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者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　共同利用研究

3-1-1　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。

3-1-2　2019 年度の実施状況

(1)　課題研究

課　題　名	提案代表者	
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	
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
機能性材料占有・非占有バンド構造	千葉大学大学院融合科学研究科	吉田　弘幸
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 (IV)	東京理科大学理工学部	中山　泰生
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
マルチドメインタンパク質の動的構造と機能連関の解明	京都大学複合原子力科学研究所	杉山　正明
金属触媒によるアミノベンゼンチオールとジオールを原料とした新規ベンゾチアジン誘導体合成法の開発	山形大学工学部	皆川　真規
フロー合成のための不斉固定化有機触媒の開発	東北大学大学院理学研科化学専攻	林　雄二郎
レクチンナノブロックによる機能性人工タンパク質超分子複合体の設計開発	信州大学繊維学部	新井　亮一
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
垂直入射レーザーコンプトン散乱による円偏光ガンマ線の生成と偏極度測定	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	高嶋　圭史
高効率なスピン偏極電子検出器の開発に向けた表面の化学状態制御法の創出とスピン分解光電子分光技術の確立	東京大学大学院理学系研究科	岡林　　潤

課　題　名（前期）	代　表　者	
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
RISM 理論と分子シミュレーションによる pKa 予測手法の開発	九州大学大学院理学研究院	吉田　紀生
CsK_2Sb カソード基板に用いるグラフェンの加熱洗浄効果の評価	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	郭　　磊
環境調和反応の集積化	九州大学大学院薬学研究院	大嶋　孝志

課　題　名（後期）	代　表　者	
RISM 理論と分子シミュレーションによる pKa 予測手法の開発	九州大学大学院理学研究院	吉田　紀生
階層的多孔構造材料の光触媒機能に関する研究	名古屋大学未来材料・システム研究所	中西　和樹
UVSOR 光電子分光装置の超高性能化に向けての BL6U の実験ステーション，上流分光系，リング光源安定性等の性能把握実験	大阪大学産業科学研究所	菅　　滋正
環状分子膜上の磁性原子による量子スピン格子の作製と電子状態解明	千葉大学大学院工学研究院	山田　豊和
高移動度有機半導体の高配向膜を利用した分子軌道イメージング	筑波大学数理物質系	山田　洋一
トポロジカル絶縁体の圧力誘起超伝導機構の解明にむけた角度分解光電子分光研究	岡山大学異分野基礎科学研究所	久保園芳博
配位子保護金属クラスターの磁性に関する研究	東京大学大学院理学系研究科	高野慎二郎
白金 (111) 面上のナノグラフェンの角度分解光電子分光および共鳴 Auger 電子分光	東京農工大学大学院工学研究院	遠藤　　理
スポット分析型高分解能電子線回折（SPA-LEED）によるツイスト２層グラフェンの構造解析	九州大学大学院工学研究院	田中　　悟
CDW を示す遷移金属カルコゲナイド $NbSe_2$ の光電子角度分布	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎

(3)　研究会

① 【分子研研究会】
マイクロビームアナリシス研究会［放射光による物質の原子レベルイメージング］
2019 年 5 月 21 日（火）～ 22 日（水）　岡崎コンファレンスセンター小会議室

5 月 21 日（火）

13:00 ～ 13:40	招待講演 ◯解良　聡（分子科学研究所） 「有機半導体分子の電子状態の特徴とその局在性の変遷」
13:40 ～ 14:15	招待講演 ◯大東琢治（分子科学研究所） 「UVSOR における走査型透過Ｘ線顕微鏡の応用研究」
14:15 ～ 14:50	◯小川貴志（韓国標準科学研究院），高井義造（大阪大学） 「シリンドリカルレンズを使用した電子顕微鏡用モノクロメータの開発」
14:50 ～ 15:20	休憩・ポスターセッション
15:20 ～ 15:55	招待講演 ◯佐々木裕次（東京大学） 「Ｘ線 1 分子追跡法とその汎用化から生まれた新計測法」
15:55 ～ 16:30	招待講演 ◯松井公佑，唯美津木（名古屋大学） 「オペランド CT-XAFS 法による固体高分子形燃料電池の３次元イメージング」
16:40 ～ 17:50	分子研施設見学
18:00 ～ 20:00	意見交換会

5 月 22 日（水）

9:30 ～ 10:05	◯松井文彦（分子科学研究所） 「共鳴光電子回折と極端紫外光電子分光ビームライン刷新整備計画」
10:05 ～ 10:40	GRMN 構築分科会活動報告 ◯角森史昭（東京大学）ほか 「八代海の海底土壌のラドンとラジウム濃度分布の特徴」
11:20 ～ 11:30	研修セミナー開催報告 ◯北村壽朗（島津製作所）
11:30 ～ 12:00	◯後藤敬典（名古屋工業大学，物質材料研究機構） 「AES・SE の DB と仕事関数の実験的考察その２」

ポスター発表

◯小川貴志（韓国標準科学研究院），高井義造（大阪大学），山澤　雄，川井　聡，毛利　淳，荒井紀明，片根純一，揚村寿英（日立ハイテクノロジーズ）
「シリンドリカルレンズ型モノクロメータの走査型電子顕微鏡への応用」

◯野島　雅（東京理科大学）
「回転電場を用いた水クラスタイオンの連続質量分離」

◯田口達也（浜松ホトニクス）
「マイクロフォーカスＸ線源を用いたＸ線非破壊検査の撮影事例と最新動向」

◯白木　将（日本工業大学）
「表面界面制御・分析技術を活用した全固体電池研究」

◯松井文彦（分子科学研究所）
「UVSOR-III 施設紹介」

② 【分子研研究会】
単分子有機化学の挑戦
2019 年 5 月 28 日（金） 分子科学研究所研究棟 201 号室

13:30-13:40	開会挨拶と趣旨説明 中西和嘉（物質・材料研究機構機能性材料研究拠点 主任研究員）
13:40-14:30	「原子間力顕微鏡を用いた単分子の構造観察と操作」 川井茂樹（物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 主幹研究員）
14:30-15:20	「生物類似表面触媒作用を用いるナノ炭素細線の合成」 坂口浩司（京都大学エネルギー理工学研究所 教授）
15:40-16:30	「走査型トンネル顕微鏡による単一分子化学反応の解析」 数間恵弥子（理化学研究所 Kim 表面界面科学研究室 研究員）
16:30-17:20	「高速高解像度透過電顕を用いた単分子反応速度論解析」 中村栄一（東京大学総括プロジェクト機構・大学院理学系研究科 特任教授）
17:20-17:30	総括 中村栄一（東京大学総括プロジェクト機構・大学院理学系研究科 特任教授）
17:30-18:00	フリーディスカッション，写真撮影
18:30-	意見交換会

③ 【分子研研究会】
化学・情報科学の融合による新化学創成に向けて
2019 年 5 月 30 日（木） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

9:00- 9:10	趣旨説明 山下善之 教授（東京農工大学大学院）
Overview（9:10-10:20）	
9:10- 9:20	佐藤一彦 研究センター長（産業技術総合研究所材料・化学領域触媒化学融合研究センター） 永田賢二 主任研究員（物質・材料研究機構） AI による分野横断型の新しい化学の創成
9:20- 9:40	松原誠二郎 教授（京都大学大学院） 情報科学を活用した化学教育の変革
9:40-10:00	高橋孝志 特任教授（横浜薬科大学） 化学データの戦略的収集と戦略的創出
10:00-10:20	長谷部伸治 特定教授（京都大学国際高等教育院） 情報科学を活用した化学学術・生産の連携システム構築
10:30-11:45	パネルディスカッション 司会　山下善之 教授　（東京農工大学大学院） 松原誠二郎 教授　（京都大学大学院） 君塚信夫 教授　（九州大学大学院） 菅原洋子 名誉教授　（北里大学理学部） 関根千津 取締役副社長　（(株)住化技術情報センター） 茶谷直人 教授　（大阪大学大学院） 上村みどり上席研究員　（帝人ファーマ(株)） 石原　司 主任研究員　（産業技術総合研究所） 高橋孝志 特任教授　（横浜薬科大学） 永田賢二 主任研究員　（物質・材料研究機構） 長谷部伸治 特定教授　（京都大学国際高等教育院） 松原誠二郎 教授　（京都大学大学院） 山下善之 教授　（東京農工大学大学院） 山本浩史 教授　（分子科学研究所）

④ 【分子研研究会】
固体化学フォーラム研究会
2019 年 6 月 10 日（月）～ 11 日（火） 岡崎コンファレンスセンター

6 月 10 日（月）

10:00	開会挨拶	島川 祐一 京大	
10:05	所長挨拶	川合 眞紀 分子研	
Session 1 座長		山本 浩史 分子研	
10:15L1		大坪 主弥 京大	多孔性金属錯体ナノチューブの疎水性空間における超プロトン伝導
10:45L2		草本 哲郎 分子研	開殻π電子系が拓く発光・磁気特性
11:15L3		植村 卓史 東大	錯体ナノ空間で高分子を制御する
Session 2 座長		島川 祐一 京大	
13:00L4		東 正樹 東工大	ビスマス，鉛ペロブスカイトの系統的な電荷分布変化と巨大負熱膨張
13:30L5		関真 一郎 東大	磁気スキルミオンの物質設計
14:00L6		石渡晋太郎 阪大	新しい磁性リン化合物の高圧合成
Session 3 座長		草本 哲郎 分子研	
14:45L7		山本 浩史 分子研	有機強相関トランジスタを用いた物性科学
15:15L8		下谷 秀和 東北大	有機半導体レーザーの開発
Session 4 座長		宮坂 等 東北大	
16:00L9		所 祐子 筑波大	フォノンモード計算を用いた電荷移動型相転移錯体の設計
16:30L10		正岡 重行 阪大	５つの金属イオンが織りなす触媒機能
17:10	ポスター発表（前後半 40 分ずつ）		
18:30	懇親会		

6 月 11 日（火）

Session 5 座長		竹入 史隆 分子研	
9:00L11		解良 聡 分子研	有機半導体の輸送電荷の特徴：光電子分光法による電子状態測定から
9:30L12		石坂 香子 東大	VTe_2 の構造相転移：特異な電子構造と格子ダイナミクス
10:00L13		木内 久雄 京大	operando 硬Ｘ線光電子分光法による全固体電池計測の装置開発と反応解析
Session 6 座長		解良 聡 分子研	
10:45L14		櫻井 敦教 分子研	赤外超高速分光で明らかにする固体酸化物中プロトン伝導メカニズム
11:15L15		平山 雅章 東工大	電極／電解質界面におけるリチウムイオン導電現象
11:45	写真撮影 + ポスター表彰 + 昼食		
Session 7 座長		廣井 善二 東大	
13:00L16		藤田 晃司 京大	層状ペロブスカイト酸化物における酸素八面体回転エンジニアリング：新規強誘電体・圧電体の開拓
13:30L17		大場 史康 東工大	半導体物性の系統的理論予測とデータ駆動型新物質探索
14:00L18		近藤 剛弘 筑波大	ホウ素と水素で構成される二次元物質ホウ化水素シートの特性
Session 8 座長		小林 玄器 分子研	
14:45L19		有田亮太郎 東大	機能反強磁性体のクラスター多極子理論
15:15L20		中山 将伸 名工大	材料シミュレーションによる蓄電池材料の効率探索
15:45	閉会挨拶	廣井 善二 東大	
16:00	ラボツアー希望者		

⑤ 【分子研研究会】
量子位相自由度を用いた新たな機能性分子システムの開拓
2019 年 8 月 5 日（月）～ 6 日（火） 分子科学研究所研究棟 301 号室

8 月 5 日（月）

13:30-14:00 はじめに
山本 浩史（分子研）

第一部：位相の制御

14:00-14:30 「振動ポラリトンを用いた化学反応制御」
香月 浩之（奈良先端大）

14:30-15:00 「ラジカル対の量子制御」
前田 公憲（埼玉大）

15:00-15:30 「テラヘルツ・赤外パルスによる電子分極のコヒーレント制御」
岡本 博（東大）

第二部：励起と位相

16:00-16:30 「電流励起有機半導体レーザー」
安達 千波矢（九大）

16:30-17:00 「有機単結晶 DFB レーザー」
下谷 秀和（東北大）

17:00-17:30 「シフトカレントの欠陥耐性とダイナミクス」
中村 優男（理研）

17:30-18:00 T.B.A.
宮島 大吾（理研）

18:00-18:30 「Topological Aspects of Nonlinear Optical Effects」
森本 高裕（東大）

8 月 6 日（火）

第三部：準位縮退と位相

10:00-10:30 「トポロジカルドメインエンジニアリング」
賀川 史敬（東大）

10:30-11:00 「有機ディラック電子系における量子現象」
田嶋 尚也（東邦大）

11:00-11:30 「単分子膜の構造解析」
若林 裕助（東北大）

11:30-12:00 全体ディスカッション
司会：山本 浩史（分子研）

⑥ 【分子研研究会】
有機ディラック電子系におけるトポロジカル現象と新奇物性開拓
Topological Physics and Organic Massless Dirac Systems
2019 年 8 月 8 日（木）～ 10 日（土） 分子科学研究所研究棟 301 号室

8 月 8 日（木）

13:00-13:10 はじめに
田嶋尚也（東邦大理）

13:10-13:30 α-$(BETS)_2I_3$ と α-$(BEDT\text{-}STF)_2I_3$ の輸送特性
田嶋尚也（東邦大理）

13:30-13:50 α-D_2I_3 (D = ET, STF, BETS) の精密解析による構造物性研究
鬼頭俊介（名大工）

13:50-14:10 第一原理計算による α-$(BETS)_2I_3$ の構造と電子状態
圓谷貴夫（熊本大先導）

14:10-14:30 α-$(BETS)_2I_3$ の ^{13}C NMR
藤山茂樹（理研）

14:30-14:50 α-$(STF)_2I_3$ の構造と物性
内藤俊雄（愛媛大理）

14:50-15:20 ディラック・ワイル・トポロジカル物質の軌道電流に起因する核磁気緩和率
前橋英明（東大理）

15:40-16:05 単一成分分子性結晶におけるノーダルライン半金属
加藤礼三（理研）

16:05-16:25　分子性導体のディラック電子系における電気伝導度
鈴村順三（名大理）

16:25-16:50　ノーダルライン状態の帯磁率
小形正男（東大理）

16:50-17:10　常圧 massless Dirac 電子系候補物質の NMR 研究
関根孝彦（東大工）

17:10-17:30　有機導体 α-$(BEDT\text{-}TTF)_2I_3$ における電子相関効果と温度圧力相図
田中康寛（早稲田理工）

17:30-17:50　有機ディラック系物質における軌道反磁性の観測
鴻池貴子（物材機構）

18:30-　意見交換会

8 月 9 日（金）

9:30- 9:55　Excitonic 相としての電荷秩序
福山秀敏（東理大）

9:55-10:25　強相関系励起子絶縁体の電子状態とスピン軌道相互作用の効果
石原純夫（東北大理）

10:25-10:45　Ta_2NiSe_5 における光誘起エキシトニック絶縁体－金属相転移
宮本辰也（東大新領域）

11:05-11:25　励起子絶縁体 Ta_2NiSe_5 の輸送現象
中埜彰俊（名大理）

11:25-11:55　Ta_2NiSe_5 のエキシトニック相と光誘起半金属相
溝川貴司（早稲田理工）

13:15-13:45　有機ディラック電子系におけるスピン－軌道相互作用と電子相関効果
森成隆夫（京大人環）

13:45-14:05　有機ディラック電子系 α-$(BEDT\text{-}TTF)_2I_3$ における非一様電荷秩序と輸送現象
大木大悟（名大理）

14:05-14:35　第一原理手法を用いたトポロジカル物性と物質開拓
平山元昭（理研 CEMS）

14:35-14:55　An Old Compound: Is It a New Candidate for Dirac Electrons in Organics?
Woun Kang（梨花大）

15:15-15:45　強相関ディラック電子系における量子相転移の臨界性
大塚雄一（理研 RCCS）

15:45-16:15　スピン軌道固体の g 因子とトポロジー：ディラック電子を超えて
伏屋雄紀（電通大）

16:15-16:35　τ 型有機導体におけるディラック電子とトポロジカルギャップ
長田俊人（東大物性研）

16:35-16:45　有機ディラック電子系研究概観
澤　博（名大工）

8 月 10 日（土）

9:30-11:50　所内・所外教員の意見交換会

⑦ 【分子研研究会】
錯体化学に基づく分子の構造変換設計と機能制御
2020 年 3 月 1 日（日）～ 3 月 2 日（月） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

新型コロナウィルス流行に伴い開催中止

(4) 若手研究活動支援

課　題　名	提案代表者	
第 59 回分子科学若手の会夏の学校講義内容検討会	東京大学大学院理学系研究科	小松原　航
分子科学若手の会分野交流若手の研究会：分子科学の未踏領域の探求	東京大学大学院理学系研究科	小松原　航

(5) 岡崎コンファレンス

課　題　名	提案代表者	
キラリティ誘起スピン選択およびその関連現象	分子科学研究所	山本　浩史
先端表面計測の挑戦—実空間・逆空間・実時間における微視的構造とダイナミクスの解明への新展開	Fritz-Haber Institute of the Max-Planck Society	熊谷　崇

(6) UVSOR 施設利用

（前期）

アゾベンゼン含有磁性錯体へ光渦 UV 照射による超分子らせん分子配向誘起	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
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
ペロブスカイト鉛ハライド結晶のテラヘルツ領域偏光反射分光	山形大学理学部	北浦　守
IV 族半導体中の新種不純物中心・格子欠陥の電子状態に関する研究	東北学院大学工学部	原　明人
生体系物質のテラヘルツ分光 III	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
ゼオライトの Al 酸点上 Mo 炭化物触媒活性種の XAFS による構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷　博文
溶解度を制御した水酸アパタイト表面に吸着した微量元素の局所環境解析	大阪府立大学大学院工学研究科	村田　秀信
アルミナに担持されたガリウム酸化物の局所構造解析	大阪市立大学複合先端研究機構	吉田　朋子
高速重イオン照射による Al 系スピネル構造化合物の不規則化	九州大学大学院工学研究院	吉岡　聰
溶液法により作製したペロブスカイト薄膜のエネルギー分解光電子分光測定	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分子ドーピング膜の電子状態と分子配向評価	千葉大学大学院工学研究院	奥平　幸司
脂質二重膜を構成するリン脂質分子の電子状態とイオン濃度依存性	豊橋技術科学大学環境・生命工学系	手老　龍吾
液晶・液体相転移点近傍における臨界ゆらぎの観測	分子科学研究所	岩山　洋士
ビームライン整備	分子科学研究所	長坂　将成
軟 X 線吸収分光法によるタンパク質の元素選択的観測	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
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
軟 X 線吸収分光法で探るグリシンベタイン及びジメチルグリシンの水和	広島大学大学院理学研究科	岡田　和正
ニッケル水分解触媒への炭酸・アミノ酸吸着のオペランド C-K 端 XAFS 観測	山口大学大学院創成科学研究科	吉田　真明
Probing Ion Pairing Effects in Hydrated Carboxylate Ions by Means of Soft X-Rays Absorption Spectroscopy	Synchrotron SOLEIL	CEOLIN, Denis
２次元・変調構造による励起子の増感を利用した真空紫外・極端紫外光の波長変換	秋田大学大学院理工学研究科	小玉　展宏
分子性結晶の相転移とオージェ・フリー発光の温度相関	山形大学理学部	大西　彰正
中性 K 中間子稀崩壊実験のためのシンチレーター類の単一光子計数法による蛍光寿命測定と素材評価	山形大学学士課程基盤教育機構	田島　靖久
新規シンチレータのエネルギー輸送効率とバンド構造の解明	東北大学未来科学技術共同研究センター	黒澤　俊介
深紫外発光アルミン酸亜鉛薄膜の形成過程解明および光学特性の評価	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欠陥形成と構造に伴う変化の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野　正人
時間分解発光法を用いた希土類酸化物における励起子発光の局在化	福井大学学術研究院工学系部門	牧野　哲征
NaCl:I- 結晶における光励起キャリヤの動的振る舞いの解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相　武利
真空紫外吸収分光法による酸化マグネシウム単結晶の欠陥準位の研究	九州シンクロトロン光研究センター	小林　英一
アポトーシスのクロマチン凝集過程における DNA リン酸結合状態の可視化	東北大学多元物質科学研究所	江島　丈雄
STXM による Na イオン電池電極材料の電子状態マッピング	産業技術総合研究所	朝倉　大輔
高活性光触媒材料の STXM による水溶液中での核生成と結晶成長メカニズムの解明	産業技術総合研究所	三石　雄悟
星間有機物の物性理解	東京大学大学院理学系研究科	左近　樹
隕石から探る木星大移動説：ユレイライトの炭素質物質の STXM 分析	横浜国立大学大学院工学研究院	癸生川陽子
STXM による細胞核及び細胞質における定量的分子イメージングの精度向上	東海大学工学部	伊藤　敦
STXM を用いたポリマー材料の配向解析	分子科学研究所	大東　琢治
BL4U 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 (3)	京都工芸繊維大学分子化学系	池田　裕子

地球外物質に含まれる有機物の分子構造を用いた低温の温度変化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	上椙　真之
STXM を用いた未変性炭素質コンドライト中の太陽系初期有機物の発見：その官能基組成から起源に迫る	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とその同位体二次元分布から読み解く地球外有機物の形成環境	海洋研究開発機構高知コア研究所	伊藤　元雄
反応性縮毛矯正剤処理毛髪における局所化学反応の可視化	大分大学理工学部	檜垣　勇次
Oxidation-Sensitive Nanocarriers for Controlled Dermal Drug Delivery	Freie University Berlin	RUEHL, Eckart
Microphysical and Chemical Properties of Soot Particles Upon Aging	University of Gothenberg	KONG, Xiangrui
Interfacial Electronic Structure of Metal-Free Photocatalytic Water Splitting Material	Tamkang University	PONG, Way-faung
High-Pressure Soft X-Ray Microscopy of CO_2 Fluids	Lawrence Berkeley National Laboratory	GUO, Jinghua
Probing the Microscopic Electronic Structures for Developing Flexible/Foldable Supercapacitor	National Synchrotron Radiation Research Center	HSU, Yao-jane
Comprehensive Characterization of Monolithic Polymers by Scanning Transmission X-Ray Microscopy (STMX)	University of South Australia	ARRUA, Dario
BL4B のビームライン光学系の調整・整備	分子科学研究所	岩山　洋士
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 II	富山大学教養教育院	彦坂　泰正
アモルファス半導体の光誘起現象に関する研究	岐阜大学工学部	林　　浩司
エキゾチックノーダル物質におけるフェルミアーク探索	東北大学大学院理学研究科	佐藤　宇史
Rashba スピン軌道相互作用を有する垂直磁化薄膜の角度分解光電子分光	東京大学大学院理学系研究科	岡林　　潤
Fe_2P 単結晶表面上に作成した Ni_2P 薄膜の電子状態	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 $FeTe_{1-x}Se_x$ の電子構造研究	分子科学研究所	出田真一郎
立方晶カイラル化合物 NiSbS の３次元角度分解光電子分光	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤　孝寛
$NdFeAs_{1-x}P_xO_{0.9}F_{0.1}$ 単結晶のホール面における超伝導ギャップの組成依存性	大阪大学大学院理学研究科	田島　節子
異方的金属絶縁体転移物質の顕微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
基板電子状態から独立した単層～数原子層 Bi 超薄膜の電子状態	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪　嘉之
Investigating Electronic Structures of the Strained Transition Metal Dichalcogenide Monolayers	Seoul National University	KIM, Changyoung
波長 100 nm 真空紫外線直入射反射ミラーの開発	東北大学多元物質科学研究所	羽多野　忠
ビームラインミラー角度測定系の開発とフィードバック制御による変動補償	京都大学エネルギー理工学研究所	全　　炳俊
異方的金属絶縁体物質のテラヘルツ偏光顕微分光	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
低エネルギー高分解能 ARPES による新奇トポロジカル超伝導体の開拓	東北大学大学院理学研究科	佐藤　宇史
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 3	東京工業大学理学院	平原　　徹
有機半導体結晶における電子フォノン相互作用による電子状態変調	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
不足ドープ三層系銅酸化物高温超伝導体 Bi2223 の低エネルギー角度分解光電子分光による電子構造の温度変化	分子科学研究所	出田真一郎
層状 MAX 相化合物 V_2AlC におけるディラック半金属的電子状態の研究	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤　孝寛
近藤絶縁体の表面電子構造の面方位依存性	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
角度分解光電子分光法による $NiTe_2$ のタイプ II ディラックコーンの Pd 置換効果及び Ti インターカレーション効果の研究	大阪大学大学院理学研究科	宮坂　茂樹
遷移金属ダイカルコゲナイドの励起エネルギー依存 ARPES	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
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
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
ボロンドープダイヤモンド薄膜の複素屈折率測定 (II)	福井大学学術研究院工学系部門	福井　一俊
複合型複素屈折率測定装置の整備	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および光電子収量分光測定によるバンド構造と再結合過程の解明	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田　早紀
新材料による真空紫外レンズの評価	大阪大学レーザー科学研究所	清水　俊彦
原子核乾板の最小電離粒子に対する感度評価	名古屋大学大学院理学研究科／未来材料・システム研究所	中村　光廣
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
Probing GdFeCo and TbFeCo Ferrimagnetic Amorphous Alloys with X-Ray Absorption Spectroscopy	東京大学物性研究所	松田　　巌

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
環境半導体マグネシウムシリサイド n 型結晶の赤外分光	山形大学理学部	北浦　　守
Ti 添加 III 族窒化物のバンドギャップ狭小の機構解明と人工光合成光電極材料としての最適組成探索	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田　早紀
極紫外光を用いた Na の光学特性に関する研究	日本原子力研究開発機構高速炉・新型炉研究開発部門	河口　宗道
軟X線コヒーレント制御実験へ向けた蛍光検出法の開発	九州シンクロトロン光研究センター	金安　達夫
太陽軟X線撮像分光ロケット実験と衛星計画に向けた CMOS センサーの評価	国立天文台	成影　典之
磁気円二色性を利用した円偏光X線生成のための強磁性合金薄膜の透過X線の評価	分子科学研究所	山本　航平

（後期）

アゾベンゼン含有磁性錯体へ光渦 UV 照射による超分子らせん分子配向誘起	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
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
ペロブスカイト鉛ハライド結晶のテラヘルツ領域偏光反射分光	山形大学理学部	北浦　　守
IV 族半導体中の新種不純物中心・格子欠陥の電子状態に関する研究	東北学院大学工学部	原　　明人
生体系物質のテラヘルツ分光 III	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
ゼオライトの Al 酸点上 Mo 炭化物触媒活性種の XAFS による構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷　博文
溶解度を制御した水酸アパタイト表面に吸着した微量元素の局所環境解析	大阪府立大学大学院工学研究科	村田　秀信
アルミナに担持されたガリウム酸化物の局所構造解析	大阪市立大学複合先端研究機構	吉田　朋子
溶液法により作製したペロブスカイト薄膜のエネルギー分解光電子分光測定	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分子ドーピング膜の電子状態と分子配向評価	千葉大学大学院工学研究院	奥平　幸司
２次元・変調構造による励起子の増感を利用した真空紫外・極端紫外光の波長変換	秋田大学大学院理工学研究科	小玉　展宏
分子性結晶の相転移とオージェ・フリー発光の温度相関	山形大学理学部	大西　彰正
中性 K 中間子稀崩壊実験のためのシンチレーター類の単一光子計数法による蛍光寿命測定と素材評価	山形大学学士課程基盤教育機構	田島　靖久
新規シンチレータのエネルギー輸送効率とバンド構造の解明	東北大学未来科学技術共同研究センター	黒澤　俊介
深紫外発光アルミン酸亜鉛薄膜の形成過程解明および光学特性の評価	静岡大学学術院工学領域	小南　裕子
NaCl:I- 結晶における光励起キャリヤの動的振る舞いの解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相　武利
真空紫外吸収分光法による酸化マグネシウム単結晶の欠陥準位の研究	九州シンクロトロン光研究センター	小林　英一
BL4B のビームライン光学系の調整・整備	分子科学研究所	岩山　洋士
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 II	富山大学教養教育院	彦坂　泰正
アモルファス半導体の光誘起現象に関する研究	岐阜大学工学部	林　　浩司
ビームラインミラー角度測定系の開発とフィードバック制御による変動補償	京都大学エネルギー理工学研究所	全　　炳俊
異方的金属絶縁体物質のテラヘルツ偏光顕微分光	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
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
3d 遷移金属添加 AlN の発光／励起スペクトル測定および光電子収量分光測定によるバンド構造と再結合過程の解明	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田　早紀
原子核乾板の最小電離粒子に対する感度評価	名古屋大学大学院理学研究科／未来材料・システム研究所	中村　光廣
二光子相関によるアンジュレータ光パルスの計測	広島大学放射光科学研究センター	加藤　政博
マイクロ波照射下における有機分子挙動のテラヘルツ分光観察	京都大学化学研究所	高谷　　光
軟X線吸収分光法を用いた有機薄膜／金属酸化物界面電子状態の解析	千葉大学大学院工学研究院	奥平　幸司
有機無機ハイブリッドペロブスカイト $FAMAPbI_3$ に添加した Rb 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と衛星計画に向けた CMOS センサーの評価	国立天文台 SOLAR-C 準備室	成影　典之
軟X線 in situ XAFS 構造解析による白金サブナノ粒子の構成原子数依存の電気化学挙動の解明	東京工業大学科学技術創成研究院	葛目　陽義
脂質二重膜を構成するリン脂質分子の電子状態とイオン濃度依存性	豊橋技術科学大学環境・生命工学系	手老　龍吾
配向膜を用いた液晶分子の分子配列の観測	分子科学研究所	岩山　洋士
軟X線吸収分光法によるタンパク質の元素選択的観測	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
軟X線分光法によるメタン酸化触媒反応活性種の直接観測	名古屋大学物質科学国際研究センター	山田　泰之
軟X線 XAFS による溶液中触媒活性種の電子構造解析	京都大学化学研究所	高谷　　光

Mechanism Study of between Iron Salts and Organometallic Reabent by XAFS	Wuhan University	AIWEN, Lei
Dependency of Micelle Formation in Aqueous Environmental Model Systems on Acidity and the Presence of Co-Solutes	University of Oulu	PRISLE, Nonne
原子核乾板中の AgBr:I 微結晶の低温での発光特性の研究	東邦大学理学部	中　竜大
希土類イオン添加酸化物の真空紫外励起による発光の欠陥形成および組成変化に伴う変化の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野　正人
新材料による真空紫外レンズの評価	大阪大学レーザー科学研究所	清水　俊彦
ジフルオロエチレンの光誘起幾何異性体変換の動的解明	大阪大学レーザー科学研究所	山ノ井航平
一次元単結晶活物質材料におけるリチウム脱挿入過程のオペランド STXM 解析	産業技術総合研究所	朝倉　大輔
STXM による溶液中での金属酸化物の結晶成長メカニズムの解明	産業技術総合研究所	三石　雄悟
温泉堆積物に含まれるホウ素の分布と化学形態—ホウ素排水処理技術の開発に向けて	東京農工大学農学研究院	橋本　洋平
STXM による細胞内蛋白質イメージングと厚い試料への適用の試み	東海大学工学部	伊藤　敦
STXM を用いた電子収量法による絶縁試料の配向解析	分子科学研究所	大東　琢治
アカスジキンカメムシの構造色の in-situ 分析	分子科学研究所	大東　琢治
BL4U の整備	分子科学研究所	大東　琢治
硫黄架橋ゴムの網目ドメインネットワークの特性化	京都工芸繊維大学分子化学系	池田　裕子
加熱時における雰囲気の変化による地球外有機物質の組織変化と分子構造の変化過程と，母天体での高分子化過程	高輝度光科学研究センター	上椙　真之
はやぶさ２帰還試料測定のための機関間連携分析システムの構築	海洋研究開発機構高知コア研究所	伊藤　元雄
Probing the Microscopic Electronic Structure for High Specific Capacitance of Vanadium Oxide Supercapacitor	National Synchrotron Radiation Research Center	HSU, Yao-jane
Penetration of Drug-Loaded Nanocarriers and Drug Release in Serine-Protease-Treated Skin	Freie University Berlin	RUEHL, Eckart
Characterizing Ultrastructural Features in Tissues of Human Patients with Storage Diseases	University of Oulu	MINNA, Patanen
Molecular Level Chemical and Structural Characterization of Individual Aerosol Particles: Organosulfates and Nano-Plastics	University of Oulu	PRISLE, Nonne
遷移金属添加 CeO_2 中の磁性元素の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本　知之
軟Ｘ線 XAFS 構造解析による酸化スズサブナノ粒子の構成原子数依存の電子状態変化挙動の解明	東京工業大学科学技術創成研究院	葛目　陽義
Ti 添加Ⅲ族窒化物のバンドギャップ狭小の機構解明と人工光合成光電極材料としての最適組成探索	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科	今田　早紀
ΘT 複合対称性で保護された新奇トポロジカル物質の開拓	東北大学材料科学高等研究所	佐藤　宇史
角度分解光電子分光によるワイル磁性体とその機能物性の開拓	東京大学物性研究所	近藤　猛
空間反転対称性の破れた新しい結晶構造が生み出すバルク物質中のスピン偏極ディラック電子状態の開拓	東京大学物性研究所	櫻木　俊輔
Rashba 型スピン軌道相互作用が誘起する磁性界面の電子状態計測	東京大学大学院理学系研究科	岡林　潤
Ag(100) 上に作成した VO(100) 薄膜における 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
一軸圧印加した $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ の電子構造の研究	分子科学研究所	出田真一郎
立方晶カイラル化合物 NiSbS(111) 面における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
光陰極の量子効率向上のための NEA 表面の電子構造観測	大阪大学大学院生命機能研究科	木村　真一
波数空間における遷移金属カルコゲナイドの光電子分光と第一原理計算の比較	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
ARPES Study of Electronic Compressibility in Hole Doped Perovskite Iridates	Westlake University	RUIHUA, He
Electronic Structure Study on van der Waals Heterostrutures: Mini Bands and the Mott Gap Induced by Moire Superlattice	Seoul National University	KIM, Changyoung
マイクロ波照射下における有機分子挙動のテラヘルツ分光観察	京都大学化学研究所	高谷　光
環境半導体マグネシウムシリサイド n 型結晶の不純物状態	山形大学理学部	北浦　守
地球外有機物の３次元分布観察を目指した高輝度赤外分光マイクロトモグラフィー開発	広島大学大学院理学研究科	薮田ひかる
縮重に近い軌道を有する $Me_4N[Pt(dmit)_2]_2$ の電子構造の研究	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 で探る新奇界面超伝導の起源	東北大学材料科学高等研究所	佐藤　宇史
二重トポロジカル絶縁体の時間反転対称性の破れの効果の検証	東京工業大学理学院	平原　徹
有機半導体結晶における電子フォノン相互作用による電子状態変調 II	分子科学研究所	解良　聡
BL7U 光電子エンドステーションの整備	分子科学研究所	田中　清尚
高エネルギー分解能 ARPES による三層系銅酸化物高温超伝導体 Bi2223 のドーピング依存性	分子科学研究所	出田真一郎
層状 MAX 相化合物 Ti_2SnC および Ti_3SiC_2 の低励起エネルギー偏光依存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

角度分解光電子分光によるタイプ II ディラック電子系 $NiTe_2$ における Ni インターカレーション効果の研究	大阪大学大学院理学研究科	宮坂　茂樹
希ガス中加熱によるトポロジカル近藤絶縁体単表面の改質	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪　嘉之
一硫化サマリウムの電子状態・電荷ダイナミクスに及ぼす元素置換の効果～新規アクチュエーター開発を目指して～	名古屋大学大学院工学研究科	横山　泰範
Operando Microscopic Analysis at the Graphene-Metal Interface	Tamkang University	PONG, Way-faung
軟X線分光によるバイオマス中軽金属成分の分析	京都大学化学研究所	高谷　光
STXM を用いた水および NaCl 溶液中の帯電性ナノバブル周囲水の電子状態観測	東京大学物性研究所	原田　慈久
Needle-Shaped Hydroxyapatite Nanoparticles as Skin	The National Nanotechnology Center of Thailand	MAHATNIRUNKUL, Thanisorn
内殻励起による AlN の不純物発光測定	福井大学学術研究院工学系部門	福井　一俊
光電子放出分布の偏光特性および光エネルギー依存性の測定	広島大学大学院理学研究科	高口　博志

(7)　施設利用

①　装置開発室

位相分解波動関数イメージング装置の開発と運用	東京工業大学大学院理学院	水瀬　賢太
差動排気高濃度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

分子動力学法による水の３次元ラマン・THz 振動分光計算	京都大学大学院理学研究科	谷村　吉隆
生体分子の機能発現反応に関する理論的研究	千葉大学大学院薬学研究院	星野　忠次
触媒分子系および生体分子系の量子化学と反応動力学	北海道大学触媒科学研究所	長谷川淳也
拡張アンサンブル法による分子シミュレーション	名古屋大学大学院理学研究科	岡本　祐幸
複合電子系の構造，電子状態，反応過程，溶媒和構造に関する理論的研究	京都大学福井謙一記念研究センター	榊　茂好
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
場の量子論に基づく局所物理量による量子物性の研究	京都大学大学院工学研究科	瀬波　大土
金属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	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
複雑分子系におけるテラヘルツ帯から赤外領域のスペクトル解析	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永　圭介
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	お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科	森　寛敏
溶液界面の構造と機能の計算化学	東北大学大学院理学研究科	森田　明弘
10 族金属によるオレフィン重合触媒の機構解析と有機デバイスを指向した芳香族化合物の設計	東京大学大学院工学系研究科	野崎　京子
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および，フラビン - 金属イオン配位錯体の振電バンドの理論的解析	東京工業大学科学技術創成研究院	宮崎　充彦
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
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
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
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
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
複素環式化合物の合成および反応性に関する理論研究	高知大学大学院総合人間自然科学研究科	金野　大助
リン脂質フリップを誘起する膜貫通ペプチドの計算分子設計	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
シミュレーションによるガラス状態の弾性と塑性の研究	東京大学大学院総合文化研究科	池田　昌司
OZ 理論から求まる二原子分子溶質の溶媒和自由エネルギー補正に関する研究：クーロン相互作用を考慮する場合	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 $CaMn_4O_5$ クラスターの構造，電子・スピン状態および反応性に関する理論的研究	大阪大学ナノサイエンス教育研究センター	山口　兆
非平面型パ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
ナノカーボン・アミノ酸・クラスターの反応動力学の量子化学的研究	電気通信大学大学院情報理工学研究科	山北　佳宏
クラウディング分子のクラスター構造が核酸の安定性に与える影響の解析	甲南大学先端生命工学研究所（FIBER）	杉本　直己
ミオシン VI の長距離ステップ運動を利用した高効率な動作メカニズムの解明	名古屋大学大学院工学研究科	寺田　智樹
タンパク質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工学研究院	入佐　正幸
水，氷，クラスレートハイドレートの構造相転移の理論研究	岡山大学大学院自然科学研究科	松本　正和
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
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
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
軟X線光科学に関する理論的研究	広島大学大学院理学研究科	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	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	山下　晃一
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	立教大学理学部化学科	スンダラム　アルルモジラジャ
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
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
分子集合体のシミュレーション 4	北里大学理学部	米田　茂隆
ナノマテリアル及び生体分子の機能・物性・反応性に関する理論的研究	早稲田大学先進理工学研究科	中井　浩巳
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
触媒を用いた化学反応機構の理論的解明	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構造および原子層物質の形成と機能に関する研究	三重大学大学院工学研究科	秋山　亨
クラスターイオンの幾何構造，反応性および衝突断面積の計算	東北大学大学院理学研究科	大下慶次郎
タンパク質の構造と機能発現の関連性	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
不凍タンパク質が氷に吸着する分子機構	信州大学国際ファイバー工学研究所	望月　建爾
金属クラスターの構造とその反応性	東京大学大学院理学系研究科	小安喜一郎
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	島根大学総合理工学部	影島　博之
両親媒性分子集合体からなる大規模不均一系中の物質輸送シミュレーションの構築	名古屋大学大学院工学研究科	吉井　範行
アルコール単分子膜／水界面での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
有機光起電力デバイスの電荷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	京都大学福井謙一記念研究センター	佐藤　徹
有機絶縁分子膜中の金属原子クラスターの動的挙動の研究	千葉大学大学院理学研究院	中山　隆史
希薄溶液中の球状および棒状分子の回転拡散係数と Stoke-Einstein-Debye の関係の分子論的表式の確立	新潟大学理学部	大鳥　範和
APEX 反応および APEX 重合反応の反応機構とナノカーボン分子の構造物性解明研究	名古屋大学大学院理学研究科	伊藤　英人
Accurate Estimation of Electrode Potential on TiO_2 Type Cathodes	東京工業大学大学院理学院	Juhasz Gergely
メゾスケールサイズを有する金属錯体の電子状態解析	東京工業大学化学生命科学研究所	田中　裕也

多機能配位子をもつ金属錯体の構造および反応性に関する理論研究	理化学研究所	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
質量分析法による生体分子のラジカル分解過程に関する研究	産業技術総合研究所	浅川　大樹
機械学習に夜溶媒和モデルの精度向上を目指したデータの解析	筑波大学大学院数理物質系	松井　亨
複合ナノクラスター・分子複合体の構造および電子状態に関する研究	慶應義塾大学理工学部	角山　寛規
液体の統計力学理論による生体分子機能の解析	九州大学大学院理学研究院	吉田　紀生
新規π電子系の設計・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
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
遷移金属クラスターと有機化合物の反応解析	東京大学大学院工学系研究科	丸山　茂夫
量子化学計算による光合成水分解反応の分子機構の解明	名古屋大学理学研究科	野口　巧
レニウム (I) フタロシアニン錯体の電気化学的 CO_2 還元反応	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
計算化学的手法を用いた有機合成反応の機構，有機物質の物性解明	慶應義塾大学薬学部	東林　修平
量子化学計算と機械学習で拓く触媒化学・材料科学	相模中央化学研究所	巳上幸一郎
化学反応動力学理論計算を活用した有機化学反応の反応機構解析	乙卯研究所	黒内　寛明
有機金属錯体を用いた触媒および発光性材料の理論的設計と物性解析	北海道大学大学院工学研究院	伊藤　肇
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：脂質分子の影響	東京大学先端科学技術研究センター	篠田　恵子
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
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その物性改変	東京大学大学院工学系研究科	黒田　大祐
反応自動探索法の開発と応用	北海道大学	前田　理
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
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
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
青色光受容体蛋白質の DNA 修復機構の理論的解析	理化学研究所	佐藤　竜馬
多核 Mn 錯体に触媒される水分解の非断熱電子動力学による研究	京都大学福井謙一記念研究センター	山本憲太郎
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
ナノコンポジット材料開発における第一原理と分子動力学を用いた計算科学の革新	National Institute of Advanced Industrial Science and Technology	Pradeep Varadwaj
小分子の変換反応を指向した遷移金属触媒合成に関する理論的研究	相模中央化学研究所	長岡　正宏
光・電子機能有機分子材料の機能解明とデザインのための計算化学シミュレーション	高度情報科学技術研究機構計算科学技術部	河東田道夫
分子動力学シミュレーションを用いた固体・液体界面における分子構造とダイナミクス	茨城大学工学部	城塚　達也
液体中の生体分子の拡散係数の分子動力学計算とその基本セルサイズ依存性	九州大学大学院理学研究院	秋山　良
細胞内メタボライトによる非特異的相互作用の分子動力学シミュレーション	前橋工科大学生命情報学科	優　乙石
ポストメタロセン触媒によるオレフィン重合反応および連鎖移動反応に関する理論的研究	名古屋大学大学院情報学研究科	三澤　奈々
第一原理分子動力学法による基底状態および励起状態の生体系への展開	理化学研究所	中村振一郎
細胞内における蛋白質の動的構造の解明を目指した分子動力学シミュレーション	理化学研究所	松岳　大輔
MTS-MD/3D-RISM-KH 法を応用した結合自由エネルギー予測法の確立	立命館大学生命科学部	杉田　昌岳
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	神奈川大学総合理学研究所	田仲　二朗
有機化合物における置換基効果の微視的機構	鳥取大学大学院工学研究科	早瀬　修一
クロコン酸結晶における赤外スペクトルの理論研究	高エネルギー加速器研究機構	岩野　薫
高反応性のジボラン (4)・Al アニオン・ヘテロベンゼン類の性質の解明	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
分子クラスターの新規高分解能振動回転分光法の開発	東京工業大学理学院	水瀬　賢太
薬物と飲食物に含まれる生理活性物質との相互作用解析	福岡大学薬学部	池田　浩人
高い内部自由度を有する低分子非晶質有機半導体材料の凝集状態に関する計算	山形大学大学院有機材料システム研究科	横山　大輔
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
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
超臨界条件下の水－有機溶媒混合系の並進ダイナミクスと溶媒和構造	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

DFT によるアゾ磁性金属錯体の遷移と電子状態	東京理科大学理学部	秋津　貴城
パイ共役系分子による発光材料の開発	北里大学理学部	長谷川真士
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
all head-to-tail 環状 poly(3-hexylthiophene) の構造および紫外可視吸収スペクトルと蛍光スペクトルに関する理論的研究	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
汎用分子力場の改良と液体シミュレーション	東京大学先端科学技術センター	山下　雄史
クラスター複合体による化学反応の解明	豊田工業大学クラスター研究室	市橋　正彦
分子シミュレーションによる分子集合体の研究	名古屋文理大学	本多　一彦
エノールエステルの不斉加水分解におけるアルブミンの作用	明星大学理工学部	松本　一嗣
量子化学計算による炭素 1 原子を含む分子の酸化還元反応過程の解明	早稲田大学国際教養学部	稲葉　知士
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	名古屋工業大学工学研究科	小野　克彦
第一原理量子論による次世代 Emerging メモリの設計指針の獲得	名古屋大学大学院工学研究科	白石　賢二
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量子ビーム科学研究部門	黒崎　　譲
生体分子および溶媒の構造機能相関の解明	立命館大学生命科学部	髙橋　卓也
ボウル型共役化合物の物性調査，および金属クラスター触媒の活性評価研究	大阪大学大学院工学研究科	櫻井　英博
修飾核酸の分子動力学計算のための基盤構築	量子科学技術研究開発機構生体分子シミュレーショングループ	桜庭　　俊
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
液晶性錯体の安定構造解析	北里大学理学部	吉田　　純
格子モデルを用いたタンパク質トポロジーの熱力学的解析	三重大学総合情報処理センター	白井　伸宙
ペプチドナノリングの分子及びイオン捕捉能に関する理論的研究	高千穂大学人間科学部	竹内　　淨
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
SiNN ピンサー配位子を有する 10 族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	惠良田知樹
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ものづくり環境学科	大澤　正久
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
光機能性分子の電子状態および振動スペクトル計算	室蘭工業大学工学研究科	飯森　俊文
新規な典型元素化合物の構造の研究	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物質工学科	井手　智仁
有機半導体蒸着膜の自発的配向分極現象の解明	明治大学理工学部	野口　　裕
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
アルカリ金属を利用した炭素固体合成反応の計算化学的解明	北海道大学大学院工学研究院	島田　敏宏
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
マルチスケール構造を有する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
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
ブロモチモールブルーの色と構造の関係	弘前大学教育学部	島田　　透
遷移金属ダイカルコゲナイドの第一原理計算	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
機械学習を用いた非対称コマ分子の３次元整列制御	東北大学大学院理学研究科	大槻　幸義
気相ナノ粒子の輸送と荷電に関する分子動力学的解析	金沢大学大学院自然科学研究科	玉舘　知也
凝縮系における緩和および反応ダイナミクスの理論研究	分子科学研究所	斉藤　真司
ナノ構造体の光・電子物性の第一原理計算	分子科学研究所	飯田　健二
複雑系の量子状態理論の開発と不均一系触媒および光機能システム系への応用	分子科学研究所	江原　正博
タンパク質凝集の分子シミュレーション	分子科学研究所	奥村　久士
NCN- 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	生命創成探究センター	古賀　信康
初期地球の隕石衝突における有機分子の熱分解反応と生存率	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
染色体の原子間力顕微鏡像の理論予測	金沢大学ナノ生命科学研究所	炭竈　享司
MD シミュレーションを用いたアクチン線維の安定性の研究	東海学院大学健康福祉学部	小田　俊郎

医工連携に基づいた人体内の固液混相流解析	東海大学工学部	高橋　俊
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
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
凝集誘起発光についての理論的研究	千葉工業大学工学部	山本　典史
溶媒効果を考慮した手法による抗体の糖鎖認識機構に関する理論的研究	北里大学一般教育部	能登　香
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
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
理論計算を基盤とする新規合成反応の開拓	東京農業大学生命科学部	斉藤　竜男
金属中心キラリティーの精密制御と錯体の性質解明	東京大学大学院理学系研究科	長田　浩一
五核鉄クラスターの電子状態と反応性の理論解析	名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所	柳井　毅
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
ヘキサアザトリフェニレン誘導体が形成する電荷移動錯体の物性評価	関西学院大学理工学部	田中　大輔
カテキン誘導体の分子内カップリング反応に対する DFT 計算	富山県立大学工学部	占部　大介
有機ケイ素材料の合成と物性解明	茨城工業高等専門学校	江川　泰暢
糖結合タンパク質 hGal-1 とファルネシル基類似化合物の相互作用解析	東北大学大学院薬学研究科	宮田　大輔
Si–H 基を含む二水素結合クラスターにおけるクラスター内イオン－分子反応過程の解明	北里大学理学部	石川　春樹
計算化学的なアプローチに基づく新規近赤外発光素子の開発	岡山大学大学院自然科学研究科	村井　征史
有機分子の光励起状態における構造変化の研究	北海道大学大学院理学研究院	小門　憲太
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
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
新規パイ共役化合物の構造－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
DNA と金属錯体の相互作用	中央大学理工学部	千喜良　誠
光誘起過渡構造変化を利用した分子間反応開発	東京大学大学院総合文化研究科	正井　宏
イミダクロプリドの光分解過程の解明ならびに規則炭素触媒における反応理解	東北大学多元物質科学研究所	山本　雅納
三重項－三重項消滅フォトンアップコンバージョン分子材料の計算科学的研究	立教大学理学部	三井　正明
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拡張と応用計算	岐阜大学工学部	宇田川太郎
Multi-Scale Modeling of Interstellar Radical Species on Water Ice	Institute of Low Temperature Science	W. M. C. Sameera
多核前周期遷移金属錯体反応場を用いた金属アルキリデン種の合成と反応	岡山大学大学院自然科学研究科	黒木　尭
ナノバイオ物質の電子状態・構造・機能の相関	名古屋大学未来材料・システム研究所	押山　淳
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	久新荘一郎
短寿命種や界面化学種の振動スペクトル解析	筑波大学	石橋　孝章
抗金属錯体抗体の分子認識基盤の分光学による理解	医薬基盤・健康・栄養研究所	秋葉　宏樹
表面吸着分子の電子及びフォノン物性	分子科学研究所	南谷　英美
理論計算による内包フラーレンの研究	東北大学大学院理学研究科	岡田　洋史
超原子価化合物の電子・幾何構造の分光学的研究	広島大学大学院理学研究科	井口　佳哉
分子動力学計算と先端的計測による抗体の動的構造解析	生命創成探究センター	谷中　冴子
π共役拡張型有機半導体材料の開発に関する理論計算	東京都立産業技術研究センター	小汲　佳祐
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	名古屋大学未来社会創造機構	松尾　豊
中分子医薬品の膜透過性に対する分子動力学シミュレーション	筑波大学計算科学研究センター	西澤　宏晃
ジアリール基をもつジピリド縮環型 NHC 配位子を有するイリジウム錯体の合成とその応用	広島大学大学院理学研究科	山本　陽介
相関電子系の特異な物性に関する数値的研究	千葉大学大学院理学研究科	太田　幸則
ジチアシクロペンテンオリゴマーの電子状態解析	静岡大学学術院工学領域	植田　一正
メタロゲルミレンを用いた触媒反応の研究	東北大学大学院理学研究科	渡邉　孝仁
高い反芳香族性を示す 4nπ 電子系の設計と構築	首都大学東京理学部	西長　亨
配位子保護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
機能性開殻分子の構造－物性－電子状態相関の解明	分子科学研究所	草本　哲郎
遷移金属触媒と基質との相互作用に関する理論的考察	早稲田大学理工学術院総合研究所	太田　英介
量子化学と統計力学に基づく溶液中金属錯体の理論的研究	総合研究大学院大学物理科学研究科	小杉　健斗
Theoretical Study of Molecular Vibrational Polariton in the Ultrastrong Coupling Regime	分子科学研究所	NGUYEN, Thanh Phuc
ナノ流路内部を運動するイオン液体輸送特性の流路幅依存性の評価及び定式化	福井大学学術研究院工学系部門	福島　啓悟

深層神経ネットワークによる脳理論の検証	基礎生物学研究所	渡辺　英治
加水分解酵素を用いる速度論的光学分割の機構解明と合成化学的応用	大阪大学大学院薬学研究科	赤井　周司
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
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
密度汎関数法による 1,4- ジアゼピン誘導体の構造解析	東京都市大学工学部	塩月　雅士
典型元素の特性を活用した光機能性分子の開発	茨城大学工学部	吾郷　友宏
SH2 ドメインを単特異的に活性化するモチーフの開発	東京大学大学院工学系研究科	梅根輝来人
DFT 計算を用いた反応機構の解明による選択的有機合成反応の開発	奈良教育大学理科教育講座	山崎　祥子
植物由来のπ電子系化合物における分子内相互作用のエネルギー解析	杏林大学保健学部	田中　　薫
遷移金属錯体を用いた有機フッ素化合物の不活性結合切断反応の機構解明	大阪大学大学院工学研究科	生越　専介
原子層制御エッチング反応過程に関する ab initio 密度汎関数理論研究	奈良女子大学研究院自然科学系	竹内　孝江
有機反応への電場効果の検証	岐阜大学	安藤　香織
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
分子の構造，反応，機能の理論研究	放送大学教養学部	橋本　健朗
遷移系列イオンを含む化合物の反応制御に関する理論的研究	岐阜大学地域科学部	和佐田裕昭
π電子部位連結化合物の大振幅ねじれ運動ポテンシャルにおける垂直配向障壁の分光学的精度と量子化学計算	日本大学工学部	奥山　克彦
新奇低次元遷移金属カルコゲナイドの電子状態の解明	首都大学東京理学部	中西　勇介
気相分子クラスターの構造と分子間相互作用の理論的解析とレーザー分光研究	東北大学大学院理学研究科	松田　欣之
シュウドアズリンにおける弱い相互作用の効果	茨城大学理工学研究科	Taborosi Attila
ヘム輸送体へのヘム結合過程のシミュレーション	理化学研究所	田村　康一
高極性液晶化合物の分子動力学シミュレーション	九州大学先導物質化学研究所	奥村　泰志

3-1-3　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 ～ '12		'13		'14		'15		'16		'17		'18		'19		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	110	941	2	27	1	11	2	32	2	30	1	8	2	22	1	7	人数：登録人数
協力研究	4,297	6,795	64	183	64	206	62	205	82	246	73	229	45	148	36	131	〃
所長招へい	4,621	4,621	156	156	103	103	128	128	80	80	100	100	116	116	84	84	人数：旅費支給者
研究会	349	5,993	10	254	6	162	11	195	7	151	10	201	10	174	7	88	〃
若手研究活動支援（若手研究会等）	5	66	1	21	2	38	1	16	1	14	2	41	1	21	2	32	〃
岡崎コンファレンス	1	29	1	18	1	34	1	21	3	115	0	0	1	35	2	66	〃
施設利用 I	2,211	5,215	41	105	44	191	20	52	2	6	2	6	3	9	2	2	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)	5,457	18,612	204	786	199	751	235	844	221	813	236	914	248	985	264	1,024	〃
協力研究 (ナノプラット)	540	1,209	52	123	63	147	64	174	75	144	69	154	81	151	66	127	人数：登録人数
施設利用 (ナノプラット)	348	896	132	378	174	453	197	618	196	493	185	554	164	475	139	434	件数：許可件数 人数：許可人数
合計	18,134	44,574	663	2,051	657	2,096	721	2,285	669	2,092	678	2,217	671	2,136	603	1,995	

＊施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用　　（'19 年度の数値は，2020.1.10 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 ～ '12		'13		'14		'15		'16		'17		'18		'19		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	25	25	1	1	1	1	1	1	3	3	4	4	1	1	0	0	人数：旅費支給者
研究会	50	889	1	37	1	37	1	30	1	41	1	43	1	30	1	42	〃
施設利用	3,393	16,524	142	732	125	649	119	732	142	762	160	867	213	1,067	185	954	件数：許可件数 人数：許可人数
合計	3,890	19,042	144	770	127	687	121	763	146	806	165	914	215	1,098	186	996	

＊合計には課題研究，協力研究，招へい協力研究を含む。　　（'19 年度の数値は，2020.1.10 現在）

3-2　国際交流と国際共同研究

3-2-1　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
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
18	0	2	8	3	131	144
19	0	1	6	0	108	115
合計	12	21	151	221	1,211	1,616

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
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
18	9	2	14	16	20	12	0	71	144
19	2	2	9	10	20	10	0	62	115
合計	124	32	143	167	218	277	5	650	1,616

表３　海外からの研究者（2019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	'19.12. 7–'19.12.12
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			
HAGENLOCHER, Jan	ドイツ	Eberhard Karls Universitat Tuebingen 大学院生	'19. 6.11–'19. 9. 8
３．国際共同研究			
SAENNAWA, Wiyada	タイ	Suranaree University of Technology 学生	'18. 6.14–'19.10. 1
MOHAMAD ZAKARIA, Siti Mastura Binti	マレーシア	University of Malaya 学生	'18.11. 1–'19. 4.29
LEE, Pui Kee	マレーシア	University of Malaya 大学院生	'18.11. 1–'19. 4.29
Huang, Wei-Hong	台湾	国立交通大学学生	'19. 3. 1–'19. 4.26
CASSOURET, Florent	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'19. 4. 5–'19. 8.27
DOWE, Nicolas	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'19. 4. 5–'19. 8.27
WANG, Tak-Wai	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'19. 4. 5–'19. 8.27
Adrien, Girault	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'19. 4. 5–'19.10. 5
Jeremy, Roudinga	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'19. 4. 5–'19.10. 5
CAGNON, Benjamin	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'19. 4. 5–'19. 8.27
MARIE, Vincent	フランス	フランス国立パリ高等化学学校	'19. 4. 5–'19. 8.27
Schnapka, Vincent	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'19. 4. 5–'19. 8.27
Aminreza, Khodabandeh	オーストラリア	University of South Australia 研究員	'19. 7.16–'19. 7.20
Lai, Yu-Ling	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 研究員	'19. 8. 6–'19. 8.11
Shiu, Hung-Wei	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 研究員	'19. 8. 6–'19. 8.11
Le, Lan Nguyen Ngoc	タイ	Chulalongkorn University 大学院生	'19. 9. 6–'20. 3.31
Wilasri, Thunchanok	タイ	Kasetsart University 大学院生	'19. 9.30–'20. 3.25
Yang, Ling	台湾	National Chiao Tung Univestiy 大学院生	'19.10. 1–'20. 2.15
Wu, Yi-Ju	台湾	National Chiao Tung Univestiy 大学院生	'19.10. 1–'19.12.21
Jakkapan, Kumsampao	タイ	VISTEC 大学院生	'19.10. 1–'20. 9.30
Gamage Don Kaveendra Virajith Maduwantha	スリランカ	Sabaragamuwa University of Sri Lanaka 大学院生	'19.10. 4–'20. 3.31
Priestley, Michael	スウェーデン	University of Gothenburg 研究員	'19.10.15–'19.10.19
Goh, Ean Wai	マレーシア	University of Malaya 大学院生	'19.10.16–'20. 3.31
Chang, Yeet Hoong	マレーシア	University of Malaya 大学院生	'19.11. 1–'19. 4.30
Hasin, Panitat	タイ	Kasetsart University 講師	'19.12. 2–'20. 4.30
４．所長招へい協力研究員			
三輪邦之	アメリカ	Northwestern University 博士研究員	'19. 7. 3–'19. 7. 7
落合達海	イギリス	University of Edinburgh 海外特別研究員	'19.10. 7–'19.10.15
熊谷　崇	ドイツ	マックスプランクフリッツ・ハーバー研究所グループリーダー	'19.10.12–'19.10.15
５．招へい研究員			
BOBUATONG, Karan	タイ	Rajamangala University of Technology Thanyaburi 博士研究員	'19. 4. 1–'19. 5. 2
UDAYAKUMER, Deva Priyakumar	インド	International Institute of Information Technology 日本学術振興会外国人特別研究員	'19. 4.18–'19. 6. 2
HSU, Chain-Shu	台湾	National Chiao Tung University 教授	'19. 4.11–'19. 4.14
WU, Tung-Kung	台湾	National Chiao Tung University 准教授	'19. 4.11–'19. 4.14
杉山輝樹	台湾	National Chiao Tung University 准教授	'19. 4.11–'19. 4.14
LI, Yaw-Kuen	台湾	National Chiao Tung University 教授	'19. 4.11–'19. 4.14
SAENNAWA, Wiyada	タイ	Suranaree University of Technology 大学院生	'19. 4. 1–'19.10. 1
MOHAMAD ZAKARIA, Siti Mastura	マレーシア	University of Malaya 大学院生	'19. 4. 1–'19. 4.30
LEE, Pui Kee	マレーシア	University of Malaya 大学院生	'19. 4. 1–'19. 4.30
JERRY, Stahlberg	スウェーデン	Swedish University 研究員	'19. 4.24–'19. 4.25
LIN, Chun-Liang	台湾	National Chiao Tung University 助教	'19. 4.23–'19. 4.24
CHIU, Ya-Ping	台湾	National Taiwan University 教授	'19. 4.23–'19. 4.24
KONG, Xiangrui	スウェーデン	University of Gothenburg 大学院生	'19. 6.25–'19. 6.29 '19.10.15–'19.10.19
PEI, Xiangyu	スウェーデン	University of Gothenburg 研究員	'19. 6.25–'19. 6.29
WOJCIK, Janusz	ポーランド	Jagiellonian University 教授	'19. 7. 8–'19. 7. 9

VIJAYAN, Jayadev	ドイツ	Max Planck Institute of Quantum Optics 大学院生	'19. 7.14–'19. 7.20
CHANG, Rakwoo	韓国	Kwangwoon University 教授	'19. 7.28–'19. 7.31
JANG, Joonkyung	韓国	Pusan National University 教授	'19. 7.28–'19. 7.31
KIM, Jun Soo	韓国	Ewha Womans University 准教授	'19. 7.28–'19. 7.31
SUNG, Jaeyoung	韓国	Chung-Ang University 教授	'19. 7.28–'19. 7.31
CHOI, Cheol Ho	韓国	Kyugpook National University 教授	'19. 7.28–'19. 7.31
RHEE, Young Min	韓国	KAIST 教授	'19. 7.28–'19. 7.31
JU, Sang-Yong	韓国	Yonsei University 准教授	'19. 7.28–'19. 7.31
SONG, Jae Kyu	韓国	Kyung Hee University 教授	'19. 7.28–'19. 7.31
CHOI, Myong Yong	韓国	Gyeongsang National University 教授	'19. 7.28–'19. 7.31
PARK, Seung Min	韓国	Kyung Hee University 教授	'19. 7.28–'19. 7.31
KIM, Tae Kyu	韓国	Pusan National University 准教授	'19. 7.28–'19. 7.31
LIM, Manho	韓国	Pusan National University 教授	'19. 7.28–'19. 7.31
KHODABANDEH, Aminreza	オーストラリア	University of South Australia 研究員	'19. 7.16–'19. 7.20
ZHAO, Xiang	中国（香港含む）	Xi'an Jiaotong University 教授	'19. 7.27–'19. 8.30
			'20. 1.14–'20. 2.14
HUANG, Tzu-His	台湾	Tamkang University 大学院生	'19. 7.22–'19. 7.27
HUANG, Yu-Cheng	台湾	National Chiao Tung University 大学院生	'19. 7.22–'19. 7.27
			'19. 8.19–'19. 8.24
CHANG, Han-Wei	台湾	Tamkang University 研究員	'19. 7.22–'19. 7.26
PACHARIYANGKUN, Anna	タイ	VSITEC 大学院生	'19. 9. 6–'19.12. 4
YU, Li-Chung	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 研究員	'19. 8. 6–'19. 8.11
SHIU, Hung-Wei	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 准教授	'19. 8. 6–'19. 8.11
LAI, Yu-Ling	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 非常勤研究員	'19. 8. 6–'19. 8.11
CEOLIN, Denis	フランス	Synchrotron SOLEIL 研究員	'19. 8. 5–'19. 8.24
SAISOPA, Thanit	タイ	Suranaree University of Technology 研究員	'19. 8. 5–'19. 8.24
BORSUP, Jongrak	タイ	Suranaree University of Technology 大学院生	'19. 8. 5–'19. 8.24
KLAIPHET, Kanchanasuda	タイ	Suranaree University of Technology 大学院生	'19. 8. 5–'19. 8.24
HSU, Wei-Hao	台湾	Academia Sinica 研究員	'19. 8.19–'19. 8.24
DONG, Chung-Li	台湾	Tamkang University 助教	'19. 8.19–'19. 8.24
LEE, Suyoung	韓国	Seoul National University 大学院生	'19. 9. 2–'19. 9. 7
			'19.11.25–'19.11.30
PARK, Heonjoon	韓国	Seoul National University 大学院生	'19. 9. 2–'19. 9. 7
			'19.11.25–'19.11.30
OH, Dong Jin	韓国	Seoul National University 大学院生	'19. 9. 2–'19. 9. 7
			'19.11.25–'19.11.30
PALASSERY, Jaseela	インド	University of Calcutta 学生	'19. 8.19–'19. 9.30
RUEHL ECKART, Gunther Adolf	ドイツ	Free University of Berlin 教授	'19. 9. 8–'19. 9.14
GERMER, Gregor	ドイツ	Freie University Berlin 大学院生	'19. 9. 8–'19. 9.14
FLESCH, Roman	ドイツ	Freie Universitat 助教	'19. 9. 9–'19. 9.15
KUO, Jer-Lai	台湾	Academia Sinica Research Fellow	'19. 9.21–'19. 9.22
TAKAHASHI, Kaito	台湾	Academia Sinica 准教授	'19. 9.21–'19. 9.22
林　倫年	台湾	National Taiwan University 主任研究員	'19. 9.21–'19. 9.22
YOSHIDA, Daisuke	台湾	Academia Sinica 博士研究員	'19. 9.21–'19. 9.21
HUANG, Qian-Rui	台湾	Academia Sinica 博士研究員	'19. 9.21–'19. 9.26
YEH, Shou-Hao	台湾	Academia Sinica 大学院生	'19. 9.21–'19. 9.22
TZENG, Sheng-Yuan	台湾	Academia Sinica 大学院生	'19. 9.21–'19. 9.22
ZHAO, Geng	中国（香港含む）	Westlake University 大学院生	'19. 9.13–'19.10.25
WEN, Wei	中国（香港含む）	Westlake University 大学院生	'19. 9.13–'19.10.25
HE, Ruihua	中国（香港含む）	Westlake University 准教授	'19. 9.13–'19.10.25
PRIESTLEY, Michael	スウェーデン	University of Gothenburg 博士研究員	'19.10.15–'19.10.19
SONG, Zhen	中国（香港含む）	Westlake University 大学院生	'19.10.20–'19.10.25
HONG, Caiyum	中国（香港含む）	Westlake University 大学院生	'19.10.20–'19.10.25
AKA, Gerard	フランス	フランス国立パリ高等化学学校教授	'19.10.11–'19.10.17
MAHATNIRUNKUL, Thanisorn	タイ	National Nanotechnology Center 研究員	'19.11.20–'19.11.23
MUNTWILER, Matthias	スイス	Paul Scherrer InstituteBeamline Scientist	'19.12.14–'19.12.19

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
中央研究院 原子與分子科学研究所	台湾	分子科学研究所と中央研究院原子與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	2019.10.23	2024.10.22	校長	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
ベルリン自由大学	ドイツ	自然科学研究機構分子科学研究所とベルリン自由大学との分子科学分野における日独共同研究プロジェクトに関する協定	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	2019. 6.21	2022. 6.20	学長	所長
固体表面物理化学国家重点実験室	中国	自然科学研究機構分子科学研究所と固体表面物理化学国家重点実験室との協定	分子科学の学術推進と共同研究の実施	2019.12.23	2024.12.22	所長	所長

（2019.12.31 現在）

3-2-2　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。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を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。令和元年度は下記２件の岡崎コンファレンスを開催した。

会 議 名：第 80 回岡崎コンファレンス
“Chirality-Induced Spin Selectivity and Its Related Phenomena”
期　　間：2019 年 5 月 15 日（水）～ 5 月 18 日（土）
場　　所：岡崎コンファレンスセンター
組織委員：山本浩史（分子科学研究所），Ron Naaman（Weizmann Institute）
内　　容：

分子の持つキラルな構造と，電子の（スピンと並進運動を組み合わせた）キラルな運動とを結びつける効果として，Chirality-Induced-Spin-Selectivity（CISS）が 2011 年に発見され，これを使った関連研究が新たなキラリティの活用手段として注目されている。キラリティは「掌性」とも言われ，材料においてはそれを構成する原子の配置が自身の鏡像体と重なれなくなる性質の事であるが，無機材料・有機材料を問わずに広く存在する概念であるため，CISS 効果についてもその適用範囲が今後大きく広がる可能性が期待される。本コンファレンスでは，これまで CISS 効果を研究してきた主に物理化学系の研究者と，それを理論的に解明しようとしてきた理論物性物理の研究者，そして似たような対称性を持つ Edelstein 効果や電気磁気キラル二色性（Electro-Magneto-Chiral Dichroism）を調べている物性科学の研究者などが初めて一堂に会し，材料は DNA やタンパク質から分子モーター，無機ナノチューブまで，測定手段は光電子分光，電気化学，電子デバイス計測など，多様な物質と計測手法におけるそれぞれの CISS 効果について，活発に議論した。コンファレンス終了時には，このような会合を続けて開催していく必要が確認され，このコミュニティの活動がゴードンコンファレンスなどに引き継いでいかれることとなった。

招待講演者として海外から 20 名，国内から７名が参加し，口頭発表を行った。さらにポスター発表は 15 件，聴講者を含む参加者は総勢で 75 名（うち所内 14 名）であった。

以下に招待講演者を挙げる。

Invited Speakers（海外）

Ron Naaman (Weizmann Inst.)

Helmut Zacharias (Univ. of Munster)

Ismael Diez Perez (Kings college London)

Jie Song (Shanghai Jiao Tong Univ.)

Jeanne Crassous (Univ. Rennes 1)

Karl Heinz Ernst (Empa)

Eric Vetter (North Carolina State Univ.)

David Waldeck (Univ. of Pittsburgh)

Jean-Philippe Ansermet (Ecole Polytechnique Federale de Lausanne)

Michael Therien (Duke Univ.)

Amnon Aharony (Hebrew Univ.)

Ora Entin-Wohlman (Ben Gurion Univ.)

Vladimiro Mujica (Arizona State Univ.)

Xu Yang (Univ. of Groningen)

Ai-Min Guo (Central South Univ.)

Yossi Paltiel (Hebrew Univ.)

Sandipan Pramanik (Univ. of Alberta)

Claudio Fontanesi (Univ. degli Studi di Modena e Reggio)

Narcis Avarvari (Angers Univ.)

Jeremy Levy (Univ. of Pittsburgh)

Invited Speakers（国内）

Yasuhiro Utsumi (Mie Univ.)

Yoshihiro Iwasa (Univ. of Tokyo)

Shuichi Murakami (Tokyo Tech)

Tetsuaki Itou (Tokyo Univ. of Science)

Kazuyuki Ishii (Univ. of Tokyo)

Yoshihiko Togawa (Osaka Pref. Univ.)

Masayuki Suda (IMS)

以下にプログラムを示す。

15th May

13:30-13:40	Opening Hiroshi M. Yamamoto (IMS)
13:40-14:20	Electronic Spin Filtering by Helical Molecules Helmut Zacharias (Univ. of Munster)
14:20-15:00	Spin-Dependent Transport in Bioinspired Single-Molecule Junctions Ismael Diez Perez (Kings college London)

15:00-15:40 CISS Effect on DNA Nanostructures
Jie Song (Shanghai Jiao Tong Univ.)

16:00-16:40 Chiroptical and Photophysical Properties of Multifunctional Molecules Based on Helicenes
Jeanne Crassous (Univ. Rennes 1)

16:40-17:20 Chirality-Dependent Electron Spin Filtering by Molecular Monolayers of Helicenes
Karl Heinz Ernst (Empa)

17:20-18:00 Chirality Induced Magnetoresistance in 2D Chiral Hybrid Perovskites
Eric Vetter (North Carolina State Univ.)

16th May

9:30-10:10 Adventures with Chiral Induced Spin Selectivity
David Waldeck (Univ. of Pittsburgh)

10:10-10:50 Spin-Dependent Electrochemical Charge Transfer Probed by Magnetic Resonance
Jean-Philippe Ansermet (Ecole Polytechnique Federale de Lausanne)

11:10-11:50 Light-Driven Molecular Switch for Reconfigurable Spin Filters
Masayuki Suda (IMS)

11:50-12:30 Chiral, Low-Resistance Organic and Nanoscale Frameworks that Uniquely Propagate Spin Polarized Currents
Michael Therien (Duke Univ.)

13:30-15:00 (Plenary lecture)
Polarized Spin Induced Enatio-Specific Chemistry
Ron Naaman (Weizmann Inst.)

15:30-16:10 Spin Current and Torque in Chiral Molecules
Amnon Aharony, Ora Entin-Wohlman, Yasuhiro Utsumi

16:10-16:50 Chirality-Induced Spin Selectivity Effect and Spin-Dependent Chemistry
Vladimiro Mujica (Arizona State Univ.)

16:50-17:30 Spin-Dependent Electron Transmission Model for Chiral Molecules in Solid-State Nanodevices
Xu Yang (Univ. of Groningen)

18:00-20:30 Poster Presentations

17th May

9:30-10:10 Spintronics and Superconducting Spintronics Based on Chiral Molecules
Yossi Paltiel (Hebrew Univ.)

10:10-10:50 Nanotubes and Effects on Magnetoresistance and Spin Filtering
Sandipan Pramanik (Univ. of Alberta)

11:10-11:50 Theory of Chiral Transport in Chiral Crystals
Shuichi Murakami (Tokyo Tech)

11:50-12:30 Current-Induced Magnetization in Elemental Tellurium
Tetsuaki Itou (Tokyo Univ. of Science)

13:30-14:10 Electron Spin Polarizations and Magneto-Chiral Dichroism of Porphyrinic Compounds
Kazuyuki Ishii (Univ. of Tokyo)

14:10-14:50 Chiral TTF and Metal-Dithiolene Materials
Narcis Avarvari (Angers Univ.)

14:50-15:30 Nontrivial Electrical Transport Phenomena on Chiral Magnetic Materials
Yoshihiko Togawa (Osaka Pref. Univ.)

-------- 16:00-17:30 ----------

Molecular Science Forum

Shuichi Murakami (Tokyo Tech)

18:00-20:00 Banquet

18th May

9:30-10:10 CISS Effect in Chiral Imprinted Ni Revealed via XNCD
Claudio Fontanesi (Univ. degli Studi di Modena e Reggio)

10:10-10:50 Chiral Transport in Heteropolar Nanotubes
Yoshihiro Iwasa (Univ. of Tokyo)

10:50-11:30 Engineered Helicity of One-Dimensional $LaAlO_3/SrTiO_3$ Nanowires
Jeremy Levy (Univ. of Pittsburgh)

11:30-11:45 Closing
Ron Naaman (Weizmann Inst.)

(afternoon) Excursion

会 議 名：第81回岡崎コンファレンス

“Synthetic, Biological, and Hybrid Molecular Engines”

期　　間：2019年12月2日（月）～12月4日（水）

場　　所：岡崎コンファレンスセンター

組織委員：杉本敏樹（分子科学研究所），熊谷　崇（フリッツハーバー研究所）

内　　容：

物質表面の構造や物性，化学的機能を原子・分子レベルで調べる表面科学研究は，化学産業で重要な電気化学反応や触媒化学反応などの分子論的素過程の解明に加え，ナノサイエンスおよびナノテクノロジーの発展に大きく貢献してきた。このような発展を支える表面計測･分光分野は，近年目覚ましく発展するレーザーや放射光などの光関連技術，走査プローブ顕微鏡，ナノスケール微細加工技術，そして計算科学との高度な融合により，新たな局面を迎えつつあります。このように，様々な分野の最先端技術が組み合わされることによって飛躍的な発展を遂げ得る表面計測・分光分野の性質上，積極的に異分野研究者の接点を増やすこと，とりわけ若手・中堅研究者の密な研究交流と長期的な研究協力の芽となる機会を作り出すことは本質的に重要である。そこで，本コンファレンスでは，表面計測・分光学を専門とする研究者の講演を中心に企画しつつも，触媒科学や材料科学，及びそれらに本質的に関わる理論分野の研究者を呼びこむことに努め，「表面界面におけるキャリアダイナミクス」，「表面反応のオペランド分光」，「新概念に基づくメタンのC-H活性化」，「近接場光学の物理と化学」，「新奇な２次元物質や分子集合体」，「高度な水素利用に向けた物質開発と計算科学の挑戦」などに関するトピックに集中的に議論を行った。外国人招待講演者12名，日本人招待講演者21名，ポスター発表者25名を含めて参加者は80名を超える比較的規模の大きな会議となった。

以下に招待講演者を挙げる。

Akimitsu Narita (MPI for Polymer Research/OIST)

Alex Paarmann (Fritz-Haber Institute)

Aliaksei Mazheika (Technical Univ. Berlin)

Atsushi Urakawa (Delft Univ. of Technology)

Christopher Kley (Fritz-Haber Institute)

Emiko Kazuma (RIKEN)

Genki Kobayashi (Institute for Molecular Science)

Hajo Freund (Fritz-Haber Institute)

Hirohito Ogasawara (Stanford Linear Accelerator Center)

Hiroshi Imada (RIKEN)

Julia Stähler (Fritz-Haber Institute)

Jun Haruyama (Univ. of Tokyo)

Jun Yoshinobu (Univ. of Tokyo)

Kazuhiro Takanabe (Univ. of Tokyo)

Kazunari Yoshizawa (Kyushu Univ.)

Ken Sakaushi (National Institute for Materials Science)

Leonhard Grill (Univ. of Graz)

Makoto Fujita (Univ. of Tokyo/Institute for Molecular Science)

Mariana Rossi (Fritz-Haber Institute)

Masaaki Yoshida (Yamaguchi Univ.)

Nian Lin (The Hong Kong Univ. of Sci. and Technol.)

Ralph Ernstopher (Fritz-Haber Institute)

Satoru Takakusagi (Hokkaido Univ.)

Shiwei Wu (Fudan Univ.)

Susumu Yamamoto (Tohoku Univ.)

Takahiro Kondo (Univ. of Tsukuba)

Takanori Koitaya (Institute of Molecular Science)

Takashi Kumagai (Fritz-Haber Institute)

Takashi Suzuki (Univ. of Tokyo)

Toshiki Sugimoto (Institute for Molecular Science)

Ya-Ping Chiu (National Taiwan Univ.)

Yoshiaki Sugimoto (Univ. of Tokyo)

Yujin Tong (Fritz-Haber Institute)

以下にプログラムを示す。

December 2nd, 2019

12:30–13:30	Registration
13:30–13:40	*Opening Remarks* (Maki Kawai, Toshiki Sugimoto & Takashi Kumagai)
13:40–15:10	**Model Catalyst and its Perspective** (Chair: Maki Kawai)
(90 min)	13:40-14:20 Hajo Freund (Fritz-Haber Institute) "Model Systems in Heterogeneous Catalysis at the Atomic Level"
	14:20-14:45 Takahiro Kondo (Univ. of Tsukuba) "Vibration-Driven Reaction of CO_2 with Hydrogen at Cu Surfaces"
	14:45-15:10 Jun Yoshinobu (Univ. of Tokyo) "Adsorption, Activation and Reaction of Inert Molecules on Model Catalysts"
15:10–15:50 (40 min)	*Break & Free discussion*
15:50–17:40	**New Approach for Electrochemistry** (Chair: Julia Stähler)
(110 min)	15:50-16:20 Yujin Tong (Fritz-Haber Institute) "Structures and Dynamics at Electrochemical Interfaces Studied by Nonlinear Spectroelectrochemistry"
	16:20-16:45 Masaaki Yoshida (Yamaguchi Univ.) "Operando Observation of All Elements in Water Splitting Electrocatalysts"
	16:45-17:15 Christopher Kley (Fritz-Haber Institute) "Revealing Catalytic Materials at the Nanoscale: From UHV STM to In Situ Electrochemical AFM"
	17:15-17:40 Jun Haruyama (Univ. of Tokyo) "Electrode Potential and Charge Transfer Reaction Using Density Functional Theory Combined with Implicit Solvation Model"

17:40–18:00 (20 min) *Break & Free discussion*

18:00–20:00 (120 min) *Poster & Welcome reception*

December 3rd, 2019

9:00–10:15 (75 min) **Operando Spectroscopy for Surface Reactions** (Chair: Yujin Tong)

9:00- 9:25 Hirohito Ogasawara (SLAC)
"Elucidation of Surface Reaction Pathway Using Ultrafast Soft X-Ray Spectroscopy"

9:25- 9:50 Susumu Yamamoto (Tohoku Univ.)
"Operando Observation of Photo-Excited Carriers and Molecules at Solid Surfaces Using Soft X-Ray Spectroscopies"

9:50-10:15 Satoru Takakusagi (Hokkaido Univ.)
"Development of Operando PTRF-XAFS Technique for Determining 3D Structure of Active Sites in Heterogeneous Catalysis"

10:15–10:50 (35 min) *Break & Free discussion*

10:50–12:05 (75 min) **New Approach for Near-Field Physics and Chemistry** (Chair: Ralph Ernstofer)

10:50-11:15 Takashi Kumagai (Fritz-Haber Institute)
"Near-Field Physics and Chemistry in Plasmonic STM Junctions"

11:15-11:35 Emiko Kazuma (RIKEN)
"Single Molecule Study of Plasmon-Induced Chemical Reactions"

11:35-12:05 Alex Paarmann (Fritz-Haber Institute)
"Far-Field Approach to Optical Near Fields: Nonlinear Infrared Spectroscopy and Microscopy"

12:05–12:15 *Conference photo*

13:30–14:45 (75 min) **New Concept for Methane Activation** (Chair: Atsushi Urakawa)

13:30-13:55 Kazunari Yoshizawa (Kyushu Univ.)
"Orbital Concept for Methane Activation by Metal-Oxo Species: Enzyme to Surface"

13:55-14:20 Kazuhiro Takanabe (Univ. of Tokyo)
"Crucial Role of OH Radicals in Improving Selectivity in the Oxidative Coupling of Methane"

14:20-14:45 Takanori Koitaya (Institute of Molecular Science)
"Catalytic Activation of C1 Molecules Studied by Ambient-Pressure XPS"

14:45–15:15 (30 min) *Break & Free discussion*

15:15–16:40 (85 min) **Electron Dynamics in 2D Systems** (Chair: Nian Lin)

15:15-15:45 Ralph Ernstopher (Fritz-Haber Institute)
"Ultrafast Electron Dynamics: Momentum- and Real-Space Perspective"

15:45-16:15 Shiwei Wu (Fudan Univ.)
"Second Harmonic Generation: A Symmetry Probe for 2D Materials"

16:15-16:40 Takashi Suzuki (Univ. of Tokyo)
"Ultrafast Carrier Dynamics in a Twisted Bilayer Graphene Quasicrystal Studied by Time- and Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy"

16:40–17:05 (25 min) *Break & Free discussion*

17:05–18:00 (55 min) **Carrier Dynamics in Condensed Phase and Interface** (Chair: Fumio Komori)

17:05-17:35 Julia Stähler (Fritz-Haber Institute)
"ZnO: Ultrafast Generation and Decay of a Surface Metal"

17:35-18:00 Toshiki Sugimoto (Institute for Molecular Science)
"Challenge of Infrared Spectroscopy: Unveiling Water-Assisted Carrier Trapping at TiO_2 Nano-Photocatalyst with Distinct Particle Morphologies"

18:10–18:50 *Shuttle Bus for Conference Dinner (From OCC to Okazaki New Grand Hotel)*

19:00-21:00 *Conference dinner (Okazaki New Grand Hotel)*

December 4th, 2019

9:00–10:20 (80 min) **Molecular Materials** (Chair: Leonhard Grill)

9:00- 9:30 Makoto Fujita (Univ. of Tokyo/Institute for Molecular Science)
"TBA"

9:30- 9:55 Akimitsu Narita (MPI for Polymer Research/OIST))
"Bottom-up Chemical Synthesis of Atomically Precise Graphene Nanostructures"

9:55-10:20 Ya-Ping Chiu (National Taiwan University)
"Light-Induced Molecular Dipole Reordering in Halide Perovskites"

10:20–10:50 (30 min) *Break & Free discussion*

10:50–12:35 **Scanning Probe Techniques for Molecular Systems** (Chair: Takashi Kumagai)
(105 min) 10:50-11:20 Leonhard Grill (Univ. of Graz)
"Manipulation of Single Molecules: Wires, Switches and Motors"
11:20-11:50 Nian Lin (The Hong Kong Univ. of Science and Technology)
"Desine, Synthesis and Characterization of Low-Dimensional Conjugated Metal–Organic Coordination Structures on Surfaces"
11:50-12:15 Yoshiaki Sugimoto (Univ. of Tokyo)
"Imaging and Force Spectroscopy of Individual Atoms/Molecules Using Atomic Force Microscopy"
12:15-12:35 Hiroshi Imada (RIKEN)
"STM Study of Exciton Creation and Annihilation in a Single Molecule"

13:45–15:05 **Hydrogen Dynamics and Engineering** (Chair: Toshiki Sugimoto)
(80 min) 13:45-14:15 Mariana Rossi (Fritz-Haber Institute)
"How Theory Can Elucidate Anharmonic Quantum Nuclear Fluctuations and Hydrogen Dynamics at Finite Tem-Peratures"
14:15-14:40 Genki Kobayashi (Institute for Molecular Science)
"Study on Hydride Ion Conductive Oxyhydrides"
14:40-15:05 Ken Sakaushi (National Institute for Materials Science)
"Quantum Effects in Proton Transfer at Electrified Surfaces"
15:05–15:35 *Break & Free discussion*
(30 min)
15:35–16:25 **In-Situ/Operando Techniques for Catalysis** (Chair: Kazuhiro Takanabe)
(50min) 15:35-16:00 Atsushi Urakawa (Delft Univ. of Technology)
"Holistic Understanding of Catalytic Performance through Physicochemical Gradients Present in Reactors"
16:00-16:25 Aliaksei Mazheika (Technical Univ. Berlin)
"Ab Initio Machine-Learning Study of CO_2 Activation on Semiconductor Oxide Surfaces"
16:25–16:55 **Panel discussion** (Chair: Jun Yoshinobu)
(30 min) Hajo Freund, Leonhard Grill, Atsushi Urakawa, Ralph Ernstofer
16:55–17:00 *Closing Remarks* (Toshiki Sugimoto)

3-2-3 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。第 17 回シンポジウム「Advances in Materials and Molecular Sciences」は，2019 年 7 月に名古屋にて，新学術領域研究「光合成分子機構の学理解明と時空間制御による革新的光－物質変換系の創製」との共催で実施された。日本側 11 件，韓国側 12 件の講演と 19 件のポスターセッションがあった。次回第 18 回は 2021 年韓国にて開催予定で，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）
17	2019 年 7 月	Advances in Materials and Molecular Sciences	名古屋

3-3　大学院教育

3-3-1　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 ～ 2009	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
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	40	3	1	1					1	3	8
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	5	1								1	
岐阜大学	2										
静岡大学		2	2								
名古屋大学	99	4	11	12	11	9	12	12	9	11	5
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	47			1	1					3	2
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	
総合研究大学院大学											1
首都大学東京	20										
名古屋市立大学	34	4	2	3	2	2	1	2	2	4	5
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	4	1	3	6	6	8	4	1	2	2	3
計	684	17	27	30	24	27	26	17	16	27	24

＊外国の大学等

3-3-2　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専攻の入学者数，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（2019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	4	14
機能分子科学専攻	8	5	19
計	15	9	33

在籍学生数（2019年12月現在） 単位：人　（年度別）

入学年度専攻		2014	2015	2016	2017	2018	2019	計	定　員
構造分子科学専攻	５年一貫	1	1	2	2	6	0	12	2
	博士後期	0	1	0	1	1	2	5	3
機能分子科学専攻	５年一貫	0	2	2	1	6	4	15	2
	博士後期	0	0	1	2	2	2	7	3

学位取得状況　単位：人　（年度別）

専　攻	1991 ～ 2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	112(12)	2	2	6	4	2	4	4	6	3	0	145(12)
機能分子科学専攻	87(14)	5	1	3	6	1(3)	3	4	2	0(1)	2	114(18)

（　）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 ～ 2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019
構造分子科学専攻	149(6)	5(1)	1(1)	6(2)	5(4)	11(4)	7(3)	6(5)	5(4)	10(9)	3(0)
機能分子科学専攻	119(5)	4(2)	6(2)	8(2)	4	2(1)	4(3)	8(5)	8(5)	6(4)	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，入学者数） 単位：人

	構造分子科学専攻			機能分子科学専攻		
	1989-2017年度	2018年度	2019年度	1989-2017年度	2018年度	2019年度
中　国	32			12		
フランス				1		1
ロシア				1		

バングラディッシュ	6			2		
インド	1			3	1	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	3			7		
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 ～ '17 年度	'18 年度	'19 年度	'89 ～ '17 年度	'18 年度	'19 年度	
北海道大学	3(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				2(1)			2(1)
長岡技術科学大学	2(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	1			5
岐阜大学				1	1(1)		2(1)
静岡大学	2			1			3
名古屋大学	8(5)	2(2)		9(2)		2(1)	21(10)
愛知教育大学		1(1)					1(1)
名古屋工業大学	1			2(2)			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)		1	17			34(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)			3			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				2(2)			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				5(1)	1(1)	1(1)	7(3)
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)		1	2(1)			7(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)				1(1)	5(2)
立命館大学	1			4(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	48(3)	1(1)		36(4)	1	2(1)	88(9)

＊外国の大学等
（　）は５年一貫で内数

修了生の現職身分別進路（2019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	43	38	81
民間企業	27	18	45
その他	28	22	50
計	146	115	261

3-3-3　オープンキャンパス・分子研シンポジウム

2019年6月7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2019を開催し，引き続き8日（土）に分子研オープンキャンパス2019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13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63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42名，大学院生12名，大学教員及び関連機関6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	4	0	0	1	0	5
関　東	18	2	0	2	0	22
甲信越	1	0	0	0	1	2
北　陸	0	1	1	0	0	2
東　海	9	2	0	2	0	13
近　畿	7	5	1	1	2	16
中国・四国	0	0	0	0	0	0
九州・沖縄	3	0	0	0	0	3
合　計	42	10	2	6	3	63

3-3-4　夏の体験入学

2019年８月６日（火）から９日（金）までの４日間，分子科学研究所において，第16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。選考の結果，本年度は27名の学生（学部学生23名，大学院修士課程学生４名）を受け入れて実施した。実施スケジュールは以下のとおりである。

８月６日（火）：オリエンテーション，配属研究室にて研究体験
８月７日（水），８日（木）：配属研究室にて研究体験
８月９日（金）：UVSORと計算科学研究センターの見学，体験内容報告会，交流会

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	大阪市立大学	学部４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	国際基督教大学	学部３年		
3	名古屋大学	学部３年		
4	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
5	東海大学	学部１年		
6	神戸大学	学部３年	タンパク質１分子の動きを観察してみよう	飯野　教授
7	京都大学	学部２年		
8	京都大学	学部２年	量子系のダイナミクス，光との相互作用について学びます	石崎　教授
9	名古屋大学	学部２年	フロンティア軌道理論と量子化学計算	江原　教授
10	東京農工大学	学部４年		
11	東京大学	学部３年	レーザー冷却された原子集団の観測と物質波回折	大森　教授
12	名古屋大学	学部２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
13	東京電機大学	修士２年	ナノの金属ロッドを作って波動関数を見る	岡本　教授
14	東北大学	修士１年		
15	立命館大学	学部３年	有機EL，有機太陽電池の作製と発光・発電測定	平本　教授
16	関西大学	学部３年		
17	京都大学	学部２年	有機トランジスタ	山本　教授

18	京都大学	修士１年	キラル分子を合成し，その機能を探索する	椴山　准教授
19	愛知工業大学	学部４年		
20	愛知工業大学	学部４年		
21	龍谷大学	学部３年	イオン導電体を合成し，結晶構造とイオン導電率の関係を調べよう	小林　准教授
22	龍谷大学	学部３年		
23	京都大学	学部２年	最先端のパルスレーザー非線形分光計測を用いたとっても難しい分子分光研究への挑戦！	杉本　准教授
24	筑波大学	学部３年		
25	埼玉工業大学	学部３年		
26	京都大学	学部２年	安定なラジカルを合成してその発光特性を調べてみよう！	草本　准教授
27	東北大学	学部２年		

3-3-5　総研大アジア冬の学校

2020 年 1 月 16 日（木）分子科学研究所明大寺地区南実験棟において，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 16 回目になる。アジア全域から参加者を募り，総研大生 14 名と若手研究者を含めた教職員 10 名に加え，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）８名と国内の他大学から２名の留学生と１名の教員を受け入れ, 計 35 名で実施した。今年度のテーマは, 作年度に引き続き「Challenges for New Frontiers in Molecular Science: From Basic to Advanced Researches」とし，参加者によるフラッシュトークおよびポスター発表を実施後，３名の講師によって最先端の研究成果に基づく講義が行われた（講演者は下記の通り）。また，今年度から，参加者の投票によってポスター賞を選出する試みを取り入れ，22 件のポスター発表の中から３件を優秀ポスターとして表彰した。フラッシュトークおよびポスター発表では，所内の総研大生，教員とインターンシップ生との交流が持たれ大変盛況であった。

KATO, Koichi (IMS, SOKENDAI)
“Dynamic Sugar Codes that Determine Protein Functions and Fates”
SODEOKA, Mikiko (RIKEN)
“New Methodologies for Chemical Biology Research”
YAMAMOTO, Hisashi (Chubu University)
“New Peptide Synthesis for Changing Drug Industry From Lewis Acid Catalyst to Peptide Synthesis”

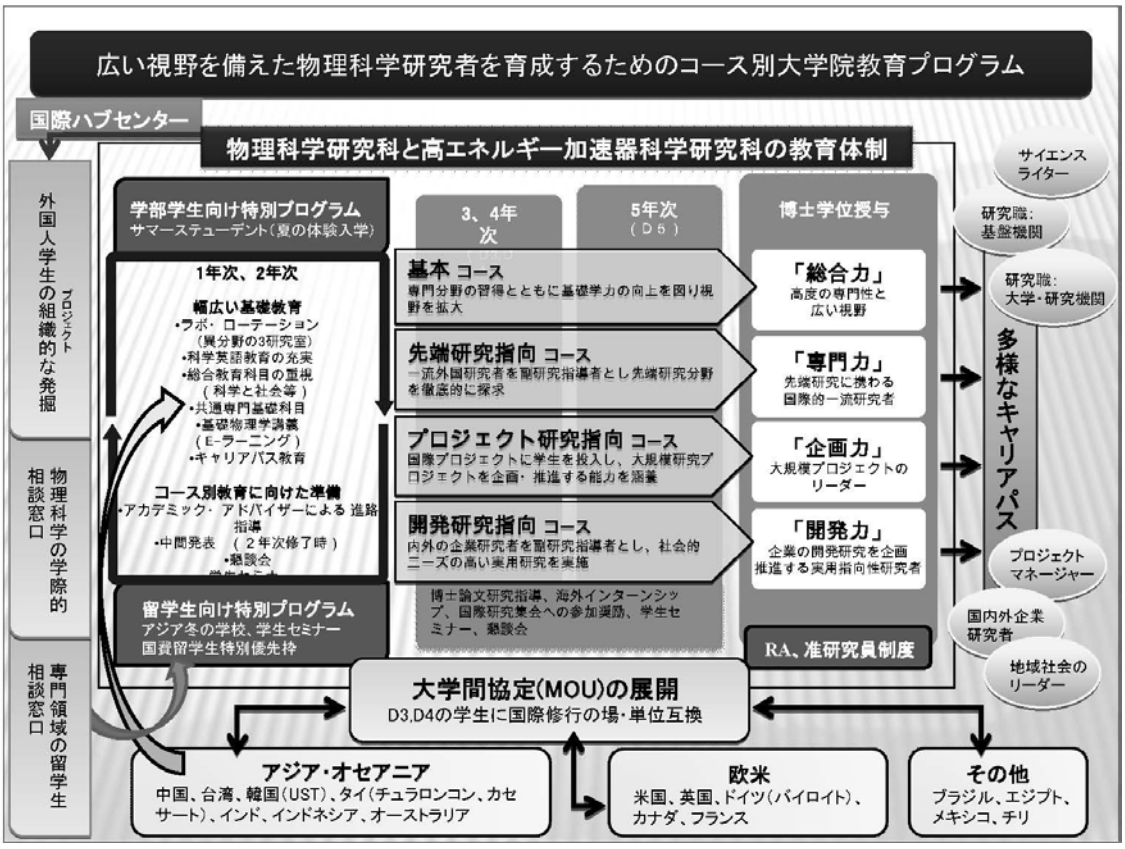
3-3-6　広い視野を備えた物理科学研究者を育成するためのコース別教育プログラム

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。



3-3-7　統合生命科学教育コース群

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きた（http://ibep.nips.ac.jp/index.html）。

2019 年度より総合的な教育の視点から，研究領域に関連する問題や課題に応じて，各研究科・専攻が開設する授業科目群をグループとしてまとめ，狭義の専門分野を超えて広く本学の学生に履修を促す「コース群」が設置され，「統合生命科学教育プログラム」より「統合生命科学教育コース群」として新たなスタートをきることとなった。

「統合生命科学教育コース群」としては，これからの生物学に寄与することの出来る研究者を育成するために，生物科学のみならず，物理科学，数理科学，情報科学などに通じる学際的かつ統合的な生命観を育てることを目的とする授業科目群を提供している。

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分子細胞生物学 II，④バイオインフォマティクス演習，⑤発生生物学 II，⑥生体分子シミュレーション入門*，⑦基礎生体分子科学，⑧構造生体分子科学，⑨統合進化学*が実施された。⑦バイオインフォマティクス演習について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ている。

＊履修登録者無しのため中止