

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 2023 年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名 (通年)	提案代表者	
キラル物質におけるマルチスケール量子機能の統一描像の確立	放送大学	岸根順一郎

(2) 協力研究

課 題 名 (通年)	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
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 (II)	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
ポリグルタミン病原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
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ーレン超原子集積体の電子ダイナミクス計測
 新奇トポロジをもつ二次元分子磁石の開発
 溶液から成長させた単結晶性有機半導体薄膜の電子構造計測
 固体担持型ピスマストリフラートの調整と不均一触媒反応系への展開
 糖タンパク質修飾糖鎖の構造決定と糖鎖認識受容体との相互作用解析
 多様な複合糖質を活用した糖鎖機能メカニズムの解析
 モータータンパク質キネシンの全原子分子動力学シミュレーション
 バナジウム酸化物薄膜における相転移現象のナノスケールイメージング
 高効率スピン偏極測定用2次元スピンフィルターの実用化と利用最先端研究

大阪公立大学	洪田 昌弘
千葉大学	山田 豊和
東京理科大学	中山 泰生
山形大学	皆川 真規
東北医科薬科大学	山口 芳樹
北陸先端科学技術大学院大学	山口 拓実
熊本大学	鄭 誠虎
大阪大学	阿部 真之
大阪大学	菅 滋正

課 題 名 (前期)

提案代表者

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
 包接型 P,N 含有多座配位子保護による金属クラスター触媒の開発
 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

東京大学	岡林 潤
愛媛大学	太田 英俊
東北大学	佐藤 宇史

課 題 名 (後期)

提案代表者

包接型 P,N 含有多座配位子保護による金属クラスター触媒の開発
 時間分解インパルス誘導ラマン分光を用いた機能性発光有機りん光分子・卑金属錯体の励起状態構造ダイナミクスの観測

愛媛大学	太田 英俊
九州大学	宮田 潔志

(3) 研究会

課 題 名 (通年)

提案代表者

森野ディスカッション
 イオン液体インフォマティクスの発展にむけて
 化学・工学・環境学を例とした持続可能な社会のための産学官民連携のあり方
 明日の放射光光電子分光研究展開のシーズとニーズ
 溶液の化学現象の軟X線分光測定のプロントニア
 UVSOR-SPring8 赤外ビームライン合同ユーザーズミーティング

公益信託分子科学奨励森野基金	宗 像 利明
東京大学	北田 敦
早稲田大学	所 千晴
分子科学研究所	松井 文彦
分子科学研究所	長坂 将成
分子科学研究所	田中 清尚

(6) 施設利用

① UVSOR 施設利用

課 題 名 (通年)

提案代表者

テラヘルツ吸収分光による高移動度有機半導体単結晶の分子間フォノン計測
 軟X線吸収分光法による金属酸化物をドーピングした有機半導体層の電子状態解析
 メタン芳香族化に活性なベータ型炭化モリブデン触媒活性種の L 殻 XANES 構造解析
 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 搭載装置の評価
 層状複水酸化物の層間への陰イオンの挿入・脱離に伴う局所環境変化の分析
 ZnFe₂O₄ の高速重イオン照射誘起による Zn 局所構造変化
 試料搬送装置を用いた軟X線吸収分光法による電池材料のオペランド測定の開発
 中性 K 中間子稀崩壊実験で使用するシンチレータ類の単一光子係数法による蛍光寿命測定による性能評価
 赤色・近赤外発光シンチレータとバンド構造
 暗黒物質直接探索でのダイヤモンドシンチレーティングボロメータの実用化に向けた低温での発光応答理解
 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
 深紫外発光アルミニウム酸亜鉛薄膜の基板界面領域の結晶性の評価
 VUV スペクトロスコーピーによる遷移金属イオン電荷移動遷移の包括的理解
 ビームライン整備 (リモート測定)
 プラズマエッチングガスの解離過程の解明
 擬カゴメ格子強相関系の電子状態
 NaCl:Γ⁻,Ce³⁺ 結晶における Γ⁻ イオンから Ce³⁺ イオンへのエネルギー移動の研究
 合金を用いた多層膜反射鏡の特性調査

東京理科大学	中山 泰生
千葉大学	奥平 幸司
埼玉工業大学	有谷 博文
国立天文台	成影 典之
大阪公立大学	村田 秀信
九州大学	吉岡 聡
九州シンクロトン光研究センター	小林 英一
山形大学	田島 靖久
東北大学	黒澤 俊介
筑波大学	梅本 篤宏
埼玉大学	小玉 翔平
静岡大学	小南 裕子
北陸先端科学技術大学院大学	上田 純平
分子科学研究所	岩山 洋士
名古屋大学	石川 健治
大阪大学	木村 真一
大阪公立大学	河相 武利
東京大学	吉川 一朗

熱処理によるアモルファス半導体薄膜の内殻吸収スペクトル変化の観察	岐阜大学	林 浩司
中～遠赤外吸収分光によるチエノアセン系高移動度有機半導体単結晶の分子振動計測	東京理科大学	中山 泰生
時間分解遠赤外ブロードバンド分光による光誘起キャリアの原子・格子との相互作用の解明	分子科学研究所	西田 純
一軸圧力下の強相関半導体の電子構造	大阪大学	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	広島大学	藪田ひかる
多環芳香族炭化水素の紫外特性調査	東京大学	吉川 一郎
多角入射 ATR 紫外分光によるイオン液体／電極界面の電子状態解析	立教大学	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	静岡大学	越水 正典
中性子シンチレーターとして期待される Li-glass の真空紫外特性評価	大阪大学	清水 俊彦
高融点キラル化合物の高分解能光電子スペクトル測定	広島大学	高口 博志
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	中野 敏行

課 題 名 (前期)	提案代表者	
熱電材料への不純物添加に伴う電荷補償機構の解明	山形大学	北 浦 守
透過型 NRF を用いた非破壊核種分析法の高精度化に関する研究	量子科学技術研究開発機構	静間 俊行
水素添加応力負荷オペランド陽電子消滅測定による不安定欠陥の検出	千葉大学	藤 浪 真紀
γ線偏光検出用コンプトンカメラの基礎研究	東京大学	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
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 fLCS ガンマ線の発生と同位体イメージングへの応用に関する研究	京都大学	大垣 英明
ガンマ線誘起陽電子寿命測定法を用いたタングステンの水素誘起空孔その場観測	京都大学	藪内 敦
触媒反応条件下における酸化セリウムのガンマ線誘起陽電子消滅寿命測定	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
光電子円二色性を示す新規キラル系分子の探索	広島大学	高口 博志
超高速光電子分光による内殻電子ダイナミクスの実時間観測	九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫
シアシックニング溶液における凝集ポリマーの電子状態解明	筑波大学	赤田 圭史
軟X線による共鳴散乱と XAFS を利用した液晶性超分子キラル構造体の解析	理化学研究所	荒岡 史人
表面イオニクスによる低温触媒反応の軟X線オペランド分光	早稲田大学	関根 泰
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内の親水性基の電子状態とそのイオン種依存性	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
発光性ラジカル配位子を含む銀 (I) 錯体の溶液状態における発光特性及び軟X線吸収分光法による構造決定	分子科学研究所	壬生 託人
軟X線共鳴散乱および分光によるキラル液晶の層間分子間相互作用と極性構造の相関に関する研究	京都大学	高西 陽一
界面選択的な軟X線吸収分光法を用いるイオン液体の電極界面におけるイオン層構造の解析	京都大学	西 直哉
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
酢酸 /I- メチルイミダゾール混合液の分子構造と電子状態研究	山口大学	堀川 裕加
半導体光触媒による人工光合成反応の中間体検出：水中軟エックス線 XAFS を用いたオペランド計測	神戸大学	大西 洋
Probing the Effect of Surface Charge, Nanoparticle Size and Specific Counter Ions on the Water Structure at the Nanosilica-Solution Interface	University of Gothenburg	孔 祥瑞
Probing the H-Bonding Network in the Vicinity of Aqueous Ammonia and Ammonium Ion by X-Ray Absorption Spectroscopy	Synchrotron SOLEIL	CEOLIN, Denis
SBR/BR ブレンドによる凝集シリカ間の化学結合状態	東北大学	江島 丈雄
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	朝倉 大輔
レドックスフロー電池電解液の溶液と沈殿物の電子状態解析	産業技術総合研究所	細野 英司
走査型透過X線顕微鏡のための引っ張り応力印加セルの開発と応用	高エネルギー加速器研究機構	大東 琢治
ビームラインおよび STXM の整備	高エネルギー加速器研究機構	大東 琢治
アポトーシス誘発細胞核内における複数のタンパク質の STXM による分布解析	東海大学	伊藤 敦
彗星有機物の初期水質変成条件を STXM で決定する試み	広島大学	藪田ひかる
SO ₂ Uptake and Transformation on Natural Salt Aerosol under Light and Dark Conditions	University of Gothenburg	孔 祥瑞
In-Situ Water Environment to Modify the Surface Oxidation and Structure of rGO and BN membranes	Tamkang University	Cheng-Hao Chuang
STXM Imaging of Salla Disease Fibroblasts	University of Oulu	Minna Patanen

Transition Metal Dopants on Graphitic Carbon Nitride (g-C₃N₄) for Electrocatalytic Carbon Dioxide Reduction Reaction
 高品位内包フラーレン薄膜の光電子角度分布計測
 軟X線吸収分光法による金属をドーブした金属酸化物ナノ粒子の伝導帯電子構造解析
 「準ホモエピタキシャル」単結晶有機半導体ヘテロ接合の価電子バンド計測
 磁気ボトル型電子分析器を用いた多電子・イオン同時計測
 光電子多次元分光による分子キラリティ誘導スピン選択機構の解明
 整備課題
 紫外光励起中半導体光触媒の軟X線吸収分光
 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解析
 ZnFe₂O₄ の高速重イオン照射誘起による Fe 局所構造変化
 高空間分解能 ARPES で探るカゴメ超伝導体の対称性の破れ
 Ag 上に成長した単層ゲルマニウムの角度分解光電子分光
 垂直磁気異方性を示す Mn 基合金のスピン分解・軌道分解光電子分光
 位置分解 ARPES による銅酸化物高温超伝導体の不均一な超伝導状態の研究
 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
 BL5U 光電子エンドステーションの整備と開発
 新奇低次元カイラル半導体の電子構造と多体相互作用
 i-MAX 相化合物 (Mo_{1/3}Yb_{2/3})₂AlC の角度分解光電子分光
 角度分解光電子分光による LPSO 型 Mg-Y-Zn 合金の相安定性機構の解明
 鋭いエッジをもつ原子制御した高密度シリコン立体ファセット構造からの光電子分光
 TiSe₂ 表面の CDW 転移の研究: アルカリ金属吸着による転移温度の変化
 キャリアドーブされた強相関半導体における電子・正孔対凝縮相の電子構造
 極端紫外線高分散分光器の感度校正
 放射光顕微赤外分光法を用いたアミロイドオリゴマーの構造解析
 低エネルギー高分解能 ARPES による新奇電子液晶状態の解明
 高い正孔移動を示す可溶化ベンゾボルフィリン誘導体単結晶性薄膜の価電子バンド計測
 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 II
 分子固体における遍歴電子バンドと電子フォノン相互作用の異方性
 BL7U 光電子エンドステーションの整備と開発
 ガーネット型固体電解質 Li_{6.5}La₃Zr_{1.5}Ta_{0.5}O₁₂ バルク単結晶の角度分解光電子分光
 強相関 Yb 化合物の熱電特性と電子構造の関係に関する研究
 高分解能低エネルギー角度分解光電子分光を用いた原子層近藤格子における重い電子状態の観測
 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 II
 ARPES Study of Anomalous Secondary Photoemission from SrTiO₃(100)
 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
 C 型小惑星リュウグウにおける有機物の宇宙風化
 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
 配位数変動が与える (AE,Sn)S; (AE = Mg, Ba, Ca, Sr) の電子構造評価
 新規なホウ化水素シート電子状態の精密評価
 界面磁気近接効果を利用した Pd 薄膜の電子状態変動

National Synchrotron Radiation Research Center
 筑波大学
 千葉大学
 東京理科大学
 富山大学
 分子科学研究所
 分子科学研究所
 大阪公立大学
 大阪産業技術研究所
 九州大学
 東北大学
 日本原子力研究開発機構
 東京大学
 東京大学
 東京工業大学
 分子科学研究所
 分子科学研究所
 名古屋大学
 名古屋工業大学
 奈良先端科学技術大学院大学
 大阪大学
 大阪大学
 核融合科学研究所
 高エネルギー加速器研究機構
 東北大学
 東京理科大学
 東京工業大学
 分子科学研究所
 分子科学研究所
 名古屋大学
 豊田工業大学
 大阪大学
 広島大学
 Westlake University
 核融合科学研究所
 京都大学
 高エネルギー加速器研究機構
 産業技術総合研究所
 東京大学
 名古屋大学
 Yao-Jane Hsu
 山田 洋一
 奥平 幸司
 中山 泰生
 彦坂 泰正
 福谷 圭祐
 岩山 洋士
 吉田 朋子
 道志 智
 吉岡 聡
 佐藤 宇史
 寺澤 知潮
 岡林 潤
 堀尾 真史
 一ノ倉 聖
 田中 清尚
 福谷 圭祐
 伊藤 孝寛
 宮崎 秀俊
 服部 賢
 田中慎一郎
 中村 拓人
 川手 朋子
 川崎 平康
 佐藤 宇史
 中山 泰生
 平原 徹
 解良 聡
 田中 清尚
 伊藤 孝寛
 松波 雅治
 中村 拓人
 出田真一郎
 Ruihua He
 小林 政弘
 松本 徹
 的場 史朗
 永井 武彦
 松田 巖
 宮町 俊生

課 題 名 (後期)

提案代表者

GiPALS 実験および DFT 計算によって解き明かす As 添加 CdTe 結晶における補償欠陥の格子構造
 ガンマ線偏光測定電子飛跡カメラの開発
 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
 超短パルスガンマ線を用いた陽電子消滅法による材料欠陥評価の研究
 ガンマ線誘起陽電子寿命測定法を用いたタングステンの水素誘起空孔その場観測
 触媒反応下における酸化セリウムのガンマ線誘起陽電子消滅寿命測定
 超高速光電子分光による内殻電子ダイナミクスの実時間観測
 シアシックニング溶液における凝集ポリマーの電子状態解明 II
 Operando 軟X線 XAFS を用いた酸性水溶液電解時における γ -MnO₂ 電極触媒上での酸素発生反応機構の解明
 軟X線による共鳴散乱と XAFS を利用した液晶性超分子キララル構造体の解析 その 2

山形大学
 東京大学
 核融合科学研究所
 名古屋大学
 京都大学
 大阪産業技術研究所
 九州シンクロトロン光研究センター
 筑波大学
 理化学研究所
 理化学研究所
 北 浦 守
 島 添 健次
 小林 政弘
 高嶋 圭史
 藪内 敦
 道志 智
 金安 達夫
 赤田 圭史
 足立 精宏
 荒岡 史人

表面イオニクスによる低温触媒反応の軟X線オペランド分光	早稲田大学	関根 泰
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X線吸収スペクトル計測そのイオン種依存性	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
共鳴軟X線共鳴散乱による樹脂素材の架橋構造の解析	分子科学研究所	岩山 洋士
電気化学オペランド軟X線分光による電解生成メタン酸化活性種の観測	名古屋大学	山田 泰之
界面選択的な軟X線吸収分光法を用いるイオン液体の電極界面におけるイオン層構造の解析	京都大学	西 直哉
軟X線共鳴散乱および軟X線分光によるキラルスメクチック液晶の層間分子間極性相互作用と微細構造の相関	京都府立医科大学	高西 陽一
エラストマー混合材料における応力印可時の微小領域化学結合状態	東北大学	江島 丈雄
走査型透過X線顕微鏡に応力印加セルを用いたタイヤゴムの研究	高エネルギー加速器研究機構	大東 琢治
レドックスフロー電池電解液の溶液と沈殿物の電子状態解析	産業技術総合研究所	細野 英司
リチウムイオン電池の単結晶板状粒子活物質の価数変化マッピング解析	産業技術総合研究所	朝倉 大輔
アポトーシス誘発細胞核内における複数のタンパク質のSTXMによる分布解析	東海大学	伊藤 敦
小惑星リュウグウの有機物における宇宙風化に起因する構造変化の解明	京都大学	松本 徹
Enhancing the Electrocatalytic Activity of Mo-Doped Co ₃ O ₄ Nanowires for the Oxygen Evolution Reaction: An X-Ray Spectro-Microscopic Investigation	Tamkang University	Chung-Li Dong
SO ₂ Uptake and Transformation on Natural Salt Aerosol under Light and Dark Conditions	University of Gothenburg	孔 祥瑞
二次元金属有機フレームワーク THPB/Cu(111) の電子構造の直接観測	東京理科大学	金井 要
「準ホモエピタキシャル」単結晶有機半導体ヘテロ接合の価電子バンド計測 (II)	東京理科大学	中山 泰生
磁気ボトル型電子分析器を用いた多電子・イオン同時計測	富山大学	彦坂 泰正
光電子多次元分光による分子キラリティ誘導スピン選択機構の解明 II	分子科学研究所	福谷 圭祐
共添加二酸化チタン中の 3d 遷移金属元素による可視光吸収機構の解明	大阪公立大学	村田 秀信
水を 4 電子酸化する半導体光触媒の軟エックス線吸収分光	大阪公立大学	吉田 朋子
マイクロ ARPES による新型カゴメ超伝導体の電子状態解明	東北大学	佐藤 宇史
異元素置換した Mn 基の規則合金におけるスピン分解・軌道分解光電子分光	東京大学	岡林 潤
グラフェン層間化合物の超伝導における d 軌道の役割	東京工業大学	一ノ倉 聖
キャリアドーパされた強相関半導体における電子・正孔対凝縮相の電子構造	大阪大学	中村 拓人
カイラル強誘電半導体の電場制御と電子構造解明	分子科学研究所	福谷 圭祐
強相関 Ce 化合物における異常熱電特性に対する電子構造からのアプローチ	豊田工業大学	松波 雅治
偏光依存角度分解光電子分光による Zr ₂ SnC の電子状態の研究	名古屋大学	伊藤 孝寛
角度分解光電子分光による LPSO 型 Mg-Y-Zn 合金の相安定性機構の解明 II	名古屋工業大学	宮崎 秀俊
鋭いエッジをもつ原子制御した高密度シリコン立体ファセット構造からの光電子分光	奈良先端科学技術大学院大学	服部 賢
過剰ドーパ 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 II	広島大学	出田真一郎
放射光顕微赤外分光法を用いたアミロイドオリゴマーの構造解析	高エネルギー加速器研究機構	川崎 平康
純粋液晶状態と共存する超伝導状態の超伝導ギャップ対称性の解明：低エネルギー高分解能 ARPES	東北大学	佐藤 宇史
Ag 上に成長した単層ゲルマネンの高分解能角度分解光電子分光	日本原子力研究開発機構	寺澤 知潮
高分解能角度分解好電子分光による表面モット絶縁体相およびドーピングによる超伝導発現の検証	東京工業大学	平原 徹
高い正孔移動度を示す可溶化有機半導体の単結晶性薄膜の価電子バンド計測	東京理科大学	中山 泰生
分子固体における遍歴電子バンドと電子フォノン相互作用の異方性 II	分子科学研究所	解良 聡
層状 MAB 相化合物 MoAIB の角度分解光電子分光	名古屋大学	伊藤 孝寛
原子層近藤格子における重い電子状態の制御	大阪大学	中村 拓人
アルカリ金属蒸着による TiSe ₂ 表面における CDW 転移の改質	大阪大学	田中慎一郎
不足ドーパ三層系銅酸化物高温超伝導体の電子構造の研究	広島大学	出田真一郎
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
極端紫外線高分散分光器の感度較正	核融合科学研究所	川手 朋子
ノーダルライン半金属候補物質 IrO ₂ の電子構造の解明	名古屋大学	平井大悟郎
銀基板上におけるゲルマニウムを含んだ有機分子構造体の電子状態	物質・材料研究機構	川井 茂樹
放射光アンジュレータを用いた紫外光渦-生体分子相互作用の初観測	広島大学	松尾 光一
可視域発光観測による真空紫外光の偏光評価 III	九州シンクロトロン光研究センター	金安 達夫
界面磁気近接効果を利用した Pd 薄膜の電子状態変調 II	名古屋大学	宮町 俊生
原子層磁石と磁性金属単原子膜との層間磁気結合	千葉大学	山田 豊和

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
複合電子系の構造, 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
キラル分子内における電子カイラリティの非対称性と自然界のホモキラリティ	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多座配位子を有する均一系触媒設計へ向けた理論計算	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
自己集合過程とエネルギー変換材料の計算科学	横浜市立大学 立川 仁典
複雑分子系におけるマイクロ波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
密度汎関数法計算の新たな展開と半導体中の欠陥の電子物性解明	名古屋大学 押山 淳
革新的量子科学と正確かつ大規模なシミュレーション科学の創造	量子化学研究協会 中辻 博
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
赤外分光によるエキサイプレックスの構造と電荷分布, および多環芳香族分子 (PAHs) の水和構造の研究	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
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
有機試薬を用いた分子内および分子間環化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 金野 大助
分子動力学シミュレーションを用いた機能性分子の選択的膜会合と機能発現の解明	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
表面・界面の物性・動態・機能の分子動力学解析	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
様々なタンパク質の構造転移の統一的描像の確立に向けた自由エネルギーランドスケープ計算手法の改良	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・ハイドレートの相転移の理論研究	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	大阪公立大学 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科学的アプローチ	関西学院大学 加藤 昌子
リガンド多価結合における相互作用に関する理論的研究	北里大学 能登 香
軟X線光学に関する理論的研究	広島大学 高橋 修
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
Molecular Mechanism of Protein Function Studied by Site-Selective Heat Current Analysis	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 II	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
アミノ酸変異によるタンパク質複合体の結合自由エネルギーシフト	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
機能性有機分子材料の電子的性質に関する理論的研究	三重大大学 伊藤 彰浩
重元素分子の高精度な相対論的量子化学計算にむけた方法論の開発と応用	広島大学 阿部 穰里
現代社会のインフラとなっている半導体技術の基礎となる半導体/Aモルファス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
計算科学的手法による半導体ナノ構造の形成と機能に関する研究	三重大大学 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
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
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
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と水溶媒和の働きについて	山陽小野田市立山口東京理科大学	畠山 允
水表面における OH 伸縮振動のスペクトル拡散ダイナミクスに関する理論研究	富山大学	石山 達也
有機光電変換物質の電子状態の解明	日本女子大学	村岡 梓
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
3 体相互作用に基づく Lennard-Jones 液体の体積粘性率の定式化と流体力学極限における動的構造因子の定量的評価	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
Photochemistry and Electronic Trapping in TiO ₂ Nanostructures	東京工業大学	Gergely Juhasz
高熱電特性を示す有機金属分子素子の開発	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	理化学研究所環	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のための温度計イオンの開発	産業技術総合研究所	浅川 大樹
酸解離定数計算の新しい展開とその応用	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	名古屋大学	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
コンビナトリアル化学によるジグリコールアミド系有機配位子の合成と、その配位子を用いたアクチノイドイオンの選択的抽出に関する分子科学研究	広島大学	井口 佳哉
3d 遷移金属錯体の有機ケイ素化合物に対する反応性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
アリルロジウムフタロシアニ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
第一原理計算と熱流体計算による化学気相蒸着反応の解明と最適化	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タンパク質の機能解析	東京大学	篠田 恵子
シミュレーションに基づく抗体・ワクチン・治療薬の分子設計	国立感染症研究所	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
分子性光触媒および固体電極触媒の反応過程の調査および触媒系の最適化	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	静岡県立大学	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
新規不斉触媒の開発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表面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接着メカニズムの解明	名古屋大学	鈴木 淳巨
Computational Innovation of Novel Catalysts for Ammonia Synthesis	名古屋大学	Pradeep Risikrishna Varadwaj
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
基本セルのサイズ依存性を考慮した巨大分子の不均一水和と拡散係数分割の分子動力学シミュレーション研究	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	高度情報科学技術研究機構	手島 正吾
ケージ状共役有機構造体の構造と電子物性の解明	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
生体分子集合及び電池電解質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：ナノ構造形成における分子輸送挙動の解析	兵庫県立大学	鷺津 仁志
巨大分子のイオン選択性の起源：構造論とエネルギー論	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
配向制御された高分子集合体の動的特性と物性相関解析	東京工業大学	古屋 秀峰

生体物質における凝集現象と枯渇効果の寄与	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	JST さきがけ	炭竈 享司
ピナフチル-ピレン環状色素の立体構造と光学特性	岡山大学	高石 和人
有機分子水溶液のX線誘起超高速反応動力学	理化学研究所	山崎 馨
星間でのアミノ酸前駆体生成を模擬する有機分子合成シミュレーション	核融合科学研究所	中村 浩章
Ag置換ゼオライトにおけるプロパン／プロピレン分離メカニズムの解明	信州大学	田中 秀樹
ポリオキソメタレートを基盤としたハイブリッド分子触媒の開発	東京大学	鈴木 康介
タンパク質-リン酸化ペプチドの結合自由エネルギー評価	医薬基盤・健康・栄養研究所	李 秀榮
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	沼田 宗典
生体内で起こる疾患およびウイルス感染の分子論的メカニズムの解明および創薬に関する理論的研究	筑波大学	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	三ツ沼治信
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	九州大学	森 俊文
界面活性剤凝集挙動の理論モデリング	岡山大学	甲賀研一郎
データ駆動型高分子材料研究のためのデータプラットフォーム基盤の創出	統計数理研究所	林 慶浩
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動態解析	量子科学技術研究開発機構	田口 真彦
グルタミド誘導体の超分子組織体構造と修飾官能基の配向による機能発現の解析	熊本大学	桑原 穰
量子化学計算による有機分子触媒の精密設計	東北大学	寺田 眞浩
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
ラジカル解離型フォトクロミック分子を配位子とした新規フォトクロミック金属錯体の創製と光機能探索	立命館大学	小林 洋一
人工力誘起反応法を利用したヘテロ元素含化合物の新規合成法の開発とその円偏光発光材料への応用	北海道大学	長田 裕也
電気化学的に発生させた活性化学種の反応挙動の理論化学的考察	岡山大学	光藤 耕一
分子集合体への分子分配および集合構造に関する研究	京都工芸繊維大学	水口 朋子
高分子 P4MP1 とカーボンナノチューブをホストとする長鎖アルカン選択的吸蔵現象の解明	慶應義塾大学	千葉 文野
アダマンタン縮環アレーン類の生成反応機構解明および新奇 π 共役系分子の構造物性解明	名古屋大学	八木亜樹子
有機触媒及び有機金属触媒を用いた新規反応の理論的機構解明及び反応予測	岡山大学	山崎 賢
DFT 計算を用いる新規 C-H 官能基化反応の機構解明	名古屋大学	安井 猛
粘弾性体と粉体の静摩擦の法則の包括的解明	大阪大学	岩下 航
ホスフィン保護 Au ₁₁ クラスターの超高速緩和ダイナミクスの配位子効果	関西学院大学	江口 大地
Exploiting Weak Interactions in Apolar Ices. Phase II. CO ₂ Ice Formation, Explicit Determination of Binding Energies on CO ₂ Ices, and Mixtures CO/CO ₂	東京大学	German Molpeceres de Diego
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
遷移金属複合系の構造、電子状態、反応の理論的研究	東京都立大学	中谷 直輝
バイオ系・材料系におけるエネルギー変換過程の解析	量子科学技術研究開発機構	藤田 貴敏
アモルファス物質における電子・格子状態シミュレーション	大阪大学	南谷 英美
分子動力学法を用いた、貴ガスによる隠れた薬剤結合部位の探索	産業技術総合研究所	飯田 慎仁
第一原理計算による金属間化合物表面の化学的特性の研究	鹿児島大学	野澤 和生
導電性ワイドギャップ材料の探索	九州大学	寒川 義裕
分子動力学シミュレーションによる溶液化学に関わる研究	福岡大学	永井 哲郎
Computational Investigation 2D and/or 2D+nD Materials for Future Application in Energy Conversion and Storage	東京理科大学	Arpita Varadwaj
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	大阪大学	古賀 信康
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	海野 雅司
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	岡本 祐幸
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
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
クーロン爆発イメージングに基づく高分解能分光を用いた分子クラスターの構造とダイナミクスの研究	北里大学	水瀬 賢太
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	福岡大学	池田 浩人
低分子非晶質有機半導体薄膜における官能基配向と膜物性との相関理解	山形大学	横山 大輔
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
アミノ酸シッフ塩基銅 (II) 錯体とリゾチームの複合体における動力学および QM/MM 計算	東京理科大学	秋津 貴城
二原子分子溶媒モデルの相関関数を正確に求める方法論の開発	愛媛大学	宮田 竜彦
優れた円偏光発光特性を示す π 共役系化合物の探索	北里大学	長谷川真士
含リン三次元パイ共役分子の構造と物性	大阪公立大学	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
溶液 XAS 解析のための第一原理計算	東京大学	佐々木 岳彦
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	埼玉医科大学	土田 敦子
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
キナクリドンキノンのホウ素化反応および光還元反応に関する研究	名古屋工業大学	小野 克彦
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
生体分子および溶媒の構造機能相関の解明	立命館大学	高橋 卓也
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
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
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	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	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	渡邊 総一郎
キノイド型分子の電子励起状態および構造の量子化学計算	室蘭工業大学	飯森 俊文
新規な典型元素化合物の構造と反応性に関する研究	学習院大学	狩野 直和
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	清水 章弘
細胞内における超硫黄分子の振動解析	東北大学	影山 莉沙
機能性有機材料の性能評価のための理論計算	東京都立産業技術研究センター	小汲 佳祐
典型元素を含む化合物の構造物性理論計算	東京都立大学	瀬高 渉
第一原理計算による CDW 下の遷移金属ダイカルコゲナイドの電子状態の研究	大阪大学	田中 慎一郎
典型元素の特性を活用した発光体および光触媒の開発	茨城大学	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	山崎 祥子
DFT 計算に基づいた固体酸化物／液相界面の局所構造解析	東京大学	中山 哲
新規機能性有機色素の開発	岐阜大学	船曳 一正
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への応用	北里大学	内山 洋介
高周期元素を含む電荷移動型有機光触媒の探索	名古屋工業大学	高木 幸治
計算科学の援用による高機能なレドックス活性分子の探索	横浜国立大学	信田 尚毅
Theoretical Studies of Strong Light-Matter Interactions in Molecular Systems	京都大学	Nguyen Thanh Phuc
統計学的解析に基づくフェノール光触媒の最適化	大阪大学	西本 能弘
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
空間的軌道相互作用に基づく π 共役に関する研究	名古屋市立大学	雨夜 徹
非対称大環状分子をビルディングブロックとした超分子金属錯体の機能化	東京大学	田代 省平
DFT 計算による異種金属混合原子価集積体の電子構造の解明	岐阜大学	植村 一広
量子化学計算と量子回路のシミュレーションによる量子多体系の理論的研究	大阪大学	吉田 悠一郎
有機典型金属化合物を用いた合成化学, 構造化学	広島大学	吉田 拡人
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	高椋 利幸
電場中における分子・イオンの反応の研究	学習院大学	奥津 賢一
新奇機能性分子材料の構造－物性相関に関する理論研究	大阪大学	谷 洋介
網羅的な構造検索と直感的な手法によるタンパク質構造の新規設計	名古屋大学	佐久間 航也
有機分子光触媒の設計と反応性解析に関する研究	日本工業大学	小池 隆司
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
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
安定ジラジカル分子を用いた光化学の未開拓領域の探索	京都大学	清水 大貴
異常拡散現象の時間分解計測と分子動力学計算	青山学院大学	柏原 航
複数の金属中心の協同効果を利用した重合反応の機構解明	弘前大学	竹内 大介
ESR スペクトル計算とその線量評価への応用	東北大学	山下 琢磨
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	分子科学研究所	江原 正博
病気に関わるタンパク質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
抗体分子の構造ダイナミクスの探査	分子科学研究所	谷中 冴子
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	分子科学研究所	岡崎 圭一
周期的 3 次元有機構造体の創製	分子科学研究所	瀬川 泰知
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
Conformation and Electronic Structures of Metal Tetraarylbilatrienones on Au(111) and Ag(111)	分子科学研究所	ウルバン アドリアン ジョー
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	和歌山県立医科大学	入江 克雅

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
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	東京大学	伊藤 喜光
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
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	黒崎 譲
配位ネットワークを形成するアルキル保護銀ナノクラスターの構造解明	東京大学	堂本 悠也
新規なケミカルリサイクル反応機構の計算化学的解明	長崎大学	重光 保博
π クラスター分子の電子物性の解明	大阪大学	西内 智彦
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
単分子磁石によるトロイダルモーメントの制御	広島大学	井上 克也
Isolatable Paramagnetic and Anionic Transition Metal Complexes Stabilized by Heterocyclic Ligands for Redox and Photoredox Active Functional Materials	広島大学	Shang Rong
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
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
特異な構造パラメータを有する高歪化合物の創出	北海道大学	島尻 拓哉
新規生物活性物質の設計・合成・機能評価	九州大学	平井 剛
クロミック分子の光物性に関する量子化学計算	立命館大学	長澤 裕
三重項媒介配位子保護金属クラスターの計算科学的研究	立教大学	三井 正明
三重項エネルギー移動を利用するアルキナールの立体発散型還元的環化反応	北海道大学	中村 顕斗
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	海老原昌弘
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	山下 健一
量子力学に基づく分子シミュレーション研究	法政大学	数納 広哉
エネルギー変換触媒の構造・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
単層カーボンナノチューブの構造制御合成に向けた合金触媒を用いた分子動力学シミュレーション	東京大学	丸山 茂夫
ペプチド金属錯体の環状金属イオン配列における分子間相互作用とキラリティの評価	お茶の水女子大学	三宅 亮介
抗生物質耐性分子メカニズムの理論的研究	城西国際大学	額賀 路嘉
金属クラスター連結体の創製	東京理科大学	新堀 佳紀
新規キラル分子・分子集合体のキロプティカル特性の理論計算	大阪大学	石割 文崇
金属カーバイド種を用いた増炭反応の開発	京都大学	黒木 亮
ゲスト包接能を有するカラムナー液晶の開発：2量体構造の解明	日本大学	吉田 純
β シート性ペプチド構造の安定性評価	東京大学	恒川 英介
人工光合成開発に向けた金属錯体触媒および分子変換反応の理論的研究	大阪大学	渡部 太登
スルースペース型電荷移動を活用する新規 TADF 分子設計研究	大阪大学	武田 洋平
典型元素による新規超原子価化合物の創製とその特異な物性開発	和歌山大学	林 聡子
有機ケイ素化合物の構造と性質	群馬大学	久新 莊一郎
電池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
量子化学計算による金属カルベノイド化学種の安定性および反応性探索	北海道大学	岡本 和紘
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
計算化学を利用した複雑天然物の効率のかつ立体選択的全合成研究	星薬科大学	加茂 翔伍
理論計算による酸化物固定化キラル Tb 錯体の表面構造の解明	名古屋大学	邨次 智
機能性開殻分子材料の構造－物性－電子状態相関の解明	大阪大学	草本 哲郎
キラルスピロ π 共役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
電気陽性 13・14 族元素配位子またはフラーレンが結合した金属錯体の電子構造に関する理論的研究	東北大学	小室 貴士
DFT 計算と TD-DFT 計算	大阪大学	モハメッド サリム ヘフニ
リパーゼ触媒 O-アシル化による軸不斉ピアリール化合物の動的速度論的光学分割	大阪大学	鹿又 喬平
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	和佐田裕昭
1,4-Diphenylbutadiyne および <i>trans</i> -Stilbene の分子内 π 電子共役の強さについて	日本大学	奥山 克彦
チイルラジカルを利用した分子触媒反応の開発	東京工業大学	山本 雅納
水和フェノールカチオンの微視的水素結合構造に対する重水素置換効果	北里大学	石川 春樹
環境低負荷な有機合成触媒反応の開発を指向した遷移金属錯体の構造および反応性に関する研究	奈良女子大学	浦 康之
NHC 配位シクロメタル化錯体を用いた触媒反応に関する研究	東京電機大学	山本 哲也
骨格多様性を持つピブサニン類のプロテインキナーゼ C 活性化剤としての構造最適化	香川大学	柳田 亮
原子核の量子効果を考慮した理論計算手法による応用計算	岐阜大学	宇田川太郎
ペプチド系有機化合物の構造解析と反応機構の解明	北海道大学	勝山 彬
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

セルロースナノファイバーのネットワーク形成に関する非平衡ダイナミクスシミュレーション	東京農工大学	坂本 道昭
イリジウム触媒を用いる異性化／環化異性化／芳香環化マルチタスク触媒システムと sp^3 炭素 - sp^2 炭素 [1,5]- シリル転位反応の開発	大阪大学	佐古 真
待ち行列理論を用いた気相中におけるイオン誘起核生成プロセスのモデル化	金沢大学	玉 館 知也
タンニンの MMP-1 結合様式の解明	岐阜大学	山内 恒生
金属－酸化物複合クラスターと小分子の相互作用	国立科学博物館	林 峻
キラルアイソトポマーの安定配座探索と円二色性に関する研究	東京理科大学	川崎 常臣
銅 (III) 錯体の配位子場逆転に誘起される光化学・酸化還元挙動の解明	山陽小野田市立山口東京理科大学	竹山 知志
機械学習を用いた低熱伝導率と高強度を同時に実現するホイスラー化合物の探索	名古屋工業大学	宮崎 秀俊
RCCS システムにおけるバイオインフォマティクス解析環境の構築	基礎生物学研究所	内山 郁夫
ラジカル反応およびイオン反応を用いた反応開発と材料科学への展開	山口大学	川本 拓治
金属表面吸着分子の振動スペクトル計算	分子科学研究所	櫻井 敦教
高濃度電解質溶液の分子動力学シミュレーション	岐阜大学	寺尾 貴道
新規モデル生物のオミクス解析	基礎生物学研究所	重信 秀治
高反応活性な遷移金属錯体及び典型元素化合物の構造と反応に関する理論計算	東京工業大学	石田 豊
光と酸を用いた協働的結合開裂反応の反応機構解析	東京大学大学	正井 宏
ペプチド触媒による選択的反応の機構解明	東京大学	工藤 一秋
機械学習を用いた脳機能画像解析	生理学研究所	郷田 直一
ビスセミキノコバルト錯体における縮退電子配置と擬縮退分子振動の結合状態	岡山理科大学	山本 薫
生体高分子中の結合分子および残基間相互作用の量子化学的解析	産業技術総合研究所	山崎 和彦
高還元力を有する新規光酸化還元触媒の創製	分子科学研究所	奥村慎太郎
量子化学計算と超高速時間分解分光による機能性分子の光物性解析	九州大学	小川 知弘
イミノエステルを用いる不斉 1,3- 双極子環化付加反応における, 2,5-trans ジアステレオ選択性の解明	中央大学	古屋 翔平
分子動力学法ソフトウェアから得られる物理的性質・性能情報の違いについての解析	理化学研究所	小林 千草
ガウシアンによる機能性有機分子の振動解析	兵庫県立大学	相賀 則宏
固定化金属錯体, 有機分子および金属ナノ粒子による新奇触媒作用の理論的解明	横浜国立大学	長谷川慎吾
Theoretical Prediction of Time-Resolved Pump-Probe Photoelectron and IR Spectra of Nucleobases in Solution via GPU-Accelerated Non-Adiabatic Molecular Dynamics Simulation	京都大学	Alexander Konstantin Humeniuk
植物ポリフェノールの立体化学および反応機構に関する研究	長崎大学	松尾 洋介
巨大ボリウム電子顕微鏡画像位置合わせ処理	生理学研究所	Nilton Liuji KAMIJI
遷移金属内包シリコンケージ超原子の C_{60} 錯体形成過程の研究	慶應義塾大学	中 嶋 敦
高分解能分子分光実験のための計算化学	京都大学	馬場 正昭
全合成による全立体配置決定を指向した複雑な海洋マクロリド iriomoteolide-1b の構造・配座解析	中央大学	村田 佳亮
分子認識能を有する高輝度円偏光発光分子を利用したバイオセンシング技術の開拓	大阪大学	重光 孟
真空中でのポリオール水溶液の凍結過程	九州大学	吉岡 拓哉
「フラビンタンパク質の光誘起ラジカルペア生成に関する人工システムの構築」に対する理論的考察	広島大学	岡 芳美
システイニルプロリルペプチドにおける 2,5 ジケートピペラジンチオエステル形成の反応機構研究	名古屋大学	中津 幸輝
タンパク質の生産性向上とフォールディングを両立させるアミノ酸変異の探索	名古屋大学	中野 秀雄
ディープラーニングを利用したアサガオの開花に関与する遺伝子発現シス因子の同定	長岡技術科学大学	西村 泰介
拡張アンサンブル法を用いたタンパク質－リガンド結合の自由エネルギー解析	兵庫県立大学	尾嶋 拓
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
安定的に核酸医薬を内包する高分子ナノキャリアの開発	国立精神神経医療研究センター	水野 隼斗
遷移金属を用いた炭素－水素および炭素－ヘテロ元素結合活性化反応の機構解明	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	
電子・光・フォノン物性および欠陥・界面構造のハイスループット第一原理計算とデータベース化	東京工業大学	神谷 利夫
極限環境構造材料の原子シミュレーションに資する構造材料用ニューラルネットワーク原子間相互作用の創出	大阪大学	尾方 成信
全原子モデル自由エネルギー計算を用いた液晶性高分子の熱力学的安定性解析	大阪大学	松林 伸幸
燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた, マルチスケール計算技術構築とその活用	関西大学	藤本 和士

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	2023			
				前期	後期	計	登録者数
共同研究	(1) 課題研究		2	1	1	1	12
	(2) 協力研究 ^{*1}		47	17	16	33	114
	(マテリアル) ^{*2}		40	28	28	56	172
研究会	(3) 分子研研究会		6	6	0	6	398
	(4) 若手研究活動支援		1	0	0	0	0
	(5) 岡崎コンファレンス		0	0	0	0	0
	所長招へい ^{*3}		5	35	0	35	35
	UVSOR 研究会 ^{*3}		1	0	2	2	167
施設利用	(6) ① UVSOR		209	105	87	192	1,034
	(マテリアル) ^{*2}		5	1	2	3	26
	(6) ②機器センター (マテリアル) ^{*2}		136	98	98	196	640
	(6) ③装置開発室		0	0	0	0	0
	(マテリアル) ^{*2}		12	5	5	10	60
	(6) ④計算科学研究センター		298	302	0	302	1,329

*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 各種研究会プログラム

【分子研研究会】

化学・工学・環境学を例とした持続可能な社会のための産学官民連携のあり方

2023年6月14日（水）～15日（木） 分子科学研究所研究棟201号室（ハイブリッド開催）

6月14日（水）

- 13:00-13:05 開会の挨拶
早稲田大学理工学術院／東京大学大学院工学系研究科 所 千晴
1. サイエンスコミュニケーションとSDGs
- 13:05-13:35 環境保全に関連する越境的アウトリーチの取り組み：アートと科学の融合「植物の一年時計」ほか
東京大学大学院農学生命科学研究科 安田仁奈
- 13:35-14:15 知識から行動へ：自然を活用した課題解決の研究と実践
東京大学大学院農学生命科学研究科 吉田丈人
- 14:15-14:55 フューチャー・デザイン：私たちの存続可能性をめざして
京都先端科学大学国際学術研究院 西條辰義
2. 化学・化学工学における産学官民連携
- 15:20-15:50 アクションリサーチと社会実装：種子島の事例
東北大学大学院工学研究科 北川尚美
- 15:50-16:20 市民との対話と若者との協働：全員参加型シンポジウムとボトムアップ研究提案
早稲田大学理工学術院 野田優・慶應義塾大学理工学部 藤岡沙都子
- 16:20-17:00 Efficiency も Sufficiency も
東京大学先端科学技術研究センター 平尾雅彦

6月15日（木）

3. 持続可能な社会のための化学・化学工学・環境学の方向性
- 9:00-9:40 持続可能な社会における化学・化学工学のあり方
東北大学材料科学高等研究所 阿尻雅文
- 9:40-10:20 持続可能な社会への転換をめざした環境学の協働
東洋大学情報連携学部 花木啓祐
- 10:20-10:55 総合討論「Well-beingを念頭においた持続可能な社会のための化学・化学工学のあり方」
モデレータ 慶應義塾大学理工学部 藤岡沙都子
- 10:55-11:00 閉会の挨拶
東北大学大学院工学研究科 北川尚美

【分子研研究会】

明日の放射光光電子分光研究展開のシーズとニーズ

2023年7月29日（土）～30日（日） 岡崎コンファレンスセンター

- 13:00-13:20 reception
- 13:20-13:30 opening
- 13:30-14:45 (Session 1) Deepening of Condensed Matter Physics 物性物理の深化
S. Ideta 出田真一郎 [Hiroshima U. 広島大] Invited
ARPES Studies and Its Developments at HiSOR: Towards HiSOR-II Projects
S. Ichinokura 一ノ倉聖 [Tokyo Inst. Tech. 東工大] Invited
Intercalation-Driven Superconductivity in Graphene
M. Horio 堀尾真史 [U. Tokyo 東大物性研] Invited
Space-Resolved ARPES on Strongly Correlated Materials
- 15:05-17:55 (Session 2) PEEM & Momentum Microscopes 光電子運動量顕微鏡の展開
K. Fukumoto 福本恵紀 [KEK 高エ研] Invited
Operando Observation of Organic Transistors Using Femtosecond PEEM
M. K. Man [OIST] Invited
Imaging in Real and Momentum Space with Ultrafast XUV Light Source
S. Ito [Marburg Univ.] Invited
Momentum-Space Movies of Electrons at Surfaces and Interfaces
M. Hoesch [DESY PETTRA-III] Invited
Active Sites of Te-Hyperdoped Silicon
T. H. Chuang [TPS] Invited
Transition of Soft X-Ray Photoelectron Microscopy from TLS to TPS
F. Matsui 松井文彦 [IMS-UVSOR 分子研]
Multimodal Valence Stereography for Cutting-Edge Spin Materials Science
- 18:00-21:00 Poster session ポスター・意見交換会

【学協会連携分子研研究会】

森野ディスカッション

2023 年 8 月 31 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）

1. 2023 年度研究助成金贈呈式

- 14:10-15:10 石井邦彦（理研）
「二次元蛍光寿命相関分光法の開発」
江波進一（筑波大）
「新規質量分析法を用いた大気マルチフェーズ反応機構の解明」
今田 裕（理研）
「走査プローブ顕微鏡を用いた単一分子フォトニクス」

2. 森野ディスカッション

- 15:30-17:45 講演 A 北海道大学低温研究所 渡部直樹 教授
「低温氷表面での物理化学過程～宇宙における分子進化の鍵～」
講演 B 東京大学大学院理学系研究科 橘 省吾 教授
「「はやぶさ 2」探査機が持ち帰った小惑星リュウグウの石」
総合討論

【分子研研究会】

金属酸化物：イオン液体インフォマティクスの発展にむけて

2023 年 9 月 13 日（水）～ 14 日（木） 岡崎コンファレンスセンター小会議室（ハイブリッド開催）

9 月 13 日（水）

- 13:30-13:45 「はじめに」
北田 敦（東京大）
13:45-14:45 「イオン液体・柔粘性結晶の実測データベースの構築と機械学習を用いた物性予測」
畠山 欽（東工大）
15:00-16:00 「第一原理計算と機械学習を用いた無機材料における原子間相互作用のモデリングとその応用」
世古敦人（京都大）
16:00-17:00 「データ駆動型材料研究の諸問題：統計的機械学習による予測・発見・理解」
吉田 亮（統計数理研）
17:00-17:30 全体討議
18:00-20:00 現地ポスター&意見交換会
【岡崎コンファレンスセンター 中会議室】

9 月 14 日（木）

- 09:00-10:00 「凝縮系の電子状態計算を用いたイオン液体の分子モデリングと大規模系への応用展開」
石井良樹（北里大）
10:15-11:15 「濃厚電解液中の Li イオン伝導機構」
篠田 渉（岡山大）
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】

UVSOR-SPring8 赤外ビームライン合同ユーザーズミーティング

2023 年 9 月 29 日（金） 分子科学研究所研究棟 201 号室（ハイブリッド開催）

- 9:30- 9:45 趣旨説明と UVSOR 赤外 BL 紹介
田中清尚（分子研 UVSOR）
9:45-10:00 SPring-8 赤外利用の展望
池本夕佳（JASRI）
10:00-10:20 赤外ナノ・超高速分光の現状と赤外放射光の可能性
西田 純（分子研）
10:20-10:40 皮膚角層赤外吸収特性の解析と製剤開発への応用
小幡誉子（星薬科大学）
10:55-11:15 顕微 FT-IR イメージングによる薬物粉末の異同識別
瀬戸康雄（理化学研究所）
11:15-11:35 Visualization of Glyoxylic Acid in Human Hair by Using BL43IR
宇山允人（株式会社資生堂）

11:35-11:50	The neaSCOPE as a Tool for Near-Field Imaging and Spectroscopy at the Synchrotron Aina Reich (neaSpec/attocube)
13:00-13:20	放射光赤外顕微鏡を用いた毛髪の実験と製品への応用 伊藤 廉 (株式会社ミルボン)
13:20-13:40	マイクロビーム FT-IR を用いたポリ乳酸表面における水分子の吸着の評価 松葉 豪 (山形大学)
13:40-14:00	赤外分光法による PEG および PEG 修飾デンドリマーの水和状態の解析 児島千恵 (大阪公立大学)
14:00-14:20	赤外波長選択的振動励起による生体関連物質の化学変換 川崎平康 (高エネルギー加速器研究機構)
14:55-15:15	フォノンが関わるプロトン移動機構 松井広志 (東北大学)
15:15-15:35	BL43IR における赤外磁気光学スペクトル測定：円二色性と旋光性 井口 敏 (東北大学)
15:35-15:55	SPRING-8 BL43IR を用いた高圧での分光実験 岡村英一 (徳島大学)
15:55-16:15	UVSOR での先端赤外分光の試みと今後の期待 木村真一 (大阪大学)
16:25-	UVSOR 見学

【分子研研究会】

溶液の化学現象の軟X線分光測定の前線
2023 年 10 月 2 日 (月) ～ 4 日 (水) 岡崎コンファレンスセンター

10 月 2 日 (月)

13:00 - 13:10	Welcome message Masanari Nagasaka (Institute for Molecular Science, Japan)
13:10 - 14:50	Session A
13:10 - 13:35	Soft X-Ray Absorption Spectroscopy to Investigate Artificial Biomembranes in Aqueous Solution Ryugo Tero (Toyohashi University of Technology, Japan)
13:35 - 14:00	Photon-in-Photon-out Spectroscopy and Synchrotron Radiation Project in Shenzhen Yitao Cui (Institute of Advanced Science Facilities, Shenzhen, China)
14:00 - 14:25	XAS Study for Aqueous Cellobiose: Experiment and Theory Takehiko Sasaki (The University of Tokyo, Japan)
14:25 - 14:50	Measurements with Utilizing Soft X-Ray Pulse at the Photon Factory 2.5 GeV Ring Jun-ichi Adachi (High Energy Accelerator Research Organization, Japan)
15:05 - 16:00	Session B, Chair: Satoru Suzuki (University of Hyogo, Japan)
15:05 - 15:30	Small Angle X-Ray Scattering Experiments at the 3 GeV Diffraction-Limited Storage Ring at MAX IV Laboratory: Recent Results and New Opportunities Tomás S. Plivelic (MAX IV Laboratory, Lund University, Sweden)
15:30 - 15:45	(Hot Topic, P09) Study of Chirality Emergence and Structural Change of Organic Molecules by Circularly Polarized Lyman-Alpha (121.6 nm) Irradiation in UVSOR-III Masahiro Kobayashi (National Institute for Fusion Science, Japan)
15:45 - 16:00	(Hot Topic, P02) Electronic Structure Analysis of Square Planar Ni Complex Bearing Tris(pentafluorophenyl)borane as a Z-Type Ligand Yuta Uetake (Osaka University, Japan)
16:00 - 18:00	Poster presentations

10 月 3 日 (火)

09:00 - 10:40	Session C
09:00 - 09:25	Time Resolved Soft X-Ray Absorption Spectroscopy System for Liquid Sample in Photon Factory Fumitoshi Kumaki (High Energy Accelerator Research Organization, Japan)
09:25 - 09:50	Very Sharp Diffraction Peak in Liquids and Glasses Shinji Kohara (National Institute for Materials Science, Japan)
09:50 - 10:15	UVSOR BL4U STXM Beamline: Status and Future Outlook Tohru Araki (Institute for Molecular Science, Japan)
10:40 - 11:55	Session D
10:40 - 11:05	Structure of Aqueous Ethanol Solution: Soft X-Ray Emission Spectroscopy Measurements and Theoretical Calculations Osamu Takahashi (Hiroshima University, Japan)
11:05 - 11:30	Acetic Acid in 1-Methylimidazole Observed by Soft X-Ray Emission Spectroscopy Yuka Horikawa (Yamaguchi University, Japan)
11:30 - 11:55	Mechanistic Investigation of Homogeneous Iron-Catalyzed Organic Reactions Based on Solution-Phase XAS Analysis Hikaru Takaya (Teikyo Science University & Institute for Molecular Science, Japan)

13:30 - 15:35	Session E
13:30 - 13:55	Operando Soft X-Ray Absorption Spectroscopy for Observing Chemical Processes in Solutions Masanari Nagasaka (Institute for Molecular Science, Japan)
13:55 - 14:20	Direct Observation of Electrochemically Generated High-Valent Iron-Oxo Species Applicable to CH ₄ Oxidation Reaction Yasuyuki Yamada (Nagoya University, Japan)
14:20 - 14:45	Soft X-Ray Spectroscopy for Semiconductor Photocatalysts Hiroshi Onishi (Kobe University & Institute for Molecular Science, Japan)
14:45 - 15:10	Transition Metal L-Edge Operando RIXS Studies of Electrode Materials for Li-Ion Batteries Daisuke Asakura (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Japan)
15:10 - 15:35	Tracking Chemical Dynamics through Soft X-Ray Spectroscopy Zhong Yin (Tohoku University, Japan)
15:35 - 15:45	Conference Photo
16:10 - 17:30	Session F
16:10 - 16:25	(Hot Topic, P13) Development of Structural Analysis in Solution by Combining Soft X-Ray Absorption and Raman Spectroscopies Morihsa Saeki (National Institutes for Quantum Science and Technology, Japan)
16:25 - 16:40	(Hot Topic, P12) Observation of Interactions between Functional Polymers and Water Molecules Using Soft X-Ray Emission Spectroscopy under Real Atmospheric Conditions Naoya Kurahashi (Institute for Molecular Science, Japan)
16:40 - 17:05	(Online) Liquid Jet Photoemission at FlexPES Beamline, MAX IV Gunnar Öhrwall (MAX IV Laboratory, Lund University, Sweden)
17:05 - 17:30	(Online) Soft X-Ray Operando Characterization of Electrochemical Interfaces by Ambient Pressure Photoelectron Spectroscopy at MAX IV Andrey Shavorskiy (MAX IV Laboratory, Lund University, Sweden)
18:00 - 20:00	Banquet

10月4日(水)

09:00 - 10:40	Session G
09:00 - 09:25	Geometry Sampling and Modeling Methods to Simulate Transient X-Ray Absorption Spectra of Molecules Dissolved in a Solvent Shota Tsuru (RIKEN Center for Computational Science, Japan)
09:25 - 09:50	A New Perspective for Understanding the Thermodynamics of Liquids: Mesoscopic Fluctuation Yukio Kajihara (Hiroshima University, Japan)
09:50 - 10:15	Time-Resolved and Nonlinear Soft X-Ray Absorption, Reflection and Fluorescence Spectroscopy at SACLA BL1 by Using Ultrathin Flat Jets Hiroshi Iwayama (Institute for Molecular Science, Japan)
10:15 - 10:40	Veritas: A Versatile Beamline for High Resolution Soft X-Ray Resonant Inelastic Scattering at the MAX IV Laboratory Conny Sâthe (MAX IV Laboratory, Lund University, Sweden)
11:05 - 12:20	Session H
11:05 - 11:30	New Resonant Inelastic Soft X-Ray Scattering Facility at NanoTerasu Jun Miyawaki (National Institutes for Quantum Science and Technology, Japan)
11:30 - 11:55	Photoelectron Spectroscopy of Liquids: Accessing Electronic Energetics and Surface Properties Stephan Thürmer (Kyoto University, Japan)
11:55 - 12:20	Operando Observation for Water Splitting Electrocatalysts Using Hard/Tender/Soft X-Ray Absorption Spectroscopy Masaaki Yoshida (Yamaguchi University, Japan)
12:20 - 12:30	Closing remarks
13:00 - 17:00	Optional tour to Okazaki castle and Daijuji temple

【UVSOR 研究会】

放射光の量子性・干渉性に基づく革新的計測手法の探索

2023年11月17日(金)～18日(土) 岡崎コンファレンスセンター小会議室

11月17日(金)

<趣旨説明>

14:00 - 14:30 加藤政博(広島大/分子研)

<セッション1 超高速・超短パルス>

14:30 - 15:00 位相制御2色レーザーパルスを用いた分子のイオン化・解離過程の制御
遠藤友随(QST)

15:00 - 15:30 高次高調波を用いた真空紫外から軟X線領域の超高速分光
水野智也(東大物性研)

15:30 - 16:00 単一サイクル自由電子レーザー基本原理の実証
田中隆次(理研)

- <セッション 2 量子計測・時間構造化光>
- 16:15 - 16:45 量子測定の新展開—定量的な量子測定の可能性—
飯沼昌隆（広島大）
- 16:45 - 17:15 光周波数コムの基礎と標準や分光への応用
和田雅人（産総研）
- 17:15 - 17:45 タンデムアンジュレータによる極紫外ダブルパルスの発生とその利用
金安達夫（佐賀 LS）
- 17:45 - 18:15 SPIDER 法による放射光電場波形計測
藤 貴夫（豊田工大）
- 18:45 - 交流会 @UVSOR 棟 3 階セミナー室

11 月 18 日（土）

- <セッション 3 量子計測・超高速分光>
- 9:00 - 9:30 光コムの使い方
安井武史（徳島大学）
- 9:30 - 10:00 数サイクルパルスを用いた複雑分子系の極限時間分解分光
倉持 光（分子研）
- 10:00 - 10:30 static な内殻励起分光から探る高速電子緩和
和田真一（広島大）

- <セッション 4 顕微・イメージング>
- 10:45 - 11:15 赤外近接場分光によるキャリア・励起子の局所ダイナミクスの解明
西田 純（分子研）
- 11:15 - 11:45 光干渉断層計測（光コヒーレンストモグラフィー）OCT
西澤典彦（名古屋大）
- 11:45 - 12:15 X線用中空ファイバー光学系の開発と放射光実験への応用の展望
田中義人（兵庫県立大）

- <セッション 5 偏光・空間構造化光>
- 13:15 - 13:45 軟X線励起による STED とその顕微応用
江島丈雄（東北大）
- 13:45 - 14:15 高強度レーザーによるボルテックス電子ビームの生成とその応用
森下 亨（電通大）
- 14:15 - 14:45 高速離散円偏光変調を用いた局所分光イメージング分析の展望
成島哲也（文科省）
- 14:45 - 15:15 分割型アンジュレータによる偏光制御と軟X線分光
大坪嘉之（QST）

<まとめと展望>

- 15:15 - 15:30 加藤政博（広島大／分子研）

<施設見学>

- 15:45 - UVSOR など

【UVSOR 研究会】

UVSOR シンポジウム 2023・第 6 回次期施設建設検討会

2023 年 12 月 2 日（土）～ 3 日（日） 岡崎コンファレンスセンター（ハイブリッド開催）

12 月 2 日（土）

- 開式の挨拶 岩山洋士 分子科学研究所 09:00 - 09:05
- Session 1 09:05 - 11:35
- 09:05 - 09:15 2024 年度施設運営方針
解良 聡 分子科学研究所
- 09:15 - 09:35 単一電子によるタンデムアンジュレータ光の観測
浅井佑哉 広島大学
- 09:35 - 10:05 【招待講演】微小ビームを活用した線形・非線形X線分光
堀尾真史 東京大学

- 10:25 - 10:55 【招待講演】 Exploring Nano Properties in Deep-Sea Hydrothermal Vents: Clues to Life's Origins
Hye-Eun Lee 理化学研究所
- 10:55 - 11:15 高分解能 ARPES による不足ドーブ三層系銅酸化物高温超伝導体 Bi222 のノード金属の観測
出田真一郎 広島大学
- 11:15 - 11:35 二本のアンジュレータ光源を駆使した光電子運動量顕微鏡
松井文彦 分子科学研究所

ポスターショートプレゼンテーション 11:35 - 12:10

特別企画講演「バイオ系における光科学の展開」 13:00 - 18:10

- 13:00 - 13:05 趣旨説明
解良 聡 分子科学研究所
- 13:05 - 13:20 軟X線バイオイメーシング：現状と将来展望
荒木 暢 分子科学研究所
- 13:20 - 13:50 光融合科学から創生する「命をつなぐ早期診断・予防技術」研究イニシアティブ
三沢和彦 東京農工大学
- 13:50 - 14:20 レーザー光ビームの波面制御による多光子顕微鏡の高度化
根本知己 生理学研究所
- 14:20 - 14:50 基礎生物学研究所超階層生物学センターにおける光を使った共同利用
亀井保博 基礎生物学研究所
- 14:50 - 15:20 トランススケールスコープが拓く生命科学研究の新たな潮流
永井健治 大阪大学
- 15:35 - 16:05 先端軟X線光源を活用した細胞イメージング技術の開発とその応用に向けた取り組み
木村隆志 東京大学物性研究所
- 16:05 - 16:20 密着X線顕微鏡によるバイオイメーシング
岩山洋士 分子科学研究所
- 16:20 - 16:35 軟X線吸収分光法によるバイオ研究の現状と展望
長坂将成 分子科学研究所
- 16:35 - 17:05 真空紫外放射光によるキラル分光と生体分子構造研究
松尾光一 広島大学
- 17:05 - 17:35 材料表面に機能を付与する界面水を探る
原田慈久 東京大学
- 17:40 - 18:10 パネル討論
(司会) 荒木 暢 分子科学研究所

ポスターセッション 18:20 -

意見交換会 18:20 - 20:00

12月3日(日)

Session 2 09:00 - 10:50

- 09:00 - 09:30 【招待講演】 時間分解X線分光学的手法による光化学反応のダイナミクス研究
野澤俊介 高エネルギー加速器研究機構
- 09:30 - 09:50 STXM によるアクティブトレッドゴムの機能可視化
金子房恵 住友ゴム工業株式会社
- 10:10 - 10:30 酸化セリウムのガンマ線誘起陽電子消滅寿命に及ぼす粒子径の影響
道志 智 大阪産業技術研究所
- 10:30 - 10:50 有機-無機ハイブリッド界面磁気結合に及ぼす分子間相互作用の影響の評価
小野広喜 名古屋大学

利用者懇談会 10:50 - 12:00

閉会 12:00

ポスターセッション (* は学生発表)

- P-01 全 炳俊 京都大学
Generation of Flat-Laser Compton Scattering Gamma-Ray Beam for Multi-Isotope Imaging in UVSOR-III
- P-02 Elham Salehi IMS
Q-Scan Measurement for the UVSOR Booster Ring
- P-03 金安達夫 九州シンクロトロン光研究センター
極端紫外ダブルパルスによる光電子波束の干渉
- P-04* 西原快人 大阪大学
時間・スピン分解電子散乱法の開発

- P-05* 伊吹 駿 大阪公立大学
Ag⁺ イオンを含む三元化合物結晶 CsAg₂I₃ の光学特性の研究
- P-06* 堀 健太 山口大学
炭酸緩衝溶液中で機能する Ni・Fe 水分解触媒のオペランド XAFS 測定
- P-07* 三田愛也 名古屋大学
層状 MAX 相化合物 Zr₂SnC の角度分解光電子分光
- P-08* 西野 史 分子科学研究所
WS₂ 単層膜上のキラル分子薄膜の角度分解光電子分光
- P-09* 石田 洸 大阪大学
赤外・ARPES 測定用の一軸圧力セルの試作
- P-10 前島尚行 分子科学研究所
Au(111) 上の 2 次元金属-リンネットワークの電子状態解析
- P-11* 山内 要 東京理科大学
ジナフトチエノチオフェン単結晶の異方的な振動状態の探索
- P-12* 隅 琢磨 山形大学
GIPALS 実験によって解き明かす Mg₂Sn 結晶における不純物添加効果
- P-13* 菅原知佳 広島大学
アセトン水溶液の軟 X 線吸収スペクトルから水和水を同定する新しいアイデア
- P-14* 小山正太郎 名古屋大学
リチウム固体電解質 Li_{3x}La_{2/3-x}TiO₃ 単結晶の角度分解光電子分光
- P-15* 河野健人 名古屋大学
層状 MAB 相化合物 MoAlB の角度分解光電子分光
- P-16 大門 寛 分子科学研究所
電子線励起の原子分解能ホログラフィー
- P-17 川崎平康 高エネルギー加速器研究機構
難分解性生体材料の放射光顕微赤外分光解析
- P-18* 陳 奕同 大阪大学
ARPES によるエピタキシャル YbSb(001) 薄膜表面の電子状態
- P-19 矢木真穂 名古屋市立大学
乾眠するクマムシの微視的解剖学に向けて
- P-20 長谷川友里 立命館大学
弱い相互作用が pentacene/graphite 界面の電子状態に及ぼす影響
- P-21 福谷圭祐 分子科学研究所
有機単結晶ルブレンの温度依存電子構造観測
- P-22 平 義隆 分子科学研究所
UVSOR-III BL1U におけるガンマ線誘起陽電子消滅分光法の開発
- P-23 菅 滋正 大阪大学
Extensive Potential of SX-RIXS and Spin-Momentum Resolved Photoelectron Microscopy
- P-24* 杉原弘基 大阪大学
YbCu₂/Cu(111) 単原子層合金における重い電子状態
- P-25 杉本泰伸 分子科学研究所
ヘムタンパク質溶液の軟 X 線吸収分光
- P-26 岩山洋士 分子科学研究所
共鳴軟 X 線散乱法の開発
- P-27* 大西祐輝 広島大学大学院
角度分解光電子分光および逆光電子分光により検証する銅酸化物高温超伝導体の量子電荷揺らぎによる電子自己エネルギーへの影響
- P-28* 宮井雄大 広島大学
超過剰ドープ Bi2201 の高分解能角度分解光電子分光：電子状態の対称性の評価
- P-29* 坪田悠希 広島大学
角度分解光電子分光による銅酸化物高温超伝導体 Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+δ} の電子相図の再検討
- P-30 萩原健太 分子科学研究所
直入射光電子運動量顕微鏡による Au(111) の軌道電子構造解析
- P-31 下ヶ橋龍之介 分子科学研究所
温度変化に伴う C₈₀ フラーレン内単分子磁石の配向推定