

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た。平成 26 年度からは、分子研全体の国際インターンシッププログラム（IMS-IIP）に組み込む形でアジア版 IMS-IIPA と名前を変え、事業を継続している。EXODASS から IMS-IIP に変わるにあたり、滞在期間を 3 ヶ月以内から 6 ヶ月以内に延長する（若手教員は 1～2 ヶ月）、募集を原則として MOU 提携校に限る（MOU 提携校以外からも受入れは可能であるが、わざわざ宣伝はしていない）など、分子研独自のインターンシップ制度として、より戦略的な運用を図っている。

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。

3-1 研究領域

理論・計算分子科学研究領域

研究目的 量子力学，統計力学などに基づく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，機能に関する理論・計算分子科学研究による解明

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・計算科学研究

- 研究課題
- 1 ,凝縮系における不均一な構造遍歴動力学および物性・機能発現の解明
 - 2 ,ナノ構造体の光応答理論開発と光・電子機能物質の理論設計
 - 3 ,有機分子・錯体分子の電子状態の解明とその量子化学理論の開発

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・計算科学研究

- 研究課題
- 1 ,電子状態理論の開発と光物性科学・不均一触媒系への応用
 - 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 ,複雑な励起状態のための理論開発と応用
- 2 ,生体分子の機能に関係する柔らかいコンフォメーション動力学の理論・計算研究
- 3 ,電子状態シミュレーションと情報化学手法を駆使した物質の構造・機能相関に関する理論的研究

- 研究課題
- 1 ,決定論と確率論を融合した電子状態理論の開発
 - 2 ,高効率光エネルギー変換に関する理論的研究
 - 3 ,基質・リガンド結合に伴う生体分子系の大規模構造変化についての MD 計算等による解析
 - 4 ,蛍光プローブ分子の構造・機能相関の解明と分子設計
 - 5 ,エネルギー変換用複合分子システムの構造・機能相関の解明とシステム設計

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 ,貴金属ナノ構造体及びその分子との結合系の光学特性に関するイメージング計測による研究
- 2 ,プローブ顕微鏡による分子認識機能および局所電子スピン状態の研究
- 3 ,光電子分光法によるトポロジカル物性の研究

光源加速器開発研究部門(極端紫外光研究施設)

- 研究目的 シンクロトロン光源用電子加速器に関する開発研究を行う
- 研究課題 1 ,先進的な光源加速器の設計開発研究
- 2 ,相対論的電子ビームを用いた新しい光発生法に関する研究

電子ビーム制御研究部門(極端紫外光研究施設)

- 研究目的 シンクロトロン光源・自由電子レーザーなどの高性能化のための電子ビーム制御技術の開発研究を行う
- 研究課題 1 ,電子ビーム計測・制御技術に関する開発研究
- 2 ,加速器におけるビーム物理学研究
- 3 ,自由電子レーザーにおけるビーム物理学研究

光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的 固体の新奇物性に関わる電子状態を放射光赤外・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子分光法の開発研究を行う

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

先端レーザー開発研究部門（分子制御レーザー開発研究センター）

研究目的 分子科学研究のためのテラヘルツから軟X線にいたる先端光源の開発

- 研究課題 1 ,マイクロチップレーザー，セラミックレーザー，高機能非線形波長変換など，マイクロ固体フォトリソグラフィの研究
2 ,サブサイクル超短光パルス発生装置や，光パルス評価法，超高速分光装置の開発
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が見出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

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

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 ,固体 NMR を用いた生体分子・分子材料の構造・物性解析

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 ,有機材料と電気 2 重層を用いた電界誘起相転移の探索
2 ,新奇有機機能性液体材料の開発および光・磁気物性解析
3 ,新規機能性金属ナノクラスターの創製

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。さらに，人工細胞を創成して生物の挙動を再現することを目指した研究を展開する。

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 ,タンパク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 ,金属酵素モデル錯体による酸素分子活性化機構
4 ,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
5 ,交差触媒システムを内包する人工細胞の構築と解析

生体分子情報研究部門

研究目的 先端計測技術により、細胞内情報伝達を担う生体分子の分子機構を解明する

- 研究課題
- 1 ,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
 - 2 ,各種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
 - 3 ,赤外差分光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 タンパク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 ,水素結合・疎水性相互作用・静電的相互作用といった非共有結合性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 機能性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 ,機能性金属錯体の合成と構造解明
 - 2 ,金属錯体を用いた小分子の高効率変換反応の開発
 - 3 ,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 ,遷移金属触媒や典型元素の特性を活かした新反応・新分子の創出とそれに基づく新概念の確立や有用分子の効率的合成法の開発

- 2 ,光の創成と利用に資する光機能性金属錯体の開拓
- 3 ,光応答性タンパク質の励起状態プロトン移動の解析と新規蛍光性タンパク質の開発

研究課題 1 ,パラジウムやニッケル触媒を用いる含窒素巨大 電子系分子の創出ならびに炭素 - 硫黄結合の触媒的活性化

- 2 ,発光性クロミック白金錯体，元素活用型発光性 3d 金属錯体，および，金属錯体光触媒系の構築と構造，物性，機構解明

- 3 ,光応答性タンパク質 Photoactive Yellow Protein のクマリン誘導体を用いた再構成と発光特性の評価

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 ,タンパク質分子構造および機能の合理デザイン
 - 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 ,ナノスケール曲面を有するグラフェン半導体分子
 - 4 ,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 ,生体分子モーターのエネルギー変換機構の解明

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，先端機器の開発と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，文部科学省受託研究ナノテクノロジープラットフォーム分子・物質合成の代表機関・実施機関の運営を担っている。

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)

- (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。
- (ア)「課題研究(一般)」申請者が設定した研究課題で申請するもの。
- (イ)「課題研究(新分野形成支援)」あらかじめ設定された下記の課題の中から一つを選び、申請するもの。
- (i) 理論と実験の融合による水溶液の特異性と生体分子の機能発現の解明
 - (ii) 乱雑量子系における多体相互作用の研究
 - (iii) 分子性物質の機能性科学
 - (iv) 新しい駆動原理に立脚する分子変換・エネルギー変換
- (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的利用。
- (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的利用。

3-3-2 2015 年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名	提案代表者
電子物性科学の第三フェイズ～多自由度が拮抗するしなやかな複雑電子系の科学～	理化学研究所基幹研究所 加藤 礼三
元素戦略触媒	分子科学研究所 魚住 泰広

(2) 協力研究

課 題 名 (通年)	代 表 者
3重項 - 3重項消光によるアップコンバージョン過程の理論研究	筑波大学数理物質系 重田 育照
ピコ秒紫外 - 赤外二重共鳴分光実験と理論計算による S2 電子状態の解析	広島大学大学院理学研究科 江幡 孝之
磁場や光に応答する新しい外場応答型有機伝導体の微小結晶構造解析	大阪府立大学大学院理学系研究科 藤原 秀紀
ドメインスワップ二量体デノボタンパク質 WA20 とその改変体を用いたナノ分子ブロックによる自己組織化ナノ構造の創製と解析	信州大学繊維学部 新井 亮一
コヒーレントフォノンの量子状態推定と制御	東京工業大学応用セラミックス研究所 中村 一隆
希土類錯体をゲルに分散させた材料の高強度発光メカニズム解明: レーザ媒質としての物性探索	島根大学教育学部 西山 桂

高性能テラヘルツ波光源に向けた波長変換効率の励起時間依存性	理化学研究所テラヘルツ光源研究チーム	縄田 耕二
円偏光高輝度 UV 照射による有機無機複合材料中のキラル構造誘起	東京理科大学理学部	秋津 貴城
BLIU における大強度ガンマ線発生と同位体イメージングへの応用	京都大学エネルギー理工学研究所	全 炳俊
狭帯域コヒーレントエッジ放射の研究	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	保坂 将人
円偏光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
凝縮系水分子に対する多電子同時計測	富山大学理学部	彦坂 泰正
精密有機合成を指向した金属クラスター触媒の開発	大阪大学大学院工学研究科	櫻井 英博

課 題 名 (前 期)	代 表 者	
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
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
軟 X 線吸収分光法による酸素生成触媒のオランダ観測	慶應義塾大学理工学部	吉田 真明
常温接合を用いた高性能固体レーザーの開発	中央大学理工学部	庄司 一郎
解離イオンから探るトリフルオロプロベンの分子内転位とオージェスペクトル変化	広島大学大学院理学研究科	岡田 和正
DNA/RNA 結合タンパク質が特異的な塩基配列を選択して認識するメカニズム	慶應義塾大学理工学部	古川 良明
ピコ秒レーザーを用いた THz 波パラメトリック発生の高効率化	名古屋大学大学院工学研究科	村手 宏輔
軟 X 線分光による水・分子液体中のイオン液体の電子状態の研究	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	足立 純一
水の局所構造と動的挙動 ; 超短パルスレーザー分光と理論計算の interplay	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
植物の光合成反応中心における初期電荷分離過程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
励起子ポラリトン凝縮高励起状態の研究	横浜国立大学大学院工学府	堀切 智之
分子動力学法によるヒトタンパク質 - 薬物相互作用の解析	神戸大学大学院理学研究科	小堀 康博
光電子分光法による有機金属界面のエネルギー準位接合評価	千葉大学大学院融合科学研究科	米澤恵一朗
有機分子の電子状態の次元依存性	千葉大学大学院融合科学研究科	山田 豊和
暗視野顕微鏡法によるクラミドモナスの遊泳パターン解析	宇部工業高等専門学校	島袋 勝弥
導電性高分子 / ボルフィリン間における励起エネルギー移動機構の解明と発光増幅特性に関する研究	島根大学大学院総合理工学研究科	水野 斎
多体系の「かたちに潜む知恵」の解析と制御のためのゲージ理論	岩手大学人文社会科学部	花見 仁史
希ガス原子のオージェサテライト分光 : PCI 効果と光電子再捕獲によるリユドベリ列の漸次的生成	上智大学理工学部	東 善郎
グラム陽性細菌のヘム取り込み系におけるヘム輸送タンパク質の構造と機能	北海道大学大学院理学研究院	内田 毅

課 題 名 (後 期)	代 表 者	
分子動力学法によるヒトタンパク質 - 薬物相互作用の解析	神戸大学大学院理学研究科	小堀 康博
光電子分光法による有機金属界面のエネルギー準位接合評価	千葉大学大学院融合科学研究科	米澤恵一朗
時間分解赤外分光法によるレチナルタンパク質の構造ダイナミクスの解析	岡山大学大学院医歯薬学総合研究科	塚本 卓
DNA/RNA 結合タンパク質が特異的な塩基配列を選択して認識するメカニズム	慶應義塾大学理工学部	古川 良明
植物の光合成反応中心における初期電荷分離過程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
準安定多価分子イオンの生成機構の解明	新潟大学自然科学系理学部	副島 浩一
極端紫外光渦による原子分子の光イオン化ダイナミクス	九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫
Passive Q-switched Laser を用いたマルチパルスレーザー点火の特性評価	大阪大学工学部	赤松 史光
励起子ポラリトン高励起状態の研究	横浜国立大学大学院工学府	堀切 智之
多体系の「かたちに潜む知恵」の解析と制御のためのゲージ理論	岩手大学人文社会科学部	花見 仁史
水の局所構造と動的挙動 ; 超短パルスレーザー分光と理論計算の interplay	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
生体利用を目的とする光応答一酸化炭素放出錯体の創出	大阪府立大学大学院理学研究科	中島 洋
ニトロキシドラジカル液晶の磁気ドメイン構造の円二色性イメージング測定	大阪大学大学院基礎工学研究科	内田 幸明
アルドキシム脱水酵素の反応機構について	富山県立大学工学部	浅野 泰久
軟 X 線分光による水・分子液体中のイオン液体の電子状態の研究	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	足立 純一
人工光合成半導体光電極のための超広帯域光電変換 III 族窒化物薄膜の電子状態の解明	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	園田 早紀

(3) 研究会

【分子研研究会（一般）】

膜タンパク質内部のプロトン透過を考える

2015年4月20日（月）～21日（火） 岡崎コンファレンスセンター大会議室

4月20日（月）

セッション1 チャネル型経路のプロトン透過

ディスカッションリーダー：難波啓一，北尾彰朗

9:00	難波啓一	はじめに
9:05	神取秀樹（名工大）	趣旨説明
9:30	平田文男（立命館大）	分子チャネルの透過機構と蛋白質の構造揺らぎ：統計力学的研究
9:55	藤吉好則（名大）	水チャネルにおけるプロトン透過制御機構とその重要性
10:45	安井正人（慶応大）	脳のアクアポリンの機能と関連疾患
11:10	岡村康司（阪大）	電位センサー機能の多様性と共通原理について
11:35	中川敦史（阪大）	電位依存性プロトンチャネルの構造
13:30	老木成稔（福井大）	イオンチャネルのプロトン透過：細胞毒ナノチューブ polytheonamide B の整流性プロトン透過
13:55	古谷祐詞（分子研）	イオンチャネルの分子機構解明への赤外分光解析による挑戦
14:20	吉田紀生（九大）	チャネルロドプシンのイオン輸送経路探索・液体論によるアプローチ
15:10	伊藤政博（東洋大）	細菌べん毛モーターのイオン選択透過機構を探る
15:35	北尾彰朗（東大）	細菌べん毛モーター固定子のイオン透過メカニズム
16:00	難波啓一（阪大）	細菌べん毛モーターの回転機構におけるプロトン透過の役割
16:25 - 16:35	写真撮影	
16:35 - 18:30	ポスターセッション	
(16:45 - 17:30)	奇数番号説明時間	(17:30 - 18:15) 偶数番号説明時間
18:30 - 20:30	懇親会@岡崎コンファレンスセンター中会議室	

4月21日（火）

セッション2 トランスポーター型経路のプロトン透過

ディスカッションリーダー：神取秀樹，飯野亮太

9:00	神取秀樹	2日目のはじめに
9:05	林 重彦（京大）	タンパク質の pKa 制御とプロトン能動輸送の分子機構
9:30	神山 勉（名大）	バクテリオロドプシンはプロトン/水分子・対輸送体である
9:55	井上圭一（名工大）	H ⁺ ポンプと Na ⁺ ポンプ：2つのロドプシンから見えるもの
10:45	小倉尚志（兵庫県大）	プロトンポンプ機能に必要な部品の働き
11:10	月原富武（兵庫県大）	チトクロム酸化酵素のプロトンポンプ機構
11:35	重田育照（筑波大）	チトクロム c 酸化酵素におけるプロトン輸送の構造的仕掛け
13:30	飯野亮太（岡崎統合バイオ）	回転型 ATPase によるイオンの輸送を考える
13:55	村田武士（千葉大）	V-ATPase のイオン輸送メカニズム
14:20	石谷隆一郎・濡木 理（東大）	プロトンで駆動されるトランスポーターの分子機構
15:10	杉田有治（理研）	膜輸送タンパク質におけるプロトン対抗輸送の役割
15:35	塚崎智也（奈良先端大）	プロトン駆動型タンパク質分泌モーター SecDF
16:00	池口満徳（横浜市大）	多剤排出トランスポーター AcrB でのプロトン透過と機能
16:25 - 17:00	総合討論	

ポスター発表プログラム

- P01 光誘起陽イオンチャネル ChR の水素結合環境とプロトン移動を考える
伊藤奨太¹, 加藤英明², 大石賢実², 谷口怜哉², 岩田達也¹, 濡木 理², 神取秀樹¹ (¹名工大院工, ²東大院理)
- P02 腸内連鎖球菌由来の V-ATPase の 1 分子回転計測
上野博史^{1,2}, 皆川慶嘉², 宗行英朗¹, 野地博行², 村田武士³, 飯野亮太⁴
(¹中央大理工, ²東大院工, ³千葉大院理, ⁴岡崎統合バイオ・分子研)
- P03 パッチクランプ法による大腸菌呼吸鎖の末端酸化酵素の H⁺-pump の機能解析
宇野正晃¹, 駒澤光祐¹, 黒田照夫², 川崎 寿¹, 矢部 勇¹ (¹東京電機大先端科学, ²岡山大院医歯薬)
- P04 光駆動ナトリウムイオンポンプのイオン取込みと選択性
加藤善隆, 井上圭一, 吉住 玲, 橋本優一, 神取秀樹 (名工大院工)
- P05 電位依存性プロトンチャネルの疎水性バリアを形成するアミノ酸残基の役割
川鍋 陽, 岡村康司 (阪大院医)
- P06 趣旨説明
神取秀樹 (名工大院工)
- P07 ビブリオ菌のべん毛固定子タンパク質 PomA/PomB 複合体のナノディスク再構成
郷原瑞樹, 竹川宜宏, 小嶋誠司, 本間道夫 (名大院理)
- P08 イオン透過を担う固定子の集合に共役した細菌べん毛モーターの活性化機構
小嶋誠司¹, 朱世偉¹, 高尾真登², 李娜¹, 佐久間麻由子¹, 西野優紀¹, 本間道夫¹, 今田勝巳² (¹名大院理, ²阪大院理)
- P09 ドメイン運動の階層的な解析により描かれる SERCA の反応による構造変化
小林千草¹, 小池亮太郎², 太田元規², 杉田有治^{1,3,4,5}
(¹理研 AICS, ²名大情報科学, ³理研杉田理論分子科学研, ⁴理研 QBic, ⁵理研 iTHES)
- P10 カリウムイオンをポンプするロドプシンの創成
今野雅恵¹, 井上圭一^{1,2}, 加藤英明³, 濡木 理³, 神取秀樹¹ (¹名工大院工, ²JST さきがけ, ³東大院理)
- P11 H⁺ポンプ型ロドプシン AR3 の H⁺ チャネルへの機能転換
鈴木悠斗¹, 井上圭一^{1,2}, 林 重彦³, 須藤雄気^{4,5,6}, 神取秀樹¹
(¹名工大院工, ²JST さきがけ, ³京大院理, ⁴岡山大院医歯薬, ⁵JSTCREST, ⁶分子研)
- P12 Na⁺ 駆動型べん毛モーター固定子 MotPS の生育 pH の異なる 2 種類の Bacillus 属細菌における中性環境におけるイオン透過性の差異の解明
高橋優嘉¹, 野口有希奈², 伊藤政博^{1,2} (¹東洋大バイオナノ, ²東洋大院生命)
- P13 Protons Observed by Neutron Protein Crystallography
田中伊知朗¹, 日下勝弘¹, 山田太郎¹, 細谷孝明¹, 矢野直峰¹, 片桐政樹¹, 新村信雄¹, 大原高志² (¹茨城大, ²JAEA)
- P14 アミノ酸排出輸送体の X 線結晶構造解析
土屋雄俊, 道喜慎太郎, 石谷隆一郎, 濡木 理 (東大院理)
- P15 クライオ電子顕微鏡法による Na⁺ 駆動型べん毛モーター固定子 MotPS 複合体の高分解能構造解析
寺原直矢, 加藤貴之, 南野 徹, 難波啓一 (阪大院生命機能)
- P16 中性子構造解析によるプロトン伝達経路の直接観測
中村彰彦¹, 石田卓也², 五十嵐圭日子², 鮫島正浩², 日下勝弘³, 山田太郎³, 田中伊知朗³, 新村信雄³
(¹岡崎統合バイオ, ²東大院農生, ³茨城大)
- P17 高分解能ステップ計測で紐解く細菌べん毛モーターの動作機構
中村修一^{1,4}, 森本雄祐^{2,4}, 上池伸徳⁴, 曾和義幸³, 南野 徹⁴, 難波啓一^{2,4}
(¹東北大院工, ²理研 QBic, ³法政大生命科学, ⁴阪大院生命機能)
- P18 光合成水分解反応におけるチロシン Y_Z を経由するプロトン移動機構
中村 伸, 長尾 遼, 野口 巧 (名大院理)
- P19 アスパラギン酸 / アラニン交換輸送体 (AspT) の構造変化解析
鈴木聡美, 木村拓哉, 宮本あかり, 七谷 圭, 阿部敬悦 (東北大院農)
- P20 細菌べん毛モーター固定子 MotA/B のモデリングと分子シミュレーション
西原泰孝, 北尾彰朗 (東大分生研)
- P21 真正細菌ロドプシンのナトリウムポンプ, クロライドポンプからプロトンポンプへの機能転換
野村祐梨香¹, 井上圭一^{1,2}, 神取秀樹¹ (¹名工大, ²JST さきがけ)
- P22 小胞体 Ca²⁺ 恒常性に関わるイオンチャネルの結晶化
平泉将浩¹, 石谷隆一郎¹, 服部素之², 濡木 理¹ (¹東大院理, ²復旦大学 (中国))
- P23 大腸菌由来 NO₃⁻/NO₂⁻ 対向輸送体 NarK の X 線結晶構造解析
福田昌弘¹, 竹田弘法¹, 加藤英明^{1,4}, 道喜慎太郎¹, 伊藤耕一², Andrés D. Maturana³, 石谷隆一郎¹, 濡木 理¹
(¹東大院理, ²東大新領域, ³名大院生命農, ⁴Stanford Univ.)
- P24 V₁-ATPase の化学力学共役スキーム解明に向けたハイブリッド *Enterococcus hirae* V₁-ATPase の回転観察
皆川慶嘉¹, 上野博史¹, 野地博行¹, 村田武士², 飯野亮太³ (¹東大院工, ²千葉大院理, ³岡崎統合バイオ・分子研)
- P25 腸内連鎖球菌 V-ATPase のクライオ位相差電子顕微鏡単粒子構造解析
村田和義¹, 村田武士², 上野博史³, 飯野亮太⁴ (¹生理研, ²千葉大院理, ³中央大理工, ⁴岡崎統合バイオ・分子研)
- P26 細胞内局所 pH と細胞機能の関係
森本雄祐¹, 上田昌宏^{1,2} (¹理研生命システムセンター, ²阪大院理)
- P27 プロトン還元触媒作用を有する Ni(II) 錯体に関する理論的研究
山田健太 (理研)
- P28 光駆動ナトリウムポンプ KR2 のポンプスイッチにおける Asn112 の重要性
吉住 玲¹, 井上圭一^{1,2}, 加藤英明³, 濡木 理³, 神取秀樹¹ (¹名工大院工, ²JST さきがけ, ³東大院理)
- P29 溶液中会合イオンの解離カイネティクスの多様性: 分子動力学シミュレーションによる自由エネルギー地形解析
米谷佳晃 (原研分子シミュレーション)

【アジア連携分子研研究会】

Supramolecular Dynamics at the Interface of Chemistry and Biology

2015年6月12日(金)～13日(土) 分子科学研究所山手地区3号館2階西大会議室

June 12 (Friday)

10:00-10:10 Opening remarks by Takafumi UENO

Session I Chairperson: Takahiro HOHSAKA

10:10-10:40 Susumu UCHIYAMA (Osaka University)

“Quantitative Analysis of Protein-Protein Interactions”

10:40-11:10 Ryota IINO (Institute for Molecular Science)

“Dynamic Motions of Individual Molecular Motors”

11:10-11:40 Seok-Cheol HONG (Korea University)

“Single-Molecule Methods Reveal the Conformational Dynamics and Energetics of DNA Molecules”

11:40-13:30 Photo and Lunch

Session II

13:30-14:00 Takayuki UCHIHASHI (Kanazawa University)

“High-Speed Atomic Force Microscopy: A New Tool for Studying Protein Dynamics at Work”

14:00-14:30 Takumi YAMAGUCHI (Institute for Molecular Science)

“Paramagnetic Lanthanide-Tagging for NMR Characterization of The Conformational Dynamics of Oligosaccharides”

Session III

14:50-15:20 Nobuyasu KOGA (Institute for Molecular Science)

“Protein Design from Scratch for Understanding Principles for Folding”

15:20-15:50 Hironari KAMIKUBO (Nara Institute of Science and Technology)

“Designing an Artificial Protein by Using a Kind of Building Blocks Responsible for Structure and Function”

Session IV

16:10-16:40 Masumi TAKI (The University of Electro-Communications)

“Artificial Molecule Evolution via the 10BASE_d-T”

16:40-17:10 Takahiro HOHSAKA (Japan Advanced Institute of Science and Technology)

“Incorporation of Nonnatural Amino Acids by Expanding the Genetic Code and its Application to Fluorescence Analysis of Proteins”

June 13 (Saturday)

Session V

9:30-10:00 Junqiu LIU (Jilin University)

“Protein Assembly and Enzymatic Functionality”

10:00-10:30 Teruyuki KOMATSU (Chuo University)

“Protein Nano- and Micro-Tubes as Smart Biomaterials”

Session VI

10:50-11:20 Takafumi UENO (Tokyo Institute of Technology)

“Protein-Based Supramolecular Coordination Materials”

11:20-11:50 Takaki KOIDE (Waseda University)

“Collagen Triple Helix, A Unique Peptide Scaffold for Biotools and Biomaterials”

Session VII

13:30-14:00 Hsin-Yun HSU (National Chiao-Tung University)

“Engineering of Novel Peptides for Ubiquitome Discovery and Self-Assembled Drug Delivery System”

14:00-14:30 Tomohisa SAWADA (The University of Tokyo)

“Metal-Directed Short Peptide Folding and Assembly”

Session VIII

14:50-15:20 Sheng-Hsien CHIU (National Taiwan University)

“Sodium Ions Template the Formation of Rotaxanes From BPX26C6 and Nonconjugated Amide and Urea Functionalities”

15:20-15:50 Kazunori SUGIYASU (National Institute for Materials Science)

“Living Supramolecular Polymerization”

Session IX

- 16:10-16:40 Takahiro MURAOKA (Tokyo Institute of Technology)
"Bioinspired Multi-Block Amphiphiles"
- 16:40-17:10 Daisuke SUZUKI (Shinshu University)
"Control of Spatio-Temporal Structures for Polymer Microspheres toward Advanced Soft Materials"
- 17:10-17:20 Closing remarks by Ryota HINO

【分子研研究会（一般）】

キラリティ × 光学物性研究会

2015年6月27日（土）～28日（日） 分子科学研究所研究棟201号室

6月26日（金）

16:00-19:00 受付

6月27日（土）

9:00- 受付

9:30-10:30 趣旨説明 + 概要・全体像
井上 克也（広島大学理学研究科）

10:30-11:30 「近接場光学顕微鏡によるキラリティなプラズモンの可視化」
岡本 裕巳（分子科学研究所）

13:00-14:00 「フェロイクの光学応答」
有馬 孝尚（東京大学新領域新創成科学研究科 / 理化学研究所）

14:00-15:00 「キラリティ磁性体のスピン位相と光の相互作用」
岸根 順一郎（放送大学自然の理解部門）

15:30-16:30 「円偏光を用いたドメイン構造の可視化と制御」
大隅 寛幸（理化学研究所 SPring-8）

16:30-17:30 「パルス中性子源を活用した無機キラリティ磁性体研究」
高阪 勇輔（広島大学理学研究科）

18:00-21:00 意見交換会

6月28日（日）

9:00 受付

9:30-10:30 「ナノ構造体における光磁気応答」
信定 克幸（分子科学研究所）

10:30-11:30 「マルチフェロイック関連物質における対掌性」
木村 剛（大阪大学基礎工学研究科）

13:00-13:40 「Application of Templated Plasmonic Substrates in Chiroptical Spectroscopy」
JACK, Calum（School of Chemistry, University of Glasgow）

13:40-14:40 「光の軌道角運動量と固体中電子スピン」
余越 伸彦（大阪府立大学工学研究科）

14:40-15:40 「希土類金属間化合物のキラリティ磁性」
大原 繁男（名古屋工業大学工学研究科）

15:40-15:50 閉会，アナウンス

【学協会連携分子研研究会】

軟X線イメージングの描く未来

2015年9月7日（月）～8日（火） 分子科学研究所研究棟201号室

：軟X線イメージング技術開発
技術開発の現状と展望

：ユーザー利用研究
ユーザー視点での到達点と問題点，そして将来への期待

：軟X線イメージングへの期待
軟X線イメージング技術を利用していない研究者から，技術開発に対する新たなシーズ

：異なるアプローチのイメージング
異種のアプローチによるイメージング技術，軟X線イメージングの技術的立ち位置を明確にする

9月7日(月)

- 13:30 ~ 13:40 『主旨説明』大東琢治(分子研)
13:40 ~ 14:10 『STXM ビームライン BL4U の現状と応用観察手法の開発』大東琢治(分子研)
14:10 ~ 14:40 『走査型透過X線顕微鏡を用いたゴム材料の構造観察』金子房恵(住友ゴム工業)
14:40 ~ 15:10 『EUV リソグラフィとマスク観察顕微鏡』原田哲男(兵庫県立大学)
15:10 ~ 15:40 『EUV 照明を用いたマスクブランクス欠陥の観察』宮井博基(レーザーテック)

16:00 ~ 16:30 『立命館大学 SR センター透過型軟X線顕微鏡ビームラインの現状と今後の展開』竹本邦子(関西医科大)
16:30 ~ 17:00 『軟X線顕微法によるコネクティクスの可能性』水谷治央(Harvard Univ.)
17:00 ~ 17:50 招待講演 『軟X線顕微鏡の期待と展望』青木貞雄(総合科学研究機構)
18:00 ~ 20:00 Poster Session, 技術交流会

9月8日(火)

- 9:00 ~ 9:50 招待講演 『軟X線顕微分光の現状と将来展望』荒木 暢(Diamond Light Source)
9:50 ~ 10:20 『広視野を30nm 解像する EUV 顕微鏡の開発』豊田光紀(東北大)

10:40 ~ 11:10 『軟X線吸収分光による固-液相不均一系触媒反応のその場観察』湯沢勇人(分子研)
11:10 ~ 11:40 『コンパクト STXM の開発とサステナブル科学への展開』武市泰男(KEK)
11:40 ~ 12:10 『軟X線顕微鏡による太陽系原始天体物質中の有機物分析』上相真之(JAXA)

13:00 ~ 13:40 UVSOR 施設見学
13:40 ~ 14:10 『光電子顕微鏡(PEEM)による軟X線顕微分光と磁気ダイナミクス解析』大河内拓雄(JASRI/SPring-8)
14:10 ~ 14:40 『中性子イメージングの現状と今後の展望』篠原武尚(JAEA/J-PARC)
14:40 ~ 15:10 『走査型透過軟X線顕微鏡を用いたリチウムイオン電池の正極活物質の劣化挙動観察』山重寿夫(トヨタ自動車)

15:30 ~ 16:00 『Recent Developments in the Fabrication of X-Ray Imaging Optics』Anthony Beaucamp(京都大学)
16:00 ~ 16:30 『ベクトルビームを用いたレーザー顕微鏡における高空間分解能イメージング』小澤祐市(東北大)
16:30 ~ 17:00 『レーザー生成多価イオンプラズマ水の窓軟X線光源』東口武史(宇都宮大)
17:00 Closing Remark

【分子研研究会(一般)】

理論計算分子科学ワークショップ: 計算法とシミュレーションの新展開
2015年10月22日(木) 分子科学研究所研究棟201号室

- 12:30 - 13:30 受付
13:30 - 13:40 初めに
13:40 - 14:10 岡本祐幸(名古屋大学)
「拡張アンサンブル法による量子化学シミュレーション」
14:10 - 14:40 Yasuyuki Ishikawa(プエルトリコ大)
「Relativistic Multireference Møller-Plesset Perturbation Theory Calculations」

15:10 - 15:40 八木 清(理化学研究所)
「最適化座標に基づく振動状態理論の開発と応用」
15:40 - 16:10 中嶋隆人(理化学研究所)
「NTChemと相対論的分子理論」
16:10 - 16:40 中辻 博(量子化学研究協会)
「化学と量子化学と研究の楽しさ」

17:00 - 19:00 意見交換会(懇親会)

【分子研研究会(一般)】

局所と大域: データサイエンスと階層性の創発
2015年11月27日(金) 分子科学研究所研究棟201号室

- 14:30 - 14:40 鹿野 豊(分子研)
はじめに
14:40 - 15:30 平 理一郎(基礎生物学研究所)
覚醒脳の高次元神経活動の記録と解析

- 15:40 - 16:10 日高 昇平 (JAIST)
非線形数理解析の展開と高次神経活動の解析
- 16:20 - 16:50 新井 賢亮 (ボストン大学)
非線形振動子系としての神経活動データの解析
- 17:00 - 17:30 長谷川 裕記 (核融合科学研究所)
連結階層モデルを用いた大規模シミュレーション
- 17:40 - 17:50 平 理一郎 (基礎生物学研究所)
おわりに

【分子研研究会 (一般)】

高輝度・高強度赤外光源の現状と展望

2016年2月11日(木)～12日(金) 岡崎コンファレンスセンター

2月11日(木)

11:00-11:10 主旨説明 全炳俊(京都大学)

座長：木下豊彦(高輝度光科学研究センター)

- 11:10-11:40 中赤外自由電子レーザーの現状と世界的動向
全炳俊(京都大学)
- 11:40-12:10 高輝度・高強度赤外光源の現状と将来展望
木村真一(大阪大学)
- 12:10-12:40 次期放射光光源計画と赤外
浜 広幸(東北大学)

座長：並河一道(東京学芸大学)

- 13:50-14:20 赤外放射光を利用した強相関電子系分子性導体の研究
佐々木孝彦(東北大学)
- 14:20-14:50 赤外放射光を利用した高圧での光物性
岡村英一(徳島大学)
- 14:50-15:20 中赤外自由電子レーザー利用研究の現状
築山光一(東京理科大学)

座長：加藤政博(分子科学研究所)

- 15:40-16:10 大強度・高安定テラヘルツ自由電子レーザーの開発
磯山悟朗(大阪大学)
- 16:10-16:40 THz自由電子レーザー利用研究
入澤明典(大阪大学)
- 16:40-17:10 コンパクトERLを用いた大強度赤外光源の開発
本田洋介(高エネルギー加速器研究機構)
- 17:10-18:10 ポスター
- 18:30- 懇親会

2月12日(金)

座長：富澤宏光(JASRI)

- 09:00-09:30 超短赤外光パルスレーザー光源の最先端
藤 貴夫(分子科学研究所)
- 09:30-10:00 高輝度テラヘルツ波発生および高感度検出とその応用
南出泰亜(理化学研究所)
- 10:00-10:30 中赤外レーザーを用いた手のひらサイズの非侵襲血糖値センサーの開発
青山 誠(日本原子力研究開発機構)

座長：全炳俊(京都大学)

- 10:50-11:20 赤外放射光の現状と将来展望
池本夕佳(高輝度光科学研究センター)
- 11:20-12:20 総合討論 司会：全炳俊(京都大学)

ポスター発表リスト

- P01：テラヘルツ波パワーの絶対値測定による電子ビーム診断
平 義隆(産業技術総合研究所)
- P02：京大炉ライナックにおける高強度遠赤外光源開発と利用研究
高橋俊晴(京都大学)

- P03: 日本大学 LEBRA における高強度 CTR 光源開発の現状と展望
清紀 弘 (産業技術総合研究所)
- P04: 小型電子線型加速器 LEENA によるテラヘルツ光源開発の現状
橋本 智 (兵庫県立大学)
- P05: 赤外顕微鏡を用いた女性毛髪のイメージング研究
渡邊 紘介 ((株)ミルボン)
- P06: 高圧合成白金族窒化物の赤外分光
駒淵 舞, 曾田 一雄 (名古屋大学)
- P07: 顕微赤外吸収分光を利用した半導体ナノワイヤ中のドーパント不純物の状態評価
深田 直樹 (物質・材料研究機構)
- P08: 赤外顕微鏡ビームラインの現状と応用
家路 豊成 (立命館大学)
- P09: タンパク質の構造と機能に及ぼす赤外自由電子レーザーの照射効果
川崎 平康 (東京理科大学)
- P10: アミノ酸の光学異性化の赤外顕微鏡観察
亀井 俊 (大阪大学)
- P11: 日大 LEBRA における FEL とその利用
野上 杏子 (日本大学)
- P12: 赤外自由電子レーザー照射による温度上昇の時間分解測定
千葉 朋幸 (東京理科大学)
- P13: フェムト秒赤外レーザーを用いた生体分子ダイナミクスの観測
久保 稔 (理化学研究所)
- P14: 層状鉄酸化物 LuFe_2O_4 における光誘起磁気相転移のテラヘルツポンブプローブ分光
伊藤 桂介 (東北大学)
- P15: 高輝度・高強度赤外光源強度マップ
全 炳俊 (京都大学)
- P16: 産総研 S バンド小型リニアック施設における高強度テラヘルツ波を用いた利用研究
~ 水溶液計測と実環境計測 ~
黒田 隆之助 (産業技術総合研究所)
- P17: ニュースパルにおける赤外ビームラインの検討
庄司 善彦 (兵庫県立大学)
- P18: UVSOR-III における峽帯域コヒーレントエッジ放射の研究
保坂 将人 (名古屋大学)
- P19: 赤外 FEL 共振器によるzeptosecond X 線パルス発生の可能性
羽島 良一 (日本原子力研究開発機構)

【アジア連携分子科学研究会】

日韓生体分子科学セミナー

2016年2月15日(月) ~ 17日(水) 岡崎コンファレンスセンター

February 15 (Mon)

- 10:00-10:25 Steven P. Gross (UC Irvine, and KIAS)
Single molecular motor heterogeneity and its implications for ensemble function
- 10:25-10:45 Akihiko Nakamura (IMS)
Analysis of functional structure of cellulase by neutron crystallography
- 10:45-11:10 Ryota Iino (IMS)
Direct observation of intermediate states during the stepping motion of kinesin-1
- 11:10-11:35 Sota Sato (Tohoku Univ. & JST)
Biological functions implanted in artificial supramolecules 2
- 11:35-11:55 Takayoshi Watanabe (Japan Adv. Inst. of Sci. & Tech.)
Novel method for site-specific protein pegylation using aromatic amine-containing non-natural amino acid
- 13:30-13:55 Keehyoung Joo (KIAS)
Contact Assisted Protein Structure Modeling by Global Optimization in CASP11
- 13:55-14:20 Nam Ki Lee (POSTECH)
New single-molecule FRET method for observing fast dynamics and its application for dsDNA bending dynamics
- 14:20-14:45 Masahide Terazima (Kyoto Univ.)
Time-resolved study on conformation change and inter-domain change during protein reactions
- 14:45-15:10 Kunihiro Kuwajima (Tokyo Univ.)
The H/D-exchange kinetics of a fully unfolded protein studied by the DMSO-quenched and 2D NMR techniques
- 15:40-16:00 Balachandran Manavalan (KIAS)
StrRate: Structure-based protein folding type classification and folding rate prediction

- 16:00-16:20 Seung Hwan Hong (KIAS)
Template based modeling by dynamic fragment assembly: revisited
- 16:20-16:45 Ji-Joon Song (KAIST)
Understanding molecular Architecture of Huntington's disease protein
- 17:30- Banquet

February 16 (Tue)

- 10:00-10:25 Fumio Hirata (Ritsumeikan Univ.)
Multi-scale dynamics simulation of protein based on the generalized Langevin equation combined with 3D-RISM theory
- 10:25-10:45 InSuk Joung (KIAS)
Efficient sampling of transition pathways using nudged elastic band and conformational space annealing
- 10:45-11:10 Hisashi Okumura (IMS)
Pressure induced structural change of proteins by molecular dynamics simulations
- 11:10-11:35 Seokmin Shin (Seoul National Univ.)
The two faces of self-assembly of peptides
- 11:35-12:00 Jooyoung Lee (KIAS)
Atomistic mechanism of conformational transition of adenylate kinase investigated by Lorentzian structure-based potential
- 13:30-13:55 Chaok Seok (Seoul National Univ.)
Galaxy7TM: Modeling and docking of G-protein coupled receptors
- 13:55-14:15 Takumi Yamaguchi (Japan Adv. Inst. of Sci. & Tech.)
Design and creation of Lewis X-expressing glycoclusters toward functional analyses of oligosaccharides in membrane systems
- 14:15-14:40 Kazushi Kinbara (Tokyo Inst. of Tech.)
Development of Stimuli-Responsive Multiblock Amphiphilic Molecules Mimicking Multipass Transmembrane Proteins
- 14:40-15:05 Weontae Lee (Yonsei Univ.)
NMR and X-ray crystallographic studies on syndecan, proteoglycan: Structure, function and diseases
- 15:35-16:00 Shinobu Itoh (Osaka Univ.)
Activation mechanism of fungal tyrosinase
- 16:00-16:25 Masafumi Odaka (Akita Univ.)
Time-resolved crystallography of the reaction intermediate of nitrile hydratase: Revealing a role for the cysteinesulfenic acid ligand as a catalytic nucleophile
- 16:25-16:50 Shuji Akiyama (IMS)
Atomic-scale origins of slowness in the cyanobacterial circadian clock
- 16:50-17:15 Dong Hae Shin (Ewha Womans Univ.)
Structural properties of GmhA and GmhB from *Burkholderia thailandensis*
- 18:00- Free Discussion

February 17 (Wed)

- 10:00-10:25 Takeshi Uchida (Hokkaido Univ.)
Heme uptake proteins from *Vibrio cholerae*
- 10:25-10:50 Hiroshi Sugimoto (RIKEN/SPring-8)
Structural mechanism of the heme transporter complex from pathogenic bacteria
- 10:50-11:10 Norifumi Muraki (IMS)
Crystal structures of HtaA and HmuT, heme uptake proteins from *Corynebacterium glutamicum*
- 11:10-11:35 Jeong-Yong Suh (Seoul National Univ.)
Structural basis for the preferential interaction of auxin-response transcriptional repressor with different transcription factors
- 11:35-11:55 Saeko Yanaka (IMS)
Affinity improvement of antibody through mutational modification of the conformational dynamics
- 13:30-13:55 Susumu Uchiyama (Osaka Univ.)
Mass spectrometry of protein-ligand interactions
- 13:55-14:20 Takafumi Ueno (Tokyo Inst. of Tech.)
Protein Crystals for Designing Biohybrid Solid Materials
- 14:20-14:45 Tadashi Satoh (Nagoya City Univ.)
Structural insights into the working mechanisms of multi-domain enzymes involved in ER protein quality control
- 14:45-15:05 Jaeyoung Byeon (Soongsil Univ.)
Protein contact prediction based on information theory
- 15:35-16:00 Julian Lee (Soongsil Univ.)
Prediction of protein rigid domains and hinge residues based on graph theory and elastic network model
- 16:00-16:25 Takahiro Kosugi (IMS)
De novo design of protein function

16:25-16:50 Changbong Hyeon (KIAS)
Mapping allosteric signaling of G protein-coupled receptors

【アジア連携分子研研究会】
日中機能性超分子アーキテクチャーシンポジウム
2016年2月24日(水)～26日(金) 岡崎コンファレンスセンター

February 23 (Tuesday)

14:00 ~ 17:30 Registration at the Hall of Okazaki Conference Center

18:00 ~ 20:00 Welcome Reception at Okazaki Conference Center

February 24 (Wednesday)

8:55 Opening Remark by Donglin Jiang

Chairperson: Hiromitsu Maeda (9:00 ~ 10:30)

9:00 ~ 9:30 Xinchun Wang (Fuzhou University)
Photocatalytic Water Splitting by Graphitic Carbon Nitride Polymers

9:30 ~ 10:00 Masato Ikeda (Gifu University)
Biomolecule Responsive Supramolecular Hydrogel-Enzyme Hybrids

10:00 ~ 10:30 Zhishan Bo (Beijing Normal University)
Highly Efficient Planar Perovskite Solar Cells via Modification of *c*-TiO₂ Surface with Self-Assembled Fullerene Derivative Monolayer

Chairperson: Zhishan Bo (10:50 ~ 12:20)

10:50 ~ 11:20 Tomoki Ogoshi (Kanazawa University)
Pillar[n]arene-Based Supramolecular Assemblies in Bulk State

11:20 ~ 11:50 Bien Tan (Huazhong University of Science and Technology)
Soluble Hypercrosslinked Polymers from Single Polymer Folding

11:50 ~ 12:20 Shigehisa Akine (Kanazawa University)
Helix Inversion of Helical Multinuclear Complexes Controlled by Molecular Recognition

12:20~ 13:30 Photo and Lunch

Chairperson: Tomoki Ogoshi (13:30 ~ 15:30)

13:30 ~ 14:00 Shuichi Hiraoka (The University of Tokyo)
Self-Assembly Process of Coordination Capsules and Cages

14:00 ~ 14:30 Mingjie Liu (Beihang University)
Bioinspired Functional Hydrogels Embedded with Semiconducting Nanosheets

14:30 ~ 15:00 Shiki Yagai (Chiba University)
Metastable Molecular Assemblies: an Entrance to Dynamic Materials

15:00 ~ 15:30 Yuanzhi Tan (Xiamen University)
Molecular Carbon Nano-materials

Chairperson: Bien Tan (15:30 ~ 18:20)

15:50 ~ 16:20 Itaru Osaka (Riken)
Control of Electronic and Ordering Structures in π -Conjugated Polymers for High-Performance Organic Electronic Devices

16:20 ~ 16:50 Weiwei Li (Institute of Chemistry, CAS)
Semi-Crystalline Diketopyrrolopyrrole Polymers for Field-Effect Transistors and Polymer Solar Cells

16:50 ~ 17:20 Gaku Fukuhara (Osaka University)
Supramolecular Allosteric Amplification-Sensing with Polymer Hosts

17:20 ~ 17:50 Wenke Zhang (Jilin University)
The Study of Polymer Interactions in Supramolecular Assemblies Using Single-Molecule Force Spectroscopy

18:30 ~ 20:30 Dinner and Poster Session

February 25 (Thursday)

Chairperson: Shuichi Hiraoka (9:00 ~ 10:30)

9:00 ~ 9:30 Donglin Jiang (JAIST)
Structural Diversity of Covalent Organic Frameworks

9:30 ~ 10:00 Tsuneaki Sakurai (Kyoto University)
Noncontact Evaluation of Carrier Transport Property for Designed π -Electronic Molecular Assembly

10:00 ~ 10:30 Zhen Li (Wuhan University)
The Modification of the Functionality of π -Molecules through the Structural Adjustment

Chairperson: Zhen Li (10:50 ~ 12:20)
10:50 ~ 11:20 Atsushi Wakamiya (Kyoto University)
Molecular Design for p-Type Buffer Materials toward Highly Efficient Perovskite Solar Cells
11:20 ~ 11:50 Jia Guo (Fudan University)
Polymer Frameworks Constructing Functional Composite Microspheres
11:50 ~ 12:20 Tsuyohiko Fujigaya (Kyushu University)
Bottom-up Functionalization of Carbon Nanotube for Highly Durable Electrocatalyst
12:20~ 13:30 Lunch and Poster Session

Chairperson: Atsushi Wakamiya (13:30 ~ 15:30)
13:30 ~ 14:00 Hiromitsu Maeda (Ritsumeikan University)
 π -Electronic Ion-Pairing Supramolecular Assemblies
14:00 ~ 14:30 Wenhua Li (Beijing Normal University)
Colloidal Synthesis of Functional Nanomaterials and Their Optoelectronic Application
14:30 ~ 15:00 Yanhong Xu (Jilin Normal University)
Designed Synthesis and Multifunctional Application Studies of Conjugated Microporous Polymers
15:00 ~ 15:30 Yulan Chen (Tianjin University)
Bischler-Napieralski Cyclization towards 1,10-phenanthroline-analogous *S,N*-heteroacenes

Chairperson: Stefan Kaskel (15:30 ~ 17:50)
15:50 ~ 16:20 Yasuhiro Ishida (Riken)
Single-crystal-like Soft Materials: Magnetic Orientation of Three-dimensional Polymer Networks
16:20 ~ 16:50 Shijie Ren (Sichuan University)
Functional Conjugated Microporous Polymers: Preparation and Application
16:50 ~ 17:20 Yoshinori Takashima (Osaka University)
Stimuli Responsive Supramolecular Materials Formed from Host and Guest Polymers
17:20 ~ 17:50 Long Chen (Tianjin University)
Synthesis and Self-Organization of Large Polyaromatic Hydrocarbons
18:30 ~20:30 Banquet

February 26 (Friday)

Chairperson: Yasuhiro Ishida (9:00 ~ 10:30)
9:00 ~ 9:30 Stefan Kaskel (Technische Universität Dresden)
Supramolecular Assembly of Highly Porous Materials
9:30 ~ 10:00 Feng Shi (Beijing University of Chemical Technology)
Precise Macroscopic Supramolecular Assembly and Applications
10:00 ~ 10:30 Yuh Hijikata (Nagoya University)
Theoretical Approaches for Dynamic Self-Assembly Materials

Chairperson: Long Chen (10:50 ~ 11:20)
10:50 ~ 11:20 Huanli Dong (Institute of Chemistry, CAS)
High Mobility Emissive Organic Semiconductor: Design, Synthesis and Device Applications
Closing Remark Zhishan Bo

Poster Section (Presentation on 24 February 18:00 ~ 20:00)

Poster 1 Cuihong Li (Beijing Normal University)
Non-Fullerene Electron Acceptors for Wide Band Gap Polymer Organic Solar Cells
Poster 2 Ayako Baba, Tatsuo Kojima, and Shuichi Hiraoka (The University of Tokyo)
Self-Assembly Mechanism of Pt(II)-Linked Coordination Macrocycles
Poster 3 Hiromitsu Maeda and Atsuko Kuno (Ritsumeikan University)
Synthesis of Amide-Contained Anion-Responsive π -Electronic Molecules
Poster 4 Cheng Gu¹ and Donglin Jiang^{1,2} (¹IMS; ²JAIST)
Highly Photofunctional Porous Organic Polymer Films
Poster 5 Shumpei Kai, Tatsuo Kojima, and Shuichi Hiraoka (The University of Tokyo)
The Self-Assembly Mechanism of Pd₂L₄ Coordination Cages
Poster 6 Enquan Jin^{1,2} and Donglin Jiang^{1,3*} (¹IMS; ²Sokendai; ³JAIST)
sp²-Carbon-Based Covalent Organic Framework
Poster 7 Masanori Nakagawa, Tatsuo Kojima, and Shuichi Hiraoka (The University of Tokyo)
Self-Assembly Process of Pd₂L₄ Cage Complex Constructed from U-Shaped Rigid Ditopic Ligand
Poster 8 Sasanka Dalapati¹ and Donglin Jiang^{1,2*} (¹IMS; ²JAIST)
An Alternative to the Aggregation Induced Emission
Poster 9 Naomi Orito, Tsuneaki Sakurai, and Shu Seki (Kyoto University)
Development of Electroactive Foldamers Composed of Planar π -Conjugated Systems and Flexible Chains

- Poster 10 Ning Huang¹ and Donglin Jiang^{1,2*} (¹IMS; ²JAIST)
Tailor-Made Pore Surface Engineering in Covalent Organic Frameworks for Performance Screening
- Poster 11 Ryohei Yamakado and Hiromitsu Maeda (Ritsumeikan University)
Ion-Pairing Assemblies Based on Various Receptor-Anion Complexes
- Poster 12 Qing Xu^{1,2} and Donglin Jiang^{1,3*} (¹IMS; ²Sokendai; ³JAIST)
Carbonized Covalent Organic Frameworks for Oxygen Reduction Reaction
- Poster 13 Hiromitsu Maeda and Shunsuke Kaname (Ritsumeikan University)
Synthesis of Cyclic Anion-Responsive π -Electronic Molecules and Their Assemblies
- Poster 14 Ping Wang^{1,2} and Donglin Jiang^{1,3*} (¹IMS; ²Sokendai; ³JAIST)
Design and Synthesis of Triangular Covalent Organic Framework
- Poster 15 Wakana Naito and Hiromitsu Maeda (Ritsumeikan University)
Chirality Induction of π -Electronic Systems by Inner Modifications
- Poster 16 Shanshan Tao^{1,2} and Donglin Jiang^{1,3*} (¹IMS; ²Sokendai; ³JAIST)
Proton Conduction in Crystalline, Mesoporous, Covalent Organic Frameworks
- Poster 17 Yohei Haketa, Yuya Bando, and Hiromitsu Maeda (Ritsumeikan University)
Ion-Pairing Assemblies Based on π -Electronic Anions
- Poster 18 Lipeng Zhai^{1,2} and Donglin Jiang^{1,3*} (¹IMS; ²Sokendai; ³JAIST)
Covalent Organic Frameworks for Carbon Dioxide Capture
- Poster 19 Yuya Matsuta, Daisuke Sakamaki, and Shu Seki (Kyoto University)
Synthesis and Electronic Properties of Triphenylamine Derivatives with Small Internal Reorganization Energy Stemming from Nonbonding Character in Frontier Orbitals

【分子研研究会（一般）】

金属錯体の非対称配位圏設計と異方集積化が拓く新物質創成科学
2016年3月5日（土）～6日（日） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

3月5日（土）

- 13:00-13:10 趣旨説明
塩谷 光彦（東京大学大学院理学系研究科）
- 13:10-13:40 大坪 主弥（京都大学大学院理学研究科）
「多孔性金属 - 有機ナノチューブにおけるプロトン輸送空間」
- 13:40-14:20 二瓶 雅之（筑波大学数理物質系化学域）
「外部刺激応答性環状四核錯体の水素結合による集積化」
- 14:20-15:10 村橋 哲郎（東京工業大学大学院理工学研究科）
「拡張 - 共役系不飽和炭化水素を用いた金属集積」
- 15:30-16:00 雨夜 徹（大阪大学大学院工学研究科）
「ポウルスマネンの金属錯体」
- 16:00-16:40 三宅 弘之（大阪市立大学大学院理学研究科）
「アミノ酸誘導体配位子からなる錯体ヘリシティーの創生と動的構造変換プログラミング」
- 16:40-17:30 八島 栄次（名古屋大学大学院工学研究科）
「ラセン構造に由来するキラル物質の創成と機能開発」
- 18:00-20:00 懇親会

3月6日（日）

- 9:00- 9:40 莊司 長三（名古屋大学大学院理学研究科）
「外部添加因子による生体触媒の反応空間制御」
- 9:40-10:30 江原 正博（分子科学研究所）
「非対称配位場をもつ金属錯体の光学物性と触媒活性：理論計算化学からのアプローチ」
- 10:40-11:20 楊井 伸浩（九州大学工学研究院応用化学部門，分子システム科学センター）
「フォトン・アップコンバージョンを示す錯体システムの構築」
- 11:20-12:10 唯 美津木（名古屋大学物質科学国際研究センター）
「金属錯体・クラスターの固定化による表面配位圏の設計」
- 12:10-12:20 閉会挨拶

【分子研研究会（一般）】

触媒の分子科学：理論と実験のインタープレイ最前線

2016年3月9日（水）～10日（木） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

3月9日（水）

- 13:00-13:05 開会・司会 長谷川淳也（北海道大学）
- 13:05-13:35 中嶋 敦（慶応義塾大学，JST-ERATO，KiPAS）
“金属ナノクラスターの触媒活性のサイズ効果：気相と液相の革新的実験アプローチ”
- 13:35-14:05 石川敦之（早稲田大学）
“金属ナノ粒子によるCO酸化反応に関する理論的研究：CO被覆率及び担体効果の検討”
- 14:05-14:35 福岡 淳（北海道大学）
“低温エチレン酸化と冷蔵庫触媒の実用化”
- 14:35-15:05 奥村光隆（大阪大学）
“触媒機能発現に関するヘテロ接合効果の理論的研究”

司会 武次徹也（北海道大学）

- 15:35-16:05 町田正人（熊本大学）
“遷移元素を取り込んだCeO₂表面構造による貴金属代替触媒機能”
- 16:05-16:35 邨次 智（名古屋大学）
“酸化物表面と金属錯体を駆使した触媒創出：構造と機能”
- 16:35-17:05 古山通久（九州大学）
“不均質系触媒および電極触媒における実測 - 計算協働：構造の観点からの一考察”
- 17:05-17:35 田中庸裕（京都大学）
“自動車排ガス触媒のメカニズム——自動車用触媒の貴金属低減に向けて”
- 18:00- 懇親会

3月10日（木）

司会 奥村光隆（大阪大学）

- 09:30-10:00 武次徹也（北海道大学）
“触媒反応への理論化学からのアプローチ：実験との協働と概念の提案”
- 10:00-10:30 佃 達哉（東京大学）
“貨幣金属クラスター触媒の開発”
- 10:45-11:15 榊 茂好（京都大学）
“複合金属微粒子の構造と電子状態”
- 11:15-11:45 小林久芳（京都工芸繊維大学）
“最近の酸化チタン表面の光触媒作用の研究”
- 11:45-12:15 薩摩 篤（名古屋大学）
“ガルバニック析出法によるバイメタル触媒：Ag-Ni と Pd-Co の例を中心に”

司会 江原正博（分子研）

- 13:30-14:00 山口和也（東京大学）
“マンガン酸化物をベースとした酸化触媒および新反応の開発”
- 14:00-14:30 福田良一（分子科学研究所）
“触媒系の電子状態と反応機構の解明にむけた理論計算による取り組み”
- 14:45-15:15 吉澤一成（九州大学）
“アンモニア合成反応における理論と実験のインタープレイ”
- 15:15-15:45 北川 宏（京都大学）
“ナノ物質における状態密度エンジニアリング”
- 15:45-15:50 閉会 江原正博（分子科学研究所）

(4) 若手研究会等

課 題 名	提案代表者
第55回分子科学若手の会夏の学校講義内容検討会	京都大学大学院理学研究科 田中 駿介

(5) 岡崎コンファレンス

課 題 名	提案代表者
テンソル積状態のアルゴリズムと応用	分子科学研究所 鹿野 豊

(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 整備	分子科学研究所	手島 史綱
XAFS による Mg 基板上へ作製した Si 添加ハイドロキシアパタイト多孔体のライン分析の検討	東北大学金属材料研究所	佐藤 充孝
MTB 触媒用 Mo/H-MFI の炭化経時変化の L 殻 XANES による検討	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
第三周期元素の K 吸収端プリエッジスペクトルの温度依存性解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
軟 X 線吸収分光法を用いた絶縁材料のその場観察	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
単結晶性金属ドーパ単分子膜の電子構造の研究	産業技術総合研究所計測フロンティア部門	細貝 拓也
価電子帯および内殻光電子分光法による有機ヘテロ界面に発生する「バンドの曲がり」の精密評価	東京理科大学理工学部	中山 泰生
Determination of the Interface Electronic Structure of L-Cysteine with Noble Metal Nanoparticles	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika
真空紫外励起でのワイドギャップホウ酸塩の固有発光と多重自励起子生成およびエネルギー移動	秋田大学大学院工学資源学研究所	小玉 展宏
高発光量パイロシリケート型シンチレータの探索とそのメカニズムの解明	東北大学金属材料研究所	黒澤 俊介
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	早稲田大学大学院先進理工学研究所	大木 義路
深紫外発光アルミニウム酸亜鉛蛍光体の基礎物性評価	静岡大学大学院工学研究科	小南 裕子
窒化炭素発光デバイス材料の発光測定	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
VUV Spectroscopy for the Inorganic Materials Doped with Lanthanide Ions	分子科学研究所	田中 清尚
異方的近藤半導体の偏光真空紫外反射スペクトル	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
NaCl 単結晶中の不純物イオン間の励起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
電子・電子・イオン同時計測による分子 2 価イオン状態の安定性の研究	富山大学	彦坂 泰正
マルチフェロイック酸化物中の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 整備	分子科学研究所	岩山 洋士
EUV 高次高調波用の高反射率多層膜ミラーの開発	東北大学多元物質科学研究所	豊田 光紀
固体惑星の EUV 分光に関する基礎実験	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉川 一朗
2 元系アモルファス半導体における光誘起真空紫外吸収変化の組成依存性	岐阜大学工学部	林 浩司
紫外光誘起赤外吸収分光によるシンチレーター結晶の電子捕獲中心の解明	山形大学理学部	北浦 守
不純物中心の観測を利用した太陽電池グレードシリコンの結晶評価	東北学院大学工学部	原 明人
BL6B の整備	分子科学研究所	手島 史綱
鉛フリー圧電体の遠赤外線スペクトル	名古屋工業大学大学院工学研究科	柿本 健一
赤外顕微円二色性イメージングの開発と生体試料への応用	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
新奇原子層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
清浄ベンタセン単結晶の価電子バンド構造の深さ分解解析	東京理科大学理工学部	中山 泰生
パイロクロア型イリジウム酸化物で開拓する強相関系トポロジカル量子相	東京大学物性研究所	近藤 猛
トポロジカル絶縁体 / 磁性絶縁体超格子の電子構造	東京工業大学大学院理工学研究所	平原 徹
有機半導体における電子格子相互作用の検出	分子科学研究所	解良 聡
電荷・スピンストライブ秩序相を有する高温超伝導体の電子構造	分子科学研究所	田中 清尚
Local Orbital Angular Momentum Studies on Bulk Spin-Split Bands in GaAs, InSb and CdTe Using Low Photon-Energy Circular-Dichroism in ARPES	分子科学研究所	田中 清尚
Circular Dichroism ARPES Studies on Magnetic Impurity Topological Insulator	分子科学研究所	田中 清尚
BL7U 光電子エンドステーションの整備	豊田工業大学	松波 雅治
擬一次元有機導体 (TMTTF) ₂ X の低励起エネルギー角度分解光電子分光 : モット局在 - 電荷秩序相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
鉄系超伝導体 NdFe(As,P)(O,F) 単結晶の角度分解光電子分光によるフェルミ面と超伝導ギャップの観測	大阪大学大学院理学研究科	田島 節子
微小ギャップ半導体のバンド構造と表面電子構造	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
中性子輝散性蛍光体における蛍光寿命特性	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 のウィットネスサンプル評価	国立天文台	成影 典之
VUV エリブソメトリーの整備	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
真空紫外反射によるニオブリン酸ガラス中のニオブイオンの電子状態の研究	産業技術総合研究所ユビキタスエネルギー研究部門	北村 直之
角度分解紫外光電子分光法を用いた自己組織化単分子膜上の有機分子薄膜の分子配向	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司

金属ナノ構造の量子化電子状態と吸着有機分子軌道との界面電子構造に関する研究 Development and Maintenance of the BL-8B	東京理科大学理工学部 千葉大学先進科学センター	中山 泰生 KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika
有機 / 金属界面への低エネルギー照射による光電子放出現象の解明 クラスター内包フラ - レンの紫外光電子スペクトル Dimerization and Band Formation in Organic Thin Films 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 光電子イメージング装置と可視域発光測定用ガスセルの性能評価 原子核乾板の最小電離粒子に対する感度評価 光学反射率による半導体 In_2Se_3 のバンドギャップの観測 コヒーレント光源の利用技術の開発と固体分光への応用 有機固体専用光電子分光ラインの構築 : BL2B の立ち上げ 真空紫外発光分による固体光励起状態の包括的研究	近畿大学理工学部 岡山大学安全衛生推進機構 分子科学研究所 広島大学大学院先端物質科学研究科 九州シンクロトロン光研究センター 名古屋大学エコトピア科学研究所 分子科学研究所 大阪大学大学院生命機能研究科 分子科学研究所 山形大学理学部	田中 仙君 宮崎 隆文 解良 聡 栗木 雅夫 金安 達夫 中村 光廣 出田 真一郎 木村 真一 解良 聡 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 BL1B 整備 MTB 触媒用 Mo/H-MFI の炭化経時変化の L 殻 XANES による検討 第三周期元素の K 吸収端プリエッジスペクトルの温度依存性解析 単結晶性金属ドーパ単分子膜の電子構造の研究 価電子帯および内殻光電子分光法による有機ヘテロ界面に発生する「バンドの曲がり」の精密評価 Determination of the Interface Electronic Structure of L-Cysteine with Noble Metal Nanoparticles 真空紫外励起でのワイドギャップホウ酸塩の固有発光と多重自励起子生成およびエネルギー移動 高発光量パイロシリケート型シンチレータの探索とそのメカニズムの解明 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 深紫外発光アルミニウム酸亜鉛蛍光体の基礎物性評価 窒化炭素発光デバイス材料の発光測定 VUV Spectroscopy for the Inorganic Materials Doped with Lanthanide Ions NaCl 単結晶中の不純物イオン間の励起エネルギー移動の研究 電子・電子・イオン同時計測による分子 2 価イオン状態の安定性の研究 マルチフェロイック酸化物中の磁性元素の電子状態解析 BL4B 整備 固体惑星の EUV 分光に関する基礎実験 2 元系アモルファス半導体における光誘起真空紫外吸収変化の組成依存性 紫外光誘起赤外吸収分光によるシンチレーター結晶の電子捕獲中心の解明 不純物中心の観測を利用した太陽電池グレードシリコンの結晶評価 BL6B の整備 鉛フリー圧電体の遠赤外線スペクトル 赤外顕微円二色性イメージングの開発と生体試料への応用 トポロジカル絶縁体 / 磁性絶縁体超格子の電子構造 中性子輝散性蛍光体における蛍光寿命特性 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 VUV エリプソメトリーの整備 角度分解紫外光電子分光法を用いた自己組織化単分子膜上の有機分子薄膜の分子配向 金属ナノ構造の量子化電子状態と吸着有機分子軌道との界面電子構造に関する研究 有機 / 金属界面への低エネルギー照射による光電子放出現象の解明 クラスター内包フラ - レンの紫外光電子スペクトル 窒化処理により析出する合金窒化物の局所構造解析 水熱合成した AlPO_5 試料の構造評価 軟 X 線吸収分光法を用いた電圧印加中の金属 / 酸化物界面反応の研究 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	東北学院大学工学部 分子科学研究所 埼玉工業大学工学部 早稲田大学理工学術院 産業技術総合研究所計測フロンティア部門 東京理科大学理工学部 千葉大学先進科学センター 秋田大学大学院工学資源学研究所 東北大学金属材料研究所 早稲田大学大学院先進理工学研究所 静岡大学大学院工学研究科 福井大学大学院工学研究科 分子科学研究所 大阪府立大学大学院理学系研究科 富山大学 早稲田大学理工学術院 分子科学研究所 東京大学大学院新領域創成科学研究科 岐阜大学工学部 山形大学理学部 東北学院大学工学部 分子科学研究所 名古屋工業大学大学院工学研究科 大阪大学大学院生命機能研究科 東京工業大学大学院理工学研究所 山形大学理学部 東北大学大学院工学研究科 福井大学大学院工学研究科 千葉大学大学院融合科学研究科 東京理科大学理工学部 近畿大学理工学部 岡山大学安全衛生推進機構 東北大学金属材料研究所 大阪府立大学大学院工学研究科 九州シンクロトロン光研究センター 広島大学大学院先端物質科学研究科	淡野 照義 手島 史綱 有谷 博文 山本 知之 細貝 拓也 中山 泰生 KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika 小玉 展宏 黒澤 俊介 大木 義路 小南 裕子 福井 一俊 田中 清尚 河相 武利 彦坂 泰正 山本 知之 岩山 洋士 吉川 一朗 林 浩司 北浦 守 原 明人 手島 史綱 柿本 健一 木村 真一 平原 徹 大西 彰正 越水 正典 福井 一俊 奥平 幸司 中山 泰生 田中 仙君 宮崎 隆文 佐藤 充孝 中平 敦 小林 英一 栗木 雅夫

希土類イオン添加酸化物の真空紫外励起による遷移スペクトル測定と元素添加および合成条件に伴う変化の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野 正人
化合物半導体放射線検出器材料の研究	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
ワイル半金属関連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
電子ドーブ型銅酸化物高温超伝導体の超伝導ギャップ	東京大学大学院理学系研究科	藤森 淳
イリジウム酸化物の角度分解光電子分光測定で実証する強相関系トポロジカル量子相	東京大学物性研究所	近藤 猛
有機半導体における電子格子相互作用の検出	分子科学研究所	解良 聡
BL7U 光電子エンドステーションの整備	分子科学研究所	田中 清尚
高分解能角度分解光電子分光による三層系銅酸化物高温超伝導体の電子構造解明	分子科学研究所	出田真一郎
Fe 周囲の局所構造及び Fe 間距離を制御した $AFe_2(As,P)_2$ ($A = Ba_{1-y}Sr_y, Sr_{1-y}Ca_y, Eu$) のフェルミ面, 超伝導ギャップの研究	大阪大学大学院理学研究科	田島 節子
微小ギャップ半導体のギャップ内準位のスピン偏極性	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
エピタキシャルグラフェンにおけるフォノンおよび局所的周期構造による光電子散乱現象	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
高品質 $CrO_2(001)$ 膜の電子構造研究	岡山大学大学院自然科学研究科	横谷 尚睦
ARPES Studies of Hole Doped Transition Metal Dichalcogenide ($W_{1-x}Ta_xSe_2$ and $Mo_{1-x}Ta_xSe_2$)	Inchon National University	PARK, Seung Ryong
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
CLASP 光学素子の汚染・経年変化モニターと CLASP2 に用いるマグネシウム輝線用光学素子の開発・評価	国立天文台	成影 典之
真空紫外領域における $Ca_xSr_{1-x}F_2$ 単結晶の真空紫外光学特性評価	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 晋吾
逆光電子分光用分光システムの構築	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
オプトセラミックスの真空紫外領域における光学特性	大阪大学レーザーエネルギー学研究所	清水 俊彦
原子核乾板の荷電粒子に対する検出能力の評価	名古屋大学エコトピア科学研究所	中村 光廣
コヒーレント光源の利用技術の開発と固体分光への応用	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
有機固体専用光電子分光ラインの構築: BL2B の立ち上げ	分子科学研究所	解良 聡
真空紫外発光分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

光センサーとアンテナ分子の相互作用解析	日本大学生物資源科学部	高野 英晃
X線結晶構造解析による分子構造の決定	豊橋技術科学大学環境・生命工学系	藤沢 郁英
カルコゲナイド半導体ナノ粒子の発光特性に関する研究	名古屋工業大学大学院物質工学	濱中 泰
硫化銅ナノ粒子の近赤外局在プラズモン共鳴における光学非線形性の研究	名古屋工業大学大学院物質工学	濱中 泰
シクロデキストリン類と薬物の包接複合体の構造解析	愛知学院大学薬学部	小川 法子
キレートカルベン金属錯体の合成と構造解析	静岡大学理学部	仁科 直子
自己凝集能を導入した有機半導体の光吸収と分子配列の解明	静岡大学工学部	植田 一正

装置開発室

(前期)

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装置の開発	名古屋大学グリーンモビリティ連携研究センター	宇理須恒雄
サブテラヘルツ分光測定用温度可変セル	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
ヘリウム準安定励起原子を用いた衝突実験装置の製作	電気通信大学大学院情報理工学研究所	山北 佳宏
光イオン・光電子断層画像観測装置の開発	東京工業大学大学院理工学研究所	水瀬 賢太

(後期)

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装置の開発	名古屋大学グリーンモビリティ連携研究センター	宇理須恒雄
--------------------------------	------------------------	-------

計算機利用

格子欠陥系 X線光電子分光の第一原理的研究	慶應義塾大学理工学部	山内 淳
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
触媒分子系および生体分子系の量子化学と反応動力学	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
金属蛋白質の電子構造制御に関する理論的研究	広島市立大学大学院情報科学研究科	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
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学研究科	立川 仁典
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
革新的量子科学と大規模シミュレーション科学の創造	量子化学研究協会研究所	中辻 博
色素増感太陽電池に関する理論的研究	産業技術総合研究所エネルギー技術研究部門	北尾 修
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
溶液界面の構造と機能の計算化学	東北大学大学院理学研究科	森田 明弘
遷移金属触媒を用いた分子精密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
量子化学計算を利用した化学反応の多面的解析	大阪大学大学院薬学研究科	川下理日人
理論電子および振動スペクトルによる 1-ナフトール-(アンモニア) _n クラスタおよびフェノール-(アンモニア) _n クラスタの基底状態プロトン移動のサイズ依存性に関する研究	東京工業大学資源化学研究所	宮崎 充彦
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と反応経路自動探索の多角的展開	北海道大学大学院理学研究院	武次 徹也
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
超原子価窒素および硫黄・セレン化合物の構造と物性	広島大学大学院理学研究科	山本 陽介
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
分子ナノカーボンの構造と物性	名古屋大学大学院理学研究科	瀬川 泰知
アンサンブル分子ドッキングによるリガンド分子配座探索	金沢大学理工研究域	齋藤 大明
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
超臨界水の並進ダイナミクス解析	徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部	吉田 健
光合成酸素発生中心 CaMn ₄ O 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
有機半導体成長過程の理論的研究	岩手大学工学部	西館 数芽
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
量子化学計算と QM/MM 法を利用した大規模複雑系に関する理論研究	名古屋大学大学院理学研究科	Irle Stephan
種々の溶媒環境下でのグアニン四重鎖構造の自由エネルギー地形	甲南大学先端生命工学研究所	杉本 直己
ミオシン VI およびミオシン V のプロセシブ運動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
タンパク質機能と分子自己組織化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
蛋白質による DNA 加水分解における溶媒の役割	九州工業大学情報工学部	入佐 正幸
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
量子分子科学計算ソフトウェア NTChem の開発とナノサイズ分子の分子機能の解明・設計への応用	理化学研究所計算科学研究機構	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
非共有結合相互作用ならびに抗体・リガンド間相互作用の量子化学計算	北里大学一般教育部	江川 徹
Ni@Ag パイメタル触媒の CO 酸化反応に関するマイクロキネティクス	名古屋大学大学院工学研究科	沢邊 恭一
軟 X 線光化学に関する理論的研究	広島大学サステナブル・ディベロップメント実践研究センター	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
ナノカーボンの転位・解離反応の動力学理論	東北大学大学院理学研究科	河野 裕彦
分子軌道法計算による有機反応および有機分子構造の設計と解析	東京大学大学院薬学系研究科	大和田智彦
タンパク質の安定性に関する研究	立命館大学薬学部	加藤 稔
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
化学反応および光化学・光物理過程のメカニズムとそれに対する反応場の影響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
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
タンパク質粗視化モデルに関する理論的研究	金沢大学理工研究域	川口 一朋
環境中および生体内の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	伊藤 彰浩
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

第一原理計算手法にもとづくナノ構造の形成と機能発現に関する研究	三重大学大学院工学研究科	秋山 亨
クラスターイオンの幾何構造, 反応性および移動度計算	東北大学大学院理学研究科	大下慶次郎
蛋白質の構造変化と機能発現に関する理論的研究	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
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
ガラス系における遅いダイナミクスの理論・シミュレーション研究	新潟大学大学院自然科学研究科	金 鋼
タンパク質に特有なダイナミクスとその分子基盤の解明	横浜市立大学大学院生命医科学研究科	淵上 壮太郎
刺激応答性高分子 PNIPAM の相転移メカニズムの解明	岡山大学大学院自然科学研究科	望月 建爾
蛋白質構造変化に伴う最適な反応座標を探索する計算科学研究	近畿大学先端技術総合研究所	米澤 康滋
銀イオン交換ゼオライトを触媒としたメタン活性化及び転化反応の反応機構の理論的研究	東京工業大学大学院総合理工学研究科	馬場 俊秀
第一原理計算を用いた分子動力学法の開発と界面への応用	大阪大学大学院基礎工学研究科	大戸 達彦
分子集合体の分子動力学シミュレーション	北里大学理学部	米田 茂隆
分子凝集状態における複合化学反応過程に関する理論的研究	名古屋大学大学院情報科学研究科	長岡 正隆
液体界面の分子構造と振動スペクトルの理論研究	富山大学大学院理工学研究部	石山 達也
両親媒性分子の水和構造と熱力学	名古屋大学大学院工学研究科	吉井 範行
3重項 - 3重項消光によるアップコンバージョン過程の理論研究	筑波大学大学院数理工学研究所	重田 育照
X線回折散乱実験と分子シミュレーションを用いた生体分子の動的構造の解析	慶應義塾大学理工学部	笠口 友隆
振電相互作用に関する理論的研究	京都大学大学院工学研究科	佐藤 徹
半導体固体中の複合不純物がつくる分子性リドベルグ状態を介した電子トンネル現象の第一原理的研究	千葉大学大学院理学研究科	中山 隆史
金属錯体の反応性と物性に関する理論的研究	近畿大学理工学部	畑中 美穂
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
分子内および分子間電子移動の研究	神奈川大学理学部	田仲 二郎
クロコン酸結晶における光誘起巨視的強誘電消失の理論的研究	高エネルギー加速器研究機構	岩野 薫
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
マルチスケール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
タンパク質中 D- アミノ酸残基の起源および機能	金沢大学医薬保健研究域	小田 彰史
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
配向性非晶質有機半導体材料の設計指針確立に向けた幾何構造・電子構造・振動モードの計算	山形大学大学院理工学研究科	横山 大輔
強相関電子系におけるレーザー誘起ダイナミクスのシミュレーション	筑波大学数理工学系物質工学域	前島 展也
薬物リード化合物創出のための分子シミュレーション	産業技術総合研究所ゲノム情報研究センター	亀田 倫史
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
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
セルロース結晶表面の溶媒とダイナミクス挙動と結晶性セルロース結合性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
窒素ドーピンググラフェンの合成における N ドープ位置の制御	東京大学大学院理学系研究科	小幡 誠司
キラリティ誘導シッフ塩基金属錯体の光学スペクトルの DFT 計算	東京理科大学理学部	秋津 貴城
Ornstein-Zernike 型積分方程式理論による溶媒と自由エネルギーの高精度推算法の開発	愛媛大学大学院理工学研究科	宮田 竜彦
酸化還元ユニットを有する三次元パイ共役系分子の開発	北里大学理学部	長谷川真士
共鳴禁止にもとづくアジド化合物のクリック反応性向上に関する研究	東京医科歯科大学生体材料工学研究所	吉田 優
貴金属フリー燃料電池用材料の計算化学研究	産業技術総合研究所ナノシステム研究部門	崔 隆基
励起状態における超高速化学結合ダイナミクスの観測と解明	理化学研究所	倉持 光
様々な新奇熱応答性高分子溶液の分子動力学シミュレーション	北海道大学大学院工学研究科	佐藤信一郎
化学反応の ab initio 計算による研究	愛媛大学大学院理工学研究科	長岡 伸一
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
分子磁性体の分子軌道法による理論解析及び新規手法の開発	大阪大学大学院理学研究科	奥村 光隆
金属クラスター上での化学反応の理論的解析	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	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
リパーゼによる脂肪族ジカルボン酸ジエステルの酵素加水分解に関する研究	明星大学理工学部	松本 一嗣
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院	中野 幸司

量子化学計算による炭素1原子を含む分子の酸化還元反応過程の解明	早稲田大学国際教養学部	稲葉 知士
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
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
第一原理量子論による次世代新原理メモリの設計指針の獲得	名古屋大学大学院工学研究科	白石 賢二
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	産業技術総合研究所ナノシステム研究部門	森下 徹也
光解離反応の量子制御に関する理論的研究	日本原子力研究開発機構	黒崎 譲
タンパク質・生体関連巨大分子系の量子化学計算に基づくアプローチ	産業技術総合研究所ナノシステム研究部門	石田 豊和
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
量子化学計算による触媒機能の解明	星薬科大学薬学部	坂田 健
水素結合系における光化学過程の理論的研究	弘前大学大学院理工学研究科	山崎 祥平
第一原理計算手法に基づくナノ電子材料のプロセス/機能制御に関する研究	島根大学大学院総合理工学研究科	影島 博之
遷移金属原子を含む有機金属クラスターの幾何構造と電子物性の解明	慶應義塾大学大学院理工学研究科	増淵 継之助
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	大阪大学大学院工学研究科	櫻井 英博
計算化学的手法によるネオジム触媒を用いたイソプレン重合における立体規則性発現機構の解明	広島大学大学院工学研究科	田中 亮
アゾベンゼン類似体における励起状態光化学反応機構の解明	お茶の水女子大学理学部	近藤 未菜子
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	分子科学研究所	江原 正博
アミロイド線維の形成機構を理解するための分子動力学シミュレーション	分子科学研究所	奥村 久士
分子・分子集合体の運動状態制御と実時間イメージング	分子科学研究所	水瀬 賢太
ナノサイズ分子の2次の摂動(MP2)法による構造最適化並列計算プログラムの開発	分子科学研究所	石村 和也
化学反応動力学のための量子化学計算	分子科学研究所	岩山 洋士
分子動力学計算による水溶液の局所構造の研究	分子科学研究所	長坂 将成
湾曲 共役分子の理論研究	分子科学研究所	東林 修平
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
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	中村 卓
カリウムチャネルでのイオン透過のメゾスコピックな過程の解明とその濃度, 電位依存性	福井大学医学部	老木 成稔
4次元MRIによる脳の機能及び構造解析	生理学研究所	福永 雅喜
有機化合物における置換基効果の微視的機構	鳥取大学大学院工学研究科	早瀬 修一
13族元素を含む高反応性化学種の性質の解明	中央大学理工学部	山下 誠
4dまたは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
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
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	中澤 日出樹
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
縮合多環芳香環部位を有する環状アセチレン分子の自己会合挙動の解明	群馬大学大学院理工学府	加藤 真一郎
DNAと金属錯体との相互作用	中央大学理工学部	千喜 良 誠
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
NMR計測と分子動力学計算を活用した糖鎖および複合糖質のコンフォメーション解析	分子科学研究所	山口 拓実
ピンサー型錯体を用いた触媒反応の反応機構解析	分子科学研究所	浜坂 剛
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
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	早稲田大学先進理工学部	武田 京三郎
小分子活性化を指向した遷移金属錯体の分子設計と理論計算	東京工業大学大学院理工学研究科	石田 豊
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
多孔体触媒細孔内での有機分子の挙動および反応性に関する理論的研究	東京大学大学院総合文化研究科	増井 洋一
量子化学計算による金属酵素活性中心の分子構造解析	兵庫県立大学大学院生命科学研究科	太田 雄大
動的螺旋分子における螺旋反転反応機構の理論的研究	日本女子大学理学部	村岡 梓
金属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
原子核の量子効果を考慮した多成分系理論の開発と応用計算	岐阜大学工学部	宇田川 太郎
ダブルハイブリッド密度汎関数法を用いたフラレン生成熟の高精度計算	理化学研究所	川島 雪生

分子とナノ表面の励起電子状態と陽電子状態の第一原理計算	東京理科大学理学部	渡辺 一之
有害化合物の鉱物表面へ吸着構造の解明	東京大学大学院理学系研究科	田中 雅人
優れた光増感能力を有する有機色素設計の理論的検討	立教大学理学部	三井 正明
QM/MM 計算による光合成水分解反応の分子メカニズムの研究	名古屋大学大学院理学研究科	野口 巧
二酸化炭素を用いる不飽和アミン類の触媒的環化カルボキシル化反応における反応機構解析	東京工業大学大学院理工学研究科	長谷 俊
有機ケイ素化合物の構造と性質	群馬大学大学院理工学部	久新 莊一郎
水素結合性の超臨界流体中での溶質 - 溶媒水素結合	同志社大学理工学部	木村 佳文
金属錯体の電子構造制御と反応機構解明	分子科学研究所	正岡 重行
一価アニオン性多座配位子を有する鉄触媒を用いたオレフィン重合触媒の探索	東京大学大学院工学系研究科	伊藤 慎庫
拡張反応の機構解明研究と触媒反応設計	名古屋大学大学院理学研究科	伊藤 英人
分子スケールからみる液体中のナノ粒子の正確な輸送挙動と Stokes-Einstein の関係	新潟大学大学院自然科学研究科	石井 良樹
水の局所構造と動的挙動; 超短パルスレーザー分光と理論計算の interplay	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
Optical properties of nanocarbon systems	東京工業大学大学院理工学研究科	Juhasz Gergely
Hras-GTP 複合体内外における水分子の動き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
定電位電極表面における分子の吸着構造と拡散過程の第一原理シミュレーション	京都大学学際融合教育研究推進センター	胡 春平
ポテンシャルエネルギー面に基づいた回転異性体 (配座異性体) の配座探索	杏林大学保健学部	田中 薫
Zero-multipole summation 法の分子動力学シミュレーションへの応用	東京大学大学院新領域創成科学研究科	桜庭 俊
軽元素を活用した機能性電子材料の創出	東京大学大学院理学系研究科	神坂 英幸
分子動力学法によるヒトタンパク質 - 薬物相互作用の解析	神戸大学大学院理学研究科	小堀 康博
低原子価ゲルマニウム配位子を有する錯体を用いた 結合活性化	東北大学大学院理学研究科	渡邊 孝仁
シクロデキストリンによる - ラクタム系抗生物質の包接挙動のエネルギー解析	近畿大学生物理工学部	藤澤 雅夫
計算機および生化学実験によるタンパク質分子デザイン	分子科学研究所	古賀 信康
機能性パイ電子系物質の電子物性	京都大学大学院工学研究科	関 修平
7 員環配位子トロポロンのノイノセント挙動	北里大学理学部	吉田 純
プロテインキナーゼ C β 1 ドメインリガンドの結合様式の予測	香川大学農学部	柳田 亮
多核有機金属分子ワイヤーの電子構造の解明	東京工業大学資源化学研究所	田中 裕也
籠型配位子を用いた遷移金属錯体の合成と反応	大阪大学大学院理学研究科	畑中 翼
水素発生と貯蔵を行う遷移金属触媒の分子設計	産業技術総合研究所太陽光発電研究センター	津留崎陽大
単一分子電子素子のための分子設計	大阪大学大学院理学研究科	小川 琢治
量子化学計算によるガス状化学物質と O ₃ ・OH との反応機構の解明	国立環境研究所	古濱 彩子
両親媒性物質 - 水 2 成分系における温度に対する表面張力特異性の解明	東京理科大学理工学部	金子 敏宏
多孔性材料表面での吸着分子の挙動に関する理論研究	東京大学大学院総合文化研究科	尾中 篤
Ctr4 タンパク質における Cys/Trp モチーフの構造と機能	東北大学大学院薬学研究科	平松 弘嗣
高濃度エマルジョンのジャミング転移点近傍における非線形シア応答の MD シミュレーション	大阪大学大学サイバーメディアセンター	吉野 元
第一原理計算準坳の分極関数の開発と種々の振動分光スペクトル計算	京都大学大学院理学研究科	谷村 吉隆
6-7 族金属錯体の構造および反応性に関する理論研究	岡山大学大学院自然科学研究科	浅子 壮美
クライオ電子顕微鏡によるタンパク質の単粒子構造解析	生理学研究所	村田 和義
プロテックなピンサー型配位子を有する遷移金属錯体の合成と反応性	東京工業大学大学院理工学研究科	戸田 達朗
計算分子分光学: 分子の構造および反応に関する計算化学	お茶の水女子大学理学部	平野 恒夫
高効率太陽電池設計に向けた有機無機界面における分子構造・電子状態の解明	東京大学先端科学技術研究センター	城野 亮太
シンクロトロン光源及び自由電子レーザーに関する研究	分子科学研究所	加藤 政博
緑青色蛍光タンパク質 (CFP) の電子励起状態の研究	東邦大学理学部	細井 晴子
新規有機化合物変換反応の開発を指向した理論化学的検討	愛知教育大学理科教育講座	赤倉松次郎
多環 共役系分子の光励起種・イオン種の理論的・実験的振動分光による構造の決定	青山学院大学理工学部	坂本 章
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
質量分析によるペプチドのラジカル分解過程の解析	産業技術総合研究所計量標準総合センター	浅川 大樹
計算化学に基づくゼオライト骨格構造及びアルミニウム含有量・位置の骨格エネルギーへの影響の研究	東京大学大学院工学系研究科	大久保達也
植物由来ポリフェノール化合物と標的タンパク質の相互作用の分子動力学的解析	名城大学薬学部	金田 典雄
放射線損傷による DNA 構造変化の分子動力学シミュレーション	日本原子力研究開発機構	米谷 佳晃
第一原理レプリカ交換法による Li クラスターの安定性研究	計算科学振興財団	西川 武志

量子化学文献データベースの開発
 化学反応経路自動探索プログラム GRRM14

首都大学東京大学院理工学研究科
 東北大学大学院理学研究科

波田 雅彦
 大野 公一

(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力学
 色素増感太陽電池の電子移動過程の理論的研究
 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現
 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
 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
 拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明
 太陽電池および人工光合成における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算
 バイオマス利用のための酵素反応解析
 ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス

東京大学大学院総合文化研究科
 名古屋大学エコトピア科学研究所
 東京大学大学院工学系研究科
 名古屋工業大学大学院工学研究科
 名古屋大学大学院工学研究科
 名古屋大学大学院理学研究科
 東京大学大学院工学研究科
 九州大学高等研究院理学研究院
 横浜国立大学大学院工学研究科

高塚 和夫
 安田 耕二
 押山 淳
 尾形 修司
 岡崎 進
 岡本 祐幸
 山下 晃一
 吉田 紀生
 大野かおる

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 ~ '08		'09		'10		'11		'12		'13		'14		'15		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	107	879	1	28	0	0	1	13	1	21	2	27	1	11	2	32	人数： 登録人数
協力研究	3,825	5,446	119	412	122	316	108	292	123	329	64	183	64	206	60	200	"
招へい 協力研究	195	197	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
所長 招へい	4,154	4,154	148	148	148	148	78	78	93	93	156	156	103	103	103	103	人数： 旅費支給者
研究会	324	5,434	5	110	6	137	4	105	10	207	10	254	6	162	11	93	"
若手研究会 等	1	12	1	10	1	14	1	11	1	19	1	21	2	38	1	16	"
岡崎コンファ レンス	-	-	-	-	-	-	-	-	1	29	1	18	1	34	1	-	"
施設利用 I	1,927	4,350	60	179	66	166	98	266	60	254	41	105	44	191	15	52	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)	4,736	15,789	171	676	170	666	190	668	190	813	204	786	199	751	209	746	"
協力研究 (ナノプラット)	429	914	36	86	35	94	25	64	15	51	52	123	63	147	62	168	"
施設利用 (ナノプラット)	212	515	39	107	25	89	20	35	52	150	132	378	174	453	181	593	"
合計	15,910	37,690	580	1,756	573	1,630	525	1,532	546	1,966	663	2,051	657	2,096	645	2,003	
経費	545,194		-		-		-		-		-		-		-		千円

* 施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用 ('15 年度の数値は、2015.12.25 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 ~ '08		'09		'10		'11		'12		'13		'14		'15		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	15	15	0	0	0	0	4	4	6	6	1	1	1	1	1	1	人数： 旅費支給者
研究会	41	713	2	44	1	1	2	68	4	63	1	37	1	37	1	30	"
施設利用	2,831	13,817	147	660	140	659	139	682	136	706	142	732	125	649	116	705	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	3,309	16,149	149	704	141	660	145	754	146	775	144	770	127	687	118	736	
経費	230,477		-		-		-		-		-		-		-		千円

('15 年度の数値は，2015.12.25 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
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
13	0	0	5	60	149	214
14	1	1	10	17	129	158
合計	43	38	345	197	1,272	1,895

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
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
13	25	6	18	11	44	42	0	68	214
14	17	4	11	18	22	24	1	61	158
合計	212	61	133	191	310	364	19	605	1,895

表3 海外からの研究者(2015年度)

1. 外国人運営顧問			
NAAMAN, Ron	イスラエル	ワイツマン科学研究所教授	
ROSSKY, Peter J.	アメリカ	ライス大学自然科学研究部部長・教授	
2. 分子科学研究所外国人研究職員			
BAGCHI, Biman	インド	Indian Institute of Science	'15. 5.29-'15.12.11
KIM, Hyung Joon	アメリカ	Carnegie Mellon University	'15. 9.14-'15.12.13
3. 日本学術振興会招へい外国人研究者等			
GU, Cheng	中国	分子科学研究所 IMS フェロー	'14. 4. 1-'16. 3.31
PAN, Shiguang	中国	分子科学研究所 IMS フェロー	'15. 4. 1-'17. 3.31
DALAPATI, Sasanka	インド	分子科学研究所 IMS フェロー	'15. 4. 1-'17. 3.31
JACK, Calum Neilson	イギリス	分子科学研究所 IMS フェロー	'15. 7. 1-'16. 3.31
4. 国際共同研究			
RASTI, Soroush	イラン	Sharif University of Technology 大学院生	'15. 4. 1-'15. 5.10
RILHAC, Vincent	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'15. 4. 1-'15. 8.24
SIMOEN, Marine	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'15. 4. 1-'15. 8.24
GOUILLARD, Louis	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'15. 4. 1-'15. 8.24
LIVACHE, Clement	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'15. 4. 1-'15. 8.24
QUINARD, Benoit	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'15. 4. 1-'15. 8.24
CANDEL, Gaelle	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'15. 4. 1-'15. 8.24
CHOUHAN, Lata	インド	Indian Institute of Technology 学部学生	'15. 5. 5-'15. 7.15
THAMMAPORN, Ratsupa	タイ	Kasetsart University 大学院生	'15. 5.31-'15. 7.31
CHIU, Chao-Wen	台湾	National University of Kaohsiung 准教授	'15. 6.28-'15. 7. 5
WANG, Yu-Fu	台湾	Tamkang University 大学院生	'15. 6.28-'15. 7. 5
ZHANG, Yu-Xiang	中国	University of Science and Technology 大学院生	'15. 6.28-'15.11. 1
JUNG, Sung Won	韓国	浦項工科大学校大学院生	'15. 7.25-'15. 8. 1
SOHN, Yeong-Sup	韓国	浦項工科大学校大学院生	'15. 7.17-'15. 8. 1
KWON, Ki Won	韓国	浦項工科大学校大学院生	'15. 7.17-'15. 8. 1
KIM, Keun Su	韓国	浦項工科大学校助教	'15. 7.20-'15. 7.22
RANCAN, Fiorenza	ドイツ	ベルリン自由大学研究員	'15. 8.23-'15. 8.29
KLOSSEK, Andre	ドイツ	ベルリン自由大学研究員	'15. 8.23-'15. 8.30
SCHULZ, Robert	ドイツ	ベルリン自由大学大学院生	'15. 8.23-'15. 8.30
RUEHL ECKART, Gunther Adolf	ドイツ	ベルリン自由大学教授	'15. 8.24-'15. 8.29
FLESCH, Roman	ドイツ	ベルリン自由大学助教	'15. 8.24-'15. 8.31
YAMAMOTO, Kenji	ドイツ	ベルリン自由大学大学院生	'15. 8.23-'15. 8.31
LAI, Yu-Ling	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 非常勤研究員	'15. 9. 1-'15. 9. 5
LIN, Ming-Wei	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center ポスドク研究員	'15. 9. 1-'15. 9. 5
CHANG, Lo-Yueh	台湾	National Tsing Hua University 大学院生	'15. 9. 1-'15. 9. 5
VISOOTSAT, Akasit	タイ	Kasetsart University 大学院生	'15. 8.31-'15.11.30
CHUENIM, Vorrapol	タイ	Chulalongkorn University 大学院生	'15. 9. 1-'15.11.30
YEW, Hanchoi	マレーシア	University of Malaya 大学院生	'15. 8.31-'15.11.30
CHEN, Chi-Liang	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 研究員	'15.12. 8-'15.12.12
5. 所長招へい協力研究員			
MUNRO, Ian	イギリス	Manchester University 名誉教授	'15. 4. 8-'15. 4.16
GEORGESCU, Iulia	イギリス	Nature Physics, Senior Editor	'15.10. 5-'15.10. 6
CHIN, Cheng	アメリカ	The University of Chicago 教授	'15. 4. 1-'16. 3.31
6. 特別訪問研究員			
KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika	スリランカ	千葉大学特任助教	'15. 4. 1-'16. 3.31
7. 招へい研究員			
MIRIAN, Najmeh	イラン	Institute for Reserch in Fundamental Sciences 研究員	'15. 5.10-'15. 5.19 '15. 8. 9-'15. 8.15

LEE, Sze Koon	マレーシア	University of Malaya 大学院生	'15. 5.11-'15. 5.17 '15. 8.12-'15. 9.30
DANG, JingShuang	日本	大阪大学大学院工学研究科 Postdoctoral Fellow	'15. 4. 1-'15. 4. 1
KOBAYASHI, Rika	オーストラリア	Australian National University Academic Consultant	'15. 6.23-'15. 6.24
AMOS, Roger	オーストラリア	Australian National University Manager	'15. 6.23-'15. 6.24
GUPTA, Aditi	インド	The International Institute of Information Technology, Hyderabad 大学院生	'15. 7. 1-'15. 9.27
UDAYAKUMER, Deva Priyakumar	インド	The International Institute of Information Technology, Hyderabad 准教授	'15. 7. 1-'15. 8. 3
MILLER, Dwayne	ドイツ	Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter 教授	'15. 5.24-'15. 5.26
ZHANG, Wei	アメリカ	University of Colorado 准教授	'15. 7.16-'15. 7.19
NOONIKARA, Anurag	インド	Indian Institute of Science Education and Research Mohali 大学院生	'15. 7.20-'15. 8.30
O-THONG, Sompong	タイ	Thaksin University 助教	'15. 8.11-'15. 8.14
PISUTPAISAL, Nipon	タイ	King Mongkut's University 助教	'15. 8.10-'15. 8.14
KALATHINGAL, Mahroof	インド	Indian Institute of Science Education and Trivandrum 大学院生	'15. 9. 1-'15.11.30
CHIPOT, Christophe	フランス	University of Lorraine 教授	'15. 9. 6-'15. 9.13
FRITZ, Torsten	ドイツ	Friedrich-Schiller University 教授	'15. 9. 2-'15. 9. 4
CONFESOR, Mark Nolan P.	フィリピン	Mindanao State University 准教授	'15. 8.23-'15. 8.25
RESERVA, Rosario	フィリピン	Mindanao State University 大学院生	'15. 8.23-'15. 8.25
JEREZ, Michael Jade	フィリピン	Mindanao State University 大学院生	'15. 8.23-'15. 8.25
KREMER, Kristof	ドイツ	Friedrich-Alexander-University 大学院生	'15. 9.26-'15.10. 3
TUKIAINEN, Mikko	フィンランド	University of Turku 大学院生	'15.10. 7-'15.11. 6
ISHIKAWA, Yasuyuki	プエルトリコ	University of Puerto Rico 教授	'15.10.20-'15.10.26
横山知大	オランダ	Delft University of Technology ポスドク研究員	'15. 9.29-'15.10. 2
BORNALES, Jinky	フィリピン	Mindanao State University 教授	'15.11. 8-'15.11.19
PORTUGAL, Renato	ブラジル	National Laboratory for Scientific Computing 教授	'15.11.13-'15.11.20
JEX, Igor	チェコ	Czech Technical University 教授	'15.11.13-'15.11.19
DI FRANCO, Carlo	イギリス	Imperial College London 助教	'15.11.11-'15.11.19
XU, Jian	中国	Chinese Academy of Sciences 教授	'15.11. 2-'15.11. 2
HU, Chin-Kun	台湾	The LSCP, Academia Sinica 研究員	'15.11.26-'15.12. 2
AKA, Gerard	フランス	フランス国立パリ高等化学学校教授	'15.12. 4-'15.12.13
DENG, Hexiang	中国	Wuhan University 教授	'15.11.15-'15.11.16
新井賢亮	アメリカ	Boston University ポスドク研究員	'15.11.26-'15.11.29

8 . 岡崎コンファレンス

SHAM, Tsun-Kong	カナダ	University of Western Ontario 教授	'16. 1.11-'16. 1.14
CHEN, Lin X.	アメリカ	Argonne Natl. Laboratory 教授	'16. 1.11-'16. 1.14
CRAMER, Stephen P.	アメリカ	University of California, Davis 教授	'16. 1.11-'16. 1.14
FISCHER, Peter	アメリカ	University of California, Santa Cruz 教授	'16. 1.11-'16. 1.14
ROGALEV, Andrei	フランス	European Synchrotron Radiation Facility 研究員	'16. 1.11-'16. 1.14
BANULS, Mari Carmen	ドイツ	Max-Planck-Institut für Quantenoptik 助教	'16. 1.11-'16. 1.14
CHA, Min Chul	韓国	Hanyang University 教授	'16. 1.11-'16. 1.14
CHUNG, Myung-Hoon	韓国	Hongik University 教授	'16. 1.11-'16. 1.14
HE, Yin-Chen	ドイツ	Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems 博士研究員	'16. 1.11-'16. 1.14
HUANG, Ching-Yu	アメリカ	State University of New York at Stony Brook 博士研究員	'16. 1.11-'16. 1.14
KAO, Ying-Jer	台湾	National Taiwan University 教授	'16. 1.11-'16. 1.14
KIM, Paniin	韓国	Sungkyunkwan University 大学院生	'16. 1.11-'16. 1.14
LEE, Hyunyong	韓国	Sungkyunkwan University 博士研究員	'16. 1.11-'16. 1.14
NATTAPONG, Paibonvorachat	タイ	Chulalongkorn University 講師	'16. 1.11-'16. 1.14
POILBLANC, Didier	フランス	CNRS and Universite de Toulouse 教授	'16. 1.11-'16. 1.14
POLLMANN, Frank	ドイツ	Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme 教授	'16. 1.11-'16. 1.14
RAN, Ying	アメリカ	Boston College 助教	'16. 1.11-'16. 1.14
SANDVIK, Anders	アメリカ	Boston University 教授	'16. 1.11-'16. 1.14
TU, Wei-Lin	フランス	Université Toulouse III - Paul Sabatier 大学院生	'16. 1.11-'16. 1.14
VIDAL, Guifre	カナダ	Perimeter Institute for Theoretical Physics 教授	'16. 1.11-'16. 1.14
WANG, Ling	中国	Beijing Computational Science Research Center 助教	'16. 1.11-'16. 1.14
XIANG, Tao	中国	Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences 教授	'16. 1.11-'16. 1.14
XIE, Zhiyuan	中国	Renmin University of China 准教授	'16. 1.11-'16. 1.14
YANG, Liping	中国	Chongqing University 講師	'16. 1.11-'16. 1.14
YANG, Shu	カナダ	Perimeter Institute for Theoretical Physics 博士研究員	'16. 1.11-'16. 1.14

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	2014.10.14	2018.10.13	物理化学ディ ビジョン長	所長
中央研究院 原子・分子科学 研究所	台湾	分子科学研究所と中央研究 院原子・分子科学研究所と協 力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)	2014. 2.20	2017. 2.19	所長	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	2014.10.23	2019.10.22	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
物質エネルギー ヘルムホルツ ベルリンセンター	ドイ ツ	物質エネルギーヘルムホル ツベルリンセンターと分子 科学研究所との分子科学分 野における独自共同研究プ ロジェクトに関する覚書	分子科学分野における学術 交流及び共同研究等の実施	2015. 1.16	2016. 6.20	所長	所長
インド科学教育 研究所コルカタ 校	イン ド	自然科学研究機構分子科学 研究所とインド科学教育研 究所コルカタ校との分子科 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	2015.10. 7	2019.10. 6	校長	所長
インド科学研 究所	イン ド	自然科学研究機構分子科学 研究所とインド科学研究所 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	2015.10. 7	2019.10. 6	事務局長	所長

(2015.12.31 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こととなり、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 27 年度は下記の第 75 回岡崎コンファレンスを開催した。

会 議 名: 第 75 回岡崎コンファレンス

“Tensor Network States: Algorithms and Applications 2016”

期 間: 2016 年 1 月 11 日(月) ~ 14 日(木)

場 所: 岡崎コンファレンスセンター

組織委員: 西野 友年(神戸大学), 堀田 知佐(東京大学), 引原 俊哉(群馬大学), 奥西 巧一(新潟大学), 藤堂 眞治(東京大学), Tao Xiang(中国科学院物理研究所), Ying-Jer Kao(国立台湾大学), Guifre Vidal(ペリメータ理論物理学研究所), 鹿野 豊(分子科学研究所)

内 容:

テンソルネットワーク状態とは量子多体系の計算ツールとして近年、世界中で注目を集めている。その代表的な例としては、密度行列繰り込み群法(DMRG)を基礎とした 1 次元のエネルギーギャップのある系に有効な行列積状態(MPS), N 次元のエネルギーギャップのある系に有効な射影エンタングルメントペア状態(PEPS), エネルギーギャップがない系に有効なマルチスケールエンタングルメント繰り込み群法(MERA)などが挙げられる。DMRG がプリンストン大学の Garnet Kin-Lic Chan らによって量子化学計算に応用され手法も多様化していったように、量子多体系を記述する方法論としてテンソルネットワーク状態は有効であることが指摘されている。プリンストン大学の Garnet Kin-Lic Chan は惜しくもインフルエンザのために岡崎には来ることが出来なかったが、Skype を用いて香港から講演を行い、今後のテンソルネットワーク状態の研究の可能性について示唆し、本会議の中でも議論が何度もわき上がった。そして近年、ペリメータ理論物理学研究所の Guifre Vidal らが提唱したテンソルネットワーク繰り込み群法と呼ばれる新しい方法論が開発され、臨界現象を伴う多体系の計算が深化出来る可能性があることが本人により指摘され、同じくペリメータ理論物理学研究所 Shuo Yang により最適化方法に多角的な検討を行うことが出来た。最終日には、東京大学の今井浩らにより、テンソルネットワーク状態とグラフ理論の密接なる関係性についても指摘があり、数値計算

方法として有効であるとする傍証を様々な集めることが出来た。更に、「計算物質科学イニシアティブ (CMSI) との共催事業であった。

外国人招待講演者を以下に挙げる。

Garnet Chan (Princeton University, U.S.A.)
Anders Sandvik (Boston University, U.S.A.)
Guifre Vidal (Perimeter Institute for Theoretical Physics, Canada)
Ying-Jer Kao (National Taiwan University, Chinese Taiwan)
Tao Xiang (Institute of Physics, Chinese Academy of Science, China)
Frank Pollmann (Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Germany)
Ying Ran (Boston College, U.S.A.)
Didier Poilblanc (CNRS and Universite de Toulouse, France)
Mari Carmen Banuls (Max-Planck-Institut für Quantenoptik, Germany)
Shuo Yang (Perimeter Institute for Theoretical Physics, Canada)

また、日本人招待講演者を以下に挙げる。

Takeshi Yanai (Institute for Molecular Science, National Institutes of Natural Sciences)
Naoki Nakatani (Hokkaido University)
Tsuyoshi Okubo (Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo)
Hiroshi Imai (University of Tokyo)

プログラム等は以下のようであった。

The 75th Okazaki Conference

Tensor Network States: Algorithms and Applications 2016

Date: January 11–14, 2016

Site: Okazaki Conference Center (OCC), Conference Room B (1st floor)

Aim

Tensor networks are recognized as one of the most promising numerical tools to study quantum many body systems; representatives are the matrix product state (MPS), the multi-scale entanglement renormalization ansatz (MERA), and the projected entangled-pair states (PEPS), and Density Matrix Renormalization Group (DMRG). By now, the concept covers various fields including material science, quantum chemistry, and lattice gauge theories, and it is desired to share ideas among these fields.

This workshop will focus on the recent developments on tensor network based algorithms and applications. It will host the discussion of current problems and developments among the leading researchers, aiming to promote interactions between selected fields from statistical mechanics to condensed matter, from quantum chemistry to nano-technology and high energy physics.

Program

January 11, 2016

9:30-	Registration
<i>(1st Session Chair: Ying-Jer Kao)</i>	
9:50-10:00	Opening Remarks
10:00-11:00	Guifre Vidal (Perimeter Institute for Theoretical Physics) “Tensor network renormalization: scale invariance on the lattice”
11:00-12:00	Shuo Yang (Perimeter Institute for Theoretical Physics) “Loop optimization for tensor network renormalization”
12:00-13:30	Lunch

(2nd Session Chair: Kouichi Okunishi)

- 13:30-14:30 **Ying-Jer Kao** (National Taiwan University)
“Tree tensor network strong disorder renormalization group on a disordered antiferromagnetic Ising chain in external fields”
- 14:30-15:30 **Tsuyoshi Okubo** (University of Tokyo)
“Ground state properties of frustrated honeycomb and kagome lattice antiferromagnets”
- 15:30-16:00 Coffee Break

(3rd Session Chair: Chisa Hotta)

- 16:00-17:00 **Frank Pollmann** (Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme)
“Many-body localization: Entanglement and efficient numerical simulations”
- 17:00-17:30 **Tomotoshi Nishino** (Kobe University)
“Phase transition of classical Ising model on 2D fractal lattice”
- 17:30-18:00 **Ling Wang** (Beijing Computational Science Research Center)
“Tensor network approach to quantum phase transition”

January 12, 2016

(4th Session Chair: Toshiya Hikihara)

- 10:00-10:30 **Liping Yang** (Chongqing University)
“The fine structure of the entanglement entropy in the O(2) model”
- 10:30-11:00 **Yin-Chen He** (Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems)
“Kagome chiral spin liquid and symmetry protected topological phases”
- 11:00-12:00 **Didier Poilblanc** (CNRS and Universite de Toulouse)
“PEPS representation of chiral and non-chiral topological spin liquids”
- 12:00-13:30 Lunch

(5th Session)

- 13:30-14:30 Poster Session
- 14:30-15:00 Coffee Break

(6th Session Chair: Synge Todo)

- 15:00-16:00 **Anders Sandvik** (Boston University)
“Unusual finite-size scaling in a system with two divergent length scales”
- 16:00-17:00 **Ying Ran** (Boston College)
“Symmetric tensor networks—algorithms to sharply identify classes of quantum phases distinguishable by short-range physics”
- 17:00-18:00 **Mari Carmen Banuls** (Max-Planck-Institut für Quantenoptik)
“Almost conserved local quantities”
- 19:00- Banquet at Okazaki New Ground Hotel

January 13, 2016

(7th Session Chair: Tomotoshi Nishino)

- 10:00-11:00 **Tao Xiang** (Institute of Physics, Chinese Academy of Science)
“Renormalization of frustrated Heisenberg antiferromagnets”
- 11:00-11:30 **Ching-Yu Huang** (State University of New York at Stony Brook)
“Transition of a Z₃ topologically ordered phase to trivial and critical phases”
- 11:30-12:00 **Kouichi Okunishi** (Niigata University)
“Snapshot spectrum and critical phenomenon for the 2D classical spin system”
- 12:00-13:30 Lunch

(8th Session Chair: Guifre Vidal)

- 13:30-13:40 Remark by Director **Iwao Ohmine**
- 13:40-13:50 Conference Photo Session
- 13:50-14:50 **Garnet Chan** (Princeton University)
“Tensor networks—some new directions (Skype Presentation)”
- 14:50-15:50 **Naoki Nakatani** (Hokkaido University)
“QC-DMRG Algorithm on the Tree Tensor Network States (TTNS)”
- 15:50-16:30 Coffee Break

(9th Session Chair: Tao Xiang)

- 16:30-17:00 **Nattapong Paiboonvorachat** (Chulalongkorn University)
“Electronic Structure of Porphin by Semi-empirical HF-DMRG Calculations”
- 17:00-17:30 **Takeshi Yanai** (Institute for Molecular Science)
“Quantum chemistry with density matrix renormalization group”
- 17:30-18:00 **Hideo Sekino** (Toyohashi University of Technology)
“Time Evolution of MPS by QCA”

January 14, 2016

(10th Session Chair: Yutaka Shikano)

10:00-11:00	Hiroshi Imai (University of Tokyo) “Tree Tensor Network, Quantum Computing, and Graph Minor Theory”
11:00-11:30	Hidefumi Hiraishi (University of Tokyo) “Parameterized algorithms to compute Ising partition function via graph decompositions”
11:30-12:00	Hikaru Kawauchi (Kanazawa University) “Tensor renormalization group analysis of CP(N-1) model”
12:00-12:30	Zhiyuan Xie (Renmin University of China) “Some recent applications of tensor renormalization group”
12:30-14:00	Lunch
14:00-18:00	Free Discussion
18:00	Closing

3-4-3 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)、第15回シンポジウム“Hierarchical Structure from Quantum to Functions of Biological Systems”(神戸, 2013年7月)を開催してきた。第16回シンポジウムを2015年7月に釜山で開催予定であったが、6月に韓国で流行したMERS(中東呼吸器症候群)により、延期されることになった。今回は、このような予想しない計画変更を迫られたが、日韓両国からの研究者による継続的なシンポジウムを通して、研究・人材交流を進めている。

3-5 大学院教育

3-5-1 特別共同利用研究員

分子科学研究所は、分子科学に関する研究の中核として、共同利用に供するとともに、研究者の養成についても各大学の要請に応じて、大学院における教育に協力し、学生の研究指導を行っている。また、特別共同利用研究員の受入状況は以下の表で示すとおりであり、研究所のもつ独自の大学院制度（総合研究大学院大学）と調和のとれたものとなっている。

特別共同利用研究員（1991年度までは受託大学院生，1992年度から1996年度までは特別研究学生）受入状況（年度別）

所 属	1977 ~ 2005	06	07	08	09	10	11	12	13	14	15
北海道大学	12										
室蘭工業大学	2										
東北大学	13									3	3
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										1
東京大学	31		2	4	3	3	1	1			
東京工業大学	42								1	1	3
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	9	12
愛知教育大学		1									
名古屋工業大学	17						2	1		3	1
豊橋技術科学大学	39			1							
三重大学	7										
京都大学	42	1	1	1	2			1	1		
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	26			1				2	2	1	1
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	16										
広島大学	38										
山口大学	1										
愛媛大学	9										
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	6						1				
首都大学東京	19	1									
名古屋市立大学	13	8	5	4	4	4	2	3	2	2	1
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	9										
東邦大学	3										
星薬科大学	1										
早稲田大学	13										
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	8	4
計	617	16	17	17	17	17	27	30	24	27	26

* 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（2015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	7	8	19
機能分子科学専攻	9	7	19
計	16	15	38

在籍学生数（2015年12月現在） 単位：人

（年度別）

入学年度専攻		2011	2012	2013	2014	2015	計	定員
構造分子科学専攻	5年一貫	1	3	2	4	3	13	2
	博士後期	0	0	1	6	4	11	3
機能分子科学専攻	5年一貫	1	0	0	1	3	5	2
	博士後期	0	0	3	1	1	5	3

学位取得状況 単位：人

（年度別）

専攻	1991～2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	90(11)	5	5(1)	7	5	2	2	6	4	2	2	130(12)
機能分子科学専攻	74(14)	5	1	4	3	5	1	3	6	1(3)	2	105(17)

()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	1989～2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015
構造分子科学専攻	120	11(1)	8(1)	5(1)	5(3)	5(1)	1(1)	6(2)	5(4)	11(4)	7(3)
機能分子科学専攻	108	4	5(1)	5(2)	7(2)	4(2)	6(2)	8(2)	4	2(1)	4(3)

()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		
	1989-2013年度	2014年度	2015年度	1989-2013年度	2014年度	2015年度
中国	27	4	1	11		
フランス				1		
ロシア				1		
バングラディッシュ	6			2		
インド	1			2		
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		1	1	4		
マレーシア			1			

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 ~ '13 年度	'14 年度	'15 年度	'89 ~ '13 年度	'14 年度	'15 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	1(1)		3(1)
山形大学				2	1		3
筑波大学	1			1			2
群馬大学				1			1
千葉大学	5		1(1)	3			9(1)
東京大学	7			9			16
東京農工大学	1						1
東京工業大学	2(2)		1(1)	3			6(3)
お茶の水女子大学	4			1			5
電気通信大学	1			2			3
横浜国立大学	1						1
新潟大学				1			1
長岡技術科学大学	1						1
富山大学	1						1
福井大学				1			1
金沢大学	2			4			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	3	2(2)		7			12(2)
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)	1	1	16		1	32(1)
京都工芸繊維大学	1			1			2
大阪大学	5	1(1)		4			10(1)
神戸大学	4					1(1)	5(1)
奈良女子大学				1			1
鳥取大学	1			1			2
岡山大学	4			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

群馬工業高等専門学校		1(1)				1(1)
奈良工業高等専門学校					1(1)	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(1)	1	1(1)	6(2)
東邦大学	1(1)			2		3(1)
日本大学				2(1)		2(1)
法政大学	3(1)					3(1)
明星大学	1					1
立教大学		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			3		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	39(3)	5	3	30(3)		77(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 (2015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	13	13	26
准教授	20	8	28
講 師	3	2	5
助 教	11	14	25
大学・公的機関等研究職	35	32	67
民間企業	25	16	41
その他	24	21	45
計	131	106	237

3-5-3 オープンキャンパス・分子研シンポジウム

2015年5月29日(金)に分子研シンポジウム2015を開催し、引き続き30日(土)に分子研オープンキャンパス2015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、分子研や総研大への理解を深めていただくことを目的としている。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9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5名の先生方に講演をお願いした。参加登録者数は、所内は掌握していないが、所外からは70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37名、大学院生20名、教員・研究者10名、民間3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	修士課程	教員・その他	民間	合計
北海道	2	0	2	0	4
東北	0	0	0	0	0
関東	15	8	2	0	25
甲信越	1	1	0	0	2
北陸	1	0	0	0	1
東海	3	0	2	2	7
近畿	7	10	3	1	21
中国	3	0	0	0	3
九州・沖縄	5	1	1	0	7
合計	37	20	10	3	70

3-5-4 夏の体験入学

2015年8月4日(火)から7日(金)までの4日間、分子科学研究所において、第12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、13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4日(火): 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5日(水), 6日(木): 配属研究室にて研究体験

8月7日(金): 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	千葉大学	学部3年	量子論におけるダイナミクスとは何であるかを紙と鉛筆・計算機を駆使して体感しよう！	信定 准教授
2	大阪市立大学	学部4年	金属タンパク質を対象とした研究を体験してみよう	青野 教授
3	愛知工業大学	学部3年	キラル分子を合成し，その機能を探索する	椴山 准教授
4	新潟大学	学部2年	光を使って原子の集団を制御しよう	大森 教授
5	筑波大学	学部3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
6	大阪市立大学 大学院	博士1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
7	名古屋大学	学部2年	タンパク質を「見て」・「触ってみる」，「動かしてみる」，「解析してみる」	斉藤 教授
8	立命館大学	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
9	東京大学	学部3年	遷移金属ナノ触媒を作る！	魚住 教授
10	立命館大学	学部3年	遷移金属ナノ触媒を作る！	魚住 教授
11	法政大学	学部3年	タンパク質を「見て」・「触ってみる」，「動かしてみる」，「解析してみる」	斉藤 教授
12	神戸大学	学部4年	レーザーから発生する光パルスの測定	藤 准教授
13	立命館大学	学部3年	タンパク質で生物時計を作ってみよう	秋山 教授

3-5-5 総研大アジア冬の学校

2015年12月1日（火）から4日（金）の期間，核融合科学研究所・分子科学研究所において，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12回目である。今回の冬の学校は，核融合科学研究所との共同開催であった。海外からの応募者は93名あり，これを書類選考で絞り込み，19名を受け入れた。その国籍別の内訳はタイ6名，中国2名，ベトナム2名，インドネシア3名，台湾1名，マレーシア3名，ネパール1名，インド1名である。また，IIP（IMS国際インターンシッププログラム）の留学生が7名，日本国内からの参加者が5名あり，講師を除く参加者は合計31名であった。今回は，テーマを“Multiple Approaches to Future Energy”とし，エネルギーに関連する核融合科学・分子科学の基礎から最先端にわたる講義が行われた。参加者によるポスター発表も行われた。期間中，最初の3日間を核融合科学研究所（土岐）で行った後，最終日は場所を分子研に移して講義や施設見学が行われた。講演者は下記のとおりである。

OKAMURA, Shoichi (NIFS)

“Introduction to the Magnetic Confinement Fusion: Achievements and Challenges”

GOTO, Motoshi (NIFS, SOKENDAI)

“Fundamentals of Plasma Spectroscopy and its Application for the Fusion Plasma”

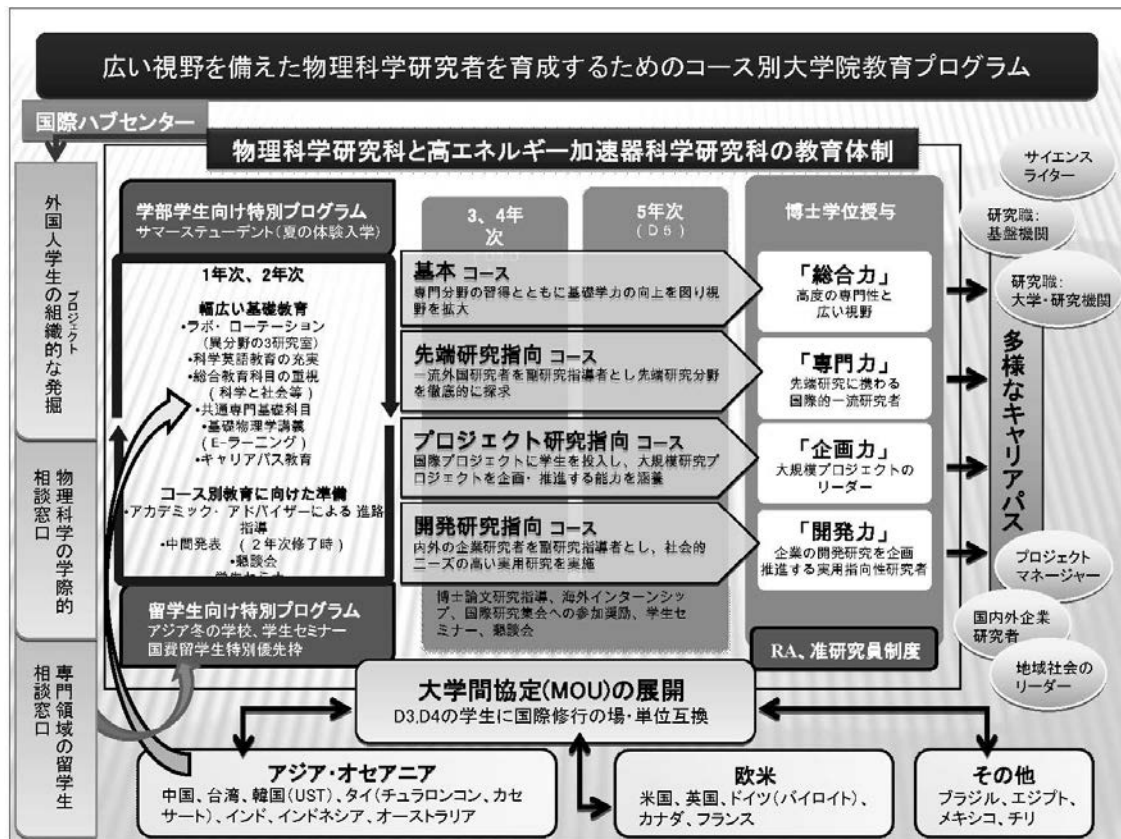
HORIUCHI, Ritoku (NIFS, SOKENDAI)
“Basis of Particle-In-Cell (PIC) Simulation and its Extensions”
SUGAMA, Hideo (NIFS, SOKENDAI)
“Theory and Simulation of Magnetized Fusion Plasmas”
ITO, Atsushi (NIFS, SOKENDAI)
“Multiscale Simulation Research for Plasma-material Interaction”
JIANG, Donglin (IMS, SOKENDAI)
“Two-Dimensional Organic Frameworks Challenging for Energy Issues”
EHARA, Masahiro (IMS, SOKENDAI)
“Elements Strategy for Catalysts and Batteries”
MASAOKA, Shigeyuki (IMS, SOKENDAI)
“Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation”

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

2009～2011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」が実施され、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、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た。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。これを継続する位置づけのものとして2012～2015年度において、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」が実施されている。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専攻が参加している。

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。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。最も重要な取り組みは、3カ月程度の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であり、毎年数名の短期留学を実施している。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科学学生セミナーなど、積極的な取り組みが行われている。これら以外にも、国内民間企業へのインターンシップ、海外国際会議派遣、英語教育、アジア冬の学校、夏の体験入学、専攻内FD等を本プログラムで実施している。

2016年度からは第3期中期計画に入り、総研大のカリキュラムが大きく変わろうとしているためやや流動的な状況ではあるが、海外インターンシップを中心にできる限り本プログラムの長所を継続できるよう調整が進められているところである。



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。2015年度は、総研大からの支援を受け、プログラムを継続実施している (<http://ibep.ims.ac.jp/index.html>)

2015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。本年度は、10科目(統合生命科学入門、 統合生命科学シリーズ、 構造生体分子科学、 基礎生体分子科学、 生体分子シミュレーション入門、 バイオインフォマティクス演習、 統合進化学、 分子細胞生物学、 メカノシステムバイオロジー、 生物情報学(システム生物学特論、ゲノム生物学、バイオインフォマティクス特論、生物統計学基礎、生物情報処理))に、「統合生命科学実践コース」の1科目を新たに加えた。統合生命科学実践コースは、講義と実地演習(実験実習)からなる複合科目で、5年間の集大成として企画された。

(2) 統合生命科学サマースクール(総研大、岡崎統合バイオサイエンスセンターと本プログラム共催)

本年度は、総研大からの支援を受け、構造分子科学専攻の青野重利教授がオーガナイザーで「バイオセンシング研究領域」というタイトルで8月に開催された。海外から多くの参加者があり、また若手や留学生から活発な議論があり盛会であった。

本プログラムの経験を活かした、将来の専攻・研究科を超えた異分野融合教育が行われる必要がある。

