

3. 共同研究と大学院教育

大学共同利用機関としての分子科学研究所は、所外の分子科学及び関連分野の研究者との共同研究を積極的に推進しており、全国の研究者からの共同研究の提案を運営会議で審議し、採択された共同研究に対しては旅費及び研究費の一部を支給している。また、海外の研究者との共同研究に対しては、研究者の派遣及び相手国研究者招へいのために国際共同研究事業を行っている。特に、東アジア地域での分子科学の急速な発展に対応して、平成18年度から22年度において、日本学術振興会の支援により分子科学研究所が中心となり、アジアでの分子科学の協力研究体制の拠点ネットワークを作る目的で日本、韓国、中国、台湾の研究者が一堂に会するアジア研究教育拠点事業（Asian CORE プログラム）を行い、新領域創出による共同研究の萌芽を見いだす機会を設けた。平成23年度からは、このような取組をアジア地区に限定することなく、より国際的に発展・拡充するため、分子科学国際共同研究拠点形成事業を開始した。また、分子科学研究所は21世紀東アジア青少年大交流計画（JENESYS; Japan-East Asia Network of Exchange for Students and Youths）に積極的に参画し、毎年、ASEAN 諸国の拠点大学及び公募で選考された若手研究者と大学院学生を招へいし、人材の育成に努めてきた。また、平成23年度からは、post-JENESYS プログラムとして EXODASS（EXchange program for the Development of Asian Scientific Society）プログラムを立ち上げ、アジア地区の若手研究者に、分子科学研究所に2週間～3ヶ月間滞在し、研究を行う機会を提供することにより、アジア地区における基礎研究の発展と研究ネットワーク構築に寄与した。平成26年度からは、分子研全体の国際インターンシッププログラム（IMS-IIP）に組み込む形でアジア版 IMS-IIPA と名前を変え、事業を継続している。EXODASS から IMS-IIP に変わるにあたり、滞在期間を3ヶ月以内から6ヶ月以内に延長する（若手教員は1～2ヶ月）、募集を原則として MOU 提携校に限る（MOU 提携校以外からも受入れは可能であるが、わざわざ宣伝はしていない）など、分子研独自のインターンシップ制度として、より戦略的な運用を図っている。

分子科学研究所は、また大学共同利用機関を基盤機関とする総合研究大学院大学・物理科学研究科に属し、構造分子科学専攻と機能分子科学専攻の二つの大学院専攻を持ち、他の大学院では整備されていない各種の高度な大型の研究施設・実験設備を活用して特色のある大学院教育を行っている。総合研究大学院大学としての分子科学研究所の2専攻では、分子科学における最先端の基礎研究を行うとともに、学生の研究課題に応じて、複数指導体制を採用し、研究活動に密着した学生セミナー、国際シンポジウム、共同研究等を通して若手研究者育成のための大学院教育を行っている。さらに、他大学の大学院生や学部学生に対しても、それぞれ受託大学院生（特別共同利用研究員制度による）、体験入学者として受け入れ、先端的な研究施設を用いて積極的な教育研究活動を行っている。総合研究大学院大学への入学資格は、修士の学位をもつ方、大学を卒業して企業等で研究に従事し、修士の学位と同等と認められる方を対象とした博士後期課程に加えて、平成18年度より学部卒を対象とした5年一貫制博士課程を導入している。

3-1 研究領域

理論・計算分子科学研究領域

- 研究目的 量子力学，統計力学などに基づく分子及びその集合体，生体分子やナノ物質などの多体化学系の構造，反応，物性，機能に関する理論・計算分子科学研究による解明

理論分子科学第一研究部門

- 研究目的 多体分子系の反応ダイナミクス，物性，機能の解明のための方法論の開発とそれに基づく理論・計算科学的研究
- 研究課題 1, 凝縮系における反応，物性，機能発現の解明
2, ナノ構造体の光応答理論開発と光・電子機能物質の理論設計

理論分子科学第二研究部門

- 研究目的 主として量子力学・統計力学に立脚した凝縮相分子系における動的現象および機能発現の理論計算研究
- 研究課題 1, 凝縮相化学過程の量子ダイナミクス理論

計算分子科学研究部門

- 研究目的 機能性分子や不均一系触媒，さらに生体分子などの電子状態や構造の解明のための方法論の開発とそれに基づく理論・計算科学的研究
- 研究課題 1, 電子状態理論の開発と光物性科学・不均一系触媒への応用
2, 分子動力学シミュレーションにおける新しい手法の開発と生体系への応用

理論・計算分子科学研究部門（若手独立フェロー）

- 研究目的 1, 分子集合体の光電子物性とダイナミクスに関する理論・計算科学的研究
2, 生体分子マシンの機能ダイナミクスの理論・計算手法による解明と，そのデザイン原理の探求
- 研究課題 1, 有機半導体の励起子ダイナミクスの解析
2, 機能性 π 共役系の光電子物性の解析
3, 生体分子マシンの機能ダイナミクスの全原子・粗視化 MD 計算による解析
4, 一分子実験・MD 計算データの統計力学的モデリング

理論・計算分子科学研究部門（客員）

- 研究目的 1, 開殻性を持つ分子および分子集合系の光物性の理論的解明と物質設計
2, 不均一系触媒に関する理論・計算科学的研究
3, 分子集合系の遅いダイナミクスに関する理論・計算科学研究
- 研究課題 1, 新奇な縮環炭化水素の開殻性と三次非線形光学物性の理論解析と物質設計
2, 量子マスター方程式法による分子集合系のシングレットフィッシュンの機構解明と物質設計
3, 固体酸化物／液相界面における不均一系触媒反応の理論解析
4, 粘性，拡散，エネルギー輸送を支配する構造変化メカニズムの解析

光分子科学研究領域

- 研究目的 物質に光を照射すると、様々な興味深い性質を現したり、化学反応をおこす。様々な物質の構造や性質を光で調べることで、物性や反応を光で制御すること、及びそれに必要となる高度な光源開発を目的として研究を行う

光分子科学第一研究部門

- 研究目的 主としてレーザー光源を用いた先端的分光法、顕微鏡法等を用いて、分子とその集合体の高精度・高精細な構造を明らかにすると同時に、新たな光機能の開拓や物質特性の光制御を目指した研究を行う
- 研究課題 1, 極めて高い空間分解能を持つ先端的分光法による、分子集団の励起ダイナミクス、微粒子系における励起状態と増強電場の研究

光分子科学第二研究部門

- 研究目的 物質の量子論的な性質を、デザインされた光電場で詳細に観察し制御するための新しい方法論と、それを支える高度な光源の開発を目指した研究を行う
- 研究課題 1, 高度にデザインされたレーザー場を用いて、原子・分子及びその集合体の量子ダイナミクスを精密に観測・制御するための研究

光分子科学第三研究部門

- 研究目的 真空紫外光や軟X線を用いた新奇な励起分子ダイナミクスの開拓と、それに関する動的プロセスの解明及び制御を目指した研究を行う
- 研究課題 1, 真空紫外光・軟X線分光による分子及び分子集合体の物性研究
2, レーザー光及び放射光を用いた光化学反応の研究

光分子科学第四研究部門（客員）

- 研究目的 原子や比較的簡単な分子から、それらの集合体、固体表面に吸着した原子・分子やナノ構造体、さらに生体分子までを広く対象とし、高度な周波数・時間・空間分解分光法、極端紫外光や特殊波長レーザー等を用いた光学測定等によりそれらの性質を明らかにする
- 研究課題 1, 局所分光法による有機薄膜電子状態の次元依存性に関する研究
2, 空間構造を持つ放射光の発生と利用法の開拓

光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

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

電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的 シンクロトロン光源の高性能化のための電子ビーム・光ビーム制御技術の開発研究を行う

- 研究課題 1, 電子ビーム計測・制御技術に関する開発研究
2, 光ビーム計測・制御技術に関する開発研究

光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的 固体の新奇物性に関わる電子状態を放射光赤外・テラヘルツ分光及び高分解能三次元角度分解光電子分光により明らかにする

- 研究課題 1, 放射光を用いた固体分光用の観測システムの開発
2, 固体物質の局在から遍歴に至る電子状態の分光研究

光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的 放射光軟X線を利用した新しい分子分光法の開発研究を行う

- 研究課題 1, 放射光を用いた光化学実験用の観測システムの開発

物質分子科学研究領域

研究目的 分子及びその集合体を示す新たな現象や有用な機能の発見を目指し、新規分子・物質の開発やそれらの高次集積化と、電子・光物性、反応性、触媒能、エネルギー変換などの研究を行う。また、分子・分子集合体・生体分子等の物性・機能の起源を解明するため、主として分光法に基づいた新たな観測技術開発に努める

電子構造研究部門

研究目的 分子・物質材料の物理的・化学的新機能と機構解明

- 研究課題 1, 物質科学・表面科学のための新しい分光学的計測手法の開発
2, 固体表面上の分子集合体の特異的な構造物性・化学機能・量子ダイナミクスの探求

電子物性研究部門

研究目的 分子集合体・生体分子の物性と機能

- 研究課題 1, 開殻系分子集合体や生体分子の磁気共鳴研究

分子機能研究部門

研究目的 物質変換・エネルギー変換のためのデバイス創製、生体分子の構造と機能

- 研究課題 1, 有機薄膜太陽電池
2, 固体 NMR を用いた生体分子・分子材料の構造・物性解析
3, 次世代電気化学デバイスの創出に向けた新物質探索

物質分子科学研究部門（客員）

研究目的 物質分子科学のコミュニティ交流を通じた新しい先端的研究分野の開拓

研究課題 1, 有機系熱電材料とフレキシブル熱電変換デバイス
2, ディラック電子系有機導体をチャネルとした FET 製作と量子輸送

生命・錯体分子科学研究領域

研究目的 生体系が示す多種多彩な機能の発現が、どのような機構で行われているか分子レベルで解明するための研究を行う。また、生体分子を利用した新たな分子デバイスの開発も行う。中心金属と配位子の組み合わせで金属錯体は多彩な機能を発現する。新しい錯体合成法を開発することで新たな結合構造を持つ金属錯体を創製し、その機能を開拓する。また、金属錯体の特性を生かしてエネルギー・環境問題軽減のための高効率有機化合物変換反応、水中での有機化合物の分子変換、無機小分子の変換と機構解明を行う。さらに、人工細胞を創成して生物の挙動を再現することを目指した研究を展開する。

生体分子機能研究部門

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

研究課題 1, 新規な機能を有する金属タンパク質の構造機能相関解明
2, 複合糖質およびタンパク質の構造・ダイナミクス・相互作用に関する研究
3, 生体分子モーターのエネルギー変換機構の解明、新規設計と実証
4, 合成両親媒性分子を用いたベシクル型人工細胞の構築と解析

生体分子情報研究部門

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

研究課題 1, 溶液散乱と結晶構造解析を相補的に駆使した動的構造解析
2, 各種分光法と表面増強効果あるいは顕微計測技術を組み合わせた新規計測法の開発
3, 赤外差分分光計測による膜タンパク質の構造機能相関解明
4, イオンチャネル及び G タンパク質共役型受容体の機能的発現と分子機構解析

錯体触媒研究部門

研究目的 分子間の共同作用的相互作用に立脚した化学反応の駆動、化学反応システムの構築

研究課題 1, 水素結合・疎水性相互作用・静電的相互作用といった非共有結合性相互作用による有機分子変換触媒システム構築
2, 分子集合挙動に基づく超分子触媒、高次構造触媒の設計と創製

錯体物性研究部門

研究目的 機能性金属錯体の設計と合成，金属錯体を反応場とする有機分子や無機分子の高効率変換

- 研究課題
- 1, 機能性金属錯体の合成と構造解明
 - 2, 金属錯体を用いた小分子の高効率変換反応の開発
 - 3, エネルギーの高効率利用を指向した金属触媒反応の開発

生命・錯体分子科学研究部門（客員）

- 研究目的
- 1, バックキーボウル，フラーレン，金属ナノクラスター触媒の化学の確立
 - 2, 自己組織化に基づく“分子システム化学”の創成
 - 3, 高速原子間顕微鏡の開発と生体超分子複合体1分子計測への適用

- 研究課題
- 1, 新規バックキーボウルの合成と物性評価，フラーレンの電子受容能を用いた新規反応の開発
 - 2, 配位高分子を用いたイオン伝導体，プロトン伝導体の創成
 - 3, タンパク質分子モーター，タンパク質分子マシンの構造ダイナミクスの解明

協奏分子システム研究センター

- 研究目的
- 分子を軸足に「個」と「集団」を結ぶロジックを確立し，その原理をもとに斬新な分子システムを創成する

階層分子システム解析研究部門

- 研究目的
- 個々の分子の動態が分子間相互作用や複雑な制御ネットワークを介して多重の階層を貫き，分子システムとしての卓越した機能へ繋がっていく仕組みの解明

- 研究課題
- 1, 生物時計タンパク質が24時間周期のリズムを奏でる仕組みの解明
 - 2, タンパク質分子構造および機能の合理デザイン
 - 3, 生体分子系における反応および階層的構造変化の解明
 - 4, 赤外分光法を基軸とした協奏分子システムの動的構造変化の解析

機能分子システム創成研究部門

- 研究目的
- 機能性新分子の合成と，その複合化による創発的分子ナノデバイスの創成

- 研究課題
- 1, 機能性分子の多重集積化による新規機能性分子デバイス
 - 2, ナノスケール曲面を有するグラフェン半導体分子
 - 3, 金属錯体を触媒とする酸素発生・光水素発生・二酸化炭素還元とその反応場形成
 - 4, 酸水素化物を基本とした新規機能性材料の探索
 - 5, 電極／電解質界面の制御によるリチウム二次電池の高性能化

生体分子システム研究部門

- 研究目的
- 生物が示す多彩な生命現象の分子レベルでの解明

- 研究課題
- 1, 新規な機能を有する金属タンパク質の構造と機能
 - 2, 超高磁場 NMR を機軸とする生命分子のダイナミクスの探究
 - 3, タンパク質分子が相互作用する際の認識, 情報伝達, 機能制御及びそのための実験・理論的手法の開発
 - 4, 生体分子モーターのエネルギー変換機構の解明

メゾスコピック計測研究センター

- 研究目的
- 分子が集まって機能するシステムにおいて特性発現に役割を担う, ミクロとマクロを繋ぐ階層間の情報・物質・エネルギーのやりとりの現場を, できる限りありのままの姿で捉え, 新しい分子の能力を引き出すための極限的計測法の開発とその利用研究を行う

物質量子計測研究部門

- 研究目的
- 精密な光観測・制御法を先鋭化し, 新しい量子相を作り出して制御し, 量子情報処理など新規な分子の能力を引き出す
- 研究課題
- 1, 振幅と位相をデザインしたレーザー場による超精密コヒーレント制御法の開発
 - 2, ナノ構造体の光応答理論開発と多階層系の特性解析, 光・電子機能物質の理論設計
 - 3, 固体表面における分子集合体の特異的量子ダイナミクスの探究

組織計測研究部門

- 研究目的
- 低摂動で繊細な分子計測法等, 分子のありのままの姿を非破壊的に観測する計測手法を開発し, 分子物質の機能を解明
- 研究課題
- 1, ナノ領域顕微分光法による原子・分子集合体の微細光学解析
 - 2, 極限的計測法のための新レーザー光源, 高機能非線形波長変換など, マイクロ固体フォトリソの研究

広帯域相関計測解析研究部門

- 研究目的
- 多変数計測解析手法, 高分解能広帯域計測法とその解析法を開発し, 分子の能力とそれを司る物理過程の解析を展開
- 研究課題
- 1, 生体分子モーターのエネルギー変換機構解明のための新計測法開発
 - 2, サブサイクル超短光パルス発生装置, 光パルス評価法, 超高速分光装置の開発

特別研究部門

- 研究目的
- 分子科学分野において最先端の科学を切り拓く世界的研究者を「卓越教授」として招聘し, 研究に専念できる環境を提供する。分子科学分野のトップレベル研究を支援する。

3-2 研究施設

極端紫外光研究施設

- 目 的 極端紫外光研究施設は、全国共同利用施設として UVSOR-III 光源加速器（電子蓄積リング）からのシンクロトン光を国内の大学等の研究者に安定に供給して極端紫外光物性・光化学の共同利用研究を支援するとともに、極端紫外光源の高輝度化、加速器を利用した新しい光源に関する研究や新たな放射光分子科学の開拓的研究を国内外の研究者と共同して推進する。

機器センター

- 目 的 機器センターは、新規物質開発を行う上で基盤設備となる汎用物性測定装置、汎用化学分析装置、及び汎用分光計測装置を集中管理し、さらに、先端機器の開発と冷媒の供給管理も担当することにより、研究所内外の共同利用に資することを目的として設立された。共同利用としては協力研究を通して利用する形態と施設利用の二種類がある。また、大学連携研究設備ネットワークの幹事機関を担い、さらには、文部科学省受託研究ナノテクノロジープラットフォーム分子・物質合成の代表機関・実施機関として共同利用・民間利用拠点を務めている。

装置開発室

- 目 的 装置開発室は、多様化する材料の精密加工技術及び非機械加工を含むマイクロ・ナノ加工技術の高度化、並びに高密度集積回路の設計・製作・評価技術を確立し、所内研究あるいは共同利用研究の技術支援を行うほか、デジタルエンジニアリングの導入を進める。また、迅速な研究成果が求められる研究者からの要求に応じて装置の設計・製作を行う。

計算科学研究センター（岡崎共通研究施設）

- 目 的 計算科学研究センターは、全国共同利用施設として、高性能分子シミュレータを国内の大学等の研究者に提供し、個々の研究室の計算機等では不可能な大規模計算等に関する共同利用研究を支援する。さらに、分子科学分野の計算に必要なライブラリの整備を進める。また、ワークショップなどを通して研究交流や人材育成の場を提供する。これらの活動に加え、ポスト「京」重点課題アプリケーション開発 重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」、同重点課題7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」、同萌芽的課題アプリケーション開発（萌芽的課題 基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求）、科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業「計算物質科学人材育成コンソーシアム」、「元素戦略プロジェクト」（研究拠点形成型）の5プロジェクト研究に対し、研究の場・計算機資源を提供する。

生命創成探究センター（自然科学研究機構）

目 的 生命創成探究センター（Exploratory Research Center on Life and Living Systems = ExCELLS）は、自然科学研究機構の更なる機能強化を目指すために、岡崎統合バイオサイエンスセンターを中核として機構の組織を再編・統合して設置された。本センターでは、「生きているとは何か？」という人類の根源的な問いの解明に向けて、生命の仕組みを観察する新たな技術を開発するとともに、蓄積されていく多様な情報の中に隠されている意味を読み解き、さらに合成・構成的アプローチを通じて生命の基本情報の重要性を検証する活動を行っている。こうした「みる・よむ・つくる」のアプローチを基軸に、生命の始原形態や環境適応戦略を理解するために、極限環境生命の研究者とも協力しながら異分野融合型の研究を進め、生命の設計原理を探究する。この目的のもとに、国内外の大学・研究機関の連携によりコミュニティ横断型の共同利用・共同研究を推進する。

3-3 共同利用研究

3-3-1 共同利用研究の概要

大学共同利用機関の重要な機能として、所外の分子科学及び関連分野の研究者との共同利用研究を積極的に推進している。そのために共同利用研究者宿泊施設を用意し、運営会議で採択されたテーマには、旅費及び研究費の一部を支給する。次の8つのカテゴリーに分類して実施している。(公募は前期・後期(年2回)、関係機関に送付)。

- (A) 課題研究：数名の研究者により特定の課題について行う研究で3年間にまたがることも可能。
- (ア)「課題研究(一般)」申請者が設定した研究課題で申請するもの。
- (イ)「課題研究(新分野形成支援)」分子科学に関連した新しい研究分野開拓のための準備研究
- (B) 協力研究：所内の教授又は准教授と協力して行う研究。(原則として1対1による)。
- (平成11年度後期より UVSOR 協力研究は、協力研究に一本化された)
- (C) 研究会：分子科学の研究に関連した特定の課題について、所内外の研究者によって企画される研究討論集会。
- (ア)「分子研研究会(一般分)」国内の研究者が集まるもの。
- (イ)「アジア連携分子研研究会」アジア地区の研究者が数名含まれるもの。
- (ウ)「ミニ国際シンポジウム」欧米など海外の研究者を含めたもの。
- (エ)「学協会連携分子研研究会」分子科学関連学協会が共催するもの。
- (D) 若手研究活動支援：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 2018 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
脂質膜上での人工ドメイン形成技術開発と生体高分子集積への展開	熊本大学大学院先端科学研究部	大谷 亮

(2) 協力研究

課 題 名 (通年)	代 表 者	
有機イオン周囲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	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
磁性液晶の磁気ドメイン構造の円二色性イメージング測定	大阪大学大学院基礎工学研究科	内田 幸明
有機半導体界面のエネルギー準位接続解析～構造物性との相関～	筑波大学数理物質系	櫻井 岳暁
有機分子の電子状態の次元依存性	千葉大学大学院工学研究院	山田 豊和
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 (III)	東京理科大学理工学部	中山 泰生
レーザーコンプトンガンマ線を利用した陽電子消滅寿命解析による結晶中カチオン単原子空孔の可視化	山形大学理学部	北浦 守
ベクトルビームアンジュレータ放射光の詳細研究	量子科学技術研究開発機構量子ビーム科学研究部門	川瀬 啓悟
相対論的電子ビームからの短波長コヒーレント光渦の発生	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	保坂 将人
極低温分光実験と反応経路探索計算による桂皮酸誘導体の光誘起異性化の研究	広島大学大学院理学研究科	江幡 孝之
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	東京工業大学生理理工学院	蒲池 利章
EDEM タンパク質による糖鎖トリミングと小胞体関連分解に関する研究	京都大学ウイルス・再生医科学研究所	細川 暢子

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	信州大学繊維学部	新井 亮一
受動 Q スイッチレーザーを用いたガスパレイクダウン機構に関する研究	大阪大学工学部	赤松 史光

課 題 名 (前期)	代 表 者	
高分子膜中のアゾベンゼン含有錯体への偏光・光渦 UV 照射による波長選択的分子配向誘導	東京理科大学理学部	秋津 貴城
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
磁気ドメイン制御型 Q スイッチのメカニズム解明	豊橋技術科学大学電気・電子情報工学系	後藤 太一
ダイヤモンドスピンセンサーと近接場光ファイバースプロブの結合	北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	安 東秀
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	愛媛大学大学院理工学研究科	太田 英俊
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	名古屋大学大学院理学研究科	内橋 貴之
2 μm 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
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
水中での金属ナノ粒子を触媒とする新規 C-C カップリング反応	大阪工業大学工学部	大高 敦

課 題 名 (後期)	代 表 者	
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	大愛媛大学大学院理工学研究科	太田 英俊
半導体ナノワイヤのソフトマテリアル中への固定化に基づく光電変換機能発現	名城大学理工学部	西山 桂
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
光電気化学反応場のオペランド分光計測	北九州市立大学国際環境工学部	天野 史章
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
ダイヤモンドスピンセンサーと近接場光ファイバースプロブの結合	北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	安 東秀
キラルプラズモンとキラル磁性結晶の結合系の開拓	大阪府立大学大学院工学研究科	戸川 欣彦
分子性触媒を基盤とした高効率な光エネルギー変換系の構築	立教大学理学部	中藺 孝志
高出力赤外光パラメトリック増幅器のための配向パターン化 GaAs 結晶デバイスの開発	中央大学理工学部	庄司 一郎
アルカリ金属ドーピングされた芳香族分子結晶中の電子の非局在性	筑波大学数理物質系	山田 洋一

(3) 研究会

① 【分子研研究会】

化学と情報科学との融合による新化学創成

2018 年 5 月 29 日 (火) ～ 30 日 (水) 岡崎コンファレンスセンター小会議室

5 月 29 日 (火)

13:30-13:40 挨拶 研究会開催趣旨説明
阿尻雅文 教授 (東北大)

1) ビッグデータ薬剤, 医療ビッグデータ解析

13:40-14:05 「創薬研究の最前線」
上村みどり 上席研究員 (帝人ファーマ株式会社)

2) つくる反応ルートを探る

14:05-14:30 「機械学習による触媒反応収率予測」
佐藤一彦 センター長 (産業技術総合研究所)

14:30-14:55 「データ駆動的アプローチによる化学分野への展開」
永田賢二 主任研究員 (産業技術総合研究所)

14:55-15:20 「Chematica のもたらすもの」
松原誠二郎 教授 (京都大学)

3) 構造解析・分析における AI の活用

15:35-16:00 「材料設計・プロセス設計のためのデータ駆動型化学～材料設計・プロセス設計・品質管理と制御の連動～」
船津公人 教授 (東京大学)

4) 化学プロセスにおける AI

16:00-16:25 「AI と化学産業」
山下善之 教授 (東京農工大学)

5) 教育

16:25-16:50 「情報系ではない理工系学科になぜディープラーニングの教育が必要か
——ブチ・マス時代のディープラーニング活用——」
阿久津典子 教授 (大阪電通大学)

17:20-19:00 意見交換会 (会費: 5,000 円程度 (予定))

5 月 30 日 (水)

9:00- 9:25 「知識、モデル、データから新たな知識の創造」
長谷部伸二 教授 (京都大学)

総合討論 阿尻司会

9:25-11:00 パネラー 参加予定者 (敬称略)
上村みどり, 佐藤一彦, 永田賢二, 松原誠二郎, 船津公人, 阿久津典子, 山下善之, 長谷部伸二, 阿尻雅文

② 【分子研研究会】

新たな元素戦略を切り拓く物質科学研究会

2018 年 6 月 1 日 (金) ~ 2 日 (土) 分子科学研究所研究棟 201 号室

6 月 1 日 (金)

16:00 ~ 17:00 「様々な電気化学反応に適用できる新しい触媒材料の開発」
山田幾也 (大阪府大 工学研究科)

17:00 ~ 18:00 「金属-有機構造体を用いたイオン輸送制御」
堀毛悟史 (京大 iCeMS)

18:00 ~ 19:00 自由討論

19:30 ~ 22:00 懇親会・ランプセッション (研究棟ラウンジ)

6 月 2 日 (土)

9:00 ~ 10:00 「最小エネルギー円錐交差 (MECI) で内部変換を視る: 光機能分子の設計」
小西玄一 (東工大 物質理工)

10:00 ~ 11:00 「固体物理と電気化学の交差点: 固体電解質-電極界面研究から見た課題と展望」
一杉太郎 (東工大 物質理工)

11:00 ~ 12:00 「強力磁場を自在にあやつる多結晶超伝導永久磁石」
山本明保 (東京農工大)

12:00 ~ 13:00 自由討論・昼食

③ 【分子研研究会】

光とナノ物質の相互作用——分子科学の未来にむけて

2018 年 6 月 10 日 (日) 岡崎コンファレンスセンター大隅ホール

司会 齊藤真司 (分子科学研究所)

13:30 ~ 13:40 川合真紀 (分子科学研究所)
はじめに・趣旨説明

13:40 ~ 14:10 矢花一浩 (筑波大学)
「電子ダイナミクスの第一原理計算を巡って」

14:10 ~ 14:40 根岸雄一 (東京理科大学)
「精密金属クラスターの構造解析」

14:40 ~ 15:10 八井 崇 (東京大学)
「非一様光場 (近接場光) に基づくデバイス・加工技術の新機軸」

15:10 ~ 15:40 安池智一 (放送大学)
「表面光化学過程と電子ダイナミクスの諸相」

16:10 ~ 16:20 福山秀敏 (東京理科大)
「信定さんからのメッセージ」

司会 谷村吉隆 (京都大学)

16:20 ~ 16:30 岩佐 豪 (北海道大学)
「双極子近似を超えた光と分子の相互作用: 未知の光学現象と光反応と科学の未来」

16:30 ~ 16:40 飯田健二 (分子科学研究所)
「ボスと一緒に研究したナノ物質の光誘起電子ダイナミクス」

16:40 ~ 16:50 岸根順一郎 (放送大学)
「Chiral 磁気プラズモニクスへ向けて」

16:50 – 17:00	秋山 良（九州大学） 「信定克幸：『紀の国』から来た男」
17:00 – 17:10	宮崎州正（名古屋大学） 「1998 年～2018 年の液体・ガラスの非平衡物理学」
17:10 – 17:20	井上克也（広島大学） 「信定さんと『キラル磁性×光学物性研究会』」
17:20 – 17:30	加藤 毅（東京大学） 「分子科学の方向性と展望」
17:30	閉会の辞

- ④ 【分子研研究会】
有機デバイスを用いた量子状態制御の新展開
2018 年 6 月 29 日（金）～ 30 日（土） 分子科学研究所研究棟 201 号室

Jun 29 (Fri)

Session 1:

13:00 – 13:30		Registration	
13:30 – 14:00	oral 1	はじめに	山本 浩史
14:00 – 14:20	oral 2	OLED から有機半導体レーザーへの新展開	安達 千波矢
14:20 – 14:40	oral 3	有機半導体を利用したボラリトン状態の量子コヒーレント制御を目指して	香月 浩之
14:40 – 15:00	oral 4	テラヘルツ・赤外強電場による有機分子性結晶の電子相制御	岡本 博
15:00 – 15:20	oral 5	有機電荷移動錯体におけるシフト電流光電変換	中村 優男

Session 2:

15:35 – 15:55	oral 6	非熱平衡過程を用いた量子状態制御	賀川 史敬
15:55 – 16:15	oral 7	有機材料の表面構造解析	若林 裕助
16:15 – 16:35	oral 8	スピン流研究の広がり：量子スピン液体や核スピンを用いたスピン流生成	塩見 雄毅
16:35 – 16:55	oral 9	螺旋状の原子鎖における電流誘起スピン偏極	明楽 浩史
16:55 – 17:15	oral 10	プローブ顕微鏡による局所物性評価	長谷川 幸雄
17:15 – 18:15		free discussion	
18:30		移動 + 意見交換会（19:00～）	

Jun 30 (Fri)

Session 3:

9:00 – 9:20	oral 11	有機ラジカル分子設計と量子磁気状態	細越 裕子
9:20 – 9:40	oral 12	第一原理による高精度励起スペクトル計算の紹介	野口 良史
9:40 – 10:00	oral 13	有機ディラック電子系における量子現象	田嶋 尚也
10:00 – 10:20	oral 14	有機トランジスタにおけるレーザー発振	下谷 秀和
10:20 – 10:40	oral 15	分極スイッチ機能開拓に向けた分子システムの開発	堀内 佐智雄
10:55 – 12:00		free discussion + Closing	

- ⑤ 【アジア連携分子研研究会】
Frontier Bioorganization Forum 2018
（日韓台生命分子科学セミナー 2018）
2018 年 7 月 8 日（日）～ 11 日（水） 分子科学研究所山手 3 号館大会議室

July 8 (Sun)

11:00 – 13:00 Registration

Session 1 Chair: Shinji Takada

13:00 – 13:10		Opening Remarks Koichi Kato (Director, ExCELLS)	
13:10 – 13:30	O-1	Koichi Kato	ExCELLS, IMS
13:30 – 14:00	O-2	Jooyoung Lee	KIAS
14:00 – 14:30	O-3	Hirofumi Sato	Kyoto University
14:30 – 15:00	O-4	Chin-Lin Guo	Academia Sinica

<i>Session 2</i>	<i>Chair: Makoto Tominaga</i>		
15:30 – 16:00	O-5	Takayuki Uchihashi	Nagoya University
16:00 – 16:30	O-6	Kay-Hooi Khoo	Academia Sinica
16:30 – 17:00	O-7	Shuji Akiyama	IMS
17:00 – 17:30	O-8	Kyoung-Seok Ryu	Korea Basic Science Institute

July 9 (Mon)

<i>Session 3</i>	<i>Chair: Motohiro Nishida</i>		
9:00 – 9:30	O-9	Ming-Daw Tsai	Academia Sinica
9:30 – 10:00	O-10	Hisashi Okumura	ExCELLS, IMS
10:00 – 10:30	O-11	Sun Choi	Ewha Womans University

<i>Session 4</i>	<i>Chair: Chien-Chih Yang</i>		
11:00 – 11:30	O-12	Nobuyasu Koga	ExCELLS, IMS
11:30 – 12:00	O-13	Hyungsik Won	Konkuk University
12:00 – 12:30	O-14	Shigenori Nonaka	ExCELLS, NIBB
12:30 – 14:00	Lunch (Council Meeting)		

<i>Session 5</i>	<i>Chair: Jooyoung Lee</i>		
14:00 – 14:30	O-15	Motohiro Nishida	ExCELLS, NIPS
14:30 – 15:00	O-16	Rita Pei-Yeh Chen	Academia Sinica
15:00 – 15:30	O-17	Shigetoshi Aono	ExCELLS, IMS
15:30 – 16:00	Coffee Break (Group Photo)		

<i>Session 6</i>	<i>Chair: Ming-Daw Tsai</i>		
16:00 – 16:30	O-18	Juyong Lee	Kangwon National Univ.
16:30 – 17:00	O-19	Kung-Ta Lee	National Taiwan University
17:00 – 17:30	O-20	Kazuhiro Aoki	ExCELLS, NIBB
18:00 – 20:00	Banquet		

July 10 (Tue)

<i>Session 7</i>	<i>Chair: Shigetoshi Aono</i>		
9:00 – 9:30	O-21	Shin-ichi Higashijima	ExCELLS, NIBB
9:30 – 10:00	O-22	Joon-Hwa Lee	Gyeongsang National Univ.
10:00 – 10:30	O-23	Meng-Chiao Ho	Academia Sinica

<i>Session 8</i>	<i>Chair: Sun Choi</i>		
11:00 – 11:30	O-24	Naoyuki Inagaki	NAIST
11:30 – 12:00	O-25	Nobuyuki Shiina	ExCELLS, NIBB
12:00 – 12:30	O-26	Weontae Lee	Yonsei Univ.

<i>Session 9</i>	<i>Chair: Rita Pei-Yeh Chen</i>		
14:00 – 14:30	O-27	Susumu Uchiyama	ExCELLS, Osaka Univ.
14:30 – 15:00	O-28	Hsiao-Ching Lin	Academia Sinica
15:00 – 15:30	O-29	Art E. Cho	Korea University

ExCELLS Young Scientists Forum 2018

<i>Chair: Rina Yogo</i>			
16:00 – 16:18	Y-1	Maho Yagi-Utsumi	ExCELLS, IMS
16:18 – 16:36	Y-2	Tomohiro Tanaka	ExCELLS, NIPS
16:36 – 16:54	Y-3	Yohei Kondo	ExCELLS, NIBB
<i>Chair: Saeko Yanaka</i>			
17:00 – 17:30	Panel discussion		
17:30 – 19:00	Poster session		

July 11 (Wed)*Session 10 Chair: Weontae Lee*

9:00 – 9:30	O-30	Makoto Tominaga	ExCELLS, NIPS
9:30 – 10:00	O-31	Jeong-Yong Suh	Seoul National University
10:00 – 10:30	O-32	Chien-Chih Yang	National Taiwan University

Session 11 Chair: Kazuhiro Aoki

11:00 – 11:30	O-33	Shinji Takada	ExCELLS, NIBB
11:30 – 12:00	O-34	Euiyoung Bae	Seoul National University
12:00 – 12:30	O-35	Chia-Cheng Chou	National Center for High-performance Computing
12:30 – 12:40	Closing Remarks		

14:00 – 16:00 Lab tour

⑥ 【学協会連携分子研研究会】

第1回ヒドリドイオニクス研究会

～新たな研究領域と産学連携分野の創出に向けて～

2018年10月28日(日) 岡崎コンファレンスセンター小会議室

10:00 – 10:30	受付
10:30 – 10:35	川合 真紀 (分子科学研究所 所長) 開会挨拶
10:35 – 11:00	小林 玄器 (分子科学研究所) ヒドリドイオニクス研究会概要説明
11:00 – 12:00	細野 秀雄 (東京工業大学) 機能材料中の水素の役割と活用: ヒドリドにフォーカスして
13:00 – 14:00	菅野 了次 (東京工業大学) 超イオン導電体の物質探索 銅からリチウム, ヒドリドまで
14:00 – 15:00	陰山 洋 (京都大学) ヒドリドの特徴を活かした物質開発・制御
15:10 – 16:10	常行 真司 (東京大学) 物質中の水素は計算機でどう“見える”か?
16:10 – 17:10	銭谷 勇磁 (パナソニック株式会社) ペロブスカイト型酸化物 $\text{Ba}_{1-x}\text{Zr}_{1-y}\text{Y}_y\text{O}_{3-\delta}$ における特異な伝導物性
17:10 – 17:15	総評
17:15 – 17:20	閉会挨拶
17:30 – 19:30	情報交換会 (岡崎コンファレンスセンター中会議室)

⑦ 【ミニ国際シンポジウム分子研研究会】

The International Symposium on Bioinorganic Chemistry 2018

2018年11月30日(金)～12月1日(土) 岡崎コンファレンスセンター

November 30th (Fri)9:30 – 9:40 *Opening Remarks* Osami SHOJI (Nagoya University)*Chaired by Takashi MATSUO**Invited talks*

9:40 – 10:00	Satoshi ABE (Tokyo Institute of Technology) “In cell protein crystals containing organometallic Pd complexes”
10:00 – 10:20	Norifumi KAWAKAMI (Keio University) “Enzyme immobilization in protein aggregates composed of a protein nanoparticle, TIP60”
10:20 – 10:40	Shigeyuki MASAOKA (Institute for Molecular Science) “Pentamuclear iron catalysts for water oxidation”

Chaired by Toshitaka MATSUI

Keynote Lecture

11:00 – 11:40 Thomas M. Makris (University of South Carolina)
“To be announced”

Invited talks

11:40 – 12:00 Yoshihito SHIOTA (Kyushu University)
“C–H bond activation by dicopper-oxo species”

12:00 – 12:20 Hiroaki KOTANI (University of Tsukuba)
“Redox Noninnocent Behavior of Tris(2-pyridylmethyl)amine Bound to Lewis Acidic Metal Ions Induced by C–H Deprotonation”

Chaired by Norifumi KAWAKAMI

Invited talks

13:30 – 13:50 Tasuku HIRAYAMA (Gifu Pharmaceutical University)
“Development of fluorescent probes for the detection of Fe(II) ion in living cells”

13:50 – 14:10 Taiho KAMBE (Kyoto University)
“Physiology and biochemistry of zinc-requiring ectoenzymes”

14:10 – 14:30 Masayasu TAKI (Nagoya University)
“Design of new fluorophores for optical imaging”

Chaired by Yutaka HITOMI

Keynote Lecture

14:50 – 15:30 Christoph J. Fahrni (Georgia Institute of Technology)
“Illuminating biological trace metals with high- and low-energy photons”

Chaired by Yasuhiro FUNAHASHI

Invited talks

15:50 – 16:10 Yoshiaki FURUKAWA (Keio University)
“Copper in ALS: A neurodegeneration caused by metal deficiency in SOD1”

16:10 – 16:30 Minoru KUBO (University of Hyogo)
“Time-resolved IR analysis of the catalytic reaction pathway of NO reductase”

16:30 – 16:50 Takashi FUJISHIRO (Saitama University)
“X-ray crystallographic snapshots of sulfur mobilization to iron-sulfur cluster biosynthesis”

Chaired by Shinobu ITOH

Special lecture

17:10 – 18:10 Yoshihito WATANABE (Nagoya University)

18:30 – 20:30 Banquet

December 1st (Sat)

Chaired by Yuichiro AIBA

Invited talks

9:30 – 9:50 Nobutaka FUJIEDA (Osaka Prefecture University)
“Cupin proteins as multipotent macromolecular ligands”

9:50 – 10:10 Koji OOHORA (Osaka University)
“Hemoprotein engineered with artificial heme analogues showing unique catalysis via the detectable active species”

10:10 – 10:30 Takehiko TOSHA (RIKEN SPring-8 Center)
“Regulation of nitric oxide dynamics in microbial denitrification”

10:30 – 10:50 Toshikazu ONO (Kyushu University)
“Learning from vitamin B₁₂-mediated reactions: Cobalt(III)–carbon bond assisted catalytic C–H fluoroalkylation of arenes and heteroarenes”

Chaired by Takehiko TOSHA

Keynote Lecture

11:10 – 11:50 Lionel Cheruzel (San Jose State University)
“To be announced”

Chaired by Shinya ARIYASU

Invited talks

13:00 – 13:20 Hitoshi UBE (The University of Tokyo)
“Metal-mediated Molecular Gearing Systems based on Triptycene”

- 13:20 – 13:40 Shin-ichiro KAWANO (Nagoya University)
“Nanoporous Liquid Crystals and Double-Decker Cages Utilizing Shape-Persistent Metallomacrocyclic”
- 13:40 – 14:00 Yuma MORIMOTO (Osaka University)
“Detailed Characterization and Reactivity Studies of a Bis(μ -oxido)nickel(III) Complex”

Chaired by Takeshi UCHIDA

Invited talks

- 14:20 – 14:40 Tomohiko INOMATA (Nagoya Institute of Technology)
“Immobilization of microbes on artificial siderophore complexes-modified substrates”
- 14:40 – 15:00 Norifumi MURAKI (Institute for Molecular Science)
“The structure basis of the novel heme-iron uptake system in *Corynebacteria*”
- 15:00 – 15:20 Satoshi NAGAO (Nara Institute of Science and Technology)
“NMR study on structures and dynamic properties of cytochrome *c* bound to lipid bicelles”
- 15:20 – 15:30 *Closing Remarks* Shigetoshi AONO (Institute for Molecular Science)

⑧ 【ミニ国際シンポジウム分子研研究会】

Water at interfaces 2018

2019年1月15日(火)～17日(木) 岡崎コンファレンスセンター

January 15th (Tue) @Okazaki Conference Center

- 8:50- 9:20 Registration
- 9:20- 9:30 Opening remark (Toshiki Sugimoto, IMS)
- 9:30- 9:55 1_Shinji Saito (IMS) <invited>
: Supercooled water: Structure, dynamics, thermodynamics, and glass transition
- 9:55-10:20 2_Tetsuya Hama (Hokkaido U) <invited>
: Liquid-like behavior of interstellar water ice at low temperatures
- 10:20-10:45 3_Shinichi Enami (NIES) <invited>
: Microheterogeneous Water Surfaces
- 11:20-12:00 4_Patrick Ayotte (U de Sherbrooke) <invited>
: Preparation, Characterization and Storage of Water Vapours Highly Enriched in its Ortho-H₂O Nuclear Spin Isomer
- 12:00-12:40 5_Heon Kang (Seoul U) <invited>
: Proton Transport in Ice Interior and Its Surface
- 12:40-14:00 Taking group photograph & Lunch Time (box lunch)
- 14:00-14:40 6_Mischa Bonn (MPIP) <invited>
: Hydrogen Bonding at Water and Ice Interfaces
- 14:40-15:05 7_Shoichi Yamaguchi (Saitama U) <invited>
: Surface Structure of Ice Ih Revealed by HD-SFG Spectroscopy and Theoretical Modeling
- 15:05-15:30 8_Toshiki Sugimoto (IMS)
: Proton ordering in heteroepitaxial ice films
- 16:00-16:40 9_Chuan Shan Tian (Fudan U) <invited>
: Mechanism of Electric Power Generation from Ionic Droplet Motion on Polymer Supported Graphene
- 16:40-17:05 10_Tomoko Shimizu (Keio U) <invited>
: Scanning Probe Microscopy Studies of Water/Solid Interfaces
- 17:05-17:45 11_Ying Jiang (Peking U) <invited>
: Peering into interfacial water by scanning probe microscopy: from single molecules to two-dimensional ices
- 18:00-20:30 150 min poster session & free discussion with food and drinks
(Welcome remarks by Maki Kawai, IMS; Hiroshi Onishi, Kobe U; Yuki Nagata, MPIP)

January 16th (Wed) @Okazaki Conference Center

- 9:00- 9:25 12_Satoshi Nihonyanagi (RIKEN) <invited>
: Role of Hydrogen Bonding in Ultrafast Spectral Diffusion Dynamics of Water at Charged Lipid Interfaces
- 9:25-10:05 13_Thomas D Kühne (U of Paderborn) <invited>
: The name is bond—Hydrogen bond
- 10:05-10:45 14_Nico van der Vegt (Darmstadt U) <invited>
: Non-additive ion effects at polymer–water interfaces
- 11:15-11:40 15_Akihiro Morita (Tohoku U) <invited>
: Mechanism of Ion Transport through Water–Oil Interface

11:40-12:20	16_Adam Foster (Aalto U) <invited> : Probing molecular processes at solid-liquid interfaces
13:40-14:00	17_Ken-ichiro Murata (Hokkaido U) <oral> : In situ observation of ice crystal growth inside quasi-liquid layers
14:00-14:40	18_Chang Qing SUN (Nanyang Tec) <invited> : O:H-O bond transition by aqueous charge injection
14:40-15:05	19_Yoshihisa Harada (Tokyo U) <invited> : RIXS for hydrogen bond of liquid water at interfaces
15:45-16:10	20_Yasuyuki Yokota (Riken) <invited> : Developments of In Situ and Ex Situ Techniques for Microscopic Studies of Electrochemical Reactions at Aqueous Solution/ Electro Interfaces
16:10-16:30	21_Yuki Uematsu (Kyushu U) <oral> : Jones-Ray effect can be explained by charged impurities
16:30-16:50	22_Andrea Grisafi (EPFL) <oral> : A machine learning framework for second harmonic scattering
16:50-17:00	Closing remark (Toshiki Sugimoto, IMS)

January 17th (Thu) –optional <IMS Lab tour>– @IMS Research Building

10:00-12:30	IMS Lab tour 1: UVSOR (The Meeting Room is IMS Research Building 301)
13:30-15:00	IMS Lab tour 2: Sugimoto G (The Meeting Room is IMS Research Building 301)

⑨ 【分子研研究会】

錯体化学を基盤とした階層構造制御と機能発現
2019年3月3日(日)～4日(月) 岡崎コンファレンスセンター小会議室

3月3日(日)

13:00-13:05 開会あいさつ・趣旨説明 植村 卓史(東京大学)

座長: 植村 卓史

13:05-13:35	異方性コロイドが水中に形成する巨大格子の科学 石田 康博(理研)
13:35-14:05	動的金属ナノ粒子のサイエンス 今岡 享稔(東工大)
14:05-14:35	非共有結合型相互作用に基づいたアキラルらせん高分子への高効率不斉誘起 長田 裕也(京大)
14:35-15:05	発光性をもつ金イソシアニド錯体の機械的応答特性 伊藤 肇(北大)

座長: 正岡 重行

15:30-16:00	フッ化炭素溶媒中における遷移金属錯体の触媒機能発現 森本 祐麻(阪大)
16:00-16:30	酸化酵素の誤作動を誘起する擬似基質を用いる物質変換 荘司 長三(名大)
16:30-17:00	配位結合とペプチド配座を利用した新奇ナノ構造の創出 澤田 知久(東大)
17:00-17:30	階層的超分子重合によって実現する未知のトポロジー 矢貝 史樹(千葉大)
18:30-	懇親会

3月4日(月)

座長: 山田 鉄兵

9:30-10:00	構造制御された π 電子系材料の非接触電気伝導度評価 櫻井 庸明(京大)
10:00-10:30	錯体ナノ空間を舞台とした共役高分子の超階層構造の構築 北尾 岳史(東大)
10:30-11:00	機械学習による結晶形成機構解明を基盤とした新規ナノクラスター MOF の開発 田中 大輔(関学)

11:15-11:45	錯体とカーボンの融合 西原 洋知 (東北大)
11:45-12:15	合金クラスターの精密合成と一次元構造体の創成 根岸 雄一 (東京理科大)

⑩ 【分子研研究会】

New Frontier in Protein Design & Engineering

2019 年 3 月 15 日 (金) ~ 16 日 (土) 分子科学研究所研究棟 201 号室

March 15, 2019 (Fri)

13:30-13:50	Opening Remarks and Introduction Ryoichi Arai (Shinshu Univ.) & Nobuyasu Koga (IMS, ExCELLS)
13:50-14:25	Osami Shoji (Nagoya Univ.) “Hydroxylation of Nonnative Substrates Catalyzed by Cytochrome P450BM3 Facilitated by Decoy Molecules”
14:25-14:50	Daisuke Matsui (Toyama Prefectural Univ.) “Rational identification of aggregation hotspots based on secondary structure and amino acid hydrophobicity”
14:50-15:15	Naoya Kobayashi (ExCELLS) “Cumulative thermostabilization of beta-glucosidase with structure-based sequence profile information”

Special Lecture

15:35-16:20	Michael Hecht (Princeton Univ.) “Sustaining Life with Genes and Proteins Designed ‘From Scratch’ ”
16:35-17:00	Shintaro Minami (ExCELLS) “Design of new fold proteins yet-unexplored in nature”
17:00-17:35	Tomoaki Matsuura (Osaka Univ.) “Engineering and characterizing membrane proteins using artificial cells”
17:35-18:00	Naohiro Terasaka (Univ. of Tokyo) “Directed evolution of bacterial protein cages to package their own mRNA”

March 16, 2019 (Sat)

9:30- 9:55	Daisuke Kuroda (Univ. of Tokyo) “Exploring antibody designability through physicochemical analyses, mutagenesis and computations”
9:55-10:20	Takao Arimori (Osaka Univ.) “Development of an artificially designed antibody fragment “Fv-clasp”
10:20-10:55	Munehito Arai (Univ. of Tokyo) “Experimental and theoretical design of enzymes and binding proteins”
11:15-11:40	Yuta Shinohara (RIKEN) “Design principles of temperature-compensated phosphorylation in the circadian clock”
11:40-12:15	Satoshi Akanuma (Waseda Univ.) “Protein engineering experiments to explore the evolution of early life”
13:15-13:50	Koki Makabe (Yamagata Univ.) “Folding and Design of the Peptide Self-Assembly Mimics, PSAMs”
13:50-14:25	Paola Laurino (OIST) “A journey from an ancient finger print of Rossmann fold enzymes to cofactor engineering”
14:25-15:00	Mitsuo Umetsu (Tohoku Univ.) “Can proteins be engineered to generate a desired function from slim library ?”

(4) 若手研究活動支援

課 題 名	提案代表者
第 58 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	京都大学大学院理学研究科 加藤 史明

(5) 岡崎コンファレンス

課 題 名	提案代表者
合成, 生体, ハイブリッド発動分子に関する国際シンポジウム	東京工業大学生命理工学院 金原 数

(6) UVSOR 施設利用

(前期)

オーダー・ディスオーダー型圧電結晶の赤外反射分光	山形大学理学部	北 浦 守
生態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
有限層数の有機半導体薄膜における分裂した電子準位の波数分解測定	千葉大学大学院工学研究院	吉田 弘幸
角度分解紫外光電子分光法による金属酸化物上の有機分子薄膜の電子構造と分子配向評価	千葉大学大学院工学研究院	奥平 幸司
有機ヘテロ界面の構造無秩序化を誘起する要因の解明	東京理科大学理工学部	赤池 幸紀
結晶性有機半導体材料の価電子バンド構造に対する水蒸気曝露の効果	東京理科大学理工学部	中山 泰生
オペランド軟X線吸収分光測定による炭酸コバルト水分解触媒の機能解明	山口大学大学院創成科学研究科	吉田 真明
脂質二重膜を構成するリン脂質分子の電子状態計測	豊橋技術科学大学環境・生命工学系	手老 龍吾
液晶素子の軟X線吸収スペクトルの偏光ベクトル依存性の研究	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
パラジウム NNC- ピンサー型錯体を触媒として用いた有機ケイ素化合物と有機ハロゲン化合物との反応の機構解析	分子科学研究所	浜坂 剛
軟X線吸収分光法で探るグリシンペタインの塩添加による脱水和	広島大学大学院理学研究科	岡田 和正
火星隕石中の窒素化学種および同位体比分析で解明する火星大気進化	海洋研究開発機構高知コア研究所	中田 亮一
Influence of the pH on the X-Ray Absorption Spectra of Mixed Copper-Glycine and Mixed Calcium-Glycine Aqueous Solutions, Recorded in the Vicinity of the N1s, C1s, and Ca2p Ionization Thresholds	Synchrotron SOLEIL	CEOLIN, Denis
Selective Catalytic Hydrogenation of Furfural by the Bimetallic Nanocatalysts	University of Science and Technology of China	JU, Huanxin
層状複合イオン結晶の低次元性による自己束縛励起子の形成とダウンコンバージョン蛍光	秋田大学大学院理工学研究科	小玉 展宏
シンチレーション光の特性改善に関する研究	山形大学理学部	大西 彰正
パイロクロア型新規シンチレータ材料のバンド構造の解明	東北大学未来科学技術共同研究センター	黒澤 俊介
隕石と有機物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
真空紫外励起による無機蛍光体の発光特性と発光機構の解明	学習院大学理学部	稲熊 宜之
深紫外発光アルミン酸亜鉛蛍光体の配向性成長薄膜形成過程の解明	静岡大学学術院工学領域	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および欠陥形成に伴う変化の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野 正人
Yb ₂ O ₃ および Ga ₂ O ₃ の誘電関数の決定	福井大学学術研究院工学系部門	牧野 哲征
NaCl:I- 単結晶中における光励起による Ag ⁺ から Ag ⁻ イオンへの変換過程の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
Electronic Band and Defect Structure of Spinel Nitrides of the Group 14 Elements and Their Solid Solutions	C.N.R.S, France	KANAIEV, Andrei
アポトシス過程におけるクロマチン凝集に伴うリン酸化過程の解明	東北大学多元物質科学研究所	江島 丈雄
STXM Observation of Dissolution Distribution of Ferrous or Ferric Ion in Magnetite	筑波大学生命環境系	興野 純
STXM による Li イオン電池正極材料の Li 拡散および酸化還元反応の空間分布の観測	産業技術総合研究所省エネルギー研究部門	朝倉 大輔
STXM を用いた帯電性ナノバブル周囲の水の電子状態観測	東京大学物性研究所	原田 慈久
室内実験および宇宙環境曝露実験に基づく炭素質星間塵の物質理解	東京大学大学院理学系研究科	左 近 樹
生体試料の定量的分子マッピングへの STXM の展開：モデル分子混合物による検証と培養細胞への応用	東海大学工学部	伊藤 敦
走査型透過X線顕微鏡を用いたポリマー中の化学状態解析	分子科学研究所	大東 琢治
ビームラインおよび STXM の整備	分子科学研究所	大東 琢治
硫黄架橋ゴムの二相不均一網目構造の特性化	京都工芸繊維大学分子化学系	池田 裕子
その場観察・分析技術を用いた地球外物質に含まれる有機物の分子構造の分析による進化過程の解明と、「はやぶさ2」試料の機関横断型連携分析システムの構築	高輝度光科学研究センター	上 梶 真之
火星起源隕石から探る火星表層環境の変遷～リン・塩素・炭素の化学種分析からのアプローチ～	広島大学大学院理学研究科	宮原 正明
硫黄の化学種別サブミクロンイメージング法による地球外有機物の形成環境の解明	海洋研究開発機構高知コア研究所	伊藤 元雄
STXM Studies on Quasi-2D and Triple-Cation Mixed-Halide Perovskite Solar Cells	National Synchrotron Radiation Research Center	HSU, Yao-jane
The Effect of the Generation of Free Radicals on the Properties of GO/ZnO/Si Composites Elucidated by Scanning Transmission X-Ray Microscopy	Tamkang University	PONG, Way-faung
Redox-Sensitive Nanocarriers for Controlled Dermal Drug Delivery	Freie University Berlin	RUEHL, Eckart

STXM in Characterizing Ultrastructural Features in the Liver of Patients with Storage Diseases	University of Oulu	IMMONEN, Esa-ville
High-Pressure Soft X-Ray Spectro-Microscopy of CO ₂ Fluids	Lawrence Berkeley National Laboratory	GUO, Jinghua
In Depth Qualitative Structural Analysis of Nanocellulose Hybrid Materials and Cellulose Nanofibril Aerogels	University of Oulu	LIIMATAINEN, Henrikki
軟X線分光による窒化処理した銅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
Y ₃ Fe ₅ O ₁₂ ガーネットの電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
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
BL4B 光学系の調整および整備	分子科学研究所	岩山 洋士
アモルファス半導体薄膜の光照射による内殻吸収の経時変化観察	岐阜大学工学部	林 浩司
窒素及びフッ素ドーパされた TiO ₂ 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
軟X線吸収分光を用いた高分子系接着材料表面の化学状態と光損傷閾値の評価	理化学研究所放射光科学総合研究センター	山根 宏之
高分解能 ARPES による鉄系高温超伝導体薄膜の異方的電子構造の直接観測	東北大学大学院理学研究科	佐藤 宇史
Rashba 型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
リン偏析による Fe ₂ P の表面電子状態の制御	立教大学理学部	枝元 一之
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ン光研究センター	伊藤 孝寛
スクッテルダ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
Measuring the Berry Curvature of Dresselhaus Semiconductor by Circular Dichroism ARPES	Seoul National University	KIM, Changyoung
アモルファス半導体光誘起構造変化に対する熱処理効果に関する研究	岐阜大学工学部	林 浩司
オーダー・ディスオーダー型圧電結晶の赤外反射分光	山形大学理学部	北浦 守
ゲルマニウム結晶中の格子欠陥に起因する電子準位の分光学的研究	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
異方的金属絶縁体物質の偏光テラヘルツ顕微分光	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
高強度 THz 波による物質制御と赤外分光による物性評価	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
低エネルギー高分解能 ARPES による新奇ノーダルフェルミオン物質の研究	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 の結晶相転移に伴う価電子バンド構造変化の実測	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の電子状態の研究	東京大学大学院理学系研究科	藤森 淳
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 V	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 _x Fe ₂ As ₂ の超伝導ギャップ	分子科学研究所	出田真一郎
層状 MAX 相化合物 V ₂ AlC の高分解能 3 次元角度分解光電子分光	名古屋大学シンクロトン光研究センター	伊藤 孝寛
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
擬 1 次元 Bi 原子鎖による異方的巨大 Rashba 効果	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪 嘉之
CDW 転移を示す遷移金属ダイカルコゲナイド (NbSe ₂) の励起エネルギー依存 ARPES および電子格子相互作用素過程の研究	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
二段に原子価転移する希土類化合物 EuPtP のフェルミ面形状の特定	大阪府立大学大学院工学研究科	安齋 太陽
Band Structure Modification of 2D TMDCs Using Molecular Dopant	Humboldt-Universität zu Berlin	KOCH, Nobert
Momentum and Doping Dependent Superconducting Gap Measurements on n-Type Cuprate Superconductors	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
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	国立天文台ひので科学プロジェクト	石川 遼子
ボロンドープダイヤモンドの複素屈折率測定	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
3d 遷移金属添加 AlN の発光／励起スペクトル測定によるバンド構造の解明	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田 早紀
複合ガラスシンチレーターの真空紫外での応用	大阪大学レーザー科学研究所	清水 俊彦
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
MFI ゼオライト上の Mo 複合炭化物活性種の L 殻 XANES による構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
軟X線吸収分光法による P3HT/PCBM の分子回転角までふくめた分子配向評価	千葉大学大学院工学研究院	奥平 幸司
湿式合成したリン酸カルシウム系バイオセラミクス中に含まれる微量元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之

太陽軟X線撮像分光ロケット実験に用いるフライト品と将来の衛星計画に向けたCMOSセンサーの評価	国立天文台 SOLAR-C 準備室	成影 典之
リン酸三カルシウム (TCP) を用いた新規機能性水酸アパタイト材料の合成と評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
複合型酸化ガリウム光触媒の構造解析	大阪市立大学複合先端研究機構	吉田 朋子
高速重イオン照射したLiNbO ₃ のXAFS構造解析	九州大学大学院工学研究院	吉岡 聰
3d遷移金属添加AlN薄膜のバンド構造の解明と可視光光電変換材料としての最適化研究	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田 早紀
原子核乾板の最小電離粒子に対する応答評価	名古屋大学大学院理学研究科／未来材料・システム研究所	中村 光廣
微惑星における有機物進化に対する鉱物の役割の解明	横浜国立大学大学院工学研究院	癸生川陽子
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
拡散反射法による軟X線吸収スペクトル測定を試み	大阪府立大学大学院工学研究科	村田 秀信
Li内包C ₆₀ の電子状態解析	筑波大学数理物質系	山田 洋一
(後期)		
オーダー・ディスオーダー型圧電結晶の赤外反射分光	山形大学理学部	北浦 守
生態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
有限層数の有機半導体薄膜における分裂した電子準位の波数分解測定	千葉大学大学院工学研究院	吉田 弘幸
角度分解紫外光電子分光法による金属酸化物上の有機分子薄膜の電子構造と分子配向評価	千葉大学大学院工学研究院	奥平 幸司
結晶性有機半導体材料の価電子バンド構造に対する水蒸気曝露の効果	東京理科大学理工学部	中山 泰生
層状複合イオン結晶の低次元性による自己束縛励起子の形成とダウンコンバージョン蛍光	秋田大学大学院理工学研究科	小玉 展宏
シンチレーション光の特性改善に関する研究	山形大学理学部	大西 彰正
パイロクロア型新規シンチレータ材料のバンド構造の解明	東北大学未来科学技術共同研究センター	黒澤 俊介
深紫外発光アルミニウム酸亜鉛蛍光体の配向性成長薄膜形成過程の解明	静岡大学学術院工学領域	小南 裕子
NaCl:I-単結晶中における光励起によるAg ⁺ からAg ⁻ イオンへの変換過程の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
Electronic Band and Defect Structure of Spinel Nitrides of the Group 14 Elements and Their Solid Solutions	C.N.R.S, France	KANAEV, Andrei
Y ₃ Fe ₅ O ₁₂ ガーネットの電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
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
BL4B光学系の調整および整備	分子科学研究所	岩山 洋士
アモルファス半導体薄膜の光照射による内殻吸収の経時変化観察	岐阜大学工学部	林 浩司
窒素及びフッ素ドーパされたTiO ₂ 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
軟X線吸収分光を用いた高分子系接着材料表面の化学状態と光損傷閾値の評価	理化学研究所放射光科学総合研究センター	山根 宏之
アモルファス半導体光誘起構造変化に対する熱処理効果に関する研究	岐阜大学工学部	林 浩司
オーダー・ディスオーダー型圧電結晶の赤外反射分光	山形大学理学部	北浦 守
ゲルマニウム結晶中の格子欠陥に起因する電子準位の分光学的研究	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
異方性の金属絶縁体物質の偏光テラヘルツ顕微分光	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
高強度THz波による物質制御と赤外分光による物性評価	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
ボロンドープダイヤモンドの複素屈折率測定	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
3d遷移金属添加AlNの発光／励起スペクトル測定によるバンド構造の解明	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田 早紀
複合ガラスシンチレータの真空紫外での応用	大阪大学レーザー科学研究所	清水 俊彦
MFIゼオライト上のMo複合炭化物活性種のL殻XANESによる構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
軟X線吸収分光法によるP3HT/PCBMの分子回転角までふくめた分子配向評価	千葉大学大学院工学研究院	奥平 幸司
湿式合成したリン酸カルシウム系バイオセラミクス中に含まれる微量元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
太陽軟X線撮像分光ロケット実験に用いるフライト品と将来の衛星計画に向けたCMOSセンサーの評価	国立天文台 SOLAR-C 準備室	成影 典之
複合型酸化ガリウム光触媒の構造解析	大阪市立大学複合先端研究機構	吉田 朋子
LCSガンマ線によるQED非線形効果	量子科学技術研究開発機構高崎量子応用研究所	早川 岳人
高分子膜中のアゾベンゼン含有錯体への光過UV照射による波長選択的分子配向誘導	東京理科大学理学部	秋津 貴城
円偏光アンジュレータ光照射による生体有機分子薄膜への光学活性発現	横浜国立大学大学院工学研究院	高橋 淳一

UVSOR-BL1U からの LCS ガンマ線を用いた NRF 同位体 3D イメージング法に関する研究	京都大学エネルギー理工学研究所	大垣 英明
ゲルマニウム結晶中の格子欠陥に起因する電子準位の分光学的研究	東北学院大学工学部	原 明人
シンチレータの発光過程の解明を目指した軟X線励起時の発光の観察	東北大学未来科学技術共同研究センター	黒澤 俊介
軟 XAFS 分析による (水) 酸化マグネシウムを用いた各種有害元素除去機構解明	早稲田大学創造理工学部	加藤 達也
チタネートナノチューブ中にイオン交換した多価カチオンの局所構造分析	大阪府立大学大学院工学研究科	村田 秀信
高速重イオン照射した $Y_3Al_5O_{12}$ 中 Al 及び Y の局所構造	九州大学大学院工学研究院	吉岡 聰
単結晶性有機薄膜への金属ドーピング	筑波大学数理物質系	山田 洋一
脂質二重膜を構成するリン脂質分子の電子状態計測	豊橋技術科学大学環境・生命工学系	手老 龍吾
偏光方向依存性による液晶相における分子配向度の計測	分子科学研究所	岩山 洋士
軟X線吸収分光法による電極反応の機構解明	分子科学研究所	長坂 将成
軟X線吸収分光法による液相の光化学反応の機構解明	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
パラジウム NNC- ピンサー型錯体を触媒として用いたクロスカップリング反応の触媒活性種解析	分子科学研究所	浜坂 剛
軟X線溶液 XAFS による鉄触媒クロスカップリング反応中間体の電子構造解析	京都大学化学研究所	高谷 光
水・アセトン 2 成分溶液系における水の電子構造変化と部分モル体積	広島大学大学院理学研究科	岡田 和正
Electronic Structure of Carbon Dots Aqueous Dispersion Probed by In-Situ X-Ray Absorption Spectroscopy	Helmholtz-Zentrum Berlin	PETIT, Tristan
隕石と有機物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
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構造および欠陥形成に伴う変化の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野 正人
酸化物・フッ化物ホストにおける Eu^{3+} 電荷移動遷移エネルギーの決定	京都大学大学院人間・環境学研究科	上田 純平
アポトーシス過程におけるクロマチン凝集のリン酸化過程の可視化	東北大学多元物質科学研究所	江島 丈雄
土壌微小領域の炭素・窒素の不均一性とその形態	筑波大学生命環境系	浅野 眞希
隕石から探る木星大移動説	横浜国立大学大学院工学研究院	癸生川陽子
生体分子分布識別のための精密 NEXAFS 測定とその培養細胞内分布への適用	東海大学工学部	伊藤 敦
走査型透過軟X線顕微鏡を用いた最古堆積岩中の有機物分析	海洋研究開発機構	伊規須素子
STXM を用いた NEXAFS-CT による細胞のアポトーシスの 3 次元分析	分子科学研究所	大東 琢治
走査型透過X線顕微鏡を用いたタイヤゴムの化学状態解析	分子科学研究所	大東 琢治
ビームラインおよび STXM の整備	分子科学研究所	大東 琢治
硫黄架橋ゴムの二相不均一網目構造の特性化 (2)	京都工芸繊維大学分子化学系	池田 裕子
軟X線イメージングによるシアノバクテリア細胞中のたんぱく質の可視化	大阪大学大学院工学研究科	寺本 高啓
火星起源隕石に取り込まれた火星土壌の化学種分析	広島大学大学院理学研究科	宮原 正明
地球外物質に含まれる有機物の分子構造の不均質性に基づいた地球外有機物の進化過程解明と、「はやぶさ2」試料の機関横断型連携分析システムの構築	高輝度光科学研究センター	上相 真之
STXM による微生物-鉱物界面のその場観察に基づく微生物による海洋地殻風化メカニズムの解明	愛媛大学大学院農学研究科	光延 聖
硫黄の化学種別サブミクロンイメージング法による地球外有機物の形成環境の解明	海洋研究開発機構高知コア研究所	伊藤 元雄
天然ゴムエマルション粒子の加硫過程における硫黄局在化と脂質膜融合プロセスの可視化	大分大学理工学部	檜垣 勇次
Redox-Sensitive Nanocarriers for Controlled Dermal Drug Delivery	Freie University Berlin	RUEHL, Eckart
Chemical and Structural Characterization of Ambient Rural Background Aerosol and Complex Laboratory Generated Secondary Organic Aerosol Samples	University of Oulu	PRISLE, Nonne
Chemical and Spatial Identification for Gas-Dependent Nanobubbles Sandwiched in Graphene Liquid Cells	Tamkang University	PONG, Way-faung
High-Pressure Soft X-Ray Microscopy of CO ₂ Fluids	Lawrence Berkeley National Laboratory	GUO, Jinghua
相界面析出により生成した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
低エネルギー領域の軟X線吸収分光法のための検出器の開発	分子科学研究所	長坂 将成
Ti 添加 AlN のバンドギャップ狭小機構の解明と光電変換材料としての組成最適化研究	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田 早紀
高分解能 ARPES による新奇ワイル半金属の開拓	東北大学大学院理学研究科	佐藤 宇史
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
Ag(100) 上に作成した V ₂ O ₃ (0001) 薄膜の MIT の探査	立教大学理学部	枝元 一之
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

ファンデルワールス半導体 1T-TiS ₂ の表面電子状態の研究 フォトカソード材料の NEA 表面の電子構造と活性化の相関 角度分解光電子分光による NdFeAs _{1-x} P _x O _{0.9} F _{0.1} 単結晶の超伝導ギャップの P 濃度依存性	名古屋大学シンクロトン光研究センター 大阪大学大学院生命機能研究科 大阪大学大学院理学研究科	伊藤 孝寛 木村 真一 宮坂 茂樹
Study on Interaction between Charge Density Wave Collective Modes and Electrons	Korea Advanced Institute of Science and Technology Seoul National University	KIM, Yeong Kwan KIM, Changyoung
Investigating Electronic Structures of the Strained Transition Metal		
将来惑星探査に向けた水素吸収セルイメージャーの性能評価 X[Pt(dmit) ₂] ₂ 塩の e-mv モードの観測と軌道単位の評価 低エネルギー高分解能 ARPES による反強磁性トポロジカル物質の研究 チエノチオフェン構造を有する高移動度有機半導体分子単結晶の価電子バンド分散の実証 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 2 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 VI BL7U 光電子エンドステーションの整備 高分解能 ARPES による一軸圧印可された鉄系超伝導体 Ba(Fe _{1-x} Co _x) ₂ As ₂ の超伝導ギャップ 層状 MAX 相化合物 V ₂ AlC における表面バンド形成メカニズムの解明 異方的金属絶縁体物質の偏光角度分解光電子分光 II III-V 族半導体基板の表面終端構造によるトポロジカル物質薄膜の改質 NbSe ₂ における電子格子相互作用素過程の研究 (II)	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所 愛媛大学大学院理工学研究科 東北大学大学院理学研究科 東京理科大学理工学部 東京工業大学理学院物理学系 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 名古屋大学シンクロトン光研究センター 大阪大学大学院生命機能研究科 大阪大学大学院生命機能研究科 大阪大学産業科学研究所	桑原 正輝 山本 貴 佐藤 宇史 中山 泰生 平原 徹 解良 聡 田中 清尚 出田真一郎 伊藤 孝寛 木村 真一 大坪 嘉之 田中慎一郎
Study on Tinteraction between Charge Density Wave Collective Modes and Electrons	Korea Advanced Institute of Science and Technology	KIM, Yeong Kwan
パイロクロア型ルテニウム酸化物の真空紫外分光 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 フッ化カルシウムと金属接合面の真空紫外光を用いた特性評価 真空紫外領域分光による鉄系超伝導体の電子状態の研究 原子核乾板の最小電離粒子に対する応答評価	東京大学大学院工学系研究科 国立天文台 SOLAR-C 準備室 名古屋工業大学大学院工学研究科 大阪大学大学院理学研究科 名古屋大学大学院理学研究科／未来材料・システム研究所	金澤 直也 石川 遼子 小野 晋吾 中島 正道 中村 光廣
Chemical and Structural Characterization of Ambient Rural Background Aerosol and Complex Laboratory Generated Secondary Organic Aerosol Samples 原生代後期エディアカラ紀のエディアカラ動物群の炭質物構造解析：最古節足動物の探索 新規アクチュエーター開発を目指した一硫化サマリウム固溶系の反射分光測定による電子状態の研究 UVSOR Experiments for the Induction of Molecular Chirality STXM を用いたナノバブル周囲の水の電子状態観測 ナノ集光 X 線ビームによる試料損傷メカニズムの解明	University of Oulu 東京大学大学院総合文化研究科 名古屋大学大学院工学研究科 Sichuan university 東京大学物性研究所 理化学研究所放射光科学研究センター	PRISLE, Nonne 小宮 剛 横山 泰範 YAO, Jiabin 原田 慈久 山根 宏之

(7) 施設利用

① 装置開発室

(前期)

神経細胞ネットワーク診断プラットフォームの開発

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診断プラットフォームの開発

名古屋大学未来社会創造機構

宇理須恒雄

差動排気超音速ジェット装置の製作

京都大学大学院理学研究科

馬場 正昭

② 計算機利用

分子動力学シミュレーションによる多次元振動分光のスペクトル計算

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科

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を用いた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	鈴木 聡
無秩序系および複雑分子系におけるテラヘルツスペクトル	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
密度汎関数法計算の新たな展開とナノ界面成長機構の解明・予測	名古屋大学未来材料・システム研究所	押山 淳
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
革新的量子科学と大規模シミュレーション科学の創造	量子化学研究協会研究所	中辻 博
色素増感剤を用いた諸課題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族金属によるオレフィン重合触媒の設計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
芳香族溶媒和クラスターの光誘起溶媒再配向ダイナミクスに関わる溶媒和構造探索および振動スペクトルの量子化学計算	東京工業大学科学技術創成研究院	宮崎 充彦
分子間相互作用理論とその分子クラスター研究への応用	分子科学研究所	岩田 末廣
第一原理反応ダイナミクスと先進的電子状態理論の多角的展開	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
脂質膜へのタンパク質埋め込みのための分子シミュレーション技術の開発	理化学研究所	齋藤 大明
セルロース材料および関連タンパク質の分子シミュレーション研究	宮崎大学工学教育研究部	湯井 敏文
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
OZ理論から求まる異核LJ二原子分子の溶媒和自由エネルギー補正に関する研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮田 竜彦
光合成酸素発生中心CaMn ₄ O 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
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
金属分子クラスターとアミノ酸の反応経路に関する量子化学的研究	電気通信大学大学院情報理工学研究科	山北 佳宏
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
ミオシンVIの歩行メカニズムの動的ランドスケープ計算による解明	名古屋大学大学院工学研究科	寺田 智樹
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
蛋白質によるDNA加水分解における溶媒の役割	九州工業大学大学院情報理工学研究科	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	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
生体内水分子の効果を考慮したモデルを適用した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	能登 香
軟X線光学化学に関する理論的研究	広島大学サステナブル・ディベロップメント実践研究センター	高橋 修
化学反応の量子ダイナミクスに関する理論的研究	東京大学大学院工学系研究科	山下 晃一
ナノ・バイオ分子の光化学反応における非断熱励起状態ダイナミクス	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
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
分子動力学計算によるポリマーの構造変化ダイナミクスの研究	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3	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	早稲田大学理工学術院	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開発と応用	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解離分光のための赤外スペクトルの予測	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	東京工業大学生命理工学院	北尾 彰朗
第一原理計算手法にもとづく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
蛋白質の機能発現と構造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
動的分子間相互作用に注目した液晶の機能開発	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
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
有機分子の化学反応における分子間相互作用の役割	弘前大学大学院理工学研究科	山崎 祥平
不凍糖タンパク質と水の相互作用の分子機構	信州大学国際ファイバー工学研究所	望月 建爾
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
分子動力学計算・量子化学計算によるタンパク質複合体の理論解析	筑波大学大学院数理物質科学研究科	重田 育照
ソフトマテリアルの物質輸送と構造揺らぎの相関	名古屋大学大学院工学研究科	吉井 範行
水／高分子界面での水構造と振動スペクトルの分子動力学シミュレーション研究	富山大学理工学研究部	石山 達也
水素結合の方向性が蛋白質2次構造形成に与える影響	慶應義塾大学理工学部	笠口 友隆
有機デバイスの構造解析と機能探索を目指した理論研究	日本女子大学理学部	村岡 梓
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Ⅱ	千葉大学大学院理学研究院	中山 隆史
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
縮環 π 拡張反応の機構とナノグラフェン・グラフェンナノリボンの構造・光物性解明研究	名古屋大学大学院理学研究科	伊藤 英人
メソスケールサイズを有する有機金属分子素子の開発	東京工業大学化学生命科学研究所	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
溶媒和モデルを取り入れた水素結合エネルギーの定量的評価に関する理論的研究	筑波大学大学院数理物質系	松井 亨
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
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
分子動力学計算を用いた核融合炉ブランケット用四元素溶融塩の熱物性評価	東北大学大学院工学研究科	穴戸 博紀
金属イオン包接に誘起されたクラウンエーテルの分子内エキシマー形成の研究	広島大学大学院理学研究科	井口 佳哉
凝縮相中の化学反応および物性に関する理論的研究	琉球大学理学部	東 雅大
量子化学計算による光合成水分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
光線力学的療法への応用を志向した赤色光駆動型ホルムアルデヒド生成反応の開発	東京大学生産技術研究所	村田 慧
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
Solving Materials Dilemma of Membrane Electrode Assembly for Optimizing Proton Exchange Membrane Fuel Cells	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
量子化学計算を利用した有機化学反応機構解析	乙卯研究所	黒内 寛明
分子結合変化を伴う材料系の動的反応力場 MD 計算	京都工芸繊維大学材料化学系	藤原 進
原子・分子系における相対論的多体理論の応用	東京工業大学大学院理工学研究科	Bhanu Pratap Das
量子化学計算を用いた化学反応経路の探索と発光性材料の物性解析	北海道大学大学院工学研究院	伊藤 肇
反応経路自動探索法の開発と応用	北海道大学大学院理学研究院	前田 理
MD シミュレーションを用いた多剤排出トランスポーター複合体の基質排出メカニズムの解明	東京大学先端科学技術研究センター	篠田 恵子
分子シミュレーションを用いて、次世代の抗がん剤の“種”を探索する	産業技術総合研究所	伊藤 祐子
分子シミュレーションと物理化学測定による抗体－抗原複合体の相互作用解析と合理的な改変指針の提案	東京大学大学院工学系研究科	黒田 大祐
遷移金属錯体による小分子活性化の触媒反応メカニズムの解明	九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所	伊勢川美穂
Clarify Oxygen Reduction Mechanism on Lanthanides in Complex Oxides for Application in Solid Oxide Fuel Cells	九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所	Wu Ji

曲げ変形に関する液晶安定性の分子動力学による研究	東京農工大学大学院工学研究院	坂本 道昭
亜硝酸還元酵素の反応機構に影響を及ぼす弱い相互作用の構造と機能	茨城大学大学院理工学研究科	Taborosi Attila
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
分子内および分子間電子移動の分子軌道法による研究	神奈川大学理学部	田仲 二郎
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
クロコン酸結晶における赤外スペクトルの計算	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
高反応性典型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
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
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
新規振動回転イメージング分光法による分子クラスターの構造とダイナミクスの研究	東京工業大学理学院	水瀬 賢太
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
超臨界条件下の疎水性有機分子の水和と反応	徳島大学大学院社会産業理工学研究部	吉田 健
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
含アゾキラルサレン金属錯体の分光と配向の DFT による解釈	東京理科大学理学部	秋津 貴城
非平面構造に組み込まれた酸化還元系の電子状態の探求	北里大学理学部	長谷川真士
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
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
クラウドニング分子ネットワークによる非標準構造核酸の安定性への影響	甲南大学先端生命工学研究所	杉本 直己
星型ポリマーおよびブロックコポリマーのガラス転移温度の MD シミュレーション	北海道大学大学院工学研究院	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への分子の吸着と反応	豊田工業大学クラスター研究室	市橋 正彦
分子シミュレーションによる分子集合体の研究	名古屋文理大学	本多 一彦
液体・生体分子および関連分子系の構造・ダイナミクス・分子間相互作用と振動スペクトル	静岡大学工学部	鳥居 肇
アルブミンを用いる化学反応	明星大学理工学部	松本 一嗣
ホウ素錯体を電子アクセプタとする高性能 n 型半導体の開発	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 克彦
第一原理及び古典分子動力学計算による 2 次元ナノ物質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
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
拡張アンサンブル法による生体分子のシミュレーション	名古屋大学大学院理学研究科	永井 哲郎
多座リン配位子とその金属錯体の新規機能開発	広島大学大学院理学研究科	水田 勉
XNN ピンサー配位子 (X = Si, P) を有する遷移金属錯体に関する理論的研究	北里大学理学部	神谷 昌宏
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
多原子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	沖野 友哉
抗金属錯体抗体の分子認識における構造基盤	医薬基盤・健康・栄養研究所	秋葉 宏樹
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
遅延蛍光材料の励起状態の研究	日本工業大学工学部	大澤 正久
有機半導体蒸着膜における自発的配向分極形成機構の解明	明治大学理工学部	野口 裕
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
高配位有機典型元素化合物の構造と性質の解明	学習院大学理学部	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
四重鎖 DNA とヘムの相互作用の解析	筑波大学数理物質系	山本 泰彦
分子結晶の高温高圧処理による新規固体合成・物性の計算科学による研究	北海道大学大学院工学研究院	島田 敏宏
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
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	分子科学研究所	奥村 久士
ピンサー型錯体における配位子交換反応工程に関する研究	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
電波観測に向けた核酸塩基生成経路の理論的解明	アストロバイオロジーセンター	小松 勇
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
プロピレングリコール中での高効率檜山カップリング反応の反応機構解析	総合研究大学院大学物理科学研究科	市位 駿
カリウムチャネルにおける選択性発現機構の分子論的解明	福井大学医学部	老木 成稔
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	中央大学理工学部	村上 慎吾
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
ナノ構造体の光・電子物性の第一原理計算	分子科学研究所	飯田 健二
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
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
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
次世代熱電変換材料のための熱伝導率制御に関する研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	宮崎 秀俊
ペプチド金属錯体結晶の構造変換特性・物性の計算科学的評価	お茶の水女子大学基幹研究院	三宅 亮介
フッ素化芳香族化合物の分子設計	分子科学研究所	鈴木 敏泰
シリコン基板上の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
未踏重合化学・物質科学の理論的探索	相模中央化学研究所	已上幸一郎
低分子非晶質有機半導体薄膜の分子間相互作用と凝集状態構造の計算	山形大学大学院有機材料システム研究科	横山 大輔
QTAIM 二元関数解析法による結晶および不安定物質中における弱い相互作用の解析	和歌山大学システム工学部	林 聡子
ペプチドナノリングによる重金属イオンの捕捉機構に関する理論的研究	高千穂大学人間科学部	竹内 淨
原子核の量子効果を考慮した多成分系理論による化学反応解析法の開発と応用計算	岐阜大学工学部	宇田川太郎
光・磁気・電気的特性を複合的に示す新規分子性物質の開発	大阪府立大学大学院理学系研究科	酒巻 大輔
貨幣金属クラスター・色素複合系の幾何構造と電子状態の理論的解明	立教大学理学部	三井 正明
DNA と金属錯体の相互作用	中央大学理工学部	千喜良 誠
ヘキサアザトリフェニレン誘導体の対称性が物性に与える影響	関西学院大学理工学部	田中 大輔
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
アミロイド β ペプチドの分子動力学シミュレーション	香川大学農学部	柳田 亮
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
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
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
金属錯体の電子構造ならびに反応性の解明	分子科学研究所	正岡 重行
実験と計算による有機反応機構解析	東京大学大学院薬学系研究科	滝田 良
青色光受容体タンパク質の理論的研究	理化学研究所	佐藤 竜馬
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
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
修飾核酸の分子動力学計算のための基盤構築	量子科学技術研究開発機構	桜庭 俊
多座配位子で構造規制された遷移金属クラスターの構造、電子状態および反応性	奈良女子大学研究院自然科学系	浦 康之
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
Si-H 基を含む二水素結合の微視的性質の解明	北里大学理学部	石川 春樹
d- π 拡張系として機能するルテニウム-トリポロン錯体	北里大学理学部	吉田 純
タンパク質のループの繋がり方とフォールディングの熱力学	三重大学総合情報処理センター	白井 伸宙
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
新規 π 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
新規 π 共役化合物の構造-物性相関の解明に関する理論研究	大阪大学大学院理学研究科	山下 健一
赤外吸収分光法と理論計算によるポリプロリンの主鎖構造解析	東北大学大学院薬学研究科	宮田 大輔
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
複合ナノクラスターの構造・電子状態に関する研究	慶應義塾大学理工学部	角山 寛規
分子シミュレーションと核磁気共鳴法を組み合わせた抗体の動的構造解析	分子科学研究所	谷中 冴子
シミュレーションを用いたガラス・コロイドゲルの研究	東京大学大学院総合文化研究科	池田 昌司
新規多孔性分子結晶中における分子の動的挙動の解明	筑波大学数理物質系	山岸 洋
牛白血病ウイルス感染牛および白血病発症牛に特異的に発現している遺伝子群の特定	東京農業大学農学部	小林 朋子
分子モーター設計の計算科学的検討	分子科学研究所	飯野 亮太

高周期 14 族元素を含む化合物の構造物性理論計算
 π 共役拡張型有機材料の探索に関する理論計算
 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
 CNT 合成に用いられる酸化遷移金属クラスターの反応性解析
 Multi-Scale Modeling of Interstellar Radical Species on Water Ice

イオン液体のダイナミクスと輸送物性の研究
 発光性金属クラスターの電子状態の解明
 クラスレートハイドレートのカージ構造における各種ゲストとホストとの相互作用の評価
 分子の非断熱電子動力学とその応用
 時間依存断熱法を用いた強レーザー場中の H_2O の第一原理分子動力学計算
 鎖状分子からなる溶媒中の球状分子および球状分子からなる溶媒中の鎖状分子の拡散挙動
 結晶および溶融 CaO-SiO_2 における $(\text{SiO}_4)^{2-}$ 錯体の局所構造と安定性
 高濃度電解液におけるイオン輸送特性の理論的解析
 カチオン性ゲルミリン錯体と不飽和有機化合物との反応の機構研究
 計算化学的手法を用いた有機合成反応の機構解明
 新しい不斉触媒創成研究
 機械学習を用いた脳機能画像解析
 分子分光と CFD を融合した革新解析技術開発
 高分子鎖の機械的伸長と破断の研究
 Localization of Electrons in TiO_2 Electrodes

チモールブルーの構造解析
 量子・古典的手法を駆使した大規模複雑系への挑戦
 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
 Flood-Filling Networks (FFNs) を使った電顕データセットの自動全構造 3 次元再構築
 π 電子系化合物の立体配座および分子内相互作用におけるエネルギーの解析
 エポキシポリマー中の非共有相互作用の計算的研究
 超多色バイオイメージングのためのラマンタグ設計
 分子動力学計算による高接着蛋白質の水中接着メカニズムの解明
 配位子構造の最適化による高活性遷移金属触媒の合成

首都大学東京大学院都市環境科学研究科
 東京都立産業技術研究センター
 兵庫県立大学大学院生命科学研究科
 東京大学大学院工学系研究科
 北海道大学低温科学研究所

名古屋大学大学院工学研究科
 立教大学理学部
 産業技術総合研究所

京都大学福井謙一記念研究センター
 東京大学大学院理学系研究科
 新潟大学理学部

大阪大学大学院工学研究科
 東京大学大学院工学系研究科
 東北大学大学院理学研究科
 慶應義塾大学薬学部
 名古屋工業大学工学部
 生理学研究所
 徳島大学大学院社会産業理工学研究部
 北海道大学大学院生命科学院
 東京工業大学理学院

弘前大学教育学部
 東京大学大学院総合文化研究科
 東京工業大学理学院
 生理学研究所

杏林大学保健学部
 産業技術総合研究所

東京大学大学院理学系研究科
 名古屋大学大学院工学研究科
 相模中央化学研究所

瀬 高 渉
 小 汲 佳 祐
 太 田 雄 大
 丸 山 茂 夫
 W. M. C. Sameera
 山 口 毅
 新 堀 佳 紀
 神 裕 介

山本憲太郎
 高 翔
 大 鳥 範 和

鈴木 賢紀
 渡部絵里子
 渡 邊 孝 仁
 東 林 修 平
 中 村 修 一
 近 添 淳 一
 出 口 祥 啓
 松 田 昂 大
 Juhasz Gergely
 島 田 透
 横 川 大 輔
 石 田 豊
 窪 田 芳 之

田 中 薫
 Pradeep Varadwaj
 平松光太郎
 鈴木 淳巨
 長 岡 正 宏

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～'11		'12		'13		'14		'15		'16		'17		'18		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	109	920	1	21	2	27	1	11	2	32	2	30	1	8	2	20	人数： 登録人数
協力研究	4,174	6,466	123	329	64	183	64	206	62	205	82	246	73	229	45	151	〃
所長 招へい	4,528	4,528	93	93	156	156	103	103	128	128	80	80	100	100	83	83	人数： 旅費支給者
研究会	339	5,786	10	207	10	254	6	162	11	195	7	151	10	201	10	136	〃
若手研究活動 支援（若手研 究会等）	4	47	1	19	1	21	2	38	1	16	1	14	2	41	1	21	〃
岡崎コンファ レンス	—	—	1	29	1	18	1	34	1	21	3	115	0	0	1	34	〃
施設利用 I	2,151	4,961	60	254	41	105	44	191	20	52	2	6	2	6	3	9	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)	5,267	17,799	190	813	204	786	199	751	235	844	221	813	236	914	247	969	〃
協力研究 (ナノプラット)	525	1,158	15	51	52	123	63	147	64	174	75	144	69	154	45	108	人数： 登録人数
施設利用 (ナノプラット)	296	746	52	150	132	378	174	453	197	618	196	493	185	554	255	402	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	17,588	41,608	546	1,966	663	2,051	657	2,096	721	2,285	669	2,092	678	2,217	692	1,933	

* 施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用（'18 年度の数値は、2019.1.15 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。
 * 合計には招へい協力研究を含む。

分子科学研究所 UVSOR 共同利用研究実施一覧

年度 項目	'85～'11		'12		'13		'14		'15		'16		'17		'18		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	
施設長 招へい	19	19	6	6	1	1	1	1	1	1	3	3	4	4	1	1	人数： 旅費支給者
研究会	46	826	4	63	1	37	1	37	1	30	1	41	1	43	1	30	〃
施設利用	3,257	15,818	136	706	142	732	125	649	119	732	142	762	160	867	211	1,047	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	3,744	18,267	146	775	144	770	127	687	121	763	146	806	165	914	213	1,078	

* 合計には課題研究、協力研究、招へい協力研究を含む。（'18 年度の数値は、2018.12.31 現在）

3-4 国際交流と国際共同研究

3-4-1 外国人客員部門等及び国際交流

分子科学研究所では、世界各国から第一線の研究者を招き外国人研究職員として雇用したり、各種の若手研究者育成プログラムを活用し、諸外国から若手の研究者を受け入れて研究活動に参画させるなど、比較的長期間にわたる研究交流を実施している。また、当研究所で開催される国際研究集会等に参加する研究者や、研究現場、施設・設備の視察に訪れる諸外国行政機関関係者等、多くの短期的な訪問も受けて活発な国際交流が行われている。

表1 外国人研究者数の推移（過去10年間）

（単位：人）

年度	長期滞在者			短期滞在者		
	外国人研究職員	日本学術振興会招へい外国人研究者	特別協力研究員等	研究会	訪問者	合 計
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
16	0	2	7	50	112	171
17	2	1	8	9	109	129
合計	24	31	245	228	1,242	1,770

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
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
16	14	2	27	20	16	15	1	76	171
17	8	1	14	13	7	20	2	64	129
合計	156	41	148	174	260	333	11	647	1,770

表3 海外からの研究者（2018年度）

1. 外国人運営顧問			
LIST, Benjamin	ドイツ	マックスプランク石炭研究所所長	
UMBACH, Eberhard	ドイツ	工学アカデミー会員, カールスルーエ工科大学元学長	
2. 日本学術振興会招へい外国人研究者等			
FRITZ, Torsten	ドイツ	Friedrich Schiller University Jena 教授	'18. 9. 2-'18. 9.29
SCHAAL, Maximilian	ドイツ	Friedrich Schiller University Jena 大学院生	'18. 6.12-'18. 8.22
METZGER, Christian	ドイツ	University of Würzburg 大学院生	'18. 6.12-'18. 8.22
3. 国際共同研究			
MARGUET, Bastien	フランス	高等師範学校 パリサクレ校大学院生	'17. 9.27-'18. 8.15
VU, Anna	ドイツ	ベルリン自由大学大学院生	'17.11. 3-'18. 9.30
JUNKAEW, Anchalee	タイ	National Nanotechnology Center 博士研究員	'18. 4. 1-'18. 6.30
NAMUANGRUK, Supawadee	タイ	National Nanotechnology Center, Senior Researcher	'18. 4. 1-'18. 5. 2
PERROT, Armand	フランス	国立パリ 高等化学学校学生	'18. 4. 2-'18. 8.30
PI, Jaseela	インド	Government Arts and Science College for Women 学生	'18. 4. 2-'18. 5. 2
CASSOURET, Florent	フランス	国立パリ 高等化学学校大学院生	'18. 4. 2-'18. 8.30
VIGNON, Paul	フランス	国立パリ 高等化学学校大学院生	'18. 4. 3-'18. 8.30
DAUGAS, Louise	フランス	国立パリ 高等化学学校大学院生	'18. 4. 4-'18. 8.30
TONIOLO, Paul	フランス	国立パリ 高等化学学校大学院生	'18. 4. 4-'18. 8.30
DE MONTGOLFIER, Jean-Vincent	フランス	国立パリ 高等化学学校大学院生	'18. 4. 4-'18. 8.30
NAM, Yeonsig	韓国	成均館大学大学院生	'18. 4. 9-'18. 7. 5
MANDAL, Niladri Shekhar	インド	Indian Institute of Science Education and Research, Kolkata 学生	'18. 5. 6-'18. 7. 1
BOORLA, Veda Sheersh	インド	Indian Institute of Technology Kharagpur 学生	'18. 5. 7-'18. 7.15
DAS, Soumik	インド	Indian Institute of Science Education and Research, Kolkata 学生	'18. 5.10-'18. 8.12
AMSALEM, Patrick	ドイツ	Humboldt Universität zu Berlin 研究員	'18. 5.25-'18. 6. 1
PARK, Soohyung	ドイツ	Humboldt Universität zu Berlin 研究員	'18. 5.25-'18. 6. 1
SCHULTZ, Thorsten	ドイツ	Humboldt Universität zu Berlin 研究員	'18. 5.29-'18. 6. 1
ISMAIL, Mostafa	フィンランド	オウル大学研究員	'18. 6. 4-'18. 6.10
PATANEN, Minna	フィンランド	オウル大学研究員	'18. 6. 4-'18. 6.10
			'18. 8.21-'18. 8.26
WIYADA, Saennawa	タイ	Suranaree University of Technology 学生	'18. 6.14-'19. 6.30
JUNG, Woobeen	韓国	Seoul National University 大学院生	'18. 6.25-'18. 7. 7
KIM, Younsik	韓国	Seoul National University 大学院生	'18. 6.25-'18. 7.14
FELDBACH, Eduard	エストニア	University of Tartu, Senior Research Fellow	'18. 6.30-'18. 7.16
MA, Jun	中国	中国科学技術大学大学院生	'18. 7. 8-'18. 7.14
CHO, Soohyun	韓国	Yonsei University 大学院生	'18. 7. 9-'18. 7.14
CHUANG, Cheng-Hao	台湾	Academia Sinica 助教	'18. 7. 9-'18. 7.14
HSU, Wei-Hao	台湾	Academia Sinica 研究員	'18. 7. 9-'18. 7.14
HWANG, Ing-Shouh	台湾	Academia Sinica 主任研究員	'18. 7.11-'18. 7.14
CEOLIN, Denis	フランス	Synchrotron SOLEIL 研究員	'18. 8. 6-'18. 8.11
KLAIPHET, Kanchanasuda	タイ	Suranaree University of Technology 大学院生	'18. 8. 6-'18. 8.11
SAISOPA, Thanit	タイ	Suranaree University of Technology 大学院生	'18. 8. 6-'18. 8.11
LAI, Yu Ling	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 研究員	'18. 8. 7-'18. 8.12
SHIU, Hung Wei	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 研究員	'18. 8. 7-'18. 8.12
YU, Li Chung	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 研究員	'18. 8. 7-'18. 8.12
FLESCHE, Roman	ドイツ	ベルリン自由大学研究員	'18. 9. 9-'18. 9.14
RUEHL, Eckart	ドイツ	ベルリン自由大学教授	'18. 9. 9-'18. 9.14
SRISA, Jakkrit	タイ	チュラロンコン大学大学院生	'18. 9.17-'19. 1.31
AWAG, Tadsanee	タイ	カセサート大学大学院生	'18. 9.17-'19. 3.17
CHAIBUTH, Pawittra	タイ	チュラロンコン大学大学院生	'18. 9.18-'19. 3.17
RUNGNIM, Chompoonut	タイ	National Nanotechnology Center 研究員	'18. 9.18-'18.12.14
KONGSEMA, Mesayamas	タイ	カセサート大学講師	'18. 9.21-'19. 3.20
THAVORNISIN, Nopparat	タイ	チュラロンコン大学博士研究員	'18.10. 6-'18.11.20
REN, Jian	ドイツ	Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie 研究員	'18.10. 6-'18.10.14

KERDPOL, Khanittha	タイ	Chiang Mai University 大学院生	'18.10.22-'18.11.26
MOHAMAD ZAKARIA, Siti Mastura Binti	マレーシア	マラヤ大学大学院生	'18.11. 1-'19. 4.29
LEE, Kee Pui	マレーシア	マラヤ大学大学院生	'18.11. 1-'19. 4.29
LEELADEE, Pannee	タイ	チュラロンコン大学講師	'18.12. 5-'18.12.28
YAO, Jiabin	中国	四川大学大学院生	'18.12. 6-'18.12.14
STEFFEN, Duhm	中国	Soochow University 教授	'18.12. 9-'18.12.16
ZHAI, Tianshu	中国	Soochow University 大学院生	'18.12. 9-'18.12.16
YANG, Jiacheng	中国	Soochow University 大学院生	'18.12. 9-'18.12.16
4. 所長招へい協力研究員			
MIKHAILOV, Alexander	ドイツ	Fritz Haber Institute of the Max Planck Society 教授	'18. 5.17-'18. 5.19
TAO, Franklin	アメリカ	University of Kansas 教授	'18. 7.17-'18. 7.17
GRYN'OVA, Ganna	スイス	Lab. for Computational Molecular Design 博士研究員	'18.10. 6-'18.10.10
ASPURU-GUZI, Alan	カナダ	University of Toronto 教授	'18.11.28-'18.11.28
CRUDDEN, Cathleen	カナダ	Queen's University Department of Chemistry 教授	'19. 1.18-'19. 1.19
NAGAOKA, Yasutaka	アメリカ	Broun University Chemistry Department 博士研究員	'19. 1.22-'19. 1.27
5. 招へい研究員			
TIRUMALASETTY, Mahesh	インド	IISER Kolkata 大学院生	'18. 4. 1-'18. 4. 8
SUBRAMANIAM, Jeevithra	マレーシア	マラヤ大学大学院生	'18. 4. 1-'18. 4.30
MAKMUANG, Sureerat	タイ	チュラロンコン大学大学院生	'18. 4. 1-'18. 4.30
KIM, Kyoung-Hoon	韓国	Korea University 大学院生	'18. 4. 2-'18. 4. 6
森本高裕	アメリカ	University of California 博士研究員	'18. 6.17-'18. 6.18
ABEDIN, Kazi	オマーン	Sultan Qaboos University 准教授	'18. 7.21-'18. 9. 1
DE LESELEUC, Sylvain	フランス	Institut d' optique Graduate School 大学院生	'18. 7.26-'18. 7.27
BHARTI, Vineet	インド	Indian Institute of Science 研究員	'18. 7.28-'18. 8. 6
LORENZ FONFRIA, Victor	スペイン	University of Valencia, Senior Researcher	'18. 7.30-'18. 8. 3
ZHAO, Xiang	中国(香港含む)	Xi'an Jiaotong University 教授	'18. 8. 1-'18. 9. 1
NAAMAN, Ron	イスラエル	Weizmann Institute of Science 教授	'18. 8. 2-'18. 8. 5
HAGAN, David	アメリカ	University of Central Florida 教授	'18. 8. 6-'18. 8. 7
本谷友作	オランダ	Vrije Universiteit Amsterdam 研究員	'18. 9. 5-'18. 9. 6
SIMON, Damien	フランス	国立パリ 高等化学学校大学院生	'18.10. 1-'18.11.30
LEE, Sze Koon	マレーシア	マラヤ大学大学院生	'18.10. 1-'18.10.31
AVARVARI, Naricis	フランス	CNRS-University of Angers, Director of research	'18.10.28-'18.10.30
KHEK-CHIAN, Tham	シンガポール	Institute of Medical Biology 博士研究員	'18.11.18-'18.11.20
CHINSIRIKUL, Wannee	タイ	National Nanotechnology Center, Executive Director	'18.11.21-'18.11.23
RUKTANONCHAI, Uracha	タイ	National Nanotechnology Center, Deputy Executive Director	'18.11.21-'18.11.23
SUWAN, Benyapa	タイ	National Nanotechnology Center, Manager	'18.11.21-'18.11.23
TAPANEEYAKORN, Satita	タイ	National Nanotechnology Center, Researcher	'18.11.21-'18.11.23
SAPCHAROENKUN, Chaweewan	タイ	National Nanotechnology Center, Researcher	'18.11.21-'18.11.23
IEMPRIDEE, Tawin	タイ	National Nanotechnology Center, Researcher	'18.11.21-'18.11.23
SENNAROGLU, Alphan	トルコ	Koc University 教授	'18.11.25-'18.12. 1
小出明広	フランス	Universite de Rennes 博士研究員	'18.12.03-'18.12.03
AHN, Hyo Yong	韓国	Seoul National University 大学院生	'19. 1.13-'19. 1.31

表4 国際交流協定締結一覧

相手方機関名	国名	協定書等名	主な内容	締結年月日	有効期限	相手方署名者	機 構 署名者
中国科学院 化学研究所	中国	分子科学における日・中共同 研究プロジェクト覚書	共同研究（物質分子科学、光 分子科学、理論計算分子科学）	2013. 9. 6	2018. 9. 5	化学研究所長	所長
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）	2017. 1.12	2020. 1.11	所長	所長
韓国化学会 物理化学ディビ ジョン	韓国	分子科学研究所と韓国化学会 物理化学ディビジョンとの日 韓分子科学合同シンポジウム に関する覚書	日韓の分子科学分野の先導 的研究者が集まるシンポジ ウムを定期的に開催し、両国 の分子科学の発展に資する	2018.10.22	2022.10.21	物理化学ディ ビジョン長	所長
フランス国立パ リ高等化学学校	フラン ス	自然科学研究機構分子科学 研究所とフランス国立パリ 高等化学学校との分子科学 分野における共同研究に関 する覚書	情報交流、共同研究、研究 交流、会議、シンポジウム、 セミナーへの研究者派遣	2014.10.23	2019.10.22	校長	所長
インド科学教育 研究所コルカタ 校	イン ド	自然科学研究機構分子科学 研究所とインド科学教育研 究所コルカタ校との分子科 学分野における共同研究に 関する覚書	分子科学分野における学術 交流及び共同研究等の実施	2015.10. 7	2019.10. 6	校長	所長
インド科学研 究所	イン ド	自然科学研究機構分子科学 研究所とインド科学研究所 との分子科学分野における 共同研究に関する覚書	分子科学分野における学術 交流及び共同研究等の実施	2015.10. 7	2019.10. 6	事務局長	所長
物質エネルギー ヘルムホルツベ ルリンセンター 及びベルリン自 由大学	ドイ ツ	物質エネルギーヘルムホル ツベルリンセンター（HZB）、 ベルリン自由大学（FUB）、 及び分子科学研究所（IMS） の間の分子科学分野におけ る独日共同研究プロジェクト に関する覚書	分子科学分野における学術 交流及び共同研究等の実施	2016. 6.30	2019. 6.20	研究担当所長、 財務・事務担 当所長（物質 エネルギーヘ ルムホルツベ ルリンセン ター）、 学長（ベルリ ン自由大学）	所長
韓国高等科学技 術院 自然科学部	韓国	分子科学研究所と韓国高等 科学技術院自然科学部との 分子科学分野における共同 研究に関する覚書	共同研究（情報交換、研究者 交流、セミナー等の開催）	2016. 9.23	2020. 9.22	自然科学部長	所長
タイ国立ナノテ クノロジー研究 センター	タイ	自然科学研究機構分子科学 研究所とタイ国立科学技術 開発庁ナノテクノロジー研 究センターとの分子科学分 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	2017.10.30	2022.10.29	所長	所長
成均館大学	韓国	自然科学研究機構分子科学 研究所と成均館大学化学科 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	2018. 4. 1	2022. 3.31	化学科長	所長
オウル大学	フィン ランド	自然科学研究機構分子科学 研究所とオウル大学との学 術連携に関する覚書	放射光施設における分子科 学分野の学術推進と共同研 究の実施	2018. 5.14	2021. 5.13	学長	所長
国立交通大学	台湾	自然科学研究機構分子科学 研究所と国立交通大学理学部 との学術連携に関する覚書	学術交流及び共同研究等の 実施	2018. 6. 1	2023. 5.31	理学部長	所長
ペーター・グリュ ンベルグ研究所	ドイ ツ	ユーリヒ総合研究機構ペー ター・グリュンベルグ研究所 と自然科学研究機構分子科 学研究所との間の分子・材料 科学における共同研究プロ ジェクトに関する覚書	放射光施設における分子科 学分野の学術推進と共同研 究の実施	2018.10. 1	2023. 9.30	所長	所長

(2018.12.31 現在)

3-4-2 岡崎コンファレンス

分子科学研究所では、1976年（1975年研究所創設の翌年）より2000年まで全国の分子科学研究者からの申請を受けて小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」を年2～3回、合計65回開催し、それぞれの分野で世界トップクラスの研究者を数名招へいし、情報を相互に交換することによって分子科学研究所における研究活動を核にした当該分野の研究を国際的に最高レベルに高める努力をしてきた。これは大学共同利用機関としての重要な活動であり、予算的にも文部省から特別に支えられていた。しかし、1997年以降、COEという考え方が大学共同利用機関以外の国立大学等にも広く適用されるところとなり、大学共同利用機関として行う公募型の「岡崎コンファレンス」は、予算的には新しく認定されるようになったCOE各機関がそれぞれ行う独自企画の中規模の国際シンポジウムの予算に切り替わった。これに伴い、分子科学研究所主催で「岡崎COEコンファレンス」を開催することになった。一方、所外の分子科学研究者は分子科学研究所に申請するのではなく、所属している各COE機関から文部省に申請することになった。しかし、「岡崎コンファレンス」では可能であった助手クラスを含む若手研究者からは事実上提案できなくなるなど、各COE機関が行う中規模国際研究集会は小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」が果たしてきた役割を発展的に解消するものにはなり得なかった。その後、COEは認定機関だけのものではないなどの考えからいろいろなCOE予算枠が生み出され、その中で国際研究集会は、2004年からの法人化に伴い日本学術振興会において一本化され、全国的に募集・選考が行われることになった。ただし、この枠はシリーズになっている大規模国際会議を日本に誘致したりする際にも申請できるなど、公募内容がかなり異なっている。一方、法人化後、各法人で小～中規模の国際研究集会が独自の判断で開催できるようになり、分子科学研究所が属する自然科学研究機構や総合研究大学院大学でその枠が整備されつつある。ただし、所属している複数の機関がお互い連携して開催するのが主たる目的となっている。

以上のように、全国の分子科学研究者からの申請に基づく「岡崎コンファレンス」を引き継ぐような小規模国際研究集会の枠組みをこれまで探索してきたが、継続的に開催していくためには分子研独自の事業として運営費交付金を使うしか方策がないことがわかった。その検討結果を受けて、「岡崎コンファレンス」を再開することを決断し、平成18年度に6年半ぶりに第66回岡崎コンファレンスを開催した。また平成19年度から平成23年度までは公募方式によって課題を募集し、毎年1件を採択して開催した。平成24年度開催の岡崎コンファレンスからは、応募の方式を見直し、分子研研究会等、他の共同研究と同時期に募集を行い、審査についても共同研究専門委員会で行うこととした。これに伴い、年度当り複数件の開催も、予算状況等により可能となる。平成30年度は下記の岡崎コンファレンスを開催した。

会 議 名： 第79回岡崎コンファレンス

“Synthetic, Biological, and Hybrid Molecular Engines”

期 間： 2018年8月31日（金）～9月2日（日）

場 所： 岡崎コンファレンスセンター

組織委員： 金原 数（東京工業大学）、飯野亮太（分子科学研究所）

内 容：

外部エネルギーを受け取ることで機械的な構造変化を起こし、これを利用して別の形のエネルギーへと変換する分子機械を「発動分子（Molecular Engines）」と名付け、発動分子を構築するための基礎学理を確立することを目標としている新学術研究領域「発動分子科学」が2018年度に採択された。本コンファレンスでは、これまで異分野として

発動分子の研究に従事してきた合成化学，分子生物学，生物物理学，ソフトマター物理学，計測科学等の国内外のエキスパートが一堂に会し，「人工分子と生体分子に共通する作動原理は何か」「人工分子と生体分子のサイズの違いはその特性にどのような制限を与えるか」「両者の利点を生かした人工・生体ハイブリッド分子をいかに構築するか」等，熱のこもった議論が展開された。

基調講演者として海外から 7 名，国内から 2 名，また招待講演者として国内から 22 名が参加し口頭発表を行った。さらにポスター発表は 51 件，聴講者も含む参加者は総勢で 107 名（うち所内 16 名）と，規模の大きなコンファレンスとなった。

以下に招待講演者を挙げる。

Keynote Speakers（海外）

Zev BRYANT (Stanford University)

Oscar CES (Imperial College London)

Jong Hyun CHOI (Purdue University)

Yifei ZHANG (Columbia University)

Ivan HUC (Ludwig-Maximilians-University)

Gwénaél RAPENNE (Nara Institute of Science and Technology/Universite Paul Sabatier, Toulouse)

Possu HUANG (Stanford University)

Keynote Speakers（国内）

Akira HARADA (Osaka University)

Toshikazu TAKATA (Tokyo Institute of Technology)

Invited Speakers

Jun ANDO (Institute for Molecular Science)

Holger FLECHSIG (Kanazawa University)

Ken'ya FURUTA (National Institute of Information and Communications Technology)

Mitsunori IKEGUCHI (Yokohama City University)

Keiichi INOUE (University of Tokyo)

Yoshiyuki KAGEYAMA (Hokkaido University)

Akira KAKUGO (Hokkaido University)

Kazushi KINBARA (Tokyo Institute of Technology)

Takahiro KOSUGI (Institute for Molecular Science)

Tomomi KOSHIYAMA (Ritsumeikan University)

Yusuke MAEDA (Kyushu University)

Takeshi MURATA (Chiba University)

Akihiko NAKAMURA (Institute for Molecular Science)

Waka NAKANISHI (National Institute for Materials Science)

Atsushi SHISHIDO (Tokyo Institute of Technology)
 Kazunori SUGIYASU (National Institute for Materials Science)
 Tsuyoshi TERAOKA (Kyoto University)
 Takayuki UCHIHASHI (Nagoya University)
 Takafumi UENO (Tokyo Institute of Technology)
 Rikiya WATANABE (University of Tokyo)
 Shin-ichiro M. NOMURA (Tohoku University)

以下にプログラムを示す。

August 31st, 2018 (Friday)

- | | | |
|-------|---------------------------------------|--|
| 8:30 | Registration desk open | |
| 9:20 | Opening remark | Maki KAWAI (Director General, Institute for Molecular Science) |
| 9:30 | Introductory talk | Ryota IINO (Institute for Molecular Science)
Molecular engines: An introduction |
| 9:40 | Keynote talk 1 | Gwénaél RAPENNE (Nara Institute of Science and Technology/Universite Paul Sabatier, Toulouse)
Technomimetic nanomachines : Molecular wheels, vehicles, rotors and motors |
| 10:20 | Invited talk 1 | Waka NAKANISHI (National Institute for Materials Science)
Control of flexible molecular machines at interfaces |
| 10:40 | Invited talk 2 | Yoshiyuki KAGEYAMA (Hokkaido University)
Light-powered self-sustained mechanical motion of azobenzene crystal as the resultant of a couple of photoreaction and phase transition |
| 11:00 | Invited talk 3 | Kazunori SUGIYASU (National Institute for Materials Science)
Molecular self-assembly under kinetic control |
| 11:20 | Keynote talk 2 | Akira HARADA (Osaka University)
Cyclodextrin-based supramolecular machines and their integration to macro-scale devices |
| 12:00 | Lunch and Poster Session (Odd number) | |
| 14:00 | Keynote talk 3 | Yifei ZHANG (Columbia University)
Engineering with biomolecular motors and enzyme cascades |
| 14:40 | Invited talk 4 | Akira KAKUGO (Hokkaido University)
Molecular swarm robot driven by biomolecular motors |
| 15:00 | Invited talk 5 | Takayuki UCHIHASHI (Nagoya University)
High-speed atomic force microscopy for direct visualization of biological macromolecules at work |
| 15:20 | Invited talk 6 | Holger FLECHSIG (Kanazawa University)
Towards synthetic molecular machines—computational model studies of mechanical networks |
| 16:20 | Keynote talk 4 | Oscar CES (Imperial College London)
New approaches to artificial cell science |
| 17:00 | Invited talk 7 | Keiichi INOUE (University of Tokyo)
How the light-driven ion pump rhodopsins decide what ion species they transport? |
| 17:20 | Invited talk 8 | Takeshi MURATA (Chiba University)
Further thermostabilization of microbial rhodopsins |
| 17:40 | Invited talk 9 | Mitsunori Ikeguchi (Yokohama City University)
Molecular dynamics simulations of multidrug transporter acrB |
| 18:00 | Free discussion | |
| 18:30 | Speakers dinner @ Uokatsu | |

September 1st, 2018 (Saturday)

- | | | |
|-------|------------------------|--|
| 9:00 | Registration desk open | |
| 9:20 | Keynote talk 5 | Possu HUANG (Stanford University)
Generative modeling for protein structures |
| 10:00 | Invited talk 10 | Jun ANDO (Institute for Molecular Science)
High-speed, high-precision single-molecule imaging of dynein with plasmonic nanoprobe |
| 10:20 | Invited talk 11 | Ken'ya FURUTA (National Institute of Information and Communications Technology)
Re-design of biomolecular motors |

11:00	Invited talk 13	Takahiro KOSUGI (Institute for Molecular Science) Rational design of ATP binding site to understand rotary molecular motor
11:20	Keynote talk 6	Zev BRYANT (Stanford University) Optical control of fast and processive engineered myosins in vitro and in living cells
12:00	Lunch and Poster Session (Even number)	
14:00	Keynote talk 7	Ivan HUC (Ludwig-Maximilians-Universität) Controlling the dynamics of synthetic folded nanoarchitectures
14:40	Invited talk 14	Tomomi KOSHIYAMA (Ritsumeikan University) Control of chemical reactions in liposome environment
15:00	Invited talk 15	Kazushi KINBARA (Tokyo Institute of Technology) Synthetic mimics of transmembrane proteins
15:20	Invited talk 16	Yusuke MAEDA (Kyushu University) Geometric principle in active matters: From bacteria to active cytoskeletons and beyond
16:20	Keynote talk 8	Jong Hyun CHOI (Purdue University) Synthetic molecular motors from DNA
17:00	Invited talk 17	Akihiko NAKAMURA (Institute for Molecular Science) Direct observation of 1 nm steps of a “burnt-bridge” Brownian ratchet <i>SmChiA</i> on crystalline chitin with gold nanoprobe
17:20	Invited talk 18	Tsuyoshi TERAKAWA (Kyoto University) The condensin complex is a new type of DNA molecular motor
17:40	Invited talk 19	Rikiya WATANABE (University of Tokyo) Artificial cell-membrane microsystems for single molecule analysis of membrane proteins
18:00	Free discussion	
18:30	Banquet @ OCC second meeting room	

September 2nd, 2018 (Sunday)

9:00	Registration desk open	
9:20	Keynote talk 9	Toshikazu TAKATA (Tokyo Institute of Technology) Toward linear molecular motor energized by chemical reaction via pseudopolyrotaxane intermediate
10:00	Invited talk 20	Atsushi SHISHIDO (Tokyo Institute of Technology) Molecular alignment control of liquid crystals by scanning wave photopolymerization
10:20	Invited talk 21	Takafumi UENO (Tokyo Institute of Technology) Dynamic process of proteins observed in crystalline cages
10:40	Invited talk 22	Daisuke SUZUKI (Shinshu University) Soft hydrogel microspheres toward autonomic materials
11:00	Invited talk 23	Shinichiro M. NOMURA (Tohoku University) An amoeba-type molecular robot and the beyond
11:20	Closing Remark	Kazushi KINBARA (Tokyo Institute of Technology)
11:30	Lunch (Optional)	
12:30	Lab Tour (Optional)	

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。これまでの開催履歴は一覧表のとおりである。第11回シンポジウム「分子科学の最前線」（分子科学研究所、2005年3月）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。第16回シンポジウムは、当初2015年7月に釜山にて開催予定であったが、時に流行したMERS（中東呼吸器症候群）の懸念により開催が直前に断念され、運営スタッフの交代とともに開催延期となり2017年7月に釜

山にて IBS (Institute for Basic Science) 特別セッションなどを含めた通例より大規模な会議が開催された。次回第 17 回は 2019 年日本にて開催予定で、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。

開催一覧

回	開催年月	主テーマ	開催場所
1	1984 年 5 月	理論化学	分子科学研究所
2	1986 年 5 月	NA	ソウル (韓国)
3	1988 年 6 月	化学反応	分子科学研究所
4	1991 年 3 月	凝縮系の分子科学	ソウル (韓国)
5	1993 年 1 月	分子及び分子集合体の動的過程	分子科学研究所
6	1995 年 2 月	Molecular Science on Solid and Solid Surface	テジョン (韓国)
7	1997 年 1 月	Molecular Spectroscopy of Clusters and Related Compounds	分子科学研究所
8	1999 年 1 月	Molecular Spectroscopy and Theoretical Chemistry	テジョン (韓国)
9	2001 年 1 月	気相, 凝縮相および生体系の光化学過程: 実験と理論の協力的展開	分子科学研究所
10	2003 年 1 月	理論化学と計算化学: 分子の構造, 性質, 設計	浦項工科大学 (韓国)
11	2005 年 3 月	分子科学の最前線	分子科学研究所
12	2007 年 7 月	光分子科学の最前線	済州島 (韓国)
13	2009 年 7 月	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
14	2011 年 7 月	New Visions for Spectroscopy & Computation: Temporal and Spatial Adventures of Molecular Science	釜山 (韓国)
15	2013 年 7 月	Herarchical Structure from Quantum to Functions of Biological System	神戸
16	2017 年 7 月	Frontiers in Molecular Science: Structure, Dynamics, and Function of Molecules and Complexes	釜山 (韓国)

3-5 大学院教育

3-5-1 特別共同利用研究員

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

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

所 属	1977 ～2008	09	10	11	12	13	14	15	16	17	18
北海道大学	12										
室蘭工業大学	2										
東北大学	13						3	3			
山形大学	6				1						
茨城大学			1	1							
筑波大学	2			1							
宇都宮大学	4										
群馬大学	1										
埼玉大学	2										
千葉大学	5							1			
東京大学	37	3	3	1	1					1	3
東京工業大学	42					1	1	3	2	1	
お茶の水女子大学	6										
横浜国立大学	1			1	1						
金沢大学	11										
新潟大学	6										
福井大学	10										
信州大学	4	1	1								1
岐阜大学	2										
静岡大学			2	2							
名古屋大学	93	6	4	11	12	11	9	12	12	9	11
愛知教育大学	1										
名古屋工業大学	17			2	1		3	1			1
豊橋技術科学大学	40										
三重大学	7										
京都大学	45	2			1	1					3
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	27				2	2	1	1		1	
神戸大学	6										
奈良教育大学	1										
奈良女子大学	4										
島根大学	1										
岡山大学	16										
広島大学	38										
山口大学	1										
香川大学											1
愛媛大学	9										
高知大学	2										

九州大学	45			2	1						
佐賀大学	13										
長崎大学	2										
熊本大学	6										
宮崎大学	6										
琉球大学	1										
北陸先端科学技術 大学院大学	6			1							
奈良先端科学技術 大学院大学											1
首都大学東京	20										
名古屋市立大学	30	4	4	2	3	2	2	1	2	2	4
大阪市立大学	4										
大阪府立大学	2										
姫路工業大学	1										
学習院大学	1										
北里大学	2										
慶應義塾大学	9										
上智大学	1										
立教大学					1	1					
中央大学			1								
東海大学	3										
東京理科大学	9										
東邦大学	3										
星薬科大学	1										
早稲田大学	13										
明治大学	1										
名城大学	4										
岡山理科大学	1										
* その他	3	1	1	3	6	6	8	4	1	2	2
計	667	17	17	27	30	24	27	26	17	16	27

* 外国の大学等

3-5-2 総合研究大学院大学二専攻

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

その専攻の概要は次のとおりである。

構造分子科学専攻

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

機能分子科学専攻

物質の持つ多種多様な機能に関して、主として原子・分子のレベルでその発現機構を明らかにし、さらに分子及び

分子集合体の新しい機能の設計，創製を行うことを目的として教育・研究を一体的に行う。新規な機能測定法や理論的解析法の開発を含む機能分子科学の教育・研究指導を積極的に推進する。

大学開設以来の分子科学2専攻の入学人数，学位取得状況等及び各年度における入学者の出身大学の分布等を以下に示す。

担当教員（2018年12月現在） 単位：人

専 攻	教 授	准教授	助 教
構造分子科学専攻	7	6	18
機能分子科学専攻	9	5	21
計	16	11	39

在籍学生数（2018年12月現在） 単位：人 (年度別)

入学年度専攻		2014	2015	2016	2017	2018	計	定 員
構造分子科学専攻	5年一貫	2	1	3	4	9	19	2
	博士後期	1	1	1	1	1	5	3
機能分子科学専攻	5年一貫	0	2	2	5	4	13	2
	博士後期	0	0	3	2	2	7	3

学位取得状況 単位：人 (年度別)

専 攻	1991～2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	107(12)	5	2	2	6	4	2	4	4	6	2	144(12)
機能分子科学専攻	84(14)	3	5	1	3	6	1(3)	3	4	2	0	112(17)

() は論文博士で外数

入学状況（定員各専攻共6） 単位：人 (年度別)

専 攻	1989～2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018
構造分子科学専攻	144(3)	5(3)	5(1)	1(1)	6(2)	5(4)	11(4)	7(3)	6(5)	5(4)	10(9)
機能分子科学専攻	112(3)	7(2)	4(2)	6(2)	8(2)	4	2(1)	4(3)	8(5)	8(5)	6(4)

() は5年一貫で内数 定員は2006年度から各専攻共5年一貫2，博士後期3

外国人留学生数（国別，入学人数） 単位：人

	構造分子科学専攻			機能分子科学専攻		
	1989-2016 年度	2017 年度	2018 年度	1989-2016 年度	2017 年度	2018 年度
中 国	32			12		
フランス				1		
ロシア				1		

バングラディッシュ	6			2		
インド	1			3		1
チェコ				1		
韓国	2					1
ナイジェリア				1		
ネパール	2			3		
フィリピン				2		
ベトナム				2		
タイ	2	1		6	1	
マレーシア	1					
パキスタン		1				
エジプト					1	
カナダ			1			

大学別入学者数 単位：人

大学名等	構造分子科学専攻			機能分子科学専攻			計
	'89～'16年度	'17年度	'18年度	'89～'16年度	'17年度	'18年度	
北海道大学	2	1(1)	1(1)	2			6(2)
室蘭工業大学	1			1			2
東北大学	1		1	2(1)			4(1)
山形大学				3			3
筑波大学	1			1			2
群馬大学				1			1
千葉大学	7(1)			3			10(1)
東京大学	7			9			16
東京農工大学	1						1
東京工業大学	3(3)			3			6(3)
お茶の水女子大学	4			1			5
電気通信大学	1			2			3
横浜国立大学	1						1
新潟大学				1	1(1)		2(1)
長岡技術科学大学	1	1(1)					2(1)
富山大学	1						1
福井大学				1			1
金沢大学	2			4			6
信州大学	3			1			4
岐阜大学				1		1(1)	2(1)
静岡大学	2			1			3
名古屋大学	6(3)	2(2)	2(2)	9(2)			19(9)
愛知教育大学			1(1)				1(1)
名古屋工業大学	1			1(1)	1(1)		3(2)
豊橋技術科学大学	5			3(1)			8(1)
三重大学	1						1
京都大学	16(2)			17			33(2)
京都工芸繊維大学	1			1			2
大阪大学	6(1)			4			10(1)
神戸大学	4			1(1)			5(1)
奈良女子大学				1			1
鳥取大学	1			1			2
岡山大学	4			2		1	7
広島大学	1			3			4

山口大学	1			1			2
徳島大学						1(1)	1(1)
愛媛大学	2			2			4
九州大学	3(1)			2	1		6(1)
佐賀大学				1			1
熊本大学	3(1)						3(1)
鹿児島大学				2(1)			2(1)
琉球大学	1						1
北陸先端科学技術大学院大学	4			3			7
奈良先端科学技術大学院大学	1						1
群馬工業高等専門学校	1(1)						1(1)
奈良工業高等専門学校				1(1)	1(1)		2(2)
宇部工業高等専門学校				1(1)			1(1)
北九州工業高等専門学校	1(1)						1(1)
東京都立大学				3			3
名古屋市立大学				4	1(1)	1(1)	6(2)
大阪市立大学	2						2
大阪府立大学	2			2			4
兵庫県立大学	3(1)			1			4(1)
姫路工業大学	1			1			2
石巻専修大学	1						1
いわき明星大学				1			1
城西大学			1(1)				1(1)
青山学院大学				1			1
学習院大学	4			2			6
北里大学	1		1(1)				2(1)
慶應義塾大学	1			5			6
国際基督教大学				1			1
中央大学	1			1			2
東海大学	1			1			2
東京電機大学	1						1
東京理科大学	4(1)			2(1)			6(2)
東邦大学	1(1)		1(1)	2			4(2)
日本大学				2(1)			2(1)
法政大学	3(1)						3(1)
明星大学	1						1
立教大学	1						1
早稲田大学	3			4			7
神奈川大学	1(1)						1(1)
静岡理工科大学				1			1
名城大学	3		1(1)				4(1)
立命館大学	1			3	1(1)		5(1)
龍谷大学	1						1
関西大学	1					1(1)	2(1)
甲南大学	1						1
岡山理科大学	1			1			2
福岡大学	1(1)						1(1)
放送大学	1						1
*その他	47(3)	1	1(1)	34(4)	2	1	86(8)

*外国の大学等
() は5年一貫で内数

修士生の現職身分別進路（2018年12月現在） 単位：人

現 職 身 分	構造分子科学専攻	機能分子科学専攻	合計
教 授	13	13	26
准教授	20	8	28
講 師	3	2	5
助 教	12	14	26
大学・公的機関等研究職	42	36	78
民間企業	27	18	45
その他	28	22	50
計	145	113	258

3-5-3 オープンキャンパス・分子研シンポジウム

2018年6月15日（金）に、岡崎コンファレンスセンターにおいて分子研シンポジウム2018を開催し、引き続き16日（土）に分子研オープンキャンパス2018を開催した。本事業は全国の大学院生、学部学生及び若手研究者を対象に、分子研で行われている研究内容を分かり易く解説することにより、分子研や総研大への理解を深めていただくことを目的としている。4月からホームページで告知を始め、広報を通してポスターを大学関係者に送付し、掲示を依頼した。分子研シンポジウムは本年度が12回目になる。分子研関係者、総研大卒業生を中心に4名の先生方に講演をお願いした。参加登録者数は、所外からは52名であった（オープンキャンパス・分子研シンポジウムいずれか一方のみを含む）。参加者構成は、学部学生41名、大学院生6名、大学教員及び関連機関2名、民間3名であった。また所内からも多数参加頂いた。

参加者数まとめ

	学部学生	修士課程	博士課程	教員・その他	民 間	合 計
北海道	0	0	0	0	0	0
東 北	0	0	0	0	0	0
関 東	21	3	0	1	2	27
甲信越	0	0	0	0	0	0
北 陸	0	0	0	0	0	0
東 海	8	0	0	0	0	8
近 畿	11	2	1	1	1	16
中国・四国	0	0	0	0	0	0
九州・沖縄	1	0	0	0	0	1
合 計	41	5	1	2	3	52

3-5-4 夏の体験入学

2018年8月7日（火）から10日（金）までの4日間、分子科学研究所において、第15回総研大夏の体験入学を開催した。本事業は、他大学の学部学生・大学院生に対して、実際の研究室での体験学習を通じて、分子科学研究所（総

研大物理科学研究科構造分子科学専攻・機能分子科学専攻）における研究環境や設備，大学院教育，研究者養成，共同利用研究などを周知するとともに，分子研や総研大への理解促進を目的としている。本事業は，総研大本部から「新入生確保のための広報事業」として例年，特定教育研究経費の予算補助を受けており，総研大物理科学研究科の主催行事として2004年から毎年開催している。広く全国の大学に広報活動を行い，参加者を募集したところ，定員を大幅に上回る応募（25名）を受け，選考の結果，21名の学生に参加いただいた。実施スケジュールは以下のとおりである。

8月7日（火）：オリエンテーション，UVSORと計算科学研究センターの見学

交流会

8月8日（水），9日（木）：配属研究室にて研究体験

8月10日（金）：体験内容報告会

参加者の内訳，体験内容，受入研究室は以下の通りである。

	所属	学年	体験内容	対応教員
1	名古屋工業大学	学部3年	金属タンパク質を対象とした研究を体験してみよう	青野 教授
2	大阪市立大学	学部4年		
3	慶應義塾大学	学部2年	タンパク質で生物時計を作ってみよう	秋山 教授
4	東京女子医科大学	学部3年		
5	大阪市立大学	修士1年	タンパク質1分子の動きを観察してみよう	飯野 教授
6	東京工業大学	修士2年		
7	東京大学	学部3年		
8	東京工業大学	学部4年	量子散逸系のダイナミクス理論	石崎 教授
9	愛知工業大学	学部3年		
10	愛知工業大学	学部3年	遷移金属ナノ触媒を作る！	魚住 教授
11	山梨英和大学	学部3年	フロンティア軌道理論と量子化学計算	江原 教授
12	名城大学	学部2年	ボース・アインシュタイン凝縮体のスピン観測実験	大森 教授
13	埼玉大学	学部1年	NMRを用いてタンパク質のかたちと動きを実感する	加藤（晃）教授
14	北海道情報大学	学部4年	有機EL素子の作製と発光測定	平本 教授
15	上智大学	学部2年	金属錯体で学ぶ人工光合成	正岡 准教授
16	城西大学	学部3年		
17	名古屋大学	学部4年		
18	名古屋大学	学部4年	キラル分子を合成し，その機能を探索する	榎山 准教授
19	早稲田大学	学部3年		
20	中部大学	学部2年		
21	東京理科大学	修士2年	有機トランジスタ	山本 教授

3-5-5 総研大アジア冬の学校

2018年12月19日（水）分子科学研究所明大寺地区研究棟において、総研大「アジア冬の学校」が開催された。総研大・物理科学研究科では、研究科内の5専攻で行っている研究・教育活動をアジア諸国の大学院生及び若手研究者の育成に広く供するために、2004年度よりアジア冬の学校を開催してきた。分子研（構造分子科学専攻・機能分子科学専攻）での開催は今回で14回目である。インターンシップ生（IIPA：分子研アジア国際インターンシッププログラム）を中心に、海外の大学からの参加者2名を加え、9名を受け入れた。また、所内からは8名のポスター発表への参加があった。今回は、「分子科学、新分野への挑戦」をテーマに、分子科学の基礎にはじまり、最先端の研究および将来展望が紹介された。当日は、フラッシュトークおよびポスター発表において、所内の総研大生、教員との交流が持たれ盛況であった。講演者は下記のとおりである。

MOMIYAMA, Norie (IMS, SOKENDAI)

“Chiral Organic Molecules—From Basic to Advanced—”

IINO, Ryota (IMS, SOKENDAI)

“Single-Molecule Imaging Analysis of Protein Molecular Motors”

EHARA, Masahiro (IMS, SOKENDAI)

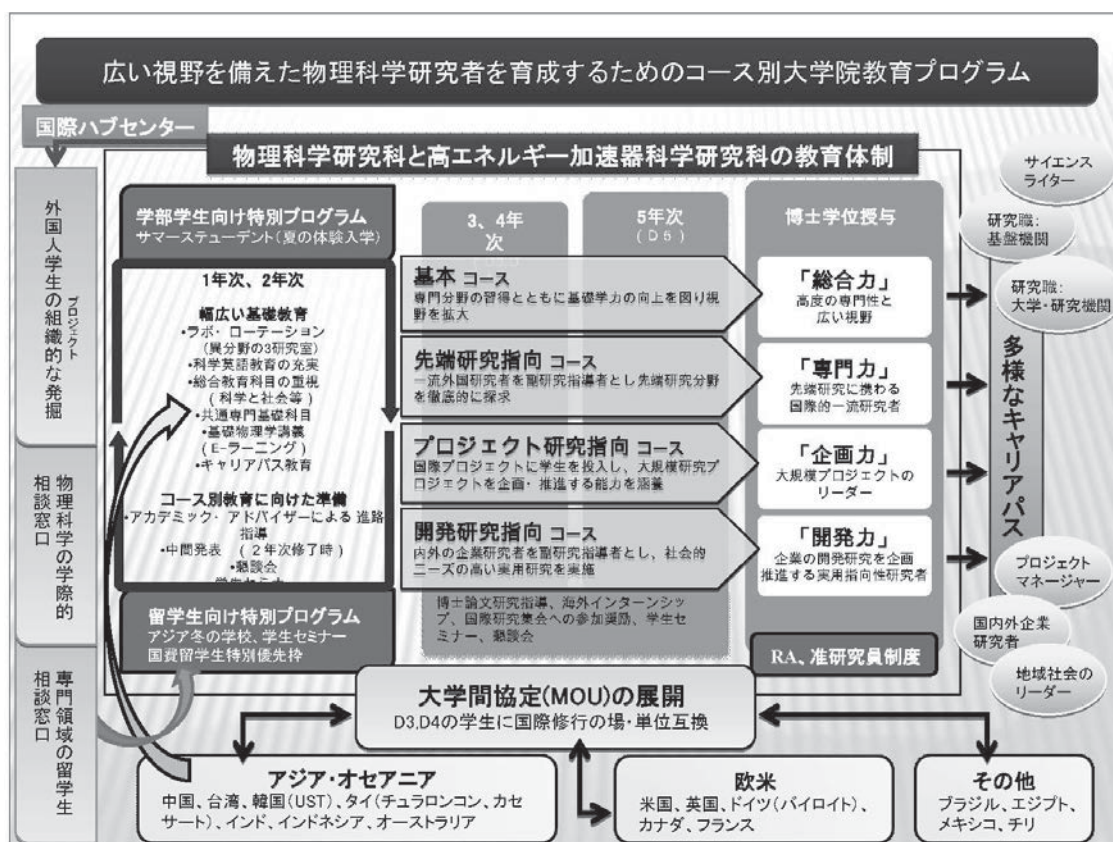
“Element Strategy for Catalysts and Batteries”

3-5-6 広い視野を備えた物理科学研究者を育成するためのコース別教育プログラム

2009～2011年度に文部科学省事業の「組織的な大学院教育改革推進プログラム」として総合研究大学院大学物理科学研究科の大学院教育改革推進プログラム「研究力と適性を磨くコース別教育プログラム」が実施され、分子科学研究所が直接関わる構造分子科学専攻、機能分子科学専攻を含む物理科学研究科では、物理科学の学問分野において高度の専門的資質とともに幅広い視野と国際的通用性を備え、社会のニーズに答えることのできる研究者の育成を目指した大学院教育が行われた。当該プログラムでは、本研究科のこのような教育の課程をさらに実質化し、学生の研究力と適性を磨き、研究者として必要とされる総合力、専門力、企画力、開発力、国際性などを身に付けさせることを目的とした。これを継続する位置づけのものとして2012～2015年度において、特別経費（概算要求）事業「広い視野を備えた物理科学研究者を育成するためのコース別大学院教育プログラム」が実施されている。これにはこれまでの物理科学研究科に加えて高エネルギー加速器科学研究科3専攻が参加している。

上記の目的のため、博士課程前期における大学院基礎教育の充実とともに、博士課程後期におけるコース別教育プログラムを実施している。物理科学研究科及び高エネルギー加速器科学研究科の大学院教育が行われている各基盤機関では、国際的に最先端の研究プロジェクト、大規模研究プロジェクト、企業との開発研究プロジェクトなどが数多く推進されており、本プログラムは、このような優れた研究的環境を最大限に生かした教育の実質化を目指している。最も重要な取り組みは、3カ月程度の国外の最先端研究室等へのインターンシップを体系化し、広い視野と国際性を涵養する取組であり、毎年数名の短期留学を実施している。両研究科所属の各専攻を擁する基盤機関は国内外に分散しており、それゆえに他専攻の授業を受講することは従来困難であった。本プログラムでは両研究科所属の大学院生が幅広い物理科学の素養を得られるべく、複数の研究室を短期間体験するラボ・ローテーションを実施し、また共通専門基礎科目のe-ラーニング化とその積極的活用により専攻間の縦横な授業履修を可能としている。すでに2011年度から分子研所属の構造分子科学専攻、機能分子科学専攻のe-ラーニング授業が配信されている。また学生が主体で企画運営する物理科学学生セミナーなど、積極的な取り組みが行われている。これら以外にも、国内民間企業へのインターンシップ、海外国際会議派遣、英語教育、アジア冬の学校、夏の体験入学、専攻内FD等を本プログラムで実施している。

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



3-5-7 統合生命科学教育プログラム

総研大では文部科学省・特別経費の支援によって、2011年より4年間の予定で分野・専攻横断型の「統合生命科学教育プログラム」を開始し、講義を2011年10月から行っている。2015年度以降は、総研大からの支援を受け、プログラムを継続実施している (<http://ibep.nips.ac.jp/index.html>)。

講義は原則英語で行われ、遠隔地講義配信システムを利用して現地、遠隔地専攻に差がなく受講できるようにしている。本年度は、9科目(①統合生命科学入門、②統合生命科学シリーズ、③統合生命科学実践コース、④イメージング科学、⑤発生生物学Ⅳ、⑥進化ゲノム生物学、⑦生体分子シミュレーション入門、⑧機能生体分子科学、⑨統合進化学)が実施された。2015年度より新設された統合生命科学実践コース(講義と実地演習からなる複合科目)の実地演習時、イメージング科学の講義・演習時では遠隔地の大学院生に対し旅費支援を行い参加可能とした。講義内容とともにサポート面でも充実した科目となった。