

3 . 共同研究と大学院教育

大学共同利用機関としての分子科学研究所は、所外の分子科学及び関連分野の研究者との共同研究を積極的に推進しており、全国の研究者からの共同研究の提案を運営会議で審議し、採択された共同研究に対しては旅費及び研究費の一部を支給している。また、海外の研究者との共同研究に対しては、研究者の派遣及び相手国研究者招へいのために国際共同研究事業を行っている。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、平成 18 年度から 22 年度において、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た。平成 23 年度からは、このような取組をアジア地区に限定することなく、より国際的に発展・拡充するため、分子科学国際共同研究拠点形成事業を開始した。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 諸国の拠点大学及び公募で選考された若手研究者と大学院学生を招へいし、人材の育成に努めてきた。また、平成 23 年度からは、post-JENESYS プログラムとして EXODASS（EXchange program for the Development of Asian Scientific Society）プログラムを立ち上げ、アジア地区の若手研究者に、分子科学研究所に 2 週間～3 ヶ月間滞在し、研究を行う機会を提供することにより、アジア地区における基礎研究の発展と研究ネットワーク構築に寄与している。

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。総合研究大学院大学としての分子科学研究所の 2 専攻では、分子科学における最先端の基礎研究を行うとともに、学生の研究課題に応じて、複数指導体制を採用し、研究活動に密着した学生セミナー、国際シンポジウム、共同研究等を通して若手研究者育成のための大学院教育を行っている。さらに、他大学の大学院生や学部学生に対しても、それぞれ受託大学院生（特別共同利用研究員制度による）、体験入学者として受け入れ、先端的な研究施設を用いて積極的な教育研究活動を行っている。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 8 月、1 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 分子及びその集合体，生体分子やナノ物質などの多体化学系の構造，反応，物性，機能について量子力学，統計力学などに基づく理論・計算分子科学研究により解明する

理論分子科学第一研究部門

研究目的 多体分子系の反応ダイナミクス，物性，機能の解明のための方法論の開発とそれに基づく理論・計算科学的研究

- 研究課題
- 1 ,凝縮系における不均一な構造遍歴ダイナミクスおよび機能発現の理論的研究
 - 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 ,凝縮重系の新規電子状態の解明とその方法論開発

計算分子科学研究部門

研究目的 機能性分子や不均一触媒系，さらに生体分子などの電子状態や構造の解明のための方法論の開発とそれに基づく理論・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 ,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 ,複雑分子系の電子状態と化学反応に関する理論的研究
 - 2 ,分子及び分子集合体における量子移動過程に関する理論的研究
 - 3 ,分子動力学（MD）計算によるナノ物質の物性解明および新しいMD手法の開発

- 研究課題
- 1 ,凝集系における分子の励起状態を記述する波動関数理論の開発
 - 2 ,酵素と触媒の反応機構に関する理論的研究
 - 3 ,生体分子における長距離電子移動経路解析
 - 4 ,水素ダイナミクスにおける量子効果の理論とシミュレーション
 - 5 ,MD計算における自由エネルギー計算手法の改良とナノ物質への応用

光分子科学研究領域

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

光分子科学第一研究部門

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

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、「フォトリック結晶」「フォトリックナノ構造」の物理的基礎と応用
- 2、X線顕微鏡の開発とその生物観察への応用
- 3、X線自由電子レーザーの測定システムの開発とその分子科学への応用
- 4、高強度テラヘルツ光の発生とその分子科学研究への応用

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・テラヘルツ分光及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の研究
 - 2 ,中赤外から真空紫外まで同時に発生する超広帯域フェムト秒パルス光源の開発
 - 3 ,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 分子及びその集合体を示す新たな現象や有用な機能の発見を目指し、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。また、分子・分子集合体の物性・機能の起源を解明するため、主として分光法に基づいた新たな観測技術開発に努める

電子構造研究部門

- 研究目的 表面の物理的・化学的新機能とその機構解明
- 研究課題 1 ,物質科学・表面科学のための新しい分光学的計測手法の開発
2 ,表面を媒体とした新しい金属錯体触媒構造の創出と選択触媒反応制御

電子物性研究部門

- 研究目的 分子性固体の物性と機能
- 研究課題 1 ,分子性固体の磁気共鳴研究
2 ,分子を使った新しいエレクトロニクスの開発

分子機能研究部門

- 研究目的 物質変換・エネルギー変換のための新規ナノ構造体・高分子・超分子およびデバイス創製，生体分子の構造と機能
- 研究課題 1 ,有機薄膜太陽電池
2 ,機能性二次元・三次元高分子の創製
3 ,生体分子の構造・物性解析のための固体核磁気共鳴法の開発

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じた新しい先端的研究分野の開拓
- 研究課題 1 ,核磁気共鳴を用いた絹の精密構造解析と再生医療材料設計
2 ,新奇有機機能性材料の開発・基礎物性研究ならびにデバイスへの応用
3 ,有機半導体導電キャリアの電子スピン共鳴

生命・錯体分子科学研究領域

研究目的 生体系が示す多種多彩な機能の発現が、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。また、生体分子を利用した新たな分子デバイスの開発も行う。中心金属と配位子の組み合わせで金属錯体は多彩な機能を発現する。新しい錯体合成法を開発することで新たな結合構造を持つ金属錯体を創製し、その機能を開拓する。また、金属錯体の特性を生かしてエネルギー・環境問題軽減のための高効率有機化合物変換反応、水中での有機化合物の分子変換、無機小分子の変換と機構解明を行う

生体分子機能研究部門

研究目的 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 ,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
 - 3 ,金属酵素による酸素分子活性化機構
 - 4 ,窒素循環サイクルに関わる金属酵素の分子機構
 - 5 ,複合糖質およびタンパク質の構造・ダイナミクス・相互作用に関する研究

生体分子情報研究部門

研究目的 溶液散乱と結晶構造解析を相補的に駆使した動的構造解析、また赤外、可視、蛍光等の分光法と表面増強効果あるいは顕微計測技術を組み合わせた新規計測法の開発により、生物時計システムや細胞内情報伝達を担う膜タンパク質の分子機構を解明する

- 研究課題**
- 1 ,タンパク質時計の計時機構解明
 - 2 ,溶液散乱と結晶構造解析を相補的に駆使した動的構造解析
 - 3 ,赤外差分計測による膜タンパク質の構造機能相関解明
 - 4 ,イオンチャネル及びG蛋白質共役型受容体の機能的発現と分子機構解析

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 ,水中での疎水の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 新しい結合構造を持つ金属錯体の設計と合成，金属錯体を反応場とする有機分子や無機分子の高効率変換
- 研究課題 1 ,新しい結合構造を持つ無機，及び有機金属錯体の合成と構造解明
2 ,有機金属錯体の素反応機構解明
3 ,金属錯体を用いた小分子の高効率変換反応の開発
4 ,エネルギーの高効率利用を指向した金属触媒反応の開発

生命・錯体分子科学研究部門（客員）

- 研究目的 1 ,金属と有機配位子により高機能錯体触媒やナノ多孔性金属錯体を合成し，それらを合成場や集積場として複素環の直接化学修飾や高分子材料の精密構造制御合成を行う
2 ,レチナルを発色団とした光受容分子の機能発現機構の解明とそれを基盤とした光操作ツールの開発
- 研究課題 1 ,金属錯体を用いた新規 C-H 結合活性化反応の探索並びに金属錯体ナノ空間を用いた精密高分子合成
2 ,レチナルタンパク質分子の単離・精製・分光解析と，同タンパク質分子による細胞・個体の光操作

協奏分子システム研究センター

- 研究目的 分子を軸足に「個」と「集団」を結ぶロジックを確立し，その原理をもとに斬新な分子システムを創成する

階層分子システム解析研究部門

- 研究目的 個々の分子の動態が分子間相互作用や複雑な制御ネットワークを介して多重の階層を貫き，分子システムとしての卓越した機能へ繋がっていく仕組みの解明
- 研究課題 1 ,生物時計タンパク質が 24 時間周期のリズムを奏でる仕組みの解明
2 ,分子時計システム研究のための研究基盤構築
3 ,凝縮相化学反応過程の量子動力学理論
4 ,分子システムの環境適応性の物理化学理論
5 ,量子トンネル現象の原理的理解に関する研究
6 ,多数の分子の究極測定理論と情報との関係に関する研究
7 ,酸水素化物を基本とした新規機能性材料の探索
8 ,電極 / 電解質界面の制御によるリチウム二次電池の高性能化
9 ,生体分子系における反応および階層的構造変化の解明
10 ,赤外分光法を基軸とした協奏分子システムの動的構造変化の解析

機能分子システム創成研究部門

- 研究目的 機能性新分子の合成と、その複合化による創発的分子ナノデバイスの創成
- 研究課題
- 1 ,機能性分子の多重集積化による新規機能性分子デバイス
 - 2 , 共役系有機化合物と金属クラスターとの複合化による新型有機金属化合物
 - 3 ,ナノサイズのお椀と粒:「バッキーボール」と「ナノクラスター触媒」
 - 4 ,ナノスケール曲面を有するグラフェン半導体分子
 - 5 ,金属錯体を触媒とする酸素発生・光水素発生・二酸化炭素還元とその反応場形成

生体分子システム研究部門

- 研究目的 生物が示す多彩な生命現象の分子レベルでの解明
- 研究課題
- 1 ,新規な機能を有する金属タンパク質の構造と機能
 - 2 ,超高磁場 NMR を機軸とする生命分子のダイナミクスの探究
 - 3 ,タンパク質分子が相互作用する際の認識, 情報伝達, 機能制御及びそのための実験・理論的手法の開発
 - 4 ,金属酵素の機能発現の分子メカニズムの解明

3-2 研究施設

極端紫外光研究施設

目的 極端紫外光研究施設は、全国共同利用施設として UVSOR-III 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。

分子制御レーザー開発研究センター

目的 分子制御レーザー開発研究センターは、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；高分解能分光法とナノ領域顕微光イメージング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、新規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、及び汎用分光計測装置を集中管理し、さらに冷媒の供給管理も担当することにより、研究所内外の共同利用に資することを目的として設立された。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、大学連携研究設備ネットワークの実務を担当している。

装置開発室

目的 装置開発室は、多様化する材料の精密加工技術及び非機械加工を含むマイクロ・ナノ加工技術の高度化、並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 計算科学研究センターは、全国共同利用施設として、超高速分子シミュレータ並びに高性能分子シミュレータを国内の大学等の研究者に提供し、個々の研究室の計算機等では不可能な大規模計算等に関する共同利用研究を支援する。さらに、分子科学分野の計算に必要なライブラリの整備を進める。また、ワークショップなどを通して研究交流や人材育成の場を提供する。これらの活動に加え、「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム分野2（新物質・エネルギー創成）」のプロジェクト研究に対し、研究の場・計算機資源を提供する。

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8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。

- (A) 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。
- (B) 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)
- (C) 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)「ミニ国際シンポジウム」欧米など海外の研究者を含めたもの。
 - (エ)「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。
- (D) 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。
- (E) 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。
- (F) 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。
- (G) 機器センター施設利用：機器センターに設置された機器の個別利用。
- (H) 装置開発室施設利用：装置開発室に設置された機器の個別利用。

3-3-2 2013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
波長選択型有機太陽電池の開発研究	中部大学工学部	田中 基彦

(2) 協力研究

課 題 名(通年)		代 表 者
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
凝縮相中の炭素骨格および芳香環の電子励起状態の研究	関西学院大学理工学部	尾崎 幸洋
概日リズムの分子機構の説明を目指した非線形結合系の数理	北海道大学大学院情報科学研究科	井上 純一
弱測定を用いた波動関数のダイナミクスと量子相関の直接観測	高知工科大学システム工学群	小林 弘和
金属ナノ構造体の増強光電場によるジアセチレン LB 膜の二光子重合反応の検討とナノスケール光導波路の試作	青山学院大学理工学部	坂本 章
金ナノ粒子・シリコンナノポア複合構造によるナノ局在・増強光電場の発生と蛍光分子励起特性の評価	慶應義塾大学理工学部	斎木 敏治
重水素置換ベンゼンの高分解能レーザー分光	京都大学大学院理学研究科	馬場 正昭
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	慶應義塾大学理工学部	古川 良明
ピコ秒パルスレーザーによるレーザー誘起ブレイクダウンを用いた点火に関する研究	大阪大学大学院工学研究科	赤松 史光

高分解能電子分光による内殻励起状態の崩壊過程の研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
オージェ終状態を選別した内殻励起 cis-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
赤外分光法を用いた新規熱電変換材料 Fe ₂ VAl 化合物の電子構造に関する研究	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
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

課 題 名 (前 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
腸管出血性大腸菌 (O-157) 感染症に対する薬剤の開発にかかわる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医療社会学研究室	尾又 一実
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
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
3 原子分子を対象にした準安定多価分子イオンの生成機構解明	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 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
赤外分光法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
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
ポルフィリン単分子磁石による光誘起磁気スイッチングデバイス開発	大阪大学大学院理学研究科	田中 大輔
複合パルスを用いたスピン・エコー法の改良	近畿大学大学院総合理工学研究科	坂東 将光
偏光 NEXAFS を用いた窒素ドープ酸化チタンの構造に関する研究	慶應義塾大学大学院理工学研究科	紋谷 祐爾
砂田格子を用いたメタマテリアル設計	京都大学大学院工学研究科	中田 陽介
光捕集アンテナにおける励起エネルギー移動ダイナミクスの分子論的機構に関する理論的研究	琉球大学理学部	東 雅大
開放系電子状態理論による光機能界面の基礎研究	放送大学教養学部	安池 智一
ZnO ナノロッド中のプロトンの固体 NMR による評価 2	大阪工業大学工学部	佐々 誠彦
分子性伝導体の単結晶広幅 NMR による電子状態の微視的研究	学習院大学理学部	開 康一
A サイト秩序型ペロブスカイト CaCu ₃ Ti _{1-x} Ru _x O ₁₂ の電子構造	弘前大学大学院理工学研究科	任 皓駿
ヒト IgG 抗体の酸性 pH により誘導された分子種の構造解析に関する研究	鹿児島大学大学院理工学研究科	伊東 祐二
赤外フェムト秒パルスレーザーの開発	福井大学大学院工学研究科	川戸 栄

課 題 名 (後 期)

代 表 者

テトラセンイミドジスルフィドと各種ドーパントを用いた有機薄膜太陽電池の膜構造制御	東京大学大学院理学系研究科	松尾 豊
マンノーストリミングを介した糖タンパク質品質管理機構の研究	京都大学再生医科学研究所	細川 暢子
電気化学軟 X 線吸収分光法によるホウ酸ニッケル酸素生成触媒の研究	慶應義塾大学理工学部	吉田 真明
ポルフィリン単分子磁石の炭素材料上分子配列制御と光誘起磁気スイッチングデバイスの開発	大阪大学大学院理学研究科	田中 大輔
高原子価金属・フェノラート錯体の性質と反応性	茨城大学理学部	島崎 優一
9.9 - ジアリール - 2.7 - フルオレンジイル骨格を有する高屈折性芳香族ポリケトンの開発	山形大学大学院理工学研究科	前山 勝也
非線型量子ウォークの極限確率分布の解明	茨城大学工学部	和田 達明
腸管出血性大腸菌 (O-157) 感染症に対する薬剤の開発にかかわる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医療社会学研究室	尾又 一実
グラフェン薄膜のエッジ状態の角度分解光電子分光	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
光捕集アンテナにおける励起エネルギー移動ダイナミクスの分子論的機構に関する理論的研究	琉球大学理学部	東 雅大
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
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
常温接合を用いた高機能固体レーザーの開発	中央大学理工学部	庄司 一郎
クマル酸誘導体とその水和系の非断熱緩和ダイナミクス	広島大学大学院理学研究科	江幡 孝之
Electronic structure of hexagonal Ge multilayers	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	FRIEDLEIN, Rainer
極限電子ビーム源としてのマルチアルカリカソード生成条件の最適化研究	広島大学大学院先端物質科学研究科	栗木 雅夫
二酸化炭素の酸素 1s 内殻励起時の低エネルギー光電子スペクトル測定	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	下條 竜夫
アンジュレタ高次光が持つ新奇な性質の解明	広島大学放射光科学研究センター	佐々木茂美
赤外フェムト秒パルスレーザーの開発	福井大学大学院工学研究科	川戸 栄

(3) 研究会

【ミニ国際シンポジウム】

レーザーフィラメンテーション技術の基礎と応用

Fundamentals and Applications of Laser Filaments

2013年4月4日(木)～6日(土) 岡崎コンファレンスセンター

April 4 (Thursday)

- 9:30- 9:45 A. Terasaki (Kyushu University, Japan)
Opening address
- 9:45-10:30 L. Wöste (Freie Universität Berlin, Germany)
Fundamentals and applications of plasma filaments: An overview of achievements from the Teramobile project
- 10:30-11:00 Coffee break
- 11:00-11:45 T. Fujii (Central Research Institute of Electric Power Industry, Japan)
Interaction of femtosecond-laser-induced filament plasma with external electric field in atmosphere and its application
- 11:45-12:15 T. Siebert (Max-Born-Institut Berlin, Germany)
Methodology for applications in supercontinuum spectroscopy: Pulse compression, shaping, and analysis
- 12:15-12:45 K. Yoshihara (Emeritus Professor of Institute for Molecular Science, Japan)
UV-light assisted water droplet/aerosol formation in air
- 12:45-14:15 Lunch
- 14:15-15:00 T. Leisner (Karlsruher Institut für Technologie, Germany)
Laser filament–cloud interactions
- 15:00-15:30 T. Fuji (Institute for Molecular Science, Japan)
Coherent control of mid-infrared pulse generation by using four-wave mixing through filamentation
- 15:30-16:00 A. Baltuska (Technische Universität Wien, Austria)
Femtosecond mid-infrared filamentation and remotely-induced gas lasing
- 16:00-16:30 Coffee break
- 16:30-17:15 T. Suzuki (Kyoto University, Japan)
Ultrafast photoelectron spectroscopy in gas and liquid phases
- 17:15-17:45 L. Shah (University of Central Florida, U.S.A.)
Prospects of femtosecond fiber lasers for filamentation applications
- 17:45-18:15 S. Utsunomiya (Kyushu University, Japan)
Radioactive contamination derived from the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant accident
- 18:15-20:00 Welcome party and Poster session

April 5 (Friday)

- 9:00- 9:45 S. L. Chin (Laval University, Canada)
Molecular lasing inside a filament
- 9:45-10:30 T. Kobayashi (University of Electro-Communications, Japan)
Proposal of a novel pulse cleaning method for the generation of stable filamentation
- 10:30-11:00 Coffee break
- 11:00-11:45 S. Tzortzakis (IESL-FORTH Heraklion, Greece)
Taming filaments and strong THz fields
- 11:45-12:15 A. Nakajima (Keio University, Japan)
Ultrafast laser spectroscopy for surface photoemission via two-photon probing
- 12:15-12:45 L. Gallmann (ETH Zürich, Switzerland)
Engineered QPM based OPCPA for few-cycle pulse compression in the mid-infrared
- 12:45-13:30 Lunch
- 13:30-17:45 Excursion
- 17:45-19:45 Conference dinner

April 6 (Saturday)

- 9:00- 9:45 U. Keller (ETH Zürich, Switzerland)
High average power pulse compression into the few cycle regime—different options and trade-offs
- 9:45-10:30 S. Minemoto (University of Tokyo, Japan)
Imaging atomic and molecular orbitals with high-order harmonic spectroscopy
- 10:30-11:00 Coffee break
- 11:00-11:45 M. Richardson (University of Central Florida, U.S.A.)
Recent studies of air filamentation
- 11:45-12:15 N. Nakashima (Toyota Physical and Chemical Research Institute)
Change of M(III) to M(II): M = Eu, Sm, Yb, Fe in solution by femtosecond laser excitation accompanied by generation of white-light laser

12:15-12:45	G. Steinmeyer (Max-Born-Institut Berlin, Germany) Rogue waves in multi-filaments: A rough optical sea
12:45-14:15	Lunch
14:15-15:00	E. Rühl (Freie Universität Berlin, Germany) Interactions of short pulse laser radiation with gases and nanoscopic matter
15:00-15:30	A. Hishikawa (Nagoya University, Japan) Ultrafast dissociative ionization in few-cycle intense laser fields
15:30-15:50	A. Terasaki (Kyushu University, Japan) Concluding remarks

【ミニ国際シンポジウム】

分子ダイナミクスの階層性——超高速分光から一分子測定による解析まで——
Hierarchical Molecular Dynamics: From Ultrafast Spectroscopy to Single Molecule Measurements
2013年5月25日(土) ~ 26日(日) 岡崎コンファレンスセンター

May 25

9:15-10:00	Registration
<i>Session 1</i>	<i>Chair: Shinji Saito (IMS)</i>
10:00-10:10	Iwao Ohmine (IMS) Opening Address
10:10-10:45	Shaul Mukamel (Univ. California, Irvine) Coherent Multidimensional Stimulated X-Ray Raman Spectroscopy of Molecules
10:45-11:20	Satoshi Takeuchi (RIKEN) Femtosecond Raman Tracking of Initial Structural Evolution in Reacting Molecules
11:20-11:55	R. J. Dwayne Miller (Max Plank Institute Hamburg) Do We Live in a Quantum World?—A New Twist
<i>Session 2</i>	<i>Chair: Yasuhisa Mizutani (Osaka Univ.)</i>
13:30-14:05	Yasuhiro Ohshima (IMS) Coherent Excitation of Molecular Motions by Intense Ultrashort Pulses
14:05-14:40	Peter Hamm (Univ. Zurich) Two-Dimensional Raman-THz Spectroscopy of Water
<i>Session 3</i>	<i>Chair: Akihito Ishizaki (IMS)</i>
15:00-15:35	Takayuki Uchihashi (Kanazawa Univ.) Single-Molecule Imaging of Proteins at Work with High-Speed Atomic Force Microscopy
15:35-16:10	Philipp Kukura (Univ. Oxford) Interferometric Scattering Microscopy: A New Look into the Nano-World
16:10-16:45	Shuji Akiyama (IMS) Circadian Pacemaker of Cyanobacteria by Intra-Molecular Feedback Regulation of KaiC ATPase
16:45-18:00	Poster Presentation
18:30	Banquet (at Okazaki New Grand Hotel)

May 26

<i>Session 4</i>	<i>Chair: Yuji Furutani (IMS)</i>
9:00- 9:35	Hideki Kandori (Nagoya Institute of Technology) Microbial Rhodopsins from the Ocean
9:35-10:10	Joachim Heberle (Freie Universität Berlin) Transient Protonation Changes in Channelrhodopsin-2 and Their Relevance to Channel Gating
<i>Session 5</i>	<i>Chair: Kumihiko Ishii (RIKEN)</i>
10:30-11:05	Shoji Takada (Kyoto Univ.) Large-Scale Functional Dynamics of p53 Studied by Multi-Scale Molecular Simulations
11:05-11:40	Gilad Haran (Weizmann Institute of Science) Single-Molecule FRET Studies of Multi-State Protein Folding
<i>Session 6</i>	<i>Chair: Tahei Tahara (RIKEN)</i>
13:30-14:05	Satoshi Takahashi (Tohoku Univ.) Microsecond-Resolved Tracking of the Unfolded State of BdpA by a Line Confocal Detection of Single Molecule Fluorescence
14:05-14:40	Akinori Kidera (Yokohama City Univ.) Hierarchical Dynamics of Protein Molecules Revealed by Molecular Dynamics Simulations
14:40	Closing Remark

【アジア連携分子研研究会】

日中合同若手シンポジウム——革新的配位材料

Japan-China Joint Coordination Chemistry Symposium for Young Scientists on Advanced Coordination Materials

2013年6月13日(木)~15日(土) 分子科学研究所 実験棟 301 - 303号室

June 13 (Thursday) Registration and Welcome banquet (Okazaki Grand Hotel)

June 14 (Friday)

8:50- 9:00 Opening remarks (Chairperson: Tetsuro Murahashi)
Jing-Lin Zuo & Takafumi Ueno

Session I Chairperson: Tetsuro Murahashi

9:00- 9:30 Sigeyuki Masaoka (Institute for Molecular Science)
Water Oxidation by Mono- and Multinuclear Metal Complexes

9:30-10:00 Yujie Xiong (University of Science and Technology of China)
Surface and Interface Modulation for Tuning Catalytic Performance of Inorganic Nanocrystals

10:00-10:30 Photo and Coffee break

Session II Chairperson: Wen-Ping Hu

10:30-11:00 Masayoshi Higuchi (National Institute for Materials Science)
Electro- and Photo-Chemical Devices with Organic-Metallic Hybrid Polymers

11:00-11:30 Masayuki Takeuchi (National Institute for Materials Science)
Functional Supramolecular Materials Based on Designed π -Conjugated Molecules

11:30-12:00 Jun-Hua Luo (Fujian Institute of Research on the Structure of Matter)
Polar Molecular Optoelectronic Crystalline Materials

12:00-13:30 Lunch

Session III Chairperson: Teppei Yamada

13:30-14:00 Yutaka Matsuo (The University of Tokyo)
Precise Synthesis of Co_8S_{15} Cluster inside the Bowl-Shaped Templating Fullerene Ligand

14:00-14:30 Wen-Ping Hu (Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences)
Organic Field-Effect Transistors

14:30-15:00 Ryota Sakamoto (The University of Tokyo)
Coordination Programming of Photo- and Electro-Functional Molecular Assemblies

15:00-15:30 Soichiro Yoshimoto (Kumamoto University)
Formation and Nanoscale Characterization of 2D Molecular Assembly at Solid-Liquid Interface

15:30-15:50 Coffee break

Session IV Chairperson: Guang-Shan Zhu

15:50-16:20 Tetsuro Murahashi (Institute for Molecular Science)
Dynamic Structural Changes of Multinuclear Sandwich Complexes

16:20-16:50 Jing-Lin Zuo (Nanjing University)
Giant Metallo-Supramolecular Cages Encapsulating Single-Molecule Magnets

16:50-17:00 Coffee break

Session V Chairperson: Jing-Lin Zuo

17:00-17:30 Michito Yoshizawa (Tokyo Institute of Technology)
Micelle-Like Molecular Capsules as Photoactive Hosts

17:30-18:00 Zhi-Yong Tang (National Center for Nanoscience and Technology)
Inorganic Nanoparticle-Metal Organic Framework Core-Shell Nanostructures: A Novel Multifunctional Platform

19:00 Dinner

June 15 (Saturday)

Session VI Chairperson: Michito Yoshizawa

9:00- 9:30 Teppei Yamada (Kyushu University)
Proton Conductivity of Acidic Metal-Organic Frameworks

9:30-10:00 Jie-Peng Zhang (Sun Yat-Sen University)
Porous Metal Azolate Frameworks

10:00-10:30 Takashi Uemura (Kyoto University)
Polymer Chemistry in Coordination Nanospaces

10:30-11:00 Coffee break

Session VII Chairperson: Xun Wang

11:00-11:30 Yan-Zhen Zheng (Xi'an Jiaotong University)
Coordination Chemistry as a Key Engine for Magnetic Cooling

11:30-12:00 Yuichi Negishi (Tokyo University of Science)
Precise Synthesis and Functionalization of Magic Gold Clusters

12:00-13:30 Lunch

<i>Session VIII</i>	<i>Chairperson: Hikaru Takaya</i>
13:30-14:00	Guang-Shan Zhu (Jilin University) Constructing Porous Materials for Gas Storage and Separation
14:00-14:30	Takane Imaoka (Tokyo Institute of Technology) Precise Synthesis of Monodisperse Subnanoparticles
14:30-15:00	Xun Wang (Tsinghua University) Inorganic Nanostructure with Sizes down to 1nm: A Macromolecule Analogue
15:00-15:20	Coffee break
<i>Session IX</i>	<i>Chairperson: Jun-Long Zhang</i>
15:20-15:50	Koji Harano (The University of Tokyo) Surface Programming of Sub-100 nm-Sized Fullerene Bilayer Vesicles
15:50-16:20	Hikaru Takaya (Kyoto University) Metal Array Fabrication Based on Metalated Amino Acids and Peptides: Emerging Function on Multi-Metal Supramolecular Assembly
16:20-16:50	Jun-Long Zhang (Peking University) Design of Luminescent ZnSalens for Molecular Imaging
16:50-17:00	Coffee break
<i>Session X</i>	<i>Chairperson: Koji Harano</i>
17:00-17:30	Akira Onoda (Osaka University) Programmed Hierarchical Assemblies of Hemoproteins toward Functional Biodevices
17:30-18:00	Takafumi Ueno (Tokyo Institute of Technology) Expanding Coordination Chemistry from Protein to Protein Assembly
18:00-18:10	Closing remarks
18:30	Dinner

【ミニ国際シンポジウム】

最先端分光で切り拓く強相関電子系の未来

IMS Workshop on Advanced Spectroscopy of Correlated Materials (ASCM 13)

2013年8月2日(金)～4日(日) 岡崎コンファレンスセンター

August 2nd (Friday) Place: 3rd floor of UVSOR Facility, Institute for Molecular Science

17:00 Registration

18:00-20:00 Welcome Reception

August 3rd (Saturday)

10:00-10:10 Opening remarks: Hidetoshi Miyazaki (Nagoya Institute of Technology, Japan)

1. Heavy Fermion systems (Chair: M. Matsunami, UVSOR)

10:10-10:35 [Invited] Global k-space perspective of temperature-dependent U 5f-states in URu₂Si₂
Jonathan Denlinger (Lawrence Berkeley National Laboratory, USA)

10:35-11:00 [Invited] Soft X-ray ARPES study of uranium compounds
Shin-ichi Fujimori (Japan Atomic Energy Agency, Japan)

11:00-11:25 [Invited] Optical study of archetypical valence-fluctuating Eu systems
Jörg Sichelschmidt (MPI Chemische Physik fester Stoffe, Germany)

11:25-11:50 [Invited] Low-energy optics of uranium-based heavy Fermions: Drude response of slow and fast electrons
Marc Scheffler (Universität Stuttgart, Germany)

11:50-13:00 Group Photo + Lunch

2. Molecular solids and Novel technical aspects including new synchrotron beam lines (Chair: R. Gemma, NIT)

13:00-13:25 [Invited] Time-resolved ARPES of graphite using femtosecond pulsed light in the deep-to-extreme UV region
Yukiaki Ishida (University of Tokyo, Japan)

13:25-13:45 [Contributed] Electron-phonon coupling investigation via phonon dispersion measurement in graphite by angle-resolved photoelectron spectroscopy
Shin-ichiro Tanaka (Osaka University, Japan)

13:45-14:05 [Contributed] Angle-resolved photoemission study of quasi-one-dimensional organic conductor
Takahiro Ito (Nagoya University, Japan)

14:05-14:20 Coffee Break

14:20-14:45 [Invited] Angle resolved photoemission spectroscopy of two dimensional organic metal
Takayuki Kiss (Osaka University, Japan)

14:45-15:15 [Invited] SOR-ARPES studies on π -electronic interaction in organic films and interfaces
Hiroyuki Yamane (Institute for Molecular Science, Japan)

15:30-16:30 UVSOR Site Tour

- 16:30-18:30 Check-in and Free Time
 18:45-21:00 Open-air Banquet at IMS (Okazaki fireworks festival)

August 4th (Sunday) Place: Conference room C, Okazaki Conference Center

3. Rare-earth and transition metal oxides (Chair: H. Miyazaki, NIT)

- 9:00- 9:25 [Invited] Observation of laser-induced magnetization precession in ferromagnetic EuO
 Takayuki Makino (University of Fukui, Japan)
 9:25- 9:50 [Invited] Investigating the Spin-Polarized Metal-Insulator Transition in Carrier Doped Eu_{1-x}Gd_xO Thin Films and Heterostructures by ARPES
 Kyle Shen (Cornel University, U.S.A.)
 9:50-10:15 [Invited] Quantum confinement of strongly correlated electrons in oxide artificial structures
 Kohei Yoshimatsu (Tokyo Institute of Technology, Japan)
 10:15-10:40 Coffee Break

4. Topological insulators (Chair: S. Kimura, Osaka Univ. and UVSOR)

- 10:40-11:05 [Invited] Theoretical proposal of topological insulator for a Kondo insulator SmB₆
 Tetsuya Takimoto (Hanyang University, Korea)
 11:05-11:30 [Invited] Topological phase transitions in ultrathin films
 Toru Hirahara (University of Tokyo, Japan)
 11:30-11:55 [Invited] Spin- and angle- resolved photoemission as a direct probe of spin textures in topological insulators
 Akio Kimura (Hiroshima University, Japan)
 11:55-12:20 [Invited] Local orbital angular momentum and circular dichroism ARPES
 Changyoung Kim (Yonsei University, Korea)
 12:20-12:30 Closing remarks: Shin-ichi Kimura (Osaka University and UVSOR, Japan)

【分子研研究会（一般）】

光による分子性伝導体の電子相制御

2013年10月3日（木）～4日（金） 岡崎コンファレンスセンター

10月3日（木）【一日目】

- 13:30-13:35 はじめに
 山本 浩史（分子研）

I. 新物質

- 13:35-14:00 「紫外光にตอบสนองして磁性と金属的伝導性を可逆的に発現する分子結晶」
 内藤 俊雄（愛媛大）
 14:00-14:25 「スピנקロスオーバー伝導体とその関連物質の外場応答」
 高橋 一志（神戸大）
 14:25-14:50 「分子性導体を用いた光駆動型超伝導トランジスタの開発」
 須田 理行（分子研）
 14:50-15:15 「パイ共役ポリマーの自己組織化による球状構造体形成と特異な発光特性」
 山本 洋平（筑波大）
 15:15-15:25 <休憩>

II. 分光測定とその理論（1）

- 15:25-15:50 「極超短パルス光で見る，操る，強相関電子・スピン・格子～モノサイクル制御を目指して～」
 岩井 伸一郎（東北大）
 15:50-16:15 「電子型強誘電転移を示す有機伝導体の探索」
 山本 薫（岡山理科大）
 16:15-16:40 「ダイマーモット絶縁体の光誘起相転移の初期過程」
 高橋 聡（名工大）
 16:40-17:05 「分子性導体の第一原理計算に基づくモデル化と多様な電子相図」
 妹尾 仁嗣（理研）
 17:05-17:30 「分子性導体の光誘起相転移における電子と構造の異なるダイナミクス」
 恩田 健（東工大）

10月4日（金）【二日目】

III. デバイスと電気的測定

- 9:00- 9:25 「色素ドーパナノ粒子 SET の光誘起スイッチング特性」
 野口 裕（千葉大）
 9:25- 9:50 「電気伝導と磁化からみた分子性導体の光応答」
 飯森 俊文（室蘭工大）
 9:50-10:15 「二次元高分子による 電子構造の制御」
 江 東林（分子研）

- 10:15-10:40 「光による α -(BEDT-TTF)₂I₃ の絶縁破壊」
田嶋 尚也 (東邦大)
- 10:40-10:50 <休憩>
- IV. 分光測定とその理論 (2)
- 10:50- 「光・テラヘルツ波による電子型強誘電体の超高速分極制御」
岡本 博 (東大)
- 11:15-11:40 「dmit 錯体における光誘起相転移の探索」
石川 忠彦 (東工大)
- 11:40-12:15 「電荷秩序系の光照射効果の理論」
橋本 博志 (東北大)
- 12:15-12:20 閉会の辞

【分子研研究会 (一般)】

造形科学：複学理インテグレーションによる未来材料開拓
2013年10月25日(金)～26日(土) 分子科学研究所 山手4号館3階会議室

10月25日

- 13:30 開会の挨拶 磯部寛之 (東北大)
- 13:35 第1部： 造形科学における合成化学の進歩 (座長 櫻井英博)
「バッキーボウルを基盤とした 分子造形イノベーション」
櫻井英博 (分子科学研究所)
「安定な反芳香族化合物の創成と三次元芳香族性の実現」
忍久保 洋 (名古屋大学)
「 造形のための新しい触媒的芳香環構築反応の開発と応用」
田中 健 (東京農工大学)
「開殻 電子系分子の新奇造形技術と新物性の開拓」
鈴木修一 (大阪市立大学)
「典型元素を用いたボウル型 造形と革新的物性の発掘」
斉藤雅一 (埼玉大学)
- 14:55 休憩
- 15:10 第2部： 造形集積科学が目指すもの (座長 芥川智行)
「強誘電性・強弾性機能の発現を目指したソフト 集積システム造形」
芥川智行 (東北大学)
「大規模分子集積化による巨視的 造形システムの構築と新機能開拓」
福島孝典 (東京工業大学)
「 共役系高分子の集合状態造形」
竹内正之 ((独)物質・材料研究機構)
「溶液デバイスの実現に向けた動的複合 アセンブリー造形」
矢貝史樹 (千葉大学)
- 16:30 第3部： 造形科学を支える物理学 (座長 杉本学)
「 造形科学のための理論設計・解析手法の開発と応用」
杉本学 (熊本大学)
「 造形システム集合体の物性制御」
竹延大志 (早稲田大学)
「発達 電子系を有する分子の複合電磁波分光法と電子機能予測」
佐伯昭紀 (大阪大学)
- 17:30 初日の議論の感想 佐藤 健太郎 (サイエンスライター)
- 18:00 懇親会

10月26日

- 9:30 フリーディスカッション
- 11:50 閉会の挨拶 福島孝典
- 12:00 解散

【分子研研究会 (一般)】

ロドプシン研究の故きを温ねて新しきを知る
2013年11月18日(月)～19日(火) 岡崎コンファレンスセンター

11月18日(月)

- 13:00 - 13:05 はじめに 今元 泰 (京都大学)

I. 生物の多彩な光受容 座長：菊川峰志（北海道大学）

- 13:05 - 13:25 井上圭一（名古屋工業大学大学院工学研究科）
光駆動ナトリウムポンプの発見と展開
- 13:25 - 13:50 岡野俊行（早稲田大学理工学術院）
青色光による遺伝子発現の制御と青色光受容分子の解析
- 13:50 - 14:10 山崎洋一（奈良先端科学技術大学院大学）
PYPの分光学的性質の多様性獲得機構
- 14:10 - 14:30 斉藤圭亮（大阪大学大学院理学研究科）
ロドプシンの機能に違いを生み出す水素結合強度の違い

II. 細胞の光応答の分子基盤 座長：佐藤恵太（京都大学）

- 14:50 - 15:10 小島大輔（東京大学大学院理学系研究科）
動物の背地適応を制御する光受容分子の探索
- 15:10 - 15:35 寺北明久（大阪市立大学大学院理学研究科）
松果体関連器官の波長識別の分子基盤
- 15:35 - 15:55 佐藤慎哉（大阪大学大学院理学研究科）
コイ錐体での視物質再生に関与する 11- シスレチナール生成反応，AL-OL 反応の解析
- 15:55 - 16:05 集合写真
- 16:05 - 18:00 ポスター発表
- 18:00 - 20:00 懇親会

11月19日（火）

III. レチナール蛋白質の光構造変化 座長：筒井 圭（京都大学）

- 9:00 - 9:20 古谷祐詞（分子科学研究所）
微生物型ロドプシンから様々な膜タンパク質研究へ—時間分解フーリエ変換赤外分光法による構造変化解析—
- 9:20 - 9:40 今元 泰（京都大学大学院理学研究科）
構造ダイナミクスからみたロドプシンの活性化機構
- 9:40 - 10:05 内藤 晶（横浜国立大学大学院工学研究院）
光照射固体 NMR による光受容膜タンパク質の活性中間体の捕捉と構造変化の解明

IV. レチナール蛋白質研究の新規アプローチ 座長：片山耕大（名古屋工業大学）

- 10:25 - 10:45 神谷基司（京都大学大学院理学研究科）
レチナールの化学
- 10:45 - 11:10 水谷泰久（大阪大学大学院理学研究科）
ロドプシン研究に共鳴ラマン分光法が寄与したもの、そしてこれから
- 11:10 - 11:35 田原太平（理化学研究所）
光受容蛋白質のフェムト秒ダイナミクスの観測と理解
- 11:35 - 11:55 川村 出（横浜国立大学大学院工学研究院）
固体 MAS NMR によるフォボロドプシンのレチナール-タンパク質間相互作用の解析

V. レチナール蛋白質と G 蛋白質共役型受容体の多様性 座長：石北 央（大阪大学）

- 13:00 - 13:20 山下高廣（京都大学大学院理学研究科）
脊椎動物非視覚オプシン Opn5 グループの多様な分子特性
- 13:20 - 13:40 今井啓雄（京都大学霊長類研究所）
霊長類味覚受容体の機能解析
- 13:40 - 14:05 神山 勉（名古屋大学大学院理学研究科）
古細菌型ロドプシンの構造比較

VI. レチナール蛋白質研究の将来にむけて 座長：和田昭盛（神戸薬科大学）

- 14:25 - 14:50 山中章弘（名古屋大学環境医学研究所）
ロドプシンを用いて神経活動を操作し、個体行動を制御する
- 14:50 - 15:10 須藤雄気（名古屋大学大学院理学研究科）
微生物型レチナールタンパク質の非常識で未来を拓く
- 15:10 - 15:35 神取秀樹（名古屋工業大学大学院工学研究科）
ロドプシン研究の現状と我々のアプローチ
- 15:35 - 16:00 七田芳則（京都大学大学院理学研究科）
脊椎動物ロドプシンの分子構築を自然から学ぶ
- 16:00 - 16:05 おわりに 古谷祐詞（分子研）

【アジア連携分子研研究会】

日韓生体分子科学セミナー——実験とシミュレーション

6th Japan-Korea Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation

2013年11月25日(月)～27日(水) 岡崎コンファレンスセンター

November 25 (Mon)

【Chair: Yuji Furutani (IMS)】

- 10:00-10:25 Akihito Ishizaki (IMS)
QUANTUM DYNAMIC ASPECTS IN PHOTOSYNTHETIC LIGHT HARVESTING—OLD ROOTS, NEW SHOOTS
- 10:25-10:50 Young Min Rhee (POSTECH)
INTERPOLATED MECHANICS/MOLECULAR MECHANICS STUDIES ON THE DYNAMICS OF FLUORESCENT PROTEINS
- 10:50-11:10 coffee break

【Chair: Shigetoshi Aono (IMS)】

- 11:10-11:35 Yuji Furutani (IMS)
STIMULUS-INDUCED DIFFERENCE FTIR SPECTROSCOPY ON ION-CHANNEL AND ION-PUMP PROTEINS
- 11:35-12:00 Osami Shoji (Nagoya Univ.)
GASEOUS ALKANE HYDROXYLATION CATALYZED BY CYTOCHROME P450BM3 BY TRICKING ITS SUBSTRATE RECOGNITION USING DECOY MOLECULES
- 12:00-13:30 lunch

【Chair: Young Min Rhee (POSTECH)】

- 13:30-13:55 Jinwoo Lee (Kwangwoon Univ.)
A NOVEL APPROACH TO NON-EQUILIBRIUM THERMODYNAMICS
- 13:55-14:20 Nam Ki Lee (POSTECH)
SINGLE-VESICLE FRET ASSAY FOR THE NEUROTOXICITY OF A-SYNUCLEIN OLIGOMERS IN PARKINSON'S DISEASE: INHIBITING NEURONAL SNARE-MEDIATED VESICLE FUSION
- 14:20-14:45 Naoyuki Inagaki (Nara Inst. of Sci. & Tech.)
SIGNAL-FORCE TRANSDUCTION IN AXON OUTGROWTH AND GUIDANCE
- 14:45-15:05 coffee break

【Chair: Yuji Furutani (IMS)】

- 15:05-15:30 Jaehoon Yu (Seoul National Univ.)
A PEPTIDE MIMETIC OF APOLIPOPROTEIN A-I THAT CONTAINS 2-NAPHTHYLAMINE RESIDUES ENHANCES CHOLESTEROL EFFLUX AND SEQUESTERS OXIDIZED LDL FROM MACROPHAGE CELLS
- 15:30-15:55 Changbong Hyeon (KIAS)
UREA-INDUCED DENATURATION OF RNA
- 15:55-16:20 Chaok Seok (Seoul National Univ.)
GALAXY 2013 TESTED ON RECENT COMMUNITY-WIDE PREDICTION EXPERIMENTS
- 16:20-16:40 coffee break

【Chair: Hisashi Okumura (IMS)】

- 16:40-16:55 Balachandran Manavalan (KIAS)
RANDOM FOREST-BASED PROTEIN MODEL QUALITY ASSESSMENT (RFMQA) USING STRUCTURAL FEATURES AND POTENTIAL ENERGY TERMS
- 16:55-17:10 Takumi Yamaguchi (IMS)
PARAMAGNETISM-ASSISTED NMR EVALUATION OF MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS FOR CONFORMATIONAL CHARACTERIZATION OF OLIGOSACCHARIDES
- 16:55-17:10 Takumi Yamaguchi (IMS)
PARAMAGNETISM-ASSISTED NMR EVALUATION OF MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS FOR CONFORMATIONAL CHARACTERIZATION OF OLIGOSACCHARIDES
- 17:10-17:25 Tadashi Satoh (Nagoya City Univ. & JST PRESTO)
STRUCTURAL BASIS FOR PROTEASOME FORMATION MEDIATED BY ASSEMBLY CHAPERONE NAS2
- 17:25-17:40 Min-Kyu Kim (KIOST)
CRYSTAL STRUCTURES OF COLD-ACTIVE β -MANNANASE AND ITS MANNOPENTAOSE COMPLEXES FROM ANTARCTIC SPRINGTAIL, *Cryptopygus antarcticus*
- 18:00 Free Discussion/Mixer

November 26 (Tue)

【Chair: Jooyoung Lee (KIAS)】

- 9:30- 9:55 Julian Lee (Soongsil Univ.)
EXACT PARTITION FUNCTION ZEROS OF THE WAKO-SAITÔ-MUÑOZ-EATON PROTEIN MODEL
- 9:55-10:20 Fumio Hirata (Ritsumeikan Univ.)
ROLE OF WATER TO CONVERT "NON-BIOLOGICAL" FLUCTUATION TO THE "BIOLOGICAL" ONE
- 10:20-10:40 coffee break

【Chair: Seokmin Shin (Seoul National Univ.)】

- 10:40-11:05 Jooyoung Lee (KIAS)
HIGH-ACCURACY PROTEIN STRUCTURE MODELING AND ITS APPLICATION TO MOLECULAR REPLACEMENT OF CRYSTAL PHASING
- 11:05-11:30 Hisashi Okumura (IMS)
REPLICA-PERMUTATION METHOD FOR PROTEIN SIMULATIONS AND PRESSURE-INDUCED DENATURATION
- 11:30-11:55 Sun Choi (Ewha Womans Univ.)
COMPUTER-AIDED DRUG DESIGN AND MOLECULAR MODELING STUDIES FOR THE DISCOVERY OF COVALENT INHIBITORS
- 11:55-13:30 lunch

【Chair: Sun Choi (Ewha Womans Univ.)】

- 13:30-13:55 Seokmin Shin (Seoul National Univ.)
UNDERSTANDING AMYLOID FORMATION
- 13:55-14:20 Hirofumi Sato (Kyoto Univ.)
MOLECULAR THEORIES OF SOLVATION, FLUCTUATION AND DIFFUSION IN AQUEOUS SOLUTION
- 14:20-14:45 Weontae Lee (Yonsei Univ.)
STRUCTURE AND DYNAMICS OF C-TERMINAL REGULATORY DOMAIN OF *Vibrio vulnificus* EXTRACELLULAR METALLOPROTEASE
- 14:45-15:05 coffee break

【Chair: Kunihiro Kuwajima (SOKENDAI)】

- 15:05-15:30 Sung-il Yoon (Kangwon National Univ.)
CONSERVED, BUT DISTINCT, ACTIVATION OF TOLL-LIKE RECEPTOR 5 BY FLAGELLIN
- 15:30-15:55 Keehyoung Joo (KIAS)
NMR STRUCTURE DETERMINATION BY CONFORMATIONAL SPACE ANNEALING
- 15:55-16:10 Chihiro Kitatsuji (IMS)
MOLECULAR MECHANISM FOR HEME-MEDIATED INHIBITION OF THE 5-AMINOLEVULINIC ACID SYNTHASE 1
- 16:10-16:30 coffee break

【Chair: Koichi Kato (IMS)】

- 16:30-16:45 Norifumi Muraki (IMS)
STRUCTURAL BASIS FOR PROTOCHLOROPHYLLIDE REDUCTION IN THE CHLOROPHYLL BIOSYNTHESIS
- 16:45-17:00 In Suk Joung (KIAS)
A SIMPLE STRUCTURE-BASED MODELING FOR EXPLORING MACRO-MOLECULAR CONFORMATIONAL CHANGES
- 17:00-17:15 Sim Jun (Soongsil Univ.)
GRAPH-THEORY BASED COMPUTATION OF PROTEIN RIGID BLOCKS
- 18:00 Banquet

November 27 (Wed)

【Chair: Shingo Nagano (Tottori Univ.)】

- 9:30- 9:55 Hironari Kamikubo (Nara Inst. of Sci. & Tech.)
FUNCTIONAL MODIFICATION OF A PROTEIN BY USING ELEMENT IMPLANTATION
- 9:55-10:20 Shuji Akiyama (IMS)
KaiC AS CIRCADIAN PACEMAKER OF CYANOBACTERIAL CIRCADIAN CLOCK
- 10:20-10:40 coffee break

【Chair: Soo Hyun Eom (GIST)】

- 10:40-11:05 Genji Kurisu (Osaka Univ.)
STRUCTURAL STUDIES OF THE CYTOPLASMIC DYNEIN MOTOR DOMAIN
- 11:05-11:30 Koichi Kato (IMS)
AN ARCHAEL HOMOLOG OF PROTEASOME ASSEMBLY CHAPERONE FORMS A HOMOTETRAMER AND FUNCTIONS AS PROTEASOME ACTIVATOR

11:30-11:55 Sun-Shin Cha (KIOST)
ZINC-BINDING TO THE SURFACE OF PROTEINS AND ITS APPLICATION TO EXPERIMENTAL PHASING
11:55-13:30 lunch

【Chair: Fumio Hirata (Ritsumeikan Univ.)】

13:30-13:55 Soo Hyun Eom (GIST)
CRYSTAL STRUCTURE OF THE CORE DOMAIN OF HUMAN SWIPROSIN-1, CALCIUM DEPENDENT ACTIN
BUNDLING PROTEIN
13:55-14:20 Kunihiro Kuwajima (SOKENDAI)
IRREVERSIBLE DENATURATION OF *Escherichia coli* MALTODEXTRIN GLUCOSIDASE
14:20-14:45 Shun Hirota (Nara Inst. of Sci. & Tech.)
OLIGOMERIZATION OF HEME PROTEINS BY DOMAIN SWAPPING
14:45-15:05 coffee break

【Chair: Shun Hirota (Nara Inst. of Sci. & Tech.)】

15:05-15:30 Toshitaka Matsui (Tohoku Univ.)
UNIQUE REACTION MECHANISMS OF IsdG-TYPE HEME DAGRADING ENZYMES FROM PATHOGENIC
BACTERIA
15:30-15:55 Shingo Nagano (Tottori Univ.)
STRUCTURE AND HEME ACQUISITION MECHANISM OF A HEMOPHORE HasA HAVING UNUSUAL
5-COORDINATED HEME
15:55-16:20 Shigetoshi Aono (IMS)
STRUCTURAL BASIS FOR THE TRANSCRIPTIONAL REGULATION OF HEME HOMEOSTASIS IN LACTOCOCCUS
LACTIS

【分子研研究会（一般）】

先端スピン計測技術による分子性物質研究の現状と展望
2013年12月18日（水）～19日（木） 分子科学研究所 研究棟201号室

12月18日

13:00 はじめに
太田仁（神戸大分子フォトサイエンス研究センター）

第1セッション 座長：中村敏和（分子研）

磁気共鳴法による生理機能イメージング装置開発
市川和洋（九大先端融合医療創成センター）
同位体でスピララベルされたキラルなニトロキシラジカルの EPR イメージング
平田拓（北大情報科学）
14:00 CW とパルス-ESR とスピララベルを使ってタンパク質についてわかること（仮題）
荒田敏昭（阪大理）
PELDOR, ENDOR でみる酸素発生系マンガクラスターの磁気構造
三野広幸（名大理）
生体内ラジカル検出のためのプローブ剤開発
山田健一（九大薬）
15:00 休憩

< 第2セッション 座長：大和真由実（九大先端融合医療レドックスナビ）

15:20 有機ラジカル単結晶 ESR と分子間磁気相互作用（仮題）
細越裕子（大府大理）
分子性物質研究に向けた多周波数 ESR の可能性
大久保晋（神戸大分子フォトサイエンス研究センター）
16:00 有機半導体素子に対する電流検出 ESR
鐘本勝一（大市大理）
パルス ESR による照射食品の計測と解析
亀谷宏美（農研機構食品総合研究所）
9GHz EPR イメージング法の医科学への応用：皮膚疾患と皮膚構造の解析
中川公一（弘前大保健）
17:00 総合討論
18:30 懇親会

12月19日

8:00 ラボツアー

第3セッション 座長：平田 拓（北大情報科学）

9:00 自己ドーブ型有機導体に対する磁気共鳴研究
中村敏和（分子研）

Qバンドパルス ESR を用いたプリオン凝集体構造の解析（仮題）
稲波 修（北大獣医）

任意波形マイクロパルスを用いたスピン制御 技術と新しい ESR 分光手法への展開
佐藤和信（大市大理）

10:00 有機薄膜の磁気伝導効果の現状
生駒忠昭（新潟大自然科学）

光誘起伝導性ドナー・アクセプター型 COF のスピンダイナミクス
古川 真（新潟大機器分析センター）

10:40 休憩

第4セッション 座長：稲波 修（北大 獣医）

11:00 高磁場動的核分極多重共鳴の装置開発と実験
藤原敏道（阪大蛋白質研）

チエノチオフェン系分子材料を用いた高移動度有機トランジスタにおけるキャリアダイナミクス
田中久暁（名大工）

高周波 ESR を用いた分子性導体の研究—— d 系および量子スピン液体物質への応用
大島勇吾（理研）

12:00 終わりに

市川和洋（九大先端融合医療創成センター）

【分子研研究会（一般）】

金属クラスター錯体・高分子状金属錯体を舞台とした構造・機能化学の最前線
2014年3月12日（水）～13日（木） 分子科学研究所 研究棟201号室

3月12日（水）

13:00-13:10 研究会趣旨説明 野呂 真一郎（北海道大学電子科学研究所）

セッション I：座長 唯 美津木（名古屋大学）

13:10-13:40 牧浦 理恵（大阪府立大学）
「液相界面における高配向性分子膜の形成」

13:40-14:20 阿部 正明（九州大学）
「共役系遷移金属錯体の配位集積に基づく分子性巨大クラスターの構築と電子特性」

14:20-14:45 写真撮影，コーヒープレイク

セッション II：座長 中沢 浩（大阪市立大学）

14:45-15:35 石谷 治（東京工業大学）
「直鎖状およびリング状 Re(I) 多核錯体の合成と光機能」

15:35-16:15 大久保 貴志（近畿大学）
「配位高分子の構造・キャリア制御と薄膜太陽電池への展開」

セッション III：座長 久枝 良雄（九州大学）

16:15-16:45 小門 憲太（北海道大学）
「多孔性結晶を鋳型とした特殊構造ネットワーク高分子」

16:45-17:35 宮坂 等（東北大学金属材料研究所）
「Functional MOFs：電子・スピン・化学反応を制御する」

18:00-20:00 懇親会

3月13日（木）

セッション IV：座長 西原 寛（東京大学）

9:30-10:00 志賀 拓也（筑波大学）
「特異な幾何構造をもつ多核金属錯体の物性研究」

10:00-10:30 近藤 篤（東京農工大学）
「柔軟な高分子状金属錯体の特異的吸着現象」

10:30-10:45 コーヒープレイク

セッション V : 座長 田所 誠 (東京理科大学)
 10:45-11:25 正岡 重行 (分子科学研究所)
 「金属錯体を用いた多電子酸化還元反応」
 11:25-12:05 植村 卓史 (京都大学)
 「錯体サブナノ空間を用いた精密高分子集積」
 12:05-12:10 閉会挨拶 黒田 孝義 (近畿大学)

(4) 若手研究会等

課 題 名	提案代表者
第 2 回分子科学若手シンポジウム	上智大学大学院理工学研究科 村上 龍大

(5) 岡崎コンファレンス

課 題 名	提案代表者
波束ダイナミクス ; コヒーレンスとインコヒーレンス	分子科学研究所 大森 賢治

(6) UVSOR 施設利用

(前期)

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
BL1B の整備	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
コヒーレントシンクロトロン放射光を用いた固体電子物性研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
Si 系廃棄物から合成した Y 型ゼオライトの局所構造評価	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
抗菌性ハイドロキシアパタイトにおける P-K 端および Ag-L 端の局所構造解析	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
ゼオライトに修飾した MoOx 触媒活性種の L 殻 XANES 解析による還元構造の解明	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
希土類元素添加酸化物蛍光体における希土類元素の局所環境解析	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 (II)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
He プラズマ照射により発現する樹枝状ナノタングステンの XAFS による構造・電子状態解析	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微粉碎処理過程での Si 局所構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
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
軟 X 線吸収分光法による加熱処理した金属酸化物薄膜の研究	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
真空紫外励起による酸化物結晶の固有発光と励起子から希土類イオンへのエネルギー移動	秋田大学工学資源学研究科	小玉 展宏
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
太陽光励起レーザ材料の光学特性	岐阜大学工学部	山家 光男
アルカリハライド結晶中の不純物イオン間のエネルギー移動の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
アミノ酸全 20 種 核酸塩基全 5 種の広域吸収スペクトル測定完結計画(3-30 eV)	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	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
希薄磁性体における磁性元素の電子状態解析	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
Li イオン二次電池高容量正極材料での反応機構解明に向けた表面・バルクの電子構造解析	産業技術総合研究所	奥村 豊旗
磁性薄膜と接合したトポロジカル絶縁体の電子構造	東京大学大学院理学系研究科	平原 徹
BL5U 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
非化学量論組成ホイスラー合金およびパイライト型遷移金属二硫化物固溶体の電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
Sm _{1-x} Y _x S における化学圧力下金属 - 絶縁体転移に伴う電子状態変化の直接観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
高分解能角度分解光電子分光を用いたキャリアドープ希土類酸化物の電子状態の直接観測	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
極端紫外光領域における岩石の反射スペクトル測定	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一朗
アモルファス半導体における光誘起欠陥評価	岐阜大学工学部	林 浩司

アミノ酸全 20 種、核酸塩基全 5 種の広域吸収スペクトル測定完結計画 (30-250 eV)	神戸大学大学院人間発達環境学研究所	中川 和道
シリコン材料中の新不純物中心の電子構造	東北学院大学工学部	淡野 照義
BL6B の顕微分光の整備	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
放射光赤外イメージングによる電子相分離の直接観測	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
鉛フリー圧電体の遠赤外線スペクトル	名古屋工業大学工学研究科	柿本 健一
高輝度放射光を用いた赤外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
新型トポジカル物質の低エネルギー高分解能 ARPES	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半導体における電子格子相互作用	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
High-resolution photoemission spectroscopy studies on iron-pnictide superconductors	東京大学物性研究所	WALID, Malaeb
微小ギャップ半導体中の表面電子構造	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
ARPES studies of electronic nematicity and pseudogap-like phase in iron-pnictides	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
Polarization dependent ARPES study on three recently found superconductors	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
Studies on the electronic anisotropy in Ba(Fe,Ru) ₂ As ₂	大阪大学大学院生命機能研究科	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 Tm 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
低励起エネルギー偏光依存型角度分解光電子分光による擬一次元有機導体における分子鎖間相互作用の研究	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
巨大 Seebeck 効果を示す FeSb ₂ における近藤半導体的電子構造の解明とその利用方法の確立	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
電荷密度波・磁性競合系と多段磁性・構造転移系の角度分解光電子分光	立命館大学理工学部	今田 真
カーボンナノマテリアル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・フリー発光の寿命特性	山形大学理学部	大西 彰正
高速シンチレタ材料におけるエネルギー移動と内殻励起の寄与の定量的解析	東北大学大学院工学研究科	越水 正典
太陽ライマン 線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
ポロンドープダイヤモンドに見られるバンド端近傍発光の時間分解	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
VUV エリプソメトリーの整備	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
価数揺動を示す強相関電子系における可視・真空紫外反射分光	名古屋大学大学院理学研究科	井村敬一郎
真空紫外透明光学素子開発に向けたガラス中希土類イオンの電子状態研究	大阪大学レーザーエネルギー学研究中心	清水 俊彦
パイ共役分子 / 金属界面に現れる界面準位の起源および形成機構の解明	岩手大学工学部	細貝 拓也
角度分解紫外光電子分光法による高伝導度を示す PEDOT-PSS 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
有機半導体・無機半導体界面のエネルギー準位接合	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
熱励起遅延蛍光色素を用いた有機 EL 素子の電子構造	千葉大学先進科学センター	石井 久夫
有機 - 有機ヘテロ界面における界面電荷と分子間電荷移動との相関	千葉大学先進科学センター	中山 泰生
Development and maintenance of the BL-8B	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga rasika
Electronic structure of amino acids assembly studies by UPS	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga rasika
有機固体のエネルギー領域 0 から 20 eV での電子平均自由行程の精密測定	京都大学化学研究所	吉田 弘幸
金属修飾した有機薄膜からの電子放出現象と電子構造との相関に関する研究	近畿大学理工学部	田中 仙君
光電子分光法による金属内包フラーレンの電子状態の研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮崎 隆文
Ultraviolet-Vacuum ultraviolet reflectance and photoluminescence studies on LaAlO ₃ /SrTiO ₃ films	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
LiTi ₂ O ₄ 透明超伝導体の低温での透過率測定	分子科学研究所	許斐 太郎
高次高調波取出用フッ化物誘電体多層膜ミラーの真空紫外反射率測定	(独)情報通信研究機構未来 ICT 研究所	和久井健太郎
立方晶窒化ホウ素中の硫黄の局所構造解析	(独)物質・材料研究機構	村田 秀信
有機固体対応ビームラインの再構築: BL2B の立ち上げおよび BL8B の整備	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
真空紫外発光分光による固体光励起状態の包括的研究	山形大学理学部	北浦 守
(後期)		
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
BL1B の整備	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
コヒーレントシンクロトロン放射光を用いた固体電子物性研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
ゼオライトに修飾した MoOx 触媒活性種の L 殻 XANES 解析による還元構造の解明	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
希土類元素添加酸化物蛍光体における希土類元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之

AlGdN の Al1s 及び Gd3d 内殻からの発光・励起スペクトル測定 (II)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
He プラズマ照射により発現する樹枝状ナノタングステンの XAFS による構造・電子状態解析	名古屋大学エコトピア科学研究所	吉田 朋子
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酸化物結晶の固有発光と励起子から希土類イオンへのエネルギー移動	秋田大学工学資源学研究所	小玉 展宏
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
太陽光励起レーザ材料の光学特性	岐阜大学工学部	山家 光男
アルカリハライド結晶中の不純物イオン間のエネルギー移動の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
アミノ酸全 20 種 核酸塩基全 5 種の広域吸収スペクトル測定完結計画(3-30 eV)	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
希薄磁性体における磁性元素の電子状態解析	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
Li イオン二次電池高容量正極材料での反応機構解明に向けた表面・バルクの電子構造解析	(独)産業技術総合研究所	奥村 豊旗
BL5U 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
非化学量論組成ホイスラー合金およびパイライト型遷移金属二硫化物固溶体の電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
中間バンド型太陽電池における周期及び組成偏重がバンド構造に及ぼす影響	名古屋大学大学院工学研究科	宇治原 徹
$Sm_{1-x}Y_xS$ における化学圧力下金属 - 絶縁体転移に伴う電子状態変化の直接観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
高分解能角度分解光電子分光を用いたキャリアドープ希土類酸化物の電子状態の直接観測	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
極端紫外光領域における岩石の反射スペクトル測定	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一朗
アモルファス半導体における光誘起欠陥評価	岐阜大学工学部	林 浩司
アミノ酸全 20 種, 核酸塩基全 5 種の広域吸収スペクトル測定完結計画 (30-250 eV)	神戸大学大学院人間発達環境学研究所	中川 和道
シリコン材料中の新不純物中心の電子構造	東北学院大学工学部	淡野 照義
BL6B の顕微分光の整備	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
放射光赤外イメージングによる電子相分離の直接観測	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
鉛フリー圧電体の遠赤外線スペクトル	名古屋工業大学工学研究科	柿本 健一
高輝度放射光を用いた赤外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
新型トポロジカル物質の低エネルギー高分解能 ARPES	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半導体における電子格子相互作用	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
微小ギャップ半導体中の表面電子構造	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
Polarization dependent ARPES study on three recently found superconductors	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
Studies on the electronic anisotropy in $Ba(Fe,Ru)_2As_2$	大阪大学大学院生命機能研究科	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
低励起エネルギー偏光依存型角度分解光電子分光による擬一次元有機導体における分子鎖間相互作用の研究	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
巨大 Seebeck 効果を示す $FeSb_2$ における近藤半導体的電子構造の解明とその利用方法の確立	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
新規オージェ・フリー発光の寿命特性	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 線偏光観測ロケット実験 CLASP のフライト品評価	自然科学研究機構国立天文台	成影 典之
VUV エリプソメトリーの整備	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
パイ共役分子 / 金属界面に現れる界面準位の起源および形成機構の解明	岩手大学工学部	細貝 拓也
角度分解紫外光電子分光法による高伝導度を示す PEDOT-PSS 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
有機半導体・無機半導体界面のエネルギー準位接合	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
熱励起遅延蛍光色素を用いた有機 EL 素子の電子構造	千葉大学先進科学センター	石井 久夫
有機 - 有機ヘテロ界面における界面電荷と分子間電荷移動との相関	千葉大学先進科学センター	中山 泰生
Development and maintenance of the BL-8B	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga rasika
Electronic structure of amino acids assembly studies by UPS	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga rasika
有機固体のエネルギー領域 0 から 20 eV での電子平均自由行程の精密測定	京都大学化学研究所	吉田 弘幸

金属修飾した有機薄膜からの電子放出現象と電子構造との相関に関する研究	近畿大学理工学部	田中 仙君
光電子分光法による金属内包フラーレンの電子状態の研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮崎 隆文
スラグおよびスラグ酸処理溶液から合成した Ca 系化合物の局所構造評価	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
新規圧電用ニオブ酸カリウム系セラミックスの構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
軟 X 線領域の蛍光収量法を用いた材料のその場観察	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
アルカリハライド微結晶によるシンチレーション機能の研究	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
酸素発生電極触媒を示す高原子価金属酸化物における LMCT 状態の解析	北海道大学大学院工学研究院	青木 芳尚
CaCu ₃ Ti _{4-x} Ru _x O ₁₂ における d 電子の二重性	弘前大学理工学研究科	任 皓駿
軟 X 線光電子分光によるリン化ニッケル表面の電子状態の解明	立教大学理学部	枝元 一之
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 2	東京大学大学院理学系研究科	平原 徹
Angle-resolved photoemission of Cu-doped NaFeAs and SrFe ₂ As ₂	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
鉄ニクタイト超伝導体における角度分解光電子分光	大阪大学大学院理学研究科	田島 節子
イリジウム酸化物の真空紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	藤岡 淳
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 宜之
真空紫外領域における YF ₃ 薄膜の光伝導特性評価	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 晋吾
真空紫外透明光学素子開発に向けたガラス中希土類イオンの電子状態研究	大阪大学レーザーエネルギー学研究中心	清水 俊彦
真空紫外反射による亜鉛リン酸塩ガラス中ビスマスの電子状態の研究	(独)産業技術総合研究所	北村 直之
Study exotic quantum properties at LaAlO ₃ /SrTiO ₃ interface using ultraviolet-Vacuum ultraviolet reflectance and photoluminescence	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
第三周期元素 K 端 XAS プリエッジの微細構造解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
有機固体対応ビームラインの再構築: BL2B の立ち上げおよび BL8B の整備	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
真空紫外発光分光による固体光励起状態の包括的研究	山形大学理学部	北浦 守

(7) 施設利用

機器センター

(通年)

新規な有機半導体の構造解明	東京工業大学大学院理工学研究科	芦沢 実
分子内電荷移動錯体の結晶構造解析による分子配列の解明と分子間相互作用の解明	静岡大学工学部	植田 一正
新規な多核金属錯体の合成と X 線結晶構造解析	静岡大学理学部	仁科 直子
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

(前期)

サイズ・組成制御した銅カルコゲナイド半導体ナノ粒子の発光特性の研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	濱中 泰
X 線結晶構造解析による分子構造の決定	豊橋技術科学大学大学院工学研究科	藤沢 郁英
シアニン J 会合体の蛍光特性に関する研究	早稲田大学理工学術院	井村 考平
アゾ金属錯体の円偏光紫外光誘起キラル秩序の CD 分光	東京理科大学理学部	秋津 貴城
新奇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
紅色光合成細菌由来光捕集膜蛋白質複合体における耐熱化の分子機構	神戸大学大学院農学研究科	木村 行宏
バイオマス利用に向けた糖化関連タンパク質の解析	農業・食品産業技術総合研究機構畜産草地研究所	横山 浩
側鎖に分岐アルキル基を有する 共役系ラセン高分子の溶媒及び温度に対する光学特性	室蘭工業大学大学院工学研究科	馬渡 康輝
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
一次元ロジウム - ジオキソレン錯体の結晶構造解析 2	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔
協同転移を示す複合機能錯体の低温構造解析	神戸大学大学院理学研究科	高橋 一志
ベンゼン重水素置換体の分子構造精密決定	九州大学稲盛フロンティア研究センター	石元 孝佳

(後期)

エネルギー有効利用のためのアニオンドーパ酸化物 - 有機物ナノコンポジットの可能性研究	自然科学研究機構核融合科学研究所	高山 定次
サイズ・組成制御した銅カルコゲナイド半導体ナノ粒子の光学特性の研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	濱中 泰
X 線結晶構造解析による分子構造の決定	豊橋技術科学大学大学院工学研究科	藤沢 郁英
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
紅色光合成細菌の光捕集膜タンパク質複合体における耐熱化の分子機構	茨城大学理学部	大友 征宇

キレート型プロトン性イオン液体中での錯形成と構成成分の拡散	奈良女子大学大学院人間文化研究科	飯田 雅康
多孔性ポリフィリン亜鉛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
イオン性ブロック共重合体の熱分析	岐阜大学工学部	三輪 洋平
光合成膜蛋白質耐熱化の熱力学的解析	神戸大学大学院農学研究科	木村 行宏
新規な光センサータンパク質の生化学的解析	日本大学生物資源科学部	高野 英晃
BEDT-TTF 銀錯体の極低温構造解析	名城大学農学部	平松 孝章
¹⁸³ W 核磁気共鳴法によるタングステン錯体の構造研究	岡山大学大学院自然科学研究科	押木 俊之
金属間結合形成転移を示す機能性金属錯体の構造解析	神戸大学大学院理学研究科	高橋 一志

装置開発室

(前期)

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
神経細胞ネットワークハイスループットスクリーニング素子のセンサー基板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
先進超伝導線材における引張歪印加機構プローブの開発	自然科学研究機構核融合科学研究所	菱沼 良光
人工脂質膜上の脂質クラスターの可視化と脂質プローブの検出感度推定	名古屋大学大学院医学系研究科	深澤 有吾

(後期)

形彫放電加工機による透過型電子顕微鏡部品製作	名古屋大学全学技術センター	松下 幸司
神経細胞ネットワークハイスループットスクリーニング素子のセンサー基板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ング回路の製作	新潟薬科大学薬学部	星名賢之助

計算機利用

半導体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
分子内および分子間電子・電荷移動の研究	神奈川大学理学部	田仲 二郎
生体分子の機能発現反応に関する理論的研究	千葉大学大学院薬学研究院	星野 忠次
生体分子および触媒分子系の量子化学	北海道大学触媒化学研究センター	長谷川淳也
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
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
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
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
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
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
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
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
革新的量子計算科学の創造と大規模シミュレーション	量子化学研究協会研究所	中辻 博
生体内におけるアミノ酸の D-化機構の解明と D-化が及ぼす影響の検討	金沢大学医薬保健研究域	小田 彰史
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
ナノ・バイオ物質群の構造・機能・電子状態の相関関係の計算科学的解析	筑波大学数理物質系	神谷 克政
相対論的分子軌道法と実験のコラボレーションによる機能性金属錯体の電子状態設計：有機 EL・分子スイッチングを中心に	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
界面和周波発生分光の理論	東北大学大学院理学研究科	森田 明弘
遷移金属触媒をもちいた二酸化炭素変換反応の機構解析	東京大学大学院工学系研究科	野崎 京子
有機デバイスへの応用に向けた非晶質有機半導体材料の幾何・電子構造計算と膜の屈折率計算	山形大学大学院理工学研究科	横山 大輔
バクテリア ATP 合成酵素の サブユニットを基にした GTP センサーの理論設計	京都大学大学院理学研究科	高田 彰二
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
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
真空及び固体中における分子とナノ構造の磁性理論	横浜国立大学大学院工学研究院	Raebiger Hannes
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
分子動力学及び量子化学計算を用いたセルロース関連分子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
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

有機化学反応における求電子性および求核性についての理論的研究	高知大学大学院総合人間自然科学研究科	金野 大助
脂質膜へのタンパク質埋め込みのための分子シミュレーション技術の確立	金沢大学理工研究域	齋藤 大明
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	宮崎大学工学教育研究部	湯井 敏文
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
柔らかい相互作用系のガラス転移	筑波大学数理物質系	宮崎 州正
MD/3D-RISM法を用いた自由エネルギー計算による自己組織化の動的側面に関する研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮田 竜彦
光合成酸素発生中心 CaMn_4O_5 クラスタの構造, 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教育研究センター	山口 兆
分子クラスターの構造と化学反応経路の量子化学的研究	電気通信大学大学院情報理工学研究科	山北 佳宏
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
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	Irle Stephan
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
コンピューターシミュレーションによる核酸構造安定性の解析	甲南大学先端生命工学研究所	杉本 直己
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
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
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
水, 氷, クラスレートハイドレートの構造相転移の理論研究	岡山大学大学院自然科学研究科	田中 秀樹
高精度量子化学計算によるナノサイズ分子の分子機能の解明	(独)理化学研究所	中嶋 隆人
生体分子のマルチコピーマルチスケールシミュレーション	横浜市立大学大学院生命医科学研究科	森次 圭
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
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
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
励起状態とその緩和過程に関する理論的研究	慶應義塾大学理工学部	藪下 聡
金属錯体・触媒・生体関連分子の構造・物性・反応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
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
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
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
第一原理量子論による次世代新原理メモリの設計指針の獲得	筑波大学計算科学研究センター	白石 賢二
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
第一原理的手法によるナノ・バイオ関連物質の形成と機能に関する研究	三重大学大学院工学研究科	秋山 亨
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
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
フッ化物イオン認識によるウレア基修飾ポリ(パラ-フェニレン)レセプターからくる蛍光出力の振電スイッチング	北海道大学大学院工学研究科	佐藤信一郎
剪断流下の脂質膜系における構造形成	東京大学物性研究所	芝 隼人
タンパク質と基質分子の結合自由エネルギー解析	金沢大学理工研究域	川口 一朋
簡単な分子の光化学過程の理論的研究	新潟大学自然科学系	徳江 郁雄
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
有機化合物における置換基効果の微視的起源	鳥取大学大学院工学研究科	早瀬 修一
6員環構造を持つナノ物質の第一原理計算	金沢大学理工研究域	斎藤 峯雄
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
分子性結晶における光誘起相転移の理論的研究	高エネルギー加速器研究機構	岩野 薫
低酸化数ホウ素化合物の酸化還元挙動および含ホウ素 PBP 配位子を有する金属錯体群の反応性の解明	中央大学理工学部	山下 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
分子性液体に関する計算機シミュレーション	岐阜大学工学部	寺尾 貴道
5d 金属を含む多核金属錯体の電子状態	岐阜大学工学部	海老原昌弘
有機ラジカルの電子状態の ab initio MO 計算	奈良女子大学大学院自然科学系	竹内 孝江
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
芳香族アルコール溶媒和クラスターにおける励起状態プロトン移動反応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
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	筑波大学数理物質系	前島 展也
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

薬物リード化合物創出のための分子シミュレーション	(独)産業技術総合研究所	亀田 倫史
特異な機能を有する結晶分子の量子化学的研究	横浜国立大学大学院工学研究院	河野 雄次
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
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
ドーピングされたグラフェンの構造とその性質	東京大学大学院理学系研究科	今村 岳
超臨界水の振動スペクトル解析	徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部	吉田 健
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
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
酸化還元ユニットを有するキラルバイ共役系分子の開発	北里大学理学部	長谷川真士
三次元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
かさ高い芳香族アジド基が有する高いクリック性に関する研究	東京医科歯科大学生体材料工学研究所	吉田 優
シクロデキストリンによる β -ラクタム系抗生物質の包接現象のエネルギー解析	近畿大学生物理工学部	藤澤 雅夫
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	千葉工業大学工学部	松澤 秀則
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タンパク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
push-pull 型スターバースト発色団の構造と電子状態の解明	静岡大学理学部	三井 正明
異方的な場における, 分子の磁場や光応答機構の解析, および新規理論の構築	東京工業大学大学院生命理工学研究科	中田 浩弥
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
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
化学反応の ab initio 計算による研究	愛媛大学理工学研究科	長岡 伸一
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
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
分子軌道法による反応予測を基盤とする新有機反応の開発	東京大学大学院理学系研究科	中村 栄一
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
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
タンパク質中のアミノ酸間情報伝達経路の解析	名古屋大学大学院理学研究科	倭 剛久
金属クラスターの構造および反応過程の理論的解析	豊田工業大学クラスター研究室	市橋 正彦
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
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
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
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
第一原理及び古典分子動力学計算による Si ナノシート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
光解離反応の量子制御に関する理論的研究	(独)日本原子力研究開発機構	黒崎 譲
生体分子および溶媒の構造機能相関の解明	立命館大学生命科学部	高橋 卓也
理論計算による触媒機能の解明	星薬科大学薬学部	坂田 健
非古典的相互作用を含むタンパク質 - 薬物間相互作用の FMO-D 法を用いた解析計算スキームの開発	近畿大学薬学部	中村 真也
ペプチドの水溶液中における安定性の圧力依存性	立命館大学薬学部	加藤 稔
有機ケイ素化合物の特異な反応性の解明と予測	東京工業大学大学院理工学研究科	川内 進
酵素加水分解における酵素 - 基質相互作用に関する研究	明星大学理工学部	松本 一嗣
大規模系の高精度電子状態計算手法の開発と応用	早稲田大学高等研究所	小林 正人
糖質の構造解析	(財)野口研究所	山田 一作
創薬を指向する生体分子系の分子動力学計算	東京大学先端科学技術センター	山下 雄史
腸管出血性大腸菌(O-157)感染症に対する薬剤の開発にかかわる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
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
凝縮重電子系の量子化学計算: 共役系および生体金属化合物の電子状態解析	分子科学研究所	柳井 毅
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
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
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
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

フェムト秒レーザー電場をもちいた気相分子クラスターにおけるダイナミクスの研究	分子科学研究所	水瀬 賢太
大規模量子化学エネルギー微分計算プログラムの開発	分子科学研究所	石村 和也
ポウル型共役化合物の物性調査, および金属クラスター触媒の活性評価研究	分子科学研究所	櫻井 英博
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
タンパク質 - リガンド複合体形成の自由エネルギー計算	(独)日本原子力研究開発機構	河野 秀俊
シトクロム酸化酵素におけるリガンドの結合様式および相互作用機構の理論解析	兵庫県立大学大学院生命理学研究科	舘野 賢
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	長浜バイオ大学バイオサイエンス学部	中村 卓
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 太郎
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 2	北里大学理学部	米田 茂隆
対イオンによる DNA の局所構造変化がタンパク質との相互作用や凝集に及ぼす影響	大分大学医学部	谷川 雅人
カリウムチャネルでのイオン透過におけるタンパク質と水分子の役割, およびイオン選択性の発現機構の解明	福井大学医学部	老木 成稔
KODA による開花のメカニズムについて	名城大学情報センター	寺田 幸正
キラル秩序を有するシッフ塩基金属錯体の CD スペクトルの解釈	東京理科大学理学部	秋津 貴城
縮合多環芳香族化合物に基づく有機発光材料および有機半導体材料の開発	東京農工大学大学院工学研究科	中野 幸司
計算科学的アプローチによる肺炎球菌ケトライド耐性における構造学的メカニズムの解明	千葉大学大学院薬学研究院	佐藤 慶治
非平面有機半導体の分子設計	分子科学研究所	鈴木 敏泰
アミノ酸の準安定平衡状態の研究	早稲田大学国際教養学部	稲葉 知士
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
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
イオン性分子及び糖類の水和状態に関する分子動力学計算	東京大学大学院工学系研究科	川辺 駿佑
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
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	東京薬科大学生命科学部	宮川 毅
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
芳香族分子と金属イオン・極性分子における電子状態と光誘起反応の量子化学計算ならびに生体分子系における分子認識の分子動力学及び大規模量子化学計算による解析	北里大学一般教育部	江川 徹
動的螺旋分子における螺旋反転反応の理論的研究	明治大学理工学部	村岡 梓
水, 氷, クラステート水和物の相転移メカニズムに関する理論研究	分子科学研究所	望月 建爾
多孔性窒化炭素表面と有機分子の相互作用に関する理論研究	東京大学大学院総合文化研究科	尾中 篤
有機ケイ素化合物の構造と性質	群馬大学理工学研究院	久新 荘一郎
多元素クラスターの赤外分光のための基礎研究における赤外スペクトルの検討	東京大学大学院総合文化研究科	工藤 聡
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
有機金属錯体の結合性の解明	分子科学研究所	村橋 哲郎
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
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
低原子価ゲルマニウム化学種の結合した遷移金属錯体の合成と構造	東北大学大学院理学研究科	渡邊 孝仁
小分子活性化を可能とする遷移金属錯体の分子設計及び構造に関する理論計算	東京工業大学大学院理工学研究科	石田 豊
ランタノイド錯体の溶液中構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	奥村 森
DFT 計算によるジメチルジヒドロピレン共役遷移金属錯体の基底および励起状態に関する研究	名古屋大学大学院理学研究科	邨次 智
量子化学計算による金属酵素モデル錯体の反応機構の解析	九州大学先端物質化学研究所	太田 雄大
非線形, 非対称単一分子電気特性研究のための構造物性相関の研究	大阪大学大学院理学研究科	小川 琢治
クラスターイオンの幾何構造および移動度計算	東北大学大学院理学研究科	大下 慶次郎
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
時計タンパク質複合体の構造解析	名古屋大学遺伝子実験施設	石浦 正寛
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
光触媒の理論的研究	(独)物質・材料研究機構	梅澤 直人
緩和モード解析を用いた高分子溶融体の線形粘弾性の評価手法の開発	慶應義塾大学大学院理工学研究科	岩岡 伸之
量子化学計算によるイオン伝導解析	三重大学大学院工学研究科	大西 拓
クラウンエーテルおよびペプチドナノリングを用いたアミノ酸キラリティー認識機構の第一原理電子論	早稲田大学理工学術院	武田京三郎

Julia-Kocienski 反応の反応機構の解明と立体選択的オレフィン化試薬の開発	岐阜大学工学部	安藤 香織
腸管出血性大腸菌 (O-157) 感染症に対する薬剤の開発にかかわる分子動力	国立国際医療研究センター	尾又 一実
学シミュレーション		
酸化還元電位に依存したプロテインジスルフィドイソメラーゼのドメイン	分子科学研究所	加藤 晃一
再配向機構の解明		
大規模分子動力学シミュレーションによる脂質膜とタンパク質の相互作用	京都大学化学研究所	松林 伸幸
の研究		
水素結合性液体中における振動ダイナミクス	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
光誘起機能性物質の機能性解明研究	新潟大学研究推進機構	古川 貢
鉄触媒によるオレフィン重合反応の機構解析	東京大学大学院工学系研究科	伊藤 慎庫
量子多成分系分子理論の開発とその応用	横浜市立大学大学院生命ナノシステム科	立川 仁典
	学研究科	
銅含有亜硝酸還元酵素に関する計算化学研究	京都府立大学大学院生命環境科学研究科	リントゥルト 正美
近接場光と分子の相互作用	慶應義塾大学大学院理工学研究科	岩佐 豪
有機ラジカル液晶の分子間磁気相互作用の起源	大阪大学大学院基礎工学研究科	内田 幸明
分子性導電・磁性材料に関する理論的研究	京都大学低温物質科学研究センター	中野 義明
量子化学文献データベースの開発	首都大学東京大学院理工学研究科	波田 雅彦
GEMB (Generalized-Ensemble Molecular Biophysics) プログラムの開発	分子科学研究所	奥村 久士
界面分光計算ソフトウェア Calnos の開発	東北大学大学院理学研究科	森田 明弘
(計算物質科学イニシアティブ利用枠)		
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
凝縮分子科学系における揺らぎとダイナミクス	名古屋大学大学院工学研究科	笹井 理生
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
ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション	名古屋大学大学院工学研究科	尾形 修司
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
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
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	東京大学大学院工学系研究科	山下 晃一
にむけた大規模数値計算		
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
合金凝固組織の高精度制御を目指した dendroライト組織の大規模数値計算	北海道大学大学院工学研究院	大野 宗一
超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化	東北大学金属材料研究所	西松 毅

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 ~ '06		'07		'08		'09		'10		'11		'12		'13		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	103	828	2	29	2	22	1	28	0	0	1	13	1	21	2	27	人数： 登録人数
協力研究	3,644	5,027	91	219	90	200	119	412	122	316	108	292	123	329	64	173	"
招へい 協力研究	195	197	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
所長 招へい	3,863	3,863	132	132	159	159	148	148	148	148	78	78	93	93	96	96	人数： 旅費支給者
研究会	311	5,131	9	198	4	105	5	110	6	137	4	105	10	207	10	154	"
若手研究会等	-	-	-	-	1	12	1	10	1	14	1	11	1	19	1	21	"
岡崎コンファ レンス	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	29	1	18	"
施設利用 I	1,796	4,053	59	120	72	177	60	179	66	166	98	266	60	254	36	105	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)	4,444	14,538	145	595	147	656	171	676	170	666	190	668	190	813	185	711	"
協力研究 (ナノプラット)	333	677	41	107	55	130	36	86	35	94	25	64	15	51	50	123	"
施設利用 (ナノプラット)	162	343	19	69	31	103	39	107	25	89	20	35	52	150	132	395	"
合計	14,851	34,657	498	1,469	561	1,564	580	1,756	573	1,630	525	1,532	546	1,966	577	1,823	
経費	545,194		-		-		-		-		-		-		-		千円

* 施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用

('13 年度の数値は, 2014.1.31 現在)

* ナノプラット (ナノテクノロジープラットフォーム事業) は '13 年度から実施。'02 年度から '06 年度はナノテクノロジー総合支援事業, '07 年度から '12 年度までナノテクノロジー・ネットワーク事業。

分子科学研究所 UVSOR 共同利用研究実施一覧

年度 項目	'85 ~ '06		'07		'08		'09		'10		'11		'12		'13		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	2	2	人数： 旅費支給者
研究会	34	640	2	55	2	18	2	44	1	1	2	68	4	63	0	0	"
施設利用	2,530	12,431	145	678	156	708	147	660	140	659	139	682	136	706	141	732	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	2,989	14,675	161	747	159	727	149	704	141	660	145	754	146	775	143	734	
経費	230,477		-		-		-		-		-		-		-		千円

('13 年度の数値は , 2014.1.31 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） （単位：人）

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
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
09	5	5	65	3	134	212
10	3	7	64	8	71	153
11	2	3	32	11	94	142
12	2	2	6	32	202	244
合計	71	51	441	156	1,149	1,868

* 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） （単位：人）

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
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
09	10	2	9	19	47	51	4	70	212
10	16	3	13	18	22	25	1	55	153
11	15	2	7	17	33	17	0	51	142
12	8	4	13	28	26	85	0	80	244
合計	217	59	121	187	305	348	29	602	1,868

表3 海外からの研究者(2013年度)

1. 外国人運営顧問			
WOLYNES, Peter	アメリカ	ライス大学教授	
2. 日本学術振興会招へい外国人研究者等			
DHITAL, Raghu Nath	ネパール	分子科学研究所研究員	'13.10. 1-'15. 9.30
3. 国際共同研究			
KHOURY ATHIEH, Bruno	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'13. 4. 1-'13. 8.31
LE GOFF, Florian	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'13. 4. 1-'13. 8.31
LI, Ke	中国	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'13. 4. 1-'13. 8.31
THAMMAPORN, Ratshpa	タイ	カセサート大学大学院大学院生	'13. 4. 1-'13. 7.23
LONG, Chen	中国	北京理工大学大学院大学院生	'13. 4. 1-'14. 3.31
FEI, Xu	中国	中山大学(中国)大学院生	'13. 4. 1-'14. 3.31
ANSARI, Shaz Ali	インド	Indian Institute of Technology 大学院生	'13. 5. 8-'13. 7.10
SINGH, Priyanka	インド	Central Drug Research Institute(CDRI) 大学院生	'13. 5.10-'13. 8. 7
AGRAWAL, Meghdeep	インド	Indian Institute of Technology 大学院生	'13. 5.20-'13. 7.24
HARAN, Gilad	イスラエル	Weizmann Institute of Science 教授	'13. 5.24-'13. 5.29
CIOFINI, Ilaria	イタリア	フランス国立パリ高等化学学校准教授	'13. 5.30-'13. 6. 4
BOUSQUET, Diane	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'13. 5.30-'13. 6. 4
LABAT, Frederic	フランス	フランス国立パリ高等化学学校助教	'13. 5.31-'13. 6. 4
LIU, Chao	中国	Wuhan Univ. 博士研究員	'13. 6. 1-'13. 8.31
THONGPAEN, Jompol	タイ	Mahidol University 大学院生	'13. 6. 1-'13. 9.30
CHIOU, Jan-Wern	台湾	高雄大学准教授	'13. 6.23-'13. 6.29 '13. 8.25-'13. 8.31 '13.11.21-'13.11.28
WANG, Bo-Yao	台湾	淡江大学博士研究員	'13. 6.23-'13. 6.30 '13. 8.25-'13. 8.31
WANG, Yu-Fu	台湾	淡江大学大学院生	'13. 6.23-'13. 6.30 '13.10. 1-'14. 3.31
HARDAL, Ali Umit Cemal	トルコ	Koc University 大学院生	'13. 7. 1-'13. 9.30
HITCHCOCK, Adam	カナダ	McMaster University 教授	'13. 7.10-'13. 7.27 '14. 1.25-'14. 2.12
QIN, Zhisheng	中国	McMaster University 大学院生	'13. 7.22-'13. 8. 6 '13. 9.16-'13. 9.23 '13.12. 5-'13.12.23
SICHELSCHMIDT, Jorg	ドイツ	マックスプランク個体化学物理研究所教授	'13. 7.29-'13. 8. 4
SCHEFFLER, Marc	ドイツ	Physikalisches Institute, Universitat Stuttgart 准教授	'13. 7.29-'13. 8. 4
WNAG, Yu-Fu	台湾	淡江大学大学院生	'13. 8.25-'13. 8.31
PONG, Way-Faung	台湾	淡江大学教授	'13. 8.25-'13. 8.29 '13.11.17-'13.11.25
FLESCH, Roman	ドイツ	ベルリン自由大学助教	'13. 9. 8-'13. 9.16 '14. 2.16-'14. 2.22
RUEHL, Eckart	ドイツ	ベルリン自由大学教授	'13. 9. 8-'13. 9.17 '14. 2.16-'14. 2.24
KUECHLER, Sarah	ドイツ	ベルリン自由大学博士研究員	'13. 9. 9-'13. 9.13 '14. 2.17-'14. 2.22
LIN, Ming-Wei	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 助教	'13. 9.24-'13. 9.28 '13.12. 2-'13.12. 6
HSU, Yao-Chen	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 准教授	'13. 9.24-'13. 9.28
SHIU, Hung-Wei	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 准教授	'13. 9.24-'13. 9.28 '13.12. 2-'13.12. 6
LAI, Yu-Ling	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 非常勤研究員	'13. 9.24-'13. 9.28 '13.12. 2-'13.12. 6
TUNGJITGUSONGUN, Vithawas	タイ	Mahidol University 大学院生	'13.10. 1-'13.12.29
JUNG, Sung Won	韓国	浦項工科大学(POSTECH) 大学院生	'13.10.10-'13.10.26

SON, Yeong Seop	韓国	浦項工科大学 (POSTECH) 大学院生	'13.10.10-'13.10.19
ARRUA, Ruben Dario	オーストラリア	タスマニア大学博士研究員	'13.10.14-'13.10.19
KIM, Hyo Sung	韓国	浦項工科大学 (POSTECH) 学部学生	'13.10.17-'13.10.26
WANG, Hsai-tsu	台湾	National Tsinghua University 大学院生	'13.11.17-'13.11.28
SHIN, Woojong	韓国	浦項工科大学 (POSTECH) 大学院生	'13.11.17-'13.11.28
HAN, Sang Wook	韓国	浦項工科大学 (POSTECH) 教授	'13.11.22-'13.11.30
CHANG, Chiao-Kai	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 大学院生	'13.12. 2-'13.12. 6
CHIOU, Guan-Chiun	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 大学院生	'13.12. 2-'13.12. 6
EBERLE, Fabian	ドイツ	ベルリン自由大学大学院生	'14. 1. 6-'14. 3.16
ZHU, Xiaohui	中国	McMaster University 大学院生	'14. 1.25-'14. 2. 6
ROSENDAHL, Scott	カナダ	McMaster University 博士研究員	'14. 1.25-'14. 2. 9
YAMAMOTO, Kenji	日本	ベルリン自由大学大学院生	'14. 2.16-'14. 2.22
4 . 所長招へい協力研究員			
大坪 嘉之	フランス	Synchrotron SOLEIL 博士研究員	'13. 3.30-'13. 4. 3
熊谷 崇	ドイツ	Fritz-Haber-Institute 学振海外特別研究員	'13. 3.31-'13. 4. 2
FORTAGH, Jozsef	ドイツ	Universitat Tübingen 教授	'13. 4.29-'13. 5. 1
STEPHAN, Thurmer	ドイツ	Helholtz-Zentrum 博士研究員	'13. 5. 3-'13. 5. 8
柴田 幹大	アメリカ	MAX Planck Florida Institute for Neuroscience 博士研究員	'13. 5. 4-'13. 5. 9
岡崎 圭一	日本	Max-Planck Institute of Biophysics 博士研究員	'13. 8.31-'13. 9. 3
森 俊文	日本	Stanford University 博士研究員	'13. 8.31-'13. 9. 5
WALES, David	イギリス	University of Cambridge 教授	'13.11. 9-'13.11.14
小笠原 寛人	アメリカ	SLAC 国立加速器研究所スタッフサイエンティスト	'13.11.29-'13.12. 2
HERNANDEZ, Rigoberto	アメリカ	Georgia Institute of Technology 教授	'13.12. 8-'13.12.10
5 . 特別訪問研究員			
KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika	スリランカ	千葉大学特任助教	'13. 4. 1-'14. 3.31
WEI, Hao	中国	上海交通大学准教授	'13.11.21-'14. 3.31
6 . 招へい研究員			
岡崎 圭一	アメリカ	National Institutes of Health LCP 研究員	'13. 4. 1-'13. 4. 1
SHAH, Lawrence	アメリカ	CREOL The College 助教	'13. 4. 2-'13. 4. 9
CHIN, See Leang	カナダ	Lavaal University 教授	'13. 4. 3-'13. 4. 6
RICARDSON, Martin	アメリカ	CREOL The College 教授	'13. 4. 3-'13. 4. 7
WOESTE, Ludger	ドイツ	ベルリン自由大学教授	'13. 4. 3-'13. 4. 7
MUKHERJEE, Debashis	インド	Indian Association for the Cultivation of Science Emeritus Professor	'13. 4. 8-'13. 5.11
SINHA, Debalina	インド	Indian Association for the Cultivation of Science 大学院生	'13. 4. 8-'13. 5.11
SCHLAU-COHEN, Gabriela S.	アメリカ	Stanford University 博士研究員	'13. 4.12-'13. 4.18
BIEGERT, Jens	スペイン	ICFO-The Institute of Photonics Sciences 教授	'13. 4.26-'13. 4.27
GUPTA, Sreenath	アメリカ	Argonne National Laboratory 研究員	'13. 4.26-'13. 4.27
森 俊文	アメリカ	University of Wisconsin その他	'13. 4.29-'13. 5. 3
KOCH, Christiane	ドイツ	University of Kassel Theoretisch 教授	'13. 5. 7-'13. 5. 7
HANNONGBUA, Supa	タイ	Kasetsart University 教授	'13. 5.23-'13. 5.24 '13. 5.24-'13. 5.27
古賀 信康	アメリカ	University of Washington 特別研究員	'13. 6.18-'13. 6.19
斉田 謙一郎	イギリス	University of Leeds その他	'13. 6.24-'13. 6.28
KUBECEK, Vaclav	チェコ	Czech Technical University 教授	'13. 7. 7-'13. 7. 9
CAMMI, Roberto	イタリア	Universita' di Parma 教授	'13. 7.15-'13. 7.28
DENLINGER, Jonathan	アメリカ	Lawrence Berkeley National Laboratory 主任研究員	'13. 8. 2-'13. 8. 4
KIM, Changyoung	韓国	Yonsei University 教授	'13. 8. 2-'13. 8. 5
瀧本 哲也	韓国	Hanyang University 准教授	'13. 8. 2-'13. 8. 4
JO, Jihee	韓国	Chosun University 学部学生	'13. 8.11-'13. 8.24 '14. 1.26-'14. 2.14
LIM, Jong Kuk	韓国	Chosun University 助教	'13. 8.11-'13. 8.24 '14. 1.26-'14. 2.14
WANG, Hsai-tsu	台湾	National Tsing Hua University 大学院生	'13. 8.25-'13. 9. 2

TI, Tee Jia	マレーシア	University Malaya 大学院生	'13. 9.29-'13.11.15 '13.11.16-'13.12.27
IMPENG, Sarawoot	タイ	Kasetsart University 大学院生	'13. 9.30-'13.11.15 '13.11.16-'13.12.29
LI, Binbin	シンガポール	Nanyang Technological University 大学院生	'13. 9.30-'13.11.15 '13.11.16-'13.12.30
YEH, Tien Tien	台湾	National Chiao Tung University 大学院生	'13.10. 1-'13.11.15 '13.11.16-'13.12.29
SALEH, Muhammad	インドネシア	University Gadjah Mada 大学院生	'13.10. 3-'13.11.15 '13.11.16-'13.12.31
JUNG, Sung Won	韓国	Pohang University of Science and Technology 大学院生	'13.10.10-'13.10.26
DALAGAN, Juliet	フィリピン	Xavier University 助教	'13.10.12-'13.11.15 '13.11.16-'13.12.15
CHINAPANG, Pondchanok	タイ	Chulalongkorn University 大学院生	'13.10.13-'13.11.30 '13.12. 1-'14. 1.31 '14. 2. 1-'14. 4. 1
KHONGPRACHA, Pipat	タイ	Kasetsart University 講師	'13.10.23-'13.11.23 '13.11.24-'13.12.30
安宅 憲一	ドイツ	ベルリン自由大学主幹研究員	'13.10.23-'13.10.24
PANDUNGROS, Panuwat	タイ	Chulalongkorn University 講師	'13.10.29-'13.12.16
THEODOR, Agapie	アメリカ	California Institute of Technology 教授	'13.10.29-'13.10.30
OON, Han Loke	オーストラリア	The University of Western Australia 大学院生	'13.11. 4-'13.12.22
TRAN, Uyen	ベトナム	Ho Chi Minh University of Technology 大学院生	'13.11.14-'13.12.16
LIU, Wenting	中国	Shanghai University 大学院生	'13.11.15-'13.12.31
HIERSO, Cyrille	フランス	University of Burgundy 教授	'13.11.19-'13.11.21
RULISEK, Lubomir	チェコ	Institute of Organic Chemistry and Biochemistry グループリーダー	'13.12. 6-'13.12. 9
SRNEC, Martin	チェコ	Institute of Organic Chemistry and Biochemistry 研究員	'13.12. 6-'13.12. 9
KUNDIG, Peter	スイス	University of Geneva 教授	'13.12.12-'13.12.12
EBERLE, Fabian	ドイツ	ベルリン自由大学大学院生	'14. 1. 6-'14. 3.16
LINDLE, Dennis	アメリカ	University of Nevada 教授	'14. 2. 5-'14. 2.12
PIANCASTELLI, Novella	フランス	Universite Pierre et Marie Curie 教授	'14. 2. 5-'14. 2.12
LABLANQUIE, Pascal	フランス	Universite Pierre et Marie Curie 准教授	'14. 2.14-'14. 3. 2
KEDEM, Yaron	デンマーク	Nordic Institute of Theoretical Physics 研究員	'14. 2.18-'14. 2.26
KNEE, George	イギリス	University of Oxford 大学院生	'14. 2.18-'14. 3. 2
WU, Shengjun	中国	Nanjing University 教授	'14. 2.20-'14. 2.23
ZHANG, Yu-Xiang	中国	Xidian University 大学院生	'14. 2.20-'14. 3. 2
ZHU, Xuanmin	中国	University of Science and Technology of China 研究員	'14. 2.20-'14. 3. 2
7 . 岡崎コンファレンス			
BAUMERT, Thomas	ドイツ	Universitaet Kassel 教授	'13.10.29-'13.11. 3
SUSSMAN, BenjaminJ.	カナダ	National Research Council Canada 准教授 (レベル)	'13.10.29-'13.11. 3
AVERBUKH, Ilya	イスラエル	Weizmann Institute of Science 教授	'13.10.28-'13.11. 3
CAO, Jianshu	アメリカ	Massachusetts Institute of Technology 教授	'13.10.29-'13.11. 3
KOSLOFF, Ronnie	イスラエル	Hebrew University of Jerusalem 教授	'13.10.28-'13.11. 3
KREMS, Roman	カナダ	University of British Columbia 教授	'13.10.30-'13.11. 3
LEVIS, Robert J.	アメリカ	Temple University 教授	'13.10.29-'13.11. 3
MILNER, Valerie	カナダ	University of British Columbia 助教	'13.10.30-'13.11. 3
百瀬 孝昌	カナダ	University of British Columbia 教授	'13.10.30-'13.11. 3
WEIDEM_LLER, Matthias	ドイツ	University of Heidelberg 教授	'13.10.30-'13.11. 3
PACHON, Leonardo	カナダ	University of Toronto 助教	'13.10.29-'13.11. 3
NAREVICIUS, Edvardas	イスラエル	Weizmann Institute of Science 特任准教授	'13.10.28-'13.11. 3
NELSON, Keith	アメリカ	Massachusetts Institute of Technology 教授	'13.10.31-'13.11. 3

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)	2013. 9. 6	2018. 9. 5	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)	2012. 9.28	2016. 9.27	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	2010.11.29	2014.11.28	物理化学ディ ビジョン長	所長
中央研究院 原子與分子科学 研究所	台湾	分子科学研究所と中央研究 院原子與分子科学研究所と 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)	2011. 2.20	2014. 2.19	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	情報交流,共同研究,研究 交流,会議,シンポジウム, セミナーへの研究者派遣	2009.10.23	2014.10.22	校長	所長
インド科学振興 協会	イン ド	自然科学研究機構分子科学 研究所とインド科学振興協 会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)	2013. 3.20	2017. 3.19	代表	所長
ベルリン自由大 学	ドイ ツ	自然科学研究機構分子科学 研究所とベルリン自由大学 との分子科学分野における 共同研究に関する覚書	分子科学分野における学術 交流及び共同研究等の実施	2013. 6.21	2016. 6.20	学長	所長

(2013.12.31 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 年度から平成 23 年度まで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た。平成 24 年度開催の岡崎コンファレンスからは、応募の方式を見直し、分子研研究会等、他の共同研究と同時期に募集を行い、審査についても共同研究専門委員会で行うこととした。これに伴い、年度当り複数件の開催も、予算状況等により可能となる。平成 25 年度は下記の第 73 回岡崎コンファレンスを開催した。

会 議 名： 第 73 回岡崎コンファレンス

“Coherent and Incoherent Wave Packet Dynamics”

期 間： 2013 年 10 月 30 日(水) ~ 11 月 2 日(土)

場 所： 岡崎コンファレンスセンター

組織委員： Moshe Shapiro (ブリティッシュコロンビア大学), 大森賢治 (分子研), 大島康裕 (分子研)

内 容：

去る 2013 年 10 月 30 日 ~ 11 月 2 日に、岡崎市の岡崎コンファレンスセンターにおいて、標記国際会議が開催された。岡崎コンファレンスは、分子科学ならびに関連分野における中心的課題を集中して議論する場として分子研が主催するもので、研究所創設以来 30 有余年の歴史を有する。今回はカナダ British Columbia 大学の Peter Wall Institute for Advanced Studies と共催で開催された。同大学の Moshe Shapiro 教授は、会議の発案、予算獲得からプログラムの設定に至るまで強力なリーダーシップを発揮された。Shapiro 教授のご尽力が無ければ本会議が実現することは無かった。

量子の世界では、物質は波である。波は干渉して強め合ったり弱め合ったりする可干渉性(コヒーレンス)を持っている。物質の定常状態を表す定在波を固有関数と呼ぶが、固有関数を複数個重ね合わせると、それらが強め合う場所が時間とともに移動して行く状態が生まれる。これを波束と呼ぶ。時間発展する量子系を理解する為には、波束の時間発展を観測しなければならない。同様に制御する為には、波束の時間発展を制御する必要がある。本会議では、この波束の観測と制御に関連する最先端の研究動向について議論した。最近では、量子という概念は物理学だけではなく、化学、情報科学、生物学など様々な分野に波及している。なぜならレーザーを始めとする光技術の発展で実験が精緻化し、従来量子性とは無縁と思われていた自然現象で量子的な効果が認められつつあるからだ。例えば、化学反応を量子力学的な可干渉性を利用して制御する試みは 1980 年代から行われている。本会議の主催者の一人である Shapiro 教授は Toronto 大学の Paul Brumer とともに、共通の終状態に至る二つの異なる光励起過程が干渉することを利用して、分子の光解離反応を制御する手法を理論的に提案した。同時期に Chicago 大学の Stuart A. Rice とその共同研究者である David Tannor や Ronnie Kosloff らは、電子励起状態ポテンシャル上で運動する波束をレーザーパルスで他の電子状態に遷移させることによって光解離反応を制御する手法を理論的に提案した。コヒーレント制御と呼ばれるこれらの概念はその後のレーザー技術の発展によって実験的に実現された。今日では、ナノケルビンまで冷却された分子を対象に、同様の思想に基づくより精密な化学反応制御が試みられつつある。また、情報は紙や電子など物理

的な実体に乗って他所に伝わるが、この伝達物質の量子性をコヒーレント制御することによって、スパコンの1億倍以上高速なコンピューターや、盗聴が100%不可能な通信インフラなどを構築することができる。より最近では、光合成、視覚、渡り鳥の方角認知などの生物現象でも量子力学的なメカニズムが提唱されつつある。これらは時間発展する現象であることが多く、そこでの波束の時間発展を観測し制御することは、現象の理解と制御に大きな進展をもたらすと期待される。本会議では、そのような観測制御のための基盤技術の開発から、それらの応用までを幅広く議論した。例えば、上述の生物系において、量子力学的なコヒーレンスがどの程度重要な役割を果たしているのかについて、原子集団を用いたモデル系との対比などによって議論した。これらを通じて、量子力学と古典力学の境界における新しい世界観に基づく自然科学の新しい分野の創出を目指した。

招待講演者を以下に挙げる。

Prof. Shuji Akiyama (Institute for Molecular Science)

Prof. Ilya Averbukh (Weizmann Institute of Science)

Prof. Thomas Baumert (University of Kassel)

Prof. Jianshu Cao (Massachusetts Institute of Technology)

Prof. Akihito Ishizaki (Institute for Molecular Science)

Prof. Ronnie Kosloff (The Hebrew University of Jerusalem)

Prof. Roman Krems (The University of British Columbia)

Prof. Robert J. Levis (Temple University)

Prof. Valerie Milner (The University of British Columbia)

Prof. Takamasa Momose (The University of British Columbia)

Prof. Kazutaka Nakamura (Tokyo Institute of Technology)

Prof. Ed Narevicius (Weizmann Institute of Science)

Prof. Keith Nelson (Massachusetts Institute of Technology)

Prof. Yasuhiro Ohshima (Institute for Molecular Science)

Prof. Hiromi Okamoto (Institute for Molecular Science)

Dr. Leonardo Pachon (University of Toronto)

Dr. Benjamin Sussman (National Research Council, Canada)

Prof. Matthias Weidemüller (University of Heidelberg)

原子分子光物理学、ナノ科学、凝縮系物理学、生物科学など幅広い研究領域における世界トップレベルの研究者が、波束やコヒーレンスという観点から各々の分野の最先端について素晴らしい講演を行った。また、実験家と理論家がバランス良く配置されたプログラムは、様々な観点から分野横断的な議論を促進するのにとても役立った。ポスターセッションにおいても、同様の活発な議論が行われた。これらを通じて育まれた革新的なアプローチや創造的なコンセプトを以下にまとめる。

- 1) 分子回転の新しい観測制御スキーム、高強度レーザー誘起の分子解離やイオン化、分子振動を用いた高速情報処理、極低温分子の生成と衝突。
- 2) 極低温リョードベリ原子や光格子中の極低温分子を用いた多体物理の探求。

- 3) バルク固体やナノ物質中のプラズモン, コヒーレントフォノン, 光誘起相転移など電子や原子の集団運動の光制御。
 4) 光合成や概日リズムなど生体系におけるコヒーレンスの探求。

また本会議で展開された分野横断的な議論は、二つの異なる研究分野の融合の可能性を示した。例えば、極低温物理と超高速コヒーレント制御、量子光学と生物科学、量子情報処理と分子科学などの組み合わせである。研究者ネットワークという観点からは、カナダ、米国、ヨーロッパ、イスラエル、日本のトップ研究者間の共同研究を促進した点が意義深い。

本会議が大きな実りを得て終了した1ヶ月後、その中心的な役割を果たされた Shapiro 教授が他界された。Shapiro 教授はコヒーレント制御の創始者であり、これまで30年以上に渡って世界の物理化学を牽引して来られた。若手研究者を温かい目で見守りながら次世代の育成にも力を注がれた。本会議の招待講演者の中には Shapiro 教授の薫陶を受けた者が何人もいる。筆者も言葉に尽くせぬほどお世話になった。本会議は Shapiro 教授の最後のメッセージでもある。ここで育まれた新しい科学の芽を大きく育て、いつの日か Shapiro 教授のご功績に報いたい。

30th October (Wednesday)

9:20 – 9:30 Opening address by Director General of IMS, Iwao Ohmine

Session 1: Coherent manipulation of molecular motion

- 9:30 – 10:10 **Ilya Averbukh** (*Weizmann Institute of Science*)
 “Optics of a gas of coherently spinning molecules”
- 10:10 – 10:50 **Yasuhiro Ohshima** (*IMS*)
 “Coherent nonlinear optical manipulation of molecular vibration and rotation”
- 10:50 – 11:10 Coffee break
- 11:10 – 11:50 **Valery Milner** (*The University of British Columbia*)
 “Controlled creation, direct observation and study of molecular super rotors”
- 11:50 – 12:30 **Yehiam Prior** (*Weizmann Institute of Science*)
 “From individual to strongly coupled metallic nanocavities”
- 12:30 – 14:00 Lunch

Session 2: Coherent Control

- 14:00 – 14:40 **Thomas Baumert** (*University of Kassel*)
 “Nonperturbative coherent wavepacket dynamics in molecules”
- 14:40 – 15:20 **Robert J. Levis** (*Temple University*)
 “Strong field control of alkylphenones using the tunnel ionization launch state”
- 15:20 – 15:40 Coffee break
- 15:40 – 16:20 **Ronnie Kosloff** (*The Hebrew University of Jerusalem*)
 “Coherent control of hot and cold photoassociation”
- 16:20 – 17:00 **Benjamin Sussman** (*National Research Council, Canada*)
 “Ultrafast quantum processing in the vibronic states of molecules and solids”

31st October (Thursday)

Session 3: Ultracold physics and chemistry

- 9:30 – 10:10 **Matthias Weidemüller** (*University of Heidelberg*)
 “Dressing photons with Rydberg atoms—interacting polaritons, non-classical light and quantum transport of energy”
- 10:10 – 10:50 **Roman Krems** (*The University of British Columbia*)
 “Molecules in an optical lattice as a quantum simulator of polaron physics”
- 10:50 – 11:10 Coffee break
- 11:10 – 11:50 **Takamasa Momose** (*The University of British Columbia*)
 “Cold molecules towards coherent control”
- 11:50 – 12:30 **Ed Narevicius** (*Weizmann Institute of Science*)
 “TBA”
- 12:30 – Excursion (to Asuke Village; with lunch box)

1st November (Friday)

Session 4: Condensed-phase dynamics

9:30 – 10:10	Hiromi Okamoto (<i>IMS</i>) “Plasmon dynamics and chiralities investigated by optical nanoscopy”
10:10 – 10:50	Kazutaka Nakamura (<i>Tokyo Institute of Technology</i>) “Optical control of quasiparticles in a bulk solid”
10:50 – 11:10	Coffee break
11:10 – 11:50	Keith Nelson (<i>Massachusetts Institute of Technology</i>) “Molecular and collective coherent control”
11:50 – 12:30	Jianshu Cao (<i>Massachusetts Institute of Technology</i>) “Coherent energy transfer in light-harvesting: Symmetry, disorder, and noise”
12:30 – 14:00	Lunch
14:00 – 16:00	Poster
17:00 – 17:30	Attraction
18:00 – 20:00	Conference dinner

2nd November (Saturday)

Session 5: Complex systems

10:00 – 10:40	Shuji Akiyama (<i>IMS</i>) “The frontier in protein-clock system ~ How do organisms measure time? ~”
10:40 – 11:20	Akihito Ishizaki (<i>IMS</i>) “Electronic and vibrational wavepackets in photosynthetic energy transfer”
11:20 – 12:00	Leonardo Pachon (<i>University of Toronto</i>) “On the classical/quantum nature of excitonic energy transfer in multichromophoric systems”
12:00 – 12:10	Closing remarks

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年度の法人化の際に、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。平成24年度に見直しを行い、平成25年度より、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招聘、若手外国人研究者の招聘、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、平成19年度10件、平成20年度9件、平成21年度12件、平成22年度13件、平成23年度13件、平成24年度11件、本年度35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。

2013 年度実施状況

代表者	研究課題名	相手国
魚住 泰広	鉄ナノ触媒によるフロー反応の開発	カナダ
魚住 泰広	銅触媒による芳香族 C-H 結合空気酸化反応の機構研究	中国
小杉 信博	金属電析及び有機エレクトロクロミズムを理解するためのその場観測電気化学セルの開発	カナダ
小杉 信博	自己組織化ナノワイヤーと巨大ラッシュバ分裂	韓国
小杉 信博	細胞と皮膚による薬の摂取の研究 (ナノテク STXM)	ドイツ
小杉 信博	走査型透過 X 線顕微鏡によるモノリシックポリマーの評価 (ナノテク STXM)	オーストラリア
小杉 信博	バンドギャップ技術のための新規ハイブリッド二次元ナノシートの電子構造マッピング (ナノテク STXM)	台湾
小杉 信博	有機半導体デバイスの表面機能化と界面特性 (ナノテク STXM)	台湾
横山 利彦	新奇ハイブリッド二次元ナノシートの磁気特性 (ナノテク XMCD)	台湾
繁政 英治	高分解能共鳴オージェ電子分光法による内殻励起分子ダイナミクスの研究	フランス
大森 賢治	超高速量子シミュレーターの開発	フランス・ドイツ
大森 賢治	極低温分子の超高速光会合	ドイツ
大森 賢治	バルク固体の超高速光制御	ドイツ
江原 正博	多配置クラスター展開法の開発と応用	インド
江原 正博	SAC-CI 法による電子移動指標	フランス
岡本 裕巳	ナノフォトニック物質の光電場構造・ダイナミクス解析	イギリス
加藤 晃一	自己組織化ナノ内面の化学	韓国
加藤 晃一	糖鎖 - 糖鎖相互作用にかかわる N 型糖鎖の構造解析	アメリカ
加藤 晃一	NMR を利用した N 型糖鎖の立体構造解析	ドイツ
加藤 晃一	神経幹細胞における糖鎖の機能解析	アメリカ
加藤 晃一	NMR を利用した Glucosidase II MRH ドメインと N 型糖鎖の相互作用解析	アルゼンチン アメリカ
加藤 晃一	阻害剤添加による HIV 逆転写酵素の構造・ダイナミクスへの影響	タイ
加藤 晃一	NMR 法を利用したガングリオシド糖鎖間相互作用の解析	イタリア
加藤 晃一	超高磁場 NMR を活用したタンパク質翻訳後修飾の研究	韓国
加藤 晃一	糖鎖バイオマーカーの構造解析	インド
加藤 晃一	糖脂質膜上におけるアミロイド タンパク質の構造変化の生物物理学的解析	イギリス
加藤 晃一	アルツハイマー病におけるタウタンパク質のアミロイド凝集阻害化合物の開発	イスラエル
加藤 晃一	質量分析による糖鎖の構造解析	台湾
加藤 晃一	植物で発現させた糖タンパク質の糖鎖構造解析	韓国
加藤 晃一	味覚修飾タンパク質クルクリンの機能発現機構の解明	アメリカ
斉藤 真司	過冷却水のガラス転移	インド
斉藤 真司	水の分子内振動の揺らぎの解析	アメリカ
江 東林	多孔性高分子を用いた蓄電システムの構築	オーストラリア
平等 拓範	固体レーザーの開発	スペイン・チェコ 中国・アメリカ
古谷 祐詞	糖輸送タンパク質の赤外分光	スペイン・ドイツ

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書が交わされ、日韓合同シンポジウムや韓国研究者の分子科学研究所への招聘と研究交流が行われてきた。またこの覚書は2004年から4年ごとに更新を行っている。なお、韓国側の組織体制の都合上、この覚書の中の日韓合同シンポジウムに関しては、2006年に分子科学研究所と韓国化学会物理化学ディビジョン（Physical Chemistry Division, The Korean Chemical Society）との間のもので変更して更新されている。

日韓合同シンポジウムは第1回を1984年5月に分子科学研究所で開催して以来、2年ごとに日韓両国間で交互に実施している。最近では、2005年3月に第11回合同シンポジウム「分子科学の最前線」を分子科学研究所で開催した。このシンポジウムは、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。その後、第12回シンポジウム「光分子科学の最前線」（済州島、2007年7月）、第13回シンポジウム「物質分子科学・生命分子科学における化学ダイナミクス」（淡路島、2009年7月）、第14回シンポジウム“New Visions for Spectroscopy & Computation: Temporal and Spatial Adventures of Molecular Science”（釜山、2011年7月）を開催してきた。本年度、第15回シンポジウム“Hierarchical Structure from Quantum to Functions of Biological Systems”を7月に神戸で開催し、日本、韓国からそれぞれ12、11件の講演が行われた。これらの継続的なシンポジウムを通して、日韓両国からの研究者による最新の研究が紹介されるとともに、活発な討論、研究交流が進められている。

3-4-5 分子研国際インターンシッププログラム

これまでは院生などの長期研修生（インターン）の受け入れを分子研国際共同プログラムや外部資金別に実施してきたが、外部資金がいつもあるわけではなく、長期的に研究所が実施する基幹プログラムとして位置付ける方向で平成24年度に見直しを行い、平成25年度より分子研国際インターンシッププログラム（IMS-IIP）として事業化することにした。平成25年度の実績は表にあるように31名の受け入れを行った。なお、半年以上の研修生については特別共同利用研究員として受け入れてRA雇用をおこなうことにしている。EXODASS事業での受け入れは3ヶ月未満を原則としている。サマースクール、ウィンタースクール等は1週間程度である。それ以外は最長半年の受け入れを可能としている。現在はすべて分子研国際共同の予算を運用しているが、今後、可能なものについては、外部資金への応募を進めながら、実施する予定である。なお、ここでは分子研国際共同研究、日韓共同研究に参加している院生等は除外している。

	フランス	ドイツ	中国	台湾	インド	タイ	シンガポール	ベトナム	フィリピン	マレーシア	インドネシア	トルコ	オーストラリア	合計
協定に基づくもの	3	1				3(1)								7(1)
協定準備中のもの					1									1
その他の共同研究			2(2)	1(1)	2							1		6(3)
サマースクール				5										5
EXODASS			1	1		4	1	1	1	1	1		1	12
合計	3	1	3(2)	7(1)	3	7(1)	1	1	1	1	1	1	1	31(4)

() は内数で半年以上の長期インターン（特別共同利用研究員としてRA雇用しているもの）

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 ~ 2003	04	05	06	07	08	09	10	11	12	13
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									1	
茨城大学								1	1		
筑波大学	2								1		
宇都宮大学	4										
群馬大学	1										
埼玉大学	2										
千葉大学	5										
東京大学	31				2	4	3	3	1	1	
東京工業大学	40	2									1
お茶の水女子大学	6										
横浜国立大学	1								1	1	
金沢大学	11										
新潟大学	4			1	1						
福井大学	10										
信州大学	4							1	1		
岐阜大学	2										
静岡大学								2	2		
名古屋大学	80			3	4	6	6	4	11	12	11
愛知教育大学				1							
名古屋工業大学	15	2							2	1	
豊橋技術科学大学	37	2				1					
三重大学	7										
京都大学	40		2	1	1	1	2			1	1
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	26					1				2	2
神戸大学	5				1						
奈良教育大学	1										
奈良女子大学	4										
島根大学	1										
岡山大学	15		1								
広島大学	37	1									
山口大学	1										
愛媛大学	8	1									
高知大学	2										
九州大学	45								2	1	

佐賀大学	13										
長崎大学		2									
熊本大学	6										
宮崎大学	6										
琉球大学	1										
北陸先端科学技術 大学院大学	4	2							1		
首都大学東京	17	2		1							
名古屋市立大学	4		9	8	5	4	4	4	2	3	2
大阪市立大学	4										
大阪府立大学	2										
姫路工業大学	1										
学習院大学	1										
北里大学	2										
慶應義塾大学	9										
上智大学	1										
立教大学										1	1
中央大学								1			
東海大学	3										
東京理科大学	8	1									
東邦大学	3										
星薬科大学	1										
早稲田大学	12	1									
明治大学				1							
名城大学	4										
岡山理科大学			1								
* その他					3		1	1	3	6	6
計	586	17	14	16	17	17	17	17	27	30	24

* 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、さらに分子及び分子集合体の新しい機能の設計、創製を行うことを目的として教育・研究を一体的に行う。新規な機能測定法や理論的解析法の開発を含む機能分子科学の教育・研究指導を積極的に推進する。

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

担当教員（2013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	8	6	16
機能分子科学専攻	8	8	19
計	16	14	35

在籍学生数（2013年12月現在）単位：人

（年度別）

入学年度専攻		2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	計	定員
構造分子科学専攻	5年一貫	0	0	2	0	1	2	4	9	2
	博士後期	0	0	0	1	0	4	1	6	3
機能分子科学専攻	5年一貫	1	1	1	2	2	2	0	9	2
	博士後期	0	0	0	0	4	5	4	13	3

学位取得状況 単位：人

（年度別）

専攻	1991～2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	80(11)	3	7	5	5(1)	7	5	2	2	6	3	125(12)
機能分子科学専攻	65(10)	5(4)	4	5	1	4	3	5	1	3	3	99(14)

()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	1989～2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013
構造分子科学専攻	105	7	8	11(1)	8(1)	5(1)	5(3)	5(1)	1(1)	6(2)	5(4)
機能分子科学専攻	95	6	7	4	5(1)	5(2)	7(2)	4(2)	6(2)	8(2)	4

()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		
	1989-2011年度	2012年度	2013年度	1989-2011年度	2012年度	2013年度
中国	22	3	2	7	1	3
フランス				1		
ロシア				1		
バングラディッシュ	6			2		
インド	1			1		1
チェコ				1		

韓国	2					
ナイジェリア				1		
ネパール	2			3		
フィリピン				2		
ベトナム				2		
タイ				2	2	

大学別入学者数 単位：人

大学名等	構造分子科学専攻			機能分子科学専攻			計
	'89 ~ '11 年度	'12 年度	'13 年度	'89 ~ '11 年度	'12 年度	'13 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			9			16
東京農工大学	1						1
東京工業大学			2(2)	3			5(2)
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			3	1		6
信州大学	3			1			4
岐阜大学					1		1
静岡大学	2			1			3
名古屋大学	2	1		7			10
名古屋工業大学	1						1
豊橋技術科学大学	5			3(1)			8(1)
三重大学	1						1
京都大学	13(1)			16			29(1)
京都工芸繊維大学	1			1			2
大阪大学	5			4			9
神戸大学	4						4
奈良女子大学				1			1
鳥取大学	1				1		2
岡山大学	3	1		2			6
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	3(1)			2			5(1)
佐賀大学				1			1
熊本大学	3(1)						3(1)
鹿児島大学				2(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				4			4
大阪市立大学	2						2
大阪府立大学	2			2			4
兵庫県立大学	2			1			3
姫路工業大学	1			1			2
石巻専修大学	1						1
いわき明星大学						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			5			6
国際基督教大学				1			1
中央大学	1			1			2
東海大学	1				1		2
東京電機大学	1						1
東京理科大学	3			1			4
東邦大学	1(1)			2			3(1)
日本大学				2(1)			2(1)
法政大学	2		1(1)				3(1)
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	1		4
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
福岡大学			1(1)				1(1)
放送大学	1						1
*その他	34(2)	4(1)	1	24(3)	3	3	69(6)

* 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 (2013 年 12 月現在) 単位 : 人

現 職 身 分	構造分子科学専攻	機能分子科学専攻	合計
教 授	9	9	18
准教授	22	8	30
講 師	3	4	7
助 教	15	13	28
大学・公的機関等研究職	25	25	50
民間企業	29	22	51
その他	23	19	42
計	126	100	226

3-5-3 オープンキャンパス・分子研シンポジウム

2013年5月31日(金)午後～6月1日(土)午前まで分子研シンポジウム2013を開催し、引き続き1日(土)午後に分子研オープンキャンパス2013を開催した。本事業は全国の大学院生、学部学生及び若手研究者を対象に、分子研で行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、外部の方々にも広く認識していただくことを目的としている。2008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、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7回目になる。分子研関係者、総研大卒業生を中心に4研究領域から推薦された7名の先生方に講演をお願いした。参加登録者数は、所内は把握していないが、所外からは54名であった(オープンキャンパス・分子研シンポジウムいずれか一方のみを含む)。参加者構成は、沖縄から東北まで、学部学生16名、大学院生30名、教員・研究者6名、民間2名であり、あわせて合計54名であった。所内からも多くの参加を得た。

参加者数まとめ

	学部学生	大学院生	教員・その他	民間	合計
東北	1	1	0	0	2
関東	10	19	2	2	33
甲信越	0	0	1	0	1
東海	1	0	1	0	2
近畿	2	10	1	0	13
九州・沖縄	2	0	1	0	3
合計	16	30	6	2	54

3-5-4 夏の体験入学

2013年8月5日(月)から8日(木)までの4日間、分子科学研究所において、第10回総研大夏の体験入学を開催した。本事業は、他大学の学部学生・大学院生に対して、実際の研究室での体験学習を通じて、分子科学研究所(総研大物理科学研究科構造分子科学専攻・機能分子科学専攻)における研究環境や設備、大学院教育、研究者養成、共同利用研究などを周知するとともに、分子研や総研大への理解促進を目的としている。本事業は、総研大本部から「新入生確保のための広報事業」として例年、特定教育研究経費の予算補助を受けており、総研大物理科学研究科の主催行事として2004年から毎年開催している。広く全国の大学に広報活動を行い、参加者を募集したところ、定員を上回る応募を受け、選考の結果、28名の学生に参加いただいた。実施スケジュールは以下のとおりである。

8月5日(月): オリエンテーション, UVSOR と計算科学研究センターの見学
交流会

8月6日(火), 7日(水): 配属研究室にて研究体験

8月8日(木): 体験内容報告会

参加者の内訳，体験内容，受入研究室は以下の通りである。

	所属	学年	体験内容	対応教員
1	京都大学大学院	修士2年	光で分子を回してみよう！	大島 教授
2	東京工業大学大学院	修士2年	磁気共鳴法・磁性測定による機能性材料の電子状態(磁性・伝導性)の観測	中村 准教授
3	東京工業大学大学院	修士2年	有機トランジスタ	山本 教授
4	東京工業大学大学院	修士2年	膜タンパク質の分子機構に赤外分光計測で迫る！	古谷 准教授
5	東京工業大学大学院	修士2年	光を使って分子を制御しよう	大森 教授
6	福島大学大学院	修士2年	固体 NMR を用いた生体分子の構造研究に関する体験	西村 准教授
7	静岡大学大学院	修士1年	原子や分子の光電効果，理論計算による帰属を体験してみよう	小杉 教授
8	東邦大学	学部4年	有機半導体セキシチオフェンの合成	鈴木 准教授
9	日本大学	学部4年	クラスター触媒を用いた反応の一例を体験	櫻井 准教授
10	金沢大学	学部3年	多孔性と 共役を兼ね備える分子	江 准教授
11	東京大学	学部3年	分子動力学シミュレーションを学び体験する	奥村 准教授
12	東京工業大学	学部3年	金属酵素モデルを用いた酵素研究の体験	藤井 准教授
13	城西大学	学部3年	Pt ナノ触媒を用いた水中でのアルコール酸化反応	魚住 教授
14	城西大学	学部3年	有機金属クラスターを合成してみよう	村橋 教授
15	京都大学	学部3年	金属タンパク質を対象とした研究を体験してみよう	青野 教授
16	慶應義塾大学	学部3年	ナノの金属ロッドを作って波動関数を見る	岡本 教授
17	東北大学	学部3年	超高真空中での磁性超薄膜の作成と in situ 磁化測定	横山 教授
18	京都大学	学部3年	分子動力学シミュレーションを学び体験する	奥村 准教授
19	高知大学	学部2年	有機 EL 素子の作製と発光測定	平本 教授
20	東京大学	学部2年	レーザーから発生する光パルスの測定	藤 准教授
21	横浜市立大学	学部2年	タンパク質で生物時計を作ってみよう	秋山 教授
22	東京大学	学部2年	計算化学のハッキング体験学習	柳井 准教授
23	鳥取大学	学部2年	タンパク質で生物時計を作ってみよう	秋山 教授
24	東京大学	学部2年	金属酵素モデルを用いた酵素研究の体験	藤井 准教授
25	上智大学	学部2年	有機 EL 素子の作製と発光測定	平本 教授
26	慶應義塾大学	学部2年	有機金属クラスターを合成してみよう	村橋 教授
27	東京理科大学	学部1年	金属錯体で学ぶ人工光合成	正岡 准教授
28	徳島大学	学部1年	フロンティア軌道理論と量子化学計算	江原 教授

3-5-5 総研大アジア冬の学校

2013年12月10日(火)から13日(金)にかけて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及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)での開催は今回で10回目である。アジア諸国から定員を大幅に超える応募を受け、書類選考の結果、17名を受け入れた。その国籍別の内訳はタイ6名、インドネシア4名、シンガポール3名、中国2名、ベトナム1名、マレーシア1名である。また、EXODASS 招聘留学生在が12名、日本国内からの参加者が14名あり、講師を除く参加者は合計43名であった。今回は、テーマを“ Innovations and Challenges in Molecular Science: From Basics to Cutting-edge Researches ”とし、分子科学の基礎から最先端にわたる講義を行った。参加者によるポスター発表、EXODASS 招聘留学生によるミニシンポジウムも行われた。プログラムの詳細は下記のとおりである。

December 10

14:00-17:30: Registration
17:30-19:00: Welcome Reception

December 11

9:30-11:00: **Prof. Tetsuro Murahashi (IMS)**
Organometallic Complexes of Transition Metals: Structures and Reactivities
11:00-11:10: Break
11:10-12:40: **Prof. Tetsuro Murahashi (IMS)**
Organometallic Complexes of Transition Metals: Structures and Reactivities
12:40-14:00: Lunch
14:00-17:30: **EXODASS mini-symposium**
17:30-19:00: **Poster Session**

December 12

9:30-11:00: **Prof. Hiroshi Yamamoto (IMS)**
Organic Field-Effect-Transistors: Its mechanism, application and recent advances
11:00-11:10: Break
11:10-12:40: **Prof. Hiroshi Yamamoto (IMS)**
Organic Field-Effect-Transistors: Its mechanism, application and recent advances
12:40-14:00: Lunch
14:00-14:45: **Mr. Shangbin Jin (SOKENDAI/IMS)**
Large Pore Donor-Acceptor Covalent Organic Frameworks and their Charge Transfer and Separation Events
14:45-15:30: **Mr. Kenji Mochizuki (SOKENDAI/IMS)**
A new molecular level insight into how the hydrogen bond network is disordered in homogeneous ice melting
15:30-15:35: Group Photograph
15:35-15:45: Break
15:45-17:15: **Prof. Takuya Nagasaka (National Institute for Fusion Science)**
Development of Low Activation Vanadium Alloys for Fusion Reactor
17:30-19:00: Banquet

December 13

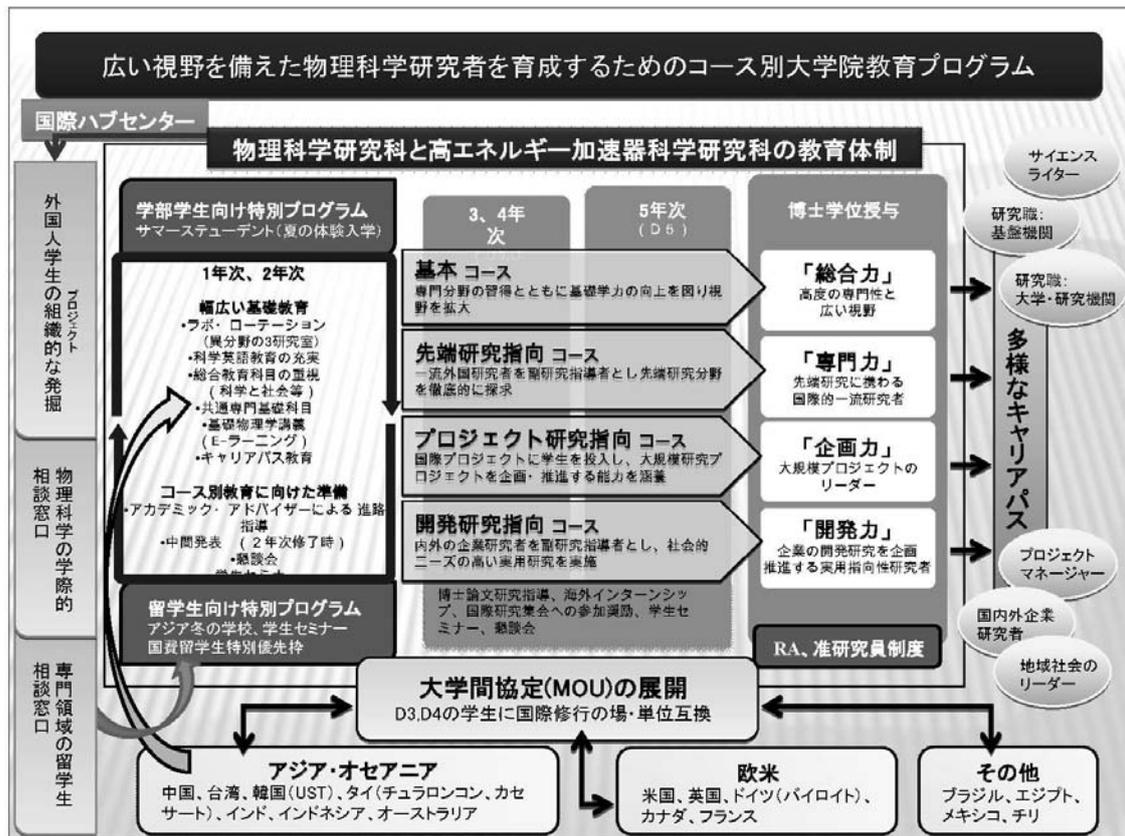
9:30-11:00: **Prof. Masahiro Ehara (IMS)**
Quantum Chemistry for Excited States
11:00-11:10: Break
11:10-12:40: **Prof. Masahiro Ehara (IMS)**
Quantum Chemistry for Excited States

3-5-6 広い視野を備えた物理科学研究者を育成するためのコース別教育プログラム

2009年度に文部科学省事業の「組織的な大学院教育改革推進プログラム」として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、3年間のプログラムとして、2011年度まで実施された。分子科学研究所が直接関わる構造分子科学専攻、機能分子科学専攻を含む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大学院教育が行われている。当該プログラムでは、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た。当該プログラムは2011年度をもって終了したが、これを継続する位置づけのものとして2012年度から、特別経費（概算要求）事業「広い視野を備えた物理科学研究者を育成するためのコース別大学院教育プログラム」を実施することとなった。これにはこれまでの物理科学研究科に加えて高エネルギー加速器科学研究科3専攻の参加を得ることとなった。

上記の目的のため、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している（本プログラムの概要スキームを図に示す）。物理科学研究科及び高エネルギー加速器科学研究科の大学院教育が行われている各基盤機関では、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。国外の最先端研究室等へのインターンシップを体系化し、広い視野と国際性を涵養する取組も行っている。また、両研究科所属の各専攻を擁する基盤機関は国内外に分散しており、それゆえに他専攻の授業を受講することは従来困難であった。本プログラムでは両研究科所属の大学院生が幅広い物理科学の素養を得られるべく、複数の研究室を短期間体験するラボ・ローテーションを実施し、また共通専門基礎科目のe-ラーニング化とその積極的活用により専攻間の縦横な授業履修を可能としている。すでに2011年度から分子研所属の構造分子科学専攻、機能分子科学専攻のe-ラーニング授業が配信されている。また学生が主体で企画運営する物理学学生セミナーなど、積極的な取り組みが行われている。

本プログラムは研究科の枠を越え総研大全体に波及する教育プログラムとなったことから、履修規程や単位認定方法などの実務的作業・調整が進められ、2013年度から本格的に研究科を超えたプログラムとして運用している。



3-5-7 統合生命科学教育プログラム

総研大では文部科学省・特別経費の支援によって、2011年より4年間の予定で分野・専攻横断型の「統合生命科学教育プログラム」を開始し、講義を2011年10月から行っている (<http://ibep.ims.ac.jp/index.html>)、

2013年度の本プログラムの活動を以下に要約する。

(1) 講義

講義は原則英語で行われ、遠隔地講義配信システムを利用して現地、遠隔地専攻に差がなく受講できるようにしている。科目数は前年度8から今年度11に増加。「機能生体分子科学」の代わりに「構造生体分子科学」、新たに「基礎生体科学分子」、「生物情報学」、「生命起源論」を加えた。

(2) 「学生企画型共同研究 (IRC grant)」

本企画は大学院生自らが創造性にとみ、分野横断的かつ専攻をまたいだ共同研究を企画、遂行するもので、将来の研究費申請のシミュレーションでもある。今年度の採用は3件であった。研究成果は2013年度生命科学リトリート(ヤマハリゾートつま恋)で発表された。

(3) 統合生命科学サマースクール(岡崎統合バイオサイエンスセンター 本プログラム 新学術「動的秩序と機能」(代表加藤晃一教授)共催)

本年度は機能分子科学専攻の加藤晃一教授がオーガナイザーで「生命システムの動秩序」というタイトルで8月に開催された。海外を含め多くの参加者があり、また若手からの活発な議論があり盛会であった。

本プログラムの提供する講義に機能・構造分子科学専攻の大学院生の参加が少ないのは残念である。本プログラムでは豪華な講師陣が興味深い講義をしており、聴かないのはもったいないと思うことがしばしばである。ちょっと窓を開けて外の景色も見てみてはいかがでしょうか。