

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、アジア地域での分子科学の急速な発展に対応して、2006年度から2010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、東アジアでの分子科学の協力研究拠点ネットワーク形成を目的とし日本、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。その後、2011年度からはこの協力研究拠点形成の取組をより国際的に発展・拡充させ、分子科学国際共同研究拠点形成事業を開始している。

また、分子科学研究所は2008年より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、ASEAN諸国の若手研究者と大学院学生を招聘し、人材の育成に努めてきた。2011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、さらに2014年度には分子研全体の国際インターンシッププログラム（IMSIIIP）の枠組みの中でのアジア枠インターンシップ制度IMS-IIPAと名前を変え、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つつある。現在のIMS-IIPA事業は招聘若手研究者の滞在期間を最長6ヶ月に拡充し、原則としてMOU提携校との連携（応募、招聘）によって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（設立時は博士課程後期3年のみ；2006年度より5年一貫制博士課程）。総合研究大学院大学（総研大）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。

2021年度は前年からのコロナ禍により、外部からの研究者の出入りが伴う共同利用、多くの人が集う研究会、海外との往来が不可欠な国際インターンシップ、院生の研究教育に資する学会参加・発表、外部との研究交流、全てが低調に陥ってしまった。実際に他大学（大学院）から分子研（総合研究大学院大学・分子科学2専攻）への進学者の掘り起こしに資する研究所・大学院への体験入学は各研究室での随時訪問受入として実施し、また分子科学・アジア冬の学校も開催中止、15名の受け入れが決まっていた国際インターンシップ（フランス7名、マレーシア3名、インド2名、タイ2名、台湾1名）も全てがキャンセルとなってしまった。しかし、いつの時代にも、どのような体制下・環境下でも自然科学研究の本質が変わるものではない。来たるポスト・コロナにおいても全国共同利用機関として、アジアの研究ハブとして、また高度専門的な大学院教育の場としての役割を発展的に担っていく。

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：所内および複数の所外研究機関に所属する数名の研究者により、特定の課題について行われる研究。最長3年にわたって継続することが可能。

- ①「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
- ②「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)。

- ①一般
- ②ナノテクノロジープラットフォーム事業(5-6参照)
- ③NMRプラットフォーム事業(5-8参照)

(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。

- ①「分子研研究会(一般分)」国内の研究者が集まるもの
- ②「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
- ③「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
- ④「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
- ⑤「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：大学院生が主体的に企画する分子科学に関連する研究会や勉強会等。

(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) 施設利用

- ①UVSOR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。
- ②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。
- ③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。
- ④計算科学研究センター施設利用：計算科学研究センターに設置されたスーパーコンピュータを利用する研究。

3-1-2 2021年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名 (通年)	提案代表者
溶液軟X線吸収分光法による檜山クロスカップリング反応機構の解明	九州大学カーボンニュートラル・エネエル 藤川 茂紀 ギー国際研究所

(2) 協力研究

課 題 名 (通年)	提案代表者
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(II)	大阪大学産業科学研究所 田中慎一郎
UVSOR BL6UのMomentum Microscopeの高性能化とスピン計測に対する準備	大阪大学産業科学研究所 菅 滋正
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

キララプラズモンとキララ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
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 (II)	東京理科大学理工学部	中山 泰生
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	関西学院大学理工学部	村上 慧
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
糖アジドの還元と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
モメンタムマイクロスコープによる高移動度有機半導体の伝導機構解明	筑波大学数理工学系	山田 洋一
超短パルスガンマ線誘起陽電子消滅分光法を用いた原子空孔型欠陥分析法の開発	山形大学理学部	北浦 守
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
赤外自由電子レーザーによるポリアラニン凝集解離過程の計算	群馬大学大学院保健学研究科	中村 和裕
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メティブ生命分子研究所	柳井 毅
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
イリジウム単結晶薄膜上に化学気相成長したグラフェン膜の評価	青山学院大学理工学部	黄 晋二

課 題 名 (前期)

提案代表者

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
ポリ (トリアリアルホスフィン硫黄) 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
電荷再配置を伴う酸化還元挙動を示す異種金属 5 核錯体の電子移動過程の解明	産業技術総合研究所	伊豆 仁
TRP チャネル制御機構解明のための分子シミュレーション研究	産業医科大学医学部	森 誠之

課 題 名 (後期)

提案代表者

脊椎動物の季節適応を制御する分子の生化学的解析	名古屋大学大学院生命農学研究科	吉村 崇
小型集積レーザー技術による高平均出力テラヘルツパラメトリック光源の開発	名古屋大学大学院工学研究科	村手 宏輔
垂直磁気異方性を有する薄膜界面の作製と電子状態の精密計測への応用	東京大学大学院理学系研究科	岡林 潤
蓄積リング自由電子レーザーの広帯域化とそれを用いたエネルギー可変単色ガンマ線源開発	京都大学エネルギー理工学研究科	全 炳俊
ハロゲンドープによるペリレンカチオン形成過程における占有軌道のエネルギー準位シフト解析	東京農工大学大学院工学研究院	遠藤 理
トポロジカル物質におけるスピン偏極局所電子状態の解明	東北大学材料科学高等研究所	佐藤 宇史
安定化レクチンナノブロック超分子複合体の開発と解析	信州大学繊維学部	新井 亮一
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
マイクロチップレーザーを利用した微小液滴中への短寿命活性種の発生と高選択的化学反応	大阪大学大学院工学研究科	焼山 佑美
パルス ESR 法を用いた高 LET 放射線照射で生成するアラニンラジカルの局所的ラジカル分布の評価	東京都立産業技術センター	中川 清子
光制御タンパク質複合体の構造解析	大阪大学大学院理学研究科	石川 春人

(3) 研究会

課 題 名 (前期)

提案代表者

IMS-FHI Symposium “Emerging Techniques of Scanning Probe Microscopy” 森野ディスカッション	分子科学研究所 大阪大学大学院理学研究科	熊谷 崇 宗像 利明
--	-------------------------	---------------

課 題 名 (後期)

提案代表者

アト秒レーザー科学研究施設 (ALFA) 計画の現状と展望 エネルギー科学の最前線：階層横断的な理解に向けて	東京大学大学院理学系研究科 分子科学研究所	山内 薫 中村 敏和
---	--------------------------	---------------

(4) 若手研究活動支援

課 題 名 (前期)

提案代表者

第 60 回分子科学若手の会夏の学校 キララ物質に特有なスピン輸送現象の探究	学習院大学大学院自然科学研究科 東京大学大学院理学系研究科	時田 司 鈴木 裕太
---	----------------------------------	---------------

(6) 施設利用

① UVSOR 施設利用

課 題 名 (前期)	提案代表者
相変態に伴う結晶格子変化に及ぼす原子空孔密度の影響 円偏光ガンマ線を利用した電磁石の磁気ヒステリシス効果の測定	日本原子力研究開発機構物質科学研究センター 諸岡 聡 日本原子力研究開発機構原子力基礎工学研究センター 遠藤 駿典
フラット LCS ガンマ線ビームの発生とこれを用いた NRF 反応断面積の測定に関する研究	京都大学エネルギー理工学研究所 大垣 英明
バルク金属中の水素侵入動的挙動解明のための LCS ガンマ線入射-陽電子消滅測定	大阪府立大学大学院工学研究科 堀 史説
ガンマ線誘起陽電子消滅法による金属酸化物中の高温下における酸素欠陥挙動の解明	大阪産業技術研究所 道志 智
光電子円二色性の光エネルギー依存性の測定 タンデムアンジュレータを用いた光電子波束干渉制御	広島大学大学院理学研究科 高口 博志 佐賀県地域産業支援センター九州シンクロトロン光研究センター 金安 達夫
テラヘルツ/赤外分光によるマイクロ波化学反応促進機構の解明 BL1B の整備	京都大学化学研究所 高谷 光 大阪大学大学院生命機能研究科 木村 真一 埼玉工業大学工学部 有谷 博文
XANES による MTB 活性 Mo/H-MFI 触媒上の Al 酸点による炭化 Mo 活性種形成効果の検討	埼玉工業大学工学部 有谷 博文
軟 X 線吸収分光法による有機太陽電池の高効率化を目指した金属酸化物層の電子状態解析	千葉大学大学院工学研究院 奥平 幸司
太陽フレア X 線・集光撮像分光観測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
ハイドロキシアパタイトの焼結における異種元素添加の影響 高速重イオン照射されたパイロクロー構造 $Gd_2Zr_2O_7$ 中のカチオン局所構造 紫外光電子分光法による有機/金属酸化物ナノ粒子界面の膜構造及び電子状態評価	大阪府立大学大学院工学研究科 村田 秀信 九州大学大学院工学研究院 吉岡 聡 千葉大学大学院工学研究院 奥平 幸司
一定始状態光電子分光を用いたポリエチレンモデル化合物の NEA 電子構造の解明	千葉大学先進科学センター 石井 久夫
共鳴 X 線散乱による液晶性強誘電体における極性ゆらぎ構造の観測 XAS による糖類分子とイオン液体-水との相互作用の研究 金表面上における生体分子の X 線吸収分光 脂質二重膜を構成するリン脂質分子の電子状態と分子配向 共鳴軟 X 線散乱法によるソフトマターのメゾスコピック構造の解明 軟 X 線吸収分光法による溶液光励起ダイナミクス解明 ビームライン整備	理化学研究所 荒岡 史人 東京大学大学院新領域創成科学研究科 佐々木岳彦 横浜国立大学理工学部 大野 真也 豊橋技術科学大学環境・生命工学系 手老 龍吾 分子科学研究所 岩山 洋士 分子科学研究所 長坂 将成 分子科学研究所 長坂 将成 分子科学研究所 奥村慎太郎
触媒反応中間体である有機ケイ素化合物の電子状態解析 電気化学軟 X 線分光法によるメタン酸化触媒反応活性種の観測 軟 X 線共鳴散乱によるキラル液晶の精密構造解析 軟 X 線分光によるマイクロ波による化学反応促進機構の解明 人工光合成をめざす半導体光触媒の水 XAFS 測定: フィージビリテスタディ 水・アセトン 2 成分溶液系に見られる水の電子構造変化 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	名古屋大学物質科学国際研究センター 山田 泰之 京都大学大学院理学研究科 高西 陽一 京都大学化学研究所 高谷 光 神戸大学大学院理学研究科 大西 洋 広島大学大学院理学研究科 岡田 和正 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 Microscopic Insights on Ice Nucleation of Organic Solutions	Synchrotron SOLEIL CEOLIN, Denis University of Gothenburg KONG, Xiangrui
次世代中性 K 中間子稀崩壊実験に向けた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 バンド構造と結晶構造の包括的理解による赤色発光シンチレータの開発 深紫外発光アルミン酸亜鉛薄膜と基板界面の評価 ビームライン整備 (自動測定・リモート測定に向けたシステム開発) 一硫化サマリウム SmS の電子状態・電荷ダイナミクスに対する元素置換効果 フルオロオレフィンの紫外光誘起分解反応の解明 三元金属ハロゲン化物結晶中の Tl^+ センターの緩和励起状態の解明 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 STXM による溶液中での金属デンンドライトの結晶成長メカニズムの解明 全固体リチウムイオン電池の界面近傍の元素分布および電子状態解析	山形大学学士課程基盤教育機構 田島 靖久 東北大学未来科学技術共同研究センター 黒澤 俊介 静岡大学学術院工学領域 小南 裕子 分子科学研究所 岩山 洋士 名古屋大学大学院工学研究科 横山 泰範 大阪大学レーザー科学研究科 山ノ井航平 大阪府立大学大学院理学系研究科 河相 武利 東北大学多元物質科学研究科 江島 丈雄 産業技術総合研究所 三石 雄悟 産業技術総合研究所 細野 英司

星間有機物の宇宙環境曝露実験による物性変化の調査	東京大学大学院理学系研究科	左近 樹
STXMによるアポトーシスにおける核酸および核内タンパク質の分布動態解析	東海大学工学部	伊藤 敦
STXMを用いたポリマー中の薬品の分散及び化学状態解析	分子科学研究所	大東 琢治
ビームラインおよびSTXMの整備	分子科学研究所	大東 琢治
「はやぶさ2」初期分析固体有機物チームによる、小惑星リュウグウ試料中酸不溶性有機物のC-, N-, OXANES測定にむけた直前リハーサル	広島大学大学院理学研究科	藪田ひかる
Phase2 高知による「はやぶさ2」帰還試料の多機関連携分析	海洋研究開発機構高知コア研究所	伊藤 元雄
Internal and External Mixing States of Salt Particles and Dust over Mars Analogues Sites	University of Gothenburg	KONG, Xiangrui
STXM in Characterizing Lysosomal Storage Materials in Mouse Model and Human Disease Samples	University of Oulu	MINNA, Patanen
Redox Processes in Human Skin: Triggered Drug Release from Nanocarriers	Freie University Berlin	RUEHL, Eckart
In Situ Scanning Transmission X-Ray Microscopy of Cobalt and Reduced Graphene Oxide during Hydrogen Evolution Reaction	Tamkang University	PONG, Way- faung
Comprehensive Understanding of Solid-Solid Interface Ion Transfer Mechanism via LiFePO ₄ and LiMn ₂ O ₄ Primary Particle Investigated by In-Situ Operando STXM	Seoul National University	LIM, Jongwoo
多電子同時計測による多電子放出過程の研究	富山大学教養教育院	彦坂 泰正
反射率磁気円二色性測定でみる磁性体薄膜の立体構造	分子科学研究所	山本 航平
ビームライン整備(軟X線ラウンドロビンのための、標準試料の網羅的測定)	分子科学研究所	岩山 洋士
カルコゲナイド系アモルファス薄膜の熱処理効果に関する研究	岐阜大学工学部	林 浩司
ディラック半金属を基軸としたトポロジカル量子相転移の探索	東北大学大学院理学研究科	佐藤 宇史
角度分解光電子分光によるカイラル磁性体およびカゴメ磁性体の研究	東京大学物性研究所	近藤 猛
表面キャリアドープによる新たなモット転移の開拓	東京大学物性研究所	堀尾 眞史
3d遷移金属合金超薄膜のスピン分解・軌道分解光電子分光	東京大学大学院理学系研究科	岡林 潤
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のスペクトル強度の温度変化	広島大学放射光科学研究センター	出田真一郎
磁性層状 RE-i-MAX 相化合物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
3次元立体構造シリコン表面からの光電子分光	奈良先端科学技術大学院大学	服部 賢
キャリアドープした価数揺動物質 SmS の三次元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
層状 misfit 化合物 (BiSe) _{1+n} (NbSe ₂) _m (m = 1,2,3) の空間分解角度分解光電子分光	岡山大学異分野基礎科学研究科	横谷 尚睦
ARPES Study of Electronic Compressibility in Electron Doped Cuprates	Westlake University	RUIHUA, He
合金を用いた多層膜反射鏡の特性調査	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉川 一郎
彗星大気観測に向けた光学フィルタの性能評価	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉岡 和夫
フェリ磁性遷移金属合金の磁気光学カー効果測定	東京大学物性研究所	松田 巖
水素吸収セルの吸収性能安定性評価	立教大学理学部	田口 真
飛翔体に搭載する紫外線吸収フィルタの性能評価	立教大学理学部	桑原 正輝
アニオンとカチオンの不均一分布を伴う希土類賦活蛍光体単粒子の光誘起赤外吸収顕微分光	山形大学理学部	北浦 守
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 (II)	東京理科大学理工学部	中山 泰生
テラヘルツ/赤外分光によるマイクロ波化学反応促進機構の解明	京都大学化学研究所	高谷 光
強相関半導体の電流誘起局在・非局在転移の電子状態	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開発	広島大学大学院理学研究科	藪田ひかる
低エネルギー ARPES で探る鉄カルコゲナイドの高温超伝導機構	東北大学大学院理学研究科	佐藤 宇史
角度分解光電子分光による高分子薄膜のギャップ内準位の解明	千葉大学先進科学センター	石井 久夫
高分解角度分解光電子分光によるトポロジカル絶縁体サンドイッチ構造の電子状態測定	東京工業大学理学院	平原 徹
層状化合物上の有機単層膜界面における新奇二次元電子構造の探索	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 のスペクトル強度の温度変化	広島大学放射光科学研究センター	出田真一郎
軸配位型フタロシアニン分子系伝導体 TPP[FePc(CN) ₂] ₂ 単結晶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鉄系超伝導体 1111 系の incipient バンドの超伝導応答の研究	大阪大学大学院理学研究科	宮坂 茂樹
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 一郎

真空紫外領域におけるパイロクロー型モリブデン酸化物の反射率測定	東京大学大学院工学系研究科	上田健太郎
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 II	福井大学学術研究院工学系部門	福井 一俊
減衰全反射型紫外分光法による有機半導体/イオン液体界面電子状態研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	田邊 一郎
ガンマ線照射処理により高効率化した深紫外検出器用光導電性材料の開発	大阪大学レーザー科学研究所	清水 俊彦
最小電離損失粒子に対する原子核乾板の感度評価	名古屋大学大学院理学研究科/未来材料・システム研究所	中村 光廣
可視域発光観測による真空紫外光の偏光評価	佐賀県地域産業支援センター九州シンク	金安 達夫
	ロトロン光研究センター	
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
Ni-L 吸収端 XAS による N-ヘテロサイクリックカルベンを支持配位子にもつニッケル錯体の電子状態解析	大阪大学大学院工学研究科	植竹 裕太
β -SiAlON 蛍光体で観測される発光バンドの固有性・非固有性	山形大学理学部	北浦 守
テーバー型高感度マイクロチャンネルプレートの検出効率測定	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	的場 史朗
rutile TiO ₂ (110) 上に担持した Cu ナノ粒子の CO 曝露による電子状態変化	立命館大学グローバル・イノベーション研究機構	光原 圭
タンデムアンジュレータを用いた原子分子の量子状態制御	佐賀県地域産業支援センター九州シンク	金安 達夫
	ロトロン光研究センター	
課 題 名 (後期)	提案代表者	
テラヘルツ/赤外分光によるマイクロ波化学反応促進機構の解明	京都大学化学研究所	高谷 光
XANES による MTB 活性 Mo/H-MFI 触媒上の Al 酸点による炭化 Mo 活性種形成効果の検討	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
軟X線吸収分光法による有機太陽電池の高効率化を目指した金属酸化物層の電子状態解析	千葉大学大学院工学研究院	奥平 幸司
太陽フレアX線・集光撮像分光観測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
ハイドロキシアパタイトの焼結における異種元素添加の影響	大阪府立大学大学院工学研究科	村田 秀信
紫外光電子分光法による有機/金属酸化物ナノ粒子界面の膜構造及び電子状態評価	千葉大学大学院工学研究院	奥平 幸司
次世代中性 K 中間子稀崩壊実験に向けた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
バンド構造と結晶構造の包括的理解による赤色発光シンチレータの開発	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と基板界面の評価	静岡大学学術院工学領域	小南 裕子
ビームライン整備 (自動測定・リモート測定に向けたシステム開発)	分子科学研究所	岩山 洋士
フルオロオレフィンの紫外光誘起分解反応の解明	大阪大学レーザー科学研究所	山ノ井航平
三元金属ハロゲン化物結晶中の TI ⁺ センターの緩和励起状態の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
多電子同時計測による多電子放出過程の研究	富山大学教養教育院	彦坂 泰正
反射率磁気円二色性測定でみる磁性体薄膜の立体構造	分子科学研究所	山本 航平
ビームライン整備 (軟X線ラウンドロビンのための、標準試料の網羅的測定)	分子科学研究所	岩山 洋士
カルコゲナイド系アモルファス薄膜の熱処理効果に関する研究	岐阜大学工学部	林 浩司
合金を用いた多層膜反射鏡の特性調査	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉川 一朗
彗星大気観測に向けた光学フィルタの性能評価	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉岡 和夫
フェリ磁性遷移金属合金の磁気光学カー効果測定	東京大学物性研究所	松田 巖
水素吸収セルの吸収性能安定性評価	立教大学理学部	田口 真
飛翔体に搭載する紫外線吸収フィルタの性能評価	立教大学理学部	桑原 正輝
アニオンとカチオンの不均一分布を伴う希土類賦活蛍光体単粒子の光誘起赤外吸収顕微分光	山形大学理学部	北浦 守
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 (II)	東京理科大学理工学部	中山 泰生
テラヘルツ/赤外分光によるマイクロ波化学反応促進機構の解明	京都大学化学研究所	高谷 光
強相関半導体の電流誘起局在・非局在転移の電子状態	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開発	広島大学大学院理学研究科	藪田ひかる
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 II	福井大学学術研究院工学系部門	福井 一俊
減衰全反射型紫外分光法による有機半導体/イオン液体界面電子状態研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	田邊 一郎
ガンマ線照射処理により高効率化した深紫外検出器用光導電性材料の開発	大阪大学レーザー科学研究所	清水 俊彦

最小電離損失粒子に対する原子核乾板の感度評価	名古屋大学大学院理学研究科／未来材料・システム研究所	中村 光廣
直線偏光ガンマ線を用いたピグミー E1 共鳴に関する研究	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	静間 俊行
相変態に伴う結晶格子変化に及ぼす原子空孔密度の影響	日本原子力研究開発機構物質科学研究センター	諸岡 聡
円偏光ガンマ線を利用した電磁石の偏極分解能のエネルギー依存性の測定	日本原子力研究開発機構原子力基礎工学研究センター	遠藤 駿典
ガンマ線誘起陽電子消滅分光法の整備	分子科学研究所	平 義隆
放射光の位相構造計測法の開発	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	高嶋 圭史
フラット LCS ガンマ線ビームの発生とこれを用いた NRF 反応断面積の測定に関する研究	京都大学エネルギー理工学研究所	大垣 英明
陽電子寿命その場計測法を用いた鉄系材料の水素脆化破壊過程での空孔形成・クラスター化に関する研究	京都大学複合原子力科学研究所	藪内 敦
バルク金属中の水素・欠陥相互作用の動的挙動解明のための LCS ガンマ線入射-陽電子消滅測定	大阪府立大学大学院工学研究科	堀 史説
ガンマ線誘起陽電子消滅法を用いた異なる形状を有する酸化セリウムの酸素欠陥評価	大阪産業技術研究所	道志 智
単一電子からの放射光の実験研究	広島大学放射光科学研究センター	加藤 政博
直列アンジュレータ放射特性の高速制御	広島大学放射光科学研究センター	加藤 政博
光電子円二色性の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
パイロクロア化合物不規則化の XAFS 構造解析	九州大学大学院工学研究院	吉岡 聡
角度分解光電子分光によるポリエチレンモデル化合物のエキソ電子放出現象の解明	千葉大学先進科学センター	石井 久夫
液相中一重項酸素の生成ダイナミクスの軟 X 線吸収分光法による研究	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	足立 純一
液晶性強誘電体における協同的非対称構造の共鳴 X 線散乱による捕捉	理化学研究所	荒岡 史人
XAS によるセロピオースとスクロースの加水分解過程の研究	東京大学大学院新領域創成科学研究科	佐々木 岳彦
金表面上における生体分子の X 線吸収分光	横浜国立大学理工学部	大野 真也
脂質二重膜を構成するリン脂質分子の電子状態と分子配向	豊橋技術科学大学環境・生命工学系	手老 龍吾
共鳴軟 X 線散乱法における機器校正のための標準物質・標準計測法の開発	分子科学研究所	岩山 洋士
軟 X 線吸収分光法による生体試料の局所構造解析	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
電解生成型メタン酸化触媒活性種の軟 X 線分光法による直接観測	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およびらせん自発形成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
軟 X 線 XAFS による有機マグネシウムの構造研究	京都大学化学研究所	高谷 光
人工光合成をめざす半導体光触媒の水 XAFS 測定	神戸大学大学院理学研究科	大西 洋
Zr 含有自己発光ヨウ化物の発光特性の調査	埼玉大学大学院理工学研究科	小玉 翔平
プラズマエッチングガスの解離過程の解明 (1)	名古屋大学低温プラズマ科学研究センタ	石川 健治
パイロクロア型酸化物中希土類イオンの存在位置の広がり真空紫外域遷移スペクトル形状に与える影響の解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野 正人
フィルター粒子間バウンダリー構造における空間配置とその化学結合状態	東北大学多元物質科学研究所	江島 丈雄
レドックスフロー電池における炭素触媒のオペランド電子状態解析	産業技術総合研究所	朝倉 大輔
全固体リチウムイオン電池の活物質／固体電解質界面の劣化解析	産業技術総合研究所	細野 英司
環境制御走査型透過 X 線顕微鏡を用いたポリマーの化学状態変化	分子科学研究所	大東 琢治
ビームラインおよび STXM の整備	分子科学研究所	大東 琢治
グラフェン超薄膜を用いた高機能汎用型光学素子の開発	名古屋大学大学院理学研究科	三石 郁之
小惑星リュウグウが黒いのはなぜか? ~「はやぶさ2」初期分析固体有機物チームが STXM で解読する、揮発性物質の形成過程および初期地球への供給機構	広島大学大学院理学研究科	藪田 ひかる
Mixing States of Sulfur and Alkali Components in Exhaust Particles from Biomass Thermal Conversion Reactors	University of Gothenburg	KONG, Xiangrui
Redox Processes in Human Skin: Triggered Drug Release from Nanocarriers	Freie University Berlin	RUEHL, Eckart
In Situ Scanning Transmission X-Ray Microscopy of Cobalt and Reduced Graphene Oxide during Hydrogen Evolution Reaction	Tamkang University	PONG, Way-faung
Unraveling Anion Induced Degradation Mechanisms in Primary Li-Mn Rich Layered Oxide Particle via Ex-Situ STXM	Seoul National University	LIM, Jongwoo
原子分解能・電界電子放出顕微鏡の開発	東京大学物性研究所	柳沢 啓史
易損傷試料用光電子分光設備の設置へむけたビームラインおよびシステム評価	分子科学研究所	解良 聡
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
ディラック半金属を基軸としたトポロジカル量子相転移の探索	東北大学材料科学高等研究所	佐藤 宇史

遷移金属超薄膜量子井戸構造のスピン分解・軌道分解光電子分光	東京大学大学院理学系研究科	岡林 潤
遷移金属インターカレート NbS ₂ における磁性ワイル半金属の検証	東京大学物性研究所	堀尾 真史
角度分解光電子分光によるグラフェン層間化合物の多体効果の研究	東京工業大学理学院	一ノ倉 聖
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
狭ギャップ半導体・半金属における自発的励起子の探索	分子科学研究所	福谷 圭祐
層状 MAX 相化合物 Zr ₂ SnC および Zr ₃ SnC ₂ 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
3次元立体構造シリコン表面からの光電子分光	奈良先端科学技術大学院大学	服部 賢
価数揺動物質における原子吸着による表面価数転移	大阪大学大学院生命機能研究科	中村 拓人
TiSe ₂ の 3D フェルミ表面の観察と CDW 転移による変調	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
La(O,F)Bi _{1-x} M _x S ₂ (M = Pb, Sn) における Bi サイト置換効果	岡山大学異分野基礎科学研究所	横谷 尚睦
ARPES による銅酸化物高温超伝導相図の再考	広島大学放射光科学研究センター	出田真一郎
ARPES Study of Electronic Compressibility in Electron Doped Cuprates	Westlake University	RUIHUA, He
テーパー型高感度マイクロチャンネルプレートの光検出効率測定	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	の場 史朗
ミラーホルダー温度安定化による BL5B 射出光エネルギー安定化	京都大学エネルギー理工学研究所	全 炳俊
可視域発光観測による真空紫外光の偏光評価	佐賀県地域産業支援センター九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫
新奇カゴメ超伝導体の低エネルギー高分解能 ARPES	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 α -IGZO 薄膜のギャップ準位の解明	千葉大学先進科学センター	石井 久夫
トポロジカル磁性体におけるフェルミ準位近傍の微細電子構造	東京大学物性研究所	近藤 猛
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	東京工業大学理学院	平原 徹
層状化合物上の有機単層膜界面における新奇二次元電子構造の探査 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
軸配位型フタロシアニン分子系伝導体 TPP[(MPC)(CN) ₂] ₂ (M = Fe, Co) 単結晶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
単元素トポロジカル絶縁体における表面科学的手法による局所 p-n 接合の実現	大阪大学大学院生命機能研究科	中村 拓人
低エネルギー ARPES を用いた ROBiS ₂ におけるフェルミ面形状の変化	岡山大学異分野基礎科学研究所	横谷 尚睦
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 一郎
STXM によるアポトーシスにおける核酸および核内タンパク質の分布動態解析	東海大学工学部	伊藤 敦
Phase2 高知による「はやぶさ2」帰還試料の多機関連携分析	海洋研究開発機構高知コア研究所	伊藤 元雄
光渦放射光の光子計数領域でのヤングの干渉実験	広島大学放射光科学研究センター	加藤 政博
電子ビーム軌道変動のビームライン分光性能への影響	広島大学放射光科学研究センター	加藤 政博
放射光赤外顕微鏡を用いたファイバー型生体材料の構造解析	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設	川崎 平康
紫外線反射率測定による宇宙風化作用の定量評価	東京大学大学院新領域創成科学研究科	吉岡 和夫
有機半導体薄膜の紫外 ATR 分光：偏光方向と ATR 入射角度依存性の解明	大阪大学大学院基礎工学研究科	田邊 一郎
光電子散乱画像観測装置の高度化	富山大学教養教育院	彦坂 泰正
バンド構造と結晶構造の包括的理解による赤色発光シンチレータの開発 II	東北大学未来科学技術共同研究センター	黒澤 俊介

④ 計算科学研究センター施設利用

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科	長谷川 淳也
d 電子複合系の構造, 電子状態, 反応過程に関する理論的研究	京都大学触媒・電池元素戦略ユニット	榎 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スピンドイナミクス解析	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	広島大学大学院先進理工系科学研究科	赤瀬 大
歯車状両親媒性分子 (GSA) の熱力学的安定性及び発光スペクトルに対する置換基効果の理論的研究	横浜市立大学	立川 仁典
複雑分子系におけるテラヘルツ帯から赤外領域におけるスペクトル解析	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
量子力学 (QM) / 分子力学 (MM) 法と分子動力学計算によるハロ酸脱ハロゲン化酵素の反応機構解析	長浜バイオ大学バイオサイエンス学部	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
色素増感光電極・光触媒等の計算化学的研究	産業技術総合研究所	草間 仁
生体分子複雑系の全原子・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
フラグメント電子状態理論を基とした大規模第一原理分子シミュレーションと電子状態インフォマティクスによる機能材料の熱力学・光物性の迅速設計	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
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
芳香族二量体クラスターの π 電子共鳴状態の赤外分光による構造研究	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
第一原理計算によるフロロカーボンプラズマドライエッチングによる酸化膜表面の誘電性質の解明	横浜国立大学大学院工学研究院	Raebiger Hannes
分子動力学及び量子化学計算を用いた生体高分子および機能材料の構造と機能に関する研究	横浜国立大学大学院工学研究院	上田 一義
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
環化反応による炭化環式および複素環式化合物合成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
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	北陸大学薬学部	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	東京大学大学院新領域創成科学研究科	岡崎 進
ナノ狭小空間における分子およびイオンの溶媒和と動態の解析	徳島大学大学院社会産業理工学研究部	吉田 健
モデル溶融塩を溶媒としたときの二原子溶質分子の溶媒和を記述するAAOZ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 ₄ O ₅ クラスターの構造、電子・スピン状態および反応性に関する理論的研究	大阪大学ナノサイエンス教育研究センター	山口 兆
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
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
カメレオンモデルによるタンパク質構造転移の自由エネルギーランドスケープ解析	名古屋大学大学院工学研究科	寺田 智樹
生体分子と分子集合体の分子機能の理論計算	京都大学大学院理学研究科	林 重彦
水、氷、クラスレートハイドレートの構造相転移の理論研究	岡山大学異分野基礎科学研究所	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
糖鎖結合による生体分子認識に関する理論的研究	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
エネルギー変換材料の計算科学	京都大学実験と理論計算科学のインターブレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点	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
高精度な糖鎖力場の構築	東京大学先端科学技術センター	山下 雄史
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
全原子分子動力学シミュレーションで解明するソフトマテリアルの微視的構造	北里大学理学部	渡辺 豪
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
新型コロナウイルス感染阻害の分子機構の解明	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	茨城大学大学院理工学研究科	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
次世代IT社会及び次世代低炭素社会の基礎となる半導体/絶縁体界面の第一原理計算による研究	名古屋大学未来材料・システム研究所	白石 賢二
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
理論計算による触媒機能の解明	東邦大学薬学部	坂田 健
クラスターイオンの幾何構造、反応性および衝突断面積の計算	東北大学大学院理学研究科	大下慶次郎
蛋白質の機能発現と構造に関する理論的研究	京都府立大学大学院生命環境科学研究科	リントゥルオト 正美
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
有機分子における光化学過程の理論的研究	弘前大学大学院理工学研究科	山崎 祥平
原子核の量子効果を考慮した理論計算手法による重水素同位体効果の解析	岐阜大学工学部	宇田川太郎
シグナル伝達を制御する巨大タンパク質複合体の分子動力学シミュレーションによる動的制御機構解明	近畿大学先端技術総合研究所	米澤 康滋

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水表面の自由 OH, 水素結合 OH の振動緩和ダイナミクスの理論研究	富山大学理工学研究所	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数物科学科	村岡 梓
有機分子固体中の金属ナノドットの帯電安定性: 第一原理計算による研究	千葉大学大学院理学研究院	中山 隆史
触媒および機能性物質の機構解明と分子デザイン	慶應義塾大学理工学部	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 2: イオンサイズ依存性	新潟大学理学部	大鳥 範和
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
ジヨードビリアルを用いた 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
ラジカルカチオン性有機金属分子ワイヤーとスイッチの開発	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: 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反応過程に関する研究	産業技術総合研究所	浅川 大樹
金属錯体の酸化還元電位に関するデータベース作成	筑波大学大学院数理物質系	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
タンパク質に結合する人工オリゴアミドのインシリコ設計	東京大学大学院工学系研究科	森本 淳平
CDFT 分子動力学計算による核変換溶融塩ターゲットの電子移動反応性評価	東北大学大学院工学研究科	穴戸 博紀
量子化学計算によるランタノイド/マイナーアクチノイド錯イオンの構造探索と赤外スペクトル計算	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
量子化学計算による光化学系 II における水分解およびキノン還元反応の分子機構解析	名古屋大学大学院理学研究科	野口 巧
薬剤分子放出を志向した有機金属フタロシアニンの光反応開発	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	福田 良一
理論計算ならびに機械学習を利用した新規材料・触媒開発	相模中央化学研究所	花村 仁嗣
有機化学反応の反応メカニズム解明を目指した計算化学的解析	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
炭素・高分子複合材料における低波数ラマンを与える分子間振動モードの解析	北海道大学大学院工学研究院	島田 敏宏
分子動力学シミュレーションを用いた膜タンパク質-膜系の相互作用, 機能, ダイナミクス解析	東京大学生物生産工学研究センター	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
シミュレーションに基づく分子モダリティの理解・制御・設計	東京大学大学院工学系研究科	黒田 大祐
DFT 計算によるガス分離膜及び燃料電池に応用する触媒の設計	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
第一原理計算を活用した構造中の歪を利用した高機能熱電変換材料の開発	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
ヒトにおいて高効率な紫外線損傷 DNA 修復を可能とする新たな分子系の創成	大阪大学大学院基礎工学研究科	山元 淳平
Multi-Scale Modeling of Interstellar Radical Species on Water Ice	北海道大学低温科学研究所	W. M. C. Sameera
分極効果を考慮した分子動力学計算による酸化物固体の表面緩和イオン配位構造のシミュレーションおよび構造形成エネルギーの評価	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熱力学状態依存性	九州大学大学院理学研究院	秋山 良
機械学習アプローチによる非対称コマ分子のレーザー誘起 3 次元整列の制御機構の予測	東北大学大学院理学研究科	大槻 幸義
新規合成反応, 新機能の創出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
ナノカーボンと有機物を有する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
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
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
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	星本 陽一
生体・高分子自己集合系の分子シミュレーション	岡山大学異分野基礎科学研究所	篠田 渉
機能性分子集合体の分子動力学研究: 1-3 次元ナノチャネルがもつ水の輸送機構解析	兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科	石井 良樹
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 2	神戸大学科学技術イノベーション研究科	天能精一郎

生体分子の微視的な水和構造に関する理論的研究	東京工業大学科学技術創成研究院	平田 圭祐
イオン性色素を含む新規 π 電子系の合成と配列制御	山形大学有機材料システム研究科	山門 陵平
分子動力学シミュレーションによる高分子液晶および異方的集合配向材料の熱伝導特性解析	東京工業大学物質理工学院	古屋 秀峰
気液相境界近傍における音波伝播の分子動力学シミュレーション	東京大学物性研究所	浅野 優太
積分方程式理論によるタンパク質の溶解度；ホフマイスター系列の再構築	九州産業大学理工学部	末松安由美
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
キラルな大環状化合物の励起状態構造の解明	岡山大学大学院自然科学研究科	高石 和人
Importance of T Cell Receptor Flexibility on T Cell Activation	大阪大学免疫学フロンティア研究センター	Floris van Eerden
ReaxFF を用いたトリチウムベータ崩壊の DNA テロメア構造への影響	核融合科学研究所	中村 浩章
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	田中 秀樹
金属酸化物ナノクラスターの精密設計と機能開拓	東京大学大学院工学系研究科	鈴木 康介
有機金属触媒を用いた反応機構に関する理論的研究	東京電機大学工学部	山本 哲也
酸化型ヒドロゲナーゼ活性中心の局所構造と電子状態の理論的決定	筑波大学計算科学研究センター	堀 優太
新しい治療法の確立を目指した新規触媒の開発	東京大学大学院薬学系研究科	三ツ沼治信
生体分子で起こる化学反応と機能相関構造ダイナミクスの理論的解明	九州大学先端物質化学研究所	森 俊文
界面活性剤凝集挙動の理論モデリング	岡山大学異分野基礎科学研究所	甲賀研一郎
高分子インフォマティクスのための分子動力学計算による高分子物性データベースの構築	統計数理研究所	林 慶浩
SH ₂ ドメインに対する特異的結合リン酸化ペプチドの開発	医薬基盤・健康・栄養研究所	河原 正浩
光活性化アデニル酸シクラーゼの分子シミュレーションによる機能解析	量子科学技術研究開発機構量子生命科学領域	田口 真彦
分子間電子移動で起こる化学反応メカニズム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 二郎
水の分子間及び分子内振動モードに対する多次元振動分光の量子シミュレーション	京都大学大学院理学研究科	谷村 吉隆
水素結合型強誘電物質の第一原理研究	高エネルギー加速器研究機構	岩野 薫
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
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自然科学系	鷹野 景子
分子クラスターの構造制御による化学反応の構造依存性の研究	北里大学理学部	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
シッフ塩基金属錯体の電子構造と蛋白質へのドッキング探索	東京理科大学理学部	秋津 貴城
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
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
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
液相糖類分子の挙動と 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
FixL 二量体の酸素センサー機構	名古屋大学大学院理学研究科	倭 剛久
クラスター複合体の反応解明に向けて	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
アルブミンを用いる光学活性体の合成	明星大学理工学部	松本 一嗣
量子化学計算によるペプチド形成過程の解明	早稲田大学国際教養学部	稲葉 知士
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	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 克彦
第一原理及び古典分子動力学計算による 2 次元ナノ物質の構造形成プロセスと電子物性の解明	産業技術総合研究所	森下 徹也
光化学反応の制御と応用に関する理論的研究	量子科学技術研究開発機構量子ビーム科学研究部門	黒崎 譲
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
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
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
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
発光性金属錯体の励起状態の研究	日本工業大学基幹工学部	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励起状態ダイナミクスおよび構造の研究	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と反応の研究	学習院大学理学部	狩野 直和
新規な π 共役分子の電子状態	東京工業高等専門学校	井手 智仁
新規機能性 π 共役分子の合成と物性に関する研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	清水 章弘
高周期 14 族元素を含む化合物の構造物性理論計算	東京都立大学大学院都市環境科学研究科	瀬高 渉
層状化合物の電子状態の第一原理計算	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
典型元素の特性を活用した π 共役分子の開発	茨城工業高等専門学校	江川 泰暢

ジチアシクロペンテン環を用いた近赤外光吸収材料の設計と固体中での隣接 π 共役間相互作用の解明	静岡大学学術院工学領域	植田 一正
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
DFT 計算を用いた反応機構の解明による効率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
第一原理シミュレーションによる固体酸化触媒の機能解明	東京大学大学院工学系研究科	中山 哲
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
非自明なスピン状態を経由する遷移金属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院	小島 正寛
グルタミド超分子ナノ構造体における機能性官能基の配向構造解析	熊本大学大学院先端科学研究部	桑原 穰
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
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	計算科学研究センター	江原 正博
タンパク質凝集と凝集阻害剤の分子動力学シミュレーション	生命創成探究センター	奥村 久士
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
生体分子マシンにおけるマルチスケールな機能発現ダイナミクスのシミュレーション	計算科学研究センター	岡崎 圭一
分子シミュレーションによるイオン液体の研究	分子科学研究所	石田 干城
3次元共役構造をもつ分子集合体の創製	分子科学研究所	瀬川 泰知
ヒト微小管とタウの結合状態における微小管の構造安定性およびC末端天然変性領域の分子挙動解析	信州大学農学部	梅澤 公二
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
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
生体分子および溶媒の構造機能相関の解明	立命館大学生命科学部	高橋 卓也
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	佐賀大学理工学部	海野 雅司
反応自動探索法の開発と応用	北海道大学	前田 理
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
Vibsanin B の oxy-Cope 転位の遷移状態解析	香川大学農学部	柳田 亮
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
配位重合における Bronsted 酸性中性ホウ素化合物の助触媒作用	広島大学大学院先進理工系科学研究科	田中 亮
新しい発光性 π 共役系化合物の合成研究と光物性	北里大学理学部	長谷川真士
量子化学計算と統計学的アプローチを駆使したポリオキソメタレート	東京大学大学院総合文化研究科	横川 大輔
理論的検討		
空間的軌道相互作用に基づく π 共役に関する研究	大阪大学大学院工学研究科	雨夜 徹
量子化学計算を用いた有機合成反応機構および物性の解明	慶應義塾大学薬学部	東林 修平
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
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
遷移系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
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
π 共役拡張型有機材料の開発に関する分子計算	東京都立産業技術研究センター	小汲 佳祐
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
合金触媒によるカーボンナノチューブの成長メカニズム解明へ向けた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
低分子非晶質有機半導体材料の固体膜中における配座分布に関する計算	山形大学大学院有機材料システム研究科	横山 大輔
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
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
抗体の分子内相互作用ネットワークと機能の連関の解明	分子科学研究所	谷中 冴子
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
新規機能性有機色素の開発	岐阜大学工学部	船曳 一正
触媒的骨格転位反応の反応機構解析	東北大学大学院理学研究科	中村 達
新規双極性有機典型元素化合物の創成と P-O 結合に対する元素効果	北里大学理学部	内山 洋介
分子金属錯体および多核クラスターの精密制御と機能の解明	東北大学大学院理学研究科	長田 浩一
大環状多核金属錯体の構造制御と機能化	東京大学大学院理学系研究科	田代 省平
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
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(2)	北里大学理学部	石川 春樹
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
アルケニルフルオリド同士のメタセシス反応実現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

シリコン基板上的有機分子吸着構造と電子状態の解析	横浜国立大学大学院工学研究院	大野 真也
金属元素を含まない機能性近赤外発光素子の開発	名古屋大学大学院理学研究科	村井 征史
光アップコンバージョンのための配位子保護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
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所	山北 佳宏
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
パラフェニレン骨格とアミド架橋からなるベルト状パイ共役分子の合成	名古屋工業大学大学院工学研究科	高木 幸治
Development of Novel High Functional Asymmetric Catalysts	名古屋工業大学工学部	中村 修一
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
高反応性のジボラン(4)・Al-B化合物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
典型元素を含む非平面多環芳香族炭化水素の構造と物性	早稲田大学理工学術院	加藤 健太
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	影山 莉沙
還元反応を起点とする多核金属錯体反応場の構築と機能	岡山大学学術研究院自然科学研究学域	黒木 堯
気相クラスターイオンの衝突速度に関する分子動力学の解析	金沢大学理工学域フロンティア工学類	玉箇 知也
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
新規超原子価ヨウ素触媒の開発	横浜国立大学大学院工学研究院	信田 尚毅
金属ナノクラスター中のヒドリドの挙動の解明	広島大学大学院先進理工系科学研究科	水田 勉
天然紫外線防御物質マイコスポリン様アミノ酸の光励起ダイナミクスと溶媒和構造に関する理論的研究	山口東京理科大学薬学部	畠山 允
ラジカルカチオン種の π ダイマー形成を利用する導電性物質の開発	東京都立大学理学部	西長 亨
安定ラジカルを発生する平衡系に関する研究	東京工業大学物質理工学院	青木 大輔
量子化学計算によるエネルギー変換触媒の分子機構の解明	山口東京理科大学工学部	太田 雄大
リチウムイオン電池への応用を志向した結晶性多孔質ヘキサアザトリフェニレン誘導体	関西学院大学理学部	田中 大輔
異種金属多核錯体およびその集積体の電子構造のDFT計算	岐阜大学工学部	植村 一広
有機化合物における置換基効果の微視的機構	鳥取大学工学部	早瀬 修一
機能性開殻分子材料の構造-物性-電子状態相関の解明	分子科学研究所	草本 哲郎
酸化還元活性なルテニウム-トロポロン錯体のキラル光学特性の評価	日本大学文理学部	吉田 純
電子励起イソシン酸フェニル誘導体の分子構造	日本大学工学部	奥山 克彦
Theoretical Studies of Light-Matter Interactions in Molecular Systems	京都大学大学院工学研究科	Nguyen Thanh Phuc
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
金属錯体触媒を用いた溶液中化学反応の理論的研究	大阪大学大学院工学研究科	小杉 健斗
新規生物活性物質の設計・合成・機能評価	九州大学大学院薬学研究院	平井 剛
クラスター・遷移金属錯体の反応機構と電子状態に関する理論研究と、量子コンピューティング技術を活用した古典シミュレーション研究	大阪大学量子情報・量子生命研究センター	吉田悠一郎
配位子保護金属クラスターの励起状態の解明	立教大学理学部	新堀 佳紀
第一原理分子動力学法による二次電池の濃厚電解液の研究	物質・材料研究機構エネルギー・環境材料研究拠点	小泉 健一
C-F結合の新規活性化法における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
非ベンゼノイド系有機発光体の開発	茨城大学大学院理工学研究所	近藤 健
糖鎖-タンパク質複合体における分子間相互作用	野口研究所	山田 一作
分子動力学を用いた人工核酸を含む核酸オリゴマーの安定性研究	医薬基盤・健康・栄養研究所	黒田 正孝
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部	覚知 亮平
量子化学計算とインフォマティクスの融合研究	早稲田大学理工学術院	清野 淳司
量子化学計算による抗COVID-19薬剤候補に関する理論研究	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
有機典型元素を用いた合成化学、構造化学	広島大学大学院先進理工系科学研究科	吉田 拓人
塩基性陰イオンを含むイオン液体中での遷移金属イオンの溶媒和構造	佐賀大学理工学部	高椋 利幸
超低酸化数アニオン性コバルト錯体の調製を鍵とする不活性結合官能基化法の開発	京都大学大学院理学研究科	齊藤 颯
内包フラレンおよびその誘導体の理論計算による研究	東北大学大学院理学研究科	岡田 洋史
ヘテロラジカルからなる新奇フォトクロミック分子の創製と機能探索	立命館大学生命科学部	小林 洋一
π 電子系配位子を鍵とする開殻性典型元素錯体の開発	大阪大学大学院工学研究科	兒玉 拓也
キラル分子結晶の樹状成長における分子的メカニズム解明	筑波大学数理物質系	山岸 洋
理論計算による酸化物固定化キラルTb錯体の表面構造解明	名古屋大学大学院理学研究科	邨次 智
高压溶液内で生起する化学反応機構と溶媒和構造の計算化学的解明	長崎大学大学院工学研究科	重光 保博
ペプチド型人工抗体の開発研究	中部大学応用生物学部	山本 敦

先端的コヒーレント振動分光による機能性複雑分子の超高速構造ダイナミクス の観測と解明	分子科学研究所	倉持 光
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
ブチルアミノ基で架橋した [3.3](3,9) ジカルバゾロファン の合成	大阪教育大学教育学部	種田 将嗣
有機電解反応の反応機構解析	岡山大学大学院自然科学研究科	光藤 耕一
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
溶媒極性と温度に 応答するタンパク質疎水ポケットの動的構造変化の解明	東京理科大学先進工学部	梅澤 雅和
Electronic Trapping Sites and Polaron Formation in TiO ₂ Nanostructures	東京工業大学理学院	Gergely Juhasz
反応自動探索法によるヘテロ元素を活用した新反応の創出と新材料の開発 拡張アンサンブル法を用いた糖鎖クラスターの構造ダイナミクス解析	北海道大学化学反応創成拠点 医薬基盤・健康・栄養研究所	長田 裕也 李 秀栄

(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

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
ナノ・バイオ分子における X 線誘起解離動力学の実時間イメージング理論	理化学研究所	山崎 馨
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
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

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		第3期									
		年度		2016	2017	2018	2019	2020	2021				
									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	1	4	
	(2) 協力研究 *1			82	73	45	37	51	20	27	47	166	
		(ナノプラット)			75	56	77	61	48	30	36	66	179
		(NMR 事業) *2								2	1	3	6
研究会	(3) 研究会			7	10	10	7	4	2	2	4	767	
	(4) 若手研究活動支援			1	2	1	2	1	2	0	2	108	
	(5) 岡崎コンファレンス			3	1	1	2	0	0	0	0	0	
	所長招へい *3			81	100	110	101	10	0	0	0	0	
	UVSOR 研究会 *3			1	1	1	1	1	1	2	3	205	
施設利用	(6) ① UVSOR			142	160	213	186	104	101	110	211	1,046	
		(ナノプラット)			38	43	2	4	2	1	2	3	11
	(6) ② 機器センター	(ナノプラット)			196	162	153	153	139	69	78	147	454
	(6) ③ 装置開発室				2	2	3	3	1	0	0	0	0
		(ナノプラット)					0	7	9	3	5	3	8
(6) ④ 計算科学研究センター			221	224	248	268	269	278	0	278	1,192		

*1 UVSOR 利用を含む (1999 年度後期より UVSOR 協力研究は、協力研究に一本化された)。

*2 NMR プラットフォーム事業による協力研究は 2021 年度から開始。

*3 公募以外の研究会。

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, (6) ④ 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】

IMS-FHI Symposium “Emerging Techniques of Scanning Probe Microscopy”

2021年7月12日(月)～13日(火) (オンライン)

(Day 1)

- 15:55(JST) Takashi Kumagai
“Opening remarks”
- 16:00-16:40(JST) Borja Cirera (Fritz Haber Institute)
“Characterization of Nanocarbon Materials Using STM/AFM/TERS”
- 16:40-17:20(JST) Taketoshi Minato (Institute for Molecular Science)
“Electrode/Electrolyte Interface Analyzed by Scanning Probe Microscopy”
- 17:20-18:00(JST) Tomoko Shimizu (Keio University, Japan)
“How to Bridge the ‘Materials Gap’ in High Resolution AFM/STM?”
- 18:00-18:30(JST) Leonard Gura (Fritz Haber Institute)
“High Speed STM: Implementation and Application of Spiral Scan Geometries”

(Day 2)

- 16:00-16:40(JST) Akitoshi Shiotari (Fritz Haber Institute)
“Control of Single-Molecule Reactions by High Spatial Resolution AFM”
- 16:40-17:20(JST) Chi Chen (Research Center for Applied Sciences, Academia Sinica, Taiwan)
“Near-Field Optics: From the Viewpoint of Scanning Probe Microscopy”
- 17:20-18:00(JST) Jun Nishida (Institute for Molecular Science)
“Ultrafast Nano-Imaging of Polaron Dynamics and Coupling in a Lead Halide Perovskite”

【分子研研究会】

第8回森野ディスカッション

2021年8月31日(火) (オンライン)

1. 2021年度研究助成金贈呈式 14時20分～14時55分

受賞者講演 A 羽田 真毅 准教授 (筑波大学数理物質系)
「超高速時間分解電子線回折法を用いた凝縮系分子の構造ダイナミクス」

受賞者講演 B 奥野 将成 准教授 (東京大学大学院総合文化研究科)
「新規非線形振動分光法の開発と凝縮相・界面の分子構造研究への応用」

2. 森野ディスカッション 15時10分～17時25分

講演 A 雲林院 宏 教授 (北海道大学電子科学研究所)
「単一細胞エンドスコピー～生きた細胞内部を診て操作する新技術～」

講演 B 水谷 泰久 教授 (大阪大学大学院理学研究科)
「機能を生み出すタンパク質構造の稠密性」

【分子研研究会】

エネルギー科学の最前線：階層横断的な理解に向けて

2022年2月28日(月)～3月1日(火) (オンライン)

2月28日(月)

- 13:15～13:20 川合真紀 分子研所長挨拶
- 13:20～13:30 岡本裕巳 分子研総主幹挨拶&事務連絡
- 13:30～14:00 大谷義近 (東大物性研)
「機能的スピン変換現象」
- 14:00～14:30 平等拓範 (分子研)
「マイクロ固体フォトンクスによるスマートエネルギー変換」
- 15:00～15:30 宮坂 等 (東北大金研)
「多孔性錯体格子材料と物性科学」
- 15:30～16:00 中村優男 (理研創発物性科学研究センター)
「量子位相に駆動される低散逸で高速応答のシフト電流光電変換」

- 16:00 ~ 16:30 若宮淳志 (京大化研)
「材料化学で挑むペロブスカイト太陽電池の高性能化と社会実装」
- 16:30 ~ 16:40 初日コメント
- 3月1日 (火)
- 13:30 ~ 14:00 伊澤誠一郎 (分子研)
「有機半導体界面を利用した光アップコンバージョン」
- 1:00 ~ 14:30 塚崎 敦 (東北大金研)
「トポロジカル物質群の薄膜素子活用に向けて」
- 14:30 ~ 15:00 佐藤弘志 (理研創発物性科学研究センター)
「刺激に応答する多孔性結晶」
- 15:30 ~ 16:00 福島鉄也 (東大物性研)
「スーパーコンピュータ「富岳」を用いた磁性材料の探索」
- 16:00 ~ 16:30 島川祐一 (京大化研)
「新規遷移金属酸化物の電荷転移と熱制御応用」
- 16:30 ~ 16:40 まとめ

【学協会連携分子研研究会 (連携先: 日本学術会議化学委員会)】
アト秒レーザー科学研究施設 (ALFA) 計画の現状と展望
2022年3月8日 (火) (オンライン)

- 13:00 「ご挨拶」
川合 真紀 (日本学術会議連携会員, 大学共同利用機関法人自然科学研究機構分子科学研究所所長)
- 13:05 「ご挨拶」
石川 哲也 (国立研究開発法人理化学研究所放射光科学研究センター長)
- 13:10 「ALFA 計画について」
山内 薫 (日本学術会議連携会員, 東京大学大学院理学系研究科化学専攻教授)
- 13:30 「ALFA ビームライン A, B, C について」
岩崎 純史 (東京大学大学院理学系研究科超高速強光子場科学研究センター教授)
- 13:50 「ALFA ビームライン D について」
吉田 光宏 (大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構准教授)
- 14:10 「XUV 域自由電子レーザーについて」
矢橋 牧名 (国立研究開発法人理化学研究所放射光科学研究センターグループディレクター)
- 14:30 「XUV 域自由電子レーザーによるアト秒パルスの発生」
田中 隆次 (国立研究開発法人理化学研究所放射光科学研究センターグループディレクター)

『話題提供』 (様々な研究分野から)

- 15:00 山口 誠哉 (大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構教授)
- 15:15 緑川 克美 (国立研究開発法人理化学研究所光量子工学研究センター長)
- 15:30 板谷 治郎 (東京大学物性研究所極限コヒーレント光科学研究センター准教授)
- 15:45 佐野 雄二 ((株) LAcubed 代表取締役研究開発部長, 大学共同利用機関法人自然科学研究機構分子科学研究所プログラムマネージャー)
- 16:00 岡本 裕巳 (日本学術会議第三部会員, 大学共同利用機関法人自然科学研究機構分子科学研究所教授)
- 16:15 山内 美穂 (日本学術会議連携会員, 九州大学先端物質化学研究所教授)
- 16:30 飯野 亮太 (大学共同利用機関法人自然科学研究機構分子科学研究所教授)
- 16:45 森 初果 (日本学術会議第三部会員, 東京大学物性研究所長)
- 17:10 「全体討議——ALFA への期待, 要望」
- 17:50 「おわりに」
栗原 和枝 (日本学術会議連携会員, 東北大学未来科学技術共同研究センター教授)
- 18:00 閉会

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 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
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
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
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
マックス・プランク協会フリッツ・ハーバー研究所（物理化学領域）	ドイツ	分子科学研究所とマックス・プランク協会フリッツ・ハーバー研究所（物理化学領域）との協定	学術交流及び共同研究等の実施	2021. 5.10	2024. 5. 9
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	分子科学及び物質物理学の学術連携及び共同研究等の実施	2021. 5.10	2024. 5. 9
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
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
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
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）	2020. 1.12	2023. 1.11
国立陽明交通大学	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
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
インド工科大学カンプール校	インド	自然科学研究機構分子科学研究所とインド工科大学カンプール校との分子科学分野における共同研究に関する覚書	学術交流及び共同研究等の実施	2020. 4. 1	2024. 3.31

表2 外国人研究者数の推移

(単位：人)

中期計画区分		第3期						
年度		2016	2017	2018	2019	2020	2021	計
外国人研究職員（客員）		0	2	0	0	0	0	2
日本学術振興会外国人招へい研究者		1	1	1	1	0	0	4
日本学術振興会外国人特別研究員		0	0	0	0	0	0	0
国際協力研究員	長期	36	29	27	21	7	2	122
	短期	44	63	52	39	0	0	198
研究会参加者（オンライン参加者含）		50	9	34	39	61	122	315
招へい研究員等		35	27	34	36	2	0	134
合 計		166	131	148	136	70	124	775

国際協力研究員＝短期：施設利用者（学生含む）、長期：インターンシップ生

表3 外国人研究者の延べ来所人数の国別内訳推移

(単位：人)

中期計画区分	第3期						
年度	2016	2017	2018	2019	2020	2021	計
フランス	23	19	24	20	0	0	86
ドイツ	27	20	20	40	1	0	108
イギリス	2	5	1	2	0	1	11
スウェーデン	9	5	0	5	0	0	19
フィンランド	5	8	6	5	1	0	25
アメリカ	15	12	12	5	0	0	44
中国	11	25	9	15	2	0	62
韓国	20	14	21	27	1	0	83
台湾	27	17	25	29	2	0	100
タイ	17	11	26	16	5	2	77
インド	3	6	6	2	0	0	17
マレーシア	0	3	6	3	1	0	13
その他*	20	25	24	21	0	1	91
合 計	179	170	180	190	13	4	736

*その他に含まれる主な国は、オーストラリア、シンガポール、オーストリア、オランダ、スイス、イスラエル、ロシア

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場所となり、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。

このような背景の下、2006年には全国の分子科学研究者の立案に基づく先導的な中小規模の国際研究会を開催する枠組みを維持継続するために、運営交付金による分子研独自の事業として「岡崎コンファレンス」を再開した。同年の第66回岡崎コンファレンスを皮切りに2007年以降は研究会の開催提案を広く公募し、全国共同利用による共同研究の一環として継続的に開催してきた。しかしながら2020年以降は世界的コロナ禍のため岡崎コンファレンスとしての国際研究会の提案・採択が無く、本コンファレンスは2019年の第80回を最後に開催されていない。一方で、2020-2021年度には岡崎コンファレンスの枠組みとは別に分子研PIが主導的に関与するwebを利用した幾つかの国際研究会や産学連携研究集会が開催されており、分子研研究会の新たな可能性を切り拓きつつある。2022年以降はいわゆるwith-/after-coronaの世界において国際研究集会のあり方も良くも悪くも変わらざるを得ないと考えられ、分子研共同利用においてもweb会議の環境整備・開催支援に注力しつつある。今後は研究会開催形式の変化にも柔軟に対応しwith-/after-coronaにおける「岡崎コンファレンス」を始めとする分子研研究会の有効な実施方法を試行しつつ新たな活性化を目指したい。

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2023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

（2022年3月31日現在）

中期計画区分 年度	第1期 以前	第2期	第3期							計
	1977～ 2009	2010～ 2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2016～ 2021 計	
北海道大学	12	0								12
室蘭工業大学	2	0								2
東北大学	13	6								19
山形大学	6	1								7
茨城大学	0	2								2
筑波大学	2	1								3
宇都宮大学	4	0								4
群馬大学	1	0								1
埼玉大学	2	0								2
千葉大学	5	1						1	1	7
東京大学	40	5		1	3	8	6	3	21	66
東京工業大学	42	5	2	1					3	50
お茶の水女子大学	6	0								6
横浜国立大学	1	2								3
金沢大学	11	0								11
新潟大学	6	0								6
福井大学	10	0								10
信州大学	5	1			1				1	7
岐阜大学	2	0								2
静岡大学	0	4								4
名古屋大学	99	59	12	9	11	5	13	10	60	218
愛知教育大学	1	0								1
名古屋工業大学	17	7			1				1	25
豊橋技術科学大学	40	0								40
三重大学	7	0								7
京都大学	47	2			3	2			5	54
京都工芸繊維大学	6	0								6
大阪大学	27	6		1					1	34
神戸大学	6	0								6
奈良教育大学	1	0								1
奈良女子大学	4	0								4
島根大学	1	0								1
岡山大学	16	0								16
広島大学	38	0						1	1	39

山口大学	1	0								1
香川大学	0	0			1				1	1
愛媛大学	9	0								9
高知大学	2	0								2
九州大学	45	3								48
佐賀大学	13	0								13
長崎大学	2	0								2
熊本大学	6	0								6
宮崎大学	6	0								6
琉球大学	1	0								1
北陸先端科学技術 大学院大学	6	1								7
奈良先端科学技術 大学院大学	0	0			1				1	1
総合研究大学院大学	0	0				1			1	1
首都大学東京	20	0								20
名古屋市立大学	34	14	2	2	4	5	6	5	24	72
大阪市立大学	4	0								4
大阪府立大学	2	0								2
姫路工業大学	1	0								1
学習院大学	1	0								1
北里大学	2	0								2
慶應義塾大学	9	0								9
上智大学	1	0								1
立教大学	0	2								2
中央大学	0	1								1
東海大学	3	0								3
東京理科大学	9	0								9
東邦大学	3	0								3
星薬科大学	1	0								1
早稲田大学	13	0								13
明治大学	1	0								1
名城大学	4	0								4
中部大学	0	0					1	1	2	2
岡山理科大学	1	0								1
海外機関	4	28	1	2	2	3	1		9	41
計	684	151	17	16	27	24	27	21	132	967

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。

担当教員と在籍学生数 単位：人

(2021年5月1日現在)

専攻		構造分子科学		機能分子科学	
担当教員	教授	7		8	
	准教授	7		7	
	助教	14		20	
	計	28		35	
学生数	入学年度	5年一貫 〈定員2〉	博士後期 〈定員3〉	5年一貫 〈定員2〉	博士後期 〈定員3〉
	2021	1	1	2(1)	1
	2020	2	5(2)	2(1)	2(1)
	2019	0	2	3(1)	2(2)
	2018	4	0	2	2(2)
	2017	1	0	1	1
	2016	0	0	1(1)	1(1)
	2015	0	1	0	0
計	8	9(2)	11(4)	9(6)	

() は留学生数で内数。

フランス1名、ドイツ1名、エルサルバドル1名、中国3名、韓国1名、タイ2名、インド3名、二専攻合計で12名。

入学と学位取得の状況 単位：人

(2022年3月31日現在)

区分	専攻	中期計画区分	第1期以前	第2期	第3期							合計
		年度	1989～2009	2010～2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2016～2021計	
入学者数	構造分子科学	5年一貫	6	15	5	4	9	0	2	1	21	42
		博士後期	143	20	1	1	1	3	5	1	12	175
	機能分子科学	5年一貫	5	10	5	5	4	4	3	2	23	38
		博士後期	114	18	3	3	2	2	3	1	14	146
	計		268	63	14	13	16	9	13	5	70	401
学位取得者数	構造分子科学	課程博士	112	20	4	6	3	2	4	3	22	154
		論文博士	12	0	0	0	0	0	0	0	0	12
	機能分子科学	課程博士	87	19	4	2	0	3	3	4	16	122
		論文博士	14	3	0	0	1	0	0	0	1	18
	計		225	42	8	8	4	5	7	7	39	306

外国人留学生数（国別入学者数） 単位：人

(2022年3月31日現在)

中期計画区分	第1期以前	第2期	第3期							合計
年度	1989～2009	2010～2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2016～2021計	
フランス	0, 1					0, 1			0, 1	2
ドイツ							1, 0		1, 0	1
ロシア	0, 1									1
チェコ	0, 1									1
カナダ					1, 0				1, 0	1
エルサルバドル								0, 1	0, 1	1
中国	19, 6	14, 5	0, 1			0, 1	0, 3		0, 5	49
韓国	2, 0				0, 1				0, 1	3
タイ	0, 1	2, 3	0, 2	0, 1			1, 0		1, 3	10
インド	1, 0	0, 2	0, 1		0, 1	0, 1			0, 3	6
バングラディッシュ	6, 2									8
パキスタン				1, 0					1, 0	1
ネパール	2, 1	0, 2								5
マレーシア		1, 0								1
ベトナム	0, 1	0, 1								2
フィリピン	0, 3									3
エジプト				0, 1					0, 1	1
ナイジェリア	0, 1									1
合計	30, 18	17, 13	0, 4	1, 2	1, 2	0, 3	2, 3	0, 1	4, 15	97

構造分子科学専攻(A)と機能分子科学専攻(B)の入学者数をA,Bで表す

大学別入学者数 単位：人

(2022年3月31日現在)

専攻	構造分子科学				機能分子科学				総計	
	中期計画区分	第1期 以前	第2期	第3期	計	第1期 以前	第2期	第3期		計
	年度	1989～ 2009	2010～ 2015	2016～ 2021		1989～ 2009	2010～ 2015	2016～ 2021		
北海道大学		2		3(3)	5(3)	2			2	7
東北大学		1		1	2	1	1(1)		2(1)	4
山形大学						2	1		3	3
千葉大学		5	1(1)	1	7(1)	3			3	10
東京農工大学		1		1(1)	2(1)					2
東京工業大学			3(3)		3(3)	3		1(1)	4(1)	7
新潟大学						1		1(1)	2(1)	2
長岡技術科学大学		1		1(1)	2(1)					2
金沢大学		2			2	3	1		4	6
信州大学		3		1	4	1			1	5
岐阜大学							1	1(1)	2(1)	2
名古屋大学		2	3(3)	6(5)	11(8)	5	2	4(3)	11(3)	22
愛知教育大学				1(1)	1(1)					1
名古屋工業大学		1			1			2(2)	2(2)	3
豊橋技術科学大学		5			5	2	1(1)		3(1)	8
京都大学		12(1)	3	2(1)	17(2)	16	1	2(1)	19(1)	36
大阪大学		5	1(1)		6(1)	4			4	10
神戸大学		4			4		1(1)		1(1)	5
鳥取大学		1			1		1		1	2
岡山大学		3	1		4	2		1	3	7
広島大学		1		1	2	3			3	5
徳島大学								1(1)	1(1)	1
九州大学		2	1(1)		3(1)	2		1	3	6
熊本大学		3(1)		1(1)	4(2)					4
群馬工業高等専門学校			1(1)		1(1)					1
奈良工業高等専門学校							1(1)	1(1)	2(2)	2
宇部工業高等専門学校								1(1)	1(1)	1
北九州工業高等専門学校				1(1)	1(1)					1
名古屋市立大学						3	1	3(3)	7(3)	7
大阪府立大学		2		1	3	2			2	5
兵庫県立大学		2		1(1)	3(1)	1			1	4
いわき明星大学							1		1	1
城西大学				1(1)	1(1)					1
北里大学		1		1(1)	2(1)					2
東海大学		1			1		1(1)		1(1)	2
東京電機大学		1			1			1(1)	1(1)	2
東京理科大学		3	1(1)	1	5(1)	1	1(1)		2(1)	7
東邦大学		1(1)		1(1)	2(2)	2			2	4
日本大学				1	1	2(1)		1	3(1)	4
法政大学		2	1(1)		3(1)					3
立教大学			1		1					1
神奈川大学				1(1)	1(1)					1
愛知工業大学								1(1)	1(1)	1
名城大学		3		1(1)	4(1)			2(1)	2(1)	6

立命館大学	1			1	2	1(1)	1(1)	4(2)	5
関西大学	1			1			1(1)	1(1)	2
福岡大学		1(1)		1(1)					1
海外機関・その他	30	17(2)	4(1)	51(3)	18	12(3)	11(3)	41(3)	92
合計	102(3)	35(15)	33(21)	170(39)	81(1)	28(10)	37(23)	146(34)	316

() は5年一貫で内数。

第1期(2009年度)以前の入学者があった大学を以下に示す。

東京大学(16名)。北陸先端科学技術大学院大学, 早稲田大学(7名)。学習院大学, 慶應義塾大学(6名)。お茶の水女子大学(5名)。愛媛大学(4名)。電気通信大学, 静岡大学, 東京都立大学(3名)。室蘭工業大学, 筑波大学, 京都工芸繊維大学, 山口大学, 鹿児島大学, 大阪市立大学, 姫路工業大学, 中央大学, 岡山理科大学(2名)。群馬大学, 横浜国立大学, 富山大学, 福井大学, 三重大学, 奈良女子大学, 佐賀大学, 琉球大学, 奈良先端科学技術大学院大学, 石巻専修大学, 青山学院大学, 国際基督教大学, 明星大学, 静岡理工科大学, 龍谷大学, 甲南大学, 放送大学(1名)。

修了生の進路 単位:人

(2021年12月現在)

		2010～2020年度修了生の 修了直後の進路状況			1991～2020年度修了生の 現在の状況		
専攻		構造分子科学	機能分子科学	計	構造分子科学	機能分子科学	計
大学・ 公的機関等	教授	0	0	0	24	19	43
	准教授	1	0	1	17	13	30
	講師	0	0	0	4	2	6
	助教	0	0	0	16	10	26
	研究職	26	15	41	—	—	—
	小計	27	15	42	—	—	—
進学				0	—	—	—
民間企業(研究職含む)		2	8	10	—	—	—
その他		8	5	13	—	—	—
合計		37	28	65	—	—	—

修了直後は1年以内の就職・進学先等。
各項目には海外の機関・団体等を含む。

3-3-3 オープンキャンパス

2021年6月5日(土)に分子研オープンキャンパスを開催した。新型コロナウイルス感染症対策のため、昨年度と同様にZoomを用いたオンライン形式での実施となった。当日の参加人数は昨年度の21人から微増して29名となり、その内訳は学部生22名、大学院生4名、高専生1名、社会人2名、キャンセル11名であった。本イベントは10時から開始し、川合所長による分子研の紹介、担当教員による総研大・入試の説明後に、各研究室の概要紹介と体験入学の制度説明を行った。午後からは4つのZoomセッションを設けて参加者と教員の30分間の意見交換の場を設けた。参加申込み時の希望研究室が必ずしも当日の参加セッションと一致しなかったという昨年度の経験に基づき、今年度は、参加者が午前中の研究室紹介を聞いた上で意見交換のセッションを選択できるような形式にした。アンケートの結果からは、参加者の大半から大学院進学や分子研に関する有益な情報が得られ満足したとの回答が得られた一方で、もう少し教員と個別に話す時間が欲しかったとの指摘もあった。各研究室のより詳細な情報を知りたいという参加者にオープンキャンパス後に体験入学や研究室見学を促すという目的で体験入学の制度説明を組み合わせた。主旨が

十分に伝わっていなかった可能性がある。また、全体的に気軽に参加できるオンライン形式は好評であったが、同時にキャンセルが11名出たことも受け止めなければならない事実であり、来年度以降は何らかの改善が必要であろう。なお、オープンキャンパスの参加者のうち9名（学部生7名、大学院生2名。）は、その後見学や体験入学で来所した。

3-3-4 体験入学

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。本年度も昨年度と同様、新型コロナウイルス感染拡大に伴い、例年8月の第2週に受け入れてきた体験入学を中止し、感染者数が落ち着いている時期に、各研究室個別に見学者や体験入学者を受け入れる対応をとった（受入時期と感染症対策は岡崎三機関の規則に従った。）。選考の結果、本年度は34名の学生（学部学生24名、大学院生10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。

6月5日(火)：分子研オープンキャンパス（オンライン開催）で体験入学の中止と研究室ごとの個別受入を周知

1月7日(金)：体験入学WEB説明会

参加者の内訳、受入研究室、受入期間は以下の通りである。

	所属	身分	訪問先	受入期間
1	広島大学	大学院生	杉本 G	4月15日～17日 8月4日～7日
2	早稲田大学	大学院生	杉本 G	7月8日～10日
3	名城大学	大学院生	瀬川 G	6月9日
4	山梨大学	大学院生	瀬川 G	7月2日
5	九州大学	学部生	飯野 G	6月29日～7月1日
6	名古屋大学	学部生	岡崎 G	8月2日
7	近畿大学	大学院生	奥村 G	6月30日～7月1日
8	京都大学	学部生	杉本 G	8月4日～6日
9	大阪工業大学	学部生	小林 G	7月14日～15日
10	慶應義塾大学	学部生	古賀 G	7月29日～30日
11	北里大学	学部生	榎山 G	オンライン参加
12	名古屋大学	学部生	瀬川 G	8月5日
13	名古屋大学	学部生	瀬川 G	8月3日
14	名古屋大学	学部生	瀬川 G	8月5日
15	岐阜大学	学部生	小林 G	7月26日～29日
16	名古屋大学	学部生	瀬川 G	8月4日

17	名古屋大学	学部生	瀬川 G	8月4日
18	名古屋工業大学	大学院生	瀬川 G	11月5日
19	名古屋市立大学	学部生	加藤 G	11月30日
20	名古屋市立大学	学部生	加藤 G	11月30日
21	京都大学	大学院生	瀬川 G	11月4日
22	名古屋大学	大学院生	瀬川 G	11月30日
23	名古屋大学	大学院生	瀬川 G	11月30日
24	名古屋大学	大学院生	瀬川 G	11月30日
25	名古屋大学	学部生	瀬川 G	11月30日
26	名古屋大学	学部生	瀬川 G	11月30日
27	京都大学	学部生	杉本 G	3月23日～25日
28	九州大学	学部生	杉本 G	3月23日～26日
29	京都大学	学部生	杉本 G	3月23日～25日
30	近畿大学	学部生	大森 G	2月20日～25日
31	近畿大学	学部生	大森 G	2月20日～25日
32	名城大学	学部生	草本・瀬川・榎山 G	3月8日～11日
33	名城大学	学部生	草本・瀬川・榎山 G	3月8日～11日
34	名古屋市立大学	学部生	瀬川 G	3月22日

3-3-5 総研大アジア冬の学校

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。新型コロナウイルスの感染拡大に伴い、昨年度に引き続き2021年度も総研大アジア冬の学校は中止を決定した。

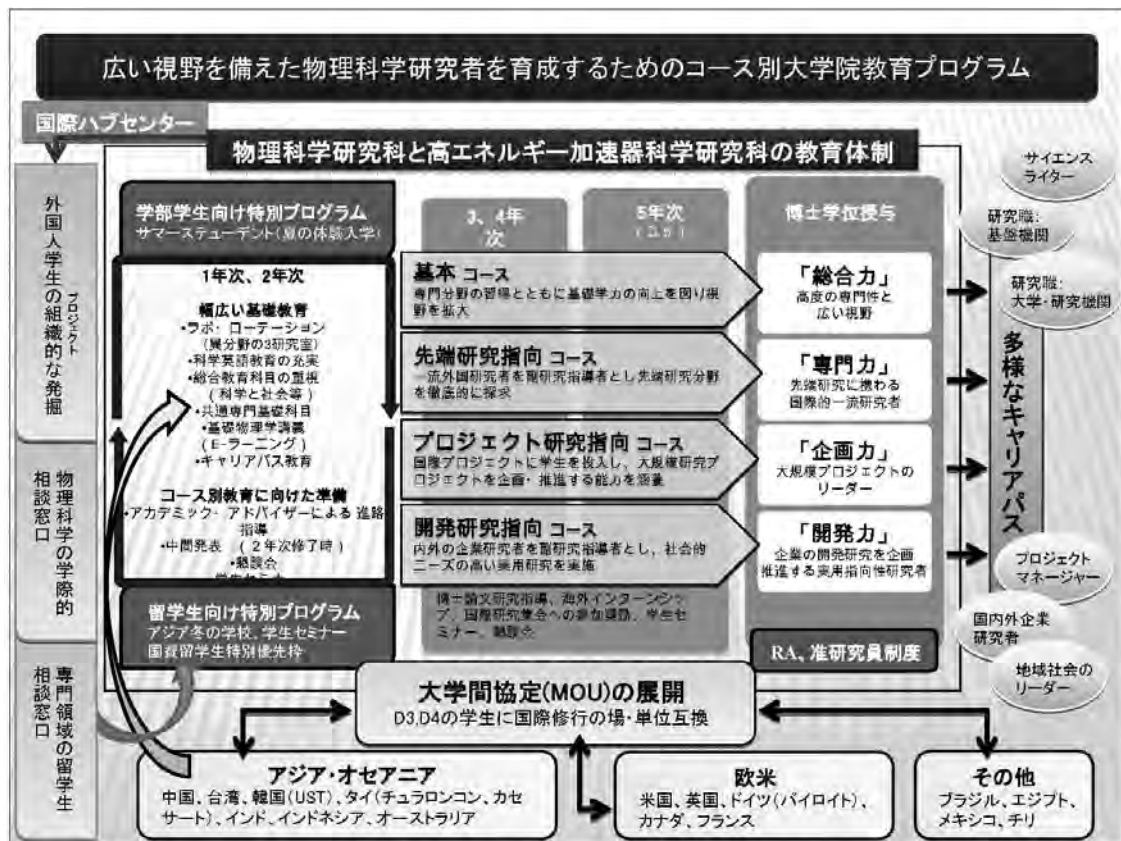
3-3-6 広い視野を備えた物理科学研究者を育成するためのコース別教育プログラム

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」が実施された。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きた。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た。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年度以降もプログラムを継続してきたが、2019年度以降、本プログラムからの予算支援がなくなったため、「先端研究指向コース」等で実施するインターンシップは、全学で公募する「SOKEDNAI 研究派遣プログラム」へ統合されている。物理科学コース別教育プログラムは2022年3月末をもって新規募集を終了した。2022年度入学者は2022年度開講のコース別プログラム科目の履修は可能だが、コース選択・修了はできない。



3-3-7 統合生命科学教育コース群

総研大では、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」を設置している。

「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、Zoom（Web会議システム）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、8科目（①統合生命科学入門、②分子細胞生物学II、③バイオインフォマティクス演習、④発生生物学IV、⑤生体分子シミュレーション入門（中止）、⑥基礎生体分子科学、⑦構造生体分子科学、⑧統合進化学）が実施された。昨年度に引き続きコロナ禍においての実施となり、講義方法（講義室及びZoomの併用／Zoomのみ）を検討しなければならない状況が幾度となくあったが、先生方の入念な準備により実施することができた。来年度も厳しい状況が予想されるが、今年度の経験を活かし臨機応変に対応していきたい。

3-4 その他

3-4-1 分子研コロキウム

分子研コロキウムは、所長はもとより、所内全ての教授、准教授、研究者が集い、各人の専門分野を越えて学問的な刺激を享受することを趣旨とし、各々の専門分野で講師をお招きして開催する部門公開セミナーとは一線を画す。今年度 955 回を数える歴史あるセミナーであるが、コロキウムに参加する所員は、年々、減少する一途にあり、コロキウム本来の趣旨が所員に正しく理解されているかは疑わしい状況にある。1988 年「総合研究大学院大学」の設立、2003 年「国立大学法人法」の制定にともない、所長、教授、准教授が、研究所・大学院の運営により多くの時間を割かざるを得なくなるなど、コロキウムが始まった 1976 年当時と現在とでは研究所を取り巻く状況が大きく異なってきた事実はあるが、コロキウム本来の趣旨に立ち返り、その存在意義を高めるべく、2010 年度からコロキウムの改革が進められている。

2021 年度は昨年を引き続き、(i) 領域推薦枠の導入、(ii) 4 月から 3 月までの通年開催、の 2 つの開催要領を検討した。前者は、お招きする講師の選出に複数の教員が関わることでコロキウムへの関心を高めることが主な目的であり、後者は、コロキウムの開催が年末から年度末にかけて集中してしまうここ数年の傾向を考慮しての対策である。これらの開催方針は次年度にも引き継がれることとなった。

昨年度に、コロナ禍における新しいコロキウムの開催方法として、オンラインによる開催、あるいはオンラインとオンサイトを併用したハイブリッド開催が整備された。今年度も、時々刻々と状況が変化する新型コロナウイルス感染症の感染拡大状況に応じて、コロキウムをオンライン開催あるいはオンライン・オンサイトのハイブリッド開催とするよう柔軟に対応した。また、新型コロナウイルス感染症が流行する以前は、研究者間の交流を目的とするワイン会や懇親会が例年行われてきたが、本年度はこれらを開催せず、代わりにコロキウム後に意見交換会を設けるなどの代替案を採用した。

本年度に開催されたコロキウムはすべてオンライン上で所外公開された。所外公開に伴い参加者は大幅に増え、100 人以上の参加登録があるなど非常に盛況であった。議論も活発であり、オンライン化の良い面を認識することができた。一方で、所外公開のオンラインのコロキウムでは、専門性の高い議論が活発におこなわれる反面、専門外の研究者や学生からの質問がし難いという意見もあり、運営方法はその都度改善していくことが必要になるであろう。これは本コロキウムに限らずオンラインで開催される講演会・研究会全般にあてはまる検討事項であろう。コロナウイルス対策がきっかけであったが、オンラインでの所外発信という新しい選択肢ができたことで、コロキウムが講演者と所内外の研究者を広く巻き込んだ「ブレーンストーミング」の場となることを期待したい。

以下に、2021 年度に行われた分子研コロキウム一覧を示す。

回	開催日	テーマ	講演者	参加人数
950	2021. 5. 6 (オンライン)	Organic Light Emitting Diode—A review	Prof. Ching Wan Tang (The Hong Kong University of Science and Technology)	67
951	2021. 5.20 (オンライン)	Singlet Fission for Photovoltaics: Search for New Materials	Prof. Josef Michl (University of Colorado Boulder)	75
952	2021. 7. 9 (オンライン)	キラリティが結ぶ弾性・磁気・電気・光 の物理 Chirality-Induced Dynamics of Phonon, Spin and Photon	岸根順一郎 (放送大学教授)	101

953	2021. 8.17 (オンライン)	ファンデルワールス積層による原子層の 自在配列と量子輸送現象 Quantum Transport in van der Waals Junctions of Atomic Layers	町田友樹 (東京大学生産技術研究所教授)	46
954	2021.12. 9 (オンライン・ オンサイト併用)	非平面 π 共役分子がもたらす特異な光物性 Non-Planar π -Conjugated Molecules Featuring Unique Photophysical Properties	宮島大吾 (理化学研究所創発物性科学 研究センターユニットリー ダー)	49
955	2022. 1.18 (オンライン)	特異な電子構造と安定性をあわせもつ新奇 π 電子系の創成 Exploring Novel π -Electron Systems toward Unusual Yet Stable Functional Materials	深澤愛子 (京都大学高等研究院物質－ 細胞統合システム拠点 (iCeMS) 教授)	94