド自動車用リチウムイオン電池の Li 及び F 含有表面皮膜成分の分析	(独)産業技術総合研究所関西センター	鹿野 昌弘
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
角度分解紫外光電子分光法による有機/有機ヘテロ界面の分子配向評価	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
単結晶上の金属錯体分子薄膜における分子基板間相互作用と光電子強度分布	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
光電子分光法による有機電荷移動錯体の研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮崎 隆文
光触媒における酸化還元機構の解明(2)	新潟大学工学部	太田 雅壽
有機単結晶上に形成したヘテロ界面電子構造の角度分解光電子分光	千葉大学先進科学センター	中山 泰生
有機薄膜太陽電池関連物質の表面・界面電子状態の測定	島根大学総合理工学部	田中 仙君
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
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
VUV 発光分光ライン化に向けた整備	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
セリウム単結晶の共鳴角度分解光電子分光; 4f バンド構造の α - γ 相転移	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
BL5U におけるユーザータイム前調整および整備作業	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
局在・非局在競合系の相転移メカニズム解明のための電子状態測定	立命館大学理工学部	寺嶋 健成
擬 2 次元 CDW 系化合物における 3 次元フェルミ面ネスティングの系統研究; 低励起エネルギー角度分解光電子分光	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
BL7U におけるユーザータイム前調整および整備作業	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
MgAl 型 LDH 型粘土中のナノシート構造の解明	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
XANES を用いたリチウムイオン二次電池のコンバージョン負極反応解析	京都大学大学院人間・環境学研究科	内本 喜晴
有機物複合化リン酸カルシウムの局所構造解析	大阪府立大学大学院工学研究科	小野木伯薫
P ドープ Zn _{1-x} Mg _x Te エピタキシャル膜の局所構造解析	佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター	齊藤 勝彦
層状ペロブスカイト型ニッケル酸化物における真空紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	十倉 好紀
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
真空紫外光を用いた希土類添加酸化物の 4f-5d および 4f-4f 遷移スペクトルの解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野 正人
水・イオン液体表面における光イオン化と光反応	九州大学大学院総合理工学研究院	原田 明
同時計測による 2 価イオンの解離ダイナミクスの研究	新潟大学理学部	副島 浩一

銅含有酸化物の酸化・還元反応に伴う電子構造変化	関西大学化学生命工学部	荒地 良典
歪み超格子半導体内に形成されるミニバンド構造における超格子周期性の影響	名古屋大学大学院工学研究科	宇治原 徹
赤外顕微鏡を用いた多元極限下での固体電子状態の研究	神戸大学自然科学系先端融合研究環	入澤 明典
固体電子状態の赤外～紫外分光を用いた研究	神戸大学自然科学系先端融合研究環	入澤 明典
太陽ライマン α 光観測用偏光解析装置および分光器の開発	国立天文台	成影 典之
機能的有機薄膜の真空紫外域における光学特性評価	明治大学理工学部	松本 皓永
ホットキャリアの衝突による希土類イオンの直接励起機構の検証	山形大学理学部	北浦 守
XANES を用いたリチウムイオン二次電池層状酸化物正極の劣化反応解析	京都大学大学院人間・環境学研究科	内本 喜晴
原子核乾板の電子線に対する感度向上のための実験	名古屋大学大学院理学研究科	中村 光廣
$\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 合金の量子スピンホール相の研究	東京大学物性研究所	松田 巖

(6) 施設利用

機器センター

(前期)

有機・無機複合材料としての多核・クラスター金属錯体の交流磁化率測定	東京理科大学理学部	秋津 貴城
フラストレーション系低次元酸化物および超伝導体の磁性に関する研究	名古屋大学大学院理学研究科	高見 剛
無溶媒固相反応を応用した木質セルロースの高機能化について	静岡県立大学環境科学研究所	坂口 真人
重合誘起相分離による構造形成過程に関する研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	山本 勝宏
ナノカーボン化合物のX線回折と物性	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	平郡 論
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	小野 克彦
新規 π 電子系化合物の合成と構造	愛媛大学総合科学研究支援センター	宇野 英満
希土類磁性薄膜の磁気特性に関する研究	名古屋工業大学	安達 信泰
核酸化学修飾法の開発	生理学研究所	片岡 正典
新規なチオフェン骨格を有する系有機伝導体の結晶構造解明	東京工業大学大学院理工学研究科	芦沢 実
ESR 法によるスピロピラン誘導体の固体光反応の研究	大阪大谷大学薬学部	谷本 能文
非周期系スピングラスにおけるスローダイナミクス	北海道大学大学院工学研究科	柏本 史郎
スタフィロコッカ・ヌクレアーゼ変異体を用いた蛋白質フォールディング機構の研究(2)	名古屋大学大学院理学研究科	横 互介
高度拡張型ドナーを用いた新規分子性導体の構造と物性に関する研究	愛媛大学大学院理工学研究科	御崎 洋二
キラル結晶構造を持つ分子磁性体のスピン状態観測および内部磁場の見積もり	広島大学大学院理学研究科	井上 克也
有機分子の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
非天然金属中心を有するヘム及びノンヘム人工鉄含有タンパク質の電子状態解析	大阪大学大学院工学研究科	小野田 晃
多環芳香族炭化水素 (PAH) の構造と無輻射遷移	京都大学大学院理学研究科	小若 泰之

(後期)

金属錯体を構成要素とする有機無機複合材料の磁性測定	東京理科大学理学部	秋津 貴城
熱電体遷移金属酸化物および超伝導体の磁性	名古屋大学大学院理学研究科	高見 剛
電子共鳴スペクトル法によるヘムタンパク質活性中心の分子ひずみ解析	千葉大学大学院薬学研究院	根矢 三郎
新規 π 電子系化合物の合成と構造	愛媛大学大学院理工学研究科	宇野 英満
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	愛知教育大学	中野 博文
Co-YIG ナノ粒子, Co/Pt ナノ粒子の磁性	岐阜大学工学部	嶋 睦宏
有機分子の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
無溶媒固相反応を応用したバクテリアセルロースの高機能化について	静岡県立大学環境科学研究所	坂口 真人
新規電子供与体を用いた機能性有機結晶の構造と物性に関する研究	愛媛大学大学院理工学研究科	白旗 崇
希土類磁性薄膜の磁気特性に関する研究	名古屋工業大学	安達 信泰
ナノカーボン化合物の構造と磁気特性	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	平郡 論
重合反応誘起相分離による構造形成過程に関する研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	山本 勝宏
非天然金属中心を有するヘム及びノンヘム人工鉄含有タンパク質の電子状態解析	大阪大学大学院工学研究科	小野田 晃
新規な有機半導体の結晶構造の解明	東京工業大学大学院理工学研究科	芦沢 実
多環芳香族炭化水素 (PAH) の構造と無輻射遷移	京都大学大学院理学研究科	小若 泰之
光応答性タンパク質の電子移動反応機構に関する研究	奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科	松尾 貴史
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	小野 克彦
スピングラス準結晶の熱残留磁化	北海道大学大学院工学研究科	柏本 史郎

一次元ロジウム (I) - セミノナト錯体の磁気特性の解明	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔
ハロゲン架橋一次元複核白金錯体の構造相転移の解明	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔
高次倍音振動の観測による高振動励起状態の振動構造に関する研究	関西学院大学大学院理工学研究科	土肥 敦之
フェライト微粒子のナノ構造制御に関する検討	秋田工業高等専門学校	丸山 耕一
希土類 - 遷移金属磁歪薄膜の磁気特性に関する検討	秋田工業高等専門学校	丸山 耕一
新規ナノマテリアルの物性研究	法政大学生命科学部	緒方 啓典
核酸化学修飾法の開発	生理学研究所	片岡 正典
Crystals of myelin membrane proteins	生理学研究所	Jan Sedzik
ハニカムシート構造を持つ混合原子価鉄三核錯体の構造解析	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔
グレーシングへの応用を目指した重合開始剤フリーの紫外線硬化型樹脂の開発	愛知県産業技術研究所工業技術部	藤原 梨斉
有機導電結晶および、イオン伝導・物質の磁気特性と光照射効果	北海道大学電子科学研究所	太田 信廣
リチウムイオン二次電池材料の磁気的性質	関西大学化学生命工学部	荒地 良典
EPR 分光法による金属クラスターの構造研究	東北大学多元物質科学研究所	松岡 秀人

装置開発室

(前期)

高輝度反射楕円回転体鏡の製作	京都大学大学院理学研究科	馬場 正昭
酸化チタン光誘起超親水化反応の機構の解明, そのための装置製作	東京大学先端科学技術研究センター	橋本 和仁
衛星搭載または気球搭載用 Ge:Ga 圧縮型赤外線検出器の開発, 耐熱材料インコネル 600 のワイヤー放電加工による精密加工及び小径エンドミルによる微細加工	名古屋大学全学技術センター	鈴木 和司
アライメント酸素分子ビーム発生用速度選択デスク高精度ホルダーの開発Ⅰ)	大阪大学大学院理学研究科	笠井 俊夫

(後期)

スパッタ成膜およびドライエッチング用自動回転機能付きサンプルホルダーの開発	(独)産業技術総合研究所	銘苅 春隆
黒鉛製高温分子線源ノズル孔の孔開け	名古屋大学大学院工学研究科	山口 浩樹
電子線コンプトン散乱の時間分解反応顕微鏡の開発による物質内電子移動の可視化	東北大学多元物質科学研究所	山崎 優一
アライメント酸素分子ビーム発生用速度選択デスク高精度ホルダーの開発Ⅱ)	大阪大学大学院理学研究科	笠井 俊夫

計算機利用

相対論的モデル内殻ポテンシャルと FMO 法の連動による重元素含有ナノ・バイオ系のリアルシミュレーション	お茶の水女子大学アカデミック・プロダクション	森 寛敏
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	お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科	鷹野 景子
理論化学計算を積極的に活用した高選択的有機合成反応の開発	愛知教育大学教育学部	赤倉松次郎
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
アセン架橋オリゴポリフィリンの電子構造	愛媛大学大学院理工学研究科	魚山 大樹
環境中および生体内の有機化学反応機構の解明	茨城大学理学部	森 聖治
機能性有機顔料の結晶状態における分子間相互作用の理論的研究	横浜国立大学工学部	千住 孝俊
ナノ構造固体表面と細胞表面との相互作用の研究	横浜国立大学大学院工学研究院	荻野 俊郎
量子化学計算を用いたセルロース・糖鎖の構造と機能の研究	横浜国立大学大学院工学研究院	上田 一義
真空及び個体中における分子とナノ構造の電子移動理論	横浜国立大学大学院工学研究院	Hannes Raebiger
多成分分子理論の開発および水素結合系への応用	横浜国立大学大学院国際総合科学研究科	立川 仁典
蛋白質の動的構造と機能の解析	横浜市立大学大学院国際総合科学研究科	木寺 詔紀
非経験的分子軌道法によるクラスターの構造について	岡山理科大学大学院理学研究科	中川 幸子
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	(独)海洋研究開発機構	数納 広哉
大気エアロゾル生成に関する分子シミュレーション	(独)海洋研究開発機構	河野 明男
好冷性マレーテデヒドロゲナーゼ: 部位特異的変異導入による低温適応機構の解明	関西大学大学院工学研究科	茨木 将
デンドリマー系における粗視化シミュレーション	岐阜大学工学部	寺尾 貴道
キラル分子触媒の立体選択性に関する理論研究	岐阜大学工学部	安藤 香織
分子動力学法, 及び ab initio 法による分子間相互作用の評価	岐阜大学人獣感染防御研究センター	桑田 一夫
5d 金属原子を含むランタン型複核錯体の電子状態	岐阜大学工学部	海老原昌弘
化学反応の分類および分子設計に関する理論的研究	岐阜大学工学部	酒井 章吾
生体分子系の量子化学: 励起状態と化学反応	京都大学大学院工学研究科	長谷川淳也

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	京都大学福井謙一記念研究センター	諸熊 奎治
生体分子・芳香族分子など複雑な分子の関与する分子の性質・化学反応の理論的研究	京都大学福井謙一記念研究センター	石田 俊正
機能性有機材料の電子物性解析に関する理論的研究	京都大学大学院工学研究科	田中 一義
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
Rigged QED 理論に基づく局所量に関する研究	京都大学大学院工学研究科	立花 明知
第一原理計算に基づく合金材料設計	京都大学大学院工学研究科	弓削 是貴
数値シミュレーションによる分光スペクトルの計算	京都大学大学院理学研究科	谷村 吉隆
生体分子機械の分子動力学シミュレーション	京都大学大学院理学研究科	高田 彰二
量子コンピュータ素子開発のための分子シミュレーション	近畿大学大学院総合理工学研究科	梅崎 雅人
高分子と生体分子のシミュレーション	金沢大学理工研究域	高須 昌子
ナノ物質の構造と機能に関する第一原理計算	金沢大学理工研究域	斎藤 峯雄
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	金沢大学理工研究域	小田 竜樹
固液気界面の分子動力学解析	九州工業大学大学院工学研究院	長山 暁子
分子の電子状態と反応動力学に関する理論的研究	九州大学情報基盤研究開発センター	南部 伸孝
アモルファス性有機半導体材料の分子構造計算	九州大学未来化学創造センター	横山 大輔
半導体薄膜・界面の電子状態並びに輸送特性の第一原理的研究	慶應義塾大学理工学部	山内 淳
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
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
計算化学的手法を用いた生体高分子に関する研究	慶應義塾大学医学部	平野 秀典
分子シミュレーションによるケミカルシャペロン療法の分子メカニズムの解明	慶應義塾大学理工学部	柚木 克之
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
熱化学反応及び光化学反応に関する理論的研究	広島大学大学院理学研究科	高橋 修
新規超原子価および低配位典型元素化合物の構造と反応	広島大学大学院理学研究科	山本 陽介
分子動力学シミュレーションに基づく自由エネルギー計算法による蛋白質と核酸の機能と物性の物理化学的研究	弘前大学大学院理工学研究科	斎藤 稔
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
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
半導体ナノ構造形成過程に関する第一原理的研究	三重大学大学院工学研究科	秋山 亨
遷移金属錯体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	山形大学地域教育文化学部	野々山 信二
ブラウン動力学シミュレーション法による、周期会合高分子のレオロジー研究	山形大学大学院理工学研究科	印出井 努
色素増感太陽電池用の色素に関する理論的研究	(独)産業技術総合研究所	北尾 修
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	(独)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	(独)産業技術総合研究所	石田 豊和
デジタルスキャン光シート顕微鏡で取得した画像データシーケンスのデコンボリューションと 3 次元像構築	基礎生物学研究所	野中 茂紀
高精度電子状態理論による分子の励起状態と化学反応に関する研究	計算科学研究センター	江原 正博
入力作成支援ソフトウェア “ ignition ” の開発	計算科学研究センター	岡崎 進
ナノサイズ分子の分子理論と量子化学計算	分子科学研究所	永瀬 茂
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
生体分子の拡張アンサンブル分子動力学シミュレーション	分子科学研究所	奥村 久士
量子化学文献データベース	首都大学東京大学院理工学研究科	橋本 健朗
ガラス系の遅い動力学とフラストレーションに関する理論的研究	首都大学東京理工学研究科	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	首都大学東京理工学研究科	波田 雅彦
分子の光励起解離過程の理論的研究	新潟大学理学部	徳江 郁雄
凝縮系における分子ダイナミクス	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
分子動力学計算を用いた蛋白質 - RNA 複合体の induced-fit 機構の研究	神戸大学大学院工学研究科	栗崎 以久男
分子軌道計算を用いた分子構造の算出	神奈川工科大学工学部	宇津山 太吾
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
軌道相互作用に基づく化学反応系の解析	星薬科大学薬学部	坂田 健
液体・生体分子および関連分子系の構造・ダイナミクス・分子間相互作用と振動スペクトル	静岡大学教育学部	鳥居 肇
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
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	千葉大学大学院理学研究科	太田 幸則

生体分子の機能発現反応に関する理論的研究	千葉大学大学院薬学研究院	星野 忠次
2次元紫外・可視分光の理論的研究	早稲田大学先進理工学部	中井 浩巳
カーボンナノチューブの固相成長過程とペプチドナノリングの自己積層化におけるナノダイナミクス	早稲田大学先進理工学部	武田京三郎
分子モーターの動作機構のマルチスケールシミュレーション	早稲田大学理工学術院	岡崎 圭一
ナノマテリアル及び生体分子の機能・物性・反応性に関する理論的研究	早稲田大学理工学術院	中井 浩巳
バイオナノ流体に関する量子分子動力学解析	大阪大学大学院基礎工学研究科	川野 聡恭
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
感染症原因蛋白質の量子化学・分子動力学法による相互作用・薬剤耐性・スペクトル予測の検討	大阪大学大学院薬学研究科	川下理日人
分子磁性体の分子軌道法による理論解析及び新規手法の開発	大阪大学大学院理学研究科	奥村 光隆
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
氷点下における固体高分子型燃料電池の触媒層イオノマーの酸素輸送メカニズムに関する分子動力学解析	大同工業大学燃料電池研究センター	鈴木 昭也
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
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	筑波大学大学院数理物質科学研究科	岡田 晋
強相関電子系における光誘起ダイナミクスのシミュレーション	筑波大学大学院数理物質科学研究科	前島 展也
Flexibility の異なる 2 つの物質の界面の第一原理計算による研究	筑波大学大学院数理物質科学研究科	白石 賢二
2- ハロ酸脱ハロゲン化酵素と耐熱性システイン合成酵素の反応機構解析	長浜バイオ大学分子生命科学コース	中村 卓
有機化合物における分子配座，分子間相互作用，及び化学反応機構に対するフッ素置換効果	鳥取大学大学院工学研究科	早瀬 修一
階層的電子状態計算理論とナノ構造プロセス	鳥取大学大学院工学研究科	星 健夫
核内受容体の揺らぎと構造変化における分子動力学法を用いた線形応答理論解析	東海大学情報教育センター	渡邊 千鶴
分子軌道法および密度汎関数法を用いた生体関連分子およびその溶媒和クラスターの安定構造の研究	東京工業大学資源化学研究所	宮崎 充彦
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	東京工業大学理工学研究科	斎藤 晋
遷移金属錯体の分子設計及び構造，反応に関する理論的研究	東京工業大学大学院理工学研究科	石田 豊
タンパク質膜間相互作用の分子動力学シミュレーション	東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センター	藤田 直也
ナノ・バイオ物質の電子状態・構造・機能の相関	東京大学大学院工学系研究科	押山 淳
ポリル金属類の性質の解明と新規低原子価ホウ素化合物ポリレンのデザイン	東京大学大学院工学系研究科	山下 誠
塩素負イオンの親和力を用いた選択的化学イオン化	東京大学大学院総合文化研究科	真船 文隆
分子動力学シミュレーションによるタンパク質の高精度立体構造予測法の開発	東京大学大学院農学生命科学研究科	寺田 透
化学反応の量子ダイナミクスに関する理論的研究	東京大学大学院工学系研究科	山下 晃一
新規な分子負イオンの探索と構造の解明	東京大学大学院総合文化研究科	永田 敬
溶媒が有機反応に及ぼす影響に関する理論研究	東京大学大学院総合文化研究科	友田 修司
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	東京大学大学院理学系研究科	中村 栄一
ホスフィンルホン酸 / パラジウム触媒系を用いた極性オレフィンの重重合反応機構の解析	東京大学大学院工学系研究科	野崎 京子
ゼオライト細孔内に捕捉されたホルムアルデヒドの安定化現象およびその反応性に関する理論的研究	東京大学大学院総合文化研究科	尾中 篤
分子動力学計算および分子軌道計算を用いた分子周囲の動的環境の考察	東京大学大学院理学系研究科	渡邊 香
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
Gaussian & Fourier Transform (GFT) 法に基づいた ab-initio 分子動力学法の研究	東北大学エネルギー安全科学国際研究センター	島崎 智実
化学反応中間体クラスターの構造解析	東北大学大学院理学研究科	水瀬 賢太
金属酸化物上の化学吸着と触媒の ab initio および DFT による理論的研究	東北大学大学院理学研究科	Zhanpeisov Nurbosyn
界面非線形分光の理論	東北大学大学院理学研究科	森田 明弘
クラスターの非調和振動分光と化学反応経路探索	東北大学大学院理学研究科	山北 佳宏
コンピュータ支援創薬を指向したタンパク質 - リガンド複合体の分子シミュレーション	東北薬科大学薬学部	小田 彰史
生体高分子系へのレプリカ交換 MD 法の改良・開発	(独)産業技術総合研究所	亀田 倫史
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	奈良県立医科大学医学部	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
有機化学反応のさまざまな選択性の解析	奈良先端科学技術大学院大学情報科学研究科	中村 建介

ab initio MO 法による金属イオン-抽出剤錯体の構造研究	(独)日本原子力研究開発機構	佐伯 盛久
分子動力学計算による細胞膜と薬剤分子との結合についての研究	姫路獨協大学薬学部	吉井 範行
イオントラップを用いた分子イオンの分光	富山大学理学部	森脇 喜紀
生体内素反応過程および分子複合体形成における多機能性発現に関する量子化学的研究	福岡大学薬学部	新矢 時寛
磁性金属錯体の電子状態の解明	(独)物質・材料研究機構	西野 正理
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
ペータアミロイドとガングリオシド GM1 相互作用の解析	分子科学研究所	宇理須恒雄
シート状高分子の構造計算	分子科学研究所	江 東林
機能性物質のスピン・電子状態研究	分子科学研究所	古川 貢
DFT 計算による酸化物固定化 Ir ダイマー触媒の表面構造と触媒反応機構解明	分子科学研究所	邨次 智
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
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
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
凝縮系のダイナミクスと多時間相関関数および多次元分光法による解析	分子科学研究所	斉藤 真司
3D-RISM/MD 法による溶液中での自己組織化のシミュレーション	分子科学研究所	平田 文男
クラスター複合体の電子構造と電子ダイナミクスの理論計算	分子科学研究所	信定 克幸
ホタルルシフェラーゼの発光波長予測	兵庫県立大学大学院工学研究科	加藤太一郎
タンパク環境下でのプロトン移動反応	兵庫県立大学大学院生命科学研究科	重田 育照
タンパク質機能中心における固有な異方性の量子論に基づく解析	兵庫県立大学大学院生命科学研究科	神谷 克政
表面・薄膜・クラスターの電子状態と反応過程	兵庫県立大学大学院物質科学研究科	島 信幸
量子スピン系の低エネルギー状態に関する数値的研究	兵庫県立大学大学院物質科学研究科	中野 博生
金属クラスター上での吸着分子の反応過程	豊田工業大学クラスター研究室	近藤 保
分子の励起状態とその動的挙動の研究	豊田理化学研究所	岩田 末廣
高分子濃厚系における高分子鎖の動的性質	防衛大学校応用物理学科	萩田 克美
魔法数金属クラスターの構造と反応性	北海道大学触媒化学研究センター	佃 達哉
励起状態反応ダイナミクス手法の開発と応用	北海道大学大学院理学院	武次 徹也
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
インフルエンザウイルス HA と宿主受容体の糖鎖との相互作用解析	名古屋市立大学大学院医学研究科	尾曲 克己
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院	岡本 祐幸
穴のあいたフラレンの構造および分子包接特性に関する理論的研究	名古屋大学大学院環境学研究科	岩松 将一
水中における脂質分子集団系の構造形成と機能	名古屋大学大学院工学研究科	岡崎 進
溶液内化学反応の理論研究	名古屋大学大学院理学院	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
分子の電子状態と化学反応のポテンシャル面の理論的研究	名古屋大学大学院情報科学研究科	古賀 伸明
ミオグロビンの配位子光解離反応の解析	名古屋大学大学院理学院	倭 剛久
分子シミュレーションによる分子集合体の研究	名古屋文理大学情報文化学部	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	明治学院大学法学部	高橋 順子
膜タンパク質の構造と機能に関する分子シミュレーション	(独)理化学研究所	杉田 有治
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	(独)理化学研究所	常田 貴夫
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	(独)理化学研究所	田原 太平
蛋白質の構造機能相関計算	立命館大学生命科学部	高橋 卓也
計算科学の超精密化と巨大化	量子化学研究協会	中辻 博
非線形量子系におけるソリトンとカオス	鈴鹿国際大学国際人間科学部	大野 稔彦
分子軌道計算を用いた結晶構造の予測	和歌山大学システム工学部	山門 英雄
天然物合成反応の計算による予測	名古屋大学大学院理学院	山口潤一郎

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 ~ '02		'03		'04		'05		'06		'07		'08		'09		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	93	711	5	70	3	26	1	13	1	8	2	29	2	22	1	15	人数： 登録人数
協力研究	3,263	4,078	101	246	100	263	96	232	84	208	91	219	90	200	118	270	"
招へい 協力研究	194	196	1	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
所長 招へい	3,133	3,133	308	308	160	160	100	100	162	162	132	132	159	159	139	139	人数： 旅費支給者
研究会	266	4,082	8	229	13	304	11	206	13	310	9	198	4	105	5	45	"
若手研究会等	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	12	1	10	"
施設利用 I	1,587	3,557	54	150	55	154	53	106	47	86	59	120	72	177	57	168	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)	3,896	12,378	120	525	154	587	132	510	142	538	145	595	147	656	167	673	"
合計	12,432	28,135	597	1,529	485	1,494	393	1,167	449	1,312	438	1,293	475	1,331	488	1,320	
経費	514,400		30,794		-		-		-		-		-		-		千円

* 施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用

('09 年度の数値は、2009.12 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 ~ '02		'03		'04		'05		'06		'07		'08		'09		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	"
施設長 招へい	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	14	14	1	1	0	0	人数： 旅費支給者
研究会	31	477	1	51	1	16	1	59	3	37	2	55	2	18	2	44	"
施設利用	2,034	9,997	129	715	128	582	126	643	113	494	145	678	156	708	147	659	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	2,487	12,078	130	766	129	598	127	702	116	531	161	747	159	727	149	703	
経費	216,593		13,884		-		-		-		-		-		-		千円

('09 年度の数値は、2009.12 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
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
07	4	6	27	7	131	175
08	7	8	43	7	136	201
合計	119	82	325	431	902	1,859

* 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
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
07	27	9	12	16	25	38	5	43	175
08	33	11	19	14	35	27	2	60	201
合計	323	94	149	138	273	246	63	573	1,859

表3 海外からの研究者（2009年度）

1. 外国人運営顧問			
STACE, Anthony John	イギリス	ノッティンガム大学教授	
SAUVAGE, Jean-Pierre	フランス	ストラスブール大学教授	
2. 分子科学研究所外国人研究職員			
YANG, Dah-Yen	台湾	原子分子科学研究所	21. 2. 1-22. 1.31
DAS, Sankar Prasad	インド	Jawaharlal Nehru University	21. 3. 1-22. 2.28
GADRE, Shridhar Ramchandra	インド	University of Pune	21. 5.19-21. 8.18
CHATTERJEE, Bishnu Pada	インド	West Bengal University of Technology	21. 5. 8-21. 8. 7
SHAPIRO, Moshe	イスラエル	Weizmann Institute of Science	21.10. 3-21.12.29
3. 日本学術振興会招へい外国人研究者等			
GUO, Jia	中国	復旦大学	19.10. 1-21. 9.30
VESHAPIDZE, Giorgi	グルジア	Kansas State University	20.11.18-22.11.17
IBRAHIM, Heide Nadda	ドイツ	The Free University of Berlin	21. 5.11-22. 8.10
SZWAJ, Christophe	フランス	リール工科大学	21.10.18-21.12.13
MURUGADOSS, Arumugam	インド	自然科学研究機構分子科学研究所	21.11. 1-23.10.31
4. 国際共同研究			
AKA, Gerard Philippe	フランス	Ecole Nationale Supérieure de Chimie Paris 教授	21. 4. 8-21. 4.30
LOISEAU, Pascal	フランス	Ecole Nationale Supérieure de Chimie Paris 准教授	21. 4. 8-21. 4.30
PATCHAREE, Preedasuriyachai	タイ	Chulalongkorn University 研究員	21. 5. 8-21. 8. 6
KWON, Yong Seung	韓国	成均館大学教授	21. 8.17-21. 8.30 22. 2.15-22. 3. 1
OH, Hyunjin	韓国	MASAN COLLEGE 教授	21. 8.17-21. 8.23
SONG, Yun Young	韓国	Cheju Tourism College 准教授	21. 8.23-21. 8.30
SIMON, Marc	フランス	LCPMR/Université Pierre et Marie Curie 教授	21.10. 2-21.10.16
MORTIER, Michel	フランス	Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris 所長	21.10. 2-21.10.14
YILDIZ, Fikret	ドイツ	Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik ポスドク	21.10. 3-21.11. 1
GUO, Jinghua	アメリカ	Ernest Orlando Lawrence Berkeley National Laboratory 主任研究員	21.10. 3-21.10. 5
AZIZ, Emad F.	ドイツ	Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien 主任研究員	21.10. 3-21.10. 5
MIRON, Catalin	フランス	Centre de Etudes Nucleaires de Saclay 主任研究員	21.10. 3-21.10. 5
KIMBERG, Victor	フランス	Centre de Etudes Nucleaires de Saclay 研究員	21.10. 3-21.10.24
GUILLEMIN, Renand	フランス	LCPMR, Université Pierre et Marie Curie 研究員	21.10. 3-21.10.19
PRZYBYLSKI, Marek	ドイツ	Max-Planck-Institute für Mikrostrukturphysik 教授	21.10.10-21.10.31
BAUER, Uwe	ドイツ	Max-Planck-Institute für Mikrostrukturphysik 大学院生	21.10.17-21.10.24
LABLANQUIE, Pascal	フランス	LCPMR/Université Pierre et Marie Curie 准教授	21.11. 1-21.11.30
CHAVASIRI, Warinthorn	タイ	Chulalongkorn University, Associate Professor	22. 3.15-22. 3.21
5. 所長招へい協力研究員			
趙 翔	中国	西安交通大学教授	21. 5. 7-21. 5. 9
NG, Cheuk-Yiu	アメリカ	University of California 教授	21. 6.10-21. 6.11
6. 特別訪問研究員			
翁 志煥	中国	電気通信大学	21. 4. 1-22. 3.31
陳 青根	中国	理化学研究所	21. 6. 1-22. 3.31
MAITY, Niladri	インド	電気通信大学	21.12. 1-22. 3.31
7. 招へい研究員			
HE, Ting-Chao	中国	上海交通大学大学院生	21. 4. 1-21. 5.17 21. 7.10-21. 8.10
KERSTIN, Hild	ドイツ	Johannes Gutenberg-University 大学院生	21. 4. 3-21. 5.27
SUNDARAM, Arulmozhiraja		(独)物質・材料研究機構非常勤研究員	21. 4.11-21. 4.11
JEBAMALAI, William John Bosco	インド	Jubilant Chemsys Ltd. 研究員	21. 6. 1-21. 6. 4
MANIKANDAN, Dhanagopal	イタリア	University of Messina ポスドク	21. 6. 6-21. 6.17
WEIDEMUELLER, Matthias	ドイツ	Universität Heidelberg 教授	21. 6.14-21. 6.16
ROSSKY, Peter J.	アメリカ	University of Texas 教授	21. 7. 1-21. 7. 3

CAMMI, Roberto	イタリア	Universita' di Parma 教授	21. 7.22–21. 7.30
SCHWENTNER, Nikolaus	ドイツ	Freie Universitat Berlin 教授	21. 9.26–21.10. 1
GAO, Ying	中国	Yale University ポスドク	21.10.31–21.11.30
ZHANG, Deqing	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences 教授	21.11. 2–21.11. 3
GUO, Haiqing	中国	Peking University 准教授	21.11. 2–21.11. 3
GAN, Zhihua	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Science 教授	21.11. 2–21.11. 3
CHEN, Chuan-Feng	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Science 教授	21.11. 2–21.11. 3
SHI, Zhang-Jie	中国	Peking University 教授	21.11. 2–21.11. 3
MA, Yuguo	中国	Peking University 准教授	21.11. 2–21.11. 3
VAN TOL, Hans	ドイツ	The Florida State University 研究員	21.11. 5–21.11.15
KERN, Dorothee	アメリカ	Brandeis University 教授	21.11. 9–21.11.14
DUAN, Xuanming	中国	中国科学院理化技術研究所教授	21.11.13–21.11.14
MEHATA, Mohan Singh	インド	独立行政法人日本学術振興会研究員	21.11.18–21.11.20
SAUE, Trond	フランス	Universit e Louis Pasteur 教授	21.11.24–21.11.27
DIJKSTRA, Arend Gerrit		京都大学研究員	21.12.10–21.12.10
GRIESINGER, Christian	ドイツ	Max Planck Institute for Biophysical Chemistry 教授	21.12.19–21.12.23
RAMASWAMY, Ram	インド	Jawaharlal Nehru University 教授	22. 1.20–22. 1.21
CHANDAK, Mahesh	インド	MGM university of Helth Sciences 講師	22. 1.23–22. 2. 9
RUNGROTMONGKOL, Thanyada	タイ	Chulalongkorn University 研究員	22. 1.31–22. 3.13
HAN, Woong Yeom	韓国	Yonsei University 准教授	22. 2. 3–22. 2. 3
BROWN, Leonid S.	カナダ	University of Guelph, Associate Professor	22. 2. 5–22. 2. 5
AQUILANTI, Vincenzo	イタリア	Universita di Perugia 教授	22. 2.16–22. 3.10
BONNET, Laurent	フランス	Universite Bordeaux I 教授	22. 2.19–22. 2.24
DOLTSINIS, Nikos	イギリス	King's College London 講師	22. 2.19–22. 2.24
HAN, Ke-Li	中国	Dalian Institute of Chemical Physics 教授	22. 2.20–22. 2.24
BAEK, Dae Yul		京都大学特別協力研究員	22. 3. 7–22. 3.31
BHANDARI, Rakesh	インド	Methodex Infres Pvt. Ltd 副社長	22. 3.20–22. 3.30
GUO, Hao	中国	Henan University 講師	22. 3.28–22. 3.31

表 4 国際交流協定締結一覧

相手方機関名	国名	協定書等名	主な内容	締結年月日	有効期限	相手方署名者	機 構 署名者
中国科学院 化学研究所	中国	分子科学における日・中共同 研究プロジェクト覚書	共同研究(物質分子科学, 光 分子科学 理論計算分子科学)	2008. 9.27	2013. 9.26	化学研究所長	所長
韓国高等科学技 術院 自然科学部	韓国	分子科学研究所と韓国高等 科学技術院自然科学部との 分子科学分野における共同 研究に関する覚書	共同研究(情報交換, 研究者 交流, セミナー等の開催)	2008. 9.29	2012. 9.28	自然科学部長	所長
韓国化学会 物理化学ディビ ジョン	韓国	分子科学研究所と韓国化学会 物理化学ディビジョンとの日 韓分子科学合同シンポジウム に関する覚書	日韓の分子科学分野の先導 的研究者が集まるシンポジ ウムを定期的に開催し, 両国 の分子科学の発展に資する	2006.12.19	2010.12.18	物理化学ディ ビジョン長	所長
ソウル国立大学 BK21 化学・分 子工学部門	韓国	分子科学研究所とソウル国 立大学化学・分子工学部門 (BK21)との日韓協力に関す る覚書	情報交換, 協力研究プロジェ クト実施, 教員, 研究員, 学 生の派遣, 研究者交流	2007. 6. 4	2011. 6. 3	化学・分子工 学部門長	所長
中央研究院 原子・分子科学 研究所	台湾	分子科学研究所と中央研究 院原子・分子科学研究所との 間の分子科学における協 力に関する覚書	共同研究(物質関連分子科 学, 原子, 分子との光科学, 理論と計算の分子科学)	2008. 2.15	2011. 2.14	所長	所長
JILA (宇宙物理 学複合研究所)	アメリ カ	自然科学研究機構分子科学 研究所と JILA (宇宙物理学 複合研究所)との科学に関 する共同研究覚書	原子, 分子, 光学科学分野に 関する情報交換, 両機関の 共通研究課題に関する共同 研究の推進, 両機関の研究 者及び学生交流	2008.10.22	2013.10.21	議長	所長
フランス国立パ リ高等化学学校	フラン ス	自然科学研究機構分子科学 研究所とフランス国立パリ 高等化学学校との分子科学 分野における共同研究に関 する覚書	学生の受入れと研究者交流, 合同会議等を行い, 学術情 報交換と人的な交流を行う	2009.10.23	2014.10.22	学校長	所長

(2009.12.31 現在)

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年度からは公募方式によって課題を募集し、毎年1件を採択して開催している。平成21年度は下記の第69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69回岡崎コンファレンス

“New Frontier in Quantum Chemical Dynamics”

期 間：2010年2月21日～23日

場 所：岡崎コンファレンスセンター

組織委員：南部伸孝（上智大，提案代表者），小杉信博（分子研，所内対応者），石田俊正（京大福井センター），A. D. Kondorskiy（Levdev研究所），信定克幸（分子研，所内対応者）

内 容：

物質の特異性や分子の様々な機能が発現する要因の一つに、分子の量子力学的振る舞いがある。例えば、視覚の初期過程であるレチナル分子の光異性化反応，光デバイス等への応用が期待されるフォトクロミズム分子の反応等において、重要な過程として認識されている。さらに、現代では技術の進歩により複雑な分子の合成が可能となり、量

量子効果がもたらす現実的な機能の恩恵を受けつつある。このような状況の中、将来の科学において新しい描像を理論家は予見する必要がある。そこで、化学動力学分野で最新の研究を行っている研究者が集い、量子効果の扱いと制御という枠組みの中で最新の研究結果、手法、傾向等について議論することを目的とした岡崎コンファレンスを開催した。以下に示す3つのトピックスを議論した。また、それぞれのトピックスで議論の中心となるキーワードを明記する。

(i) 化学ダイナミクスと非断熱現象における量子効果

(a) 基礎理論と半古典論

(b) トンネル現象（多次元系、インスタントン理論など）

(ii) 多自由度系における分子動力学

(a) 半古典論における位相情報の包含

(b) on-the-fly での量子化学計算の実行とダイナミクス（ab initio MD）

(c) 溶液内反応における量子効果

(iii) 分子機能の制御や分子設計

(a) レーザー光による光反応制御

(b) 量子効果を積極的に利用した分子設計

本岡崎コンファレンスでは、以下に示すようなプログラムで合計32件の招待講演からなるオーラルセッションにより、上記トピックスについて討論を行った。事前登録参加者数が80名、当日の申し込みの参加者を加えると総参加者数は100名程度であった。

February 21 (Sun.)

9:00- 9:10 Opening address (Hiroki Nakamura, Director General, IMS)

9:10- 9:20 Introductory talk (Shinkoh Nanbu, Sophia Univ.)

Session 1. Basic Theory and Concepts of Chemical Dynamics

Chairperson: Kazuo Takatsuka

9:20-9:55 *Hiroki Nakamura* (Institute for Molecular Science)
“Semiclassical Theories of Quantum Effects in Chemical Dynamics—From Comprehension to Control of Dynamics”

9:55-10:30 *Vincenzo Aquilanti* (Università di Perugia)
“Hyperspherical and related views at elementary chemical processes”

Chairperson: Toshiyuki Takayanagi

10:50-11:25 *Kazuo Takatsuka* (University of Tokyo)
“Nuclear semiclassics and nonadiabatic electron dynamics in molecules”

11:25-12:00 *Shinnosuke Kawai* (Hokkaido University)
“Nonlinear Dynamics of Chemical Reactions through a Saddle Point”

Session 2. Quantum dynamics and Non-adiabatic Processes

Chairperson: Tetsuya Taketsugu

13:30-14:05 *Satoshi Yabushita* (Keio University)
“On the use of complex optimized GTOs for the efficient calculations of resonance state energies and photoionization cross-sections”

14:05-14:40 *Hiroshi Ushiyama* (University of Tokyo)
“Proton Transfer Dynamics”

14:40-15:15 *Kenji Honma* (Hyogo University)
“Reaction dynamics of transition metal atoms studied by crossed beam technique”

15:15-15:50 *Ikuo Tokue* (Niigata University)
“Dissociation Dynamics After the $\text{SO}_2(\tilde{C}^1\text{B}_2 \leftarrow \tilde{X}^1\text{A}_1)$ Excitation Studied by Wave Packet Propagation Technique”

Chairperson: Toshimasa Ishida

16:10-16:45 *Takeshi Yamamoto* (Kyoto University)
“Some numerical quests for accurate quantum dynamics in gas and condensed phases”

- 16:45-17:20 *Haruki Ishikawa* (Kobe University)
“Infrared spectroscopy of jet-cooled tautomeric dimer of 7-azaindole: A model system for the ground-state double proton-transfer reaction”
- 17:20-17:55 *Kiyoshi Yagi* (University of Yamanashi)
“Vibrational theory for polyatomic molecules, clusters, and beyond”

February 22 (Mon.)

Session 3. Semiclassical Theory of Chemical Reactions and Non-adiabatic Processes

Chairperson: Koji Ando

- 9:00- 9:35 *Ke-Li Han* (Dalian Institute of Chemical Physics)
“The 3D nonadiabatic dynamics calculation of DH_2^+ and HD_2^+ systems by using the trajectory surface hopping method based on the Zhu-Nakamura theory”
- 9:35-10:10 *Alexey D. Kondorskiy* (P. N. Lebedev Physical Institute)
“Semiclassical Wave Packet Propagation Method for Electronically Nonadiabatic Chemical Dynamics”

Chairperson: Katsuyuki Nobusada

- 10:30-11:05 *Laurent Bonnet* (Universite Bordeaux I)
“Classical Reactive Scattering in a Quantum Spirit”
- 11:05-11:40 *Yi Zhao* (Xiamen University)
“Approaches on electron transfer rate constants from weak-to-strong electronic coupling regimes”

Session 4. Laser Control of Chemical Dynamics

Chairperson: Tahei Tahara

- 13:10-13:45 *Hirohiko Kono* (Tohoku University)
“Nonadiabatic response of molecules to time-dependent fields”
- 13:45-14:20 *Tsuyoshi Kato* (University of Tokyo)
“Development of time-dependent multiconfiguration wave function theory for electronic and molecular dynamics in intense laser fields”
- 14:20-14:55 *Kenji Ohmori* (Institute for Molecular Science)
“Spatiotemporal coherent control with picometer and attosecond precision; From cold molecules to bulk solids”

Chairperson: Alexey D. Kondorskiy

- 15:15-15:50 *Yukiyoshi Ohtsuki* (Tohoku University)
“Development of optimal control simulation and its applications to molecular alignment and quantum information processing”
- 15:50-16:25 *Michihiko Sugawara* (Keio University)
“A new control scheme for multi-level quantum system based on effective decomposition by intense CW-laser fields”

Session 5. Semiclassical dynamics and ab initio MD

Chairperson: Motoyuki Shiga

- 16:45-17:20 *Nikos Doltsinis* (King's College London)
“Multiscale Modelling of Photoactive Materials”
- 17:20-17:55 *Shigehiko Hayashi* (Kyoto University)
“Photochemical Reaction Dynamics of Retinal Proteins”
- 17:55-18:30 *Tetsuya Taketsugu* (Hokkaido University)
“Ab initio molecular dynamics approach to excited-state reactions”

February 23 (Tue)

Session 6. Quantum Effects in Condensed Phases

Chairperson: Shinji Saito

- 9:00- 9:35 *Kenichi Kinugawa* (Nara Women's University)
“Dynamics of condensed phase hydrogen explored by means of path integral centroid molecular dynamics simulations”
- 9:35-10:10 *Shinichi Miura* (Kanazawa University)
“Molecular Dynamics Algorithms for Quantum Monte Carlo Methods”
- 10:10-10:45 *Motoyuki Shiga* (Japan Atomic Energy Agency)
“Ab initio path integral simulations”

Chairperson: Takeshi Yamamoto

- 11:05-11:40 *Toshiyuki Takayanagi* (Saitama Univ.)
“Nuclear quantum effects in helium complex and uracil anion”
- 11:40-12:15 *Koji Ando* (Kyoto University)
“Semiquantal wavepacket modeling of reaction dynamics and chemical bonding”

Chairperson: Haruki Ishikawa

- 13:30-14:05 *Tahei Tahara* (RIKEN)
“Coherent Nuclear Dynamics in Primary Ultrafast Chemical Processes”
- 14:05-14:40 *Atsushi Yamada* (Nagoya University)
“Mixed Quantum-Classical Molecular Dynamics Simulation of Intramolecular Proton Transfer Reaction in Solution: One-Dimensional Quantization Model Study”

Session 7. Molecular Design and Control of Molecular Functions

Chairperson: Kiyoshi Yagi

15:00-15:35	<i>Takayuki Ebata</i> (Hiroshima University) “Laser spectroscopic study on encapsulation structure of functional molecules in supersonic jets”
15:35-16:10	<i>Tomokazu Yasuike</i> (Institute for Molecular Science) “Photoinduced coherent dynamics of adsorbates on metal surfaces: nuclear wave packet simulation with quasi-diabatic potential energy curves obtained by open-boundary cluster model”
16:10-16:45	<i>Shinkoh Nanbu</i> (Sophia University) “Hydrogen encapsulation using non-adiabatic tunneling”
16:45-16:50	Closing remarks (Toshimasa Ishida)

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、海外の教授、准教授クラスの研究者の10日間程度の招聘、分子研側からの共同研究に関わる教員の海外出張、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、19年度10件、20年度9件、本年度12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。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。

2009年度実施状況

代表者	研究課題名	相手国
繁政 英治	電子分光法による内殻励起分子の脱励起ダイナミクスに関する研究	フランス イギリス
加藤 政博	レーザーと電子ビームを用いたコヒーレント光発生	フランス
木村 真一	強相関系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	ドイツ
小杉 信博	軟X線共鳴分光に関する国際共同研究（UVSOR BL3U）	フランス ドイツ スウェーデン 韓国
魚住 泰広	キラルなピンサー錯体による新規不斉触媒反応の開発	中国
櫻井 英博	新規高分子担持型金クラスター触媒の開発	タイ
江 東林	光捕集アンテナを有する磁性微粒子の合成に関する研究	中国
平等 拓範	COB系結晶による第二高調波発生QスイッチNdマイクロチップレーザー	フランス
横山 利彦	Pt(111)上のCo磁性超薄膜の二光電子磁気円二色性の研究	ドイツ
横山 利彦	異方性多層膜系の磁気異方性と層間相互作用の競合に関する研究	ドイツ
宇理須恒雄	神経細胞分子情報伝達システムの構築と分子科学新分野開拓	中国
大森 賢治	極低温原子分子のコヒーレント制御	カナダ

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、この覚え書きの内、日韓合同シンポジウムに関して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）との間のものに變更して更新された。合同シンポジウムは、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、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。2009年7月には淡路島で第13回目に相当するシンポジウムとして「物質分子科学・生命分子科学における化学ダイナミクス」が開催された。このシンポジウムは、日本学術振興会のアジア研究教育拠点事業のセミナーとしての支援を得て行われ、また（財）井上科学振興財団及び（財）兵庫県国際交流協会の国際研究集会開催助成、また私企業2社からの援助を頂いた。次回の日韓分子科学シンポジウムは、2011年に韓国で開催する予定（テーマは2010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 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21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の研究、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-ペプチド相互作用の精密解析（韓国、台湾、香港との共同研究）、バッキーボウルに関する合成・物性研究（台湾との共同研究）、新規遷移金属錯体触媒システムの開発（韓国との共同研究）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（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）が進展した。

理論分子科学においては、ナノ構造体における光学応答理論（台湾との共同研究）が進展した。

(2) セミナー

「第2回日韓生体分子科学セミナー——実験とシミュレーション」（日本・名古屋）、「日中機能性超分子構築シンポジウム」（日本・札幌）、「日韓分子科学シンポジウム「物質分子科学・生命分子科学における化学ダイナミクス」」（日本・淡路島）、「第4回物質・光・理論分子科学のフロンティア」冬の学校（韓国・ソウル）、「中日先端有機化学シンポジウム」（中国・上海）、「第4回全体会議」（台湾・台北）が開催された。

3-4-6 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付属加速器研究所、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 ～ 99	00	01	02	03	04	05	06	07	08	09
北海道大学	10					1	1				
室蘭工業大学	2										
東北大学	13										
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	3		1	1							
東京大学	31								2	4	3
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	8	2									
信州大学	3		1								1
岐阜大学	2										
名古屋大学	68	2	6	2	2			3	4	6	6
愛知教育大学								1			
名古屋工業大学	11	3	1			2					
豊橋技術科学大学	30				7	2				1	
三重大学	7										
京都大学	35	3	1	1			2	1	1	1	2
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	24	1	1							1	
神戸大学	3	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	33	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	38	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	4	4
大阪市立大学	4										
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	6		2	1							
上智大学	1										
東海大学	1		1	1							
東京理科大学	2	1	4		1	1					
東邦大学	1	1	1								
星薬科大学	1										
早稲田大学	9		1	1	1	1					
明治大学								1			
名城大学	4										
岡山理科大学							1				
* その他									3		1
計	474	27	31	28	26	17	14	16	17	17	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専攻の入学人数、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（2009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	9	20
機能分子科学専攻	10	9	19
計	20	18	39

在籍学生数（2009年12月現在）単位：人

入学年度専攻		2004年度	2005年度	2006年度	2007年度	2008年度	2009年度	計	定員
構造分子科学専攻	5年一貫	0	0	0	1	1	3	5	2
	博士後期	0	1	2	6	4	2	15	3
機能分子科学専攻	5年一貫	0	0	0	1	2	2	5	2
	博士後期	1	0	0	3	3	5	12	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	1991～99	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	52(10)	8(1)	3	11	6	3	7	5	5(1)	7	2	109(12)
機能分子科学専攻	48(6)	6	5	5(4)	1	5(4)	4	5	1	4	1(1)	85(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	1989～99	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009
構造分子科学専攻	82	8	5	3	7	7	8	11(1)	8(1)	5(1)	5(3)
機能分子科学専攻	76	0	7	6	6	6	7	4	5(1)	5(2)	7(2)

（ ）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		
	1989-2007年度	2008年度	2009年度	1989-2007年度	2008年度	2009年度
中国	16		2	4		2
フランス				1		
ロシア				1		
バングラディッシュ	6			2		
インド	1					
チェコ				1		
韓国	2					
ナイジェリア				1		
ネパール	1		1			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 ~ '07 年度	'08 年度	'09 年度	'89 ~ '07 年度	'08 年度	'09 年度	
北海道大学	2			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			3			8
東京大学	7			8	1		16
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			5			7
名古屋工業大学	1						1
豊橋技術科学大学	4	1			1	1	7
三重大学	1						1
京都大学	11		1(1)	15	1		28(1)
京都工芸繊維大学	1			1			2
大阪大学	5			4			9
神戸大学	3	1					4
奈良女子大学				1			1
鳥取大学	1						1
岡山大学	3			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		1(1)				3(1)
鹿児島大学				1		1(1)	2(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				3			3
名古屋市立大学				3			3
大阪市立大学	1	1					2
大阪府立大学	2			2			4
兵庫県立大学	1	1			1		3
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	1		6
国際基督教大学				1			1
中央大学	1			1			2
東海大学		1					1
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(1)	2(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	3						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	27		3(1)	15		3	48(1)

* 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（2008 年 1 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	0	1
准教授	6	8
講 師	3	2
助 教	14	14
大学以外の研究職	10	11
博士研究員等	36	23
企業等（研究職等）	6	11
企業等（研究職以外）	14	4
不 明	9	5

3-5-3 オープンキャンパス・分子研シンポジウム

2009 年 6 月 5 日（金）午後～ 6 日（土）午前まで分子研シンポジウム 2009 を開催し、引き続き 6 日（土）午後
に分子研オープンキャンパス 2009 を開催した。本事業は全国の大学院生、学部学生および若手研究者を対象に、分
子研で行なわれている研究内容を分かり易く解説することにより、共同研究の機会を拡大するとともに、総合研究大
学院大学の物理科学研究科を担う教育機関であることについても、外部の方々に広く認識して頂くことを目的として
いる。昨年度からその名称をオープンキャンパスへと変更している。4 月からホームページで告知を始め、化学雑誌、
学会誌等への広告掲載、および広報を通してポスターを大学関係者に送付し、掲示を依頼した。分子研シンポジウム
は本年度が 3 回目になる。

分子研OB，総研大OBを中心に4研究領域から推薦された5名の先生方に講演をお願いした。参加登録者数は，所外28名，所内14名の計42名，参加者総数は43名であった。未登録の所内参加者もあったようで，一時はコンファレンスセンター中会議室がいっぱいになった。

一方，オープンキャンパスでの参加登録者数は51名，キャンセルが2名あった。南は沖縄から北は北海道まで，学部学生19名，修士課程19名，博士課程2名，その他9名，総勢49名の参加となった。シンポジウム，オープンキャンパスのいずれかへの参加者は70名であった。

参加者数まとめ

	学部学生	修士課程	博士課程	その他	合 計
北海道・東北	0	1, 1, (1)	1, 1, (1)	1, 0, (0)	3, 2, (2)
関東	3, 6, (3)	1, 2, (1)	0	0	4, 8, (4)
信越・北陸	0, 2, (0)	0	0	0	0, 2, (0)
東海	3, 5, (3)	0, 6, (0)	0	6, 7, (2)	9, 18, (5)
関西	4, 6, (4)	5, 9, (5)	1, 0, (0)	2, 2, (2)	12, 17, (11)
中国	0	0, 1, (0)	0, 1, (0)	0	0, 2, (0)
四国	0	0	0	0	0
九州・沖縄	1, 0, (0)	0	0	0	1, 0, (0)
所内	0	0	1, 0, (0)	13, 0, (0)	14, 0, (0)
合 計	11, 19, (10)	7, 19, (7)	3, 2, (1)	22, 9, (4)	43, 49, (22)

* 分子研シンポジウム，オープンキャンパス2009，双方への同時参加者数の順で表示

3-5-4 夏の体験入学

2009年7月28日から31日にかけて，「分子科学研究所夏の体験入学」(第6回)を行った。この事業は，全国の大学生・大学修士課程学生を対象に，分子研での研究活動や教育活動を実際に体験し，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趣旨とする。総研大の新入生確保のための広報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て，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6回目の開催となった。予算申請・広報活動等を物理科学研究科に属する国立天文台，核融合科学研究所，宇宙航空研究開発機構とともに共同で行い，実際の体験は各研究室独自に行った。今回の参加学生は9名の参加であった。今回は，開催の日程が7月下旬に設定され，例年より1,2週間早めだったこと，また新型インフルエンザの流行の影響を受けて他大学の代講と重なるなどの理由で，本年度は少人数による催しとなった。

分子研での体験入学は，以下のスケジュールに従って進められた。

7月28日(火): UVSORならびに計算科学研究センターの見学，受け入れ研究室による体験研究の紹介を兼ねた合同のオリエンテーション

7月29日(水)，30日(木): 研究体験

7月31日(金): 体験内容紹介・感想および閉会式

体験のテーマは次の通りある。「光合成モデル化合物の合成」(永田准教授担当)，「有機EL素子の作製と発光測定」(平本教授担当)，「緑色蛍光蛋白質の巻き戻りを調べてみよう」(桑島教授担当)，「NMRを用いてタンパク質のかた

ちと動きを実感する」(加藤教授担当)、「『スピン転移物質の合成』に関する体験入学プログラム」(江准教授担当)、「クラスター触媒を用いた反応の一例を体験」(櫻井准教授担当)、「金属タンパク質を対象とした研究を体験してみよう」(青野教授担当)、「統計力学に基づく溶液内化学過程の理論的研究」(平田教授担当)。

3-5-5 総研大アジア冬の学校

総研大の特別教育研究経費によって、2009年12月1日(火)～4日(金)に岡崎コンファレンスセンターで「総研大アジア冬の学校」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院生および若手研究者の育成に広く供するために、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310名を超える学生・若手研究者がアジア各国から参加してきている。

外国からの応募は63名あり21名を受け入れた。国籍別の内訳は、中国12名、タイ5名、韓国1名、インド1名、マレーシア1名である。国内からの参加者は12名、うち総研大生は9名、国籍は日本、中国、タイ、韓国等である。冬の学校では10件の講義、29件のポスター発表(外国からは21件、国内からは8件)があった。極端紫外光研究施設(UVSOR)や計算科学研究センター、920MHz NMR装置などを中心に分子科学研究所を見学した。

開催より充分前からウェブページを通して、講義やポスターの概要と分子研全グループの最近の活動報告を参加者に伝えておいた。参加者が充分な予習をしていたためか、非常に活発な議論がなされ、かなり高度な質問が多かった。なお、プログラムの詳細は下記のとおりである。

2009 *Sokendai Asian Winter School at IMS*
“Molecular Sciences—Central Role in Multidisciplinary Fields”

December 1

14:00-17:30 Registartion
17:30 Reception

December 2

09:00-10:30 Prof. Kenji Ohmori
Exploring Quantum/Classical Boundary
10:30-10:40 Coffee Break
10:40-12:10 Prof. Akiyoshi Hishikawa
Molecules Dressed with Light
12:10-14:00 Lunch
14:00-15:30 Prof. Tsuneo Urisu
Development of the Neural Network Device
15:30-15:40 Coffee Break
15:40-17:10 Prof. Hiroshi Fujii
Molecular Mechanism of Metalloenzymes
17:30-20:00 Poster Presentations

December 3

09:00-10:30 Prof. Kyuya Yakushi
Electronic state of molecular conductors studied by infrared and Raman spectroscopy
10:30-10:40 Coffee Break
10:40-12:10 Prof. Masahiro Katoh
Basics of Synchrotron Radiation and Free Electron Laser
12:10-14:00 Lunch
14:00-15:30 Prof. Masahiro Hiramoto
Organic Thin-film Solar Cells
15:30-15:40 Coffee Break
15:40-17:10 Prof. Toshiyasu Suzuki
Organic Semiconductors for Plastic Electronics
17:30-20:00 Banquet

December 4

09:00-10:30 Prof. Hidehiro Sakurai
Chemistry of Buckybowls: Bowl-Shaped π -Aromatic Compounds

10:30-10:40 Coffee Break

10:40-12:10 Prof. Toshi Nagata
How to Capture Solar Energy—Molecular Aspects of Photosynthesis

Afternoon of December 4: Lab Tour and Free Time

December 5 Departure

3-5-6 組織的な大学院教育改革推進プログラム

総合研究大学院大学物理科学研究科の大学院教育改革推進プログラム「研究力と適性を磨くコース別教育プログラム」が採択され、平成21年秋から実施されている。3年間のプログラムとして、平成23年度まで続く予定である。

物理科学研究科では、物理科学の学問分野において高度の専門的資質とともに幅広い視野と国際的通用性を備えた、社会のニーズに答えることのできる研究者の育成を目指した教育が行われている。本プログラムでは、本研究科のこのような教育の課程をさらに実質化し、学生の研究力と適性を磨き、研究者として必要とされる総合力、専門力、企画力、開発力、国際性などを身に付けさせることを目的としている。そのため、博士課程前期における大学院基礎教育の充実とともに、博士課程後期におけるコース別教育プログラムを実施する。本研究科の大学院教育が行われている各基盤研究機関では、国際的に最先端の研究プロジェクト、大規模研究プロジェクト、企業との開発研究プロジェクトなどが数多く推進されており、本プログラムは、このような優れた研究的環境を最大限に生かした教育の実質化を目指している。また、eラーニングの積極的活用により、学生の成績評価、学生による授業評価、教員のファカルティ・ディベロップメント（FD）に関する組織的取り組みを行う。現在既に、この大学院教育改革推進プログラムに伴う履修規定の改定、共通専門基礎科目のeラーニング化、学生が主体で企画運営する研究科学生セミナーなどに向けた積極的な取り組みが行われている。

