

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
DESFRAŃCOIS, 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
TOWORAKAJHONKUN, 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, Srikaow	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
PROMKATKA EW, 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
Ulrich 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, Jülich 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・分子科学研究所	台湾	分子科学研究所と中央研究院原子・分子科学研究所との間の分子科学分野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進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，研究者交流，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こととなり，大学共同利用機関として行う公募型の「岡崎コンファレンス」は，予算的には新しく認定されるようになったCOE各機関がそれぞれ行う独自企画の中規模の国際シンポジウムの予算に切り替わった。これに伴い，分子科学研究所主催で「岡崎COEコンファレンス」を開催することになった。一方，所外の分子科学研究者は分子科学研究所に申請するのではなく，所属している各COE機関から文部省に申請することになった。しかし，「岡崎コンファレンス」では可能であった助手クラスを含む若手研究者からは事実上提案でき

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

以上のように、全国の分子科学研究者からの申請に基づく「岡崎コンファレンス」を引き継ぐような小規模国際研究集会の枠組みをこれまで探索してきたが、継続的に開催していくためには分子研独自の事業として運営費交付金を使うしか方策がないことがわかった。その検討結果を受けて、「岡崎コンファレンス」を再開することを決断し、平成 18 年度に 6 年半ぶりに第 66 回岡崎コンファレンスを開催した。また平成 19 年度から平成 23 年度までは公募方式によって課題を募集し、毎年 1 件を採択して開催した。平成 24 年度開催の岡崎コンファレンスからは、応募の方式を見直し、分子研研究会等、他の共同研究と同時期に募集を行い、審査についても共同研究専門委員会で行うこととした。これに伴い、年度当り複数件の開催も、予算状況等により可能となる。平成 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。

Ulrich 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 assemblies 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 SnS₂
 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)
h ν -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: Hiroataka 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 CH₃NH₃PbI₃ 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 C₆₀ overlayer on pentacene single crystal*
- P08: Jun Yoshinobu (Tokyo), *Reaction of NO on silicene/ZrB₂/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 PC₆₁BM/sextithiophene 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: MoS₂, MoSe₂, WS₂, and WSe₂*
- 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 position 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 HfO₂ 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)
CO₂ 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：齊藤真司（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られる。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. Neepta 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 Bente (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 Otake (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 Otake (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 Otake

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 Bente

- 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 Bente (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 Neepea 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, Jülich, 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ものであった。

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 Spin Echo 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 Homogeneous 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。