

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。(関係機関に通知して、前期・後期の年2回の課題公募を行っており(前期には通年の課題も受付け)、また随時申請を受付けている。)

- (1) 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
- (2) 協力研究：所内の教授又は准教授等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)
- (3) 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。
 - (オ)「分子研研究会(on-web)」Zoom等によるweb開催を前提とするもの。
- (4) 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。
- (5) 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。
- (6) 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。
- (7) ①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。
②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 2020年度の実施状況

(1) 課題研究

| 課 題 名 (通年) | 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 | 九州大学大学院理学研究院 大谷 亮 |

(2) 協力研究

| 課 題 名 (通年) | 提案代表者 |
|---|----------------------------|
| 水溶液中における有機イオンと水和水の微視的構造と動的挙動に関する研究 | 神戸大学分子フォトサイエンス研究センター 富永 圭介 |
| 高度に配向制御した分子薄膜との協奏を利用した新奇磁性開発 | 千葉大学大学院工学研究院 山田 豊和 |
| エピタキシャル有機半導体 pn 接合の電子構造評価 | 東京理科大学理工学部 中山 泰生 |
| 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 |
| Diaminodiphenyldisulfide 誘導体を用いた触媒的 S-S 結合開裂と C-S 結合構築を伴う新規 benzothiazole の触媒合成 | 山形大学工学部 皆川 真規 |
| 部位特異的な化学修飾のための構造基盤の確立 | 鹿児島大学大学院理工学研究科 伊東 祐二 |
| 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 |
| マイクロフロー空間内の局所光励起による超分子ダイナミクスの解析 | 京都府立大学大学院生命環境科学研究科 沼田 宗典 |
| 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 |
| 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 |

| | | |
|--|---------------|-------|
| 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確立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 |
| CDW を示す遷移金属カルコゲナイドの波数空間でのバンド変調の研究 | 大阪大学産業科学研究所 | 田中慎一郎 |
| 不安定共振器型マイクロチップレーザーを用いたガスブレイクダウンに関する研究 | 大阪大学工学部 | 赤松 史光 |
| 高強度マイクロチップレーザーを用いた高出力テラヘルツパラメトリック発生器の開発 | 名古屋大学大学院工学研究科 | 村手 宏輔 |

課 題 名 (前期)

提案代表者

| | | |
|--|-------------------------|-------|
| 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 |
| ポリ(トリアリアルホスフィンスルフィド)保護サブナノ金属クラスター触媒の開発 | 愛媛大学大学院理工学研究科 | 太田 英俊 |
| 新触媒反応を基盤とした分子物性解明と微結晶構造解析 | 名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所 | 村上 慧 |
| センサータンパク質を駆動系とした可変型タンパク質超分子ナノ構造体の創製 | 奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科 | 山中 優 |
| UVSOR 光電子分光装置の超高性能化に向けた分光系と実験装置の性能把握実験 | 大阪大学産業科学研究所 | 菅 滋正 |
| 放射線照射により生成するマルトースのラジカル生成機構への水和水の効果 | 東京都立産業技術研究センター | 中川 清子 |
| 有機半導体層のエネルギー状態と光電変換機能 | 豊橋技術科学大学院工学研究科 | 伊崎 昌伸 |

課 題 名 (後期)

提案代表者

| | | |
|--|------------------|-------|
| 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 | 大阪工業大学工学部 | 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 | 静岡大学農学部 | 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 | 山形大学理学部 | 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 | 九州シンクロトロン光研究センター | 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 | 横浜国立大学理工学部 | 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 | 大阪大学産業科学研究所 | 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 | 関西学院大学理工学部 | 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 | 九州大学先端物質化学研究所 | 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 | 産業医科大学医学部 | 田中 悟 |

課 題 名 (後期二次募集)

提案代表者

| | | |
|--|-------------------------|-------|
| 放射線照射により生成するマルトースのラジカル生成機構への水和水の効果 | 東京都立産業技術研究センター | 中川 清子 |
| ナノスケール蓄光材料の新規開発と有機・無機媒体への分散 | 名城大学理工学部 | 西山 桂 |
| モメンタムマイクロスコプを用いた高移動度有機半導体高配向膜の分子軌道トモグラフィ | 筑波大学数理物質系 | 山田 洋一 |
| 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究科 | 林 雄二郎 |
| 糖アジドの還元にもなうライゲーション反応の開発 | 青森大学薬学部 | 鈴木 達哉 |
| 位相制御された逆コンプトン散乱ガンマ線の発生 | 名古屋大学シンクロトロン光研究センター | 高嶋 圭史 |
| 光合成アンテナ系の分子機構の解明に向けた計算化学的解析 | 名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所 | 藤本 和宏 |

(3) 研究会

課 題 名 (前期)

提案代表者

| | | |
|------------------------|------------|-------|
| 錯体化学に基づく分子の構造変換設計と機能制御 | 立命館大学生命科学部 | 越山 知美 |
|------------------------|------------|-------|

課 題 名 (後期)

提案代表者

| | | |
|--|---------------|-------|
| ナノ空間で光が織りなす分子操作・化学反応制御の新展開 | 北海道大学大学院理学研究院 | 南本 大穂 |
| Next Generation Spectro-Microscopy and Micro-Spectroscopy Workshop | 分子科学研究所 | 大東 琢治 |
| 錯体化学から始まる学術展開の可能性 | 名古屋大学大学院工学研究科 | 松田亮太郎 |

(4) 若手研究活動支援

| 課題名 | 提案代表者 |
|--------------------------------|---------------------|
| 第18回 ESR 夏の学校：ESR 法の基礎・理論・生体応用 | 大阪市立大学大学院理学研究科 加藤 賢 |

(6) UVSOR 施設利用

| 課題名 (前期) | 提案代表者 |
|--|---|
| LCS ガンマ線を用いた環境半導体マグネシウムスタナイト結晶の陽電子消滅寿命解析 | 山形大学理学部 北浦 守 |
| 光子誘起陽電子消滅法を用いた材料分析に関する研究 | 産業技術総合研究所 豊川 弘之 |
| UVSOR-BL1U からの LCS ガンマ線を用いた NRF 同位体 3D イメージング法の高分解能化 | 京都大学エネルギー理工学研究所 大垣 英明 |
| 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 | 広島大学大学院先進理工系科学研究科 高口 博志 |
| 環境半導体マグネシウムシリサイド結晶のテラヘルツ透過分光 | 山形大学理学部 北浦 守 |
| ゲルマニウムに発生する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 |
| 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 | 分子科学研究所 高谷 光 |
| アミノ酸ドーブした強誘電体のテラヘルツ分光 | 大阪大学大学院生命機能研究科 木村 真一 |
| 軟X線吸収分光法によるバルクヘテロ有機層/金属酸化物界面の電子状態評価 | 千葉大学大学院融合科学研究科 奥平 幸司 |
| MTB 触媒反応で形成される Mo 炭化物活性種の L 殻 XANES 構造解析 | 埼玉工業大学工学部 有谷 博文 |
| 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 |
| アモルファス化した Ag 添加ゼオライト蛍光体の局所環境解析 | 大阪府立大学大学院工学研究科 村田 秀信 |
| スピネル構造 $Mg_{1-x}Ni_xAl_2O_4$ 中のカチオン局所構造 | 九州大学大学院工学研究院 吉岡 聡 |
| 角度分解紫外光電子分光法による Au および SiO_2 上に作成した α -sexithiophene, p-sexiphenyl 薄膜の分子配向評価 | 千葉大学大学院融合科学研究科 奥平 幸司 |
| 軟X線吸収分光法による糖類分子と液体との相互作用の研究 | 東京大学大学院新領域創成科学研究科 佐々木 岳彦 |
| 軟X線 in situ XAFS 構造解析による白金合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 |
| 脂質二重膜中のリン脂質分子の電子状態測定によるイオン配位の評価 | 豊橋技術科学大学応用化学・生命工学系 手老 龍吾 |
| 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線共鳴散乱によるキラル液晶の精密構造解析 | 京都大学大学院理学研究科 高西 陽一 |
| 反応性有機金属触媒種の有機溶媒中軟X線 XAFS | 分子科学研究所 高谷 光 |
| 軟X線吸収スペクトルの定量解析によるグリシンベタイン食塩水の特異な水和構造の解明 | 広島大学大学院先進理工系科学研究科 岡田 和正 |
| 吸着炭酸イオンに誘起される Fe・Ni 触媒の活性構造のオペランド XAFS 観測 | 山口大学大学院創成科学研究科 吉田 真明 |
| Temperature Dependence of the Interaction of Calcium Dication with Water Probed by X-Ray Absorption Spectroscopy | Synchrotron SOLEIL CEOLIN, Denis |
| Mechanism Study of Reaction between Iron Salts and Organometallic Reagent by XAS | The Institute for Advanced Studies of Wuhan University LEI, Aiwen |
| 不整合変調と自己束縛励起子発光の相関及び不規則場による発光の不均一広がり | 秋田大学大学院理工学研究科 小玉 展宏 |
| $(Cs,Rb)_2ZnCl_4$ 混晶のオージェ・フリー発光のスペクトル変化から探る最外内殻正孔の格子緩和状態 | 山形大学理学部 北浦 守 |
| シンチレータの熱消光の包括的研究 | 東北大学未来科学技術共同研究センター 黒澤 俊介 |
| 赤色発光ハロゲン化物シンチレータの網羅的研究 | 東北大学未来科学技術共同研究センター 黒澤 俊介 |
| 紫外発光アルミニウム酸亜鉛薄膜の配向性制御と膜質の評価 | 静岡大学大学院工学研究科 小南 裕子 |
| 気体試料を対象とした吸収および発光分光法の整備 | 分子科学研究所 岩山 洋士 |
| 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・不純物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 |
| スピン軌道相互作用と電子相関の協奏による電子状態 | 大阪大学大学院生命機能研究科 木村 真一 |
| フルオロオレフィ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科 山ノ井 航平 |
| 三元金属ハロゲン化物結晶中の Tl^+ センターの光学特性の研究 | 大阪府立大学大学院理学系研究科 河相 武利 |
| $Na_{0.44}MnO_2$ 単結晶ナノワイヤーの Na 脱挿入過程のオペランド STXM 解析 | 産業技術総合研究所 細野 英司 |
| STXM による高性能光触媒材料のオペランド二次元マッピング解析 | 産業技術総合研究所 三石 雄悟 |
| フロー型セルを用いた帯電性ナノバブル周囲水の STXM マッピング | 東京大学物性研究所 原田 慈久 |
| 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 |
| 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 |

| | | |
|--|---|--------------------------------|
| STXM を用いたブレンドポリマーにおける化学状態解析 ビームラインおよび STXM の整備 | 分子科学研究所 分子科学研究所 | 大東 琢治 大東 琢治 |
| 放射光 CT と STXM-NEXAFS の連携による、隕石中の微小有機物粒子の 3 次元分布・構造の可視化と、初期太陽系における有機物進化の解明 | 高輝度光科学研究センター | 上相 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と基礎 データの取得 | 海洋研究開発機構高知コア研究所 | 伊藤 元雄 |
| Operando Microscopic Analysis at the Graphene-Metale Interface | Tamkang University | PONG, Way-faung |
| Penetration of Drug-Loaded Nanocarriers and Drug Release in Serine-Protease- Treated Skin | Freie University Berlin | RUEHL, Eckart gunther adolf |
| Comprehensive Understanding of Lithium Ion Insertion Mechanism via LiMn ₂ O ₄ Primary Particle Investigated by In-Situ Electrochemical STXM | Seoul National University | LIM, Jongwoo |
| Effects of Fuel Sulfur Content and Wet-Scrubbing on the Microphysical and Chemical Properties of Shipping Exhaust Particles | University of Gothenberg | KONG, Xiangrui |
| Needle-Shaped Hydroxyapatite Nanoparticles as Skin Penetration Enhancer | The National Nanotechnology Center of Thailand | MAHATNIRUNKUL, Thanisorn |
| 表面吸着分子についての多電子同時計測 | 富山大学教養教育院 | 彦坂 泰正 |
| BL4B 整備 | 分子科学研究所 | 岩山 洋士 |
| アモルファス半導体光誘起現象の可逆性に関する研究 | 岐阜大学工学部 | 林 浩司 |
| ⊙ T 複合対称性で保護された新奇トポロジカル物質の開拓 | 東北大学大学院理学研究科 | 佐藤 宇史 |
| SnS 単結晶の電子構造：バンドの起源の解明 | 東北大学多元物質科学研究所 | 鈴木 一誓 |
| 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 |
| Rashba 型スピン軌道相互作用が誘起する磁性合金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 |
| 複合原子層における新奇電子構造の開拓 | 東京大学大学院工学系研究科附属量子相 エレクトロニクス研究センター | 坂野 昌人 |
| Ni ₂ P(10-10) 上に作成した Fe リン化合物薄膜の電子状態 | 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 |
| 角度分解光電子分光による二層系銅酸化物高温超伝導体 Bi2212 のスペクトル 形状の温度変化 | 分子科学研究所 | 出田真一郎 |
| 層状強磁性 MAX 相系化合物 Ce ₄ Mo ₄ Al ₇ C ₃ の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ディラック電子系 NiTe ₂ における Pd 置換効果に よるバンド分散の変化 | 大阪大学大学院理学研究科 | 宮坂 茂樹 |
| 単原子層 Bi 超薄膜のトポロジカル秩序とスピン・バレー偏極 | 大阪大学大学院生命機能研究科 | 大坪 嘉之 |
| ARPES Study of Electronic Compressibility in Hole Doped Perovskite Iridates | Westlake University | RUIHUA, He |
| Electronic Structure Study on van der Waals Heterostructures: Mini Bands and the Mott Gap Induced by Moire Superlattice | Seoul National University | KIM, Changyoung |
| 波長 100 nm 真空紫外線の分光器 2 次光評価と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 |
| 強磁性鉄酸化物薄膜における光誘起磁化ダイナミクス | 東京大学物性研究所 | 松田 巖 |
| 表面状態の変化した多層膜反射鏡の極端紫外光に対する反射率評価 | 東京大学大学院新領域創成科学研究科 | 吉岡 和夫 |
| 不純物ドーブしたマグネシウムシリサイド結晶のプラズマ周波数の温度依存性 | 山形大学理学部 | 北浦 守 |
| 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 | 分子科学研究所 | 高谷 光 |
| 電流による局在電子状態の融解現象の直接観測 | 大阪大学大学院生命機能研究科 | 木村 真一 |
| 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 (前年度からの継続研究) | 広島大学大学院先進理工系科学研究科 | 藪田ひかる |
| 低エネルギー高分解能 ARPES で探るトポロジカル超伝導 | 東北大学大学院理学研究科 | 佐藤 宇史 |
| SnS 単結晶の電子構造：伝導電子の観測 | 東北大学多元物質科学研究所 | 鈴木 一誓 |
| 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 2 | 東京大学大学院理学系研究科 | 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 III | 分子科学研究所 | 解良 聡 |
| BL7U 光電子エンドステーションの整備 | 分子科学研究所 | 田中 清尚 |
| 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 スペクトル形状の温度変化 | 分子科学研究所 | 出田真一郎 |
| 低励起エネルギー高分解能光電子分光による La _{(1-x)/3} Li _x NbO ₃ 単結晶の電子 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 |
| 角度分解光電子分光による高電子ドーブ鉄系超伝導体 LaFeAsO _{1-x} H _x のフェル ミ面及び超伝導ギャップ測定 | 大阪大学大学院理学研究科 | 宮坂 茂樹 |
| 再構成 Au 表面上グラフェンの共鳴角度分解光電子分光 | 大阪大学産業科学研究所 | 田中慎一郎 |
| トポロジカル近藤絶縁体単表面超構造による表面電子状態への影響 | 大阪大学大学院生命機能研究科 | 大坪 嘉之 |
| Understanding Low-Temperature Insulator Transitions in 2D Halide Perovskites | Concordia University | SALZMANN, Ingo |
| 高速シンチレータ材料におけるエネルギー移動と内殻励起の寄与の定量的解析 | 東北大学大学院工学研究科 | 越水 正典 |

| | | |
|-----------------------------|----------------------------|-------|
| ボロンドープダイヤモンド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 |
| VUV ガラス材料の光学特性評価 | 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 |

課 題 名 (後期) 提案代表者

| | | |
|--|-----------------------------|-------|
| 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東海量子ビーム応用研究センター | 早川 岳人 |
| 干渉計を用いたアンジュレータ放射の波形測定 | 名古屋大学シンクロトロン光研究センター | 高嶋 圭史 |
| カーボンナノチューブに閉じ込めた硫黄原子鎖の構造 | 富山大学理学部 | 池本 弘之 |
| 高効率化を目指した超薄膜グラフェン電子収量用液体セルの開発 | 名古屋大学大学院理学研究科 | 三石 郁之 |
| 多層膜反射鏡の反射率測定 | 東京大学大学院新領域創成科学研究科 | 吉川 一朗 |
| 鏡面研磨した隕石片の極端紫外領域における反射率特性に関する研究 | 東京大学大学院新領域創成科学研究科 | 吉岡 和夫 |
| 彗星探査機に搭載する新型吸収セルの性能評価 | 宇宙航空研究開発機構太陽系科学研究系 | 桑原 正輝 |
| BL5B における迷光除去マスク設置および温度安定化による取出し光エネルギー変動改善 | 京都大学エネルギー理工学研究所 | 全 炳俊 |
| 中～遠赤外吸収分光による高移動度有機半導体単結晶の分子・格子振動の探索 | 東京理科大学理工学部 | 中山 泰生 |
| 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 |
| アンジュレータ放射光渦のダブルスリット回折実験 | 広島大学大学院先進理工系科学研究科 | 和田 真一 |
| 軟X線分光による有機マグネシウム化合物の構造解析 | 京都大学化学研究所 | 高谷 光 |
| 金基板上における共有結合性有機分子構造体の電子状態 | 分子科学研究所 | 解良 聡 |
| 軟X線 XAFS による有機マグネシウム化合物の構造解析 | 京都大学化学研究所 | 高谷 光 |
| 曖昧な「結晶性」を左右する物理的指標の解明 | 山形大学理学部 | 北浦 守 |

(7) 施設利用

② 装置開発室

課 題 名 (後期) 提案代表者

| | | |
|---------------------------|---------------|-------|
| 高周波磁場変調を用いた ESR 測定システムの構築 | 名古屋大学大学院理学研究科 | 三野 広幸 |
|---------------------------|---------------|-------|

③ 計算機利用

課 題 名 (通年) 提案代表者

| | | |
|--|------------------------|--------|
| 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 |
| 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 |
| カイラル分子が作り出す電子カイラリティの生成機構と場の量子論に基づく局所物理量による量子物性の研究 | 京都大学大学院工学研究科 | 瀬波 大土 |
| 高反応性のジボラン (4)・Al アニオンの性質の解明およびメタンの C-H 結合活性化へ向けた均一系触媒設計 | 名古屋大学大学院工学研究科 | 山下 誠 |
| 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 | 赤瀬 大 |
| 量子多成分系分子理論を用いた水素ダイナミクスと同位体効果の理論的研究 | 横浜市立大学データサイエンス学部 | 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 |
| 密度汎関数法計算の新たな展開とナノ表面・界面成長機構の解明 | 名古屋大学未来材料・システム研究所 | 押山 淳 |
| 量子力学 (QM) / 分子力学 (MM) 法によるハロ酸脱ハロゲン化酵素の反応機構解析 | 長浜バイオ大学メディカルバイオサイエンス学科 | 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 |
| 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 | 中央大学理工学部 | 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活性評価とシクロペンタジエノン金属錯体による金属配位子協働的結合切断反応の開発 | 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 | お茶の水女子大学基幹研究院自然科学系 | 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 |
| トポロジカル π 共役分子の構造と物性 | 分子科学研究所 | 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 |
| 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 |
| 分子シミュレーションを用いたヘロナミド類の抗真菌作用メカニズムの解明 | 理化学研究所生命機能科学研究センター | 齋藤 大明 |
| 構造多糖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 |
| 全原子分子動力学計算の高分子研究への展開 | 名古屋大学大学院工学研究科 | 岡崎 進 |
| 生体・高分子自己集合系の分子シミュレーション | 名古屋大学大学院工学研究科 | 篠田 渉 |
| 水溶液中の重金属イオンの活性炭に対する吸着挙動の解析 | 徳島大学大学院社会産業理工学研究部 | 吉田 健 |
| 多原子分子からなる溶質の溶媒和自由エネルギーを正確に求める OZ 理論の開発 | 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 |
| パイ共役系環状化合物の合成研究と光物性 | 北里大学理学部化学科 | 長谷川真士 |
| 三次元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 |
| ミオシン VI の反応サイクル全体の動的ランドスケープによるステップ運動機構の解明 | 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 |
| 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 |
| 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 | 横浜国立大学大学院生命医科学研究科 | 森次 圭 |
| 脱溶媒和効果を考慮した手法による抗体と糖鎖間相互作用の比較研究 | 北里大学一般教育部 | 能登 香 |
| 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 |
| 遷移金属化合物および包接化合物の構造・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自然科学系 | 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5 | 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 | 早稲田大学大学院先進理工学研究科 | 中井 浩巳 |
| タンパク質間相互作用の粗視化モデルの開発と電子伝達系への応用 | 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 | 東京都立大学大学院理学研究科 | 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 |
| 第一原理計算およびマテリアルズインフォマティクスによるナノ構造および原子層物質の形成と機能発現に関する研究 | 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 |
| 分子運動に起因する動的分子間相互作用を活用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 |
| 高分子構造変化における水の影響 | 信州大学国際ファイバー工学研究所 | 望月 建爾 |
| 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 |
| 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 |
| 第一原理分子動力学シミュレーションによる HCl 水溶液表面での Zundel, Eigen 構造研究 | 富山大学理工学研究部 | 石山 達也 |

| | | |
|---|--|----------------|
| 光起電力デバイスの電荷移動メカニズム | 日本女子大学理学部 | 村岡 梓 |
| 有機分子半導体膜中の積層構造欠陥の電子物性の研究 | 千葉大学大学院理学研究院 | 中山 隆史 |
| 反応経路自動探索を用いる触媒・発光材料の理論的研究 | 奈良先端科学技術大学院大学研究推進機構 | 畑中 美穂 |
| イオン性液体におけるイオン伝導率、内部移動度、および Haven 比の包括的研究 1: イオン質量依存性 | 新潟大学理学部 | 大鳥 範和 |
| ボー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 |
| ジョードピアールを用いた APEX 反応の反応機構解明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 |
| Theoretical Study to Improve IrOx-Type Electrodes for Water Oxidation | 東京工業大学大学院化学専攻 | Juhasz Gergely |
| 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 |
| 質量分析法による生体分子の気相分解過程に関する研究 | 産業技術総合研究所 | 浅川 大樹 |
| 機械学習による溶媒とモデルの改善と酸解離定数への応用 | 筑波大学大学院数理工学系 | 松井 亨 |
| 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 電子系イオンの設計・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 |
| タンパク質の機能を制御するペプチド・タンパク質の合理設計 | 東京大学大学院工学系研究科 | 森本 淳平 |
| 核変換溶融塩ターゲット開発に向けた DFT 分子動力学計算による熱力学量評価 | 東北大学大学院工学研究科 | 穴戸 博紀 |
| 極低温気相紫外分光と Franck-Condon シミュレーションによるホスト-ゲスト化合物の包接構造の研究 | 広島大学大学院理学研究科 | 井口 佳哉 |
| ピンサー配位子を有する鉄錯体に関する理論的研究 | 北里大学理学部 | 神谷 昌宏 |
| 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 | 名古屋大学大学院理学研究科 | 野口 巧 |
| Pd(II) 二核錯体を用いる光触媒的 C-H 塩素化反応の開発 | 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 |
| 計算化学を利用した有機化学反応機構の解明 | 公益財団法人乙卯研究所 | 黒内 寛明 |
| 計算化学を用いた触媒の理論設計および有機発光材料の物性解析 | 北海道大学大学院工学研究院 | 伊藤 肇 |
| 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 |
| 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 |
| 遷移金属触媒による小分子活性化の反応機構についての DFT 研究 | 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 |
| 機械学習を用いた低熱伝導率ホイスラー型熱電変換材料の探索 | 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における紫外線損傷 DNA の修復機構の解明 | 理化学研究所生命機能科学研究センター | 佐藤 竜馬 |
| ケイ酸系溶融体より生ずる Ca_2SiO_4 結晶における $[\text{SiO}_4]^{4-}$ 錯体構造へ及ぼす固溶元素の影響 | 大阪大学大学院工学研究科 | 鈴木 賢紀 |
| 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 |
| 分子動力学法を用いた生体巨大分子の拡散係数の計算: 変性の効果 | 九州大学大学院理学研究院 | 秋山 良 |
| 生体系や表面系の凝縮系の第一原理計算による電子状態からの機能メカニズムの解明 | 理化学研究所 | 中村振一郎 |
| 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 |
| 分子金属錯体の精密制御に基づく配列・空間の創出 | 東京大学大学院理学系研究科 | 長田 浩一 |
| 新規合成反応の開発を志向した理論化学的研究 | 東京農業大学生命科学部 | 斉藤 竜男 |
| 静電場中における分子イオンの輸送ダイナミクス | 金沢大学大学院自然科学研究科 | 玉舘 知也 |
| ナノカーボンと有機物を用いた機能材料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 | 手島 正吾 |
| 膜透過ペプチドに対する細胞膜表面への移動過程に対する理論的研究 | 筑波大学計算科学研究センター | 西澤 宏晃 |
| 加水分解酵素を用いる速度論的光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 |
| 高極性液晶化合物の分子動力学シミュレーション 2 | 九州大学先端物質化学研究所 | 奥村 泰志 |
| 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 |
| 工業原料を利用した精密化学変換反応の開発 | 大阪大学大学院工学研究科 | 生越 専介 |
| 種々の分子の原子間力顕微鏡像の理論計算 | 金沢大学ナノ生命科学研究所 | 炭竈 享司 |
| 超短レーザーパルスを用いたナノ分子の反応動力学イメージング理論 | 東北大学金属材料研究所 | 山崎 馨 |
| 金属有機構造体による水同位体分子認識 | 信州大学先鋭領域融合研究群先鋭材料研究所 | 田中 秀樹 |
| 分子動力学シミュレーションによる高分子液晶およびモデル液晶化合物の熱伝導特性解析 | 東京工業大学物質理工学院 | 古屋 秀峰 |
| 人工光合成のための界面の研究と強相関ソルバーの検証 | 神戸大学科学技術イノベーション研究科 | 天能精一郎 |
| 機能性分子集合体の分子動力学研究: ナノ界面における構造とダイナミクスの解析 | 兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科 | 鷺津 仁志 |

| | | |
|---|---|---|
| カルマン渦におけるキャピテーションの分子動力学計算 Structural Mechanism of T Cell Activation | 東京大学物性研究所 大阪大学微生物病研究所 | 野口 博司 Floris Jan van Eerden |
| トリチウムベータ崩壊の生体高分子への影響 軸性キラルな発光色素の励起状態構造の解明 実験と計算の融合による気相生体分子の精密構造決定：分子認識機構の解明に向けて イオン性色素結晶を含む新規 π 電子系の合成と配列制御 微視的構造から考えるタンパク質の塩析・溶解 分子内および分子間電子移動の分子軌道法による研究 クロコン酸結晶における赤外スペクトルの理論研究 | 核融合科学研究所 岡山大学大学院自然科学研究科 東京工業大学科学技術創成研究院 山形大学大学院有機材料システム研究科 九州産業大学理工学部 神奈川大学総合理学研究所 高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 | 中村 浩章 高石 和人 平田 圭祐 山門 陵平 末松安由美 田仲 二郎 岩野 薫 |
| 金属錯体に関する理論的研究 水素結合クラスターにおける赤外誘起異性化反応の観測と異性化経路の探索 色素増感光電極・光触媒及び太陽電池等の計算化学的研究 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 低分子非晶質有機半導体材料の熱的・化学的安定性および電荷輸送特性に関する計算 アゾキラル金属錯体の電子状態の DFT 計算 キラル超分子集合体の理論的検討 蛋白質による DNA 加水分解における溶媒の役割 化学反応の <i>ab initio</i> 計算による研究 クラスター複合体の反応性解析 分子シミュレーションによる分子集合体の研究 エノールエステルの不斉加水分解 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 分子配列によって制御された有機ホウ素錯体の発色機構の解明 第一原理及び古典分子動力学計算による Si 関連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 | 静岡理工科大学理工学部 北里大学理学部 産業技術総合研究所 福岡大学薬学部 山形大学大学院有機材料システム研究科 東京理科大学理学部 東京大学大学院工学系研究科 九州工業大学大学院情報工学研究院 愛媛大学工学研究科理学系 豊田工業大学クラスター研究室 名古屋文理大学情報メディア学科 明星大学理工学部 早稲田大学国際教養学部 名古屋工業大学工学研究科 産業技術総合研究所 | 関山 秀雄 石川 春樹 草間 仁 池田 浩人 横山 大輔 秋津 貴城 伊藤 喜光 入佐 正幸 長岡 伸一 市橋 正彦 本多 一彦 松本 一嗣 稲葉 知士 小野 克彦 森下 徹也 |
| 生体分子および溶媒の構造機能相関の解明 水素結合系における光化学過程の理論的研究 振電相互作用に関する理論的研究 振動円二色性分光法の超分子キラリティへの応用 発光性金属錯体の励起状態の研究 歪んだ多環芳香族化合物の構造と性質 光機能性分子の電子状態・構造・スペクトル計算 新規な典型元素化合物の構造と反応性の研究 超分子錯体に関する熱力学的研究 遷移金属ダイカルコゲナイドの第一原理計算 (II) ジチアシクロペンテン環トライマー骨格を有する短波長赤外光吸収材料の電子状態解明 典型元素の特性を活用した有機エレクトロルミネッセンス用発光材料の開発 第一原理シミュレーションによる固体酸化物触媒の機能解明 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 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 タンパク質凝集の分子シミュレーション 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 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 星間空間における環状分子の生成経路探索 分子シミュレーションによるイオン液体の研究 大規模 GW/BSE 法による非フラレン電子アクセプター太陽電池の界面電荷移動状態の解析 微小管のシーム領域における構造集団の分子動力学計算解析 4次元 MRI による脳の機能及び構造解析 機械学習を用いた機能的 MRI データ解析 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 分子クラスターの広帯域高分解能振動回転分光による分子間相互作用の研究 | 量子科学技術研究開発機構量子ビーム科学研究部門 立命館大学生命科学部 弘前大学大学院理工学研究科 京都大学福井謙一記念研究センター 愛媛大学大学院理工学研究科 日本工業大学工学部 東邦大学理学部 室蘭工業大学工学研究科 学習院大学理学部 東京工業高等専門学校 大阪大学産業科学研究所 静岡大学学術院工学領域 茨城大学工学部物質科学工学科 東京大学大学院工学系研究科 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 生命創成探究センター アストロバイオロジーセンター 分子科学研究所 分子科学研究所 信州大学農学部 生理学研究所 生理学研究所 大阪府立大学大学院理学系研究科 東京工業大学理学院 | 黒崎 譲 高橋 卓也 山崎 祥平 佐藤 徹 佐藤 久子 大澤 正久 渡邊総一郎 飯森 俊文 狩野 直和 井手 智仁 田中慎一郎 植田 一正 吾郷 友宏 中山 哲 斉藤 真司 江原 正博 奥村 久士 長坂 将成 古賀 信康 小松 勇 石田 干城 藤田 貴敏 梅澤 公二 福永 雅喜 近添 淳一 酒巻 大輔 水瀬 賢太 |

| | | |
|---|------------------------------|------------------|
| 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 |
| 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 |
| 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 |
| 量子化学計算による反応機構の解明 | 産業技術総合研究所 | 栢沼 愛 |
| 質量分析における有機過酸化物の安定性の考察 | 東邦大学医学部 | 岡 真悠子 |
| チモールブルーおよびプロモチモールブルーの電子状態解析 | 弘前大学教育学部 | 島田 透 |
| 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 |
| 4d または 5d 金属を含む複核および三核金属錯体の電子状態 | 岐阜大学工学部 | 海老原昌弘 |
| π 共役拡張型有機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 |
| 短寿命種や界面化学種の振動スペクトル解析 | 筑波大学数理学系 | 石橋 孝章 |
| 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 |
| 分子シミュレーションによる抗体設計 | 東京大学大学院工学系研究科 | 黒田 大祐 |
| チオエーテルをアンカーとして持つ有機金属分子ワイヤーの開発 | 東京工業大学化学生命科学研究科 | 田中 裕也 |
| 分子系における磁性およびフォノン物性の第一原理計算 | 分子科学研究所 | 南谷 英美 |
| 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 |
| Multi-Scale Modeling of Interstellar Radical Species on Water Ice | 北海道大学低温研究所 | W. M. C. Sameera |
| 炭素鎖分子の永久双極子モーメントの再評価 | 上智大学理工学部 | 久世 信彦 |
| 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 |
| 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 |
| 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 |
| 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 |
| 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 |
| 新規機能性有機色素の開発 | 岐阜大学工学部 | 船曳 一正 |
| 理論計算ならびに機械学習を利用した有機半導体、触媒開発 | 相模中央化学研究所 | 已上 幸一郎 |
| 高周期元素含む高反応性化学結合の理論的研究 | 立教大学理学部 | 箕浦 真生 |
| 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 |
| 配位子の最適化による高活性重合触媒の設計 | 相模中央化学研究所 | 長岡 正宏 |
| 電子状態計算にもとづく低次元開殻分子系物質の構造 - 物性相関の解明 | 分子科学研究所 | 草本 哲郎 |
| 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 |
| 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 |
| 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 |
| ヘキサアザトリフェニレン電荷移動錯体の構造評価 | 関西学院大学理工学部 | 田中 大輔 |
| 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 |
| DFT Calculation of the Diffusion of Methoxy Species on TiO ₂ (110) Surface | 北海道大学触媒科学研究所 | LIU CAN |
| GaN を用いた次世代パワーデバイスの計算科学による設計 | 名古屋大学大学院工学研究科 | 白石 賢二 |
| 多核構造を有する前周期遷移金属アルキリデンおよびアルキリジンクラスターの合成 | 岡山大学大学院自然科学研究科 | 黒木 堯 |
| 理論計算に先導される特異環境で発光する新規 π 共役系分子の開発 | 名古屋大学大学院理学研究科 | 村井 征史 |
| 7-メチルグアニンカ場の作成 | 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 |
| 人工光合成に向けた有機金属錯体の電子状態に関する研究 | 東京都立大学大学教育センター | 立花 宏 |
| ピロール・酸化プロピレンクラスターのキラル認識の研究 | 静岡大学理学部 | 松本 剛昭 |
| カーボンナノチューブおよび窒化ホウ素ナノチューブの合成メカニズム解明に向けた量子化学計算と分子動力学シミュレーション | 東京大学大学院工学系研究科 | 丸山 茂夫 |
| 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 |
| 金属酸化物ナノクラスターの設計とその電子状態解析 | 東京大学大学院工学系研究科 | 鈴木 康介 |
| 新規双極性有機典型元素化合物の創成と反応性 | 北里大学理学部 | 内山 洋介 |
| タンパク質間相互作用の分子間相互作用シミュレーションによる予測 | 東京大学大学院工学系研究科 | 平林 祐介 |
| 三重項消滅アップコンバージョンのための金属クラスター増感剤に関する計算科学的研究 | 立教大学理学部 | 三井 正明 |
| 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 荘一郎 |
| EGS5 を用いたガンマ線誘起陽電子消滅計測のシミュレーション | 分子科学研究所 | 平 義隆 |
| 有機パラジウム錯体の触媒作用に関する研究 | 東京電機大学工学部 | 山本 哲也 |
| 縮合多環芳香族化合物に基づく有機発光材料の開発 | 東京農工大学大学院工学研究院 | 中野 幸司 |
| 銀ヒドリドナノクラスターの構造解明 | 広島大学大学院先進理工系科学研究科 | 水田 勉 |

| | | |
|---|-----------------------------|-------------------|
| 二成分型液晶の構造解析 | 北里大学理学部 | 吉田 純 |
| 分子動力学シミュレーションと機械学習を組み合わせたプロテインキナーゼCリガンド結合能予測モデルの開発 | 香川大学農学部 | 柳田 亮 |
| 複数の反芳香族骨格を集積させた π 電子系の量子化学計算 | 名古屋工業大学大学院工学研究科 | 高木 幸治 |
| 典型元素の特性を活用した新機能 π 共役分子の開発 | 茨城工業高等専門学校 | 江川 泰暢 |
| 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 |
| 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 |
| 遷移金属錯体触媒を用いる有機反応の反応機構研究 | 分子科学研究所 | 高谷 光 |
| 溶液中金属錯体の電子状態と反応性の理論的研究 | 大阪大学大学院工学研究科 | 小杉 健斗 |
| 錯体配位子を用いたランタノイド錯体の磁気的性質 | 金沢大学国際基幹教育院 | 三橋 了爾 |
| 柔軟な骨格による巨大金属錯体構造の設計に向けた計算による配座予測方法の検討 | お茶の水女子大学基幹研究院自然科学系 | 三宅 亮介 |
| 細胞内の超硫黄分子の振動解析 | 東北大学大学院薬学研究科 | 宮田 大輔 |
| 分子シミュレーションと物理化学測定によるレクチン-多糖類複合体の相互作用解析と機能改変 | 東京大学大学院工学系研究科 | 大川 将志 |
| エステルダンス反応の位置選択性に関する理論的考察 | 早稲田大学先進理工学部 | 太田 英介 |
| 生物分子系の電子構造及び反応性の解明に向けた計算化学的解析 | 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 |
| 液相糖類分子のXASスペクトルシミュレーション | 東京大学大学院新領域創成科学研究科 | 佐々木岳彦 |
| 分子自由度とスピンの理論的研究 | 奈良女子大学自然科学系 | 土射津昌久 |
| シュウドアズリンMet16変異体のQM/MM計算 | 茨城大学理工学研究科 | 山口 峻英 |
| 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 |
| 拡張アンサンブル法を用いた糖鎖クラスターの立体構造予測 | 医薬基盤研究所 | 李 秀榮 |
| 新規超原子価ヨウ素化合物の探索 | 東京工業大学物質理工学院 | 信田 尚毅 |
| サブユニット集積型ナノサイズ空孔錯体の自己集合過程および機能の解明 | 東京大学大学院工学系研究科 | 堂本 悠也 |
| 生体分子複合体系の全原子・粗視化分子シミュレーション研究 | 神戸大学大学院システム情報学研究科 | 田中 成典 |
| 柔構造を持つマルチドメインタンパク質の構造空間探索のための分子シミュレーション | 生命創成探究センター | 加藤 晃一 |
| 菌類・地衣類代謝物の放射性セシウム蓄積機構および抗ウイルス機能に関する計算科学研究 | 日本原子力研究開発機構システム計算科学センター | 数納 広哉 |
| 新規高機能性の不斉触媒研究 | 名古屋工業大学工学部 | 中村 修一 |
| 機能性ピビリドナート配位子を有する遷移金属錯体触媒によるアルコール脱水素化反応の機構研究 | 京都大学大学院人間・環境学研究科 | 新林 卓也 |
| 理論計算による内包フラレンの研究 | 東北大学大学院理学研究科 | 岡田 洋史 |
| マイクロフロー反応場を用いて創製される準安定超分子構造の解析 | 京都府立大学大学院生命環境科学研究科 | 沼田 宗典 |
| Theoretical Studies of Light-Matter Interactions in Molecular Systems | 京都大学大学院工学研究科 | Nguyen Thanh Phuc |
| 分子動力学シミュレーションによるアミロイドペプチドの安定化構造の解析 | 東京理科大学総合研究院赤外自由電子レーザー研究センター | 川崎 平康 |
| インターエレメント多重結合をもつ有機イオンの反応機構に関する量子化学的研究 | 奈良女子大学自然科学系 | 竹内 孝江 |
| 典型金属触媒反応の量子化学計算を用いた反応機構解明 | 大阪大学大学院工学研究科 | 西本 能弘 |
| 階層方程式を用いた電子フォノン相互作用に関する計算研究：有機太陽電池におけるエキシトン移動及びホルスタイン・ハバードモデルへの応用 | 京都大学大学院理学研究科 | 谷村 吉隆 |
| 理論計算を用いた求核性コバルト錯体の触媒作用の解明 | 広島大学大学院先進理工系科学研究科 | 米山 公啓 |
| 超高速分光と量子化学計算を用いた光機能性分子の励起状態ダイナミクスの解明 | 九州大学大学院理学研究院 | 宮田 潔志 |
| 深層学習によるヒトの知覚アルゴリズムの探求 | 基礎生物学研究所 | 渡辺 英治 |
| 高反応活性な典型元素及び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 |
| 中間的なスピン状態を経由するコバルト触媒反応の計算化学的機構解析 | 北海道大学大学院薬学研究科 | 小島 正寛 |
| 複雑な星間有機分子生成反応の理論的研究 | 東洋大学理工学部 | 田代 基慶 |
| 金属錯体場における小分子の捕捉・活性化に関する計算化学的考察 | 名古屋工業大学大学院工学研究科 | 小澤 智宏 |
| 高分子合成を志向した有機素反応の反応機構解析 | 群馬大学大学院理工学府 | 覚知 亮平 |
| シリコン基板上の有機分子吸着構造と電子状態の解析 | 横浜国立大学大学院工学研究院 | 大野 真也 |
| アルケニルフルオリド同士のメタセシス反応実現のに向けた新規支持配位子の設計 | 相模中央化学研究所 | 上地 達矢 |
| 分子磁性体の統計熱力学 | 大阪市立大学大学院理学研究科 | 塩見 大輔 |
| 大腸菌脂質分子の力場作成 | 東京大学生物生産工学研究センター | 篠田 恵子 |
| イオン・原子及びイオン・分子衝突の理論的研究 | 宮崎大学工学部 | 五十嵐明則 |

(計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業利用枠)

課 題 名 (通年)

提案代表者

(計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業利用枠)

| | | |
|---|-------------------------|-------|
| 貴金属フリーの汎用元素ナノ触媒に向けた第一原理計算 | 北海道大学大学院理学研究院 | 武次 徹也 |
| 触媒および電極の電子状態のための理論研究 | 早稲田大学大学院理工学術院 | 中井 浩巳 |
| 新規多機能電解液の保護膜形成機構に関する理論的解析 | 東京大学大学院工学系研究科 | 山田 淳夫 |
| 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 |
| 高強度フェムト秒パルスにより引き起こされるナノ分子の電子・反応動力学イメージングに関する動力学理論 | 理化学研究所 | 山崎 馨 |
| 省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション | 名古屋大学未来材料・システム研究所 | 押山 淳 |
| 次世代二次電池・燃料電池開発による ET 革命に向けた計算・データ材料科学 | 物質・材料研究機構エネルギー・環境材料研究拠点 | 館山 佳尚 |
| 環境適合型機能性化学品 | 大阪大学大学院基礎工学研究科 | 松林 伸幸 |

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

| 分類 | 中期計画区分 年度 | 第3期 | | | | | | | |
|-----------------|-------------------------|------|------|------|------|------|-----|-------|------|
| | | 2016 | 2017 | 2018 | 2019 | 2020 | | | |
| | | | | | | 前期 | 後期 | 計 | 登録者数 |
| 共同研究 | (1) 課題研究 | 2 | 1 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 5 |
| | (2) 協力研究* (ナノプラット) | 82 | 73 | 45 | 37 | 21 | 30 | 51 | 106 |
| 研究会 | (3) 研究会 | 7 | 10 | 10 | 7 | 1 | 3 | 4 | 89 |
| | (4) 若手研究活動支援 | 1 | 2 | 1 | 2 | 1 | 0 | 1 | 42 |
| | (5) 岡崎コンファレンス | 3 | 1 | 1 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| | 所長招へい | 81 | 100 | 110 | 101 | 3 | 7 | 10 | 10 |
| | UVSOR 研究会 | 1 | 1 | 1 | 1 | 0 | 1 | 1 | 89 |
| 施設利用 | (6)UVSOR | 142 | 160 | 213 | 186 | 89 | 15 | 104 | 566 |
| | (ナノプラット) | 38 | 43 | 2 | 4 | 1 | 1 | 2 | 7 |
| | (7) ①機器センター (ナノプラット) | 196 | 162 | 153 | 153 | 64 | 75 | 139 | 275 |
| | (7) ②装置開発室 (ナノプラット) | 2 | 2 | 3 | 3 | 0 | 1 | 1 | 2 |
| (7) ③計算科学研究センター | 221 | 224 | 248 | 268 | 269 | 0 | 269 | 1,142 | |

* UVSOR 利用を含む。

年度ごとの実績として、共同研究と施設利用の分類では課題件数を示す。(1) 課題研究、(7) ③計算科学研究センターは、通年で1課題を1件のまま計数、それ以外の通年課題は前期と後期の2期分として、1課題を2件として年度計に表す。研究会の分類では開催件数を示す。ただし、所長招へいは旅費支給者人数を示す。右端列にある登録者数は、共同研究と施設利用の分類では課題登録者数、研究会の分類では参加人数を示す。

3-1-4 分子研研究会プログラム

【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7月10日(金) (オンライン)

- 9:30 - 9:35 西原 寛 錯体化学会会長 挨拶
9:35 - 9:40 大場 正昭 実行委員長 挨拶
9:40 - 9:45 趣旨説明 越山 友美
座長：越山 友美
9:45 - 10:10 非平面ビルディングブロックからなる分子集合体
焼山 佑美 (大阪大学大学院工学研究科)
10:10 - 10:35 刺激に応答する金属錯体の機能制御
中井 英隆 (近畿大学理工学部応用化学科)
10:35 - 11:00 電子状態インフォマティクスによる機能性分子の探索
杉本 学 (熊本大学大学院先端科学研究部)

座長：小林 厚志

- 11:15 - 11:40 速度論的制御に基づく金属錯体型マクロサイクルの構造変換と機能創出
酒田 陽子 (金沢大学理工研究域物質化学系)
11:40 - 12:05 金属錯体ナノ空間における分子捕捉と反応
松田 亮太郎 (名古屋大学大学院工学研究科)
12:05 - 12:30 消光経路のデータベースと機械学習を用いるランノイド発光材料の理解・分子設計
畑中 美穂 (慶應義塾大学理工学部化学科)

座長：山田 鉄兵

- 13:30 - 13:55 3Dドメインスワッピングによる金属タンパク質の超分子創成
廣田 俊 (奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科)
13:55 - 14:20 高分解能電子顕微鏡による配位高分子の形成機構研究
原野 幸治 (東京大学大学院理学系研究科)
14:20 - 14:45 金属錯体ユニットを精密配置したマクロサイクルによる超分子構造体の構築と分子捕捉
中村 貴志 (筑波大学数理工学系)

座長：二瓶 雅之

- 15:00 - 15:15 含窒素グラフェンナノリボン構造を有する Fe/N/C 触媒の調製と評価
松元 香樹¹, 小野田 晃², 林 高史¹ (¹大阪大学大学院工学研究科, ²北海道大学大学院地球環境科学研究科)
15:15 - 15:30 二次元中空シート型配位高分子の構造と磁気特性の可逆的変換
芳野 遼, 大谷 亮, 大場 正昭 (九州大学大学院理学研究院)
15:30 - 15:55 タンパク質金属配位子を利用した反応制御
藤枝 伸宇 (大阪府立大学大学院生命環境科学研究科)
15:55 - 16:20 ソフトクリスタル特性と希土類錯体の発光
長谷川 美貴 (青山学院大学理工学部)
16:20 - 16:25 閉会の挨拶 林 高史 錯体化学会副会長
16:45 - 18:45 ポスターセッション

【分子研研究会】

ナノ空間で光が織りなす分子操作・化学反応制御の新展開
2020年12月4日(金)～5日(土) (オンライン)

12月4日(金)

- 13:00 - 13:10 開会の挨拶 (南本大穂 (北海道大学))
一般講演：発表 20分, 質疑 5分
チュートリアル講演：発表 55分, 質疑 5分
第一セッション (座長：袁輪陽介 (大阪大学))
13:10 - 13:35 O-01 土井 謙太郎 (豊橋技術科学大学) 「マイクロ・ナノ粒子の光操作と電気検出」
13:35 - 14:00 O-02 西山 嘉男 (金沢大学) 「ナノ物質における時空間挙動の観測と制御」
14:00 - 14:25 O-03 赤松 大輔 (産業技術総合研究所) 「光トラップされたナノ微粒子と冷却原子の相互作用の研究」

第二セッション (座長：南本大穂 (北海道大学))

- 14:45 - 15:10 O-04 西原 大志 (京都大学)「カーボンナノチューブの熱励起子輻射の研究」
15:10 - 15:35 O-05 杉本 敏樹 (分子科学研究所)「非線形レーザー分子分光で明らかになってきた固体表面上の水分子の特異な水素結合構造と物性・機能」
15:35 - 16:00 O-06 数間 恵弥子 (理化学研究所)「単一酸素分子のプラズモン誘起解離反応の実空間観測」

第三セッション (座長：南本大穂 (北海道大学))

- 16:20 - 17:20 T-01 ◆チュートリアル講演 笹木 敬司 (北海道大学)「光圧操作の基礎と応用」

12月5日 (土)

第四セッション (座長：細川千絵 (大阪市立大学))

- 9:00-10:00 T-02 ◆チュートリアル講演 岡本 裕巳 (分子科学研究所)「キラリティと光学活性の常識と常識はずれ」
10:00-10:25 O-07 石井 智 (物質・材料研究機構)「遷移金属窒化物の光励起ホットキャリアとその応用」
10:25-10:50 O-08 岩佐 豪 (北海道大学)「双極子近似を超えた近接場光と分子の多重極相互作用と励起状態制御に向けて」

第五セッション (座長：東海林竜也 (神奈川大学))

- 11:10-11:35 O-09 柚山 健一 (大阪市立大学)「界面での分子・ナノ粒子の光マニピュレーション」
11:35-12:00 O-10 有川 敬 (京都大学)「テラヘルツ光渦を用いた擬似局在表面プラズモンの多重極モード選択励起」
12:00-12:25 O-11 米谷 玲皇 (東京大学)「ナノメカニクスと光センシング」
12:25-12:30 閉会の挨拶 (南本大穂 (北海道大学))

【アジア連携分子研研究会】

Next Generation Spectro-Microscopy and Micro-Spectroscopy Workshop

2020年10月28日 (水) ~ 29日 (木) (オンライン)

1 Day (Oct. 28)

- 13:30-14:00 Registration open (ZOOM connection test)
14:00-14:15 Opening
14:15-14:50 Dr. Fumihiko Matsui (IMS)
Soft-x-ray photoelectron momentum microscopy for selective atomic/molecular orbital excitation
14:50-15:25 Prof. Jongwoo Lim (Seoul National Univ.)
Operando electrochemical scanning x-ray transmission microscopy for lithium-ion batteries
15:25-16:00 Prof. Wen-Xin Tang (Chongqing Univ.)
In situ observation of meta-stable magnetization state in Fe/W(110) nanostructures
16:15-16:50 Dr. Takuji Ohgashi (IMS)
Current Status of the Scanning Transmission X-Ray Microscopy Beamline in UVSOR
16:50-17:25 Prof. Takafumi Sato (Tohoku Univ.)
Nano-ARPES study of novel topological materials
17:25-18:00 Dr. Takuya Masuda (National Institute for Materials Science)
Development of a laboratory-based in situ XPS apparatus for liquid samples and electrochemical interfaces
18:00-18:30 Discussion&Workshop photo

2 Day (Oct. 29)

- 13:30-14:00 Registration open (ZOOM connection test)
14:00-14:05 Second Day Opening
14:05-14:40 Dr. Hung-Wei Shiu (NSRRC)
STXM at TPS 27A1: Capabilities and Opportunities
14:40-15:15 Dr. Tzu-Hung Chuang (NSRRC)
Photoelectron related image and nanospectroscopy endstation at TPS 27A2: Capabilities and opportunities
15:15-15:50 Prof. Michael S Altman (Hong Kong Sci. Tech. Univ.)
Strain and Permeability of Graphene studied by Cathode Lens Microscopy, Diffraction and Spectroscopy
16:05-16:40 Dr. Michael Man (OIST)
Visualization of excitons in 2D semiconductor by time-resolved ARPES
16:40-17:15 Prof. Lijuan Zhang (Shanghai Synchrotron Radiation Facility)
Stability and inner structure of nanobubbles investigated by STXM
17:15-17:50 Dr. Nozomu Ishiguro (Tohoku Univ.)
Nano-scale Chemical State Visualization using Ptychography-XAFS
17:50-18:30 Discussion&Closing

【分子研研究会】

錯体化学から始まる学術展開の可能性

2021年3月11日（木）～12日（金） 岡崎コンファレンスセンターおよびオンライン

【3月11日（木）第1日】

- 13:00-13:10 開会の辞・趣旨説明
松田 亮太郎（名古屋大学大学院工学研究科）
- 13:10-13:50 脳内蛋白質複合体の研究を通して、生物無機化学の未来について考えること
横井 紀彦（自然科学研究機構生理学研究所）
- 13:50-14:30 超分子錯体化学を基盤とした細胞機能の模倣と制御
窪田 亮（京都大学大学院工学研究科）
- 14:30-15:10 対アニオンの設計による配位重合触媒作用の制御
田中 亮（広島大学大学院先進理工系科学研究科）
- 15:30-16:10 錯体化学に立脚した結合開裂過程の研究
森本 祐麻（大阪大学大学院理学研究科）
- 16:10-16:50 錯体化学研究から企業へ：研究開発ジャーニー
栗谷 真澄（昭和電工研究開発部）

【3月12日（金）第2日】

- 9:00-9:40 シアノ系金属錯体集積体の構造ひずみに基づく機能開拓
大谷 亮（九州大学大学院理学研究院）
- 9:40-10:20 結晶性多孔体の新機能開拓
貞清 正彰（東京理科大学理学部第一部）
- 10:20-11:00 金属クラスター集積空間におけるイオン輸送現象
吉成 信人（大阪大学大学院理学研究科）
- 11:20-12:00 柔軟な電子状態を示す外場応答性金属錯体の開発
関根 良博（熊本大学大学院自然科学研究科）
- 12:00-12:40 原子層半導体を舞台とする物質化学とデバイス工学
桐谷 乃輔（大阪府立大学大学院工学研究科）
- 12:40-13:00 講評・閉会の辞
北川 宏（京都大学大学院理学研究科・錯体化学会会長）