

## 平成 28 年度若手研究者ワークショップ(ブラジル) 実施報告書

平成 28年 12月 12日

## 1. ワークショップ名

(和文) 計算的および実験的手法による光化学・光生物学における近年の進展と挑戦

(英文) Overseas Challenges in Photochemical and Photobiological Sciences via Computational and Experimental Approaches

ワークショップに関するホームページ <http://www.ncube.human.nagoya-u.ac.jp/mscrs2016/>

## 2. ワークショップの目的

光化学および光生物学は、化学および工学の両面において重要な研究領域である。光によって誘起される様々な現象を理解するには、原子・分子レベルでの振る舞いを理解する必要がある。しかしながら、理論的・実験的手法はそれぞれ課題を抱えており、両方の研究領域における知識・技術を用いた共同研究が必要となる。このワークショップは、光励起・発光現象が介在する化学反応系や生体现象に関連した研究領域に対して、最新の計算科学や実験科学的手法を用いた最新の研究成果についての情報を相互報告する機会を提供し、将来の両国間におけるさらなる若手研究者の共同研究や人材交流を促進することを目的として開催された。

3. 開催期間 平成 28年 10月 11日 ~ 平成 28年 10月 13日 3日間

4. 開催地(会場) 名古屋大学 野依記念学術交流館

## 5. 開催体制

## (1) 実施機関

日本側	独立行政法人日本学術振興会(JSPS)
	国立大学法人 名古屋大学
ブラジル側	サンパウロ州立研究財団(FAPESP)
	サンパウロ大学

## (2) 開催責任者

1) 日本側

コーディネーター

所属機関・部局・職・氏名 名古屋大学大学院 情報科学研究科 教授 長岡正隆

機関所在地〒464-8601 愛知県名古屋市千種区不老町

TEL 052-789-5623

FAX 052-789-5623

Email mnagaoka@is.nagoya-u.ac.jp

事務担当者

部局・職・氏名 研究協力部研究支援課外部資金係 主任 白木 孝浩

機関所在地〒 同上

TEL 052-747-6482

FAX 052-789-2041

Email ken-jsps@adm.nagoya-u.ac.jp

2) ブラジル側

コーディネーター

所属機関・部局・職・氏名 サンパウロ大学 物理学研究所 教授 カヌート シルヴィオ

機関所在地〒 Caixa Postal 66318 05315-970 Sao Paulo, SP Brazil

TEL +55 11 30916980

FAX

Email canuto@if.usp.br

## 6. 参加者

### (1) メンター

日本側

氏名	所属機関・部局	職名	専門
古賀 伸明 コガ ノブアキ	名古屋大学・ 大学院情報科学研究科	教授	理論化学、物理化学、量子 化学
佐藤 啓文 サトウ ヒロフミ	京都大学・ 大学院工学研究科	教授	理論化学、物理化学、量子 化学
長谷川 淳也 ハセガワ ジュンヤ	北海道大学・ 触媒化学研究所	教授	理論化学、量子化学、光生 物学

ブラジル側

氏名	所属機関・部局	職名	専門
CUSTODIO, Rogério ケストジェオ ホジェリオ	University of Campinas	教授	理論化学、量子化学
GEORG, Herbert ゲオルギ ヘルベルチ	Federal University of Goiás, Institute of Physics	教授	物理化学、光物理、物性 物理学
COUTINHO, Kaline コーチンニョ カリーネ	University of São Paulo, Department of General Physics	教授	物理化学、生物物理学、 分子物理学

(2)参加者数

	メンター数	参加者数	その他 参加者数 <sup>[注]</sup>	合計
日本側参加予定数	3	20	28	51
ブラジル側参加予定数	3	7	0	10
その他の国からの参加予定数	0	0	6	6
合計	6	27	34	67

[注]本事業で経費を負担しない参加者については、「その他参加者数」にてカウントしてください。

(3)参加者リスト 様式 3-1 及び 3-2 にて最終版を提出してください。

(4)参加者の選出方法

参加者の募集方法として、(1)ワークショップのテーマにふさわしいと考えられる若手研究者を代表者およびメンターからの推薦および、(2)ワークショップ HP および関連学会のメーリングリスト等で告知して、参加者を募集するという方法で候補者を挙げた。次に、9月21日に開催した名古屋大学での準備会にて、代表者およびメンターらが候補者の中から職歴および研究業績に基づいて総合的に判断して発表者および発表形式を決定した。選抜基準として、光化学・光生物学の分野において卓越した業績を上げていること、候補者の所属機関・研究領域を考慮することの2つの観点から参加者を選抜した。

## 7. 委託事業の内容

(1)運営体制・方法について

ワークショップを実施する会場となる名古屋大学において、コーディネーターの一人である長岡正隆教授を中心に運営委員会を設立した。ワークショップの公式 HP を作成し、情報の周知・広報および参加手続き等については主として HP を通じて行った。問い合わせ用のメールアドレスも用意し、各種問い合わせにも対応した。9月21日に準備会を名古屋大学で実施し、発表者の最終決定やその他の事項の決定を行った。また、11月4日に整理会を行い、会議の総括を行った。

(2)日程、議題(別添可)

本会議は10月11日から13日の3日間の日程で行った。大きく3つの議題に分けて発表プログラムを作成した。1日目には歓迎レセプションを開催した。3日目は本ワークショップの議題に関連の深い施設である「福井謙一記念研究センター」を訪問しワークショップを行うと共に、所属研究者と議論する時間を設けた。また、本会議初日前日の10月10日には、名古屋大学から国際会議助成金支援によるワークショップ(本ワークショップで報告される研究で用いられる2つの手法の中、とくに計算科学的手法に焦点を絞り、ブラジ

ル以外の関連研究を選んだもの)も連続して開催した。

## 8. 本事業で得られた成果

### (1) 学術的な観点からの成果

本ワークショップでは、光励起・発光現象が介在する化学反応系や生体现象に関連した研究領域に対して、最新の計算科学や実験科学的手法を用いた研究成果についての最新の情報を共有することを目的としており、次の3つのトピックで構成した。セッション1では、理論化学的手法として、大規模系への応用が盛んになされているQM/MM法について近年の応用例や新たな挑戦について議論を行った。セッション2では、実験的手法あるいは計算的手法を組み合わせた研究例について紹介・議論を行った。セッション3は、実際の生物学的・工学的な応用へ向けた取り組み例について、最新の研究動向の報告がなされた。さらに、理論的・実験的手法での各々の課題を解決するために、自由な議論の時間を設け、実験および理論科学者との共同研究の可能性を探るセッションも設けた。

三日間のワークショップを通じて、光科学・光生物学をキーワードとして、理論的・実験的手法によって物理化学現象を原子・分子レベルから解明することに取り組んでいる科学者間の情報交換および人的交流を促進するという目的が十分に果たせたといえる。これは今後、光によって誘起される様々な現象に対するより深い理解を進めるための確かな礎となった。

### (2) 国際交流及び若手研究者養成の観点からの成果

これまで名古屋大学とサンパウロ大学は、共同での著書・論文執筆、国際ワークショップの開催、大学院生の交換留学や研究室訪問などを通じて、国際交流を深めてきた。本ワークショップ開催によって、これまで以上に2国間の国際交流が活発になることが期待できる。具体的な取り組みとして、日本とブラジルの2国からの本会議参加者を中心とする新たなメーリングリストを構築した。このメーリングリストにより、主に学生、若手研究者を対象とする留学生向け奨学金、国際学会開催などの種々の情報共有が将来的に円滑化されることを目指している。また、実験・理論領域での近年の成果を共有し、直接会って議論を交わすことで、現在取り組んでいる研究テーマや直面している課題を互いにより深く理解することが可能となった。本取り組みは、今後の問題解決に向けた国際的な共同研究実現の可能性を大いに促進するものと言える。

## 平成28年度若手研究者ワークショップ 参加者リスト

平成 28年 10月 14日

ワークショップ名: Overseas Challenges in Photochemical and Photobiological Sciences via Computational and Experimental Approaches

## 1. 日本側参加者リスト

No	姓	名	所属機関・部局	職名	所属国名 <sup>1)</sup>	備考 <sup>2)</sup>
No	Family Name	Name	Affiliation	Job Title	Country <sup>1)</sup>	Note <sup>2)</sup>
1	長岡	正隆	名古屋大学・大学院情報科学研究科	教授	日本	*
1	Nagaoka	Masataka	Graduate School of Information Science, Nagoya University	Professor	Japan	
2	古賀	伸明	名古屋大学・大学院情報科学研究科	教授	日本	*
2	Koga	Nobuaki	Graduate School of Information Science, Nagoya University	Professor	Japan	
3	佐藤	啓文	京都大学・大学院工学研究科	教授	日本	*
3	Satou	Hirofumi	Graduate School of Engineering, Kyoto University	Professor	Japan	
4	長谷川	淳也	北海道大学・触媒科学研究所	教授	日本	*
4	Hasegawa	Junya	Institute for Catalysis, Hokkaido University	Professor	Japan	
5	ビスタファ	カルロス	名古屋大学・大学院情報科学研究科	博士研究員	日本	*
5	Bistafa	Carlos	Graduate School of Information Science, Nagoya University	PostDoctoral Research Fellow	Japan	
6	北村	勇吉	名古屋大学・大学院情報科学研究科	博士研究員	日本	*
6	Kitamura	Yukichi	Graduate School of Information Science, Nagoya University	PostDoctoral Research Fellow	Japan	
7	高柳	昌芳	名古屋大学・大学院情報科学研究科	特任助教	日本	*
7	Takayanagi	Masayoshi	Graduate School of Information Science, Nagoya University	Project Assistant Professor	Japan	
8	竹中	規雄	名古屋大学・大学院情報科学研究科	特任助教	日本	*
8	Takenaka	Norio	Graduate School of Information Science, Nagoya University	Project Assistant Professor	Japan	
9	横川	大輔	名古屋大学・大学院理学研究科	特任准教授	日本	*
9	Yokogawa	Daisuke	Graduate School of Science, Nagoya University	Associate Professor	Japan	
10	チェン	ユエ	北海道大学・触媒科学研究所	博士研究員	日本	*
10	Chen	Yue	Institute for Catalysis, Hokkaido University	PostDoctoral Research Fellow	Japan	
11	原 渕	祐	北海道大学・大学院理学研究院	博士研究員	日本	*
11	Harabuchi	Yu	Faculty of Science, Hokkaido University	PostDoctoral Research Fellow	Japan	
12	中山	哲	北海道大学・触媒科学研究所	准教授	日本	*
12	Nakayama	Akira	Institute for Catalysis, Hokkaido University	Associate Professor	Japan	
13	ラタンサク	マヌサーダ	北海道大学・触媒科学研究所	博士研究員	日本	*
13	Ratanasak	Manussada	Institute for Catalysis, Hokkaido University	PostDoctoral Research Fellow	Japan	
14	斉田	謙一郎	北海道大学・大学院理学研究院	特任助教	日本	*
14	Saita	Kenichiro	Faculty of Science, Hokkaido University	Project Assistant Professor	Japan	

15	ハッサニアンアレイ	ハディ	京都大学・大学院理学研究科	博士研究員	日本	*
15	Hassanian Arefi	Hadi	Graduate School of Science, Kyoto University	PostDoctoral Research Fellow	Japan	
16	山崎	祥平	弘前大学・大学院理工学研究科	助教	日本	*
16	Yamazaki	Shohei	Graduate School of Science and Technology, Hirosaki University	Assistant Professor	Japan	
17	城塚	達也	東北大学・大学院理学部研究科	研究員	日本	*
17	Joutsuka	Tatsuya	Graduate School of Science, Tohoku University	Researcher	Japan	
18	バラドウワジ	プラディーブ	東京大学・化学システム工学科	博士研究員	日本	*
18	Varadwaj	Pradeep	Chemical System Engineering, The University of Tokyo	PostDoctoral Research Fellow	Japan	
19	北	幸海	横浜市立大学 大学院生命ナノシステム科学研究科	准教授	日本	*
19	Kita	Yukiumi	Graduate School of Nanobioscience, Yokohama City University	Associate Professor	Japan	
20	川口	一朋	金沢大学・理工研究域 数物科学系	助教	日本	*
20	Kawaguchi	Kazutomo	Institute of Science and Engineering, Kanazawa University	Assistant Professor	Japan	
21	本林	健太	名古屋工業大学・フロンティア研究院	助教	日本	*
21	Motobayashi	Kenta	Frontier Research Institute, Nagoya Institute of Technology	Assistant Professor	Japan	
22	赤瀬	大	広島大学・大学院理学研究科	博士研究員	日本	*
22	Akase	Dai	Graduate School of Science, Hiroshima University	PostDoctoral Research Fellow	Japan	
23	水上	渉	九州大学・総合理工学研究院	助教	日本	*
23	Mizukami	Wataru	Faculty of Engineering Science, Kyushu Hiroshima University	Assistant Professor	Japan	
24	東	雅大	琉球大学・海洋自然科学科	助教	日本	*
24	Higashi	Masahiro	Department of Chemistry, Biology and Marine Science, University of the Ryukyus	Assistant Professor	Japan	
25	菱川	明栄	名古屋大学・大学院理学研究科	教授	日本	
25	Hishikawa	Akiyoshi	Graduate School of Science, Nagoya University	Professor	Japan	
26	稲垣	泰一	名古屋大学・大学院情報科学研究科	博士研究員	日本	
26	Inagaki	Taichi	Graduate School of Information Science, Nagoya University	PostDoctoral Research Fellow	Japan	
27	伊藤	克浩	名古屋大学・大学院情報科学研究科	学生	日本	
27	Ito	Katsuhiro	Graduate School of Information Science, Nagoya University	Student	Japan	
28	井内	哲	名古屋大学・大学院情報科学研究科	助教	日本	
28	Iuchi	Satoru	Graduate School of Information Science, Nagoya University	Assistant Professor	Japan	
29	ウップラ	プルショッタム	名古屋大学・大学院情報科学研究科	博士研究員	日本	
29	Uppla	Purushotham	Graduate School of Information Science, Nagoya University	PostDoctoral Research Fellow	Japan	
30	栗崎	以久男	名古屋大学・大学院情報科学研究科	博士研究員	日本	
30	Kurisaki	Ikuo	Graduate School of Information Science, Nagoya University	PostDoctoral Research Fellow	Japan	
31	鈴木	雄一	名古屋大学・大学院情報科学研究科	学生	日本	
31	Suzuki	Yuichi	Graduate School of Information Science, Nagoya University	Student	Japan	

32	藤江	拓哉	名古屋大学・大学院情報科学研究科	学生	日本	
32	Fujie	Takuya	Graduate School of Information Science, Nagoya University	Student	Japan	
33	前田	猛	名古屋大学・大学院情報科学研究科	学生	日本	
33	Maeda	Takeshi	Graduate School of Information Science, Nagoya University	Student	Japan	
34	松本	健太郎	名古屋大学・大学院情報科学研究科	学生	日本	
34	Matsumoto	Kentaro	Graduate School of Information Science, Nagoya University	Student	Japan	
35	山口	毅	名古屋大学・大学院工学研究科	助教	日本	
35	Yamaguchi	Tsuyoshi	Graduate School of Engineering, Nagoya University	Assistant Professor	Japan	
36	吉田	久美	名古屋大学・情報文化学部	教授	日本	
36	Yoshida	Kumi	School of Informatics and Sciences, Nagoya University	Professor	Japan	
37	笠原	健人	京都大学・大学院工学研究科	学生	日本	
37	Kasahara	Kento	Graduate School of Engineering, Kyoto University	Student	Japan	
38	松三	勇介	京都大学・大学院工学研究科	学生	日本	
38	Matsumi	Yusuke	Graduate School of Engineering, Kyoto University	Student	Japan	
39	シシュキン	マキシム	京都大学・実験と理論計算科学のインターフェイスによる触媒・電池の元素戦略研究拠点	研究員	日本	
39	Shishkin	Maxim	ESICB, Kyoto University	Researcher	Japan	
40	シャンカー	サドハンシュ	京都大学・大学院工学研究科	博士研究員	日本	
40	Shanker	Sudhanshu	Graduate School of Science, Kyoto University	PostDoctoral Research Fellow	Japan	
41	山本	武志	京都大学・大学院理学研究科	助教	日本	
41	Yamamoto	Takeshi	Graduate School of Science, Kyoto University	Assistant Professor	Japan	
42	炭竈	享司	福井大学・医学部	助教	日本	
42	Sumikama	Takashi	Faculty of Medical Sciences, University of Fukui	Assistant Professor	Japan	
43	大西	拓	三重大学・大学院工学研究科	助教	日本	
43	Onishi	Taku	Department of Chemistry for Materials and CUTE, Mie University	Assistant Professor	Japan	
44	川嶋	裕介	大阪大学・大学院薬学研究科	学生	日本	
44	Kawashima	Yusuke	Graduate School and School of Pharmaceutical Science	Student	Japan	
45	中田	真秀	理化学研究所 情報基盤センター	技師	日本	
45	Nakata	Masahide	Advanced Center for Computing and Communication	Engineer	Japan	
46	張	賀東	名古屋大学 大学院情報科学研究科	准教授	日本	
46	Chan	Futon	Graduate School of Information Science, Nagoya University	Associate Professor	Japan	
47	安田	耕二	名古屋大学 未来材料・システム研究科	准教授	日本	
47	Ysuda	Koji	Institute of Materials and Systems for Sustainability	Associate Professor	Japan	
48	吉田	悠一郎	京都大学・大学院工学研究科	学生	日本	
48	Yoshida	Yuichiro	Graduate School of Engineering, Kyoto University	Student	Japan	

49	稲井	直人	名古屋大学大学院理学研究科(物質理学専攻 量子化学グループ)	学生	日本	
49	Inai	Naoto	Graduate School of Science, Nagoya University	Student	Japan	
50	中瀧	翔太	名古屋大学大学院理学研究科(物質理学専攻 量子化学グループ)	学生	日本	
50	Nakataki	Shota	Graduate School of Science, Nagoya University	Student	Japan	
51	須田	佳代	名古屋大学大学院理学研究科(物質理学専攻 量子化学グループ)	学生	日本	
51	Suda	Kayo	Graduate School of Science, Nagoya University	Student	Japan	
52	三澤	奈々	東京大学大学院 工学系研究科 化学生命工学専攻	学生	日本	
52	Misawa	Nana	School of Engineering, the University of Tokyo	Student	Japan	

1) 参加者が所属する機関の所在国を記入してください

2) 本ワークショップ経費にて参加される方については、備考欄に「\*」を記入してください。

## List of Participants for JSPS-FAPESP Joint Research Workshop 2016

Date: Oct. 14th 2016

Workshop Title: Overseas Challenges in Photochemical and Photobiological Sciences via Computational and Experimental Approaches

### 2. List of participants on the Brazilian side

No	Family Name	Name	Affiliation	Job Title	Country <sup>1)</sup>	Note <sup>2)</sup>
1	ACCIOLY CANUTO	Sylvio Roberto	University of São Paulo	Professor	Brazil	*
2	CUSTODIO	Rogério	University of Campinas	Professor	Brazil	*
3	GEORG	Herbert	Federal University of Goiás	Professor	Brazil	*
4	COUTINHO	Kaline	University of São Paulo	Professor	Brazil	*
5	BARBOSA FERREIRA	Marcos Antonio	Federal University of São Carlos	Professor	Brazil	*
6	HOMEM DE MELLO	Paula	Federal University of ABC	Professor	Brazil	*
7	MARTÍNEZ	Leandro	University of Campinas	Professor	Brazil	*
8	PEREIRA DOS SANTOS	Diego	University of Campinas	Professor	Brazil	*
9	SCHWAB	Ricardo Samuel	Federal University of São Carlos	Professor	Brazil	*
10	SPARVOLI DE MEDEIROS	Marina	Federal University of ABC	Professor	Brazil	*
11	TROIANO FELICIANO	Gustavo	São Paulo State University	Professor	Brazil	*

<sup>1)</sup> Please write a country of affiliated institution.

<sup>2)</sup> Please put "\*" in this section when FAPESP/JSPS pays his/her expenses.

## 平成28年度若手研究者ワークショップ 参加者リスト

平成 28年 10月 14日

ワークショップ名: Overseas Challenges in Photochemical and Photobiological Sciences via Computational and Experimental Approaches

## 3. その他の国からの参加者リスト

No	姓	名	所属機関・部局	職名	所属国名 <sup>1)</sup>	備考 <sup>2)</sup>
No	Family Name	Name	Affiliation	Job Title	Country <sup>1)</sup>	Note <sup>2)</sup>
1	アギユラー	マニエルアソゲル	エストレマドゥーラ 大学	教授	スペイン	
1	Aguilar	Manuel Angel	University of Extremadura	Professor	Spain	
2	ドメーネ	カルメン	キングスカレッジ ロンドン	教授	英国	
2	Domene	Carmen	King's College London	Professor	UK	
3	リー	サンヨブ	ソウル大学校	教授	韓国	
3	Lee	Sangyoub	Seoul National University	Professor	South Korea	
4	ナヴァホ	マリアエレナマルチン	エストレマドゥーラ 大学	教授	スペイン	
4	Navarro	Maria Elena Martin	University of Extremadura	Professor	Spain	
5	ロベール	ヴァンサン	ストラスブール大学	教授	フランス	
5	Robert	Vincent	University of Strasbourg	Professor	France	
6	ヴェララウシ	サージ	ストラスブール大学	教授	フランス	
6	Vela Llausí	Sergi	University of Strasbourg	Professor	France	

## JSPS-FAPESP Joint Research Workshop Questionnaire for the Participants

Workshop Title Overseas Challenges in Photochemical and Photobiological Sciences via Computational and Experimental Approaches

**Among the participants, 23 people kindly answered the questionnaire.  
In the following, we summarize the results.**

### Part 1

Please let us know how you evaluate this workshop so that we can improve our workshops in the future.  
Circle the letter from A to E that matches closest your opinion.

The letters stand for the following:

**A** = strongly agree    **B** = agree    **C** = neutral    **D** = disagree    **E** = completely disagree

	A	B	C	D	E
<b>Organization of the workshop</b>					
-The time allotted to each part of the program was appropriate	16	5	1	0	0
-The lecture and laboratory components were effectively linked	12	7	3	1	0
-The size of the classes was optimal	14	6	3	0	0
<b>Lectures</b>					
-Sufficient time was allocated for the lectures	15	5	3	0	0
-The lectures were useful in my research (interesting, stimulating and practical)	11	8	4	0	0
-The level of the lectures relative to my educational background and experience was optimal	7	12	3	0	0
<b>Discussions</b>					
-Sufficient time was allocated for the discussions	10	8	4	1	0
-The discussions were useful in my research (interesting, stimulating and practical)	8	11	4	0	0
<b>Lecturers</b>					
-Lecturers gave equal treatment to all the participants	13	7	2	1	0
-Lecturers respected the ideas, opinions and comments of the participants	13	9	1	0	0

## Overall

-I found my participation in the workshop to be meaningful	11	9	2	0	0
-I was able to create and expand working networks with other researchers by participating in the workshop	10	7	5	0	0

### Part 2

Please write your comments.

-The most successful aspect of this workshop:

*Several participants praised the level of the talks as also as the opportunity to meet researchers from a different scientific community.*

*In addition, several have pointed out that the workshop was an excellent opportunity for young researchers present their works and construct collaborative networks.*

-The least successful aspect of this workshop (if possible, suggestion for improvement):

*Some of the participants pointed out that they would like to have even more time for free discussion about the topics and possible collaborations. However, based on the format of the workshop and the number of attendants, this would be only possible if in future editions, the workshop had a longer duration (4 or 5 days).*

-Other comments:

- none -

