

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マテリアル先端リサーチインフラ事業(5-5参照)

(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

- ① 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。
- 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 2022年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名 (通年)		提案代表者
CO ₂ の水中電気還元 to 有効な金属錯体-炭素電極の高耐久性を目指した不活性化機構の解析と解明	名古屋大学	斎藤 進
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	藤川 茂紀

(2) 協力研究

課 題 名 (通年)		提案代表者
高分解能モメンタムマイクロスコブによる実用有機半導体材料の軌道トモグラフィー	筑波大学	山田 洋一
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	西山 桂
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	田中 悟

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	佐藤 宇史
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	岡林 潤
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	吉村 崇
単結晶有機半導体「準ホモエピタキシャル」接合の太陽電池応用への試み	東京理科大学	中山 泰生
超低電圧駆動有機 EL デバイスの開発および性能評価	富山大学	森本 勝大
有機ホウ素化合物による非フラレン n 型半導体の開発と太陽電池の作製評価	名古屋工業大学	小野 克彦
Momentum Microscopy 装置による 3D フェルミ面計測手法の確立とその応用	大阪大学	田中慎一郎
超薄膜グラフェンを用いた独自の高効率電子収量用液体セルの開発	名古屋大学	三石 郁之
ジスルフィド (S-S) 結合の触媒的開裂と再構築による非対称ジスルフィドの合成	山形大学	皆川 真規
高次非線形分光計算による界面水物性の分子論的解析	慶應義塾大学	稲垣 泰一
ポリグルタミン病原因遺伝子のリピート関連性非 ATG 依存性翻訳産物へのレーザー照射後の凝集解離の分子シミュレーション	群馬大学	中村 和裕
シュタウディングーライゲーション法を用いた N 結合型糖鎖構造構築反応の開発	青森大学	鈴木 達哉
BL6U の Momentum Microscope でのスピン物性科学の展開	大阪大学	菅 滋正
六方晶格子を持つ水素化物ハライド Ba ₂ H ₃ X (X = Cl, Br, I) のヒドリド導電特性	京都大学	生方 宏樹

課 題 名 (前期)

提案代表者

Chirality-Induced Spin Selectivity の基礎理論研究	放送大学	岸根順一郎
PyBTM 及び F ₂ PyBTM 安定発光性ラジカルのパラ置換体の開発	龍谷大学	服部 陽平
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	黄 晋二
分子動力学計算を用いた準安定な超分子構造体のダイナミクス解析	京都府立大学	沼田 宗典
光機能性分子材料の電子と振動の自由度が協奏する光化学初期過程の測定	九州大学	宮田 潔志

課 題 名 (後期)

提案代表者

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	黄 晋二
光電子運動量顕微鏡による MXenes 単結晶の電子状態の研究	名古屋大学	伊藤 孝寛
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準単色ガンマ線源開発	京都大学	全 炳俊
高い時間コヒーレンスを持つ高輝度 EUV 光を実現するコヒーレント高調波発生とその特性評価	秋田工業高等専門学校	坂本 文人
電子不足高原子価イリジウム触媒の開発と C-H 官能基化反応への応用	北海道大学	吉野 達彦
チェレンコフ位相整合高出力テラヘルツ波光源の開発	名古屋大学	村手 宏輔
広帯域 2 光子光電子分光による内包フラレン超原子集積体の電子ダイナミクス計測	大阪公立大学	渋谷 昌弘
クーロン相互作用で不斉反応場を構築した金属酸化物クラスター触媒の新合成と評価	東京都立大学	山添 誠司

(3) 研究会

課 題 名 (前期)

提案代表者

森野ディスカッション	公益信託分子科学奨励森野基金	宗像 利明
イオン液体の構造と物性予測のデータ解析技術	防衛大学校	阿部 洋
金属酸化物表面と薄膜の構造化学	神戸大学	大西 洋

課 題 名 (後期)

提案代表者

UVSOR-III における多様な量子ビームの発生と先端利用に関する研究会	分子科学研究所	平 義隆
軟 X 線共鳴散乱・反射率	Diamond Light Source	荒木 暢
ソフトマテリアル・ソフトマターのナノ～メソスケール構造解析		
生体分子材料を探る：発動分子のさらなる理解と設計に向けて	東京工業大学	上野 隆史

(4) 若手研究活動支援

課 題 名 (前期)

提案代表者

第 20 回 ESR 夏の学校：ESR 装置の基礎と原理・生体応用	神奈川大学	平野 弘樹
-----------------------------------	-------	-------

(6) 施設利用

① UVSOR 施設利用

課 題 名 (前期)	提案代表者
ドーパント周囲に潜む空隙型欠陥の検出を目指した可視光ガンマ線同時照射陽電子消滅寿命分光の開発	山形大学 北浦 守
透過型 NRF を用いた非破壊核種分析における温度の影響に関する研究	日本原子力研究開発機構 小泉 光生
γ線偏光検出用コンプトンカメラの基礎研究	東京大学 島添 健次
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
BL1U アンジュレータを用いた Flat-LCS ガンマ線の特性と NRF 反応断面積絶対値測定に関する研究	京都大学 大垣 英明
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	大阪公立大学 堀 史説
温度およびガス雰囲気を制御したガンマ線誘起陽電子消滅寿命測定法の開発	大阪産業技術研究所 道志 智
単一電子蓄積を利用した放射光の時空間特性の研究	広島大学 加藤 政博
放射光の時間干渉性を利用した新奇な放射光利用法の開拓	広島大学 加藤 政博
イオン化終状態を分離した高分解能光電子円二色性の測定	広島大学 高口 博志
軟X線ダブルパルスによる多電子波束の量子干渉	九州シンクロトロン光研究センター 金安 達夫
軟X線吸収分光法による高効率有機太陽電池のための金属ドーピング金属酸化物の伝導帯電子構造解析	千葉大学 奥平 幸司
H-MFI ゼオライト上の炭化モリブデン活性種の XANES による MTB 触媒反応時の炭化進行の構造解析	埼玉工業大学 有谷 博文
X線吸収分光による金属原子を内包した0次元シリコンケージ構造体のシリコン原子の構造解析	慶應義塾大学 中嶋 敦
日米共同・太陽フレアX線集光撮像分光観測ロケット実験 FOXSI-4 搭載装置の開発と評価	国立天文台 成影 典之
希土類元素含有複合酸化物の局所構造と M-edge XANES スペクトルに関する基礎的研究	京都大学 朝倉 博行
共添加二酸化チタンにおける添加元素の局所環境解析	大阪公立大学 村田 秀信
ダブルスピネル構造中カチオンの局所構造	九州大学 吉岡 聡
NEXAFS 分光用試料搬送装置を用いた電池材料の大気非暴露分析	九州シンクロトロン光研究センター 小林 英一
紫外光電子分光法による金属をドーブした金属酸化物ナノ粒子/有機薄膜界面の電子状態評価	千葉大学 奥平 幸司
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 II	高エネルギー加速器研究機構 足立 純一
軟X線散乱によるネマチック液晶におけるナノクラスター構造と強誘電性の相関探索	理化学研究所 荒岡 史人
金属カルボニル化合物液体試料についての XAS 測定	東京大学 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 大野 真也
水中での脂質二重膜の電子状態とイオン配位構造	豊橋技術科学大学 手老 龍吾
溶液光化学反応の軟X線吸収分光測定	分子科学研究所 長坂 将成
ビームライン整備	分子科学研究所 長坂 将成
共鳴軟X線散乱法によるポリマーの構造解析	分子科学研究所 岩山 洋士
【審査免除】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 山田 泰之
軟X線共鳴散乱による自発形成長周期構造液晶の精密構造解析	京都大学 高西 陽一
軟X線共鳴散乱による機能性フッ素ポリマーの構造分析	大阪大学 山ノ井 航平
CK端 XAS 計測によるスマネンの溶液中でのスタッキング挙動の観測	大阪大学 植竹 裕太
人工光合成をめざす半導体光触媒の水中 XAFS 測定：金属カチオン外殻電子遷移の計測	神戸大学 大西 洋
水・DMSO 2成分溶液系における水の電子構造変化	広島大学 岡田 和正
オペランド軟X線 XAFS 観測による炭酸 Co-Ni 水分解触媒の活性化メカニズムの解明	山口大学 吉田 真明
Temperature Dependence of the Interaction of Calcium Dication with Water Probed by X-Ray Absorption Spectroscopy	Synchrotron SOLEIL CEOLIN, Denis
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による詳細評価	山形大学 田島 靖久
バンド構造・発光起源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創成	東北大学 黒澤 俊介
自己発光ハロゲン化物シンチレータにおける電荷遷移移動発光の調査	埼玉大学 小玉 翔平
深紫外発光アルミン酸亜鉛薄膜の成長方位と結晶性の評価	静岡大学 小南 裕子
整備課題 (リモート測定にむけた整備)	分子科学研究所 岩山 洋士
プラズマエッチングガスの解離過程の解明	名古屋大学 石川 健治
強相関半導体の電流誘起金属化の電子状態	大阪大学 木村 真一
三元化合物・アルカリ銀ハライド結晶の光学特性の研究	大阪公立大学 河相 武利

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・紫外・可視域遷移スペクトル形状に与える影響の解析	名古屋大学	吉野 正人
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	江島 丈雄
レドックスフロー電池の窒素ドーパカーボン触媒のオペランド電子状態解析	産業技術総合研究所	細野 英司
高電位型 Li-Fe-Mn-Co 系ポリアニオン正極材料の酸化還元反応分布の観測	産業技術総合研究所	朝倉 大輔
STXM による細胞核内の核酸およびタンパク質分布解析の高精度化	東海大学	伊藤 敦
走査型透過 X 線顕微鏡を用いたポリマーの湿度制御下における化学状態変化	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	三石 郁之
小惑星リュウグウに記録される分子多様性に記録される真の地球外有機物進化の決定 ～「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	藪田ひかる
多機関連携分析を駆使したリュウグウ試料に含まれる有機物の全容解明への挑戦	海洋研究開発機構	伊藤 元雄
Hunting for Organosulfur and Organonitrogen Content in Aged Dust Aerosol Particles Transported by Extreme Dust Storms	University of Gothenburg	KONG, Xiangrui
STXM in Characterizing Lysosomal Storage Materials in Salla Disease Mouse Model	University of Oulu	MINNA, Patanen
Probing, of Drugs and Nanocarriers in the Viable Parts of Human Skin	Freie Universität Berlin	RÜHL, Eckart
Understanding Interface Kinetics between Primary Battery Particles (LiCoO ₂) and Solid Electrolyte via Operando STXM	Seoul National University	LIM, Jongwoo
Interfacial Engineered Nanostructural Photoelectrodes for Efficient Water Decomposition	Tamkang University	PONG, Way-faung
有機-無機界面磁気結合を利用した原子層物質の磁気状態制御	名古屋大学	宮町 俊生
XMCD を用いた β -Mn 型カイラル磁性体 Fe _{2-x} Pd _x Mo ₃ N および Co _{2-x} Pd _x Mo ₃ N エピタキシャル薄膜における磁気状態の研究	名古屋大学	伊藤 孝寛
原子分解能・電界電子放出顕微鏡の開発	東京大学	柳沢 啓史
磁気ボトル型電子分析器を用いた電子同時計測	富山大学	彦坂 泰正
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 II	分子科学研究所	解良 聡
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
整備課題（高精度標準計測のための整備）	分子科学研究所	岩山 洋士
アモルファス半導体薄膜の光照射及び熱処理効果に関する研究	岐阜大学	林 浩司
グラフェン超薄膜の紫外・X線透過率測定	名古屋大学	三石 郁之
高効率水分解水素生成光電極設計に向けた高濃度 3d 遷移金属添加 AlN の光照射下の電子構造解明	京都工芸繊維大学	今田 早紀
白色発光特性を有する炭素含有多孔質シリカ中の炭素の局所構造の解明	大阪産業技術研究所	道志 智
軟 X 線内殻吸収分光で明らかにするスピントロニクスオーバー現象に関連する鉄配位高分子の配位子場効果	沖縄科学技術大学院大学	山神 光平
高分解能 ARPES で探る新奇カゴメ超伝導体への元素置換効果	東北大学	佐藤 宇史
高分解能角度分解光電子分光法による二次元単層ホウ化銅の電子状態の研究	東京大学	堀尾 眞史
垂直磁気異方性を示す Mn 合金のスピン分解・軌道分解光電子分光	東京大学	岡林 潤
角度分解光電子分光によるグラフェン層間化合物の界面効果の研究	東京工業大学	一ノ倉 聖
BL5U 光電子エンドステーションの整備と開発	分子科学研究所	田中 清尚
【審査免除】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
偏光依存角度分解光電子分光による Zr ₃ SnC ₂ の表面電子状態の研究	名古屋大学	伊藤 孝寛
原子制御した 3 次元立体構造シリコン (111) ファセット表面上に作製した超薄膜からの光電子分光	奈良先端科学技術大学院大学	服部 賢
層状希土類化合物における電荷密度波転移	大阪大学	中村 拓人
角度分解光電子分光による新奇トポロジカル相の開拓	岡山大学	横谷 尚睦
ARPES による銅酸化物高温超伝導相図の再考 II	広島大学	出田真一郎
合金を用いた多層膜反射鏡の特性調査	東京大学	吉川 一朗
探査機搭載用光学フィルタの性能評価	東京大学	吉岡 和夫
惑星探査に向けた紫外線吸収フィルタの性能評価	立教大学	桑原 正輝
可視域発光観測による真空紫外光の偏光評価 II	九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫
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 (III)	東京理科大学	中山 泰生
時間分解遠赤外分光による光電変換物質の電子-格子相互作用とポーラロンダイナミクスの解明	分子科学研究所	西田 純
強相関半導体の光誘起局在・非局在転移の空間分布の観測	大阪大学	木村 真一
放射光顕微赤外分光法を用いた難分解性有機化合物の構造解析	高エネルギー加速器研究機構	川崎 平康

低エネルギー高分解能 ARPES による強誘電ワイル半金属の探索	東北大学	佐藤 宇史
T* 型銅酸化物高温超伝導体の擬ギャップの特性解明	東京大学	堀尾 眞史
高分解角度分解光電子分光による磁性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	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 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と開発	分子科学研究所	田中 清尚
固体電解質 $\text{La}_{(1-x)/3}\text{Li}_x\text{NbO}_3$ ($x = 0, 0.08$) および $\text{Li}_{3x}\text{La}_{2/3-x}\text{TiO}_3$ バルク単結晶の角度分解光電子分光	名古屋大学	伊藤 孝寛
低次元トポロジカル物質における Lifshitz 転移へのドーピング効果	大阪大学	中村 拓人
層状窒化塩化物超伝導体の電子構造の直接観測	岡山大学	横谷 尚睦
高分解能角度分解光電子分光による三層系銅酸化物高温超伝導体の電子構造研究	広島大学	出田真一郎
多角入射減衰全反射型紫外分光法による有機半導体/イオン液体界面の電子状態深さ分解研究	大阪大学	田邊 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	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	吉川 一朗
隕石および黒色サンプルにおける紫外線反射率の定量評価	東京大学	吉岡 和夫
ワイドバンドギャップ半導体の可視-真空紫外複素屈折率スペクトル	福井大学	福井 一俊
深紫外分光的手法による資源探索のための鉱物分析	大阪大学	清水 俊彦
最小電離損失粒子を用いた原子核乾板の感度評価	名古屋大学	中村 光廣

課 題 名 (後期)

提案代表者

可視光ガンマ線同時照射陽電子消滅寿命分光による共賦活不純物の光誘起価数転移の観測	山形大学	北浦 守
その場陽電子消滅測定による鉄試料における加工誘起空孔形成	千葉大学	藤浪 眞紀
γ 線偏光検出用コンプトンカメラの基礎研究	東京大学	鳥添 健次
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
真空紫外域円偏光照射によるアミノ酸分子のキラリティ発現に関する研究	核融合科学研究所	小林 政弘
BL1U アンジュレータを用いた Flat-LCS ガンマ線の特性と NRF 反応断面積絶対値測定に関する研究	京都大学	大垣 英明
電解水素チャージで純鉄中に形成される原子空孔のガンマ線誘起陽電子寿命法を用いたその場計測	京都大学	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	大阪公立大学	堀 史説
新規キラル化合物の孤立系光電子円二色性の研究	広島大学	高口 博志
【審査免除】 軟X線ダブルパルスによる多電子波束の量子干渉	九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫
単一電子からのアンジュレータ放射の観測	広島大学	加藤 政博
軟X線吸収分光法による高効率有機太陽電池のための金属ドーピング金属酸化物の伝導帯電子構造解析	千葉大学	奥平 幸司
H-MFI ゼオライト上の炭化モリブデン活性種の XANES による MTB 触媒反応時の炭化進行の構造解析	埼玉工業大学	有谷 博文
X線吸収分光による金属原子を内包した0次元シリコンケージ構造体のシリコン原子の構造解析	慶應義塾大学	中嶋 敦
日米共同・太陽フレアX線集光撮像分光観測ロケット実験 FOXSI-4 搭載装置の開発と評価	国立天文台	成影 典之
希土類元素含有複合酸化物の局所構造と M-edge XANES スペクトルに関する基礎的研究	京都大学	朝倉 博行
共添加二酸化チタンにおける添加元素の局所環境解析	大阪公立大学	村田 秀信
ダブルスピネル構造中カチオンの局所構造	九州大学	吉岡 聡
NEXAFS 分光法による試料搬送装置を用いた固体電解質の分析	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
紫外光電子分光法による金属をドーブした金属酸化物ナノ粒子/有機薄膜界面の電子状態評価	千葉大学	奥平 幸司
各種共鳴状態を利用した軟X線散乱によるソフトマター超分子構造の探索	理化学研究所	荒岡 史人
金属カルボニル化合物液体試料についての XAS 測定	東京大学	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	大野 真也
水中での脂質二重膜の電子状態とイオン配位構造	豊橋技術科学大学	手老 龍吾
溶液光化学反応の軟X線吸収分光測定	分子科学研究所	長坂 将成
ビームライン整備	分子科学研究所	長坂 将成
整備課題 (共鳴軟X線散乱測定)	分子科学研究所	岩山 洋士
軟X線分光法を利用した電解生成型メタン酸化触媒活性種の電子状態解析	名古屋大学	山田 泰之
軟X線共鳴散乱による自発形成長周期構造液晶の精密構造解析 (II)	京都大学	高西 陽一

人工光合成をめざすチタン酸ストロンチウム (SrTiO ₃) 光触媒の水中 XAFS 測定 水・DMSO 2 成分溶液系における水の電子構造変化 Understanding the Inter-Ion Interactions in Natural Salt Brines from a Martian Analogue Site	神戸大学 広島大学 University of Gothenburg	大西 洋 岡田 和正 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 寿命測定による詳細評価 バンド構造・発光起源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創成 自己発光ハロゲン化物シンチレータにおける電荷遷移移動発光の調査 深紫外発光アルミン酸亜鉛薄膜の成長方位と結晶性の評価 整備課題 (リモート測定にむけた整備) プラズマエッチングガスの解離過程の解明 強相関半導体の電流誘起金属化の電子状態 三元化合物・アルカリ銀ハライド結晶の光学特性の研究 六方晶窒化ホウ素膜の紫外から軟 X 線に至る広エネルギー帯域における発光収量の評価 暗黒物質探索実験に向けたダイヤモンドシンチレータの発光特性評価 フィルター粒子間バウンドラバー構造の化学結合状態 走査型透過 X 線顕微鏡を用いたポリマーの劣化による化学状態変化 ビームラインおよび STXM の整備 レドックスフロー電池のカーボン触媒のオペランド電子状態解析 【審査免除】 STXM による細胞核内の核酸およびタンパク質分布解析の高精度化 彗星有機物の初期水質変成条件を STXM で決定する試み 【審査免除】 他機関連携分析を駆使したリュウグウ試料に含まれる有機物の全容解明への 挑戦 【審査免除】 Probing of Drugs and Nanocarriers in the Viable Parts of Human Skin	山形大学 東北大学 埼玉大学 静岡大学 分子科学研究所 名古屋大学 大阪大学 大阪公立大学 山形大学 筑波大学 東北大学 高エネルギー加速器研究機構 高エネルギー加速器研究機構 産業技術総合研究所 東海大学 広島大学 海洋研究開発機構	田島 靖久 黒澤 俊介 小玉 翔平 小南 裕子 岩山 洋士 石川 健治 木村 真一 河相 武利 北浦 守 梅本 篤宏 江島 丈雄 大東 琢治 大東 琢治 細野 英司 伊藤 敦 藪田 ひかる 伊藤 元雄
【審査免除】 Interfacial Engineered Nanostructural Photoelectrodes for Efficient Water Decomposition The Investigation of Concentration and Chemical Composition of Ice-Nucleating Particles from Biomass Burning Emissions レドックスフロー電池電解液のオペランド電子状態解析 有機-無機界面磁気結合を利用した原子層物質の磁気状態制御 XMCD を用いた β -Mn 型カイラル磁性体 Fe _{2-x} Pd _x Mo ₃ N および Co _{2-x} Pd _x Mo ₃ N エピタキシャ ル薄膜における磁気状態の研究 磁性ヘテロ薄膜構造の磁化方向制御に関する研究 原子分解能・電界電子放出顕微鏡の開発 磁気ボトル型電子分析器を用いた電子同時計測 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 II 反射率磁気円二色性測定でみる磁性体薄膜の立体構造 整備課題 (高精度標準計測のための整備) グラフェン超薄膜の紫外・X 線透過率測定 六方晶窒化ホウ素膜の紫外から軟 X 線に至る広エネルギー帯域における発光収量の評価 軟 X 線吸収分光法による遷移金属酸化物ナノ粒子の表面電子状態解析 高収率で水を 4 電子酸化する半導体光触媒の軟 X 線吸収分光 【審査免除】 高分解能 ARPES で探る新奇カゴメ超伝導体への元素置換効果 T' 型銅酸化物高温超伝導体の本質的な電子ドーピング効果の検証 垂直磁気異方性を示す Mn-Co 合金のスピン分解・軌道分解光電子分光 角度分解光電子分光による π 電子と d 電子の相互作用の研究 遷移金属リニ化合物薄膜の電子状態および化学状態観察 BLSU 光電子エンドステーションの整備と開発 磁性 i-MAX 相化合物 (Mo _{1/3} RE _{2/3}) ₂ AIC の終端面ドメイン選択角度分解光電子分光 熱電特性と電子構造の関係に関する光電子分光研究 原子制御した 3 次元立体構造シリコン (111) ファセット表面上に作製した超薄膜からの光 電子分光 TiSe ₂ の 3D フェルミ面の CDW 転移による形態変化 原子層強相関物質の角度分解光電子分光 ノーダルライン半金属 LaTe _{1+x} Sb _{1-x} の角度分解光電子分光 過剰ドーピング Bi2201 における電子状態の三次元性とフェルミ面対称性の破れの観測 合金を用いた多層膜反射鏡の特性調査	Freie Universität Berlin Tamkang University University of Gothenburg 産業技術総合研究所 名古屋大学 名古屋大学 名古屋大学 東京大学 富山大学 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 名古屋大学 山形大学 千葉大学 大阪公立大学 東北大学 東京大学 東京大学 東京工業大学 立教大学 分子科学研究所 名古屋大学 豊田工業大学 奈良先端科学技術大学院大学 大阪大学 大阪大学 岡山大学 広島大学 東京大学	RUEHL, Eckart PONG, Way-faung KONG, Xiangrui 朝倉 大輔 宮町 俊生 伊藤 孝寛 宮町 俊生 柳沢 啓史 彦坂 泰正 解良 聡 山本 航平 岩山 洋士 三石 郁之 北浦 守 奥平 幸司 吉田 朋子 佐藤 宇史 堀尾 真史 岡林 潤 一ノ倉 聖 前島 尚行 田中 清尚 伊藤 孝寛 松波 雅治 服部 賢 田中慎一郎 中村 拓人 横谷 尚陸 出田真一郎 吉川 一朗

探査機搭載用光学フィルタの性能評価	東京大学	吉岡 和夫
惑星探査に向けた紫外線吸収フィルタの性能評価	立教大学	桑原 正輝
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	の場 史朗
グラフェン超薄膜の紫外・X線透過率測定	名古屋大学	三石 郁之
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 (III)	東京理科大学	中山 泰生
時間分解遠赤外分光による光電変換物質の電子-格子相互作用とポーラロンダイナミクスの解明	分子科学研究所	西田 純
強相関半導体の光誘起局在・非局在転移の空間分布の観測	大阪大学	木村 真一
放射光顕微赤外分光法を用いた難分解性有機化合物の構造解析	高エネルギー加速器研究機構	川崎 平康
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	藪田ひかる
低エネルギー高分解能 ARPES による強磁性原子層薄膜の研究	東北大学	佐藤 宇史
光電子分光によるアモルファス p 型透明酸化半導体の電子構造探索	千葉大学	石井 久夫
【審査免除】高分解角度分解光電子分光による磁性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	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 IV	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と開発	分子科学研究所	田中 清尚
角度分解光電子分光によるリチウム固体電解質バルク単結晶における光照射スペクトル変調効果のイオン伝導度依存性	名古屋大学	伊藤 孝寛
TiSe ₂ における低エネルギー領域での ARPES の励起光波長依存性の研究	大阪大学	田中慎一郎
極低キャリア CDW 物質における偏光依存 ARPES	大阪大学	中村 拓人
銅酸化物高温超伝導体におけるコヒーレンスピークのスペクトル強度の波数依存性	広島大学	出田真一郎
多角入射減衰全反射型紫外分光法による有機半導体/イオン液体界面の電子状態深さ分解研究	立教大学	田邊 一郎
高速シンチレ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	静岡大学	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	吉川 一朗
隕石および黒色サンプルにおける紫外線反射率の定量評価	東京大学	吉岡 和夫
ワイドバンドギャップ半導体の可視-真空紫外複素屈折率スペクトル	福井大学	福井 一俊
深紫外分光学的手法による資源探索のための鉱物分析	大阪大学	清水 俊彦
Yb を含む準結晶の UV-VUV 反射スペクトルと電子状態	徳島大学	岡村 英一
新規キラル化合物の円偏光特性評価のための高分解能光電子スペクトル測定	広島大学	高口 博志
放射光源を用いた光電離による核融合プラズマ、星間プラズマの模擬実験	核融合科学研究所	小林 政弘
多角入射 ATR 紫外分光法による有機半導体/イオン液体界面の電子状態研究：イオン液体依存性	立教大学	田邊 一郎
最小電離損失粒子を用いた原子核乾板の感度評価	名古屋大学	中村 光廣

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	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	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	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	北河 康隆
局所物理量を用いたイオンとスピンのダイナミクス解析	京都大学	瀬波 大土
高反応性のジボラン (4) と AI 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	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	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	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溶液効果の理論的研究	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紫外領域におけるスペクトル解析	神戸大学	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	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
人工光合成に関する計算化学的研究	産業技術総合研究所	草間 仁
生体分子複雑系の全原子・粗視化シミュレーション研究	神戸大学	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	森 寛敏
溶液界面の構造と機能の計算化学	東北大学	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	野崎 京子
多環芳香族分子 (PAHs) の水和構造の赤外分光による研究	お茶の水女子大学	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	武次 徹也
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	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	佐藤 啓文
ヘロナミド類の抗真菌作用メカニズムの解明のための計算分子設計技術の開発	北陸大学	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	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	岡崎 進
ナノ制限空間における溶媒和と動態の解析	徳島大学	吉田 健
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	山口 兆
三次元バイ共役分子の構造と物性	大阪府立大学	津留崎陽大
ナノ炭素・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	山北 佳宏
三脚巴状分子の凝集誘起発光についての理論的研究	千葉工業大学	山本 典史
カメレオンモデルによるタンパク質構造転移をとまなう機能発現機構の自由エネルギーランドスケープ解析	名古屋大学	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	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	入佐 正幸
水, 氷, クラスレート・ハイドレート構造相転移の理論研究	岡山大学	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	横浜市立大学	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	関西学院大学	加藤 昌子
細菌感染の付着因子の糖鎖認識に関する理論研究	北里大学	能登 香
軟X線光科学に関する理論的研究	広島大学	高橋 修
エネルギー変換材料の計算科学	京都大学	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	大和田智彦
部位選択的熱流解析によるタンパク質分子機能の探索	名古屋大学	倭 剛久
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	鳥居 肇
機能性ソフトマテリアルの全原子分子動力学シミュレーション	北里大学	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	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	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	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	三重大学	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	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	波田 雅彦
次世代カーボンニュートラル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	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	北尾 彰朗
第一原理計算手法による半導体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	秋山 亨
理論計算による触媒機能の解明	東邦大学	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	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	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	中野 義明
ソフトマター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	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	山崎 祥平
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	米澤 康滋
金属クラスターの構造とその反応性	東京大学	小安喜一郎
天然紫外線防御物質マイコスポリン様アミノ酸の高速脱励起機構に関する理論的研究	山陽小野田市立山口東京理科大学	畠山 允
第一原理分子動力学シミュレーションによる水の変角振動緩和ダイナミクスの理論研究	富山大学	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	村岡 梓
振電相互作用に関する理論的研究	京都大学	佐藤 徹
不均一界面系における静的および動的物性の理論的研究	慶應義塾大学	畑中 美穂

水の輸送係数に対する構造規則性の寄与と相互作用モデルの関係	新潟大学	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	櫻井 英博
新奇ナノカーボン・共役ラダー分子群創出に向けた合理的な分子・反応・機能デザイン	名古屋大学	伊藤 英人
Electronic Trapping and Surface Protonation in TiO ₂ Nanostructures	東京工業大学	JUHASZ, Gergely
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	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	平野 恒夫
気相イオンの温度計測に関する研究	産業技術総合研究所	浅川 大樹
フラグメント分子軌道法による FIV プロテアーゼと HIV-1 プロテアーゼ阻害剤の相互作用解析	筑波大学	松井 亨
液体の統計力学理論による生体分子の機能解析	九州大学	吉田 紀生
荷電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	前田 大光
学際的研究のための気相中原子・分子電子励起状態精密量子化学計算	東洋大学	田代 基慶
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	森本 淳平
DFT 分子動力学計算を用いた溶融塩中の放射性廃棄物の溶解度評価	東北大学	穴戸 博紀
単層カーボンナノチューブの構造制御合成に向けた分子動力学シミュレーション	東京大学	丸山 茂夫
ジグリコールアミド系有機配位子によるランタノイド/マイナーアクチノイドイオンの選択的抽出に関する理論的研究	広島大学	井口 佳哉
キノリン骨格ピンス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	神谷 昌宏
量子化学計算による光化学系 II の構造・反応機構解析	名古屋大学	野口 巧
有機イリジウムポルフィリン錯体による赤色光アンケーシング反応の開発	東京大学	村田 慧
理論計算を利用した有機半導体材料の開発	相模中央化学研究所	花村 仁嗣
計算化学を用いた触媒の理論設計および有機材料の発光物性と分子運動の解析	北海道大学	伊藤 肇
分子動力学と第一原理計算を用いた有機結晶および液体の熱物性および熱電効果の計算科学的研究	北海道大学	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の構造, 機能, ダイナミクス解析	東京大学	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	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	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
3d 遷移金属からなる均一系及び不均一系触媒による CO ₂ 還元反応機構の調査	九州大学	伊勢川美穂
実験と計算による有機反応機構解析	東京大学	滝田 良
光回復酵素による光応答機構の解明	大阪大学	山元 淳平
新規高機能性の不斉触媒研究とベイズ最適化・機械学習への適用	名古屋工業大学	中村 修一
酸化物結晶および融体における構造緩和を駆動力とした不規則錯体構造の自発的形成過程の解析	大阪大学	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	鈴木 淳巨
Computational Investigation of Colossal Dielectric Permittivity Materials and Chemical Bonding Features of Transition Metal Dioxides	名古屋大学	VARADWAJ, Pradeep Risikrishna
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	柳井 毅
粘度の基本セルサイズ効果をも踏まえた分子動力学シミュレーションによる巨大分子の流体力学半径と水和の関係	九州大学	秋山 良
分子金属錯体および多核クラスターの精密制御と電子状態の解明	東北大学	長田 浩一
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	斉藤 竜男
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	(財)高度情報科学技術研究機構	手島 正吾
含ヘテロ非平面多環芳香族炭化水素の構造および性質	早稲田大学	加藤 健太
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	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	星本 陽一
生体分子自己集合系の分子シミュレーション	岡山大学	篠田 渉
機能性分子集合体の分子動力学研究: 親水性界面における水分子の機能解析	兵庫県立大学	石井 良樹
イオン(分子)認識における微視的水和効果と温度効果の解明	東京工業大学	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	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配向樹脂材料の熱伝導特性解析	東京工業大学	古屋 秀峰
2次元と3次元シミュレーションから明らかにするタンパク質の凝集	九州産業大学	末松安由美
染色体の新規モデル開発と種々の分子の原子間力顕微鏡像の理論計算	金沢大学	炭竈 享司
キラルナフタレン四量体色素の励起状態構造	岡山大学	高石 和人

Disruption Mechanism of the *Toxoplasma gondii* Parasitophorous Vacuole by IRGB6

放射性壊変や電磁波相互作用による生体分子の構造変化
 Ag 置換ゼオライト X におけるプロパン／プロピレン分離メカニズムの解明
 金属酸化物クラスターを利用した分子状複合体の設計と機能開拓
 SH₂ ドメインとリン酸化ペプチドの結合自由エネルギー解析
 低分子を認識・活性化する新規錯体に関する研究
 高電位鉄硫黄タンパク質の活性中心の構造と電子状態についての理論的解析
 溶液内および生体分子内で起こる化学反応と構造ダイナミクスの理論的解明
 界面活性剤凝集挙動の理論モデリング
 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と高機能性高分子の探索
 マルチドメインタンパク質の分子シミュレーションによる機能解析
 量子化学計算による有機分子触媒の精密設計
 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光機能分子の励起状態探索
 人工力誘起反応法を活用したヘテロ元素含有新反応剤と新規円偏光発光材料の開発
 電気化学的に発生させた活性種の反応における反応機構と反応選択性の理論化学的考察
 分子の構造, ESR スペクトルの計算
 イオンチャネルのイオン選択性機構の解析のための分子動力学シミュレーション
 両親媒性分子集合体への物質輸送機構の解明
 高分子破壊に関する分子シミュレーション
 CNT へのアルカン混合溶媒からの長鎖選択的吸蔵とその理解
 Antibody-Antigen Complex Prediction Optimized by Alpha Fold
 分子間電子移動を伴う化学反応と分子間相互作用の研究
 クロコン酸結晶における中赤外光による強誘電分極増強の理論的解明
 金属錯体に関する理論的研究
 薬物あるいは生理活性物質と大環状化合物との相互作用解析
 低分子非晶質有機半導体薄膜中の官能基配向評価に関する計算
 第一原理計算によるプラズマドライエッチングの局所的環境変化によるフロロカーボン膜の誘電膜における性質変化の予測
 円偏光発光を示す π 共役系化合物の開発
 金属カルボニル化合物の XAS スペクトルシミュレーション
 クラスター複合体の構造と反応性
 天然由来のリード化合物の構造と反応に関する量子化学的研究
 分子シミュレーションによる分子集合体の研究
 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
 光化学反応の制御と応用に関する理論的研究
 生体分子および溶媒の構造機能相関の解明
 フッ素化ボラタアントラアセンアニオンの電子的特性が配位重合に及ぼす影響
 半導体 MOF 開発のための含硫黄配位子設計
 新奇機能性分子材料の構造-物性相関に関する理論研究
 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
 新規な典型元素化合物の構造と反応性に関する研究
 新奇な π 共役構造の電子状態
 新規機能性 π 共役分子の合成と物性に関する研究
 細胞内における超硫黄分子の振動解析
 高周期 14 族元素を含む化合物の構造物性理論計算
 第一原理計算による層状物質の角度分解光電子分光の解析
 計算科学を用いた希薄溶液中で近赤外光を吸収する π 共役部位の開発
 典型元素の特性を活用した発光体および光触媒の開発
 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
 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
 アルキルシラン化合物を受容体とした二水素結合クラスターの構造解明
 高周期元素を基盤とするレドックス活性有機触媒の探索
 高性能電極メディアータ開発における計算化学の援用

大阪大学 van EERDEN, Floris
 核融合科学研究所 中村 浩章
 信州大学 田中 秀樹
 東京大学 鈴木 康介
 医薬基盤・健康・栄養研究所 李 秀榮
 東京電機大学 山本 哲也
 筑波大学 堀 優太
 九州大学 森 俊文
 岡山大学 甲賀研一郎
 統計数理研究所 林 慶浩
 量子科学技術研究開発機構 田口 真彦
 東北大学 寺田 眞浩
 立命館大学 小林 洋一
 北海道大学 長田 裕也
 岡山大学 光藤 耕一
 東北大学 奥津 賢一
 和歌山県立医科大学 入江 克雅
 京都工芸繊維大学 水口 朋子
 名古屋大学 藤本 和士
 慶應義塾大学 千葉 文野
 大阪大学 徐 子暢
 神奈川大学 田仲 二郎
 高エネルギー加速器研究機構 岩野 薫
 静岡理工科大学 関山 秀雄
 福岡大学 池田 浩人
 山形大学 横山 大輔
 横浜国立大学 RAEBIGER, Hannes
 北里大学 長谷川真士
 東京大学 佐々木岳彦
 豊田工業大学 市橋 正彦
 埼玉医科大学 土田 敦子
 名古屋文理大学 本多 一彦
 名古屋工業大学 小野 克彦
 量子科学技術研究開発機構 黒崎 讓
 立命館大学 高橋 卓也
 広島大学 田中 亮
 関西学院大学 田中 大輔
 大阪大学 谷 洋介
 愛媛大学 佐藤 久子
 日本工業大学 大澤 正久
 東邦大学 渡邊総一郎
 学習院大学 狩野 直和
 東京工業高等専門学校 井手 智仁
 大阪大学 清水 章弘
 東北大学 影山 莉沙
 東京都立大学 瀬高 渉
 大阪大学 田中慎一郎
 静岡大学 植田 一正
 茨城大学 吾郷 友宏
 奈良教育大学 山崎 祥子
 東京大学 中山 哲
 静岡大学 松本 剛昭
 名古屋工業大学 高木 幸治
 横浜国立大学 信田 尚毅

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 Theoretical Studies of Light-Matter Interactions in Molecular Systems	京都府立大学 京都大学	沼田 宗典 NGUYEN, Thanh Phuc
第一列遷移金属触媒の光応答に関する理論化学的検証 グルタミド超分子ナノ構造体の機能発現における官能基配向構造の解析 空間的軌道相互作用に基づく π 共役に関する研究 大環状多核金属錯体の動的特性と触媒活性の探索 遷移金属錯体等の分子の電子状態に関する理論的研究および量子計算の古典シミュレーション研究 新規キノイド系分子の合成と応用 イオン液体-分子性液体溶液中で働く相互作用と混合状態の解明 第一原理計算を用いた物質表面及び界面の研究 アレーン類のアダマンタン縮環反応の反応機構解明および新奇 π 共役系分子の構造物性解明 半合理的手法により構築された主鎖構造による人工タンパク質設計 マイナーアクチノイド回収用抽出剤 HONTA の電子構造及び電荷移動に係る研究 超短寿命核種アスタチン化合物に関する量子化学計算 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 分子動力学シミュレーションによるタンパク質の凝集と凝集阻害 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 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分子シミュレーション 分子系・凝縮系における磁性およびフォノン物性の第一原理計算 機能性開殻分子材料の構造-物性-電子状態相関の解明 3次元 π 共役構造体の創成 新規高分子担持光酸化還元触媒の創製 α チューブリン C 末端領域の翻訳後修飾が微小管構造集団に与える影響の分子ダイナミクス解析 4次元 MRI による脳の機能及び構造解析 機械学習を用いた脳機能画像解析 拡張アンサンブル法による分子シミュレーション 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 イオン種に対する高分解能振動回転分光による分子間相互作用の研究 外場からの摂動下にある分子およびその集合体の計算化学的検討 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 還元反応によるカルボアニオン種の発生法の開拓と金属-炭素結合種の構造解明 計算化学による有機触媒及び有機金属触媒を用いた新規反応の機構解明 炭素-ヘテロ原子結合の切断および形成を伴う骨格転位反応の計算化学による機構解明 長波長領域での蛍光発現を可能とする電子受容体の設計 質量分析におけるイオン化条件及び観測イオンの安定構造に関する理論的検討 モデル溶融塩からなる溶媒の相関関数を正確に求める方法論の開発 π クラスター分子の電子物性の解明 キノイド分子の電子励起状態エネルギーレベルおよび構造の量子化学計算 新規機能性有機色素の開発 量子化学計算による反応機構の解明 熱活性化遅延蛍光材料の仮想スクリーニング 4d または 5d 金属を含む多核金属錯体の電子状態 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 新規双極性有機典型元素化合物の創成と双極子付加反応 アミノ酸シッフ塩基金属錯体の立体構造と電子構造 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 有機分子光触媒の理論的分子設計法に関する研究 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 短寿命種や界面化学種の振動スペクトル解析 DFT 計算による複数の金属種からなる多核金属錯体の電子構造の解明 抗生物質耐性分子メカニズムの理論的研究	北海道大学 熊本大学 名古屋市立大学 東京大学 大阪大学 茨城大学 佐賀大学 九州工業大学 名古屋大学 名古屋大学 日本原子力研究開発機構 大阪大学 分子科学研究所 計算科学研究センター 生命創成探究センター 分子科学研究所 生命創成探究センター 計算科学研究センター 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 分子科学研究所 信州大学 生理学研究所 生理学研究所 名古屋大学 高知大学 北里大学 東京大学 佐賀大学 京都大学 岡山大学 大阪大学 名古屋大学 東邦大学 愛媛大学 大阪大学 室蘭工業大学 岐阜大学 産業技術総合研究所 大阪大学 岐阜大学 和歌山大学 北里大学 東京理科大学 大阪大学 日本工業大学 奈良女子大学 筑波大学 岐阜大学 城西国際大学	小島 正寛 桑原 穰 雨夜 徹 田代 省平 吉田悠一郎 近藤 健 高椋 利幸 河野 翔也 八木亜樹子 佐久間航也 宮崎 康典 寺本 高啓 斉藤 真司 江原 正博 奥村 久士 長坂 将成 古賀 信康 岡崎 圭一 南谷 英美 草本 哲郎 瀬川 泰知 奥村慎太郎 梅澤 公二 福永 雅喜 近添 淳一 岡本 祐幸 金野 大助 水瀬 賢太 伊藤 喜光 海野 雅司 黒木 堯 山崎 賢 鹿又 喬平 村井 征史 岡 真悠子 宮田 竜彦 西内 智彦 飯森 俊文 船曳 一正 栢沼 愛 相澤 直矢 海老原昌弘 林 聡子 内山 洋介 秋津 貴城 山下 健一 小池 隆司 浦 康之 石橋 孝章 植村 一広 額賀 路嘉

統計的手法による超原子価ヨウ素試薬の置換基効果の解明	大阪大学	西本 能弘
原子核の量子効果を考慮した理論計算手法による水素結合系の解析	岐阜大学	宇田川太郎
イオン・原子及びイオン・分子衝突の理論的研究	宮崎大学	五十嵐明則
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	稲葉 知士
新規生物活性物質の設計・合成・機能評価	九州大学	平井 剛
イソシアニドの挿入数制御に基づくロジウム触媒による含窒素複素環化合物の多様性志向型合成反応の機構研究	京都大学	新林 卓也
配位子保護貴金属クラスターの三重項性に関する計算科学的研究	立教大学	三井 正明
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	東林 修平
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	大阪公立大学	酒巻 大輔
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	和佐田裕昭
機能性有機材料の開発のための量子化学計算	東京都立産業技術研究センター	小汲 佳祐
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	三ツ沼治信
分子動力学計算による抗体の分子内ネットワークの探索	分子科学研究所	谷中 冴子
新規キラル分子のキロプティカル特性の理論計算	大阪大学	石割 文崇
固定化分子触媒による新規触媒作用の理論的解明	横浜国立大学	長谷川慎吾
新規金属クラスターの電子状態の解明	東京理科大学	新堀 佳紀
光反応中間体のエネルギー解析	大阪大学	大久保 敬
大環状系のラジカルカチオン π ダイマーの芳香族性	東京都立大学	西長 亨
有機ケイ素化合物の構造と性質	群馬大学	久新莊一郎
DFT 計算を用いた新規 C-H 活性化反応の機構研究	名古屋大学	平子 直洋
第一原理計算による LPSO 型 Mg 合金における局所クラスターと相安定性に関する研究	名古屋工業大学	宮崎 秀俊
有機典型元素を用いた合成化学, 構造化学	広島大学	吉田 拓人
量子化学に基づく生体分子の機能に関する計算科学研究	法政大学	数納 広哉
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	清野 淳司
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	影島 博之
金属錯体を基盤とした人工光合成反応の開発に向けた理論的研究	大阪大学	小杉 健斗
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	岩本 啓
特異な構造を有する複素芳香族化合物の理論研究	就実大学	山本 浩司
Benzene-CH ₄ van der Waals 錯体における 6 次元モデルポテンシャル計算と分子間振動波束観測	東京工業大学	中村 雅明
有機半導体分子 TIPS-ペンタセンのガウシアンによる振動解析	兵庫県立大学	相賀 則宏
分子内芳香族ラジカルカチオンクロスカップリング反応の機構解析	横浜国立大学	岡本 一央
新規熱活性化遅延蛍光分子の構造ならびに励起状態の理論計算	大阪大学	武田 洋平
14 族元素を配位原子とする多座配位子・クラスターが結合した遷移金属錯体に関する理論的研究	東北大学	小室 貴士
Search for Saddlepoints in the syn-/antiperiplanar Isomerism of 5,10,15-Triaryl-19-arylbilatrien-abc-onato Nickel (II)	分子科学研究所	ウルバン アドリアンジョー
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
理論計算を利用したラジカルメカノフォアの解析および新規分子骨格の開発	東京工業大学	杉田 一
深層学習によるキラルらせん構造の左右カウント	分子科学研究所	山本 浩史
水和フェノールカチオンにおける微視的水素結合構造: 複環構造の探索	北里大学	石川 春樹
DTE 結合型プレンステッド酸触媒の光照射による pKa 調節機能解明	北海道大学	中村 顕斗
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
エネルギー変換分子触媒の分子構造・電子状態と反応性の相関の解明	山陽小野田市立山口東京理科大学	太田 雄大
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	邨次 智
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	中野 幸司
3次元粉体ポアズイユ流の連続体解析と数値計算	大阪大学	吉井 究
トランの電子状態	日本大学	奥山 克彦
アルツハイマー病の治療薬を目的としたアミロイド β 分解活性を有するペプチドの特性評価と投与方法に関する研究	東北大学	幡川 祐資
円偏光発光特性を有するヘリセン分子の設計と合成	大阪大学	佐古 真
不斉増幅を伴う光学活性含窒素 8 員環の合成研究	大阪大学	滝澤 忍
Al ₂ O ₃ 表面上における炭素膜の成長過程に関する研究	岡山大学	QIANG, Yue
含金属共役高分子の設計	関西大学	三田 文雄

光増感剤利用に向けた発光性セリウム錯体の開発	東京理科大学	倉持 悠輔
フラットバンドを有する有機分子-金属ハイブリッド系における高温超伝導の理論	新潟大学	関川 卓也
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	中村 栄一
光と化学的な添加剤を用いた協働的な Si-C 結合開裂反応の反応機構探索	東京大学	正井 宏
ホスフィン保護 Au ₁₁ クラスタのキャリアダイナミクスに与える配位子効果	関西学院大学	江口 大地
新規 π 共役系の物性化学研究	京都大学	関 修平
量子化学計算を用いた環状金属イオン配列における分子間相互作用およびキラリテイの評価	お茶の水女子大学	三宅 亮介
金属表面上の生体分子の構造と電子状態	横浜国立大学	大野 真也
クロス β 構造における量子化学計算を用いた Steric zipper の相互作用エネルギーの算出	東京大学	恒川 英介
古典および量子シミュレータを用いた量子化学計算	東京大学	山崎 雅人
ゲスト包接能を有するカラムナー液晶の開発	日本大学	吉田 純
C1 カルベノイド化学種の理論および実験に基づく計算化学的解明	北海道大学	岡本 和紘
アニリン分子の分光特性に対する溶媒効果の研究	九州大学	大橋 和彦
エネルギー材料の分子シミュレーション	産業技術総合研究所	崔 隆基
非極性水中の弱い相互作用 I : CO, CO ₂ 氷上の H 原子の挙動	東京大学	相川 祐理
タンパク質-RNA 複合体系の全原子分子シミュレーション研究	早稲田大学	浜田 道昭
遷移金属触媒および有機触媒を用いた不飽和結合への付加反応における位置および立体選択性の解明	大阪大学	兒玉 拓也

(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

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	館山 佳尚
革新的光触媒材料の第一原理設計	神戸大学	天能精一郎
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	押山 淳
バイオ分子における X 線誘起非断熱反応動力学の実時間イメージング理論	理化学研究所	山崎 馨
大規模電子状態計算ベースとした有機光デバイス材料の励起子ダイナミクス解析	量子科学技術研究開発機構	藤田 貴敏

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4期			
		年度	2022			
			前期	後期	計	登録者数
共同研究	(1) 課題研究		2	2	2	18
	(2) 協力研究 *1		22	25	47	175
	(マテリアル)*2		15	25	40	112
研究会	(3) 研究会		3	3	6	482
	(4) 若手研究活動支援		1	0	1	70
	(5) 岡崎コンファレンス		0	0	0	0
	所長招へい *3		5	0	5	5
	UVSOR 研究会 *3		1	0	1	14
施設利用	(6) ① UVSOR		104	105	209	1,010
	(マテリアル)*2		2	3	5	35
	(6) ② 機器センター (マテリアル)*2		61	75	136	397
	(6) ③ 装置開発室 (マテリアル)*2		0	0	0	0
	(6) ④ 計算科学研究センター		298	0	298	1,252

*1 一部課題では UVSOR 利用あり (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 マテリアル先端リサーチインフラ事業は 2022 年度から開始。それ以前はナノテクノロジープラットフォーム事業。

*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

【学協会連携分子研研究会】

森野ディスカッション

2022年8月31日（水）（オンライン開催）

1. 2022年度研究助成金贈呈式

- 14:35 伊澤誠一郎（分子研）講演 10分
「有機半導体界面での光電変換特性の解明と新機能開拓」
- 14:50 近藤 徹（東工大）講演 10分
「分子分光法を用いた光合成タンパク質の動的な光反応制御機構および機能的なロバスト性の解明」

2. 森野ディスカッション

- 15:30 講演 A 池田勝佳（名工大）講演 35分
「表面増強分光で探る帯電界面の構造とダイナミクス」
- 16:25 講演 B 岡本裕巳（分子研）講演 35分
「光学遷移の選択律を破るナノ分光」

【分子研研究会】

金属酸化物：表面と薄膜の構造化学

2022年9月26日（月） 分子科学研究所研究棟 301号室（ハイブリッド開催）

- 15:00-16:00 “Surface Structures Drive the Growth of Perovskite Oxide Films”
Michele Riva (TU Wien) ※オンライン
- 16:00-17:00 “Physical Properties of Defects on Metal Oxide Surfaces Analyzed by Scanning Probe Microscopy”
Taketoshi Minato (Institute for Molecular Science)
- 17:00-18:00 “Pulsed Laser Deposition of Compositionally Graded Sr-Doped NaTaO₃ Thin Films and Their Photoexcited Carrier Dynamics”
Shingo Maruyama (Tohoku University)
- 18:00-19:00 “Toward Excited-State Molecular Dynamics Analyses of Metaloxide Photocatalysts: Computational Method Developments and Applications”
Hiroki Uratani (Waseda University)

【分子研研究会】

イオン液体の構造と物性予測のデータ解析技術

2022年9月28日（水）～29日（木） 岡崎コンファレンスセンター中会議室（ハイブリッド開催）

9月28日（水）

- 13:30-13:45 「はじめに」
阿部 洋（防衛大）
- 13:45-14:45 「イオン液体の更なる機能開拓に必要な理論化学的手法の拡張」
森 寛敏（中央大）
- 15:00-16:00 「情報化学によるガス分離吸収性イオン液体の迅速探索と実験検証」
黒木 菜保子（中央大）
- 16:00-17:00 「実験データ駆動型の情報科学に基づく有機イオン伝導体の物性予測」
畠山 歆（早稲田大）
- 17:00-17:30 全体討議

9月29日（木）

- 09:00-10:00 「イオン液体の低融点を理解する」【ZOOM】
遠藤太佳嗣（同志社大）
- 10:15-11:15 「情報科学を用いた物性評価の自動化」
小野寛太（大阪大）
- 11:15-12:00 全体討議
- 12:00-12:05 閉会の挨拶
解良 聡（分子研）

【分子研研究会】

軟X線共鳴散乱・反射率

ソフトマテリアル・ソフトマターのナノ～メソスケール構造解析

2022年11月8日(火) (オンライン開催)

- 10:00-10:10 Welcome & Introduction
荒木 暢 (Diamond Light Source)
- 10:10-11:00 *Keynote Lecture*
Probing Morphology and Chemistry in Complex Soft Materials with In Situ Resonant Soft X-Ray Scattering
Cheng Wang (Advanced Light Source)
- 11:15-11:40 ニューズバルにおけるフォトレジストの軟X線共鳴散乱/反射率測定
原田哲男 (兵庫県立大学)
- 11:40-12:05 UVSOR および Photon Factory における共鳴軟X線散乱装置の開発
岩山洋士 (分子科学研究所)
- 12:05-12:30 軟X線反射率/吸収分光による wet 環境対応薄膜解析装置の検討
～中性子や陽電子を組み合わせたマルチプローブ解析を目指して
山田悟史 (高エネルギー加速器研究機構)
- 13:30-13:55 Tender X-Ray 領域での合金の ASAXS 測定
奥田浩司 (京都大学)
- 13:55-14:25 BL15A2 におけるテンダーX線による散乱・反射率法による高分子構造解析
山本勝宏 (名古屋工業大学)
- 14:25-14:50 中性子を用いた固体高分子形燃料電池の解析
原田雅史 (豊田中央研究所)
- 15:05-15:30 共鳴軟X線散乱による液晶相精密構造解析への試み
高西陽一 (京都大学)
- 15:30-15:55 屈曲液晶における超分子カイラル多型ナノ構造
荒岡史人 (理化学研究所)
- 15:55-16:20 DDS ナノ粒子の構造解析
櫻井和朗 (北九州市立大学)
- 16:30-17:10 Discussion
- 17:10-17:15 Closing
解良 聡 (分子科学研究所)

【分子研研究会】

UVSOR-III における多様な量子ビームの発生と先端利用に関する研究会

2022年11月28日(月) 岡崎コンファレンスセンター (ハイブリッド開催)

- 08:50 ~ 09:00 趣旨説明
(分子研: 平義隆)
- 09:00 ~ 09:30 UVSOR 光源開発ビームラインの歴史
(広島大学/分子研: 加藤政博)
- 09:30 ~ 10:00 自由電子レーザーの開発と利用・今後の展開
(京都大学: 全炳俊)
- 10:00 ~ 10:30 UVSOR でのコヒーレント高次高調波光源の開発
(秋田高専: 坂本文人)
- 10:40 ~ 11:10 タンデムアンジュレータによるアト秒制御ダブルパルスの発生と原子分子実験への応用
(SAGA-LS: 金安達夫)
- 11:10 ~ 11:40 放射光の時空間構造の制御とその利用の可能性
(広島大学/分子研: 加藤政博)
- 11:40 ~ 12:10 紫外円偏光照射による有機物分子のキラリティの発現に関する研究
(核融合研: 小林政弘)
- 13:30 ~ 14:00 UVSOR-III におけるガンマ線源の開発と利用及び今後の展開
(分子研: 平義隆)
- 14:00 ~ 14:30 ニューズバル γ 線ビームライン BL01 の現状
(兵庫県立大学: 橋本 智)
- 14:30 ~ 15:00 ガンマ線を用いた原子核物理実験とその応用
(京都大学: 大垣英明)
- 15:10 ~ 15:40 偏光検出コンプトンカメラの開発と応用
(東京大学: 島添健次)
- 15:40 ~ 16:10 陽電子消滅法の基礎とパルス γ 線誘起陽電子発生装置への期待
(千葉大学: 藤浪真紀)
- 16:10 ~ 16:40 原子空孔を見て発光材料への不純物添加効果を探る
(山形大学: 北浦守)

【分子研研究会】

生体分子材料を探る：発動分子のさらなる理解と設計に向けて
2023年3月29日（水）～30日（木） 分子科学研究所山手3号館大会議室

3月29日（水）

(1) 生体分子材料と人工分子材料の境界を探る手法_01

- 13:00-13:10 挨拶
(東工大：上野隆史)
- 13:10-13:40 生体の分子機構を利用してつくる機能性材料
(東工大：芹澤 武)
- 13:40-14:10 金属連結ペプチド鎖が創り出すナノトポロジー
(東工大：澤田知久)
- 14:20-14:50 **de novo** 設計膜ペプチドを基盤とした人工イオンチャネルの創出
(理研：新津 藍)
- 14:50-15:20 無機ナノシートの集合構造制御による機能性ソフトマテリアル
(信州大：佐野航季)

(2) 生体分子材料と情報・理論をつなぐ手法

- 15:30-15:45 植物の構造と機能に学ぶバイオメテックス
(秋田県立大：津川 暁)
- 15:45-16:00 ロボット機構学によるタンパク質の理解
(神奈川工大：有川敬輔)
- 16:00-17:00 ポスター発表
- 17:00-18:00 総合討論 01

3月30日（木）

(1) 生体分子材料と人工分子材料の境界を探る手法_02

- 9:30- 9:50 生体材料の自律的合成——静から働の機能へ向けて
(東工大：上野隆史)
- 9:50-10:20 生体・人工ハイブリッド分子モーターの創出と特性解析
(分子研：飯野亮太)
- 10:20-10:50 人工的な DNA レール上を走るタンパク質モーターの創出
(情報研：古田健也)
- 11:00-11:30 動態イメージングで探る生命分子材料と人工分子材料の境界
(名大：内橋貴之)

(2) 生体分子材料と社会をつなぐ将来

- 11:30-12:00 生体分子材料の社会実装, 何をする? 何ができる?
——ライフサイエンス・ニューロサイエンスからの示唆——
(東通大：福土珠美)
- 13:00-13:55 総合討論 02
- 13:55-14:00 挨拶
(分子研：飯野亮太)