

分子研 レターズ

48
Issue of July 2003

巻頭言

分子研への期待.....廣田 褔

研究紹介

磁気共鳴法による分子性導体の電荷分離と電荷秩序配列研究.....中村敏和
金属酵素が機能を制御する分子メカニズムをさぐる.....藤井 浩

レターズ

最近思うこと.....中村宏樹



表紙写真説明

右下；電界放出形透過電子顕微鏡 日本電子製JEM-3100FEF

（本文 84 ページからに関連記事）

左下；CM2 セミナーの様子

右上；実験棟東の小径

分子研への期待

京都大学名誉教授・分子科学研究所研究顧問 廣 田 襄

私は1976年に長いアメリカでの大学生活を終えて帰国して以来、共同研究や研究会などで分子研には色々とお世話になった。また、客員や運営委員会の一員として、分子研の運営の一端にも触れさせて頂いた。分子研の設立からこの四半世紀の発展を、大きな期待を持って少し離れた所から眺めてきた。昨年からは分子研での研究の現状を詳しくお聞きする機会を持ち、分子研の現状と将来に関して新たな印象を抱いた。

まず分子研の規模の拡大とカバーする研究分野の広がりには強い印象を持った。設立当初の小規模な物理化学の研究所から、錯体化学、有機化学、生物化学分野をも含む総合的な化学の研究所になってきたという印象である。化学が分子の科学であるという意味では、本当の意味での分子科学研究所に近づいたというべきかも知れない。広い分野で数多くの興味ある研究が行われており、そのレベルは一般に高い。とくに理論部門やレーザー開発部門のアクティビティーの高さに感心した。このように分子研が大きく発展したのを見ることは大変嬉しい事である。

70年代から90年代にかけては、観測手段の進歩が次々と新しい知見を分子科学にもたらし、コンピューターの進歩に基づく理論化学の発展や、分子性物質の伝導性や磁性などの物性研究の進展もあって、物理化学を中心とする分子科学は大きく発展した。その流れの中で、分子研は世界における分子科学研究のセンターとして確固とした地位を築いてきた。現在でも伝統的な分子科学の研究は分子研の研究の大きな部分を占めている。しかし、分子研のカバーする分野が増え、統合バイオセンターやナノサイエンスセンターが設立され、分子研での研究も多様化し、変わりつつあるように思われる。伝統的な分子科学が成熟し、化学とそれを取り巻く状況も変わりつつある現状を考えれば、これは当然のことであろう。重要なのは、この新しい流れの中で世界の分子科学をリードする独創的な成果を生み出す事である。分子研が新しい分野で大きな成果をあげ、世界に誇り得る研究センターになることを心から期待したい。

独創的な研究を生む要因は色々あるが、その一つとして、異なったバックグラウンドや異分野の研究者間の協力や交流がしばしば指摘されている。^{*}分子研は全国の大学から異なる分野の研究者を集め、外国人研究者も多く、このような協力や交流を行い易い環境にある。近くには基生研や生理研もあり、昼食時には食堂で異分野の研究者とのディスカッションも容易にできる。このような環境を大いに生かし、自分の専門の枠を越えて他分野の研究者とも積極的に交流し、インパクトの大きい独創的な研究を生み出して欲しい。

^{*})たとえば、Cambridge大学のLaboratory of Molecular Biologyの成功の一因として、この点が指摘されている。Science Vol. 300, 278 (2003)

分子研レターズ 48 目次

巻頭言

分子研への期待

廣田 襄 1



研究紹介

磁気共鳴法による分子性導体の電荷分離と電荷秩序配列研究
中村敏和 4金属酵素が機能を制御する分子メカニズムをさぐる
藤井 浩 8

New Lab (研究室紹介)

大腸菌は組換えタンパク質の夢を見るか? 青野重利 13

「分子」概念のフロンティアを目指して 小川琢治 16

リフレッシュして 菱川明栄 18

New Lab (流動研究部門紹介)

大気圧放電プラズマによる環境対策技術とDNA一分子操作
水野 彰 20

着眼大局着手小局 高橋正彦 23

基礎物性評価とデバイス開発のワイドギャップ 解良 聡 26



レターズ

最近思うこと 中村宏樹 29

ニュース

超高速コンピュータ網形成プロジェクト(NAREGI)
「ナノサイエンス実証研究」拠点の紹介 平田文男 31

第13回オープンハウス 佃 達哉 36

分子研を去るにあたり

駆け出しの頃の出会いの幾つか 鈴木俊法 38

9年4ヶ月 片岡英樹 40

トランジション 高口博志 41

得意技 大竹秀幸 42

流動研究部門を去るにあたり

やっとかなったサバティカル 小宮山政晴 43

流動部門での刺激的な2年間 奥平幸司 44

流動部門を終えるにあたり 久保園芳博 45

流動部門を終えるにあたり 高嶋圭史 47

外国人研究員の印象記

Research Life in IMS Ha-Jin Lee 48

Impressions about IMS and Japan Nicolaie PAVEL 50



	受賞者紹介	
	岩村秀名誉教授に学士院賞	52
	笠井俊夫教授に日本化学会学術賞	53
	松尾司助手に日本化学会進歩賞	54
	鈴木研二氏に日本化学会第 83 春季年会学生講演賞	55
	客員外国人研究員の紹介	
	Prof. KUMAR, Krishna, Subbarao Venkata	57
	Prof. DAS, Puspendu Kumar	58
	Prof. YOON, Cheol Min	59
	Prof. KIM, Younkyyoo	60
	Prof. MORGUNOV, Roman	60
	Prof. VAROTSIS, Constantinos	61
	新人自己紹介	63
	総合研究大学院大学	79
	学位取得者及び学位論文名 / 新入生紹介	
	新装置紹介	
	マイクロ結晶構造解析装置	82
	文部科学省ナノテクノロジー総合支援プロジェクト「分子物質総合成・解析支援」における透過電子顕微鏡、走査電子顕微鏡、集束イオンビーム加工観察装置の運用開始	84
	COE コンファレンス報告	86
	課題研究報告	
	動的電子状態に基づいた光スイッチング分子の開発	89
	国際研究協力事業報告	
	第 10 回日韓合同シンポジウム	99
	分子研研究会開催一覧	102
	分子研コロキウム・分子科学フォーラム 開催一覧	103
	共同研究実施状況	104
	海外渡航一覧	106
	人事異動一覧	108
	編集後記	116

磁気共鳴法による 分子性導体の電荷分離と電荷秩序配列研究

分子集団研究系物性化学研究部門 中 村 敏 和

1. はじめに

「絶縁体と考えられている有機物質が電気を流し、超伝導にすらなり得る。」というエポックメイキングな事がこの四半世紀のうちに実現され、しかもこの分野を専門としない研究者にまで当たり前の事のように受け入れられているという現実は、よくよく考えれば驚くべき事である。著者のような若手(いや中堅か!?)が言うのは恐れ多いが、このことはこの分野の研究者のたゆまない努力によるものである。さらに、この分野の発展の中心的な部分に日本人の研究者が関与し(OB・OGを含めた多くの分子研研究者が!)、リーダーシップを発揮してきたことは特筆すべき事である。

これまでの精力的な研究により、いわゆる分子性導体・超伝導体の基本的な概念や巨視的な性質はかなり明らかになってきている。さらに現在は、種々の競合する電子相の発現機構や異常物性の起源、複合スピン系の多元物性などが注目を浴びている。必ずしもすべての研究者が応用を考えているわけではないだろうが、少なからず「新規な機能を持たせる」、「機能発現を制御する」といったことが、根底に有るものと考えられる。そういった最近のトピックスのひとつとして、電荷分離(電荷秩序)現象があげられる。これは著者が前所属の学習院大学時代から関わってきた問題であるが、現在ではキャリア濃度

の小さい強相関電子系の普遍的な現象として認知されている。さらに、今回紹介するTMTTF系では強誘電転移の可能性も指摘されており、物性物理の問題だけでなく機能性の観点からも興味を持たれている。

2. TMTTF系の新展開

TMTTF(図1)は、いわゆる分子性導体第一世代に属するフロンティア時代の分子である。 $(\text{TMTTF})_2\text{X}$ と称される一連の物質群は、分子が一方方向に積層した擬一次元電子構造を為している。室温では金属的な電気伝導性を示すが、温度を下げていくとほとんどの塩で100 K以上の比較的高温から絶縁体的に振る舞うようになる。そのため、超伝導体開発を中心とした(少なくとも当時の)物質開発のメインストリームは、超伝導体を与えるSe誘導体のTMTSF系や第二世代のBEDT-TTF系へ徐々に移っていった。しかしながら最近になって、八面体対アニオンを持つ $(\text{TMTTF})_2\text{MF}_6$ ($M = \text{P}, \text{As}, \text{Sb}$)において、誘電率測定¹⁾・¹³C NMR測定²⁾から、低温で誘電率が強誘電的挙動を示す、同じ温度領域でTMTTF分子の電荷状態が不均一になっている(電荷分離状態)ことが報告され、再び注目を浴びている。電荷分離状態の存在は、TMTTF系の低温絶縁状態がTMTTF二量体で1スピン(half-filled)というモット絶縁体であるというこれまでの解釈に再検討を投げかけるものである。また、強誘電現象は多方面からの応用が期待できるのと同時に、このような比較的小さな分子から構成される分子性伝導体で本当に強誘電現象が起こっているとすれば非常に興

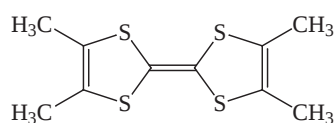


図1 TMTTF分子

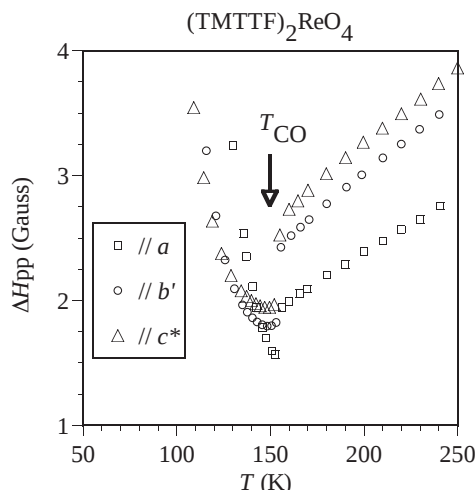


図2 (TMTTF)₂ReO₄塩のESR線幅の温度依存性。154 Kでスピン重項転移とともに電荷分離を起こす。

味深い現象である。ミクロな観点からの電荷状態の詳細や発現機構の解明が急務であり、我々は磁気共鳴測定 (ESR・NMR) の観点から(TMTTF)₂X系の電荷局在状態研究を行っている。

3. TMTTF系のESR

今さら著者があらためて言うまでもないが、分子性導体の興味深い点のひとつとして、(電子物性に直接は関与しないと考えられている) 閉核アニオンの形状やサイズをかえるだけで多彩な電子相が実現できることがあげられる。(TMTTF)₂X系の物質群は、結晶構造は同じで格子常数もほとんど変わらないにもかかわらず、カウンターアニオンXの違いにより、スピン重項・スピンパイエルス・反強磁性といった種々の基底状態をとる。また後述するように、常磁性絶縁相の挙動もカウンターアニオンの違いにより異なっていることが分かる。カウンターアニオンの違いにより、なぜ発現する電子相が違うのかが分かれば、低次元電子系の電子状態解明とともに、そのまま機能性制御の手がかりを得ることになる。我々は種々のカウンターアニオンを持つ一連のTMTTF塩について、系統的なESR研究を行った。³⁾

高温金属相では、一連のTMTTF塩についてESR

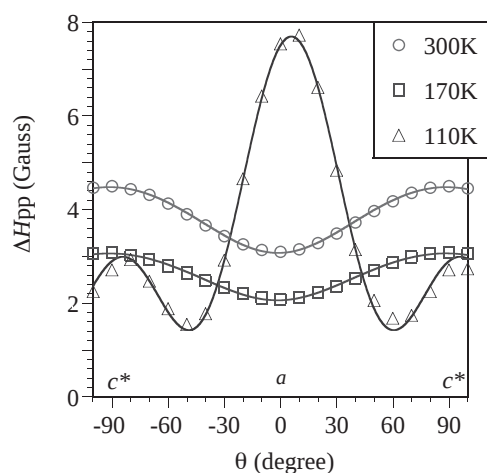


図3 金属相 (300 K)、絶縁相 (170 K)、電荷分離相 (110 K) における(TMTTF)₂ReO₄塩のESR線幅の角度依存性。電荷分離相では線幅の異方性が変化しており、磁気双極子相互作用が支配的であることが分かる。

挙動に定性的な差は見られないが、低温常磁性絶縁相ではESRパラメーター挙動に明瞭な差が見られる。特にESR線幅の異方性に注目するとTMTTF系は、四面体カウンターアニオンReO₄・ClO₄塩 (Type I) 八面体カウンターアニオンSbF₆・AsF₆・PF₆塩 (Type II) 小さいカウンターイオンBr・SCN塩 (Type III) の3つのグループに大別できる。基底状態に落ちる温度よりかなり高温ですでにESR挙動に大きな違いがあることは、常磁性絶縁状態の電子状態がこの3つのグループで異なっていることを強く示唆している。

Type I: 四面体アニオンは結晶中では二つの配向自由度がある。室温では熱運動によりランダムな配向を取っているが、低温のある決まった温度で秩序化し超格子を形成することが知られている。このアニオンが秩序化温度で、磁化率は急激に減少しスピン重項状態になる。ESR線幅はこのアニオン秩序化温度でjumpし、低温で異方性の変化とともに急激な線幅の増加を示す (図2)。ESR線幅異方性が変化しているということは、線幅の起源が変化していることを意味している。実際ESR線幅の角度依

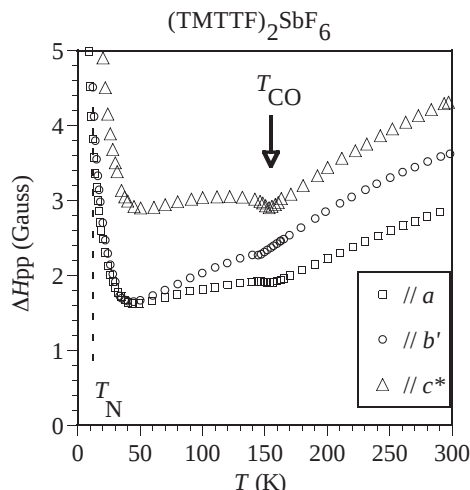


図4 (TMTTF)₂SbF₆塩のESR線幅の温度依存性。150 Kに線幅の異常があり、その温度以下で異方性が変化していることが分かる。30 K以下の線幅の急激な増大は反強磁性揺らぎの発達によるもので、今回の話題とは直接は関係ない。

存性の解析から（図3）高温金属相の線幅は伝導電子の緩和が支配的であること、低温絶縁相では磁気双極子相互作用が支配的であることが分かる。各分子上の磁気モーメントの大きさは電荷量にスケールすると考えられるので、低温相での線幅の異方性を調べることで電荷分離状態に関する知見を得ることができる。分子が一元的に積層している a 軸方向の線幅が増大していることから、図6(a)のように一次元鎖方向に $-o-o-O-O-$ タイプの電荷秩序状態が起こっていることが示唆される。この結果は最近の岡山大野上らによる低温X線構造解析の結果⁴⁾と合致している。

Type IIのグループでは誘電率等に異常が観測される温度で、図4のようにESR線幅はhumpを示し、その温度以下で徐々に異方性が変化する。しかしながら、異方性はType Iとは異なり、二次元面内ではほぼ等方的である。このことから、例えば図6(b)のように、電荷秩序状態は一次元鎖方向に $-o-O-o-o-O-$ で、鎖間では濃淡が互い違いになっているのではないかと推測できる。仮にこのモデルに

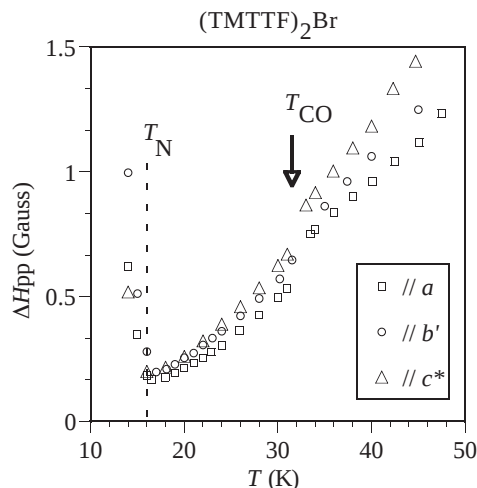


図5 (TMTTF)₂Br塩のESR線幅の温度依存性。30 Kで線幅がjumpし、その温度以下で異方性が変化している。低温での線幅の異方性はReO₄塩ともSbF₆塩とも異なっている。

立てば、電荷秩序超格子の波数ベクトルは元のブラッグ反射と変わらず、X線で構造転移が観測されないことと矛盾しない。

Type IIIのグループでは、ESR線幅に大きな異常は観測されないが、反強磁性転移直上でType I、IIとは違った異方性の変化が観測される（図5）。低温では一次元鎖の鎖間方向に線幅が大きいことから、図6(c)のような一次元鎖方向に $-o-O-o-O-$ で鎖間では電荷の濃淡が揃っているような電荷配列が考えられる。この配列パターンは、我々が以前この系の反強磁性相に対して行った¹H NMRの結果⁵⁾から示される磁気構造と合致しており、モデルの妥当性を支持している。さらに、SCN塩においては低温X線構造解析の結果⁴⁾とも合致している。

4. ¹³C NMR測定

¹³C NMRからは、局所的な¹³C核をプローブとして、超微細結合を通じて相互作用している常磁性電子の情報が得られる。我々は、電子密度が大きい分子中央部の二重結合部を選択的に¹³C同位体置換したTMTTF分子を合成し、¹³C NMR測定を行っている。NMR吸収線はTMTTF分子の超微細結合つまり

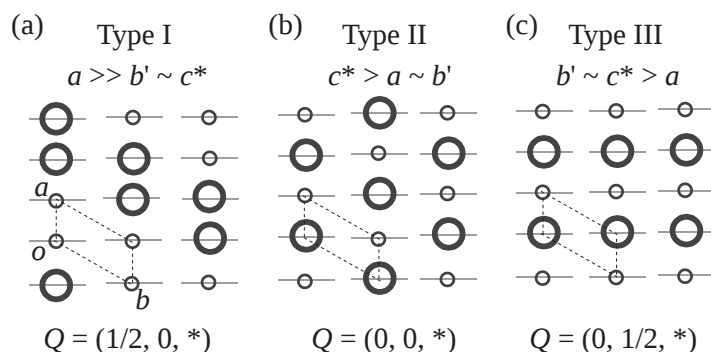


図6 考え得る伝導面内における電荷局在配列のモデル。横線がTMTTF分子1個を表しており、○が電荷の大きさを表している。a軸が分子積層方向で、b方向がside-by-sideで分子が接近している方向。(a) Type I、(b) Type II、(c) Type III。

電荷状態を反映している。NMR吸収線の温度変化から ^{13}C 核上の電荷密度分布を見積もることが出来る。また、NMRスピン格子緩和率からスピン（電荷）のダイナミクスに関する情報を得ることが出来る。紙面がつかたので、NMR結果の詳細は別の機会に紹介するが、SCN塩の ^{13}C NMR吸収線はアニオン秩序化相転移温度で分裂が起こり、 ^{13}C サイトの電荷状態が非等価になっていることを示唆している。さらに AsF_6 等種々の塩についても測定を行っており、TMTTF分子の電荷状態について考察を行っている。

5. おわりに

TMTTF系に限らず分子性導体は、一般に電子構造は比較的単純でありながら、出てくる電子相は多彩である。物質の機能性を考える上でもパラメーターが少なく非常に有利な系である。つまり、分子性導体は「物性物理のモデル物質」であると同時に「新しい機能をもちうる物質群」と、とらえることが出来る。結晶のみならず分子性の凝縮系は、将来にわたってもますます発展が期待できるものと考えている。

^{13}C NMR測定は藤山茂樹博士が精力的に研究を行ってくれている。また、4月から総研大生として前田圭介君がメンバーに加わり、すでにESR測定を開始してくれている。TMTTF系の電荷秩序の考

察に関しては、内外の研究者と大いなる議論の結果によるもので、ここで謝意を表したい。

6. 参考文献

- 1) P. Monceau *et al.*, *Phys Rev. Lett.* **86**, 4080 (2001).
- 2) D. S. Chow *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1698 (2000).
- 3) T. Nakamura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **72**, 213 (2003).
- 4) Y. Nogami and T. Nakamura, *J. Phys. IV France* Pr9-145 (2002).
- 5) T. Nakamura *et al.*, *Synth. Met.* **70**, 1293 (1995).

金属酵素が機能を制御する分子メカニズムをさぐる

統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域 藤 井 浩

1. はじめに

私たちの体の中にはたくさんの金属酵素と呼ばれるタンパク質が存在し、私たちの生命活動を支えている。金属酵素は、金属イオンを含む酵素を意味し、多くの場合、この金属イオンが酵素反応と直接関係している。例えば、体中の鉄分が足りなくなると貧血を起こすのも、赤血球中のヘモグロビンと呼ばれる金属タンパク質が関係している。私たちが必要とする金属イオンは、鉄、銅などわずか十数種類だが、金属酵素が行う反応の種類は莫大な数になる。どうしてわずかな金属イオンからこんなにたくさんの種類の反応ができるのであろうか？ 私たちの研究グループでは、この問題に答えるため金属酵素がどのようなからくりで働いているかを分子レベルで研究している。金属酵素の研究と聞くと生化学のように思われるが、酵素も1つの分子であり、生体内の分子科学である。ここでは、私たちのグループが行ってきた酸素活性化に関わる金属酵素の研究を紹介する。

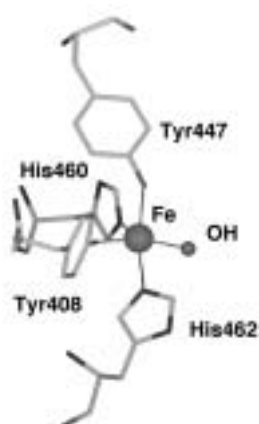


図1 カテコールジオキシゲナーゼの活性中心の構造

2. 金属イオンの電子状態が酵素の反応場の形を決める

私たち地球上の生物の多くは、呼吸により酸素を体内に取り入れて生活している。体内に取り込まれた酸素は、生活のエネルギーを作るため、体内に侵入してきたバイ菌をやっつけるため、生理活性物質の合成や代謝などさまざまな目的に使われる。生物が酸素をさまざまな目的に使うために多くの金属酵素が働いている。その一例としてカテコールジオキシゲナーゼの活性中心のX線結晶構造解析を図1に示した。この酵素は、地中のバクテリアの中で酸素活性化を行い芳香環の代謝過程に関わっている。活性中心には鉄イオンがあり、ここで反応が起こる。鉄イオンには、チロシン残基のフェノレート基が2つ、ヒスチジン残基のイミダゾール基が2つ、水分子が1つ配位し、全体として三角両錐の特異な構造をとっている。私たちのグループでは、この酵素の活性中心の構造と酸素活性化機構の関わりを解明するため、この活性中心のモデル化を試みた。この酵素のモデル錯体を作るために、サレンに着目した。サレンは、1分子内にフェノレート基を2つ、イミン基を2つもち、酵素と類似の活性中心をとることが期待できる。しかし、サレンは平面性の高い配位子であるため、分子間相互作用によりダイマーを容易に形成してしまう問題があった。酵素では、タンパク質が活性中心を分子間相互作用から保護している。そこで、立体的にかさだかいメシチル基(2,4,6-トリメチルフェニル基)をサレン配位子の周囲に導入し、酵素のタンパク質のように活性中心を保護する

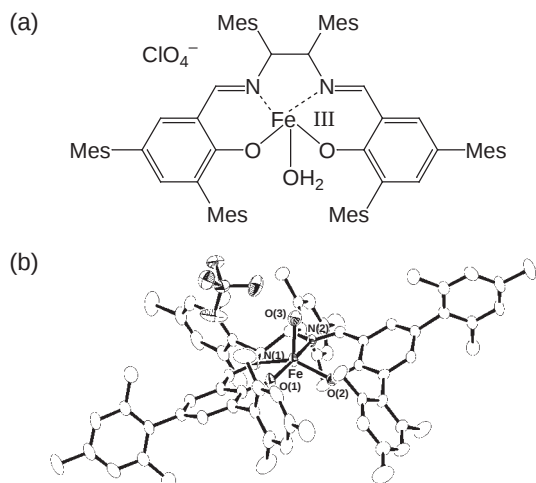


図2 カテコールジオキシゲナーゼのモデル錯体 a) とそのX線結晶構造 b)

ことを試みた。図2(a)に示すような立体障害をもつサレン鉄錯体の合成を行った。酵素と同様に水分子が配位したサレン鉄錯体を合成し、その構造をX線構造解析した。結果を図2(b)に示したが、サレンに導入したメシチル基が活性中心を分子間相互作用から保護していることがわかった。さらに興味深いことに、この錯体の配位構造はこれまでに報告されているサレン鉄錯体とは大きくことなり、平面構造から大きく歪み、酵素と類似の三角両錐構造になっていることがわかった。配位子を酵素のものと類似させたら、配位構造までも似る結果となった。どうしてサレン配位子が大きく歪み、三角両錐構造になったのであろうか？ 今回サレンに導入したメシチル基同士の立体反発による歪みと考えられたので、さらにこの配位子を使ってこれまで多く報告されている塩素イオン錯体を合成した。構造解析を行って結果、塩素錯体は水錯体ほど歪んでおらず、むしろこれまでのサレン錯体と同様の四角錐構造であることがわかった。この結果は、水錯体が三角両錐構造をとるのはメシチル基の立体障害でないことを示した。そこで次に水配位子の影響を検討するため、さらにいくつかの錯体の構造解析を行った。図3に外部配位子とサレン錯体の構造ひずみの関係を示し

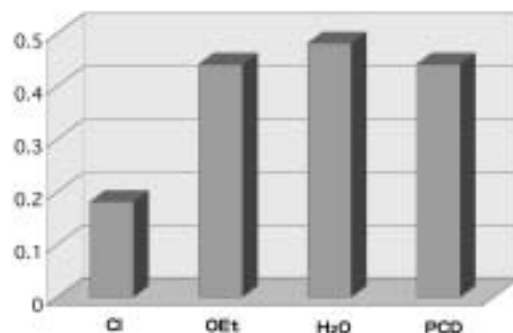


図3 外部配位子とサレン錯体の構造ひずみの関係
縦軸は τ 値を示し、0が四角錐構造、1が三角両錐構造であることを示す。横軸は、外部配位子を示す。Cl：塩素錯体、OEt：エソキシド錯体、H₂O：水錯体、PCD：カテコールジオキシゲナーゼ

た。興味深いことに、サレン錯体に配位する外部配位子のドナー性が大きくなるにつれ、錯体の歪みが大きくなることがわかった。つまり、錯体の立体的な要因で歪んだのではなく、電子的な要因で歪んだことを示した。これをさらに検証するため、置換基のないサレン錯体のDFT計算を行い、最適構造を求めてみた。結果は、先の実験結果と一致し、構造歪みが電子的な要因によることを支持した。水分子からの電子供与が d_{z^2} 軌道のエネルギーを上昇させたため、それを補うために $d_{x^2-y^2}$ 軌道のエネルギーを低下させる必要があり、結果として配位子が三角両錐構造に変化したと考えられた。今回の結果は、カテコールジオキシゲナーゼの三角両錐構造がタンパク質からの立体的な要因によるものではなく、鉄イオンに配位した水分子の電子的な要因によることを示した。さらにこの水配位子は、酵素反応にも関係していると考えられる。水配位子からの電子供与は、基質からの電子移動を起こりにくくするため、酵素反応を阻害する。基質の配位による水配位子の解離が、酵素反応の進行には必須であると考えられる。

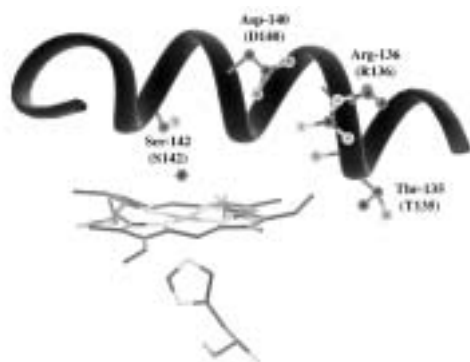


図4 ヘムオキシゲナーゼの活性中心の構造
タンパク質内のアミノ酸の配列はN末端からかぞえられる。たとえばThr-135はN末端から135番目にスレオニンがあることを意味する。

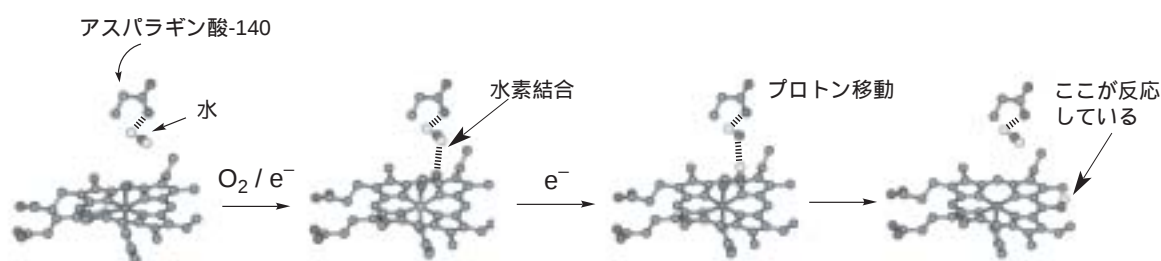


図5 ヘムオキシゲナーゼによる酸素活性化機構

3. タンパク質が作る水素結合ネットワークが酵素機能を制御する

金属酵素の活性中心にある金属イオンは、金属酵素にとっては必須であるが、金属イオンの力だけで酵素反応はできない。実際、鉄錯体を使った酸素の活性化は非常に困難であり、たとえ酸素活性化してもその反応性を制御できず、酵素のような選択的な反応はできない。酵素が酵素たる所以は、やはりタンパク質にある。ここではヘムオキシゲナーゼという私たちの肝臓で胆液を作っている酵素を題材に、酸素活性化や酵素の機能制御にタンパク質がどのように関わっているかを研究した成果を報告する。

ヘムオキシゲナーゼは、私たちの肝臓や脾臓、さらには脳や睾丸に多く存在する。肝臓や脾臓にある酵素は消化液の一つである胆液を作ることに関わり、脳や睾丸にある酵素は生体内情報伝達物質である一酸化炭素の合成に関わっていると考えられている。興味深いことに一酸化炭素は私たちの体には有毒であるにもかかわらず、体の中で合成されて情報伝達（たとえば概日リズム）にかかわっている。ヘムオキシゲナーゼは、約30年前に初めて生体細胞から

単離され、研究が進められてきたが、多くの不明な点があった。その一つに、この酵素がいかにして酸素を活性化しているかという点であった。私たちは、ヘムオキシゲナーゼの活性中心にあるアミノ酸残基がこれに関わっていると考え（図4）、それらのミュータント酵素を作成した。図4に示すように、スレオニン-135、アルギニン-136、アスパラギン酸-140、セリン-142をそれぞれアラニンに置換したミュータントを作成し、それらの酵素機能を研究した。その結果、アスパラギン酸-140が酵素機能を支配するアミノ酸残基であることを見いだした。さらに、アスパラギン酸-140をグルタミン酸、アスパラギン、ロイシン、フェニルアラニンに置換したミュータントの作成を行い、詳細な研究を行った結果、アスパラギン酸は酸素分子活性化に必要なプロトンを提供していることが明らかとなった。図5に本研究による酸素活性化機構を示す。ヘムオキシゲナーゼに取り込まれたヘムは、鉄3価から鉄2価に還元された後、酸素錯体を形成する。アスパラギン酸-140は、ヘム鉄に配位した酸素分子と直接水素結合を作るには遠く、水分子がこれらの間に入り水素結合ネット

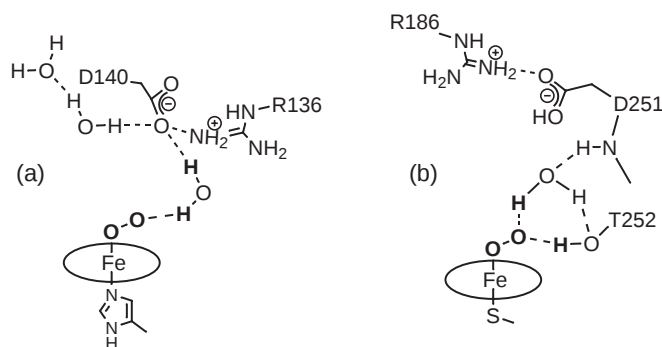


図6 ヘムオキシゲナーゼとチトクロームP450の酸素活性化反応中間体の構造の違い
(a) ヘムオキシゲナーゼ、 (b) チトクロームP450

ワークを形成する。水素結合の存在により、酸素錯体の還元電位は大きく上昇し、さらにもう一電子還元を受けることができるようになる。実際、アスパラギン酸-140をミュートンションして水素結合ネットワークを切断すると、酸素錯体までは生成するが、プロトンがないため次の電子が入らない。ヘム鉄に配位した酸素分子は、還元酵素からさらに一電子もらい、ハイドロパーオキシまで還元される。ヘム鉄に配位したハイドロパーオキシは、水素結合によりヘムの α メソ炭素方向に配向が固定される。そのため、生成したハイドロパーオキシは α メソ炭素だけを選択的に水酸化するのである。

この結果から次に、どうして酸素活性化をする酵素が生体内にはいっぱいあるのにそれぞれの働きが違うのだろう、という疑問がわいてくる。この疑問に対する答えを探すため、これまで酸素活性化酵素としてよく知られたチトクロームP450とヘムオキシゲナーゼを比較してみた。チトクロームP450は種々の外部基質を水酸化できるが、ヘムオキシゲナーゼのようにヘムを代謝できない。逆にヘムオキシゲナーゼは、種々の外部基質を水酸化できない。何が二つの酵素のそれぞれの機能を支配しているのか？ 図6にそれぞれの酵素の酸素活性化反応中間体の構造を示した。チトクロームP450では、ミュートンションの実験からスレオニン残基とアスパラギン酸残基が酸素分子活性化に必須であることが示

されている。これらの残基は近傍に存在する水分子と水素結合ネットワークを形成して、ヘム鉄に配位した酸素分子にプロトンを供給する。これは、先の書いたようにヘムオキシゲナーゼの酸素活性化機構と同じである。ところがチトクロームP450では、スレオニンとアスパラギン酸の二つの残基が機能しているため、酸素分子にプロトンを供給する経路が2つある。そのため活性化された酸素分子はO=O結合の解裂により一方の酸素原子を水として放出することができる。結果として鉄5価オキシ種を生成し、これが非常に活性なため、そばにいる外部基質を水酸化するのである。一方ヘムオキシゲナーゼでは、アスパラギン酸-140しか水素結合ネットワークに関与していない。そのため、活性化された酸素分子はO=O結合の解裂により水を放出し、鉄5価オキシ種を生成できない。したがって外部基質を水酸化することができない。そのかわりにハイドロパーオキシ種が近傍にいたヘムを酸化し、ヘム代謝へとつながるのである。つまり、チトクロームP450では二本の手で酸素結合を引っ張るためO=O結合が切れてしまうが、ヘムオキシゲナーゼでは一本の手でしか引っ張れないためO=O結合は切れなかったのである。結果としてこれが、これらの酵素の反応を異なったものにしたと考えられる。酸素活性化を行う金属酵素の機能は、水素結合ネットワークの形態にあると考えられる。

4. おわりに

ここで紹介した研究の詳細は最後に示した文献を参考ください。これらからさらに基礎的な研究を積み重ねていき、自然のからくりの美しさの一部でも見ることができればと思っている。また、酵素機能発現に必要な因子がわかり、それらを組み換えることにより、酵素の機能を目的に応じて自由にコントロールできるようになればと夢見ている。

最後に、ここで示した研究を共に進めてくれた倉橋拓也博士（助手）に感謝する。また、X線構造解析をご指導いただいた戸村正章博士（ナノサイエンスセンター）に感謝する。

参考文献

- 1) H. Fujii and Y. Funahashi, *Angew. Chemie. Int. Ed.* **41**, 3638–3641 (2002).
- 2) H. Fujii, *J. Am. Chem. Soc.* **124**, 5936–5937 (2002).
- 3) H. Fuji, X. Zhang, T. Tomita, M. Ikeda-Saito and T. Yoshida, *J. Am. Chem. Soc.* **123**, 6475–6484 (2001).
- 4) R. Davydov, V. Kofman, H. Fujii, T. Yoshida, M. Ikeda Saito and B. M. Hoffman, *J. Am. Chem. Soc.* **124**, 1798–1808 (2002).



大腸菌は組換えタンパク質の夢を見るか？

統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域 青 野 重 利

平成14年5月に、北陸先端科学技術大学院大学から異動となり、岡崎に着任しました。本来であれば、前回発行された分子研レターズに掲載されるような原稿を用意しないといけなかったのですが、私の怠慢のため、時期遅れな研究室紹介となってしまいました。New Lab 欄に載るのは、多少、賞味期限切れかも知れませんが、御容赦下さい。

昨年5月に着任したものの、実験装置と学生は10月末まで前任地に残ったままでした。その間、私は岡崎でデスクワークのみの日々を送る事となりました。前任地では、私自身も、ほぼ毎日フルタイムで実験することができ、体もそのペースに慣れていたのが、約半年のデスクワークですっかり墮落してしまい、なかなか現場復帰できそうにありません。そんな中でも、平成15年1月に、助手の中島洋さんが着任、4月には小林克彰君（IMS フェロー）、稲垣さや香さん（総研大D1）、吉村英哲君（総研大D1）の3名が新たにメンバーに加わり、やっと研究室を本格的にスタートさせる事が出来ました。（……と思っていたら、中島さんが5月に名古屋大学に助教授として異動し、またしばらくは助手不在の期間が続きそうです。）

現在、私の研究グループでの主要な研究テーマは、「気体分子センサー機能を有する金属タンパク質の生物無機化学的研究」です。以下に、その内容について簡単に紹介致します。我々人間を始めとし、植物、微生物に至るまで、さまざまな気体分子が生体機能の発現と深く関わりあっています。例えば、酸素は、酸素呼吸における電子受容体として機能する

のを始めとし、様々な生体内酸化還元反応の基質として機能しています。酸素以外にも、二酸化炭素、一酸化炭素、メタン、エチレン、水素、窒素、 N_2O 、 NO 等が、酵素の基質、あるいは反応生成物となることが知られています。このように、気体分子が酵素反応に関与する例は、比較的多く知られており、研究も進んでいます。これに対し、近年、気体分子の新たな機能として、気体分子がシグナル分子として機能し、様々な生理機能の制御に関与することが報告され始め、多くの研究者の注目を集めています。気体分子がシグナル分子として機能するためには、生体側に気体分子を感知する何らかの仕組みが必要です。そのような仕組みとして、気体分子のセンサータンパク質が存在しています。我々は、気体分子センサータンパク質のなかでも特に、一酸化炭素センサータンパク質CooA、および酸素センサータンパク質HemATを対象として研究を進めています。

一酸化炭素が呼吸毒であることは、皆さんよく御承知の通りです。ところが、微生物（細菌）の中には変なヤツもいて、一酸化炭素を「餌」にして元気に育つものがいます。この細菌（*Rhodospirillum rubrum*という名の光合成細菌）は、さまざまな条件下で生育可能な、環境順応性の高い細菌です。例えば、この細菌は、酸素存在下では酸素呼吸で生育します。嫌気（酸素がない）条件下でも、光照射下においては、光合成により生育します。さらに、暗所、嫌気条件下においても、一酸化炭素が存在すれば、一酸化炭素を唯一のエネルギー源として生育することも可能です。酸素呼吸、光合成、一酸化炭素

代謝では、それぞれの反応に関与する酵素は全く異なっており、それらは必要な場合にのみ、細菌中に発現します。例えば、一酸化炭素代謝に関与する酵素は、この細菌が嫌気条件下で一酸化炭素が存在する条件におかれた場合にのみ、この細菌中で合成され、一酸化炭素の代謝反応を行います。この時、一酸化炭素の存在をセンシングして、一酸化炭素代謝に関与する酵素の発現をオン・オフ制御しているのが、CooAと呼ばれるタンパク質です。

CooAは、一酸化炭素の有無を感知し、一酸化炭素が存在する場合にのみ、一酸化炭素代謝に関与する酵素をコードしている遺伝子の発現を誘導します。CooAによる遺伝子発現制御は、転写（DNAを鋳型としてメッセンジャーRNAが合成される反応）レベルでなされています。すなわち、CooAは一酸化炭素センサーであるとともに、転写反応をオン・オフ制御する転写調節因子としての機能も有していることが分かります。CooAは、一酸化炭素センサーの活性中心として機能するヘム（鉄プロトポルフィリン錯体）を有しています。分子中のヘムに一酸化炭素が配位することにより、一酸化炭素がセンシングされていると考えられますが、その詳細な機構については不明な点が多く残されています。我々は、CooAによる一酸化炭素センシングの分子機構、一酸化炭素によるCooAの機能制御機構、およびCooAによる転写制御機構の解明を目指して研究を進めています。

酸素センサータンパク質としては、HemATと呼ばれるタンパク質を対象として研究を行っています。

我々が研究対象としているHemATは、枯草菌と呼ばれる細菌中に含まれており、枯草菌の酸素に対する正の走化性（酸素が存在する方に向かって泳いで行く性質）制御系において、酸素センサーとして機能しています。HemATにより酸素の存在が感知されると、そのシグナルが一連のシグナル伝達タンパク質を経由し、最終的に鞭毛の回転方向を変えることにより、細菌の運動方向が制御されます。HemATもCooAと同様、その分子中にヘムを含むヘムタンパク質です。興味深い事に、HemAT中のヘム結合ドメインは、酸素運搬作用を示すヘムタンパク質であるミオグロビンと、アミノ酸配列の相同性を示すことから、両者の立体構造は良く似ているものと予想されています。にも関わらず、ミオグロビンは酸素貯蔵、HemATは酸素センサーと、両者で異なった機能を示す理由については、まだ良く分かっていません。HemATに関しても、酸素センシング機構、ならびにHemATにより酸素がセンシングされた後のシグナル伝達機構の解明を軸に、研究を進めています。

CooA、HemATいずれも、もともとこれらのタンパク質が含まれている細菌中では、ごく微量しか存在しないため、それらを単離精製することは、ほとんど不可能です。しかし、遺伝子工学的な実験手法を用いれば、これらのタンパク質を大腸菌に大量に作らせる事が可能です。我々の研究グループでは、フラスコを利用して化合物を合成するかわりに、大腸菌を生きたフラスコとして利用して、これらタンパク質の合成を行わせています。大腸菌は、文句も



言わず、自分達が生きて行くには全く必要無いタンパク質を、せっせと合成してくれます。でも、それを精製する人間は、「発現量が少ない」だの、「発現したタンパクが不安定」だのと、文句や愚痴をこぼしながら、実験を行っています。

研究所の常として、研究室メンバーの人数は少ないですが、少数精鋭を目指し（目指すだけではなく、本当にそうならないと困るのですが……）、世界で認められる研究成果を挙げるべく、頑張っていきたいと思います。

もしこれを読んで、研究室を見てみたい、研究内容についてもう少し知りたい等、思われた方は、遠慮なく青野（aono@ims.ac.jp）まで御連絡下さい。

最後に、日本海側から岡崎に引っ越してきたの感想を記して終わりたいと思います。

味噌：八丁味噌（赤だし？）の味には、まだ慣れません。味噌カツにチャレンジする勇気ありません。

魚：コレステロール値を気にしながら食事をしている身にとって、美味しい魚を手に入れるのが大変なのは、ちょっとつらいです。子供たちも、美味しい回転寿司がないと文句を言っています。

冬の天気：冬に青空が広がり、布団も干せるのは嬉しいものです。

「分子」概念のフロンティアを目指して

分子スケールナノサイエンスセンター

分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門 小 川 琢 治

2003年2月1日付で分子スケールナノサイエンスセンター 分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門に着任しました。前任地は、1学年50名・60名という賑やかな所でしたので、こちらのアダルトな静けさにまだ慣れていません。一緒に来てくれた大学院生5名も、大学と同じつもりで実験室でがらが音楽を掛けるので周りの人に迷惑ではないかと冷や冷やしております。(私自身も研究室で音楽を掛けていますが、迷惑なようであればお知らせ下さい。)

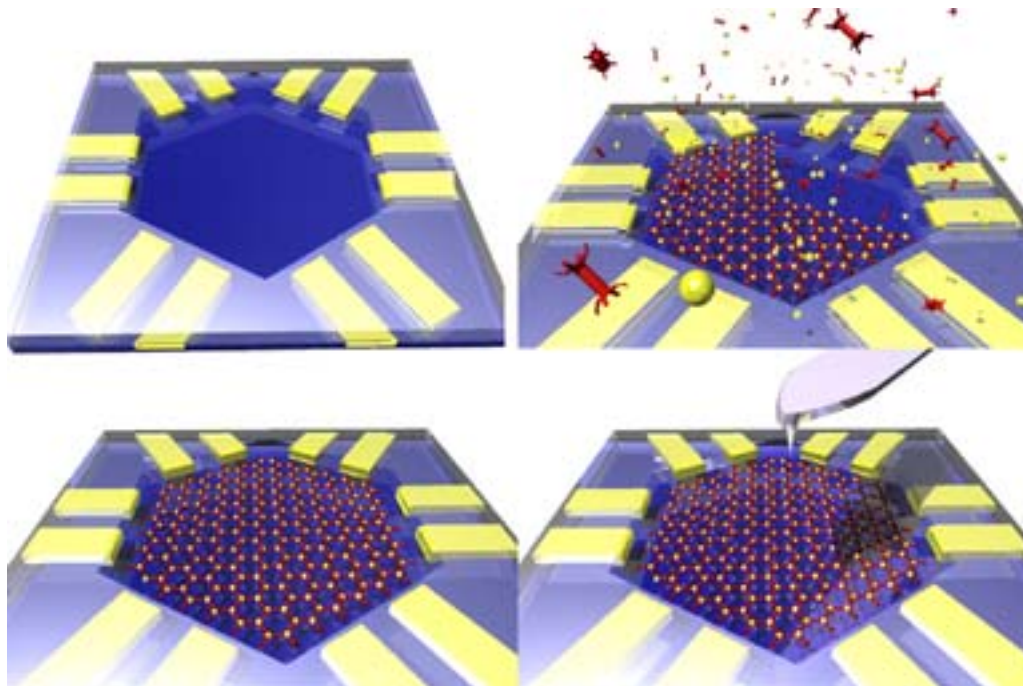
研究室メンバーは、現在上記の大学院生5名と、科学技術振興事業団の経費で来て頂いているサンパウロ大学・化学研究所・助教授の荒木幸一さん(日系ブラジル人)です。今年の後期に、助手とIMSフェローが着任の予定です。本来私のグループが入るべき部屋はE地区に建設中で、現在は間借りですので、今年の後期から本格稼働で現在は開店準備中と言うところかもしれません。助手として来て頂く予定の人の得意技は、分子を使ったナノリソグラフィーと多探針走査プローブ顕微鏡です。荒木さんは、電気化学、錯体化学が専門です。大学院生の1名も実は社会人ドクターで元々の専門は分子ビームを扱う物理化学でした。私自身の専門は有機化学で、スタッフの専門分野は大きく異なりますが、全員が分子を使ったナノサイエンスへの強い情熱を持っていますので、相補的な良いグループ構成ができたのではないかと喜んでいます。

大学では教育の比重が高いため、学問の継続性が重視される組織構成になっており、学際的な研究やこれまでに無い新規領域の研究がやりにくい風潮が

ありました。上記のスタッフ構成も大学の講座制の中では不可能だったのではないかと思います。その意味で、ナノサイエンスセンターは新たな学際領域を開拓するのに最適の場所であると思っていますし、大学ではできない研究をしなくては存在意義が無いと考えています。

私たちのグループの研究目的は、有機分子をナノ構造体と考えて、さまざまな形状、電子状態の分子を作り、これを電子線リソグラフィーなどのような手法で作成した金属・無機半導体のナノ構造体と組み合わせて新たな物質群を作り、その電子・電気物性を研究しようというものです。もっとも手近なターゲットは、分子の大きさのギャップを持つ金属・無機半導体電極を作り、そこに少数分子を入れてその電気特性を測ることです。既に小さな分子では報告があり、量子化コンダクタンス、クーロンブロックード、コンドー効果などの興味深い現象が報告されています。しかしいずれの報告も、得られた物性から見て1分子が電極に入っているのであろうとの間接的な証拠しかなく、直接分子を見ながらその電気特性を計測した例はありません。これを実現するため、100 nm程度の大きさを持つ π 共役分子の合成と、その大きさにあった電極の作成を行ってきました。

その次の段階としては、より複雑な分子系を作り、より複雑な構造の電極に入れた物を作りその電子状態を計測することを考えています。分子は、分子同士の相互作用と分子・電極の相互作用により、単一の存在のときと異なるより高次の機能を出すことが期待できます。図にその概念図を示しました。この



図

目的に向けて、分子同士の相互作用を制御できる分子や、表面が原子レベルで平坦な電極の作成を行っています。

巨大有機分子の合成、分子・ナノ微粒子の自己集合、ナノリソグラフィー、走査プローブ顕微鏡による単分子観察、少数分子電気特性の計測などテーマが多岐にわたっており、それぞれに様々な技術的困難を超えていく必要がありますが、それが新たな学問分野を開拓していく醍醐味であろうと、スタッフ・学生ともども日夜努力しております。ご指導、ご鞭撻を賜りますよう、よろしくお願い申し上げます。

リフレッシュして

極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門 菱 川 明 栄

はじめまして、4月1日付けで東京大学大学院理学系研究科から着任しました。どうぞよろしくお願いいたします。

分子研には東京大学に助手として着任以来、学会に参加したり講演会によんでいただいたりして何度か訪れる機会がありましたが、私が初めて「分子研」の存在を強く認識したのは、博士課程1年から2年の終わりにかけて滞在していた留学先の研究室においてでした。もうかれこれ10年以上前のことになります。博士課程に進学してから分子の世界に強い関わりを持つようになった私は、それまであまり縁がなかった物理化学系の雑誌に目を通すようになりました。木の香りが強くただよい日が柔らかく斜めに差し込む静かな図書室で、調べものをしたり新着雑誌などをみていると、必ずといっていいほど目にとまったのが分子研からの報告でした。日本にもこんな際だった研究所があるのかと強い印象を受けましたが、その後まさにその場所に自分で研究室を構えるようになるとは、当時の私には全く想像がおよばないことでした。

4月の中旬に家族で岡崎に越してきて以来、早くも一月が過ぎようとしています。ようやく家の中の段ボール箱の山も残りわずかになり、ようやく岡崎市の5種類にもわたるゴミの分別にも、自宅の少しレトロな風呂釜にも慣れてきました。一方で研究室はといえば、たくさんの初動資金をいただいた上に、小杉先生が使っていた静かで居心地の良い部屋を譲っていただくことになりました。窓の外でまだつたないリズムでさえずるホトトギスに迎えられて、

分子研での新しい研究生活が始まりました。

さて肝心の研究室の紹介ですが、なにぶんまだ助手もおりませんので、当面、研究室構成員は私一人だけで、さらにしばらくは実験もお休みという状況です。前任地と比べてあまりのペースの変化に最初はずいぶんとまどいました。一方で自宅が研究室に近くなったおかげで家族と過ごす時間も増え、気分をリフレッシュして新しいことをじっくり考えるための貴重な時間が得られました。

これまでは、主としてレーザーを用いた孤立分子の光解離過程の研究を行い、特にここ数年はきわめて強いレーザー場の中で起きる分子の特異な振る舞いに関心を持って実験を進めてきました。一般に光吸収や衝突によって高いエネルギー状態におかれた分子は、その後、きわめて短い時間スケールで刻一刻とその構造をかえていき、最後に反応生成物となります。私たちの研究グループでは、分子ダイナミクスの理解へ向けての新たなアプローチとして、「シンクロトロン放射光および高強度超短パルスレーザーを用いた超短パルス軟X線光源の開発」と「超短パルス軟X線によるフェムト秒・アト秒分子ダイナミクスの実時間追跡」をめざして研究を進めています。

一般に、軟X線領域の高いエネルギーを持つ光を分子に照射すると、特定の原子の原子核近傍に存在する「内核電子」のイオン化がおきます。生成した自由電子は周りの原子に散乱されて放出されるので、標的とした原子の周りにはどのように原子が配置されているか、すなわち分子がどのような構造を持っているかをX線吸収スペクトルにみられる微細構造



の解析などによって調べることが可能です。

このような短パルス軟X線による反応追跡の手法は、あらかじめ標的分子の電子状態構造についての知識が必要とされないうえに、反応過程を直接分子構造の変化として捉えることができるため、クラスターや表面、溶液系などの複雑な系で起きる超高速現象に対して広く用いることができます。またアト秒領域の高い時間分解能が期待できることから、例えばこれまで困難であった強い光子場の中で進行する分子過程の研究に適応できると期待されます。最近の研究で、原子分子内のクーロン場の大きさに匹敵するほどの電場成分を持つ強光子場中における分子は、摂動領域に比べて質的に大きく異なった挙動を示すことが明らかにされてきました。なかでも、レーザーとの相互作用によって分子はその構造を大きく変えることが見いだされおり、強光子場において生成した「ドレストポテンシャル」の形状を反映しているものと考えられています。これまでこの構造変形過程は、光子場が消滅した後に残された解離生成物の運動量分布に基づいて調べられてきましたが、短パルス軟X線を用いることによって、きわめて強い光子場にさらされている分子の姿を実時間で追跡することが可能になると考えています。

超短パルス軟X線・極端紫外光による研究はこれまで未開拓の研究分野であり、ここで取り上げた研究テーマはその一例にすぎません。今までいた居心地の良い世界から大きく足を踏み出すのか、少しずつ歩いて気付いたら遠くにいることに気付くことになるのかまだ分かりませんが、自分の感性を信じて進んでいきたいと思っています。

最後になりましたが、着任にあたっては分子科学研究所小杉信博教授、東京大学大学院理学系研究科山内薫教授をはじめ多くの先生方にお世話になりました。この場を御借りして、御礼申し上げたいと思います。

大気圧放電プラズマによる環境対策技術とDNA 一分子操作

分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門 水 野 彰

1. ごあいさつ

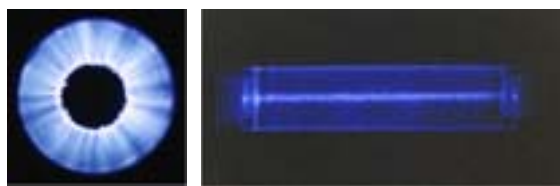
豊橋技術科学大学より流動研究部門に転任して参りました。茅先生、宇理須先生をはじめ、諸先生方にたいへんお世話になりました。深く御礼申し上げます。私は電気工学が専門で、高電圧放電を利用して空気中に浮遊するほこりを帯電させて集じんする研究を大学院時代に行い、3年間メーカーの研究所に勤務した後、豊橋技術科学大学に移りました。10年前にエコロジー工学系が新設された時に電気系から移り、新学科の立ち上げに参画してまいりました。今回、たいへん恵まれた機会をいただきましたので、分子研で新しい研究を立ち上げたいと思っております。豊橋は地理的にも近く、将来交流を深めることができたら、教育・研究両面でどちらにもメリットがあると思います。そのためのきっかけになることができたら、たいへん嬉しく思います。どうかよろしく願い申し上げます。以下に私が行ってまいりました研究を紹介させていただきます。

2. 高電圧放電プラズマによる環境対策技術

排ガス中の微粒子を、高電圧コロナ放電で発生するイオンにより帯電して浄化する電気集じん技術はすでに100年の歴史があり、公害防止に大きな役割を果たしています。針対平板電極などに高電圧を加えるだけで働き、フィルタと違って圧力損失がほとんど無いなどの利点を持っていますので、発電所や工場で広く使われています。パルス高電圧などを用いてコロナ放電を強くすると、大気圧条件下でも広い範囲を電離してプラズマを生成することができます(図1)。プラズマ中では酸素分子などから反

応性の高いラジカルが生成され、排ガス中の窒素酸化物の浄化や、有機揮発性ガスの分解などを行うことができます。最近、室内用空気清浄装置もプラズマを利用するものが多くなってきました。表面処理や殺菌などにも利用できます。また、ディーゼル自動車用排ガス浄化装置として実用化をめざして研究が行われています。

プラズマによるラジカル反応は強力ですが、選択性などに問題があります。例えば排ガス中に数100 ppm含まれている窒素酸化物をプラズマで除去するために、酸素、窒素、水あるいは二酸化炭素など、標的分子より圧倒的に数の多い分子がまず電離・励起されます。その後、エネルギーが徐々に移っていき、最後に窒素酸化物の除去反応が起こります。もし窒素酸化物分子に直接ラジカルを作用させることができれば反応効率が大幅に向上できます。このような反応を目指すひとつの方法として、比表面積の大きい吸着剤や触媒とプラズマとを組み合わせることで、標的分子を表面に長く留めて置き、ラジカル反応の確率を高めることができると考えられます。強誘電体充填層放電プラズマ(図1-b)はそのために用いられるプラズマ発生方法のひとつです。高周波交流電圧あるいはパルス高電圧を充填層に印加することで、強誘電体ペレットの接触点付近にプラズマが発生します。強誘電体ペレット表面に吸着剤あるいは触媒を担持します。実験的にはプラズマと触媒との組み合わせが有効であることが示されますが、そのときの表面での反応機構がどうなっているか、わかっておりません。たいへん興味深い研究課題であると思っております。このメカニズムの解明を少



(a) パルスストリーマ放電



(b) 充填層放電

図1 大気圧放電プラズマ

しでも進めたいと思っております。討論などいただけますよう、お願い申し上げます。

3. 一分子DNAの操作と計測

電気集じんはコロナ放電で発生するイオンで浮遊する微粒子を帯電して、電気的な力で集じん電極に付着させてガス流から微粒子を除去するものです。微粒子の帯電量は概ね表面積に比例します。重力が粒子径の3乗に比例しますので、粒子径が小さいほど相対的に電気的な力が強くなります。このためマイクロマシンなど、小さいものを動かすときの駆動力は電気力が有利になります。上述の電気集じんの原理は、電気泳動によるDNAやタンパク分子の分離技術と基本的に同じです。微粒子の静電気力による制御は、複写機や自動車の静電塗装など多くの産業に応用されています。

10数年前に、ほこりなどの微粒子のかわりに細胞やDNA一分子を取り扱うことにも興味を持ち、電気力とレーザートラッピングを用いた操作方法の研究を行ってきました。クーロン力だけでなく、不平等電界で働くグラディエント力やレーザーを急激に絞ることで微粒子を捕捉するレーザートラッピング (Laser tweezers) も有用です。

DNA分子は、良く知られていますように直径2 nmの二重鎖の分子で、これを電極として高電圧を印加したら、髪の毛のように電界に沿って伸び、結

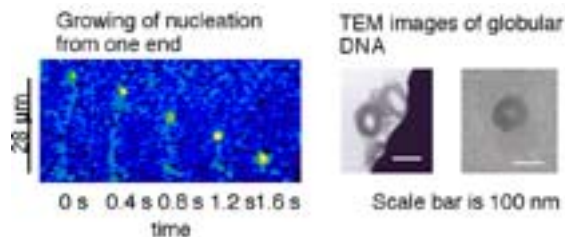


図2 T4 DNA グロビュールへの相転移 (T4 DNA, Condensing reagents; PEG/MgC12, spermidine)

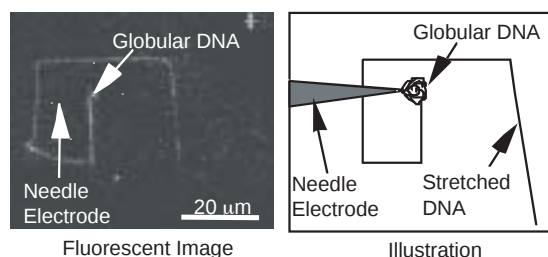


図3 グロビュールDNAの順次伸張

合の弱いところから切れていくように思います。コロナ放電をしておりましたので、このようにDNAに高電圧を印加してみたいと思って、10年ほど前にDNAを扱い始めました。最近は蛍光顕微鏡により、DNA一分子などがリアルタイムで明瞭に観察できます。細胞から取り出した長いDNAはたいへん切れやすいのですが、正イオンをDNA分子の周囲に供給すると相転移を起こし、図2のように、コンパクトなグロビュールになります。こうするとたいへん丈夫になりますので、手荒に扱うことができます。またレーザートラッピングを行うことができますようになります。この相転移は可逆的ですので、もとに戻すことができます。図3はグロビュール状の酵母染色体DNAをもとにしながら、基板上に伸ばして固定し、パターンを描いたものです。このようにして伸張固定した後、蛍光色素で標識した制限酵素を結合させるなどで光学的な制限地図を作り、断片を切り出し、PCR増幅して配列を調べる基本的な操作方法の開発を行っております。

DNA断片一つからPCR増幅するためには最初の

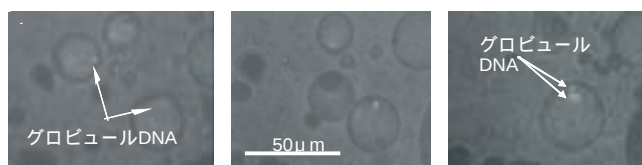


図4 油中の液滴反応系
グロビュールDNAを入れた液滴の輸送と融合

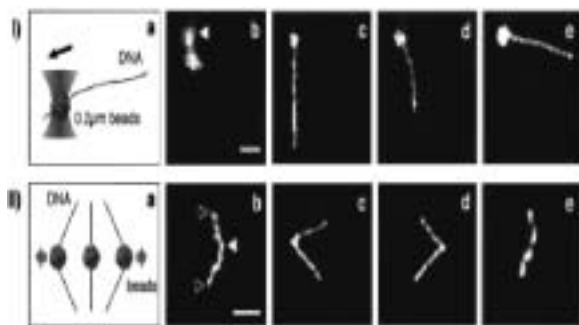


図5 ラテックス粒子の凝集を用いたレーザートラッピング (0.2 μm ラテックス粒子を 2×10^{10} 個/ cm^3 の濃度で分散させ、YAG レーザー 300–800 mW を使用)

数サイクルが大事です。図4は油中の液滴ですが、これを用いてPCR増幅を行うと、確度が高くなります。また、化学反応は分子同士が出会う時間に依存しますので、このような反応系により装置を超小型化することで、反応速度を向上できると考えられます。このために半導体微細加工技術を応用できます。

ところでレーザートラッピングは光学顕微鏡の照明部分にレーザーを入れることで簡単に装置を作ることができます。DNA一分子をひも状のままレーザートラッピングする簡単な方法を考えました。DNA溶液中に0.2 μm のラテックス粒子を入れておくだけです。レーザーを絞ると焦点付近に数10個のラテックス粒子がトラップされ、これがDNA分子を包み込むため、図5のようにDNA分子を操作できるようになります。多分単純に機械的に保持しているだけではなく、図1-bの充填層放電のように、ラテックス粒子どうしの接触点付近はレーザーの電界が強まるため、グラディエント力できわめて細いDNA分子が捕捉できるのではないかと考えております。この方法はリアルタイムに見ることができれば、タンパク分子などの操作にも適用できると思います。簡単ですので、ぜひお試しください。

4. おわりに

分子研ではDNA一分子を電極とした装置を作り、高電界中に置かれたDNAがどのような壊れ方をするかを調べたいと思っております。その際、界面と分子の相互作用の解明はたいへん重要で、基板への固定方法などの研究も進める必要を感じております。

流動研究部門には助教授の高橋先生が東北大学から着任されています。研究内容は異なっていますが、昼食時などに話しますと、共通の興味を持てることが多々あります。

分子研では、一分子の操作と観察などでたいへん素晴らしいご研究をされておられる先生があられます。任期中にできるだけ多くの先生方と情報交換をさせていただきたいと願っております。どうかよろしくお願い申し上げます。



着眼大局着手小局

分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門 高橋正彦

平成15年4月に、東北大学多元物質科学研究所から、分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門へ赴任しました。研究グループの現在の構成は、高橋正彦（助教授）と、同じく東北大学多元研から来られた渡辺昇さん（助手）の2人です。独立法人化の大波の中、この貴重な機会を快く与えて下さった茅幸二分子研所長ならびに東北大学多元研の宇田川康夫先生をはじめ、関係者の皆様に深く感謝致します。また、赴任のさいには、反応動力学研究部門の宇理須恒雄先生に大変お世話になりました。

まずは自己紹介から。昭和38年2月22日生まれ、40歳。ワシントン（初代米大統領）、ショパン（音楽家）、都はるみ（歌手）といった方々と誕生日が同じだそうです。趣味は、釣りと囲碁。釣りはサングリアの村井博店長、囲碁は酒井楠雄課長に師事することをすでに決めています。両先生とも、まだそのことを知りませんが……。

一方、本分たる研究の方へと申しますと、まだ駆け出しに過ぎないものの、振り返ってみると如何に多くの先生方に育てて頂いて来ているかを改めて実感すると同時に、私の研究歴が見事に挫折の連続であることもよく分かります。（これまでのボス達の研究が怪しげの意ではない。念のため。）以下に証明します。私の研究生生活は、京都大学理学部化学科で佐々木宗夫先生（現甲南大理）のご指導のもと、ストップフロー法を使った溶液中のプロトン移動反応からスタートしました。大学院では、志田忠正先生（京大院理名誉教授、現神奈川工科大）グループの末席を文字通り汚しました。加藤立久先生（現分子研）の励ましを受けながら希ガスマトリクス中

での化学反応のESR追跡法の開発を試みましたが、何の成果も得られませんでした。志田先生、加藤先生、本当にごめんなさい。しかし、研究の面白さの一端も知らないまま企業に就職することが我慢できず、修士卒業を目前にした1986年11月に分子研の木村克美先生（分子研名誉教授、現物質・材料研究機構）に文部技官として採用して頂きました。

当時の木村先生グループは気相分子のレーザー光電子分光を活発に行っており、当然ながら私もそのお手伝いをすることになりました。「レーザーって何？」のレベルにいた私が研究のまねごとをできるようになったのも、ひとえに助手をされていた奥山克彦先生（現日大工）の公私に亘る暖かいご指導とご配慮によるものであり、感謝の言葉もありません。そして、ここ分子研の恵まれた環境のもと、はじめて研究の醍醐味を知ることができました。木村先生グループでは多光子イオン化で生成した光電子のエネルギー分布を飛行時間法により計測していましたが、私はまたも芳しい結果を出すことができませんでした。そこで木村先生にお願いして、しきい電子アナライザーの開発に挑戦することにしました。紆余曲折があったものの、最終的には従来のエネルギー分解能を2 - 3桁、さらに検出効率を4桁も改善でき、それまでやりたくてもやれなかった研究を行えるようになりました。セナ（故F1ドライバーAYRTON SENNAから名前を頂戴した）と名づけた自作装置で、NO-Arやaniline-(Ar)_nといったファンデルワールス錯合体カチオンの分子間振動や、S₁電子励起状態にある*trans*-stilbeneの分子内振動エネルギー再分配を光電子分光で観測できた時の感動は忘

れられません。そして、これらの仕事で、京大理の論文博士号を取らせてもらえました。おっと、一つ大事なことを忘れていました。当時、錯体部門におられた大瀧仁志先生（現立命館大理工）の秘書の小林貴恵さんと結婚し、子宝にも恵まれました。これで、俗に云う三冠王達成です。

その後、宇田川先生に助手として拾って頂くことになり、1992年4月に仙台に移りました。ここでは、宇田川先生のお勧めもあって、電子運動量分光装置の開発に取り組みました。本分光は、標的原子分子の高速電子衝撃イオン化によって生成する非弾性散乱電子と電離電子双方のエネルギーと散乱方向を同時計測法を用いて計測します。これにより、散乱前後のエネルギーおよび運動量保存則を利用して、電離電子が衝突前に分子内で持っていた運動量の分布を決定できます。ご存知の通り、電子運動量分布は運動量空間波動関数の2乗ですから、この手法で軌道毎の波動関数形を見ることができるはずで、本邦初の装置ということもあって3年がかりでようやく試作を終え、「夢とロマン」を持って実験を開始しましたが、これがなかなかうまくいかない。信号強度（同時計測数）が0.01 cpsのオーダーでは、一月以上の積算をしても二流のデータしか得ることができない。釣りや囲碁の腕前は順調に上達するものの、本業の研究がこのありさまでは幸せな気分になるはずもなく、数年の間ただひたすら忍耐していました。このダメ助手には、さすがの宇田川先生もさぞヤキモキされていたことと思います。

私にとっての大きな転機は、1997年11月から1年間の、文部省在外若手研究員として英国のJohn

Eland先生（Oxford大、PTCL）のもとへ留学したことでした。どうやら私は装置開発をする星のもとに生まれたようで、ここでも新しい実験装置を作らせてもらえました。名前はVIPCO（Velocity Imaging Photoionisation COincidence）。光イオン化で生成する全ての荷電粒子を画像観測法により同時計測します。この装置により、通常の光電子スペクトルやイオン質量スペクトルから配向分子の光電子角度分布に至るまで、光イオン化に関するありとあらゆる情報を一挙に得ることができます。設計からわずか一年足らずで装置を完成し、幾つかの面白い実験結果と共に帰国できました。この望外の成果も、PTCLの技官の皆さんの多大なご協力があってこそです。特に二次元検出器の自作は苦労しただけに思いつく深く、「翌朝までにプリアンプの立ち上がり時間を1.5から2 nsになませてください」といったムチャクチャな注文も、その道のプロは解決してくれました。こうした装置製作以外にも、Eland先生からはParis近郊のORSAYなど各地を訪れる機会を頂きました。英国紳士のEland先生は黙して語らずですが、「実験室に閉じこもってやるばかりが研究ではない。人とのつながりという無形の財産を少しずつ蓄えていきなさい。」という暗黙のメッセージだと解釈し、妻からは不良留学生だと注意されたぐらい、夜の勉強会（？）にも熱心に参加しました。いろいろな意味で、本当に実り多い一年でした。

日本に帰国してから、さっそく二次元検出器を使った電子運動量分光2号機の製作に取りかかりました。1号機での幾多の設計ミスを感じしていただけに、2号機は比較的順調に稼動し、懸案であった低



い同時計測数を数十 cps まで改善できました。先の分子研での成果と同様、装置の性能が上がれば研究が楽しくなるに決まっています。勢いに乗って 3 号機を製作し、現在では数千 cps を得ています。1 号機の時代と比べると、隔世の感があります。

こうした研究は「原子分子」あるいは「原子衝突」というカテゴリーに入りますが、多くの耳目を集める華やかな応用研究とは異なり、正直に言って地味な学問です。しかし、原子衝突の研究は、世の中にある原子分子の性質やそれらの相互作用の様子を調べるだけでなく、多彩な衝突反応を駆使し、望みの物質を創り出すカギを握っています。それは、その多様な反応も一つ一つの素反応の組み合わせであり、これら素反応の理解こそが物質科学から生命科学に亘る広範な自然科学の基礎だからです。我々の先達は、血と汗を振り絞りながら、標的の振動子強度や電荷分布等の情報を含む散乱断面測定と生成物の輻射や解離・再結合といった後続緩和過程の解明に向けて、原子衝突研究に飛躍的展開をもたらしてくれました。しかし、残された課題はまだ数多くあります。その一つは、原子分子の衝突は微視的であるが故に観測困難であり、その研究は常に間接的であり続けていることです。

「背筋を伸ばして、盤面全体を見なさい。部分にこだわっては、全局を誤ります。」と、囲碁を習うときに上級者に教わります。また、日本棋院の石田芳夫九段は「一目千手」と豪語しています。つまり、盤面を一瞥するだけで、瞬時に千手を見通すことができる云うのです。ここには、一手一手詳細に展開を読むといった手間のかかる作業は含まれていな

い。観ることは、まことに素晴らしく効率的です。

私の分子研での挑戦は、衝突反応やこれと密接に関係する電子軌道の形をより直接的に、ビジュアルに捉えなおすことです。それは、こうした試みが最先端の散乱理論や電子状態理論を厳密に検証するのみでなく、全ての人に対して原子衝突の明確な姿を視覚的に与えられるから。分子研に持参した 3 号機により通常の電子運動量分光実験を比較的容易に行えるようになりましたので、これをベースに、より進んだ実験である、配向分子の電子運動量分光の開発をやらせて頂こうと考えています。axial recoil やレーザーなどの応用を図るつもりです。仙台での予備実験を通して、そのゴールは遥か彼方にあることは承知しています。でも、逃げるつもりは毛頭ありません。また、これと並行して、分子研装置開発室のご協力を仰いで、その道のりを短くするための次世代の分光器開発に着手させて頂ければと願っています。

最後に。俳聖・芭蕉によれば、「不易流行其基一也」。すなわち、不易と流行の基はひとつ、不易が流行を、流行が不易を動かすと云います。齢 40 にしてようやく私自身の「不易」を見つけたつもりになっていますが、今はそれが錯覚でないことを祈るばかりです。小局を味良く解決するためにも、また、独自の大局観を育てるためにも、分子研の皆さんとの交流を本当に楽しみにしています。どうぞ、よろしくお願い致します。

基礎物性評価とデバイス開発のワイドギャップ

分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門 解 良 聡

1. はじめに

分子科学研究所において分子スケールナノサイエンスセンターが設立されたように、ナノサイエンス・ナノテクノロジーは現在最も注目をあびている分野の一つであり、また今後極めて熾烈な競争が展開されるであろう分野である。「分子」をキーワードとした新しい物質系における未知なる法則を確立していくという学術的側面と、それをういたテクノロジーとしての工学的側面が同時進行している。実際に有機ELデバイスはすでに実用化され、性能の向上を目標とした次段階へ移行しており、また有機トランジスタや太陽電池の開発にもわかに現実味を帯びて積極的に行われている。一方で、学術的なアプローチも着実に進展してはいるが、デバイスの実用化と照らし合わせるとそのギャップにとまどいを感じる。これはいつの時代においてもそうであったように、物づくりはある程度の経験則だけで十分進展しうるということからも納得できることではある。ただしやはり学術的なアプローチからの新たな方法論の確立によってはじめて、次なる大きな一歩は生まれるという考えの元、日々の研究に勤しんでいるところである。

2. 有機薄膜の表面・界面構造

ナノテクノロジーの一環として、すでに実デバイスとしての機能を発現しているものがいくつかあるが、それらの物性が何を元に発現しているかの詳細は明確でない。有機薄膜の場合にはその膜を構成している分子種のみならず、その膜構造(配向・配列)の変化を念頭に評価することが重要だが、分子配向

と電子状態の関連性はまだまだ議論されていない。またデバイス形成においては、必然的に有機分子と無機(金属・半導体)材料、あるいは有機異種分子間等の種々の界面が形成される。これらの界面もおのずと多様な特性を示すため、観測される現象の統括的な解釈、方法論の確立がいっそう困難となっている。有機デバイスの特性を正しく理解するためには特に下記の点が重要であると考えられるが、現状として分子性固体においては、学術的側面からの詳細な検討はまだまだ不足している。

- 1) 界面における異物質間のエネルギー準位接合
- 2) 界面におけるキャリアダイナミクス
- 3) 分子間、分子基板間相互作用に起因した電子状態変化

つまりこれまでに無機半導体の分野によって培われた種々の法則からは、有機分子デバイスにおける物性発現の要因を正しく理解できているとは言い難く、言い換えればようやく有機半導体特有の現象が新たに認識された段階であり、今後解明すべき様々な基本的課題が山積しているのが現状といえよう。

これらの物性を評価する上で、光電子分光法は有効な手法の一つであるが、有機薄膜に対しては、まずは得られるスペクトル構造(線幅・形状・位置)についての正しい理解が、この分野における研究の第一歩として非常に重要である。我々のグループでは角度分解紫外光電子分光法(ARUPS)、メタステーブル原子電子分光法(MAES)などの表面敏感な測定法を用いて、こうした有機薄膜の表面・界面物性を明らかにすることを目的として研究を行ってきた。特に最近では有機分子のHOMOバンド構造に

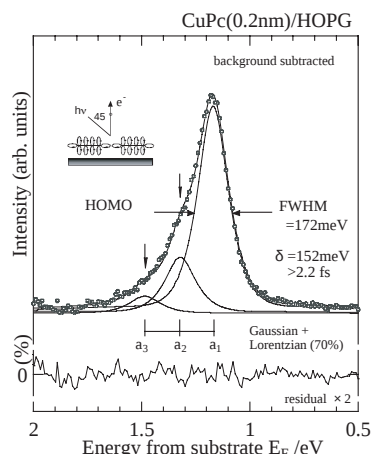


図1 HOPG 基板上的 CuPc 単分子層 (2 Å) の UPS

注目して実験を行っている。HOMO バンドの線幅や形状は薄膜中や界面におけるキャリアの動的過程、分子間相互作用等の有機半導体基礎物性を語る上で、極めて興味深い知見を含んでおり、デバイスにおける機能性発現の所以を探るうえでも重要なポイントとなると思われる。

最近、グラファイト (HOPG) 基板上的銅フタロシアニン (CuPc) 単分子層膜において HOMO バンド幅がこれまでに例のないシャープさで検出された。この結果は新たに有機薄膜における光電子スペクトルの線幅の起源を見直す必要性を示唆するもので、極めてインパクトのあるデータであった。このデータと遭遇したことにより、私のもっばらの興味は、有機薄膜の光電子スペクトル構造の起源を探ることとなっている。

3. HOMO バンド幅の起源

図1はグラファイト (HOPG) 基板上に作成した CuPc (膜厚 0.2 nm) の高分解能 UPS の結果である。¹⁾ 理論計算に裏付けられるとおり、CuPc の HOMO バンドは単一の π 電子軌道から構成される。また分子は基板上で分子面を平行に配向していることが、MAESにより明らかとなっている。図から明らかのように、驚くべきことであるが HOMO バンドが気相のデータと同等の鋭さで検出された。図はスペク

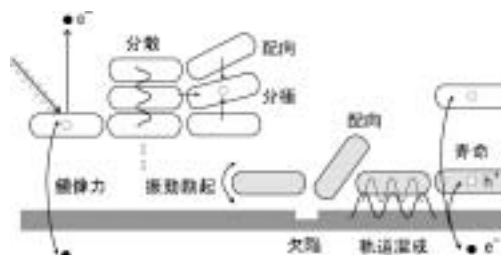


図2 光電子スペクトル線幅の構造因子の可能性として考えられる現象: ホール寿命、振動カップリング、基板との相互作用の不均一分布 (配向変化、軌道混成) エネルギーバンド分散 (分子内、分子間) 差分極効果 (配向) 遮閉効果、不純物準位

トルのバックグラウンドの寄与を差し引き、Gaussian と Lorentzian の混成関数によりフィッティングしてある。非対称な HOMO バンドは等間隔、等幅の 3 つのコンポーネントで明瞭に分離され、各構造の半値幅は各々 172 meV となった。主ピークの高 E_B 側の付随構造は振動構造のカップリングを検知している可能性があり興味深い。さらにこの線幅から装置分解能の寄与を差し引くことで、価電子帯におけるホールの寿命の 2.2 fs を得た。

分子性固体におけるスペクトル線幅の由来は分子間、分子/基板間の相互作用の差異に基づき、図2に模式的に示すようないくつかの物理現象が関与していると考えられる。有機分子薄膜の紫外光電子スペクトルは 30 年以上も前から何百という測定が行われているが、その分子種 (形状・化学構造・集合状態) に関わらず、約 0.4 eV 以上のブロードな価電子帯スペクトル構造が検出されてきた。観測が始められた 70 年代当初はこの点に多くの研究者が関心を示していたが、80 年初頭のひとつの結論 (差分極効果) を終点に、その後議論の的からは外れた存在となっていた。^{2),3)} しかしこのように単分子層領域でこれまで無視されていたホール寿命および振動構造が密接に関与した構造が検出されたことにより、今後有機分子性固体における新たな議論の展開が期待できるといえる。注意すべき点はこのような異様ともいえる値が近年の装置性能の向上による結果で

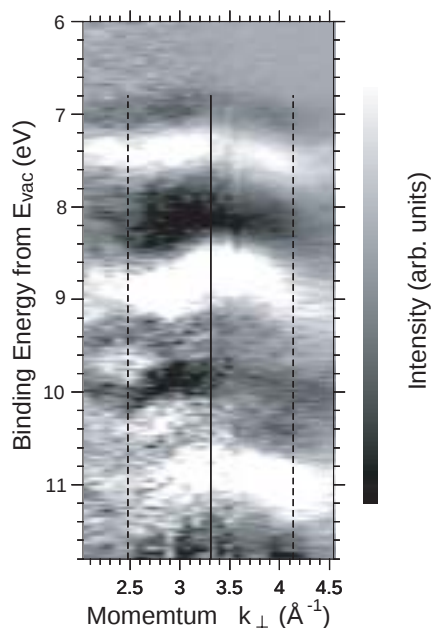


図3 PTCDA 配向積層膜 (3 nm) のエネルギーバンド分散

はなく、種々の要因を排除した結果の必然ということにある。例えば、グラファイト基板は、極めて容易に平滑な清浄表面を導出でき、また吸着分子との相互作用が極めて弱いため、化学反応に伴う電子構造の変化、波動関数の重なりによる軌道混成、吸着サイトの不均一分布などの要因を極力排除できる。このような現象の単純化と高度に配向した均一な試料の作成によってはじめて検出された結果なのである。

また図2に記したように、線幅の起源のひとつとしてエネルギーバンド分散の形成は重要な意味を持つ。しかしこのような極めて一般的な構造をもつ有機半導体においては、分子間相互作用は弱いvan der Waals力であり、バンド幅は非常に狭く、線幅への影響は極めて小さいことが考えられる。しかし最近、高度に配向した有機積層膜を試料として用いることで、このような分子性固体における弱い相互作用の系についての分子間エネルギーバンド分散を直接測定することに成功したので、その結果を最後に簡単に紹介する。

典型的な有機半導体であるPTCDAの配向単分子膜の高分解能UPS結果は、図1で示したCuPcのようなシャープなHOMOバンドは与えず、いくつか

の微細構造を含んだブロードなバンド (FWHM = 400 meV) であった。そこで十分に配向規定したPTCDA積層膜を作成し、精度の高い放射光励起ARUPS測定を行った結果、折り返しのエネルギー幅約0.2 eVと小さな幅ではあるが、エネルギーバンド分散が存在することを確認することができた。図3はPTCDA (3 nm) のUPSの励起波長依存性測定より得られたバンド分散マッピングの結果である。観測されたHOMOバンドのシフトは強束縛近似モデルでよく再現され、 π - π 相互作用の分子間重なり積分の大きさ (0.05 eV)、ホール有効質量 (5.28 m_0)、ホール移動度 (3.8 cm²/Vs) などの物理量を見積もることができた。^{4),5)}

このように高度に配向を規定した有機薄膜を対象として精密な測定を行うことで、分子スケールという新次元における未知なる法則を導き出していくことができる。ひいては機能性分子デバイスの開発応用においても飛躍的な効果が期待できると目論んでいる。現在こうした有機薄膜界面におけるホール・電子ダイナミクスが密接に関与すると思われる現象に注目し、その大きな溝を少しずつでも埋めるべく研究を行っている。

参考文献

- 1) S. Kera *et al.*, *Chem. Phys. Lett.* **364**, 93 (2002).
- 2) W.R. Salaneck *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **40**, 60 (1978).
- 3) Y. Harada *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 2269 (1984).
- 4) H. Yamane *et al.*, *Phys. Rev. B* **68**, 33102 (2003).
- 5) S. Kera *et al.*, *UVSOR Activity Report 2001* p.196 (2002).



最近思うこと

理論研究系分子基礎理論第二研究部門 中 村 宏 樹

まとまったアイデアや構想がないまま、ここに何かを書かなくてはいけない羽目になってしまった。取り留めのない無責任なことを書くことになりそうである。世の中に対する危機感と愚痴の表明（勿論、自分自身の反省をも込めて）になってしまうであろうことを最初にお詫びしておきたい。と言うのも、最近、例の大学共同利用機関の法人化問題で振り回されているからである。この改革によって素晴らしい体制と組織が出来そうだとすることであれば良いが、どうもそういう明るい光が見えてこない現実の中で、それでもこれを進めて行かねばならず、しかもそれに負担しなくてはならないのは誠に心外であり健康に良くない。誰かが、「山本五十六の心境です」と冷やかしてくれたが、残念ながら「言い得て妙」である。多大な時間と労力を費やしているが、日本の基礎学術は100年の計で本当に大丈夫なのだろうかと心底心配になる。国に資金が十分でない時の良くない改革は最悪である。運営上本当に良い意味での自由度が増すのであれば悪いことばかりではないであろうが（実際、少しでもそうなることを期待している訳であるが）、非公務員化に伴う諸問題、企業会計の導入、予算のない中での組織の拡大、会計を単年度にしなくても良いと言う甘い言葉が実は大嘘であったこと、などなど問題が山積みである。中でも、小生が最も心配しているのは、応用研究への思考と圧力が強まるのではないかと言うことである。世の中の風潮として、一般社会に受け入れられ易い応用研究や金儲けに繋がりと見られる研究、或いは、実際にお金を儲ける研究が重視されかねない。基礎学術を守るために、責任ある大きな大学が

声を大にして異を唱えてくれれば良いのだが……。些か既に遅きに失する嫌いはあるが、それでも黙っているよりは遥かにましな筈である。よく、日本の組織改革は「着せ替え人形だ」と言われる。体裁だけが違って、中身が変わらないのである。今回は、「着せ替えで中身が腐らない様に気を付けなくてはならない」と言う皮肉な状況にあるのではないだろうか!! 少しでも良い方向に向かう様に（多大な！）努力をしなくてはならない。

何はともあれ、基礎科学、基礎学術の意義とその重要性について我々自身が改めて深く考え直すなくてはならない。社会に対する責任を自覚すると共に、意義と重要性を強く訴えていく努力をする必要がある。「基礎科学は子供の様なものだから大事にしないといけない」という表現がある。「将来有用な大人に育って行く者がいるからである」と言うこともあるが、むしろ、「子供それ自身に存在意義がある」からなのである。基礎科学、基礎学術もそれ自身に存在意義があるのである。ただ、我々が殻に閉じこもって奢っているだけでは許されない。説明責任は果たさなくてはならない。しかし、何と云っても、最大の問題は、科学者自身が気概を失い、プラグマティズムと応用研究重視の風潮に流されているのではないかと危惧されることである。

先日、御殿場にある前島秀章美術館を訪れる機会があった。木彫り彫刻家の前島秀章の「時空を超えた木彫りの芸術作品」展である。実にほのぼのとした作品が並んでいた。彫刻作品と並んで、彼の文章が額に収められて飾られていた。その中に、「芸術とは、ギスギス、ガタガタした社会をなごませ、人

の心をほのぼのとさせる役割を担ったものであると思っている」と、そして「彫刻で哲学をしたい」と言う文章があった。実に素晴らしい表現である。「学術（学問と芸術）」にはやはりそのような重要な役割がある筈である。

最近の世の中を見ていると、つくづく、「哲学の欠如」を感じる。プラグマティズムが蔓延している。何事においても、本質を見極める努力をし、もっと「深く物事を考える」努力をする必要があるのではないだろうか。当たり前のことであるが、これは、学術研究においても言えることである。技術の進歩によって研究手段や発表方法などが格段に便利になっており、表面的にはきらびやかさを増しているが、中身が本当に素晴らしいものになっているであろうか。大掛かりな数値計算をして得られた結果が「当たり前じゃないの!」と思われる事が間々ある。また、美しいパワーポイントの画面に感心しても、「中身はどうも……」と思われる事がある。計算機を駆使する特技などはそれ自身素晴らしいことではあるが、目的と手段を混同しない事が肝要である。厳しく自問自答しなくてはならない。このようなことは、特に、若い世代に正しく伝達されなくてはいけない。「優れた研究とはどういうものなのか」と言うことを。それには、哲学と信念を持って苦しみながら深く考える必要があるのだと言うことを。また、「本邦初公開」的な研究はやめましょう。「欧米で上手く行っているからやる」と言ったことを時々耳にするが、こういうことでは何時まで経っても真に独創性のある研究は出来ないでしょう。

分子研には優れた人材が集まっており、基礎学術

に対する底力があります。上述した様な厳しい（間違った）世の中の風潮に流されることなく、情熱と気概を持って基礎学術のあるべき姿を実力で示して行く努力を一人一人の研究者が積み上げていかれる事を祈っています。これは、あと3年弱で退職する者のいわば遺言です。

合掌

超高速コンピュータ網形成プロジェクト (NAREGI) 「ナノサイエンス実証研究」拠点の紹介



「ナノサイエンス実証研究」の目的と意義

本年4月より5年間の計画で表記のナショナルプロジェクトが分子研を拠点としてスタートしました。このプロジェクトの背景、目的、位置付け、性格などについて、プロジェクト代表としての立場から、本誌面を借りて紹介します。

このプロジェクトはグリッドと呼ばれる新しい計算機環境を我が国に構築する目的で進められている超高速コンピュータ網形成プロジェクト (NAREGI) の一環として、グリッド環境の有効性を実証することをその第一のミッションにしています。その意味ではいわゆるIT関連のプロジェクトですが、そのような超高速コンピュータ環境での計算がトリヴィアルなものであってはいけないということで、科学的に重要な分野のひとつとして、現在、同じく国家プロジェクトとして位置付けられているナノサイエンスが選ばれたわけです。ちなみに、ナノサイエンス以外に「ビジネスグリッド」、ITBL、バイオグリッドなどのプロジェクトが同様の主旨で走っています。これらのプロジェクトのもうひとつの重要な性格は「産学官連携」プロジェクトとしての側面です。現在、我が国の経済や国家財政が厳しい状況にあることは国民の最大の関心事ですが、そのような状況を克服することを目的に、現在、政府主導の「産業再生プログラム」が進行しており、本プロジェクト自身もその一環としての位置付けをもっています。

ところで、分子研のサイドから見ると、「ナノサイエンス実証研究」プロジェクトは物質科学の発展にとって重要な意味をもっています。昨年、分子研

はナノサイエンスにおける全国の拠点のひとつとして「分子スケールナノサイエンス」センターを立ち上げました。このセンターは主として実験的側面からナノスケールのサイエンスを分子レベルで展開し、分子エレクトロニクスをもその視野に入れた研究を進展させることを目的に発足したセンターですが、われわれのプロジェクトはその「計算科学」版とも言える位置付けをもっています。

それでは、「今、何故、計算ナノ科学」が重要なのか？ この疑問に対する答えは二つの側面から与えることができます。ひとつは「学問的」動機です。ナノサイエンスが対象にする問題の空間的スケールは文字どおり 10^{-9} m から 10^{-6} m 程度で、それに応じて時間スケールも決まってきます。この空間・時間スケールの問題に対する理論的アプローチとしてふたつの方向が考えられます。ひとつはボトムアップ、すなわち、分子科学的 (10^{-7} m– 10^{-9} m) アプローチであり、他はアップダウン、すなわち、物性論 (無限系) 的アプローチです。分子科学的アプローチはこれまで主として量子化学や分子シミュレーションに基礎を置き、小さな分子の電子状態や小さな多体系の物性 (集合体としての性質) に関しては大きな成果をおさめてきました。しかし、このようなアプローチをナノスケールの問題に適用しようとすると忽ち大きな困難にぶつかってしまいます。すなわち、問題とする系のサイズや性質に対して計算機の能力が数桁から時として数十桁も下回ってしまうからです。一方、物性科学的アプローチは熱力学、流体力学、固体電子論、統計力学などに基礎を置き、分子サイズから見ると無限に大きな系に対して成功

をおさめてきました。しかし、この方向からナノスケールの問題にアプローチすると別の困難にぶつかってしまいます。このような方法では原子レベルでの性質を極度に単純化しているため、化学的な個性を犠牲にしてしまうからです。もし、ナノスケールの化学がナノサイズで初めて発現する機能を問題にするとすれば、これは致命的な欠陥です。金属はよく化学反応の触媒として使われていますが、その場合、触媒作用に本質的な役割を果たしているのは特異な電子構造で、非局在化した電子がバンド構造をとっているところに特徴があります。そのような問題には先に述べた固体電子論（あるいはバンド理論）が有効です。一方、金属を構成している個々の原子はそれがバラバラに存在する時には、当然、電子状態は局在化しており、期待される機能を示しません。それでは、一体、金属集合体のサイズがどのぐらいになった時に、どのような機能を示すのかという疑問が生じますが、このような疑問に理論的解答を与えることは計算ナノ科学の典型的な課題のひとつであると考えます。

「計算ナノ科学」のもうひとつの重要な対象と考えられるのは溶液内のいわゆる「自己組織化」の問題です。例えば、生体内における化学反応は「酵素」というナノサイズの分子を触媒として起きており、酵素機能が発現するためには蛋白質が「自己組織化（フォールディング）」して特異な構造をとらなければなりません。金属が「触媒」としての機能（電子物性）を示すためには金属原子が溶液中で集合してあるサイズになる必要があります。また、界面活性剤などの両親媒性分子が化学反応の反応場として有

効であるためにはそれらが集まってミセルやベシクルなどのナノスケールの分子集合体を形成しなければなりません。これらの例に見られるように、自然界にはナノスケールで初めて機能が発現する現象が数多くあり、これらの集合体ができるためには、まず、バラバラの分子や原子がエントロピーの障壁を越えて集まる必要があります。しかも、原子や分子がただ集まれば良いのではなく、例えば、「化学反応」という「機能」が発現するためには、「ナノ集合体」の化学的性質が原子レベルで制御されていなければなりません。ナノ集合体を特徴づけるさらに重要な性質はそれら全部が同じサイズではなく、ある平均値の周りに分布していることであります。自然界の化学過程はこのナノ集合体の「構造安定性」と「揺らぎ」を巧みに使ってコントロールされているのであります。そして、ナノ粒子の構造安定性、揺らぎ、および機能はその置かれている溶媒環境によって支配されています。このような「溶液内分子の自己組織化」はある意味では非常に古い問題で、おそらく、前前世紀から数多くの理論的研究が行われてきました。しかしながら、それらの研究はほとんどが現象論（熱力学、流体力学、電磁気学）レベルの研究であり、原子・分子レベルの化学的な性質を問題にするナノサイエンスに対してはほとんど無力であると言わざるを得ません。

以上、二つの例で説明したようにナノスケールの問題に対しては従来の伝統的な理論はほとんど無力であり、ナノスケールの問題を解明するためには新しい理論を開発するか、あるいは従来の理論や方法をいくつか組み合わせた新しい方法論を構築するこ



とが本質的要請となります。本プロジェクトの「学問的な」意義はまさに従来の理論や方法論の枠組みを越えた新しい方法論をナノサイエンスの分野で構築することにあります。

ところで、ナノ計算科学にはもうひとつの重要な意義があります。それはナノレベルで発現する様々な機能の解明が産業や医療などの技術基盤の確立に大きな影響を与える可能性です。ナノ科学のもつこの側面はすでに電子工業への応用の可能性が「分子素子」や「量子ドット」などの言葉を通じて華々しく報じられていますが、もし、これらの試みが現実のものになった場合、測りしれない影響を産業や医療に与えることはもちろんのこと、「トランジスタ」や「ナイロン」の発明が「固体物理」や「高分子」という大きな科学の分野を作り出したのと同様の効果を学問にフィードバックすることは疑いありません。ここではナノサイエンスが医療に大きな影響を与えるかもしれない例として最近のトピックスをひとつ紹介します。

抗癌剤を使わずに癌を治す話

熊本に崇城大学（旧熊本工業大学）という私立大学がありますが、そこに私の友人の一人である上岡龍一という教授がいます。上岡教授の専門はいわゆる人工脂質膜を反応場にした有機化学で、ペプチドの加水分解反応における不斉選択性を追求していました。彼の得意技は超音波によってサイズ分布が非常にシャープな混合脂質膜を作ることで、その技をつかって有機化学の分野で良い仕事をしていました。ところが、もう、10年以上も前のことですが、上

岡教授が彼の友人の獣医さんから「1ヶ月ももたないから何にでも使ってくれ」と、癌に冒された一匹の猫を譲り受けました。もともと薬学部出身だった上岡教授は、最初、その猫をいわゆるドラッグデリバリー実験に使いました。すなわち、彼自身が作った混合脂質膜（リポソーム）に抗癌剤を包んで注射をしたわけです。その結果、確かに、猫の寿命は1年半程度延びました。同様の実験を何例か繰り返した後、上岡教授は何を思ったか、抗癌剤を入れないで、すなわち、人工リポソームだけを使って実験を行いました。驚いたことに、この治療は顕著な延命効果を示しました。しかも、抗癌剤を含まないため、副作用がほとんどないことがわかりました。上岡教授は、その後、たくさんの動物実験を行うことによってこの抗癌作用が確かなものであることを証明し、現在、厚生省の承認を受けて「臨床実験」を行うまでに研究が進展しています。上岡教授は癌細胞を死に至らしめる最初の引き金は「リポソーム」と細胞膜との融合にあり、この膜融合によって細胞内の環境が変化し、最終的にアポトーシス（計画死）を誘起するという仮説を提唱しています。それでは、何故、「リポソーム」が健康な細胞は殺さずに癌細胞だけにアタックするかという疑問が生じます。実は、液体のもつ揺らぎがこの疑問に答えるカギを握っていると我々は考えています。癌細胞は健康な細胞に比べて速く増殖することが知られています。細胞が増殖するためにはもともとの形を壊す必要があり、そのために不安定な状態、すなわち、揺らぎの大きな状態を経過する必要があります。このいわば中途半端な状態が「リポソーム」の攻撃に対して弱

点になっているというのが我々の仮説です。実は、すでに、癌細胞の中の水の状態（液体構造やダイナミクス）が正常細胞内のそれとは異なっていることはNMR実験からよく知られており（MRIもこの現象を利用している）、このことも癌細胞の揺らぎが大きいことと無関係ではないと考えられます。

ところで、「人工リボソーム」の抗癌作用の「引き金」となった膜融合は純粋に「物理化学過程」であり、脂質膜の構造や熱力学的安定性と密接に関係していることは明らかなです。その意味で、この問題は医療の現場に「物理化学」が最も本質的なレベルで有効性を発揮する数少ない例のひとつであると考えられます。また、「リボソーム」のサイズがナノスケールであることから、ナノサイエンスの重要な課題のひとつとも言えます。

「産業再生プログラム」と「産学官連携」にひとこと
さて、本プロジェクトのひとつの性格が「産業再生プログラム」の一環として「産学官連携」にあることは本稿の最初に述べましたが、ここで、この点について私の基本的なスタンスを述べたいと思います。

本プロジェクトのミッションがグリッド計算環境の実証研究であり、その目的を達成するためにナノサイエンスの分野を先導する理論的方法論を構築するという学問的動機についてはこれまで述べたとおりですが、もし、このような方法論が将来実際の生産や医療活動に活かされるとすればそれは我々研究者にとって望外の幸せであります。そして、そのために産学官が連携して研究活動を行うことの重要性

について全く異論を挟む余地はありません。しかしながら、そのことは「産学官連携」が無原則的に行われてよいということを決して意味しません。私は産学官連携には三つの原則が必要であると考えています。それは 公正であること、研究成果の公開、学問の自由、の三つです。

まず、公正でなければなりません。すなわち、本プロジェクトに参加する資格や本プロジェクトの成果を享受する権利は広く社会に開かれていなければなりません。これは特定の企業がその利益を追求するためのプロジェクトではないからです。このプロジェクトで行われた研究の成果はすべて公開される必要があります。これは本プロジェクトが公的資金、すなわち、国民の血税を使って実施される以上絶対に守られるべき原則だと考えます。もちろん、個々の企業がプロジェクト終了後にその成果をその技術開発や生産活動などに活用することは大いに奨励されるべきですが、本プロジェクト内でその研究費や計算資源を個々の企業の利潤追求の目的に使うことは許されないとします。さらに付け加えれば、政府が「産業再生プログラム」なるプロジェクトを立ち上げる原因となった我が国の経済不況そのものが、その原因はいわゆる「バブル経済」にあり、企業が利潤追求に急なあまり真に経済競争力を高める基盤的な技術の開発をおろそかにし、「土地投機」や「金融投機」に狂奔した結果であることはすでに多くの識者や政治家が指摘しているとおりであります。（現在、米国も同様のバブル崩壊の危機にさらされていることは周知のとおり。）もし、「産業再生プログラム」が「バブル経済」とその崩壊によって疲弊



した我が国の経済を根本的に立て直すことを目指しているとするれば、「公的資金」によって行われる今回のプロジェクトを自己の「赤字」を埋めるためとか、利潤を増やす絶好の機会と捉えることはいかなる企業といえども許されないことだと考えます。逆に、このプロジェクトで期待される基礎的な研究成果を本質的なレベルで理解し、消化することによって、競争力の高い基盤的な技術開発に活かすことこそ、個々の企業に求められているのではないのでしょうか？ その意味で、本プロジェクトは「米100俵の精神」をその基本精神としたいと考えています。

最後に、最も大事なこととして、学問の自由、すなわち、「研究テーマ」や「研究方法」などの選定および研究の発表については研究者に完全に任せられなければならないと考えます。もし、どのような研究であれ「学問的動機」以外の何らかの強制が働く場合、研究者の自発的な研究意欲は殺がれ、プロジェクトの成功自身が保証されないからです。このことは先に述べた「公正」および「公開」の原則とも密接に関係しています。もし、個々の企業が自己の利益の追求に急なあまり、研究者にとって興味のない研究テーマを押し付けようとしても、それはお互いにとって不幸な結果を招くだけです。また、企業秘密を守ることを優先するために論文発表を妨げることなどは研究者の「学問的動機」と真っ向から対立する発想です。

（平田文男 記）

第13回オープンハウス

さる5月17日に分子科学研究所オープンハウスが開催されました。全国の大学院生・学部学生・社会人を対象として、分子科学研究所での研究内容や教育活動について知っていただくことを目的として行われているこの行事も、今回で通算13回目を数えました。ごく簡単にはありませんが、当日の様子など報告させていただきます。

今回の参加者募集にあたっては、前回のアンケート結果に基づいて、学会誌への広告掲載を見合わせ、分子研ホームページでの告知、ポスター・チラシの配付を中心に行いました。最終的には前回の2倍近い、合計71名（学部学生16名、修士学生33名、博士学生14名など）からの参加申し込みがありました。このように多くの参加者を集めることができたのは、所内の皆様の御協力（アンケート結果参照）とともに、今回から新しい試みとして「分子科学研究会シンポジウム」と連携したことも一因に挙げられるかと思います。シンポジウムの参加者にとっても、議論の熱がさめる間もなく分子科学研究の第一線で活躍している研究グループの見学ができる機会として今回のオープンハウスは非常に有意義だった

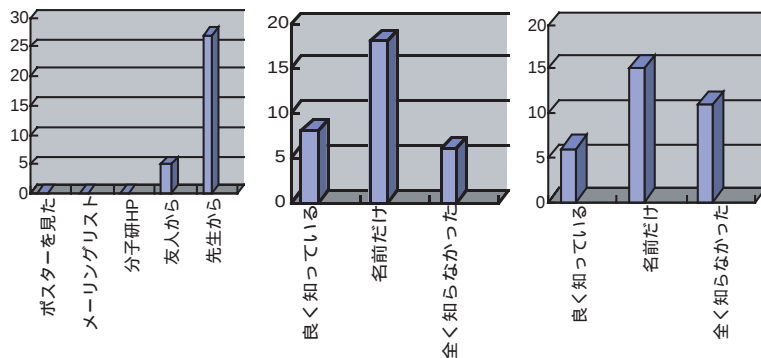
のではないかと思います。

公開日当日は、まず岡崎コンファレンスセンターで、茅所長から分子研の概要を、田中晃二教授から総研大の概要について聞いていただきました。そのあと、参加者にはE地区とB地区に別れて、約3時間半にわたって自由に研究室を見学してもらいました。夕方には、参加者と研究所内のメンバーが集まって職員会館で懇親会を行い、和やかな雰囲気のもと無事終了しました。参加者の感想はおおむね好評で、「施設や実験スペースが素晴らしい（11件）」、「説明が丁寧で熱意を感じた（10件）」、「専門外の話が聞けて有意義だった（6件）」などの声が寄せられました。その一方で、オープンハウスに対しては「実際に実験するところが見たい、持帰れる資料が欲しい、専門外の人間に対する説明を工夫してほしい」という意見もありました。さらに総研大に対しては、「素晴らしいのだからもっと宣伝すべき（8件）」の他に「入学定員を増やしてほしい（2件）」という意見もありました。

今回のオープンハウスの開催にあたり、所内の皆様、各大学の先生方をはじめ、前担当の永田央助教

授、広報の佐藤敦子・中村理枝様、秘書の臼井千夏様、分子科学研究会シンポジウムとの関係に関して藤井正明先生、稲垣いつ子様には大変お世話になりました。この場をお借りして、お礼申し上げます。

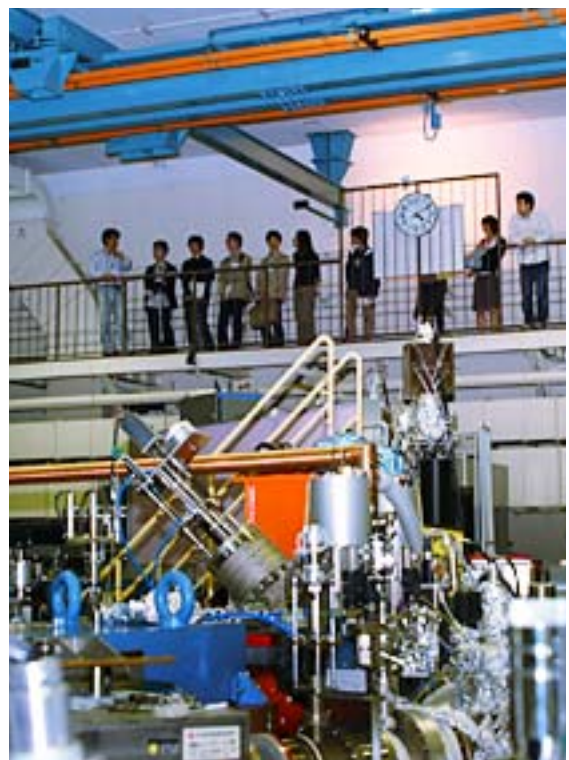
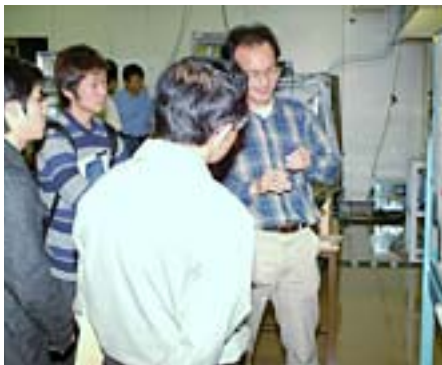
（佃 達哉 記）



今回のオープンハウスを
何で知りましたか？

分子研を知っていましたか？

総研大を知っていましたか？



駆け出しの頃の出会いの幾つか

理化学研究所化学反応動力学研究室主任研究員 鈴木 俊 法

(前 電子構造研究系電子状態動力学研究部門助教授)

Scene 1

ぎらぎら照りつける夏の太陽の下、景色に変化の無い米国の大中西部を西に向かって走る車。とうもろこし畑の中に時折止まると、中からアジア系の男が出てきて、もはや分かりきっているはずの己の小さを再確認している。漆黒の闇の中ロッキー山脈に差し掛かると、宝石箱をひっくり返したような満天の星座の群れが降りそそぎ男は更に感動する。アメリカの自然はすごいなあ。山を下りてネバダの灼熱の砂漠地帯に入ると、エアコンの付いていない男の赤いトヨタ車は燃え出しそうである。暑い。死ぬ……。車内はスタンドやら掃除機やらが一杯に積み込まれていて、その怪しげな車はついに警官に呼び止められる。「何やってんだーお前は。」「ニューヨーク州からカリフォルニア州まで引越し途中の日本人ポストドクです。どこか安い宿ありませんか?」「はあー。それならガソリンスタンドの2階にトラックの運ちゃんたちが泊まってるっぺよ。」そこには、革のベストに身を包んだボブサップのような男達がごろごろいた……。

Scene 2

梅の花が咲き始める頃、日本の国立研究所の会議室。人事選考委員長が尋ねる。「あなたの研究を行うためには一体どの位の予算がかかりますか?」男は答える。「? 千万円でしょう」すると、同席している所長が優しく言葉をかける。「まあ、研究費の話はまた別の機会にしましょう。今は研究内容の話をしましょう。」

Scene 3

1992年のうだるように暑い8月、名古屋駅前のとあるホテルの一室。日産科学振興財団の理事と国立研究所の助教授が話し合っている。「自分はアイディアもやる気もあるのですが研究資金が足りないのです。」「分かりました。貴方に研究費を満額差上げましょう。ただ、この研究費は200万円が限度ですが、貴方は申請書の段階で190万円しか要求していませんね。10万円はどうしたんですか?」助教授は研究費の限度額一杯に申請するのは品が無いと思い10万円下げていた。意味が無いといえ意味が無い10万円の差であった。「貴方が要求していないのに私が10万円足すのもおかしいですから、190万円満額にしましょう。」

Scene 4

それでも真空装置の作れない助教授が、国立研究所の教授の部屋に現れる。「大変困っているのですが……。」すると教授が優しく答える。「あのね、君が廣田先生の助手のとき作った真空装置は私は使っていないし、君が設計したものだから使っていいですよ。」教授の弘前弁なまりの優しい言葉に山形出身の助教授は感動する。これで何とかなるぞ……。助教授らは、さっそくもらった装置からNOビームを出して、LIFやREMPIを初めて取る。若い研究室で初めて観測されたスペクトルが無性に美しく見え助教授は感動するが、極低温なので線が数本出ているだけの単純なものである。(この装置は今でも理研で使われている。)



Scene 5

助教授と助手それに大学院生が、飯を食うために駅前に向かって国立研究所の前の坂を一緒に下りている。レーザーのオブティクス話をしているが、誘電体反射ミラーを買う金が無いらしい。大学院生が口を開く。「こういうミラーは前の研究室（阪大）にたくさん転がってました。ちょっと行って取ってきましょうか？」助教授はその言葉に感動しながらも、自分の学生を犯罪者にさせまいと学生を押しとどめる。

Scene 6

スペイン・サラマンカの乾いた夏。開かれていた国際会議に光分解反応のイメージング装置を完成した助教授がポスターを持ってやってくる。著名研究者の大掛かりな装置を使った実験に人々の関心が集まる中で、助教授はささやかな実験のポスターの前に立っている。大型スーパーの近くで個人商店を営む雰囲気である。助教授の2つ隣にポスターを出していたオランダの教授が「自分のポスターより鈴木さんのポスターの方が面白いから見て行きなさい」と彼のお客に話している。偉い学者は例外なく駆け出しの若手に優しいものである。

Scene 7

一連の結果を得た助教授が英語論文をまとめる。苦勞して得た結果だけに、英語は読みやすいものにしなければ。彼は、国立研究所の英国人研究者に原稿を添削してもらおう。「貴方の英文は、非常にフォーマルな表現とくだけた表現が混じっていますね。」

助教授は英語力に限界を感じつつ御礼のケーキを渡す。彼女はケーキを見て非常に嬉しそうである。話がクリスマスに及ぶ。「ところで私達はクリスマスのボランティアに孤児院に行きました。サンタの格好をしたりして子供を喜ばせるのです。」「孤児院がこの近くにあるのですか？」「はい、ありますよ。孤児院といっても親はいるのに愛情を受けていない子だそうです。」助教授は研究所の目と鼻の先に施設があることを知らなかった。後日、助教授はその施設を訪れる。「社会の援助を必要としている所があるのに、税金で飯を食い研究するなら本当に本質的な仕事をしなければ駄目だ！」子供たちを見て半分落ち込みながら、新たな闘志を燃やす。

瞬く間に10年が過ぎました。研究者として非常に大切な時期でしたが、研究のことを深く考えられる分子研の環境だからこそ、自分のような凡人でも欧米の俊秀と競いながら研究ができたのだと思っています。悔いのない時間を過ごすことができました。新任地ではより大きな仕事に向かって努力したいと思っています。井口先生、伊藤先生、茅先生の三所長にはお世話になりました。分子科学者からお借りした助教授職をお返し致します。科研費・民間財団などの資金を与えてくださった所外の先生方や、研究室に何も無い頃から集まって支えてくれた研究室の諸君、装置開発室や事務の方々にも心からお礼を申し上げます。

9年4ヶ月

千葉大学電子光情報基盤技術研究センター非常勤研究員 片 柳 英 樹
(前 技術課第一技術班電子構造研究系技術係員)

これまであまり熱心に分子研レターズを読んでいなかったために、原稿の依頼をいただいたとき気軽に承諾してしまいました。いざ書く段になって、既刊の「分子研を去るにあたり」を読み返してみたところ、執筆者は偉い先生方ばかりで、場違いな私の原稿などを載せるわけにはいかないとあわてました。真剣に取り消しを考えましたが、やはり書かせていただくことにしました。何よりも、お礼を述べなければならなかったからです。

修士も出ていない、明らかに馬の骨であった私を、技官として鈴木俊法先生に拾っていただいた以来、9年4ヶ月の長期にわたり、先生にも分子研の皆様にも迷惑をかけるばかりで、本当に申し訳ありませんでした。昨年度に、どうにかこうにか学位論文をまとめることができたのは、全て鈴木先生、および分子研の先生方のご指導によるものです。ありがとうございました。以下、反省として自分の過去を振り返ってみたいと思います。

大学生のころ化学の雑誌で「交差分子線装置」の記事を読み、化学といえばフラスコを振っている印象しかなかった私は、まるで素粒子物理か何かのような、その実験方法に大変驚きました。それがまさか近い将来交差分子線装置(の隣)で実験をするような機会に恵まれるとは想像もしていませんでした。この幸運に、私なりに鼻息荒く飛び込んだつもり分子研での研究活動は、しかし、想像を絶する厳しさでした。憧れだけでは、研究はできませんでした。

研究系に配属された技官の先輩方は、短い期間で個性的な研究を成し遂げ、学位を取得し、新天地へ

と、分子研から去っていきました。私にはできない、と思いました。こんな激しい競争にさらされ、大学では見たことも聞いたこともない複雑な装置や難解な理論を操り、学位をとって出ていくことは不可能かもしれない。ならばいっそのことやめてしまって、人生やり直す勇気が必要なのか。あるいはそれでも、ここで踏ん張る努力が必要なのか。と毎日悩みました。

おそらくは勇気がなかったからでしょう。私は分子研をやめませんでした。着任当時電子構造研究系にいらっしゃった方々は、次々と分子研を離れ、活躍の場を移して行かれました。そして、遂に鈴木先生が理研に異動されることになりました。私は、その他の仕事を投げ出して学位論文に取り組み、何とか学位をとることができました。周囲には大迷惑だったと思います。申し訳ありません。

その後、再び拾う神に恵まれ、現在の仕事をいただいて、今のところ何とか「研究する人生」を続けております。現在の職は非常勤で任期も短いため、気を抜かず、分子研で得たこと、反省するべき事をよく考えて研究に精進したいと考えております。

(オチのない文章ですみません。)



トランジション

理化学研究所化学反応動力学研究室研究員 高 口 博 志
(前 電子構造研究系電子状態動力学研究部門助手)

2003年の1月末、およそ7年間お世話になった分子研から、理化学研究所に移るために東名高速に乗りました。96年3月の大学卒業後の分子研赴任時には、東京インターからちょうど逆ルートで岡崎に向かいました。その途中静岡あたりで時ならぬ豪雨にあい、高速道路上で前も後ろも見えない危ない状況に、研究者としての第一歩での不安な先行きを暗示しているようだと、情けなくも強く不安に感じたことを覚えています。そして、それがその後毎春楽しませてくれる正門の桜の木ということも知らずに、下をくぐって分子研所内に入ったときには、研究者として第一歩を踏み出すことへの大きな期待と喜びを感じたように思います。

7年間の分子研研究生活ではいろいろなことを経験させていただきました。研究成果としてわかったこと、明らかにできたことはわずかだったかもしれませんが、「研究する」という言葉の意味のヒントくらいはつかむことができたような気がします。少なくとも研究に対する自分なりの価値観はこの間に大きく変わりました。総じてそれがずいぶん相対化しているように思ってしまう自分が少し齒がゆくもありますが、思えばこれもまだ、インターネットなどからたやすく手に入る情報を見るたびに更新されるものの域を出ていないかも知れません。このように何らかの結論や解決への道筋、そして自分自身の科学観、世界観といったものすら常に移り変わり、そのため一点を見据えて研究に没頭する境地などには一度として達することがなかったこの7年間は、その代わりたくさんの宿題を与えてもらった歳月で

した。

7年前には赤い小さな車一杯に積み込んできた布団や衣類の段ボール箱の代わりに、助手席には寝息を立てている同乗者がいます。当時と車名は同じですが、車の色は青に変わりました。岡崎インターから聞いていたFM愛知はいつしか聞こえなくなり、登坂車線が見えなくなってきたあたりからは、同じラジオのチューニングのままでJ-WAVEが鳴っていました。3度目の年男を迎えたこの歳に少々長く居た場所から移ることは、想像を少し超えるくらいの長さの時間の間に、内面的なものを含めて変わるものと変わらないものを認識してみる機会とはなりました。しかし、これもまたトランジェントなものであり、分子研で過ごした時間と同じように、あるいはそれ以上に、自分自身と周りの環境にこれからより大きな展開が待っている予感を感じています。それを今後どのように享受できるかは、岡崎で出された最大の宿題として和光に持ち越しです。

研究面においては常に大きな刺激を与えて下さり、また日々の生活においては楽しくお付き合いいただいた分子研の皆様に感謝したいと思います。どうもありがとうございました。

得意技

アイシン精機株式会社 新規事業企画室 ファイバーレーザー事業グループ 担当員 大 竹 秀 幸
(前 分子制御レーザー開発研究センター助手)

レーザーセンターの助手として六年五ヶ月の間、分子研でお世話になりました。いいことや悪いことが、毎日のように、しかもゲリラ的に起こり続けた六年半だったと思います。そんな毎日の中で一番役に立ったのは小学生のころから培った柔道の精神だったような気がします。

私の専門は光物性ですが、実は柔道も専門です。得意技は内股、払い腰、巴投でした。ところで得意技の定義って何でしょう。パルセロナ五輪の後、近代柔道という雑誌に、「得意技とは相手がその技をかけてくるということを事前に知っていても、それでも投げられてしまうような技をいう」と吉田秀彦の内股を絶賛した内容の記事が載せられていました。いい定義だと思います。彼の技は必殺技と呼んでも差し支えないでしょう。私の技は到底彼のレベルまで達しておりませんでした。それでも得意技と称しておりました。ところが、いつまでたっても得意技が出来ない稽古仲間もいました。彼らは決して稽古嫌いというわけではなかったのですが、なかなか上達しません。何故かという、彼らは流行を追いつぎたのでした。技にも流行り廃りというものがありまして、前出の吉田の内股、古賀の背負い投げを筆頭に、岡田の小内巻き込み、丸山スペシャル(すいません、ほとんどの人はわからないと思いますが、すごい技だと思って下さい)など、多種多様な得意技が流行っては廃れていきました。得意技がない連中は、あまりに熱心に打ち込むあまりか、そういった技の習得にばかり熱心になり、今まで稽古していた技の研鑽を怠ってしまうのです。でも、上記の得意技は信じがたいほどの才能が信じがたいほ

どの稽古を積み重ねて編み出したものであり、付け焼き刃で対抗できるほど単純な技ではありません。このつまみ食いのような稽古は、結果的に回り道に他ならないのです。流行の技を追いかけた稽古仲間の多くは初段になれるかなれないかという段階で柔道を止めてしまいました。これは今までの稽古の意味が否定されてしまうので、非常に辛いことだと思います。私は幸いなことに、肘が悪くて流行の背負い投げができなかったり、器用でなかったこともあり、四半世紀にわたり同じような技ばかり稽古してきました。今でも道場に出れば、自分の得意技が何であるのか、どういう技なら新しい得意技に成り得るのかと自問自答しながら稽古しております。やはり、柔道も研究も本質は同じなのかも知れません。

最後になりましたが、分子研に在職中、様々な形でご支援いただきました、猿倉さんと猿倉Gの皆様、レーザーセンターの皆様、分子研関係者の皆様に、この場をお借りしてお礼を申し上げます。シドニー五輪や全日本選手権決勝で井上康生選手が見せた「必殺の内股」に勝るとも劣らない「得意技」、いや「必殺技」を、分子研が世界に向けてアピールし続けることを心より祈念して筆を置きます。

ありがとうございました。(礼)



やっとかなったサバティカル

山梨大学大学院医学工学総合研究部教授 小宮山 政 晴
(前 分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門教授)

米国で大学院生活を送っていたころから、サバティカルに興味がありました。働き始めてもないのにサバティカルというのも変な話ですが、普段と異なる研究環境を定期的に体験するという意味で非常によいシステムのように見えましたし、また米国の大学のダイナミズムの源泉の一つのようにも思えたのです。このようなことから、分子研の流動制度についても以前からたいへん興味をもっていました。これには、界面分子科学研究部門の最初(平成元年度)の流動教官が、私がよく知っていた人たちだったこともあずかっています。このようなわけで、私に流動の話が出たときは、躊躇なく準備を開始したというわけです。

流動部門に人を出すというのは、出す側の大学にとってなかなかたいへんなことです。人が一人いなくなるだけではなく、ポストもひとつなくなります。替わりの人を客員が何かでとればよいのですが、そういう制度にもなっていません。したがって出す側の大学では、流動する予定の先生の授業をだれがやるのか、流動する先生が担当している、またはその後2年間担当するはずの学生をだれが指導するのか、といったことが大きな問題になります。このような問題は、ことに人員に比較的余裕のない、地方の新制大学で顕在化しやすく、そのようなことが原因で、流動の話が途中でだめになるということもしばしばあるようです。

私の場合は幸いなことに、教養部改組(大綱化)に関連した一連の学内改革の一部として、学部を替わって新設の学科に移ったばかりでしたので、授業負担も少なく、論文指導をしなければならない学生

もまだいない状態で、流動に際しての問題はあまり大きくありませんでした。それでも、学科レベルから学部レベルまで、流動の意義から始まって、流動中の負担部分の対処、そして2年後にはポストも私も必ず返ってくることの説明まで、それなりの根回しが必要だったことはいうまでもありません。最終的には授業負担の問題だけが残りましたが、これは毎週金曜日に授業をやるために大学に帰るという約束をすることで解決できました。

さて、このようにして始まった二年間の流動生活も、あっという間に過ぎてしまいました。申し分のない(と私には思える)分子研のような研究環境の中で「サバティカル」を送ることができるのは、研究者にとってはたいへんに幸運なことであるように思います。大学のさまざまな運営や学生の厚生補導などから開放されて、四六時中研究のことだけを考えていればよいという状況下、サバティカルには過分の研究費と、装置開発室を始めとする充実した研究支援環境に恵まれて、心おきなく仕事に打ち込むことができました。流動中の研究が実を結ぶのはしばらく先のことになると思いますが、このような流動を可能にくださった、茅所長はじめ分子研の皆様には篤く御礼を申し上げたいと思います。

流動部門での刺激的な 2 年間

千葉大学大学院自然科学研究科助教授 奥 平 幸 司

(前 分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門助教授)

2001 年 4 月から 2 年間の流動部門の任期を終えて、2003 年 4 月 1 日より千葉大学に帰任いたしました。この 2 年間は、所長の茅幸二先生をはじめ多くの人々のご好意により、快適な研究活動を送ることが出来ました。また宇理須恒雄先生をはじめ極端紫外光科学研究系の方々には、特にお世話になりました。

こちらにもどり 1 ヶ月になり講義、学生実験も始まりました。2 年間遠ざかっていた大学生活のリズムに慣れるに従い、改めて流動部門のこの 2 年間は、とても刺激的で、あっという間に夢の様に過ぎさってしまいました。2 年前流動部門に着任し、岡崎への転入届を市役所に提出する際通った乙川の堤防の桜がとてもきれいでした。そう感じたのもつかの間、次に同じ場所でほころびかけた桜を見たのは、岡崎からの転出届を提出しに行く時でした。

僕は分子研に 13 年前に IMS フェローとしてお世話になっております。その後も協力研究で UVSOR の BL8B2 ユーザーとして年数回訪れる機会がありました。その意味では分子研自体（外観）は僕にとって目新しいものではありません。ユーザーとして分子研に来る場合、時間的問題（UVSOR のユーザーの場合、1 週間程度のマシンタイムの間朝 9 時ごろから夜 8 時ごろ（もちろんもっと遅くまでいることもあります）まで UVSOR 実験ホールに閉じこもっていることが多く、外に出るのは食事と SR 光入射時になってしまうことが多い）から、なかなか分子研の雰囲気に触れるにはいたりません。しかしながらこの 2 年間の分子研での生活は後述するように、久しぶりに IMS フェロー時代に感じるものが

できた刺激の多い日々となりました。流動部門は、大学で多くの時間が割かれる入試問題作成、試験監督、授業などの負担がなく、研究者にとってすばらしい環境であることは確かです。さらに時間の問題だけでなく、分子研には身近に大変すばらしい研究者の方々があり、最先端の研究がもつその雰囲気に触れることはそれだけでもとても貴重な体験でした。実際、毎日の様に行われる研究会、多くの人たちと有益なディスカッション、共同研究等、研究分野間の垣根の低さは大学では得られないものでしょう。このような環境の中で、放射光を用いた有機薄膜表面・界面の電子状態に関する研究を行うことができました。自分として満足な結果を出せたとははいえませんが（したいこと、やり残したことが多すぎます）、今後の自分の研究の上で重要な“芽”を見つけることが出来たのではないかと思います。

現在大学に戻り、日々“研究＋その他の用務”に追われ苦闘しております。しかしながら分子研で受けた刺激を大切にしながら、学生が多いという大学の特徴を有効に活用し、新たな研究に進んでいきたいと思っております。

最後に、流動部門に関して、一言。今後独法化の関連でその存続を含めて多くの議論がなされると思います。研究者の流動性の低さ、研究以外の業務に費やす時間の増大等、これまで日本の大学の教官について指摘されてきた問題点を考えると、流動部門の存続とより良い方向への制度の変革は是非とも必要だと思えます。2 年間本当にありがとうございました。



流動部門を終えるにあたり

岡山大学理学部助教授 久保園 芳 博
(前 分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門助手)

平成 13 年 4 月に、岡山大学理学部から分子科学研究所界面分子科学（流動）部門に着任してから、すでに二年以上が経過しました。今年 4 月からは、岡山大学理学部に戻り、研究生活を再開しております。岡山大では、フラーレン物質の構造・物性研究と、材料への展開を図ることを目指して研究を行っていましたが、流動をお世話頂いた宇理須先生との打ち合わせの上で、分子研では走査トンネル顕微鏡（STM）を使ったナノスケールでのフラーレンの構造・物性研究を行うことを決めました。また、当時フラーレン電界効果トランジスターによる超伝導が話題になっていたため、分子研で電界効果トランジスターの研究を行うことを決めました。なお、現在は電界効果トランジスター研究については方向転換して、フラーレンの基本性質を知る手段として、また応用を念頭に研究を進めております。電界効果トランジスター作製に当たっては、アルミナ絶縁膜の作製が困難であることを知り、シリコン酸化膜を用いることにしました。それまで全くシリコン酸化膜についての知識を持っていなかったわけですが、宇理須先生を始めとする宇理須研の方々に、いろいろ丁寧に教えて頂きながら、徐々に電界効果トランジスター研究の体制を整えていきました。幸い、二名の大学院生が分子研の特別研究員として常駐してくれましたし、岡山大の修士課程から総合研究大学院大学博士課程に進学し、宇理須研に所属した学生がいっしょに STM 研究を行うことになりました。さらに、岡山大から 4 名の学生が協力研究等の制度を利用するなどして、度々来てくれましたので、研究については人員的には問題は生じませんでした。

STM 研究につきましては、13 年度半ばに装置が納入され、徐々に結果を出すことができました。

我々は、以前より岡山大学という研究環境にあまり恵まれない位置にいたこともあり、高エネルギー加速器研究機構や SPring-8 などの全国共同利用施設を利用して研究を行うというスタイルを取ってききましたが、これに分子研が加わったというのが着任時の正直な感想でした。事実、従来出張に加えて、岡山と分子研の往復が加わったため、通常より遙かに出張回数が増えるということになりました。13 年度は岡山大の研究室内に教授がいたこともあり、研究室が継続して存在しておりましたので、岡山大に残した 4 名の学生を中心に、岡山大で物性研究用の試料作製を行うこととしました。14 年度には、所属研究室の教授が退官されたため、学生を他の研究室に分散配属させ、その管理下で従来通り我々と共同研究を行うという方針をとりました。その間に岡山大の研究棟の改築や研究室の移動などがあったため、学生には研究以外の雑務で大幅な肉体的（精神的）負担を求めることになりました。しかし、一方で学生たちは分子研と一緒に研究を行うことを楽しんでくれていたと思います。また、分子研の学生との交流も結構頻繁にあったようです。

研究面では、分子研での研究を通じて、薄膜電界効果トランジスターとナノスケールの構造・物性研究について、予備的な段階をきっちり固めることができたと思っております。岡山に帰ってからは、分子研での研究をベースに結果を出していこうと思っています。家族は岡崎に二年間居住しました。長女は幼稚園に通い、長男は赤ん坊でしたが、岡崎で成

長しました。そのため、岡山に戻ってからも名鉄パノラマカーのことを頻繁に話題にします。また、宿舎のみなさんにはいろいろ親切にしてみました。最後に、分子研で研究を行うに当たって、宇理須先生を始めとする宇理須研のみなさん、見附先生とグループのみなさん、理論の永瀬先生、小林先生、加藤先生、横山先生、ナノサイエンスセンターの酒井さん、装置開発の水谷さんを始めとする方々に非常にお世話になりました。また、電界効果トランジスターについて夢田先生にいろいろお教え頂きました。この場をお借りしてお礼を申し上げます。今後ともよろしく願い申し上げます。



流動部門を終えるにあたり

名古屋大学大学院工学研究科助手 高 嶋 圭 史
(前 分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門助手)

流動部門での研究を終えて、4月1日から名古屋大学工学研究科に戻りました。岡崎と名古屋は車で1時間程度の距離であり、この4年間の流動任期中は共同研究のため分子研と名古屋大の間を行き来していましたので、帰任して1ヶ月ほどですが、まだ分子研にも所属しているような気がしています。

分子研では、小杉施設長をはじめとするUVSORスタッフの方々、特にUVSORマシングループの方々に大変お世話になりました。これまで加速器を利用した実験を行ったことはあったのですが、加速器の運転についての知識は全くありませんでした。名古屋大学では放射光利用のための小型電子蓄積リング建設の計画を持っており、私もこの計画に参加させてもらっているのですが、UVSORにおいて実際の電子蓄積リングの運転に接することができたのは非常に良い経験となりました。

新しく加速器を建設するにあたっては、発生する放射線の遮蔽方法を十分に検討しなければいけません。UVSORは名古屋大で計画している施設と同程度の規模であるため、UVSOR蓄積リング周辺での放射線量の測定は、遮蔽設計の基礎データとして利用したいと思っています。放射線の測定は、蓄積リング内を周回している電子が軌道を外れて失われる過程を考察する上でも重要ですので、今後もUVSORにおいて測定を行いたいと考えているところです。

UVSORマシングループとは短パルスレーザーを

用いた放射光発生の可能性についてこの2年ほど共同研究をさせて頂きました。BL5用の円偏光アンジュレーター中を電子のパンチが通過する時に、これとタイミングを合わせてレーザーを後方から入射します。すると、レーザーと重なった位置にいる電子のエネルギーが変化して、偏向電磁石を通過するうちにパンチ本体から外れてゆきます。この外れた部分の電子からの放射光のみを取り出せばレーザーのパルス幅と同程度の短パルス放射光を得ることができます。また、パンチ本体には、エネルギー変化を受けた電子が移動するため、はじめにいた部分にディップができますので、この影響でディップの長さ程度の波長を持つコヒーレント放射光が発生します。これらの放射光は、実用化するためには強度を上げる工夫が必要ですが、ぜひ実験的に確かめてみたいと思っています。

分子研での流動の任期は終わったのですが、これからも共同研究等でいろいろとお世話になることがあるかと思っています。よろしくお願い致します。

最後になりましたが、茅所長、極端紫外光科学研究系主幹の宇理須教授には、分子研で研究を行う機会を与えて下さり、大変感謝しています。また、この4年間に界面分子科学研究部門に所属された小宮山教授をはじめとする先生方、秘書の佐々木さんにはいろいろとお世話になりました。ありがとうございます。

Research Life in IMS

Ha-Jin Lee

Since my arriving at IMS at June 2002, I am working as a JSPS postdoctoral fellow in the group of Professor Hayao Kobayashi. When I was Ph.D candidate (about 6 years ago), I heard the name the “IMS” for the first time from one of my academic advisors. (Associated Prof. Insook Rhee Paeng, Dept. of Chem., in Seoul Women’s University) She told me that IMS is one of the high-class research institutes in the world. At that time I couldn’t understand the word “high-class research institute.” However, now—after I joined here I can realize its meaning.

In 1996, when I was in a master program-the 1st year graduate school student, I had a chance to work at NIMC (National Institute of Materials and Chemical Research), Tsukuba in the Dr. M. Mizuno’s group for two months as a research fellow student who was supported by Japan-Korea Industrial Technology Cooperation Foundation Research Fellowship Program. During working at Tsukuba, my research was much more intensified, especially on synthesis of the conductive organic materials. The experience at NIMC led me to keep studying this field. After I returned to Korea, I enlarged my research experience. Furthermore I decided to pursue doctoral degree with this research field. I knew Prof. Kobayashi’s name when I attended the ICSM, one of the big conferences related to my field. Since then I could meet him frequently through many papers. I knocked the door for my postdoctoral research in Prof. Kobayashi’s group after completing my degree. Even though I missed the

first chance (2001 spring) to apply JSPS program, I was very fortunate that I could receive information on the next JSPS recruitment via Prof. Kobayashi and get approval of my fellowship by JSPS.

During the official processes for my staying in Japan I felt kind consideration from administrative staffs, Ms. Kondo and Mrs. Haruna, as well as Prof. Kobayashi. When I arrived in Japan, all the living necessities had been already settled down (even some foods and water for arriving day were kindly prepared by Ms. Kondo-san.) and I didn’t have to handle anything at all. Actually I had been apprehensive for my Japanese life because it was the first time for me to survive such a long period (2 years) alone not only in abroad but in Korea. However, the apprehension was gone when I found the thoughtful organization and careful consideration by IMS’s staffs. Those experiences made my start in Japan so easy and helped to adapt myself to new circumstances quickly.

Now I am enjoying research life in IMS under great research environment including high quality equipments, rich library and supportive colleagues who hold great skills and deep knowledge. My research interests were mainly focused on the synthetic works of new organic conductor materials in Korea. Therefore I did not concentrate on investigating the physical properties of new materials and I couldn’t help sending those to any research institutes and waiting for a long time to get the results. On the contrary, in IMS I have used all the equip-



ment and research facilities (such as X-ray crystallography, SQUID, 4-probe conductor meter, ESR, SEM, low-temperature center, and so on) which I want to use by myself (of course it took long time little bit to be accustomed to new equipments...) without regard to time.

I also feel my research knowledge is enlarged through the regular or special colloquiums such as CM2 seminar and Molecular Science Forum and Colloquiums, and I am very delighted to hear lots of lectures which are provided by great lecturers.

All these research environments are sufficient to explain the 'high-class research institute', and I don't doubt the research experiences in IMS will play a very important role to determine my future research career.

Finally, I would like to express my great appreciate to Prof. Hayao Kobayashi for giving me a chance to enjoy research life in IMS and fully supporting for active research. I also give my thanks to Dr. Hideki Fujiwara, an excellent coworker and helper at the same time, and also all members of OUR group.

Impressions about IMS and Japan

Nicolaie PAVEL

My name is Nicolaie PAVEL and presently I am with the National Institute for Laser, Plasma and Radiation Physics, Bucharest, Romania, under a senior scientist position. As I have spend few years in Institute for Molecular Science (IMS) from Okazaki, working under direct supervising of Associate Prof. Dr. Takunori TAIRA of Laser Research Center, it was not a surprise for me his kind request of writing about my experiences and telling my opinion about the periods I was living in Japan. A little more difficult is to do that; my job is to work with figures, make experiments and calculus, deal with abstract problems, but now I have to solve a problem of ‘literature.’ Seems difficult, but my teacher asked me so I have at least to try!

I was lucky! Really! Most of the foreigners are coming to Japan to do their job without knowing Japanese! But I started in April 1996 at Kanazawa University (Ishikawa Prefecture) with a six months Japanese class: it was not only a daily six-hours class plus four to six-hours home working, but also a period I get used to the Japanese people, life, culture, customs! It was the period I found how real are things you could sometimes find only from books! I moved in September 1996 to Fukui University (Fukui Prefecture) where I was a research student under a MONBUSHO scholarship, and where I met my teacher, Takunori TAIRA! You know, many times a student to teacher relation is cold, mainly based on respect; they meet in the classroom and at the final exams! But he was different: you could discuss with him any problem, about science or life, he was all the time trying to fill the time

you spend out of laboratory, showing you new places, going to the sea, amusement parks, ‘onsen,’ introducing you to new peoples, *etc.* Of course he was very demanding with your job, but this is normal, isn’t it? It was the period (September 1996—April 1998) when I learned so many things about my job, but also we put the bases of a warm friendship.

I joined IMS in 1999 under a Japanese Society for the Promotion of Science (JSPS) two-years post-doctoral scholarship, and I worked with Taira-sensei during that period. IMS has a very well equipped library where I could find almost any paper or book I looked for (it was one book about spectroscopy even in Romanian language); in few days I received also copies of papers published in journals with limited circulation! The access to web was very fast and the care paid by the Institute to have subscription to most of the important journals you could find in the ISI scheme shows attention for a step that is very important in doing a good research work: information. I saw also the group of Taira-sensei growing; he started with two rooms and two experimental benches, and by a sustained financial support from the MONBUSHO he has now very good equipment and of course great results. You can find his or his co-workers names in most of the important journals (*Appl. Phys. Lett.*, *Opt. Lett.*, *Phys. Rev. B*, *Opt. Commun.*) and Digests of Conferences held in Japan or abroad. Keeping already established relations (Stanford Univ., for example) helped our group in research continuity, but the policy of inviting new and new people from abroad for



short working periods in IMS, or persons from Japan to give us lessons about subjects related to our works, let us know what is new and how things are moving in a research area! Many times I needed to make various devices or to change my experimental set-ups: IMS has special storerooms where I could find every mechanical or electronically parts. Moreover, for more difficult devices a qualified personal was waiting for your requests and doing very well their job.

IMS surroundings give you an idea about part of Japanese life: integration with and care for nature! I was impressed by the fact that every day of the year I could find a flower at IMS! White, yellow, red, or pink: white ‘sakura’ in spring, a sea of red during summer, red-colored trees in autumn, green leaves covered with white snow in winter! You could find even a small pond there; sincerely, what are missing to that pond are few fishes! But just go to the Biological Institute and a pond covered with water lily and a bird that seems to be the guarder of that place is waiting for you!

I lived in Mishima lodge: the care of IMS for a good accommodation for foreigner researchers must be appreciated! I know that in Japan moving in a new apartment means, many times, to move in an empty, unfurnished place, for which you must pay few times the monthly rent! But here I could find everything for a daily decent life, apartments furnished in western style that are placed in a quiet neighborhood. The Okazaki town is also a quiet town (many people could say that is too quiet!), but walking along the river or around the castle, visiting

various temples or parks could pour peace in your soul and refresh you after a working day! However, in less than one hour you can reach Nagoya and its tumultuous day or nightlife! Just try!

This does not mean that everything went smooth for me! Starting a new research subject need assiduous work, sometimes it was difficult to understand why it takes so much time to take a decision and why is more difficult to change a decision that is clear going you on a wrong path, many times I get bored discussing again and again about the some subject! But I am a Latin people and I was living in Japan! Japan taught me to be patient and to taste every small victory (I mean good result), to learn from every mistake and to keep hoping and fighting, and hoping again!

I visited IMS also in autumn of 2001 for two-months and in 2002 under a 10-months JSPS scholarship. Few of my friends leaved the group of Taira-sensei, new peoples joined the group, but I found the same intense working atmosphere. Some of us have now children, our responsibilities increase, and every person’s life is following its path. But I hope that friendship will last! I am sure that Taira’s-Sensei group will grow up further and I hope to visit the Institute for Molecular Science and join this research group in near future.

Finally I would like to say thanks to all the peoples I met at IMS, students, foreigners, teachers, friends or just persons that were kind to say a simple ‘Hello!’ I hope I will see you again, and if not I wish you have a life filled with good results, joy and happiness.

学士院賞

日本化学会学術賞

日本化学会進歩賞

日本化学会第83春季年会学生講演賞

岩村 秀

笠井俊夫

松尾 司

鈴木研二

岩村 秀分子科学研究所名誉教授に 学士院賞

分子科学研究所名誉教授の岩村 秀先生が、木下 實先生（東大名誉教授、分子研評議員）、伊藤公一先生（大阪市大名誉教授）と共に、分子性磁性体の研究に対する業績で、平成15年度の学士院賞を受賞されました。この分野に身を置くものとして、また分子研に在籍するものとして、お三人の先生方に対し、心よりお祝いを申し上げます。

岩村 秀先生は、昭和9年12月17日東京都にお生まれ、（ちなみにお三人方は同じ年生まれ）昭和32年3月東京大学理学部化学科をご卒業後、同大学大学院化学系研究科に進学され、修士課程、博士課程（ちなみにお三人方は同じ学部、大学院研究科）を修了ののち、昭和37年3月に理学博士号を取得と同時に東京大学理学部助手、昭和41年7月東京大学講師を経て、昭和45年1月東京大学助教授となられた。昭和51年10月～昭和52年11月分子科学研究所関連領域研究系助教授を併任され、昭和52年12月から分子科学研究所教授（関連領域研究系関連分子科学第1研究部門）となられ関連領域研究系研究主幹を併任し、昭和53年4月からは化学試料室長をも併任されている。昭和62年6月に東京大学理学部教授として戻られ、平成6年には九州大学有機化学基礎研究センター教授となられ

た。引き続き定年の平成7年3月まで東京大学教授を併任され、平成7年4月より九州大学有機化学基礎研究センター・センター長を併任された。平成10年3月に九州大学を定年後、平成10年4月より学位授与機構教授、平成12年4月より、放送大学教授となられ今日に至っている。その間、平成7年に東京大学名誉教授、平成9年に分子科学研究所名誉教授、平成10年に九州大学名誉教授の称号を授与されている。また平成14年度の日本化学会会長を務められている。

岩村先生の分子磁性体の研究は、分子科学研究所時代に当時大阪市大の伊藤公一教授（今回の共同受賞者）との高スピンオリゴカルベン（今回の共同受賞者）との高スピンオリゴカルベンの共同研究に始まったと伺っている。その当時有機分子に複数のスピン源を配したポリカルベン、ポリラジカル分子の分子内スピン源間磁気相互作用の考え方が原子価結合論で予想できることが分かった頃で、その当時世界に先駆けて非常に大きな磁気モーメントを有するポリカルベン分子が分子研で次々と合成され、この共同研究で解析された。この研究は東大に移ってからも続けられ、分子設計、合成法、発生法が改良され、平成5年には18個ものスピンが平行に並んだ $S = 9$ の分子が合成され、その基底状態のスピン多重度の証明に成功されている。この分子は、遷移金属イオンが持ちうる最大のスピン多重度である三価ガドリニウムの $S = 9/2$ をはるかに凌駕した有機分子として広く知られ、今日でも均一有機分子で最大



のスピ多重度をもつ。また、不安定なカルベンの代わりに安定ラジカルであるニトロキシドラジカルを複数分子内に持つ、高スピンオリゴニトロキシドラジカルの合成研究にも同時に意欲的に取り組んでこられ、数々の高スピンオリゴニトロキシドラジカルの開発に成功されている。東大時代には、こうして開発されたオリゴニトロキシドラジカルは、これらのラジカルと遷移金属イオンの自己集合組織化による、有機無機ハイブリッドフェリ磁性体の構築研究へと生かされた。この構築手法では、配位結合の方向が規定されることを利用することで、配位子のラジカル置換基の数とその方向により、磁性体の構造を予測・設計することができる。その結果、結晶構造の制御のみならず、磁気構造の制御を同時に行うことができ、世界的に高く評価された。これらの分子磁性体の構築研究は有機化学、物性化学の概念を駆使されて合理的、且つ筋道を立てて科学的立場から進められた。これらの業績を受け、米国シカゴ大学 Julia and Edward Lee Lectureship (昭和62年)、日本化学会賞 (平成4年)、紫綬褒章 (平成8年)、藤原賞 (平成10年)、ポーランド化学会キュリーメダル (平成13年) などをご受賞されている。

また岩村先生は、他のお二人共々、分子磁性の分野では世界的なオピニオンリーダーとしてこの分野の指導、発展に大きく寄与されると共に、人材育成にも力を注がれ、長年の研究活動を通して、多くの優れた研究者を世に送り出されている。このほか学術行政、日本化学会をはじめとする幅広い学会活動、国際学術交流など科学の広い分野で多大の貢献をされている。今後ともますますのご発展とご健康を心

よりお祈りし、お祝いの言葉と致します。

(井上克也 記)

笠井俊夫教授に 日本化学会学術賞

前関連領域研究系分子クラスター研究部門の笠井俊夫教授が、「配向分子ビーム法による反応ダイナミクス研究——気相反応における立体 (分子配向) 効果の発見とその表面反応への展開」の業績で平成14年度日本化学会学術賞を受賞されました。心からお祝い申し上げます。

化学反応における立体 (分子配向) 効果は、アレニウスの反応速度式の前指数因子に見られるように、その重要性は古くから認知されています。(配向とは、英語でいう Orientation で分子の頭と尻尾を区別することができる分子軸の向きです。) 実験的に、立体 (分子配向) 効果を観測するために、分子配向をどのように制御すれば良いのか? 紙上に記した分子の分子配向は容易に制御できますが、実際の気相中の孤立分子は、分子回転をしており、分子配向を制御することが困難であると、容易に推察できます。笠井先生は、気相において分子の配向を制御する方法として、六極不均一電場を用いた高密度の配向分子線反応装置を独自に開発されました。この反応装置の優れたところは、分子の量子状態と衝突方向の両方を制御した状態で反応させることができることです。さらに反応生成物を高感度で検出す

ることが可能であることです。それを用いて種々の励起原子・有機分子反応系に関して、分子の配向状態を制御しつつ反応断面積を測定し、分子配向効果すなわち立体効果を実験的に初めて直接観測することに成功されました。これにより、化学反応論における基本概念である反応分子軌道間の重なり及び分子配向原理を直接実験と比較検討することができるようになりました。また、分子軌道間の重なり立場から重要な気相反応、例えばペニングイオン化反応、エキシマー生成反応、電子衝撃による分子イオン化反応などの立体反応ダイナミクス研究を行い立体効果の発見と分子レベル反応機構の詳細を明らかにされました。これらの研究を通じて、立体効果の起源となる要因を、波動関数の空間形状と反応物間の相互作用ポテンシャルを用いて統一的に解明することに成功されています。

また、気相ダイナミクス研究の一環として、配向分子線装置の中核部である六極不均一電場を用いて中性分子クラスターの構造とサイズの非破壊的選別法を世界に先駆けて確立されました。その選別法で選別されたクラスターの気相反応への応用もなされています。近年は、気相及びクラスター反応の立体ダイナミクス研究で得られた研究成果を物質創成や触媒設計に応用するため、超高真空対応型配向分子ビーム表面反応装置を立ち上げられています。今後、分子配向制御に基づく表面反応ダイナミクス研究が表面反応制御法に大きな役割を果たすと考えられます。

笠井先生が受賞講演で「アレニウス式の前指数因子に含まれる立体因子は、一見0から1の確率値

しか持ちませんがそれは非常に大きな効果で、そのことにより分子の配向を制御することで反応断面積や生成分岐を制御することができます。」と言及されています。笠井先生が“Stereo-Alchemy”と呼ばれる上記の研究は、言うまでもなく世界的に極めて高い評価を受け「立体ダイナミクス」研究が新分野として定着するのに大いに貢献されてきました。その評価の一端として“International Conference on Sterodynamics”が、笠井先生を世話人代表として2004年12月に大阪で開催されるのは、私達ダイナミクス研究をする者にとっても嬉しいことです。

笠井先生の研究は、終始一貫して配向分子線装置を用いた基礎科学的な研究です。先生がよく言われることは、「研究にとって究極に大切な事は、眼前に見える物質ではなく、その背後にある真理である。従って、そのことを許す寛容な環境が、教育の場合と同様に大切である。」ということです。上記の研究成果は、研究を行なわれてきた大阪大学理学部や分子科学研究所の自由で温かい雰囲気と基礎科学研究への情熱、さらには、笠井先生の多彩な才能との融和により創出されたものであると思います。笠井先生のますますのご活躍をお祈り致します。

(井村考平 記)

松尾 司助手に 日本化学会進歩賞

錯体化学実験施設の松尾司助手が、「ケイ素基の



特性を活用した四員環および五員環を機軸とする π 電子系アニオン種に関する研究」で、平成14年度日本化学会進歩賞を受賞した。以下に受賞対象となった松尾氏の研究内容を簡単に紹介する。

過剰な電子を収容した π 電子系ポリアニオン種は、実験化学だけでなく理論化学の観点からも非常に興味深い化学種である。しかし、負電荷間の大きな静電的反発のためにポリアニオン種の合成は非常に困難であり、正確な構造や性質に関しては未知であった。松尾氏はこの問題点を克服するのに、ケイ素基のもつ立体的効果に加え、ケイ素-炭素結合における σ^* 軌道と π^* 軌道間の「負の超共役」による π 電子系の空軌道エネルギー準位の低下とケイ素基の α 位のアニオン電荷を安定化する効果に着目した。これらケイ素基のもつ特性を巧みに活用することにより、種々のジアニオン種やテトラアニオン種をアルカリ金属錯体として合成・単離し、それらの構造と性質の解明を通して独自のカルボアニオン種の化学を開拓した。これらの研究における主な業績として、シクロブタジエンジアニオンの芳香族性の解明、溶液中における対カチオンの動的挙動の解明、テトラアニオン種の合成と構造の解明が挙げられる。なかでも特筆すべき成果はシクロブタジエンジアニオンの合成である。遷移金属錯体から典型金属錯体へのトランスメタル化法という従来にない、独創的な合成法を用いることにより、四員環6 π 電子系化合物であるシクロブタジエンジアニオン（松尾氏に

よると有機化学における「モナリザ」だったらしい）をジリチウム錯体として初めて合成・単離した。X線結晶構造解析とNMR研究からシクロブタジエンジアニオンが非ベンゼン系芳香族化合物であることを実験化学的に証明した。また、シクロブタジエンジアニオンが二重に縮退したHOMOと1つのLUMOを併せもつ特異な有機分子であることを、磁気円二色性スペクトルにおける負のファラデーA項の観測により実証した。

以上の成果は、松尾氏の職人技的な合成テクニックと失敗を恐れずに実験に取り組む好奇心（最近もよく失敗し、実験室でうなだれているのを目撃します）があって得られたものである。現在、典型元素化学を基盤に有機金属化学、無機金属化学へと研究領域を意欲的に展開し、次の「モナリザ」を射止めるべく日々奮闘している。今回の受賞を関係者一同からお祝するとともに、松尾氏の今後一層のご発展を期待したい。

（川口博之 記）

鈴木研二氏に 日本化学会第83春季年会学生講演賞

日本化学会は若手研究者の活性化をはかることを目的として第83春季年会からB講演を設け、さらに博士課程に在籍する学生会員の優れたB講演に対して「学生講演賞」を授与し、日本化学会会長名で表彰する制度を設けました。総研大の鈴木研二君は

第一回目の「学生講演賞」を受賞しました。まずは受賞おめでとうございます。講演題目は「 θ -(ET)₂RbZn(SCN)₄の高圧相での電荷分離」です。 θ 型とよばれるBEDT-TTFの電荷移動塩では均一な電荷分布をもつ金属状態が不均化（電荷分離）を起こし、不均一な電子分布を持つ局在状態へ相転移します。鈴木君は温度と圧力をパラメーターとしてこの相転移がどのように変化してゆくかを電気抵抗とラマン分光法によって研究しました。ラマン分光法ではBEDT-TTF分子の電荷に敏感なC=C伸縮振動を観測できます。この振動バンドが電気抵抗のとぶ温度で明瞭に分裂することで、高圧下で電荷分離が発生していることを明らかにしました。高圧（3 GPa）・低温（10 K）という困難な条件下で丁寧な実験を行い、電子状態の変化を明らかにした事が評価されたものと思います。鈴木君は平成15年度4月から博士課程に3年次に入っています。現在 θ 型構造のBEDT-TTF塩について系統的な研究を進め、いわゆる金属相が通常の金属とは異なる異常な状態であることを明らかにするなど新しい方向へ研究を展開しています。これら一連の仕事を元に学位論文を書く予定になっていますが、今回の受賞は鈴木君にとって大きな励みになったと思います。今後もさらに研鑽を積み立派な学位論文を書き上げてください。

（薬師久弥 記）

反応動力学研究部門 (分子エネルギー変換研究部門)
Prof. KUMAR, Krishna, Subbarao Venkata

基礎光化学研究部門 (分子エネルギー変換研究部門)
Prof. DAS, Puspendu Kumar

ナノ触媒・生命分子素子研究部門
Prof. YOON, Cheol Min

統合バイオサイエンスセンター
Prof. KIM, Younkyyoo

界面分子科学研究部門 (極端紫外光研究部門)
Prof. MORGUNOV, Roman

統合バイオサイエンスセンター (分子エネルギー変換研究部門)
Prof. VAROTSIS, Constantinos



Prof. KUMAR, Krishna, Subbarao Venkata

Kumar 博士は 1954 年生まれで、1974 年に若干 20 歳でインドのバンガロール大学物理学修士を取得した秀才である。1981 年にプラズマ中の負イオン生成機構の研究でインド科学研究所に博士論文を提出し Ph.D. を取得された。1983 年からタタ基礎科学研究所の研究員、准教授を経て、1998 年から同研究所の助教授に就いておられる。現在は光・原子・分子研究室のリーダーの一人としてグループを率いておられるとのことである。ボンベイ市海浜の風光明媚な土地にあるタタ研究所は、1945 年に設立されたインドの学術拠点であり、400 人を超える研究者が数学・物理学・化学・生物学・コンピュータ科学・科学教育などの分野で仕事に取

り組んでいる。

Kumar 博士は、研究員の時代にドイツのカイザースラウテルン大学 Bergmann 教授の元にポスドク留学をされ、Na ダイマーの電子衝撃回転励起の研究に関して 2 年間で 6 報の論文を作成された。その後も原子分子衝突の実験を専門とし活躍されている。研究内容は電子の非弾性散乱過程、イオン分子反応、負イオン化学、実験装置開発技術、生物物理学など多岐に渡る。氏は電子原子光衝突国際会議 (ICPEAC) の常連であり招待講演者にも選ばれており、この分野ではインドの代表格と目されている。分子研での滞在期間は平成 15 年 1 月から 6 月初頭までの 4 ヶ月半と短期であったが、シャットダウン直前の UVSOR 放射光リングから供給される真空紫外光や軟 X 線を利用して、分子やフラーレンの光イオン化実験に精力的に取り組まれた。氏の博識に

我々はたびたび驚かされることが多く、グループの若手にとって良い刺激になったと思っている。

Kumar 博士はたいへん明るく活発な性格で温かい人柄であり、とても話好きである。滞在中は東工大や大阪大に招待され、講演を通して多くの研究者と交流を深められていた。来所後まもなく日本語を習い始め、帰国時には複雑な漢字を理解するまでの上達ぶり示された。また分子研に在籍する多くの外国人研究者とも広く親交を結ばれたようである。

ご家族は理知的な奥様と 8 歳と 13 歳のかわいらしいお嬢様で、学校の休暇期間を利用して 4 月から渡来された。休日に京都・奈良の観光をされるなど、4 人で日本の生活を楽しんでおられたようである。

(見附孝一郎 記)

Prof. Das, Puspendu Kumar

Das 教授は、1958 年インドのカルカッタ（現在は、Kolkata と呼ぶ）で生まれ、大学までの教育をこの地で受けられた。その後、カンプールのインド工業大学（Indian Institute of Technology, Kanpur）で 1980 年に 22 歳で修士号を取られ、アメリカに渡ってニューヨークのコロンビア大学大学院に進学、光物理化学で著名な Richard Bersohn 教授に師事、気相における小さな分子の光解離の研究で博士号を取得された。この頃、京都大学の川崎昌博教授が同研究室に度々滞在されていた。その後、カナダの John Polanyi 教授の研究室に博士研究員として移られ、

固体表面における小さな分子の光解離過程の研究に着手された。アメリカとカナダでの研究の過程は、筆者が分子研で 1979 年から始めた研究経過と全く同じ経路と同じタイミングであり、Das and Planyi の最初の表面光解離の論文には、著者らの論文が引用されている。1986 年にイギリスのブリストルで Fadaday Discussion が開催され、Polanyi、Zare、Castleman、ら（著者を含めて）が招待され、この会場にまだ博士研究員だった Das 教授がおられた。

因みに、この会場で、私の講演の際に「液体はクラスタの固まりだ」と発言したとたん、前の方にいた Stuart Rice、John Murrell らが、ワッハッハと腹を抱えて笑い出し、突然静まりかえったのが記憶に新しい。この会議の 2 週間後に John Polanyi がノーベル賞を受賞するとのニュースが流れ、以後何ヶ月間か、彼との連絡が途絶え、彼との議論に関する会議録の原稿を実際の討論より相当簡略化せざるを得なかった。懇親会の席上で Das 氏は、インドのバンガロールの Indian Institute of Science の無機・物理化学教室の講師に内定しており、12 月からの着任であること、また、是非、バンガロールに来てくれということ述べられた。残念ながら、この 10 年前に、パキスタンで恐ろしい光景を目にした著者はインドに行く気になれず、15 年後にやっと日印学術交流で英国風の都市であるバンガロールに滞在するチャンスに恵まれた。この時、Das 教授は教授に内定しており、精力的に分子の光解離や分子を用いたレーザー高調波発生の研究に従事されていた。今回の来日は 2 回目であるが、分子研での研究に大きな



情熱を持っておられる。有意義な3ヶ月を過ごされることを願っている。

(西 信之 記)

Prof. YOON, Cheol Min

ナノ触媒研究部門では本年 JSPS 日韓招聘プログラムにおける客員教授として高麗大学 (Korea University) の尹 哲民 (Yoon, Cheol Min) 先生をお迎えすることとなりました。昨年度、同プログラムにおいて筆者 (魚住) として初めて韓国からの客員教授 (李教授) をお迎えして以来、2 年連続、2 度目の貴重な機会です。昨年は 2002 年。私の研究室にはドイツ人ポスドクも同時に在籍していたため、ワールドカップの準決勝ではきな臭い空気を察して両名にアパートへの帰宅を促すなどたいへんでしたが、今年はそんな気遣いもありません。大歓迎です。

さて、ところが実はこの拙稿執筆時点では尹先生は来日前であり、また私は個人的に尹先生とは一面識さえないため、その人となりを紹介することができません。では何故尹先生をお迎えすることになったのか、その経緯を記したいと思います。

尹先生は 1955 年のお生まれで、1979 年に高麗大学を卒業後、81 年に KAIST で修士号取得、その後 84 年まで高麗大学に戻り Lecturer and Teaching Assistance (講師補 (?)) を務められています。さ

らに 84 年から米国 Princeton 大学に渡り 89 年に同大学化学課で博士号を得られ、91 年まで同大学で博士研究員として所属されました。2 年間に民間の研究機関で過ごし、93 年に高麗大学助教授、95 年準教授、2000 年から正教授として現在にいらしています。さて尹先生が Princeton 大学におられた当時の指導教官は今をときめく (前からときめいてたけど) Prof. Daniel Kahne です。

この Kahne 教授は New York の Columbia 大学の出身であり、G. Stork 教授の薫陶を受けた第一線の有機化学者です。その兄弟子に私がかつて教えを受けた W. C. Still 教授 (Columbia 大学、当時) がおります。1995 年、Still 研究室に在籍 (Post Doctoral Research Associate) していた私は、Kahne 教授と共同研究を遂行しました。その間、毎週末になると Dan が車でマンハッタンまで試料を持込み、こっちも日曜返上で担当する変換工程を完了させ月曜には送り返し、また週末には Dan が来る。といったリズムがしばらく続き、最終的にこのプロジェクトは大きな果実を実らせました。Dan との共同研究は科学研究の醍醐味に満ちたものであり、忘れられぬものとなりました。そんな私にとっては Dan Kahne 門下生である尹先生をお迎えすることは、たとえ面識がなくとも、まるで旧来の友人をお迎えするような懐かしさと、そしてなにより Dan 門下生なら間違いなく私たちに科学上の刺激を与えてくれるに違いないという確信に溢れたものです。

なんだか客員の先生の紹介文というよりも個人的な懐古になってしまいましたが、この駄文を持って尹先生の紹介に替えさせていただこうと思います。

尹先生，お待ち申し上げます．早く一緒に焼肉食べにいきましょう．

（魚住泰広 記）

Prof. KIM, Younkyoo

Younkyoo Kimさんは1958年韓国に生まれた。1981年にソウル国立大学を卒業し、続いて同大学の化学科Choo, Kwang-Yul教授の指導のもとに「Kinetics and Mechanism of the Reaction of N Atoms with Trichloroethylene」の研究で修士を得た。その後ミシガン州立大学化学科のG. T. Babcock教授の指導のもとに「Raman Spectroscopy of Modified Porphyrin Macrocycles—Porphycene and Chlorin」の研究で1992年にPh.D.を得た。1年間アメリカでポスドクをした後韓国に戻り、Hankuk Univ. of Foreign Studiesの化学科助手、1997年に助教授、2002年に教授にと昇進した。

韓国に職をえてからも夏休みや冬休みにはBabcock教授の研究室に出かけミエロペルオキシダーゼやシトクロム酸化酵素の共鳴ラマンの研究を手伝うようになった。Babcock教授に「岡崎に行け」と勧められた事から講義の休み期間を利用して分子研を訪問する事が多くなった。既に分子研での仕事として“Presence of the Heme-oxo Intermediate in Oxygenation of Carbon Monoxide by Cytochrome c Oxidase Revealed by Resonance Raman Spectroscopy,” Y. Kim, K. Shinzawa-Itoh, S. Yoshikawa, and T.

Kitagawa, *J. Am. Chem. Soc.* **123**, 757–758 (2001)を発表している事からもわかるように、北川グループに加わってシトクロム酸化酵素の共鳴ラマンの研究をしている。今回は紫外共鳴ラマン分光法を用いて、上記の論文で作った中間体にアミノ酸ラジカルが含まれるかどうかを明らかにする研究に従事する予定である。

（北川禎三 記）

Prof. MORGUNOV, Roman

客員外国人研究員として平成15年7月から平成16年3月まで滞在予定のRoman Morgunovさんについて紹介します。Morgunovさんは、1969年にロシアEssentukiで裁判官の父とエンジニアの母の間に生まれました。ロシアTambov州立大学物理学科を卒業され、1995年「イオン結晶の可塑性に対する磁場の影響」の研究によりState University of Technologies(Voronezh)で学位を取られました。その後博士研究員等を経て2000年にTambov州立大学物理学科教授になり、2001年にはロシア科学アカデミーInstitute of Solid State Physics(Chernogolovka)へLaboratory of Spectroscopy of Structural Defects in SolidsのLeading Research Scientistとして移られました。

Morgunovさんは、固体中のスピンに依存する反応、ポリマーの可塑的性質、分子磁性体などの機能性物質の機械的・電気的・磁氣的物性に対する構造



欠陥の影響等に強い興味を持たれ、電子スピン共鳴、光学的吸収・発光、RYDMR、硬度などの機械的物性測定など幅広い実験手法により研究を行っています。中でも結晶の可塑性を検出手段とする新しい電子スピン共鳴法を開発、構造欠陥の研究ですばらしい成果を挙げられています。彼は大変なハードワーカーでこの若さですでに75編の論文を出しており、2001年には優れた若手研究者に与えられるEuropean Academia Prizeを受賞されています。

Morgunovさんの研究グループは、結晶の可塑性と光学特性に対する静磁場とマイクロ波磁場の影響の研究と分子性磁性体と超伝導体における磁気的特性と機械的特性の相関関係の研究をメインテーマに研究を行っています。分子研では「機能性固体の物性に対する構造欠陥と強磁場の役割」の研究でわれわれと協力研究を行うことになっています。Cu(hfac)₂L^{Et}やBEDT-TTFなどの機能性分子結晶等について、構造欠陥と15 Tまでの強磁場が結晶の諸物性にどのような影響を与えるかその役割を解明する計画で、面白い成果が上がるものと期待しています。各種測定のためいろいろとご協力・ご支援をお願いします。

ご家族は奥様のElena Morgunovaさんとお嬢さんのSofiaさん(8歳)。奥様は科学ジャーナリストとしてご活躍中で、「化学と生命」などいろいろな雑誌・新聞に記事を書いておられます。http://www.issp.ac.ruのGazetaに奥様の書かれた記事が載

っているそうですので、ロシア語の読める方は是非ご覧ください。お嬢さんはネコが大好きとか。「将来は生物学者に……」なんてMorgunovさんは密に思っておられるようです。ご都合によりご家族と一緒にの来日は無理なようなのが残念です。

(谷本能文 記)

Prof. VAROTSIS, Constantinos

C. Varotsisさんは1960年ギリシャのクレテ島に生まれた。高等学校はギリシャのPiraeusで過ごした後1978年アメリカのシンシナチ大学に進学して化学と物理を学んだ。卒業後ノースイースタン大学に移りオプティクス中心の物理学を専攻して修士の学位を得た。更にミシガン州立大学に進み、G. T. Babcock教授のもとで1990年にChemical PhysicsのPh.D.を取得した。1992年迄同教授のもとでポスドクとして仕事をした後1993年にクレテ大学の助手になり1999年に準教授に昇進した。

修士課程ではL. D. Ziegler教授とスチレン気体の紫外共鳴ラマンプロファイルから高励起電子状態を論ずるタイプの物理化学の研究をしていたが、博士課程に入ってから末端酸素酵素の共鳴ラマン分光の研究に方向転換した。1990年頃に彼が発表した論文は北川グループの発表した結果と合わず、しばしば論争になった。その後、北川グループで学位を得た者がG. T. Babcock教授の部屋でポスドクと

して仕事をしたり、C. Varotsisが北川グループにきて実験を見たりしている内に北川グループの結果に同意するに至った。数年前に短期間分子研に来て赤外分光の研究に参加し次の論文を出した。“Infrared Evidence for Cu_B Ligation of Photodissociated CO of Cytochrome c Oxidase at Ambient Temperatures and Accompanied Deprotonation of a Carboxyl Side Chain of Protein,” T. Iwase, C. Varotsis, K. Shinzawa-Itoh, S. Yoshikawa, and T. Kitagawa, *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 1415–1416 (1999). 最近彼は好熱菌や大腸菌の末端酸化酵素や一酸化窒素還元酵素をFT-IRや共鳴ラマン法で精力的に調べている。それらの酵素を岡崎にもってきて、こちらの装置を用いて測定し、北川グループで調べている哺乳類の酵素との違いを明らかにしていく予定である。

(北川禎三 記)



おお しも けいじろう
大 下 慶次郎

電子構造研究系基礎電子化学研究部門 学振特別研究員

昨年3月に東北大学大学院理学研究科にて大野公一教授のご指導のもと気相中のクラスター内反応の研究で学位を取得しました。同年4月より西信之教授のグループでお世話になっております。既に岡崎での生活も一年が過ぎ、なぜか分子研レターズ(第46号)の表紙にも載ってしまいましたが、未だに恵まれた研究環境に感動する毎日です。明るく活発に研究活動したいと思っておりますので、よろしくお願い致します。



おか むら れい
岡 村 玲

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 博士研究員

平成14年3月に東京工業大学大学院理工学研究科博士課程を修了し、同年4月より田中晃二教授のグループでお世話になっております。東工大ではルテニウムポリヒドリドクラスターの研究に携わってきました。現在は「酸化還元活性を持つ新規白金錯体の合成と性質」をテーマとしています。ハードもソフトも充実した分子研から貪欲に吸収し、視野を広げ知識を深めたいと思っております。今後も宜しくお願いいたします。



とり い かおる
鳥 居 薫

分子スケールナノサイエンスセンターナノ触媒・生命分子素子研究部門 事務補佐員

昨年六月より魚住グループでお世話になっております。以前会社に勤めていた時は、環境調査の仕事をしていました。この一年、周囲の方々の御親切、御指導のおかげで、少しずつですが、仕事にも慣れてきました。今後ともどうぞよろしくお願い致します。今の私の趣味は、王子(二歳の息子)と遊ぶことです。



QUEMA, Alex

分子制御レーザー開発研究センター リサーチ・アソシエイト

After finishing my Masters degree in Physics at De La Salle University, Philippines, I worked as a faculty in the same University. In 1999, I pursued my Ph.D. studies at Osaka University, Japan under a scholarship grant from the Japanese Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (Monbukagakusho). I earned my Ph.D. degree (2002) in Osaka University where I studied the magneto-optical effects of various semiconductors in the terahertz (THz) region. After completing my Ph.D. studies, I joined the group of Prof. Nobuhiko Sarukura of the Laser Research Center for Molecular Science in IMS. At present, I am an IMS fellow and my research interest is the application of magnetically enhanced THz radiation in nanocluster crystals and organic/biological samples.





た だ な お
夢 田 奈 緒

分子集団研究系物性化学研究部門 事務補佐員

昨年9月より物性化学部門にてお世話になっております。「水はH₂O、りんごは木から落ちるもの」ということを知っていれば、あとはお金の計算が出来ればこの世の中渡って行けると思っていた私にとって、ここでの生活は毎日が「未知との遭遇」です。ワカラナイ事だらけで「あわわあわわ……」することも多いと思いますが、よろしくお願いいたします。



お の よう こ
小 野 陽 子

分子制御レーザー開発研究センター 事務補佐員

H14年10月よりこちらでのお世話になっております。今までとは全く違った環境・分野の中での業務に多々戸惑いもあり、半年程経つ今でも分からない事だらけですが、周りの方々に助けられ毎日が充実したものとなっています。これからいろいろな事にチャレンジしていきたいと思っています。どうぞよろしくお願いいたします。



なが さわ たか ゆき
長 澤 賢 幸

分子スケールナノサイエンスセンターナノ触媒・生命分子素子研究部門 助手

平成13年9月名古屋大学大学院理学研究科退学後、岡崎国立共同研究機構統合バイオサイエンスセンター博士研究員を経て、昨年11月より現職。学位研究領域の遷移金属錯体化学と、有機光化学との融合による新規機能性分子系列の開発に挑戦しております。人工的光エネルギー変換の他、生体内金属酵素における触媒機構に関心があります。よろしくお願いいたします。



て ろう りゅう ご
手 老 龍 吾

技術課第二技術班極端紫外光科学研究系 技術係員

東京大学大学院理学系研究科博士課程中退、平成14年11月より現職。これまでは走査トンネル顕微鏡を用いて金属酸化物表面の構造と反応性に関する研究に携わってきました。分子研に来てからは宇理須先生の下でシリコン表面上での脂質膜形成と観察の研究を行っています。多くの方と知り合いになり、視野を広げていきたいと思っています。どうぞよろしくお願いいたします。



SLANINA, Zdenek

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 学振外国人招へい研究者



I was born in a small, 800 years old town Policka in the former Czechoslovakia, now the Czech Republic or Czechia. As the country is right in the center of Europe, it was run over by the European history many times. For the last time, it was on Aug. 21, 1968 when the country was occupied by Russia and its four satellites. The event had changed the lives of 15 millions of Czechoslovakians virtually overnight. As a consequence, the country was for twenty years pretty isolated from the rest of the world. For people in science there were two options: to emigrate (and expose your relatives to administrative punishments) or not to emigrate (and expose yourself to scientific isolation). I got my master degree (named RNDr.) from Charles University of Prague, the oldest university in the Central Europe. The university was founded in 1348. Then I got my doctoral degree (named CSc.) from the Czechoslovak Academy of Sciences, a lot younger institution—its roots can be traced back to 1784. In my PhD thesis I computed then—elusive objects—carbon clusters: linear, cyclic, polyhedral. The institute never had own computer as the limited resources were primarily allocated into experiments. The carbon clusters were in fact computed during off-peak periods like Christmas or summer vacations on a computer of a top governmental office—the State planning commission. When computations of C_8 cube were close to its end, they were interrupted by a rather typical event of those times. Exceptionally, there were visitors in the institute—that time a scholar from Switzerland. As there was no other option, he also computed at the governmental office. Well, the secret service soon took notice and suspected a spy activity. Of course, they later on realized that he was just scientist interested really only in molecules. However, somebody had to be punished otherwise the secret service would be ridiculous. So, we were served a one-year ban to enter any governmental office (and thus, the C_8 -cube computations were cut short just before the end). Those were about our conditions for doing computational chemistry. While the field is frequently dubbed as chemistry without chemicals, our computational endeavors were not only without chemicals but at times even without computers. Well, nothing lasts forever—during the eighties of the previous century the country had gradually been opening again. I also tried, three times, and failed to receive local administrative approval for research in Sweden, the United States, and Germany. It became obvious to me that it would be better to try to go to some truly remote country with no sensitive topics in recent mutual history. As I have always been interested in the Far East and its culture, Japan was a natural fourth choice. This way I could finally start a research stay abroad, at Hokkaido University, actually owing to still another serendipitous but fortuitous confluence. Whereas obtaining administrative approval on the Czechoslovak side was very difficult, obtaining approval from Japanese authorities was not straightforward either. There was a hidden rule that scholars from then East-European countries should not be allowed to use supercomputers. Every applicant for a long-term visa in Japan had to write a one-page essay on the purpose of the trip. If the catchword “supercomputer” was found in the essay, the application was automatically turned down, and there was no chance to reverse the negative decision. I was

not aware of the yet secret rule. However, I have believed that the term is somewhat artificial or exaggerated. So, I did not use the catchword supercomputer in my visa application and got the visa. Out of sudden, the iron curtain had collapsed in autumn 1989 and there have been absolutely no restrictions for travel abroad since then. Just the opposite—the country encourages long scientific stays abroad as at present it is still not able to provide enough resources to basic research. Hence, I have decided for a super-long research trip around the globe, jumping from one carbon-cluster lab to another: Germany, USA, Belgium, Taiwan, Japan. At IMS, I have been involved in metallofullerene research in Prof. Nagase's group. In my leisure time, I have been pursuing my long-lasting interest in the Japanese history, geography and culture.



はら だ よし お
原 田 佳 男

技術課第三技術班装置開発技術系 技術補佐員（研究支援推進員）

名古屋工業大学工学部（２部）電気情報工学科在学中。昨年１２月より技術課装置開発室でお世話になっています。以前は金型製作会社に５年間勤務していました。機械加工は多少経験があるのですが、CAD製図に関してはほとんど経験がないのでかなり苦労しています。分からない事だらけですが、がんばりますのでよろしく願います。



お の み さ よ
小 野 美 菜 代

電子構造研究系基礎電子化学研究部門 事務補佐員

はじめまして、昨年の１２月から電子構造研究系の西グループで、ナノ支援担当の事務員でお世話になっております。

はじめは、見るもの（実験装置）体験する事（研究会など）すべてが初めてで戸惑いながらのスタートでしたが、今ではすっかりグループの温厚な人柄に助けられながら楽しく仕事をしております、これからも一生懸命頑張りますのでよろしく願います。



DUNIN-BARKOVSKIY, Lev

分子スケールナノサイエンスセンター分子クラスター研究部門 非常勤研究員

Graduated from Nizhny Novgorod State University (Russia) in 1992. Then research trainee, graduate student, research assistant and research associate (up to now) at the Institute of Solid State Physics of Russian Academy of Sciences (Chernogolovka, Moscow region, Russia). In 1999 received Ph.D. degree in physics, physics of condensed matter. INTAS young scientist fellowship at Institut für Materialphysik der Universität Wien (Austria) in 2001. At present, a postdoctoral fellow at IMS, Molecular Cluster group under leadership of Pr. Tanimoto.

Area of current research interests: strength and plasticity of crystals, magneto-plastic effects in paramagnetic and diamagnetic materials, spin-dependent reactions in the system of crystal lattice defects, magnetic properties of salts with charge transfer.



なか じま ひろし
中 島 洋

関連領域研究系関連分子科学第一研究部門 助手

(統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域 青野グループ)

本年1月1日付で北陸先端科学技術大学院大学より転任してきました。分子研では青野教授のグループに属していました。研究テーマは金属含有タンパク質における金属イオンの周辺構造と機能相関の解明です。5月1日付で名古屋大学に転出する事が決まりましたので、このレターが配布されるころには、既に分子研を辞していることでしょう。短い間でしたが、濃密な時間を過ごす事ができました。正直なところ、もう少し時間があつたらよかったのと思う今日この頃です。



なが い まさ こ
永 井 正 子

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 事務補佐員

愛知県蒲郡市出身。大学で少しだけ化学を勉強し、市役所勤務を経てドイツで音楽の勉強をしてきました。これほどの変わったキャリアを持つ人は他にいないだろうと思われる自称“迷ヴァイオリニスト”です。このお仕事に就いてすでに4ヶ月が過ぎ、やっと慣れてきました。それでも分子研ではまだまだ知らない部分が多く、これから研究していきたいと思います。どうぞご指導のほどよろしくお願いします。





お がわ たく じ
小 川 琢 治

分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門 教授
京都大学理学研究科を修了後、愛媛大学理学部、九州大学有機化学基礎研究センターなどを経て、2003年2月に分子研に着任しました。有機化学的手法とリソグラフィ的手法を組み合わせナノ構造体を作成し、その電気・電子物性を研究することを考えています。5月からセンター長を拝任して、管理職と研究職の二足のわらじになりましたが、目的達成のために努力したいと思いますので、よろしくお願いします。



あ ら き こう いち
荒 木 幸 一

分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門 博士研究員
PhD in Chemistry from University of São Paulo in 1994. Soon after receiving the master's degree in 1989, joined the Institute of Chemistry at the same university as assistant professor and become associate professor in 2000. I was visiting associate at Caltech from 1990 to 1991 (Prof. Fred Anson's Group) and at MIT from 1995 to 1996 (Prof. Mark Wrighton's Group). My research interest is the syntheses and applications of coordination chemistry based supramolecular & nanostructured porphyrins and materials. I joined Prof. Ogawa Takuji Group at Institute of Molecular Science in March 2003, where would like to contribute in the study of the electrochemical and electronic conducting properties of new giant porphyrin chains and arrays.



お の しん ご
小 野 晋 吾

分子制御レーザー開発研究センター 助手

平成14年9月東京理科大学大学院理学研究科博士課程を修了後、日本学術振興会特別研究員(PD)を経て、平成15年3月より現職。紫外及び遠赤外における固体レーザー開発に取り組んでおります。どうぞよろしくお願い致します。



あき た もと こ
秋 田 素 子

相関領域研究系相関分子科学第一研究部門 助手

平成11年3月東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程修了後、分子研、九州大学有機化学基礎研究センター博士研究員を経てこの4月に分子研に戻ってきました。今まで携わってきた「有機化学」を基に、今後はもっと視点を高く、視野を広く持ち、新規物性・反応の開発を目指した研究を行いたいと考えています。好きなことは、運動、海釣り、長風呂（温泉ならなお良）、航空機（見るのも乗るのも）等々です。どうぞよろしくお願いいたします。



ひし かわ あき よし
菱 川 明 栄

極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門 助教授

平成6年京都大学大学院工学研究科修了後、東京大学大学院助手、講師、助教授を経て、4月にこちらに着任いたしました。これまで強い光子場における分子のふるまいに関心を持って、主にレーザーを使って研究を行ってきましたがこれからは放射光も手にして、新しい研究分野の開拓に取り組んで行きたいと思います。



い とう たか ひろ
伊 藤 孝 寛

極端紫外光実験施設 助手

秋田県出身。杜の都仙台で博士学位（東北大理）を取得し、理研SPring-8における1年間のポスドクを経て、この4月から分子研にお世話になっています。今後はUVSOR施設で主に光電子分光法を用いた研究および装置開発を行っていききたいと思っています。こちらではまだまだ分からないことが多いのですが、周囲の人から「妙になじんでいる」といわれる程、こちらの生活は肌に合っているようです。皆様どうぞよろしくお願いいたします。



みず の あきら
水 野 彰

分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門 教授

1978年東京大学大学院工学系研究科電気工学専攻博士課程を修了後、石川島播磨重工業（株）勤務の後、1981年より豊橋技術科学大学電気電子工学専攻講師、助教授、1993年同エコロジー工学系教授として、大気圧プラズマによる環境技術やDNA 1分子操作など、静電気・高電界応用の研究を行って参りました。諸先生にお世話になり分子研で研究を進める機会を与えていただきましたこと、深く感謝申し上げます。豊橋とは地理的に近いこともあり、交流を進めるきっかけになることができればたいへん嬉しく思います。どうかよろしくお願いいたします。





たか はし まさ ひこ
高橋 正彦

分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門 助教授

1992年の東北大学科学計測研究所(現多元物質科学研究所)への転任以来、11年ぶりに岡崎へ帰ってきました。専門は、電子線を用いたコンプトン散乱による衝突ダイナミクスと電子構造の実験研究。「新しい環境で新しい研究を」をスローガンに、気分もリフレッシュして「分子研」を大いに楽しむつもりです。どうぞ、御指南のほどお願い申し上げます。



わた なべ のぼる
渡邊 昇

分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門 助手

平成10年東北大学工学研究科博士課程を修了した後、東北大学科学計測研究所、同多元物質科学研究所助手を経て4月から流動部門でお世話になることになりました。keVオーダーの高いエネルギーを持つX線や電子線の非弾性散乱実験から、分子の電子状態を調べる研究を主にやってきました。二年間という限られた期間ですが、新しい環境で頑張っていきたいと思いますので、どうぞよろしくお願い致します。



け ら さとし
解 良 聡

分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門 助手

新潟県に19年間、千葉県に11年間いました(いろいろばれてしまいそう?)。千葉大学大学院自然科学研究科博士課程を修了後、同大学助手を経て、4月より本研究流動部門助手としてお世話になっております。現在、有機無機界面の電子構造に興味を持って研究活動を行っています。どうぞよろしくお願いいたします。



にし の まさ みち
西野 正理

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 非常勤研究員

阪大院理学研究科(化学)で博士の学位を取得後、東大院工学系研究科(物理工学)での学振特別研究員を経て、本年4月より現職。moleculeからcondensed matterまで磁性を中心として研究を行ってきました。量子化学、物性理論により、遷移金属分子の磁性、相転移現象(spin crossover, photoinduced phase transition)、磁性体の空間構造に依存した量子ゆらぎの効果、ナノ分子のトンネルダイナミクスなどを研究対象としてきました。分子研ではタンパク質の折れ畳み問題に取り組めます。様々な分野の研究者との交流を期待しています。趣味はテニス等スポーツ。よろしく申し上げます。



ちか ずみ しん べい
近 角 真 平

理論研究系分子基礎理論第二研究部門 非常勤研究員

平成14年3月までの5年間、茨城県東海村にある日本原子力研究所先端基礎研究センターの極限ハドロングループに所属していました。最初の4年間は連携大学院制度の下、筑波大学物理学研究科原子核理論に在籍し、平成13年3月に博士課程を修了した後は学振PDとして過ごしました。分子シミュレーションを研究手法としてきたので、分子研で研究できることを非常に嬉しく思っています。



KOBRYN, Oleksandr

理論研究系分子基礎理論第四研究部門 非常勤研究員

I graduated from the *Lviv State University* (Ukraine), Faculty of Physics, in 1992 and get my PhD degree in physics and mathematics at the *Institute for Condensed Matter Physics* (Lviv, Ukraine) in 1997. Since then, I have been working as the Junior Research Fellow (1997–1999) and the Research Fellow (1999–2000) at the same Institute, and as the Research Associate at the *Institute of Physics, University of Tsukuba*, Japan (2000–2003). In April 2003 I went to the Department of Theoretical Studies as the IMS Research Fellow and joined the group led by Professor Fumio Hirata. My scientific field includes study of transport processes in dense gases, liquids and plasma. Also I am interested in non-equilibrium processes in dense quantum nuclear systems and interaction of ultra strong laser pulses with matter.



まる やま こう いち
丸 山 耕 一

分子構造研究系分子動力学研究部門 非常勤研究員

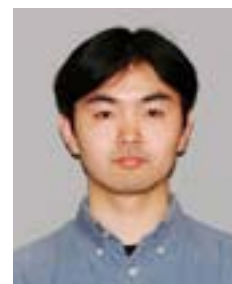
平成10年、東京工業大学大学院理工学研究科で博士（工学）取得後、同大学院助手、金属材料技術研究所・科学技術特別研究員、学習院大学理学部助手を経て、現職に就きました。これまでは、金属材料の物性、磁性を主に研究対象としてきましたが、新しい環境での新しい課題には、地道な努力と新しい観点とでチャレンジしていくように心がけようと思っています。よろしくお願いいたします。



せ と やま ひろ ゆき
瀬 戸 山 寛 之

極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門 非常勤研究員

平成15年3月に千葉大学大学院自然科学研究科博士後期課程を修了。同年4月より現職。これまでは自己組織化単分子膜の電子状態・分子配向について研究を行ってきました。こちらでは小杉先生のもとで内殻励起子やRydberg励起状態に対する環境効果の研究を行う予定です。多くの研究者からいろいろな刺激を受けられる環境を十分に生かしていきたいと考えています。どうぞよろしくお願い致します。





ごとう まさひろ
後藤 昌宏

分子制御レーザー開発研究センター 非常勤研究員

平成13年東京大学大学院工学系研究科超伝導工学専攻博士課程修了。同年よりアジレントテクノロジーにおいてLEDの研究を2年間行っていました。その後、猿倉研にてお世話になっております。

今は光の研究をしており、専門が転々と変わっているといろいろと勉強しなければならないと思っております。この恵まれた環境を生かして、研究生活を楽しんでいこうと思っております。どうぞよろしくお願いいたします。



いし づき ひで き
石 月 秀 貴

分子制御レーザー開発研究センター 非常勤研究員

平成7年3月に大阪大学大学院工学研究科電子工学専攻の修士課程修了後、3年間メーカー勤務をした後、同大学院博士課程に入学、平成13年3月に修了しました。平成13年4月より2年間は、福井県地域結集型共同研究事業の研究員という身分で、特殊波長レーザー開発研究部でお世話になってきました。研究内容に変化はありませんが、新たな気持ちで取り組みたいと思います。よろしくお願いいたします。



いとう かなめ
伊 藤 歌奈女

分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門 研究員(科学研究)

2003年3月総合研究大学院大学数物科学研究科博士課程修了後、4月より現職。学生のときと同様に、鈴木Gでお世話になっています。研究テーマは分子エレクトロニクスのための有機半導体開発です。今春からまた新たな気持ちでがんばりたいと思います。どうぞよろしくお願いいたします。



かとうだ みち お
河東田 道 夫

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 産学官連携研究員

平成15年3月に早稲田大学大学院理工学研究科修士課程を修了後、4月より永瀬グループにお世話になっております。これまでは*ab initio*電子状態計算における周期境界条件を適用した固体表面のモデル化について研究を行っていました。現在はナノスケールの系を取り扱うための電子状態計算手法の開発を行っております。趣味はソフトテニス(軟庭)と旅行です。どうぞよろしくお願いいたします。



まる やま ゆたか
丸 山 豊

理論研究系分子基礎理論第四研究部門 産学官連携研究員

総研大生として谷村グループで学位を取得した後、豊田中央研究所などでポストドクをしておりましたが、この4月よりNaReGiの研究員として平田グループでお世話になることになりました。今までは粗視化モデルを用いてベシクルや生体膜のダイナミクスを研究していました。今後は3DRISMを用いて両親媒性分子などの疎水相互作用について調べていきたいと考えています。



なか お さとる
中 尾 聡

分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門 産学官連携研究員

三重県出身。平成11年に東京工業大学大学院理工学研究科有機材料工学専攻を修了後、学振特別研究員、大阪府立産業技術総合研究所の非常勤職員を経て、4月より多田博一先生のグループでお世話になっています。文科省ナノテクノロジー総合支援プロジェクトの活動と有機半導体の研究に関わらせて頂いています。限られた期間ですが、色々な知識や技術を身に付けたいと思います。よろしくお願い致します。



BUSHIRI, M. Junaid

電子構造研究系基礎電子化学研究部門 リサーチ・アソシエイト

Ph.D. Degree is obtained in the field of Raman Spectroscopy from Department of Physics, University of Kerala, Thiruvananthapuram (Trivandrum), Kerala, India under the guidance of Professor V. U. Nayar in the year 2000. Worked in Indian Institute of Science, Molecular Biophysics unit, Bangalore (Summer Fellowship Programme of Indian Academy of Sciences Bangalore) for a period of two months in the year 1999. After Ph.D., worked in Centre for Macroscopic Quantum-Field Lasers, Korea Advanced institute of Science and Technology, Daejeon Republic of Korea. (from 29-10-2001 to 25-12-2001) and Institute of Atomic and Molecular Science (Laser Spectroscopic Laboratory for Reactive Intermediate) Academia Sinica, Taipei, Taiwan (from 1-05-2002 to 25-12-2002). Research areas are, growth of single crystals for photonic applications, Phase transition analysis of single crystals using temperature dependent Raman spectroscopy, Raman spectral studies of crystals in an *in situ* electric field etc. Present research work is mainly preparation and characterisation of nanomagnetic materials in the research group of Professor Nobuyuki Nishi, Department of Electronic Structure at IMS.





LIU, Guang

電子構造研究系基礎電子化学研究部門 リサーチ・アソシエイト
(東京工業大学資源化学研究所山瀬研究室)

I got the B.S. degree in July 1997 and the Ph.D. in July 2002 in Peking University, Beijing, P. R. China, in major of physical chemistry. I joined Professor Yamase's research group in Tokyo Institute of Technology in November 2002, and became a JSPS research fellow in April 2003 (also under the direction of Professor Toshihiro Yamase).

My research interest is focused at polyoxometalates, including the synthesis, structures, physical properties and applications of them. Current work subject is the synthesis, structures and photochromic properties of alkylammonium trimolybdates.



鳥居 肇

理論研究系分子基礎理論第三研究部門 客員助教授

1992年に東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程を修了した後、同専攻で助手を務め、2001年に静岡大学教育学部に異動し、現在に至っています。液体や生体分子系などにおける分子間相互作用と、その分子振動とスペクトルに対する影響について研究を行っています。最近2年間は、地理的に近くなったためなのか、分子研を訪れることが随分増えました。今回の機会を生かして議論が深められればと思っています。



太田 俊明

分子構造研究系分子構造学第二研究部門 客員教授

1971年に東京大学で理学博士の学位を取得後、理学部化学教室、高エネルギー物理学研究所、広島大学を経て、1992年から東京大学に帰って現在に至っています。1978年にスタンフォード大学に在外研究員として行ってから、放射光の世界に入り、放射光科学を通して化学以外にも、物理、生物、工学、医学などさまざまな分野の人と知り合うことができました。現在、放射光を用いた表面化学、表面磁性の中心に研究を行っています。



榎 敏明

分子集団研究系分子集団研究部門 客員教授

分子研の極低温センターで1977 - 1987の期間、助手としてお世話になり、その後、東工大で仕事を進めていますが、16年ぶりで分子研に戻ってきました。当時と違って、分子研も随分職員が増え、部門の名前も大きく変わっており、違った研究所に来たと言う印象を強く感じています。在任期間中、積極的に研究を推進してゆくつもりです。研究は、分子磁性体、伝導体、ナノサイズの炭素系等の電子物性の実験を行っています。



ない とう とし お
内 藤 俊 雄

分子集団研究系分子集団研究部門 客員助教授

東京大学大学院理学系研究科修士課程修了後、東邦大学理学部助手、同講師、北海道大学大学院理学研究科講師を経て、平成13年より同助教授。

卒業研究以来、平面 π -共役系分子の電荷移動錯体に基づく伝導性物質の開発を行っております。最近、光を照射することでそうした結晶内のキャリア数を制御できないかという研究を始めました。この4月から客員として出入りを許され、研究の幅が広がると期待しております。よろしくお願いいたします。



い とう けん じ
伊 藤 健 二

極端紫外光実験施設 客員助教授

1982年以来高エネルギー加速器科学研究機構物質構造科学研究所放射光研究施設でVUV-SX領域の放射光利用技術の開発、原子分子科学の研究を行っています。高度化が進められるUVSORの発展に少しでもお役に立てればと考えています。



まつ ざか ひろ ゆき
松 坂 裕 之

錯体化学実験施設配位結合研究部門 客員教授

1988年に東京大学で学位を取得後、ペンシルバニア州立大学、東京大学、東京都立大学を経て、現在は大阪府立大学に在籍しています。専門は有機金属化学で、同種及び異種金属原子を含む(混合)金属クラスター分子の合成と機能開拓にとりくんでいます。本年4月より客員部門に加えていただいたことを機に、岡崎の地で多くの新しい刺激を受け、視野を広げていきたいと考えております。よろしくお願いいたします。



うえ の けい じ
上 野 圭 司

錯体化学実験施設配位結合研究部門 客員助教授

東北大学大学院博士後期課程中退後、東北大学大学院理学研究科助手を経て、平成13年11月より群馬大学工学部助教授として勤務しております。専門は有機金属化学、無機金属化学で、ケイ素、ゲルマニウム、ガリウムなどの重い典型元素と金属との間に、不飽和結合などの新しいタイプの結合を持つ錯体の合成を行っています。分子研という素晴らしい場を活用させて頂き、新しい展開を模索したいと思います。どうぞよろしくお願いいたします。





わた なべ ひろ かず
渡 邊 廣 憲

技術課第一技術班分子構造研究系 技術係員

平成15年3月に東京大学理学部化学科を卒業し、同年4月より横山教授のグループでお世話になっています。これまで卒業研究しか行っていないので、本格的な研究生活がどのようなものか、期待とわずかな不安を抱いて分子研に来ました。こちらではナノスケール磁性薄膜について研究する予定です。また、色々な分野について見識を広めたいと思っています。どうぞ宜しくお願い致します。



さわ まさ たか
澤 昌 孝

技術課第三技術班電子計算機技術係 技術係員

平成15年3月に名古屋工業大学大学院工学研究科修士課程を修了し、4月より技官として電子計算機室でお世話になっております。これまでは非平衡統計物理学の手法を用いた電算機シミュレーションを行っていました。こちらではシステムの管理等を行いますが、まだまだ新人ですので周りの方にはご迷惑をおかけしますがどうぞよろしくお願い致します。



の がわ きょう こ
野 川 京 子

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 事務補佐員

平成15年4月より理論研究系でお世話になっております。今までは全く違う分野で仕事をしておりましたので戸惑う事もありますが、分子研というすばらしい環境のもと、多くの事を学んでいけたらと思っています。分からない事ばかりで、皆さまには色々にご迷惑をお掛けするかと思いますが、どうぞよろしくお願い致します。



こ ばやし かつ あき
小 林 克 彰

統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域 非常勤研究員

4月から統合バイオサイエンスセンター・青野研究室でお世話になっております。学位は錯体化学実験施設の田中晃二先生の下で取得しており、分子研の生活はすでに5年目に突入しております。生活環境はほとんど変わっていませんが、研究対象は錯体から蛋白質へと大きく変わりました。扱う分子の大きさは1000倍大きくなりましたので、研究についてもこれまでの1000倍（物理的に無理？）頑張っていきたいと思っています。よろしくお願い致します。



くじ め まさ と 蘭 目 理 人

統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域 非常勤研究員

愛知県豊橋市出身です。名古屋大学情報文化学部、同大学大学院人間情報学研究科修士課程、東京工業大学総合理工学研究科博士課程を経て、平成15年4月から藤井浩先生のグループで非常勤研究員になりました。現在はモデル錯体を用いて金属酵素の性質を調べています。よろしくお願いいたします。



しる ぐち かつ ゆき 城 口 克 之

統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域 研究員（科学研究）

木下研究室で一分子生理学の研究を行っているポスドク1年目です。「花が咲かない寒い日は、下へ下へと根を伸ばせ。やがて大きな花が咲く。」と願っています。サッカー好きです。よろしくお願いいたします。



まつ だ しげ のぶ 松 田 成 信

計算科学研究センター 産学官連携研究員

昭和56年東北大学大学院理学研究科前期課程を修了後（専攻は収束電子回折）旭化成（株）（当時は旭化成工業（株））に入社し、昭和62年北海道大学理学部より学位（論文博士）を取得しました。専門は高分子溶液理論でした。その後ScotlandのHeriot-Watt University（Postdoctoral Research Fellow；平成3年～平成4年）や宮崎県工業技術センター（客員研究員；平成11年～平成14年）への出向を経て、平成14年度は一旦旭化成に戻り、基盤技術センターで透過型電子顕微鏡を担当していました。この4月より再度旭化成から出向し、こちらでお世話になっており、文部科学省の超高速コンピュータ網形成プロジェクト（National Research Grid Initiative—NAREGI—）ナノサイエンス実証研究（ナノグリッド）の事務局をやらせていただいております。よろしくお願いいたします。



かん だ りつ こ 神 田 律 子

総合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域 支援研究員

平成15年3月名古屋工業大学大学院物質工学専攻にて博士前期課程を修了後、4月から木下先生の研究室でお世話になっています。新しい環境になり、右も左もわからず戸惑ってばかりですが、研究室の皆さんと毎日楽しく頑張っていきたいと思っています。どうぞよろしくお願いいたします。





たか はし かず ゆき
高 橋 一 志

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 博士研究員

平成11年3月東京大学大学院理学系研究科博士課程を修了後、同年4月より京都大学大学院工学研究科において日本学術振興会特別研究員、平成13年4月より(財)神奈川科学技術アカデミー研究員を経て、平成15年4月より現職。これまで分子磁性体、分子性導体、光応答性材料の研究を行ってきましたが、最近是小林先生のグループで伝導性、磁性などの制御を目指した新規な分子性機能材料の合成と評価を中心に研究しています。よろしくお願いします。



CUI, Hengbo

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 博士研究員

中国延辺大学化学系修士を卒業した後、延辺大学薬学院で助手を3年勤めてから来日し、平成15年に東京大学大学院理学系研究科博士課程修了。4月よりこちらの小林速男先生のグループでお世話になっています。こちらでは、分子性伝導体および磁性体の研究を行っています。よろしくお願い致します。



WALKER, Gilbert C.

統合バイオサイエンスセンター生命環境研究領域 学振外国人招へい研究者

I graduated from Bowdoin College in 1985, after working on my first project, on the role of hydrogen bonding in the photochemistry of polyene aldehydes, with Professor Ronald Christensen. At graduate school I worked in the group of Professor Paul F. Barbara at the University of Minnesota and worked on ultrafast spectroscopy of solvation and electron transfer reactions, receiving my Ph. D. in 1991. Professor Robin M. Hochstrasser then guided my post-doctoral work at the University of Pennsylvania, where we studied protein coupling to the first steps of charge separation in photosynthetic reaction centers. Since 1993 I have been on the faculty at the University of Pittsburgh. My research group continues to work on the vibrational spectroscopy of proteins and ultrafast chemical reactions. In addition, we have recently developed a program in scanning probe microscopy, to understand the dynamics of polymer and protein surfaces, using force and near-field microscopy techniques. At present I am visiting the laboratories of Professor Teizo Kitagawa, to study protein aggregation and fibril formation. I have been finding lots of exciting new science and new friends at IMS and the Center for Integrative Bioscience!

平成 14 年度総合研究大学院大学学位取得者及び学位論文名



数物科学研究科（構造分子科学専攻）[課程博士]

氏 名	博 士 論 文 名	付記する専攻分野	授与年月日
小 林 克 彰	Synthesis and Characterization of Ruthenium Oxyl Radical Complexes	理 学	H15. 3.24
東 門 孝 志	二酸化炭素多電子還元反応を目指した一酸化炭素の還元的活性化法	理 学	H15. 3.24
藤 芳 暁	時間分解インパルス誘導ラマン分光法の開発と電子励起状態分子の構造化学への応用	理 学	H15. 3.24
王 志 宏	Studies of Chemical Reactions with Atomic Hydrogen on Si(100) Surfaces by Infrared Reflection Absorption Spectroscopy	理 学	H15. 3.24
油 努	水溶性有機金属錯体をもちいた pH 選択的触媒反応の開発	理 学	H15. 3.24
伊 藤 歌奈女	アセンオリゴマーの合成と有機トランジスタへの応用	理 学	H15. 3.24
大 橋 雅 卓	Construction of Artificial Metalloproteins: Noncovalent Insertion of Metal Complex Catalysts into Protein Cavities	理 学	H15. 3.24
加 藤 恵 一	Development of Variable Spin Networks Based on Oligoaminoxyl Radicals	理 学	H15. 3.24
田 中 仙 君	Surface Photovoltage in Semiconductors Studied with Photoelectron Spectroscopy Using Synchrotron Radiation and Laser	理 学	H15. 3.24
Akhtaruzzaman, Md.	Studies on Novel Linear π -Conjugated Molecules Containing Pyridyl Groups	理 学	H15. 3.24

数物科学研究科（機能分子科学専攻）[課程博士]

氏 名	博 士 論 文 名	付記する専攻分野	授与年月日
坪 内 雅 明	時間分解光電子画像観測法によるピラジンの項間交差及びイオン化動力学的研究	理 学	H15. 3.24
宮 下 尚 之	光誘起イオン性中性相転移のダイナミクス	理 学	H15. 3.24

数物科学研究科（機能分子科学専攻）[論文博士]

氏 名	博 士 論 文 名	付記する専攻分野	授与年月日
片 柳 英 樹	Molecular photodissociation dynamics studied by photoion and photoelectron imaging	理 学	H15. 3.24
長 友 重 紀	Resonance Raman Study on a Mechanism of Quaternary Structural Change of Human Hemoglobin A	理 学	H15. 3.24

総合研究大学院大学平成15年度(4月入学)新入生紹介



平成15年度(4月入学)新入生

専攻	氏名	所属	研究テーマ
構造分子科学	稲垣 さや香	統合バイオサイエンスセンター	好熱性一酸化炭素酸化細菌由来CooAの機能と構造の研究
	坂上 知	分子スケールナノサイエンスセンター	分子素子におけるキャリア注入・輸送特性の解明と制御
	西 龍彦	極端紫外光実験施設	多重極限環境下遠赤外分光による有機超伝導体の電子状態の研究
	三澤 宣雄	極端紫外光科学研究系	チャンネルタンパク質と脂質二重膜を用いた模擬細胞膜表面の構築と評価
	吉村 英哲	統合バイオサイエンスセンター	HemATの構造と機能の相関についての研究
機能分子科学	大坪 才華	分子集団研究系	新規分子性伝導体の合成と物性研究
	尾上 靖宏	統合バイオサイエンスセンター	ATP合成酵素のエネルギー変換機構の解明
	酒巻 順一郎	分子スケールナノサイエンスセンター	Pd-Ni複合金属クラスターの創成とそれを利用したタンデム型触媒反応の開発
	前田 圭介	分子集団研究系	磁気共鳴法を用いた有機導体の新規物性の探索
	松上 優	理論研究系	RISM理論に基づく相分離現象の研究
	皆川 真規	錯体化学実験施設	炭素-金属結合を有するピンサー型遷移金属錯体の合成

マイクロ結晶構造解析装置

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 小林 速 男

本装置は、簡便な $\text{MoK}\alpha$ 線の X 線集光装置が入手可能になったとの情報を受け、X 線集光装置を装着した新たな回折装置により微小結晶の X 線構造解析を可能にすることを目的に、株式会社リガクに製作依頼したものである。平成 14 年 11 月に導入され、実験棟 309 号室に設置されている。本装置はリガク社としても初めての微小結晶構造解析用のシステムで、搬入後は暫く試験運転を行っていたが、現在は通常運転を行っている。X 線発生装置は 800 W (50 kV、16 mA) で省エネ型である。微小点フィラメントを使用するが、耐用時間は 1000 時間程度で、フィラメント交換とそれに伴う焦点調整は専門家に依頼して行うようになっている。発生した X 線 ($\text{MoK}\alpha$) をコンフォーカルミラーによって約 100 μm のビームに絞り込むので、結晶の大きさは 0.1 mm 以下であることが望ましい。回折 X 線像は CCD 検出器で観測する。コンフォーカルミラーが X 線によって劣化する事を防ぐために運転時はヘリウムガスをポンペより流す。また、

ヘリウムガス低温冷却装置が付いており、低温実験時にはポンペよりヘリウムガスを流す。最低温度は 35 K である。将来、物性研究用の装置としても十分な威力を発揮させるためには、低温装置の能力を更に充実させる必要があるであろう。しかしともあれ、本装置導入によって、懸案であった極微小結晶の構造決定について非常に大きな前進を見ることが出来た。具体的には、(勿論、微小結晶しかできないものは結晶性の良くないものが多いと思われるので必ずしも楽観できないが) 恐らく平均サイズが 20 μm 程度の目に見えないような微小結晶でも十分構造決定が可能である。一方、従って、微小結晶を取り扱うための器用さと訓練が多少要求されるような場合もあるようである。本装置の使用希望がある場合には、分子集団動力学部門の藤原助手に連絡されたい。

このような微小結晶の構造決定が、SP8 の様な特別の施設を利用しなくても、実験室に設置できる簡便な装置で可能になったことにより、従来不

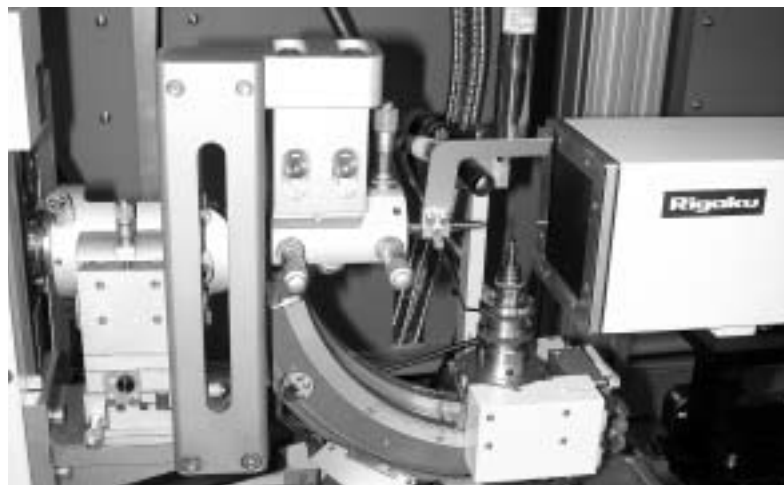
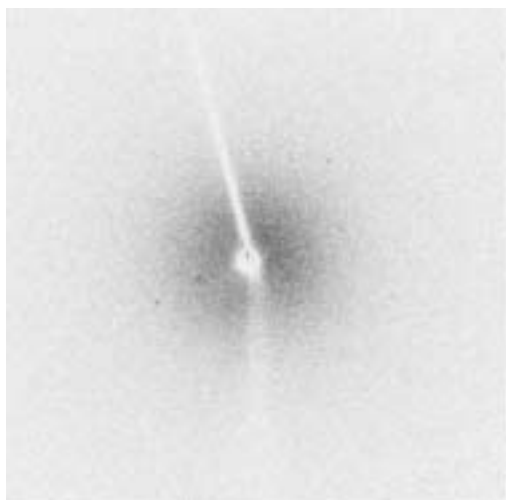
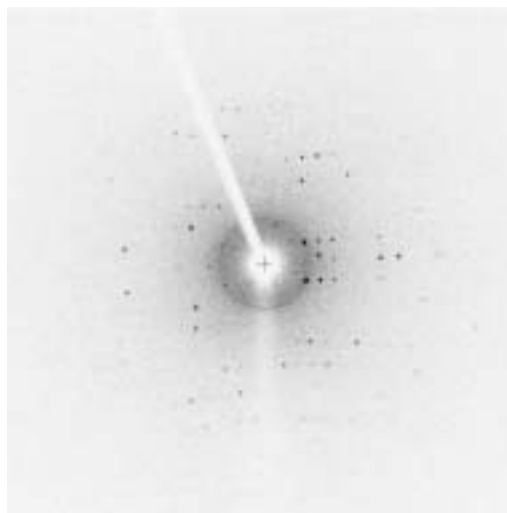


写真 1 ミクロ結晶構造解析装置



(a)



(b)

写真 2 (a) 通常の CCD 回折装置 (AFC-7 Mercury50 kV、100 mA、Fine focus) でとられた微小有機結晶の X 線回折像。回折斑点は殆ど観測されていない。

(b) 同一の結晶を本装置で撮影したもの。多くの X 線回折斑点が観測されている事が判る。

可能であった種々の (分子性) 結晶の構造解析が進むとともに、興味深い物性を期待されながら、構造決定が出来ないために研究の進展が図られなかった色々な物質群の開発研究やその物性研究が、将来、この装置の普及によって前進する可能性が大いに出てきたのではないかと想像している。



文部科学省ナノテクノロジー総合支援プロジェクト 「分子物質総合合成・解析支援」における 透過電子顕微鏡、走査電子顕微鏡、 集束イオンビーム加工観察装置の運用開始

分子スケールナノサイエンスセンター

分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門 多田 博一

電子構造研究系基礎電子化学研究部門 西 信之

【はじめに】

ナノテクノロジー総合支援プロジェクト（以下ナノ支援と呼びます）は、日本の「材料・ナノ」分野の技術競争力を飛躍的に高め、知的資産の創成を図るため、研究機関や研究分野を越えた横断的な支援を行うことを目的として平成14年からスタートしました。独立行政法人 物質・材料研究機構に総合運営本部がおかれ、国内外のナノテクノロジー・ナノサイエンスの動向や関連研究会などの情報収集・発信を行っています（<http://www.nanonet.go.jp/japanese/>）。ナノ支援の大きな柱の一つは、共用施設の利用支援で、現在 超高压電子顕微鏡、極微細加工・造形、放射光、物質合成・解析、の4つの施設・設備を活かした支援を行っています。分子科学研究所は、「分子・物質総合合成・解析支援」に申請し、京都大学（化学研究所、ベンチャービジネスラボラトリー、ナノ工学高等研究院）、九州大学（工学研究院）とともに採択され、その活動をはじめました（<http://nanoims.ims.ac.jp/>）。分子研のナノ支援では、「分子エレクトロニクス素子作製・評価システム」や「ナノクラスター質量分析装置」、「分子結合状態解析システム」など、7つの支援プログラムを核として、分子・物質材料の設計、合成、集積化、機能計測に関する支援を行っています。これらの支援をより効率的・効果的に行うため、平成

14年度に、3つの顕微鏡を導入しました。以下にその概要を紹介いたします。

【2】電界放出形電子顕微鏡 日本電子製JEM-3100FEF

最高加速電圧300 kVの電界放出形電子銃を備え、インカラム方式のΩ形エネルギーフィルターを持つ電子顕微鏡で、像観察とともにエネルギー損失スペクトル（EELS）分析が可能です。分解能は0.17 nm（粒子像）、0.10 nm（格子像）で、原子層レベルでの像観察と分析が行えます。試料作製用として、マイクロームおよび収束イオンビーム加工装置（後述）を準備しており、生物試料から無機固体まで幅広い材料の観察が可能です。特に、EELスペクトルによる状態分析は、分子・物質材料の創成に威力を発揮すると思われます。

【3】電界放出形走査電子顕微鏡 日本電子製JSM-6700F（写真1）

冷陰極形電界放射形電子銃を備え、試料表面の微細構造を高分解能で観察可能です。加速電圧は0.5～30 kV、2次電子像の分解能は、1.0 nm以下（加速電圧15 kV時）です。照射電流を1 pA～2 nAまで変えることができ、特に分子物質など電子線照射に弱い試料の観察にも適しています。エネルギー分散型X線分析装置（EDS）を備え、表面の組成の定



写真 1



写真 2

性分析および定量分析が可能です。Windows上のグラフィックユーザーインターフェースも使いやすく、比較的短時間で操作に慣れることができます。

【 4 】収束イオンビーム加工観察装置 日本電子製
JEM-9310FIB (写真 2)

FIBは、高速のGaイオンを試料に衝撃して、切削加工を行うとともに、イオン照射により発生する2次電子を結像して像観察を行う装置です。イオンを用いるため、試料極表面の情報がSEMとは異なるコントラストで得られることが特徴です。Gaイオンの最大加速電圧は30 kVで、像分解能は8 nmです。TEM用の薄片試料を作製するためのピックアップシステムも整備しています。試料支持および帯電防止のためのカーボン蒸着機構を備えています。これらの機能を用いることにより、TEM用薄片試料やSEM用断面加工の他、ナノスケールでの切削と造形が可能となります。

【 5 】利用方法

これらの装置に関する情報は、分子研ナノ支援ホームページ (<http://nanoims.ims.ac.jp/>) に随時掲載しております。お問い合わせは、tem@nano.ims.ac.jp、sem@nano.ims.ac.jp、fib@nano.ims.ac.jp宛、遠慮なくお寄せください。

岡崎 IMS コンファレンス 2002

生体分子科学のフロンティアを探る

開催日	2002年11月19日(火) - 21日(木)
開催場所	岡崎コンファレンスセンター
提案代表者	分子科学研究所 北川 禎三

昨年まで「分子研 COE コンファレンス」と呼んできた国際シンポジウムが本年から標記のように変わった。本シンポジウムを企画する頃はまだ分子研 COE コンファレンスという理解であり、今回は統合バイオサイエンスセンターの木下一彦、渡辺芳人（現名古屋大学教授）、北川禎三がオーガナイザーとなって “Dynamical Structures and Molecular Design of Metalloproteins” と題したシンポジウムを 2002 年 11 月 19 - 21 日にコンファレンスセンターで開催した。外国人 9 人を含む 21 人の招待講演と 35 件のポスター発表があり、活発な討論が行われた。参加登録者は 114 人（外国人 22 人）であった。

蛋白質のアミノ酸配列は遺伝子で決められ、各々は特異な立体構造をとって生理機能を果たしている。蛋白質の特色は、それが柔らかい高分子で構造が常に揺れ動いている上に、酵素反応の過程では構造そのものが変わっていくところにある。そのような蛋白質の構造をナノ秒やピコ秒の時間刻みで決め、構造が生理機能とどのように関係しているか？ また構造原理に基づいてアミノ酸配置の分子設計をすれば、活性のない蛋白質を触媒活性のある酵素に変換できるのか？ といった事を議論する事が狙いであった。

シンポジウムは S.G. Sligar 教授の格調高い包括的講演でスタートした。シトクロム P450 の構造と反応機構が関心を集め、ミオグロビンにアミノ酸置換

で P450 活性のあるものに変換できる事がいくつか示された。生物の進化と共に蛋白質機能が複雑化していったという一般常識を疑わせるほど、1 つの蛋白から色々な酵素活性をもつ蛋白が作れる事が明らかにされた。この事は “進化” というものを我々に根本的に考えなおさせるものとなった。また、生体エネルギーを作る過程は電子移動にカップルするプロトン能動輸送と、それによって作られた化学ポテンシャルを使って ATP を合成するという 2 つの現象から成るが、前者からシトクロム酸化酵素、後者から ATP 合成酵素がとり上げられた。後者は蛋白質がモーターのように心棒のまわりに回転するという動きの結果として ATP のできる事を、1 分子観測の動画として証明された事が印象的であった。このように各分野の世界最先端の研究が披露され、若い人に強い刺激を与えるよいシンポジウムであった。

PROGRAM

November 18 (Monday)

15:00-18:30 Registration

18:30-20:00 Get-Together Party

November 19 (Tuesday)

9:00-9:10 Welcome Greeting
K. Kaya (Director, IMS)



Opening Remarks
T. Kitagawa (Center for Integrative Bioscience)

Chair: M. Ikeda-Saito (Tohoku University)

9:10–9:50 **S. G. Sligar** (University of Illinois, Urbana)
The Cytochrome P450 Dynamic Landscape:
A Case of Complex Adaptive Matter

9:50–10:30 **Y. Watanabe** (Nagoya University)
Introduction of P450, Peroxidase, and
Catalase Activities into Myoglobin by Site-
Directed Mutagenesis

10:30–10:50 Coffee Break

Chair: Y. Shiro (RIKEN)

10:50–11:30 **V. Srajer** (Argonne National Laboratory)
NS Time-Resolved X-Ray Diffraction
Study of Protein Relaxation and Ligand
Migration in Myoglobin and Scapharca
Hemoglobin

11:30–12:10 **M. Nakasako** (Keio University)
Hydration Structure of Proteins

12:10–13:30 Lunch

13:30–15:00 Poster Discussion

Chair: K. Akasaka (Kinki University)

15:00–15:40 **H. Kandori** (Nagoya Institute of Technology)
Internal Water Molecules of Rhodopsins at
Work

15:40–16:20 **R. B. Dyer** (Los Alamos National Laboratory)
The Role of Fast Protein Motions in
Enzymatic Catalysis

16:20–16:40 Coffee Break

Chair: Y. Naruta (Kyushu University)

16:40–17:20 **I. Hamachi** (Kyushu University)
Bioorganic Engineering of Native Proteins

17:20–18:00 **D. B. Goodin** (Scripps Research Institute)
Engineering Heme Enzymes to Bind Novel
Ligands, Substrates and Molecular

November 20 (Wednesday)

Chair: T. Hase (Osaka University)

9:00–9:40 **S. Yoshikawa** (Himeji Institute of
Technology)
The Reaction Mechanism of Cytochrome *c*
Oxidase

9:40–10:20 **Y. Lu** (University of Illinois, Urbana)
Designing a Cytochrome *c* Oxidase:
Structural and Kinetic Study of CuA and
Heme-CuB Model Proteins

10:20–10:40 Coffee Break

Chair: N. Go (Institute of Atomic Energy)

10:40–11:20 **Y. Okamoto** (IMS)
Molecular Simulations of Protein Folding

11:20–12:00 **S. Hayward** (University of East Anglia)
A Database Approach to Understanding and
Predicting Functional Domain Movements
in Proteins

12:00–13:20 Lunch

13:20–14:50 Poster Discussion

Chair: K. Yoshihara (JAIST)

14:50–15:30 **M. Terazima** (Kyoto University)
New Time-resolved Detections on Energy
and Protein Structures of Some Photoactive
Proteins

15:30–16:10 **R. J. D. Miller** (University of Toronto)
Advent of Few Cycle Optical Pulses:
Mapping the Transduction of Reaction
Forces from the Quantum to Mesoscale
Motions of Protein Functions

16:10–16:30 Coffee Break

Chair: K. Nagayama (Center for Integrative Bioscience)

16:30–17:10 **A. Ikai** (Tokyo Institute of Technology)
Force Spectroscopy of Metallo-protein
Dynamics

17:10–17:50 **K. Kinoshita Jr.** (Center for Integrative
Bioscience)
Single-Molecule Physiology under an
Optical Microscope: How Molecular
Machines May Work

18:30–20:30 Banquet: Okazaki New Grand Hotel

November 21 (Thursday)

Chair: M. Go (Nagoya University)

9:00–9:40 **I. Morishima** (Kyoto University)
Module as the Structural and Functional
Unit in Hemoproteins and Its Application to
Design of Novel Hemoproteins

9:40–10:20 **T. Yomo** (Osaka University)
Experimental Evolution of Function from
Random Sequences

10:20–10:40 Coffee Break

Chair: T. Iizuka (Hosei University)

10:40–11:20 **L.-L. Wong** (Oxford University)
Molecular Recognition in Catalysis by
Cytochrome P450cam

11:20–12:00 **T. Kitagawa** (Center for Integrative
Bioscience)
Time-Resolved Resonance Raman Study on
Vibrational and Structural Relaxations of
Carbonmonoxy Myoglobin

12:00–12:40 **P. Anfinrud** (National Institutes of Health)
Watching a Protein as Its Functions with
Picosecond Time-Resolved X-Ray
Crystallography and Femtosecond Time-
Resolved IR Spectroscopy

12:40–12:45 Concluding Remarks
K. Kinoshita Jr. (Center for Integrative
Bioscience)

動的電子状態に基づいた光スイッチング分子の開発

提案代表者

九州大学

助 手

速水 真也

提案者及び共同研究者

分子科学研究所

助教授

井上 克也



1. 緒言

本課題研究は“動的電子状態に基づいた光スイッチング分子の開発”という研究テーマを提案したものである。現在まで光応答性物質を構築する試みが提唱され、注目を集めているが、幾つかの報告例がなされているのみである。光スイッチングを光誘起スピン転移現象すなわち Light-Induced Excited Spin State Trapping (LIESST) 現象を用いることにより開発する試みは、現在まで鉄(II)化合物でのみ見出されていた。以前我々は、鉄(III)あるいはコバルト(II)化合物などにおいて分子間相互作用を利用することにより、光励起準安定状態をトラップすること、すなわち光スイッチングに成功した。これら LIESST 化合物は協同効果が大きいため生じる現象であり、光による磁氣的・構造的制御が可能となり、新規光物性の出現が期待される。いまだに発展途上のこの分野において、我々が開発した光スイッチングデバイスは非常に安定性に優れており、材料としての利用価値が高いと判断される。また光誘起相転移材料・磁性材料を構築することは現在最も重要な課題の一つであり、光磁気メモリデバイスとしての開発が飛躍的に発展し、次世代の機能性物質として適用されると期待されている。しかしながら光応答性分子デバイス数は非常に限られており、なかなか発展していないのが現状である。これを打開するため有機・無機ハイブリッド化合物を用いると、有機化合物である配位子部位の修飾も容易であり、ま

た無機化合物部位である金属イオンは電荷やスピン状態などを制御することも可能であり、系統的に化合物を構築することが可能となりうる。また次元性をコントロールすることも可能であり、室温での相転移温度を有する分子スイッチングデバイスの構築ならびに光制御を可能にできると期待される。本研究は、光スイッチング分子として光誘起スピン転移化合物およびその他の光誘起相転移材料・磁性材料の新規開発を目的とし、さらに光スイッチングに伴って期待できる新しい光物性の探索をも目指したものである。

2. 研究戦略

我々はまず光スイッチング分子として光誘起スピン転移 (LIESST) 化合物に注目した。LIESST 化合物は 1984 年に初めて観測されて以来、その光スイッチング特性から注目されてきた。その LIESST

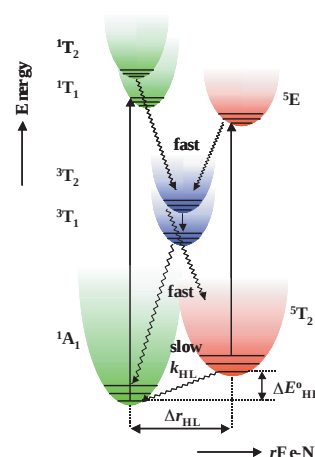


図1 d⁶化合物における光誘起スピン転移 (LIESST) の原理図。

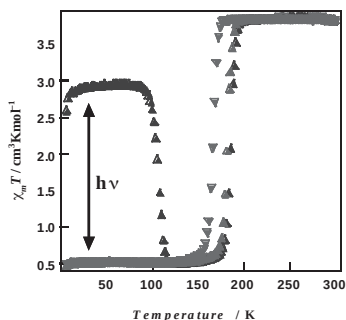


図2 鉄(III)錯体[Fe(pap)₂]ClO₄の磁気特性および光磁気特性。

挙動はスピン転移点以下の温度で低スピン状態のサンプルに光を照射することにより、低スピン状態から準安定高スピン状態へのスピン転移され長時間保持されたままの状態になる。さらにこの準安定高スピン状態に別の光を照射するともとの低スピン状態に戻る。この現象は低温で低スピン状態に光照射を行った場合、励起状態に遷移した電子が緩和する過程で高スピン状態の最低準位にトラップされるために起こる(図1)。そのLIESST化合物において鉄(II)化合物のみ見出されており、その他の金属イオンを有する化合物においては、金属配位子間の結合距離やエネルギー障壁のため不可能とされてきた。したがって様々な金属イオンを用いた化合物でLIESST現象を観測することは、光スイッチング分子デバイスの開発に大きな発展を促すことになる。

最近、我々は分子間力に着目し、協同効果の非常に大きな系であれば光誘起準安定状態を保持できることを提言し、不可能とされてきた鉄(III)化合物でのLIESST効果の観測に初めて成功した(図2)。一般的にそのような化合物はスピン転移挙動が急激であり協同効果が大きく、非常に大きな熱的ヒステリシスを示す。大きなヒステリシスを示す化合物はそのヒステリシスループ内で双安定状態が存在し、光スイッチング分子としての応用も考えられる。我々はまず光スイッチング分子としてLIESST化合物を用いることにより、新規光スイッチング分子デバイスの構築を行うことを試みた。

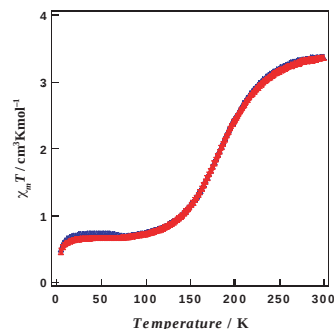


図3 鉄(II)錯体[Fe(aza)₂(NCS)₂]の磁気特性。

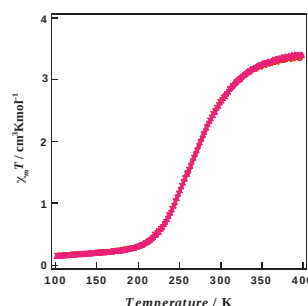
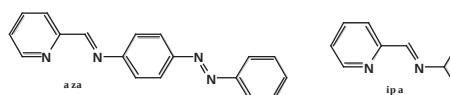


図4 鉄(II)錯体[Fe(ipa)₂(NCS)₂]の磁気特性。

3. 研究成果

3.1 スピン転移鉄(II)化合物における協同効果の理論的アプローチ

新規光スイッチング分子デバイスを構築するために「どのような構造を有するものがLIESST現象を示すのか」ということが重要なポイントとなってくる。そこでLIESST現象を示す化合物、示さない鉄(II)化合物[Fe(aza)₂(NCS)₂] (1)、[Fe(aza)₂(NCSe)₂] (2)、[Fe(ipa)₂(NCS)₂] (3)、[Fe(ipa)₂(NCSe)₂] (4)をそれぞれ合成し、それら化合物の構造と磁気特性および光磁気特性を詳細に検討した。それぞれの配位子aza



とipaは、アゾベンゼンとイソプロピル部位にこそ構造の違いが見られるが、どちらも同じ環境で配位する二座配位子である。鉄(II)化合物1-4は温度に依存したスピントロースオーバー挙動を示し(図3、図4)、それぞれのスピン転移温度は $T_{1/2} = 184$ K、

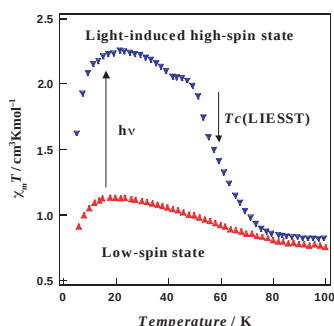


図5 鉄(II)錯体[He(aza)₂(NCS)₂]の光磁気特性。

255 K、260 K、370 Kであった。すべての鉄(II)化合物において熱的ヒステリシスは観測されず、緩やかなスピン転移挙動を示していた。これらの鉄(II)化合物に5 KでLIESST実験を行った。図5にaza配位子を用いた錯体1の光磁気特性を示す。550 nmの光照射後低スピン状態から準安定高スピン状態へとトラップされたことが分かる。またその後温度を上昇されると約50 Kで緩和が起こりもとの低スピン状態へと戻った。同様に錯体2においてもLIESST挙動が観測され、錯体1と2はLIESST現象を示した。一方、錯体3と4は5 Kで光照射してもLIESST挙動を示さなかった。そこで分子間の相互作用を構造的な観点から考察を行うために、鉄(II)化合物1-4の

構造解析を行った。aza配位子を用いた錯体1と2は分子内においてaza配位子が π - π スタッキングにより重なり合っておりカウンター陰イオンNCS⁻はシス位で配位していた。また結晶のパッキング構造は隣り合った分子がaza配位子により π - π スタッキングを通じて重なり合っており、分子間相互作用の強い化合物であることが分かった(図6)。一方、ipa配位子を用いた錯体3と4の分子構造は錯体1と2と同様にNCS⁻イオンはシス位で配位しており、基本的には似たような分子構造をしていた。しかしながら結晶のパッキングの様子は、イソプロピル基のかさ高い置換基のため分子間相互作用が働いている部位は見当たらず分子間相互作用の弱い系であることが分かった(図7)。以上の結果よりスピン転移鉄(II)化合物は、通常LIESST現象を観測することが知られているが、置換基としてかさ高いものを用いた場合、分子間相互作用が弱まりLIESST現象が5 Kでさえ観測されないことが分かった。したがってLIESST現象を観測するためには、分子を構築する上で分子間相互作用の導入が重要であると考えられる。

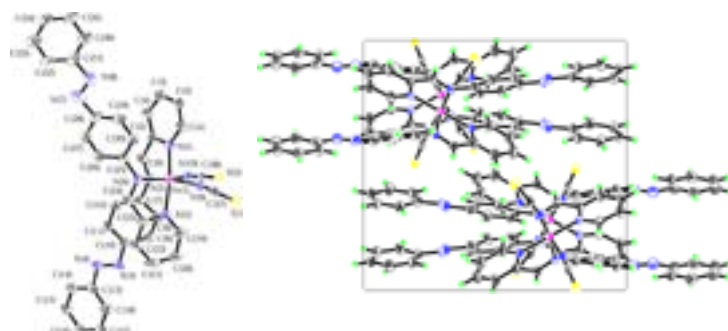


図6 鉄(II)錯体[He(aza)₂(NCS)₂]の分子構造と結晶パッキングの様子。

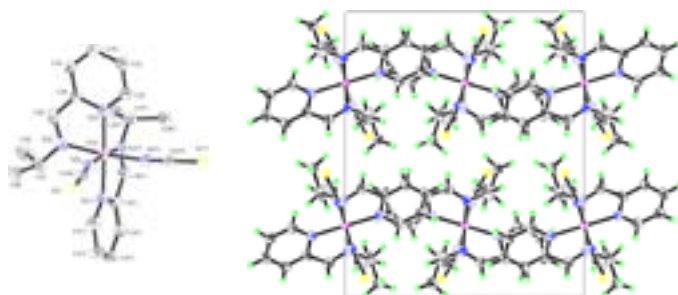


図7 鉄(II)錯体[He(ipa)₂(NCS)₂]の分子構造と結晶パッキングの様子。

が分かった(図7)。以上の結果よりスピン転移鉄(II)化合物は、通常LIESST現象を観測することが知られているが、置換基としてかさ高いものを用いた場合、分子間相互作用が弱まりLIESST現象が5 Kでさえ観測されないことが分かった。したがってLIESST現象を観測するためには、分子を構築する上で分子間相互作用の導入が重要であると考えられる。

これらの分子間相互作用を見積もるために、磁化率の温度変化(図3と図4)に対して(1)式のハミルトニアンを用いてフィッティングを行った。

表1 フィッティングによって求めた鉄(II)化合物1-4の熱力学的パラメーター。

	[Fe(aza) ₂ (NCS) ₂] (1)	[Fe(aza) ₂ (NCSe) ₂] (2)	[Fe(ipa) ₂ (NCS) ₂] (3)	[Fe(ipa) ₂ (NCSe) ₂] (4)
ΔH (kJmol ⁻¹)	6.0	8.0	10.7	15.4
ΔS (JK ⁻¹ mol ⁻¹)	31.7	32.2	39.2	41.6
$T_{1/2}$ (K)	188.1	248.7	272.2	370.9
J/k (K)	89	186	158	321

$$\hat{H} = \frac{\Delta_0}{2} \hat{\sigma} - J \langle \sigma \rangle \hat{\sigma} \quad (1)$$

ここで最初の項は高スピン種の形成エネルギーを表しており、第二の項は平均的なスピン種の相互作用を表している。また $\sigma = -1$ の時に低スピン状態、 $\sigma = +1$ の時に高スピン状態とし、 $\langle \sigma \rangle$ は σ の熱的平均値を表している。さらに $J > 0$ の時は分子間相互作用が強く協同効果が働いていることを示している。また(1)式のハミルトニアンは(2)式を導くことができる。

$$K_{eq} = \frac{1 + \langle \sigma \rangle}{1 - \langle \sigma \rangle} = r_{eff} \exp \left[- \frac{\Delta_{eff} - 2J \langle \sigma \rangle}{kT} \right] \quad (2)$$

スピン転移挙動の熱力学的パラメーターは(3)–(5)式を用いて求めることが出来る。

$$\Delta H = R(\Delta_{eff}/k) \quad (3)$$

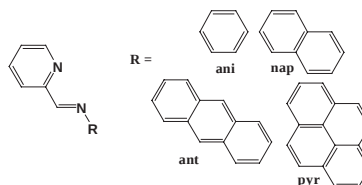
$$\Delta S = R \ln r_{eff} \quad (4)$$

$$T_c = \Delta H / \Delta S \quad (5)$$

以上の式を用いて鉄(II)化合物1-4に対してフィッティングを行い、熱力学的パラメーターを求めた(表1)。その結果、スピン転移に伴うエントロピーはほぼ一定であり、これはそれぞれ高スピン状態と低スピン状態間の電子基底状態における寄与は鉄(II)化合物1-4に対して似たようなものであることを表している。一方、スピン転移に伴うエンタルピーは寄与する因子が数多く存在し、鉄(II)化合物1-4

におけるエンタルピーは6.0 kJmol⁻¹から15.4 kJmol⁻¹の値を持つことが分かった。したがって式(5)を用いることにより、スピン転移温度を正確に求めることができた。このフィッティングによりスピン転移挙動に伴う磁化率の傾きから分子間相互作用の強さすなわち協同効果の大きさを見積もるため、 J の値を考慮することは非常に重要なことである。ここで鉄(II)化合物1-4に対して得られた J の値は、すべて $J > 0$ の値を示しており協同的に作用しスピン転移挙動が起こっていることが分かる。しかしながら鉄(II)化合物1と2はLIESST現象を示し、鉄(II)化合物3と4はLIESST現象を示さない。この原因として考えられることはスピン転移温度がことなっているため、より高温のスピン転移温度を有する化合物はLIESST挙動を示さないということになる。しかしながらその他の鉄(II)化合物で報告されているLIESST挙動において、スピン転移温度が400 K以上の化合物においてもLIESST現象が観測されていることから、磁気特性には現れない何らかの分子間相互作用が働いているということが考えられる。

さらに置換基としてナフタレン、アントラセン、



ピレンなどを導入することにより、分子間相互作用をエキシマー蛍光を用いて見積もることを検討した。用いた配位子は左図に示すように上述した配位子と基本骨格は同じであるが、置換基として π 系の広が

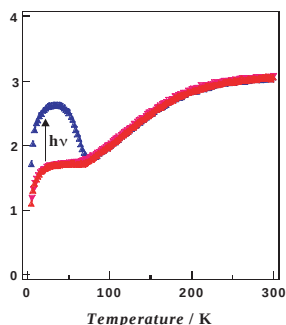


図8 鉄(II)錯体[Fe(ani)₂(NCS)₂]の光磁気特性。

りを持つものを用いてエキシマー蛍光の観測が期待できる。ani配位子を用いた錯体[Fe(ani)₂(NCS)₂]は図8に示すように不完全なスピン転移挙動を示し、かなり緩やかなスピン転移挙動を示している。しかしながら LIESST 挙動が観測されることから、 π 系の置換基を有しているため何らかの分子間相互作用が働き協同効果が働いているものと考えられる。

3.2 スピン転移鉄(III)化合物の LIESST 現象

我々は分子間力に着目し、協同効果の非常に大きな系であれば光誘起準安定状態を保持できることを提言し、不可能とされてきた鉄(III)化合物[Fe(pap)₂]Xや[Fe(qsal)₂]Xでの LIESST 挙動の観測に初めて成功した。現在まで三つの化合物においてのみ鉄(III)LIESST 化合物が見出されているが、理論的なアプローチが不十分である。図2や図9に示すように大きなヒステリシスを有するスピン転移鉄(III)化合物に対して LIESST 現象は観測することができた。しかしながらヒステリシスを示さない鉄(III)化合物においては LIESST 現象を観測できていない。今回合成した鉄(III)化合物[Fe(pap)₂]PF₆は温度に依存したスピン転移挙動を示すが、ヒステリシスは観測されなかった。しかしながら5 Kで光照射すると磁化の増加が確認され、LIESST 現象を観測することに成功した(図10)。鉄(II)化合物では高スピン状態と低スピン状態の金属-配位子間の結合距離の差が比較的大きいことからある程度の協同効果で LIESST 挙動を観測することが可能であるが、鉄(III)化合物の場合はその結合距離の差が小さいことから分子間相互作用を強くしないと LIESST 挙動を

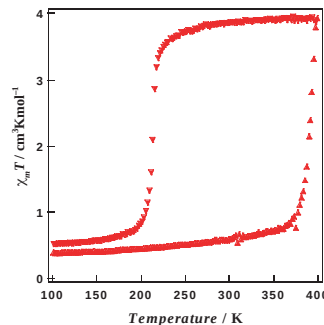


図9 鉄(II)錯体[Fe(qsal)₂]NCS·CH₂Cl₂の磁気特性。

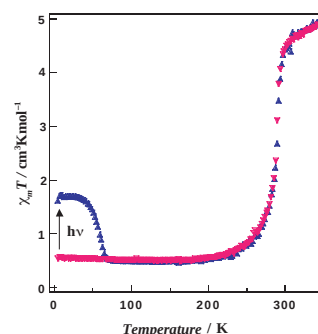
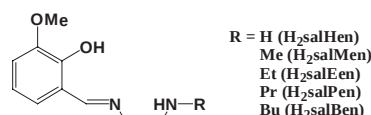


図10 鉄(III)錯体[Fe(pap)₂]PF₆の磁気特性。

観測することは困難であったが、この場合にはヒステリシスを示さない鉄(III)化合物において LIESST 挙動を観測することに初めて成功した。

3.3 分子間相互作用を導入した新規スピン転移鉄(III)化合物の構築

現在まで開発した LIESST 挙動を示す鉄(III)化合物は、分子間相互作用として π - π スタッキングを用いた化合物を構築してきた。さらに強い分子間相互作用を導入するため、水素結合と π - π スタッキングの両方を有する化合物の構築を行った。合成した鉄(III)化合物はそれぞれ[Fe(3-OMe-salHen)₂]ClO₄ (5)、[Fe(3-OMe-salMen)₂]ClO₄ (6)、[Fe(3-OMe-salEen)₂]ClO₄ (7)、[Fe(3-OMe-salPen)₂]ClO₄ (8)、[Fe(3-OMe-salBen)₂]ClO₄ (9)であり構造解析の結果より錯体5-9



はすべて同様の構造をしており、水素結合と π - π スタッキングの分子間相互作用が導入された結晶パッ

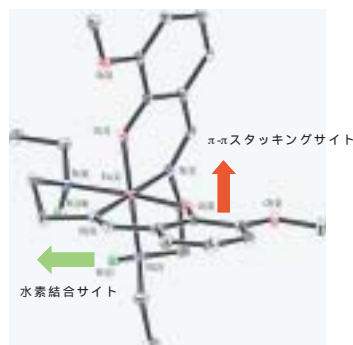
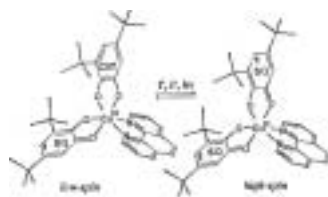


図 11 鉄(III)錯体 $[\text{Fe}(\text{3-OMe-salEen})_2]\text{ClO}_4$ の分子構造。

キングをしていることが分かった。水素結合はカウンター陰イオンである過塩素酸イオンを通じて分子間で水素結合によるネットワークが構築されており、さらに隣の錯体同士で π - π スタッキングを形成していた(図 11)。また錯体 5 と 6 は低スピン状態であり、錯体 8 は高スピン状態であった。錯体 7 と 9 は急激なスピン転移挙動を示すが、ヒステリシスはあまり示さなかった(図 12 と図 13)。ここに示すような水素結合と π - π スタッキングを導入し分子間相互作用を強化した化合物において LIESST 現象が観測できる可能性を有している。

3.4 コバルト(II)化合物における光応答性

光スイッチング分子デバイスを構築する上で、さまざまな遷移金属イオンを有する化合物が必要であり、コバルト(II)化合物に対して光応答性を観測することにした。しかしながらコバルト(II)化合物の LIESST 現象を観測することは非常に困難なことである。そこでまずコバルト(II)錯体 $[\text{Co}(\text{3,5-DBSQ})_2(\text{phen})]$ を合成し、低温下での光照射を行うことにした。この化合物は下図に示すように温度に



依存して配位子のセミキノンの上のラジカルが中心コバルト(II)イオンに可逆的に移動することにより、

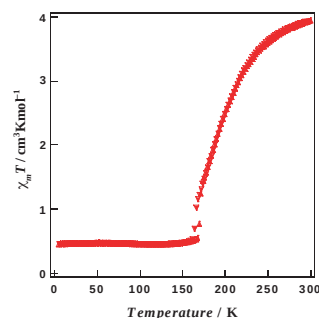


図 12 鉄(III)錯体 $[\text{Fe}(\text{3-OMe-salEen})_2]\text{ClO}_4$ の磁気特性。

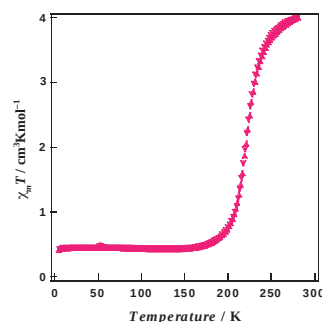
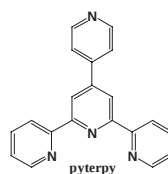


図 13 鉄(III)錯体 $[\text{Fe}(\text{3-OMe-salBen})_2]\text{ClO}_4$ の磁気特性。

コバルト(II)高スピン状態とコバルト(III)低スピン状態間を転移する化合物である。この現象は valence-tautomerism と呼ばれており、スピン転移挙動とは区別されている現象である。図 14 に示すようにこのコバルト(II)化合物は急激な valence-tautomerism が起こる。5 K で光照射を行った結果、準安定コバルト(II)高スピン状態をトラップすることに成功し、温度の上昇に伴いもとのコバルト(III)低スピン状態へと緩和することが分かった。LIESST 現象以外でこのように準安定状態をトラップすることに初めて成功した。さらに低温における光照射後のコバルト(II)イオンとラジカルとの磁氣的相互作用に関して重要な知見を与えた。



さらに新規コバルト(II)スピン転移化合物の構築を行った。用いた配位子はターピリジンサイトとピリジンサイトを有する配位子

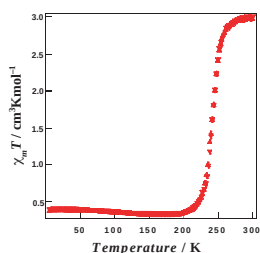


図 14 コバルト(II)錯体[Co(3,5-DBSQ)₂(phen)]の磁気特性。

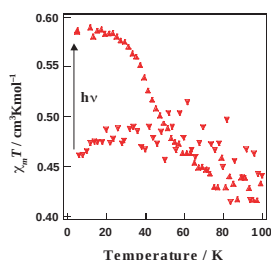


図 15 コバルト(II)錯体[Co(3,5-DBSQ)₂(phen)]の光磁気特性。

pyterpyである。この配位子を用いてコバルト(II)化合物[Co(pyterpy)₂](ClO₄)₂を合成した。ターピリジンサイトにコバルト(II)イオンが配しており、ピリジンサイトは他の金属イオンと配位できるように空サイトとなっていた(図 16)。このコバルト(II)錯体の磁化率を測定したところ、スピン転移挙動が観測されスピン転移挙動を示すビルディングブロックの構築に成功した。例えばこのコバルト(II)錯体に銀(I)イオンを配位させると図 18 に示すような一次元鎖構造を有するスピン転移化合物を構築することが可能であり、さらに銅(II)イオンやニッケル(II)イオンを配位させることにより二次元シートを構築することも可能である。

3.5 光スイッチングを用いた分子磁性の制御

LIESST 現象の最高緩和温度 (130 K) を示す鉄(II)化合物[Fe(L)(CN)₂]・H₂Oの構築に以前成功している。この化合物の特徴は構造であり、軸配位子としてシアノ基が二つ炭素原子で鉄(II)イオンに配位しており、もう一方の窒素原子が他の金属イオンと配位することができる。この鉄(II)LIESST 錯体と[Mn(hfac)₂(H₂O)₂]を反応させることにより、シアノ

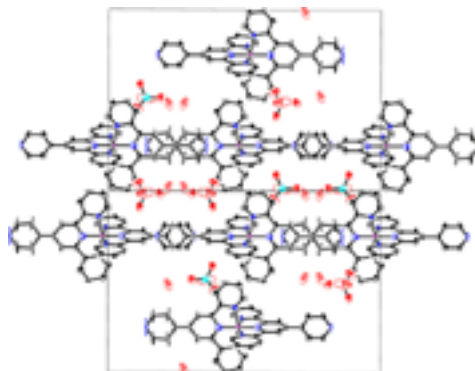


図 16 コバルト(II)錯体[Co(pyterpy)₂](ClO₄)₂の分子構造。

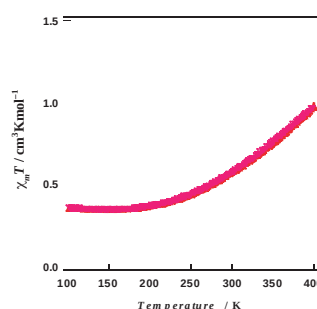


図 17 コバルト(II)錯体[Co(pyterpy)₂](ClO₄)₂の磁気特性。

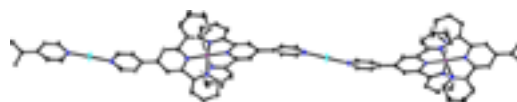


図 18 Ag[Co(pyterpy)₂](ClO₄)₃の一次元鎖構造。

架橋一次元鉄(II)マンガニ(II)化合物[Fe(L)(CN)₂]-[Mn(hfac)₂]を構築した(図 19)。この一次元鎖化合物は単結晶を得ることが困難であったためXAFSの測定により一次元鎖構造が構築できていることを確認した。300 Kでは鉄(II)の高スピン状態とマンガニ(II)の高スピン状態であるが、温度が下がるにつれ鉄(II)イオンがスピン転移し、70 K以下では約50%の鉄(II)イオンが高スピン状態から低スピン状態に転移していることがメスバウアースペクトルの結果からも分かった。また5 Kで光照射すると磁化の増大が観測され鉄(II)イオンのLIESST現象が観測された。光照射をやめた後温度を上昇させて行くと磁化の増大が観測され、その後熱緩和によりもとの

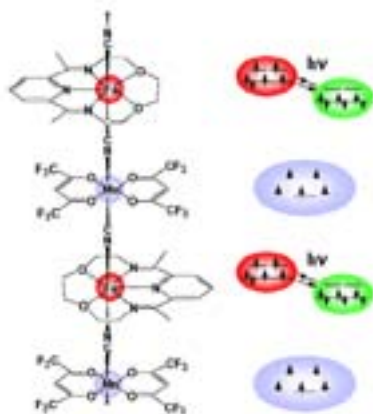


図 19 一次元化合物 $[\text{Fe}(\text{L})(\text{CN})_2][\text{Mn}(\text{hfac})_2]$ の光ス
イッチングを用いた磁性的制御。

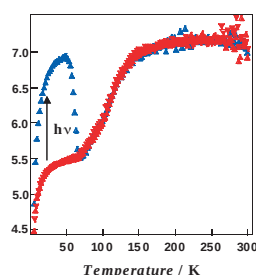


図 20 $[\text{Fe}(\text{L})(\text{CN})_2][\text{Mn}(\text{hfac})_2]$ の光磁気特性。

低スピン状態に戻ることを確認した (図 20)。

光照射後の 50 K 以下での磁氣的挙動を詳細に見積もるために(6)式を用いてフィッティングを行った。

$$\chi = \frac{N\beta^2}{3kT} \left(g^2 \frac{1+F(\beta J)}{1-F(\beta J)} + \delta g^2 \frac{1-F(\beta J)}{1+F(\beta J)} \right) \quad (6)$$

ここで $F(\beta J) = \coth(\beta J) - 1/\beta J$, $g = 1/2 (g_{\text{Fe}} + g_{\text{Mn}})$, $\delta g = 1/2 (g_{\text{Fe}} - g_{\text{Mn}})$ であり、フィッティングパラメーターは $J = -0.10 \text{ cm}^{-1}$ で Lande 因子は $g_{\text{Fe}} = 1.976$, $g_{\text{Mn}} = 2.42$ であった。光照射前は 50% の鉄(II)低スピン状態 ($S = 0$) が存在し、一次元鎖内の磁氣的相互作用は弱い。光照射後、鉄(II)高スピン状態 ($S = 2$) とマンガン(II)高スピン状態 ($S = 5/2$) がシアノ架橋により交互につながった一次元鎖 $-\text{Fe}^{\text{II}}(S = 2) - \text{Mn}^{\text{II}}(S = 5/2) - \text{Fe}^{\text{II}}(S = 2) - \text{Mn}^{\text{II}}(S = 5/2) -$ が形成され、反強磁性的な相互作用が強まったことが分かった。

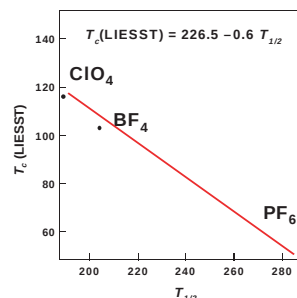


図 21 $[\text{Fe}(\text{pap})_2]\text{X}$ に対する $T_{1/2}$ vs. $T_c(\text{LIESST})$ の関係。

3.6 スピン転移鉄(III)化合物における協同効果に関する研究

我々は分子間力に着目し、協同効果の非常に大きな系であれば光誘起準安定状態を保持できることを提言し、不可能とされてきた鉄(III)化合物 $[\text{Fe}(\text{pap})_2]\text{X}$ や $[\text{Fe}(\text{qsal})_2]\text{X}$ での LIESST 挙動の観測に初めて成功した。現在まで二つの化合物においてのみ鉄(III)LIESST 化合物が見出されているが、理論的なアプローチが不十分である。そこで本研究において鉄(III)化合物 $[\text{Fe}(\text{pap})_2]\text{X}$ のカウンターイオン X を変化させスピン転移温度 $T_{1/2}$ と光誘起スピン転移後の熱緩和温度 $T_c(\text{LIESST})$ をプロットして直線関係を明らかにした (図 21)。また協同効果とトンネリングあるいは熱緩和の関係を明らかにするために、鉄(III)化合物 $[\text{Fe}(\text{pap})_2]\text{ClO}_4$ の鉄イオンをアルミニウムイオンで金属希釈した鉄(III)化合物 $[\text{Fe}_x\text{Al}_{1-x}(\text{pap})_2]\text{ClO}_4$ をそれぞれ合成し、磁気挙動および光磁気特性について詳細に検討した (図 22)。その結果、金属希釈した系の光磁気特性は、 $T_c(\text{LIESST})$ が低くなること、および光照射後の準安定高スピン状態の補足率が減少することを確認した。これは分子間相互作用の減少により、LIESST 効果が現象することを意味しており、LIESST 現象には協同効果が重要なファクターであるということを証明した。

3.7 鉄(III)高スピン化合物の逆光誘起スピン転移挙動の観測

上述した鉄(III)化合物の光誘起スピン転移挙動は、スピン転移化合物において見受けられる現象である。

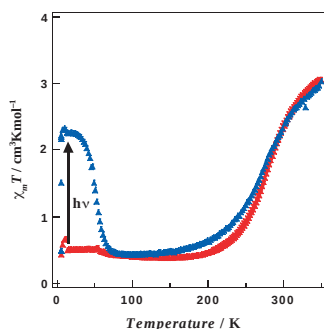


図 22 [Fe_{0.5}Al_{0.5}(pap)₂]ClO₄の磁気挙動、光磁気特性。

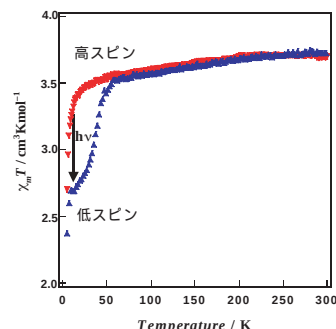


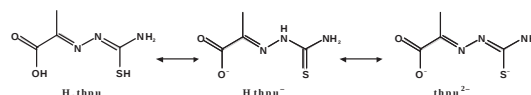
図 23 [Fe(qsal)₂]Clに対する磁気逆光誘起スピン転移。

すなわち室温で高スピン状態から温度を降下させるとスピン転移温度 ($T_{1/2}$) 以下で低スピン状態となる。この低スピン状態に光を照射することにより、低スピン状態から高スピン状態へと可逆的に変化する。ここで用いた鉄(III)化合物[Fe(qsal)₂]Clは5 K–300 Kの温度領域で $\chi_m T = 3.9 \text{ cm}^3 \text{Kmol}^{-1}$ の値を取り高スピン状態であった(図 23)。低温で $\chi_m T$ の値が減少しているのはゼロ磁場分裂のためであると考えられる。5 Kで550 nmの緑色光を照射すると $\chi_m T$ の値が減少し、高スピン状態から低スピン状態へとスピン転移することが観測された(図 23)。従来までのLIESST現象は、スピン転移温度以下の低温で低スピン状態に光照射することで高スピン状態をトラップするものであったが、この化合物の光誘起スピン転移現象は、逆の光誘起スピン転移現象であり、新しい光磁気特性を見出したものと考えられる。これらの結果は、凍結効果などの影響も考えられ、今後これらの磁気挙動および光磁気特性を詳細に検討していく必要があるものと考えられる。

3.8 新規鉄(III)光誘起スピン転移化合物の構築

鉄(III)化合物の光誘起スピン転移挙動は現在までのところ[Fe(pap)₂]Xと[Fe(qsal)₂]X系においてのみ観測することに成功した。それらの構造は分子間で π - π スタッキングを形成しており、分子間相互作用が強く働いていることが分かる。強い分子間相互作用が働く場合、協同効果が働き光誘起スピン転移挙動を示すものと考えられるが、このような設計指針は光スイッチング分子を開発する上で重要な設計指

針となる。また現在までのところ鉄(III)化合物の光誘起スピン転移挙動は、 π - π 相互作用を用いたときにおいて観測されたが、水素結合を用いて分子間相互作用を強める鉄(III)化合物[Fe(thpu)(Hthpu)]の構築を行った。この化合物に用いた配位子は、プロトンの脱離によりHthpu⁻およびthpu²⁻の3座配位子とな



る。鉄(III)イオンに配位する場合、対陰イオンを含まずHthpu⁻およびthpu²⁻がそれぞれ鉄(III)イオンに配位しニュートラルとなりこの鉄(III)化合物を形成する。この鉄(III)化合物の $\chi_m T$ の温度依存性を図 24 に示す。 $\chi_m T$ の値は、150 Kで $0.53 \text{ cm}^3 \text{Kmol}^{-1}$ であり、温度の上昇に伴い $T_{1/2\uparrow} = 239 \text{ K}$ で急激に低スピン状態から高スピン状態へとスピン転移した。300 Kで $\chi_m T$ の値は $3.67 \text{ cm}^3 \text{Kmol}^{-1}$ であり、高スピン種に帰属することができる。温度の下降に伴い $T_{1/2\downarrow} = 225 \text{ K}$ で急激に高スピン状態から低スピン状態へと転移し、もとの低スピン状態へと戻った。この化合物の熱ヒステリシスは $\Delta T = 14 \text{ K}$ であり、分子間相互作用が強く働き協同効果を伴ったスピン転移挙動を示した。また5 Kで低スピン状態のサンプルに550 nmの光を照射し磁化率測定を行った結果、磁化の増加が観測された(図 24)。したがって化合物[Fe(thpu)(Hthpu)]は光誘起スピン転移挙動を示す化合物であることが分かった。この化合物の構造は

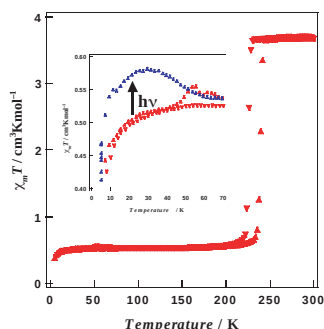


図 24 [Fe(thpu)(Hthpu)]の磁気挙動、光磁気特性。

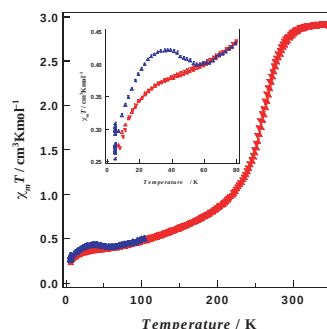
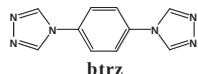


図 25 [Fe(btrz)₃](ClO₄)₂の磁気挙動、光磁気特性。

単結晶が得られず構造解析はできなかったが、配位子の特徴から水素結合が関与し、分子間相互作用を強めているものと考えられる。今後水素結合がどのように関与しているかなど詳細に検討するため、単結晶構造解析が必要である。

3.9 次元性を有する鉄(II)錯体の LIESST 現象

鉄(II)化合物の LIESST 現象は、1984 年にドイツのグループによって発見されて以来、その光スイッチングの観点から盛んに研究が行われている。しかしながらほとんどが単核錯体のものが多く、次元性を有する LIESST 化合物はあまり知られていない。



また多くの場合が協同効果により LIESST 現象を示し、配位結合で

リンクしたポリマー化合物の場合は LIESST 現象を示しにくいというのが現状である。そこで配位子 btrz を架橋配位子として用いて鉄(II)化合物の構築を行った。配位子 btrz は 4 座配位子であるが、この配位子は 2 座で鉄(II)イオンに配位しており 3 次元のポリマー錯体を形成していることがわかった。この鉄(II)化合物は、温度に依存してスピン転移挙動を示し、5 K で光照射を行うと磁化の増大が観測され LIESST 挙動を示すことが分かった。

4. おわりに

我々は光の時代に向け、物質のもつ様々な機能、例えば、磁石の特性、電気の特性、色などを光で自由自在にスイッチさせることができる新しい物質、

新しい技術を開発することを目指して研究を行っている。その際に構築される光スイッチング分子は小分子ではあるが、光スイッチング分子としての機能出現が現実のものとなった。また近年、ホスト・ゲストの化学が発展し、超分子化学あるいは集積型化合物という概念が広まった。物質における非共有結合の果たす役割の重要性を考えると、分子膜・液晶などに代表される秩序性を有する多様な分子集合系も視野に入れるべきである。これらの集合系を構成する小分子単独からは思いもつかぬ多彩な特性や機能が発現するからである。そこでこれまでに発展してきた超分子化学の構築法を模倣して、光スイッチング分子デバイスを構造的秩序をもたせ集合系にし、光物性にフィードバックできれば、次の飛躍が生じ多彩な機能出現が期待できるものと考えられる。

第 10 回日韓合同シンポジウム



平成 15 年 1 月 12 - 15 日の 3 日間、第 10 回日韓合同シンポジウムが韓国の Pohang 大学で開催された。1984 年の分子科学研究所での第 1 回シンポジウム以来、2 年ごとに日本と韓国が交互に主催してきている。今回の 10 回目のシンポジウムは、韓国の Mu Shiki Jhon 教授を代表として Kwang S. Kim 教授が主催された。理論化学と計算化学の最近の進展に焦点がおかれ、下記のプログラムにもあるように、分子構造から物質設計までの化学、物理、生物分野の幅広いテーマが取り上げられた。韓国からは 15 名の研究者が、日本からは茅所長を代表として 15 名の研究者が、日韓以外からは W. A. Goddard III 教授 (Caltech) U. Landman 教授 (Georgia Tech) K. Morokuma 教授 (Emory) H. B. Schlefel 教授 (Wayne State) の 4 名が招待され、九つのセッションで活発な研究発表と研究交流が行われた。また、若い研究者のポスター発表も 24 件も行われ、斬新な研究が数多く報告された。本シンポジウムの成果は、韓国化学会の代表的学術雑誌の *Bull. Korean Chem. Soc.* の特集号としてまもなく出版され、理論化学と計算化学の最近の進展が韓国の研究者にも広く紹介される予定である。これらは、日韓両国の今後の研究を大きく推進するものと期待される。

(永瀬 茂 記)

Program of 10th Korea-Japan Joint Symposium on Theoretical/Computational Chemistry

January 12–15, 2003

National Creative Research Initiative Center for
Superfunctional Materials

Pohang University of Science and Technology, Korea

Jan 13 (Mon)

8:30-09:00 Registration (Coffee/Snacks)

Opening Remarks

9:00-9:05 **Mu Shik Jhon** (KAIST)

9:05-9:10 **Koji Kaya** (IMS)

Session I Biotech-Nanotech

Chairman: Kwang S. Kim (POSTECH)

9:10-9:50 **William A. Goddard III** (Caltech)
de Novo Computational Chemistry and
Applications to Catalysis, Nanotechnology,
Drug design, and Materials Science

9:50-10:20 **Kyoung Tai No** (Soongsil Univ./TIC)
Force Field for Protein Simulation and Its
Application for Drug Design

10:20-10:50 **Shigeru Nagase** (IMS)
Endohedral Metallofullerenes. Cage
Structures and Metal Motion

10:50-11:00 Coffee Break

Session II Reaction Dynamics and Kinetics

Chairman: Hiroshi Nakatsuji (Kyoto Univ.)

11:00-11:30 **Seung C. Park** (Sungkyunkwan Univ.)
Theoretical Study of Gas-Surface Reactive
Scattering : Model $H + H \rightarrow H_2$ / Si(100)-
(2×1)

11:30-11:50 **Yongho Kim** (Kyunghee Univ.)
The Potential Energy Surface of BH_5 and
the Rate of the Hydrogen Scrambling



11:50-12:20 **Koichi Yamashita** (Tokyo Univ.)
Vibrational Relaxation Effects on the
Photodesorption of NO/Pt(111): A Density
Matrix Study

12:20-13:30 Lunch Break

Session III Nanomaterials

Chairman: Fumio Hirata (IMS)

13:30-14:10 **Uzi Landman** (Georgia Tech)
SMALL IS DIFFERENT: Physics and
chemistry in the non-scalable regime

14: 10-14:40 **Kizashi Yamaguchi** (Osaka Univ.)
Symmetry and broken symmetries in
molecular orbital descriptions of unstable
molecules and magnetic clusters

14:40-15:10 **Kwang S. Kim** (POSTECH)
Theoretical insights into the kaleidoscopic
world of gas phase clusters and
nanomaterials

Coffee Break

Session IV Solvent Dynamics, Free energy
calculations, and Protein simulations

Chairman: Sangyoub Lee (Seoul Nat. Univ.)

15:20-15:50 **Fumio Hirata** (IMS)
Phase Behavior of Solutions Confined in
Nanoporous Media

15:50-16:10 Masataka Nagaoka (Nagoya Univ.)
Structure Optimization of Molecules in
Solution via Free-Energy Gradient Method

Chairman: Shigeyoshi Sakaki (Kyoto Univ.)

16:10-16:30 **Susumu Okazaki** (IMS)
A molecular dynamics study of vibrational
energy relaxation of solute in solution

16:30-17:00 **Seokmin Shin** (Seoul Nat. Univ.)
Molecular Dynamics Simulations of Protein
Folding

17:00-17:10 Coffee Break

Session V Electronic Structure Theory / Algorithms

Chairman: Satoshi Yabushita (Keio Univ.)

17: 10-17:40 **Kimihiko Hirao** (Tokyo Univ.)
Recent Advances in Electronic Structure
Theory

17:40-18:00 **Cheol Ho Choi** (Kyungbuk Nat. Univ.)
Linear scaling quantum theories in
GAMESS

Chairman: Hosung Sun (Sungkyunkwan Univ.)

18:00-18:20 **Seiichiro Ten-no** (Nagoya Univ.)
On the use of short-range geminal in
explicitly correlated methods

18:20-18:50 **Hiroshi Nakatsuji** (Kyoto Univ.)
SAC-CI theory: from fine spectroscopy to
molecular biology

19:00-21:30 Reception

Jan 14 (Tue)

Session VI Inorganic / Organic / Polymer Systems

Chairman: Yoon Sup Lee (KAIST)

8:50-9:30 **Keiji Morokuma** (Emory Univ.)
Applications of ONIOM and Other
Electronic Structure Methods to Catalyses
and Nano Chemistry

9:30-9:50 **Chan Kyung Kim** (Inha Univ.)
Theoretical Studies on the Pyrolyses of 2-
Phenoxycarboxylic Acids and Sulphonyl
Oximes

Chairman: Kyoung Tai No (Soongsil Univ.)

9:50-10:20 **Sungyul Lee** (Kyunghee Univ.)
Effects of microsolvation on the structures
and reactions of clusters: Computational
Study

10:20-10:50 **Shigeyoshi Sakaki** (Kyoto Univ.)
C-H σ -Bond Activation and Related
Reaction by Transition Metal Complexes:
Theoretical Study



10:50-11:00 Coffee Break

Session VII Relativistic ab initio calculations and LS coupling

Chairman: Kimihiko Hirao (Tokyo Univ.)

11:00-11:30 **Yoon Sup Lee** (KAIST)
Molecular Calculations Using Relativistic Effective Core Potentials with Effective Spin-Orbit Operators

11:30-11:50 **Takahito Nakajima** (Tokyo Univ.)
Relativistic Molecular Theory

11:50-12:20 **Hosung Sun** (Sungkyunkwan Univ.)
The effective valence shell Hamiltonian for spin-orbit coupling in molecules

12:20-13:00 Lunch Break

13:00-14:30 Poster Session
P1 - P24

Session VIII Ab initio Molecular Dynamics

Chairman: Shigeru Nagase (IMS)

14:30-15:10 **H. Bernhard Schlegel** (Wayne State Univ.)
Exploring Potential Energy Surfaces for Chemical Reactions : An Overview of Some Practical Methods

15:10-15:30 **Kyung-Koo Baeck** (Kangnung Nat. Univ.)
An AIMD Study with the Equation-of-Motion Coupled-Cluster Theory and the Full- Multiple-Spawning Method

15:30-16:00 **Tetsuya Taketsugu** (Ochanomizu Univ.)
Direct dynamics simulation with surface hopping scheme on the dissociative recombination reaction $\text{HCNH}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{HNC} / \text{HCN} + \text{H}$

16:00-16:10 Coffee Break

Session IX Excited States, Spectroscopy and Quantum Control

Chairman: Seung C. Park (Sungkyunkwan Univ.)

16:10-16:40 **Satoshi Yabushita** (Keio Univ.)
Theoretical Studies on the Photodissociation of Cl_2 and Br_2

16:40-17:00 **Jin Yong Lee** (Chonnam Nat. Univ.)
Collective electronic oscillators method: Two-photon absorption of paracyclophanes and charge transfer driven nonlinear optical property of polyenes and polyynes

17:00-17:10 Coffee Break

Chairman: Kazuo Takatsuka (Tokyo Univ.)

17:10-17:40 **Sangyoub Lee** (Seoul Nat. Univ.)
Theory of intrapolymer excimer- formation kinetics

17:40-18:10 **Minhaeng Cho** (Korea Univ.)
Theoretical investigation of multidimensional vibrational spectroscopies of peptides

Chairman: Sungyul Lee (Kyunghee Univ.)

18:10-18:30 **Young Sik Kim** (Hongik Univ.)
Optimal Control of Quantum Dynamics in Reduced Space

18:30-19:00 **Kazuo Takatsuka** (Tokyo Univ.)
Direct observation of wavepacket bifurcation in electron transfer systems by means of time-resolved pump-probe photoelectron spectroscopy

平成14年度(後期) 分子研研究会

開催日時	研究会名	提案代表者	参加人数
2002年11月 8日(金) ～ 10日(日)	複雑凝集系の分子科学	宇田川康夫	57名
2002年11月13日(水) ～ 14日(木)	赤外放射光の現状と将来計画	難波 孝夫	44名
2002年11月29日(金) ～ 12月 1日(日)	高精度大規模理論計算が開く新しい分子科学	榊 茂好	112名
2002年12月13日(金) ～ 14日(土)	磁気科学の新展開——化学反応と材料プロセスへの磁場効果	山口 益弘	61名
2003年 2月18日(火) ～ 19日(水)	クラスター・ジャイアントクラスター・ナノ粒子の分子科学:機能デザインを目指した構造・電子物性・磁性研究	中嶋 敦	59名
2003年 3月 3日(月) ～ 5日(水)	分子を構成要素とする新しい電子機能物質	小林 速男	91名
2003年 3月 5日(水) ～ 6日(木)	銅蛋白質の構造・物性の分子科学	高妻 孝光	39名

* プログラムの詳細は「分子研レポート」に掲載することになりました。

また、http://www.ims.ac.jp/events/oldj_symposium.html も御参照下さい。

平成 14 年度（後期） 分子研コロキウム・分子科学フォーラム



コロキウム フォーラム	開 催 日 時	講 演 題 目	講 演 者
第 753 回	2002年 10 月 16 日	Prospects of applications based on functionalised fullerenes	K.-P. Dinse
第 754 回	10 月 23 日	軟 X 線磁気円二色性法によるナノスケール磁性薄膜の評価	横山 利彦
第 755 回	11 月 13 日	磁気科学——化学反応・物理変化の強磁場による制御——	谷本 能文
第 756 回	11 月 27 日	気体分子センサータンパク質の構造と機能	青野 重利
第 757 回	12 月 18 日	少数多体の反応の理論計算——ペニングイオン化と反応ポテンシャル面生成	石田 俊正
第 41 回	1 月 15 日	相転移とその周辺——臨界現象からガラス転移まで——	川崎 恭治
第 758 回	2003年 1 月 22 日	Electronic structures of carbon nanotube peopods	Young Kuk
第 42 回	1 月 29 日	一技術者として 20 世紀の反省と 21 世紀への課題	石丸 典生
第 759 回	2 月 5 日	分子性強相関半導体結晶を用いた電界効果型デバイス	長谷川達生
第 43 回	2 月 12 日	発見の方法論——アブダクションとセレンディピティ	立花 隆
第 44 回	3 月 26 日	分子と超伝導体	小林 速男

平成14年度（後期）共同研究

課題研究

○は提案代表者

溶液中でのナノ会合体の自己組織化に関する理論構築

分子科学研究所教授

○ 平田 文男

ウクライナ凝縮系物理学研究所教授

M.Holovko

京都大学エネルギー理工学研究所助教授

木下 正弘

京都大学化学研究所助手

岡村恵美子

立命館大学総合理工学研究機構ポスドクトラルフェロー

今井 隆志

崇城大学工学部教授

上岡 龍一

佐賀大学大学院工学系研究科大学院生

松上 優

末端酸化酵素の高酸化状態反応中間体の構造化学

分子科学研究所教授

○ 北川 禎三

東京大学大学院総合文化研究科助教授

小倉 尚志

東京大学大学院総合文化研究科大学院生

織田 賢二

東京大学大学院総合文化研究科大学院生

高橋 俊成

姫路工業大学理学部教授

吉川 信也

Univ. of Crete Department of Chemistry助教授

Constantinos Varotsis

Hankuk Univ. Foreign Studies Department of Chemistry教授

Younkyoo Kim

京都大学大学院工学研究科助手

高橋 聡

協力研究

「タンパク質の折り畳みに対する溶媒効果の分子論的研究」を始め61件



協力研究（ナノ支援）

「新規な有機FETの開発」を始め32件

研究会

高精度大規模理論計算が開く新しい分子科学	京都大学大学院工学研究科教授	榊 茂好
クラスター・ジャイアントクラスター・ナノ粒子の分子科学：機能デザインを目指した構造・電子物性・磁性研究	慶應義塾大学理工学部教授	中嶋 敦
分子を構成要素とする新しい電子機能物質	分子科学研究所教授	小林 速男
複雑凝集系の分子科学	東北大学多元物質科学研究所教授	宇田川康夫
磁気科学の新展開——化学反応と材料プロセスへの磁場効果	横浜国立大学大学院工学研究院教授	山口 益弘
赤外放射光の現状と将来計画	神戸大学大学院自然科学研究科教授	難波 孝夫
銅蛋白質の構造・物性の分子科学	茨城大学理学部助教授	高妻 孝光

施設利用

「ESCAによる半導体表面層の分析」を始め31件

UVSOR 施設利用

「複合型メタロシリケートのXAFSによる構造解析」を始め79件

施設利用（ナノ支援）

「ナノサイエンスを指向した含ケイ素およびゲルマニウム新規化学種の理論的研究」を始め12件

* 共同研究実施一覧（各課題名等）は「分子研レポート」に掲載することになりました。

井上克也	相関領域研究系助	14.10.5 ~ 14.10.27	スペイン	“International Conference on Molecular Magnets 2002”で研究発表のため/サラゴア大学での研究発表/ストラスブルグ、CNRS、IPCMSでの研究発表
藤原秀紀	分子集団研究系手	14.10.5 ~ 14.10.12	スペイン	分子磁性に関する国際会議 (ICMM2002) に小林速男教授の代理として出席し、資料収集及び研究発表を行う
中村宏樹	理論研究系授	14.10.6 ~ 14.10.12	ロシア	XXVII European Conference on Laser Interaction with Matter にて講演を行う
加藤立久	分子構造研究系授	14.10.6 ~ 14.10.11	ドイツ	Sendai-Berlin Joint Seminar on Advanced ESR において基調講演を行うため
古川貢	分子構造研究系手	14.10.6 ~ 14.10.11	ドイツ	Sendai-Berlin Joint Seminar on Advanced ESR に参加・発表することが目的である
木村真一	極端紫外光実験施設助	14.10.7 ~ 14.10.20	ドイツ	ドイツ固体化学物理マックスプランク研究所・共同研究と講演
猿倉信彦	分子制御レーザー開発研究センター助	14.10.9 ~ 14.10.14	アメリカ	Qpeak 社、モルトン先生と共同研究打ち合わせのため
平田文男	理論研究系授	14.10.12 ~ 14.10.19	中国	Yangtze Conference on Fluids and Interfaces にて招待講演を行う
岡崎進	電子計算機室授	14.10.12 ~ 14.10.19	中国	液体と界面に関する揚子江会議、講演
谷村吉隆	理論研究系授	14.10.21 ~ 14.10.24	韓国	The 1 st Symposium on Multidimensional Vibrational Spectroscopy (2002)
岡本祐幸	理論研究系授	14.10.22 ~ 14.10.26	韓国	Eok Kyun Lee 教授を訪問し、課題研究 (第一原理からのタンパク質の立体構造予測シミュレーション法の開発 JSPS-RFTF98P01101) に関する討論のため
米満賢治	理論研究系授	14.10.25 ~ 14.11.3	フランス ポーランド	フランスで開催される NEDO meeting “Intelligent CT materials” にて研究成果発表を行う。またポーランドのプロツワフ工科大学にて研究課題に関する討論を行う
見附孝一郎	極端紫外光科学研究系助	14.10.30 ~ 14.11.2	台湾	SRRC (放射光研究センター) 主催の第 8 回ユーザーミーティングとワークショップに出席して研究発表を行う
岡本祐幸	理論研究系授	14.10.31 ~ 14.11.6	アメリカ	「11 th Conference on Current Trends in Computational Chemistry」にて招待講演のため
猿倉信彦	分子制御レーザー開発研究センター助	14.11.9 ~ 14.11.16	イギリス	IEEE Lasers and Electro-Optics Society に発表のため出席
井上克也	相関領域研究系授	14.11.10 ~ 14.11.21	フランス	CNRS-IPCMS 分子磁性研究会で研究発表およびリバイスツール大学、Marc Drillon 教授と共同研究打ち合わせ
藤井正明	電子構造研究系授	14.11.18 ~ 14.12.2	ニュージーランド	University of Otago の Senior Lecturer のキーガード博士と二重共鳴分光法の研究に関する研究討議および共同研究
谷村吉隆	理論研究系授	14.11.24 ~ 14.11.26	韓国	KAIST で博士課程の審査をするため
夢田博一	分子スケールナノサイエンスセンター助	14.12.1 ~ 14.12.20	アメリカ	分子素子開発の展開戦略に関する調査研究
平等拓範	分子制御レーザー開発研究センター助	14.12.15 ~ 14.12.19	アメリカ	スタンフォード大学にて界面制御による高機能光計測用広帯域波長可変クロマチックレーザーの開発研究に関する情報収集
木下一彦	統合バイオサイエンスセンター授	15.1.5 ~ 15.1.13	アメリカ	“The Biophysics of Single Molecules” にて研究発表を行う。また一分子生理学最先端の情報収集を行う
谷村吉隆	理論研究系授	15.1.7 ~ 15.1.12	シンガポール マレーシア	総研大アジアレクチャーとして、Putra Malaysia 大学とシンガポール国立大学での集中講義
北川禎三	統合バイオサイエンスセンター授	15.1.8 ~ 15.1.16	中国	院入試面接 (光科学) 陸軍第 4 医科大、杏林大学客員教授就任、河南大学 講演



林 直 毅	技 術	課 官	15. 1. 9 ~ 15. 3.21	アイルランド	新奇強誘電性液晶分子の合成および実験による強誘電性液晶の配向分布決定のための最新技術の習得
岡 本 祐 幸	理 論 研 究	系 授	15. 1.10 ~ 15. 1.12	シンガポール	総研大アジアレクチャーとしてシンガポール国立大学での集中講義
茅 幸 二	所	長	15. 1.12 ~ 15. 1.15	韓 国	10 th Korea-Japan Joint Symposium on Theoretical/Computational Chemistry に出席のため
永 瀬 茂	理 論 研 究	系 授	15. 1.12 ~ 15. 1.15	韓 国	10 th Korea-Japan Joint Symposium on Theoretical/Computational Chemistry にて招待講演及び討論を行うため
平 田 文 男	理 論 研 究	系 授	15. 1.12 ~ 15. 1.15	韓 国	10 th Korea-Japan Joint Symposium on Theoretical/Computational Chemistry にて招待講演及び討論を行うため
岡 崎 進	電 子 計 算 機	室 授	15. 1.12 ~ 15. 1.15	韓 国	第 10 回日韓理論・計算化学シンポジウム・講演
木 村 真 一	極 端 紫 外 光 実 験 施 設	助 教 授	15. 1.13 ~ 15. 1.15	韓 国	日韓共同研究セミナー 講演
奥 村 久 士	理 論 研 究	系 手	15. 1.28 ~ 15. 2.10	イギリス	課題研究(第一原理からのタンパク質の立体構造予測シミュレーション法の開発JSPS-RFTF98 P 01101)に関する討論及び情報収集のため
平 等 拓 範	分子制御レーザー開発研究センター	助 教 授	15. 2. 2 ~ 15. 2.11	アメリカ	先端固体フォトリクス国際会議 ASSP で研究成果発表、スタンフォード大学にて研究、討論を行う
庄 司 一 郎	分子制御レーザー開発研究センター	助 手	15. 2. 2 ~ 15. 2. 8	アメリカ	先端固体フォトリクス国際会議 ASSP で研究成果発表
岡 本 祐 幸	理 論 研 究	系 授	15. 2.22 ~ 15. 2.28	フランス イタリア	生物物理化学研究所(パリ)及び核磁気共鳴研究所(フィレンツェ)を訪問し、研究成果の発表及び情報収集をする
木 下 一 彦	統合バイオサイエンスセンター	教 授	15. 2.22 ~ 15. 3. 9	アメリカ ス イ ス	“Keystone Symposia on Molecular and Cellular Biology” 参加発表
足 立 健 吾	相 関 領 域 研 究	系 手	15. 2.28 ~ 15. 3. 7	アメリカ	“Biophysical Society 47 th Annual Meeting”にて研究発表をおこなう
藤 山 茂 樹	分 子 集 団 研 究	系 手	15. 3. 2 ~ 15. 3.11	アメリカ	2003 年アメリカ物理学会年次大会に出席発表し、討論を行う
渡 辺 三 千 雄	装 置 開 発 室	助 教 授	15. 3.18 ~ 15. 3.27	アメリカ	OAI(NASA)において、UHV環境下における新しい潤滑膜(分子研で開発)を講演。さらにNASAにおける関連技術を調査し討議する
見 附 孝 一 郎	極 端 紫 外 光 科 学 研 究 系	助 教 授	15. 3.21 ~ 15. 3.29	アメリカ	第225回アメリカ化学会年会のシンポジウム「真空紫外光を用いた分光学と動力学」に出席し口頭発表を行う。また、討論等に参加して研究情報を収集する
木 下 一 彦	統合バイオサイエンスセンター	教 授	15. 3.22 ~ 15. 3.29	アメリカ	ACS Symposium: “Physical chemistry of molecular motors”参加発表
平 田 文 男	理 論 研 究	系 授	15. 3.23 ~ 15. 3.30	アメリカ	アメリカ化学会に参加して研究成果発表を行うため。ヒューストン大学で研究課題に関する討論を行うため
繁 政 英 治	極 端 紫 外 光 実 験 施 設	助 教 授	15. 3.25 ~ 15. 4. 2	フランス	南パリ大学にて実験及び研究打ち合わせ

異動年月日	氏名	区分	異動後の所属・職名	現(旧)の所属・職名	備考
14.10.16	夢田 奈緒	採用	分子集団研究系物性化学研究部門事務補佐員		
14.10.16	小野 陽子	採用	分子制御レーザー開発研究センター特殊波長レーザー開発研究部事務補佐員(科学技術振興調整)		
14.10.16	Quema, Alex	採用	分子制御レーザー開発研究センター放射光同期レーザー開発研究部リサーチ・アシエイト	大阪大学大学院工学研究科博士後期課程院生	
14.10.31	朱 超原	辞職	米国ミネソタ大学博士研究員	理論研究系分子基礎理論第二研究部門助手	
14.10.31	More, Sam D.	辞職	三井 BNRI 研究員	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門非常勤研究員	
14.10.31	松本 太輝	辞職	信州大学繊維学部精密素材工学科技術補佐員	分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門非常勤研究員	
14.11. 1	Mil'nikov, Gennady	採用	理論研究系分子基礎理論第二研究部門助手	科研費特別協力研究員	
14.11. 1	長澤 賢幸	採用	分子スケールナノサイエンスセンターナノ触媒・生命分子素子研究部門助手	統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域研究員(科学研究)	
14.11. 1	永瀬 茂	併任	(筑波大学化学系先端学際領域研究センター教授)	理論研究系分子基礎理論第一研究部門教授	
14.11. 1	手老 龍吾	採用	技術課第二技術班極端紫外光科学研究系技術係員	東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程	
14.11.16	魚住 泰広	配置換	分子スケールナノサイエンスセンターナノ触媒・生命分子素子研究部門教授	錯体化学実験施設錯体触媒研究部門教授	
14.11.16	Kshirsagar, Balwant	採用	分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門非常勤研究員	ブネ大学大学院理学研究科物理学専攻博士課程院生	
14.11.30	相原 秀典	辞職	錯体化学実験施設錯体物性研究部門非常勤研究員(委任経理金)	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員(科学技術振興調整)	
14.11.30	安江 崇裕	辞職	錯体化学実験施設錯体物性研究部門非常勤研究員(委任経理金)	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員(科学技術振興調整)	
14.11.30	禿子 瞳	辞職	計算科学研究センター事務補佐員	技術課第三技術班電子計算機技術係技術補佐員(研究支援推進員)	
14.12. 1	相原 秀典	採用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門非常勤研究員(委任経理金)	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員(科学技術振興調整)	
14.12. 1	安江 崇裕	採用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門非常勤研究員(委任経理金)	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員(科学技術振興調整)	
14.12. 1	岡部 智絵	採用	電子構造研究系基礎電子化学研究部門産学官連携研究員(テクニカル・アシスタント)	電子構造研究系基礎電子化学研究部門特別共同利用研究員	
14.12. 1	三上 泰治	採用	電子構造研究系基礎電子化学研究部門産学官連携研究員(テクニカル・アシスタント)	計算科学研究センター特別共同利用研究員	
14.12. 1	玉木 浩貴	採用	電子構造研究系基礎電子化学研究部門産学官連携研究員(テクニカル・アシスタント)	総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程在学中	
14.12. 1	成島 隆	採用	電子構造研究系基礎電子化学研究部門産学官連携研究員(テクニカル・アシスタント)	総合研究大学院大学先端科学研究科博士後期課程在学中	
14.12. 1	原田 佳男	採用	技術課第三技術班装置開発技術係技術補佐員(研究支援推進員)		



14.12. 1	古 池 晶 探 用	統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域研究員(科学研究)	静岡大学機器分析センター非常勤職員
14.12. 1	禿 子 瞳 探 用	計算科学研究センター事務補佐員	技術課第三技術班装置開発技術係技術補佐員(研究支援推進員)
14.12. 1	鈴 木 陽 子 併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科助手	(理論研究系分子基礎理論第二研究部門助手)
14.12. 1	藤 山 茂 樹 併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科助手	(分子集団研究系物性化学研究部門助手)
14.12.16	Dunin Barkovskiy Lev 探 用	分子スケールナノサイエンスセンター分子クラスター研究部門非常勤研究員	RussianAcademyofSciences 助手
14.12.16	木 村 将 浩 探 用	電子構造研究系基礎電子化学研究部門産学官連携研究員(テクニカル・アシスタント)	総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程在学中
15. 1. 1	足 立 健 吾 探 用	関連領域研究系相關分子科学第一研究部門助手	派遣研究員(科学研究)岡崎国立共同研究機構勤務
15. 1. 1	中 島 洋 転 入	関連領域研究系相關分子科学第一研究部門助手	北陸先端科学技術大学院大学材料科学研究科助手
15. 1. 1	神 坂 英 幸 探 用	理論研究系分子基礎理論第二研究部門非常勤研究員	分子科学研究所特別協力研究員
15. 1. 1	鈴 木 健 太 郎 探 用	関連領域研究系相關分子科学第一研究部門非常勤研究員	分子科学研究所特別協力研究員
15. 1. 1	足 立 健 吾 勤 務 命	統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域助手	関連領域研究系相關分子科学第一研究部門助手
15. 1. 1	中 島 洋 勤 務 命	統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域助手	関連領域研究系相關分子科学第一研究部門助手
15. 1.16	上 地 一 郎 探 用	電子構造研究系基礎電子化学研究部門産学官連携研究員(テクニカル・アシスタント)	分子スケールナノサイエンスセンター分子クラスター研究部門特別共同利用研究員
15. 1.31	高 口 博 志 辞 職	理化学研究所反応動力学研究室研究員	電子構造研究系電子状態動力学研究部門助手
15. 1.31	玉 木 浩 貴 辞 職		電子構造研究系基礎電子化学研究部門産学官連携研究員(テクニカル・アシスタント)
15. 2. 1	小 川 琢 治 転 入	分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門教授	愛媛大学理学部助教授
15. 2. 1	小 川 琢 治 客員終了	分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門教授	(分子集団研究系分子集団研究部門助教授)
15. 2. 1	小 川 琢 治 併 任	愛媛大学理学部教授	(分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門教授)
15. 2. 1	小 川 琢 治 併 任	独立行政法人通信総合研究所関西先端研究グループ	(分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門教授)
15. 2. 1	井 村 孝 平 併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科助手	(分子構造研究系分子構造学第一研究部門助手)
15. 2. 1	山 田 亮 併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科助手	(分子集団研究系分子集団動力学研究部門助手)
15. 2.28	李 艶 君 退 職	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門非常勤研究員(委任経理金)	分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門非常勤研究員(委任経理金)
15. 3. 1	李 艶 君 探 用	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門非常勤研究員(委任経理金)	分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門非常勤研究員(委任経理金)

15. 3.16	小 野 晋 吾	採用	分子制御レーザー開発研究センター 放射光同期レーザー開発研究部助手	日本学術振興会特別研究員 PD
15. 3.29	Kshirsagar, B.	辞職	イタリア国ナノ物質研究所研究員	分子スケールナノサイエンスセンター 界面分子科学研究部門非常勤研究員
15. 3.31	鈴木 俊 法	辞職	理化学研究所主任研究員	電子構造研究系電子状態動力学 研究部門助教
15. 3.31	藤 崎 弘 士	退職	米国 博士研究員	理論研究系分子基礎理論第二 研究部門非常勤研究員
15. 3.31	神 坂 英 幸	退職	東京大学大学院工学研究科博士 研究員	理論研究系分子基礎理論第二 研究部門非常勤研究員
15. 3.31	外 山 南 美 樹	退職	(株)コンボン研究所東京研究 室研究員	分子構造研究系分子動力学研究 部門非常勤研究員
15. 3.31	鈴木 健太郎	退職	東京大学大学院特任研究員	関連領域研究系関連分子科学第 一研究部門非常勤研究員
15. 3.31	陰 地 宏	退職	立命館大学 SR センター契約職 員(解析エンジニア)	極端紫外光科学研究系基礎光科 学研究部門非常勤研究員
15. 3.31	池 田 真 吾	退職	東京大学物性研究所研究員	電子構造研究系基礎電子化学研究 部門研究員(科学研究・間接経費)
15. 3.31	森 道 康	退職	東北大学金属材料研究所 COE 研究員	電子構造研究系基礎電子化学研究 部門研究員(科学研究・間接経費)
15. 3.31	岩 瀬 祐 希	退職	高エネルギー加速器研究機構物 質構造科学研究所研究支援員	電子構造研究系基礎電子化学研究 部門研究員(科学研究・間接経費)
15. 3.31	深 谷 敦 子	退職	東北大学金属材料研究所研究支 援者	電子構造研究系基礎電子化学研究 部門研究員(科学研究・間接経費)
15. 3.31	及 川 健 一	退職	日本原子力研究所東海研究所職 員	電子構造研究系基礎電子化学研究 部門研究員(科学研究・間接経費)
15. 3.31	村 山 美 乃	退職	アトフィナエルフ研究員	分子スケールナノサイエンスセン ターナノ光計測研究部門研究員(科学研究・間接経費)
15. 3.31	菊 池 淳	退職	名古屋大学大学院工学研究科助 手	錯体化学実験施設錯体触媒研究 部門産学官連携研究員
15. 3.31	Hocke Heiko	退職		錯体化学実験施設錯体触媒研究 部門産学官連携研究員
15. 3.30	依 田 隆 夫	退職	長浜バイオ大学講師	理論研究系分子基礎理論第一 研究部門リサーチ・アソシエイト
15. 3.30	Prokop, P. V	退職		電子構造研究系基礎電子化学研 究部門リサーチ・アソシエイト
15. 3.31	木 村 将 浩	退職	総合研究大学院大学博士課程学 生	電子構造研究系基礎電子化学研究 部門産学官連携研究員(テクニカル・アシスタント)
15. 3.31	上 地 一 郎	退職		電子構造研究系基礎電子化学研究 部門産学官連携研究員(テクニカル・アシスタント)
15. 3.31	三 上 泰 治	退職		電子構造研究系基礎電子化学研究 部門産学官連携研究員(テクニカル・アシスタント)
15. 3.31	片 柳 英 樹	辞職	千葉大学電子光情報基盤研究セ ンター非常勤研究員	技術課第一技術班電子構造研究 系技術係員
15. 3.31	安 達 章 子	退職		理論研究系分子基礎理論第一 研究部門事務補佐員



15. 3.31	平 松 弘 嗣	退 職		統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域非常勤研究員	
15. 4. 1	秋 田 素 子	採 用	相關領域研究系相關分子科学第 一研究部門助手	九州大学有機化学基礎研究セン ター博士研究員	
15. 4. 1	菱 川 明 栄	転 入	極端紫外光科学研究系基礎光化 学研究部門助教授	東京大学大学院理学系研究科助 教授	
15. 4. 1	伊 藤 孝 寛	採 用	極端紫外光実験施設助手	理化学研究所播磨研究所量子電 子材料研究チーム連携研究員	
15. 4. 1	藤 井 正 明	転 出	東京工業大学資源化学研究所教 授	電子構造研究系電子状態動力学 研究部門教授	
15. 4. 1	高 橋 和 敏	転 出	佐賀大学シンクロトロン光応用 研究センター講師	極端紫外光実験施設助手	
15. 4. 1	下 條 竜 夫	辞 職	姫路工業大学大学院理学研究科 助教授	極端紫外光実験施設助手	
15. 4. 1	水 野 彰	転 入	分子スケールナノサイエンスセン ター界面分子科学研究部門教授	豊橋技術科学大学工学部エコロ ジー工学系教授	流動研究部門
15. 4. 1	高 橋 正 彦	転 入	分子スケールナノサイエンスセン ター界面分子科学研究部門助教授	東北大学多元物質科学研究所多 元解析研究部門助教授	流動研究部門
15. 4. 1	渡 邉 昇	転 入	分子スケールナノサイエンスセン ター界面分子科学研究部門助手	東北大学多元物質科学研究所多 元解析研究部門助手	流動研究部門
15. 4. 1	解 良 聡	転 入	分子スケールナノサイエンスセン ター界面分子科学研究部門助手	千葉大学大学院自然科学研究科 助手	流動研究部門
15. 4. 1	小宮山 政 晴	転 出	山梨大学大学院医学工学総合研 究部教授	分子スケールナノサイエンスセン ター界面分子科学研究部門教授	流動研究部門
15. 4. 1	奥 平 幸 司	転 出	千葉大学大学院自然科学研究科 助教授	分子スケールナノサイエンスセン ター界面分子科学研究部門助教授	流動研究部門
15. 4. 1	高 嶋 圭 史	転 出	名古屋大学大学院工学研究科助 手	分子スケールナノサイエンスセン ター界面分子科学研究部門助手	流動研究部門
15. 4. 1	久保園 芳 博	転 出	岡山大学理学部助教授	分子スケールナノサイエンスセン ター界面分子科学研究部門助手	流動研究部門
15. 4. 1	西 野 正 理	採 用	理論研究系分子基礎理論第一研 究部門非常勤研究員	日本学術振興会特別研究員(東 京大学大学院工学系研究科勤務)	
15. 4. 1	Zou, Shiyang	採 用	理論研究系分子基礎理論第二研 究部門非常勤研究員	総合研究大学院大学数物科学研 究科博士後期課程院生	
15. 4. 1	近 角 真 平	採 用	理論研究系分子基礎理論第二研 究部門非常勤研究員	日本学術振興会特別研究員	
15. 4. 1	Kobryn, Oleksandr	採 用	理論研究系分子基礎理論第四研 究部門非常勤研究員	筑波大学博士研究員	
15. 4. 1	丸 山 耕 一	採 用	分子構造研究系分子動力学研究 部門非常勤研究員	学習院大学理学部物理学科助手	
15. 4. 1	瀬戸山 寛 之	採 用	極端紫外光科学研究系基礎光化 学研究部門非常勤研究員	千葉大学大学院自然科学研究科 博士後期課程院生	
15. 4. 1	後 藤 昌 宏	採 用	分子制御レーザー開発研究センター放射 光同期レーザー開発研究部非常勤研究員	(株) Agilent Technologies Japan 研究員	
15. 4. 1	石 月 秀 貴	採 用	分子制御レーザー開発研究センター特殊 波長レーザー開発研究部非常勤研究員	福井県産業支援センターコア研 究員雇用研究員	

15. 4. 1	伊藤 歌奈女	採用	分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子分子エレクトロニクス研究部門研究員(科学研究)	総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生
15. 4. 1	河東田 道夫	採用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門産学官連携研究員	早稲田大学大学院理工学研究科修士課程院生
15. 4. 1	李 秀 栄	採用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門産学官連携研究員	日本学術振興会特別研究員(分子科学研究所勤務)
15. 4. 1	丸 山 豊	採用	理論研究系分子基礎理論第四研究部門産学官連携研究員	株式会社豊田中央研究所客員研究員
15. 4. 1	中 尾 聡	採用	分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子分子エレクトロニクス研究部門産学官連携研究員	大阪府立産業技術総合研究所非常勤嘱託員
15. 4. 1	M. JUNAID BUSHIRI	採用	電子構造研究系基礎電子化学研究部門リサーチ・アソシエイト	
15. 4. 1	Liu Guang	採用	電子構造研究系基礎電子化学研究部門(東京工業大学資源化学研究所勤務)	東京工業大学資源化学研究所研究員(科学研究)
15. 4. 1	渡 邊 廣 憲	採用	技術課第一技術班分子構造研究系技術係員	東京大学理学部化学科学生
15. 4. 1	澤 昌 孝	採用	技術課第三技術班電子計算機技術係技術係員	名古屋工業大学大学院工学研究科博士前期課程院生
15. 4. 1	野 川 京 子	採用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門事務補佐員	(シールアドエアージャパン派遣職員)
15. 4. 1	小 林 克 彰	採用	統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域非常勤研究員	科学技術振興事業団技術員
15. 4. 1	岡 目 理 人	採用	統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域非常勤研究員	東京工業大学大学院総合理工学研究科博士後期課程院生
15. 4. 1	城 口 克 之	採用	統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域研究員(科学研究)	東京大学大学院博士課程院生
15. 4. 1	松 田 成 信	採用	計算科学研究センター産学官連携研究員	旭化成(株)中央技術研究所・基盤技術部在職中
15. 3.31	江 潤 卿	退職	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門研究員(科学研究・間接経費)	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門非常勤研究員
15. 4. 1	江 潤 卿	採用	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門研究員(科学研究・間接経費)	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門非常勤研究員
15. 3.31	竹 中 和 浩	退職	錯体化学実験施設錯体触媒研究部門研究員(科学研究・間接経費)	錯体化学実験施設錯体触媒研究部門非常勤研究員
15. 4. 1	竹 中 和 浩	採用	錯体化学実験施設錯体触媒研究部門研究員(科学研究・間接経費)	錯体化学実験施設錯体触媒研究部門非常勤研究員
15. 3.31	結 城 雅 弘	退職	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員(科学研究・間接経費)	錯体化学実験施設錯体物性研究部門非常勤研究員
15. 4. 1	結 城 雅 弘	採用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員(科学研究・間接経費)	錯体化学実験施設錯体物性研究部門非常勤研究員
15. 3.31	白 沢 信 彦	退職	分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子分子エレクトロニクス研究部門研究員(科学研究・間接経費)	分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子分子エレクトロニクス研究部門非常勤研究員
15. 4. 1	白 沢 信 彦	採用	分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子分子エレクトロニクス研究部門研究員(科学研究・間接経費)	分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子分子エレクトロニクス研究部門非常勤研究員
15. 3.30	Quema, Alex	退職	分子制御レーザー開発研究センター放射光同期レーザー開発研究部研究員(科学研究)	分子制御レーザー開発研究センター放射光同期レーザー開発研究部リサーチ・アソシエイト



15. 4. 1	Quema,Alex	採	用	分子制御レーザー開発研究センター放射光同期レーザー開発研究部研究員(科学研究)	分子制御レーザー開発研究センター放射光同期レーザー開発研究部リサーチ・アソシエイト
15. 3.31	相 原 秀 典	退	職	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員(科学技術振興調整)	錯体化学実験施設錯体物性研究部門非常勤研究員(委任経理金)
15. 4. 1	相 原 秀 典	採	用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員(科学技術振興調整)	錯体化学実験施設錯体物性研究部門非常勤研究員(委任経理金)
15. 3.31	安 江 崇 裕	退	職	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員(科学技術振興調整)	錯体化学実験施設錯体物性研究部門非常勤研究員(委任経理金)
15. 4. 1	安 江 崇 裕	採	用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員(科学技術振興調整)	錯体化学実験施設錯体物性研究部門非常勤研究員(委任経理金)
15. 3.31	崔 隆 基	退	職	理論研究系分子基礎理論第一研究部門産学官連携研究員	理論研究系分子基礎理論第一研究部門非常勤研究員
15. 4. 1	崔 隆 基	採	用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門産学官連携研究員	理論研究系分子基礎理論第一研究部門非常勤研究員
15. 3.30	山 崎 健	退	職	理論研究系分子基礎理論第四研究部門産学官連携研究員	理論研究系分子基礎理論第一研究部門リサーチ・アソシエイト
15. 4. 1	山 崎 健	採	用	理論研究系分子基礎理論第四研究部門産学官連携研究員	理論研究系分子基礎理論第一研究部門リサーチ・アソシエイト
15. 3.31	糸 美和子	退	職	理論研究系分子基礎理論第一研究部門事務補佐員(産学官連携経費事業管理費)	理論研究系分子基礎理論第一研究部門事務補佐員(未来開拓)
15. 4. 1	糸 美和子	採	用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門事務補佐員(産学官連携経費事業管理費)	理論研究系分子基礎理論第一研究部門事務補佐員(未来開拓)
15. 3.31	神 本 文 市	退	職	技術課第四技術班技能補佐員	技術課第四技術班技能補佐員(研究支援推進員)
15. 4. 1	神 本 文 市	採	用	技術課第四技術班技能補佐員	技術課第四技術班技能補佐員(研究支援推進員)
15. 3.31	岩 橋 健 輔	退	職	計算科学研究センター研究員(科学研究・間接経費)	計算科学研究センター非常勤研究員
15. 4. 1	岩 橋 健 輔	採	用	計算科学研究センター研究員(科学研究・間接経費)	計算科学研究センター非常勤研究員
15. 3.31	眞 木 淳	退	職	統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域産学官連携研究員	計算科学研究センター非常勤研究員
15. 4. 1	眞 木 淳	採	用	九州大学勤務	計算科学研究センター非常勤研究員
15. 3.31	平 尾 公 彦	客員終了		(東京大学大学院工学研究科教授)	理論研究系分子基礎理論第三研究部門教授
15. 3.31	阿久津 秀 雄	客員終了		(大阪大学たんぱく質研究所教授)	分子構造研究系分子構造学第二研究部門教授
15. 3.31	高 柳 敏 幸	客員終了		(特殊法人日本原子力研究所先端基礎研究センター助教授)	理論研究系分子基礎理論第三研究部門助教授
15. 3.31	加 藤 礼 三	客員終了		(理化学研究所分子物性化学研究室主任研究員)	分子集団研究系分子集団研究部門教授
15. 3.31	堀 洋一郎	客員終了		(高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光源研究系助教授)	極端紫外光実験施設助教授
15. 3.31	茶 谷 直 人	客員終了		(大阪大学産業科学研究所助教授)	錯体化学実験施設錯体触媒研究部門助教授

15. 3.31	時 任 宣 博 客員終了	(京都大学化学研究所教授)	錯体化学実験施設配位結合研究 部門教授
15. 3.31	鬼 塚 清 孝 客員終了	(大阪大学産業科学研究所助教 授)	錯体化学実験施設配位結合研究 部門助教授
15. 4. 1	鳥 居 肇 客 員	理論研究系分子基礎理論第三研 究部門助教授	(静岡大学教育学部助教授)
15. 4. 1	太 田 俊 明 客 員	分子構造研究系分子構造学第二 研究部門教授	(東京大学大学院理学系研究科 教授)
15. 4. 1	榎 敏 明 客 員	分子集団研究系分子集団研究部 門教授	(東京工業大学大学院理工学研 究科教授)
15. 4. 1	内 藤 俊 雄 客 員	分子集団研究系分子集団研究部 門助教授	(北海道大学大学院理学研究科 助教授)
15. 4. 1	伊 藤 健 二 客 員	極端紫外光実験施設助教授	(高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所助教授)
15. 4. 1	松 坂 裕 之 客 員	錯体化学実験施設配位結合研究 部門教授	(大阪府立大学総合科学部教授)
15. 4. 1	上 野 圭 司 客 員	錯体化学実験施設配位結合研究 部門助教授	(群馬大学工学部応用化学科助 教授)
15. 4. 1	茶 谷 直 人 客 員	錯体化学実験施設錯体触媒研究 部門教授	(大阪大学産業科学研究所教授)
15. 3.31	藤 井 正 明 併任終了	(電子構造研究系電子状態動力 学研究部門教授)	分子制御レーザー開発研究セン ター長
15. 3.31	平 田 文 男 併任終了	(理論研究系分子基礎理論第四 研究部門教授)	計算科学研究センター長
15. 4. 1	岡 本 裕 巳 併 任	分子制御レーザー開発研究セン ター長	(分子構造研究系分子構造学第 一研究部門教授)
15. 4. 1	藤 井 正 明 併 任	電子構造研究系電子状態動力学 研究部門教授	(東京工業大学資源化学研究所 教授)
15. 4. 1	松 本 吉 泰 併 任	分子スケールナノサイエンスセ ンターナノ光計測研究部門教授	(総合研究大学院大学先端科学 研究科教授)
15. 4. 1	永 瀬 茂 併 任	筑波大学化学系教授	(理論研究系分子基礎理論第一 研究部門教授)
15. 4. 1	中 村 宏 樹 併 任	国立情報学研究所大学共同利用 機関法人化準備室教授	(理論研究系分子基礎理論第二 研究部門教授)
15. 4. 1	小 川 琢 治 併 任	独立行政法人通信総合研究所関西先 端研究センターナノ機構グループ	(分子スケールナノサイエンスセンター分子金 属素子・分子エレクトロニクス研究部門教授)
15. 4. 1	魚 住 泰 広 併 任	京都大学大学院理学研究科教授	(分子スケールナノサイエンスセン ターナノ触媒・生命分子素子研究部門教授)
15. 4. 1	水 野 彰 併 任	東京大学大学院工学系研究科教 授	(分子スケールナノサイエンスセン ター界面分子科学研究部門教授)
15. 4. 1	小 川 琢 治 併 任	総合研究大学院大学数物科学研 究科教授	(分子スケールナノサイエンスセンター分子金 属素子・分子エレクトロニクス研究部門教授)
15. 4. 1	木 村 真 一 併 任	総合研究大学院大学数物科学研 究科助教授	(極端紫外光実験施設助教授)
15. 4. 1	中 村 敏 和 併 任	総合研究大学院大学数物科学研 究科助教授	(分子集団研究系物性化学研究 部門助教授)



15. 4. 1	小 野 晋 吾	併 任	総合研究大学院大学先導科学研究科助手	(分子制御レーザー開発研究センター放射光同期レーザー開発研究部助手)
15. 4. 1	北 川 禎 三	併 任	統合バイオサイエンスセンター長	(統合バイオサイエンスセンター生命環境研究領域教授)
15. 4. 1	永 瀬 茂	併 任	計算科学研究センター長	(理論研究系分子基礎理論第一研究部門教授)
15. 4. 1	木 下 一 彦	併 任	九州大学大学院理学研究院教授(客員)	(統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域教授)
15. 4. 1	北 川 禎 三	併 任	九州大学先導物質化学研究所分子集積化学部門教授	(統合バイオサイエンスセンター生命環境研究領域教授)
15. 4. 1	青 野 重 利	併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科教授	(統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域教授)
15. 4. 1	小 林 郁	併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科助手	(理論研究系分子基礎理論第一研究部門助手)
15. 4. 1	庄 司 一 郎	併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科助手	(分子制御レーザー開発研究センター助手)
15. 4.15	李 艶 君	退 職	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門研究員(科学研究)	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門非常勤研究員(委任経理金)
15. 4.16	李 艶 君	採 用	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門研究員(科学研究)	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門非常勤研究員(委任経理金)
15. 4.27	相 原 秀 典	辞 職	財団法人相模中央化学研究所	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員(科学技術振興調整)
15. 4.30	魚 住 泰 広	併任解除	(分子スケールナノサイエンスセンターナノ触媒・生命分子素子研究部門教授)	相関領域研究系研究主幹
15. 4.30	茅 幸 二	免 ず る	(分子科学研究所長)	分子スケールナノサイエンスセンター事務取扱
15. 4.30	永 園 尚 代	退 職		技術課事務補佐員
15. 5. 1	中 島 洋	転 出	名古屋大学大学院理学研究科助教授	相関領域研究系相関分子科学第一研究部門助手
15. 5. 1	王 志 宏	採 用	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門研究員(科学研究)	総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生
15. 5. 1	加 藤 政 博	併 任	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光源研究系助教授	(極端紫外光実験施設助教授)
15. 5. 1	青 野 重 利	併 任	相関領域研究系研究主幹	(統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域教授)
15. 5. 1	小 川 琢 治	併 任	分子スケールナノサイエンスセンター長	(分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門教授)
15. 5. 1	中 岡 由 美 子	採 用	計算科学研究センター事務補佐員	

分子研レターズ48巻も無事発刊になりました。ご執筆お寄せくださった方々、ご意見くださった方々ほか、皆様に深く感謝いたします。47巻より、既に開催された研究会プログラムと共同研究課題一覧の掲載を取り止め、これらは分子研レポートにのみ掲載し、分子研レターズはもう少し読み物的な冊子にすることになりました。さらに皆様からのご意見承りますので、よろしくお願いします。

今年度から私が広報委員長を務めることになりました。その矢先でしたが、以前分子研レターズの編集を担当され、昨年からは外部から分子研ホームページの更新やポスターを作成して下さっていた佐藤敦子さんがお辞めになりました。これまでのご尽力にレターズ編集委員からもお礼申し上げます。代わって7月より武藤信行さんが着任しました。今後の広報担当は、レターズを含む印刷物を主に中村理枝さん、ホームページやポスターを主に武藤信行さんをお願いしてまいります。

さて、ご承知の通り、先だって国立大学法人化法が成立しました。丁度今号に中村宏樹先生がご意見を書いてくださいました。これからどうなっていくのか全く見えていない状況で、わかっていることは、国に資金が十分でない時の良くない改革は最悪、これに対して我々が努力すべきは、着せ替えて中身が腐らない様に気を付けること。先が思いやられます。この巻が発刊される頃にはもう少しはわかっているのでしょうか。中村先生のおっしゃるとおり、自分自身もこの機において、自身が基礎科学者としての気概を失いプラグマティズムの風潮に流されることのないよう、基礎科学の意義とその重要性をもう一度深く考え直してみようと思います。

広報が法人化でこれまでより重要になるとはよくいわれます。今のところ具体的なことは何も想定されていませんが。広報がプラグマティズムを放棄すると何も残らないかもしれませんが、これまでホームページはやや事務的過ぎたような印象も受けます。岡本裕巳前委員長からの引継ぎにあったのですが、生理研のようなホットな研究成果の掲載を検討いたします。

岡本祐幸レターズ編集委員長は2年間ご苦労様でした。今年度、次号編集過程から、委員長は横山が務めさせていただきます。こちらに着任して1年以上が経っていますが、まだわからないことだらけです。不手際お許しいただき、よろしくお願いします。

(横山利彦 記)

分子研レターズ編集委員

岡 本 祐 幸 (委員長)
横 山 利 彦 (本号編集担当)
川 口 博 之
平 等 拓 範
多 田 博 一
佃 達 哉

分子研広報委員会

中 村 理 枝
管理局庶務課文書広報係
加 藤 厚
稲 津 善 子

分子研レターズ No. 48

発行年月	平成15年7月
印刷年月	平成15年8月
発行	岡崎国立共同研究機構 分子科学研究所
編集	分子研レターズ編集委員会
印刷	株式会社コムラ

岡崎国立共同研究機構
分子科学研究所

444-8585 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地
<http://www.ims.ac.jp/>