

### 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	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～	筑波大学数理工学系 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
ベ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	東京工業大学生命理工学院 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ブ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
ダイヤモンドスピセンサーと近接場光ファイバプローブの結合	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
ダイヤモンドスピセンサーと近接場光ファイバプローブの結合	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	中藪 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ポ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 有機ラジカルの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 $Ba_{1-x}Zr_{1-y}Y_3O_{3-\delta}$ 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 30<sup>th</sup> (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) “Pentanuclear 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 1<sup>st</sup> (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 B<sub>12</sub>-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( $\mu$ -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 15<sup>th</sup> (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-H<sub>2</sub>O 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\_Chuanshan 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 16<sup>th</sup> (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 17<sup>th</sup> (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 $\pi$ 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ベ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 <sub>2</sub> O <sub>3</sub> および Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 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 <sup>+</sup> から Ag <sup>-</sup> 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 <sub>2</sub> 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
Y <sub>3</sub> Fe <sub>5</sub> O <sub>12</sub> 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所	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 <sub>2</sub> 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 <sub>2</sub> 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 <sub>1-x</sub> Se <sub>x</sub> (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 <sub>2</sub> (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
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・ディソ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 <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> 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 <sub>1-x</sub> K <sub>x</sub> Fe <sub>2</sub> As <sub>2</sub> 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 <sub>2</sub> 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ロン光研究センター	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 <sub>2</sub> ) 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科	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 <sub>3</sub> 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 <sub>60</sub> の電子状態解析	筑波大学数理工学系	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	静岡大学大学院工学領域	小南 裕子
NaCl:I-単結晶中における光励起によるAg <sup>+</sup> からAg <sup>-</sup> 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 <sub>3</sub> Fe <sub>5</sub> O <sub>12</sub> 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ピングされたTiO <sub>2</sub> 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
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
ポ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科	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 真希
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 $V_2O_3(0001)$ 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 <sub>2</sub> の表面電子状態の研究	名古屋大学シンクロトン光研究センター	伊藤 孝寛
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	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
角度分解光電子分光による NdFeAs <sub>1-x</sub> P <sub>x</sub> O <sub>0.9</sub> F <sub>0.1</sub> 単結晶の超伝導ギャップの P 濃度依存性	大阪大学大学院理学研究科	宮坂 茂樹
Study on Interaction between Charge Density Wave Collective Modes and Electrons	Korea Advanced Institute of Science and Technology	KIM, Yeong Kwan
Investigating Electronic Structures of the Strained Transition Metal	Seoul National University	KIM, Changyoung
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	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所	桑原 正輝
X[Pt(dmit) <sub>2</sub> ] <sub>2</sub> 塩の e-mv モードの観測と軌道単位の評価	愛媛大学大学院理工学研究科	山本 貴
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	東北大学大学院理学研究科	佐藤 宇史
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	東京理科大学理工学部	中山 泰生
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	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 VI	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 による一軸圧印可された鉄系超伝導体 Ba(Fe <sub>1-x</sub> Co <sub>x</sub> ) <sub>2</sub> As <sub>2</sub> 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 <sub>2</sub> AlC における表面バンド形成メカニズムの解明	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 II	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
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	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪 嘉之
NbSe <sub>2</sub> における電子格子相互作用素過程の研究 (II)	大阪大学産業科学研究科	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	東京大学大学院工学系研究科	金澤 直也
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	石川 遼子
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	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 晋吾
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	大阪大学大学院理学研究科	中島 正道
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
Chemical and Structural Characterization of Ambient Rural Background Aerosol and Complex Laboratory Generated Secondary Organic Aerosol Samples	University of Oulu	PRISLE, Nonne
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	東京大学大学院総合文化研究科	小宮 剛
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	名古屋大学大学院工学研究科	横山 泰範
UVSOR Experiments for the Induction of Molecular Chirality	Sichuan university	YAO, Jiabin
STXM を用いた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
ナノ集光 X 線ビームによる試料損傷メカニズムの解明	理化学研究所放射光科学研究センター	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院

星野 忠次

触媒分子系および生体分子系の量子化学と反応動力学

北海道大学触媒化学研究所

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ベクトル	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
芳香族溶媒と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と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 $\text{CaMn}_4\text{O}_5$ 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 京子
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	リントウルオト正美
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工学物質科学研究科	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科	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 $\pi$ 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
メゾ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科	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工学物質系	松井 亨
新規 $\pi$ 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	宍戸 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解反応の分子機構解明	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
<b>Solving Materials Dilemma of Membrane Electrode Assembly for Optimizing Proton Exchange Membrane Fuel Cells</b>	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刺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
<b>Clarify Oxygen Reduction Mechanism on Lanthanides in Complex Oxides for Application in Solid Oxide Fuel Cells</b>	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 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	東京農工大学大学院工学研究院 茨城大学大学院理工学研究科	坂本 道昭 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 分子内および分子間電子移動の分子軌道法による研究 量子ダイナミクスによる動的物性量の理論的研究 クロコン酸結晶における赤外スペクトルの計算 場の量子論に基づく局所物理量による量子物性の研究 高反応性典型元素化合物の性質の解明 金属錯体に関する理論的研究 タンパク質中 D- アミノ酸残基の起源および機能 4d または 5d 金属を含む多核金属錯体の電子状態 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 化学反応および分子特性に関する理論研究 量子化学と統計力学に基づく複雑化学系の理論的研究 超臨界条件下の疎水性有機分子の水和と反応 微細構造を認識する超分子複合系の構築と構造解析 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 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 アラインなどの歪み分子の反応性に関する理論的考察 キラル超分子集合体の理論的検討 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 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 化学反応の <i>ab initio</i> 計算による研究 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 金属クラスター複合体への分子の吸着と反応 分子シミュレーションによる分子集合体の研究 液体・生体分子および関連分子系の構造・ダイナミクス・分子間相互作用と振動スペクトル アルブミンを用いる化学反応 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 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 光化学反応の制御と応用に関する理論的研究 金属クラスターと小分子の相互作用 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 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 多座リン配位子とその金属錯体の新規機能開発 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 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 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 抗金属錯体抗体の分子認識における構造基盤 振動円二色性分光法の超分子キラリテイへの応用 遅延蛍光材料の励起状態の研究 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 歪んだ多環芳香族化合物の構造と性質 高配位有機典型元素化合物の構造と性質の解明 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 新規機能性 $\pi$ 共役分子の合成と物性に関する研究 四重鎖 DNA とヘムの相互作用の解析 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 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 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 アミロイド線維の分子シミュレーション 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	佐賀大学大学院工学系研究科 神奈川大学理学部 大阪大学大学院基礎工学研究科 高エネルギー加速器研究機構 京都大学大学院工学研究科 名古屋大学大学院工学研究科 静岡理工科大学工学部 名城大学薬学部 岐阜大学工学部 東京工業大学理学院 神奈川大学理学部 京都大学大学院工学研究科 徳島大学大学院社会産業理工学研究部 新潟大学大学院自然科学研究科 東京理科大学理学部 北里大学理学部 東京医科歯科大学生体材料工学研究所 東京大学大学院工学系研究科 甲南大学先端生命工学研究所 北海道大学大学院工学研究院 愛媛大学大学院理工学研究科 東京大学大学院理学系研究科 豊田工業大学クラスター研究室 名古屋文理大学 静岡大学工学部 明星大学理工学部 名古屋工業大学大学院工学研究科 産業技術総合研究所 量子科学技術研究開発機構 東京大学大学院理学系研究科 大阪大学大学院工学研究科 名古屋大学大学院理学研究科 広島大学大学院理学研究科 北里大学理学部 北海道大学大学院工学研究院 理化学研究所 医薬基盤・健康・栄養研究所 愛媛大学大学院理工学研究科 日本工業大学工学部 明治大学理工学部 東邦大学理学部 学習院大学理学部 東京工業高等専門学校 大阪大学大学院基礎工学研究科 筑波大学数理物質系 北海道大学大学院工学研究院 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所	海野 雅司 田仲 二郎 中野 雅由 岩野 薫 瀬波 大土 山下 誠 関山 秀雄 小田 彰史 海老原昌弘 水瀬 賢太 松原 世明 佐藤 啓文 吉田 健 岩本 啓 秋津 貴城 長谷川真士 吉田 優 伊藤 喜光 杉本 直己 佐藤信一郎 長岡 伸一 中村 栄一 市橋 正彦 本多 一彦 鳥居 肇 松本 一嗣 小野 克彦 森下 徹也 黒崎 譲 小安喜一郎 櫻井 英博 永井 哲郎 水田 勉 神谷 昌宏 恵良田知樹 沖野 友哉 秋葉 宏樹 佐藤 久子 大澤 正久 野口 裕 渡邊総一郎 狩野 直和 井手 智仁 清水 章弘 山本 泰彦 島田 敏宏 斉藤 真司 江原 正博 奥村 久士 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
カリウムチャン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
$\pi$ 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 $\beta$ 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部	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科	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	奈良女子大学大学院自然科学系	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- $\pi$ 拡張系として機能するルテニウム-トロボロン錯体	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 $\pi$ 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 $\pi$ 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
$\pi$ 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	首都大学東京大学院都市環境科学研究科	瀬高 渉
$\pi$ 共役拡張型有機材料の探索に関する理論計算	東京都立産業技術研究センター	小汲 佳祐
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
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	東京大学大学院工学系研究科	丸山 茂夫
Multi-Scale Modeling of Interstellar Radical Species on Water Ice	北海道大学低温科学研究所	W. M. C. Sameera
イオン液体のダイナミクスと輸送物性の研究	名古屋大学大学院工学研究科	山口 毅
発光性金属クラスターの電子状態の解明	立教大学理学部	新堀 佳紀
クラスレートハイドレートのケ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	産業技術総合研究所	神 裕介
分子の非断熱電子動力学とその応用	京都大学福井謙一記念研究センター	山本憲太郎
時間依存断熱法を用いた強レーザー場中の H <sub>2</sub> O の第一原理分子動力学計算	東京大学大学院理学系研究科	高 翔
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	新潟大学理学部	大鳥 範和
結晶および溶融 CaO-SiO <sub>2</sub> における (SiO <sub>4</sub> ) <sup>2-</sup> 錯体の局所構造と安定性	大阪大学大学院工学研究科	鈴木 賢紀
高濃度電解液におけるイオン輸送特性の理論的解析	東京大学大学院工学系研究科	渡部絵里子
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	東北大学大学院理学研究科	渡邊 孝仁
計算化学的手法を用いた有機合成反応の機構解明	慶應義塾大学薬学部	東林 修平
新しい不斉触媒創成研究	名古屋工業大学工学部	中村 修一
機械学習を用いた脳機能画像解析	生理学研究所	近添 淳一
分子分光と CFD を融合した革新解析技術開発	徳島大学大学院社会産業理工学研究部	出口 祥啓
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
Localization of Electrons in TiO <sub>2</sub> Electrodes	東京工業大学理学院	Juhasz Gergely
チモールブルーの構造解析	弘前大学教育学部	島田 透
量子・古典的手法を駆使した大規模複雑系への挑戦	東京大学大学院総合文化研究科	横川 大輔
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
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	生理学研究所	窪田 芳之
$\pi$ 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	杏林大学保健学部	田中 薫
エポキシポリマー中の非共有相互作用の計算的研究	産業技術総合研究所	Pradeep Varadwaj
超多色バイオイメージングのためのラマンタグ設計	東京大学大学院理学系研究科	平松光太郎
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	名古屋大学大学院工学研究科	鈴木 淳巨
配位子構造の最適化による高活性遷移金属触媒の合成	相模中央化学研究所	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 )