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 2017年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名	提案代表者
高分子材料を構成するトリチウムのヘリウム3への壊変に伴う構造変化の分子シミュレーション	京都工芸繊維大学材料化学系 藤原 進

(2) 協力研究

課 題 名 (通年)	代 表 者
液体中の光励起分子についての軟X線分光の試み	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
IV族二次元材料と半導体がつくる界面の電子状態測定	北陸先端科学技術大学院大学マテリアルサイエンス系 高村由起子
革新的水分解触媒の開発に向けた軟X線オパランド観測	慶應義塾大学理工学部 吉田 真明
有機薄膜太陽電池界面の界面準位計測	筑波大学数理工学系 櫻井 岳暁
タンパク質の熱安定性をターゲットとした神経変性疾患の治療薬探索とその熱力学的評価	慶應義塾大学理工学部 古川 良明
アキラルシッフ塩基複核錯体-PVA複合材料への光渦UV照射による分子配向	東京理科大学理学部 秋津 貴城
UVSORにおける進行方向ビーム不安定性の研究と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
高解像度・三次元同位体イメージングに向けたUVSOR大強度ガンマ線源の強度増強	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 渡邊 浩
放射光ベクトルビームの実験研究	広島大学放射光科学研究センター 川瀬 啓悟
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	名城大学理工学部 西山 桂

メタノールデヒドロゲナーゼのガスセンサータンパク質による発現制御 合成学的アプローチによる複合糖質の動的構造解析	東京工業大学生命理工学院 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	蒲池 利章 山口 拓実
蛋白質の構造変化における「弱い」相互作用の解析 人工タンパク質ナノブロック構成要素の新規デザインによる自己組織化ナノ構造複合体の創出及び結晶性多孔質ソフトナノマテリアル開発 磁気ドメイン制御型の Q スイッチの薄膜化 2 μm レーザーによる遠・中赤外光パルス発生の研究 準安定3価分子イオンの生成機構の解明 2価の多原子分子イオンの解離ダイナミクス 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とスピン分解光電子分光技術の確立	京都大学大学院理学研究科 信州大学繊維学部 豊橋技術科学大学電気・電子情報工学系 香川大学工学部 新潟大学自然科学系 理学部 富山大学大学院医学薬学研究部 東京大学大学院理学系研究科	今元 泰 新井 亮一 後藤 太一 鶴町 徳昭 副島 浩一 彦坂 泰正 岡林 潤

課 題 名 (前期)

代 表 者

ダイヤモンドスピンセンサーと近接場光ファイバプローブの結合 キラルプラズモンとキラル磁性結晶 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 ヘテロ芳香族化合物とアルコールを用いたヘテロ環骨格の触媒的合成法の開発 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 解離イオンとオーグメントから探るジフルオロキセノンの内殻励起状態 Rydberg 電子波束の時間発展の観測と制御 新規多座ホスフィン誘導体を表面修飾剤とする遷移金属ナノ粒子の調製とその触媒機能の探索 透明電極表面へのフラレン形成と界面状態の解明 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析 ロクシオウグサレキ由来の天然色素ザイリンドンの光反応性と酸化還元特性の解明 糖鎖分解酵素の高速 AFM / 蛍光顕微鏡による一分子動態解析 スピン偏極電子源の応答性の測定 レーザーアブレーション技術の有機化学反応への応用 溶連菌由来ヘムセンサータンパク質による遺伝子発現制御機構の解明	北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科 大阪府立大学大学院工学研究科 大阪大学大学院基礎工学研究科 山形大学工学部 筑波大学大学院数理工学系 関西学院大学理工学部 奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科 愛媛大学大学院理工学研究科 愛知工業大学工学部 東京理科大学総合研究院 慶應義塾大学薬学部 名古屋大学大学院理学研究科 高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設 大阪大学大学院工学研究科 兵庫県立大学大学院生命科学研究科	安 東秀 戸川 欣彦 内田 幸明 皆川 真規 重田 育照 河野 光彦 香月 浩之 太田 英俊 森 竜雄 川崎 平康 東林 修平 内橋 貴之 金 秀光 櫻井 英博 澤井 仁美
--	--	--

課 題 名 (後期)

代 表 者

有機色素 J 会合体を含有する微小共振器の高密度光励起下での発光特性 Rydberg 電子波束の時間発展の観測と制御 超薄膜液体の電気・光物性測定 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 (II) ダイヤモンドスピンセンサーと近接場光ファイバプローブの結合 キラルプラズモンとキラル磁性結晶 CD イメージングを利用したキラル配位高分子の絶対構造の同定と応用展開 マイクロチップレーザーによる多時刻ブレイクダウンを用いたレーザー点火に関する研究 常温接合を用いた赤外波長変換デバイスの開発 レーザーアブレーション技術の有機化学反応への応用 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 HIV TAT タンパク質とアミロイドペプチドの結合についての分子動力学シミュレーション スピン偏極電子源の応答性の測定 新規多座ホスフィン誘導体を表面修飾剤とする遷移金属ナノ粒子の調製とその触媒機能の探索 ヘテロ芳香族化合物とアルコールを用いたヘテロ環骨格の触媒的合成法の開発 糖鎖分解酵素の高速 AFM / 蛍光顕微鏡による一分子動態解析 有機イオン周辺の水和水の水素結合ネットワーク構造とそのダイナミクス	鳥根大学大学院総合理工学研究科 奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科 兵庫県立大学大学院物質科学研究科 東京理科大学理工学部 北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科 大阪府立大学大学院工学研究科 九州大学大学院工学研究院 大阪大学工学部 中央大学理工学部 大阪大学大学院工学研究科 東京大学生産技術研究所 国立国際医療研究センター医療社会学研究室 高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設 愛媛大学大学院理工学研究科 山形大学工学部 名古屋大学大学院理学研究科 神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	水野 肅 香月 浩之 田島 裕之 中山 泰生 安 東秀 戸川 欣彦 山田 鉄兵 赤松 史光 庄司 一郎 櫻井 英博 岡部 洋二 尾又 一実 金 秀光 太田 英俊 皆川 真規 内橋 貴之 富永 圭介
--	--	--

(3) 研究会

① 【分子研研究会】

水の局所構造・物性解析の最先端
2017年6月12日(月) 分子科学研究所研究棟201号室

12:50 - 13:00	「はじめに」 高原 淳 (九大), 小杉信博 (分子研)
13:00 - 13:35	大内幸雄 (東工大) 「和周波振動分光によるイオン液体/電解質水溶液界面の微視・巨視評価」
13:35 - 14:10	井上賢一 (理研) 「ヘテロダイン検出振動和周波発生分光法を用いた界面水の超高速ダイナミクス」
14:10 - 14:45	川口大輔 (九大) 「中性子反射率法による高分子/水界面の凝集構造解析」
15:15 - 15:50	大西 洋 (神戸大) 「ピコニュートン力学計測でさぐる界面水構造」
15:50 - 16:25	小杉信博 (分子研) 「軟X線透過吸収顕微分光法による水溶液の局所構造解析」
16:25 - 17:00	西川恵子 (千葉大) 「硬X線を使った解析」
17:00 - 17:35	藤井秀司 (大阪工大) 「空気-水界面への固体微粒子の吸着現象が拓く材料化学」
17:35 - 18:05	総括討論
18:30 - 20:30	意見交換会

② 【学協会連携分子研研究会】

触媒反応であるタンパク質反応を分子科学的観点から捉える
2017年6月14日(水) 分子科学研究所研究棟201号室

午前の部	司会 寺嶋正秀
10:00 - 10:15	趣旨説明 今野美智子 (お茶の水女子大学名誉教授)
10:15 - 10:50	中村彰彦 (岡崎統合バイオ) 「反転型セルロース加水分解酵素のプロトン伝達経路を含んだ反応機構」
10:50 - 11:25	平田文男 (豊田理化学研究所) 「蛋白質の構造揺らぎと『水』」
11:25 - 12:00	山縣ゆり子 (熊本大学大学院生命科学研究部) 「ヒト MTH1 の幅広い基質特異性の構造的基盤」
午後の部	司会 今野美智子
13:15 - 13:50	寺嶋正秀 (京都大学大学院理学研究科) 「いかにして刺激受容後にタンパク質分子全体の構造変化過程や標的分子との分子間反応過程を時間分解で捉えるか」
13:50 - 14:25	樋口芳樹 (兵庫県立大学大学院生命理学研究科) 「[NiFe] ヒドロゲナーゼの水素分子の触媒反応機構の解明」
14:25 - 15:00	近藤美欧 (分子科学研究所) 「生体機能模倣による鉄5核錯体による酸素発生触媒機構」
15:00 - 15:35	相田美砂子 (広島大学大学院理学研究科) 「生理活性分子の特異的水和について」
	司会 正岡重行
15:45 - 16:20	菅 倫寛 (岡山大学異分野基礎科学研究所) 「X線自由電子レーザーにより明らかにされた光化学系IIの反応中間体の構造と水分解・酸素発生の反応機構」
16:20 - 16:55	長岡正隆 (名古屋大学大学院情報学研究科) 「タンパク質反応の大規模分子動力学計算—ヘモグロビンサブユニットへの酸素分子侵入経路の統計的解析—」
16:55 - 17:30	岩田 想 (京都大学大学院 医学研究科, 理化学研究所 放射光科学総合研究センター) 「自由電子レーザーによるバクテリオロドプシンの構造変化の動き—光によって水素イオンを輸送する仕組みの解明」
17:30	閉会の辞

③ 【アジア連携分子研研究会】

Japan-China Joint Interdisciplinary Symposium on Coordination-Based Hybrid Materials

(日中合同若手学際シンポジウム～配位化学を基盤とした次世代複合材料)

2017年6月23日(金)～25日(日) 岡崎コンファレンスセンター

June 23 (Friday)

Registration and Welcome banquet at Okazaki New Grand Hotel

June 24 (Saturday)

Scientific program at Okazaki Conference Center

8:50- 9:00 Opening remarks (Takane Imaoka)

Session 1 (Chairperson: Shigeyuki Masaoka)

9:00- 9:25 Takashi Uemura (Kyoto University)

9:25- 9:50 Xun Wang (Tsinghua University)

9:50-10:15 Ryota Sakamoto (The University of Tokyo)

Session 2 (Chairperson: Xun Wang)

10:30-10:55 Shigeyuki Masaoka (Institute for Molecular Science)

10:55-11:20 Jie-Peng Zhang (Sun Yat-sen University)

11:20-11:45 Yuki Kurashige (Kyoto University)

11:45-12:10 Kensuke Kurihara (Institute for Molecular Science)

Session 3 (Chairperson: Jie-Peng Zhang)

13:40-14:05 Takane Imaoka (Tokyo Institute of Technology)

14:05-14:30 Guang-Shan Zhu (Northeast Normal University)

14:30-14:55 Teppei Yamada (Kyushu University)

14:55-15:20 Jun-Hua Luo (Fujian Institute of Research on the Structure of Matter)

15:20-15:50 Photo and Coffee Break

Session 4 (Chairperson: Teppei Yamada)

15:50-16:15 Koji Harano (The University of Tokyo)

16:15-16:40 Xin-Yi Wang (Nanjing University)

16:40-17:05 Shohei Tashiro (The University of Tokyo)

18:30- Dinner at Okazaki New Grand Hotel

June 25 (Sunday)

Scientific program at Okazaki Conference Center

Session 5 (Chairperson: Guang-Shan Zhu)

9:00- 9:25 Norie Momiyama (Institute for Molecular Science)

9:25- 9:50 Bin Zhao (Nankai University)

9:50-10:15 Akira Onoda (Osaka University)

Session 6 (Chairperson: Akira Onoda)

10:30-10:55 Nobuhiro Yanai (Kyushu University)

10:55-11:20 Shang-Da Jiang (Peking University)

11:20-11:45 Yoji Kobayashi (Kyoto University)

11:45-12:10 Masayuki Nihei (University of Tsukuba)

Session 7 (Chairperson: Koji Harano)

13:40-14:05 Takuya Nakashima (Nara Institute of Science and Technology)

14:05-14:30 Tao Liu (Dalian University of Technology)

14:30-14:55 Keiichi Inoue (Nagoya Institute of Technology)

Session 8 (Chairperson: Ryota Sakamoto)

15:15-15:40 Kazunori Sugiyasu (National Institute for Materials Science)

15:40-16:05 Bin Zhang (Tianjin University)

16:05-16:30 Satoshi Muratsugu (Nagoya University)

16:30-16:45 Closing remarks (Takane Imaoka & Xin-Yi Wang)
18:00- Dinner

④ 【分子研研究会】

不均一なゆらぎとその周辺の科学：Nishikawa Line から第二臨界点まで
2017年7月18日(火)～19日(水) 岡崎コンファレンスセンター小会議室

7月18日(火)

12:55～13:00 「はじめに」阿部洋(防衛大)

座長 浜谷 望(お茶大)

13:00～13:50 「ゆらぎをプローブとした超臨界流体の構造と物性」西川恵子(千葉大)

13:50～14:30 「ヨウ化錫の液-液転移シナリオ」瀧崎員弘(愛媛大)

14:30～15:00 「水和イオン液体の水和状態の解析とタンパク質の構造に及ぼす影響」藤田恭子(東京薬大)

15:00～15:20 休憩&写真撮影

座長 森下徹也(産総研)

15:20～16:00 「水のギプスエネルギーと液液臨界点仮説」三島 修(物質・材料研究機構)

16:00～16:30 「水素結合性の超臨界流体の溶質・溶媒相互作用とプロトン移動反応」木村佳文(同志社大)

16:30～17:00 「過冷却水の秩序」松本正和(岡山大)

17:00～17:30 「低濃度ポリオール水溶液ガラスのポリアモルフィズム」鈴木芳治(物質・材料研究機構)

特別セッション

座長 高橋憲司(金沢大)

17:35～17:55 「TBA」HyungKim(カーネギーメロン大学)

18:00～20:00 懇親会&ポスターセッション

7月19日(水)

座長 一川尚広(農工大)

9:00～9:30 「金属錯体からなるイオン液体の多彩な機能性」持田智行(神戸大)

9:30～10:00 「イオン液体の触媒作用を用いたセルロースのエステル交換反応」高橋憲司(金沢大)

10:00～10:30 「イオン液体と zwitterion の微生物への相互作用」黒田浩介(金沢大)

座長 服部高典(J-PARC センター)

10:45～11:15 「単純分子ガラスの短・中距離構造とガラス転移」山室 修(東大)

11:15～11:45 「イオン液体に水を添加した系における分子動力学シミュレーション」古石貴裕(福井大)

11:45～12:15 「中性子散乱で観るイオン液体と分子液体のダイナミクス」古府麻衣子(J-PARC センター)

座長 阿部 洋(防衛大)

13:30～14:00 「紫外光電子分光法を用いたイオン液体のマーデルングポテンシャル計測」大内幸雄(東工大)

14:00～14:30 「電極近傍のイオンの分布と配向」都築誠二(産総研)

14:30～15:00 「イオン液体/Pt電極界面におけるイオン吸着脱離挙動の電位応答ヒステリシス」岩橋 崇(東工大)

座長 鈴木芳治(物質・材料研究機構)

15:15～15:45 「イミダゾリウム系イオン液体のLow-Qピークの圧力応答」浜谷 望(お茶大)

15:45～16:15 「芳香族系及び脂環式系イオン液体の相挙動とダイナミクス」藤井幸造(千葉大)

16:15～16:20 「終わりに」解良 聡(分子研)

ポスターセッション

P01 「J-PARCにおける高圧中性子実験の現状」服部高典(J-PARC センター)

P02 「ジャイロイド構造を利用した三次元空間の設計と機能展開」一川尚広(東農大)

P03 「ヨウ素添加イミダゾリウム系イオン液体の光電気伝導特性」青野祐美(防衛大)

P04 「イオン液体-ポリヨウ素系の複雑な相挙動」阿部 洋(防衛大)

P05 「サンドイッチ型ルテニウム錯体からなるイオン液体の物性および反応性」富永拓海(神戸大)

P06 「フェロセン系イオン性プラスチック結晶の構造および相転移」木股覚統(神戸大)

- P07 「還元性イオン液体中での金属ナノ粒子の生成」岡副慎也（同志社大）
 P08 「プロトン性イオン液体中でのプロトン移動ダイナミクス」藤井香里（同志社大）
 P09 「TG法でみたイオン液体中での光応答タンパク質のダイナミクス」小野寺香葉（同志社大）
 P10 「イミダゾリウム系イオン液体 [Csmim][BF₄] の高圧下での小角X線散乱実験」菊地なつみ（お茶大）
 P11 「脂環式イオン液体 [Pyrri1,4]PF₆, [Pip1,4]PF₆ の THF 溶媒中における回転ダイナミクス」小口 聡（千葉大）
 P12 「動的共有結合により構造変換可能なイオン液体の合成」島田悠実子（金沢大）
 P13 「リグニン誘導体を相溶化剤とした炭素繊維強化樹脂の機械特性の評価」酒井啓基（金沢大）
 P14 「亜リン酸系イオン液体を用いた難燃性セルロースプラスチックの開発」西田龍ノ介（金沢大）
 P15 「イオン液体設計による重合性両親媒性分子の自己組織化制御」武内弘明（農工大）
 P16 「アミノ酸イオン液体を溶媒とした脂質キュービックマトリックスの構築」藤原沙希（農工大）

⑤ 【分子研研究会】

共鳴条件下における光と分子の力学的相互作用——分子操作への展開——
 2017年8月18日（金）～19日（土） 岡崎コンファレンスセンター

8月18日（金）

- 12:30-13:00 受付
 13:00-13:10 開会の挨拶
 13:10-14:50 ◆チュートリアル講演
 石原 一（大阪府立大学大学院工学研究科 大阪大学大学院基礎工学研究科）
 「光と物質の相互作用に現れる微視的な自己無撞着性」
 15:10-15:30 養輪 陽介（大阪大学大学院基礎工学研究科）
 「極限環境における半導体微粒子の共鳴的光操作」
 15:30-15:50 田中 嘉人（東京大学生産技術研究所, JST さきがけ）
 「局在プラズモン共鳴にあるナノ構造と光の新奇力学的相互作用」
 15:50-16:10 北野 健太（青山学院大学理工学部）
 「高強度テラヘルツパルスを用いた共鳴励起による分子回転操作」
 16:10-18:00 ポスターセッション
 18:45-20:45 <場所移動>懇親会

8月19日（土）

- 9:00-10:00 ◆チュートリアル講演
 岡本 裕巳（分子科学研究所メゾスコピック計測研究センター）
 「非線形分極について～初歩と光圧への効果～」
 10:00-10:20 庄司 暁（電気通信大学大学院情報理工学研究科）
 「光圧によるナノ粒子の駆動と分離」
 10:20-10:40 瀬戸浦 健仁（大阪大学大学院基礎工学研究科）
 「プラズモニックナノ粒子の光熱効果に誘起される物質輸送」
 11:00-11:20 鈴木 康孝（山口大学大学院創成科学研究科）
 「集光したレーザー光を用いたナノシートの光マニピュレーション」
 11:20-11:40 亀山 達矢（名古屋大学大学院工学研究科）
 「近赤外光応答する新規半導体量子ドットの開発」
 11:40-12:00 増井 恭子（産業技術総合研究所 大阪大学先端フォトニクスバイオセンシング OIL）
 「金属ナノ粒子/ポリマーコンポジットの作製法」
 12:00-12:20 上野 貢生（北海道大学電子科学研究所）
 「プラズモン放射圧による高分子ゲルの体積相転移」
 12:20-12:30 閉会の挨拶

⑥ 【分子研研究会】

生体金属動態
 2017年8月26日（土）～27日（日） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

8月26日（土）

- 13:00-13:10 はじめに
 13:10-13:40 城 宜嗣（兵庫県立大理）
 生体内鉄関連タンパク質の構造ダイナミクス
 13:40-14:10 小椋康光（千葉大薬）
 セレン代謝物の同定とその生物学的意義の解明

14:10-14:40	朴 三用 (横浜市大生命医科) 細胞生物学ツールによる新たな試み
15:00-15:30	田村朋則 (京大工) Conditional プロテオミクスによる亜鉛関連タンパク質群の同定
15:30-16:00	古川良明 (慶大理工) 生体内の銅イオン動態と神経変性疾患
16:00-16:30	神戸大朋 (京大生命科学) 分泌型亜鉛要求性酵素のメタレーションに関わる亜鉛トランスポーター
16:30-17:00	明石知子 (横浜市大生命医科) ネイティブ質量分析による構造解析
17:20-18:05	末松 誠 (AMED) ガス分子による代謝制御機構と医学への展開: CO 受容体の探索と機能解明
18:30-	懇親会

8月27日(日)

9:00- 9:30	宮嶋裕明 (浜松医大内科) 鉄の蓄積からくる神経変性症, 無セルロプラスミン血症を中心に
9:30-10:00	石森浩一郎 (北大理) 細胞内鉄代謝制御機構におけるシグナル伝達分子としてのヘムの機能
10:00-10:30	藤代 瞳 (徳島文理大薬) 腎臓近位尿細管における有害金属および薬物の毒性と動態の解析
10:50-11:35	魚住信之 (東北大工) 生体金属の吸収・排出・循環を司る微生物と植物の膜タンパク質
13:00-13:30	武田志乃 (放医研) ケミカル・バイオイメージング: ウラン生体濃集と化学形変化
13:30-14:00	鈴木道生 (東大農) 真珠貝微細構造内の有機基質の構造・機能解析によるバイオミネラリーゼーション研究
14:00-14:30	青野重利 (岡崎統合バイオ) 遷移金属の細胞内動態とその恒常性維持機構の解明
14:50-15:10	高野順平 (大阪府大生命環境) 植物におけるミネラルトランスポーターによるミネラルセンシング
15:10-15:40	伊藤 隆 (首都大学東京理工) NMR による生細胞内蛋白質の立体構造・ダイナミクスの解析
15:40-16:10	津本浩平 (東大医科研) 生体金属動態の制御と蛋白質相互作用解析
16:10-	最後に

⑦ 【分子研研究会】

Cutting-Edge Researches in Coordination Chemistry and Photochemistry
2017年11月4日(土) 岡崎コンファレンスセンター小会議室

9:30- 9:35	Opening Remarks Shigeyuki Masaoka (Institute for Molecular Science)
<Session 1>	
9:35-10:05	Dr. Takashi Nakazono (Rikkyo University) Mechanism of Water Oxidation Catalyzed by Cobalt Porphyrins
10:05-10:35	Dr. Yutaka Saga (Tokyo University of Science) Ternary Hybrid Catalysis Enabling Room-Temperature Hydrogen Gas Release from Organic Molecules
<Session 2>	
10:50-11:20	Dr. Shun Hashiyada (Institute for Molecular Science) Visualization of Chiral Light Confined in Nano Space
11:20-11:50	Dr. Ryo Ohtani (Kumamoto University) Synthetic Raft Domains of Coordination Polymers on Giant Unilamellar Vesicles
11:50-12:00	Photo Session
<Session 3>	
13:10-13:30	Mr. Yoshiyuki Takemoto (Nagoya Institute of Technology) Catalytic Ammonia Formation via Silylation of Dinitrogen by Using T-Shaped Cobalt Complex Bearing Iminophosphorane Ligand
13:30-14:00	Dr. Masaya Okamura (Institute for Molecular Science) Water Oxidation Reaction Catalyzed by a Pentanuclear Iron Complex

- 14:00-14:30 **Dr. Yoko Sakata** (Kanazawa University)
Kinetically Controlled On-Demand Acceleration of Guest Exchange by Using Anion-Capped Metallohost
- 14:30-15:00 **Dr. Yumi Yakiyama** (Osaka University)
Stimuli-Responsive Coordination Networks Composed of Multi-Interactive Molecules

<Session 4>

- 15:15-15:35 **Mr. Lee Sze Koon** (Institute for Molecular Science)
Phosphine-Substituted Ru(II) Polypyridyl Complex for Catalytic CO₂ Reduction
- 15:35-16:05 **Dr. Satoshi Muratsugu** (Nagoya University)
Regulated Metal Coordination Structures on Surface for Selective Catalysis
- 16:05-16:35 **Dr. Katsuhiko Kanaizuka** (Yamagata University)
Construction of Enhanced Photocurrent Systems by Nanocomposite Layers of Silver Nanoparticles and Dyes
- 16:45-17:55 <Special Session>
Prof. Leif Hammarström (Uppsala University, Sweden)
Molecular and Biomimetic Approaches to Artificial Photosynthesis
- 17:55-18:00 Closing Remarks
Shigeyuki Masaoka (Institute for Molecular Science)

- ⑧ 【学協会連携分子研研究会】
量子ビームの物質生命科学への応用の新展開
2017年11月16日(木)～18日(土) 岡崎コンファレンスセンター小会議室

11月16日(木)

- 12:50-13:00 開会あいさつ(分子研・加藤 政博)
- 【一般セッション1(座長:分子研・加藤 政博)】
- 13:00 - 13:30 (KEK・宮島 司) 低エネルギー領域における定在波型加速空洞内電子の軌道解析
- 13:30 - 14:00 (KEK・島田 美帆) CW超電導線形加速器によるマルチビーム運転の検討
- 14:00 - 14:30 (KEK・山本 尚人) マクロ粒子法と準解析的手法を用いた電子バンチ群とダブルRFシステムの相互作用の数値解析
- 14:30 - 15:00 (広大・栗木 雅夫) エミッタンス交換によるビーム形状の最適化
- 【特別セッション1(座長:兵庫県立大・宮本 修治)】
- 15:15 - 16:00 招待講演(KEK・三宅 康博) ミュオン科学の新展開
- 16:00 - 16:30 (分子研・大東 琢治) UVSORにおけるSTXMの近況

【特別セッション2(座長:名大・高嶋 圭史)】

- 16:45 - 17:30 招待講演(KEK・兵頭 俊夫) KEK物構研低速陽電子実験施設における低速陽電子生成と利用実験
- 17:30 - 18:15 招待講演(名大・西谷 智博) GaN半導体による電子ビームイノベーションで実現する1ショット撮像クライオ電子顕微鏡

11月17日(金)

- 【特別セッション3(座長:東北大・柏木 茂)】
- 09:00 - 09:30 (名大・保坂 将人) 放射光による光渦の発生
- 09:30 - 10:15 招待講演(名大・齋藤 晃) 軌道角運動量を運ぶ電子ビームの新展開
- 【特別セッション4(座長:KEK・宮島 司)】
- 10:30 - 11:00 (理研・池田 時浩) ガラスキャピラリーを使ったイオンマイクロビーム小型生成装置による細胞内小器官ピンポイント損傷法
- 11:00 - 11:30 (阪大・入澤 明典) 赤外自由電子レーザーによる物質科学の新展開
- 11:30 - 12:00 (京大・全 炳俊) 準単色ガンマ線の核共鳴蛍光吸収測定による同位体CTイメージングの実証

【一般セッション2(座長:広大・栗木 雅夫)】

- 13:00 - 13:30 (J-PARC・原田 寛之) 次世代大強度陽子加速器に向けたレーザー荷電変換入射
- 13:30 - 14:00 (核融合研・木崎 雅志) 核融合研におけるプラズマ加熱用中性粒子ビーム源の開発
- 14:00 - 14:30 (KEK・大谷 将士) 遂に実現したミュオン高周波線型加速
- 14:30 - 15:00 (QST・榊 泰直) レーザー駆動イオン加速

【一般セッション3(座長:名大・保坂 将人)】

- 15:15 - 15:45 (KEK・Aryshev Alexander) LUCX Pre-Bunched e-Beam Generation and Its Application to THz Experimental Studies

- 15:45 - 16:15 (QST・羽島 良一) FEL 共振器における CEP 安定化した数サイクル光パルスの生成
 16:15 - 16:45 (広大・川瀬 啓悟) 小型放射光リングと HiSOR 次期光源
 16:45 - 17:30 招待講演 (立命館・山田 廣成) 新設された卓上放射光センターの紹介と活性水素水の研究について

11月18日(土)

【若手セッション1 (座長:UVSOR・藤本 将輝)】

- 09:00 - 09:15 (広大・正木 一成) NEA-GaAs カソードの高耐久化研究
 09:15 - 09:30 (広大・名越 久泰) 電子ビーム駆動方式 ILC 陽電子源の設計研究
 09:30 - 09:45 (東邦大・佐藤 謙太) ガラスキャピラリーによる細胞照射のためのフレネル型ピンポイントレーザー照準法の開発
 09:45 - 10:00 (東邦大・廣瀬 寛士) ガラスキャピラリー光学系によるレーザーマイクロビームピンポイント照射法開発:ビームパワー密度分布測定
 10:00 - 10:15 (早稲田大・蓼沼 優一) コヒーレントチェレンコフ放射による THz 光生成ターゲットの研究
 10:15 - 10:30 (東北大・齊藤 悠樹) 低屈折率シリカエアロゲル薄膜からのチェレンコフ光を用いたサブピコ秒バンチ長計測

【若手セッション2 (座長:京大・全 炳俊)】

- 10:45 - 11:00 (早稲田大・内田 朋哉) 短パルス電子ビームを用いたパルスラジオリシス法における PαMS の照射効果の評価
 11:00 - 11:15 (早稲田大・森田 遼介) クラブ衝突レーザーコンプトン散乱のためのレーザーシステム開発
 11:15 - 11:30 (兵庫県立大・森本 悠介) LCS ガンマ線による光核反応中性子の計測
 11:30 - 11:45 (兵庫県立大・杉田 健人) レーザーコンプトン散乱ガンマ線の生成と対生成陽電子を用いた材料研究
 11:45 - 12:00 (名大・長谷川 純) UVSOR における高調波空洞によるビーム運動学の実験研究
 12:00 - 12:15 (九大・宮原 巧) 輝尽性蛍光体検出器によるレーザー駆動イオンビーム診断系の開発——機械学習法でのイオン推定を目指して

【若手セッション3 (座長:広大・松葉 俊哉)】

- 13:00 - 13:15 (室蘭工大・富田 大介) 粒子加速器バンチコンプレッサーにおいて航跡場がビーム動力学に及ぼす影響の評価
 13:15 - 13:30 (総研大・布袋 貴大) シミュレーション用 cERL 入射器空洞3次元電磁場のモデル化
 13:30 - 13:45 (J-PARC・守屋 克洋) 次世代大強度ビームの縦方向測定に向けた非破壊型ビームモニタに関する研究
 13:45 - 14:00 (J-PARC・小林 愛音) J-PARC MR のビームの開軌道歪み (COD) の強度依存性の調査
 14:00 - 14:15 (核融合研・藤原 大) レーザーアブレーション法を用いた原子内包フラーレン高効率生成法の研究 (仮)
 14:15 - 14:30 (分子研・郭 磊) CsK₂Sb カソードの安定した高 QE の実現
 14:30 - 14:45 (分子研・藤本 将輝) 円偏光アンジュレータから生じる光渦波面の観測
 14:45 - 15:00 (東北大・齊藤 寛峻) 交叉型アンジュレータを用いた偏光可変コヒーレント THz 放射生成の研究

⑨ 【学協会連携分子研研究会】

電池の分子科学:理論と実験のインタープレイ最前線
 2018年1月26日(金)~27日(土) 岡崎コンファレンスセンター小会議室

1月26日(金)

13:00 - 13:05 開会 山下 晃一

電池基礎・二次電池 (司会 山下 晃一)

- 13:05 - 13:45 山本陽介 (広島大学)
「安定な超原子価硫黄ラジカルの合成と電池への応用」
 13:45 - 14:15 竹中規雄 (名古屋大学)
「二次電池高性能化に向けた電極界面被膜形成機構の理論的解析」
 14:15 - 14:45 山田裕貴 (東京大学)
「溶媒和・イオン会合状態と SEI 形成反応の関係」
 14:45 - 15:15 喜多條鮎子 (九州大学)
「コンバージョン反応を利用した Li イオン二次電池の構築」

電池一般

- 15:35 - 16:05 宮崎晃平 (京都大学)
「金属-空気二次電池のための高活性電極触媒」
 16:05 - 16:35 Maxim Shishkin (京都大学)
「NaMnO₂ Cathode Material: Analysis of Voltage Profile Using DFT+U/Linear Response Technique」
 16:35 - 16:55 城野亮太 (東京大学)
「非水系酸化還元反応の第一原理分子動力学計算」
 16:55 - 17:35 金村聖志 (首都大学東京)
「革新電池におけるバルク反応・界面反応の解析と電池性能向上」
 18:00 - 懇親会

1月27日(土)

電池一般・二次電池 (司会 江原 正博)

- 09:30 - 10:10 安部武志 (京都大学)
「高エネルギー密度電池の電極/電解質界面」
- 10:10 - 10:40 石塚良介 (大阪大学)
「オーダー N 法を用いた MD/DFT 自己無撞着法の開発」
- 11:00 - 11:30 松本一彦 (京都大学)
「二次電池の中温域作動を目指したイオン液体電解質の開発」
- 11:30 - 12:00 大越昌樹 (早稲田大学)
「Na イオン二次電池用高濃度電解液におけるイオン拡散に関する理論的研究」

NMR

- 13:15 - 13:45 山下晃一 (東京大学)
「リン負極における Na 拡散過程と NMR スペクトル」
- 13:45 - 14:05 森田凌平 (岡山大学)
「 ^{23}Na および ^{31}P NMR を用いたナトリウムイオン二次電池リン負極の状態分析」
- 14:05 - 14:25 渡部絵里子 (東京大学)
「NMR 法を用いたナトリウムイオン電池正極材料における局所構造解析」
- 14:25 - 14:55 久保田圭 (東京理科大学)
「ナトリウムおよびカリウムイオン電池の電極材料開発」
- 14:55 - 15:00 閉会 江原 正博 (分子科学研究所)

⑩ 【分子研研究会】

刺激と応答——金属錯体は何を結ぶか

2018年3月4日(日)～5日(月) 岡崎コンファレンスセンター小会議室

3月4日(日)

- 13:00-13:10 趣旨説明 柘植 清志 (富山大学)
- 13:10-13:45 秋根茂久 (金沢大学)
開閉できる含金属ホスト分子の開発と機能
- 13:45-14:20 佐藤弘志 (東京大学)
刺激によって様相を大きく変える多孔性錯体結晶
- 14:20-14:55 河野正規 (東京工業大学)
刺激応答システムの設計と構造-物性の相関の解明
- 15:10-15:45 須藤雄気 (岡山大学)
光刺激と生物応答から学ぶ生体光操作ツールの開発
- 15:45-16:20 中島 洋 (大阪市立大学)
生体内での利用を志向した近赤外光応答型一酸化炭素放出物質の開発
- 16:20-16:55 古川修平 (京都大学)
磁場に応答して神経伝達物質を放出する金属錯体材料
- 16:55-17:30 芳賀正明 (中央大学)
表面錯体膜の電子・プロトン・光に対する多重応答性とデバイス機能
- 18:30-21:00 懇親会

3月5日(月)

- 8:45- 9:20 大津英揮 (富山大学)
金属錯体の光刺激による小分子活性化
- 9:20- 9:55 小澤芳樹 (兵庫県立大学)
ギガバスキュラ圧力下での金属錯体のフォトルミネッセンスピエゾクロミズム
- 10:05-10:40 小林厚志 (北海道大学)
高効率光電荷分離を目指した光増感ナノ界面の創出
- 10:40-11:15 吉成信人 (大阪大学)
ジホスフィン配位子をもつ遷移金属錯体の熱誘起構造変換
- 11:15-11:50 大月 穰 (日本大学)
超分子金属錯体の光・電子機能
- 11:50-11:55 閉会挨拶

(4) 若手研究会等

課題名	提案代表者
第15回 ESR 夏の学校：多周波およびパルス ESR 法の基礎と展望	神戸大学大学院理学研究科 江間 文俊
第57回分子科学若手の会 夏の学校 講義内容検討会および開催支援	学習院大学大学院自然科学研究科 沖野隼之介

(5) 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
希土類置換型ランガサイト結晶の赤外分光	山形大学理学部	北浦 守
生体系物質のテラヘルツ分光	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
窒素マルテンサイト鋼の焼戻しにおける添加合金元素の化学状態測定	東北大学金属材料研究所	佐藤 充孝
MTB 高活性な Mo 過炭化活性種の L 殻 XANES による構造評価	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
軟X線吸収分光法による絶縁体/金属界面反応の研究	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
太陽軟X線2次元撮像分光ロケット実験に用いるフライト品の評価	国立天文台 SOLAR-C 準備室	成影 典之
Al 添加したハイドロキシアパタイトの構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
高配向有機 EL 分子膜の分子軌道評価	筑波大学数理工学系	山田 洋一
角度分解光電子分光法を用いた P3HT/PCBM 薄膜の電子構造と分子配向評価	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
有機半導体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
電子機能性有機分子薄膜の界面電子構造と内蔵電位勾配の精密評価	東京理科大学理工学部	中山 泰生
複合イオン化合物の真空紫外励起によるオキソアニオン由来の多重自己束縛励起子の生成と量子切断	秋田大学大学院理工学研究科	小玉 展宏
パイロクロア型発光体のバンド構造の変化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
深紫外発光アルミニウム酸重鉛蛍光体の光学的基礎物性評価	静岡大学大学院工学領域	小南 裕子
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・構造および温度に伴う変化の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野 正人
NaCl:I 単結晶中におけるキャリア拡散によるエネルギー移動の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
磁気ボトル型電子エネルギー分析器による多電子同時計測	富山大学大学院医学薬学研究部	彦坂 泰正
光学系調整などのビームライン整備	分子科学研究所	岩山 洋士
窒素ドープ半導体光触媒の化学状態解析	大阪市立大学複合先端研究機構	吉田 朋子
遷移金属ダイカルコゲナイド原子層膜の電子構造解明と新奇物性開拓	東北大学大学院理学研究科	佐藤 宇史
ARPES による銅酸化物高温超伝導体の電子ネマティック相の観測	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 GeTe 薄膜の電子・スピン状態測定	東京工業大学理学院物理学系	平原 徹
軟X線光電子分光による Fe ₂ P(10-10) の表面電子状態の解明	立教大学理学部	枝元 一之
分子軌道計測技術の展開 III：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
高分解能角度分解光電子分光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規トポロジカル多層膜の電子状態解析	名古屋工業大学大学院工学研究科	宮崎 秀俊
角度分解光電子分光による NdFeP _{1-x} As _x (O,F) 単結晶の超伝導ギャップ対称性の組成変化の観測	大阪大学大学院理学研究科	宮坂 茂樹
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
2元系アモルファス膜における光誘起内殻吸収スペクトル変化の観察	岐阜大学工学部	林 浩司
ハフニウムシンチレータの発光機構の解明と新規材料の開拓	東北大学未来科学技術共同研究センター	黒澤 俊介
シリコン中の新種不純物中心の基底状態の研究	東北学院大学工学部	原 明人
希土類置換型ランガサイト結晶の赤外分光	山形大学理学部	北浦 守
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
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
老化による疾病の早期発見のための3次元赤外顕微キラリメージングの開発	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
UVSOR 赤外光を用いた固体の低温および顕微分光研究	大阪大学産業科学研究科	入澤 明典
低エネルギー高分解能 ARPES によるトポロジカル半金属の研究	東北大学大学院理学研究科	佐藤 宇史
直接バンド観察で開拓する強相関トポロジカル量子相：ARPES 研究	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

1111 型鉄系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 III	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ホールキャリア依存性	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ロン光研究センター	伊藤 孝寛
高温超伝導体における超伝導状態の自己エネルギー解析	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 $\text{Sr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Fe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$, $\text{EuFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ 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電子構造 II	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
放射光を用いた角度分解光電子分光による希土類化合物 YbInCu_4 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
Electronic Structure Studies of TaAs_2 and NbAs_2 by ARPES	Fudan University	FENG, Donglai
ARPES Studies on the “Turn-On Temperature” Behavior in WTe_2	Seoul National University	KIM, Changyoung
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
パイロクロア型イリジウム酸化物における真空紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	藤岡 淳
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 SOLAR-C 準備室	成影 典之
ボロンドープダイヤモンドのグリーン発光測定	福井大学学術研究院工学系部門	福井 一俊
VUV エリプソメトリーの整備	福井大学学術研究院工学系部門	福井 一俊
生体物質と強相関電子系の真空紫外分光と真空紫外分光計の評価	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
真空紫外検出機器用シンチレーターの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
最小電離損失粒子に対する原子核乾板の感度評価	名古屋大学未来材料・システム研究所	中村 光廣
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
Study of Optical Absorption of Parasitic Transition Metal Ions (Fe^{3+} , Cr^{3+}) at 15K Temperature in Nonlinear Crystal $\text{YAl}_3(\text{BO}_3)_4$ (YAB) in the 150–380 nm Range	分子科学研究所	石月 秀貴
3d 遷移金属添加 AlN の光電子収量分光測定による電子バンドポテンシャルの解明	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田 早紀
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
$\text{Sr}_2\text{MoFeO}_6$ への元素添加に対する Mo の電子状態変化の評価	早稲田大学理工学術院	山本 知之
希土類フッ化物蛍光体における Mn の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
希ガス蛍光のゼーマン量子ビート	九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫
平成 29 年度東海・北陸地区技術職員合同研修 (物理・化学コース)	分子科学研究所	中村 永研
平成 29 年度東海・北陸地区技術職員合同研修 (物理・化学コース)	分子科学研究所	中村 永研
真空紫外吸収分光法による酸化マグネシウムの欠陥の研究	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
アモルファス半導体薄膜の吸収スペクトル測定	岐阜大学工学部	林 浩司
Band Structure of Organometal Halide Perovskite (MAPbI_3 and MAPbBr_3) in Single Crystal	奈良先端科学技術大学院大学	鄭 敏喆
(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
希土類置換型ランガサイト結晶の赤外分光	山形大学理学部	北浦 守
生体系物質のテラヘルツ分光	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
MTB 高活性な Mo 過炭化活性種の L 殻 XANES による構造評価	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
太陽軟 X 線 2 次元撮像分光ロケット実験に用いるフライト品の評価	国立天文台 SOLAR-C 準備室	成影 典之
Al 添加したハイドロキシアパタイトの構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
高配向有機 EL 分子膜の分子軌道評価	筑波大学数理物質系	山田 洋一
角度分解光電子分光法を用いた P3HT/PCBM 薄膜の電子構造と分子配向評価	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
有機半導体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
電子機能性有機分子薄膜の界面電子構造と内蔵電位勾配の精密評価	東京理科大学理工学部	中山 泰生
複合イオン化合物の真空紫外励起によるオキソアニオン由来の多重自己束縛励起子の生成と量子切断	秋田大学大学院理工学研究科	小玉 展宏
パイロクロア型蛍光体のバンド構造の変化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
深紫外発光アルミン酸亜鉛蛍光体の光学的基礎物性評価	静岡大学学術院工学領域	小南 裕子

NaCl:I-単結晶中におけるキャリア拡散によるエネルギー移動の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
磁気ボトル型電子エネルギー分析器による多電子同時計測	富山大学大学院医学薬学研究部	彦坂 泰正
光学系調整などのビームライン整備	分子科学研究所	岩山 洋士
窒素ドープ半導体光触媒の化学状態解析	大阪市立大学複合先端研究機構	吉田 朋子
2元系アモルファス膜における光誘起内殻吸収スペクトル変化の観察	岐阜大学工学部	林 浩司
ハフニウムシンチレータの発光機構の解明と新規材料の開拓	東北大学未来科学技術共同研究センター	黒澤 俊介
シリコン中の新種不純物中心の基底状態の研究	東北学院大学工学部	原 明人
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
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
老化による疾病の早期発見のための3次元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 赤外光を用いた固体の低温および顕微分光研究	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 SOLAR-C 準備室	成影 典之
ボロンドープダイヤモンドのグリーン発光測定	福井大学学術研究院工学系部門	福井 一俊
VUV エリプソメトリーの整備	福井大学学術研究院工学系部門	福井 一俊
真空紫外検出機器用シンチレータの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所	清水 俊彦
最小電離損失粒子に対する原子核乾板の感度評価	名古屋大学未来材料・システム研究所	中村 光廣
希土類添加 BaBiO ₃ の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
再水和置換で合成した新規置換型 NiAl 系 LDH 材料の Al 局所構造解明	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
高速重イオン照射した Gd ₃ Ga ₅ O ₁₂ 中 Ga 及び Gd の局所構造	九州大学大学院工学研究院	吉岡 聰
有機半導体薄膜の電子構造に対して水蒸気が及ぼす効果の検証	東京理科大学理工学部	中山 泰生
構造不均一化が生じる有機ヘテロ接合の光電子分光	東京理科大学理工学部	赤池 幸紀
軟X線吸収分光法による微小濃度の金属錯体溶液の局所構造解析	分子科学研究所	長坂 将成
マイクロ流路を用いた溶液反応の軟X線吸収分光測定	分子科学研究所	長坂 将成
ビームライン整備	分子科学研究所	長坂 将成
透過型X線吸収分光による液晶相の分子配向の研究	分子科学研究所	岩山 洋士
軟X線吸収分光法による濃 KSCN 水溶液の局所構造の温度依存性の検討	分子科学研究所	湯沢 勇人
軟X線吸収分光法によるクラウンエーテル包接錯体の局所構造解析	分子科学研究所	湯沢 勇人
輝尽発光分光によるシンチレータ結晶における真空紫外領域の電子正孔対生成効率の決定	山形大学理学部	北浦 守
有機物を含んだ隕石の紫外反射スペクトル測定	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉川 一朗
ScO の誘電関数およびハロゲン化物混晶の局在準位の決定	福井大学学術研究院工学系部門	牧野 哲征
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および水素添加に伴う変化の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野 正人
VUV スペクトロスコーピーによる消光メカニズムの解明	京都大学大学院人間・環境学研究所	上田 純平
軟X線分光による窒化処理した鋼中の窒素の化学状態評価	東北大学金属材料研究所	佐藤 充孝
Sr ₂ FeMoO ₆ 中の Fe の電子状態評価	早稲田大学理工学術院	山本 知之
解離イオンとオーグメントから探るジフルオロオ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
高分解能 ARPES による遷移金属ダイカルコゲナイド原子層薄膜の研究	東北大学大学院理学研究科	佐藤 宇史
ARPES による銅酸化物高温超伝導体 Bi2212 における電荷秩序状態の研究	東京大学大学院理学系研究科	藤森 淳
スピ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
Ag(100) 上に作成した V ₂ O ₃ (0001) 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 IV : 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 ARPES による FeTe _{1-x} Se _x (x = 0, 0.25, 0.65) の電子構造研究	分子科学研究所	出田真一郎
偏光依存3次元角度分解光電子分光による遷移金属シリサイド TSi ₂ (T = Ta, Nb, V) の電子状態の系統研究	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤 孝寛
in-situ ARPES によるサマリウム酸化物超薄膜の電子状態解析	名古屋工業大学大学院工学研究科	宮崎 秀俊
異方的金属絶縁体物質の偏光角度分解光電子分光	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法による NiTe ₂ のタイプ II ディラックコーンの観測	大阪大学大学院理学研究科	宮坂 茂樹
特異な1次元電子構造を示す半導体表面 Bi 薄膜における格子変調 I	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪 嘉之
Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy Study of FeSe _{1-x} S _x	Fudan University	FENG, Donglai
Experimental Observation of Hidden Orbital Angular Momentum (OAM) in Diamond and Silicon	Seoul National University	KIM, Changyoung
鉄系高温超伝導体薄膜の低エネルギー高分解能 ARPES	東北大学大学院理学研究科	佐藤 宇史
有機無機ペロブスカイト太陽電池材料 CH ₃ NH ₃ PbI ₃ 単結晶清浄表面の価電子バンド構造の精密分析	東京理科大学理工学部	中山 泰生
ARPES による2次元系遷移金属カルコゲナイド強磁性体・超伝導体の研究	東京大学大学院理学系研究科	藤森 淳

高分解能角度分解高電子分光による磁性絶縁体／トポロジカル絶縁体ヘテロ接合・超格子の電子状態研究	東京工業大学理学院物理学系	平原 徹
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 IV	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 ARPES による鉄系超伝導体 $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ の電子構造の研究	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半導体における 1 次元 - 2 次元金属相転移に伴う電子状態変化の系統研究	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤 孝寛
擬一次元系 $Ca_{1-x}Y_xV_2O_4$ の角度分解光電子分光	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法による $Sr_{0.92}Ca_{0.08}Fe_2(As_{1-x}P_x)_2$ の超伝導ギャップノードの P 濃度依存性	大阪大学大学院理学研究科	田島 節子
スクッテルライト中間層を持つ鉄系超伝導体の角度分解光電子分光	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
特異な 1 次元電子構造を示す半導体表面 Bi 薄膜における格子変調 II	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪 嘉之
ARPES Study on the Origin of the Magnetoresistance Suppression in Mo Doped WTe_2	Seoul National University	KIM, Changyoung
シンチレーション光の特性制御に関する研究	山形大学理学部	大西 彰正
$Ba_xSr_{1-x}F_2$ 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
Study of Band Structure of Organometal Halide Perovskite Single Crystal	奈良先端科学技術大学院大学	鄭 敏喆
軟 X 線吸収分光による高分子系樹脂材料の表面・バルク化学状態の同時測定	理化学研究所放射光科学総合研究センター	山根 宏之
希ガス蛍光のゼーマン量子ビート	九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫

(6) 施設利用

① 装置開発室

(通年)

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

分子内および分子間電子移動と化学反応機構の研究	神奈川大学理学部	田仲 二郎
第一原理計算を用いた分極率計算法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	北海道大学触媒科学研究所	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, 溶媒と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
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による機能性分子の理論的研究	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
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
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
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
特定混合比で発現する特異物性を利用した新材料創成のための第一原理分子シミュレーションと機械学習の連携	お茶の水女子大学基幹研究院	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
理論電子および振動スペクトルによるヒドロキシベンゼン類溶媒和クラスターの励起状態プロトン／水素移動反応サイズ依存性に関する研究	東京工業大学科学技術創成研究院	宮崎 充彦
低分子非晶質有機半導体の分子間相互作用と二量体構造の計算	山形大学大学院有機材料システム研究科	横山 大輔
量子化学計算による生体高分子と活性酸素種との反応解析	近畿大学理工学部	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
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
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
立体選択的反応における溶媒効果と反応機構に関する理論研究	高知大学大学院総合人間自然科学研究科	金野 大助

自由エネルギー計算によるペプチド-脂質膜の相互作用解析	理化学研究所生命システム研究センター	齋藤 大明
セルロース結晶および関連タンパク質の溶媒和ダイナミクス挙動	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
高温電解質水溶液中の水和のダイナミクス解析	徳島大学大学院理工学研究部	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
ミオシン VI の機能メカニズムにおけるブラウン運動の役割と構造不均一性の研究	名古屋大学大学院工学研究科	寺田 智樹
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
タンパク質と分子集合体の分子機能の理論計算	京都大学大学院理学研究科	林 重彦
水、氷、クラスレート/ハイドレートの構造相転移の理論研究	岡山大学異分野基礎科学研究所	田中 秀樹
量子分子科学計算ソフトウェア NTChem によるナノサイズ分子の分子機能の解明・設計	理化学研究所計算科学研究機構	中嶋 隆人
生体分子のマルチコピー・マルチスケールシミュレーション	横浜市立大学大学院生命医科学研究科	森次 圭
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
免疫系における抗体-糖鎖リガンド間相互作用の理論的研究	北里大学一般教育部	江川 徹
担持 Au ナノ粒子触媒の CO 酸化反応およびシンナムアルデヒド水素化反応活性に関する理論的研究	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
XFEL による内殻イオン化と超高速電子・エネルギー移動の動力学理論	東北大学大学院理学研究科	河野 裕彦
分子軌道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
分子動力学計算による水溶液中タンパク質の構造/揺らぎの研究	東京大学先端科学技術研究センター	山下 雄史
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
遷移金属化合物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 2	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部	中井 浩巳
液晶分子の熱伝導率の分子動力学シミュレーションによる予測	東京工業大学物質理工学院	川内 進
タンパク質間相互作用の粗視化モデルのための分子動力学シミュレーション	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
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
重原子を含む化合物の基底・励起電子状態と分子物性に関する量子化学計算	首都大学東京大学院理工学研究科	波田 雅彦
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、反応性および衝突断面積の計算	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	リントウオト 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	京都大学大学院理学研究科	中野 義明
高濃度コロイド系の降伏・ジャミング現象	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
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
刺激応答性高分子 PNIPAM と共貧溶媒効果の解明	岡山大学異分野基礎科学研究所	望月 建爾
電位依存型プロトン透過性膜タンパク質 VSOP の機能解明	近畿大学先端技術総合研究所	米澤 康滋
軌道相互作用に基づいたゼオライトにおける Si-(OH)-Al 基の局所構造が脱プロトン化エネルギーへ及ぼす影響の解明	東京工業大学物質理工学院	馬場 俊秀
固体における 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	筑波大学計算科学研究センター	重田 育照
両親媒性分子集合体の相互作用に関する分子動力学計算による研究	名古屋大学大学院工学研究科	吉井 範行
固体高分子中の水構造、ダイナミクスの理論研究	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	苮口 友隆
振電相互作用に関する理論的研究	京都大学大学院工学研究科	佐藤 徹
金属電極から有機分子半導体中への金属原子の拡散侵入過程の研究	千葉大学大学院理学研究科	中山 隆史
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・グラフェンナノリボン類の構造・機能解明研究	名古屋大学大学院理学研究科	伊藤 英人
Physical and Chemical Properties of TiO_2 Nanoparticles	東京工業大学理学院	Juhasz Gergely
機能性有機金属分子素子の開発と電子構造解明	東京工業大学科学技術創成研究院	田中 裕也

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
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
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
タンパク質の動きが周辺分子の物性に与える影響に関する理論的研究	筑波大学大学院数理物質系	松井 亨
CRISPR システムのシミュレーション	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高分子の分子動力学シミュレーション	名古屋大学大学院理学研究科	永井 哲郎
新規 π 電子系の合成を基軸とした超分子集合体の創製	立命館大学生命科学部	前田 大光
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
多座配位子で構造規制された遷移金属クラスターの電子状態	奈良女子大学大学院自然科学系	浦 康之
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	長浜バイオ大学バイオサイエンス学部	中村 卓
量子化学計算による光合成水分解反応の分子機構解析	名古屋大学大学院理学研究科	野口 巧
凝縮系における化学反応および物性の分子論的機構解明	琉球大学理学部	東 雅大
複雑で多様な分子構造と電子状態および化学反応に関する研究	京都大学実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点ユニット	福田 良一
近赤外光を吸収するフタロシアニン類縁体の合成と光物性	東京大学生産技術研究所	村田 慧
第一原理計算を利用した新規薬物の合理的設計開発	立教大学理学部	常盤 広明
分子性液体中に溶存する球状分子の Stokes-Einstein の関係とその境界条件	新潟大学理学部	大鳥 範和
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
クロコニン酸結晶における巨視的光誘起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
場の量子論に基づく局所物理量による量子物性の研究	京都大学大学院工学研究科	瀬波 大土
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
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
新規イメージング法を用いた分子間相互作用ダイナミクスの研究	東京工業大学理学院	水瀬 賢太
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
超球面探索法を用いた分子構造、結晶構造の探索	和歌山大学システム工学部	山門 英雄
化学反応および分子特性に関する理論研究	神奈川大学理学部	松原 世明
量子化学と統計力学に基づく複雑化学系の理論的研究	京都大学大学院工学研究科	佐藤 啓文
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
シッフ塩基金属錯体の構造最適化と双極子モーメントの算出	東京理科大学理学部	秋津 貴城
OZ 理論から求まる二原子分子の溶媒和自由エネルギーの補正に関する研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮田 竜彦
三次元環状構造に埋め込まれた π 共役系の物性評価	北里大学理学部	長谷川真士
燃料電池界面の分子シミュレーション	産業技術総合研究所	崔 隆基
シアノスチルベン誘導体の凝集誘起発光についての理論的研究	千葉工業大学工学部	山本 典史
溶媒環境が DNA 内の相互作用や構造の安定性に与える影響	甲南大学先端生命工学研究所	杉本 直己
水溶液中で生成する π スタッキング自己組織化集合体の構造ゆらぎ制御	北海道大学大学院工学研究科	佐藤信一郎
化学反応の ab initio 計算による研究	愛媛大学大学院理工学研究科	長岡 伸一
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
金属クラスター複合体上での化学反応の解明	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	名古屋文理大学情報メディア学部	本多 一彦
液体・生体分子および関連分子系の構造・ダイナミクス・分子間相互作用と振動スペクトル	静岡大学教育学部	鳥居 肇
アルブミンによる不斉ニトロアルドール反応	明星大学理工学部	松本 一嗣
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
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
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
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	量子科学技術研究開発機構	黒崎 譲
生体分子および溶媒の構造機能相関の解明	立命館大学生命科学部	高橋 卓也
理論計算による触媒機能の解明	星薬科大学薬学部	坂田 健
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	湖上壮太郎
4 族金属錯体を用いたエチレン-プロピレン共重合における触媒構造とモノマー選択性との関係の解明	広島大学大学院工学研究科	田中 亮
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
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

修飾核酸の分子動力学計算のための基盤構築	東京大学大学院新領域創成科学研究科	桜庭 俊
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
ナノ秒時間分解近赤外共鳴ラマン分光と時間依存密度汎関数法によるフラレン C ₆₀ とその類似分子の励起状態の構造の決定	青山学院大学理工学部	坂本 章
一級ベンジリックアミン配位子を有するイリジウム水素移動還元触媒による芳香族フッ素化合物の水素化脱フッ素化反応	東京工業大学物質理工学院	松並明日香
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
化学結合の開裂エネルギーに着目したタンデム質量分析系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
アト秒分子内電荷マイグレーション過程の解明へ向けた高励起電子状態計算	理化学研究所光量子工学研究領域	沖野 友哉
計算科学による新規ヘム結合蛋白質の de novo 設計	東京大学大学院農学生命科学研究科	森脇 由隆
ピリジニルケトン配位子を有する鉄錯体の酸化還元特性	北里大学理学部	神谷 昌宏
ピロリ菌の [NiFe] 型ヒドロゲナーゼの分子動力学計算	岡山大学大学院環境生命科学研究科	田村 隆
セルロース結晶 (I,II) 構造相転移についての大規模量子化学計算による検討: 6 位ヒドロキシメチル基コンフォメーションと水素結合ネットワークの影響	北海道大学大学院工学研究院	恵良田知樹
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
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光電子過程と触媒反応に関する研究	分子科学研究所	江原 正博
アミロイド線維の分子シミュレーションと新しい拡張アンサンブル分子動力学法の開発	分子科学研究所	奥村 久士
ピンサー型錯体を用いた触媒反応の反応機構解析	分子科学研究所	浜坂 剛
分子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
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
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
カリウムチャンネルにおけるイオン透過と選択性発現機構の関心の解明	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明	生理学研究所	福永 雅喜
機能性パイ電子系物質の電子物性	京都大学大学院工学研究科	関 修平
高反応性含 13 族元素化合物の性質の解明	名古屋大学大学院工学研究科	山下 誠
心臓生理機能の多階層的な統合的理解のための分子シミュレーション	東邦大学医学部	村上 慎吾
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科学研究科	太田 雄大
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状態評価	関西学院大学理工学部	田中 大輔
錯体構造の理解を通じた抗金属錯体抗体の分子認識メカニズムの解明	医薬基盤・健康・栄養研究所創薬デザイン研究センター	秋葉 宏樹
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
分光法と分子動力学計算/量子化学計算を用いた生体関連分子の動的構造解析	佐賀大学大学院工学系研究科	海野 雅司
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
DNA と金属錯体との相互作用	中央大学理工学部	千喜良 誠
キラルな八面体型金属錯体の VCD 解析	北里大学理学部	吉田 純
理論化学的手法の天文、素粒子物理および応用物理分野における原子・分子反応素過程への応用	東洋大学理工学部	田代 基慶
プロペラ型有機色素のらせん型自己集合によるキラル発光特性発現の理論的検討	立教大学理学部	三井 正明
非対称ジゲルメンによる小分子活性化	学習院大学理学部	猪股 航也
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
タンパク質の協同的な折れたたみとループのつながり方の関係	三重大学総合情報処理センター	白井 伸宙
カリックス [4] アレーンの金属イオン錯体の配座異性体と異性化反応経路の探索	広島大学大学院理学研究科	井口 佳哉
振動スペクトルを用いたタンパク質の新規構造解析法の開発	東北大学大学院薬学研究科	中林 孝和
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
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 浄
アラインなどの歪み分子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
原子核自身の量子揺らぎを考慮した多成分系理論の開発と化学反応解析への応用	岐阜大学工学部	宇田川太郎
海洋天然物アプリアトキシン単純化アナログの配座解析	香川大学農学部	柳田 亮
有機ケイ素化合物の構造と性質	群馬大学大学院理工学部	久新莊一郎
単一分子有機化学の研究	大阪大学大学院理学研究科	小川 琢治
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
NMR 計測と分子動力学計算を活用した特殊構造を持つ糖鎖の動的構造解析	分子科学研究所	谷中 冴子

不斉遷移金属触媒反応の反応機構解析	分子科学研究所	大迫 隆男
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
逆交換交差過程における有機分子の立体構造と励起エネルギーの関係	産業技術総合研究所	細貝 拓也
振動円二色性分光法の超分子キラリティへの応用	愛媛大学大学院理工学研究科	佐藤 久子
分子間水素結合相互作用を用いた遷移金属錯体の配位構造制御	関西学院大学理工学部	三橋 了爾
Optimizing Proton Exchange Membrane Fuel Cells by Providing Insights into the Materials of its Membrane Electrode Assembly	九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所	Kulbir Kaur Ghuman
生体系における動的分子過程の分子動力学シミュレーション解析	量子科学技術研究開発機構	米谷 佳晃
低原子価ホウ素配位子を有する錯体を用いた小分子活性化	東北大学大学院理学研究科	渡邊 孝仁
湾曲複素環分子の理論研究	慶應義塾大学薬学部	東林 修平
量子化学計算による有機半導体の分子軌道計算とその合理的合成法の探索	相模中央化学研究所	已上幸一郎
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
高反応活性遷移金属錯体の構造と反応に関する理論計算	東京工業大学理学院	石田 豊
発光性金 (I) 錯体の励起状態の研究	日本工業大学工学部	大澤 正久
生体内アミノ酸残基のラセミ化反応における隣接残基の影響に関する計算科学的研究	金沢大学医薬保健研究域	福吉 修一
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
擬一次元有機分子の協同的な電荷移動に関する理論的研究	山形大学理学部	安東 秀峰
CNT 合成に用いられる 2 元遷移金属触媒クラスターの反応性解析	東京大学大学院工学系研究科	丸山 茂夫
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
気相クラスターにおける微視的水和構造の異性化経路の探索	北里大学理学部	石川 春樹
シリコン基板上的有機分子吸着構造と電子状態の解析	横浜国立大学理工学部	大野 真也
量子化学計算を用いた高分子電解質でのイオンと高分子の電子状態に関する研究	近畿大学理工学部	森澤 勇介
生体分子の原子核の量子揺らぎを考慮した分子シミュレーション	理化学研究所計算科学研究機構	川島 雪生
機能性材料における物質輸送及びイオン伝導性の考察	東邦大学医学部	岡 真悠子
地球外における生物物質の化学進化	アストロバイオロジーセンター	小松 勇
量子ダイナミクスによる動的物性量の理論的研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	中野 雅由
π 共役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
有機半導体蒸着膜の自発的配向分極現象の解明	明治大学理工学部	野口 裕
有機分子の光励起状態における構造変化の研究	北海道大学大学院理学研究院	小門 憲太
自動反応経路探索を用いる化学反応の機構解明	奈良先端科学技術大学院大学研究推進機構	畑中 美穂
ペプチドナノリングにおける重金属イオン捕捉能の第一原理電子論	早稲田大学先進理工学部	武田京三郎
食品の化学反応の解析	戸板女子短期大学	大塚 讓
密度汎関数理論を用いた酸化チタン表面の欠陥に関する研究	慶應義塾大学理工学部	泰岡 顕治
シミュレーションによるガラスの熱物性とガラス転移の性質に関する研究	東京大学大学院総合文化研究科	池田 昌司
核融合炉ブランケットシステムに向けた新型溶融塩開発のための分子動力学シミュレーションによる熱物性評価	東北大学大学院工学研究科	宍戸 博紀
HIV TAT タンパク質とアミロイドペプチドの結合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
歪んだ多環芳香族化合物の構造と性質	東邦大学理学部	渡邊総一郎
計算化学を利用した有機化学反応機構の解析	乙卯研究所	黒内 寛明
高分子鎖の機械的伸長と破断の研究	北海道大学大学院生命科学院	松田 昂大
機能性分子の電子状態計算	室蘭工業大学工学研究科	飯森 俊文
高配位有機典型元素化合物の構造と性質の解明	東京大学大学院理学系研究科	狩野 直和
可逆な反応による分子複合体形成に基づく新規材料開発	東京工業高等専門学校	井手 智仁
新規機能性 π 共役分子の合成と物性に関する研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	清水 章弘
(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	岡山大学異分野基礎科学研究所	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
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
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
ナノ・バイオ分子の光化学反応イメージング理論	東北大学金属材料研究所	山崎 馨
常温溶融塩およびその混合液体における潤滑・導電特性向上に向けた計算材料科学的研究	東北大学金属材料研究所	芝 隼人

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～'10		'11		'12		'13		'14		'15		'16		'17		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	1	13	1	21	2	27	1	11	2	32	2	30	1	8	人数： 登録人数
協力研究	4,066	6,174	108	292	123	329	64	183	64	206	62	205	82	246	73	229	〃
招へい 協力研究	195	197	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	〃
所長 招へい	4,450	4,450	78	78	93	93	156	156	103	103	128	128	80	80	83	83	人数： 旅費支給者
研究会	335	5,681	4	105	10	207	10	254	6	162	11	195	7	151	9	167	〃
若手研究会 等	3	36	1	11	1	19	1	21	2	38	1	16	1	14	2	41	〃
岡崎コンファ レンス	-	-	-	-	1	29	1	18	1	34	1	21	3	115	0	0	〃
施設利用 I	2,053	4,695	98	266	60	254	41	105	44	191	20	52	2	6	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)	5,077	17,131	190	668	190	813	204	786	199	751	235	844	221	813	221	827	〃
協力研究 (ナノプラット)	500	1,094	25	64	15	51	52	123	63	147	64	174	75	144	63	153	〃
施設利用 (ナノプラット)	276	711	20	35	52	150	132	378	174	453	197	618	196	493	191	585	〃
合計	17,063	41,076	525	1,532	546	1,966	663	2,051	657	2,096	721	2,285	669	2,092	645	2,099	

*施設利用IIは'00より電子計算機施設利用

('17年度の数值は、2017.12.31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 ~ '10		'11		'12		'13		'14		'15		'16		'17		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	4	4	6	6	1	1	1	1	1	1	3	3	2	2	人数： 旅費支給者
研究会	44	758	2	68	4	63	1	37	1	37	1	30	1	41	1	43	〃
施設利用	3,118	15,136	139	682	136	706	142	732	125	649	119	732	142	762	158	855	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	3,599	17,513	145	754	146	775	144	770	127	687	121	763	146	806	161	900	

('17 年度の数値は、2017.12.31 現在)