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者とした博士後期課程に加えて，平成 18 年度より学部卒を対象とした５年一貫制博士課程を導入している。

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・計算科学的研究

研究課題
1, 凝縮系における反応・構造変化動力学と物性・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

理論分子科学第二研究部門

研究目的　主として量子力学・統計力学に立脚した凝縮相分子系における動的現象および機能発現の理論計算研究

研究課題
1, 凝縮相化学過程の量子ダイナミクス理論

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, 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（若手独立フェロー）

研究目的
1, 分子集合体の光電子物性とダイナミクスに関する理論・計算科学的研究
2, 生体分子マシンの機能ダイナミクスの理論・計算手法による解明と，そのデザイン原理の探求

研究課題
1, 有機半導体の励起子ダイナミクスの解析
2, 機能性π共役系の光電子物性の解析
3, 生体分子マシンの機能ダイナミクスの全原子・粗視化MD計算による解析
4, 一分子実験・MD計算データの統計力学的モデリング

理論・計算分子科学研究部門（客員）

研究目的
1, 複合光応答をする分子の光物性の理論計算
2, 分子の量子動力学計算のための理論開発と応用
3, 水界面におけるミクロな構造とそのダイナミクスに関する研究

研究課題
1, ３重項－３重項消光に基づくアップコンバージョン機構の理論解析
2, 動的な厳密有効ポテンシャル理論の開発
3, グラフェンを使った水の浄化の研究

光分子科学研究領域

研究目的　物質に光を照射すると，様々な興味深い性質を現したり，化学反応をおこす。様々な分子物質の構造や性質を光で調べること，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ックス研究への適用

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，強相関・極低温リュードベリ原子気体を用いた超高速・多体電子ダイナミクスに関する研究
2，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
3，光電子分光法によるトポロジカル物性の研究
4，局所分光法による有機薄膜電子状態の次元依存性に関する研究

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ニクスの研究

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・生体分子等の物性・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　分子・物質材料の物理的・化学的新機能と機構解明

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　分子集合体・生体分子の物性と機能

研究課題　１, 開殻系分子集合体や生体分子の磁気共鳴研究

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　物質分子科学のコミュニティ交流を通した新しい先端的研究分野の開拓

研究課題　１, 有機系熱電材料とフレシキブル熱電変換デバイス

２, 分子性材料を電極とする二次電池の開発

３, ディラック電子系有機導体をチャネルとした FET 製作と量子輸送

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　タンパク質や複合糖質等の生体分子が示す多彩な機能発現の詳細な分子機構を明らかにするとともに，生体分子や人工細胞の設計・創成を行う

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, 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
3, 生体分子モーターのエネルギー変換機構の解明，新規設計と実証
4, 合成両親媒性分子を用いたベシクル型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, 有機金属錯体触媒における反応中間体錯体と反応生成物との相関性を評価する手法の確立
2, 生体触媒の基質特異性変換による高難度物質変換
3, 酵素タンパク質の超分子複合体形成による効率的な細胞内連続化学反応の分子機構の解明

研究課題
1, 不斉ニッケル触媒による反応中間体錯体と鏡像体過剰率との相関に関する研究
2, 基質類似物質による酸化酵素の活性化とガス状アルカン水酸化
3, 嫌気呼吸に関わる酵素タンパク質の複合体形成とその機能的意義の解明

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, ナノスケール曲面を有するグラフェン半導体分子
3, 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，①テラヘルツから軟X線にいたる先端光源の開発；②高出力超短パルスレーザーを用いた量子制御法の開発；③高分解能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ニ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，ポスト「京」重点課題アプリケーション開発　重点課題５「エネルギーの高効率な創出，変換・貯蔵，利用の新規基盤技術の開発」，同重点課題７「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」，科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業「計算物質科学人材育成コンソーシアム」の３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，生理科学などの学際領域にまたがる諸問題に対し，総合的な観点と方法論を適用，駆使するとともに，生命現象の基本に関する諸問題を分子レベルから，細胞，組織，個体レベルまで統合的に捉えた独創的研究により，新しいバイオサイエンスを切り開くことを目的としている。

3-3　共同利用研究

3-3-1　共同利用研究の概要

大学共同利用機関の重要な機能として，所外の分子科学及び関連分野の研究者との共同利用研究を積極的に推進している。そのために共同利用研究者宿泊施設を用意し，運営会議で採択されたテーマには，旅費及び研究費の一部を支給する。次の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）」分子科学に関連した新しい研究分野開拓のための準備研究

(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　2016 年度の実施状況

(1)　課題研究

課　題　名	提案代表者	
生体微量元素科学の新基軸	大阪大学大学院工学研究科	伊東　　忍
量子計測を用いた振動状態分光	分子科学研究所	鹿野　　豊

(2)　協力研究

課　題　名（通年）	代　表　者	
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
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
シリセン・ゲルマネンヘテロ構造の電子状態測定	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	高村由起子
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資構造科学研究所	足立　純一
軟Ｘ線オペランド分光を利用した革新的水分解触媒の創生	慶應義塾大学理工学部	吉田　真明
熱変性を利用したタンパク質ミスフォールディング過程の理解と神経変性疾患	慶應義塾大学理工学部	古川　良明
キラルソフトマトリックス中のアキラル錯体への偏光照射によるキラル分子配向誘導	東京理科大学理学部	秋津　貴城
BL1U 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
高強度 THz 励起時間分解光電子分光装置の開発	大阪大学大学院生命機能研究科	渡辺　　浩
桂皮酸メチル誘導体の $^1n\pi^*$ 状態の探索と光異性化機構の解明	広島大学大学院理学研究科	江幡　孝之
環境適合型発光バイオマーカーを指向した希土類ナノ粒子の表面構造解析と化学修飾	島根大学教育学部	西山　　桂

合成学的アプローチによる複合糖質の動的構造解析	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	山口　拓実
全反射照明蛍光・暗視野顕微鏡を利用した V_1-ATPase の回転運動と ATP 加水分解反応の同時計測	東京大学大学院工学系研究科	上野　博史
LZMW を利用したキネシンと ATP の１分子蛍光計測	京都大学大学院工学研究科	横川　隆司
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
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物質科学研究科	重田　育照
緑色植物の光化学系 II における初期電荷分離過程の分子論的機構解明	琉球大学理学部	東　雅大
強度スクイーズド状態を用いた分子分光の応用可能性	北海道大学大学院情報科学研究科	松岡　史晃
メタフォトニックスによる赤外域分子輝線多重渡蔽光学素子の開発	岩手大学人文社会科学部	花見　仁史
結晶性イオン導電材料の合成と構造解析	東京工業大学大学院総合理工学研究科	鈴木　耕太
準安定３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
軌道角運動量を運ぶ円偏光アンジュレータ高次光の利用研究探索	広島大学放射光科学研究センター	佐々木茂美
高効率なスピン偏極電子検出器の開発に向けた表面の化学状態制御法の創出	東京大学大学院理学系研究科	岡林　潤

課　題　名（前期）	代　表　者	
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
第１級芳香族アミンとアルコールを用いた含窒素環骨格の直接的触媒合成法の開発	山形大学工学部	皆川　真規
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
時間分解赤外分光法によるレチナー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
改良型人工タンパク質ナノブロックによる自己組織化ナノ構造複合体の創製と解析	信州大学繊維学部	新井　亮一
生命現象へ現実的に適応可能な Vicsek モデルの拡張	東京理科大学理学部	住野　豊
常温接合を用いたダイヤモンドとレーザー結晶との複合構造高出力レーザーの開発	中央大学理工学部	庄司　一郎
解離イオンとオージェスペクトルから探るジフルオロキセノンの内殻励起状態	関西学院大学理工学部	河野　光彦
異方性二次元キラルナノ構造体における円二色性の起因の解明	早稲田大学理工学術院先進理工学研究科	朝日　透
磁気ドメイン制御型 Q スイッチレーザーの小型化	豊橋技術科学大学電気・電子情報工学系	後藤　太一
キラルプラズモンとキラル磁性結晶	大阪府立大学大学院工学研究科	戸川　欣彦
水中における金属ナノ粒子を触媒とする反応の機構に関する研究	大阪工業大学工学部	大高　敦
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
2μm レーザーによる遠・中赤外光パルス発生の研究	香川大学工学部	鶴町　徳昭

課　題　名（後期）	代　表　者	
キラルプラズモンとキラル磁性結晶	大阪府立大学大学院工学研究科	戸川　欣彦
超薄膜液体の電気・光物性測定	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	田島　裕之
UVSOR における高調波加速空胴の開発研究	名古屋大学大学院工学研究科	持箸　晃
偏極量子ビーム照射による生体有機物ホモキラリティ研究	広島大学放射光科学研究センター	松尾　光一
第１級芳香族アミンとアルコールを用いた含窒素環骨格の直接的触媒合成法の開発	山形大学工学部	皆川　真規
蛋白質の構造変化における「弱い」相互作用の解析	京都大学大学院理学研究科	今元　泰
人工タンパク質ナノブロックによる自己組織化ナノ構造複合体の創製と解析及びまとめ	信州大学繊維学部	新井　亮一
レーザー超音波を用いた航空機構造の検査におけるレーザー照射条件の最適化	東京大学生産技術研究所	岡部　洋二
常温接合を用いたダイヤモンドとレーザー結晶との複合構造高出力レーザーの開発	中央大学理工学部	庄司　一郎
磁気ドメイン制御型 Q スイッチレーザーの小型化	豊橋技術科学大学電気・電子情報工学系	後藤　太一
2μm レーザーによる遠・中赤外光パルス発生の研究	香川大学工学部	鶴町　徳昭
解離イオンとオージェスペクトルから探るジフルオロキセノンの内殻励起状態	関西学院大学理工学部	河野　光彦
２価の多原子分子イオンの解離ダイナミクス	富山大学大学院医学薬学研究部	彦坂　泰正
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
抗 HIV 感染薬効メカニズムについての分子動力学シュミレーション	国立国際医療研究センター	尾又　一実
生命現象へ現実的に適用可能な Vicsek モデルの拡張	東京理科大学理学部	住野　豊
ダブルパルス励起における誘導放出の量子干渉への影響についての研究	奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科	香月　浩之
水中における金属ナノ粒子を触媒とする反応の機構に関する研究	大阪工業大学工学部	大高　敦
ペンタセン単結晶清浄表面の角度分解紫外光電子分光法による研究	東京理科大学理工学部	中山　泰生
中赤外線レーザーが神経変性疾患原因凝集体を解離する過程の分子科学シュミレーション	群馬大学大学院保健学研究科	中村　和裕
分子シミュレーションによるアミロイド線維の解離機構の解明	東京理科大学総合研究院	川崎　平康
希ガスの時間分解蛍光分光	上智大学理工学部	東　善郎
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

(3) 研究会

① 【分子研研究会（一般）】
超機能分子の創成：合成，計測，数理が織りなす社会実装分子の戦略的設計と開発
2016 年 6 月 27 日（月）～ 28 日（火） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

June 27, 2016 (Mon)

13:00-13:10 Opening remarks by Prof. Takafumi Ueno

Session I (13:10-14:40) Chairman: Prof. Uchihashi

13:10-13:40 Kazuya Watanabe (Tokyo Univ. Pharm. Life Sci.)
"Connecting intracellular catabolism to external electrodes"

13:40-14:10 Ryota Iino (Institute for Molecular Science)
"Our approaches toward 'real' engineering of protein molecular machines"

14:10-14:40 Chun-Biu Li (Hokkaido Univ.)
"Single Molecule Time Series Analyses of F_1-ATPase to Unveil the Roles of ATP Hydrolysis"

Session II (15:00-16:00) Chairman: Prof. Iino

15:00-15:30 Nobuhiro Yanai (Kyushu Univ.)
"Photon upconversion in self-assembled molecular systems"

15:30-16:00 Waka Nakanishi (National Institute for Materials Science)
"Control of molecular machines at 2D-interface"

Session III (16:20-17:20) Chairman: Prof. Kinbara

16:20-16:50 Takayuki Uchihashi (Kanazawa Univ.)
"Visualization of Functional Dynamics of Biological Molecules by High-Speed AFM"

16:50-17:20 Nobuyasu Koga (Institute for Molecular Science)
"Design of various α-β and myriad all-α protein structures"

17:20-17:50 Tatsuya Nojima (Tokyo Tech)
"Protein Condensate: Development of Integrated-Protein Liquid Material"

18:30- Dinner

June 28, 2016 (Tue)

Session IV (9:30-10:30) Chairman: Prof. Ueno

9:30-10:00 Satoru Nagatoishi (Univ. of Tokyo)
"Thermodynamics of the interaction between proteins and small compounds in drug discovery"

10:00-10:30 Ryoichi Arai (Shinshu Univ.)
"Self-assembling supramolecular nanostructures created from de novo protein nano-building blocks"

Session V (10:50-11:50) Chairman: Prof. Nagatoishi

10:50-11:20 Kenya Furuta (Advanced ICT Research Institute)
"Creating novel biomolecular motors based on dynein and actin-binding proteins"

11:20-11:50 Takafumi Ueno (Tokyo Tech)
"Biosupramolecular materials designed by protein assemblies"

Session VI (13:30-14:30) Chairman: Prof. Arai

13:30-14:00 Takehiro Sato (Spiber Inc.)
"Proteins: The New Frontier in Material Science"

14:00-14:30 Kazuaki Kato (Univ. of Tokyo)
"Molecular designs for soft and hard materials of polyrotaxanes"

Session VII (14:50-15:50) Chairman: Prof. Furuta

14:50-15:20 Kazushi Kinbara (Tokyo Tech)
"Design of synthetic molecules mimicking structure and function of proteins"

15:20-15:50 Tsutomu Hamada (JAIST)
"Physical design of artificial cell membranes"

Session VIII (16:10-17:10)　　　Chairman: Prof. Hamada

16:10-16:40　Hideki Nabika (Yamagata Univ.)
"Spatiotemporal Organization under Continuous Flow: Design from Chemical and Mathematical Approaches"

16:40-17:10　Yusuke Maeda (Kyushu Univ.)
"Physics of optothermal diffusiophoresis: From the origin of life to molecular manipulation"

17:10-17:25　Closing remarks Prof. Ryota Iino

② 【分子研研究会（一般）】
有機金属化学の大潮流
2016 年 9 月 2 日（金）～ 3 日（土）　岡崎コンファレンスセンター

9 月 2 日（金）

13:00 – 13:10　開始の挨拶

13:10 – 14:10　「アリル化・脱アリル化」
北村 雅人（名古屋大学大学院創薬科学研究科教授）
座長：菅 誠治（岡山大学大学院自然科学研究科教授）

14:10 – 15:10　「芳香族化合物の遷移金属触媒反応」
三浦 雅博（大阪大学大学院工学研究科教授）
座長：佐藤 哲也（大阪市立大学大学院理学研究科教授）

15:30 – 16:30　「分子活性化」
茶谷 直人（大阪大学大学院工学研究科教授）
座長：上野 聡（東京工科大学工学部講師）

16:30 – 17:30　「光エネルギーを反応促進力として使う」
村上 正浩（京都大学大学院工学研究科教授）
座長：伊丹 健一郎（名古屋大学 ITbM 拠点長，名古屋大学理学研究科教授，JST-ERATO 研究総括）

18:00 –　懇親会

9 月 3 日（土）

9:00 – 10:00　「二重活性化型不斉触媒の創出」
笹井 宏明（大阪大学産業科学研究所教授）
座長：荒井 孝義（千葉大大学院理学研究科教授）

10:00 – 11:00　「フォトレドックス触媒反応：可視光（太陽光）で促進される有機電子移動触媒反応」
穐田 宗隆（東京工業大学科学技術創生研究院化学科教授，生命科学研究所所長）
座長：引地 史郎（神奈川大学工学部教授）

11:00 – 12:00　「新しい反応活性種創製法の開発」
岩澤 伸治（東京工業大学大学院理工学研究科教授）
座長：櫻井 英博（大阪大学大学院工学研究科教授）

12:00 –　閉式の挨拶

③ 【アジア連携分子研研究会】
Japan-Korea-Taiwan Bioinorganic Chemistry Symposium
（日韓台生物無機化学シンポジウム）
2016 年 9 月 29 日（木）～ 30 日（金）　岡崎コンファレンスセンター小会議室

September 29 (Thu)

9:00- 9:10　Opening (Shinobu Itoh)

Chair: Masahito Kodera (Doshisha Univ.)

9:10- 9:40　Wonwoo Nam (Ewha Womans Univ., Korea)
"Metal-Oxygen Intermediates in Dioxygen Activation Chemistry"

9:40-10:10　Way-Zen Lee (National Taiwan Normal Univ., Taiwan)
"O_2 Activation by a Bio-Mimic of Co-HPCD"

10:10-10:40　Yasuhiro Funahashi (Osaka Univ., Japan)
"Formation of Dioxygen Adducts in Biomimetic Dicopper and Tricopper Systems"

Chair: Hiroshi Fujii (Nara Women's Univ.)

11:00-11:30　Jaeheung Cho (DGIST, Korea)
"Reactivity of Metal(III)-peroxo and -hydroperoxo Intermediates"

11:30-12:00　Chien-Ming Lee (National Taitung Univ., Taiwan)
"Characterization of Coordinatively Unsaturated Mn(II)/Mn(III) Complexes and the Reactivity toward Dioxygen"

Chair: Koichiro Ishimori (Hokkaido Univ.)

13:00-13:30 Shiro Hikichi (Kanakawa Univ., Japan)
"Dioxygen Activation on Mononuclear Non-Heme Iron and Cobalt Complexes"

13:30-14:00 Yutaka Hitomi (Doshisha Univ., Japan)
"Novel Iron-Based Superoxide Dismutase Mimics"

Chair: Takashi Hayashi (Osaka Univ.)

14:00-14:30 Yunho Lee (KAIST, Korea)
"CO_2 Conversion at a Single Nickel Center"

14:30-15:00 Tzung-Wen Chiou (National Tsing Hua Univ., Taiwan)
"[Ni^{III}(OMe)]-Mediated Reductive Activation of CO_2 Affording a Ni(k^1-OCO) Complex"

Chair: Hideki Masuda (Nagoya Inst. Tech.)

15:15-15:45 Tsai-Te Lu (Chung Yuan Christian Univ., Taiwan)
"The Choice of NO vs. NO^-: From the Spectroscopic Characterization to In Vivo Study of Fe-NO Complexes"

15:45-16:15 Chih-Neng (Sodio) Hsu (Kaohsiung Medical Univ., Taiwan)
"Chelation or Dimerization on the Asymmetrical β-Diketiminato Copper and Zinc Complexes"

Chair: Yoshitsugu Shiro (Univ. Hyogo & RIKEN)

16:15-16:45 Chen-Hsiung Hung (Academia Sinica, Taiwan)
"N-Confused Porphyrin Complexes: Effective Compounds as Functional Models for Nitrite Reductase and Nitric Oxide Reductase"

16:45-17:15 Shigeyuki Masaoka (IMS, Japan)
"Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation"

18:00- Banquet

September 30 (Fri)

Chair: Takahiko Kojima (Univ. Tsukuba)

9:00- 9:30 Takafumi Ueno (Tokyo Inst. Tech., Japan)
"Multi-Bioinorganic Functions Designed with Protein Cage"

9:30-10:00 Seung Jae Lee (Cheonbuk National Univ., Korea)
"Oxidation of Methane through Component Interaction from Type II Methanotrophs"

10:00-10:30 Osami Shoji (Nagoya Univ., Japan)
"Non-Native Substrate Hydroxylation Catalyzed by Cytochrome P450s Utilizing False Recognition of Target Substrates"

Chair: Shinobu Itoh (Osaka Univ.)

10:45-11:15 Woon Ju Song (Seoul National Univ., Korea)
"Design of a *De Novo* Metallo-Hydrolase with *In Vivo* Catalytic Activity"

11:15-11:45 Akira Onoda (Osaka Univ., Japan)
"Biohybrid Catalysts Harboring a Synthetic Catalyst within a Protein Cavity"

11:45-12:15 Toshitaka Matsui (Tohoku Univ., Japan)
"Functional Coupling of Mono- and Dioxygenase Chemistries in a Single Active Site Promotes Unique Heme Degradation"

Chair: Yoshio Hisaeda (Kyushu Univ.)

13:15-13:45 Shun Hirota (NAIST, Japan)
"Structure and Function of Heme Protein Oligomers Constructed by Domain Swapping"

13:45-14:15 Kiyoung Park (KAIST, Korea)
"Spectroscopic and Computational Elucidation of Binuclear Non-Heme Iron Enzyme Intermediates"

14:15-14:45 Hiroshi Nakajima (Osaka City Univ., Japan)
"Engineering of Electron Transfer Protein for Biofunctional Materials"

Chair: Shigetoshi Aono (IMS)

15:00-15:30 Mi Hee Lim (UNIST, Korea)
"Engineering Structure-Mechanism-Based Chemical Regulators for Distinct Pathological Factors in Alzheimer's Disease"

15:30-16:00 Yun-Ming Wang (National Chiao Tung Univ., Taiwan)
"Water-Soluble Dinitrosyl Iron Complex (DNIC): A Nitric Oxide Vehicle Triggering Cancer Cell Death via Apoptosis"

16:00-16:10 Closing (Shigetoshi Aono)

④ 【分子研研究会（一般）】
若い世代が創る次世代型分子触媒の開発とその展望
2016 年 11 月 10 日（木）～ 11 日（金） 分子科学研究所山手３号館２階西大会議室

11 月 10 日（木）

時間	演題	講演者
座長：大迫 隆男		
13:30-13:40	開会挨拶	國信 洋一郎
13:40-14:00	光エネルギーを活用する二酸化炭素の固定化反応	石田 直樹
14:00-14:20	キラルなグアニジン触媒を用いる速度論的光学分割法の展開	中田 健也
14:20-14:40	コバルト触媒を活用する二酸化炭素固定化反応の新展開	藤原 哲晶
14:40-15:00	分子触媒とタンパク質反応場の融合：バイオハイブリッド触媒で挑む反応開発	小野田 晃
15:00-15:20	配位性官能基導入による高機能性不斉有機分子触媒の創製研究	中村 修一
座長：浜坂 剛		
15:40-16:00	高分子主鎖らせんキラリティの自在制御に基づく新材料創出	長田 裕也
16:00-16:20	配位子の精密設計を基盤とする新しい金属触媒機能の開拓	鷹谷 絢
16:20-16:40	ホモエノラート等価体による分子変換を指向した含窒素複素環式カルベン触媒の創製	鳴海 哲夫
16:40-17:00	固相多点担持ホスフィンによる次世代型不均一系遷移金属触媒の開発	岩井 智弘
17:00-17:20	オニウム塩触媒の新たな可能性の探索	白川 誠司
17:20-17:40	第１遷移金属触媒を用いる有機ハロゲン化物のスタニル化およびホウ素化反応	米山 公啓
17:40-	写真撮影，ホテルチェックイン	
18:30-	懇親会	

11 月 11 日（金）

時間	演題	講演者
座長：椴山 儀恵		
9:30- 9:50	ホスフィン－ボラン化合物を配位子として活用したアリルアルコールのアリル位置換反応	小野寺 玄
9:50-10:10	β - ケトエステルの不斉 α - アリル化反応	吉田 雅紀
10:10-10:30	高次選択的 Diels–Alder 反応を制御するキラル超分子触媒の開発	波多野 学
10:30-10:50	銅触媒を用いた窒素およびリン元素導入を伴うアルケンの新規二官能基化反応の開発	平野 康次
10:50-11:10	触媒的不斉ハロゲン化反応の開発と応用	柴富 一孝
11:10-11:30	π - 相互作用を活用する自己集積型 salen 錯体の開発	今堀 龍志
座長：大迫 隆男		
12:30-12:50	合成で使える！ AZADO- 銅協働触媒を用いる高化学選択的アルコール空気酸化反応	笹野 裕介
12:50-13:10	キラルアミノホスホニウム塩を用いる触媒的分子変換	浦口 大輔
13:10-13:30	キラルリン酸触媒による動的速度論的光学分割を利用した軸不斉ビアリールの不斉合成	森 啓二
13:30-13:50	ロジウム触媒を用いた縮合反応による新規キノイド型縮環オリゴシロールの合成および物性	新谷 亮
13:50-14:10	光誘起電荷移動状態を形成する有機光触媒の開発	松原 亮介
座長：浜坂 剛		
14:30-14:50	アルコールの光触媒変換に基づく合成化学	中 寛史
14:50-15:10	光学活性アミンの不斉合成を指向した (Z)- ケチミンの立体選択的合成法の開発	加納 太一
15:10-15:30	劇的な反応加速効果と高エナンチオ選択性を実現する不斉求核触媒の開発	萬代 大樹
15:30-15:50	非共有結合性相互作用による C–H 結合変換反応の位置選択性の制御	國信 洋一郎
15:50-16:00	閉会挨拶	椴山 儀恵

⑤ 【分子研研究会（一般）】
表面科学の最先端技術と分子科学～第７回真空・表面科学若手研究会～
2016 年 12 月 2 日（金） 分子科学研究所研究棟 201 号室

9:30- 9:40	開会の挨拶
9:40-10:40	徳永 智春（名古屋大学） 「カーボンナノファイバー内部空間に閉じ込められた金属の特性変化」
10:50-11:50	羽馬 哲也（北海道大学） 「宇宙の水素と塵の表面科学」

12:50-13:50　杉本　宜昭（東京大学）
「原子間力顕微鏡を用いた単原子分子計測」

14:00-15:00　永村　直佳（物質・材料研究機構）
「放射光軟X線顕微鏡分光で探るグラフェンの異種接合界面電子状態」

15:10-16:10　飯田　健二（分子科学研究所）
「光や電圧の印加で発現する界面電子的機能の理論」

16:10-18:00　ポスターセッション

18:00-18:10　閉会の挨拶：川合　眞紀（分子科学研究所，所長）

18:45-20:45　懇親会

⑥【分子研研究会（一般）】
生体や物質機能の起源にせまる先端的電子スピン計測
2016年12月7日（水）～8日（木）　分子科学研究所研究棟301号室

12月7日（水）

午後第1部　座長：太田 仁（神戸大学分子フォトサイエンス研究センター）

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

13:10-13:20　小堀 康博（神戸大学大学院理学研究科）
電子スピン分極イメージング法の開発によるPSII電荷分離構造の三次元映像化

13:20-13:40　荒田 敏昭（大阪大学大学院理学研究科攻）
タンパク質の活動現場と動態のESR解析：筋収縮調節とイオン輸送

13:40-14:00（招待講演）　平田 拓（北海道大学大学院情報科学研究科）
同位体ニトロキシルラジカルを用いる酸素分圧イメージング法の開発

14:00-14:20　松本 信洋（産業技術総合研究所）
有効磁気モーメント法によるニトロキシルラジカル試薬のフリーラジカルとしての純度分析の検討

午後第2部　座長：小堀 康博（神戸大学大学院理学研究科）

14:50-15:10（招待講演）　太田 仁（神戸大学分子フォトサイエンス研究センター）
神戸大学における多重極限THz ESRの現状と将来

15:10-15:30（招待講演）　市川 和洋（九州大学先端融合医療レドックスナビ研究拠点）
多周波数帯DNP-MRIの開発

15:30-15:50　黒田 新一（名古屋産業科学研究所）
イオン液体による結晶性共役高分子のドーピングとESR

15:50-16:10　櫻井 敬博（神戸大学研究基盤センター）
圧力下THz ESR装置の開発と応用

午後第3部　座長：前田 公憲（埼玉大学大学院理工学研究科）

16:30-16:50　長嶋 宏樹（名古屋大学大学院理学研究科）
光駆動水分解酸素発生系Mn_4CaO_5の分子メカニズムに関する電子核二重共鳴計測による研究

16:50-17:10　江間 文俊（神戸大学大学院理学研究科）
時間分解EPR法による有機包接結晶の室温強リン光発光性励起三重項状態の電子構造

17:10-17:30　岡本 翔（神戸大学大学院理学研究科）
ヘミンのテラヘルツESR測定

17:30-17:50　伊藤 慎治（九州大学先端融合医療レドックスナビ研究拠点）
ジメチルスルホキシドを用いて発生させたフリーラジカルの磁気共鳴イメージング

17:50-18:10　工藤 尚輝（新潟大学自然科学系（理学））
バルク接合太陽電池の磁気インピーダンス分光研究

18:10-18:30　齋藤 佑（山形大学大学院理工学研究科）
ニトロ化を伴う芳香族オレフィンのOne-pot重合反応におけるESR法による反応機構解析の試み

18:40-20:40　懇親会

12月8日（木）

午前前半　座長：佐藤 和信（大阪市立大学大学院理学研究科）

9:00- 9:20（招待講演）　稲波 修（北海道大学大学院獣医学研究科）
酸化ストレスとミトコンドリア電子伝達系応答

9:20- 9:40（招待講演）　生駒 忠昭（新潟大学自然科学系（理学））
磁気伝導計測法による一次元的自己組織体の光伝導機構の研究

9:40-10:00　中川 公一（弘前大学地域イノベーション学系（保健））
X-バンドESRイメージングによる皮膚角層の研究

10:00-10:20　浅野 素子（群馬大学大学院理工学府）
銅(I)錯体のMLCT発光と時間分解EPR観測

10:20-10:40	前田 公憲（埼玉大学大学院理工学研究科） 磁気共鳴や磁場効果測定というスペクトロスコピー

午前後半	座長：稲波 修（北海道大学大学院獣医学研究科）
11:00-11:20	大久保 晋（神戸大学分子フォトサイエンス研究センター） １次元フラストレート系 $NaCuMoO_4(OH)$ の強磁場 ESR による新奇磁性相の探索
11:20-11:40	佐藤 和信（大阪市立大学大学院理学研究科） 先端パルス ESR 技術を用いた分子スピン制御と最適化
11:40-12:00	加藤 立久（京都大学国際高等教育院） 多周波数 ESR 観測による内包フラーレン・スピン状態の決定
12:00-12:20	三野 広幸（名古屋大学大学院理学研究科） 機能性タンパク質 Photozipper の反応機構
12:20-12:40	古川 貢（新潟大学機器分析センター） 分子性機能性物質のスピンダイナミクス
12:40-12:50	おわりに

⑦ 【分子研研究会（一般）】
金属錯体の情報制御と機能連動
2016 年 3 月 6 日（月）～ 7 日（火） 分子科学研究所研究棟 201 号室

3 月 6 日（月）

13:00–13:10	趣旨説明　大場 正昭（九州大学大学院理学研究院）
13:10–13:35	越山 友美（九州大学大学院理学研究院） 「リポソームへの機能性分子の組込みと機能連動」
13:35–14:05	小野田 晃（大阪大学大学院工学研究科） 「バイオハイブリッド触媒における金属錯体とタンパク質の機能連動」
14:05–14:30	河内 岳大（東京工業大学フロンティア研究機構） 「金属と高分子を精密配置・配列した集積材料」
14:30–15:00	張 浩徹（中央大学理工学部） 「金属錯体の電子移動プロセスが拓く未来像」
15:20–15:45	楊井 伸浩（九州大学大学院工学研究院） 「錯体化学と三重項科学の融合に基づく機能発現」
15:45–16:15	小林 浩和（京都大学大学院理学研究科） 「新規ナノ材料の水素吸蔵機能と触媒への展開」
16:15–16:40	堀 彰宏（名古屋大学大学院工学研究科） 「X 線自由電子レーザーを用いた動的錯体ナノ空間の分子捕捉機能の評価」
16:40–17:10	植村 卓史（京都大学大学院工学研究科） 「MOF を使った分子情報変換重合」
17:30–18:00	宮坂 等（東北大学金属材料研究所） 「動的格子空間制御による磁気スイッチング」
18:00–18:40	西原 寛（東京大学大学院理学系研究科） 「配位プログラミングと界面」
19:30–21:30	懇親会

3 月 7 日（火）

9:00– 9:30	速水 真也（熊本大学大学院先端科学研究部） 「機能性界面および層間における錯体分子の構築」
9:30–10:00	竹延 大志（名古屋大学大学院工学研究科） 「TBA」
10:00–10:30	村橋 哲郎（東京工業大学大学院理工学研究科） 「有機金属クラスターの構造次元性転移」
10:50–11:20	正岡 重行（分子科学研究所） 「金属錯体の機能連動による触媒創出」
11:20–11:50	阿部 竜（京都大学大学院工学研究科） 「太陽光水素製造実現に向けた新規可視光応答型光触媒の開発」
11:50–12:20	石谷 治（東京工業大学大学院理工学研究科） 「金属錯体光触媒と固体光機能材料の機能連動」
12:20–12:30	閉会挨拶

(4) 若手研究会等

課　題　名	提案代表者	
第56回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会	東京大学大学院総合文化研究科	水野　雄太

(5) 岡崎コンファレンス

課　題　名	提案代表者	
電子動力学：時間階層性へのチャレンジ	筑波大学大学院数理物質科学研究科	重田　育照
溶液散乱による分子システム研究の最前線	分子科学研究所	秋山　修志
有機電子材料の先端分光に関する国際会議	分子科学研究所	解良　聡

(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
セリウム含有シンチレーター結晶中に共賦活したマグネシウムの局所構造解析	山形大学理学部	北浦　守
電解抽出法により抽出した合金窒化物の局所構造評価	東北大学金属材料研究所	佐藤　充孝
炭化モリブデン触媒活性種のL殻XANESによる構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷　博文
X線吸収スペクトルによる $RECoO_3$ における電荷保証機構の解明	早稲田大学理工学術院	山本　知之
Si置換ALPO-5の構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平　敦
NEXAFS 分光法による電圧印加下での酸化膜の化学状態分析	九州シンクロトロン光研究センター	小林　英一
有機薄膜のフロンティア軌道の重なり制御	筑波大学数理物質系	山田　洋一
分子接合剤で改質した SiO_2 および金属基板上の有機分子薄膜の電子構造と分子配向	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平　幸司
Photoemission Studies of Sumanene Adsorption on Metal Surfaces	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika
Development and Maintenance of the BL-2B	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika
π共役電子機能性金属錯体の界面電子構造の精密評価	東京理科大学理工学部	中山　泰生
Dimerization and Band Formation in Organic Thin Films	分子科学研究所	解良　聡
複合オキソアニオン由来の分子性励起子タイプ自己束縛励起子の生成と量子カッティング	秋田大学大学院工学資源学研究科	小玉　展宏
二光子励起励起スペクトル測定によるワイドギャップ化合物のバンドギャップの決定	山形大学理学部	北浦　守
バンドギャップエンジニアリングによるパイロシリケート型シンチレータの探索とその発光メカニズムの解明	東北大学未来科学技術共同研究センター	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科	大木　義路
低温領域における紫外発光アルミン酸亜鉛蛍光体の光学的基礎物性および形成準位の評価	静岡大学学術院工学領域	小南　裕子
窒化炭素白色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
新規長残光蛍光体開発のための真空準位基準エネルギーダイアグラムの構築	京都大学大学院人間・環境学研究科	上田　純平
3d遷移金属添加AlNの真空紫外固体吸収／光電子収量分光同時測定による電子バンド構造の解明	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	園田　早紀
NaCl:I- 単結晶おける励起エネルギー移動メカニズムの研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相　武利
$AETiO_3$ ペロブスカイト中における微量添加Mnイオンの価数分析	早稲田大学理工学術院	山本　知之
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	富山大学大学院医学薬学研究部	彦坂　泰正
高分解能光電子分光法によるTe薄膜の電子・スピン状態測定	東京工業大学大学院理工学研究科	平原　徹
分子軌道計測技術の展開：分子間相互作用による波動関数変調	分子科学研究所	解良　聡
BL5U 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鉄系高温超伝導体 $FeTe_{1-x}Se_x$ の電子構造研究	分子科学研究所	出田真一郎
$Sm_{1-x}Y_xS$ における Black–Golden 相転移メカニズムのフェルミオロジーによる解明	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤　孝寛
微小ギャップ半導体の(111)表面の電子構造	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
角度分解光電子分光による鉄系超伝導体 NdFe(P, As)(O, F) 単結晶のフェルミ面，超伝導ギャップ観測	大阪大学大学院理学研究科	田島　節子
Bi(111) 薄膜の格子緩和によるトポロジカル相転移	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪　嘉之

２元系カルコゲナイド系アモルファス薄膜の真空紫外吸収スペクトル評価	岐阜大学工学部	林　浩司
Ca および Mg 共賦活による Ce:GAGG シンチレーター結晶の特性改善の機構解明	山形大学理学部	北浦　守
結晶性 Si への高濃度水素ドープ技術の開発及び新種の不純物中心を利用した Si 中の炭素の高感度検出技術への展開	東北学院大学工学部	原　明人
顕微赤外分光法によるマイクロ流路上の溶液反応の観察	分子科学研究所	長坂　将成
BL6B 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
老化による疾病の早期発見のための赤外顕微キラルイメージングの開発	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
UVSOR 遠赤外光を用いた固体物性研究	大阪大学産業科学研究所	入澤　明典
ディラック・ワイル半金属におけるフェルミアーク制御：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
5d 電子系で開拓する強相関トポロジカル量子相	東京大学物性研究所	近藤　猛
表面光電効果の検証	東京大学物性研究所	石田　行章
電子ドープ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
有機半導体フロンティア軌道における電子格子相互作用	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
$(TMTTF)_2X$ における金属－モット局在－電荷秩序相転移に伴う準粒子バンド構造変化の系統研究	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤　孝寛
微小ギャップ半導体のバルク電子構造	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
アルカリ金属吸着グラフェンの電子格子相互作用	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
トポロジカル絶縁体・保護膜間に現れる界面状態の研究	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪　嘉之
High Resolution Photoemission Studies of the Predicted Type II Weyl Semimetal $MoTe_2$	Fudan UniversityDepartment of Physics	FENG, Donglai
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
太陽彩層・偏光分光観測ロケット実験 CLASP2 のフライト光学素子評価	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
新開発シンチレーターの真空紫外領域における光学特性計測及び計測技術への応用	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	清水　俊彦
原子核乾板の最小電離粒子に対する感度評価	名古屋大学大学院理学研究科	中村　光廣
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その組成変化に伴う変化の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野　正人
有機薄膜のフロンティア軌道の重なり制御	筑波大学数理物質系	山田　洋一
29eV 用 SiC/Mg 多層膜ミラーにおける反射スペクトル測定	京都大学大学院理学研究科	西谷　純一
分子性導体に対する軟エックス線照射による分子欠陥生成機構の解明	東北大学金属材料研究所	佐々木孝彦
フィードバック制御による BL6B 光軸の安定化	京都大学エネルギー理工学研究所	全　炳俊
太陽軟Ｘ線２次元撮像分光のための CMOS センサー評価	国立天文台	成影　典之
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

（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 整備	分子科学研究所	手島　史綱
炭化モリブデン触媒活性種の L 殻 XANES による構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷　博文
Ｘ線吸収スペクトルによる $RECoO_3$ における電荷保証機構の解明	早稲田大学理工学術院	山本　知之
Si 置換 ALPO-5 の構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平　敦
有機薄膜のフロンティア軌道の重なり制御	筑波大学数理物質系	山田　洋一
分子接合剤で改質した SiO_2 および金属基板上の有機分子薄膜の電子構造と分子配向	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平　幸司
π 共役電子機能性金属錯体の界面電子構造の精密評価	東京理科大学理工学部	中山　泰生
Dimerization and Band Formation in Organic Thin Films	分子科学研究所	解良　聡
複合オキソアニオン由来の分子性励起子タイプ自己束縛励起子の生成と量子カッティング	秋田大学大学院工学資源学研究科	小玉　展宏
二光子励起励起スペクトル測定によるワイドギャップ化合物のバンドギャップの決定	山形大学理学部	北浦　守
バンドギャップエンジニアリングによるパイロシリケート型シンチレータの探索とその発光メカニズムの解明	東北大学未来科学技術共同研究センター	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科	大木　義路

低温領域における紫外発光アルミン酸亜鉛蛍光体の光学的基礎物性および形成準位の評価	静岡大学学術院工学領域	小南　裕子
窒化炭素白色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
新規長残光蛍光体開発のための真空準位基準エネルギーダイアグラムの構築	京都大学大学院人間・環境学研究科	上田　純平
NaCl:I- 単結晶おける励起エネルギー移動メカニズムの研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相　武利
$AETiO_3$ ペロブスカイト中における微量添加 Mn イオンの価数分析	早稲田大学理工学術院	山本　知之
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	富山大学大学院医学薬学研究部	彦坂　泰正
２元系カルコゲナイド系アモルファス薄膜の真空紫外吸収スペクトル評価	岐阜大学工学部	林　　浩司
Ca および Mg 共賦活による Ce:GAGG シンチレーター結晶の特性改善の機構解明	山形大学理学部	北浦　　守
結晶性 Si への高濃度水素ドープ技術の開発及び新種の不純物中心を利用した Si 中の炭素の高感度検出技術への展開	東北学院大学工学部	原　　明人
顕微赤外分光法によるマイクロ流路上の溶液反応の観察	分子科学研究所	長坂　将成
BL6B 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
老化による疾病の早期発見のための赤外顕微キラルイメージングの開発	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
UVSOR 遠赤外光を用いた固体物性研究	大阪大学産業科学研究所	入澤　明典
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
太陽彩層・偏光分光観測ロケット実験 CLASP2 のフライト光学素子評価	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
新開発シンチレーターの真空紫外領域における光学特性計測及び計測技術への応用	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	清水　俊彦
原子核乾板の最小電離粒子に対する感度評価	名古屋大学大学院理学研究科	中村　光廣
鉄鋼材料の浸窒焼入れ処理および焼戻し熱処理における合金元素の局所構造評価	東北大学金属材料研究所	佐藤　充孝
軟Ｘ線吸収分光法を用いた電圧印加下での ZnO/ 金属界面の化学状態変化の観察	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平　幸司
太陽軟Ｘ線２次元撮像分光のための CMOS センサー評価	国立天文台	成影　典之
人工光合成半導体光電極のための超広帯域光電変換Ⅲ族窒化物薄膜のバンド構造の解明	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	園田　早紀
水熱処理したリン酸セリウムの P の構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平　　敦
光電子分光による生体関連分子の電子構造の解明	千葉大学先進科学センター	石井　久夫
有機半導体の分子間軌道相互作用によるバンド形成過程の直接観測	千葉大学大学院融合科学研究科	吉田　弘幸
Development and maintenance of the BL-2B	分子科学研究所	上羽　貴大
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その組成・構造変化に伴う変化の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野　正人
混晶半導体を用いた放射線検出材料の光物性評価	大阪電気通信大学工学部	大野　宣人
Optical Spectroscopy in the VUV Region and Excited State Dynamics of Novel Complex Phosphate and Silicate Materials Doped with Trivalent Praseodymium Ions	University of Verona	BETTINELLI, Marco
分子性導体に対する軟エックス線照射による分子欠陥生成のエネルギー依存性の解明	東北大学金属材料研究所	佐々木孝彦
ホールドープ型銅酸化物高温超伝導体のネマティック秩序	東京大学大学院理学系研究科	藤森　　淳
スピン軌道結合系の薄膜界面におけるバンド構造の研究	東京大学大学院理学系研究科	岡林　　潤
高分解能光電子分光法による Te 薄膜の電子・スピン状態測定	東京工業大学理学院	平原　　徹
Ag(100) 上に作成した VO(100) 薄膜の角度分解光電子分光	立教大学理学部	枝元　一之
分子軌道計測技術の展開 II：分子間相互作用による波動関数変調	分子科学研究所	解良　　聡
電荷・スピンストライプ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
BL5U 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
高分解能鉄系高温超伝導体による鉄系超伝導体 $FeSe_{1-x}Te_x$ の電子構造の研究	分子科学研究所	出田真一郎
遷移金属シリサイド TSi_2 (T = Ta, Nb, V) の３次元角度分解光電子分光	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤　孝寛
放射光光電子分光測定による新たなトポロジカル候補物質の電子状態解析	名古屋工業大学	宮崎　秀俊
$NdFeP_{1-x}As_xO_{0.9}F_{0.1}$ (x = 0.4, 0.8) 単結晶における超伝導ギャップノードの角度分解光電子分光による直接観測	大阪大学大学院理学研究科	宮坂　茂樹
角度分解光電子分光によるディラック電子系候補物質 $NiTe_2$ のディラック点の観測	大阪大学大学院理学研究科	宮坂　茂樹
微小ギャップ半導体の (111) 表面の電子構造 II	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
低対称性基板上に形成した Bi 原子鎖の電子状態とスピン分裂構造	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪　嘉之
宇宙飛翔体搭載用の極端紫外光撮像機の性能評価	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉川　一朗
低エネルギー高分解能 ARPES による線ノード半金属の研究	東北大学原子分子材料科学高等研究機構	高橋　　隆
パイロクロア型酸化物の直接バンド観察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
有機無機ペロブスカイト太陽電池材料の価電子エネルギーバンド構造の実測	東京理科大学理工学部	中山　泰生

有機半導体フロンティア軌道における電子格子相互作用 II	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
低励起光エネルギー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超伝導ギャップ構造の解明	分子科学研究所	出田真一郎
低励起エネルギー角度分解光電子分光による擬一次元有機導体におけるスピノンーホロン分散／局在状態温度依存性の系統研究	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤　孝寛
La 系及び Bi 系銅酸化物高温超伝導体における自己エネルギーの運動量依存性	京都大学大学院人間・環境学研究科	吉田　鉄平
角度分解光電子分光による $Sr_{1-y}Ca_yFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ 最適組成の超伝導ギャップの高分解能測定	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ルク電子構造 II	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
希土類化合物 $YbXCu_4$ (X = In, Cd) のフェルミ面の観測	大阪府立大学大学院工学研究科	安齋　太陽
Doping-Dependent Superconducting-Gap Measurements of Electron Doped Cuprates	Inchon National University	PARK, Seung Ryong
Acquiring Temperature Dependent Electronic Band Structure of Organic Single	Soochow University	DUHM, Steffen
原子配列のランダム性を排除した Zn-Sc 準結晶及び近似結晶における可視・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
$Ba_xSr_{1-x}F_2$ 単結晶の真空紫外光学特性	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野　晋吾
亜鉛ビスマスリン酸ガラスへのフッ素添加による電子状態変化の解明	産業技術総合研究所無機機能材料研究部門	北村　直之
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

(7)　施設利用

①　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	名古屋大学未来社会創造機構	宇理須恒雄

（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	名古屋大学未来社会創造機構	宇理須恒雄

②　計算機利用

第一原理計算準拠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
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分子科学シミュレーション	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・実装とその応用	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
タンパク質中 D- アミノ酸残基の起源および機能	名城大学薬学部	小田　彰史
有機系太陽電池に関する理論的研究	産業技術総合研究所	北尾　修
相対論的量子化学計算と第一原理分子動力学計算による機能性ナノ材料および生体関連分子の構造と機能の解明	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
10 族金属錯体によるオレフィン重合の機構解析と有機デバイスを指向した芳香族化合物の設計	東京大学大学院工学系研究科	野崎　京子
有機化学反応での結合交替での水素結合の役割	奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科	山邉　信一
理論電子および振動スペクトルによるフェノール並びにカテコール溶媒和クラスターの基底状態／励起状態プロトン移動のサイズ依存性に関する研究と SINDO 非調和振動解析を用いたプロトン付加カテコールアミン類の安定構造配座の決定	東京工業大学資源化学研究所	宮崎　充彦
量子化学計算による化学反応・発光機構解析	大阪大学大学院薬学研究科	川下理日人
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

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および生体高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
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
立体選択的反応における溶媒効果に関する理論研究	高知大学大学院総合人間自然科学研究科	金野　大助
機械学習と分子シミュレーションの連帯による標的型分子ドッキング法の開発	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
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
超臨界条件下の水－有機混合溶媒の拡散解析	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 $CaMn_4O_5$ クラスターの構造，電子・スピン状態および反応性に関する理論的研究	大阪大学ナノサイエンス教育研究センター	山口　　兆
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
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
Cyclic naphthalene diimide による非標準 DNA の安定化メカニズムの解明	甲南大学先端生命工学研究所（FIBER）	杉本　直己
ミオシン VI とアクチン繊維の相互作用様式の比較計算によるミオシン VI の長距離ステップ一方向運動の解明	名古屋大学大学院工学研究科	寺田　智樹
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
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
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糖鎖が関与する抗原－抗体間相互作用の量子化学計算	北里大学一般教育部	江川　　徹
金の双晶ナノクラスターにおける CO 酸化反応機構の理論研究	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
自在回転部位を有するナノ複合分子の構造と動力学	東北大学大学院理学研究科	河野　裕彦
分子軌道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
高圧力下のタンパク質の構造安定性に関するモデル研究	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
遷移金属錯体および生体関連物質の構造・反応・分子間相互作用に関する理論的研究	お茶の水女子大学基幹研究院	鷹野　景子
分子集合体のシミュレーション	北里大学理学部	米田　茂隆
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	早稲田大学先進理工学研究科	中井　浩巳
特異な反応場としてのマクロサイクル触媒の計算化学的研究	東京工業大学大学院理工学研究科	川内　　進
タンパク質間相互作用の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	伊藤　彰浩
重原子を含む化合物の基底・励起電子状態と分子物性に関する量子化学計算	首都大学東京理工学研究科	波田　雅彦
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よるナノ材料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
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
タンパク質の構造変化と機能発現の関連性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	リントゥルオト正美
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
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
剪断された高濃度コロイド系のガラス状態追跡	大阪大学サイバーメディアセンター	吉野　　元
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	大阪大学大学院基礎工学研究科	金　　　鋼
メタノール水溶液中の PNiPA の co-non-solvency の解明	岡山大学大学院自然科学研究科	望月　建爾
軌道間相互作用がゼオライト酸点の脱プロトン化エネルギーへ及ぼす影響の解明	東京工業大学大学院総合理工学研究科	馬場　俊秀
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物質科学研究科	重田　育照
リン脂質膜／水界面の分子構造と振動スペクトルの理論研究	富山大学理工学研究部	石山　達也
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	荎口　友隆
有機分子半導体における金属原子の吸着・クラスター化の研究	千葉大学大学院理学研究科	中山　隆史

分子性液体中の Stokes-Einstein の関係とナノ粒子への拡張	新潟大学大学院自然科学研究科	石井　良樹
π拡張反応の機構解明研究と触媒反応設計およびナノグラフェン類の電子状態計算	名古屋大学大学院理学研究科	伊藤　英人
Optical and Chemical Properties of Decorated Nanotubes	東京工業大学大学院理工学研究科	Juhasz Gergely
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
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
質量分析法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	浅川　大樹
地球における輻射環境の変遷と光合成の光吸収に関する理論研究	筑波大学数理物質系	小松　　勇
遺伝子編集タンパク質のシミュレーション研究	近畿大学生物理工学部	宮下　尚之
拡張アンサンブル法による生体分子のシミュレーション	名古屋大学大学院理学研究科	永井　哲郎
MD と統計力学理論によるタンパク質高次構造形成過程の解析	九州大学大学院理学研究院	吉田　紀生
擬似化学反応による高分子ゲル材料の不均一構造形成の研究	東京大学物性研究所	首藤　靖幸
新しい量子力学計算法の開発とプロトン移動への応用	東京大学先端科学技術研究センター	渡邉　宙志
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
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
分子内および分子間電子，電子対移動の研究	神奈川大学理学部	田仲　二朗
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解明	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
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
非晶質有機半導体材料の幾何構造・電子構造・分子間相互作用エネルギーの計算	山形大学大学院理工学研究科	横山　大輔
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	亀田　倫史
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
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
TD-DFT による金属錯体の構造最適化とスペクトル解釈	東京理科大学理学部	秋津　貴城
Ornstein-Zernike 型積分方程式理論におけるブリッジ関数に関する研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮田　竜彦
三次元パイ共役系化合物の物性評価	北里大学理学部	長谷川真士
アジドやアラインの反応性に関する理論的考察	東京医科歯科大学生体材料工学研究所	吉田　　優
分子シミュレーションを用いたクラスレートハイドレートにおけるゲスト分子の拡散性についての計算科学的研究	千葉工業大学工学部	山本　典史
様々なアーキテクチャを持つ熱応答性高分子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
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
多成分化および複合化した金属クラスター上での化学反応の実験的および理論的解明	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
ヒト血清アルブミンと有機化合物の相互作用	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
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
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	森下　徹也
光化学反応の制御と応用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	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	髙橋　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
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	渕上壮太郎
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
両親媒性分子と水からなる分子集団の構造形成のキネティクス	名古屋大学大学院工学研究科	吉井　範行
ボ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
多核有機金属分子ワイヤーの電子構造と電子移動能の相関の解明	東京工業大学化学生命科学研究所	田中　裕也
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	国立環境研究所環境リスク・健康研究センター	古濱　彩子
気相分子クラスターにおける分子間相互作用ダイナミクスの直接イメージング	東京工業大学大学院理工学研究科	水瀬　賢太
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
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

共役系および金属錯体分子の多参照電子状態計算	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およびタンパク質合成機構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
分子動力学計算と量子化学計算による液体の分子間相互作用の研究	分子科学研究所	長坂　将成
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
分子シミュレーションによるイオン液体の研究	分子科学研究所	石田　干城
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
ハロ酸脱ハロゲン化酵素とシステイン合成酵素の反応機構解析とそれに基づいた高機能酵素のデザイン	長浜バイオ大学	中村　卓
QM/MM 計算による光合成水分解反応の分子メカニズムの解析	名古屋大学大学院理学研究科	野口　巧
種々のカリウムチャネルにおけるイオン透過過程の解明	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
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
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
湾曲π共役分子の理論研究	分子科学研究所	東林　修平
DNA と金属錯体との相互作用	中央大学理工学部	千喜良　誠
高反応性ジボラン (4) および 15 族元素含有ベンゼン類縁体の性質の解明	中央大学理工学部	山下　誠
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
抗 HIV-1 阻害剤アルケニルジアリールメタン類と逆転写酵素の相互作用解析	城西大学薬学研究科	星　絢子
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
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
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
高周期 14 族元素と遷移金属間の多重結合による二水素活性化	東北大学大学院理学研究科	渡邉　孝仁
Zero-multipole summation 法の分子動力学シミュレーションへの応用	東京大学新領域創成科学研究科	桜庭　俊
原子核の量子効果を考慮した多成分分子理論の開発と応用計算	岐阜大学工学部	宇田川太郎
プロテインキナーゼ C C1 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
ペプチドナノリングによるアミノ酸のキラル認識に関する理論的研究	高千穂大学人間科学部	竹内　淨
安定な反芳香族縮合多環化合物の電子物性の解明	群馬大学大学院理工学府	加藤真一郎
有機分子非線形ナノデバイスの研究	大阪大学大学院理学研究科	小川　琢治
非平面型パイ共役分子の構造と物性	大阪府立大学大学院理学系研究科	津留崎陽大
ファルネシル基結合型ヒトガレクチン１の会合構造	東北大学大学院薬学研究科	中林　孝和
新規パイ共役系の物性化学研究	京都大学大学院工学研究科	関　修平
ヘテロアレーンの遷移金属中心に対する配位挙動	分子科学研究所	山本　浩二
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
新規π電子系の合成を基軸とした超分子集合体の創製	立命館大学薬学部	前田　大光
多核錯体におけるトロポロンを介した分子内電荷移動機構の解明	北里大学理学部	吉田　純
π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	東京大学大学院工学系研究科	岡田　洋史
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
理論計算支援による骨格内アルミニウム原子位置の制御されたゼオライトの設計と合成	東京大学大学院工学系研究科	大久保達也
アルミナ表面上の液体水分子の第一電子遷移の研究	関西学院大学理工学研究科	後藤　剛喜
高反応活性遷移金属錯体の分子設計と反応に関する理論計算	東京工業大学理学院化学系	石田　豊
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
有機ケイ素化合物の構造と性質	群馬大学大学院理工学府	久新荘一郎
多孔性材料表面に吸着した有機分子の状態に関する理論研究	東京大学大学院総合文化研究科	尾中　篤
リボソームにおけるペプチド結合形成反応のメカニズムに関する量子化学計算	兵庫医科大学医学部	福島　和明
光誘起機能性と結晶構造との相関解明研究	新潟大学研究推進機構	古川　貢
オニウム型有機分子触媒による分子変換機構の理論的解析	名古屋大学大学院工学研究科	佐藤　真
金属クラスターと小分子の相互作用	東京大学大学院理学系研究科	小安喜一郎
タンパク質中のアミノ酸残基異性化反応についての計算化学的研究	金沢大学医薬保健学域薬学系	福吉　修一
多核遷移金属ポリヒドリド錯体の構造に関する研究	奈良女子大学研究院自然科学系	浦　康之
水素結合と配位結合を組み合わせた多点相互作用に基づく新規分子認識方法の開発	関西学院大学理工学部	三橋　了爾
第一原理計算及び分子動力学を用いた電流下における分子挙動に関する研究	福井大学学術研究院工学系部門	福島　啓悟
量子化学計算による金属蛋白質活性中心の分子構造解析	兵庫県立大学大学院生命理学研究科	太田　雄大
C–H 伸縮振動の和周波発生応答の計算	大阪大学大学院基礎工学研究科	大戸　達彦

バッキーキャッチャー分子における電荷移動型遷移の理論的研究	日本女子大学理学部	村岡　梓
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
金属ナノクラスター上での二酸化炭素活性化に関する研究	徳島大学薬学部	Karanjit Sangita
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
異種置換基を持つヘキサアザトリフェニレン誘導体の電子構造決定	関西学院大学理工学部	田中　大輔
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
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挙動のエネルギー解析	近畿大学生物理工学部	藤澤　雅夫
担持遷移金属錯体触媒の構造決定	分子科学研究所	大迫　隆男
蛍光タンパク質 eYFP の構造ー機能相関	東邦大学理学部	細井　晴子
宇宙物理・素粒子物理に関連する分子素過程の理論化学的手法による研究	東洋大学理工学部	田代　基慶
有機デバイス材料を中心としたマルチスケール電子状態計算	鳥取大学大学院工学研究科	星　健夫
新規合金クラスターの電子状態解析	東京理科大学大学院総合化学研究科	新堀　佳紀
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
大規模材料分子系のためのダブルハイブリッド DFT 法の開発	長崎大学大学院工学研究科	Chan Bun
水素結合型強誘電体をはじめとする機能性有機物質に対する計算科学	産業技術総合研究所	下位　幸弘
粗視化モデルを用いた同一疎水コアを持つタンパク質間での熱安定性比較	三重大学総合情報処理センター	白井　伸宙
相関電子系の特異な物性に関する数値的研究	千葉大学大学院理学研究科	太田　幸則
カチオン性メタロゲルミレンの小分子に対する反応性	学習院大学理学部	猪股　航也
鉄ヒドロゲナーゼモデル錯体の酸化還元特性の研究	広島大学大学院理学研究科	水田　勉
計算科学を通した熱活性型遅延蛍光分子の発光機構の解明：分子構造と電子構造の相関研究	産業技術総合研究所	細貝　拓也
希土類ポルフィリン錯体における構造－物性相関の解明	大阪大学大学院理学研究科	山下　健一
ホウ素錯体をクロモフォアとする太陽電池色素の高性能化	名古屋工業大学工学研究科	小野　克彦
分子シミュレーションと核磁気共鳴法による糖鎖の構造・ダイナミクス解析	分子科学研究所	谷中　冴子
生体分子マシンにおけるマルチスケールな機能ダイナミクスのシミュレーション	分子科学研究所	岡崎　圭一
動的効果を考慮した生体分子の酸解離定数の導出	筑波大学大学院数理物質系	松井　亨
タンパク質単結晶テラヘルツスペクトルの振動バンド解析	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永　圭介
核融合炉ブランケットシステム用溶融塩の分子動力学シミュレーションによる物性値評価	東北大学大学院工学研究科	宍戸　博紀
量子化学計算による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
高性能有機増感剤の開発のための理論的検討	立教大学理学部	三井　正明
生体分子に結合する主鎖修飾型ペプチドの合理的設計	東京大学大学院工学系研究科	森本　淳平
ベンジリックアミド配位子を有するイリジウム錯体によるアリル位脱プロトン化反応の機構解析	東京工業大学物質理工学院	榧木　啓人
木質バイオマス中リグニンの低分子化における分子機構	京都府立大学大学院 生命環境科学研究科	細谷　隆史
発光性金属錯体および集合体の電子状態に関する計算化学的アプローチ	北海道大学大学院理学研究院	加藤　昌子
分子触媒反応における立体制御機構の理論的解明	立教大学理学部	山中　正浩
多元素協働触媒反応の反応機構研究	京都大学大学院工学研究科	仙波　一彦
数分子単位からなるモデルによるマクロ環分子性金属錯体の固体物性に関する理論的研究	熊本大学大学院先端科学研究部	藤本　斉
πクラスター分子の電子物性の解明	大阪大学大学院理学研究科	西内　智彦
曲面グラフェン分子の設計	分子科学研究所	鈴木　敏泰
有機分子触媒の構造と相互作用の解明	分子科学研究所	椴山　儀恵
化学結合開裂の活性化エネルギーに着目したタンデム質量分析計における化合物断片化の理論予測手法の開発	総合研究大学院大学生命科学研究科	田中　弥
量子化学文献データーベースの開発	首都大学東京理工学研究科	波田　雅彦
円偏光発光機能を有するヘリセン誘導体の絶対配置と励起状態の構造の決定	青山学院大学理工学部	坂本　章

（計算物質科学スパコン共用事業利用枠）

エネルギーの変換・貯蔵—電気エネルギー	東京大学物性研究所	杉野　修
エネルギー・資源の有効利用—化学エネルギー	岡山大学大学院自然科学研究科	田中　秀樹
次世代高機能半導体デバイス	東京大学大学院工学系研究科	押山　淳
「次世代機能性化学品」有機／無機界面の物性に関する計算	名古屋工業大学	尾形　修司
分子集合体の光電子物性と量子ダイナミクス	分子科学研究所	藤田　貴敏
生体分子マシンにおけるマルチスケールな機能ダイナミクスのシミュレーション	分子科学研究所	岡崎　圭一

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 ～ '09		'10		'11		'12		'13		'14		'15		'16		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	108	907	0	0	1	13	1	21	2	27	1	11	2	32	2	29	人数：登録人数
協力研究	3,944	5,858	122	316	108	292	123	329	64	183	64	206	62	205	83	243	〃
招へい協力研究	195	197	−	−	−	−	−	−	−	−	−	−	−	−	−	−	〃
所長招へい	4,302	4,302	148	148	78	78	93	93	156	156	103	103	128	128	62	62	人数：旅費支給者
研究会	329	5,544	6	137	4	105	10	207	10	254	6	162	11	195	7	119	〃
若手研究会等	2	22	1	14	1	11	1	19	1	21	2	38	1	16	1	14	〃
岡崎コンファレンス	−	−	−	−	−	−	1	29	1	18	1	34	1	21	3	49	〃
施設利用 I	1,987	4,529	66	166	98	266	60	254	41	105	44	191	20	52	2	6	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)	4,907	16,465	170	666	190	668	190	813	204	786	199	751	235	844	217	803	〃
協力研究 (ナノプラット)	465	1,000	35	94	25	64	15	51	52	123	63	147	64	174	70	173	〃
施設利用 (ナノプラット)	251	622	25	89	20	35	52	150	132	378	174	453	197	618	191	582	〃
合計	16,490	39,446	573	1,630	525	1,532	546	1,966	663	2,051	657	2,096	721	2,285	638	2,080	

＊施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用　（'16 年度の数値は，2016.12.31 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

項目＼年度	'85 ～ '09		'10		'11		'12		'13		'14		'15		'16		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	4	4	6	6	1	1	1	1	1	1	0	0	人数：旅費支給者
研究会	43	757	1	1	2	68	4	63	1	37	1	37	1	30	1	41	〃
施設利用	2,978	14,477	140	659	139	682	136	706	142	732	125	649	119	732	141	742	件数：許可件数 人数：許可人数
合計	3,458	16,853	141	660	145	754	146	775	144	770	127	687	121	763	142	783	

（'16 年度の数値は，2016.12.31 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
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
15	2	2	5	31	106	146
合計	36	38	304	228	1,302	1,908

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
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
15	10	6	17	16	8	27	0	62	146
合計	205	58	129	181	300	374	14	647	1,908

表３　海外からの研究者（2016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．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. 6.30
PAN, Shiguang	中国	分子科学研究所 IMS フェロー	'15. 4. 1–'17. 3.31

３．国際共同研究

XU, Chengbin	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'16. 3.22–'16. 8.21
ANGOUILLANT, Robert	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'16. 3.22–'16. 8.21
HUR, Anna	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'16. 3.22–'16. 8.21
MORICE, Maximilien	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'16. 3.22–'16. 8.21
HUBERT, Souquet-Basiege	フランス	高等師範学校グランゼコール大学院生	'16. 4.18–'16. 8.12
DESFRANÇOIS, Claire	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'16. 4.22–'16. 8.21
BISWAS, Ankita	インド	IISER Kolkata 大学院生	'16. 5.23–'16. 7.23
TIRUMALASETTY, Panduranga Mahesh	インド	IISER Kolkata 大学院生	'16. 5.23–'16. 7.24
WIGGERS, Frank	オランダ	University of Twente 大学院生	'16. 5.26–'16. 6.18
DE JONG, Michel	オランダ	University of Twente 准教授	'16. 5.29–'16. 6. 4
CHIU, Chao-Wen	台湾	National University of Kaohsiung 准教授	'16. 6. 5–'16. 6.11
DONG, Chung-Li	台湾	Tamkang University 助教	'16. 6. 5–'16. 6. 8
WANG, Yu-Fu	台湾	Tamkang University 大学院生	'16. 6. 5–'16. 6.13
LU, Ying-Jui	台湾	National Chiao Tung University 大学院生	'16. 6. 6–'16. 6.13
KHODABANDEH, Aminreza	オーストラリア	University of Tasmania 大学院生	'16. 6.11–'16. 6.20
CHEN, Qiuyun	中国	Fudan University ポスドク研究員	'16. 6.19–'16. 7. 2
YAO, Qi	中国	Fudan University 大学院生	'16. 6.19–'16. 7. 2
XU, Difei	中国	Fudan University 大学院生	'16. 6.19–'16. 7. 2
LORENZ-FONFRIA, Vivtor	スペイン	バレンシア大学主任研究員	'16. 6.27–'16. 7.13
WANG, Qi	中国	Soochow University 大学院生	'16. 7. 9–'16. 7.24
JI, Ruru	中国	Soochow University 大学院生	'16. 7. 9–'16. 7.24
DUHM, Steffen	中国	Soochow University 教授	'16. 7. 9–'16. 7.24
JUNG, Sun Won	韓国	Pohang University of Scienceand Technolog 大学院生	'16. 7.15–'16. 7.30
OH, Kyung Hoon	韓国	Pohang University of Scienceand Technolog 大学院生	'16. 7.15–'16. 7.30
WU, Eric	米国	カーネギーメロン大学化学科大学院生	'16. 7.25–'16. 8.20
FISHER, Henry	ドイツ	ベルリン自由大学 Research Associate	'16. 7.30–'16. 8. 5
RUEHL, Eckart	ドイツ	ベルリン自由大学教授	'16. 7.31–'16. 8. 6
			'16. 9.18–'16. 9.25
GLANS, Anders	アメリカ	Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), Research Scientist	'16. 8.20–'16. 9. 3
LIU, Yi-Sheng	アメリカ	Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), Research Scientist	'16. 8.21–'16. 9. 3
LAI, Yu Ling	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center (NSRRC) 研究員	'16. 8.30–'16. 9. 3
LIN, Ming-Wei	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center (NSRRC) 研究員	'16. 8.30–'16. 9. 3
SHIU, Hung-Wei	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center (NSRRC) 研究員	'16. 8.30–'16. 9. 3
TOWORAKAJOHNKUN, Natthawut	タイ	Chulalongkorn University 大学院生	'16. 9. 4–'17. 1.20
KLOSSEK, Andre	ドイツ	ベルリン自由大学ポスドク研究員	'16. 9.18–'16. 9.24
YAMAMOTO, Kenji	ドイツ	ベルリン自由大学大学院生	'16. 9.18–'16. 9.26
THITIWAT, Tanyalax	タイ	Mahidol University 大学院生	'16.10.30–'17. 3.31
ASSADAWOOT, Srikhaow	タイ	Mahidol University 大学院生	'16.10.31–'17. 3.31
PHAKAWAT, Chusuth	タイ	Chulalongkorn University 大学院生	'16.11. 6–'17. 3.28
PRAPASIRI, Pongprayoon	タイ	Kasetsart University 助教	'16.11.20–'17. 1.21
KRIANGSAK, Faikhruea	タイ	Chulalongkorn University 大学院生	'16.11.20–'17. 3.31

４．所長招へい協力研究員

BELLEMIN-LAPONNAZ, Stephane	フランス	Universite de Strasbourg, Directeur de recherche	'16. 5.19–'16. 5.21
井本　翔	ドイツ	Ruhr-Universitaet リサーチアシスタント	'16. 6.16–'16. 6.19
矢野淳子	アメリカ	Lowerence Berkeley National Lab., Senior Scientist	'16.12.15–'16.12.17

５．特別訪問研究員			
KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika	スリランカ	千葉大学特任助教	'16. 4. 1–'17. 3.31

６．招へい研究員			
KALATHINGAL, Mahroof	インド	Indian Institute of Science Education and Trivandrum 大学院生	'16. 4. 1–'16. 4.30
			'16. 9.30–'16.10.01
ZHAO, Xiang	中国	Xi'an Jiaotong University 教授	'16. 7.29–'16. 8.29
PROMKATKAEW, Malinee	タイ	Kasetsart University 大学院生	'16. 7. 3–'16. 8.21
JUNG, Sung Won	韓国	Pohang University of Science and Technology 大学院生	'16. 7.15–'16. 7.30
KIM, Jinkwang	韓国	浦項工科大学校大学院生	'16. 7.15–'16. 7.30
CAMMI, Roberto	イタリア	Universita' di Parma 教授	'16. 9. 4–'16. 9.16
HUANG, Yu-Jen	台湾	National Chiao Tung University ポスドク研究員	'16. 7.25–'16. 7.27
BRYANT, Zev	アメリカ	Stanford University 准教授	'16. 7.29–'16. 7.30
HUIJUAN, You	シンガポール	National University of Singapore 研究員	'16. 8.15–'16. 8.20
JEONG, Hyeongseop	韓国	Korea Basic Science Institute 研究員	'16. 8.17–'16. 8.21
PISUTPAISAL, Nipon	タイ	King Mongkut's University 准教授	'16. 8.17–'16. 8.21
茂木文夫	シンガポール	Temasek Laboratories 主任研究員	'16. 8.17–'16. 8.20
VISOOTSAT, Akasit	タイ	Kasetsart University 大学院生	'16. 8.12–'16. 8.25
CHALUPSKY, Jakub	チェコ	Institute of Organic Chemistry and Biochemistry AS CR, v.v.i. 研究員	'16. 9.27–'16.10.28
平田　聡	アメリカ	University of Illinois 教授	'16.11.15–'16.12.21
新井賢亮	アメリカ	Boston University ポスドク研究員	'16.10.11–'16.10.16
ZHAO, Pei	中国	Xi'an Jiaotong University ポスドク研究員	'16.11. 1–'16.12.31
ALBERTI, Andrea	ドイツ	University of Bonn, Principal investigator	'16.11.16–'16.11.21
SILBERHORN, Christine	ドイツ	University of Paderborn 教授	'16.11.18–'16.11.20
VELAZQUEZ, Luis	スペイン	Universidad de Zaragoza 教授	'16.11.16–'16.11.20
MATALONI, Paolo	イタリア	Sapienza University of Rome 教授	'16.11.17–'16.11.18
SOUQUET-BASIEGE, Hubert	フランス	Ecole normale superieure 大学院生	'16. 4.14–'16. 7.30
並木　亮	カナダ	University of Waterloo ポスドク研究員	'16. 7.23–'16. 7.30
TIRUMALASETTY, Mahesh	インド	IISER Kolkata 大学院生	'16.12. 3–'16.12.24
DUNJKO, Vedran	オーストリア	University of Innsbruck ポスドク研究員	'16.11.16–'16.11.20
QIANG, Xiaogang	イギリス	University of Bristol 研究員	'16.11.16–'16.11.21
WALMSLEY, Ian	イギリス	University of Oxford 教授	'16.11.18–'16.11.20
PERINOTTI, Paolo	イタリア	Universita di Pavia 助教	'16.11.16–'16.11.20

７．岡崎コンファレンス			
Stephan Kümmel	ドイツ	University of Bayreuth 教授	'16.11.22–'16.11.25
Matthias Dauth	ドイツ	University of Bayreuth ポスドク研究員	'16.11.22–'16.11.25
Michael Zharnikov	ドイツ	Heidelberg University 教授	'16.11.22–'16.11.25
Torsten Fritz	ドイツ	Friedrich Schiller University Jena 教授	'16.11.22–'16.11.25
Achim Schöll	ドイツ	University of Würzburg 准教授	'16.11.22–'16.11.25
Oliver Monti	アメリカ	University of Arizona 教授	'16.11.22–'16.11.25
Faris Gel'mukhanov	スウェーデン	Royal Institute of Technology 教授	'16.11.22–'16.11.25
Xianjie Liu	スウェーデン	Linköping University ポスドク研究員	'16.11.22–'16.11.25
Patrik Amsalem	ドイツ	Humboldt University, Berlin ポスドク研究員	'16.11.22–'16.11.25
Urlich Höfer	ドイツ	Philipps University of Marburg 教授	'16.11.22–'16.11.25
Payam Shayesteh	スウェーデン	Lund University ポスドク研究員	'16.11.22–'16.11.25
Niclas Johansson	スウェーデン	Lund University 准教授	'16.11.22–'16.11.25
Heiko Peisert	ドイツ	University of Tübingen 教授	'16.11.22–'16.11.25
Steffen Duhm	中国	Soochow University 教授	'16.11.22–'16.11.25
Daniel Lüftner	オーストリア	University of Graz ポスドク研究員	'16.11.22–'16.11.25
William R. Salaneck	スウェーデン	Linköping University 教授	'16.11.22–'16.11.25
Qi Wang	中国	Soochow University ポスドク研究員	'16.11.22–'16.11.25
Qian Zhang	スウェーデン	Linköping University ポスドク研究員	'16.11.22–'16.11.25
Lothar Weinhardt	ドイツ	KIT 准教授	'16.11.22–'16.11.25
Joachim Schnadt	スウェーデン	Lund University 教授	'16.11.22–'16.11.25
John McLeod	中国	Soochow University 准教授	'16.11.22–'16.11.25

Maria Hahlin	スウェーデン	Uppsala University 准教授	'16.11.22–'16.11.25
Norbert Koch	ドイツ	Humboldt University, Berlin 教授	'16.11.22–'16.11.25
Oleg V. Prezhdo	アメリカ	University of Southern California 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Thomas Miller	アメリカ	California Institute of Technology 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Neepa Maitra	アメリカ	The City University of New York 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Hans Jakob Wörner	スイス	ETH Zürich 准教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Tobias Brixner	ドイツ	University of Würzburg 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Irene Burghardt	ドイツ	Goethe University Frankfurt 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Wolfgang Domcke	ドイツ	Technical University Munich 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Ingo Barth	ドイツ	Max Planck Institute 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Oliver Kühn	ドイツ	University of Rostock 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Jörn Manz	ドイツ	Free University of Berlin 教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Ali Abedi	スペイン	University of the Basque Country ポスドク研究員	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Elham Khosravi	スペイン	University of the Basque Country ポスドク研究員	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Marcio Varella	ブラジル	University of São Paulo 准教授	'17. 3. 6–'17. 3. 8
Dmitri Svergun	ドイツ	European Molecular Biology Laboratory, Hamburg 教授	'17. 3.18–'17. 3.20
U-Ser Jeng	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 教授	'17. 3.18–'17. 3.20
Pau Bernado	フランス	Centre de Biochimie Structurale 准教授	'17. 3.18–'17. 3.20
Sangho Lee	韓国	Sungkyunkwan University 准教授	'17. 3.18–'17. 3.20
Maxim Petoukhov	ロシア	Russian Academy of Sciences 准教授	'17. 3.18–'17. 3.20
Jochen Hub	ドイツ	Institute for Microbiology and Genetics 准教授	'17. 3.18–'17. 3.20
Nozomi Ando	アメリカ	Princeton University 准教授	'17. 3.18–'17. 3.20
Frank Gabel	フランス	Institut de Biologie Structurale, Grenoble 准教授	'17. 3.18–'17. 3.20
Ralf Biehl	ドイツ	Jülich Centre for Neutron Science, Julich 准教授	'17. 3.18–'17. 3.20
Yi-Qi Yeh	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 研究員	'17. 3.18–'17. 3.20
Kuei-Fen Liao	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center, Research Assistant	'17. 3.18–'17. 3.20

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
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
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
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）	2014. 2.20	2017. 2.19	所長	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
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
物質エネルギーヘルムホルツベルリンセンター及びベルリン自由大学	ドイツ	物質エネルギーヘルムホルツベルリンセンター（HZB），ベルリン自由大学（FUB），及び分子科学研究所（IMS）の間の分子科学分野における独日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	2016. 6.30	2019. 6.20	研究担当所長，財務・事務担当所長（物質エネルギーヘルムホルツベルリンセンター），学長（ベルリン自由大学）	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）	2016. 9.23	2020. 9.22	自然科学部長	所長

（2016.12.31 現在）

3-4-2　岡崎コンファレンス

分子科学研究所では，1976 年（1975 年研究所創設の翌年）より 2000 年まで全国の分子科学研究者からの申請を受けて小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」を年２～３回，合計 65 回開催し，それぞれの分野で世界トップクラスの研究者を数名招へいし，情報を相互に交換することによって分子科学研究所における研究活動を核にした当該分野の研究を国際的に最高レベルに高める努力をしてきた。これは大学共同利用機関としての重要な活動であり，予算的にも文部省から特別に支えられていた。しかし，1997 年以降，COE という考え方が大学共同利用機関以外の国立大学等にも広く適用されるところとなり，大学共同利用機関として行う公募型の「岡崎コンファレンス」は，予算的には新しく認定されるようになった COE 各機関がそれぞれ行う独自企画の中規模の国際シンポジウムの予算に切り替わった。これに伴い，分子科学研究所主催で「岡崎 COE コンファレンス」を開催することになった。一方，所外の分子科学研究者は分子科学研究所に申請するのではなく，所属している各 COE 機関から文部省に申請することになった。しかし，「岡崎コンファレンス」では可能であった助手クラスを含む若手研究者からは事実上提案でき

なくなるなど，各COE機関が行う中規模国際研究集会は小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」が果たしてきた役割を発展的に解消するものにはなり得なかった。その後，COEは認定機関だけのものではないなどの考えからいろいろなCOE予算枠が生み出され，その中で国際研究集会は，2004年からの法人化に伴い日本学術振興会において一本化され，全国的に募集・選考が行われることになった。ただし，この枠はシリーズになっている大規模国際会議を日本に誘致したりする際にも申請できるなど，公募内容がかなり異なっている。一方，法人化後，各法人で小〜中規模の国際研究集会が独自の判断で開催できるようになり，分子科学研究所が属する自然科学研究機構や総合研究大学院大学でその枠が整備されつつある。ただし，所属している複数の機関がお互い連携して開催するのが主たる目的となっている。

以上のように，全国の分子科学研究者からの申請に基づく「岡崎コンファレンス」を引き継ぐような小規模国際研究集会の枠組みをこれまで探索してきたが，継続的に開催していくためには分子研独自の事業として運営費交付金を使うしか方策がないことがわかった。その検討結果を受けて，「岡崎コンファレンス」を再開することを決断し，平成18年度に6年半ぶりに第66回岡崎コンファレンスを開催した。また平成19年度から平成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28年度は下記3件の岡崎コンファレンスを開催した。

会 議 名：第76回岡崎コンファレンス
“Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications”
期　　間：2016年11月22日(火)〜25日(金)
場　　所：岡崎コンファレンスセンター
組織委員：Norbert Koch（フンボルト大学ベルリン），Joachim Schnadt（ルンド大学），Stacey Sorensen（ルンド大学），吉田弘幸（千葉大学），近藤　寛（慶応大学），吉信　淳（東京大学），小杉信博（分子科学研究所），解良　聡（分子科学研究所）
内　　容：

第76回は有機分子材料のアドバンス光電子分光をテーマに掲げて実行した。参加者は海外招待講演者17名（その多くは旅費を自己負担しての参加），国内招待講演者12名を含めて92名であり，例年の岡崎コンファレンスと比較すると比較的規模の大きな会議となった。

今世紀に入り，エネルギー・環境問題が露わに指摘されるようになり，これらを解決すべく多種多様な分野で次世代産業基盤の確立を目指した研究が進められている。特に複雑な分子化合物がおりなす多彩な機能性発現に注目が集まっており，分子材料を積極的に用いたエネルギー変換・情報変換デバイス開発などに期待が寄せられている。これらの材料群の特徴としては，固相における集合構造が極めて多彩であり，弱い相互作用で諸物性が顕著に変化しうること，また異種分子や無機材料との接触界面において，組成変化や構造変化を伴うことで，その分子特性が大きく変化していることにある。そのため，分子固体やその界面における電子論的な物理学的視点の研究が進められると同時に，電気化学・触媒反応のような化学的視点の研究も盛んである。このように比較的広範なコミュニティを抱える分野においては，積極的に異分野研究者間の接点を増やす機会を設け，新たな融合・連携を通じた分野横断型発想を啓発することも必要である。本会議では研究手法の観点からより限定的に対象を絞ることでベクトルを揃え，問題点の

明確化と基礎学術分野拡大の相乗効果を狙った。つまり「複雑系のスペクトロスコピー」を共通言語とした会議進行である。機能性の発現機構を理解するために，電子分光法による電子状態の精緻な評価は極めて重要であり，さらに将来的にはより詳細な知見を得るために，従来型計測法を打破する新しい発想に基づいた計測技術の開発も必要である。歴史的背景から，こうした複雑系の光電子分光は，日本，スウェーデン，ドイツが主導してきた。ドイツは今世紀に入ってから物理系研究者の参入が顕著であり，精密な界面構造解析を元にした電子状態議論において，若手を中心として極めて精緻な実験報告が多く発信されている。スウェーデンは実験手法の技術的な鍵となる光電子分光装置のエネルギー分析器開発の先駆的立場を維持しており，新規計測法の開発も継続されている。我が国は，関一彦教授（故人），上野信雄教授らが有機デバイスを中心にした基礎研究の発展はもちろんのこと，本会議の基盤となるコミュニティの構築に早くから国際的な視点でご尽力されてきた歴史的背景がある。また電子分光法が密接にリンクするコミュニティとして放射光施設があるが，UVSOR 施設の得意とする先端軟Ｘ線高輝度光源施設の連携・発展もコミュニティ強化には重要な因子であり，期間内に随時施設見学会を開催し，情報交換につとめた。

本会議では，機能性有機分子の固相，液相，種々の表面および界面における電子状態について，先端分光法を駆使した研究成果を報告し議論する場を提供した。議論するテーマは方法論で分けて５テーマであり，それぞれ講演は半日ずつ，計２日半となった。具体的には，1) 分子固体や液体とその表面および電極界面等における各種スペクトロスコピー，2) シンクロトロン放射光を用いた光電子分光，軟Ｘ線吸収・発光測定，3) 時間分解・多重励起・先端光電子分光測定，4) 多次元光電子分光や光電子放射顕微鏡によるイメージング測定，5) 準大気圧下や外場印加下などのオペランド分光測定である。この２日半の会期に Keynote 講演として３名の第一線の研究者を招聘した。有機分子薄膜界面の時間分解・2 光子励起光電子分光の第一人者である Höfer 教授（独）からは，“Time-resolved spectroscopy of electron transfer processes at metal/organic interfaces”と題して，複雑な光電子放出過程についての導入から先端研究成果の紹介までを網羅していただいた。有機分子のエネルギーバンド分散関係測定の第一人者である山根博士（分子研）からは，“Valence-band dispersion in organic thin films and interfaces”と題して，有機固体の分散関係測定の歴史経緯から，最先端の極微小分散関係の測定例までを紹介していただいた。雰囲気下光電子分光の第一人者である Schnadt 教授（スウェーデン）からは，“Ambient pressure XPS in the real-time monitoring of thin film growth”と題して，準大気圧下まで試料環境を変えた時の影響とその電子状態変化についての最新成果をご紹介いただいた。また分析研究者を多く抱える本コミュニティへの刺激的な話題提供として Hot News セッションを設け，分子研の山本教授に，“Electronic phase-transitions at an organic interface”と題して最近の有機系強相関材料の基礎研究の成果についてご講演いただいた。講演リストからも明らかな様に，次世代へ繋げる分野展望を意識して中堅研究者に若手研究者を加えた講演者構成とした。さらに若手研究者，学生を中心として 32 件のポスター発表があり，分野の裾の広さを感じさせるものであった。本会議では会議時間以外にも有効な議論時間を見出してもらうことを想定して，参加者には機構ロッジに宿泊してもらった。時に深夜まで議論は続いたようであり，結果として非常に活発な交流が実現でき，岡崎コンファレンスの主たる目的となっている，将来に向けての新たな友好関係が構築されたようである。

以下に海外招待講演者を挙げる。

Urlich Höfer (Marburg, Germany)

Joachim Schnadt (Lund, Sweden)

Michael Zharnikov (Heidelberg, Germany)

Oliver L. A. Monti (Arizona, U.S.A.)

Stephan Kümmel (Bayreuth, Germany)

Achim Schöll (Würzburg, Germany)

Daniel Lüftner (Graz, Austria)

Torsten Fritz (Jena, Germany)

Steffen Duhm (FUNSOM, China)

Heiko Peisert (Tübingen, Germany)

Patrik Amsalem (Humboldt Berlin, Germany)

Lothar Weinhardt (KIT, Germany)

Faris Gel'mukhanov (KTH, Sweden)

Xianjie Liu (Linköping, Sweden)

Niclas Johansson (Lund, Sweden)

Payam Shayesteh (Lund, Sweden)

Maria Hahlin (Uppsala, Sweden) canceled

以下に国内招待講演者を挙げる。

Hiroyuki Yamane（分子科学研究所）

Susumu Yamamoto（東京大学）

Hisao Ishii（千葉大学）

Yasuo Nakayama（東京理科大学）

Peter Krüger（千葉大学）

Hiroyuki Yoshida（千葉大学）

Koki Akaike（東京理科大学）

Masanari Nagasaka（分子科学研究所）

Hiroshi Kondoh（慶応大学）

Yasumasa Takagi（分子科学研究所）

Takanori Koitaya（東京大学）

Masaaki Yoshida（慶応大学）

以下にプログラムを示す。

November 22 (TUESDAY)

16:00-	REGISTRATION
17:30-19:30	RECEPTION

November 23 (WEDNESDAY)

9:10-	Opening (S. Kera)
9:20-11:50 SESSION 1 (chair N. Koch)	
9:20-	Ulrich Höfer (Marburg, Germany) *Time-resolved spectroscopy of electron transfer processes at metal/organic interfaces*
10:10-	Michael Zharnikov (Heidelberg, Germany) *Core-hole clock studies on assembles of molecular wires*
10:50-	Oliver L. A. Monti (Arizona, U.S.A.) *Electronic Structure and ultrafast dynamics at the hybrid interface of organic semiconductors with quasi-2D SnS_2*
11:20-	Susumu Yamamoto (Tokyo, JPN) *Tracking photo-excited carriers on semiconductor surfaces by VUV and soft X-ray pulses*

13:00-14:40 SESSION 2 (chair P. Krüger)

13:00- Stephan Kümmel (Bayreuth, Germany)
The Importance of the final state: Perpendicular emission, dichroism, and energy dependence in angle-resolved photoemission

13:40- Achim Schöll (Würzburg, Germany)
Orbital imaging by momentum microscopy: Determination of phase symmetry and molecular vibrations

14:10- Daniel Lüftner (Graz, Austria)
Photoemission tomography of NiTPP on Cu(100)

15:10-17:10 SESSION 3 (chair H. Yoshida)

15:10- Torsten Fritz (Jena, Germany)
Optical in-situ differential reflectance spectroscopy (DRS): A powerful tool to investigate ultrathin molecular films

15:40- Hisao Ishii (Chiba, JPN)
hν-dependent high-sensitivity photoemission spectroscopy to probe density-of-states of organic films

16:10- Yasuo Nakayama (TUS, JPN)
Functional organic and organic-inorganic-hybrid materials studied by excitation energy dependence of the photoelectron spectroscopy

16:40- Steffen Duhm (FUNSOM, China)
Lead halide perovskites: Formation mechanism and energy-level alignment with organic semiconductors

17:30-18:00 HOT NEWS (chair S. Kera)

17:30- Hiroshi M. Yamamoto (IMS, JPN)
Electronic phase-transitions at an organic interface

18:20- DINNER, Remarks by Director Maki Kawai

19:00-21:00 POSTER SESSION

P01: Qian Zhang (Linköping), *Ground-state charge transfer for NIR absorption with donor/acceptor molecules: Interactions mediated via energetics and orbital symmetries*

P02: Matthias Meissner (Jena), *Epitaxy of flexible 2D crystals*

P03: Matthias Dauth (Bayreuth), *Predicting photoemission: From the single-particle interpretation to the many-electron picture*

P04: Hirotaka Mizushima (TUS), *Modification of Au(111) Shockley surface state upon physisorption of polyethylene*

P05: Soichiro Yamanaka (TUS), *Depth distribution of the chemical states and electronic structures of $CH_3NH_3PbI_3$ thin films studied by the excitation energy dependent XPS*

P06: Takashi Yamada (Osaka), *Direct visualization of localized/delocalized nature of unoccupied states at the rubrene/graphite interface*

P07: Ryohei Tsuruta (TUS), *Improved crystallinity of C_{60} overlayer on pentacene single crystal*

P08: Jun Yoshinobu (Tokyo), *Reaction of NO on silicene/ZrB_2/Si(111)*

P09: Masataka Hikasa (TUS), *Valence band structures of the pentacene single crystal*

P10: Qi Wang (FUNSOM), *Heterostructures of CuPc and pentacene oxo-derivatives on Ag(111): A photoelectron spectroscopy study*

P11: Harunobu Koike (TUS), *Manipulation of Shockley-type surface states by organic molecule adsorption*

P12: Takumi Kumai (TUS), *Morphology and electronic structure of $PC_{61}BM$/sexithiophene interface*

P13: Hayato Yuzawa (IMS), *Local structure analysis of aqueous KSCN solutions by soft X-ray absorption spectroscopy*

P14: Kazuhisa Isegawa (Keio), *In-situ S-K XANES study of nafion in PEFCs: Changes in the chemical states due to humidity and X-ray photodecomposition*

P15: Isamu Yamamoto (Saga), *Unoccupied electronic states of 3d transition-metal phthalocyanine thin films*

P16: Senku Tanaka (Kindai), *Photoelectron spectroscopy on the organic photovoltaic films under visible light irradiation*

P17: Chiaki Numata (Chiba), *The change in the electronic structure of SnPc by bonding Cl atoms to central metal*

P18: Tatsuhiro Tago (Chiba), *Role of chlorine in phthalocyanine with the steric hindrance on Ag(111) surface*

P19: Kohei Ueda (Keio), *Operando study on NO reduction by CO on an Ir surface by combination of NAP-XPS and QMS*

P20: Yujiro Ito (Tokyo), *Local electronic structure of pentacene monolayer on Au(111) studied by UPS, MAES, and first-principles calculation*

P21: CANCELED

P22: Yuhei Kikuchi (Yokohama), *Linear and nonlinear spectroscopy of monolayer transition-metal dichalcogenides: MoS_2, $MoSe_2$, WS_2, and WSe_2*

P23: Kohei Okanda (Yokohama), *Analysis of the reaction mechanism of water and iron phthalocyanine on silver adsorbed Si(111)*

P24: Yuki Kashimoto (Chiba), *The evolution of intermolecular energy bands of occupied and unoccupied molecular orbitals in organic thin films*

P25: Takahiro Ueba (IMS), *Orbital energy rearrangement induced by weak interaction at perfluoropentacene/Ag(111) interface*

P26: Keiichirou Yonezawa (IMS), *The correlation between density of states and the Fermi level potion in a heteromolecular monolayer system*

P27: Takuma Yamaguchi (IMS), *Film growth and optical property for perfluoro-pentacene on graphene/SiC(0001)*

P28: Takuma Yamaguchi (IMS), *Interfacial electronic structure between coronene monolayer and graphite investigated by low energy photoelectron spectroscopy*

P29: Takuma Yamaguchi (IMS), *Impact of vibrational combination states in UPS spectrum for π-conjugated molecules in gas phase*

P30: Ryo Shiraishi (IMS), *Origin of the interfacial state observed at tetraphenyldibenzoperiflanthene thin films on Ag(111)*

P31: Yoichi Yamada (Tsukuba), *Stacking sumanene on surfaces*

P32: Takuji Ohigashi (IMS), *Development of scanning transmission x-ray microscopy for in situ/operando chemical analysis at UVSOR-III*

November 24 (THURSDAY)

8:40-10:30 SESSION 4 (chair S. Kera)

8:40-	Hiroyuki Yamane (IMS, JPN) *Valence-band dispersion in organic thin films and interfaces*
9:30-	Peter Krüger (Chiba, JPN) *Theoretical analysis of electronic state and X-ray absorption spectra of transition metal phthalocyanines and porphyrins*
10:00-	Heiko Peisert (Tübingen, Germany) *Tuning of interactions of transition metal phthalocyanines at metal surfaces by intercalated graphene buffer layers*

11:00-12:30 SESSION 5 (chair H. Ishii)

11:00-	Hiroyuki Yoshida (Chiba, JPN) *Origin of the orientation dependence of ionization energy and electron affinity in molecular thin films: Impact of molecular quadrupole moment*
11:30-	Patrik Amsalem (Humboldt Berlin, Germany) *The electronic structure In doped molecular semiconductors*
12:00-	Koki Akaike (TUS, JPN) *Energetic landscape correlated with interface structure at organic heterointerfaces*
12:30-13:40	PHOTO, LUNCH

13:40-15:20 SESSION 6 (chair M. Zharnikov)

13:40-	Lothar Weinhardt (KIT, Germany) *Studying energy relevant materials using electron and (in-situ) soft x-ray spectroscopy*
14:20-	Faris Gel'mukhanov (KTH, Sweden) *Nuclear dynamics of water molecules studied by X-rays*
14:50-	Masanari Nagasaka (IMS, JPN) *Local structure of liquid and liquid-liquid interface studied by soft x-ray absorption spectroscopy in transmission mode*

15:50-17:30 SESSION 7 (chair J. Yoshinobu)

15:50-	Hiroshi Kondoh (Keio Univ, JPN) *Spectroscopic observations of catalytic reactions on Platinum group metal surfaces under near ambient pressure conditions*
16:30-	Xianjie Liu (Linköping, Sweden) *Understanding interfacial properties of conjugated electrolyte/electrode with its application in organic electronics*
17:00-	Niclas Johansson (Lund, Sweden) *Au(111) supported MnSalen: UHV to ambient pressure XPS study of a surface supported homogeneous catalyst with retained activity*

17:50-18:20	UVSOR TOUR
19:00-	Banquet

November 25 (FRIDAY)

8:40-10:00 SESSION 8 (chair H. Kondoh)

8:40-	Joachim Schnadt (Lund, Sweden) *Ambient pressure XPS in the real-time monitoring of thin film growth*
9:30-	Payam Shayesteh (Lund, Sweden) *Operando APXPS study of the ALD of HfO_2 on Si(111)*

10:30-12:10 SESSION 9 (chair J. Schnadt)

10:30-	Yasumasa Takagi (IMS, JPN) *In-Situ near ambient pressure hard X-ray photoelectron spectroscopic study of Pt nanoparticles on a polymer electrolyte fuel cell electrode*
11:00-	Takanori Koitaya (Tokyo, JPN) *CO_2 activation on Zn-modified Cu surfaces studied by ambient-pressure X-ray photoelectron spectroscopy*
11:30-	Masaaki Yoshida (Keio, JPN) *Operando observation of oxygen evolution catalysts by XAFS*

12:10-12:20	CLOSING (N. Kosugi)
13:30-	EXCURSION

会 議 名：第77回岡崎コンファレンス

“International Symposium on Ultrafast Dynamics in Molecular and Material Sciences”

期　　間：2017年3月6日（月）～8日（水）

場　　所：岡崎コンファレンスセンター

組織委員：斉藤真司（分子科学研究所），重田育照（筑波大学），牛山　浩（東京大学），山下雄史（東京大学），高橋　聡（東京大学），藤井幹也（東京大学）

内　　容：

近年のレーザー技術の進展により，アト秒スケールの電子運動の直接観測に向けた実験が報告されるようになってきた。例えば，電子再衝突による高次高調波スペクトルによる分子軌道のイメージング等がなされたのは記憶に新しい。電子運動の直接観測理論・技術の需要は非常に広範囲にわたるものと考える。例えば，太陽電池や光触媒などにおいて現在でも謎となっているのは，アト秒スケールで励起した電子が如何なるダイナミクスで電荷分離を起こすか？どのような分子材料を用いれば効率的に電荷分離ダイナミクスを最適化できるのか？ということである。また生命科学においても，光合成における光電子移動過程や電子伝達系におけるタンパク質内の電子移動過程など，生命機能の根幹に関わる系が数多くあり，それが達成された時のインパクトは計り知れない。そこで，本岡崎コンファレンスでは，分子科学や材料科学を中心に，アト秒からピコ秒スケールの速いダイナミクスの分光研究，および理論研究を行なっている若手研究者を中心に，様々なトピックスの講演をしていただいた。

以下に招待講演者を挙げる。

Keynote Speakers

Prof. Wolfgang Domcke (Technical University Munich, Germany)

Prof. Toshinori Suzuki (Kyoto University, Japan)

Prof. Kazuo Takatsuka (Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Japan)

Invited Speakers (Overseas)

Prof. Ingo Barth (Max Planck Institute, Germany)

Prof. Tobias Brixner (University of Würzburg, Germany)

Prof. Irene Burghardt (University of Frankfurt, Germany)

Prof. Oliver Kühn (University of Rostock, Germany)

Prof. Neepa T. Maitra (The City University of New York, U.S.A.)

Prof. Jörn Manz (Free University of Berlin, Germany)

Prof. Thomas F. Miller (California Institute of Technology, U.S.A.)

Prof. Oleg V. Prezhdo (University of Southern California, U.S.A.)

Prof. Hans Wörner (ETH Zürich, Switzerland)

Invited Speakers (Domestic)

Prof. Shin-ichi Adachi (KEK)

Prof. Hiroaki Benten (Nara Institute of Science and Technology)

Prof. Tomotsumi Fujisawa (Saga University)

Prof. Mizuho Fushitani (Nagoya University)

Prof. Masaki Hada (Okayama University)

Prof. Yu Harabuchi (Hokkaido University)

Prof. Manabu Kanno (Tohoku University)

Prof. Reika Kanya (University of Tokyo)

Prof. Kim Hyeon-Deuk (Kyoto University)

Prof. Tomohito Otobe (National Institute for Quantum and Radiological Science and Technology)

Prof. Takeshi Sato (University of Tokyo)

Prof. Masahiro Shibuta (Keio University)

Prof. Tomohisa Takaya (Gakushuin University)

Prof. Tomokazu Yasuike (The Open University of Japan)

以下にプログラムを示す。

March 6th (Mon.)

12:00- Registration

13:00-13:10 Opening Remarks: Yasuteru Shigeta (University of Tsukuba)

Chair: Yasuteru Shigeta

13:10-13:55 [Keynote Lecture]
"Molecular science of nonadiabatic electron wavepacket"
Kazuo Takatsuka (Fukui Institute for Fundamental Chemistry)

13:55-14:20 "Ultrafast molecular imaging by laser-assisted electron scattering"
Reika Kanya (University of Tokyo)

Chair: Toshinori Suzuki

14:30-15:15 "Measuring attosecond electron dynamics in molecules and liquids"
Hans Jakob Wörner (ETH Zürich)

15:15-16:00 "Electronic fluxes during intramolecular adiabatic attosecond charge migration"
Jörn Manz (Shanxi University; Freie Universität Berlin)

Chair: Kim Hyeon-Deuk

16:10-16:35 "Single-active-electron analysis of laser-polarization effects on atomic/molecular multiphoton excitation"
Manabu Kanno (Tohoku University)

16:35-17:00 "Automated search for internal conversion and intersystem crossing pathways: Application to photoreactions"
Yu Harabuchi (JST PRESTO; Hokkaido University)

17:00-17:25 "Sub-cycle nonlinear response under intense laser field: Theory, Simulation, and Experiment"
Tomohito Otobe (National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology)

17:40-19:10 Poster Session

March 7th (Tue.)

Chair: Kazuo Takatsuka

09:00-09:45 [Keynote Lecture]
"Ultrafast nonadiabatic photochemistry of hydrogen bonds in organic and biological chromophores"
Wolfgang Domcke (Technical University of Munich)

Chair: Tomohito Otobe

09:45-10:10 "Hot-carrier induced multidimensional nonequilibrium dynamics of adsorbate: CO desorption from Cu(100)"
Tomokazu Yasuike (The Open University of Japan)

10:10-10:35 "Molecular Dynamics of Photofunctionalized Liquid Crystal"
Masaki Hada (Okayama University)

Chair: Hiroaki Benten

10:50-11:35 "Excited state dynamics in nanoscale materials for solar energy harvesting"
Oleg Prezhdo (University of Southern California)

11:35-12:00 "Ultrafast near-IR stimulated Raman spectroscopy of photoexcited π-conjugate molecules in solution"
Tomohisa Takaya (Gakushuin University)

12:00-12:25 "Photoexcited Electron Dynamics of Organic Molecular Films Studied by Two-Photon Photoemission"
Masahiro Shibuta (Keio University)

Chair: Tomokazu Yasuike

14:00-14:45 "X-Ray Spectroscopy and Ultrafast Spin-Flip Dynamics of Transition Metal Complexes"
Oliver Kühn (University of Rostock)

14:45-15:10 "Direct observation of bond formation by femtosecond X-ray solution scattering"
Shin-ichi Adachi (KEK)

Chair: Masahiro Shibuta

15:25-16:10 "Ultrafast multidimensional space- and time-resolved spectroscopies of supramolecular structures"
Tobias Brixner (Universität Würzburg)

16:10-16:35 "Charge generation and recombination dynamics in polymer donor/polymer acceptor blend solar cells"
Hiroaki Benten (Nara Institute of Science and Technology)

16:35-17:20 "High-dimensional quantum dynamics of functional organic polymer materials: Coherence, disorder effects, and localization"
Irene Burghardt (Goethe University Frankfurt)

17:20-17:45 "Multiple exciton generation/recombination dynamics in quantum dot and hyper-structured quantum dots"
Kim Hyeon-Deuk (Kyoto University)

18:00-20:00 Banquet

March 8th (Wed.)

Chair: Wolfgang Domcke

09:00-09:45 [Keynote Lecture]
"Time and Angle-Resolved Photoelectron Spectroscopy of Non-adiabatic Dynamics in Gas and Liquid Phases"
Toshinori Suzuki (Kyoto University)

Chair: Manabu Kanno

09:45-10:10 "Time-dependent ab initio wavefunction methods for multielectron dynamics of atoms and molecules in intense laser fields"
Takeshi Sato (University of Tokyo)

10:10-10:55 "Strong-field tunnel ionization of current-carrying molecular orbitals"
Ingo Barth (Max Planck Institute of Microstructure Physics)

Chair: Reika Kanya

11:05-11:30 "Ultrafast EUV photoelectron spectroscopy of molecular Rydberg wavepacket dynamics by single-order laser high harmonics"
Mizuho Fushitani (Nagoya University)

11:30-12:15 "Electron-Ion Dynamics in Strong Fields: The Exact Factorization Perspective"
Neepa T. Maitra (The City University of New York)

Chair: Takefumi Yamashita (University of Tokyo)

13:40-14:05 "Time-resolved impulsive stimulated Raman study of green fluorescent protein: Role of a coherent low frequency mode in the excited state proton transfer"
Tomotsumi Fujisawa (Saga University)

14:05-14:50 "Path-integral methods for non-adiabatic chemical dynamics"
Thomas F. Miller III (California Institute of Technology)

14:50- Closing Remarks: Shinji Saito (Institute for Molecular Science)

Poster Session

P01 "Semiclassical computation of photoelectron signals from conical intersection dynamics"
Yasuki Arasaki and Kazuo Takatsuka

P02 "Vacuum ultraviolet photoelectron imaging of non-adiabatic dynamics in isolated molecules"
Takuya Horio and Toshinori Suzuki

P03 "Dynamics of photoionization from molecular electronic wavepacket states in intense pulse laser fields"
Takahide Matsuoka and Kazuo Takatsuka

P04 "Adiabatic electronic motion in forming covalent bond"
Michihiro Okuyama

P05 "Multiple classical trajectories can reproduce quantum nuclear motion in strong-field processes"
Yasumitsu Suzuki and Kazuyuki Watanabe

P06 “Photodynamical electron-wavepacket mechanism of water-splitting catalyzed by manganese oxides involving hydrogen-bond network”
Kentaro Yamamoto and Kazuo Takatsuka

P07 “Ultrafast annihilation dynamics of photosystem II monomer and dimer”
Yusuke Yoneda, Tetsuro Katayama, Yutaka Nagasawa, Hiroshi Miyasaka, and Yasufumi Umena

P08 “Correlated electron–nuclear dynamics: Exact factorization of the time-dependent electron–nuclear wavefunction, exact potential energy surfaces and Berry phases”
Ali Abedi

P09 “Electronic non-adiabatic dynamics in enhanced ionization of isotopologues of hydrogen molecular ion from the exact factorization perspective “
Elham Khosravi, Ali Abedi, Angel Rubio, and Neepa T. Maitra

P10 “Strong-field ionization of rotationally state-selected NO”
Kotaro Sonoda, Atsushi Iwasaki, Kaoru Yamanouchi, and Hirokazu Hasegawa

P11 “Development of classical force fields for thermal transport in methylammonium lead halide”
Tomoyuki Hata, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita, Claudia Caddeo, and Alessandro Mattoni

P12 “LHCSR3 dissipates excitation energy within the light-harvesting complex of photosystem II in green algae *Chlamydomonas reinhardtii*”
Eunchul Kim, Ryutaro Tokutsu, Makio Yokono, Seiji Akimoto, and Jun Minagawa

P13 “A development of the constant uncertainty molecular dynamics technique to simulate real-time nuclear quantum dynamics”
Taisuke Hasegawa

P14 “Glassy dynamics and Kauzmann temperature of water: Vibrational and configurational contributions revealed by quantum mechanical complex entropy”
Shinji Saito

会 議 名: 第78回岡崎コンファレンス
“Grand Challenges in Small-Angle Scattering”

期　　間: 2017年3月18日(土) ～20日(月)

場　　所: 岡崎コンファレンスセンター

組織委員: 秋山 修志（分子科学研究所），上久保 裕生（奈良先端科学技術大学院大学），杉山 正明（京都大学）

内　　容:

Molecular systems are the main players directing energy- and material-conversions in the natural world, and they are not mere molecular aggregations. In the case of biological systems, we find complicated and dynamic behaviors of protein molecules, which are assembled and then interact further with other macromolecules under heterogeneous conditions. There is still no universal and straightforward way to visualize those structures, because the composition and stoichiometry in the system often change in a time-dependent manner.

Small-angle scattering is one of the effective analytical tools for hierarchical bio-molecular systems, providing size and shape information from sub-nanometer to micrometer in real-time. In this conference, the fundamentals of the solution scattering will be first overviewed, and then recent applications of x-ray/neutron solution scattering to the molecular system sciences will be shared with life-science students/researchers in mind. Furthermore, the organizers would like to provide an opportunity to think about an East Asian SAS community through discussions with the leading scientists invited from Taiwan and Korea SAS communities (SESSION 2).

外国人招待講演者を以下に挙げる。

Dmitri Svergun (European Molecular Biology Laboratory, Hamburg, Germany)

Pau Bernado (Centre de Biochimie Structurale, France)

Nozomi Ando (Princeton University, U.S.A.)

U-Ser Jeng (National Synchrotron Research Center, Taiwan)

Sangho Lee (Sungkyunkwan University, Korea)

Frank Gabel (Institut de Biologie Structurale, Grenoble, France)

Ralf Biehl (Jülich Centre for Neutron Science, Julich, Germany)

Maxim Petoukhov (Russian Academy of Sciences, Russia)

Jochen Hub (Institute for Microbiology and Genetics, Germany)

また，日本人招待講演者を以下に挙げる。

Hironari Kamikubo (Nara Institute of Science and Technology)

Shuji Akiyama (Institute for Molecular Science)

Masaaki Sugiyama (Kyoto University)

Satoru Fujiwara (National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology)

Tomotaka Oroguchi (Keio University)

Kazuki Ito (Rigaku Corporation)

Ryoichi Arai (Shinshu University)

Sachiko Toma-Fukai (University of Tokyo)

プログラム等は以下のようであった。

The 78th Okazaki Conference
Grand Challenges in Small-Angle Scattering
Date: March 18–21, 2017
Site: Okazaki Conference Center (OCC)
Website: https://registration.ims.ac.jp/Sas2017/
Aim

Molecular systems are the main players directing energy- and material-conversions in the natural world, and they are not mere molecular aggregations. In the case of biological systems, we find complicated and dynamic behaviors of protein molecules, which are assembled and then interact further with other macromolecules under heterogeneous conditions. There is still no universal and straightforward way to visualize those structures, because the composition and stoichiometry in the system often change in a time-dependent manner.

Small-angle scattering is one of the effective analytical tools for hierarchical bio-molecular systems, providing size and shape information from sub-nanometer to micrometer in real-time. In this conference, the fundamentals of the solution scattering will be first overviewed, and then recent applications of x-ray/neutron solution scattering to the molecular system sciences will be shared with life-science students/researchers in mind. Furthermore, the organizers would like to provide an opportunity to think about an East Asian SAS community through discussions with the leading scientists invited from Taiwan and Korea SAS communities (SESSION 2).

Program

March 18, 2017

14:00 - 18:00	Desk Opening

March 19, 2017

9:00 - 9:10	Welcome Address
9:10 - 10:10	Plenary Session 1 (chair: **Shuji Akiyama**, Institute for Molecular Science) **Dmitri Svergun** (European Molecular Biology Laboratory) “Modern small-angle scattering from biomacromolecular solutions”
10:30 - 12:00	Session 1: Challenges in Molecular Systems (chair: **Tetsuro Fujisawa**, Gifu University) **Hironari Kamikubo** (Nara Institute of Science and Technology) “Structural Exploring Multi-component Equilibrium in Biological Systems by using Continuous Titration SAXS” **Pau Bernado** (Centre de Biochimie Structurale) “Disentangling Polydispersity in Biological Systems by SAXS” **Nozomi Ando** (Princeton University) “Protein Dynamics from X-Ray Scattering and Diffraction”
12:00 - 13:00	Group Photo & Lunch
13:00 - 16:00	Poster Presentation

16:00 - 17:30	Session 2: Challenges as East Asian Core (chair: **Hironari Kamikubo**, Nara Institute of Science and Technology) **U-Ser Jeng** (National Synchrotron Research Center) "Current and Future Biological Small-angle X-ray Scattering at the National Synchrotron Radiation Research Center" **Sangho Lee** (Sungkyunkwan University) "BioSAXS studies of proteins involved in deciphering ubiquitin codes" **Shuji Akiyama** (Institute for Molecular Science) "Biological X-Ray Solution Scattering Activities at the Institute for Molecular Science"
18:00 - 20:00	Dinner Party

March 20, 2017

9:00 - 10:00	Plenary Session 2 (Canceled)
10:00 - 12:00	Session 3: Challenges in Neutron Scattering (chair: **Mamoru Sato**, Yokohama City University) **Masaaki Sugiyama** (Kyoto University) "Neutron Scattering for Bio-Molecular Systems—How to Utilize Neutron?" **Frank Gabel** (Institut de Biologie Structurale) "Small-angle neutron scattering: A powerful structural biology tool for challenging biomacromolecular complexes" **Satoru Fujiwara** (National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology) "Hydration Structures around Proteins Studied by Neutron and X-ray Small-Angle Scattering" **Ralf Biehl** (Jülich Centre for Neutron Science) "Slow internal protein dynamics in solution observed by Neutron Spinecho Spectroscopy"
13:30 - 15:00	Session 4: Challenges from Current Topics (chair: **Masaaki Sugiyama**, Kyoto University) **Kazuki Ito** (Rigaku Corporation) "Advances in Laboratory SAXS Instruments" **Ryoichi Arai** (Shinshu University) "Dynamical Ordering Nanostructures Constructed from Protein Nanobuilding Blocks" **Sachiko Toma-Fukai** (University of Tokyo) "Novel helical assembly in arginine methyltransferase 8"
15:20 - 16:50	Session 5: Challenges in Analysis and Evaluation (chair: **Satoru Fujiwara**, National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology) **Maxim Petoukhov** (Russian Academy of Sciences) "Ambiguity Assessment of Small-Angle Scattering Curves from Monodisperse Homogenious Systems" **Tomotaka Oroguchi** (Keio University) "Protein Conformational Fluctuations Investigated by X-Ray Solution Scattering and Molecular Dynamics Simulation" **Jochen Hub** (Institute for Microbiology and Genetics) "Interpretation of Solution X-Ray Scattering Data by Explicit-Solvent Molecular Dynamics"
16:50 - 17:00	Closing

March 21, 2017

10:00 - 12:00	Site Visit (for participants wishing to visit IMS, UVSOR, *etc.*)
12:00	Departure

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）との間のものに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，2017年7月に開催が延期された。今後も，日韓両国の研究者による活発な研究・人材交流が進むことが期待される。

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 ～2006	07	08	09	10	11	12	13	14	15	16
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	2
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	5	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	83	4	6	6	4	11	12	11	9	12	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	43	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	20										
名古屋市立大学	21	5	4	4	4	2	3	2	2	1	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	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	1
計	633	17	17	17	17	27	30	24	27	26	17

＊外国の大学等

3-5-2　総合研究大学院大学二専攻

総合研究大学院大学は，1988 年 10 月 1 日に発足した。分子科学研究所は，同大学院大学に参加し，構造分子科学専攻及び機能分子科学専攻を受け持ち，1991 年 3 月には 6 名の第一回博士課程後期修了者を誕生させた。なお，所属研究科は 2004 年 4 月より数物科学研究科から物理科学研究科に再編された。

その専攻の概要は次のとおりである。

構造分子科学専攻

詳細な構造解析から導かれる分子および分子集合体の実像から物質の静的・動的性質を明らかにすることを目的として教育・研究を一体的に行う。従来の分光学的および理論的な種々の構造解析法に加え，新しい動的構造の検出法や解析法を用いる総合的構造分子科学の教育・研究指導を積極的に推進する。

機能分子科学専攻

物質の持つ多種多様な機能に関して，主として原子・分子のレベルでその発現機構を明らかにし，さらに分子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（2016 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	7	19
機能分子科学専攻	10	7	22
計	17	14	41

在籍学生数（2016 年 12 月現在）　単位：人　（年度別）

入学年度専攻		2012	2013	2014	2015	2016	計	定　員
構造分子科学専攻	５年一貫	3	1	2	3	5	14	2
	博士後期	0	0	6	4	1	11	3
機能分子科学専攻	５年一貫	0	0	0	3	5	8	2
	博士後期	0	1	1	1	3	6	3

学位取得状況　単位：人　（年度別）

専　攻	1991 ～ 2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016 (9 月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	95(11)	5(1)	7	5	2	2	6	4	2	4	0	132(12)
機能分子科学専攻	79(14)	1	4	3	5	1	3	6	1(3)	3	2	108(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 ～ 2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016
構造分子科学専攻	131(1)	8(1)	5(1)	5(3)	5(1)	1(1)	6(2)	5(4)	11(4)	7(3)	6(5)
機能分子科学専攻	112	5(1)	5(2)	7(2)	4(2)	6(2)	8(2)	4	2(1)	4(3)	8(5)

（　）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		
	1989-2014 年度	2015 年度	2016 年度	1989-2014 年度	2015 年度	2016 年度
中　国	31	1		11		1
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		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	1	1		4		2
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 ～ '14 年度	'15 年度	'16 年度	'89 ～ '14 年度	'15 年度	'16 年度	
北海道大学	2			2			4
室蘭工業大学	1			1			2
東北大学	1			2(1)			3(1)
山形大学				3			3
筑波大学	1			1			2
群馬大学				1			1
千葉大学	5	1(1)	1	3			10(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	5(2)		1(1)	7		2(2)	15(5)
名古屋工業大学	1					1(1)	2(1)
豊橋技術科学大学	5			3(1)			8(1)
三重大学	1						1
京都大学	14(1)	1	1(1)	16	1		33(2)
京都工芸繊維大学	1			1			2
大阪大学	6(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)
宇部工業高等専門学校						1(1)	1(1)
北九州工業高等専門学校			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(1)	1			4(1)
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
神奈川大学			1(1)				1(1)
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	44(3)	3		30(3)		4(1)	81(7)

＊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（2016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	12	14	26
大学・公的機関等研究職	35	35	70
民間企業	25	16	41
その他	25	21	46
計	133	109	242

3-5-3　オープンキャンパス・分子研シンポジウム

2016 年 5 月 27 日（金）に分子研シンポジウム 2016 を開催し，引き続き 28 日（土）に分子研オープンキャンパス 2016 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 10 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４名の先生方に講演をお願いした。参加登録者数は，所外からは 61 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，学部学生 42 名，大学院生 11 名，大学教員６名，中学教諭１名，民間企業１名であった。所内からの参加者数は 38 名と多数参加頂いた。

参加者数まとめ

	学部学生	修士課程	博士課程	教員・その他	民　間	合　計
北海道	2	0	0	0	0	2
東　北	0	0	0	0	0	0
関　東	11	1	2	2	0	16
甲信越	2	1	0	0	0	3
北　陸	0	3	0	0	0	3
東　海	10	1	0	0	0	11
近　畿	16	1	1	4	2	24
中国・四国	1	0	0	0	0	1
九州・沖縄	0	1	0	0	0	1
合　計	42	8	3	6	2	61

3-5-4　夏の体験入学

2016 年８月８日（月）から 11 日（木）までの４日間，分子科学研究所において，第 13 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，定員を大幅に上回る応募（52 名）を受け，選考の結果，26 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８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９日（火），10 日（水）：配属研究室にて研究体験
８月 11 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	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
2	八戸工業高等専門学校	学部４年		
3	名古屋市立大学	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
4	北海道大学	学部３年		
5	東京大学	修士２年		
6	慶應義塾大学	学部３年	タンパク質 1 分子の動きを観察してみよう	飯野　教授
7	大阪市立大学	学部３年		
8	徳島大学	学部３年	遷移金属ナノ触媒を作る！	魚住　教授
9	東京理科大学	学部３年		
10	電気通信大学	修士１年	ボース・アインシュタイン凝縮体のスピン観測実験	大森　教授
11	九州大学	修士２年		
12	京都大学	修士１年	ナノの金属ロッドを作って波動関数を見る	岡本　教授
13	名古屋大学	修士１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
14	名城大学	学部３年	超高真空を知る見る触る：電子波を使って分子の並びを確認しよう	解良　教授
15	北海道大学	学部３年	有機半導体セキシチオフェンの合成	鈴木　准教授
16	東京理科大学	学部３年	光シンセサイザー マイクロ固体フォトニクスからのアプローチ	平等　准教授
17	山口大学	学部４年	角度分解光電子分光による固体の電子状態の直接観測	田中　准教授
18	学習院大学	学部３年	機能性材料，有機ラジカル，生体関連物質の電子スピン共鳴観測や磁性計測	中村　准教授
19	中央大学	学部３年	有機 EL 素子の作製と発光測定	平本　教授
20	上智大学	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
21	創価大学	学部４年	膜タンパク質の物質輸送および情報変換機構の研究	古谷　准教授
22	北里大学	学部３年	金属錯体で学ぶ人工光合成	正岡　准教授
23	城西大学	学部３年		
24	名古屋工業大学	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
25	関西大学	学部３年		
26	東京工業大学	学部４年		

3-5-5　総研大アジア冬の学校

2016年12月14日（水）から15日（木）の期間，岡崎コンファレンスセンターにおいて，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13回目である。アジア諸国から多数の応募があり，書類選考を経て，７名を受け入れた。海外からの参加者１名，所外の国内参加者１名，インターンシップ（IIP：IMS国際インターンシッププログラム）の留学生６名，所内から52名の参加登録があった。今回は，「分子科学，新分野への挑戦」をテーマに，分子科学の基礎にはじまり，最先端の研究および将来展望が紹介された。また，参加者によるポスター発表が行われた。講演者は下記のとおりである。

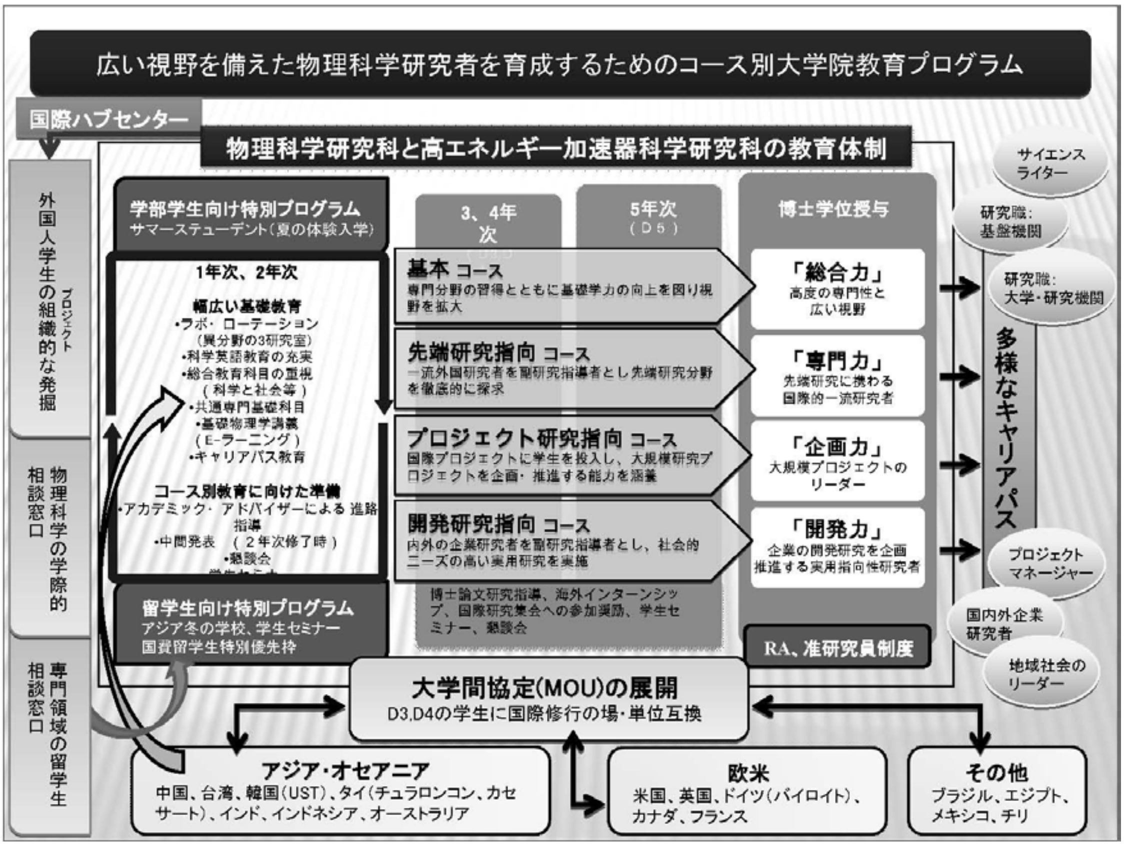
ISHIZAKI, Akihiko (IMS, SOKENDAI)
NAKAMURA, Toshikazu (IMS, SOKENDAI)

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年度以降は，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）。

2016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，11科目（①統合生命科学入門，②機能生体分子科学，③イメージング科学，④生体分子シミュレーション入門，⑤生物情報学（e-バイオサイエンス概論，遺伝学，生物統計学基礎，生物情報処理），⑥生命起源論，⑦定量生物学，⑧統合生命科学実践コース，⑨発生生物学 II，⑩進化ゲノム生物学，⑪統合生命科学シリーズ）が実施された。昨年度より新設された統合生命科学実践コース（講義と実地演習からなる複合科目）では，実地演習時に遠隔地の大学院生に対し旅費支援を行い参加可能とした。講義内容とともにサポート面でも充実した科目となった。

(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，機能分子科学専攻の飯野亮太教授がオーガナイザーで「Observe, Read, Create the Life」というタイトルで8月に開催された。海外からも多くの参加者があり，講師や討論参加者を含めた数は94名に達した。2日間にわたる講義では，若手や留学生から活発な議論があり盛会であった。2日目の午前に実施された岡崎統合バイオサイエンスセンターのラボ見学も好評であった。