

(公開)

1. 日本側参加研究者の体制

①採択年度 (和暦) (西暦)	令和3 2021	年度	②採択期間 (通常A型は5年以内 B型は3年以内)	3 年間 (1年未満は 切上げ)	③事業の型 (AまたはBを記入)	A 型
④日本側拠点機関名 (和文)	東京工業大学					
⑤研究交流課題名 (和文)	柔らかな分子の分子認識機構					
⑥課題番号	JPJSCCA20210004					
⑦コーディネーター所属部局名・ 職名・氏名 (和文)	科学技術創成研究院・教授・藤井正明					
⑧日本側協力機関名 (和文) (適宜、行を加除し、該当ない場合は「該当なし」と記入すること。)	該当なし					

⑨参加研究者数内訳 (様式12 参加研究者リスト に準じてください。重複カ ウントしないこと。)	教授級 以上	助教・ 准教授等	ポスドク等 若手研究者	大学院生	参加資格の ない者 (⑩に内訳をご記入くださ い。手引き2-4参照。)	合計	第三国所属の研究者 (内数) (⑪に内訳をご記入くだ さい。)
拠点機関	5	4	0	15	0	24	0
協力機関・協力研究者	1	3	0	3	0	7	0
合計	6	7	0	18	0	31	0

⑩手引2-4記載の参加資格のない者の内訳 (適宜、行を加除し、該当ない場合は「該当なし」と記入すること。)		
所属・職	専門分野	研究交流での役割
該当なし		

⑪「第三国所属の研究者」内訳 (5名迄。適宜、行を加除し、該当ない場合は「該当なし」と記入すること。)			
所属機関所在国・ 所属・職	専門分野	日本側拠点機関へのメリット	日本側参加者として一体的な協力体制を 確保する方法
該当なし			

2. 経費

事業の型 A 型			
①当該年度の本事業による経費の支出			
経費内訳	金額 (単位:円)	備考	
研究 交 流 経 費	国内旅費※1	0	
	外国旅費※1	0	
	謝金	0	
	備品・消耗品購入費	13,203,219	
	その他経費	296,781	
	不課税取引・非課税取引 に係る消費税 ※2	0	大学負担
	計	13,500,000	
業務委託手数料	1,350,000	研究交流経費の10% (1円未満切捨)。 消費税額は内額とする。	
合計	14,850,000		

※1「国内旅費」「外国旅費」の合計が、研究交流経費支出額の50%を超えていない場合、備考欄にエラーが出ます。

※2 受託機関における課税、非課税(免税)の区分に応じ対象額を算定のこと。受託機関で負担の場合はその旨、備考欄に記載すること。

②研究交流経費(総額)の30%に相当する額を超える各経費費目の増減があった場合の説明事由(該当ない場合は「該当なし」と記入すること。)		
新型コロナウイルス感染症拡大により、国内旅費・外国旅費ともに支出することができなかつたため、備品・消耗品を購入し研究環境を強化した。		

③ 日 本 側 の 旅 費	日本側参加研究者のうち、 所属機関が日本である者の旅費の総額(単位:千円)		0		
	日本側参加研究者のうち、 所属機関が日本以外である者の旅費の総額(単位:千円)	日本→日本以外の渡航	0		
		日本以外→日本の渡航	0		
		日本以外→日本以外の渡航	0		
(単位:千円) ④ (相手国側参加研究者の 旅費の総額)	日本又は相手国 →日本の渡航	0	(単位:千円) 左記のうち、第三国 所属の相手国側 の総額	日本又は相手国 →日本の渡航	0
	日本又は相手国 →相手国の渡航	0		日本又は相手国 →相手国の渡航	0
	日本又は相手国 →第三国の渡航	0		日本又は相手国 →第三国の渡航	0
	第三国→ 日本の渡航	0		第三国→ 日本の渡航	0
	第三国→ 相手国の渡航	0		第三国→ 相手国の渡航	0
	第三国→ 第三国の渡航	0		第三国→ 第三国の渡航	0

※旅費は、往復の金額で記載すること(例:第三国から日本に渡航の場合、第三国→日本→第三国の往復の渡航費を「第三国→日本の渡航」の欄に記載)。

経路がある場合は、日本側拠点機関の規定等に基づき、旅費の分類・切り分けを行い、記入すること。

⑤(B型で平成31年度採択課題のみ)中国・韓国・シンガポール・台湾側参加者の外国旅費がある場合 (交流経費の5%以内。該当ない場合は「該当なし」と記入すること。)		
総額(単位:千円)	手引2-6記載の要件を満たす旨の事由説明	
⑥相手国マッチングファンド(=相手国側拠点機関が本研究課題に使用した研究交流経費)(単位:千円、千円未満切捨)		
全相手国のマッチングファンド総額 (1年間の金額)	マッチングファンドのある 相手国拠点機関数	相手国拠点機関のマッチングファンド平均額 (1年間の金額)
13,607	2	6,803

3. 共同研究・セミナー

事業の型		A	型	現在の年度に○を付けること				
①共同研究（適宜、行を加除すること。）				○				
共同研究 整理番号	共同研究課題名（和文）	相手国	1年目 実施年度に ○を付ける ↓	2年目 実施年度に ○を付ける ↓	3年目 実施年度に ○を付ける ↓	A型のみ		
			4年目 実施年度に○を 付ける↓	5年目 実施年度に○を 付ける↓				
R 1	柔らかな分子の合成	フランス、ドイツ	○	○	○			
R 2	柔らかな分子の水和による構造転換解析	ドイツ	○	○	○			
R 3	柔らかな分子の分子間錯体の分光計測	フランス、ドイツ	○	○	○			
R 4	柔らかな分子の分子間錯体の構造解析	フランス、ドイツ	○	○	○			
R 5	柔らかな分子の分子間錯体の光学異性認識	フランス	○	○	○			
R 6	柔らかな分子・分子間錯体の光励起状態解析	フランス	○	○	○			
R 7	柔らかな分子の分子認識機構解明	フランス、ドイツ		○	○			

共同研究の実施状況（当該年度実施の共同研究について、共同研究整理番号毎に、特筆すべき成果、相手国側拠点機関との主体的な取り組み及び今後の研究への波及効果、研究協力体制の構築状況等について記載すること。また、手引5-3変更事例No.2にあたる変更の場合は、変更事由も記載すること。）

R1（柔らかな分子の合成）に関しては受容体ポケットを念頭に合成するペプチドに関して東工大・藤井らとParis-Saclay大A. Zehnacker-Rentien教授で討論した。R2（柔らかな分子の水和による構造転換解析）・R3（柔らかな分子の分子間錯体の分光計測）に関しては東工大・平田圭佑助教らとBerlin工科大・O. Dopfer教授により構造転換を明確に測定できる新たな計測法の開発を国際共著論文として発表した。この論文共著においてR4（柔らかな分子の分子間錯体の構造解析）が必要となり平田らとDopfer教授らで実施している。さらにお茶の水女子大・宮崎充彦准教授らとDopfer教授はフェノールの希ガス錯体並びに水和ホルムアニリド誘導体におけるR2構造転換、R3分光計測、R4構造解析を実施し、2報の国際共著論文として発表した。O. Dopfer教授は静岡大・松本剛昭准教授とピロール芳香族クラスターのR3分光計測・R4構造解析を新たに開始して共同研究実施中である。また、R3及びR4は上記A. Zehnacker-Rentien教授と東工大・藤井により環状ペプチドのプロトンおよび金属イオン錯体に関する共同研究、Paris-Saclay大E. Gloaguen准教授らと藤井・石内らによりマグネシウムイオンチャネルのイオン選択機構に関する共同研究が進行中である。特にフランス・A. Zehnacker-Rentien教授と東工大・藤井による環状ペプチドに関する研究はR5（柔らかな分子の分子間錯体の光学異性認識）に発展しており、現在共同研究が進行している。また、R6（柔らかな分子・分子間錯体の光励起状態解析）はParis-Saclay大G. Gregoire准教授と東工大・平田助教らの共同研究が順調に進行して国際共著論文を速報誌に発表し、フルペーパーもacceptとなっている。R7（柔らかな分子の分子認識機構解明）はそれぞれの国際共同研究の中で適宜議論を進めている。コロナ禍による海外渡航禁止のため、国際共同研究を促進するべくDopfer教授、Zehnacker-Rentien教授とはほぼ毎週Zoomで打ち合わせ（Dopfer教授と45回実績など）、国際共同研究を推進した。これに刺激されて他のメンバーもZoom打ち合わせを頻繁に行っている。また、大学院生をZoom討論に参加させ、材料を提供して説明させ、事後簡単なレポートを書かせることで若手研究者育成を行なった。

②セミナー（当該年度開催分について、記載。適宜、行を加除すること。）				
セミナー 整理番号	セミナー名（和文）※振興会名及び本事業名を明記すること。シンボルマーク等で代用した場合、その旨コメントにて記載すること。英文も同様。	セミナー名（英文）	開催地（国名・都市名・会場名）	開催期間（○年○月○日～○年○月○日（○日間））
S 1	JSPS研究拠点形成事業「柔らかな分子の分子認識機構」キックオフシンポジウム	Kick-off International Symposium of JSPS Core-to-Core Program on "Molecular Recognition Mechanism between Flexible Molecules"	オンライン開催 (ZOOM及びSpatialChat)	2021年10月26日 (1日間)
S 2	JSPS研究拠点形成事業「柔らかな分子の分子認識機構」ヨーロッパキックオフセミナー	2nd International Symposium of JSPS Core-to-Core Program on "Molecular Recognition Mechanism between Flexible Molecules"	ドイツ	中止
S 3	JSPS研究拠点形成事業「柔らかな分子の分子認識機構」第2回シンポジウム	2nd International Symposium of JSPS Core-to-Core Program on "Molecular Recognition Mechanism between Flexible Molecules"	日本 (オンライン開催 (ZOOM))	2022年3月10日～2022年3月11日 (2日間)
S 4				
S 5				

<p>セミナーの開催状況（当該年度開催のセミナーについて、セミナー整理番号毎に、参加者数（総数、参加国名ごとの参加人数（本事業経費による負担の有無を問わない）、交流を通じて得られた研究成果の発表・評価・とりまとめの状況、相手国とのネットワーク形成、若手の育成等の効果等について記載すること。また、手引5-3「軽微な変更の事例」の変更事項No.2にあたる変更の場合は、変更事由も記載すること。）</p>
<p>S1：参加者総数66名（日本45名、ドイツ11名、フランス10名） 2021年度は8月に日本で日本、ドイツ、フランスの研究者によるキックオフセミナーを行う予定であったが、コロナ禍による海外渡航禁止のためオンライン開催に変更した。主要参加研究者が短時間、口頭で研究紹介し、引き続きSpatialChatによるポスターセッションを開催して新たな共同研究の促進を図った。ポスターセッションには大学院学生も自身の研究を発表して国際共同研究での討論に参加させた。口頭発表16件、ポスター発表28件であり企画の意図は十分達成された。これを契機として新たに開始した共同研究は、フランス・Paris-Saclay大・E. Gloaguen准教授と東工大・石内／平田／藤井、並びに静岡大・松本剛昭准教授とドイツ・Berlin工科大・O. Dopfer教授である。</p> <p>S2：新型コロナウイルス感染症拡大による渡航制限のため、ドイツでのヨーロッパキックオフセミナーは中止とした。</p> <p>S3：参加者総数55名（日本35名、ドイツ11名、フランス9名） 1月からの変異種感染流行に鑑み再びオンラインで開催した。2日にわたり開催し、講演数を口頭発表11件に絞ることで十分な講演時間を確保して互いの研究内容を深く理解すること、及び学生を含む質疑を促進することを意図して実施した。この結果、内容の理解が十分促進され、特に共同研究実施中のものは質疑が盛り上がりを見せた。特に静大・松本剛昭准教授の発表はO. Dopfer教授との国際共同研究を発表した点でも重要であり（現在共著論文執筆中）、企画の意図を達成したと言える。</p>
<p>③当該年度に第三国でのセミナー開催があった場合の、本事業の位置づけ、第三国で開催する経済的かつ合理的な理由、そして相手国側拠点との開催経費の分担状況（セミナー整理番号毎に記入すること。該当ない場合は「該当なし」と記入すること。手引2-7参照のこと。）</p>
<p>該当なし</p>
<p>④当該年度に開催のセミナーで、参加研究者以外の者に本事業経費を使って基調講演を依頼した場合の、日本側拠点機関にとってのメリット（セミナー整理番号毎に記入すること。該当ない場合は「該当なし」と記入すること。手引3-4（1）①参照のこと。）</p>
<p>該当なし</p>

4. 研究交流状況

事業の型 A 型 (本シートには、延べ人数で計算した人数を記入すること。)

①日本→海外の渡航数(本事業経費による渡航) (適宜、行を加除すること。)

国名(派遣先) 第三国は、国名の後に(第三国)と記載すること。	教授級以上	助教・ 准教授等	ポスドク等 若手研究者	大学院生	手引2-4記載の 参加資格のない者・ その他	合計	うち、31日以上 の渡航数(該当の場合のみ) 役職ごとの内訳も()書きで併記のこと。 記入例: 4(教授級以上1、大学院生3)
1 該当なし	0	0	0	0	0	0	
2	0	0	0	0	0	0	
3	0	0	0	0	0	0	
4	0	0	0	0	0	0	
5	0	0	0	0	0	0	
6	0	0	0	0	0	0	
7	0	0	0	0	0	0	
計	0	0	0	0	0	0	

第三国への渡航がある場合は、各渡航について、手引3-4(1)①記載の要件を(B型の相手国の第三国の参加研究者の場合は手引2-6記載の要件も)満たす旨の事由説明
(適宜、行を加除し、該当ない場合は「該当なし」と記入すること。)

該当なし

②海外→日本の渡航数(本事業経費による渡航) (適宜、行を加除し、該当ない場合は「該当なし」と記入すること。)

国名(派遣元) 第三国は、国名の後に(第三国)と記載すること。	教授級以上	助教・ 准教授等	ポスドク等 若手研究者	大学院生	手引2-4記載の 参加資格のない者・ その他	合計	うち、31日以上 の渡航数(該当の場合のみ) 役職ごとの内訳も()書きで併記のこと。 記入例: 4(教授級以上1、大学院生3)
1 該当なし	0	0	0	0	0	0	
2	0	0	0	0	0	0	
3	0	0	0	0	0	0	
4	0	0	0	0	0	0	
5	0	0	0	0	0	0	
6	0	0	0	0	0	0	
7	0	0	0	0	0	0	
計	0	0	0	0	0	0	

第三国からの渡航がある場合は、各渡航について、手引3-4(1)①記載の要件を(B型の相手国の第三国の参加研究者の場合は手引2-6記載の要件も)満たす旨の事由説明
(適宜、行を加除し、該当ない場合は「該当なし」と記入すること。)

該当なし

③日本以外→日本以外の渡航数(本事業経費による渡航) (①、②の合計数の半数以下とすること。適宜、行を加除し、該当ない場合は「該当なし」と記入すること。)

国名(派遣元)	国名(派遣先)	教授級以上	助教・ 准教授等	ポスドク等 若手研究者	大学院生	手引2-4記載の 参加資格のない者・ その他	合計	うち31日以上 の渡航数(該当の場合のみ) 役職ごとの内訳も()書きで 併記のこと。 記入例: 4(教授級以上1、大学院生3)
1 該当なし		0	0	0	0	0	0	
2		0	0	0	0	0	0	
3		0	0	0	0	0	0	
計		0	0	0	0	0	0	

各渡航について、手引3-4(1)①記載の要件を(B型の相手国の第三国の参加研究者の場合は手引2-6記載の要件も)満たす旨の事由説明
※③の合計が①と②の合計の半数よりも大きくなる場合、手引2-7(3)もしくは(4)に該当するセミナー開催に伴う渡航である旨も記載すること。
(適宜、行を加除し、該当ない場合は「該当なし」と記入すること。)

該当なし

④海外→日本の渡航数(相手国側経費による渡航) (適宜、行を加除し、該当ない場合は「該当なし」と記入すること。)

国名(派遣元)	教授級以上	助教・ 准教授等	ポスドク等 若手研究者	大学院生	手引2-4記載の参加資格のない者・ その他	合計
1 該当なし	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0
6	0	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0
計	0	0	0	0	0	0

⑤日本→海外の渡航数(相手国側経費による渡航) (適宜、行を加除し、該当ない場合は「該当なし」と記入すること。)

国名(派遣先)	教授級以上	助教・ 准教授等	ポスドク等 若手研究者	大学院生	手引2-4記載の参加資格のない者・ その他	合計
1 該当なし	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0
計	0	0	0	0	0	0

5. 交流相手国

事業の型 A 型	
①相手国名 (和文)	ドイツ
②拠点機関名 (和文および英文)	
和文：ベルリン工科大学 英文：Technische Universitaet Berlin (TU Berlin)	
③コーディネーター所属 局名・職名・氏名 (英文)	Optics and Nuclear Physics (Institute)・Professor Dr.・DOPFER Otto
④協力機関名 (和文および英文) (1機関ごとに行を適宜加除し、該当ない場合は「該当なし」と記入すること。)	
和文：該当なし 英文：	

⑤参加研究者数内訳(重複 カウントしないこと)	教授級 以上	助教・准教授等	ポスドク等若 手研究者	大学院生	その他	合計	第三国所属の研究者 (内数)
拠点機関	1	0	1	11	0	13	
協力機関・協力研究者	1	1	0	0	0	2	
合計	2	1	1	11	0	15	

⑥「その他」内訳 (該当ない場合は「該当なし」と記入すること。適宜、行を加除すること。)	
所属・職名 (専門分野)	研究交流での役割 (B型で、本事業費で旅費支給の場合のみ記入すること。)
該当なし	

⑦「第三国所属の研究者」内訳 (B型で本事業費で旅費支給の場合のみ。)(5名迄。適宜行を加除し、該当ない場合は「該当なし」と記入のこと。)			
所属機関所在国・所属・職	専門分野	日本側拠点機関へのメリット	研究交流に不可欠な理由
該当なし			

⑧相手国のマッチングファンド(=相手国側拠点機関が実際に本研究課題に使用した研究交流経費) (マッチングファンドの種類ごとに一行にまとめ、負担額を記載。適宜、行を加除し、B型で該当ない場合は該当なしと記入すること。)	パターン1または2をプルダウンから選択ください。 (経費負担区分が該当する相手国のみ。)	1	※参考： 日本側研究交流経費	13,500
-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-------------------------------------------------	---	-------------------	--------

支援機関等名	ファンド・プログラム名	日本円換算額 (単位：千円)	換算レート日 (例:2021/4/12)	相手国 通貨名	換算レート (外貨1単位に 相当する円貨額)
DFG (ドイツ研究振興協会)	Electronic structure of protonated aromatic and chiral molecules	1,170	2022/3/10	ユーロ	128.37
DFG (ドイツ研究振興協会)	Spectroscopic studies on the structure and reactivity of isolated and solvated flavins in a cryogenic ion trap	913	2022/3/10	ユーロ	128.37
DFG (ドイツ研究振興協会)	Optical properties of diamondoid cations	2,111	2022/3/10	ユーロ	128.37
DFG (ドイツ研究振興協会)	Optical spectroscopy of silicon clusters and nanostructures of astrophysical relevance	2,025	2022/3/10	ユーロ	128.37
TU Berlin (ベルリン工科大学)	infrastructure program	713	2022/3/10	ユーロ	128.37
合計		6,932			

※日本側で独自に用意した資金(学長裁量経費や本事業以外の資金)を相手国側のマッチングファンドとして扱うことはできません。また、振興会と相手国の学術助成機関等との二国間交流事業等における相手国側資金を相手国のマッチングファンドとすることもできません(EPSCRC-JSPS Core-to-Core Collaboration Advanced Materialsのように本事業のために相手国の学術助成機関が用意した相手国側資金は相手国側のマッチングファンドとして扱います)。

※相手国側の学術機関独自の資金(基盤的経費を含む)をマッチングファンドとして扱うことはできません。

5. 交流相手国

事業の型 A 型	
①相手国名(和文)	フランス
②拠点機関名(和文および英文)	
和文: フランス国立科学研究センター、パリサクレール大学 英文: CNRS, Paris-Saclay University	
③コーディネーター所属部局名・職名・氏名(英文)	Institute of Molecular Sciences of Orsay・CNRS Research Director, Deputy Head of the Institute・ZEHNACKER-RENTIEN Anne
④協力機関名(和文および英文) (1機関ごとに行を適宜加除し、該当ない場合は「該当なし」と記入すること。)	
和文: 該当なし 英文:	

⑤参加研究者数内訳(重複カウントしないこと)	教授級以上	助教・准教授等	ポスドク等若手研究者	大学院生	その他	合計	第三国所属の研究者(内数)
拠点機関	4	2	0	2	0	8	
協力機関・協力研究者	0	1	0	0	0	1	
合計	4	3	0	2	0	9	

⑥「その他」内訳(該当ない場合は「該当なし」と記入すること。適宜、行を加除すること。)	
所属・職名(専門分野)	研究交流での役割(B型で、本事業費で旅費支給の場合のみ記入すること。)
該当なし	

⑦「第三国所属の研究者」内訳(B型で本事業費で旅費支給の場合のみ。)(5名迄。適宜行を加除し、該当ない場合は「該当なし」と記入のこと。)			
所属機関所在国・所属・職	専門分野	日本側拠点機関へのメリット	研究交流に不可欠な理由
該当なし			

⑧相手国のマッチングファンド(=相手国側拠点機関が実際に本研究課題に使用した研究交流経費) (マッチングファンドの種類ごとに一行にまとめ、負担額を記載。適宜、行を加除し、B型で該当ない場合は該当なしと記入すること。)	パターン1または2をプルダウンから選択ください。 (経費負担区分が該当する相手国のみ。)	1	※参考: 日本側研究交流経費	13,500
-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-------------------------------------------------	---	-------------------	--------

支援機関等名	ファンド・プログラム名	日本円換算額 (単位:千円)	換算レート日 (例:2021/4/12)	相手国通貨名	換算レート(外貨1単位に相当する円貨額)
ANR(フランス国立研究機構)	Tunifold S Tuning foldable building blocks using sulfur	351	2022/3/10	ユーロ	128.37
ANR(フランス国立研究機構)	Dichroprobe	732	2022/3/10	ユーロ	128.37
LABex PALM	Conformer-selective photoelectron dichroism	176	2022/3/10	ユーロ	128.37
ANR(フランス国立研究機構)	TUNIFOLDS Tuning foldable building blocks using sulfur	878	2022/3/10	ユーロ	128.37
ANR(フランス国立研究機構)	VAPOBIO	1,815	2022/3/10	ユーロ	128.37
ANR(フランス国立研究機構)	Water splitting dynamics in the gas phase	615	2022/3/10	ユーロ	128.37
MECANO	young investigator project	2,108	2022/3/10	ユーロ	128.37
合計		6,675			

※日本側で独自に用意した資金(学長裁量経費や本事業以外の資金)を相手国側のマッチングファンドとして扱うことはできません。また、振興会と相手国の学術助成機関等との二国間交流事業等における相手国側資金を相手国のマッチングファンドとすることもできません(EPSCRC-JSPS Core-to-Core Collaboration Advanced Materialsのように本事業のために相手国の学術助成機関が用意した相手国側資金は相手国側のマッチングファンドとして扱います)。

※相手国側の学術機関独自の資金(基盤的経費を含む)をマッチングファンドとして扱うことはできません。