

### 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)

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

- (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。  
(ア)「分子研研究会(一般分)」国内の研究者が集まるもの。  
(イ)「アジア連携分子研研究会」アジア地区の研究者が数名含まれるもの。  
(ウ)「学協会連携分子研研究会」分子科学関連学協会が共催するもの。
- (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) 岡崎コンファレンス：将来展望、研究の新展開の議論を主旨とする小規模な国際研究集会。
- (6) 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。
- (7) 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 2012 年度の実施状況

##### (1) 課題研究

課題名	提案代表者
偏極量子ビーム源の開発とその分子科学への応用	分子科学研究所 加藤 政博

##### (2) 協力研究

課題名(通年)	代表者
二成分金属ナノクラスターの構造及び物性の解明	東京理科大学理学部 根岸 雄一
非対象分子型量子ドットセルオートマトンの動作解析と理論設計	工学院大学基礎・教養教育部門 徳永 健
対イオン共有による電解質溶液中の同符号巨大分子間相互作用	九州大学大学院理学研究院 秋山 良
金ナノ粒子配列の近接場透過分光イメージング測定	(独)物質・材料研究機構高分子材料ユニット 三木 一司
金属ナノ構造体の増強光電場によるジアセチレン LB 膜の二光子光重合反応の検討とナノスケール光導波路の試作	埼玉大学大学院理工学研究科 坂本 章
近接場光学顕微鏡による金ナノ粒子光導波路の解析	京都大学大学院工学研究科 一井 崇
時間分解テラヘルツ分光法による分子の低振動ダイナミクスの実時間観測と機構解明	(独)日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門 近藤 正人
励起三重項分子の構造とスピンドイナミクス	京都大学大学院理学研究科 馬場 正昭
透過型軟X線 XAFS による反応活性界面の研究	慶應義塾大学理工学部 近藤 寛
ナノカーボンにおける光誘起転位・解離反応の動力学シミュレーション	東北大学大学院理学研究科 河野 裕彦
光誘起伝導性を示す D-A 型複合分子の微小結晶構造解析と光誘起電荷分離状態の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科 藤原 秀紀
高効率 AlGaAs/SiO <sub>2</sub> 高屈折率差導波路型波長変換素子の開発	東京大学工学部 松下 智紀

遠・中赤外超広帯域コヒーレント光の時間領域測定	香川大学工学部	鶴町 徳昭
コヒーレントシンクロトロン放射光の電場検出	横浜国立大学大学院工学研究院	片山 郁文
パルス圧縮を用いた大強度短パルス放射光発生に関する研究	京都大学エネルギー理工学研究所	全 炳俊
3原子分子の準安定な多価イオン状態の生成機構解明	新潟大学理学部	副島 浩一
アルカリドープしたエキゾチックナノカーボンの <i>in situ</i> 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
超高真空下磁気光学効果測定法による強磁性半導体超薄膜の磁気特性	名古屋工業大学若手研究イノベータ養成センター	宮崎 秀俊
新規テトラセン誘導体を用いた共蒸着 p-i-n 型有機薄膜太陽電池	東京大学大学院理学系研究科	松尾 豊
希土類・有機ハイブリッド集光アンテナのナノスペース配列	島根大学教育学部	西山 桂
交差共役系高分子合成に用いる高速重合金属触媒の探索	山形大学大学院理工学研究所	前山 勝也
バッキーボウルとその誘導体の構造と機能の研究	東邦大学理学部	菅井 俊樹
金クラスターで標識した DNA の電子顕微鏡によるシーケンシング	自然科学研究機構生理学研究所	永山 國昭
固体担持触媒を用いた有機合成反応の開発と応用	琉球大学理学部	鈴鹿 俊雅

課 題 名 ( 前 期 )

代 表 者

水溶液における溶媒の非線形応答の分子動力学シミュレーション	九州大学大学院理学研究院	久保田陽二
水、水溶液、および生体高分子における動的相互作用の解明	神戸大学自然科学系先端融合研究環分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
生体分子を扱う分子動力学計算における温度制御手法の解析	(独)産業技術総合研究所ナノシステム研究部門	森下 徹也
量子スピン系の ESR 測定及び強磁場磁化測定	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
周期分極反転素子の短パルス波長変換応用	東京農工大学大学院工学研究院	芦原 聡
オージェ終状態を選別した内殻励起 <i>cis</i> -ヘキサフルオロシクロブタンの解離過程	広島大学大学院理学研究科	岡田 和正
光電子分光による和鉄(日本刀)の酸化プロセスのその場観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
低分子型有機薄膜太陽電池の性能向上に関する研究	立命館大学理工学部	服藤 憲司
混合発光性錯体の構造と物性解明	富山大学大学院理工学研究所	柘植 清志
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
有機結晶とイオン伝導体の物性に対する光照射効果と光励起ダイナミクス	北海道大学電子科学研究所	太田 信廣
気相イオンの極低温冷却と NMR 分光への応用	神戸大学	富宅喜代一
組換え <i>Gaussia Luciferase</i> に於ける SS 結合形成による構造多形成及び「揺らぎ」の NMR 解析	東京農工大学大学院工学研究院	黒田 裕
有機磁性体の低温構造と磁性の相関	大阪府立大学大学院理学系研究科	細越 裕子
OspA の巻き戻り機構の解明	山形大学大学院理工学研究所	真壁 幸樹
金薄膜上に化学吸着させたクラウンエーテル-金属イオン包接錯体の赤外分光	広島大学大学院理学研究科	井口 佳哉
多核サンドイッチ化合物およびその類縁体の合成と性状解明	大阪大学大学院工学研究科	生越 専介
プロテアソームの分子集合と蛋白質分解機構	富山大学先端ライフサイエンス拠点	伊野部智由
pH 依存的な ERp44-Ero1 $\alpha$ 間の相互作用制御機構の解明	九州大学生体防御医学研究所	稲葉 謙次
電子励起状態計算を用いた液体・固体の遠紫外スペクトルの帰属研究	関西学院大学理工学部	尾崎 幸洋
有機化合物を主体とする分子性キラル磁性体の合成及び電気磁気光学効果の検証	城西大学理学部	秋田 素子
近赤外色素の物性研究	愛媛大学大学院理工学研究所	宇野 英満
ポルフィリンダブルデッカー型単分子磁石の分子配列評価	大阪大学大学院理学研究科	田中 大輔
蛍光偏光解消を利用したヘム依存性制御蛋白質の機能解析	北海道大学大学院理学研究院	石森浩一郎
DMRG 法による化学反応過程の理論的研究	京都大学福井謙一記念研究センター	諸熊 奎治
設計した金属タンパク質の CO <sub>2</sub> 還元機能の測定	名古屋工業大学工学部	田中 俊樹

[ 共同利用研究特別プロジェクト( 震災対応 ) ]

気相原子分子小集団の共鳴多光子イオン化解離過程のピコ秒時間分解観測	東北大学大学院理学研究科	美津津文典
新寄縮多環系芳香族化合物の合成と構造	東北大学大学院理学研究科	平郡 諭

課 題 名 ( 後 期 )

代 表 者

水、水溶液、および生体高分子における動的相互作用の解明	神戸大学自然科学系先端融合研究環分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
遠紫外における高分子骨格の電子励起状態の研究	関西学院大学理工学部	尾崎 幸洋
非線形量子ダイナミクスとデコヒーレンスとの関係	茨城大学工学部	和田 達明
高励起における励起子ポラリトン凝縮の変遷	情報・システム研究機構国立情報学研究所	堀切 智之

人工原子と量子細線を用いた人工分子設計のためのモデリング	岡山大学大学院自然科学研究科	廣川 真男
ラゲールガウスモードを用いた弱測定	高知工科大学システム工学群	小林 弘和
気相イオンの極低温冷却と NMR 分光への応用	神戸大学	富宅喜代一
Extended Electronic States in Crystalline Assemblies of Nucleosides	北陸先端科学技術大学院大学マテリアルサイエンス研究科	RIEDLEIN, Rainer
質量選別・運動量画像計測法による <i>cis</i> -ヘキサフルオロシクロブタンの解離有機化合物を主体とする分子性キラル磁性体の合成及び電気磁気光学効果の検証	広島大学大学院理学研究科	岡田 和正
有機磁性体の低温構造と磁性の相関	城西大学理学部	秋田 素子
量子スピン系の ESR 測定及び強磁場磁化測定	大阪府立大学大学院理学系研究科	細越 裕子
分子の内殻イオン化・オージェ過程の研究	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
オージェ終状態を選別した内殻励起 <i>cis</i> -ヘキサフルオロシクロブタンの解離過程	新潟大学理学部	彦坂 泰正
光電子分光による和鉄（日本刀）の酸化プロセスのその場観測	広島大学大学院理学研究科	岡田 和正
サマリウム系価数揺動化合物における光学特性の研究	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
赤外分光法による固体電子状態の研究	名古屋大学大学院理学研究科	井村敬一郎
低分子型有機薄膜太陽電池の性能向上に関する研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
ポルフィリン型単分子磁石の分子配列評価	立命館大学理工学部	服藤 憲司
近赤外色素の物性研究	大阪大学大学院理学研究科	田中 大輔
塩化ノルボルネンの環化三量化反応における立体制御機構の解明	愛媛大学大学院理工学研究科	宇野 英満
多核サンドイッチ化合物およびその類縁体の合成と性状解明	立教大学理学部	山中 正浩
ヘム結晶化酵素の分子機構解明	大阪大学大学院工学研究科	生越 専介
OspA の巻き戻り機構の解明	大阪大学大学院理学研究科	石川 春人
組換え <i>Gaussia luciferase</i> に於ける SS 結合形成による構造多形成及び「揺らぎ」の NMR 解析	山形大学大学院理工学研究科	真壁 幸樹
プロテアソームの分子集合と蛋白質分解機構	東京農工大学大学院工学研究科	黒田 裕
小胞体品質管理に関するマンノシダーゼ様タンパク質の機能発現機構の解明	富山大学先端ライフサイエンス拠点	伊野部智由
有機結晶とイオン伝導体の物性に対する光照射効果と光励起ダイナミクス	京都大学再生医科学研究所	細川 暢子
コヒーレントテラヘルツ光発生における励起光源のパルス幅最適化	北海道大学電子科学研究所	太田 信廣
Yb:YAG 結晶の光学的性質の研究	(独)理化学研究所テラヘルツ光研究プログラム	林 伸一郎
ピコ秒レーザーパルスエネルギー付加による超音速流れ制御に関する基礎研究	千葉大学環境リモートセンシング研究センター	竹内 延夫
ショートパルスレーザーを用いたレーザー点火に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	佐宗 章弘
高輝度マイクロチップレーザーのプラズマ計測応用	大阪大学大学院工学研究科	赤松 史光
生体内銅イオンの輸送を担うタンパク質間相互作用の制御メカニズム	自然科学研究機構核融合科学研究所	安原 亮
塩基を非天然骨格に導入した人工核酸の立体構造解析	慶應義塾大学理工学部	古川 良明
水中での反応における触媒活性種 3R システム構築	名古屋大学大学院工学研究科	浅沼 浩之
超広帯域コヒーレント赤外光を使った高分子の分子振動分光	大阪工業大学工学部	大高 敦
ZnO ナノロッド中の H の固体 NMR による評価	香川大学工学部	中西 俊介
金属ナノパーティクルを用いる高活性触媒の開発	大阪工業大学	佐々 誠彦
紫外光電子分光測定によるバナジウム酸化膜の電子状態に関する研究	奈良工業高等専門学校	嶋田 豊司
金ナノ粒子・シリコンナノポア複合構造の光学的評価	東海大学工学部	沖村 邦雄
設計した金属タンパク質の CO <sub>2</sub> 還元機能の測定	慶應義塾大学理工学部	斎木 敏治
複合パルスを用いたスピン・エコー法の改良	名古屋工業大学工学部	田中 俊樹
金薄膜上に化学吸着させたクラウンエーテル—金属イオン包接錯体の赤外分光	近畿大学大学院総合理工学研究科	坂東 将光
電気化学的測定法を用いたヘムセンサータンパク質の機能解析	広島大学大学院理学研究科	井口 佳哉
有機半導体のキャリアスピンダイナミクス	東京工業大学大学院生命理工学研究科	朝倉 則行
pH 依存的な ERp44-Ero1 $\alpha$ 間の相互作用制御機構の解明	新潟大学大学院自然科学系	生駒 忠昭
ヘム取込み系におけるヘム結合タンパク質の構造機能相関解明	九州大学生体防御医学研究所	稲葉 謙次
銅タンパク質生合成における翻訳後修飾反応の分子機構解明	大阪大学大学院工学研究科	林 高史
	大阪大学大学院工学研究科	伊東 忍
[ 共同利用研究特別プロジェクト( 震災対応 ) ]		
気相原子分子小集団の共鳴多光子イオン化解離過程のピコ秒時間分解観測	東北大学大学院理学研究科	美齊津文典
新奇縮合多環系芳香族化合物の合成と構造	東北大学大学院理学研究科	平郡 諭

### (3) 研究会

#### 【アジア連携分子研研究会】

溶液・ソフトマターの新局面：実験及び理論研究手法の開拓と新規物性探索への展開

Recent Development of Experimental and Theoretical Methodology on Liquids and Soft Matters: Basic Properties and Applications to Novel Devices

2012年6月1日(金)～2日(土) 分子科学研究所 研究棟201号室

6月1日(金)

- 13:00 趣旨説明 西山 桂 (島根大教)  
座長 墨 智成  
セッション(1) 計算科学のいま：方法論の開発から応用へ
- 13:10 宮田竜彦(愛媛大院理工)  
MD/3D-RISM法を用いた自由エネルギー計算
- 13:35 横川大輔(名大院理)  
量子化学的手法に基づく分子間ポテンシャルの構築
- 14:00 奥村久士(分子研)  
マルチパーリック・マルチサーマル分子動力学シミュレーションによるタンパク質の温度・圧力変性
- 14:25 ポスター発表(1) うち冒頭5分は口頭プレビュー  
座長 高椋利幸  
セッション(2) 溶液の構造・反応場としての利用
- 14:50 富田恒之(東海大理)  
機能性セラミックス合成のための溶液プロセス
- 15:15 佐藤高彰(信州大繊維)  
小角散乱法を用いた蛋白質溶液への多面的アプローチ——蛋白質間相互作用から立体構造予測まで——  
座長 加藤 稔
- 15:40 吉田亨次(福岡大理)  
細孔水の構造とダイナミクス
- 16:05 高椋利幸(佐賀大院工)  
分子性液体の特性に依存したイオン液体の会合体形成
- 16:30 ポスター発表(2)  
座長 佐藤高彰  
セッション(3) レーザーを使って観る・作る
- 17:00 塚田真也(島根大教育)  
不規則性を有する強誘電体の相転移～光散乱による観測～
- 17:25 城田秀明(千葉大院融合科学)  
フェムト秒ラマン誘起カー効果分光法でみるテラヘルツ領域の分子運動  
座長 西山 桂
- 17:50 三浦篤志(台湾・交通大)  
光圧が誘起する分子集合・結晶化の時空間分解分光とイメージング

6月2日(土)

- 座長 勝本之晶  
セッション(4) 溶液・ソフトマターの基礎物性と機能発現
- 9:30 西山 桂(島根大教育)  
溶液中における小さな有機分子の自己組織化を利用した発光デバイス合成プロセス
- 9:55 山口 毅(名大院工)  
ポリマー系電解液のワルデン則：緩和スペクトルからのアプローチ
- 10:20 原田 聖(島根大教育)  
キラル希土類錯体の円偏光発光特性評価と新規偏光発光材料への応用  
座長 吉田亨次  
セッション(5) 高分子から生体系まで
- 11:05 勝本之晶(広島大院理)  
アクリルアミド系高分子の微細構造と巨視的溶液物性の相関
- 11:30 加藤 稔(立命館大薬)  
タンパク質の構造物性——モデルペプチドの高圧研究からのアプローチ  
座長 吉田紀生  
セッション(6) 生体系のこれから
- 13:30 原野雄一(阪大蛋白研)  
生体分子の水和熱力学量計算に向けた形態計測法のアプローチ
- 13:55 墨 智成(豊橋技科大院工)  
バクテリアIV型線毛モーターの粘着脱離動力学

- 座長 原野雄一
- 14:20 伊藤 暁 (分子研)  
クーロンレプリカ交換法の Aβ(29-42) への応用
- 14:45 吉田紀生 (九大院理)  
3D-RISM による KcsA チャネル中のカチオン結合モード解析
- 15:10 吉田紀生・西山 桂  
会議総括——溶液・ソフトマター研究の将来展望——

【分子研研究会】レーザー分光および磁気測定による分子構造探求の新展開  
2012年7月30日(月)～31日(火) 分子科学研究所 研究棟201号室

7月30日(月)

- 13:00 - 13:10 馬場正昭 (京大理)  
「Opening Address」
- 13:10 - 13:30 大島康裕 (分子研)  
「レーザー分光および磁気測定による分子構造探求の新展開」
- 13:30 - 13:50 国重沙知 (京大院理)  
「ベンゼン重水素置換異性体の高分解能レーザー分光」
- 13:50 - 14:10 林 雅人 (分子研)  
「ベンゼンを含むクラスタの高分解能紫外分光」「ベンゼンを含むクラスタの高分解能紫外分光」
- 司会 水瀬賢太
- 14:10 - 14:30 三枝洋之 (横浜市大院生命ナノシステム科学)  
「気相振動分光法による核酸塩基分子の立体構造解析」
- 14:30 - 14:50 飯森俊文 (北大電子科学研究所)  
「レーザー光による有機導体の電気伝導と磁化における光誘起変化」
- 14:50 - 15:10 藤田 渉 (首都大院理工)  
「有機分子磁性体における磁気相転移と分子構造変化」
- 15:10 - 15:30 石元孝佳 (九大稲盛フロンティア研究センター)  
「ベンゼン分子の分光定数と H/D 同位体効果」
- Coffee Break
- 司会 石元孝佳
- 15:50 - 16:10 川島雪生 (横浜市大院生命ナノシステム科学)  
「水六量体アニオンクラスタの徐冷法によるシミュレーション」
- 16:10 - 16:30 小山田隆行 (横浜市大院生命ナノシステム科学)  
「ピリアル定理に基づいた多成分系分子軌道法による陽電子化合物の研究」
- 16:30 - 16:50 山田健太 (横浜市大院生命ナノシステム科学)  
「ab initio QM/MM 法における効率的な長距離静電相互作用計算のための仮想点電荷エワルド法」
- 17:10 - 17:30 立川仁典 (横浜市大院生命ナノシステム科学)  
「量子多成分系分子理論の最近の展開: 量子・熱ゆらぎを考慮した低障壁水素結合系の理論的解明」
- 17:30 - 17:50 長嶋雲兵 (産総研ナノシステム研究)  
「ゼオライト鑄型炭素の水素吸着サイトの温度依存性」
- 18:00 - 20:00 懇親会

7月31日(土)

- 司会 加藤立久
- 9:00 - 9:20 中村敏和 (分子研)  
「共同研究の観点から見た分子研の ESR 環境」
- 9:20 - 9:40 柏本史郎 (北大院工)  
「準結晶中の磁気秩序とスローダイナミクス」
- 9:40 - 10:00 松岡秀人 (東北大多元物質科学研究所)  
「多周波 ESR 法を用いた光合成研究」
- 10:00 - 10:20 大胡恵樹 (東邦大医)  
「外部刺激応答型ヘムモデルの構造と物性」
- Coffee Break
- 10:40 - 11:00 岡 芳美 (富山大先端ライフサイエンス拠点)  
「渡り鳥の高感度磁気研究レセプターを模倣した人工光誘起ラジカルペア・システム」
- 11:00 - 11:20 太田雅壽 (新潟大工)  
「長石を用いた X 線吸収線量評価」
- 11:20 - 11:40 塩見大輔 (大阪市大院理)  
「キラリティをもつ分子磁性体の磁気測定——縦磁化検出による円偏波 ESR の試み——」
- 11:40 - 12:00 鐘本勝一 (大阪市大院理)  
「ESR 遷移によって誘起される有機半導体ダイオードにおける分極電流」

	Lunch Break
	司会 鐘本勝一
13:20 - 13:40	池上崇久(島根大院総合理工) 「高い置換基を有するフタロシアニン - salen 融合型二核形成配位子とその金属錯体の合成と性質」
13:40 - 14:00	満身 稔(兵庫県立大院物質理学) 「キララー次元ロジウム (I)-セミキノト錯体の磁気特性の解明」
14:00 - 14:20	酒巻大輔(京大院工) 「特異な立体構造を有する芳香族アミンを用いた高スピン分子の開発」
14:20 - 14:40	古川 貢(分子研) 「機能性物質のアドバンスド ESR」
14:40 - 15:00	倉橋拓也(分子研) 「不斉サレンマンガニウム触媒から生成する高原子価錯体の分光・磁気測定研究」
15:00 - 15:20	藤井 浩(分子研) 「生体内における常磁性金属イオンと有機ラジカルとの磁気的相互作用について」
15:20 - 15:40	加藤立久(京大高等教育研究開発推進機構) 「共同利用 ESR 測定で得た研究結果」
15:40 - 16:00	全体討論

【分子研研究会】新しい光の創成と物質科学——精密計測と操作への展開  
2012年10月11日(木)～12日(金) 岡崎コンファレンスセンター 小会議室

10月11日(木)

13:20 - 13:25	開会の辞
13:25 - 13:45	加藤政博(分子研) 小型放射光施設 UVSOR の現状と将来計画
13:45 - 14:10	保坂将人(名大) UVSOR におけるコヒーレントシンクロトロン光源の開発
14:10 - 14:35	芦田昌明(阪大) 超広帯域赤外時間領域分光法
14:35 - 15:00	芦原 聡(農工大) 赤外振動遷移における量子干渉の操作
15:00 - 15:15	(コーヒーブレイク)
15:15 - 15:40	永井正也(阪大) 高強度ピコ秒電場パルスによる物質制御に向けて
15:40 - 16:05	田中拓男(理研) 3次元メタマテリアルの自己組織化作製法
16:05 - 16:30	宮丸文章(信州大) テラヘルツ領域のメタマテリアル
16:30 - 16:45	(コーヒーブレイク)
16:45 - 17:10	長谷宗明(筑波大) フォノン周波数コム
17:10 - 17:35	桂川真幸(電通大) 最も簡便なアト秒パルスの発生法
17:35 - 18:00	熊倉光孝(福井大) 原子波の光学的位相制御とその応用
18:30	懇親会

10月12日(金)

9:00 - 9:25	尾松孝茂(千葉大) トポロジカル光波とカイラリティ
9:25 - 9:50	越野和樹(東医歯大) 単一マイクロ波光子の決定論的下方変換：超伝導回路 QED による実現
9:50 - 10:15	清水亮介(電通大) 周波数無相関 2 光子状態の直接生成と 4 光子量子干渉
10:15 - 10:30	(コーヒーブレイク)
10:30 - 10:55	木村真一(分子研) 先端放射光を用いた物質科学
10:55 - 11:20	久保 敦(筑波大) 波束運動の動的パラメータの実験的決定
11:20 - 11:45	早瀬潤子(慶大) ダイヤモンド超薄膜中空素空孔中心の光学特性
11:45 - 12:15	枝松圭一(東北大) 光で探る測定と擾乱の不確定性関係——ハイゼンベルグと小澤の不等式——

12:15 - 13:15	(昼食)
13:15 - 13:40	石川顕一(東大) アト秒・フェムト秒極端紫外光によるヘリウム原子のイオン化
13:40 - 14:05	板谷治郎(東大) 高強度赤外 OPCPA による「水の窓」高次高調波発生
14:05 - 14:30	藤 貴夫(分子研) 超短光パルスの振動電場を測定する新しい方法
14:30 - 14:55	大村英樹(産総研) 分子トンネルイオン化の量子制御を利用したレーザー場フリーエ合成
14:55 - 15:10	(コーヒーブレイク)
15:10 - 15:35	櫛引俊宏(防衛医大) 光音響技術を用いた分子イメージング——光音響顕微鏡の創製
15:35 - 16:00	木下俊哉(京大) 低次元光格子中の BEC
16:00 - 16:25	三代木伸二(東大) KAGRA 重力波望遠鏡の設計と建設状況
16:25 - 16:50	菱川明栄(名大) EUV/X 線自由電子レーザー場における原子過程
17:05	UVSOR 見学

### 【アジア連携分子研研究会】

Workshop of Quantum Dynamics and Quantum Walks

2012年11月24日(土)～26日(月) 岡崎コンファレンスセンター

#### 11月24日(土)

9:25- 9:30	Opening Remark Chair: Etsuo Segawa
9:30-10:30	Jingbo Wang (The University of Western Australia) [Invited Talk] Quantum walks, physical implementation and potential applications
10:30-11:30	Norio Konno (Yokohama National University) [Invited Talk] A universality class of quantum walks on graphs
11:30-12:00	Tatsuya Tate (Nagoya University) Asymptotics of quantum walks on the line
12:00-13:30	Lunch
13:30-15:00	Poster Session
	2nd Session Chair: Jingbo Wang
15:00-15:30	Fabrice Debbausch (UPMC) Quantum walks with random coefficients and relativistic stochastic processes
15:30-16:00	Clement Ampadu Convergent Behavior of the Pauli Quantum Walk on the Line
16:00-16:30	Coffee Break
	3rd Session Chair: Nobuaki Obata
16:30-17:00	Iwao Sato (Oyama National College of Technology ) On the cube of the transition matrix of a discrete-time quantum walk on a graph
17:00-17:30	Tetsuji Taniguchi (Matsue College of Technology) On the smallest eigenvalue of graphs and Hoffman graphs
17:30-18:00	Hyoung-In Lee (Research Institute of Mathematics) Dynamics of cascaded decays associated with negative-binomial probability
18:00-18:30	Sho Suda (International Christian University ) Complex mutually unbiased bases and Sic-POVMs from the viewpoint of complex spherical designs and association schemes

#### 11月25日(日)

	4th Session Chair: Peng Xue
9:30-10:30	Andreas Schreiber (University of Paderborn) [Invited Talk] Time multiplexed photonic quantum walks
10:30-11:30	Ivan Kassal (University of Queensland) [Invited Talk] Modelling photosynthesis with quantum walks
11:30-12:00	Peter Rohde (Macquarie University) Optical multi-walker quantum walks
12:00-13:30	Lunch
	5th Session Chair: Ivan Kassal
13:30-14:00	Leo Matsuoka (Japan Atomic Energy Agency) Implementation of continuous-time quantum walk in a diatomic molecule by a train of non-resonant optical pulses

- 14:00-14:30 Salvador Venegas-Andraca (Tecnologico de Monterrey)  
[Invited Talk] Quantum image processing: motivation, definitions and quantum-walk based morphological operators (Teleconference)
- 14:30-15:00 Armando Perez (Universidad de Valencia & IFIC)  
Controlling quantum walks with the help of dispersion relations
- 15:00-15:30 Christopher Cedzich (Leibnitz University Hannover)  
Quantum Walks with electric fields
- 15:30-16:00 Ozgur Mustecaplioglu (Koc University)  
Quantum Walk in optical lattices
- 16:00-16:30 Coffee Break
- 6th Session Chair: Ozgur Mustecaplioglu
- 16:30-17:30 Dieter Meschede (University of Bonn)  
[Invited Talk] Electric Quantum Walks
- 17:30-18:30 Nobuyuki Takei (Institute for Molecular Science)  
[Invited Talk] Ultrafast coherent control of an ultracold Rydberg gas
- 19:30 Banquet

11月26日(月)

- 7th Session Chair: Norio Konno
- 9:30-10:30 Philippe Blanchard (Bielefeld University)  
[Invited Talk] Decoherence in Infinite Quantum Systems
- 10:30-11:30 Peng Xue (Southeast University)  
[Invited Talk] Implementing quantum walks
- 11:30-12:00 Carlo Di Franco (Queen's University Belfast)  
Two-dimensional quantum walk with reduced experimental resources
- 12:00-13:30 Lunch
- 8th Session Chair: Yutaka Shikano
- 13:30-14:00 Ramij Rahaman (University of Gdansk)  
Dual benefit of continuous variable quantum games
- 14:00-14:30 Pawel Kurzynski (Centre for Quantum Technologies)  
Quantum walk as a generalized measuring device
- 14:30-17:00 Free Discussion

【分子研研究会】生物物質科学の展望

2013年1月10日(木)～11日(金) 分子科学研究所 研究棟201号室

1月10日(木)

- 13:20 はじめに 加藤礼三(理研)  
振動分光(座長:森)
- 13:30 神取秀樹(名古屋工業大学大学院工学研究科)  
光受容タンパク質におけるエネルギー変換・情報変換
- 14:10 小倉尚志(兵庫県立大学大学院生命理学研究科)  
チトクロムc酸化酵素によるプロトンポンプ反応の研究:時間分解赤外および共鳴ラマン分光法
- 14:50-15:05 休憩
- 生体系における揺らぎ(座長:鹿野田)
- 15:05 寺嶋正秀(京都大学大学院理学研究科)  
生体機能と揺らぎ・ダイナミクス
- 15:45 足立伸一(高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所)  
時間分解X線回折・散乱法から見たタンパク質の構造ゆらぎとダイナミクス
- 16:25-16:40 休憩
- X線構造解析(座長:澤)
- 16:40 城 宜嗣(理化学研究所城生体金属科学研究室)  
生体反応場の特異性——呼吸酵素の分子進化を例に——
- 17:20 沈 建仁(岡山大学大学院自然科学研究科)  
光合成水分解反応の構造基盤
- 18:30 懇親会

1月11日(金)

- 測定手法の開発(座長:佐々木)
- 9:00 福岡剛士(金沢大学理工研究域電子情報学系)  
液中周波数変調AFMを用いた生体試料の液中サブナノスケール観察

- 9:40 原田慈久(東京大学物性研究所)  
水と生体分子の高分解能軟X線吸収・発光分光
- 10:20-10:35 休憩  
計算科学(座長:石原)
- 10:35 長岡正隆(名古屋大学大学院情報科学研究科)  
タンパク質における緩和と反応の統計的アプローチ
- 11:15 宮崎 剛(物質材料研究機構理論計算科学ユニット)  
複雑生体系に対する全原子第一原理計算
- 11:55-13:20 昼食  
化学的アプローチ(座長:加藤)
- 13:20 中島 洋(名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻)  
シグナルトランスドューサーの化学——機能解明と応用——
- 14:00 大胡恵樹(東邦大学医学部)  
外場応答ヘムモデルによる生体とマテリアルへのアプローチ
- 14:40 藤井 浩(分子科学研究所)  
金属酵素の活性部位の電子構造と酵素反応
- 15:20 終わりに 森 初果(東大)

### 【学協会連携分子研研究会】

無機化学の現状と未来:若い世代が切り開く新しいサイエンス

2013年1月17日(木)~19日(土) 分子科学研究所 研究棟201号室,岡崎コンファレンスセンター 小会議室

1月17日(木)

- 16:00-16:10 開会の挨拶と趣旨説明 北川 進(京大 iCeMS)  
錯体及び有機金属化学の現在と将来 座長北川 進(京大 iCeMS)
- 16:10-16:40 田中晃二(京大 iCeMS)  
「水の酸化反応における酸素-酸素結合生成での金属イオンの役割」
- 16:40-17:10 山本陽介(広大院理)  
「典型元素化学・有機金属化学の研究動向と将来展望」

1月18日(金)

- 無機物性材料 座長山下正廣(東北大院理)
- 9:30-10:00 陰山 洋(京大院工)  
「酸化物の配位コントロール」
- 10:00-10:30 福村知昭(東大院理)  
「酸化物薄膜合成と物質・物性探索」
- 10:30-10:50 休憩  
化学機能材料 座長北川 宏(京大院理)
- 10:50-11:20 石井和之(東大生産研)  
「光で機能するポルフィリン」
- 11:20-11:50 本橋輝樹(北大院工)  
「遷移金属酸化物における新規酸素貯蔵材料の開発と応用展開」
- 11:50-13:40 昼食  
多孔性材料 座長西原 寛(東大院理)
- 13:40-14:10 山内悠輔(NIMS / JST- さきがけ)  
「機能性無機材料としてのナノ多孔体」
- 14:10-14:40 横井俊之(東工大資源研)  
「新原理によるシリカ系規則性多孔体の合成」
- 14:40-15:00 休憩  
触媒材料 座長田中晃二(京大 iCeMS)
- 15:00-15:30 阿部 竜(京大院工 / 最先端次世代プロ)  
「人工光合成実現のための新規可視光応答型光触媒系」
- 15:30-16:00 唯美津木(分子研 / 総研大)  
「Ce系複合酸化物固溶体-金属界面でのメタンリフォーミング」
- 16:00-16:30 小倉賢(東大生産研 / 京大触媒電池元素戦略ユニット)  
「多孔質シリカを配位子とする活性サイトと空間触媒科学」
- 16:30-17:00 柴田直哉(東大総研 / JST-PRESTO)  
「原子分解能走査型透過電子顕微鏡法の新しい展開」
- 18:00-20:00 懇親会

1月19日(土)

- ナノ粒子 座長加藤昌子(北大院理)  
9:30-10:00 山内美穂(九大 I2CNER / JST-CREST)  
「金属元素を利用したナノ機能化学」  
10:00-10:30 小俣孝久(阪大院工)  
「コロイダル量子ドットの合成と物性」  
10:30-10:50 休憩  
錯体材料 座長山本陽介(広大院理)  
10:50-11:20 杉本 学(熊大院自然科学)  
「錯体化学をメイン・フィールドとする理論計算化学の挑戦」  
11:20-11:50 村橋哲郎(分子研)  
「有機金属錯体の構造次元性拡張」  
11:50-12:00 閉会の挨拶 田中晃二(京大 iCeMS)

【アジア連携分子研研究会】

The 6<sup>th</sup> Japan-China Joint Symposium on Functional Supramolecular Architectures  
2013年1月18日(金)～21日(月) 岡崎コンファレンスセンター

1月18日(金)

- 15:00 Registration  
18:00 Welcome Reception at OCC

1月19日(土)

- Opening Address: Hiromitsu MAEDA  
Chairperson: Hiromitsu MAEDA (9:00 ~ 10:10)  
9:00 ~ 9:35 Yugu MA (Peking University)  
Self-Assembly Mediated by Arene-Perfluoroarene Interactions  
9:35 ~ 10:10 Hiroshi SHINOKUBO (Nagoya University)  
Organometallic Route to Novel Porphyrins  
10:10 ~ 10:30 Coffee Break  
Chairperson: Wenping HU (10:30 ~ 11:40)  
10:30 ~ 11:05 Takahiro TSUCHIYA (Tsukuba University)  
Construction of Supramolecular Systems Based on Endohedral Metallofullerenes  
11:05 ~ 11:40 Yanhou GENG (Changchun Institute of Applied Chemistry, CAS)  
Conjugated Polymers Based on Dithienocarbazoles  
11:40 ~ 13:00 Lunch  
Chairperson: Shu SEKI (13:00 ~ 14:10)  
13:00 ~ 13:35 Aiko FUKAZAWA (Nagoya University)  
Intramolecular Alkyne Cyclization for New Ring-Fused  $\pi$ -Electron Systems  
13:35 ~ 14:10 Zengqi XIE (South China University of Technology)  
Supramolecular Optoelectronic Materials Based on Perylene Bisimides  
14:10 ~ 14:30 Coffee Break  
Chairperson: Changchun WANG (14:30 ~ 15:40)  
14:30 ~ 15:05 Zhishan BO (Beijing Normal University)  
Polymethacrylate Based Polymer Solar Cells  
15:05 ~ 15:40 Shu SEKI (Osaka University)  
Nano-Scale Charge Carrier Transport in Organic Semiconductor Materials and Their Interfaces Probed by Microwaves  
15:40 ~ 16:00 Coffee Break  
Chairperson: Chunru WANG (16:00 ~ 17:45)  
16:00 ~ 16:35 Yohei YAMAMOTO (Tsukuba University)  
Self-Assembly of  $\pi$ -Conjugated Molecules and Polymers into Electroactive Nanomaterials  
16:35 ~ 17:10 Yanchun HAN (Changchun Institute of Applied Chemistry, CAS)  
Detection of Explosives with Xeogel Film from Conjugated Carbazole-Based Dendrimer  
17:10 ~ 17:45 Hiromitsu MAEDA (Ritsumeikan University)  
Supramolecular Assemblies Based on Interionic Interactions  
18:00 ~ 20:00 Poster Section and Buffet Party at OCC

1月20日(日)

- Chairperson: Zhishan BO (9:00 ~ 10:10)  
9:00 ~ 9:35 Kazuki SADA (Hokkaido University)  
De Novo Design of Thermo-Responsive Polymer Systems via Supramolecular Interaction

- 9:35 ~ 10:10 Feng YAN (Soochow University)  
Imidazolium-Based Ionomer Polyelectrolytes for Proton-Exchange & Anion-Exchange Membrane Applications
- 10:10 ~ 10:30 Coffee Break  
Chairperson: Yanchun HAN (10:30 ~ 11:40)
- 10:30 ~ 11:05 Hiroko YAMADA (Nara Institute of Science and Technology)  
In-situ Photochemical Conversion of Diketone Precursors to Acene Derivatives for Latent Functional Materials
- 11:05 ~ 11:40 Changchun WANG (Fudan University)  
Magnetic Multifunctional Composite Microspheres for Biomedical Applications
- 11:40 ~ 13:00 Photo and Lunch  
Chairperson: Kazuki SADA (13:00 ~ 14:10)
- 13:00 ~ 13:35 Huaping XU (Tsinghua University)  
Selenium-Containing Polymers: A Promising New Biomaterial
- 13:35 ~ 14:10 Tetsuro MURAHASHI (Institute for Molecular Science)  
Redox-Switchable Metal Assembling and Ligand Coupling in Tetranuclear Palladium Sandwich Frameworks
- 14:10 ~ 14:30 Coffee Break  
Chairperson: Hiroshi SHINOKUBO (14:30 ~ 15:40)
- 14:30 ~ 15:05 Wusong JIN (Donghua University)  
Functional Self-Assembled Soft Materials from Molecular Graphenes
- 15:05 ~ 15:40 Shiki YAGAI (Chiba University)  
Molecular Design Toward Highly Organized Artificial Dye Assemblies
- 15:40 ~ 16:00 Coffee Break  
Chairperson: Yuguang MA (16:00 ~ 17:45)
- 16:00 ~ 16:35 Donglin JIANG (Institute for Molecular Science)  
Two-Dimensional Polymers and Covalent Organic Frameworks: The Molecular Drive to Designable Periodic Organic Polymer Structure
- 16:35 ~ 17:10 Takashi NAKANISHI (National Institute for Materials Science)  
Alkylated  $\pi$ -Conjugated Molecules Based Non-Assembled, Non-Volatile Functional Liquids at Room Temperature
- 17:10 ~ 17:45 Wenping HU (Institute of Chemistry, CAS)  
High Performance Organic Semiconductors, Micro- and Nanometer Sized Crystals and Devices
- 19:00 ~ Banquet
- 1月21日(月)
- Chairperson: Yanhou GENG (9:30 ~ 11:15)
- 9:30 ~ 10:05 Chunru WANG (Institute of Chemistry, CAS)  
Fullerene Application on Polymer Solar Cells
- 10:05 ~ 10:40 Shigeyuki MASAOKA (Institute for Molecular Science)  
Water Oxidation Catalyzed by Mono- and Multinuclear Metal Complexes
- 10:40 ~ 11:15 Zhen LI (Wuhan University)  
The Design, Synthesis and Properties of Some New Blue Fluorophores with Aggregation-Induced Emission  
Closing Remark: Shu SEKI and Zhishan BO

### 【分子研研究会】生体配位化学の最前線と展望

2013年2月5日(火) ~ 6日(水) 分子科学研究所 研究棟 201号室

2月5日(火)

- 13:00-15:00 DL 伊東 忍(阪大院工)  
荘司 長三(名大院理)  
「蛋白質の誤作動を利用する触媒システム開発と新規機能への展開」(20)  
澤井 仁美(分子研岡崎統合バイオ)  
「ヘムセンサー-蛋白質を介した細胞内ヘムの恒常性維持機構」(20)  
中島 洋(名大院理)  
「金属タンパク質のダイナミクスを利用する機能の創出」(20)  
藤枝 伸宇(阪大院工)  
「配位子としてのタンパク質」(20)  
小野田 晃(阪大院工)  
「金属酵素の機能エッセンスに着眼する：鉄二核中心の機能化をめざしたアプローチ」(20)  
松尾 貴史(奈良先端大)  
「タンパク質の二面性に着目した人工タンパク質の創成」(20)
- 15:15-17:25 DL 青野重利(分子研岡崎統合バイオ)  
藤井 浩(分子研岡崎統合バイオ)  
「軸配位子による高原子価鉄オキソヘム錯体の反応性の制御機構」(20)

- 松井 敏高 (東北大多元研)  
「ヘムタンパク質におけるユニークな酸素活性化」(20)
- 杉本 秀樹 (阪大院工)  
「金属置換型バイオインスパイアード触媒：有機合成への展開」(20)
- 多喜 正泰 (京大院人間・環境)  
「分子状酸素活性化機構に基づいた銅一価蛍光プローブの開発」(20)
- 上野 隆史 (東工大院生命理工)  
「細胞・金属・空間」(25)
- 船橋 靖博 (阪大院理)  
「金属酵素モデルの最前線と展望」(25)
- 17:30-18:20 座長：齋藤正男 (東北大多元研)  
鈴木 正樹 (金沢大理工)  
「非ヘム型酸化酵素の機能モデル錯体の創製」(50)
- 18:45-20:45 懇親会

2月6日(水)

- 9:00-11:30 DL 城 宜嗣 (理研)  
引地 史郎 (神奈川大工)  
「Bio-inspired 酸化触媒の開発を目指して」(25)
- 小寺 政人 (同志社大工)  
「自然に学ぶ高性能酸化触媒の開発」(25)
- 真島 和志 (阪大院基礎工)  
「エタノールアミドが生体内で用いられる化学的理由」(25)
- 田中健太郎 (名大院理)  
「バイオインスパイアードな分子組織化学：精密組織化およびメソフェーズへの展開」(25)
- 小島 隆彦 (筑波大院数理)  
「ルテニウム(IV) - オキソ錯体による基質酸化反応」(25)
- 樋口 恒彦 (名市大薬)  
「ヘムおよび関連構造の新機能発現を目指して」(25)
- 11:30-12:20 座長 渡辺芳人 (名大院理)  
成田 吉徳 (九大先端研)  
「金属酵素活性中心化学モデルから分子触媒へ」(50)
- 13:20-15:50 DL 林 高史 (阪大院工)  
菊地 和也 (阪大院工)  
「分子イメージングプローブの設計に使える機能原理」(25)
- 廣田 俊 (奈良先端大)  
「ヘムタンパク質の多量化：タンパク質変性と機能化」(25)
- 城 宜嗣 (理研)  
「呼吸酵素の分子進化における構造機能変換」(25)
- 小倉 尚志 (兵庫県立大理)  
「生体配位化学における高解像度の虫眼鏡：振動分光法」(25)
- 高妻 孝光 (茨城大理)  
「金属タンパク質の構造と機能から海洋生物無機化学へのパラダイムシフト」(25)
- 吉澤 一成 (九大先端研)  
「量子化学計算による生物無機化学の研究」(25)
- 16:00-16:50 座長 増田秀樹 (名工大工)  
巽 和行 (名大院理)  
「クラスター活性部位を持つ金属酵素：化学の挑戦」(50)

【学協会連携分子研研究会】

先端的レーザー分光技術による分子科学の新展開  
2013年2月12日(火)～13日(水) 岡崎コンファレンスセンター

2月12日(火)

- 13:00-13:10 開会の辞
- 13:10-14:00 武井宣幸 (分子研)  
「極低温リユードベリ原子の超高速コヒーレント制御」
- 14:00-14:40 多田康平 (神戸大院理)  
「分子線・磁場効果を併用した硝酸ラジカル NO<sub>3</sub> の超高分解能レーザー分光」
- 14:40-15:10 穴戸龍之介 (東北大院理)  
「プロトン付加トリメチルアミン・水クラスター ((CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>N)<sub>n</sub>-H<sup>+</sup>-H<sub>2</sub>O (n = 1-3) の赤外分光～魔法数付近のクラスター構造とその解離チャンネル～」
- 15:10-15:30 休憩

- 15:30-16:20 野村雄高 (分子研)  
「新しい赤外コヒーレント光源の開発」
- 16:20-17:00 三浦 瞬 (東大院理)  
「数サイクル強レーザーパルスによる分子解離ダイナミクス：搬送波包絡線位相依存性」
- 17:00-17:40 三宅伸一郎 (分子研)  
「コヒーレント分布操作を目指した新規高輝度狭帯域レーザーの開発」
- 2月13日 (水)
- 9:00- 9:50 宮内直弥 (学習院大院理)  
「共振増強液滴ラマンスペクトルの入射波長依存性」
- 9:50-10:30 相賀則宏 (京大院理)  
「可視光応答型光触媒 BiVO<sub>4</sub> 表面のホールトラップサイトにおける電子格子相互作用の観測」
- 10:30-10:50 休憩
- 10:50-11:40 乙須拓洋 (理研)  
「二次元蛍光相関分光で観る蛋白質自発ゆらぎ」
- 11:40-12:30 中曽根祐介 (京大院理)  
「過渡回折格子法による蛋白質反応の時間分解検出」
- 12:30-13:40 昼食
- 13:40-14:30 水野 操 (阪大院理)  
「紫外共鳴ラマン分光法によるタンパク質の高速ダイナミクス観測」
- 14:30-15:20 横野牧生 (神戸大院理)  
「時間分解蛍光分光法による光合成反応中心間の相互作用の解析：光捕集・光防御機構にあわせた相互作用の変化」
- 15:20-15:30 閉会の辞

【分子研研究会】金属錯体機能の根源を探る～分子構造とその変化様式の探求最前線  
2013年3月13日(水)～14日(木) 分子科学研究所 実験棟301-303号室

- 3月13日 (水)
- 13:00-13:10 研究会趣旨説明 村橋 哲郎 (分子科学研究所)  
セッション I: 座長 黒田 孝義 (近畿大学)
- 13:10-13:55 西原 寛 (東京大学理)  
「錯体分子ワイヤ・ネットワークの界面配位プログラミング合成と電子機能」
- 13:55-14:25 若手講演 堀毛 悟史 (京都大学工)  
「配位高分子構造のダイナミクスが誘起するイオン伝導機能」
- 14:25-14:50 写真撮影, コーヒーブレイク  
セッション II: 座長 水田 勉 (広島大学)
- 14:50-15:35 栗原 正人・富樫 貴成 (山形大学理)  
「古典的錯体であったシュウ酸銀に秘められていた機能, 今それが産業界が待望する高機能銀ナノ微粒に生まれ変わる！」
- 15:35-16:20 佃 達哉 (東京大学理)  
「新しい界面構造に基づく金属クラスターの有機修飾」  
セッション III: 座長 村橋 哲郎 (分子科学研究所)
- 16:20-16:50 若手講演 山下 誠 (中央大学理工)  
「含ホウ素多座配位子を有する金属錯体の構造と機能」
- 16:50-17:35 小澤 文幸 (京都大学化学研究所)  
「ホスファルケン配位錯体の構造と反応」
- 18:00-20:00 懇親会
- 3月14日 (木)
- セッション IV: 座長 正岡 重行 (分子科学研究所)
- 9:30-10:00 若手講演 砂田 祐輔 (九州大学先導化学研究所)  
「配位不飽和性を鍵とする高反応性鉄錯体の開発」
- 10:00-10:30 若手講演 佐藤 俊介 (豊田中央研究所)  
「金属錯体を用いた CO<sub>2</sub> 光還元反応」
- 10:30-10:45 コーヒーブレイク  
セッション V: 座長 中沢 浩 (大阪市立大学)
- 10:45-11:30 酒井 健 (九州大学理)  
「分子性触媒を基盤とした水可視光分解系の開拓」
- 11:30-12:15 山下 正廣 (東北大学理)  
「単分子量子磁石を用いた量子分子スピントロニクスの最前線」
- 12:15-12:20 閉会挨拶 伊東 忍 (大阪大学)

(4) 若手研究会等

課 題 名	提案代表者
「第 52 回分子科学若手の会夏の学校講義内容検討会」及び「第 1 回分子科学若手シンポジウム」	東北大学大学院理学研究科 山崎 馨

(5) 岡崎コンファレンス

課 題 名	提案代表者
量子コヒーレンスの極限制御	自然科学研究機構分子科学研究所 大島 康裕

(6) UVSOR 施設利用

(前期)

L 殻 XANES による Mo/H-MFI 系 MTB 触媒の Mo 活性種の高耐久条件の検討	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
地球マントル物質中における Al の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
AlGaN の Al1s 及び Gd3d 内殻からの発光・励起スペクトル測定	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
XAFS による炭素化ポーラスシリコン発光サイトの構造解析	名古屋大学エコトピア科学研究所	吉田 朋子
LTA 型ナノゼオライトの処理過程での局所構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
XAFS 法を用いたハイドロキシアパ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
真空紫外励起による酸化物結晶における希土類イオンのホスト増感	秋田大学工学資源学系研究科	小玉 展宏
有機無機ハイブリッド物質における真空紫外光照射発光増大現象の解明	山形大学理学部	北浦 守
BL3B の整備 (基本特性)	山形大学理学部	北浦 守
天然石英の紫外光励起によるルミネッセンスの研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
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
AlGaN 混晶の深い価電子帯領域からの発光励起測定	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
BL3B の整備 (基本特性)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
新規可視・紫外蛍光材料の探索と発光機構の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
アミノ酸蒸着膜の真空紫外発光スペクトル測定	神戸大学大学院人間発達環境学系研究科	中川 和道
高分解能多電子同時計測による分子のオージェ過程の研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
強相関系 Co ペロブスカイト酸化物の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
BL4B ビームライン整備	分子科学研究所	岩山 洋士
実験・理論を併用した XANES スペクトル分析による Li 二次電池正極材料の電子構造解析	(独)産業技術総合研究所	奥村 豊旗
重い電子系 CaCu <sub>3</sub> Ru <sub>4</sub> O <sub>12</sub> の角度分解光電子分光	弘前大学理工学系研究科	任 皓駿
角度分解光電子分光法によるトポロジカル絶縁体超薄膜のフェルミ準位制御	東京大学大学院理学系研究科	平原 徹
軟 X 線光電子分光による遷移金属リン化合物表面のキャラクタリゼーション	立教大学理学部	枝元 一之
高圧合成 MS <sub>2</sub> (M = Fe, Co, Ni, Cu) および Fe <sub>2-x</sub> V <sub>1+x</sub> Al 単結晶の電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
歪み超格子半導体における周期「乱れ」がキャリアダイナミクスに及ぼす影響	名古屋大学大学院工学研究科	宇治原 徹
高分解能角度分解光電子分光法によるゲルマニウム - 錫混晶薄膜の電子状態評価	名古屋大学大学院工学研究科	中塚 理
FeSb <sub>2</sub> で観測される巨大ゼーベック係数における高濃度近藤効果の役割の解明	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
3 元系ハーフホイスラー合金薄膜におけるトポロジカル絶縁体的電子状態の直接観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
角度分解光電子分光を用いた第 3 元素ドーピングによる EuO の機能性向上の解明	名古屋工業大学	宮崎 秀俊
BL5U の整備	分子科学研究所	木村 真一
水星探査衛星に用いる極端紫外光検出器の開発	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一朗
VUV 吸収スペクトルによるアモルファス半導体の光劣化評価	岐阜大学工学部	林 浩司
20 ~ 250 eV 領域におけるアミノ酸蒸着膜の吸収スペクトル測定	神戸大学大学院人間発達環境学系研究科	中川 和道
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
鉛フリー圧電体の遠赤外スペクトル	名古屋工業大学	柿本 健一
BL6B の整備	分子科学研究所	木村 真一
トポロジカル絶縁体の低エネルギー高分解能角度分解光電子分光	東北大学原子分子材料科学高等研究機構	高橋 隆
パイ電子共役系有機薄膜における電子格子相互作用の検出	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
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の電子状態の研究	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
Circular Dichroism ARPES Studies on Bulk Inversion Symmetry Broken Materials	分子科学研究所	木村 真一

Polarization Dependent ARPES Study on Low-Dimensional Iron-Chalcogenide Materials	分子科学研究所	木村 真一
BL7U 光電子エンドステーションの整備	分子科学研究所	松波 雅治
強相関 Yb 化合物の 3 次元角度分解光電子分光	分子科学研究所	松波 雅治
新規オージェ・フリー発光の時間分解測定	山形大学理学部	大西 彰正
高速シンチレータ材料におけるエネルギー移動と内殻励起の寄与の定量的解析	東北大学大学院工学研究科	越水 正典
太陽ライマン 光偏光観測ロケット実験 (CLASP) のフライト品評価	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所	成影 典之
BL7B 及び VUV エリブソメトリーの整備 (II)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
マイクロ波照射 TiO <sub>2</sub> の電子状態の解析	京都大学エネルギー理工学研究所	全 炳俊
3 ~ 30 eV 領域におけるアミノ酸蒸着膜の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所	中川 和道
金属 / 有機半導体の界面電子構造における分子の吸着距離の役割	岩手大学大学院工学研究科	細貝 拓也
角度分解紫外光電子分光法によるフッ素化有機分子薄膜の分子配向評価	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
金属単結晶上の有機半導体薄膜における分子基板間相互作用の解明	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
有機トランジスタ及び有機太陽電池のヘテロ界面電子構造の電子分光法による研究	千葉大学先進科学センター	中山 泰生
BL8B の整備	分子科学研究所	木村 真一
有機薄膜への光照射によって生じる表面起電力の観測	島根大学総合理工学部	田中 仙君
分子性有機錯体の紫外光電子スペクトル	愛媛大学大学院理工学研究所	宮崎 隆文
2 つの吸収端を利用した「水の窓」域アト秒ミラーの研究	大阪市立大学大学院工学研究科	熊谷 寛
(後期)		
L 殻 XANES による Mo/H-MFI 系 MTB 触媒の Mo 活性種の高耐久条件の検討	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
地球マントル物質中における Al の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
AIGdN の Al1s 及び Gd3d 内殻からの発光・励起スペクトル測定	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
XAFS による炭素化ポーラスシリコン発光サイトの構造解析	名古屋大学エコトピア科学研究所	吉田 朋子
XAFS 法を用いたハイドロキシアパ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
真空紫外励起による酸化物結晶における希土類イオンのホスト増感	秋田大学工学資源学研究所	小玉 展宏
有機無機ハイブリッド物質における真空紫外光照射発光増大現象の解明	山形大学理学部	北浦 守
BL3B の整備 (基本特性)	山形大学理学部	北浦 守
天然石英の紫外光励起によるルミネッセンスの研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
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
AlGaN 混晶の深い価電子帯領域からの発光励起測定	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
BL3B の整備 (基本特性)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
新規可視・紫外蛍光材料の探索と発光機構の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
アミノ酸蒸着膜の真空紫外発光スペクトル測定	神戸大学大学院人間発達環境学研究所	中川 和道
高分解能多電子同時計測による分子のオージェ過程の研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
強相関系 Co ペロブスカイト酸化物の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
BL4B ビームライン整備	分子科学研究所	岩山 洋士
実験・理論を併用した XANES スペクトル分析による Li 二次電池正極材料の電子構造解析	(独)産業技術総合研究所	奥村 豊旗
重い電子系 CaCu <sub>3</sub> Ru <sub>4</sub> O <sub>12</sub> の角度分解光電子分光	弘前大学理工学研究所	任 皓駿
角度分解光電子分光法によるトポロジカル絶縁体超薄膜のフェルミ準位制御	東京大学大学院理学系研究科	平原 徹
軟 X 線光電子分光による遷移金属リン化合物表面のキャラクタリゼーション	立教大学理学部	枝元 一之
高圧合成 MS <sub>2</sub> (M = Fe, Co, Ni, Cu) および Fe <sub>2-x</sub> V <sub>1+x</sub> Al 単結晶の電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
歪み超格子半導体における周期「乱れ」がキャリアダイナミクスに及ぼす影響	名古屋大学大学院工学研究科	宇治原 徹
高分解能角度分解光電子分光法によるゲルマニウム - 錫混晶薄膜の電子状態評価	名古屋大学大学院工学研究科	中塚 理
FeSb <sub>2</sub> で観測される巨大ゼーベック係数における高濃度近藤効果の役割の解明	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
3 元系ハーフホイスラー合金薄膜におけるトポロジカル絶縁体的電子状態の直接観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
角度分解光電子分光を用いた第 3 元素ドーブによる EuO の機能性向上の解明	名古屋工業大学	宮崎 秀俊
BL5U の整備	分子科学研究所	木村 真一
水星探査衛星に用いる極端紫外光検出器の開発	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一朗
VUV 吸収スペクトルによるアモルファス半導体の光劣化評価	岐阜大学工学部	林 浩司
20 ~ 250eV 領域におけるアミノ酸蒸着膜の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所	中川 和道
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

鉛フリー圧電体の遠赤外スペクトル	名古屋工業大学	柿本 健一
BL6B の整備	分子科学研究所	木村 真一
トポロジカル絶縁体の低エネルギー高分解能角度分解光電子分光	東北大学原子分子材料科学高等研究機構	高橋 隆
パイ電子共役系有機薄膜における電子格子相互作用の検出	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
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の電子状態の研究	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
Circular Dichroism ARPES Studies on Bulk Inversion Symmetry Broken Materials	分子科学研究所	木村 真一
Polarization Dependent ARPES Study on Low-Dimensional Iron-Chalcogenide Materials	分子科学研究所	木村 真一
BL7U 光電子エンドステーションの整備	分子科学研究所	松波 雅治
強相関 Yb 化合物の 3 次元角度分解光電子分光	分子科学研究所	松波 雅治
高速シンチレータ材料におけるエネルギー移動と内殻励起の寄与の定量的解析	東北大学大学院工学研究科	越水 正典
太陽ライマン 光偏光観測ロケット実験 (CLASP) のフライト品評価	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所	成影 典之
BL7B 及び VUV エリプソメトリーの整備 (II)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
3 ~ 30 eV 領域におけるアミノ酸蒸着膜の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
金属 / 有機半導体の界面電子構造における分子の吸着距離の役割	岩手大学大学院工学研究科	細貝 拓也
角度分解紫外光電子分光法によるフッ素化有機分子薄膜の分子配向評価	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
金属単結晶上の有機半導体薄膜における分子基板間相互作用の解明	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
有機トランジスタ及び有機太陽電池のヘテロ界面電子構造の電子分光法による研究	千葉大学先進科学センター	中山 泰生
BL8B の整備	分子科学研究所	木村 真一
有機薄膜への光照射によって生じる表面起電力の観測	島根大学総合理工学部	田中 仙君
分子性有機錯体の紫外光電子スペクトル	愛媛大学大学院理工学研究科	宮崎 隆文
廃ガラスから合成したゼオライトの局所構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
XAFS 測定による Fe 添加非晶質リン酸カルシウムの局所構造解析	東北大学金属材料研究所附属研究施設関西センター	佐藤 充孝
蛍光法を用いた人工ゼオライト中における交換カオチンの局所構造解析	東北大学金属材料研究所附属研究施設関西センター	佐藤 充孝
軟 X 線吸収分光法を用いた酸化物材料の欠陥の研究	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
太陽光発電用ワイドギャップ半導体の光学特性	岐阜大学工学部	山家 光男
水・イオン液体表面での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
X 線吸収・磁気円二色性分光による吸着磁性分子 / グラフェン系の磁気交換結合の研究	日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター	大伴真名歩
FeCo/Ag(116) 薄膜における量子井戸状態由来の磁気異方性	分子科学研究所	横山 利彦
バナジウムフタロシアニンの磁気特性に関する研究	分子科学研究所	横山 利彦
XMCD による Ni 薄膜上の鉄フタロシアニン単分子膜の磁気モーメントの定量的測定	分子科学研究所	高木 康多
巨大磁気異方性と保磁力を持つ単層磁性薄膜の XMCD による研究	分子科学研究所	中川 剛志
VUV 照射により液滴から生成する発光スペクトルの測定	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	下條 竜夫
放射光を用いた赤外イメージングシステムの構築	分子科学研究所	木村 真一
高輝度放射光を用いた顕微分光による固体電子状態の研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
低エネルギー高分解能角度分解光電子分光法による Bi 超薄膜の半金属半導体転移の研究	東京大学大学院理学系研究科	平原 徹
微小ギャップ半導体中の intrinsic な電子状態の観測	分子科学研究所	木村 真一
電荷・磁気秩序を示す希土類・遷移金属化合物の 3 次元低エネルギー光電子分光	立命館大学理工学部	今田 真
グラフェンおよび単結晶グラファイトの低エネルギー光電子分光	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
新規オージェ・フリー発光の時間分解測定	山形大学理学部	大西 彰正
機能性含フッ素ポリイミド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
真空紫外領域におけるフッ化物材料の光伝導特性評価	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 晋吾
アルカリハライド中の CsI 微結晶の緩和励起子発光	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
真空紫外固体レーザーの開発に向けたフッ化物材料の発光特性の研究	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	猿倉 信彦
Electronic Structure of Amino Acids Assembly Studies by UPS	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga rasika
鉄ニクタイト超伝導体における真空紫外領域分光	大阪大学大学院理学研究科	宮坂 茂樹
軟 X 線吸収分光法による立方晶 AlN 薄膜の構造解析	九州大学大学院総合理工学研究院	富永 亜希
真空紫外励起による無機蛍光体の発光特性と発光機構の解明	学習院大学理学部	稲熊 宣之

(7) 施設利用

機器センター

(通年)

キラル銅錯体と分子磁性体の金属錯体複合系の磁性測定	東京理科大学理学部	秋津 貴城
光誘起相転移を示す金属錯体の微小結晶構造解析と磁気的物性解明	九州大学先端物質化学研究所	姜 舜徹
ヘムタンパク質の反応性を制御するポルフィリン立体構造因子の究明	千葉大学大学院薬学研究院	根矢 三郎
MgB <sub>2</sub> 超伝導体の超伝導特性におけるホウ素同位体効果	自然科学研究機構核融合科学研究所	菱沼 良光
窒化硼素ドーピング化合物の構造と物性	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	小林 本忠
新規分子磁性体の結晶構造と磁気的性質	首都大学東京大学院理工学研究科	藤田 涉
NiFe ナノ粒子, Co/Pd ナノ細線, Fe/Pt ナノ粒子の磁気的性質の解明	岐阜大学工学部	嶋 睦宏
Pt 触媒を用いた単層カーボンナノチューブ成長に関する研究	名城大学理工学部	丸山 隆浩
NMR を利用した複合糖質およびマルチドメインタンパク質の動的構造解析	名古屋市立大学大学院薬学研究科	矢木 宏和
外部刺激応答性を利用した新規機能性物質の開発	東邦大学医学部	大胡 恵樹
新規ナノマテリアルの物性評価	法政大学生命科学部	緒方 啓典
シクロデキストリン類と低分子薬物の包接複合体結晶の単結晶 X 線構造解析	愛知学院大学薬学部	小川 法子
新規なキャリア輸送材料の合成と電子デバイスへの応用	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 克彦
金属を導入した DNA の電子状態の解明	首都大学東京大学院理工学研究科	溝口 憲治
水環境中天然有機物 (NOM) および下水 2 次処理水中有機物 (EfOM) の NMR 法によるキャラクタリゼーション	京都大学大学院工学研究科	清水 芳久
有機デバイスに用いる有機半導体材料の構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	芦沢 実
X 線結晶構造解析による分子構造の決定	豊橋技術科学大学	藤澤 郁英
誘電体 - 磁性体ハイブリッド素子の磁気的特性	秋田工業高等専門学校物質工学科	丸山 耕一
フラビン発色団を有する化合物における光誘起ラジカルペアの寿命評価	富山大学薬学部	岡 芳美
新規ポリオキシメタレート錯体の合成とその電気化学的酸化還元反応メカニズムの解明	高知大学教育研究部	上田 忠治
南極の陸上に生育する光合成生物の乾燥時における光障害防御の光波長依存特性の研究	情報・システム研究機構国立極地研究所	小杉真貴子

(前期)

結晶構造解析による分子間相互作用の見積りと固相電子移動過程の相関	静岡大学工学部	嶋植田一正
NO センシング材料の磁気的評価	名古屋工業大学大学院未来材料創成工学研究科	小澤 智宏
シナプスタンパク質のフォールディングが精神機能に及ぼす作用の検出	自然科学研究機構生理学研究所	田淵 克彦
アルカリ金属ドーピングポリアセチレンラジカルポリマーのスピン状態および磁気状態の観測	広島大学大学院理学研究科	井上 克也
アルキルエチレンジアミン系イオン液体中での遷移金属イオンの選択的相互作用	奈良女子大学大学院人間文化研究科	飯田 雅康
新奇電子供与体を成分とする分子性半導体の低温物性・構造に関する研究	愛媛大学大学院理工学研究科	白旗 崇
有機ラジカル結晶の低温 X 線結晶構造解析	大阪市立大学大学院理学研究科	塩見 大輔
酸化物磁性薄膜および多孔体の磁気特性および磁気共鳴に関する研究	名古屋工業大学セラミック基盤工学研究センター	安達 信泰
高感度 ESR 法による光合成タンパクの構造研究	東北大学多元物質科学研究所	松岡 秀人
sp 電子系準結晶の磁気特性	北海道大学大学院工学研究院	柏本 史郎
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変異体の電子状態解析	大阪大学大学院工学研究科	小野田 晃
ガラス基板へのレーザードーピングに関する研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 晋吾
フタロシアニン金属錯体の磁気特性の研究	島根大学総合理工学部	池上 崇久
メカノケミカル重合によるセルロース高機能化材料の創製	静岡県立大学環境科学研究科	坂口 真人
カビ胞子の生存に係わるフリーラジカル信号の同定	名古屋大学大学院工学研究科	石川 健治
高等植物グリコペプチドホルモン CLV3 のコンフォメーション解析	自然科学研究機構基礎生物学研究所	松林 嘉克
多層グラフェン壁を持つメソ多孔性炭素への金属担持	金沢大学理工研究域	西 信之
GPCR - リガンド相互作用の熱力学的解析	九州大学大学院薬学研究院	白石 充典
多環式芳香族炭化水素の X 線結晶構造解析	兵庫県立大学大学院工学研究科	北村 千寿
新規機能性錯体分子の構造と光学的性質	静岡大学理学部	仁科 直子
金ナノクラスターの近赤外発光分析	早稲田大学理工学術院	井村 考平
分子性超伝導体 β <sup>2-</sup> -型 (ET) <sub>2</sub> (ReO <sub>4</sub> ) における電荷不均一性の起源の研究	大阪大学大学院理学研究科	山本 貴
新規物質 Ag <sub>2</sub> CoO <sub>2</sub> の磁性に関する研究	大阪大学大学院理学研究科	高見 剛

共役系高分子の磁気特性に関する研究	室蘭工業大学大学院工学研究科	馬渡 康輝
側鎖に高い光学活性基を有する 共役系ラセン高分子の溶媒及び温度依存症	室蘭工業大学大学院工学研究科	馬渡 康輝
タンパク質空間における金属イオンのレドックス挙動とタンパク質構造との相関関係の解明	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
磁氣的フラストレーションを持つ層状二次元ネットワーク錯体の磁化緩和ダイナミクス	東邦大学理学部	加知 千裕
金属イオンと光合成光捕集タンパク質との相互作用の検出	茨城大学理学部	大友 征宇
2段階スピン転移を示すスピנקロスオーバー錯体の光誘起準安定相の構造解析	神戸大学大学院理学研究科	高橋 一志
光合成蛋白質の耐熱化機構の解析	神戸大学自然科学系先端融合研究環	木村 行宏
(後期)		
新規機能性錯体分子の構造と光学的性質	静岡大学理学部	仁科 直子
Ag <sub>4</sub> CoO <sub>2</sub> の磁性とLaCoO <sub>3</sub> のスピン転移に関する研究	大阪大学大学院理学研究科	高見 剛
多層グラフェン壁を持つメソ多孔性炭素へのシリコン担持	金沢大学理工研究域	西 信之
非平面 共役系分子の結晶構造解析による分子間相互作用の見積りと電子移動経路の相関	静岡大学工学部	植田 一正
金属イオンと光合成光捕集タンパク質との相互作用の検出	茨城大学理学部	大友 征宇
酸化物磁性薄膜および多孔体の磁気特性および磁気共鳴に関する研究	名古屋工業大学セラミック基盤工学研究センター	安達 信泰
蛍光を有する磁気ナノビーズの開発及び計測における応用	静岡大学創造科学技術大学院	朴 龍洙
コイ血液由来の糖鎖(ペンタオース)のNMRスペクトル(ROESY)の測定	三重大学大学院生物資源学研究所	青木 恭彦
新機能性有機結晶の低温X線結晶構造解析	大阪市立大学大学院理学研究科	塩見 大輔
ガラス基板へのレーザードーピングに関する研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 晋吾
Pd-Si-RE(希土類)系新規準結晶関連合金の磁気特性	北海道大学大学院工学研究院	柏本 史郎
ナノ粒子化に伴う木質セルロースの高機能化	静岡県立大学環境科学研究所	坂口 真人
ポリエチレン系アイオノマーの熱分析	岐阜大学工学部	三輪 洋平
微粒子レーザープロセス	東北大学多元物質科学研究所	佐藤 俊一
高等植物グリコペプチドホルモンCLV3のコンフォメーション解析	自然科学研究機構基礎生物学研究所	松林 嘉克
光合成蛋白質の耐熱化機構の解析	神戸大学大学院農学研究科	木村 行宏
アルカリ金属ドーピングポリアセチレンラジカルポリマーのスピン状態および磁気状態の観測	広島大学大学院理学研究科	井上 克也
可逆的な構造変化を示す新規有機酸化還元系の設計と合成	信州大学理学部	太田 哲
キララアカセン誘導体金属錯体の微小単結晶のX線構造解析	東京理科大学理学部	秋津 貴城
TEMPOラジカルを側鎖に導入したポリグルタミンのらせん磁性に関する研究	東京工芸大学工学部	比江島俊浩
逆ペロブスカイト型化合物(TSF) <sub>3</sub> [(Mo <sub>6</sub> X <sub>14</sub> )X] (X=Cl, Br)の極低温構造解析	名城大学農学部	平松 孝章
一次元ロジウム-ジオキソレン錯体の結晶構造解析	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔
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変異体の電子状態解析	大阪大学大学院工学研究科	小野田 晃
哺乳類トランスポーター蛋白質と基質・阻害剤の分子間相互作用の解析	京都大学大学院医学研究科	野村 紀通
金属酸化物ナノ粒子集合体の磁気特性解析	大阪大学産業科学研究所	真嶋 哲朗
ランタン型二核金属錯体の磁気特性の研究	島根大学大学院総合理工学研究科	池上 崇久

### 装置開発室

(前期)		
マイクロ波イメージング	自然科学研究機構核融合科学研究所	長山 好夫
高磁界超伝導線材の臨界電流特性における真性歪印加効果測定プローブの開発	自然科学研究機構核融合科学研究所	菱沼 良光
時間分解電子運動量分光装置のための超音速分子線源および画像観測イオン検出器の開発	東北大学多元物質科学研究所	山崎 優一
多チャンネル光神経電子集積回路素子の電子回路開発 ——4ch, 20ch 素子用回路開発——	名古屋大学革新ナノバイオデバイス研究センター	宇理須恒雄
多チャンネル光神経電子集積回路素子のPMMA基板開発とマイクロ流路開発	名古屋大学革新ナノバイオデバイス研究センター	宇理須恒雄
高電圧高速パルススイッチの製作	名古屋大学大学院理学研究科	菱川 明栄
高温高圧超音速ジェットパルスノズルの開発	京都大学大学院理学研究科	馬場 正昭

(後期)

マイクロ波イメージング	自然科学研究機構核融合科学研究所	長山 好夫
高磁界超伝導線材の臨界電流特性における真性歪印加効果測定プローブの開発	自然科学研究機構核融合科学研究所	菱沼 良光
時間分解電子運動量分光装置のための超音速分子線源および画像観測イオン検出器の開発	東北大学多元物質科学研究所	山崎 優一
イオンファネルを利用した、効率的イオン輸送システムの開発 ～イオンファネル駆動のための RF 電源の製作～	広島大学大学院理学研究科	井口 佳哉
分子読み取りグラフェンデバイス	横浜国立大学大学院工学研究院	荻野 俊郎
光サンプリング時間分解のイメージング法の開発	京都工芸繊維大学	永原 哲彦
光神経電子集積回路素子の 20 チャンネル電子回路をふくむシークエンサー制御機構の開発	名古屋大学革新ナノバイオデバイス研究センター	宇理須恒雄
光神経電子集積回路素子の 20ch-500 点細胞播種用 PMMA 基板開発とマイクロ回路開発	名古屋大学革新ナノバイオデバイス研究センター	宇理須恒雄
多チャンネル光神経電子集積回路素子開発—DXL 位置合わせ精度向上—	名古屋大学革新ナノバイオデバイス研究センター	宇理須恒雄

### 計算機利用

2- 八口酸脱ハロゲン化酵素と耐熱性システイン合成酵素の反応機構解析	長浜バイオ大学バイオサイエンス学部	中村 卓
4 量体型サルコシン酸化酵素の基質と生成物のチャネルの動力学的解析	北里大学理学部	米田 茂隆
5d 金属原子を含む多核錯体の電子状態	岐阜大学工学部	海老原昌弘
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
DNA シークエンシングに関する量子化学計算	大阪大学大学院基礎工学研究科	土井謙太郎
Hras-GTP 複合体における GTP の加水分解のメカニズムを分子動力学法により解明しようとする研究	東京薬科大学情報教育研究センター	宮川 毅
K <sup>+</sup> チャネルにおけるイオンの透過パターンの濃度依存性とイオン選択性の発現機構の理論的解析	福井大学医学部	老木 成稔
MD/3D-RISM シミュレーションを用いたミセルの熱力学的安定性に関する研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮田 竜彦
QM/MM 法による量子化学計算から生体分子の動的構造を解明する	佐賀大学大学院工学系研究科	海野 雅司
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
SVM を用いたドメイン境界領域の予測手法の開発	東京農工大学工学府	黒田 裕
UVSOR におけるコヒーレント光源の開発	分子科学研究所	加藤 政博
電子系新規有機材料の物理・化学的性質に関する理論計算	東京大学大学院理学系研究科	松尾 豊
アミロイド形成中間体の構造解析	千葉工業大学工学部	山本 典史
イオンチャネルの基準振動解析	分子科学研究所	古谷 祐詞
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
エナント選択的な触媒反応の反応機構の研究	東北大学理学部	Gridnev Ilya
カーボンナノチューブと有機分子の相互作用の研究	大阪大学大学院理学研究科	小川 琢治
カーボンナノリングの構造と物性研究	名古屋大学物質科学国際研究センター	瀬川 泰知
かさ高い芳香族アジド基が有する高いクリック反応性に関する研究	東京医科歯科大学生体材料工学研究所	吉田 優
ガラス転移とジャミング転移の数値的研究	筑波大学大学院数理物質科学研究科	宮崎 州正
キネシン分子モーターの 1 分子顕微鏡解析による神経変性メカニズムの解明—遺伝性痙性対麻痺の 1 型を引き起こす分子モーターの変異—	千葉大学大学院医学薬学府	川口 憲治
キラルロジウム 2 核錯体触媒の立体選択性に関する理論研究とルテニウムカルボニル錯体による C(sp <sup>3</sup> )-H 活性化機構の解明	岐阜大学工学部	安藤 香織
キラル超分子集合体の理論的検討	東京大学大学院工学系研究科	伊藤 喜光
クラスター、錯体及び固体における磁性的理論	横浜国立大学工学研究院	Hannes Raebiger
ケイ素クラスターの構造と物性研究	群馬大学大学院工学研究科	津留崎陽大
ゲノム中の内在性ウイルス由来の分子の構造と相互作用のシミュレーションによる研究	大分大学医学部	谷川 雅人
コヒーレント分光を用いた分子クラスターにおける動的構造の解明	分子科学研究所	水瀬 賢太
コンピューターシミュレーションによる核酸の構造安定性の解析と RNA 高次構造予測法の開発	甲南大学先端生命工学研究所	杉本 直己
コンピュータシミュレーションによる、和漢薬有効成分化合物の機能解析	富山大学和漢医薬学総合研究所	梅寄 雅人
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
サルモネラ由来 AAA+ プロテアーゼによる基質認識機構の原子レベルでの解析	千葉大学大学院薬学研究院	佐藤 慶治
スターバースト 共役系分子の電子励起状態の構造とエネルギーの理論的解明	静岡大学理学部	三井 正明
ゼオライト細孔内における不安定分子の反応性制御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

セルロース結晶の溶媒和ダイナミクス挙動と結晶性セルロース結合タンパク質との相互作用	宮崎大学工学部	湯井 敏文
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
タンパク質 - DNA 複合体形成の自由エネルギープロファイル	(独)日本原子力研究開発機構	河野 秀俊
タンパク質の酵素反応と機能の分子シミュレーション	京都大学大学院理学研究科	林 重彦
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	筑波大学大学院数理工学系研究科	神谷 克政
タンパク質折りたたみの拡張アンサンブル分子動力学シミュレーション	計算科学研究センター	奥村 久士
ドープされたグラフェンの成長とその物性評価	東京大学大学院理学系研究科	今村 岳
ナイロン加水分解酵素の分子設計	兵庫県立大学大学院工学研究科	根来 誠司
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
ナノカーボンの光誘起転位・解離反応の動力学シミュレーション	東北大学大学院理学研究科	河野 裕彦
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工学系研究科	岡田 晋
ナノマテリアル及び生体分子の機能・物性・反応性に関する理論的研究	早稲田大学大学院先進理工学研究科	中井 浩巳
ナノ構造体の電子構造と電子ダイナミクスの理論計算	分子科学研究所	信定 克幸
パーキンソン病の原因タンパク質 シヌクレインの凝集に関する分子動力学的研究	東京大学大学院工学系研究科	田畑 仁
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
ベンゼン誘導体における 相互作用と多環芳香族炭化水素の振電相互作用の解明	電気通信大学大学院情報理工学研究科	山北 佳宏
ポウル型共役化合物の物性調査	分子科学研究所	櫻井 英博
ホタルルシフェラーゼの構造と発光波長の予想	兵庫県立大学大学院工学研究科	加藤 太郎
リガンドのタンパク質への結合過程のマルチスケールシミュレーション	東京大学大学院農学生命科学研究科	寺田 透
レーザ誘起ブレイクダウンプラズマ過程の理論解析	徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部	出口 祥啓
異なる場における、分子の磁場や光応答機構の解析、および新規理論の構築	東京工業大学生命理工学部	中田 浩弥
液体ヘリウム中の原子分光	富山大学理学部	森脇 喜紀
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
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
化学反応および分子特性に関する理論研究	神奈川大学理学部	松原 世明
化学反応の ab initio 計算による研究	愛媛大学大学院理工学研究科	長岡 伸一
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
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
化学反応経路の自動探索	東北大学大学院理学研究科	大野 公一
加水分解酵素と基質の相互作用に関する研究	明星大学理工学部	松本 一嗣
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
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系研究科	星 健夫
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
革新的量子計算科学の創造と大規模シミュレーション	量子化学研究協会	中辻 博
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
含ヘテロ原子有機化合物の反応性に関する理論研究	高知大学大学院総合人間自然科学研究科	金野 大助
含ホウ素 PBP ピンサー金属錯体の反応性の解明	中央大学理工学部	山下 誠
幾何学的フラストレートした強相関電子系における伝導特性の数値的研究	東京大学物性研究所	服部 一匡
機能性物質の機能発現メカニズム解明研究	分子科学研究所	古川 貢
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
軌道相互作用に基づく化学反応系の解析	星薬科大学化学研究室	坂田 健
擬 1 次元 1/4 充填有機分子性固体 (EDO-TTF) <sub>2</sub> PF <sub>6</sub> の光誘起相転移の第一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
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
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工学系研究科	前島 展也
凝縮系における緩和および反応ダイナミクスの理論研究	分子科学研究所	斉藤 真司
金属カチオン - 系ならびに重金属含有生体分子系の量子化学計算	北里大学一般教育部	江川 徹
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	金沢大学大学院理工研究域	小田 竜樹
金属錯体および生体関連分子の構造・反応・分子間相互作用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
金属錯体と DNA の相互作用	中央大学理工学部	千喜良 誠
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

金属錯体触媒の電子構造制御と機構解明	分子科学研究所	正岡 重行
金属蛋白質の反応制御機構に関する理論的研究	大阪大学蛋白質研究所	鷹野 優
固体表面と生体分子の相互作用に関する研究	横浜国立大学大学院工学研究院	荻野 俊郎
光化学系 II におけるキノン電子受容体の酸化還元電位制御機構	名古屋大学大学院理学研究科	野口 巧
光合成酸素発生中心 $\text{CaMn}_4\text{O}_5$ クラスターの構造、電子・スピン状態および反応性に関する理論的研究	大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター	山口 兆
光受容タンパク質反応初期過程における超高速構造ダイナミクスの解明	(独)理化学研究所	倉持 光
高エネルギー物質の初期反応過程に関する理論的研究	横浜国立大学大学院工学研究院	河野 雄次
高圧氷の物性研究	岡山大学理学部	田中 秀樹
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
高精度量子化学計算によるナノサイズ超分子の分子機能の解明	(独)理化学研究所	中嶋 隆人
高分子電解質膜の分子シミュレーション	(独)産業技術総合研究所	崔 隆基
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
剛体球系の非平衡輸送と大規模分子動力学シミュレーション	名古屋工業大学大学院創成シミュレーション工学	磯部 雅晴
志賀毒素等、疾病に関わるタンパク質の分子動力学シミュレーション	国立国際医療研究センター	尾又 一実
軸不斉ユニットをもつキロオプティカルスピンの開発	北里大学理学部	長谷川真士
実験的手法、分子動力学シミュレーションと量子化学計算とを用いた蛋白質の構造変化の解析	名古屋大学大学院理学研究科	榎 互介
重原子を含む化合物の基底・励起電子状態と分子物性に関する量子化学計算	首都大学東京大学院理工学研究科	波田 雅彦
色素増感太陽電池に関する理論的研究	(独)産業技術総合研究所	北尾 修
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
新型リチウムとナトリウムイオン電池材料の第一原理計算	東京大学大学院工学系研究科	山田 淳夫
人工原子・分子系における相対論効果と電子相関	早稲田大学先進理工学部	武田京三郎
水、水溶液、および生体高分子における動的相互作用の解明	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
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
制限酵素、EcoRV の DNA 結合と切断反応における金属イオンと水の溶媒和での役割	九州工業大学大学院情報工学研究院	入佐 正幸
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
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
生体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
生体分子に対する分子動力学の遂行と時系列解析	奈良女子大学大学院自然科学系	戸田 幹人
生体分子の機能発現反応に関する理論的研究	千葉大学大学院薬学研究院	星野 忠次
生体分子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
生体分子系の量子化学：励起状態と化学反応	北海道大学触媒化学研究センター	長谷川淳也
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
遷移金属触媒を用いた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
相対論的モデル内殻ポテンシャルと FMO 法の運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	お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科	森 寛敏
多環式芳香族炭化水素の構造および光物性評価	名古屋大学大学院理学研究科	川澄 克光
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
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
大規模複雑系の基底状態並びに励起状態に関する量子化学シミュレーション	名古屋大学大学院理学研究科	横川 大輔
大規模分子動力学シミュレーションと溶液理論による F1 モータータンパク質の機能発現における水和効果の研究	京都大学化学研究所	松林 伸幸
大規模量子化学計算プログラムの開発	分子科学研究所	石村 和也
第一原理および古典分子動力学計算によるアルミノホウケイ酸ガラスのモデリング	千葉大学大学院工学研究科	大窪 貴洋
第一原理及び古典分子動力学計算による Si 関連物質の構造形成プロセスと電子物性の解明	(独)産業技術総合研究所	森下 徹也
第一原理的手法によるナノ・バイオ関連物質の形成に関する研究	三重大学大学院工学研究科	秋山 亨
第一原理反応ダイナミクスの多角的展開	北海道大学大学院理学研究院	武次 徹也
第一原理量子論による遷移金属酸化物ベースの抵抗変化型メモリの動作機構の理論的解明	筑波大学計算科学研究センター	白石 賢二
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
蛋白質の動的構造と機能の解析	横浜市立大学大学院生命ナノシステム科学研究科	木寺 紹紀
超球面探索法を用いた結晶構造の予測	和歌山大学システム工学部	山門 英雄

超臨界水中の並進拡散および溶媒和殻の緩和に対する水の分子間ポテンシャルの異方性の影響の検討	徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部	吉田 健
低原子価ケイ素およびゲルマニウムを配位原子とする遷移金属錯体の合成と反応性の研究	東北大学大学院理学研究科	渡邊 孝仁
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
二次元高分子構造のシミュレーション	分子科学研究所	江 東林
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
半導体ナノ構造における不純物電子状態の第一原理的研究	慶應義塾大学理工学部	山内 淳
反応経路自動探索法を用いた触媒反応および酵素反応機構の量子化学的系統解析	北海道大学大学院理学研究院	前田 理
反応高活性遷移金属錯体の分子設計及び構造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
非平面有機半導体の分子設計	分子科学研究所	鈴木 敏泰
微細構造を認識する超分子複合系の構築と構造解析	新潟大学大学院自然科学研究科	岩本 啓
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
氷の融解過程に関するシミュレーション	名古屋大学大学院理学研究科	望月 建爾
表面・薄膜・クラスターの電子状態と反応過程	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	島 信幸
複合電子系の構造, 電子状態, 反応過程, 溶媒和構造に関する理論的研究	京都大学福井謙一記念研究センター	榊 茂好
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
分子および金属クラスターの構造と電子状態の理論研究	千葉工業大学教育センター	松澤 秀則
分子シミュレーションによる分子集合体の研究	名古屋文理大学情報メディア学部	本多 一彦
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
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
分子モーターの動作機構解析シミュレーション	名古屋大学大学院工学研究科	笹井 理生
分子間相互作用理論とその分子クラスター研究への応用	分子科学研究所	岩田 末廣
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
分子磁性体の分子軌道法による理論解析及び新規手法の開発	大阪大学大学院理学研究科	奥村 光隆
分子性液体に関する粗視化シミュレーション手法の開発	岐阜大学工学部	寺尾 貴道
分子性半導体における分子振動と電子および水素自由度との結合の量子化学計算による解析	分子科学研究所	山本 薫
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
分子動力学シミュレーションを用いた膜タンパク質の自由エネルギー解析	金沢大学大学院理工研究域	齋藤 大明
分子動力学計算およびハイブリッドQM/MM 計算による生物機能メカニズムの計算科学的解析	兵庫県立大学大学院生命理学研究科	館野 賢
分子内および分子間電子移動の分子軌道による研究	神奈川大学理学部	田仲 二郎
芳香族分子およびクラスターにおける光励起反応機構の振動分光による構造論的研究	東京工業大学資源化学研究所	宮崎 充彦
密度汎関数法による金属クラスター上での酸化反応および水素化反応の機構解明	豊田工業大学クラスター研究室	市橋 正彦
密度汎関数法に基づくナトリウムイオン電池正極材料におけるホスト・ゲスト反応の解析	名古屋工業大学大学院工学研究科	中山 将伸
密度汎関数法計算による金属イオン - 有機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
薬剤の純溶媒および混合溶媒中における溶解度推算に関する新規アプローチ	近畿大学生物理工学部	藤澤 雅夫
薬物と飲食物に含まれる生理活性物質との相互作用解析	福岡大学薬学部	池田 浩人
有機ケイ素化合物の構造と電子状態	群馬大学大学院工学研究科	久新 荘一郎
有機デバイスの特性向上に向けた非晶質有機半導体材料の幾何・電子構造計算	山形大学大学院理工学研究科	横山 大輔
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置換基効果	鳥取大学大学院工学研究科	早瀬 修一
有機金属複合ナノクラスターの電子状態計算による物性機能評価	(独)科学技術振興機構	岩佐 豪
有機分子添加剤を活用した連続スーパーシリアルドール反応に関する理論的研究	愛知教育大学教育学部	赤倉松次郎
溶媒抽出によるランタノイド/アクチノイド相互分離の為の溶液中錯体構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	奥村 森
理論計算からみた孤立分子・クラスターの高エネルギー光化学	広島大学放射光科学研究センター	田林 清彦
両親媒性ピンサー型パラジウム錯体から成るベシクルの分子動力学計算	分子科学研究所	浜坂 剛
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
量子化学と統計力学に基づく複雑化学系の理論的研究	京都大学大学院工学研究科	佐藤 啓文

量子化学計算に基づく錯体触媒の構造および反応性解明とその改良	東京大学大学院総合文化研究科	増井	洋一
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
量子多成分系分子理論の開発およびその応用	横浜市立大学大学院生命ナノシステム科学研究科	立川	仁典
量子力学的厳密計算による原子少数多体系の研究	(独)理化学研究所	数納	広哉
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
有機金属錯体の結合性の解明	分子科学研究所	村橋	哲郎
第一原理分子動力学法の開発と種々の分光スペクトルのシミュレーション	京都大学大学院理学研究科	谷村	吉隆
量子力学/分子力学混合法(QM/MM法)及び量子化学計算(ab initio分子軌道法及び密度汎関数法)を用いた生体関連分子の構造,物性及び反応機構の解明	筑波大学 システム情報系	栢沼	愛
磁性分子の電子状態の理論的研究	明治大学理工学部	村岡	梓
生体分子のマルチコピー・マルチスケールシミュレーション	(独)理化学研究所	森次	圭
(計算物質科学イニシアティブ利用枠)			
バイオマス利用のための酵素反応解析	九州大学理学部	吉田	紀生
ポリモルフから生起する分子集団機能	京都大学化学研究所	松林	伸幸
拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明	名古屋大学大学院理学研究科	岡本	祐幸
凝縮分子科学系の揺らぎとダイナミクス	分子科学研究所	斉藤	真司
密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究	東京大学大学院工学系研究科	押山	淳
全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開	名古屋大学大学院工学研究科	岡崎	進
太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算	東京大学大学院工学系研究科	山下	晃一
分子における電子の動的過程と多体量子動力学	東京大学大学院総合文化研究科	高塚	和夫
量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究	東京大学物性研究所	川島	直輝

### 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 ~ '05		'06		'07		'08		'09		'10		'11		'12		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	102	820	1	8	2	29	2	22	1	28	0	0	1	13	1	11	人数： 登録人数
協力研究	3,560	4,819	84	208	91	219	90	200	119	412	122	316	108	292	123	325	"
招へい 協力研究	195	197	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
所長 招へい	3,701	3,701	162	162	132	132	159	159	148	148	148	148	78	78	89	89	人数： 旅費支給者
研究会	298	4,821	13	310	9	198	4	105	5	110	6	137	4	105	10	144	"
若手研究会等	-	-	-	-	-	-	1	12	1	10	1	14	1	11	1	19	"
岡崎コンファ レンス	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	29	"
施設利用 I	1,749	3,967	47	86	59	120	72	177	60	179	66	166	98	266	107	279	件数： 許可件数 人数： 許可人数
電子計算機 施設利用 (施設利用II)	4,302	14,000	142	538	145	595	147	656	171	676	170	666	190	668	183	680	"
合計	13,907	32,325	449	1,312	438	1,293	475	1,331	505	1,563	513	1,447	480	1,433	515	1,576	
経費	545,194		-		-		-		-		-		-		-		千円

\* 施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用

( '12 年度の数値は、2013.1.31 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 ~ '05		'06		'07		'08		'09		'10		'11		'12		備考
	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	
課題研究	38	423	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	人数： 登録人数
協力研究	312	1,109	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
招へい 協力研究	72	72	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
施設長 招へい	-	-	-	-	14	14	1	1	0	0	0	0	4	4	6	6	人数： 旅費支給者
研究会	34	603	3	37	2	55	2	18	2	44	1	1	2	68	4	63	"
施設利用	2,417	11,937	113	494	145	678	156	708	147	660	140	659	139	682	135	696	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	2,873	14,144	116	531	161	747	159	727	149	704	141	660	145	754	145	765	
経費	230,477		-		-		-		-		-		-		-		千円

( '12 年度の数値は、2013.1.31 現在 )