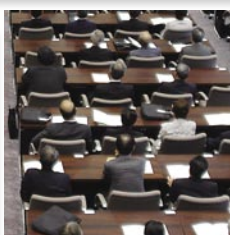
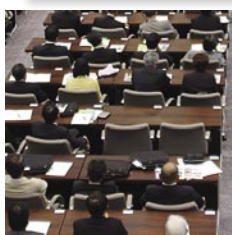


分子研 レターズ

52
Issue of August 2005



巻頭言

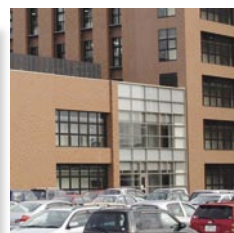
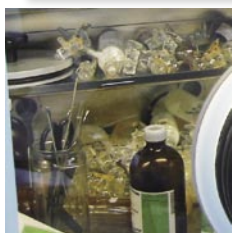
分子科学研究所への期待…加藤伸一

研究紹介

多座配位子を基盤とした金属錯体反応場の構築……………川口博之

レターズ

分子・物質計算科学ナショナルセンターの提案……………平田文男



ISSN 0385-0560

表紙写真説明

左上；30周年記念式典（本文 21 ページからに関連記事）

左下；グローブボックスでの高活性金属錯体合成（本文 4 ページからに関連記事）

右下；NMR 装置が設置されている山手 5 号館（本文 65 ページからに関連記事）

分子科学研究所への期待

株式会社豊田中央研究所 代表取締役

加藤 伸 一

昨年の法人化に伴い、分子科学研究所の運営顧問を仰せつかりました。私が勤務します豊田中央研究所はトヨタ自動車をはじめトヨタグループ9社の出資、委託により運営されている民営の研究所であり、自動車の基礎技術の研究開発を行っています。分子研の皆様は様々な所で日ごろご指導いただいておりますことをまず御礼申し上げます。

科学は社会のあらゆる行動、活動のベースとなっており、今日、人類が安全で文化的生活ができるのも科学の進展のお陰です。分子の研究は更に科学の原点に関するものであり極めて重要であります。分子研では、世界的に著名な科学者を輩出され、そして世界に先駆けた数々の輝かしい研究成果を発表されてきました。皆様のご功績に対し、心より敬意を申し上げます。

基礎科学の研究は、上述のように人類の将来の行動を決める為に極めて重要であります。優秀な科学者の育成、多くの研究資金の準備、長い研究期間などを考えると民間ではとてもできないことであり、国の研究機関でこそ行えるものと確信します。大学、国立研究機関の独立法人化により、実用研究、知的財産、ベンチャービジネス、産学官連携が進められております。工学系の大学、研究機関では活発に行われ、このことは産業界としては大変有難いことと思っています。しかしながら、分子研などのように自然科学、サイエンスを扱う研究所には実用とか役立つという事より、新しい真理の発見、新しい知見、新しい原理の究明、方法論などの本質的な研究が重点的に行われることを私は期待します。

とはいえ、今後はサイエンスとエンジニアリングの接点での産学連携が重要となってきます。私たちの企業研究所でも分子研との連携の接点がいくつかあります。自動車技術も燃料電池、二次電池など、基礎研究がより重要となっており、サイエンスのところまで踏み込む必要性が高まってきました。弊社には分子研出身の研究者が何人か活躍しておりますし、機能材料、計測、解析、計算物理などでご指導いただいております。また、生理学研究所にも大変お世話になっております。この場をお借りして、数々のご配慮に対しまして、改めて厚く御礼申し上げます。

世の中には、分かっていることは数少なく、分かっていることが無限にあるとも言われております。人類にとって希望が持てる大自然の真理の発見を期待しております。終わりに、分子研の一層のご発展と、皆様のご活躍、またわが国の基礎科学の益々の進展を祈念いたします。

分子研レターズ 52 目次

巻頭言

分子科学研究所への期待

加藤伸一 1



研究紹介

多座配位子を基盤とした金属錯体反応場の構築

川口博之 4

New Lab (研究室紹介)

着任にあたり

小澤岳昌 9

「分子の協同作用」について考える

江 東林 12

New Lab (先導分子科学研究部門 (客員) 紹介)

超高磁場 NMR が切り拓く次世代の
生命分子構造学

加藤晃一 15



レターズ

分子・物質計算科学ナショナルセンターの提案

平田文男 17

ニュース

分子科学研究所創設 30 周年記念事業報告

西 信之 21

第 15 回分子科学研究所オープンハウス

川口博之 23

分子研を去るにあたり

分子研と大学?

井上克也 25

分子研は一日にして成らず

岡本祐幸 26

岡崎の丘の上

山田 亮 30

お世話になりました

木下一彦 31

勝利の方程式

足立健吾 32

思えば遠くへ来たもんだ

南部伸孝 33

流動研究部門を去るにあたり

分子研流動鳥鷺有漏ばなし

高橋正彦 35

岡崎での二年間

渡邊 昇 36

外国人研究職員の印象記

分子研での研究生活

孫為銀 (Wei-Yin Sun) 37

My rise in Paradise

Pascal Lablanquie 38



	受賞者紹介	
	廣田榮治名誉教授に E. Bright Wilson 賞	40
	小澤岳昌助教授に文部科学大臣表彰若手科学者賞	42
	堀米利夫氏に日本化学会化学技術有功賞	42
	山田陽一助手に日本薬学会奨励賞	44
	齊川次郎、佐藤庸一、平等拓範、池末明生氏にレーザー学会進歩賞	45
	樋山みやび助手に原子衝突研究協会若手奨励賞	45
	手老龍吾技術職員に第24回表面科学講演大会講演奨励賞（若手研究者部門）	46
	石村和也技術職員に WATOC2005 ポスター賞	47
	外国人研究職員の紹介	
	Prof. TANATAR, Makariy	48
	Prof. LONG, La-Sheng	49
	Prof. AKA, Gerard Philippe	50
	Prof. LEE, Jin Yong	50
	Prof. WU, Yung-Dong	51
	荒木幸一 助教授	52
	新人自己紹介	53
	総合研究大学院大学	
	学位取得者及び学位論文名／新入生紹介	63
	新装置紹介	
	NMR	65
	課題研究報告	
	内殻励起における交換相互作用とスピン軌道相互作用	67
	自由電子レーザーの短波長化とその応用	71
	国際研究協力事業報告	
	第11回日韓合同シンポジウム	75
	分子研研究会開催一覧	77
	分子研コロキウム・分子科学フォーラム 開催一覧	78
	共同研究実施状況	79
	海外渡航一覧	81
	人事異動一覧	83
	編集後記	90

多座配位子を基盤とした金属錯体反応場の構築

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 川 口 博 之

1. はじめに

錯体は、金属の周囲を配位子が取り囲んだ化合物である。我々のグループでは配位子設計に基づき、錯体を合成し、その構造や物性に関する研究を行っている。特に、新しく設計・合成した金属錯体を構造が明確な反応場として用い、通常では活性化が困難な分子——窒素分子、一酸化炭素、二酸化炭素、メタン——の反応の開拓に焦点を当て、錯体化学の観点から研究を進めている。

2. 配位子

錯体の研究において配位子の選択は極めて重要である。我々はフェノキシド基を基本骨格に組み込んだ多座配位子に着目し、研究を進めている。その配位子の一例を図1に示す。3つのフェノキシド基をオルト位でメチレン炭素を通して連結した、フェノキシド3量体 $[R-L]^{3-}$ である。この配位子の特徴を以下に挙げる。

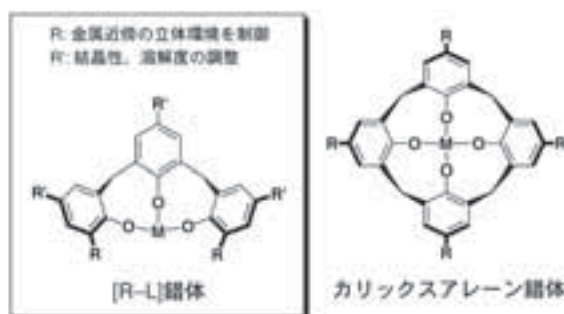


図 1

- (1) 金属には3座配位子として配位する。
- (2) 金属に配位すると、3つのベンゼン環が金属近傍を取り囲む様に位置することで特異な空間を金属近傍に形成し、カリックスアレーン錯体に類似の構造をとる。

(3) カリックスアレーン錯体と比較すると、その構造の1/4を切り取ることで、配位不飽和な金属中心を生成しやすい。

(4) カリックスアレーンの環状構造と較べると、鎖状構造の $[R-L]$ 配位子は柔軟な配位子骨格をしており、配位子の骨格変化とキレート効果による、反応過程における中間体の安定化が期待できる。

(5) 両端のオルト位の置換基により、金属中心の立体環境を制御可能である。

(6) パラ位の置換基を通して、錯体の溶解度、結晶性を調整できる。

特に上記の(2)と(3)の特徴を組み合わせることにより、カリックスアレーン類似の空孔に基質となる分子を取り込み、反応活性な配位不飽和金属中心での分子変換が期待できる。

以上の特徴をもつ $[R-L]$ 配位子を用いて合成した金属錯体の研究に関して以下に述べる。これまでの研究を通して、錯体の構造および反応性が $[R-L]$ 配位子のオルト位の置換基 R の種類に大きく依存することが明らかになっている。本稿では、*tert*-ブチル基を導入した $[tBu-L]$ 配位子を用いた結果を中心に話を進める。

3. 第5族遷移金属錯体¹⁾⁻⁴⁾

$[tBu-L]^{3-}$ を補助配位子としてもつヒドリド錯体の合成を目的に、クロリド錯体 **1-NbCl** および **1-TaCl** と $LiBH_4Et_3$ の反応を1 atmの窒素ガスの雰囲気下で行った(図2)。ニオブ錯体の場合、反応過程で窒素分子の活性化、 $N \equiv N$ 3重結合の切断が進行し、ニトリド配位子が2つの金属を架橋した2核錯体

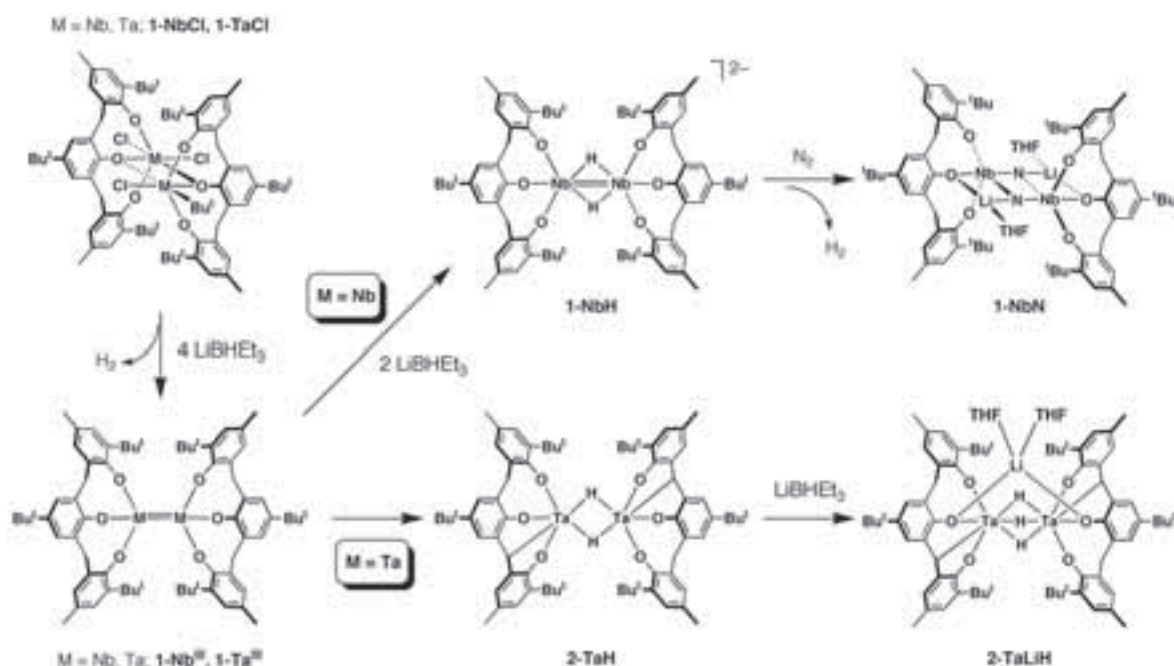


図 2

1-NbN を与える。ニトリド配位子が窒素分子に由来することは、 $^{15}\text{N}_2$ を用いた同様の反応から得られる **1-NbN 15** の ^{15}N NMR により同定した。

錯体 **1-Nb** と LiBHEt_3 の反応では、はじめに 4 倍当量の LiBHEt_3 が還元剤として働き、水素分子の発生を伴いながら金属中心は 5 価から 3 価へと還元され、中間体 **1-Nb III** を生成すると考えられる。さらに 2 倍当量の LiBHEt_3 が反応し、ヒドリド架橋の Nb(III) 2 核錯体 **1-NbH** を与える。水素分子の生成を伴いながら、中間体 **1-NbH** と窒素分子が反応することで $\text{N}\equiv\text{N}$ 3 重結合の切断が起こり (6 電子還元)、ニトリド錯体 **1-NbN** が生成する。この反応においてヒドリド試薬を使用することが極めて重要であり、他の還元剤 (カリウムグラファイト等) を用

いた反応では窒素分子の活性化が観測されなかった。今後、**1-NbH** を含めた中間体を単離し、反応機構を明らかにする予定である。

一方、タンタル錯体 **1-Ta** を用いた反応では、窒素分子の活性化は起こらず、3 つのヒドリド配位子が 2 つのタンタル金属中心を架橋した 2 核錯体 **2-TaLiH** が得られた。錯体 **2-TaLiH** では $[\text{t-Bu-L}]$ 配位子のメチレン鎖が C-H 活性化を起こしており、新しい 4 座配位子 $[\text{bit-t-Bu-L}]^4$ として 3 つの酸素原子およびメチン炭素を通して金属に結合している。全体構造は、 $[\{\text{bit-t-Bu-L}\}\text{Ta}_2(\mu\text{-H})_3]^+$ 骨格にリチウムカチオンが一つ分子内に取り込まれている、と見ることが出来る。

この反応ではニオブ錯体と同様に還元反応が進行

し、Ta(III) の中間体 **1-Ta^{III}** が生成すると考えられる。一般的に 5d 遷移金属であるタンタルは 4d 遷移金属であるニオブよりも還元反応が起こり難く、タンタル錯体の還元体は類似のニオブ錯体よりも不安定である。その結果、**1-Ta^{III}** は生成すると直ちに分子内 C-H 活性化を引き起こし、この過程で金属中心は Ta(III) から安定な Ta(V) へと酸化される (**2-TaH**, 図 2)。続いて 1 倍当量の LiBHET₃ からヒドリド配位子を取り込むことにより生成物 **2-TaLiH** を与える。

錯体 **2-TaLiH** は固体状態で比較的安定であるが、溶液中では不安定である。温度可変 NMR スペクトル

により、錯体 **2-TaH** のヒドリド配位子が [*bit*-^tBu-L] 配位子のメチン炭素へと移動し、[^tBu-L] 配位子を再生することが観測された (図 3)。この挙動は、**2-TaLiH** が溶液中で低原子価錯体として働くことを示している。例えば **2-TaH** の溶液に一酸化炭素を加えると、直ちに一酸化炭素の還元反応が進行するのが観測された。一方、系中に反応する基質が無い場合、配位子のフェノキシド基の炭素-酸素結合切断を含む反応を経て、錯体 **4-TaO** を生成する。これら一連の反応は低原子価タンタル錯体の強い還元力を反映したものである。

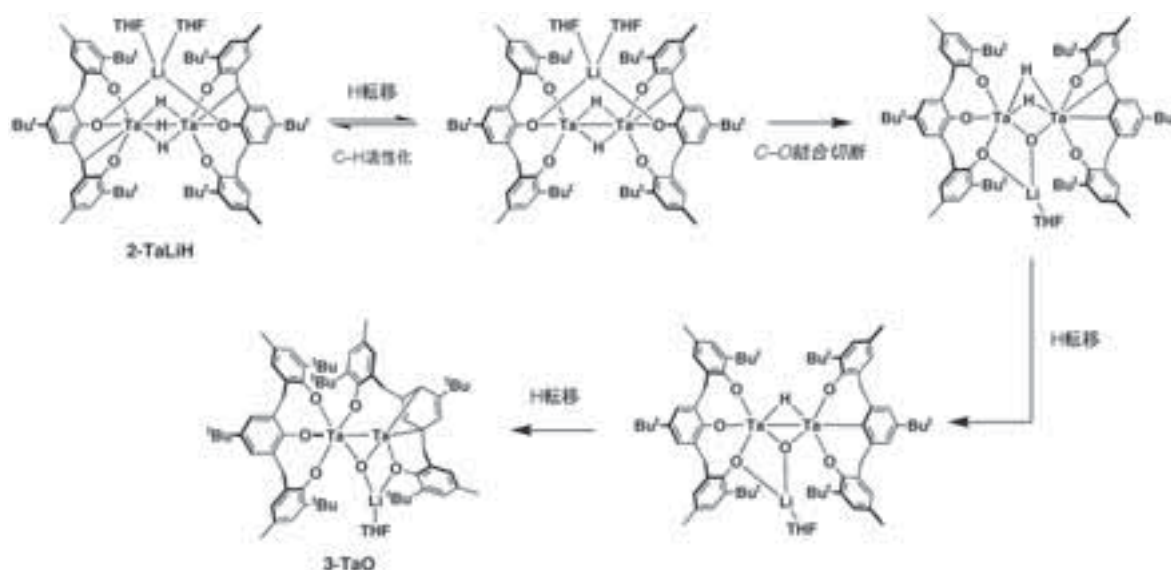


図 3

4. 第 4 族遷移金属錯体⁴⁾⁻⁵⁾

チタン錯体 **1-TiCl** では、Ti(IV) のイオン半径が小さいために、[^tBu-L] 配位子は 3 座配位子として 1 つの金属に結合することが出来ず、2 つの金属間に

広がった配位様式で結合し、2 核構造を与える (図 4)。この錯体に LiBHET₃ を作用させると、3 つのヒドリド配位子が金属間に架橋した Ti(III) 2 核錯体 **1-TiH** を与える。金属中心が Ti(IV) から Ti(III) へと



還元されることによりイオン半径が大きくなるため、 $[\text{Bu-L}]$ 配位子が一つの金属中心に3座配位子として結合することが可能になっている。反応に使用した LiBHEt_3 の内、2倍当量は還元剤として、3倍当量はヒドリド化試剤として働いている。結晶構造は、face-shared bioctahedron 構造の $[\{\text{Bu-L}\}\text{Ti}_2(\mu\text{-H})_3]^{3-}$ 骨格に3個のリチウムカチオンが取り込まれていると見ることが出来る。

溶液中でも図4に示す構造は保持されており、 ^7Li NMR スペクトルでは1:2の強度比で2本のシグナルが観測された。また、錯体 **1-TiCl** は $d^1\text{Ti(III)}$

の2核錯体であるが反磁性を示す。温度可変 NMR を測定したが、ヒドリド配位子のケミカルシフト値に温度依存性が観測されなかった。この結果から、**1-TiCl** の2つの Ti(III) 間には金属-金属結合が存在すると考えられる。これは Ti(III)-Ti(III) 結合をもつ極めて珍しい化合物である。

一方、ジルコニウム錯体 **1-ZrCl** を用いて同様に反応を行った。チタンよりもジルコニウムの方が還元反応が起こり難いため、4価の2核錯体 **1-ZrH** が得られた。**1-TiH** と類似の $[\{\text{Bu-L}\}\text{Zr}_2(\mu\text{-H})_3]^-$ 骨格をもつが、3個のリチウムカチオンの代わりに対カチオンとして $[\text{LiClLi}]^+$ を分子内に取り込んでいる。

ヒドリド配位子の動的挙動は中心金属の電子配置を反映している。例えば、 $d^1\text{-}d^1$ 錯体 **1-TiH** でヒドリド配位子間の交換は観測されないが、 $d^0\text{-}d^0$ 錯体 **1-ZrH** では3つのヒドリド配位子は2つの金属間で自由回転しており、 ^1H NMR スペクトルでは等価に観測された。今後、 $d^1\text{-}d^1$ 錯体 **1-TiH** および $d^0\text{-}d^0$ 錯体 **1-ZrH** の小分子に対する反応性を比較検討していく予定である。

5. 今後

現在、上述の結果を踏まえて、新しい配位子の設計、金属錯体の合成、それを用いた小分子の活性化反応に関する研究を展開している。⁶⁾⁻¹²⁾ 例えば、鎖状型構造をもつ $[\text{R-L}]$ 配位子に対して、3脚型構造をもつフェノキシド3量体配位子、中心のフェノキシド基をアニソールに変換することで金属-配位子間の結合に柔軟性を増したハイブリッド型配位子等を用いて、新しい型の小分子変換反応をいくつか見

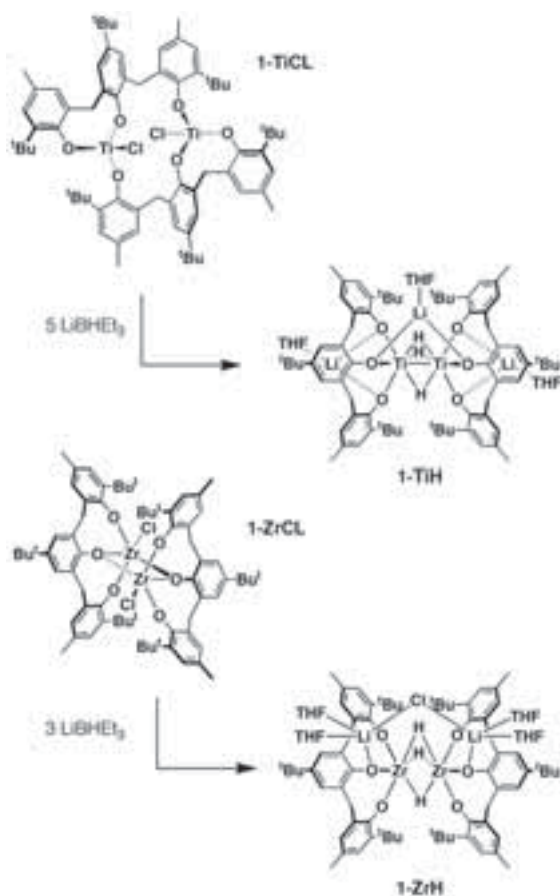


図 4

出している。今後は、その反応機構を明らかにしたい。

以上は、錯体化学の最も代表的な配位子であるフェノキシド配位子を多座配位子として用いたらどうなるかという、単純な発想から始めた研究である。[R-L] 配位子の前駆体であるフェノール 3 量体は Koebner trimer として古くから知られている化合物であったが、我々が研究を始めた段階では遷移金属錯体への配位子として利用した報告はなく、いわゆる ‘温故知新’ 型配位子である。多座配位子とすることで単座配位子の時には見られなかった構造や反応性を示す錯体を得ることが出来た。現在は前周期遷移金属を対象に研究を行っているが、後周期遷移金属および f 元素金属へと対象を拡げることで新しい化学が展開できると期待している。

6. 謝辞

最後に、本研究で得られた結果は下記の方々の高い実験技術と物質に対する深い洞察力により得られた物であり、ここに謝意を表したい。

松尾司博士 (分子研助手)

小室貴士博士 (現東北大学助手)

相原秀典博士 (現相模中研)

安江崇弘博士 (現 SUMSUNG)

結城雅弘博士 (現理研博士研究員)

張道博士 (現 Fudan Univ.)

参考文献

- 1) H. Kawaguchi and T. Matsuo, *Angew. Chem., Int. Ed.* **41**, 2792–2794 (2002).
- 2) T. Matsuo and H. Kawaguchi, *Inorg. Chem.* **41**, 6090–6098 (2002).
- 3) H. Kawaguchi and T. Matsuo, *J. Am. Chem. Soc.* **125**, 14254–14255 (2003).
- 4) H. Kawaguchi and T. Matsuo, *J. Organomet. Chem.* in press. (special issue “Young Scientists in Organometallic Chemistry 2005”)
- 5) T. Matsuo, H. Kawaguchi and M. Sakai, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 2536–2540 (2002).
- 6) T. Matsuo and H. Kawaguchi, *Organometallics* **22**, 5379–5381 (2003).
- 7) H. Kawaguchi and T. Matsuo, *Chem. Commun.* 958–959 (2002).
- 8) H. Aihara, T. Matsuo and H. Kawaguchi, *Chem. Commun.* 2204–2205 (2003).
- 9) T. Komuro, T. Matsuo, H. Kawaguchi and K. Tatsumi, *J. Am. Chem. Soc.* **125**, 2070–2071 (2003).
- 10) M. Yuki, T. Matsuo and H. Kawaguchi, *Angew. Chem., Int. Ed.* **43**, 1404–1407 (2004).
- 11) T. Komuro, T. Matsuo, H. Kawaguchi and K. Tatsumi, *Inorg. Chem.* **44**, 175–177 (2005).
- 12) T. Matsuo and H. Kawaguchi, *Chem. Lett.* **33**, 640–645 (2004). (Highlight Review)



着任にあたり

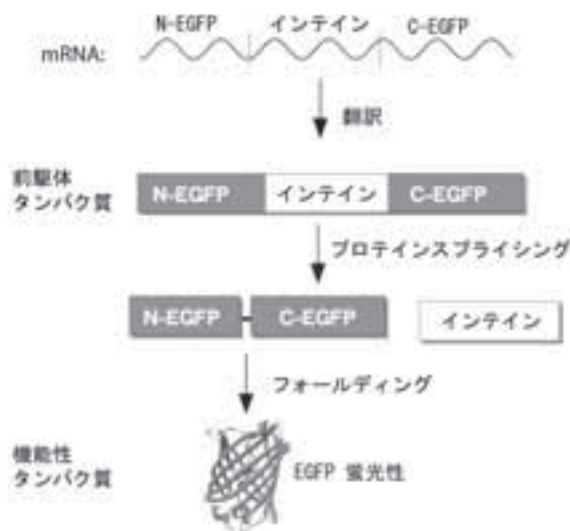
分子構造研究系分子動力学研究部門 小澤 岳 昌

平成17年4月1日付けで分子動力学研究部門の助教授に着任致しました。それまでは東京大学大学院理学系研究科で講師をしており、学部学生時代からあわせて15年もの間、同大学で過ごしてきました。東京在住時は、岡崎研究所からの際立った研究成果をよく拝見していましたので、巨大な組織をイメージしていました。しかし岡崎に来てみると、分子研、基生研、生理研が予想外にも小さな所帯であることに先ず驚きました。また、東京大学では所狭しと装置や人で溢れ、また最近では都内の雑踏が大学内にまで侵入し、大学の研究環境は快適とは言い難いのが現状です。一方、今の分子研での研究生活は、静穏な敷地に有り余る空間があり、実験室は高い天井のために圧迫感もなく、居室の窓からは一日鳥の囀りが聞こえるなど、毎日の生活にとっても新鮮な空気を感じています。研究室はまさにゼロからのスタートであり、スタッフも学生もいなければ、装置も東大からは殆ど持って来ることができず、現在は研究環境を整えつつ黙々と1人で実験を進めています。そもそもこの2年程は実験から遠ざかり、雑用と教育に追われていたので、久しぶりの実験がとても楽しく感じる毎日です。

さて私の研究テーマは、細胞内シグナルに関与する生体分子の同定と時空間解析法に関する研究です。おそらく多くの方が馴染みのない分野であると思いますので、なるべく易しく説明したいと思います。生体内で起こる様々な現象を“化学の言葉”で語るのには、生命科学研究の究極の目的といえると思います。この目的のために、一昔前は細胞をすりつぶして、生体分子を一つ一つ、生化学的に

解析する方法が一般的でした。しかし21世紀に入り、高等動物のゲノムが次々と解読され、研究対象がゲノムからタンパク質に移行してきました。とりわけタンパク質の構造と機能を網羅的に明らかにすること、またタンパク質を中心とする生体分子の細胞内や動物個体内での動態を解明することは、生命科学において最も重要な研究課題となっています。前者は、細胞内に存在するタンパク質を先ずは全て同定し、そしてその構造や機能の面から分類しようとする試み、いわゆる“プロテオーム”と呼ばれる研究です。今から100年程前、物理的手法や化学的手法により様々な原子が発見され、そして美しい周期律表にまとめあげる歴史があったことは多言を要しません。この歴史的背景に照らし合わせると、プロテオーム研究におけるタンパク質の発見とその分類は、周期性こそありませんが、生命の一大地図を完成させる作業であり、21世紀の生命科学を語る上で必要不可欠な地図になると、私自身はプロテオーム研究を位置づけています。一方後者は、物質と電磁波との相互作用を巧みに利用して、生物が生きた状態で、特定の分子を時空間解析する、いわゆる“生体分子イメージング”と呼ばれるものです。これまでの生化学は状態の記述が殆どであり、生体内で起こる現象の時間変化を追跡することは容易ではありませんでした。しかし、分子イメージングの台頭は、生命科学研究に革命をもたらしつつあると感じています。このようなプロテオームや生体分子イメージングの研究は、現在世界各国で盛んに研究が進められています。しかし未だ確立した方法は存在しません。我々は細胞内のシグナルに関

図1 プロテインスプライシング反応を利用した GFP 再構成系の原理



与する重要な現象を、光情報に変換する分子を開発し、プロテオームや生体分子イメージングの要素技術となることを実証したいと考えています。ここでは、我々が提唱したタンパク質再構成系（Protein Reconstitution System）と、その応用について紹介したいと思います。

現在、生命科学を研究する上で、光るタンパク質は必要不可欠な存在になりました。最も有名な蛍光タンパク質の一つ“緑色蛍光タンパク質（green fluorescent protein: GFP）”は、1962年に下村博士によりオワンクラゲから初めて抽出されました。GFPの重要な特徴は、その遺伝子を細胞に導入すると、遺伝子からタンパク質が合成され、数アミノ酸が自発的に蛍光団を形成し、そして細胞内で蛍光を放つことです。蛍光タンパク質を細胞に直接入れればよいと考えるかもしれませんが、細胞は厚い細胞膜により外界と隔てられているため、タンパク質を細胞に直接入れることは容易ではありません。一方、遺伝子は簡単に細胞内に導入することができます。また、遺伝子は自由に操作することができるので、ヘテロな融合タンパク質や1アミノ酸だけ置換したタンパク質などを、自由自在に細胞内で作らせることができる利点を有しています。また我々の身近なところには、ホタルという発光生物がいます。ホタルの発光は、その発光器官に存在する酵素——*luciferase*——とよばれるタンパク質が、ATPと酸素の化学エネルギーを光エネルギーに変換する中心的な役割を果たしています。このような発光タンパク質は、細胞内現象を光情報に変換するための、優れた機能性分子と捉えることができます。

さて、タンパク質は一般に、アミノ酸が一次的に連なったペプチドが正しく折りたたまれ（*folding*）、固有の立体構造をとったとき、初めてタンパク質としての機能を発揮します。GFPやルシフェラーゼも然りです。我々はGFPや*luciferase*の*folding*をシグナル変換に取り入れました。例えば238アミノ酸からなるGFPを157/158番目のアミノ酸のペプチド結合で二分して、GFPの蛍光特性を完全に失わせます（*unfold*の状態）。そして、細胞内である現象が起きたときに、二分したタンパク質が、再連結して*refolding*し、そして光を回復する仕組みを考案しました（図1）。この再連結には“プロテインスプライシング”という化学反応を利用します。スプライシングとは、一本のひも状のものが組み継がれることを言います。例えば映像分野では、撮影した長いフィルムから不要な部分を切り取り、その両端をつないで一本の完成したフィルムを作製します。タンパク質でも同様に、一本のポリペプチド鎖から、介在するペプチド（インティン）が抜け落ちて、その両側のペプチド（エクステイン）がつながる反応が存在します。我々は二分したGFPがこのスプライシング反応により再連結すると、GFPの蛍光が回復することを見出しました。この現象をGFP再構成系と呼んでいます。このGFPの蛍光の回復は、試験管内での*in vitro*実験、大腸菌、動物細胞、そしてマウス個体内など、広く一般に実現可



能であることを確認しています。この GFP 再構成に基づく蛍光の on/off スイッチを利用することにより、細胞内の様々な現象を観測することが可能となります。例えば、タンパク質 X とタンパク質 Y との相互作用を生きた細胞内で検出したい時、二分した GFP を X と Y に連結します。細胞内で X と Y が相互作用すると、プロテインスプライシング反応が進行します。その結果 GFP 再構成系の原理に基づき、蛍光性の GFP が形成されます。GFP を luciferase タンパク質に変えれば、タンパク質間相互作用の程度を発光強度として検出することも可能です。この反応はタンパク質二分子間で GFP 形成が起こるため、細胞内のいかなる場所でも相互作用検出ができる、これまでの相互作用検出法にはない優れた特徴を有しています。相互作用するタンパク質の組み合わせを網羅的に調べれば、タンパク質間相互作用地図を作製することも可能となるでしょう。

また GFP 再構成系を利用して、細胞内でのタンパク質の局在を高速に同定する方法を開発しました。細胞の中には、“オルガネラ”と呼ばれる膜で囲まれた細胞内小器官が存在します。オルガネラは特定のタンパク質を膜内に取り込んで、オルガネラ特有の機能を発揮します。たとえば、ミトコンドリアは我々の体のエネルギー産生工場であり、また細胞の生死を決定する重要な反応場でもあります。このオルガネラ特有の機能を解明するためには、先ずオルガネラに局在するタンパク質をすべて同定しなくてはなりません。細胞を地球に例えれば、ミトコンドリア国に住む人々を住民登録するようなイメージです。我々は、ミトコンドリアに局在するタンパク

質を網羅的に同定するために、GFP 再構成系を応用しました。タンパク質がミトコンドリアに局在したときに初めて、二分した GFP が再連結し、そしてその蛍光が回復する分子を開発しました。この分子を用いると、未知のタンパク質でもミトコンドリアに局在するかどうかを、蛍光シグナルとして簡単に取り出すことができます。先程の例で言うならば、地球上の人々全てに同じ名札をつけますが、ミトコンドリア国に入国した人は名札が蛍光性となります。そこで、全国民の中から名札の光っている人だけを集めて、顔写真をとり登録すればミトコンドリア国の住民登録が完了します。このようにして網羅的にミトコンドリアに局在するタンパク質を同定する方法を開発しました。以上はプロテオームに関するこれまでの研究ですが、我々は分子イメージングのための様々な機能性分子の開発にも力を注いでいます。

これまでの科学史が示すように、新しい分析法が確立するとそれに関連する学問領域は大きく進展します。この事実を鑑みると我々は今何が必要かを客観的に分析し、そして独創的な基盤となる分析方法の確立を目指さなくてはならないと常々思っております。現在、バイオと名のつく分野では、基礎分析法の開発から技術革新まで日進月歩の勢いで成長しています。我々も新しい原理に基づく“elegant”という言葉にふさわしい分析法を創り出し、分子科学研究所の研究・教育水準の向上に貢献できるように精進したいと思います。最後になりますが、分子研着任にあたり、中村所長をはじめ所内の多くの方々に激励を頂きました。この場をお借りして厚く御礼申し上げます。今後ともどうぞよろしくお願い致します。

「分子の協同作用」について考える

相関領域研究系相関分子科学第一研究部門 江 東 林

2005年5月1日付けで相関領域研究系相関分子科学第一研究部門に着任しました。分子研と最初の出会いは5年前の岡崎コンファレンスでした。僅か一泊二日という短い期間でしたが、最も印象に残っているのは分子研の恵まれた環境です。どこへ行ってもマンションやビルが立ち並ぶ東京の町風景とは対照的に、緑があふれて物静かという第一印象は非常にインパクトが大きく、すっかり目に焼き付いてしまいました。このようなところで研究できるというなと思ったことがありましたが、まさに数年後に現実になるとは夢にも思いませんでした。まだ着任して二ヶ月ではありますが、分子研のすばらしいところが次々と分かり、そのたびに感動してわくわくしてしまいます。

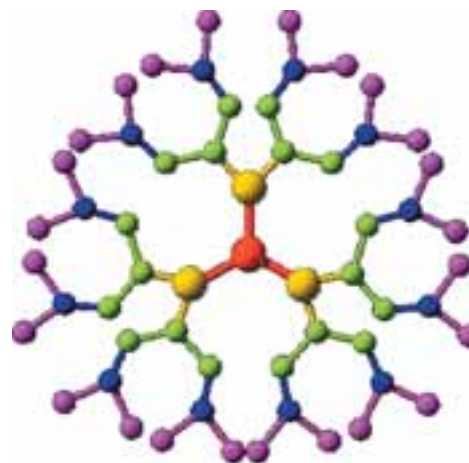
現在、研究室の立ち上げで日々が追われています。前の職場で、フラスコすら一つもなかったところから完璧に研究室を作り上げてきましたから、相当自信がありました。しかしながら、なんと言っても、学生さんや助手がまだいない状況の中、一人で戦っていくのは決して楽ではないことに気づきました。あの手この手を使って近いうちに始動の目処が立ちました。待ちに待った新しい研究が間もなくできるのをたいへん楽しみにしています。

さて、研究の話題にスイッチさせていただきます。これまでの研究を振り返って一言でまとめますと、「分子の協同作用」につきまします。三国志には、「三个臭皮匠、賽過諸葛亮」ということわざがあります。直訳すると、「凡人でも三人が協力すれば、諸葛孔明に勝てる」となりますが、個体間の協力・協同作用がいかに大事かを物語っています。人間は生物の進

化によって作り上げた巨大な生命機能体で、それを支配しているのは分子の働きといっても過言ではない。分子の世界に視野を移して絞って見ていきますが、果たしてどのような協同作用があり得るのだろうか。全く同じ構造を有しながらも、個々の分子はそれぞれの「個性」を持っています。どうすれば目で直視することも声をかけることもできない分子に「思考力」を持たせ、自らお互いに「communication」し、「意思疎通」を通じて、お互いに協力し合うことが可能になるだろうか。「結晶工学」や「分子認識」など様々な方法論が提示されていますが、ここでは、デンドリマーを用いて「分子の配列制御」を通じて、分子の働きを高めるという私たちのアプローチを紹介します。

この戦略の着眼点はデンドリマーを用いて分子の相互作用を制御することによって従来の小分子や高分子には見られない新しい機能を発現させることにあります。仮に、ある特定の相互作用を断ち切ったり、強調したりすることができれば、その分子の潜在的に有する特異な機能を引き出すことが可能であろう。光捕集アンテナの設計を例にとり考えてみましょう。古くからは色素ユニットを直鎖状に繋げてポリマーを作れば光捕集ができるのではないかと考えられました。しかし、このようなことを行っても、アクセプターユニットから離れた色素に当たった光のエネルギーはアクセプターまで動くことができません。これをデンドリマーで行うとどうなるのか。すなわち、鎖状ポリマーの場合、実際役に立つアンテナ部分はアクセプターに極近い2、3個ぐらいの色素で、ほとんどは無駄になる部分ばかりです。

一方、デンドリマーはどうでしょう。デンドリマーは三次元立体構造を有する樹木状多分岐高分子で、ギリシャ語の樹木を語源としています。最近、新聞記事などでデンドリマーの代わりに「分子の木」という言葉がよく見かけるようになりました。デンドリマーは従来の分子とは著しく異なり、コア、ビルディングブロック、外表面ユニットの三つの要素から構成され、構成ユニットがお互いに三次元的に連結されているのが構造的な特徴だと言えます。数多くの構成ユニットを有しているにもかかわらず、分子一つで空間形態の明確な構造を提供することができます。このような規則正しく配列したデンドリマー組織は効率的に光捕集アンテナ機能を発揮することが可能となります。なぜならば、三次元的に連結した色素ユニットが光捕集の際に協同的に働くからです。デンドリマー組織の中にある一つの色素ユニットを光で励起しますと、その励起エネルギーがデンドリマー組織を高速でホッピングすることができ、結果として効率的にエネルギーを分子コアに送り込むことができます。デンドリマーはきわめて大きな光吸収断面積を有することから、直接コアを励起したときと比べて、デンドリマーアンテナを励起した方が得られる光エネルギーの量のはるかに大きく、そこから様々な応用展開が生まれるわけです。もともと機能しないものであっても、デンドリマー組織に組み込むことによって協同作用がトリガーされ、機能するようになるあるいはその効果を著しく増幅することがあります。このような手法を用いてこれまでに様々な機能性デンドリマーの創出に努めてきました。協同作用の特徴的な例としてデンドリ



樹木状分子：デンドリマー

マー表面近傍における不斉認識や触媒反応などがあげられます。

以上の一分子内の協同作用とは正反対に、分子間の協同作用を利用することができれば、単一分子には見られない新しい機能を発現させることが可能になるだろうか。デンドリマーは分子間の協同作用を生み出すための好都合の分子構造を有しています。これは、合成的に世代やサイズで分子の空間形態をコントロールすることができるからです。例えば、ディスク状のデンドリマーを利用することで、サイズによって縦方向に密度の異なるカラム構造を作り分けることができ、分子間の協同作用を制御することができます。事実、集積型金属錯体をデンドリマーの中に取り込み、カラム構造において錯体間の協同作用が生まれ、結果としてすべての金属イオンの電子スピン状態が外部刺激によって一瞬にして転移するという興味深い現象を見いだしました。これは分子の空間的な配列制御によって分子の協同作用を生

み出す特徴的な例であるといえます。分子内であれ分子間であれ、いずれにせよ、デンドリマーはその美しい形の上に、その協同作用こそが魅力の神髄ではないかと思います。皆さんはどのようにとらえているのでしょうか。

分子の協同作用に関しては未解明な課題が多く、いかにして分子の相互作用を自由自在にコントロールできるのが基本的なミッションの一つです。これからは、化学の力だけでなく、むしろ異分野例えば物性物理学などとのシームレスな融合により、新しい物質群の創出とりわけ新しい物質科学の幕開けに繋がるのではないかと予感しています。分子研ではこの方向での私たちの独自の戦略を展開していきたい。

以上、「分子の協同作用」というテーマを中心に個人的な考えを述べてきました。最後になりましたが、分子研着任に当たり、中村所長、薬師主幹教授をはじめ、多くの先生方々から多大なご協力を頂きました。この場を借りて深くお礼を申し上げます。今後ともどうぞよろしくお願い申し上げます。



超高磁場NMRが切り拓く次世代の生命分子構造学

分子スケールナノサイエンスセンター先導分子科学研究部門 加藤 晃 一

2004年10月に分子スケールナノサイエンスセンター先導分子科学研究部門に着任いたしました。今年の4月には笹川弘明助手が着任し、さらに私が兼務している名古屋市立大学大学院薬学研究科の8名の大学院生が特別共同利用研究員として活動しています。私たちの研究室は山手5号館の920 MHz 核磁気共鳴 (NMR) 分光器に隣接しており、外界とは隔絶した環境にあります。 “強磁場注意” と掲げられた扉の向こうでは、超高磁場NMR装置を縦横に駆使した先端的な生体高分子の構造研究がアクティブに展開されています。920 MHz NMR装置につきましては、本誌の65-66ページに紹介記事が掲載されているのでそちらをご覧くださいと思いますが、本稿ではこの装置を利用して私たちがどのような研究を行っていかようとしているのかということについて述べさせていただきます。

私たちのグループは、NMR分光法を用いて、タンパク質をはじめとする生体高分子の作動機構を原子分解能で解明することを目的とした研究を行っています。ヒトゲノムの全塩基配列が決定された現在、ゲノムがコードしているタンパク質の高次構造・相互作用・機能の網羅的な解析が生命科学の重要な課題として、国を挙げて推進されています。しかしながら、生体を構成するタンパク質の中には、適切な研究手法の欠如から、これまでの構造ゲノム科学の守備範囲に収まらないものが数多く存在します。私たちの主要な研究対象である糖タンパク質は、こうした “厄介” な生体高分子に属します。

高等動物の生体を構成しているタンパク質の多くは、糖鎖が共有結合している糖タンパク質として存

在しています。糖鎖はタンパク質分子の機能部位の構築に寄与しており、また分子認識を媒介して細胞間のコミュニケーションを司る働きをしています。最近では、細胞内におけるタンパク質の運命 (フォールディング、輸送、分解など) の決定にも糖鎖が重要な役割を担っていることが明らかとなりつつあります。このように糖鎖の生物学的重要性は明白であるにもかかわらず、これまでの構造生物学は糖タンパク質を研究対象として積極的に取り扱ってきませんでした。糖鎖の構造はゲノムによって一義的に決定されてはおらず、独特の分岐構造をもっているために、簡便なシーケンス技術は存在しません。また一般に、タンパク質に結合している糖鎖は、完成度の異なる様々な構造からなる不均一系であり、ポリペプチド鎖に比べて内部運動の自由度に富んでいます。そのため、糖タンパク質は結晶化が難しく、仮に結晶化に成功してX線解析を行ったとしてもその電子密度像の解釈には注意を要します。そこで私たちは、NMRを利用して糖タンパク質の高次構造解析に取り組んでいます。

しかしながら、糖鎖は官能基の多様性に乏しいため、NMR計測をおこなっても信号がスペクトル中で激しく縮重してしまい、それらの解析が著しく困難です。920 MHz 超高磁場NMR装置はこのような状況で抜群の威力を発揮します。図は、9つのマンノース残基を含む糖鎖の ^1H NMRスペクトルを示していますが、超高分解能スペクトルの計測を可能とする920 MHz NMR装置の素晴らしさが一目瞭然です。私たちが開発してきた糖タンパク質の安定同位体 (^2H , ^{13}C , ^{15}N) 標識技術と組み合わせると超高磁

場における多次元NMR計測を行うことにより、様々な糖タンパク質および糖鎖-タンパク質複合体の精密高次構造解析が可能となるものと期待されます。

糖タンパク質の他にも、超高磁場NMR装置を活用することにより、従来の構造生物学の方法論ではアプローチすることが困難であったタンパク質を研究対象とすることが可能となります。例えば、パーキンソン病などの神経変性疾患に関係するタンパク質の中には天然状態において一定の三次元構造を形成していないタンパク質が数多く存在しています。こうした“natively unfolded protein”は、やはり結晶化が難しく、NMR信号の縮重も激しいためにNMR解析は困難を極めますが、920 MHz 超高磁場N

MR装置を活用することによって大きなブレイクスルーがもたらされるものと期待しています。さらに、超高磁場固体NMR法の技術を用いて膜系などへの研究も行っていきたいと考えています。

このように私たちのグループは、現在推進されつつある構造ゲノム科学の先に広がる未開の荒野に超高磁場NMR装置を武器に切り込んでいきたいと考えています。私たちは、国内外の数多くのグループとの共同研究を行っています。分子研におきましても所内の共同研究も是非推進していきたいと考えておりますので、興味のある方は是非お声をかけてください。

どうぞよろしくお願い申し上げます。

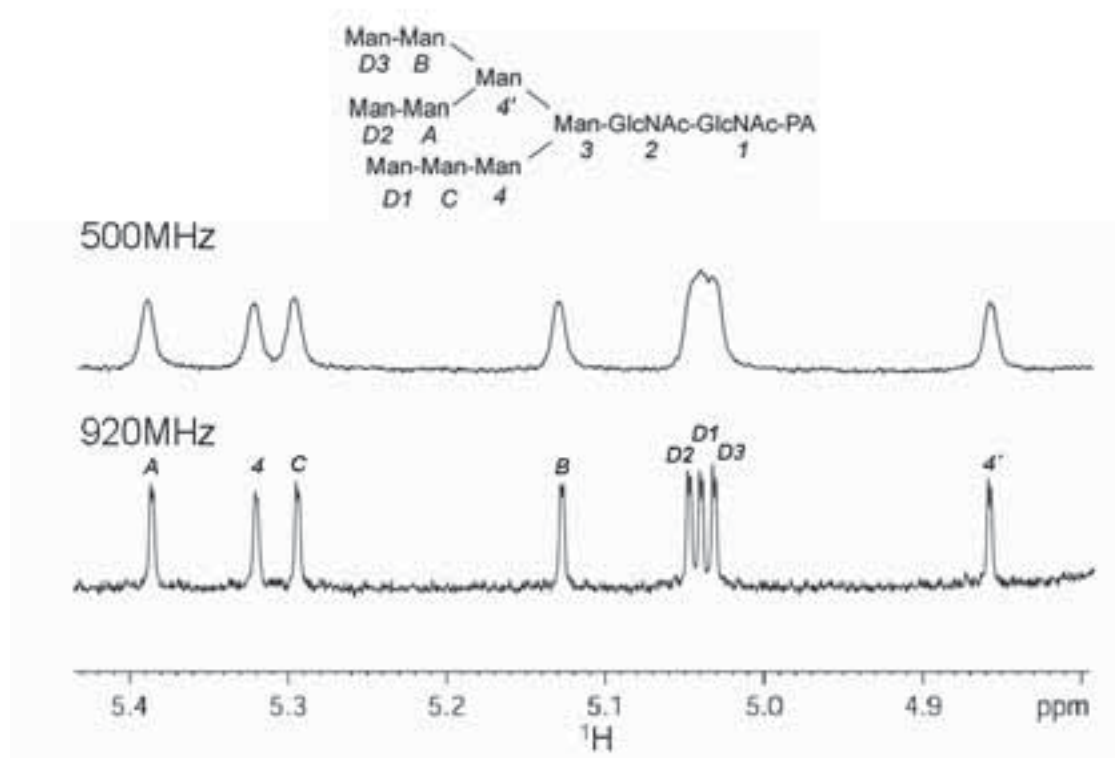


図 糖鎖のNMRスペクトル



分子・物質計算科学ナショナルセンターの提案

理論分子科学研究系分子基礎理論第三研究部門 平 田 文 男

我が国の計算科学における将来構想をめぐって、現在、文部科学省を中心として国家的な議論が展開されつつある。とりわけ、ポスト「地球シミュレータ」として推進が予定されている「ペタフロップスマシン」プロジェクトは、その予想される予算規模からして、今後の我が国における「計算科学」の根幹を担うものと成らざるを得ない。

分子科学研究所は分子科学分野の共同利用施設としてこの分野の計算科学の中心となってきたばかりでなく、2003年度から始まった国家プロジェクト「NAREGI」のアプリケーション拠点の中核を担ってきた。このような位置付けから、分子科学研究所が我が国の計算科学の将来構想に関心ではあり得ず、それに積極的な提案を行うことはむしろわれわれの責務だと考える。

我々は我が国の計算科学の将来像として「分野別ナショナルセンター」構想を提案したい。分野別ナショナルセンター構想は各分野の計算拠点对応する共同利用機関におき、グリッド環境を利用して、すべてのセンターのマシンを共有するというものである。もちろん、現在、国家プロジェクトとして開発が進められている「ペタマシン」のような超大型マシンもグリッドノードの中心として位置付けられる。また、現在、大きな国立大学に置かれている「大型計算機センター」もグリッドノードのひとつとして、計算資源を提供することが期待される。グリッド環境が確立した段階では分子科学ナショナルセンターのマシンは（ハードとしては）グリッドのひとつのノードとして他の研究機関の研究者と共有することになる。一方、分子・物質科学分野の研究者は

（ハードとしての）「ペタマシン」を含む他の研究機関のマシンを共有する。

これにより、分野毎の計算科学の特殊性とマシン（ハード）の共有による資源の効率的利用という異なる要請を同時に達成することができる。

〔提案の背景〕

これまで、大学や研究機関における計算機環境の中心はいわゆる旧7帝大の大型計算センターに代表されるように地域拠点大学あるいは領域分割型であった。例えば、北大の大型計算センターはすべての研究分野において北海道全体の計算機需要を満たすようにデザインされていた。唯一の例外は分子研など大学共同利用機関の計算センターであり、当該する分野における全国の研究者の共同利用センターの役割を果たしてきた。これは個々の大学や個々の研究者がコンピュータを購入することは不可能であった時代においては最も有効な計算機資源の利用の仕方であったであろう。

しかしながら、1980年代に始まったワークステーションの急速な発展と普及は、それまでの計算機環境を一変させ、大型計算機センターそのものの位置付けが変わらざるを得なくなった。それまで大型計算機センターを利用していた多くの研究者が自前のワークステーションをもつことができるようになり、小、中規模計算に利用していた研究者は大型センターから離れていった。単なるハードとして見た場合、共同利用研究機関のマシンもそれほど事情は変わらない。岡崎の「計算科学研究センター」を例として見た場合、ワークステーションの代わりに（単

なるハードとして) センターを使っていた研究者の利用はやはり減少したと思われる。しかしながら、大学の大型センターとは異なり、共同利用センターの利用自身がそれほど急激に減少したわけではない。その理由の第一は共同利用センターとしての充実したサービス体制である。

ワークステーションを自前で保有するためにはその維持管理を自分で行う必要あり、計算を実験解析の補助手段として利用したい実験研究者にとっては大きな負担となる。また、理論・計算分子科学以外の研究者にとって、Gaussian や CHARMM といった計算ソフトを維持・管理することも容易なことではない。このような研究者にとっては共同利用センターとそのハード・ソフト両面におけるサポート体制は依然として魅力的な計算環境なのである。

岡崎の「計算科学研究センター」が比較的高い利用率を保っているもうひとつの理由は理論分子科学の発展そのものにある。1990年代以降の計算分子科学は溶液内での生体分子のシミュレーションや蛋白質を含むナノ物質の電子状態などを直接のターゲットにできるほど方法論の開発が進み、ワークステーションの能力をはるかに越えた大規模計算に対する需要が拡大しつつある。「計算科学研究センター」を利用している研究者のいくらかはそのような計算分子科学のフロンティアにいる人達である。今後、ナノや生体分子関連の計算分子科学的方法論が開発されるに従って、計算の規模はますます拡大し、そのような大規模計算の需要は急速に増大することが予想される。

これは分子・物質科学分野だけではなく宇宙科学

や地球環境科学など他分野でも同様の状況が出て来ていると思われる。

【将来の計算環境の選択肢】

ポスト「大型計算センター」の計算環境構想として二つの方向が考えられる。ひとつはすべての分野の計算需要をひとつの巨大ナショナルセンターでまかなうという構想である。この構想は1ヶ所に計算資源やそれをサポートする人員を集中するため、一見、コストパフォーマンスがよさそうである。しかしながら、それは科学研究の本質から見た場合、却って効率の悪い形態であると思われる。どのような分野にせよ大規模計算を行うにはその計算アルゴリズムの元になっている理論・方法論があり、さらにそのアルゴリズムを具体化した計算プログラム(アプリケーションソフト)が必要である。また、そのような理論・方法論、アルゴリズム、プログラムを不断に開発し、それを発展させる研究者および技術者集団が居て初めてそのような計算環境が保証される。さらに、そのような計算科学や理論科学は実験研究と独立に存在するわけではなく当該分野の実験研究との緊密な連携の上で発展しているのである。上に述べた単一巨大ナショナルセンターによって、このような計算科学の発展を保証するためには二つの選択肢しかない。ひとつはあらゆる分野の研究者を単一のセンターに集めるということであり、それは不可能である。もうひとつの選択は単一巨大センターの計算資源を各研究分野や大学に分割し、モザイク的な運営をするという方法である。

この方法はいわば各大学に散在している大型マシ



ンを物理的に一ヶ所に集めることと大きな差異はなく、ただ単にハードとしての計算資源の切り売りにすぎない。いわば「大型センター」の全国版である。大学の大型計算センターが辿った道を再び歩むことにならざるを得ないだろう。

我々はポスト「大型計算センター」の計算環境として「分野別ナショナル計算センター」を提案する。この構想では学問分野毎（あるいは関連分野をいくつかまとめたもの）にその理論・方法論とアプリケーションソフトを核にして一種の「コンソーシアム」を形成し、そのコンソーシアムの中核拠点として、例えば、「大学共同利用機関」を位置付ける。それぞれの分野の中核拠点にはスパコン相当のマシンを配置し、それらのマシンを超高速ネットワークで結合し、すべての分野の研究者が「グリッド」を通じてこれらのマシン（ハード）を共有する。この形式によれば各研究分野の計算科学的特殊性を十分に反映することができるだけでなく、ネットワークの通信速度と「グリッド」ミドルウェアの発展如何ではベタフロップスレベルの性能を得ることも不可能ではない。また、国家プロジェクトとして推進されている巨大マシン（ペタマシン）をグリッドノードのひとつとして利用する環境を整えれば、すべての分野の研究者がその恩恵を被ることができるだろう。「分野別ナショナル計算センター」の主たる役割は当該分野における理論・計算科学の方法論を開発すると同時に、アプリケーションソフトを整備し、コンソーシアムに所属する各研究者間の研究連携・共同研究を促進することである。

現在、NAREGI プロジェクトで開発されているグ

リッドミドルウェアを利用すれば、GAUSSIAN など市販のプログラムを他のプログラムと連成して使用することが極めて容易であり、また、他研究者が異なる計算機環境で開発したプログラムを「コード変換」などの手間を経ず利用することが可能となり、ネットワークを通じた「リアルタイムコラボレーション」が実現する。

〔分子・物質科学分野のナショナルセンターを分子研に置くことの必然性〕

我々は分子・物質科学分野のナショナルセンターを分子研に置くことを提案する。その理由は以下のとおりである。

まず第一に分子科学研究所は原子・分子からその集合体（液体、固体）および生体分子を含む、ほぼ、すべての分子・物質科学を網羅しており、それらの分野で我が国のみならず世界をリードする研究を展開している。第二に、分子科学研究所の理論分子科学系および計算分子科学系は上記に対応するほぼすべての分野の理論・計算科学研究者を集めており、分子・物質分野としては質量ともに我が国最大の理論スタッフを有している。第三に、岡崎の「計算科学研究センター」は分子科学分野の共同利用施設として発足し、その後、ほぼ30年間我が国の分子科学計算の中核として機能してきた豊富な実績をもっている。第四に岡崎には分子科学研究所の他に、生物関係のふたつの大学共同利用機関（生理学研究所および基礎生物学研究所）とそれらが共同して運営している「岡崎統合バイオサイエンスセンター」があり、生命科学関連の計算科学にも貢献することが

できる。第五に、現在、国家プロジェクト「National Research Grid Initiative (NAREGI)」のナノサイエンス実証拠点として、分子・物質科学分野における研究グリッド構築プロジェクトをリードしており、分子・物質科学分野の計算コンソーシアムの形成に不可欠となる「グリッド」計算環境に関する経験を蓄積しつつある。

以上の意味で、「分子・物質科学分野のナショナルセンター」は分子科学研究所および計算科学研究センターが行ってきた活動の自然な延長であり、発展方向である。



分子科学研究所創設30周年記念事業報告

実行委員長 西 信 之

1975年4月22日に分子科学研究所が設置されて今年で30年となる。これを記念して、創設30周年記念事業が計画された。この事業は、1. 記念式典・祝賀会、2. 記念出版、3. 募金事業の3本の柱から構成されることとなった。

時間がかかる出版事業から開始すべく、2004年の5月に編集委員会が組織され、出版社の化学同人編集長の平裕幸氏と編集部の大林史彦氏を交えてどのような本にするか議論を戦わした。最初は、安直に「分子の世界パート3」という意見も飛び出したが、活字離れのこの時代に新鮮味のない本は見向きもされないという出版社の意見から、全く別の形の本を出そうということになった。ターゲットを大学生と大学院生に絞った啓蒙書でなければならない、読みやすくなければならない、売れなければならない、つまり、書店で目立つ存在で中身をばらばらっと見たときに、面白そうだから買ってみようかという気になる本を目指したのである。最初は、「分子科学者が挑む10の謎」という題名案であったが、内容を詰めて行く内に10では足りないということになり、12の謎ということになった。8月の終わりにまでに初稿をとということで、何とか原稿は集まったが、内容は著者の分野の研究紹介という性格の専門的なものが多かった。縦書きの方が読みやすいと言うわけで、縦書きの原稿をお願いしたが、横書きの原稿を縦書きモードに変換したものが多く、縦書きでは数字も寝てしまって逆にたいそう読みづらくなった。出版社からも「こんなものは売れない」と暗に言われ、著者には大変失礼であったが大幅な書き直しの注文が出され、何人かが「修正には応じな

い、著者を辞退する」という回答を寄せられた。しかし、結局は大幅な書き直しに応じて頂き、なんとか優秀な学部生と大学院生には読める内容になった。パソコンが離せない学生のためにCD-ROMをつけることとし、本には載せられなかったカラフルな写真をちりばめた。各章の扉と本の表紙には学生や若い研究者の写真を配置し、人間味を出すことによって研究者を志す若者を惹きつけようではないかという作戦が取られたが、美術的な体裁の本が多い中では冒険だった。この本を世に出すことによって、分子科学の分野が大変幅広くまた深みを有していること、そして大変面白いということが判って頂けるのではないかと思っている。この出版は法人化した研究所（自然科学研究機構）の事業であり、印税は機構（研究所）の収入として入ってくる。制作された「分子科学者がいどむ12の謎」は、5月10日あたりから全国の書店に並び、式典参加者および募金拠金者に配布された。幾つかの新聞でも紹介され、好評のようである。

次は、募金事業である。募金として集めるお金も機構に全部納めねばならない。つまり、機構の収入となる。しかし、募金の目的を明確にすればその目的のために研究所に配られるので、運営費交付金ではなかなか支出しにくい若手研究者の海外出張や大学院生などがリーダーシップを発揮して開催する研究会、そして他の研究所（専攻）へ大学院の講義を聴きに行く旅費などへの配慮が可能になる。目的は若手研究者の育成のため、ということになった。主幹施設長会議などでの議論を経て、積極的に募金活動を開始した。この過程で、名簿作りが大きな問題

記念式典：式辞を述べる中村所長

となった。分子研では、比較的短い期間での転出が起るため、各研究系や施設・センターでの人事記録が不十分であった。要覧を整理することによってどのような人が所属されたかは判っても、現在どこに居られるかを調べ上げるのは大変な仕事である。聞き取り調査のみではなく、インターネットなどを使って現在の所属と身分を探し当てた例が少なくない。若い人達はなんとか追跡できて、退官された方々はネットでの追跡は困難であった。とにかく、このようにして作り上げた名簿は、後に式典の案内を送付する時にも使われた。この名簿は100%完璧ではなく、何人かの方が抜けておられるということを知ることになった。出身者および現在のメンバーから500万円超、企業から1000万円を超える金額の募金が集まっている。心から感謝したい。

式典等の運営に関しては記念式典等企画運営委員会幹事会が組織され、所長、および事務センター長、財務部長、総務課長、財務課長をはじめとする事務センターメンバーと技術課長や主幹・施設長が何度も会議を重ねて当日に至った。招待者の確定、案内状の作成



見学会：世界最高性能のNMRを見上げながら
(ナノサイエンスセンター)



と配布、式典進行プログラムの作成、バスの運行計画、見学ルートの設定、招待者の接待等々、桑原総務係長を初めとする事務センターの方々、そして担当の先生方の献身的な働きがあり、また野川所長秘書、原田広報技術職員をはじめとするスタッフの方々の大変多忙な日々が続いた。中山文部科学大臣が来所されると言うことで準備をしていたが、国会等の関係で直前になって来られないという連絡が入った。

5月20日は幸い晴天に恵まれ、心配した見学の乱れもなく、順調に式典の開催へと進んだ。中村所長の格調高く印象的な挨拶の後、文部科学大臣祝辞が小田公彦審議官から朗読された。続いて、本研究所ばかりでなく学術行政全般にも大きな貢献をされた長倉三郎日本学士院長、小平桂一総研大学長、柴田紘一市長からの祝辞があった。式典の後で、近藤保豊田工業大学教授の講演が行われ、祝賀会へと進んだ。祝賀会では、創設とその後の発展に大きな役割を果たされた井口洋夫先生のお話しに続いて、岡崎南ロータリークラブ会長岡田邦弘氏と総合科学技術会議議員の松本和子教授のスピーチがあり、田中郁三先生によって乾杯の音頭が取られた。歓談の後、エジンバラ大学のロバート・ドノバン教授の祝辞があり、宴を閉じた。祝賀会の時間が短すぎたのが残念であったが、その日の内にご帰宅願う必要があったため、大変密度の高い午後となった。遠くから駆けつけて頂いた多くの参加者の皆様に心より感謝申し上げます。これを機会に、分子科学研究所同窓会の結成が予定されている。



第15回分子科学研究所オープンハウス

2005年6月4日（土）に第15回分子科学研究所オープンハウスを開催いたしました。この行事は年に1度開催されており、全国の大学院生、学部学生および社会人を対象に、分子研所内を自由に見学して頂く催しです。分子研で行われている研究内容を学生向けにわかりやすく解説するとともに、総合研究大学院大学の基盤機関としての分子研での教育活動について外部の人に知って頂くことを目的としています。

1月頃から分子研ホームページで告知を始め、分子科学関連分野への電子メールでの案内を行いました。特に今回は、来年度から5年一貫制博士課程が構造および機能分子科学の両専攻で導入されますが、その平成18年度入学学生募集のポスターにオープンハウスの告知を掲載し、広報委員会を通して全国の大学の生協に掲示して頂きました。所内のみなさんの御協力で、合計115名（内訳：学部学生34名、修士1年 31名、修士2年 18名、博士課程14名、その他 18名）からの参加申込がありました（参加申込締切が5月25日で、5月6日の時点では僅か16名の申込でした）。例年どおりに本年度も、オープンハウスと「分子科学研究会シンポジ

ウム」を連携して開催し、シンポジウムからも多数の参加者がありました。参加者へのアンケートで「今回の分子研オープンハウスを何でしたか？」という設問に対し、分子研ホームページとの回答が最も多く、広報におけるホームページの重要性を改めて感じました。



前年度のオープンハウス参加者からの意見として、見学時間の短さを指摘する声が多くありましたので、例年よりも少し開始時間を早めに設定しました。当日は参加者に、午後1時に岡崎コンファレンスセンターに集まって頂きました。中村宏樹所長が分子研の概要を説明し、続いて永瀬茂教授が総合研究大学院大学の概要を説明しました。また、米満賢治助教授から本年度開催される第2回夏の体験入学に関して告知がありました。その後、約4時間半にわたって、参加者には研究所内を自由に見学して頂きました。当日は天候が優れず、激しい夕立などありましたが、明大寺ー山手地区間に30分毎にシャトルバスを運行したおかげで、両地区の見学を円滑に行えていたようです。

オープンハウスに関する参加者からの意見としては、「UVSOR等の普段見られない大型装置が見学



できてよかった」、「説明して下さった方々が丁寧で、研究内容がよく理解できた」、「この様な催しは分子研について知る機会ですので、今後も継続して行ってください」等、おおむね好評でした。一方、「研究室によって、待遇に温度差を感じました」という指摘もあり、受け入れ側として反省すべき点もあったかと思います。

夕方には、参加者と研究所内のメンバーが職員会館に集まり、懇親会を行いました。例年よりも若い参加者が多かったためか（?）、用意した料理と飲み物が予想を超える早さで消費されてしまい、テーブルの上のものが気持ちよくなってしまいました。そのため、少し物足りない感じがしましたが、和やかな雰囲気のもと無事終了致しました。



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、広報委員会担当の原田美幸様、中村理枝様には大変お世話になりました。この場を御借りし、お礼申し上げます。

（川口博之 記）



分子研と大学？

広島大学大学院理学研究科教授 井 上 克 也
(前 相関領域研究系相関分子科学第一研究部門助教授)

1996年1月に分子研相関領域に入所してから、9年たった。8年とちょっと分子研にお世話になり、広島大学に異動して怒濤のような1年が過ぎたところで、少し冷静な目で分子研を外から眺めることができるようになった。こちらでは、週3～6コマの講義（しかも無機化学と無機固体物性などの得意分野のものばかり）とその準備、入試が年に8～9回（まだ全て把握できていない）、やたらに多い会議と報告書の類、学内外の研究費等の申請書書き等、分子研時代に比べてゆうに5倍は研究以外の仕事がある。しかも組織が大きいと似たような会議が4回ずつぐらいある上、申請書の類は書いても書いても箸にも棒にもかからない。こう書くといかにも身体的、精神的に大変そうであるが、意外にも分子研時代よりも気楽な気がする。分子研時代では、あつと言うまに白髪だらけになった教授の方々を数多く見てきたが、こちらでは皆髪の毛ふさふさ、黒々としている方が多い。箸にも棒にもかからない申請書だから、手抜きしている？ いやいやとんでもない。申請書の書き方の勉強などして気合い入れて引っかかるように書いていますし、みな真剣に仕事に取り組んでいます。さらに分子研時代よりもたくさん自分で実験している。なぜだろう？ 研究環境は、研究費、場所、時間の点で劣悪で、マンパワーは分子研時代よりも少し増えたぐらいで（今後増えて行く予定）変わらないので全体的には悪い。分子研の方が精神的重圧が多いのか、大学は学生がうようよと周りにたくさんいるから、精神的に紛らわされるのか？ 火事場の馬鹿力ではないけれども人間は精神的限界が身体的限界よりもはるかに低くて、

そこに問題があるのかも知れない。ごちゃごちゃ言うのはこれぐらいにして、本題の分子研での思い出について書きます。分子研に着任したときは、30そこそこで、博士号を取って一年ちょっとを私立大学で講師として務めた経験しかない状況で、さあ研究室をつくって、新しいことを始めなさいと言われてまず戸惑いました。着任したところが相関領域研究系で、ポジションを考えると、何をやっても良いが新しい芽を出すところと勝手に解釈し、有機合成がバックグラウンドにありましたが、有機にこだわらず、物性に焦点を当てようと研究をスタートさせました。幸いなことに、着任して数ヶ月後には、細越さん（現大阪府大・助教授）、A. ElZaizi氏（現フランス CNRS 研究員）、加藤恵一君（現京大化研・研究員）、J. P. Sutter氏（現フランス ツールーズ大教授）の方々が、仲間に加わって頂き、和気藹々と研究室づくりを始めることができました。また周辺には、渡辺芳人先生、小江誠司さん、秘書の谷澤美佐子さん等の個性的な人々に囲まれ、いろいろ助けていただきました。特に当時の伊藤所長、渡辺先生には少々いい加減に始めた研究に関して、いろいろと励まして頂き感謝しています。御影で研究に関して楽天的に考えるようになりました。その他、分子研ではたくさんの方々にお世話になり、お名前を挙げることはできませんが、感謝しています。

最後に、私が所属していた相関領域研究系は、無機や有機や物理化学や生物などの分野にとらわれずに冒険ができる、分子研にとっては重要な研究系であると言えます。知的創造には、制約は少ない方が良いでしょう。分子研挙げて守っていただきたい。

分子研は一日にして成らず

名古屋大学大学院理学研究科教授 岡 本 祐 幸
(前 理論分子科学研究系分子基礎理論第一研究部門 助教授)

私が奈良女子大学理学部物理学科の助教授から、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所理論研究系(現自然科学研究機構分子科学研究所理論分子科学研究系)分子基礎理論第一研究部門の助教授に転任したのは、1995年4月である。それから2005年4月に現在の名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻(物理系)に転任するまでの間、岡崎に滞在した。実を言うと、私は1995年1月に面接を受けに分子研を訪れるまで、岡崎に一度も来たことが無かった。それ以前から分子研の計算機センターのスーパーコンピュータを利用してはいたが、研究会などで来たこともなく、私と分子研との関係は計算機利用を通じてしかなかった訳である。そもそも私は、奈良女子大学では素粒子理論の研究室に所属していたこともあり、タンパク質の折り畳みシミュレーションはやっていたものの、分子科学関係の学会や研究会に出ていなかったのも、面接の時にいらっしゃった人事委員の先生方のどなたとも面識もなかった次第である。更には、1993年に出したマルチカノニカル法の論文はあったものの、タンパク質のシミュレーションの分野において、私は国際的には勿論のこと、国内でもほとんど知られていない状態であった。このように、他分野から応募してきた海のものと山のものとも分からないような私を採用して下さった分子研の人事委員会の勇断に敬意を表すとともに、この場を借りて感謝したい。

私の10年間の分子研在職中、研究面では、優秀な助手、技官、ポストドク、総研大生や所内外の共同研究者などに恵まれて、上の面接の時に広げた大風呂敷のある程度の部分は達成できたと自負してい

る。それでは、上で述べた感謝の気持ちを反映して、何か分子研に恩返しができたかと、この文章を書くに当たって改めて考えるに、以下の事が思い当たった。

まず、生協を作ることに貢献したことである。そもそも、岡崎機構の生協は、私のポストドクをしていた、西川武志君(現在、産総研・グリッド研究センター研究員)がある飲み会で、「岡崎機構に書籍部のある生協を作りたい」と言い出したことから始まった。私は、「ポストドクのような短期の職を持ちながら、そんな研究と関係ないことをやっていて大丈夫か?」とすぐには賛成しなかったが、隣にいた、理論研究系の平田文男教授が「それは素晴らしい。ぜひ作りましょう。」と言ったので、一気に盛り上がり、私も「岡崎機構構成員の福利厚生に大いに役立つことなので、次の職のことに自分で責任を持てるならやって良い。」と答えた。その後すぐ、平田教授を発起人代表として機構全体に運動が広がった。そして、西川君が「生協の作り方」をいろいろと調べてきて、本当に入念に計画をたて、2年近くかけて開店を実現してしまった次第である(文献1参照)。西川君の滅私奉公的献身には本当に驚嘆した。何分、西川君は、開店一ヶ月後には、産総研に転任したのだから……。勿論、私達も研究室を上げて発起人となって西川君をサポートした訳で、積極的に貢献はしたと思っている。

私の分子研への恩返しのもう一つは、分子研が化学と物理学の分野で論文の一報当たりの平均被引用数が全国第一位であることを「発見」したことである(文献2、3)。(その後のデータについては文献4~6を参照されたい)。これは、もともと伊藤



光男元所長が文献7を元に、分子研の紹介の挨拶の時などに良く話されていたことなので、その後の新しいデータを発見したと言い直すべきかも知れない。私は一研究者として、個人的には、文献2でKen Wilsonの例を挙げて述べたように、このような数値だけに基づく評価の危険性を警告したいと思っているが、分子研の宣伝には大いになると思って、敢えて発表した次第である。

文献2や3を書いたことがきっかけになって、「それでは、なぜ、分子研が研究活動で全国一位になることができ、そしてその地位を長く保ってこられたのか？」という問いが私の関心事となった。文献2や3でも詳しく述べたように、私の結論は、分子研の厳しい人事政策（「分子研方式」）のおかげだということである。分子研方式の主旨は、公募で幅広く人材を発掘して、その中からベストの人材を選ぶこと、教官の内部昇進の禁止、教授と助教授を独立の研究室として扱う、などである。形式だけの公募なら多くの大学も採用しているが、未だに実情は、研究業績を重視するというよりも、（弟子や先輩後輩なり、当該分野の「ボス」達が選んだ人なり）当該分野の人事委員が良く知っている人または「無難で安心できる人」を採用する場合が多いのではない（よって、私のように他の分野から参入しようという人は、まず採用されないのである）。国内では、分子研ほど教官採用人事を真剣にやっているところはないかも知れない（海外の一流大学では当然のこととして行われていることなのであるが……）。それぞれの候補者について、（数値化された評価材料およびそうでないもの両方において）できるだけ多

くの情報を集め、その中から本質をついている情報が何かを取捨選択して見極めるのが、人事委員会の眼力の発揮しどころではないだろうか。

上述の私の「なぜ分子研なのか」という問いは、最近、塩野七生の「ローマ人の物語：ローマは一日にして成らず」という本で、塩野が議論している、「なぜローマだけが繁栄したのか」という問い（文献8）と似ていることに気づいた。塩野は「古代ローマのまわりには、当時、ギリシア人、ケルト人（ガリア人）、ゲルマン人、エトルリア人、カルタゴ人などの強力なライバルがいたが、なぜ、ローマ人だけが一大文明圏を築き上げ、それを長期にわたって維持することができたのか」、ということをテーマにして本を書いた。塩野は言う。「興隆の因は当事者たちが作りあげたシステムにあると考える。なぜなら、人間の気分ほど動揺しやすいものではなく、気分を一新してくださいなどと説いても、なかなか全員で一新できるものではない。一新するには、一新せざるをえないようにする、つまりシステム化してしまうしかないと思うからである。」塩野は古代ローマ時代の同時代か、それに近い時代に書かれた史書の3人の著者の、ローマ興隆の要因についての考えを次のようにまとめる（文献8）。

1. ハリカルナッソスのディオニッソスは、宗教についてのローマ人の考え方にあった、とする。ローマの宗教には、狂信的傾向がまったくなく、それゆえに他の民族とも、対立関係よりも内包関係に進みやすかったからだろう。他の宗教を認めるということは、他の民族の存立を認めるということである。

2. ポリビウスは、ローマ独自の政治システムの確立にあった、と考える。王政、貴族政、民主政という、それぞれが共同体の一部の利益を代表しがちな政体に固執せず、王政の利点は執政官制度によって、貴族政の利点は元老院制度によって、民主政の良いところは市民集会によって活用するという、ローマ共和政独自の政治システムに、興隆の因があったとしたのであった。
3. プルタルコスは、敗者でさえも自分たちと同化する彼らの生き方をおいて他にない、と明言している。ローマでは、どこに生まれようと問題にならず、ローマ市民権の有無だけが問われたが、(中略) ある時期までは、ローマに住むだけで市民権を取得できたのである。

塩野は続ける。「これら三人の史家の指摘は、私には三人とも正しいと思われる。それどころか、ローマの興隆の要因を求めるならば、この三点全部であると思うのだ。(中略) デイオニッソスのあげた宗教、ポリビウスの指摘した政治システム、プルタルコスの言う他民族同化の性向はいずれも、古代では異例であったというしかないローマ人の開放的な性向を反映していることでは共通するからである。(中略) ローマ人の真のアイデンティティを求めるとすれば、それはこの開放性ではなかったか。(中略) 古代ローマ人が後世の人々に遺した真の遺産とは、広大な帝国でもなく、二千年経ってもまだ立っている遺跡でもなく、宗教が異なろうと人種や肌の色がちがおうと同化してしまった、彼らの開放性ではなかったか。」

これらのことは、そのまま分子研についても言えるように思う。1. における宗教とは、分子科学という物理と化学の境界領域に対して物理的にアプローチすべきか、化学的にアプローチすべきかというような、学問に対する信念に対応する。また、3. における人種の違いとは、物理学出身か化学出身かの違いととれる。分子研は更に生物学も含むこれら分野の違いを内包し、分子科学という一つの学問に同化しているのである。結局、分子研の興隆の因も開放性にあると言えるかもしれない。さらに、2. における政治システムとは、勿論、分子研の人事政策(分子研方式)ととれる。しっかりした人事システムをもたずに、人事委員それぞれの個人的見解に任せてしまっただけでは、誰が人事委員になるかに大きく影響されてしまう。ベストな人材を確保し続けるには、私情が挟まれるのを極力さけるために、システム化してしまうしかない訳で分子研方式は最良の人事システムと言える。そのうち、公正な公募による採用人事、教授と助教授を独立にすること、内部昇進禁止の3点が特に重要である。最近では多くの大学や研究所で、人事の流動性を高めるために、内部昇進禁止に代わるものとして、任期制を導入しているが、内部昇進禁止と任期制とは大きな違いがある。文献3でも詳しく述べたように、任期制は、職を非常に不安定なものにするわけであり、論文が少ないと転任先を見つけるのに不利であるから、質は二の次にして、論文を数多く書くことに重点が置かれてしまう。そして、安全のために、これまで論文を書いてきた研究からの飛躍を難しくしてしまう。すなわち、成功するかどうか分からないような、思



い切った野心的な難しい問題に新たに取り組むことを大きく阻害してしまうのである。よって、任期制はぜひとも避けなければならないと考える。任期制からは、創造性の高い研究は生まれにくいのである。更には、任期制をとるとらないに関わらず、内部昇進を制度上許すと、当事者にとっては、昇進をさせてもらうために、上の教授の「機嫌を気にする」ようなことになるか、または、昇進の可否を決定する教授側にとっては、路頭に迷うようなことはできないと、安易な昇進を結局は許してしまうことになりかねないのである。それよりは、最初からそのような期待をお互いにもたないように、内部昇進禁止としてシステム化してしまうのが、私情が入る余地がなく、すっきりしているのである。しかし、内部昇進禁止の制度がうまく機能するためには、上でも述べたように、教官採用人事をよほど真剣にやって、応募者の中から常にベストな人材（優れた研究業績を上げ、将来転出できる可能性が最も高い人材）を採用するようにすることが必要条件となる。

以上より、私はこれからも分子研の繁栄は長く続くと信じている。これからは外からエールを送りたい。そして、国立大学の法人化により大きく揺らいでいる我が国の基礎研究の基盤を守り、研究活動のレベルを更に上げていくためには、分子研の厳しい人事政策を日本中に広めることが重要だと信じる。しかし、分子研の OB・OG が全国の大学に幅広く職を得ているのに対し、分子研方式がほとんど採用されていないのが現状である（OB・OG を中心に分子研方式を宣伝し、広めていく必要があるのではないか）。こういう状態で、いきなり、全国一斉という

ことになれば、混乱も生じるであろうから、まずは、21 世紀 COE（旧トップ 30）に選ばれる（または、それを目指している）ような所ぐらいから、分子研方式を導入してはどうであろうか。特に、人材を放出しても、新たに優秀な人材がたくさん応募してくるという自信がある研究機関は今すぐにでもこのシステムを採用すべきであろう。

最後に、伊藤光男元所長、茅幸二前所長、中村宏樹所長を初め、分子研の皆さんには大変お世話になった。この場を借りてお礼申し上げたい。本当に有り難うございました。

参考文献

- 1) 平田文男：分子研レターズ 45 (2002) p. 25.
- 2) 岡本祐幸：分子研レターズ 44 (2001) pp. 27-29.
- 3) 分子研レポート 2001, pp. 62-66.
- 4) 分子研レポート 2002, pp. 74-77.
- 5) 分子研レポート 2003, pp. 76-78.
- 6) 分子研レポート 2004, pp. 86-89.
- 7) A. Anderson et al., in “Science in Japan,” SCIENCE 258 (1992) p. 561.
- 8) 塩野七生：「ローマ人の物語：ローマは一日にして成らず」(下) (新潮文庫, 2002) pp. 198-209.

なお、文献 1～6 については、次のホームページから PDF ファイルをダウンロードできる。

<http://www.ims.ac.jp/publications/indexj.html>

岡崎の丘の上

大阪大学大学院基礎工学研究科助教授 山 田 亮

(前 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助手)

2001年9月より2005年5月末まで分子研でお世話になりました。当初は分子集団動力学研究部門に配属されていましたが、その耳慣れない組織名を覚えるのにはかなりの時間を要しました。しかし、ようやく覚えた頃になり、分子スケールナノサイエンスセンターへと異動となり、正しい部署名を暗記する前にまたもや異動となりました（お察しの通り、現在自分の所属部署の正確な分類がまだよくわかっておりません）。

「分子研にいきました」と知人に話をすると、「お金あるでしょ」とよくいわれました。しかし、夕方を過ぎると人がいるにもかかわらず廊下が真っ暗になるその建物の中ではなかなか実感がわきませんでした。もっとも山手地区に移動する際には「なるほど」と強く納得しましたが……。

私の思いつく実験は必ずしもお金のかかる物ではなく、学生実験程度の仕組みでできてしまう物が多かったようです。根が貧乏性なのかもしれませんが、「ここでしかできない実験で成果を出すのは当たり前で、誰でもできるが誰も思いつかなかった実験をするのが偉いのだ」と人にはいう事になっています。もっとも、分子研という場で与えられたチャンスを活かしきれなかったように感じる事には私自身の力不足を痛感します。今後、分子研で見つけた小さな種をなんとか芽吹かせる事ができれば、と思う次第です。

さて、冒頭に述べた通り、組織の名前をそれほど意識した事はありませんが、名前にはそれなりの思いが込められており、学ぶ事があります。学生時代の研究のスタートがプローブ顕微鏡であり、分子一

粒一粒に思いを馳せる事の多かった私には、「分子集団」という言葉は新鮮でありましたし、重要な概念として認識するようになりました。* 「分子スケールナノ」という言葉もはじめは耳慣れず、不可思議でしたが、出所してからは、特にナノのまえにある「分子スケール」の語感が気に入り、よく使わせていただいております。

以前、岡崎の地元の方とお話をしていたとき、「分子研？ ああ、あの丘の上の研究所ね」といわれた事があります。Stand on the shoulders of giants ではありませんが、岡崎の丘の上に立つ事で、私も以前より少しは遠くまで物が見えるようになったような気がします。

*「分子集団」と「動力学」の関連はまだよく分かっておりません。



お世話になりました

早稲田大学理工学部物理学教授 木 下 一 彦
(前 岡崎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)

分子研の皆様、

この3月までお世話になっておりました木下です。
3年間（立ち上げ前を含めると4年間）、本当にどうもありがとうございました。おかげさまで、山歩きを含めて楽しい日々を送ることが出来ました。

早稲田大学では、キャンパスの外の古倉庫（何と鉄筋でなく鉄骨造りの2階です）を借り、その中に実験室を作って研究を再開しつつあります。お近くにお出での節は、是非お寄りください。研究室ホームページ（<http://www.k2.phys.waseda.ac.jp>）に地図や連絡先があります。

久しぶりの大学で電磁気の授業を受け持たされ、これまで名前しか知らなかったマックスウェルの方程式とやらを教えないといけないことになり、悪夢にうなされながら必死に勉強しております。

岡崎の生活に慣れたため、高田馬場に来た当初は、なんて乱雑でごみごみした所なんだろう、という印象でした（30年近く住んでいた場所の近くなのですが）。今は馴れて、おいしい店も見つかり、都会を楽しんで……といたいところですが、横浜の自宅から通勤が片道2時間近くかかるので大変です。

本当にどうもありがとうございました。

岡崎へもたまに顔を出しますので、今後ともどうかよろしくお願い致します。

付録ですが、ご参考のため、岡崎で気に入っていた店をいくつかご紹介いたします。すでにご存じの所も多いかもしれませんが。

【寿司】

千石（蒲郡市元町 10-7 0533-68-6721 木休）
寿司もおいしいけれどつまみも。エイ肝とか。

志のじま（岡崎市美合町生田 170-1 0564-52-4123 木休）
バッテリーがある日は是非バッテリーを。茶碗蒸しもいけます。

【飲み屋・和食】

房や（岡崎市緑丘 2-6-4 0564-55-6043 月休）
刺身、明太子のはさみ揚げ、だし巻き卵、・・・
カウンターが常連に占拠されていなければ（一人減りました）、カウンターがベスト。まずは「本日のお勧め」から。

こばやし（岡崎市美合新町 10-4-106 0564-52-1671 月休）
ふぐが得意ですが、お酒も含めて大将におまかせでいろいろ。カウンターでも予約した方がいいです。グルメの接待にも。あらかじめ頼めば極上ステーキも裏メニューに。

佗助（岡崎市戸崎町越舞 19-1 0564-59-4414 月休）
しゃれた京料理。昼は安くてたっぷり。酒は黒龍。予約が安全。女性にも好評。

ふじ田（豊橋市曙町若松 35 0532-45-0145 水休）
足を延ばす価値あり。値段は高めかも。

【そばや】

茶の子（岡崎市小美町岩ヶ根 84 0564-47-2851 水休）
しゃれたお店。いいそば粉のあるときは並そばがお勧め。女性はさらしな。予約すれば田舎そばも。つまみもあるので（メニュー以外にも）、夜も楽しめます。

竹うち（岡崎市井田稲場 15-5 0564-25-9366 日休）
純粋にそばを楽しむところ、だとおもいます。

【けえき】

カントリークリスマス
（岡崎市緑丘 2-6-4 0564-58-3665 火休）

勝利の方程式

早稲田大学理工学部物理学科客員講師（専任） 足 立 健 吾
（前 相関分子科学研究系相関分子科学第一研究部門助手）

勝利の方程式と言っても、秋に行われる機構杯フットボール大会で優勝するための方法でもなければ、岡崎市主催のフットサル大会で優勝するための方法でもありません。2001年に、木下先生の岡崎赴任に伴って木下研究室自体が統合バイオに移動しました。それから岡崎を去るまでの3年の間に、いつの間にか言われる様になった言葉なのです。

この方程式は、竜美丘会館通り東明大寺町交差点にある居酒屋で和むことから始まります。行った日がたまたま木曜日なら、おそらく方程式が解ける確率は下がります。生ビールが半額だからです。逆に、和みに来た口実があればあるほど、この確率は上昇します。デートがうまくいかなかったとか、送別するとか、実験がうまくいったなどの理由があれば良いのです。次は、大きな地球儀がトレードマークの統合バイオ東門そばにあるお店です。カレーポテトと唐揚げ、最後の仕上げにうま味ご飯は必ず注文するメニューでした。もう、お分かりだと思いますが、勝利とは“梯子”のことなのです。この二軒でまだ自分を見失わず、この後更に竜海中学校、ローソン近くの猫中華（通称）にたどり着くことが出来てようやく方程式は完成するのです。若さと体力がなければ出来ない業です。しかも、運が良ければ中華の大將と東の空が白じむまで飲むことが出来るから、たまったものではありません。私にとって、勝利の方程式はとても難解でした。

で、研究での勝利の方程式はというと、これは更に難解です。そんなモノがあればいいのですが、簡単ではなさそうです。ただ、これから先も日々努力し求め続けていきたいと思っています。

統合バイオサイエンスセンターという最高の実験施設、環境で研究できたことは私にとって非常に幸せでした。あまり多くの人と交流できなかったのが残念でしたが、またお会いする機会がありましたら是非勝利の方程式（どちらでも構いません）をご一緒できたら幸いです。私生活の方でも、長女が誕生したり、人生で最高に太ったりなどなど貴重な経験をし、とても思い出深い地になりました。3年間どうもありがとうございました。



思えば遠くへ来たもんだ

九州大学情報基盤センター助教授 南部 伸 孝
(前 岡崎共通研究施設計算科学研究センター助手)

小生の出身は、仙台になります。大学と大学院時代を横浜で過ごし、博士課程を中退し、愛知県の岡崎市にある研究所に赴任したのは28歳の夏でした。赴任直後に、業務への多大な作業を負わされ、指導教官には「何をやっているか？」と業務のために赴いた、つくばの環境研の隣にあるビジネスホテルの電話口にて応答する自分が思い出され、D論提出のために必死だった思い出が今も鮮明に残っております。今のポストクとは違った意味で大変でした。また、その後12年間お世話になるとは思いもよらなかったのも事実でありさらに助手の任期なども全く知らなかった時代です。業務と研究の両立とは何かといろいろな意味で職場の同僚や博士課程に在籍していた学生と議論したことが思い出されます。時代の動きが速く、今のポストクの方々に相談されても、どのように答えるべきか、思案するばかりです。ある先生は、D論（足の裏のご飯粒、取っても食べられないけど、取らないと歩けない）を取った後、皆、海外へ行くべき！とおっしゃり、ウミガメとして戻ってくるとポストがあると助言します。そして、まさに中国がその状態だと比喻されます。小生は、これでいいのかと自問自答するばかりです。何が求められ、何をすべきか、混沌としている時代ではありますが、インパクトのある仕事がしたいと願っております。

さて、堅くなりましたが、近況を紹介しつつ、分子研を去るにあたりへの寄稿をさせていただきます。まず新居は、福岡市西区にある九州大学姪浜住宅になります。姪浜地区とは、福岡市営地下鉄の西の終点付近に当たります。一方、官舎の大きさは分子研と

全く同じですが、ロケーションが異なり、九大演習林（松林）の中（マムシとムカデに注意）にあります。そこから毎朝、姪浜の駅まで自転車で約1.8 km 程走り、駐輪場に自転車を置き、約30分程度、「貝塚行き」の電車で揺られて出勤します。8時30分の授業に間に合うためには、8時02分の電車が不可欠で、こちらに来てからは朝方人間への矯正に苦勞する毎日です。但し、電車の中での読書に目覚め、またそれが混雑に伴うストレスから解消されることが分かり、一挙両得を得ております。読書と言いますと、小生は元センター長の講釈が思い出されます。それは、司馬遼太郎の「街道を行く」シリーズです。元センター長の「〇〇県人が歩いた後は、……」が忘れられず、この地を知るにはこの本が最適と「肥前の諸街道」を読み切ってしまいました。（先生は、全巻読みなさいとおっしゃるかも知れませんが、今は、ちょっと〇〇問題を読破しております。）本題に戻りますと、実はこの西区は興味深い史実が沢山あります。福岡周辺をご存じの方なら、糸島半島の約半分（九大が移動する新キャンパスのあるところ）と玄界島も西区なのですが、その付け根付近にこの九大官舎があります。また、官舎の前を唐津街道（202号線）が走っております。1274年、第一次元寇があり、かなりの方が亡くなったところです。鎌倉武士たちは太宰府付近まで後退させられた大変な侵略戦争でした。写真は、第二次元寇（1281年）まで築き上げられた元寇防塁です。2メートルもあるそうで、これによって騎馬戦を得意とする蒙古軍を押さえ、台風の影響で終末を告げたとされます。実はこの防塁が我が官舎の裏にある「生の松原」

に埋もれてあるのです。また、玄界灘を望む海岸でもあります。何とも感慨無量です。一方、「玄」と言う文字は全く意識しなかったのですが、三男の名前の一字にあてておりました。（彼はもう3歳になりますが、生粋の博多っ子になることでしょう）さらに唐津には、豊臣秀吉が朝鮮出兵時に築城した「名護屋城」跡があります。「岡崎城」ではないですが、

これも何かの縁（般若心経でしょうか）かもしれません。今までこの様なことを考えずに生活して来ましたが、ふと目を向けると様々なことがあり、ここまですり着くにも分子研での精進が実を結んだと思っております。12年間という長い間、諸先生方には、ご指導とご支援、本当にお世話になりました。今後ともよろしくお願い致します。



元寇防塁（2005年6月撮影）



分子研流動烏鷺有漏ばなし

東北大学多元物質科学研究所助教授 高 橋 正 彦
(前 分子スケールナノサイエンスセンター先導分子科学研究部門助教授)

平成15年4月からの2年間に亘り、分子研流動部門に在籍させて頂きました。アツという間に過ぎ去ってしまいましたが、これは公私共に分子研／岡崎を十二分に満喫したことも多分に関係していると思います。茅前所長、中村所長をはじめとする分子研の皆様、楽しい2年間で本当にありがとうございました。

仙台から鼻息荒くやって来た、この新米分子研助教授は岡崎で多くの新しい経験や体験をしました。私にとって環境の変化の最たるものは、教育指導すべき学生が分子研にはいなかったことです。そこで、結果が出なくてもかまわない（茅先生、中村先生、ごめんなさい!）、将来的に展開できる研究の芽を育てよう、このことを第一に考え、暖めていた幾つかの研究課題に着手しました。そうした試みの一つに配向分子の電子運動量分光があります。一種の極限的同時計測実験を試みるこの計画に対する同業者の反応はおおむね“crazy man”であり、従って、分子研でチャレンジすべき絶好のテーマだったというわけです。

実際、実験を始めてみると、“crazy man”とはうまいことを言うなあと感心するはめになりましたが、最終的には何とか同時計測信号をつかまえました。その強度はなんと約50カウント/day! こうした経緯で配向分子の電子運動量分光実験を世界に先駆けて成功しました。この成果はむろん私一人で得られたはずもなく、沈着冷静な助手の渡辺昇さん（現東北大多元研助手）、何事にもひたむきに取り組むIMSフェローのKhajuria Yugalさん（現インドIIT-Madras 助教授）、そして超の字がつく楽天家の私の、

絶妙のトリオで初めてなせたものだと自負しています。これらの仲間とあげた何度かの祝杯は格別の味がしたことは云うまでもありません。これだから、研究はやめられない!

以上のように、分子研の恵まれた環境のもと、思う存分研究を楽しませて頂きました。一方で、私が参加していたナノセンター運営委員会や共同研究専門委員会では、分子研の重要なミッションたる大学共同利用機関としての様々な問題点に関する分子研内外の先生方のご意見に強く共鳴したり、少々違和感を覚えたり……。こうした分子研の諸問題を今後は大学側から自分なりに見つめていくつもりです。

これまで私を含めて多くの大学教員が研究にとりわけ集中できる時間と環境を分子研から頂き、そして再び日本全国に散らばって行きました。こうした流動制度も研究機関毎の現益を問う行政法人化が行なわれた今、難しい局面を迎えていますが、全国にいる若手・中堅研究者の一人でも多くの自覚と成長を促すこの妙手を今後とも分子研に打ち続けて頂きたい、と願うばかりです。そういえば、教授会で中村所長が「分子研は梁山泊たれ」と仰っていました。これは、英雄豪傑のみでなく、荀子の云う「驥は一日にして千里なるも、鷺馬も十駕すれば則ち亦之に及ぶ」がごとく、研究に夢と情熱を持ってさえすれば私のような鷺馬をも今後とも受け入れ、分子科学に“厚み”を増していくことの重要性を端的に仰っているのだと理解しています。中村先生、間違っていますか?

岡崎での二年間

東北大学多元物質科学研究所助手 渡 邊 昇

(前 分子スケールナノサイエンスセンター先導分子科学研究部門助手)

平成15年4月からの流動部門での任期を終え、この4月1日より東北大学へと戻り研究生活を再開しました。分子研を離れてからすでに数ヶ月が過ぎ、岡崎での生活を懐かしく思い返しています。

流動部門での二年間の期間中には大学の法人化という大きな変革がありました。この変革により、一時は任期半ばの一年間で東北大学へと戻るということにもなりかねない状況でした。もしそうになっていたら、装置の立ち上げを終えようやく軌道に乗り始めた実験を一旦ストップすることになってしまい、我々の研究にとって大きな痛手となっていた筈です。しかしながら、前所長の茅幸二先生、現所長の中村宏樹先生をはじめ多くの方々のご尽力のおかげで、無事分子研での二年間の研究活動を送ることができました。その際には分子研、東北大学の両事務の方々には大変な負担をおかけすることになってしまいました。流動部門へと就任する場合、送り出す大学から分子研へ完全に籍を移すのですが、法人化に伴いポストを大学へと戻すことになりました。このため、東北大学に籍を置きながら分子研で研究活動をするという微妙な立場となったわけです。それにも関わらず研究に専念することができたのは、事務の方々の様々なサポートにより煩雑な事務手続きから開放された点が大きかったと思います。これ以外にも多くの方々のお力添えがあり、分子研での研究活動を実り多きものとすることができました。

また、研究以外でも岡崎での生活を楽しませていただきました。特に印象に残っているのが、サンガリアの村井博店長に連れて行っていただいた浜名湖での釣りです。グループリーダーの高橋正彦助教授

とIMS フェローのユーガル カユリアさん、そして私と全三人からなる研究室メンバー総出で、村井店長の指導の下まだか釣りへとチャレンジしました。しかし、村井師匠の弟子(?)であり、長年の釣り経験のある高橋さんはともかく、私とユーガルさんは完全な素人。針を湖底の地面に引っ掛けて大物が釣れたと勘違いするは(“地球が釣れた”と言うそうです)、借り物の竿を折ってしまうはで散々でした。(ちなみに竿を折ったのは私です。しかも二本も。)それでも、広い湖の真ん中までボートを出し、風に吹かれながら釣り糸を垂れるのはまた格別の気分で、大変楽しませていただきました。また、翌日の釣った魚をつまみにして開いたパーティーも良い思い出です。このように岡崎での二年間は、公私にわたり大変充実したものとなりました。

最後になりますが、分子研で研究を行うに当たって、宇理須先生をはじめとする宇理須研究室の皆さん、秘書の佐々木さん、そして吉田さんや水谷さんをはじめとする装置開発室の皆さんなど多くの方々に大変お世話になりました。この場をお借りしてお礼を申し上げたいと思います。今後ともよろしくお願い申し上げます。



分子研での研究生活

孫為銀 (Wei-Yin Sun)

南京大学配位化学研究所、配位化学国家重点実験室

私が昨年11月1日より外国人研究職員（客員教授）として分子科学研究所に滞在しています。所属は極端紫外研究部門になっていますが、実際には錯体化学実験施設錯体物性研究部門の川口グループで金属錯体を用いた光学活性な多孔性物質の設計と合成に関する研究を行っています。当初、今年の10月31日まで1年間の滞在する予定でしたが、私の本国での仕事の関係で途中3月－5月帰国し、また滞在時期も8月31日までと短縮してもらいました。川口先生と関係する方々に色々とお迷惑おかけしました、本当に申しわけございません。それでトータルで7ヶ月間分子研に滞在することになります。滞在中、川口グループの皆さんをはじめ分子研の方々に大変お世話になり、心よりお礼を申し上げます。

以前、学会などで何回か分子研に来たことがありましたが、いずれも短い期間でした。今回、比較的長い期間にわたって分子研で研究する、また岡崎で生活することができました。以前から分子研が研究するには非常に良いところであるとお聞きしましたが、今回の滞在でこれを実感しました。分子研が本当に良い環境に恵まれています。特に、山手地区では新しい研究施設をはじめ、各分野において優れた研究者が集まっています、また世界的にトップクラスの測定機器もそろっています、自由にのびのびと研究することができます。その上、わたしにとっては分子研に滞在中本国での仕事と離れ、会議などの雑用もありませんのでとにかく研究に専念することができますし、今行っている研究そしてこれから行いたい研究などについて考えることもできました。また、この間京都大学、大阪大学、九州大学などの

大学を訪ねていろんな先生方と交流することもできました。これらのことは私のこれからの研究に非常に役にたつと考えています。

最後に、家族も冬休み、夏休みを利用して一緒に岡崎に滞在しています。特に子供が以前日本での生活はまだ小さいころでしたのであまり印象に残っていないようです。今回、子供も岡崎での生活を楽しんでいます。

従って、私にとっても家族にとっても非常に有意義な滞在です。ありがとうございました。

My rise in Paradise

Pascal Lablanquie

Laboratoire LCP-MR, Paris

I had the wonderful chance to experience the warm hospitality of Professor Shigemasa and Doctor Hikosaka at UVSOR, to share their innovative experimental quests, join their discussions and plans, and most of all appreciate their Friendship. These 6 months fade away with the speed of an arrow. Arrived at the end of August 2004, I travelled through frightening typhoons, sunny rice fields, pale kouyou 紅葉 and the warm and cosy oshogatu お正月 down to the glittering shining winter core, ... then suddenly I had to leave as ume 梅 blossoms just popped up. I will always cherish the memory of this golden period of my life... but was it really real? Already in the plane back to France, this past adventure took the colour of a dream. How surprising, as I was feeling completely integrated and at home in UVSOR... may be life and human relationships are so different compared to Paris, that it seems to be 2 different and almost disjoint universes.

One of my strongest first impression was the small number of permanent people in UVSOR and the serious and enormous work everybody did. Up to the point of devoting entirely oneself to the laboratory, and abandoning vacation, which is something absolutely impossible for an individualistic, 'lazy' French. And yet, this hard work is done in a very relaxed and stimulating atmosphere, as if being at home in the lab. One of you told me then 'here is paradise' and I really came to agree.

First of all the liberty that is offered here in one's work is a wonderful treasure. Of course a visiting scientist is in a very privileged position, being free of any administrative charge and able to devote himself to his research only.

But I think there is something more in UVSOR and more generally in IMS: huge means are offered to the researchers to develop their theme in full liberty. How important it is to preserve this whereas the tendency, at least in France, is now to favour fashionable subjects, demand for fast success and quick results! Credit must be given to the wise Japanese research management. I must also say how I admire the choice that has been done to renovate the in-house synchrotron radiation facility into UVSOR-II. In France, the opposite choice was preferred, and the 15 year old Super ACO facility was shut down in order to put all efforts in the new 'SOLEIL' machine. But on such a 3rd generation machine, competition is severe, experiment time is scarce and it will be impossible to take time to develop and test innovative experiments. This is still possible in Japan, thanks to the in-house synchrotron UVSOR-II.

My scientific passion goes to multi-electron processes in isolated atoms and molecules. Thanks to the easy access to beam time, I could join experiments of the group, use Professor K. Ito's apparatus to explore coincidence Auger spectroscopy and get acquainted with the tricks of the powerful new undulator beam line BL3U. But the more important: thanks to everybody in the laboratory I felt at home, certainly more than in my former and now defunct laboratory LURE in France, too big and diverse. I will never forget the Friday evening wine lessons (you can find much better French wine in Japan than in France!), the warm discussions and kind 'taquineries' (sorry I cannot find the proper translation of this word in English nor



Japanese) of my colleagues, and the many discoveries in this fascinating country: the koromo maturi in Toyota, the Konomiya hadaka maturi, the rich kabuki performances in Nagoya, Osaka and Tokyo (a lucky time with two shumei 襲名：市川海老蔵 and 中村勘三郎), ... Japan keeps uncountable marvellous surprises at each corner!

米国化学会 E. Bright Wilson 賞
文部科学大臣表彰若手科学者賞
日本化学会化学技術有功賞
日本薬学会奨励賞
レーザー学会進歩賞
原子衝突研究協会若手奨励賞
第24回表面科学講演大会講演奨励賞（若手研究者部門）
WATOC2005 ポスター賞

廣田榮治
小澤岳昌
堀米利夫
山田陽一
齊川次郎、佐藤庸一、平等拓範、池末明生
樋山みやび
手老龍吾
石村和也

廣田榮治名誉教授に E. Bright Wilson 賞

このたび、廣田榮治名誉教授が2005年度のアメリカ化学会 E. Bright Wilson Award in Spectroscopy を受賞された。本賞は、L. Pauling との共著 “Introduction to Quantum Mechanics” で名高い E. Bright Wilson, Jr. の業績を記念して1994年に設立され、化学の分野において分光学の基礎もしくは応用の面で顕著な業績を挙げた個人に贈られるものである。廣田先生の受賞は、高分解能分光学における卓越した貢献、特に、フリーラジカルおよび分子イオンの検出ならびに同定による化学反応機構の解明に対するものであり、北米大陸以外で行われた研究としては初めての快挙である。その業績の大部分は、先生が分子科学研究所在任中に、ご自身のグループを率いて成し遂げられたものであり、先生が築かれた基盤の上に研究を進めている分子研在籍者として、心よりお祝い申し上げたい。

廣田先生は、1930年大阪生まれ、1953年東京大学理学部化学科ご卒業、同大学院進学、1958年修了とともに助手に任用され、講師、助教授を経て、1968年に理学部教授として九州大学に移られた。この間1960-62年には、Harvard 大学の上記 Wilson 教授の研究室に博士研究員として滞在

されている。その後、1975年の分子科学研究所の創設とともに分子構造研究系分子構造学第一研究部門の教授に着任された。1990年からは総合研究大学院大学副学長、1995年より6年間は同学長の要職を歴任され、設立期の総研大の運営にご尽力された。また、1999-2001年には日本分光学会の会長を務められている。今回の受賞以外にも、仁科記念賞（1978年）、日本化学会賞（1987年）、日本学士院賞（1992年）など、国内外の数々の賞を受けられている。

廣田先生が高分解能分光に取り組まれたのは、森野米三教授のもとでマイクロ波分光器を自作された大学院時代にさかのぼる。以来、分子構造の精密決定、回転異性体や内部回転運動の研究、部分的に重水素化した無極性分子（エタンなど）の回転遷移の観測、等を精力的に進められた。さらに、アメリカから帰国後は、留学中より暖められてきた計画である、フリーラジカルなどの反応中間体のマイクロ波分光に着手された。様々な試行錯誤の後に SO, ClO, NCO のような基本的なラジカルの観測に成功されたが、なかでも ClO は、成層圏でのオゾン破壊のカギとなる分子であり、実験室におけるマイクロ波遷移の測定は大気中でのモニターにとって不可欠なものである。

分子科学研究所に移られた際には、フリーラジカルや分子イオンの分光およびダイナミクス研究を

アメリカ化学会(本年3月に San Diego で開催)の授賞式に出席された廣田先生ご夫妻。お隣は、P. Debye 賞を受賞した California 大学 Berkeley 校の S. Leone 教授ご夫妻(天竺堯義氏撮影)。



中心的なテーマと定められ、研究室のスタッフとともに新たな展開を図られた。化学反応の途中で現れるこれらの中間体を直接検出し、構造や電子状態について詳細な情報を得ることの重要性は論を待たない。実験的な研究の上では、その高い反応性ゆえに極めて低密度にしか存在しえないことが障害となる。そのために、分光学的には、高い検出感度を有する紫外・可視領域での電子遷移の観測がもっぱら行われてきた。しかし、観測可能な波長領域に電子遷移を有しない場合や、前期解離などによって吸収線幅が広がるために引き出せる情報が限られる場合も多い。そこで、廣田先生は、多原子分子であれば必ず赤外活性な振動遷移を有すること、極性分子であれば必ず回転遷移が観測できることに着目し、赤外およびマイクロ波領域の高分解能分光を主要な手段とされた。紫外・可視分光と比較して、より長波長の電磁波を利用するこれらの分光法は本質的に吸収が弱く、また光源や検出器の性能面でも不利であった。廣田研究室では、赤外領域においては、その当時ようやく利用可能になった波長可変半導体レーザーの導入、回転遷移に対しては、マイクロ波より短波長な領域(ミリ波・サブミリ波帯)での分光装置の開発によって、従来とは桁違いの検出感度を実現させた。さらに、生成法にも様々な工夫を加え、有機ラジカルのプロトタイプであるメチル、ビニル、アリル、メトキシ、ピノキシなど、さらに、プラズマや星間空間などにおける基本的な反応中間体である SiH_3 、 H_2D^+ 、 FHF^- などを次々に検出し、その詳細な構造を明らかにした。また、高分解能分光法によって量子準位を選別して観測しつつ反応を追跡す

ることにより、各種分子の光解離ダイナミックスや有機分子の酸化過程について全く新しい実験情報を提供することに成功した。このように、廣田研究室は、高分解能分光研究における一大センターであったと言って過言ではなく、創設期の分子研が世界的研究拠点としての地位を確立するのに大きく貢献された。

廣田先生の研究スタイルをして、ご出身である旧制一高伝統の「正門主義」と評された方がいらしたが、まさに至言であろう。如何に困難であろうとも、それが本質的に重要な研究対象であるならば、正面から果敢に挑戦されていく。アメリカ留学時代に訪問された幾つかの研究室では、「フリーラジカルのマイクロ波分光は実現不可能」と聞かされたそうであるが、それにも関わらず(いやそれだからこそ)全力をもって取り組まれ、新しい実り多き研究分野を切り拓かれた。現在分子研で研究を進めているものとして、幾ばくかでも近づけるように精進せねばと思う次第である。

廣田先生は総研大の学長を退かれてのちも、共同研究者とともに実際にスペクトルの解析を進めておられ、また、学会や研究会の席で、厳しくも暖かいコメントを述べられることもしばしばである。これからも、従来に変わらぬご助言と叱咤激励をお願いするとともに、ますますのご健勝をお祈りしてお祝いの言葉としたい。

(大島康裕 記)

小澤岳昌助教授に 文部科学大臣表彰若手科学者賞

分子構造研究系 小澤岳昌助教授は、平成17年度文部科学大臣表彰若手科学者賞を受賞されました。心よりお祝い申し上げます。同賞は、文部科学省選考委員会において審査・決定され、萌芽的な研究、独創的視点に立った研究等、高度な研究開発能力を示す顕著な研究業績を挙げた若手研究者個人に授与されるものです。

現在、生命科学研究において、蛍光タンパク質（green fluorescent protein など）や発光タンパク質（luciferase など）は、細胞内で機能する生体分子やタンパク質の動態を光情報に変換する、重要な機能性分子です。従来、蛍光・発光タンパク質の利用は、それらを調べたいタンパク質に直接連結することによって行われていました。小澤博士の斬新なアイデアは、この蛍光・発光タンパク質にメスを入れて二分したり、またその二分したタンパク質を組み継ぐ反応——プロテインスプライシング——により再連結することによって、生きた細胞内で蛍光・発光の on/off スイッチが可能であることを実証したことにあります。更に、このタンパク質の切断と再構成に基づく光スイッチを利用して、細胞内の重要な現象を光信号として捉えることに成功したことが、今回高く評価されました。この蛍光・発光タンパク質の切断や再構成は、小澤博士が2000年に世界に先駆けて初めて示した成果であり、現在では protein reconstitution system（タンパク質再構成システム）

として世界の多くの研究室でその技術が応用され始めています。小澤博士自身もこれまでに、この蛍光・発光タンパク質の切断－再構成に基づいて、生きた細胞内でのタンパク質同士の相互作用や、タンパク質のリン酸化を検出するプローブ分子を開発しました。さらに、細胞内ミトコンドリアや小胞体に局在するタンパク質を網羅的に同定するプローブ分子や、生きたマウス個体内でのタンパク質の局所的な動きを低侵襲的に検出するプローブ分子等の開発に成功しました。

現在小澤博士は、生きた細胞内や動物個体内での遺伝子発現、タンパク質の動態、さらに酵素活性など様々な生体内現象を光検出するために、更に新たな研究を展開しています。生体内の重要な現象を、低侵襲的に時空間解析し、生体内分子の“真の姿”を検出する方法として、今後の展開が楽しみです。

（岡本裕巳 記）

堀米利夫氏に 日本化学会化学技術有功賞

堀米さんは、昭和55年5月に高エネルギー物理学研究所（現高エネルギー加速器研究機構）から岡崎国立共同研究機構分子科学研究所（現自然科学研究機構分子科学研究所）技術課に異動され、装置開発室所属後、技術課班長として UVSOR 施設（極端紫外光研究施設）所属となり、現在に至っている。UVSOR の技術職員全員をまとめる立場にあると

最近の“作品”（次世代軟X線発光分光器）の
最終調整に取り組まれている堀米さん

もに、研究所全体のために安全衛生管理室の一翼を担っている。

堀米さんは典型的な職人かたぎの人である。初対面の研究者にはとっつきにくい印象があるかも知れないが、一度、その実力と人柄を知ってしまうと離れられなくなる。最先端の加工・計測技術事情に精通し、機械加工の限界を知り尽くしている堀米さんの図面には深みがある。研究者は、その加工手順・組み立て方法を聞く段になって初めて、図面が語る“作品”の究極の機能美に胸を打たれる。このような卓越した技能は分子研の若い技術職員の憧れの的になっているばかりでなく、他大学からも協力を強く請われるほどである。事実、UVSOR 施設に移籍する前の3年間、北陸先端科学技術大学院大学技術室との技術者交流に貢献している。

今回の受賞で評価対象となった堀米さんの“作品”の多くは超高真空仕様の高度な機構である。地下に設置された小型放射光施設である UVSOR 施設では、装置を置く実験スペースに限りがあるという問題に加えて、本質的な問題として超高真空装置が要求される。超高真空は単なる真空ではない。真空壁面からの脱ガスを極限まで押さえるためには200℃～250℃まで真空槽の焼き出しをする必要があり、潤滑油などの有機物を真空槽内で使うことは厳禁である。大気中では考えられない厳しい条件の中で、光学素子を精密に駆動したり、試料を移送したりしなければならない。以下にその“作品”の例を三つほど挙げておく。

1. 超高真空仕様固体試料交換機構：自由度の少ない



超高真空内での移送時に問題となる試料の脱落を回避し、試料ホルダーへの確実な装着を可能とした。この簡便な機構は研究所内外の表面実験装置の多くに装備されている。

2. 超高真空仕様光学素子駆動機構：複合型斜入射分光器及び二結晶分光器の光学素子の精密駆動系の設計・製作に当たった。二結晶分光器の駆動系の特徴は一軸駆動で二つの結晶位置を制御する独特な機構にある。
3. 超高真空槽回転機構：難しいとされてきた超高真空を維持した状態での大口径の真空装置の回転を実現させた。これが先駆けとなって同種の実験装置が作られるようになった。

これは永年の経験がなければ生きていけない世界である。堀米さんは今日の不可能を明日には可能にする人である。その裏では休日でも机の前で設計に頭を悩ましている姿がある。堀米さんが我々と同じ研究の現場におられることで、研究者側もその高い技術力を生かす意識を絶えず持ち続けられる。世界的な競争の中で絶えず最新技術を導入して研究を進めなければならない UVSOR 施設にとって堀米さんの貢献度は計り知れない。UVSOR 施設長として、今後も堀米さんが我々と同じ研究の現場にいて下さるように配慮したいと思っている。

（小杉信博 記）

山田陽一助手に 日本薬学会奨励賞

分子スケールナノサイエンスセンター助手である山田陽一博士が、平成17年3月に平成17年度日本薬学会奨励賞を受賞した。同賞は、薬学の基礎および応用に関し、独創的な研究業績をあげつつあり、薬学の将来を担うことが期待される満38歳未満の研究者に授与されるものであり、受賞の研究対象になったのは「新しい固相触媒の開発とその有機合成反応への展開」である。

山田博士は、平成6年に東京大学薬学部を卒業後、東京大学大学院薬学系研究科へ進学し平成11年に博士号を取得した。帝京大学薬学部助手、米国スク립ス研究所リサーチアソシエートを経て、平成15年10月より分子科学研究所助手に着任し、現在に至る。この間、平成11年に有機合成化学協会研究企画賞、平成12年には井上研究奨励賞を受賞している。

山田博士は、新たな概念を基盤とした固相触媒の創製が学術的にも実用的観点からも重要であると考え、活性が高く、再利用可能な実用性のある新しいタイプの固相触媒の創製を研究課題としてきた。触媒活性部位となる金属分子と非架橋型両親媒性高分子配位子との自己集合により架橋型不溶性超分子錯体を生成させることにより、固相触媒の開発に成功した。その業績は、次のようなものが挙げられる。

1. リンタンングステン酸、四級アンモニウム塩を有する両親媒性高分子ポリ-N-イソプロピルアクリル

アミドから新規不溶性超分子錯体PWAAの創製に成功した。PWAAは固相触媒として過酸化水素水中でのアリルアルコールのエポキシ化、アミン、スルフィドの酸化に対し高い触媒活性を有し、再利用可能なことが明らかとなった。

2. ホスフィン配位子を有する非架橋型高分子とパラジウムより新規不溶性超分子錯体PdASを調製した。PdASを固相触媒として0.00005モル当量を用いた水中での鈴木宮浦反応では、10回の触媒の再利用に耐え、様々な基質に適用可能となった。この触媒は最高100万回以上触媒回転を実現し、反応溶媒として水、水-有機溶媒混合溶媒、無水有機溶媒いずれを用いても効率的に触媒反応が進行した。PdASは現在、東京化成工業にて市販されている。
3. PdASの改良型である触媒PdAS-Vの調製に成功し、この触媒を用いた溝呂木ーヘック反応の開発を行った。この場合も触媒の再利用、様々な基質へ適用され、最高100万回以上の触媒回転を実現した。この触媒も商品化の予定である。
4. この触媒構築法を不斉触媒系に適用し、ビナフトール骨格を有する非架橋型高分子とチタンからなる触媒TiSSを開発した。TiSSは不斉カルボニルエン反応における再利用可能な固相触媒であることを見出した。

現在、山田博士は固相触媒の開発から超分子科学への展開を目指しており、次のステップへの推進に努力している。今後の進展に期待したい。

(魚住泰広 記)



齊川次郎、佐藤庸一、平等拓範、池末明生氏にレーザー学会進歩賞

分子制御レーザー開発研究センター平等グループ所属の齊川次郎氏（現在、東京工業大学博士研究員）らが第324回研究会「高機能固体レーザーとその応用」において発表した講演に対してレーザー学会進歩賞が贈られました。心からお祝い申し上げます。講演タイトルは「超短パルス発振ディスオーダー Yb:Y₃ScAl₄O₁₂ セラミックレーザー (Short pulse generation in Yb:Y₃ScAl₄O₁₂ disordered ceramic laser)」です。

超短パルスレーザーの研究、応用の進展と共に、次世代の高出力・高効率レーザーとされる Yb:YAG からの超短パルス発生に関する議論が盛んになってきています。齊川氏らはこの講演で、焼結法で YAG に Sc を混ぜ組成比を制御することにより、超短パルス発生に有利となるよう利得幅拡大を図り、利得スペクトル形状設計も容易に実現できる事を実証したことを発表しました。これがレーザー光源製作に新たな展望を示したとして高く評価され、受賞につながりました。ディスオーダー系の材料は、均質化が困難とされていますが、これを焼結法により解決し、詳細な分光特性評価によるレーザーパラメータの決定と共振器設計を行い、モード同期実験によりセラミック材料としては最短のパルス幅 380fs を実証しました。同グループは、その後、励起条件、共振器の最適化により 280fs と Yb 添加 YAG 系のガーネット材料としても当時としては最短パルスを得る

事に成功しています (*Appl. Phys. Lett.*, **85** (24), 5845 (2004))。

セラミック YAG レーザーは、日本が世界に先駆け成功した固有技術であり、経済性、任意成型性などに優れています。このため大出力化、高機能化が可能になる等の理由により世界より注目を集めており、今後の研究のさらなる発展を期待したいと思います。

(松本吉泰 記)

樋山みやび助手に原子衝突研究協会若手奨励賞

樋山さんは現所長の中村先生のグループで総研大卒業後、最近までポスドク生活を続けており、イギリス留学時代に真空紫外領域の価電子励起・イオン化の研究手法に関して、多チャネル量子欠損 (MQDT) 法を R 行列法に結びつける研究を行った。帰国後、私の内殻の量子化学計算コードを拡張することで、軟 X 線領域の内殻電子励起・イオン化にも応用しようと、私との協力研究・課題研究に参加するようになった。その後、昨年 3 月から、私の研究グループの 2 年間の短期任用助手に着任し、次々、論文を発表し始めている。

R 行列法は電子状態理論をベースにした散乱理論なので、両理論を知っている樋山さんが得意とする領域の研究手法である。聞くところによると、ここ 1、2 年で始めた内殻領域への研究展開が原子衝突

研究協会のメンバーに注目され、内殻に関わる理論分野で若手として今後の活躍が期待されて今回の賞をいただくことになったとのことである。

この内殻電子に関わる研究分野は、理論的に未解決の現象や現在の実験技術では未だはっきりとは観測できていないが非常に重要な基礎過程など、奥が深く、実験家が要求する理論レベルにも非常に高いものがある。今後、若手奨励賞の期待に応えるべく、樋山さん自身の理論アプローチをもっとパワーアップしたものに、未解決の問題に深く切り込んでいただきたい。

(小杉信博 記)

手老龍吾技術職員に 第24回表面科学講演大会 講演奨励賞（若手研究者部門）

反応動力学研究部門の手老龍吾技術職員が、第24回表面科学講演大会（2004年11月8～11日・早稲田大）において講演奨励賞・若手研究者部門を受賞しました。対象となった講演のタイトルは「 SiO_2 表面へのアビジン単分子層作製と脂質膜形成への応用」です。

手老技術職員は2003年に着任後、脂質膜やタンパク質などの生体物質でシリコン酸化物表面を修飾し、原子間力顕微鏡（AFM）や赤外反射吸収分光（IRRAS）を用いて評価する研究を行ってきました。当グループでは膜タンパクバイオセンサーの開発を進めており、膜タンパク／脂質二重膜の集積構造を

シリコン基板表面上に形成する上で、これらの研究は極めて重要です。特にリン脂質二重膜の形成や水中 AFM 観察については当グループに全く経験が無いところから実験系や装置の立ち上げを行ってくれました。その成果が表面科学会で評価され今回の受賞につながったことをとても嬉しく思っています。アビジンは糖タンパク質の1つで、ビオチン分子との間に強いタンパク質ーリガンド結合を形成します。受賞対象となった講演では、原子レベルの平坦さを持った SiO_2/Si 表面を $-\text{COOH}$ で化学修飾し、この $-\text{COOH}$ 基との共有結合反応で SiO_2 表面上に固定化したアビジンの単分子層について、ビオチン修飾した探針で水中 AFM 観察を行い、トポグラフィ像と引力マッピングを同時測定することでアビジン1分子ずつについてビオチン結合能が保たれていることを明らかにしました。また、ビオチンラベルしたリン脂質分子を用いて「繋ぎ止め脂質二重膜（Tethered supported membrane）」をベシクル展開法（vesicle fusion）により作製しました。

この繋ぎ止め脂質二重膜構造では、脂質二重膜と基板との間に5 nm ほどの厚い水の層が存在することから、膜タンパクを基板との相互作用から切り離して基板上に固定できるため、生体分子による固体表面修飾の基礎技術として非常に重要で、様々な系への応用が期待されます。また、現在は表面機能を積極的に活用して脂質膜の物性をコントロールする研究も進めているところで、今後の発展が楽しみです。

(宇理須恒雄 記)



石村和也技術職員に WATOC2005 ポスター賞

理論分子科学研究系の石村和也技術職員が2005年1月に南アフリカのケープタウンで開催された理論化学分野の最も代表的な国際会議である WATOC (World Association of Theoretically Oriented Chemists) で「A new parallel second-order Møller-Plesset algorithm」というタイトルでポスター賞を受賞した。このポスターは殆どが数式で書かれたものであり、数百のポスターからまさに研究内容で評価選抜されて受賞されたものであることを強調したい。

現在、大きな分子の計算には密度汎関数法が主流となり幅広く使われているが、ホスト-ゲスト相互作用、分子認識、自己集合等で重要な役割をする弱い非共有結合相互作用をうまく取り扱えないという致命的な欠点がある。これとは対照的に、簡便に電子相関を取り込める分子軌道法の代表である MP2 (second-order Møller-Plesset perturbation) 法は非共有結合相互作用を取り扱えるが、分子が巨大になると計算時間が急激に増大してしまうという問題がある。このために、計算負荷を軽減するための幾つかの便宜法がこれまでに提案されてきているが、いずれも計算精度に任意性があるばかりでなくどのような分子にも広く適用できない。石村技術職員は、便宜的な方法をいっさい用いることなく、MP2 計算を高速に実行できる新しい並列計算アルゴリズムを開発してプログラム化した。このプログラムによる MP2 計算は最高速で、ナノサイズ分子の精度高い量子化

学計算の適用範囲を大きく広げたという意義がある。また、動的な負荷分散による並列化を行っているため、効率的なグリッド計算も可能である。

これらの成果は、方法論の原点に立ち返り基礎から計算アルゴリズムとプログラムを開拓するという考えのもとに得られたものである。現在は、エネルギー計算ばかりでなくエネルギー微分などへの展開を行っている。今回の受賞を心からお祝いするとともに、今後のさらなる進展を期待したい。

(永瀬 茂 記)

物性化学研究部門（分子エネルギー変換研究部門）

Prof. TANATAR, Makariy

分子集団動力学研究部門（極端紫外光研究部門）

Prof. LONG, La-Sheng

分子制御レーザー開発研究センター（極端紫外光研究部門）

Prof. AKA, Gerard Philippe

分子基礎理論第三研究部門

Prof. LEE, Jin Yong

分子基礎理論第一研究部門（分子エネルギー変換研究部門）

Prof. WU, Yung-Dong

分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門（極端紫外光研究部門）

荒木幸一 助教授

Prof. TANATAR, Makariy

平成17年の2月1日から1年間の予定で、Makariy A. Tanatar 先生に分子集団研究系物性化学研究部門の外国人客員教授として来ていただいています。とても大きな方で、小さい私と一緒に歩くと特に大きく感じられると思います。サングリアで食事をしている「デコボココンビ」を見かけられた方も多いのではないのでしょうか。

Tanatar 先生は本国ウクライナ国立アカデミー・Institute of Surface Chemistry の Senior Research Scientist ですが、研究環境の問題もあって最近の10年間の主な期間をポーランド・日本・カナダと本国を離れて研究活動をされています。なかでも、日本での滞在は延べ5年以上と大変な日本通です。日本慣れされているので、来所していただくのも簡単であろうと高をくくっていたのですが、着任するまでの手続きに関しましては、いろいろと苦労がありました。ご存じのように、岡崎の3研究所は昨年12月20日に構造改革特別区域（いわゆる特区）に認定され、外国人研究員の入国事務手続き（ビザ取得

等）が簡素化されました。Tanatar 先生は岡崎でその最初の適用で、また直前まで東京大学（こちらも特区）の客員をされていて、特区から特区への異動の場合にはビザは取り直すのか？ 変更で良いのか？ 必要な書類は？ と、統合事務センターの村木さん・受付の外国人担当である加茂さんには、入管などあちこちに問い合わせ頂いたり大変迷惑を掛けました。この場を借りてお詫びとお礼を申し上げます。

Tanatar 先生は物性物理学者で、有機導体を中心に酸化物高温超伝導や重い電子系の超伝導体に対して輸送現象（熱伝導度、ゼーベック効果、ホール効果）測定の見点から、超伝導生成機構にせまるという、いわゆる固体電子物性研究のメインストリームで活躍されています。種々の物質に関して豊富な知識を持っていられるので、分子集団系のみならず、他の系の研究者の方々とも活発な議論をしていくことを望んでいます。また、Tanatar 先生は極低温実験のエキスパートでもあり、希釈冷凍機を用いた実験を得意とされています。実験面でも技術面での情報交換が為されればと期待しています。

一方で、Tanatar 先生はご自分の研究フィールド開拓にも非常に意欲的で、我々が得意としている磁気



共鳴測定にも強い関心も持たれています。超伝導体近傍絶縁相に位置する有機導体や種々の機能性物質に対して、すでに分子研の ESR 分光器を用いて測定を開始されています。また、近いうちに固体広幅 NMR 測定にも参加してもらう予定にしています。

さきに述べましたように、Tanatar 先生は日本の延べ滞在期間が長く、特に京大で長く過ごされました。大変な日本通で、日本酒も熱燗でも飲まれたりします。ただ、最近の焼酎ブームは理解できないと私と意見が一致しています。大浴場が大好きだそうで、南公園の近くにある健康ランドまで歩いていったという強者です。ただし帰りはタクシーで帰ってきたそうです。大変なサッカーファンで、日本のチームの成績も平均的な日本人よりもよく知っていたりします。私も長く京都に居りましたし、同じ物性化学の薬師先生のところに居られる Olga さんも京都在住が長かったので、3 人だと京都（特に百万遍界隈の）談義では花が咲きます。

物理にはとても厳しい先生ですが、性格はとても温和で、いつも満面の笑みで歩いていらっしゃいます。どうぞ気軽に声を掛けていただき、科学の話でもあるいは岡崎談義でもしていただければと思います。

（中村敏和 記）

Prof. LONG, La-Sheng

La-Sheng Long さんは外国人研究職員（客員助教授）として、平成 17 年 4 月 27 日から 1 年間の予

定で、分子集団系に滞在される予定です。当初は 5 月 1 日に来日の予定でしたので、春の連休シーズンが始まった直後に来日されては研究室としては対応がしにくいと多少心配しましたが、連休シーズンが始まる前に予定を繰り上げて来られたのは受け入れ側としては有り難い事でした。Long さんは平成 14 年にやはり客員助教授で 1 年間滞在された北京大学の Zheming Wang さんの友人ですが、私自身は Wang さんに紹介されるまでは知りませんでした。Long さんは現在 42 歳で、廈門大学の助教授です。研究対象としては超分子化学、水素結合クラスター化合物の合成と結晶構造、キラル配位化合物の合成と結晶成長などが興味の中心のようです。結晶学や無機構造化学の分野ではかなり注目されているようで、来日早々一度に沢山の論文査読の要請が非常にレベルの高いジャーナルから届けられてなかなか大変のようです。今、中国の化学研究は急速にレベルアップされつつあり、良かれ悪しかれ、若い化学者は流行的なトピックスを追い、所謂インパクトファクターの大きなジャーナルを目指す傾向が極めて強いように感ぜられますが、Long さんのゆったりした容貌と謙虚な態度を見ていると中国の裾野はやはり広い……と、感心させられます。廈門大学では教育の義務が大きく、研究時間がそれ程とれないと間接的に聞いているので、分子研の 1 年間、思い切って研究に専念し、沢山の成果を出して帰国されることを希望しています。私の研究室も最近水素結合系やクラスター化合物の示す電子物性に興味を持っていますので、帰国されるまでに共同でおもしろい物質を見いだすことが出来るのではないかと、今から楽し

みにしている処です。

(小林速男 記)

Prof. AKA, Gerard Philippe

Aka, Gerard Philippe 教授の御経歴をざっと紹介する。1979年9月：アビジャン大学 数学物理
バカロレア取得 1979年9月～1982年6月：アビジャン大学 物理化学学科 学士課程修了（1982年6月学士号取得） 1982年9月～1983年6月：アビジャン大学 物理化学専攻 修士課程 在学 1983年9月～1985年6月：パリ第6大学 物理学部 修士課程修了（1985年6月修士号取得） 1985年9月～1988年6月：パリ第6大学 物理学部 博士課程修了（1988年7月博士号取得） 2000年12月：ピエール&マリー・キュリー大学（パリ第6大学）

研究指導資格取得（Diploma of Enabling of Directing Research）以降の職歴としては 1988年9月～1989年9月：カリフォルニア大学・博士研究員 1989年10月～1990年9月：アビジャン大学・講師 1990年10月～2001年8月：ENSCP(ECOLE NATIONAL SUPERIEURE DE CHIMIE DE PARIS) 助教授 2001年9月～2004年8月：ENSCP・教授（セカンドクラス） 2004年9月～現在：ENSCP・教授（ファーストクラス）、構造物性学科長これまで主として、結晶育成に携わってこられました。教授は、機能性非線形

光学材料として注目されている YCOB、GdCOB 材料を最初に発明された事でも有名です。1996年の Advanced Solid-State Lasers（米光学会 Optical Society of America 主催の固体レーザーに特化した国際会議）において、Aka 教授は YCOB、GdCOB に関する最初の発表を行いました。それを受け、日本では大阪大学の佐々木教授が両者を混合する事で、非臨界位相整合波長を設計できるとの着想を、また、米国中央フロリダ大学の B. Chai 教授は、Yb などの希土類を混入させた Self-doubling 材料の着想を得られました。以降、COB 系の材料で多くのレーザーや非線形波長変換の研究が為される事となった訳です。思い起こせば、1996年にサンフランシスコで開催された国際会議が Aka 教授との最初の出会いです。それとは別に、ルーマニアの V. Lupei 教授と Aka 教授はレーザー材料分光屋と材料育成屋との関係より親交があり、2000年に Lupei 教授をお招きした事がきっかけで Aka 教授とも親しくなり、今回、数ヶ月の招聘をお願いする事となりました。残念ながら、3ヶ月の期間は短く、この記事に依頼される前に帰国されてしまいました。しかし、分子研での研究生活は非常に刺激的だったらしく、今後頻繁に来日されるとの事です。その折りは、ぜひ声をかけてあげてください。

(平等拓範 記)

Prof. LEE, Jin Yong

Lee 教授は日韓科学交流協定に基づく招聘研究者



としてこの6月23日から2ヶ月間、また、この冬に2ヶ月間、分子研理論分子科学研究系に滞在される予定です。この間、平田グループとの間で「溶液内分子の電子状態、構造および化学反応」の問題に関して共同研究を行うことになっています。

Lee 教授は昔の Gaya 王朝の主都だった Koryoung で幼少を過ごし、その後、Daegu に移り住んで小学校、中学校、高等学校を卒業しました。その後、Pohang 工科大学および大学院に進み、そこで、私の古くからの友人である Kwang-Soo Kim 教授の指導の下で学位を取得しています。Kim 教授はもともと量子化学の理論家ですから、Lee 教授もそのベースは量子化学ですが、彼の場合、少し違ったキャリアを歩んでいます。Lee 教授は学位取得後、カリフォルニア大学（バークレー）の D. Chandler 教授の下で博士研究員として働き、そこで、化学反応における活性化障壁通過の問題に分子動力学法やモンテカルロ法を適用し、また、ロチェスター大学で Mukamel 教授と協力して、2光子吸収や電子遷移の理論的研究を行っています。

Lee 教授が育ったところは昔の新羅があった所、また、現在勤めている大学（Chonnam 大学）は昔の任那があった所（現在の光州）で、これらの地方は互いに長年抗争を繰り返してきたところだそうです。このため、赴任前は少し心配だったそうですが、光州に赴任するととても人情が厚いところで、とても住み易いと説明してくれました。

今、日本は韓流ブームで沸き返っていますが、Lee 教授もとても人当たりが柔らかく、韓国の男性が日本の女性に人気があるのはむべなるかなと一人

納得しているこのごろです。

（平田文男 記）

Prof. WU, Yung-Dong

Wu 教授は1957年生まれで、1986年にピッツバーグ大学（米国）で学位を取られた後、UCLA（米国）、エルランゲン大学（ドイツ）を経て、1995年に香港科術大学の助教授に就任され2001年から教授をされています。2000年に計算科学の国際ワークショップを Wu 教授が主催されたときに招待を受けましたが、香港科術大学は港を見下ろす非常に美しい位置にあります。

Wu 教授これまで一貫して、精度ある量子化学的手法を駆使して、様々な有機反応や生体反応の反応機構と立体選択的反応の詳細を理論的観点から明らかにしてきている応用量子化学分野の第一人者である。2001年に国際会議「理論化学の最前線」を分子科学研究所で開催した時に招待講演者として来られたことがあります。今回は3ヶ月間滞在されます。研究課題として計画している（1）遷移金属触媒によるアルケン、アルキン、カルボニル化合物のハイドロシリレーションの反応機構と立体化学の理論的解明や、（2）付加反応の立体選択性を高度に制御する新規な遷移金属触媒の理論設計は、最近の課題である、理論と計算に先導されたナノ触媒の設計と反応制御の実現を推進することが期待されますので、来日を楽しみにしています。

国際会議でしばしば会う機会がありますが、人柄は非常に明るくフランクな方でアルコールが入るとますます明るくなり話が弾みます。また、バスケットボールや水泳が好きなスポーツ家です。中国の幾つかの大学の客員教授をされていますが、最近では北京大学の理論化学を強化するために併任教授として香港と北京を行き来されています。アジア地域の理論化学と計算化学を推進するために、APACTC(Asian Pacific Conference of Theoretical & Computation Chemistry)を創設して、第1回目が2004年に岡崎で、第2回目が2005年にバンコクで開催してきましたが、今回はWu教授が主催者として中国で開催することが決まっています。

(永瀬 茂 記)

荒木 幸一 助教授

荒木幸一先生は、日系ブラジル人でサンパウロ大学化学研究所の助教授です。専門は、錯体化学・電気化学で、様々なポルフィリン誘導体を用いた触媒の研究を中心に数多くの興味深い論文を発表されています。



荒木さんは、1963年生まれで、1989年サ

ンパウロ大学の博士課程在学中に助手に採用され、2001年に助教授に昇進されました。その間、アメリカのカリフォルニア工科大学(CALTEC, 1990～1991)とマサチューセッツ工科大学(MIT, 1995～1996)で訪問研究員として研究をされています。私もMITの同じ研究室にほぼ同時期におり、その縁でいろいろな共同研究をさせて頂くようになりました。母国語はポルトガル語ですが日本語もほぼ完璧に話され、私がMITで初めて出会って1週間ほどの間は、彼のことをてっきり日本から来た日本人だと思いこんでいたほどです。

その後、2003～2004年に科学技術振興事業団のプロジェクトで、分子研の特別訪問研究員として滞在して頂きました。穏やかでいながら意志が強く、謙虚で有りながら必要な主張は断固として行う彼のことを、「古き良き日本人」と言う人がたくさんおられます。私も全く同感で、一度ブラジルを訪問しましたがそうした日系人の方が多くおられて「ああ、良い意味での昔の日本人はブラジルに保存されているんだ」と思いました。前回の分子研滞在中に荒木先生と出会ってその人柄に惹かれた方も多いのではないのでしょうか。卓球の腕前もかなりなもので、素人では全くかないません。

2005年11月から2006年1月の3ヶ月間、今度は分子研の外国人客員研究職員として来て頂くことになりました。短い間ですが、多くの方に荒木さんの魅力を知って頂ければと思います。

(小川琢治 記)



か い のり こ
甲 斐 憲 子

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 技術支援員

平成17年2月より佃達哉助教授のグループでお世話になっております。しばらく勤労生活から離れていたのが不安もありましたが、幸いにして周囲の方々に恵まれ、楽しい日々を過ごさせて頂いております。この場をお借りしてお礼を申し上げたいと思います。ありがとうございます。またこれからも色々ご迷惑をおかけすることなどあるかとは思いますが、どうか宜しくお願いします。



お ざわ たけ あき
小 澤 岳 昌

分子構造研究系分子動力学研究部門 助教授

平成10年東京大学大学院理学系研究科博士課程を修了したのち、同研究科の助手、講師を経て、この4月に着任しました。専門は生体分析化学です。生命は多くの謎につつまれていますが、その謎を解き明かす elegant な methodology に興味をもち、研究に取り組んでいます。どうぞよろしくお願いいたします。



は せ がわ ひろ かず
長谷川 宗 良

電子構造研究系電子状態動力学研究部門 助手

平成14年3月に東京大学大学院理学系研究科博士課程修了。同研究科化学専攻学術研究支援員、理化学研究所基礎科学特別研究員を経て、4月に大島グループに着任しました。超短パルスレーザーによる強光子場中の分子、高強度軟X線高調波による非線形現象の研究を行ってきました。分子研では光による分子配向・配列、構造変化を様々な光を駆使し調べたいと思います。宜しくお願いします。



ささ かわ ひろ あき
笹 川 拡 明

分子スケールナノサイエンスセンター先導分子科学研究部門 助手

神戸大学自然科学研究科博士後期課程修了後、科学技術振興事業団グループメンバー、名古屋市立大学研究員を経て、4月から分子研の助手として赴任してまいりました。専門はNMR分光法による構造生物学です。分子研の恵まれた研究環境の下、頑張っていきたいと考えておりますので、どうぞよろしくお願いいたします。





ふじ わら もと やす
藤 原 基 靖

技術課六班（ナノサイエンス技術班）ナノサイエンス技術二係 係員

平成17年3月に岡山大学大学院自然科学研究科博士後期課程を修了し、同年4月から分子スケールナノサイエンスセンターの技術職員としてお世話になっております。ESR、SQUID、X線回折装置等の管理を行っております。まだまだ力不足ではありますが、ひとつでも多くの技術や知識を吸収し、皆さまのお役に立てるよう日々努めて参りたいと思っております。よろしくお願い致します。



なか の みち こ
中 野 路 子

技術課六班（ナノサイエンス技術班）ナノサイエンス技術二係 係員

名古屋市立大学大学院薬学研究科博士前期課程を修了し、4月から分子スケールナノサイエンスセンターの技術職員としてお世話になっております。920MHz NMRを含むNMR装置を担当いたします。いたらないところも多いかと思いますが、さまざまな研究者の方々との交流を通じて、NMRに関しても人としても一步一步成長していきたいと思っております。よろしくお願い致します。



ふち ざき かず ひろ
淵 崎 員 弘

理論分子科学研究系分子基礎理論第四研究部門 客員教授

日本原子力研究所、九州大学を経て現在愛媛大学に在籍しております。愛媛大学では法人化準備委員としてかなりの時間をその業務に費やしました。今回の客員はリハビリの機会だと思っています。前世紀末から分子系の圧力誘起非晶質化現象に興味を持ち、内部自由度を有する系を理論的に扱っていますが、まだまだ「分子」の感触が分かりません。趣味は水泳、猫が大好きです。どうかよろしくお願いします。



こ まつざき たみ き
小松崎 民 樹

理論分子科学研究系分子基礎理論第四研究部門 客員助教授

総合研究大学院大学で博士号を取得後、基礎化学研究所（現京都大学福井謙一記念研究センター）研究員、日本学術振興会特別研究員、シカゴ大学化学科 Research Associate を経て、1999年7月より神戸大学理学部に勤務しています。現在、化学反応動力学の相空間構造と統計性 vs 選択性、「揺らぎ」と「機能」の関係、個と全体の自律的境界生成という視点から、複雑系化学反応を統一的に理解したいと考えています。毎日、深夜に渡って、同年代の人々と研究から人生論について激論を交わすことができた懐かしの分子研理論研究系に2005年4月から1年の予定で客員として戻ってきました。どうぞよろしくお願いします。



てら じま まさ ひで
寺 嶋 正 秀

分子構造研究系分子構造学第二研究部門 客員教授

昭和61年京都大学理学研究科博士課程を途中退学した後、東北大学理学部の助手、平成2年京都大学理学部講師、平成5年助教授を経て、平成13年京都大学理学研究科教授に着任。最近、新しい測定法を開発しながら、生体たんぱく質の化学反応機構解明に取り組み、その見事な働きに感銘を受けています。よろしくお願いします。



こ じま のり みち
小 島 憲 道

分子集団研究系分子集団研究部門 客員教授

京都大学大学院理学研究科で学位取得後、NHK放送科学基礎研究所博士研究員、神戸常盤短期大学衛生技術科（専任講師）、京都大学理学部化学科（助手・助教授）を経て、東京大学大学院総合文化研究科に在籍しています。金属錯体を中心とした分子集合体を対象に、光・スピン・電荷の相乗効果による新規物性現象の開拓に取り組んでいます。



かわ もと あつ し
河 本 充 司

分子集団研究系分子集団研究部門 客員助教授

今年から、分子集団研究系客員助教授になりました北海道大学の河本充司です。分子研には、10年ぐらい前までは頻繁に来ていました。機能性材料の物性発現のメカニズムを電荷とスピンのダイナミクスから追っています。現在の研究の流行には逆行するかもしれませんが新規物質を追求する方向ではなく、確立された物質群を新たな切り口で眺めミクロスコピックな測定法であとの時代に足がかりとなるような成果を残せたらと考えています。



はら とおる
原 徹

極端紫外光研究施設 客員助教授

パリ第11大学で学位取得後、1995年から理化学研究所播磨研究所に在籍しSPring-8挿入光源の開発を行っています。博士課程の時、蓄積リングFEL（自由電子レーザー）の研究を行っていた縁で、UVSORにも何度か伺う機会がありました。現在は、X線FELの開発研究に携わっています。UVSORを用いた、新しい放射光源の開発などを進めて行きたいと思っています。





いし い よう いち
石 井 洋 一

錯体化学実験施設配位結合研究部門 客員教授

1986年に東京大学大学院工学系研究科で学位を取得後、同研究科化学生命工学専攻助手、講師、助教授を経て、2002年4月より中央大学理工学部応用化学科教授として勤務しております。専門は有機金属化学で、現在はシアナミドや環状リン酸などの新しい配位子系を利用した多核錯体の設計、合成と反応性開発を中心に研究を行っています。どうぞよろしくお願い致します。



はやし たか し
林 高 史

錯体化学実験施設配位結合研究部門 客員教授

1990年京都大学大学院工学研究科博士後期課程を修了後、同大学助手、九州大学大学院工学研究院助教授を経て、本年4月に大阪大学大学院工学研究科応用化学専攻の教授として着任し、現在に至っています。専門は生物無機化学、生体関連化学、構造有機化学で、特にポルフィリン金属錯体やヘムタンパク質を扱い、新しい機能分子の開発を進めております。よろしくお願いいたします。



すみ もと みち のり
隅 本 倫 徳

理論分子科学研究系分子基礎理論第一研究部門 専門研究員

2003年に熊本大学大学院自然科学研究科にて理学博士の学位を取得し、京都大学21世紀COE博士研究員を経て、4月より永瀬グループで研究させて頂いております。これまでは有機金属錯体を用いた触媒反応の理論研究を行ってきました。周りの諸先輩方から色々な刺激を受け、恵まれた環境で研究生活を送ることができることに喜びを感じる毎日です。よろしくお願いいたします。



たか ぎ のぞみ
高 木 望

理論分子科学研究系分子基礎理論第一研究部門 専門研究員

立教大学理学部卒、東京都立大学大学院理学研究科博士課程修了。「何をいまさら……」と思われる方もいらっしゃると思いますが、これまでに特別共同利用研究員、日本学術振興会特別研究員（PD）として分子研内で密かに身分を変えつつ、今年度より産学官連携研究員として引き続き永瀬グループでお世話になっています。「周期表のすべての元素の化学」をテーマに、特に高周期元素の多重結合物の構造、物性、反応性などの理論予測および分子設計を、実験に先立って行っています。どうぞ、宜しくお願い致します。



くぼた よう じ
久保田 陽 二

理論分子科学研究系分子基礎理論第三研究部門 専門研究員

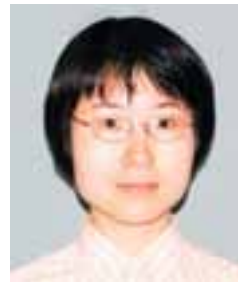
昨年まで九州大学で学生をしていました。この4月から分子研の研究員として研究しています。これまでは、光ファイバーなどにおける非線形パルスの散乱過程を研究していました。今後は、分子集合体における非線形光学応答の解析に取り組んでいきたいと思っています。どうぞよろしくお願いします。



ほり もと のり こ
堀 本 訓 子

分子構造研究系分子構造学第一研究部門 非常勤研究員

東京大学大学院理学系研究科博士課程修了。理学博士。理化学研究所基礎科学特別研究員、日本学術振興会特別研究員を経て、4月から岡本グループで研究させていただいています。現在、金のナノ粒子の光物性の研究を行っています。分子研は研究に適した環境だと日々感じています。どうぞよろしくお願いいたします。



みや ざき みつ ひこ
宮 崎 充 彦

電子構造研究系電子状態動力学研究部門 非常勤研究員

平成16年3月東北大学大学院理学研究科博士課程修了。京都大学COE 博士研究員を経て、平成17年4月より京都大学から引き続き大島グループで研究を行なっております。現在は強光子場中の気相分子の分光についての研究に取り組まっております。旅行に行くことなどを趣味としております。よろしくお願いいたします。



ほ さか こう いち
穂 坂 綱 一

電子構造研究系電子状態動力学研究部門 非常勤研究員

平成17年3月に東京大学大学院理学系研究科で博士課程を修了し、4月より大森グループで研究させて頂いております。修士課程では短パルスレーザー光源を、博士課程ではシンクロトロン放射光源を用いて、気相孤立分子の電離や解離ダイナミクスを研究して来ました。今後は光の位相に着目した分子ダイナミクスの研究を行います。どうぞよろしくお願いします。





まつ だ あき たか
松 田 晃 孝

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17年3月に東京工業大学大学院総合理工学研究科博士課程を修了、4月から菱川グループでお世話になっております。これまではレーザー誘起衝撃圧縮下における凝縮系物質の相転移ダイナミクスの研究を行ってきました。こちらでは強光子場中の分子ダイナミクスについて多くの方々と協力し研究してきたいと考えております。よろしくお願いいたします。



ESTACIO, Elmer

分子制御レーザー開発研究センター 非常勤研究員

I obtained my Ph.D. degree in Physics from the University of the Philippines in 2004, working on the high-speed properties of MBE-grown GaAs-based semiconductor materials and optoelectronic devices. I have just joined Associate Professor Nobuhiko Sarukura's group of the Laser Research Center for Molecular Science here at IMS. My current research work is on the THz radiation characteristics of semiconductor low-dimensional heterostructures such as quantum wells and quantum dots.



き むら つとむ
木 村 力

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 博士研究員

2005年3月岐阜大学大学院工学研究科博士後期課程修了後、4月より魚住グループでお世話になっております。専門はヘテロ原子化学です。現在は pincer complex に関する研究を行っています。素晴らしい研究環境のもと精一杯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。



おお たか あつし
大 高 敦

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 博士研究員

大阪大学大学院工学研究科分子化学専攻博士後期課程修了。工学博士。国立循環器病センター研究所 流動研究員を経て、4月より魚住グループで研究させて頂いております。大学では有機金属化学、循環器病センターでは医用工学の研究を行っていました。分子研では、水中での触媒反応に関する研究を行っています。バカが大好きです。宜しくお願いします。



まえ だ やす なり
前 多 泰 成

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 博士研究員

平成17年3月に京都大学大学院工学研究科博士課程を修了し、この4月から魚住泰広教授のもとでお世話になっております。遷移金属化合物を触媒とする有機合成化学に特に興味があり、現在は、新しいタイプの固体触媒の開発に取り組んでおります。北海道出身で、魚住教授の後輩にあたります。新たな環境で、できる限り多くのことを学ぼうと思います。どうぞよろしくお願い致します。



かみ や いく よ
神 谷 育 代

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 非常勤研究員

平成17年3月に奈良女子大学大学院人間文化研究科博士後期課程を修了し、本年4月より櫻井グループでお世話になっております。これまでは有機硫黄およびセレン化合物を用いた遷移金属触媒反応の研究に携わってまいりました。この恵まれた環境を生かして視野を広げ、知識を深めるため精一杯頑張りたいと思っております。どうぞ宜しくお願いいたします。



みや ざと ゆう じ
宮 里 裕 二

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 非常勤研究員

琉球大学理学部、同大学院修士課程、九州大学大学院理学府博士後期課程修了後、平成16年4月から田中グループCREST 博士研究員として分子研にはお世話になっております。本年よりIMS フェローとして同研究グループで研究に取り組んでいくこととなりました。分子研という恵まれた環境の中でこれまで以上に多くのことを学び、より幅広い視野を持って研究を展開してゆけるよう努力したいと思っております。よろしくお願いします。



わた なべ たか ひと
渡 邊 孝 仁

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 非常勤研究員

平成17年3月東北大学大学院理学研究科博士課程修了後、同年4月より川口グループでお世話になっております。これまではケイ素化合物が取り込まれた金属錯体の合成および反応性について研究を行ってきました。これからは分子研という恵まれた環境の中で、金属錯体による小分子の活性化についてより高度な研究を展開していきたいと思っております。宜しくお願い致します。





た くま もと き
田 熊 元 紀

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 博士研究員

名古屋大学大学院理学研究科で修士、博士課程を過ごし平成17年4月より分子研川口グループで研究生生活を送っています。大学とは異なる研究所の雰囲気が、私にはとてもあっているようでして充実した毎日を過ごさせていただいています。これまで遷移金属錯体の合成研究に携わってきましたので、今後も物質合成に関するさらなる技術の向上に努めて行きたいと考えています。よろしくお願いいたします。



ふじ た みつ はる
藤 田 光 晴

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 博士研究員

2005年3月に筑波大学大学院数理物質科学研究科博士課程を修了し、4月から川口グループでお世話になっています。錯体を題材として、立体構造に基づく性質に興味を持ち研究を行っています。研究テーマも環境も大きく変わりましたので、多くの事を吸収し、知見を広げていきたいと考えています。趣味は運動や旅行です。よろしくお願いいたします。



お さわ かず みち
小 澤 一 道

岡崎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

平成17年3月東京工業大学大学院生命理工学研究科博士後期課程修了。本年4月より青野グループでお世話になっております。これまでは古細菌の細胞分裂機構を分子遺伝学的手法を用いて解析してきました。今後は、生命現象を化学的な目で理解できるよう研究の幅を広げていきたいと考えております。どうぞよろしくお願いいたします。



もち づき しゅん すけ
望 月 俊 介

岡崎統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域 博士研究員

博士課程修了後、産業技術総合研究所（NEDO フェロー）・民間企業での仕事を経て、4月からお世話になっております。大学では分析化学を学び、その後は超臨界流体、液相構造解析など分野をまたぐ領域の研究をしていました。ここでの仕事も有機合成という自分の専門とは異なる内容ですが、初心に戻って一から勉強します。よろしくお願いいたします。



TANATAR, Makariy

分子集団研究系物性化学研究部門 外国人研究職員

I was born in Dnipropetrovsk, Ukraine (then USSR). I earned my Ph.D. in the Physics of Semiconductors, in National Academy of Sciences of Ukraine. I am currently a Senior Research Scientist (Associate Professor) in the Institute of Surface Chemistry, National Academy of Sciences, Ukraine. I work for a long time abroad. I spend 5 happy years with the Physics department of Kyoto University (Ishiguro lab). Recently I was affiliated with ISSP, University of Tokyo. My research interests are mainly in the physics of strongly correlated electron systems, heavy fermion and organic superconductors. What I am studying now, is the role of structural distortions in anomalous normal state electronic properties of molecular superconductors, in close collaboration with my host Professor Toshikazu Nakamura and Professor Kyuya Yakushi.



ちゃん どん りん
江 東 林

相関領域研究系相関分子科学第一研究部門 助教授

平成10年に東京大学大学院工学系研究科にて博士号を取得し、同研究科助手、科学技術振興機構・ERATO ナノ空間プロジェクトグループリーダーを経て、5月に着任しました。マンションが立ち並ぶ東京で10年間を過ごしてきた自分としては、岡崎は住みやすいところです。デンドリマーを中心に様々な機能性分子やナノマテリアルを作ってきました。分子研では心身一新して分子科学の新しい領域に挑戦したいと思います。どうぞよろしくお願いいたします。



やま だ きよ し
山 田 清 志

計算科学研究センター 専門研究職員

1990年から15年間、民間企業で東京近郊の国立大学や国立の研究所担当のSEをやってきました。この6月より出向し、計算科学研究センターでお世話になり、NAREGI関連の情報研との調整および環境整備を行っております。出身は、富山県で同じ中部圏なのですが、岡崎とは文化は全くと言って良いほど違っており、これまでに触れたことのない文化を楽しんでいるところです。また、今年は、万国博覧会も開催されており、この機会にぜひ1度行ってみたいと思っています。どうぞよろしくお願い致します。





やま さき ゆ み
山 崎 由 実

理論分子科学研究系分子基礎理論第三研究部門 事務支援員

平成17年6月1日より分子基礎理論第三で事務支援員としてお世話になっております。初めての職種・職場環境下での勤務に緊張と不安の連続の中、早2週間。先生方をはじめ秘書室の皆様の親身なサポートには日々感謝致しております。現在は少しでも早く仕事に慣れようと努める一方、南実験棟ですれ違う方々のお名前とお顔を一致させインプットしている最中です。皆様には色々とお世話になるかと思いますが、今後ともご指導よろしくお願いいたします。



かね やす たつ お
金 安 達 夫

極端紫外光研究施設 博士研究員

平成16年3月に東京都立大学大学院理学研究科博士課程修了後、東京大学大学院工学系研究科研究機関研究員を経て、6月より繁政グループでお世話になっております。これまでは低速多価イオン・原子分子の衝突ダイナミクスの研究、小型電子線形加速器を用いた硬X線源の研究開発に従事してきました。放射光施設に所属するのは初めてですが、これまでの経験を生かして研究に取り組みたいと思います。よろしくお願いいたします。

平成16年度3月総合研究大学院大学学位取得者及び学位論文名



物理科学研究科（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
木 下 朋 子	結合クラスター理論に基づく新しい計算方法の開発	理 学	H17.3.24

物理科学研究科（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
高 田 正 基	極低温走査トンネル分光法を用いた金属表面上の有機分子に関する研究	理 学	H17.3.24
伊 藤 暁	Development and application of the multi-overlap molecular dynamics methods	理 学	H17.3.24
榊 直 由	極低 ATP 濃度における F1-ATPase の回転	理 学	H17.3.24
益 田 周防海	簡単な分子の内殻励起状態に於ける価電子ダイナミクス	理 学	H17.3.24

物理科学研究科（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
齊 川 次 郎	高出力超短パルス Yb ³⁺ 添加固体レーザーに関する研究	理 学	H17.3.24
村 田 克 美	Molecular dynamics simulations of DNA dimers based on replica-exchange umbrella sampling	理 学	H17.3.24
谷 村 あゆみ	Structure of Electric Double Layer in Carbon Nanopores and Supercapacitor	理 学	H17.3.24

総合研究大学院大学平成17年度新入生紹介

平成17年度新入生

専攻	氏名	所属	研究テーマ
構造分子科学	井上 絢子	錯体化学実験施設	Mn- オキシラジカル錯体合成と物性評価
	白鳥 和矢	理論分子科学研究系	実空間差分法による半無限系の電子論的研究
	田中 雅之	分子集団研究系	振動分光法および遠赤外反射分光法による分子性導体の研究
	西村 宗十	岡崎統合バイオサイエンスセンター	酸素センサータンパク質 Hem AT の構造と機能
	福島 貴	錯体化学実験施設	二酸化炭素の多電子還元反応の開発
	中井 直史	極端紫外光科学研究系	マイクロチャネルを用いた膜タンパクバイオセンサの製作
	MD. Abu Sayed	極端紫外光科学研究系	AFM と BML-IRRAS による細胞膜表面反応の研究
機能分子科学	河尾 真宏	分子スケールナノサイエンスセンター	金属ナノ構造体と有機分子の複合体構築と物性計測
	川出 令	分子スケールナノサイエンスセンター	水中で機能を発現する高分子担持触媒の開発
	滝澤 隆	分子スケールナノサイエンスセンター	ボウル型共役化合物の合成研究
	福山 尚志	分子スケールナノサイエンスセンター	マイクロリアクターを活用した有機合成反応の開拓
	PONSECA, Jr. Carlito	分子制御レーザー開発研究センター	半導体超格子からのテラヘルツ電磁波発生に関する研究
	DE LOS REYES, Glenda	分子制御レーザー開発研究センター	テラヘルツ領域における導波路の研究

新装置紹介 (NMR)

分子スケールナノサイエンスセンター先導分子科学研究部門 助手 笹 川 拡 明



[序]

920 MHz NMR分光器（正式名称：JNM-ECA920）は2002年度に文部科学省のナノテクノロジー総合支援プロジェクトの一環として予算化、2003年度末に納入され、2004年度の調整、立ち上げを経て2005年度から本格的に共同利用設備として運用されている。本装置は国家プロジェクトのもとの物質・材料研究機構による高磁場超伝導磁石の開発（神戸製鋼所との共同開発）、さらには日本電子の協力による分光計などの周辺整備を経て完成したNMR装置である。NMR装置は分子科学研究所・山手地区に設置されており、二階建ての山手5号館が装置設置のために本体導入と同時に竣工された。

[構成]

920 MHz NMR分光器は、超伝導マグネット（写真1、表1）、マグネット運転制御盤、真空ポンプや分光器から構成されている（図1）。万が一、停電が起きた際には超伝導マグネットの超伝導状態が崩壊（クエンチ）しないように、非常用発電機が導入されている。また、溶液測定用のプローブとしてはインバースプローブとカーボンプローブの2本、固体測定用プローブとしてはカーボン用 CP-MAS プローブ、窒素用



写真1：超伝導マグネット

CP-MAS プローブ、他核用 MQ-MAS プローブの3本が用意されている。また、マグネットルームには高度空調設備が導入されており、一年を通して安定した温度下で測定を行うことが出来る。

[メンテナンス、サポート]

メンテナンスとして超伝導マグネットの超伝導状態を維持するために、週1回の液体窒素充填と2週間に1回の液体ヘリウム充填が行われている。液体窒素は自動供給装置により充填される。液体ヘリウム充填は専門の業者が行っている。磁石は神戸製鋼により24時間体制で監視されており、何か緊急時のトラブルが生じた際にはすぐにサポートを受けることができる体制にある。

[注意事項]

非常に強力な磁場（21.6 T）を持つ磁石を扱うため、磁気カードや時計、携帯電話などの電子機器の持ち込み、ペースメーカーなどは動作に異常が生じるためマグネットルームへ入室する際には、注意が必要である。また、磁石への砂鉄の付着を防ぐため、入室の際には専用の静電気防止スリッパの着用をお願いしている。

[外部からの利用]

現在のところ、溶液測定に関しては外部からの利用を受け付けている。4月からこれまでに多くの依頼があり、既に幾つかのグループには測定も行って頂いており、目覚ましい成果を挙げつつある。多くの依頼があるために機器は常に稼働率100%を超え

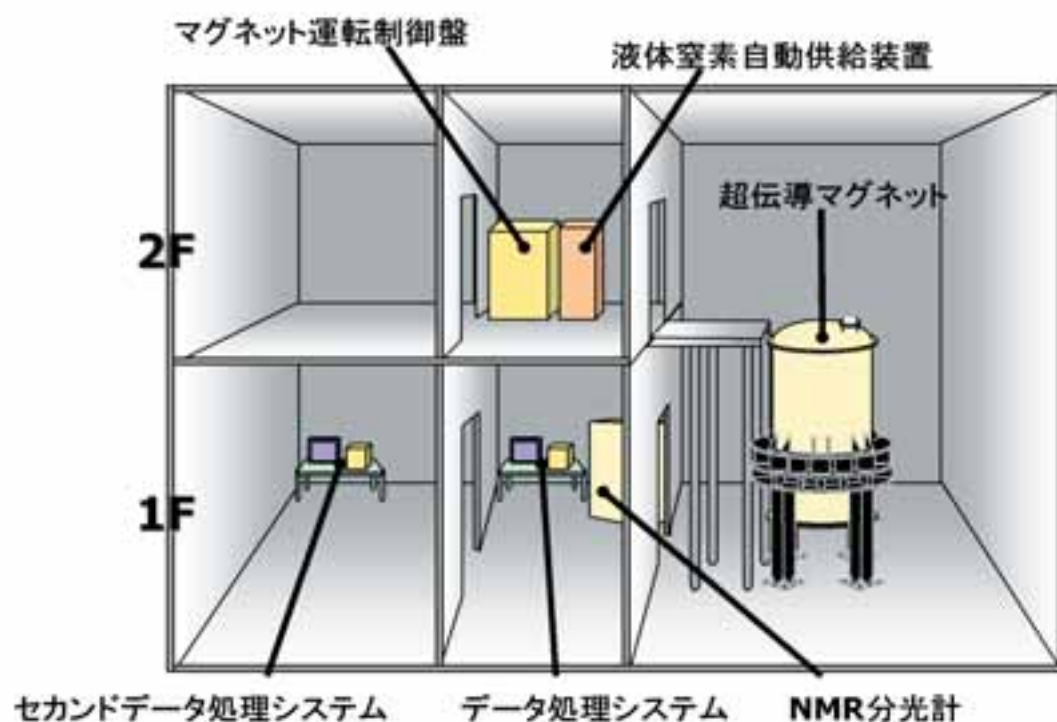


図 1：山手 5 号館簡略図

る状態を保っており、週末も装置が休む暇も無いほどである。固体測定に関しては現在のところ（6 月）最終的な調整の最中であるが既に利用申し込みもあり、近日中に測定を行うことができる環境になる予定である。また、測定のサポートを行う専門の技術職員が 1 名常勤しており、実際の測定を行う。さらに外来使用者用の実験スペースもあるのでサンプル調製等の簡単な実験操作も行うことができる。

〔利用方法〕

この機器の利用を行う方法については分子研ナノ支援ホームページ（<http://nanoims.ims.ac.jp/homepage/index.html>）に掲載しております。

〔最後に〕

この装置により従来の NMR 分光器では測定、解析が非常に困難であった糖鎖、巨大タンパク質等の複雑な生体高分子や高分子有機化合物の精密構造、機能解析が可能となり、生体高分子はもとより材料研究分野においても新しい応用分野が拓けて来ることが期待される。

•発生磁場	：21.6 T
•ボア径	：54 mmφ
•重量	：約 17 t
•液体 He 充填間隔	：500 L 以下／2weeks
•液体 N ₂ 充填間隔	：150 L 以下／1week

表 1：超伝導マグネットのスペック

内殻励起における交換相互作用とスピン軌道相互作用

提案代表者	分子科学研究所	教授	小杉信博
提案者及び共同研究者	分子科学研究所	客員教授	RUEHL, Eckart
	兵庫県立大学理学部	助教授	下條竜夫
	京都大学福井謙一記念研究センター	助教授	石田俊正
	分子科学研究所	助手	初井宇記
	分子科学研究所	助手	樋山みやび



1. 実施概要

平成15年度後期から昨年度末まで1年半、本課題研究を実施した。後期公募の特別枠のため3ヶ月滞在の外国人客員との共同研究を中心とした。我々はドイツ Wuerzburg 大学の Eckart Ruehl 教授を客員として招へいた。彼の来日は平成16年4月上旬から7月中旬であった。彼の来日中にやることは(1) UVSOR で小さなクラスター分子の光電子分光実験をすること、(2) これまで行った共同研究の論文を仕上げることであった。

(1) の光電子分光については、光吸収分光と違って、イオン化のための励起光の光量と高性能な電子エネルギー分析器が必要である。特に小さなクラスター分子はあまり試料密度を上げられないため、光量がより多く必要である。この研究で励起光に対して課された条件は、平成15年度後期から本格的な利用が可能になった UVSOR-II 光源（高度化された UVSOR 光源）によって放射光輝度が向上し、真空封止型軟X線アンジュレータのビームラインが建設できたことでクリアされた。また、高性能な電子エネルギー分析器については、私のグループで整備しているものがすでに世界最高レベルのものになっていた。唯一の問題はクラスターソースであった。ここは Ruehl 教授の経験が生きる場所なので、平成15年度前期の間に助手の初井君を Ruehl 教授のところに派遣して、装置のノウハウを習得してもらい、

後期より課題研究メンバーの一人である姫路工大下條竜夫助教授にアドバイスをもらいつつ、UVSOR 技官の堀米さん達の協力も得て、クラスター生成装置を組み立て、Ruehl 教授の来日を待った。来日後、全装置を立ち上げ、UVSOR-II を使った新設ビームライン BL-3U での初めての実験として希ガスクラスターを中心に実験して成果をまとめる一方、分子クラスターの実験の手がかりも得た。彼の帰国後、データを整理して論文にまとめるとともに、BL-3U 軟X線分光器、電子エネルギー分析器、クラスター源でいろいろ問題が見つかった点を次の実験に備えて改良しているところである。

(2) については、窒素分子クラスターの軟X線吸収（内殻励起）の実験結果をまとめて論文発表した。帰国後も引き続き、ベンゼン、ピリジン、フルオロベンゼンの小さなクラスター分子の軟X線吸収実験の研究をまとめているところである。また、Ruehl 教授はドイツの放射光施設 BESSY-II で小さな分子に対して世界最高レベルの高分解能軟X線吸収実験を行っている。その実験では内殻電子に関わる非常に小さな交換相互作用が見えてきている。そのため、例えば、内殻同士の交換相互作用がどの程度あるのか。また、その交換分裂が観測されるのか。内殻電子と励起電子の間に働く交換相互作用はどの程度か。スピン軌道相互作用の大小関係はどうなっているか。励起先が価電子空軌道と Rydberg 軌道で

はどう違うのか。クラスターのような隣の分子が近くにある場合、内殻励起状態と周辺の価電子との交換相互作用はどの程度か。交換分裂したスピン多重度の異なるスピン状態の観測は可能かどうか。など、興味深い基礎的問題が多数ある。これらを解決するための道具として、静岡大学（現京都大学）の石田俊正助教授に本課題研究メンバーに入ってもらってスピン軌道相互作用の計算プログラムを共同して開発し、また、助手の樋山さんとはイオン化断面積の計算プログラムを共同して開発した。現在、それらを使って理論解析中である。

本報告書では（１）（２）それぞれについて代表的なものについて報告する。

2. Kr クラスターの 3d 内殻光電子スペクトルのサイト依存性（投稿中）

Kr クラスターの平均原子数を 4 個～30 個にした実験条件で 3d 内殻準位の光電子スペクトルを測定した。図 1 に結果を示す。スピン軌道相互作用で分裂しているが、それぞれの 3d 副準位に付随した構造は全く同じである。このように小さなクラスターの領域で顕著なサイズ依存性を見せる内殻光電子スペクトルの実測に成功したのはこの UVSOR-II の結果が初めてである。これまでスウェーデンの MAX-II 光源などを使って行われた大きなクラスターサイズの実験ではサイズによる変化があまりなかった。3d 電子がイオン化した状態は周りの原子の分極に安定化されるので、基本的には光電子ピーク（イオン化エネルギーとして）は赤方シフトする。図に実験結果（単原子成分をかなり除去したあとのデータ）

に加えて、理論計算結果及びピーク解析結果を示した。原子 (a) とダイマー (d) は理論計算上も差がほとんどなく、今回の実験条件では区別が困難であった。今後行う予定のより高分解能な条件での実験に期待している。理論計算からはコーナー (c)、エッジ (e)、面 (f) になるに従って、第 1 配位圏の原子数が増えるため、赤方シフト量が増えてくる。ピーク解析上は面の寄与ははっきりしなかったが、コーナー (c) とエッジ (e) ははっきり区別できた。赤方シフトが最も大きいもの (b) はバルク的な成分（クラスター内部の原子）と解釈できる。実験結果はクラスター

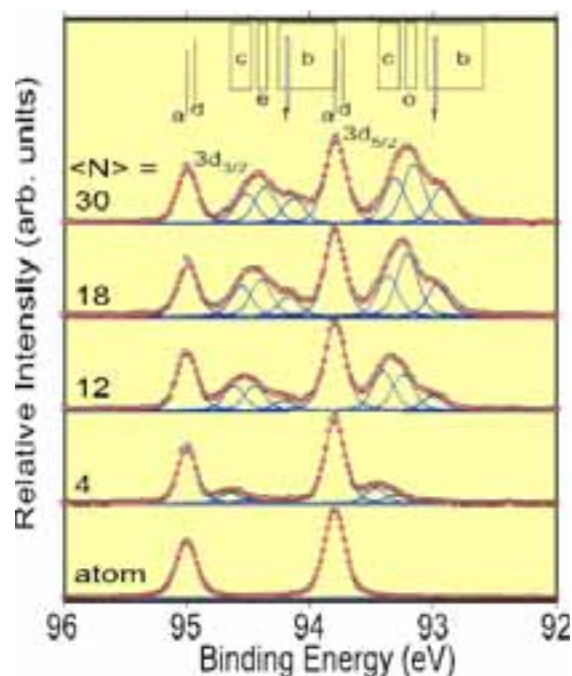


図 1 サイズの異なる Kr クラスターにおける Kr 3d 準位の光電子スペクトル。理論的予測を最上部に示す。a、d、c、e、f、b は原子、ダイマー、クラスターのコーナー位置、エッジ位置、面上、バルク（内部）を示す。



図3 3s, 4s Rydberg 軌道図

サイズが大きくなるとエッジやバルク成分が増えてくることがはっきりわかった。このように内殻電子準位を高分解能光電子分光実験することで、サイトの違いによる赤方シフトの違いがはっきり観測され、ピーク強度比（光電子の角度分布のサイト依存性を無視できるマジック角での測定）からそれぞれのサイトの原子数比が直接的にわかるので、この種の実験はクラスターの構造研究に有用である。

3. N₂ クラスターにおける Rydberg 性窒素内殻励起 (J. Chem. Phys. 121 (2004) 8343)

これは N₂ 1s-Rydberg 励起が小さな窒素クラスター、大きな窒素クラスター、固体窒素でどのようなスペクトル変化を示すか、興味を持って実施した

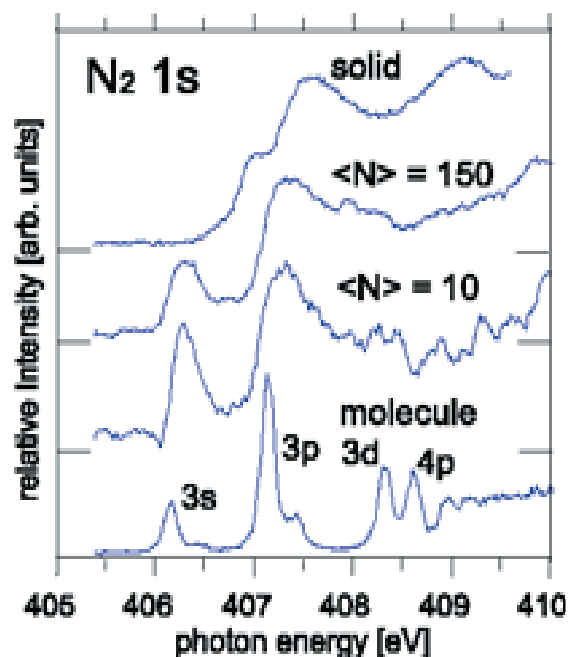
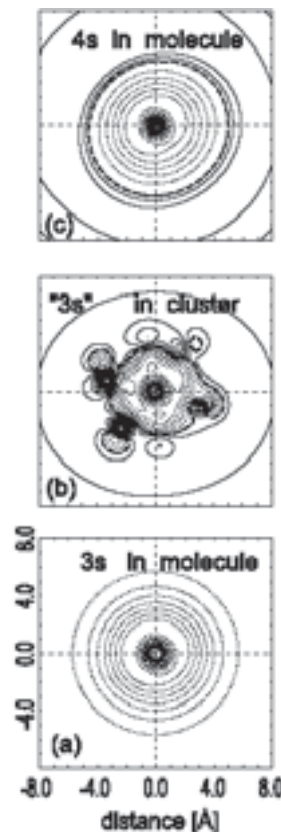


図2 N₂ 内殻励起の Rydberg 領域

研究である。内殻光電子スペクトルの強度比が直接、原子数比となるのとは違って、内殻励起（軟X線吸収）スペクトルの強度比は励起状態の広がりなどの性質に依存するため、解析が難しいが、実験そのものは光電子スペクトルよりはるかに簡単である。その結果を図2に示した。

図2で最低 Rydberg 状態の 3s Rydberg に注目すると、単分子から

クラスターになると励起エネルギーが青方シフトするのがわかる。光電子スペクトルで直接決定できる内殻準位が赤方シフトするのと逆である。逆になるのは Rydberg 電子が周りの媒質（分子）の電子と交換相互作用するからであり、交換反発による不安定化エネルギーが内殻準位の安定化エネルギー（赤方シフト）より大きくなると青方シフトになる。交換反発が小さいと内殻準位の赤方シフトが勝つ場合もありうると考えられる。Rydberg 状態が固体中ではどうなるかも興味を持たれているが、実験結果を見る限り、クラスターと同じエネルギー領域には 3s Rydberg 状態の痕跡はない。その原因を 3s Rydberg 軌道の分布から探ったところ、図3に示したように 3s Rydberg 軌道は周りに分子があると分子の



ころで直交性（交換相互作用）のため節を持ち、その節のできるところがちょうど 4s Rydberg 軌道の持つ節のあたりに相当していることがわかる。エッジやコーナーの寄与がほとんどなくなってしまう固体のスペクトルでは、ほとんどすべての 3s 軌道はバルクの環境に置かれ第 1 配位圏の分子によって 4s 軌道的になってしまい、エネルギー的に上昇する（約 1 eV）と予測される。

4. 最後に

本課題研究は例外的に認められた 3 ヶ月だけ滞在の外国人客員を含む 1 年半の後期公募の特別枠として採択されたものである。分子研の外国人客員ポストは日本学術振興会等に申請して招へいするケースと違って、計画的な採用が可能なポストとして招へい研究者のサバティカル等の計画に早くから組み入れてもらうことができる点で、実行上、非常に有効なものである。ただし、外国人客員は 6 ヶ月以上滞在というこれまでの採用条件は海外の忙しい研究者には有効でなかった。そのため、共同研究専門委員会の方で国際共同研究のきっかけを作るには 3 ヶ月枠が必要ではないかと提案し、検討を始めた（分子研レポート '99 pp.286-288 参照）。その結果、それまで前期公募のみであった課題研究に後期公募の特別枠が設定され、外国人客員をメンバーにした課題研究申請が採択された場合にのみ例外的に 3 ヶ月滞在を許してもらえるようになった。手続き的に面倒でよくわからないという意見もあったが、このお陰で私のグループでも Wuerzburg 大 Eckart Ruehl 教授との共同実験のチャンスを得ることができた。彼は今

年も共同実験のために来日予定であり、分子研での共同研究の最初のきっかけを作ってくれた 3 ヶ月の客員ポストに感謝している。

ただし、法人化された昨年度から、外国人客員の採用条件が最低 6 ヶ月から 3 ヶ月に緩和され、しかも複数回、同じ人を客員に採用することも可能になった（ただし 2 度目以降は審査が厳しくなり、通算で 1 年を越えないという条件あり）。さらに、研究所独自の国際共同研究も始まり、課題研究の特別枠に頼らなくとも海外の研究者との共同研究が非常にやりやすくなったため、現在は課題研究の後期特別枠はその存続意義を失ったことになる。私自身は外国人客員との共同研究の成果を発表する場が課題研究報告を借りる形で与えられたことを感謝している。Eckart Ruehl 客員教授の関連記事は分子研レターズ 50 号（2004.8）p.43, p.51 にある。

自由電子レーザーの短波長化とその応用

提案代表者	分子科学研究所	教 授	加藤政博
提案者及び共同研究者	分子科学研究所	助 手	保坂将人
	分子科学研究所	助 手	持箸 晃
	名古屋大学	助 手	高嶋圭史
	東北大学	教 授	浜 広幸
	姫路工業大学	助教授	下條竜夫
	科学技術振興財団	研究員	西野秀雄
	理化学研究所	研究員	原 徹
	フランス原子力委員会	研究員	M. E. Couprie



【はじめに】

電子蓄積リングにおける自由電子レーザー発振は、蓄積リングを周回する電子ビームがアンジュレータと呼ばれる交番磁界を生成する装置の中を通過する際に放出する準単色のシンクロトロン放射光を光共振器の中に閉じ込め、アンジュレータ中で繰り返し電子ビームと相互作用させることで増幅するものである。UVSOR では 1980 年代前半の建設当初から自由電子レーザー開発を想定して一部の真空チャンバーが設計・製作されている。1980 年台より実験は行われていたが、発振に成功したのは 1993 年であり、その後 1996 年に当時の発振短波長記録を更新するなどの華々しい成果を挙げた。

自由電子レーザーは、波長可変で高出力化が可能であるなどの特徴から、世界各地で精力的に研究が進められてきた。特に直線加速器の作り出す電子ビームを用いた赤外領域における高出力レーザー施設は世界各地に建設され学術研究に利用されている。一方、蓄積リングの電子ビームを用いた自由電子レーザーは、真空紫外・軟 X 線領域の高出力レーザーとしての可能性を期待され、研究が行われてき

たが、増幅率が比較的低く、一方で、短波長域では高反射率のミラーの実現が難しいという事情があり、現在でも発振波長の短波長記録は 180 nm 程度に止まっている。近年では紫外・真空紫外領域でも様々な手法によりレーザー光、コヒーレント光が作り出せるようになっており、短波長という点のみでは競争力の低下は否めないが、同じ蓄積リングで生成されるシンクロトロン放射光と自然に完全に同期が取れていること、あるいは、波長・偏光の制御が容易であるといった特徴を活かした利用研究の推進、電子ビームと自由電子レーザービームを正面衝突させることによる高効率の準単色ガンマ線生成への応用、将来の高性能加速器の利用あるいは真空紫外領域での高反射率ミラーの実現を視野に入れた共振器型自由電子レーザーの技術蓄積などの目的で、現在も世界のいくつかの拠点で研究が継続されている。その中でも UVSOR-II は放射光リングとして安定な運転条件が確立されており、その通常の運転条件に近い条件で自由電子レーザー発振が行えることから、極めて安定で高出力の発振が可能となっており、自由電子レーザーの研究開発を推進するには最適な施設である。

[研究目的]

UVSOR 加速器は平成 15 年度前半に高度化改造され、電子ビームの指向性の指標となるエミッタンス（ビームの空間広がりと角度広がり積）は、従来の 160 nm-rad から 27 nm-rad へと大幅に改善された。この高品位化された電子ビームを用いると、特に短波長領域でのレーザー増幅率が向上し、UVSOR



図 1 UVSOR 自由電子レーザー装置

における従来の短波長限界であった 240 nm を越えて、波長 200 nm あるいはそれ以下での発振も期待できる状況となった。

本課題研究では、波長 200-300 nm の領域で高強度且つ安定な自由電子レーザー発振を実現し、それを利用実験に供することで、将来の真空紫外領域での発振の実現とその実用化へつなげる実験技術を確認することを目標とした。また、長年蓄積リング自由電子レーザー研究において世界をリードしてきたフランスの研究グループのリーダーである M. E. Couprie 氏を客員助教授として招聘し、同氏らが有する紫外領域でのレーザー発振技術を UVSOR に注入することも研究計画に盛り込んだ。

[研究成果]

この課題研究は、UVSOR の運転スケジュールで光源開発研究に割り当てられている時間、通常は月曜日の朝 9 時から 21 時、を利用して実施した。実験装置の大部分は既存のものを用いたが、一部については新規に導入もしくは構築し、また、一部はフランスから持ち込んだものを使用した。

短波長領域の発振の実現については、加速器が大幅に改造されたことから、まずは調整の容易な可視領域での発振状況を確認することからスタートした。光クライストロン（レーザー光の元となる準単色シンクロトロン光を作り出すアンジュレータ装置の一種）の中での電子軌道の最適化、光キャビティの精密位置調整などをすべて一からやり直した。その後平成 15 年 12 月初旬に波長 400 nm 付近で、加速器高度化改造後初めてとなる自由電子レーザー発振に



成功した。レーザー増幅率は、電子ビームの高品質化に伴って、大幅に向上していることが確認できた(図2)。

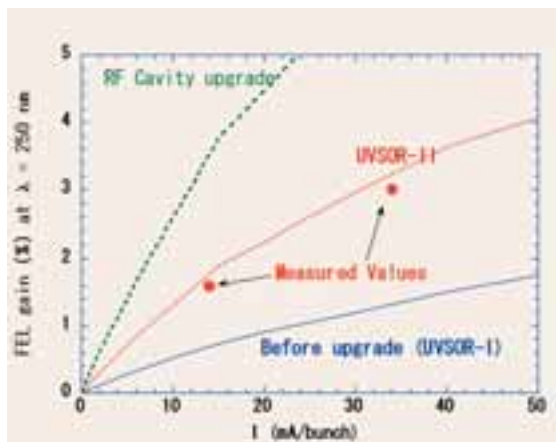


図2 ビーム電流値に対するレーザー増幅率。UVSOR-I から II への高度化に伴う増幅率の向上、また、2005 年春に行われた高周波加速空洞の更新により期待される増幅率の向上が示してある。

可視領域での良好な発振を確認後、波長 250 nm での発振を試みた。これまでの UVSOR における発振の短波長記録は 240 nm であるが、この記録を達成した当時はかろうじて発振が確認できる程度であり、出力も極めて弱いものであった。今回その記録に近い波長 250 nm で発振させたところ、数 100 ミリワットの高出力を容易に得ることができた(図3)。加速器の高性能化による増幅率の向上の結果と考えている。これまでに世界各地の蓄積リング自由電子レーザーで達成されている様々な波長領域での出力を図4に示してある。これまでの出力の最高記録は UVSOR が可視領域で達成したものであった。今回、紫外領域においても、最新の第3世代放射光

リングを用いた自由電子レーザーと遜色のないレベルの高出力が得られるようになったことがわかる。これは UVSOR の電子ビーム性能が第3世代光源のもの比べて遜色のないレベルに達していることを示している。

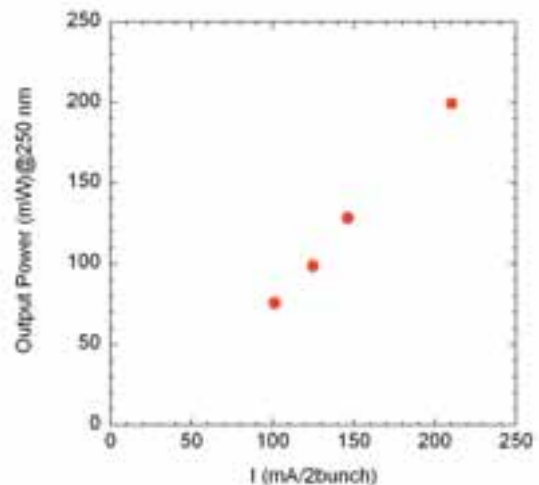


図3 蓄積ビーム電流値に対する波長 250nm での平均レーザー出力

レーザー発振の安定化に関する研究では、フランスのグループが開発したフィードバックシステムを UVSOR-II に導入して出力の安定化を試みた。UVSOR では以前より独自にレーザー発振の安定化技術を開発していたが、それは安定な発振条件を保つことで出力を安定化させるものであった。今回、導入したシステムは安定な発振条件が確立できない状況で出力を安定にするというものであり、コンセプトが異なる。電子蓄積リングと光共振器の同調をずらすことでパルス的に発振が起きる状況を作り出し、フィードバックシステムを動作させたところ

ろ出力が安定になることが確認できた（図4）。フランスの研究者とは、これ以外に、レーザー発振に伴う電子ビーム加熱の精密実時間観測、レーザー場のダイナミクスに関する観測実験を共同で行った。UVSOR-IIの安定な自由電子レーザーを用いることで、これまで系統的行われることの少なかった自由電子レーザー発振のメカニズムに関する基礎的な研究を効率よく行うことができた。また、紫外領域での自由電子レーザー発振に長年の経験を持つフランス人研究者と協力することで、紫外領域での光共振器の精密調整法なども確立することができたことも大きな収穫であった。

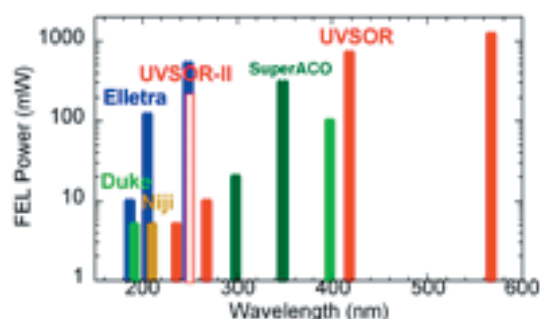


図4 世界の蓄積リング自由電子レーザーの出力比較

利用実験の推進については、いくつかの分野の放射光利用研究者と協議し、準備の容易さなどを考慮し、円偏光放射光の照射によるアミノ酸の不斉合成に関する実験を試みることにした。これは地球上の生体関連物質のホモキラリティの起源を探る研究に関連する実験であり、円偏光紫外線の照射によるアミノ酸の光分解に関する研究を行うものである。UVSORでは世界に先駆けて円偏光タイプの光クライストロンを導入しており、レーザー光がもともと

円偏光であるというUVSOR自由電子レーザーの特徴を活かせる実験である。

不斉合成実験は、先に述べた自由電子レーザーの短波長化に向けた実験と平衡して進めた。レーザーが準備できていない段階ではレーザー光ではなく円偏光アンジュレータ放射光を用いて予備的な実験を行った。その結果、不斉合成の進行が確認された。その後レーザーが250 nmで高出力発振に成功した段階で、その円偏光レーザー光を利用して不斉合成実験を行い、放射光を利用した場合と比べて格段に短い30分程度の照射で不斉合成の進行を示すデータが取得できた。

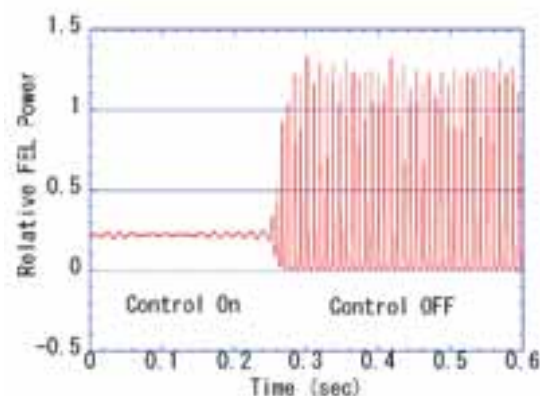


図5 フィードバックによるレーザー出力の安定化

第11回日韓合同シンポジウム



平成17年3月15-17日の3日間、第11回日韓合同シンポジウムが岡崎コンファレンスセンターで開催された。1984年に分子科学研究所で第1回合同シンポジウムが開催されて以来、2年ごとに日本と韓国で交互に主催してきている。今回の11回目のシンポジウムは「分子科学の最前線」をテーマに、韓国からは韓国化学会会長であるソウル国立大学のShin教授を代表として15名の研究者が、日本からは中村所長を代表として15名の研究者が招待され、下記のプログラムにあるように分子科学分野の理論と実験の最前線の研究発表と研究交流が行われた。これらは、日韓両国の分子科学の今後の研究を大きく推進するものと期待される。今回の合同シンポジウムは、文部科学省の「日韓友情年2005（進もう未来へ、一緒に世界へ）」記念事業としても認定された。折しも竹島問題が連日取り上げられている時期であったが、歓迎会および夜遅くまでの夕食や酒宴等を通じて親睦が大きく深められたことは、学術研究ばかりでなく日韓の友情を高めるという成果があったと思われる。

(永瀬 茂 記)

Program of 11th Japan-Korea Joint Symposium on Frontiers in Molecular Science

March 15-17, 2005

Mar 15 (Tue)

18:00- Welcome Party

Mar 16 (Wed)

Opening Remarks

9:00-9:05 **Hiroki Nakamura** (IMS)

9:05-9:10 **Kook Joe Shin** (Seoul National Univ.)

Session I

Chairman: Seokmin Shin (Seoul National Univ.)

9:10-9:40 **Kook Joe Shin** (Seoul National Univ.)
Kinetic Transition Behavior in Diffusion-Influenced Reactions

9:40-10:10 **Young Kee Kang** (Chungbuk National Univ.)
Cis-Trans Isomerization and Puckering of Proline and Its Analogues

10:10-10:40 **Shinji Saito** (Nagoya Univ.)
Two-dimensional Raman Spectroscopy and Molecular Dynamics of Liquids

Session II

Chairman: Young Kee Kang (Chungbuk National Univ.)

10:55-11:25 **Seokmin Shin** (Seoul National Univ.)
Efficient Conformational Sampling:
Applications to Protein Folding & Misfolding

11:25-11:55 **Yuko Okamoto** (IMS)
Protein Folding Problem and Generalized-Ensemble simulations

11:55-12:25 **Mino Yang** (Chungbuk National Univ.)
Modeling of Energy Transfer in PSI

Session III

Chairman: Young-Uk Kwon (Sungkyunkwan Univ.)

- 14:00-14:30 **Takuji Ogawa** (IMS)
Construction of Nano-structures for
Molecular Electronics
- 14:30-15:00 **Jin Woo Cheon** (Yonsei Univ.)
Fabrication of Inorganic Nanocrystals and
Their Electronic and Medical Applications
- 15:00-15:30 **Katsuyuki Nobusada** (IMS)
Optical Response of Monolayer-Protected
Gold Clusters

Session IV

Chairman: Dongho Kim (Yonsei Univ.)

- 15:45-16:15 **Seonghoon Lee** (Seoul National Univ.)
The Growth Behaviours, Field Emission,
and Cold Electrons of Carbon Nanotubes
- 16:15-16:45 **Tatsuya Tsukuda** (IMS)
Structures, Stabilities and Reactivities of
Size-Selected Gold Clusters Encapsulated
in Organic Shells
- 16:45-17:15 **Young-Uk Kwon** (Sungkyunkwan Univ.)
Arrayed Nanomaterials Derived from
Nanoporous Templates
- 17:15-17:45 **Nobuyuki Nishi** (IMS)
Structure and Functionality of Metal
Acetylhyde Nanocrystals and Nanowires

Mar 17 (Thu)

Session V

Chairman: Katsuyuki Nobusada (IMS)

- 9:00-9:30 **Hiroki Nakamura** (IMS)
Chemical Dynamics and Molecular Functions
- 9:30-10:00 **Seung C. Park** (Sungkyunkwan Univ.)
Potential Energy Surface and Reaction
Dynamics of O + C₃H₃ Reaction
- 10:00-10:30 **Jong-Ho Choi** (Korea Univ.)
In Search of Radical-Radical Reaction
Dynamics in Gas Phase
- 10:30-11:00 **Kenji Ohmori** (IMS)
Phase Sensitive Memory in Molecular
Wave Packets; READ and WRITE

Session VI

Chairman: Kenji Ohmori (IMS)

- 11:15-11:45 **Hiromi Okamoto** (IMS)
Nanometric Wavefunction Imaging and
Dynamics by Near-Field Spectroscopy
- 11:45-12:15 **Taiha Joo** (Postech)
Energy Transfer in Molecular arrays and
Aggregates by Femtosecond Spectroscopy
- 12:15-12:45 **Akihiro Morita** (IMS)
Theory and Simulation of Interfacial Sum
Frequency Generation Spectroscopy

Session VII

Chairman: Akihiro Morita (IMS)

- 14:15-14:45 **Manabu Sugimoto** (Kumamoto Univ.)
Solvent-Induced Modulation of Electronic
Spectra of Transition Metal Complexes
- 14:45-15:15 **Jin Yong Lee** (Chonnam National Univ.)
Understanding of Molecular Functions:
Computational Approaches
- 15:15-15:45 **Hiromi Nakai** (Waseda Univ.)
Development of Accurate Non-Born-
Oppenheimer Theory
- 15:45-16:15 **Bastiaan Braams** (Emory Univ.)
The Reduced Density Matrix Method for
Electronic Structure Calculations

Session VIII

Chairman: Hiromi Okamoto (IMS)

- 16:30-17:00 **Kim Sehun** (KAIST)
Molecular Adsorption at Semiconductor Surface
- 17:00-17:30 **Hirokazu Tada** (IMS)
STM/STS Study on Local Density of States
of Molecules Adsorbed by Metal Surfaces
- 17:30-18:00 **Cheol Ho Choi** (Kyungpook National Univ.)
Mechanistic Study of Chemical
Adsorptions on Semiconductor Surface
- 18:00-18:30 **Yoshiyasu Matsumoto** (IMS)
Creation and Dephasing of Vibrational
Wavepackets at Metal Surfaces
- 18:30-18:45 Concluding Remarks

平成 16 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
2004年10月 1日 (金) ～ 3日 (日)	生体金属分子科学の展望	城 宜嗣	25名
2004年11月 5日 (金) ～ 6日 (土)	表面磁性科学の最近の展開	太田 俊明	45名
2004年11月12日 (金) ～ 14日 (土)	有機固体の電子的物性・機能およびその応用に関する研究会	薬師 久彌	71名
2004年12月20日 (月) ～21日 (火)	物理化学から生命科学を展望する ～分子組織体から細胞へ～	寺嶋 正秀	80名
2005年 1月17日 (月) ～18日 (火)	生体分光光学と分子イメージングの最前線	田村 守	47名
2005年 1月20日 (木) ～22日 (土)	大気科学における不均質系の分子科学	高見 昭憲	56名
2005年 3月 3日 (木) ～ 7日 (土)	分子情報伝達系の表面界面分子科学研究	宇理須恒雄	45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/index.php> も御参照下さい。

平成 16 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 767 回		2004 年 10 月 27 日	Theoretical studies of conformational fingerprints in valence photoionization, Penning ionization and electron momentum spectra using one-electron propagators	Michael S. Deleuze
	第 52 回	12 月 22 日	地球に優しいナノテクでつくるフィルム型カラフル太陽電池	箕浦 秀樹
	第 53 回	12 月 15 日	レーザーマイクロ・ナノ化学——光の圧力を使って分子系を動かし並べる	増原 宏
	第 54 回	2005 年 1 月 25 日	量子コンピューティングと物性科学	井元 信之
	第 55 回	2 月 2 日	科学と社会	平田 光司
第 768 回		2 月 9 日	電子線コンプトン散乱で見る電子構造と衝突ダイナミクス	高橋 正彦
	第 56 回	3 月 2 日	循環型エネルギー資源の創生を目指した二酸化炭素の還元反応と有機物の酸化反応の開発	田中 晃二

平成 16 年度(後期) 共同利用研究



課題研究

○は提案代表者

内殻励起における交換相互作用とスピン軌道相互作用

分子科学研究所教授

○小杉 信博

兵庫県立大学大学院物質理学研究科助教授

下條 竜夫

京都大学福井謙一記念研究センター助教授

石田 俊正

分子科学研究所助手

樋山みやび

分子科学研究所客員教授

Ruehl, Eckart

分子科学研究所助手

初井 宇記

固体表面上の生体分子認識反応系の構築と構造解析

分子科学研究所教授

○宇理須恒雄

東北大学電気通信研究所教授

庭野 道夫

九州大学大学院理学研究院助手

原田 賢介

広島大学大学院理学研究科大学院生

木崎 寛之

(独) 産業技術総合研究所研究員

森垣 憲一

(独) 産業技術総合研究所主任研究員

田和 圭子

(独) 産業技術総合研究所博士研究員

渡辺 秀和

(独) 産業技術総合研究所技術研修生

岡崎 敬

兵庫県立大学大学院工学研究科大学院生

浅野 豪文

兵庫県立大学 高度科学技術研究所助教授

内海 裕一

分子科学研究所教授

水野 彰

豊橋技術科学大学助教授

桂 進司

中国科学アカデミー教授

Wan Li-Jun

分子科学研究所教授

岡崎 進

分子科学研究所助手

南部 伸孝

Ben-Gurion University of the Negev 大学院生

Bhim Prasad Kafle

自由電子レーザーの短波長化とその応用

分子科学研究所教授

○加藤 政博

兵庫県立大学大学院物質理学研究科助教授

下條 竜夫

東北大学大学院理学研究科教授

浜 広幸

(独) 科学技術振興機構研究員

西野 英雄

(独) 理化学研究所研究員

原 徹

分子科学研究所客員教授

M.E.Coupric

名古屋大学大学院工学研究科助手

高嶋 圭史

協力研究

「カーボンナノチューブネットワーク上への生体超分子の固定」を始め 54 件

協力研究（ナノ支援）

「有機トランジスタにおける構造欠陥の役割」を始め15件

研究会

物理化学から生命科学を展望する ——分子組織体から細胞へ——	京都大学大学院理学研究科教授	寺嶋 正秀
生体金属分子科学の展望	（独）理化学研究所主任研究員	城 宜嗣
表面磁性科学の最近の展開	東京大学大学院理学系研究科教授	太田 俊明
分子情報伝達系の表面界面分子科学研究	分子科学研究所教授	宇理須恆雄
有機固体の電子的物性・機能およびその応用に 関する研究会	分子科学研究所教授	薬師 久彌
生体分光學と分子イメージングの最前線	北海道大学電子科学研究所教授	田村 守
大気科学における不均質系の分子科学	（独）国立環境研究所主任研究員	高見 昭憲

UVSOR 施設利用

「低級炭化水素の脱水素触媒に有効な担持モリブデン触媒活性種の L-XANES による微細構造解析」を始め64件

施設利用

「ケイ素およびゲルマニウムを主骨格または配位子に用いた自己集合型分子の構造解析」を始め24件

施設利用（ナノ支援）

「ロジウム上の亜酸化窒素分子の配向と活性サイト近傍の分布のSTMによる評価」を始め22件

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



大 森 賢 治	電 子 構 造 研 究 系 授	16.10.12 ～ 16.10.19	フ ラ ン ス ギ リ シ ャ	ポールサバティエ大学にて共同研究に関する打ち合わせを行った後、ギリシャで行われる XTRA meeting に出席し、情報収集を行う
小 野 晋 吾	分子制御レーザー開発研究センター 助 手	16.10.24 ～ 16.10.29	フィリピン	国際会議 SAMAHANG PISIKANG PILIPINAS に出席、発表
魚 住 泰 広	分子スケールナノサイエンスセンター 教 授	16.10.26 ～ 16.10.31	中 国	上海有機化学研究所及び北京大学訪問。遷移金属触媒を利用した環境調和型化学反応に関する学術発表・学術情報交換・討論
夢 田 博 一	分子スケールナノサイエンスセンター 助 教 授	16.11. 1 ～ 16.11. 5	シンガポール	日本-シンガポールシンポジウムに参加・発表のため
加 藤 政 博	極端紫外光研究施設 教 授	16.11. 7 ～ 16.11.15	ド イ ツ	ベルリン放射光施設におけるコヒーレント放射光実験に参加し、また研究成果発表、討論をおこなう
初 井 宇 記	極端紫外光科学研究系 助 手	16.11.13 ～ 16.11.27	ア メ リ カ イ ギ リ ス・ス イ ス	次世代軟 X 線発光分光器の開発に関する研究打ち合わせ、および情報収集のため
野 々 垣 陽 一	極端紫外光科学研究系 助 手	16.11.14 ～ 16.11.20	ア メ リ カ	AVS 51 st International Symposium & Exhibition にて研究成果発表と情報収集を行う
手 老 龍 吾	極端紫外光科学研究系 技 術 職 員	16.11.14 ～ 16.11.20	ア メ リ カ	AVS 51 st International Symposium & Exhibition に参加し最新の研究成果を発表し最新の研究情報を収集する
松 本 健 俊	分子スケールナノサイエンスセンター 助 手	16.11.14 ～ 16.11.21	ア メ リ カ	AVS 51 st International Symposium で研究発表をおこない、表面化学に関連する研究について討論と情報収集をおこなう
中 村 敏 和	分 子 集 団 研 究 系 助 教 授	16.11.15 ～ 16.11.26	イ ン ド	国際シンポジウム「ISEPR2004」「APES'04」に参加し、討論および情報収集をおこなうため
松 本 吉 泰	分子スケールナノサイエンスセンター 教 授	16.11.20 ～ 16.11.23	韓 国	2004 Korea-Japan Symposium on Frontier Photochemistry "Photochemistry and Nanotechnology" に参加して講演、情報収集をおこなう
田 中 啓 文	分子スケールナノサイエンスセンター 助 手	16.11.23 ～ 16.12. 1	中 国	アジアナノ 2004 にて講演・発表と瀋陽金属科学研究所において研究打ち合わせ
Varotsis Constantinos	岡崎統合バイオサイエンスセンター 客 員 助 教 授	16.11.24 ～ 16.12. 1	スロバキヤ	Ecological Aspects of Denitrification, with Emphasis on Agriculture に出席し研究発表をおこなうため
小 杉 信 博	極端紫外光科学研究系 教 授	16.11.29 ～ 16.12. 6	ブラジル	第2回分子物理および分子分光に関するワークショップにおいて特別講演をおこなう
北 川 禎 三	岡崎統合バイオサイエンスセンター 教 授	16.12. 1 ～ 16.12.12	イ ン ド	12/1-4 Indian Association for Cultivation にてセミナー 12/5-10 AsBIC-II (第2回アジア生物無機化学会議) へ出席
渡 邊 一 也	分子スケールナノサイエンスセンター 助 手	16.12. 2 ～ 16.12. 6	イ ン ド	Indo-Japan Joint Workshop on "Frontiers of Molecular Science Developed by Advanced Spectroscopy" にて研究成果発表、情報収集をおこなう
青 野 重 利	岡崎統合バイオサイエンスセンター 教 授	16.12. 4 ～ 16.12.12	イ ン ド	2 nd Asian Biological Inorganic Chemistry Conference に出席し研究発表をおこなうため
平 等 拓 範	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	16.12.19 ～ 16.12.24	ア メ リ カ	二国間共同研究「高帯域波長可変光源のための高強度固体レーザーの研究」に関する情報収集のため
西 信 之	電 子 構 造 研 究 系 教 授	17. 1. 2 ～ 17. 1.10	イ ン ド	Optical Probes 2005 6 th International Topical Conference on Optical Probes of Conjugated Polymers and Biosystems に出席するため
佃 達 哉	分子スケールナノサイエンスセンター 助 教 授	17. 1. 3 ～ 17. 1.12	イ ン ド	Optical Probes 2005 6 th International Topical Conference on Optical Probes of Conjugated Polymers and Biosystems に出席するため
大 森 賢 治	電 子 構 造 研 究 系 教 授	17. 1. 5 ～ 17. 1.10	台 湾	Fourth Asian Photochemistry Conference にて招待講演
木 下 一 彦	岡崎統合バイオサイエンスセンター 教 授	17. 1. 6 ～ 17. 1.23	フ ラ ン ス	Research Conference on Molecular Nano-machines 参加発表
永 瀬 茂	理 論 分 子 科 学 研 究 系 教 授	17. 1.14 ～ 17. 1.22	南アフリカ共和国	WATOC に出席し、研究課題に関する討論、情報収集をおこなうため

石 村 和 也	理論分子科学研究系 技術職員	17. 1.14 ～ 17. 1.22	南アフリカ共和国	WATOC に出席し、研究課題に関する討論、情報収集をおこなうため
岡 本 祐 幸	理論分子科学研究系 助 教	17. 1.26 ～ 17. 1.31	ド イ ツ	第1回独先端科学(JGFoS)シンポジウム(Japanese-German Frontiers of Science Symposium 2004) に出席
中 村 宏 樹	所 長	17. 1.27 ～ 17. 1.30	台 湾	台湾科学アカデミー 原子分子科学研究所にて学術講演及び今後の日台協力について意見交換
木 下 一 彦	岡崎統合バイオサイエンスセンター 教 授	17. 2. 4 ～ 17. 2.12	オーストリア	Annual Linz Winter Workshop にて参加発表
大 森 賢 治	電 子 構 造 研 究 系 教 授	17. 2. 4 ～ 17. 2.13	アメリカ	フェムト秒レーザーパルスと液晶空間変調器を組み合わせた分子のフィードバック制御に関する資料収集
香 月 浩 之	電 子 構 造 研 究 系 助 手	17. 2. 4 ～ 17. 2.19	アメリカ	フェムト秒レーザーパルスと液晶空間変調器を組み合わせた分子のフィードバック制御に関する資料収集
平 等 拓 範	分子制御レーザー開発研究センター 助 教	17. 2. 5 ～ 17. 2.11	オーストリア	先端固体フォトリニクス国際会議 ASSP に参加し研究発表をおこなうため
中 川 剛 志	分 子 構 造 研 究 系 助 手	17. 2.23 ～ 17. 3.11	フランス ドイツ・イギリス	磁気円二色性装置の打ち合わせおよび欧州における磁性超薄膜研究の情報収集をおこなう
平 田 文 男	理論分子科学研究系 教 授	17. 2.28 ～ 17. 3. 8	アルメニア共和国	Hydration and Thermodynamics of Molecular Recognition にて招待講演及び討論をおこなう
岡 本 裕 巳	分 子 構 造 研 究 系 教 授	17. 3. 8 ～ 17. 3.12	韓 国	「近接場顕微分光法を用いた超高速現象の観測」に関する共同研究実施
猿 倉 信 彦	分子制御レーザー開発研究センター 助 教	17. 3.12 ～ 17. 3.20	アメリカ	国際会議 ITST2005 に出席、発表のため
菱 川 明 栄	極端紫外光科学研究系 助 教	17. 3.24 ～ 17. 3.28	韓 国	第9回東アジア化学反応ワークショップにおいて招待講演のため
南 部 伸 孝	計算分子科学研究系 助 手	17. 3.24 ～ 17. 3.28	韓 国	The 9 th East Asian Workshop on Chemical Reactions において発表をする
田 中 晃 二	錯 体 化 学 実 験 施 設 教 授	17. 3.17 ～ 17. 3.23	アメリカ	Brookhaven 国立研究所での国際共同研究の打ち合わせ カリフォルニア大学サンディエゴ校での二酸化炭素還元に関する研究打ち合わせ
繁 政 英 治	極端紫外光研究施設 助 教	17. 3.18 ～ 17. 3.31	フランス	ソレイユワークショップ（ソレイユにおける原子分子の高分解能分光実験）
中 村 宏 樹	所 長	17. 3.19 ～ 17. 3.23	アメリカ	J.Chem. Phys. Editorial Board Meeting 及びアメリカ物理学会
見 附 孝 一 郎	極端紫外光科学研究系 助 教	17. 3.24 ～ 17. 3.28	韓 国	第9回化学反応に関する東アジアワークショップに出席、研究発表をおこなう
中 村 宏 樹	所 長	17. 3.31 ～ 17. 4. 6	アイルランド	「分子衝突及び化学反応のための半古典力学的手法」に関するワークショップでの招待講演



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
16.10.16	片柳英樹	採用	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門助手	千葉大学電子光情報基盤技術研究施設非常勤研究員	
16.10.16	原田美幸	採用	技術課技術職員	基礎生物学研究所特定契約職員 特定技術職員	
16.11.1	石田干城	採用	計算分子科学研究系計算分子科学第一研究部門助手	米国ラトガース大学理学部博士研究員	
16.11.1	石田干城	勤務命令	計算科学研究センター助手	計算分子科学研究系計算分子科学第一研究部門助手	
16.10.16	中川さつき	採用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門事務支援員		
16.11.1	KULKARNI, Anant	採用	理論分子科学研究系分子基礎理論第一研究部門専門研究職員		
16.11.1	安達章子	採用	理論分子科学研究系分子基礎理論第一研究部門事務支援員		
16.11.1	岩永清子	採用	電子構造研究系基礎電子化学研究部門事務支援員		
16.10.31	大塚雄一	辞職	科学技術振興機構博士研究員	理論分子科学研究系分子基礎理論第三研究部門研究員	
16.10.31	城口直子	辞職		分子スケールナノサイエンスセンター事務支援員	
16.10.31	皿井宏昌	辞職		技術課技術補佐員	
16.10.1	高木紀明	客員本務先変更	電子構造研究系電子構造研究部門助教授	東京大学大学院新領域創成科学研究科助教授	
16.10.16	加藤晃一	委嘱	分子スケールナノサイエンスセンター先導分子科学研究部門教授	(名古屋市立大学大学院薬学研究科教授)	
17.1.31	秋永宣伸	辞職	産業技術総合研究所非常勤研究員	理論分子科学研究系分子基礎理論第一研究部門専門研究職員	
17.2.18	Khajuria, Yugal	辞職	Indian Institute of Technology Madras Chennai 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研究員	
17.3.1	Olga, Drozdova	採用	分子集団研究系物性化学研究部門研究員	分子集団研究系物性化学研究部門研究員	継続採用
17.2.28	Olga, Drozdova	退職	分子集団研究系物性化学研究部門研究員	分子集団研究系物性化学研究部門研究員	
17.4.1	小澤岳昌	採用	分子構造研究系分子動力学研究部門助教授	東京大学大学院理学系研究科講師	
17.4.1	長谷川宗良	採用	電子構造研究系電子状態動力学研究部門助手	理化学研究所基礎科学特別研究員	
17.4.1	笹川拡明	採用	分子スケールナノサイエンスセンター先導分子科学研究部門助手	名古屋市立大学大学院薬学研究科研究員	
17.4.1	藤原基靖	採用	技術課六班(ナノサイエンス技術班)ナノサイエンス技術一係員		
17.4.1	中野路子	採用	技術課六班(ナノサイエンス技術班)ナノサイエンス技術二係員		

17. 4. 1	水 川 哲 徳	昇 任	技術課六班 (ナノサイエンス技術班) ナノサイエンス技術一係主任	技術課 第五技術班 錯体化学 実験施設技術係員
17. 4. 1	鈴 井 光 一	配 置 換	技術課一班長 (機器開発技術班)	技術課 第三技術班長
17. 4. 1	吉 田 久 史	配 置 換	技術課二班長 (電子回路・ガラ ス機器開発技術班)	技術課 第一技術班長
17. 4. 1	堀 米 利 夫	配 置 換	技術課三班長 (極端紫外光技術 班)	技術課 第四技術班長
17. 4. 1	山 中 孝 弥	配 置 換	技術課四班長 (光計測技術班)	技術課 第二技術班長
17. 4. 1	水 谷 文 保	配 置 換	技術課五班長 (計算科学技術班)	技術課 第五技術班長
17. 4. 1	水 谷 伸 雄	配 置 換	技術課一班 (機器開発技術班) 機器開発技術一係長	技術課 第二技術班 極端紫外 光科学研究系技術係長
17. 4. 1	青 山 正 樹	配 置 換	技術課一班 (機器開発技術班) 機器開発技術二係長	技術課 第三技術班 装置開発 技術係長
17. 4. 1	永 田 正 明	配 置 換	技術課二班 (電子回路・ガラス機器開 発技術班) ガラス機器開発技術係長	技術課 第五技術班 分子スケール ナノサイエンス第一技術係長
17. 4. 1	蓮 本 正 美	配 置 換	技術課三班 (極端紫外光技術班) 極端紫外光技術一係長	技術課 第四技術班 極端紫外 光実験技術係長
17. 4. 1	山 崎 潤一郎	配 置 換	技術課三班 (極端紫外光技術班) 極端紫外光技術二係長	技術課 第四技術班 分子制御 レーザー開発技術係長
17. 4. 1	中 村 永 研	配 置 換	技術課三班 (極端紫外光技術班) 極端紫外光技術三係長	技術課 第一技術班 電子構造 研究系技術係長
17. 4. 1	高 山 敬 史	配 置 換	技術課六班 (ナノサイエンス技術 班)ナノサイエンス技術一係長	技術課 第五技術班 分子スケール ナノサイエンス第二技術係長
17. 4. 1	酒 井 雅 弘	配 置 換	技術課三班 (極端紫外光技術班) 極端紫外光技術三係主任	技術課 第五技術班 分子スケール ナノサイエンス第二技術係主任
17. 3.31	岡 本 祐 幸	辞 職	名古屋大学大学院理学研究科教授	理論分子科学研究系 分子基礎 理論第一研究部門 助教授
17. 3.31	夢 田 博 一	辞 職	大阪大学大学院基礎工学研究科 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助教授
17. 3.31	足 立 健 吾	辞 職	早稲田大学理工学部客員研究助 手 (非常勤)	相関分子科学研究系相関分子科 学第一研究部門助手
17. 3.31	野々垣 陽 一	辞 職	シチズン時計株式会社研究員	極端紫外光科学研究系反応動力 学研究部門助手
17. 3.31	南 部 伸 孝	辞 職	九州大学情報基盤センター助教授	計算分子科学研究系計算分子科 学第一研究部門助手
17. 3.31	北 川 禎 三	併任終了		分子構造研究系研究主幹
17. 4. 1	岡 本 裕 巳	併 任	分子構造研究系研究主幹	
17. 4. 1	刈 崎 員 弘	委 嘱	理論分子科学研究系分子基礎理 論第四研究部門教授	(愛媛大学 理学部 教授)
17. 4. 1	小松崎 民 樹	委 嘱	理論分子科学研究系分子基礎理 論第四研究部門助教授	(神戸大学 理学部 助教授)



17. 4. 1	寺 嶋 正 秀	委 嘱	分子構造研究系分子構造学第二研究部門教授	(京都大学大学院理学研究科教授)
17. 4. 1	小 島 憲 道	委 嘱	分子集団研究系分子集団研究部門教授	(東京大学大学院総合文化研究科教授)
17. 4. 1	河 本 充 司	委 嘱	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)
17. 4. 1	原 徹	委 嘱	極端紫外光研究施設助教授	(理化学研究所前任研究員)
17. 4. 1	石 井 洋 一	委 嘱	錯体化学実験施設配位結合研究部門教授	(中央大学理工学部教授)
17. 4. 1	林 高 史	委 嘱	錯体化学実験施設配位結合研究部門教授	(大阪大学大学院工学研究科教授)
17. 4. 1	石 森 浩一郎	本務先変更	分子構造研究系分子構造学第二研究部門教授	(北海道大学大学院理学研究科教授)
17. 3.31	波 田 雅 彦	委嘱終了	(東京都立大学大学院理学研究科教授)	理論分子科学研究系分子基礎理論第四研究部門教授
17. 3.31	中 嶋 隆	委嘱終了	(京都大学エネルギー理工学研究所助教授)	理論分子科学研究系分子基礎理論第四研究部門助教授
17. 3.31	太 田 俊 明	委嘱終了	(東京大学大学院理学系研究科教授)	分子構造研究系分子構造学第二研究部門教授
17. 3.31	榎 敏 明	委嘱終了	(東京工業大学大学院理工学研究科教授)	分子集団研究系分子集団研究部門教授
17. 3.31	内 藤 俊 雄	委嘱終了	(北海道大学大学院理学研究科助教授)	分子集団研究系分子集団研究部門助教授
17. 3.31	伊 藤 健 二	委嘱終了	(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)	極端紫外光研究施設助教授
17. 3.31	松 坂 裕 之	委嘱終了	(大阪府立大学総合科学部教授)	錯体化学実験施設配位結合研究部門教授
17. 3.31	上 野 圭 司	委嘱終了	(群馬大学工学部教授)	錯体化学実験施設配位結合研究部門教授
17. 4. 1	隅 本 倫 徳	採 用	理論分子科学研究系理論分子科学第一研究部門専門研究職員	京都大学大学院工学研究科教務補佐員
17. 4. 1	高 木 望	採 用	理論分子科学研究系理論分子科学第一研究部門専門研究職員	日本学術振興会特別研究員
17. 4. 1	久保田 陽 二	採 用	理論分子科学研究系理論分子科学第三研究部門専門研究職員	日本学術振興会特別研究員
17. 4. 1	Gopakumar Geetha	採 用	理論分子科学研究系理論分子科学第三研究部門専門研究職員	産業総合研究所計算科学研究部門非常勤研究員
17. 4. 1	堀 本 訓 子	採 用	分子構造研究系分子構造学第一研究部門研究員	日本学術振興会特別研究員
17. 4. 1	宮 崎 充 彦	採 用	電子構造研究系電子状態動力学研究部門研究員	京都大学大学院理学研究科研究機関研究員
17. 4. 1	穂 坂 綱 一	採 用	電子構造研究系電子状態動力学研究部門研究員	
17. 4. 1	松 田 晃 孝	採 用	極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門研究員	

17. 4. 1	ESTACIO Elmer	採用	分子制御レーザー開発研究センター研究員	
17. 4. 1	神谷 育代	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研究員	
17. 4. 1	宮里 裕二	採用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員	
17. 4. 1	渡邊 孝仁	採用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員	
17. 4. 1	田熊 元紀	採用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員	
17. 4. 1	藤田 光晴	採用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員	
17. 3.30	小野 ゆり子	退職	日本学術振興会特別研究員	理論分子科学研究系理論分子科学第一研究部門専門研究職員
17. 3.30	小久保 裕功	退職	ヒューストン大学博士研究員	理論分子科学研究系理論分子科学第一研究部門専門研究職員
17. 3.30	李 秀栄	退職	日本学術振興会海外特別研究員	理論分子科学研究系理論分子科学第一研究部門専門研究職員
17. 3.30	Anant, Kulkarni	退職	インド University of Pune 博士研究員	理論分子科学研究系理論分子科学第一研究部門専門研究職員
17. 3.30	前島 展也	退職	東北大学理学部研究員	理論分子科学研究系理論分子科学第三研究部門研究員
17. 3.31	永原 哲彦	退職	九州大学大学院工学研究院学術研究員	分子構造研究系分子構造学第一研究部門研究員
17. 3.31	山本 貴	退職	日本学術振興会特別研究員	分子集団研究系物性化学研究部門研究員
17. 3.30	PAVEL Nicolaie	退職	INSTITUTE OF AROMIC PHYSICS 研究員	分子制御レーザー開発研究センター専門研究職員
17. 3.30	眞木 淳	退職		理論分子科学研究系理論分子科学第一研究部門専門研究職員
17. 3.30	齊川 次郎	退職	東京工業大学資源化学研究所産学官連携研究員	分子制御レーザー開発研究センター専門研究職員
17. 3.30	Zhang, Dao	退職	中国夏旦大学化学系研究員	錯体化学実験施設錯体物性研究部門専門研究職員
17. 3.31	高松 軍三	退職		技術課技術支援員
17. 3.31	柴山 出男	退職		技術課技術支援員
17.3.31	伊藤 暁	退職	計算科学研究センター専門研究職員	理論分子科学研究系研究支援員(RA)
17. 3.31	溝呂木 直美	退職		理論分子科学研究系研究支援員(RA)
17. 3.31	石塚 良介	退職		理論分子科学研究系研究支援員(RA)
17. 3.31	大坪 才華	退職		分子集団研究系研究支援員(RA)



17. 3.31	前 田 圭 介	退 職	分子集団研究系研究支援員 (RA)
17. 3.31	三 澤 宣 雄	退 職	極端紫外光科学研究系研究支援員 (RA)
17. 3.31	Md. Mashiur Rahman	退 職	極端紫外光科学研究系研究支援員 (RA)
17. 3.31	冬 木 正 紀	退 職	分子スケールナノサイエンスセンター研究支援員 (RA)
17. 3.31	澤 田 健	退 職	分子スケールナノサイエンスセンター研究支援員 (RA)
17. 3.31	坂 上 知	退 職	分子スケールナノサイエンスセンター研究支援員 (RA)
17. 3.31	高 田 正 基	退 職	分子スケールナノサイエンスセンター研究支援員 (RA)
17. 3.31	西 村 知 紘	退 職	分子スケールナノサイエンスセンター研究支援員 (RA)
17. 3.31	矢 島 高 志	退 職	分子スケールナノサイエンスセンター研究支援員 (RA)
17. 3.31	小 澤 寛 晃	退 職	分子スケールナノサイエンスセンター研究支援員 (RA)
17. 3.31	坂 巻 順一郎	退 職	分子スケールナノサイエンスセンター研究支援員 (RA)
17. 3.31	皆 川 真 規	退 職	分子スケールナノサイエンスセンター研究支援員 (RA)
17. 3.31	別 府 朋 彦	退 職	分子スケールナノサイエンスセンター研究支援員 (RA)
17. 3.31	荒 川 孝 保	退 職	分子スケールナノサイエンスセンター研究支援員 (RA)
17. 3.31	日 野 貴 美	退 職	錯体化学実験施設研究支援員 (RA)
17. 3.31	加 藤 貴 志	退 職	錯体化学実験施設研究支援員 (RA)
17. 3.31	藤 井 達 也	退 職	錯体化学実験施設研究支援員 (RA)
17. 3.31	西 龍 彦	退 職	極端紫外光実験施設研究支援員 (RA)
17. 4.16	齋 藤 香	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事務支援員
17. 4.30	ZOU Shiyang	退 職	理論分子科学研究系分子基礎理論第二研究部門研究員
17. 5. 1	江 東 林	採 用	関連領域研究系相関分子科学第一研究部門助教授
17. 5. 1	山 口 大	採 用	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支援員
17. 5. 1	溝呂木 直 美	採 用	理論分子科学研究系分子基礎理論第一研究部門研究支援員 (RA)

17. 5. 1	白 鳥 和 矢	採 用	理論分子科学研究系分子基礎理論第二研究部門研究支援員 (RA)
17. 5. 1	岩 佐 豪	採 用	理論分子科学研究系分子基礎理論第二研究部門研究支援員 (RA)
17. 5. 1	松 上 優	採 用	理論分子科学研究系分子基礎理論第三研究部門研究支援員 (RA)
17. 5. 1	石 塚 良 介	採 用	理論分子科学研究系分子基礎理論第三研究部門研究支援員 (RA)
17. 5. 1	三 宅 伸一郎	採 用	電子構造研究系電子状態動力学研究部門研究支援員 (RA)
17. 5. 1	田 中 雅 之	採 用	分子集団研究系物性化学研究部門研究支援員 (RA)
17. 5. 1	前 田 圭 介	採 用	分子集団研究系物性化学研究部門研究支援員 (RA)
17. 5. 1	大 坪 才 華	採 用	分子集団研究系分子集団動力学研究部門研究支援員 (RA)
17. 5. 1	RAHMAN, Mashiur	採 用	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門研究支援員 (RA)
17. 5. 1	三 澤 宣 雄	採 用	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門研究支援員 (RA)
17. 5. 1	張 振 龍	採 用	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門研究支援員 (RA)
17. 5. 1	KAFLE, Bhim Prasad	採 用	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門研究支援員 (RA)
17. 5. 1	中 井 直 史	採 用	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門研究支援員 (RA)
17. 5. 1	小 澤 寛 晃	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支援員 (RA)
17. 5. 1	矢 島 高 志	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支援員 (RA)
17. 5. 1	河 尾 真 宏	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支援員 (RA)
17. 5. 1	酒 巻 順一郎	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研究支援員 (RA)
17. 5. 1	皆 川 真 規	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研究支援員 (RA)
17. 5. 1	荒 川 孝 保	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研究支援員 (RA)
17. 5. 1	別 府 朋 彦	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研究支援員 (RA)
17. 5. 1	川 出 令	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研究支援員 (RA)
17. 5. 1	滝 澤 隆	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研究支援員 (RA)
17. 5. 1	福 山 尚 志	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研究支援員 (RA)



17. 5. 1	神 谷 由紀子	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研究支援員 (RA)	
17. 5. 1	矢 木 宏 和	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研究支援員 (RA)	
17. 5. 1	鈴 木 麻衣子	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研究支援員 (RA)	
17. 5. 1	前 野 亜 弥	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研究支援員 (RA)	
17. 5. 1	長 野 真 弓	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研究支援員 (RA)	
17. 5. 1	住 吉 晃	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研究支援員 (RA)	
17. 5. 1	冬 木 正 紀	採 用	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支援員	
17. 5. 1	井 上 絢 子	採 用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究支援員 (RA)	
17. 5. 1	福 嶋 貴	採 用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究支援員 (RA)	
17. 5. 1	西 龍 彦	採 用	極端紫外光研究施設研究支援員 (RA)	
17. 5. 1	水 野 貴 文	採 用	極端紫外光研究施設研究支援員 (RA)	
17. 6. 1	山 田 清 志	採 用	計算科学研究センター専門研究職員	
17. 6. 1	山 崎 由 実	採 用	理論分子科学研究系分子基礎理論第三研究部門事務支援員	
17. 6. 1	金 安 達 夫	採 用	極端紫外光研究施設研究員	
17. 6. 1	山 田 亮 転	出	大阪大学大学院基礎工学研究科助教授	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助手

分子研レターズ52号をお届けします。法人化後、研究所・大学を問わずより能動的な情報発信が望まれています。分子研もこのレターズをはじめとして多くの刊行物を通した情報発信を行っています。今後他の刊行物との関連も含め、内容や手法に関する抜本的な議論が必要になってくるものと思われます。レターズの「読み物」的なアプローチがどのように生かされていくべきか、本誌読者の皆様の御意見を是非お待ちしております。

(櫻井英博 記)

分子研レターズ編集委員

大 森 賢 治 (委員長)

櫻 井 英 博 (本号編集担当)

石 田 千 城

小 澤 岳 昌

川 口 博 之

猿 倉 信 彦

中 村 敏 和

彦 坂 泰 正

菱 川 明 栄

吉 岡 資 郎

米 満 賢 治

分子研広報委員会担当

原 田 美 幸

中 村 理 枝

分子研レターズ No. 52

発行年月	平成17年8月
印刷年月	平成17年9月
発行	自然科学研究機構 分子科学研究所
編集	分子研レターズ編集委員会
印刷	ブラザー印刷株式会社

自然科学研究機構
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/>