

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 量子計測を用いた振動状態分光	大阪大学大学院工学研究科 分子科学研究所 伊 東 忍 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 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 シリセン・ゲルマネンヘテロ構造の電子状態測定	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター 大阪大学大学院基礎工学研究科 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 富 永 圭介 内 田 幸明 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質構造科学研究所 足 立 純一
軟X線オベランド分光を利用した革新的水分解触媒の創生 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 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	慶應義塾大学理工学部 慶應義塾大学理工学部 東京理科大学理学部 吉 田 真明 古 川 良明 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 高強度 THz 励起時間分解光電子分光装置の開発 桂皮酸メチル誘導体の ${}^1\pi\pi^*$ 状態の探索と光異性化機構の解明 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	京都大学エネルギー理工学研究所 大阪大学大学院生命機能研究科 広島大学大学院理学研究科 島根大学教育学部 全 炳俊 渡 辺 浩 江 幡 孝之 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
メタフォトンクスによる赤外域分子輝線多重波蔽光学素子の開発	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
解離イオンとオーグメントから探るジフルオロ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
2um 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洞の開発研究	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
解離イオンとオーグメントから探るジフルオロ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ミュレーション	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ミュレーション	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，数値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 F₁-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（千葉大学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」
穂田 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)
“O₂ 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)
“CO₂ 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 CO₂ 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 Kiyoun 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：楳山 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ールの不斉合成	森 啓二
13:30-13:50	ロジウム触媒を用いた縫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	開会挨拶	楳山 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 真紀（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） 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 $\text{NaCuMoO}_4(\text{OH})$ 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- 単結晶に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 $\text{FeTe}_{1-x}\text{Se}_x$ の電子構造研究	分子科学研究所	出田真一郎
$\text{Sm}_{1-x}\text{Y}_x\text{S}$ 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 $\text{NdFe}(\text{P}, \text{As})(\text{O}, \text{F})$ 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
$\text{Bi}(111)$ 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ピング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
電子ドーピング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) ₂ X 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科	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- 単結晶に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ピング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リメーキングの開発	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
ホールドーピング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・スピンストライブ秩序相を有する高温超伝導体の電子構造	分子科学研究所	田中 清尚
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 _x O _{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パフォーマンス評価	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-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 $\text{Sr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Fe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ 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 ($X = \text{In}, \text{Cd}$) 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
$\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{F}_2$ 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	山邊 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 PNIPAA 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	荳口 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 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	新潟大学大学院自然科学研究科 名古屋大学大学院理学研究科	石井 良樹 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 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 質量分析法によるペプチドのラジカル分解過程の解析 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 遺伝子編集タンパク質のシミュレーション研究 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 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 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 新しい量子力学計算法の開発とプロトン移動への応用 分子ナノカーボンの構造と物性 格子欠陥系 X 線光電子分光の第一原理的研究 分子内および分子間電子、電子対移動の研究 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 金属錯体に関する理論的研究 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 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 薬物リード化合物創出のための分子シミュレーション 化学反応および分子特性に関する理論研究 量子化学と統計力学に基づく複雑化学系の理論的研究 微細構造を認識する超分子複合系の構築と構造解析 TD-DFT による金属錯体の構造最適化とスペクトル解釈 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 三次元パイ共役系化合物の物性評価 アジドやアラインの反応性に関する理論的考察 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研究 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 大規模第一原理計算のための KKR グリーン関数法の開発 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 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 分子シミュレーションによる分子集合体の研究 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 ヒト血清アルブミンと有機化合物の相互作用 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 生命関連星間分子の生成機構に関する理論的研究 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 光化学反応の制御と応用に関する理論的研究 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 生体分子および溶媒の構造機能相関の解明 理論計算による触媒機能の解明 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 水素結合系における光化学過程の理論的研究 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 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 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 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 量子化学計算によるガス状化学物質と $O_3\cdot OH$ との反応機構の解明	岡山大学大学院自然科学研究科 お茶の水女子大学理学部 産業技術総合研究所 筑波大学数理物質系 近畿大学生物理工学部 名古屋大学大学院理学研究科 九州大学大学院理学研究院 東京大学物性研究所 東京大学先端科学技術研究センター 名古屋大学大学院理学研究科 慶應義塾大学理工学部 神奈川大学理学部 高エネルギー加速器研究機構 静岡理科大学理工学部 福岡大学薬学部 山形大学大学院理工学研究科 産業技術総合研究所 神奈川大学理学部 京都大学大学院工学研究科 新潟大学大学院自然科学研究科 東京理科大学理学部 愛媛大学大学院理工学研究科 北里大学理学部 東京医科歯科大学生体材料工学研究所 千葉工業大学工学部 北海道大学大学院工学研究科 奈良県立医科大学医学部 東京大学大学院理学系研究科 豊田工業大学クラスター研究室 名古屋文理大学 静岡大学教育学部 明星大学理工学部 東京農工大学大学院工学研究院 明治学院大学法学部 産業技術総合研究所 日本原子力研究開発機構 産業技術総合研究所 立命館大学生命科学部 星薬科大学薬学部 横浜市立大学大学院生命医科学研究科 弘前大学大学院理工学研究科 島根大学大学院総合理工学研究科 名古屋大学大学院工学研究科 大阪大学大学院工学研究科 東京工業大学化学生命科学研究所 国立環境研究所環境リスク・健康研究センター 東京工業大学大学院理工学研究科 神戸大学分子フォトサイエンス研究センター 分子科学研究所	浅子 壮美 平野 恒夫 浅川 大樹 小松 勇 宮下 尚之 永井 哲郎 吉田 紀生 首藤 靖幸 渡邊 宙志 瀬川 泰知 山内 淳 田仲 二郎 岩野 薫 関山 秀雄 池田 浩人 横山 大輔 亀田 倫史 松原 世明 佐藤 啓文 岩本 啓 秋津 貴城 宮田 竜彦 長谷川真士 吉田 優 山本 典史 佐藤信一郎 平井 國友 中村 栄一 市橋 正彦 本多 一彦 鳥居 肇 松本 一嗣 中野 幸司 高橋 順子 森下 徹也 黒崎 譲 石田 豊和 高橋 卓也 坂田 健 瀬上壮太郎 山崎 祥平 影島 博之 吉井 範行 櫻井 英博 田中 裕也 古濱 彩子 水瀬 賢太 富永 圭介 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	渡邊 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
非平面型バ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
新規バ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	久新莊一郎
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

パ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－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
計算科学を通じ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	穴戸 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	榎木 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	榎山 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

年度 項目	'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	1	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)