

分子研と研究者をつなぐ

LIMS

分子研
レターズ

Letters

VOL. **55**
FEBRUARY 2007
ISSN 0385-0560

レターズ 爽|春|座|談|会

「これからの分子科学と 分子研の針路」

[分子研研究顧問]

近藤 保×廣田 襄×玉尾皓平

巻頭言

AMO領域科学と分子科学研究所

宅間 宏
電気通信大学名誉教授

分子科学の最先端

大きい分子の量子化学計算

永瀬 茂
「理論分子科学研究系分子基礎理論第一研究部門」



巻頭言

01 AMO領域科学と分子科学研究所

● 宅間 宏 [電気通信大学名誉教授]

レターズ

02 爽春座談会
「これからの分子科学と分子研の針路」

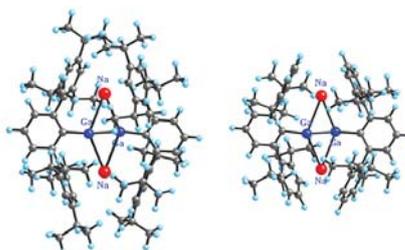
● 近藤 保 × 廣田 襄 × 玉尾皓平 [分子研研究顧問]



分子科学の最先端

06 大きい分子の量子化学計算

● 永瀬 茂 [理論分子科学研究系分子基礎理論第一研究部門]



IMS ニュース

- 10 自然科学研究機構シンポジウム「爆発する光科学の世界——量子から生命体まで——」
- 11 分子科学研究所 一般公開
- 12 分子科学会 (Japan Society of Molecular Science) 設立
- 13 第66回岡崎コンファレンス
"International Workshop on Soft X-ray Raman Spectroscopy and Related Phenomena (IWSXR)"
- 14 夏の体験入学
- 16 総研大アジア冬の学校2006
- 17 受賞者紹介
- 23 大瀧仁志先生を悼む
- 24 新装置紹介 — 高分解能真空紫外角度分解光電子分光ビームライン: UVSOR-II BL7U
- 26 国際研究協力事業報告 — 第一回JSPSアジア研究教育拠点事業「物質・光・理論分子科学フロンティア」冬の学校

IMS カフェ

- 28 ニューラボ — 桑島邦博 [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]
- 29 OBの今 — 加藤立久 六車千鶴 柘植清志
- 34 分子研を去るにあたり
- 35 外国人研究職員の紹介
- 36 外国人研究職員の印象記
- 38 新人自己紹介

共同利用研究

- 40 共同研究実施状況

@ 総研大

- 41 コラム — 分子研での研究と学生生活 服部直史 [構造分子科学専攻]
分子研生活を振り返って 前田圭介 [機能分子科学専攻]
分子研での学生生活 吉村英哲 [構造分子科学専攻]
- 44 イベントレポート
- 45 総研大生受賞者紹介
- 45 修了学生及び学位論文名
- 45 新入生紹介

■ 各種一覧

- 46 分子科学フォーラム・分子研コロキウム開催一覧
- 46 人事異動一覧
- 48 海外渡航一覧

AMO領域科学と分子科学研究所

宅間 宏

[電気通信大学名誉教授]

本表題の「AMO領域科学」とは、米国物理学会で分野名として使われている“Atomic, Molecular, and Optical Physics”を物理学だけでなく、より広い自然科学の領域に拡張したものを意味する。この領域は、量子力学の黎明期において主役を演じてから、しばらくの間主役の座を離れたと見られてきた。

勿論それは見かけ上のものであって、狭い意味の光でなく、全領域の電磁波と物質との相互作用と、それらを利用した基礎科学研究全般に目を広げれば、この領域の科学は常に自然科学の発展において重要な役割を演じてきたのである。それが俄かに人目につくようになったのは、レーザーの出現とその技術的発展のインパクトが大きかったからと言うことが出来よう。

人類の歴史における二十世紀の際立った特徴の一つが、自然科学の基礎的な理解の飛躍的進歩と、その成果の応用による技術全般の大きな発展であるという事は、文明社会の人々に共通する認識であろう。その中でも、AMO領域の進歩は特筆に値するものであった。因みに、一昨年（2005）は、アインシュタインの光量子理論と特殊相対論の誕生以来100年にあたる「物理年」として、様々な記念行事が開催された記憶も新しい。同じ年のノーベル物理学賞も、光科学で顕著な功績を挙げた3人に与えられた。

特殊相対論が光速不変という簡単明瞭な法則で表現され、実験的な検証も明快に行われるのに対して、20世紀に確立された理論体系として特殊相対論と双璧をなす量子力学においては、多様な物質の構造を扱うものである故に、3体以上の問題を解析的には解けない人間の能力では、物理的な考察によって上手に問題を単純化しないことには手も足も出ない。

しかしまた一方で、そのように複雑な系から、問題の本質に係わる概念を巧みに注出して、自然の本質を量子力学的に描くことは、分子科学の醍醐味の一つであると言うこともできよう。

分子科学の意義はいろいろな面から見て多様であるが、量子力学の実験的検証の対象としても、原子・分子の科学ほど魅力的なものは無い様に思われる。

物質の波動性に関しては、レーザー冷却した極低温原子を用いて、ダブルスリットによる干渉実験、原子波ホログラフィーや、量子反射（注：原子の物質表面における反射が、クーロンポテンシャルでなく、波動インピーダンスの空間的不連続による反射として観測される現象）の実験的検証まで行われている。

この領域の全国的な研究拠点として、分子科学研究所は単に「分子の科学」だけでなく、まさにAMO領域の科学研究の拠点として重要な役割を果たしてきた。例えば、最近行われた極短パルス高出力レーザーによる量子力学的状態変化の実験の中でも特に筆者の目に快く映るのは、極短パルスレーザーによる分子振動の可視化である。これは単に世界最高精度で分子振動を観測した「分子の科学」のみでなく、我々の量子力学的自然認識の正しさを証明したものである。このような実験的研究の基盤として、最先端のレーザーその他の光学的技術が不可欠であって、その意味でまさにAMO科学の最先端の成果である。

しかし、この領域の研究は、実用的な技術の基盤としても極めて重要であるにも関わらず、高度の学術的水準を要求するが故に、日本の民間企業からは、ともすれば敬遠されてきた。因みに、この領域の研究に欠かせない多くの研究用機材を輸入に頼っている現状は無視できない。金銭的な収支が優先する昨今の日本企業の多くは、優れた研究者を放出し、重要な技術の基盤となる学術研究への関与を避ける傾向があまりにも顕著である。分子科学研究所が、単にその中で優れた成果を生み出すだけでなく、研究条件に必ずしも恵まれない、世界的にも高い評価を受けている国内の研究センター、研究室等の中心となり、この領域をますます活性化することを強く望むものである。



たくま・ひろし

昭和5年6月8日東京にて出生。旧制浦和高等学校を経て1953年東大物理学科（旧制）卒業。日本石油（株）中央技術研究所・研究員を経て1956年より東大理学部助手（霜田研究室）として分子のマイクロ波分光学、分子線レーザー分光学の研究。1959年東大工学部物理工学科専任講師。1962年理学博士の学位取得。1963-4年米国NBS（現在のNIST）研究員として誘導ラマン散乱などの研究に従事。1965年東大教養学部基礎科学科助教授、1967年同教授として、非線形光学、レーザー分光学などの研究。1969年評議員として教養学部無期限ストの収拾に尽力。1970-74年日本電子（株）取締役・開発事業部長。1974年電気通信大学理工学科学科教授。1980年レーザー研究センターを設立し、1996年定年退職までセンター長を務め、各種高出力レーザーの基礎研究、原子・分子の高分解能レーザー分光学、中性原子のレーザー冷却、原子光学などの研究。1996-2000年日本原子力研究所特別研究員として関西研究所光量子科学研究センター設立に協力。極短パルス・高出力レーザーの開発と応用研究を行う。この間日本学術会議（14期、15期）会員、文部省学術審議会専門委員、大阪大学レーザー核融合研究センター教授、米国・カリフォルニア大学ローレンス・リヴァモア研究所レーザー部門諮問委員会メンバー、ドイツ・コンスタンツ大学客員教授、OSA理事会メンバーなどを併任。紫綬褒章、旭日中綬章受賞。日本物理学会、プラズマ・核融合学会会員。応用物理学会功労会員、原子衝突研究会名誉会員、日本レーザー医学会名誉会員。OSAフェロー会員、IEEE終身フェロー。

爽 | 春 | 座 | 談 | 会 「これからの分子科学と分子研の針路」

加速度的な広がりを見せる先端科学領域。

日々激変する環境の中、分子科学という学問分野をどう捉えていくべきか、そして分子研は何処を目指すべきなのか？

今号のレターズでは研究顧問の近藤保先生、廣田襄先生、玉尾皓平先生を迎え、編集委員長の森賢治教授が進行役として、分子科学や分子研に対する忌憚のないご意見を大いに語っていただきました。

分子科学に思うこと

近藤 ■自分の研究分野についての話をすれば、話題が広がると思いますので、先ず私が話題をご提供しましょう。

私は広い意味でのクラスターサイエンス、分子や原子が複数集まってできる新しい物質系を研究しています。集団の中で互いに協力することで、全体の性質をつくっているところがポイントです。私が学生だった頃は、二酸化炭素やアンモニアといった基礎的な分子が研究対象の中心で、常に分子中心にものを考えてきた。それが、実験手段やコンピュータの進化により、非常に複雑な分子を扱うようになってきたわけです。DNAやポリアセチレンがその代表例です。

そういう研究には2つの道がある。ひとつはどのように原子と分子が相互に働き合って、集団として全体の性質をつくっているか、その原理を追求するサイエンスです。もうひとつは、できた集合体をどう使うかという材料科学的なアプローチ。この2つが絡み合いながら進んでいくのが、私が考える分子科学の筋道です。これから、分子科学はますます複雑な方向に進むと思います。

この考え方を広げていくと、クラスターの構成要素は何でもよくて、人にも当てはまる。群集心理という現象はそのいい例で、家ではいい子なのに、外のグループに入るといじめっ子になったりする。そこまで広がると問題かもしれないが、そんなことにも繋がれる感覚です。

廣田 ■私自身は、分子科学というものを、なるべく広く捉えたいと思っています。日本の分子科学は、水島先生以来の分子構造をはじめとする、大変伝



格好わるくても新しい
そんなことに挑戦できる人材を

近藤 保 (こんどう・たもつ)

1967年東京大学大学院理学系研究科化学専門課程博士修了、1997年3月東京大学大学院理学系研究科教授を定年で退官、同年4月より豊田工業大学教授。東京大学名誉教授。1999年より分子科学研究所研究顧問。

統のある学問分野ですが、それにこだわる必要はない。サイエンス全体に大きなインパクトを与えられるような分子科学であるためには、閉じた小さな世界ではだめだと思うのです。そういう意味で、これまでの自分がやってきたことを考えると、内心、忸怩たる思いがあります。

これまでの化学者は、どちらかというとお行儀よくピュアな分野で研究をやってきた。それに対し、物理学者はわりと帝国主義的だと言われている。いろんな分野に物理学のテリトリーをどんどん広げ、天文学の分野では宇宙物理学、生物学の分野では生物物理学という学問名ができて発展しているわ



周辺分野を取り込めば
化学はもっと伸びていく

廣田 襄 (ひろた・のぼる)

1959年京都大学理学部卒、1962年ワシントン大学文理学部博士課程修了、Ph. D.、1963年シカゴ大学博士研究員、1965年ニューヨーク州立大・ストーニーブルック校助教、準教授、教授をへて、1975年京都大学理学部教授、2000年定年退官、京都大学名誉教授。2001年より分子科学研究所研究顧問。

けです。ただし、名称としては生物物理学ですが、実際のところあれは生物物理化学で、化学が中心の学問だと私は思っています。

一方、化学者というのは、そういうことをやってこなかったから、分野的に縮こまってしまって、非常に損をしているように思います。ピュアな分野できちんと研究することはもちろん重要ですが、それだけじゃなくて、もっと周辺分野を取り込んでいく精神を持たれば、学問として伸びていくはずですよ。

そういうことで考えると、分子科学ではスモールモレキュールも重要ですが、これから伸びるのは、先ほど近藤先生が話されたような複雑なものだと



他の学問に対する先導性こそ 化学の最も重要な役割だ

玉尾 皓平(たまおこうへい)

1970年京都大学大学院工学研究科合成化学専攻博士課程を経て同年同大学工学部合成化学科助手。73年～74年ニューヨーク州立大学博士研究員。86年京都大学工学部助教授。93年～2005年同大学化学研究所教授。2005年4月より理化学研究所フロンティア研究システム長、京都大学名誉教授。2004年より分子科学研究所研究顧問。

思います。化学者は自分達の“味”をうまくいかしながら、複雑なものをどう取り込んでいくかを考えるべきです。そこが、今後の分子科学の中心だと思います。

玉尾■私の考える分子科学の分子というものは、まさに化学の代名詞だと思っています。電子がローカライズした、塊の物性をもった、広いイメージの分子。それが集合して、実際に機能を発現する、そんなものだと思っています。

何を分子科学とするかということに関係するのかもしれませんが、最近のノーベル化学賞では「あれは本当に化学か？」と話題になるほど、化学の領域を広く捉えていますね。これからは、

生物寄りの領域もきっちりカバーして、化学の領域として取り込んでいくべきだと思います。

流行から外れた、新しいテーマを

廣田■私は歴史に興味を持っていて、最近イギリスのJ. D. バナールという研究者のことを調べたんです。1929年、ケンブリッジ大学のキャヴェンディッシュ研究所に結晶構造学の講師の職ができたとき、結晶学者だった彼が採用されました。最初は合金なんかの研究をやっていたのですが、1930年代初頭から蛋白質の結晶学、つまりX線での構造解析をやり始めた。その時代、蛋白質のX線構造解析なんてことはあまり誰も考えなかったろうし、殆ど夢のような話だったはずですが、でもバナールは生命の中心である蛋白質の構造を解明することが、生命の秘密を解くカギになると考えたのです。そう信じて、蛋白質の構造解析をやり始めたらしい。そして、いつできるかわからないことを必死でやっていくうちに、分子生物学が発展し、現在の構造生物学につながってきた。ケンブリッジの結晶学の源となったわけです。

私が言いたいことは、海のものとも山のものともわからないスパンの長い研究から、もの凄い学問が出てきたことの素晴らしさ。日本ではそれができなかった、そういう方向に行かなかった。この差は何かというのは難しい問題です。

大森■成功例としてバナールの話が出ましたが、その一方で、失敗した人も多はずです。そんなことを寛容する姿勢が、日本社会にあるかという点が問題です。私の想像ですが、その時代のイギリスには、失敗を恐れず、失



〈進行〉
大森賢治
編集委員長

敗に寛容な雰囲気があったのかもしれませんが。

廣田■加えて、物理出身のバナールがケンブリッジに行ったときは、生化学の教授や多様な分野の若い研究者がいて、自由で学際的な研究をする雰囲気があったのかもしれない。一方、日本の大学には講座制があり、皆お行儀よく自分の領域で研究をしている。これでは新しい学問はなかなか伸びていかないでしょう。

大森■この辺に違いがありそうですね。
近藤■日本の研究者の多くは流行のテーマをやりたがる。そうすれば安心で、予算もとりに易いからです。しかし、人気はないけれど人と違って新しい、そんな研究にもっと拍手を送り、評価する文化を育てないと、独創的な科学は発展しませんよ。人と違う研究をするんだというメンタリティの重要性を、もっといろんなところで言っていけないといけな。

廣田■イギリスにはイングリッシュ エキセントリシティという言葉がありますよね。「人と違うことを好む」という精神がいいのかなと思います。

近藤■1930年代のイギリスで、蛋白質のX線構造解析の研究にお金が出たのは、できそうにないとんでもないことだったからです。日本で独創的な研究が少ないのは日本人の能力が低いのではなく、とんでもないことに挑戦したり、それをサポートしようと思わな

いからです。これは分子研だけじゃなくて日本全体の問題。日本では誰も読まないような報告書ばかり書かされて、本当にしょうがない(笑)。

玉尾 ■ イギリスと日本の大きな差として、科学に対する自負というものもあるでしょう。西洋においては、まさに自分達が科学をつくってきたという意識が強いわけで、そこが日本とは全く違う。例えば、バイルシュタイン、ケミカル・アブストラクト、それにケンブリッジのX線データベース。こういったものの重要性を、それがつくられた当時の日本で感じることはあり得なかったわけです。この違いはちょっとやそっとでは追いつけない。だからこそ、日本では流行に乗らない、新しい取り組みを続ける必要があると思います。そして、新しいことに取り組む人にお金を出して、サポートしていかないといけない。

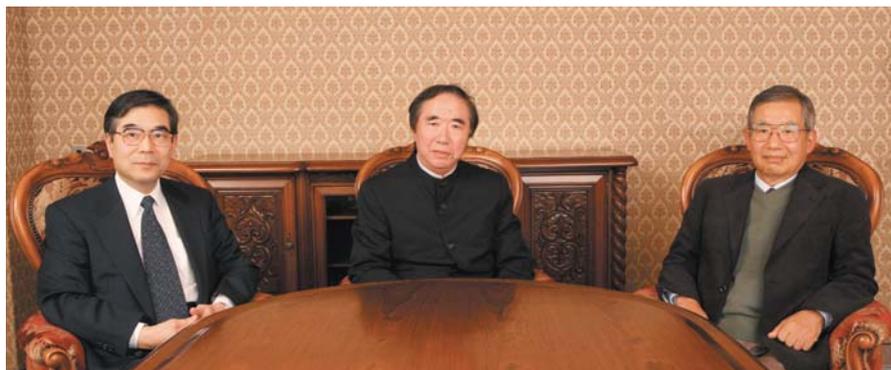
近藤 ■ どうせどんなテーマでも、僅かな確率でしか成功しないんですから(笑)。

今、日本の若い人に何の研究をしているか尋ねると、自分の研究がどんなに役立つかを延々と述べる。そうしないとお金が出ないと言うのですが、これは問題。お金の出しかたに問題があるかもしれない。研究者ばかりに新しいことをしろと言うのではなく、お金を出す立場の人や政府に意見を言える人が、全てそういう意識をもたないとだめでしょう。

玉尾 ■ 基礎的な研究のサポートは科研費ですと国は言っていますが、他の校費がどんどん減ってきていますね。

廣田 ■ これはまずい。特に地方大学は厳しい状況だと聞いています。有名大学は外部資金でそれなりことができますが、地方ではお金がなくて、なにでもできなくなってくる。

私は流行の最先端のテーマで欧米と競争するのではなく、セレンディピティーがいきる領域で競うべきだと



思っています。ノーベル賞をとられた白川先生、田中耕一さんもこれに近い。そういう面では日本に希望がありますが、それに必要なのは、いろいろとところに種をまくこと。流行の最先端のテーマだけをやっていてもそういうものは出てこないと思います。そのためには地方大学でも、自分の好きな研究ができる環境が必要なのに、それがだんだん悪くなってきていることが、私は非常に心配です。

近藤 ■ お金を出す人が誰かということも大きなポイントでしょうね。昔イギリスでは、王様や貴族がお金を出した。パトロンが感覚的に研究内容を理解できればお金が出たんです。今、日本で研究にお金を出すのは納税者。これが難しい。

大森 ■ そうですね、昔の科学は貴族がエンターテインメントとしてサポートしてきた部分があった。でも、日本にはそれが無い。加えて、日本国民の科学に対する興味が、他の国より低いという話も聞きます。そういう風潮はジャーナリズムにも通じるものがある、ちゃんとした科学記事を書けるジャーナリストが、日本では減ってきているらしいです。

廣田 ■ 今の世の中で科学技術に投下されるお金は非常に巨額です。ですから、そのごく一部を人類の知的財産を増やす目的、つまりどうなるかわからない研究のサポートに使ってもいいと思いますよ。要はバランスの問題です。

近藤 ■ 実は最近、複数の企業人から、大学との共同研究に対するモチベー

ションが下がってきた話をきいて、驚いています。企業が大学と付き合うのは、想像を超えた突飛もないアイデアに出くわすことがあるからですが、最近はそういうことがあまりなくて、わざわざ共同研究をする気が起きないと言うのです。

玉尾 ■ 大学が企業と同じ研究をやっているのはだめです。役に立つかどうかかわからないが独創的で新しい、そんな研究のサポートに大学は力を注ぐべきです。合成化学の分野でも、企業が大学に求めるのは、反応が進むか否かという基本的な研究。収率なんてものは企業に在籍するプロセス化学の専門家がすぐに上げるからと、彼らは言い切ります。

化学の未来

廣田 ■ ところで、ノーベル化学賞を調べてみると、前半の50年はいわゆる伝統的な化学が多いのですが、最近の50年は、生命現象に関する化学賞が圧倒的に多い。国際的にそんな状況なんだけれど、日本はそういう認識が少し足りない。「本当にあれが化学なのか？」という議論がされているぐらいですから。

玉尾 ■ 化学の領域が、ますます広がっていますね。そんな中、ロジャー・コーンバーグがノーベル化学賞をもらう前に、有名科学雑誌に「化学はもう終わったか？」という記事が出た。成熟した化学は、今や物理や生物のツールになってしまったのでは、という論調でした。

物理や生物の分野では、ニューフィジックスや生命の起源なんかが大いに

語られているにもかかわらず、化学にはそういう大きな命題がないというわけです。確かに、今、化学が組みまねばならない大きな命題というのは、なかなか探し出せない状況にある。

廣田 ■いわゆる伝統的な化学ということで考えればそうでしょう、だけど、もう少し広げて考えると、我々の周囲の自然現象の基本は分子なわけですよ。ですから生命現象も物理現象も含めて化学者が取り込むべき命題だと考えないと、化学は尻すぼみになってしまう。

近藤 ■物理には宇宙の問題やすごい命題がいっぱいあるかもしれないが、我々の日常感とは遠い。そういう意味では、生命現象であっても物質現象であっても、むしろ化学で取り扱う領域の方が、より重要だと思います。

玉尾 ■仰る通りです。けどもそれでは、化学が取り組むべき大きな命題というより、生物科学や物質科学を支えるツールとして、化学というものが存在するという見方もできてしまう。私は支えるというよりも、「生物科学や材料科学を先導する化学」と捉えるべきだと思います。化学の先導性が重要です。

廣田 ■とすると、支えるだけではなく先導するには、どうしたらいいかというところが問題ですね。

玉尾 ■合成化学の分野でいうと、新物質を創り出すことが、新分野を先導していくことだと思います。例えば、白川先生のポリアセチレンがいい例です。新物質を創ることができるということは、化学の重要な機能の一つですから。

廣田 ■勿論、新物質の合成は化学の重要な機能ですが、それだけだとみんな有機化学になってしまう(笑)。分子科学という分野は、どちらかというこの視点から外れるところにあり、合成が中心ではないと思いますが。

玉尾 ■その視点において重要なことは物理との融合でしょう。ポリアセチレンの場合、合成から約10年間も埋もれていたところに、他分野の研究者が

やってきて、新しい機能が発現できるようになった。分子研の場合、物性研究分野との融合、合成をやる人と物性をやる人の共同作業が重要だと思います。化学はまだまだ先導できるはずですよ。

近藤 ■でも、他の分野ばかり考える必要はない。新しいコンセプトをつくり、多様なものを生み出そうとする。それでいい。みんな違う方向を向いて「自分達にはもっとすごいものがあるかもしれない」と思って欲しい。それを探し始めたらいろいろ出てくると思いますよ、自然界は複雑怪奇ですから。どんどん分子の概念も変わるからいろんな軸があっいいんです。問題は軸の並べ方と、新しいことを考える情熱。それさえあれば、化学の命題なんてもなにも問題ない。

廣田 ■同感です。たとえば、生物の領域はブラックボックスだらけで、それを解明するのは化学なんです。こんなことが沢山ある。

近藤 ■若い冒険心に富んだ人にどんどん新しい化学をやって欲しい。そういう人は化学が生きたか死んだかなんて議論は多分しないと思う。そして我々の仕事は、新しいことを「さあやろ」と言った人をサポートすることです。

大森 ■流行から外れているけれど新しい。そういうテーマのサポートですね。

廣田 ■ケンブリッジのキャヴェンディッシュ研究所に印象深い話があります。ここはもともとラザフォードが所長だった頃、核物理学で世界をリードしていたんですが、そのうちアメリカのパークレーなんかで加速器で核物理をやりに出して、予算的にも苦しくなってきた。そんなときラザフォードが亡くなると、ローレンス・ブラッグを所長に迎えたんです。そこで彼が何をしたかということ、突然、X線や電波天文学をやりに始めた。当時、イギリスではレーザーの研究が盛んで、電波天文学が発展する機運もあったんでしょう。ですが、すばらしい核物理学の伝統を捨て、

どうなるかわからない学問をやりに出したことへの批判が、随分あったと聞いています。しかし、結果的には分子生物学が生まれ、電波天文学でも凄く成果が出て、多くのノーベル賞受賞者を輩出したわけです。これは劇的な変化と新しい挑戦の、ひとつの事例です。

分子研へのエール

玉尾 ■私が見たところでは、分子研は物性科学から立ち上がってきた伝統をきっちり受け継いでこられたと思います。ただし、キャヴェンディッシュ研究所の話とも通じるんですが、いつの時点かで、伝統を壊してでも新しい方向を強化するような決断をしなければならいかもしれません。規模から見て、なんでもかんでも手を出すわけにはいきませんから。伝統だけにとらわれないことが重要だと思います。

近藤 ■分子研には格好のいいテーマがいっぱいあるんですが、格好が悪くても新しいテーマがなかなか見当たらない。具体的なテーマをどうするかは我々の仕事ではないんですが、人を呼んでくるときがポイントだと思います。新しいこと、独創的なことに挑戦できる人材を集めて欲しい。そして、伝統も大切にしながら、独創的な新しいことに挑戦していけば、自ずから道が開けるでしょう。

廣田 ■私も人材に尽きると思います、玉尾先生が仰るように、あまり伝統にとらわれず、広い意味での分子科学を志すいい人材がいれば、どんどん引っぱってくるべきです。テーマよりも人が重要。その点、生理学研究所や基礎生物学研究所が近接する分子研には地の利がある。

加えて私が言いたいことは、帝国主義ではないですが、小さく縮こまらずに広い世界を取り込むことの重要性。それが将来の発展につながると信じています。

大森 ■本日はありがとうございました。

有用な分子の設計と合成は分子科学の中心課題の一つであるが、その研究方法は現在急速に変化している。これまでは実験を主体とする試行錯誤的な方法に頼るところが相当に大きかったが、理論と計算による合理的な設計と効率的な合成が強く望まれている。理論と計算による新しい構造や結合あるいは機能をもつ分子の予測は実験のよき出発点になり、理論と実験の著しく高められた相乗効果を生み出す。特に、標的とする候補分子のコンピュータシミュレーションによる高速なスクリーニングは研究の能率

を大きく高める。理論と計算は実験結果の合理的な説明や解釈ばかりでなく、実験が難しい系にも容易に焦点を当てることができる。また、標的とする分子のさまざまな物性や分光データなどを前もって予測できる。

小さい分子の理論と計算は実験に匹敵するあるいはそれ以上に有力な方法となっている。しかし最近では、分子理論と計算方法の目覚ましい進展とコンピュータ性能の向上により、これまでとは比較にならないほど大きい分子の精度の高い量子化学計算が可能になってきている。また、簡略化したモデル

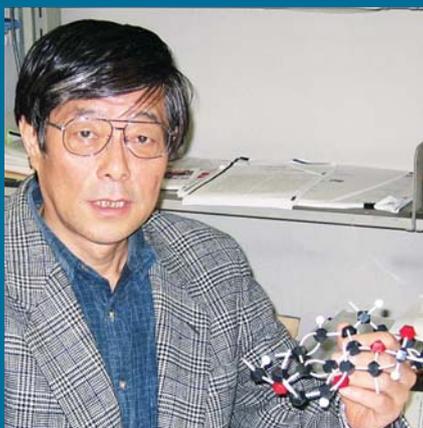
計算ではなく、実験の標的となる現実の系をそのまま扱えるようにもなっている。このために、ナノサイズの分子でも「理論と計算に先導された分子設計と合成」が現実のものになろうとしている。我々のグループでは、元素（特に高周期の元素）とナノ構造（フラーレンやカーボンナノチューブおよびナノ分子の柔構造と生体分子の内部空間）の特性を利用した分子設計を実験と共同で行っている。これらのうちから、高周期元素の多重結合と金属内包フラーレンを例として取り上げて、理論と計算の重要な役割を以下に述べる。

分子科学の最先端

大きい分子の量子化学計算

永瀬 茂

理論分子科学研究系
分子基礎理論第一研究部門



ながせ・しげる

1946年に大阪で生れる。1975年に大阪大学大学院博士課程を修了後、ロチェスター大学博士研究員、オハイオ州立大学博士研究員、分子科学研究所技官を経て、1980年横浜国立大学助教授、1991年同教授、1995年東京都立大学教授、2001年4月より現職。研究テーマは、分子の設計と反応の理論と計算。最近の一番の楽しみは暇を見つけては水泳することとTV鑑賞。

理論・計算と実験

エチレンやアセチレンに代表されるように、炭素は安定な多重結合を容易に形成して多種多様な構造や反応を提供している。ケイ素、ゲルマニウム、スズ、鉛は炭素と同族の14族元素なので、類似の多重結合分子が合成できても不思議ではないが、長年の間夢の合成標的となっていた。古くは、高周期の元素は多重結合を形成しないとされた。しかし安定なケイ素-ケイ素二重結合が合成されて以来、高周期元素の二重結合の化学は爆発的に進展した。一方、高周期元素の三重結合は最近まで夢の合成標的として残っていた。

理論計算がもっとも得意とするところは、合成標的となる分子が果たして存在可能であるか、存在するならばどの程度安定でどのような反応性をもつのかなどを実験に先立って予測できることである。たとえば、アセチレン ($\text{RC}\equiv\text{CR}$) の骨格炭素を同族の高周期元素 ($\text{M} = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$) で置換した $\text{RM}\equiv$

MR は、エネルギーの極小点に対応するが異性化反応や二量化反応を容易に起こしてしまう。そこで、この容易な異性化と二量化の原因を理論で明らかにすることにより、これらの反応を阻止するのに有用な置換基候補をコンピュータシミュレーションで予測した。ごく最近までに、理論予測した置換基あるいは類似の置換基を用いて、高周期14族元素のすべてのアセチレン類似体が合成されて単離されるに至っている。

ケイ素-ケイ素三重結合をもつ $\text{Ar}^*\text{Si}\equiv\text{SiAr}^*$ ($\text{Ar}^* = \text{C}_6\text{H}_3-2,6-(\text{C}_6\text{H}_2-2,4,6-i\text{Pr}_3)_2$) の計算例を図1に示す。アセチレンが直線構造をとるのは対照的に、 $\text{Ar}^*\text{Si}\equiv\text{SiAr}^*$ はトランスに折れ曲がった構造をとる。ここでは詳細は述べないが、トランスに折れ曲がった構造を何故とるのかの明解な説明を与えるのは理論の強みである。 $\text{Ar}^*\text{Si}\equiv\text{SiAr}^*$ は、 Ar^* 基の嵩高さのために三

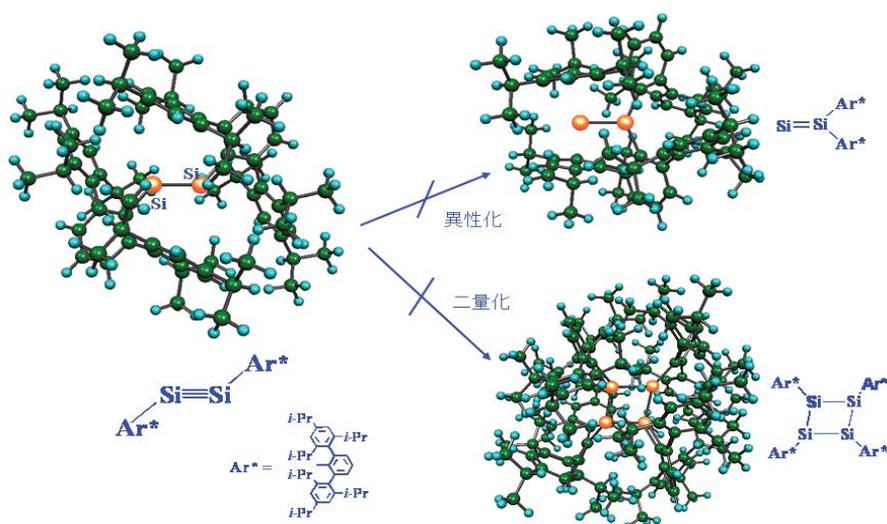


図1 $\text{Ar}^*\text{Si}\equiv\text{SiAr}^*$ の構造および異性化と二量化

重結合の回りに 10° もねじれている。当然のこととして、もうすこし小さい置換基の設計が考えられる。しかし重要なことは、 Ar^* 基の*iPr*をMeに置換すると 40° もねじれることである。また、 Ar^* 基の*iPr*をHで置換すると 80° もねじれて、トランス折れ曲がり角度は 30° も増大してSi-Si結合距離は 0.25 \AA も伸張する。したがって、図1に示す $\text{Ar}^*\text{Si}\equiv\text{SiAr}^*$ の構造は、 Ar^* 基の適切で微妙な立体的広がりやサイズのなせる業の集約である。図1に示すように、 Ar^* 基の嵩高さは $\text{Ar}^*\text{Si}\equiv\text{SiAr}^*$ の異性化ばかりでなく二量化を見事に阻止する。しかし、 Ar^* 基の*iPr*をMeに置換するだけで異性化も二量化も容易に進行してしまう。どのような立体的広がりやサイズの置換基が適切かを実験で検証を繰り返すのは多大な手間と時間がかかるが、理論計算の強みはこれらを容易にスクリーニングできることである。このためにも、サイズの大きい分子の精度の高い量子化学計算の汎用化が求められている。

大きい分子をどの程度の精度で理論計算できるかを示すために、幾つかの代表的な多重結合分子を取り上げてみる。たとえば、 $\text{Dis}_2\text{iPrSiSi}\equiv\text{SiSiPrDis}_2$ ($\text{Dis} = \text{CH}(\text{SiMe}_3)_2$)のSi-Si三重結合距離とトランス折れ曲がり角度(θ)の計算値はそれぞれ 2.075 \AA と 139.2°

であるが、これらはX線結晶解析のSi-Si = 2.062 \AA と $\theta = 137.4^\circ$ によく一致する。また、 $\text{Ar}'\text{SnSnAr}'$ ($\text{Ar}' = \text{C}_6\text{H}_3-2,6-(\text{C}_6\text{H}_3-2,6-\text{iPr}_2)_2$)の計算値のSn-Sn = 2.677 \AA と $\theta = 126.5^\circ$ もX線結晶解析のSn-Sn = 2.668 \AA と $\theta = 125.2^\circ$ に非常によく一致する。同じことは遷移金属を含むときにも言える。遷移金属と典型元素の最初の三重結合例として合成された $(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)(\text{CO})_2\text{Cr}=\text{GeAr}^*$ を図2に示す。計算値のCr-Cr = 2.169 \AA と $\angle\text{Cr-Ge-Ar}^* = 177.9^\circ$ は、X線結晶解析のCr-Cr = 2.167 \AA と $\angle\text{Cr-Ge-Ar}^* = 176.0^\circ$ に非常によく一致する。これらの例で、結合角の一致はすこしだけ悪いが、これは置換基が嵩高いために分子が結晶化する際にパッキング力で変形するからである。

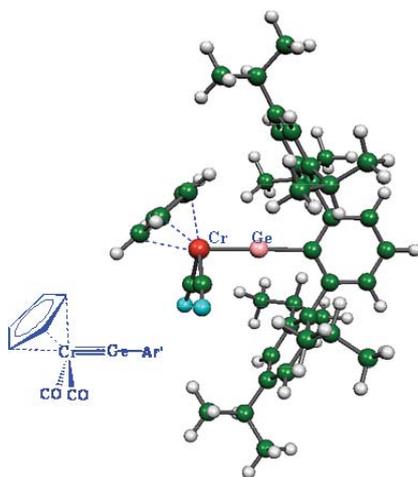


図2 $(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)(\text{CO})_2\text{Cr}=\text{GeAr}^*$ の構造

パッキング力が重要な働きをする例として、 $\text{Na}_2[\text{RGaGaR}]$ ($\text{R} = \text{Ar}^*, \text{Ar}'$)の構造を図3に示す。置換基の Ar^* ($= \text{C}_6\text{H}_3-2,6-(\text{C}_6\text{H}_2-2,4,6-\text{iPr}_3)_2$)と Ar' ($= \text{C}_6\text{H}_3-2,6-(\text{C}_6\text{H}_3-2,6-\text{iPr}_2)_2$)の違いは、 Ar^* では両翼のアリル環のパラ位に*iPr*があるだけである。X線結晶解析によると、 $\text{Na}_2[\text{Ar}^*\text{GaGaAr}^*]$ のGa-Ga距離は 2.319 \AA と三重結合に匹敵するほど短いので大きな注目を集めた。分子サイズが大きいため、 Ar^* 基をH、Me、Ph等で代用したモデル計算が数多く行われて、異常に短いGa-Ga距離の本性が議論された。しかし、モデル計算のGa-Ga距離はいずれも $0.1-0.2 \text{ \AA}$ もX線結晶解析の値より長い。そこで、 $\text{Na}_2[\text{Ar}^*\text{GaGaAr}^*]$ をモデル化せずにそのまま構造最適化すると、Ga-Ga距離は 2.344 \AA まで短縮するが実験値より依然として 0.03 \AA だけ長い。この程度の不一致は理論計算の精度によると考えられるかもしれない。しかし、 $\text{Na}_2[\text{Ar}'\text{GaGaAr}']$ のGa-Ga距離の計算値の 2.342 \AA はX線結晶解析の 2.347 \AA と 0.005 \AA の精度で一致する。これは、結晶中では $\text{Na}_2[\text{Ar}^*\text{GaGaAr}^*]$ は $\text{Na}_2[\text{Ar}'\text{GaGaAr}']$ よりも大きなパッキング力の効果を受けているからである。このことは、 $\text{Na}_2[\text{Ar}^*\text{GaGaAr}^*]$ の最適化構造は C_2 対称をもつが、X線結晶構造は C_2 対称から大きくずれていることから支持される。このように理論計算とX線結晶解析のデータの違いを厳密に議論できるのは、大きい分子も高い精度で計算できるようになってきたからである。

理論予測構造と結晶構造が劇的に異なる例もある。たとえば、 Ar' 基の中心のアリル環のパラ位の水素を SiMe_3 で置き換えた置換基 $\text{Ar}'-4\text{-SiMe}_3$ ($= \text{C}_6\text{H}_2-2,6-(\text{C}_6\text{H}_3-2,6-\text{iPr}_2)_2-4\text{-SiMe}_3$)をもつズのアセチレン類似体の $4\text{-SiMe}_3\text{-Ar}'\text{SnSnAr}'-4\text{-SiMe}_3$ である。X線結晶構造では、Sn-Sn距離は 3.066 \AA でトランス折れ曲がり角度は 99.3° である。

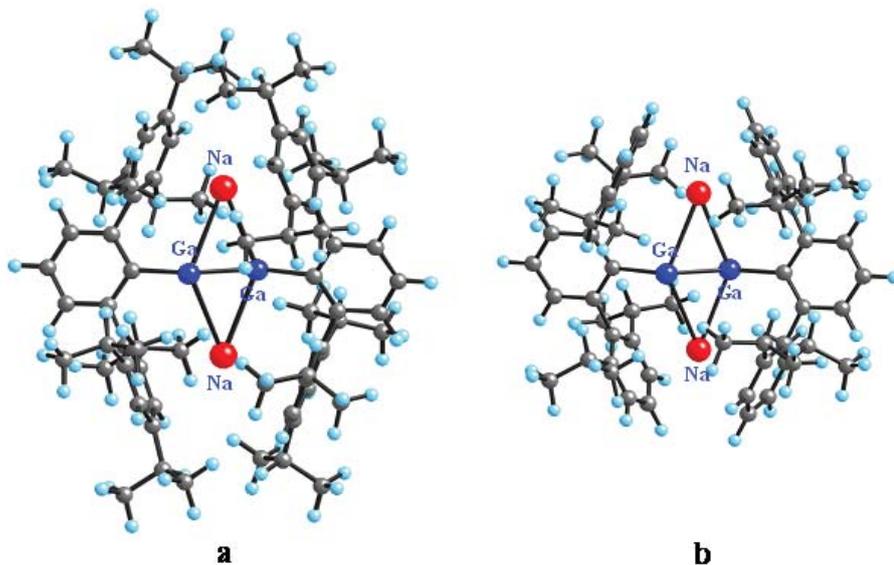


図3 (a) Na₂[Ar*GaGaAr*]の構造 (b) Na₂[Ar'GaGaAr']の構造

しかし理論計算では、X線結晶構造に対応する構造よりも、Sn-Sn距離が2.691 Åとはるかに短く折れ曲がり角度が124.9°の構造が安定である。このことは、ヘキサン溶液中で測定されたUV-vis吸収スペクトルは、理論計算で見いだされた構造をもちいることによりのみ再現できることから支持される。このためにも、溶液中での精度の高い量子化学計算の進展が望まれている。

金属を内包したフラレーンは、金属からフラレーンへ1個あるいは複数個の電子移動が起こり、空のフラレーンには見られない特異な電子および磁気特性や反応性を示すので、材料科学的な応用はもとよりドラッグデリバリーとしての薬学や医学への利用など多方面から注目されている。このために、様々な研究が活発に展開されているが、金属内包フラレーン研究の基礎となる構造解明は長年の課題となっている。

シンクロトロンにより発生する強力なX線による粉末回折データを用いた、最大エントロピー法(MEM)とRietveld法を組み合わせたMEM/Rietveld解析は、金属内包フラレーンの構造決定の強力な手法として広く受け入れられている。Y@C₈₂ (@は内包を示す)の構造解析へ初めて適用されて以来、Sc@C₈₂、La@C₈₂、Eu@C₈₂、Gd@C₈₂、Sc₂@C₆₆、Sc₂@C₈₄、La₂@C₈₀、Sc₃@C₈₂、Sc₂C₂@C₈₄、Y₂C₂@C₈₂などの代表的な金属内包フラレーンの構造がMEM/Rietveld解析により次つぎと決定されて報告されている。

たとえばSc₃@C₈₂では、3個のSc原子はきわめて短いSc-Sc距離をもつSc₃三量体としてC₈₂フラレーンに内包された図4aの構造がMEM/Rietveld解析から決定されている。しかしながら理論計算では、この構造はエネルギー極小点でないばかりでなく、3個のSc原子はもとより2個のC原子もC₈₀フラレーンに内包された図4bのSc₃C₂@C₈₀構造がはるかに安定である。この理論予測を実証するために、アダマンチリデンカルベン付加体が合成され、その単結晶からX線構造解

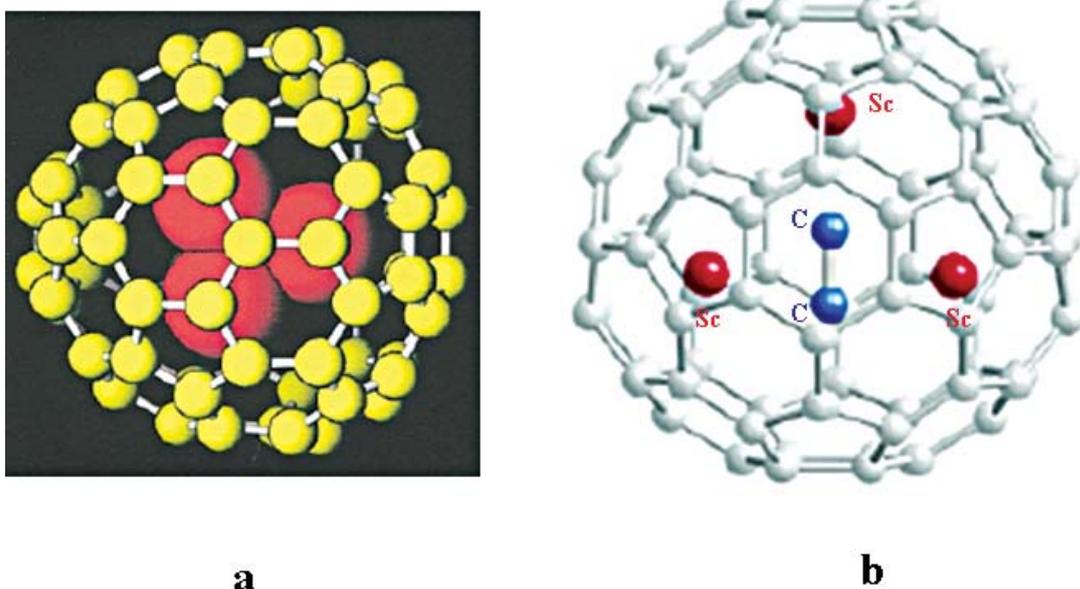


図4 Sc₃C₈₂のMEM/Rietveld解析による構造 (a) と理論予測による構造 (b)

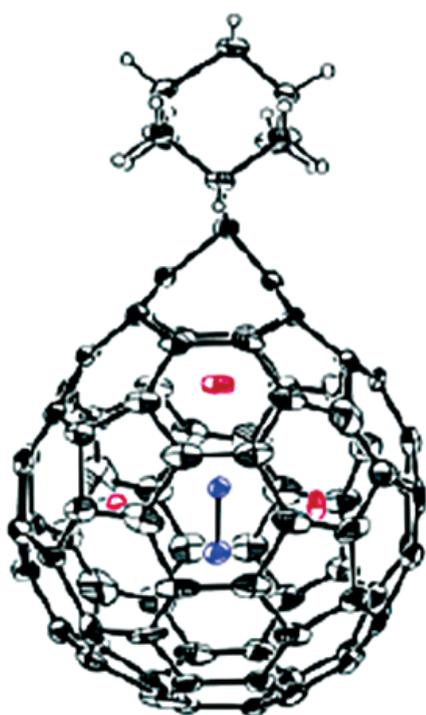


図5 Sc_3C_{82} のアダムチリデンカルベン付加体のX線単結晶構造

析がなされた。図5が鮮明に示すように、 Sc_3C_{82} であると長年の間疑いもなく信じられてきたが、 $\text{Sc}_3\text{C}_2\text{C}_{80}$ であることが明白である。同様なことは Sc_2C_{84} でも見いだして、 $\text{Sc}_2\text{C}_2\text{C}_{82}$ であることを理論計算と実験で明らかにした。これらは、理論計算と実験の密なインタープレイの重要性を指摘するものである。最近、 EuC_{82} や GdC_{82} は特別な例外として“異常”な構

造をもつとMEM/Rietveld解析から報告されているが、この構造も理論計算によるときわめて不安定であるばかりでなくエネルギーの極小点にも対応しない。理論計算とMEM/Rietveld解析の不一致に関して、「Obviously, the currently existing theoretical calculations are not at all enough to treat such systems as metallofullerenes. Further research and development of the well-refined theoretical methodology are highly required」という挑戦的な警告がだされたが、これは理論と計算の威力をあまりにも過小評価したものである。このことは、ごく最近のMEM/Rietveld研究では Sc_3C_{82} の構造は $\text{Sc}_3\text{C}_2\text{C}_{80}$ で、 Sc_2C_{84} の構造は $\text{Sc}_2\text{C}_2\text{C}_{82}$ であると訂正されていることから明らかである。

大きい分子の高精度計算

ここまでで述べた計算例は主に密度汎関数法によったものである。現在、密度汎関数法は相当に大きい分子の大規模計算を可能にしている。しかしこれまでに開発されている密度汎関数法の多くは、超分子、ゲスト-ホスト相互作用、分子認識、自己集合、生理活性、タンパク質の構造等できわめて重要な

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。他方、電子相関を取り込んだ分子軌道法は非共有結合相互作用もうまく取り扱えるが、分子が大きくなると計算負荷が急激に増大してしまうという問題がある。現在(あるいはこれから)のコンピュータでは、多数のCPUを用いて並列化計算することにより高速化が実現できる。しかし、分子軌道法では並列化計算が苦手である。このために、新しい理論と効率の高い並列アルゴリズムとプログラムの開発を行っている。これらのすべてを紹介できないが、たとえば分子軌道計算の基本であるHF (Hartree-Fock)法では、CPU数を1から16にすると計算速度が33倍になる超並列化を、タキソール分子($\text{C}_{47}\text{O}_{14}\text{NH}_{51}$)の6-31G(d)基底によるベンチマークで実現している。また、簡便に電子相関を取り込めるMP2 (second order Møller-Plesset perturbation)法では現時点で最高速の並列アルゴリズムとプログラムを開発している。精度のきわめて高い計算には、新しい量子モンテカルロ法等の開発を始めている。これらの汎用化によって、ナノサイエンス分野ばかりでなくバイオサイエンス分野の計算ターゲットが大きく広がることが期待される。

参考文献

- (1) 永瀬茂、平尾公彦、現代化学への入門「分子理論の展開」、岩波講座17、岩波書店(2002).
- (2) 高周期元素の多重結合の最近の計算例。N. Takagi and S. Nagase, *J. Organomet. Chem. (a special issue)*, **692**, 217 (2007). N. Takagi and S. Nagase, *Organometallics*, **26**, 469 (2007).
- (3) 金属内包フラーレンの構造と化学修飾の最近の総説。赤阪健、永瀬茂、*日本結晶学会誌*, **48**, 230 (2006). 若原考次、赤阪健、永瀬茂、*現代化学* (5月号), 51 (2006).
- (4) 高速MP2計算法。K. Ishimura, P. Pulay, and S. Nagase, *J. Comput. Chem.*, **27**, 407 (2006). D. G. Fedorov, K. Ishimura, T. Ishida, K. Kitaura, P. Pulay, and S. Nagase, *J. Comput. Chem.*, in press. K. Ishimura, P. Pulay, and S. Nagase, *J. Comput. Chem.*, in press.

自然科学研究機構シンポジウム

「爆発する光科学の世界——量子から生命体まで——」

分子科学研究所が中心となって、平成18年9月24日(日)に東京国際フォーラム(東京都千代田区)にて自然科学研究機構シンポジウムを開催した。前回の平成18年3月22日第1回に続き、2度目の開催であった。当日は、台風が心配されたが秋晴れとなり、関係者を除き525人の参加者で会場が埋め尽くされた。

今回のシンポジウムでは「光科学」をキーワードに、分子科学研究所が中心となり、光科学に関する最先端の研究を紹介した。講演会は「新しい光源」、「光と分子」、「光と生命体」の3部構成で行われた。まず、志村機構長の開会の辞に続いて、立花隆氏が聞きどころを紹介された。つづいて、松本吉泰

教授がイントロダクションとして「新しい光源、光と分子」の概説と光の性質についての基礎的な話をした。その後、分子研が頻繁に利用する2種類の光源の紹介として、平等拓範助教授が手のひらサイズの高輝度レーザーの最先端について、加藤政博教授からシンクロトロン放射の原理や分子研放射光施設UVSOR-IIの紹介および今後の展望について講演した。平等助教授が光源の小型化と単色性の重要性を強調し、加藤教授が大型加速器を用いた白色性を重視したのは対照的であった。

午後は、大森賢治教授が、量子力学の不思議として光の二重性(粒子性と波動性)、自身のアト秒精度での原子波の干渉実験、分子を使った量子メ



モリーなどに関して紹介した。次に化学の話に移り、江東林助教授は、 dendrimer分子を利用し、枝の部分で吸収した光エネルギーを分子中心に集めることが出来る分子設計、水の光還元、さらに医療への応用やその将来性について講演した。続いて、藤嶋昭先生(神奈川科学技術アカデミー理事長)はご自身の本多・藤島効果の発見から現在に至る一貫したTiO₂光触媒の基礎的、

プログラム

10:00 ~ 10:05	機構長挨拶	志村 令郎 (自然科学研究機構)
10:05 ~ 10:10	趣旨説明	プログラムコーディネーター 立花 隆
【新しい光源】		
10:10 ~ 10:25	Overview	松本吉泰 (分子科学研究所)
10:25 ~ 11:05	光シンセサイザーを手のひらに—マイクロ固体フォトリソグラフィの新展開—	平等拓範 (分子科学研究所)
11:05 ~ 11:45	宇宙の光を地上でつくる—シンクロトロン光源—	加藤政博 (分子科学研究所)
11:45 ~ 12:50	休憩	
【光と分子】		
12:50 ~ 13:30	量子のさざ波を光で制御する	大森賢治 (分子科学研究所)
13:30 ~ 14:10	光を吸う分子の木	江 東林 (分子科学研究所)
14:10 ~ 14:50	光触媒がもたらす安全・安心な社会	藤嶋 昭 (神奈川科学技術アカデミー)
14:50 ~ 15:05	休憩	
【光と生命体】		
15:05 ~ 15:20	Overview	三室 守 (京都大学)
15:20 ~ 16:00	葉緑体の光による細胞内移動	和田正三 (基礎生物学研究所)
16:00 ~ 16:40	光を見る微生物のしくみ	渡邊正勝 (総合研究大学院大学・基礎生物学研究所)
16:40 ~ 17:20	発達する脳を光で見よう	鍋倉淳一 (生理学研究所)
17:20 ~ 17:25	総括	プログラムコーディネーター 立花 隆
17:25 ~ 17:30	閉会挨拶	中村宏樹 (分子科学研究所長)

各講演内容の詳細は立花ゼミ公式サイト「サイ」<http://www.kuba.co.jp/nins/>に紹介されている。

応用的研究に関して熱弁下さった。

続いて、光と生命体へと話が移り、三室守先生（京都大学）の概説に引き続き、基礎生物学研究所の和田正三先生が葉緑体の光感知と細胞内移動について、総合研究大学院大学・基礎生物学研究所の渡辺正勝先生がミドリムシの光センサーについて、生理学研究所の鍋倉淳一先生が二光子顕微鏡による脳の神経ネットワーク観察について講演された。

すべての講演の後には立花隆氏が質

問やコメントをする時間を設けた。同氏の時には刺激的な質問やコメントは聴衆が違った角度から講演内容を捉えるのに役立ったと考えられる。また、最後の総括では、立花隆氏が、光科学は幅広く生活に関係し、今後日本の技術発展にどれほど必要で重要であるかを述べられた。閉会の辞として、分子研の中村宏樹所長が今後の光科学の展望と多くの方の静聴に対する謝辞を述べ、会は終了した。

前回に引き続き今回もほとんど途中

で席を立つ参加者もなく、朝10時から夕方5時30分まで終始大盛況であった。話題が豊富すぎ、プログラムがタイトすぎだったかもしれない、お昼の休憩や講演の合間に展示の説明をする時間がほとんどとれなかった。それでもわずかな時間に多くの方が展示にも足を運んでくださった。参加された方の長時間にわたる熱心なご静聴と自然科学への熱い想いに感謝したい。

（松本吉泰 記）

News

分子科学研究所 一般公開

分子科学研究所の一般公開は3年毎に実施されており、平成18年が山手地区の分子研部分が公開される初めとなった。春から技術課を中心に準備が進められ、公開展示班、講演会班、資料作成班、設営班、記録班、広報班、総務班を形成し準備を進めてきた。特に、広報室により鮮やかな青を基調としたポスターやチラシが作成され、広報活動が展開された。テーマは、「モノの始まり：ナノの世界へようこそ」というもので、今回は、全研究室を公

開するのではなく、研究室やセンターなどの希望を取って明大寺地区12カ所、山手地区13カ所が公開されると同時に、山手地域で3回の講演会、またそれぞれ3テーマずつの「おもしろ体験イベント」が行われた。

一般公開展示は、それぞれの展示会場では担当者があらかじめ準備した説明用パネルも利用して展示内容の説明にあたった。また「おもしろ体験イベント」は、一般公開参加者自身がより積極的に参加できるもので、明大寺地区において「電波のチカラ」、「メタルクラフト」、「作ってみよう！ 光を虹に分ける道具」の3テーマ、山手地区において「分子を測る」、「低温の世界」、「分子を創る、見る、触る」の3テーマで実施した。これら体験型イベントも、終日多くの参加者で賑わっていた。一般公開参加者のアンケート結果をみても、体験型イベントに対する評価は高いものであった。

公開講演会は山手3号館2階の大会議室で午後3回開催された。まず岡崎進教授が「ナノの世界をスーパーコンピュータで探る」という題名で、分子研のスーパーコンピュータの性能と

体験イベントで分子模型を作成する小学生



それを用いた計算機シミュレーションを紹介し、水中の生体膜の構造や動力学などの研究例を平易に解説した。次に永田央助教授が「光合成のひみつ・命を支える分子と光」という題名で、分子レベルから見た光合成の仕組みを詳説し、光励起電子移動を利用した金属錯体人工光合成システムの将来展望を示した。最後に小澤岳昌助教授が「光で探る生体分子のはたらき」という題名で、発光生物から取り出した発光タンパク質を生きた動物に注入して、細胞内部のタンパク質の変動を画像観測法で研究するという最新の成果を紹介した。100人近い聴衆が集まり、会場は大変盛況であった。また講演後も多くの質問があった。中には研究者顔負けの専門的な発言もあり、予定されていた15分の質疑応答時間では不足気味であった。アンケートの結果では、どの講演も面白く有益だったという回



中学生以上を対象に作成された宣伝ポスター

参加者で埋め尽くされた公開講演会

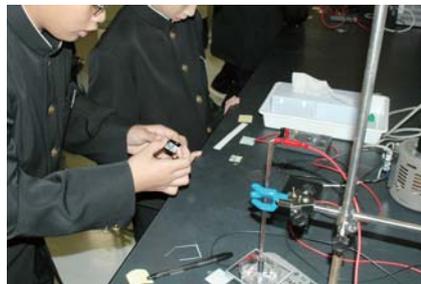


答が95%に達した。

岡崎市内中学生の見学会（通称、サイエンスレンジャー）は、午前中に南実験棟1階で実施された。この会は市教育委員会理科部会との共催で、一般公開する研究所が毎年開催するものである。今年は学生に実験装置を操作してもらい、話題の科学技術を実体験させる事を目標とし以下のテーマを選んだ。(1) 酸化チタン TiO_2 の多色塗装に電気を使う：チタンに電流を流し陽極酸化させ、 TiO_2 の厚みを50

サイエンスレンジャーで
チタン板を手に、実験に取り組む中学生

nm以下で制御し表面を様々に着色する。(2) TiO_2 を色素塗装して電気を起こす： TiO_2 ナノ粒子に花の色素を塗って、可視光を高効率で吸収する色素増感太陽電池を製作する。どちらもナノの科学現象を含み、基本原理が容易で、操作は簡単かつ安全である。また、生活に直結し話題性に富む割に学生実験の題材としては斬新である。開会式で山本教育監の挨拶と講師の紹介があり、その後、219名の中学生が3つのグループに分かれて約50分間ずつ実験を行った。中学生4人に1人の割合で研究所スタッフが補佐に付いたため、トラブルは無く、誰もが楽しそ



うに作業に取り組んでいた。カラフルに着色されたチタン板の出来映えも良く、中学生にも引率教諭にも大変好評であったと聞いている。

参加者数が少ないのではないかと心配されたが、総数2058名の予想を遙かに上回る見学者が訪れている。この中には、東京や山口からの来訪者があった。地元の皆さんの理解を深めることは研究所にとっても大変重要なことであり、多くの皆さんが興味を持って頂いたことは嬉しい限りである。この行事の成功に献身的にご協力頂いたスタッフや学生、事務センターの皆さんに感謝したい。

(西 信之、青野重利、見附孝一郎 記)

News

分子科学会 (Japan Society of Molecular Science) 設立

分子科学分野の主たる研究会の一つとして「分子構造総合討論会」(以下、討論会)があり、毎年多くの研究者や学生の参加を得て活発な討論が行われてきた。一方、分子科学研究所の設立の推進に大きく貢献した「分子科学研究会」(以下、研究会)は、分子科学分野のコミュニティーと分子研を結ぶパイプとしての役割を果たし、独自のメーリングリストによるサーキュラーの発行、講演会の開催などを行ってきた。

両者にはそれぞれ独自の歴史があるが、これらをまとめた新学会設立を求める動きが2004年に始まった。まず、同年9月に研究会側から討論会側の運営委員会に向けて、新学会発足の可能性を探るための議論を始めることが提案された。これを受けて、両組織の合

意のもとで設立検討委員会が設置され様々な角度から議論が重ねられた。その結果、参加者数の増加傾向にある分子構造総合討論会の運営が今までの運営委員会方式ではだんだん難しくなってきたことや、多様化する分子科学分野のプラットフォームとして日常的に情報交換・研究発表の場を持つこと、その場で若手を育成すること、また、分子科学分野からその他の分野の研究者、行政組織、一般社会へ情報を発信し、提言をするためのまとまった組織をもつこと、などの必要性に関する共通認識が持たれた。その後、さまざまな経緯を経て(「分子科学会」設立に至る詳しい経緯は同学会のホームページ<http://www.molsci.jp>にある)、2006年9月20日、静岡における討論会の

期間中に研究会と討論会がマージする形で新学会である分子科学会が設立された。

分子科学分野のプラットフォームを標榜する分子科学会と本研究所がどのような関係を築いていけるかは当該分野の今後の発展に大きな影響を及ぼすと考えられる。同じ「分子科学」を冠する組織ではあるが、研究分野が必ずしも完全にオーバーラップしている訳ではない。また、果たす機能は当然異なる。このような違いはあるが、本研究所と分子科学会とがそれぞれの機能を十分に発揮して、分子科学研究のさらなる活性化がはかられることを期待したい。

(松本吉泰 記)

第66回岡崎コンファレンス

"International Workshop on Soft X-ray Raman Spectroscopy and Related Phenomena (IWSXR)"

2006年8月17日～19日に岡崎コンファレンスセンターにて第66回岡崎コンファレンスを開催した。岡崎コンファレンスを開催するのは6年半ぶりである。分子研創設のときから認められてきた大学共同利用機関としての特別事業予算枠（岡崎コンファレンス開催経費を含む）が数々の事情でなくなってしまうあと、研究所としてはいろいろな外部資金に応募して国際研究集会を食いつないできた。しかし、これらは、分子研の共同研究の一環としてコミュニティからの提案に基づいて実施する岡崎コンファレンスの趣旨とは基本的に相容れないものであった。その後、2004年に法人化されたことで予算の弾力的運用が可能になったこともあって、分子研の組織や共同研究についていろいろな側面から見直したとき、岡崎コンファレンスを再開すべきとの結論も得た（分子研レターズ53号、16ページ、2006年3月発刊を参照のこと）。今回は公募なしでの実施になってしまったが、来年度以降、公募に基づき応募された提案の中から毎年1件のみ採択して開催し、その実績を踏まえて実施件数を増やすかどうか再検討することになっている。

今回の組織委員は、私、小杉信博に加え、岡本裕巳教授、繁政英治助教授、初井宇記助手の4名で構成した。私が委員長となり、岡本教授が副委員長となった。また、諮問委員として所長以外にこの分野で第一線の研究者である外国人運営顧問のJoseph Nordgren教授（スウェーデンウプサラ大学）、国際共同研究を進めているMarc Simon教授（フランスLCP-MR）に加わっていただき、招待講演者の推薦等いただきながら、準備を進めた。当初、岡崎コンファレンスの予算が確保されず、見切り発車で始めたので、講演者は国際共同研究者を中心に構成したが、その後、所長が岡崎コンファレンスの予算を確保する決断をされたため、予算的に余裕ができ、あらたに5名ほど外国人を追加できたり、パンケットも可能になったりして、助かった。

さて、今回の主題は軟X線ラマン分光と関連現象についてである。当初、タイトルをX線ラマンとしていたが、一般的にこのタイトルだと軟X線や共鳴ラマンの意味がかなり薄れるため、軟X線ラマン+関連現象に変更した。軟X線は窒素や酸素に吸収されるため、地上の自然界では存在していない光で

あり、放射光源で作り出した軟X線を真空のまま取扱う必要がある。大気にほとんど吸収されない硬X線と違って、試料は真空中で変化しない状態に維持する必要がある。ただし、軟X線を透過する適当な薄膜を使うことで真空と切り離すことができる。薄膜を使うことで薄膜を透過しない電子やイオンなどの従来型の軟X線分光は不可能となるが、価電子により非弾性散乱した軟X線を観測する発光分光（特に共鳴ラマンや共鳴発光）は可能である。軟X線発光分光によって、固体物性研究ばかりでなく、従来型の軟X線分光では扱えなかった液体や溶液などの研究も可能になる。化学においてはこの特性は特に重要である。化学で扱っている物質系は、硬X線との相互作用がなく研究対象になり得ない軽元素が主要成分であり、蒸気圧も高いからである。ただし、ラマン過程はもちろんのこと軟X線発光そのものの遷移確率は非常に小さいため、H14～15に高度化されたUVSOR-II光源のような高輝度高強度の放射光源を使うことで初めて本格的な研究が可能になる。本岡崎コンファレンスでは以下のように18人の招待講演者の講演を中心に軟X線ラマ

招待講演者

基礎的側面およびチュートリアル：

Joseph Nordgren, Uppsala Univ., Sweden
Shik Shin, Univ. Tokyo/RIKEN/SPring-8, Japan
Uwe Bergmann, Stanford Univ., U.S.A.
Kenji Ohmori, IMS, Japan

分子分光とラマン効果：

Marc Simon, LCP-MR, France
Stephane Carniato, LCP-MR, France
Victor Kimberg, IMS, Japan
Alexander Föhlisch, Hamburg Univ., Germany

物質科学への応用：

Jinghua Guo, ALS, LBNL, U.S.A.
Munetaka Taguchi, RIKEN/SPring-8, Japan
Hisashi Hayashi, Japan Women's Univ., Japan

実験技術：

Takashi Tokushima, RIKEN/SPring-8, Japan
Takaki Hatsui, IMS, Japan
Coryn Hague, LCP-MR, France

水、溶液への応用：

Lars G.M. Pettersson, Stockholm Univ., Sweden
Shinji Saito, IMS, Japan
Susumu Okazaki, IMS, Japan
Shaul Mukamel, Univ. California, Irvine, U.S.A.

ン分光と関連現象の実験及び理論について議論した。

当初、予算に不確定な要素があり、国際共同研究以外の外国人招待講演候補者との交渉が大幅に遅れたため、都

合が見つからない人たちから残念がられたことは大きな反省点である。また、国際共同研究者の都合に基づき、このような時期に開催してしまっただが、日本人にはあまりよくない時期になってし

まったことを、企画したものとして反省している。

なお、講演内容と関連論文を集めた論文選集が少し余っていますので、ご希望の方にはお送りします。小杉までご請求下さい。

(小杉信博 記)



バンケットで外国人運営顧問の Joseph Nordgren 教授と分子研所長が光科学について議論しているところ

News

夏の体験入学

総研大の新入生確保のための広報的事業の一環として、分子科学研究所夏の体験入学を8月7-10日に行いました。この企画は、全国の大学生・大学院修士課程学生を対象に、分子研での研究活動を体験し、研究所を基盤とする大学院の特色を知ってもらうことを趣旨としており、今回が第3回目となりました。実施内容について簡単にご報告申し上げます。

今回は20名の事前申し込みがありましたが、体調不良等などにより辞退者がでたため、実際には合計16名の参加となりました。参加者の学年別の内訳としては以下の通りです。B1: 1名、B2: 6名、B3: 4名、B4: 2名、M1: 2名、M2: 1名。初日は、午後から体験プログラム紹介、放射光実験施設・計算科学研究センターの見学、集合写真撮影を行い、夕方から歓迎会を行いました。実際の研究体験は、2つのキャンパス(明大寺・山手)を利

用して、2日目と3日目の正味2日間で行いました。最終日の午前中に、全ての参加者に体験内容の報告・発表をしてもらいました。

参加者に対してアンケートを行った

結果、分子研や総研大の印象などについては次のような意見が多くありました。

1. 最先端でオリジナルな設備を十二分に使える研究環境は素晴らしい。



2. アカデミックな雰囲気や所員が高い問題意識を持ってひたむきに研究に取り組む姿勢に感動した

3. 問題設定から解決にいたるまでを議論を重ねながら進めるプロセスに対して魅力を感じた

また、アンケートを通して、多くの学生さんが知識的技術的な面での未熟さを実感しつつも、それをなんとか吸収したいという強い意気込みを持っていることがわかりました。この前向きな姿勢には多いに勇気づけられました。一方で、大学での講義内容と先端科学

の大きなギャップを前にして、何を基準にして進路を決めたら良いか悩む学生の姿も浮き彫りになりました。

残念ながら、今年度の総研大入試受験者の中に、今回の体験入学参加者は含まれていません。この理由としては、対象となる学生数が3名と少なかったことや出願期間（8月10-16日）が多くの大学の休日と重なったことなどが考えられます。しかし、進路の選択肢として総研大に興味があるとの回答が11名の参加者から寄せられました。またアンケートや参加者の声を聞く限

り、総研大の認知度や理解を高める効果があったと思います。今後もこの企画を発展的に継続させることが、総研大の活性化につながると信じています。

最後に、今回の企画を実施するにあたり、総研大広報委員会の皆様、研究所間のとりまとめをしてくださった核融合研の竹入先生・受入研究室の皆さん・大学院担当事務・その他関係者の皆さんに多大なご協力を頂きました。この場をお借りしてお礼申し上げます。

（佃 達哉 記）

体験内容

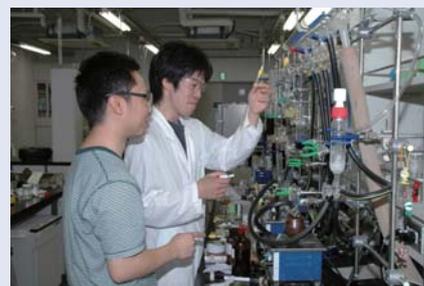
参加者の学年および体験内容

1. 学部3回生
ナノの金属ロッドを作って波動関数を見る
2. 学部2回生
新しい電子物性を狙った分子物質開発
3. 学部3回生
金属錯体の合成実験ーフェロセンの合成
4. 学部3回生
スピン転移物質の合成
5. 学部3回生
極短パルス光による反応イメージングと制御
6. 学部1回生
レーザー光イオン化質量分析法による共鳴イオン化スペクトルの測定
7. 修士課程2回生
分子の配列を観察しよう
8. 学部2回生
金クラスターの精密合成
9. 学部2回生
クラスター触媒を用いた反応の一例を体験
10. 修士課程1回生
固体広幅NMR装置を体験するとともに、最先端のESR装置を使って分子性固体の電子状態（磁性・伝導性）を実測してみよう
11. 学部4回生 同上
12. 修士課程1回生
二酸化炭素の還元反応に関する研究を体験
13. 学部2回生
量子化学の基礎にふれ、実際にプログラムを使ってみよう
14. 学部2回生
生体分子の細胞内動態を解析する
15. 学部4回生
光合成モデル化合物の合成
16. 学部2回生
量子論におけるダイナミクスとは何であるかを数値実験を通して体感しよう！



研究体験風景1

研究体験風景2



研究体験風景3



若手懇親会風景

総研大アジア冬の学校2006

「総研大アジア冬の学校2006」が2006年11月20日（月）～22日（水）の日程で岡崎コンファレンスセンターにて開催されました。これは総合研究大学院大学の2006年度特定研究教育経費に基づく企画で、2002年に開催された「岡崎レクチャー（アジア冬の学校）」の流れを汲むものです。総合研究大学院大学物理科学研究科5専攻の連携事業として行われるようになって2度目の開催となり、各専攻の連携の下に総合研究大学院大学で行われているレベルの高い研究・教育内容を広く国内およびアジア諸国からの学生・若手研究者の教育に活用することを目的としています。今年度の参加者は合計45名で、アジア諸国（韓国、中国、インド、バングラディッシュ、台湾、タイ、フィリピン）からの参加者は26名、国内からは19名の参加があり、そのうち総研大生は3名でした。

本年度は、“Frontiers in Molecular Science: Electronic and Structural Properties of Molecules and Nano Materials”、をテーマとして、集中講義1件、セミナー6件の講義（すべて英語）が行われました。集中講義は、小杉信博先生に“Molecular Spectroscopy and Electronic Structure Theory”というタイトルで4コマ（6時間）にわたって御担当いただき、分子軌道理論の基礎から内殻励起分光への応用まで、ホワイトボードを用いたわかりやすい丁寧な講義がありました。セミナーは2日に分けて行われました。初日は、岡本裕巳先生による、“Near-field Imaging/Spectroscopy of Nanomaterials”、佃達哉先生による、“Structure and Properties of Gold Clusters Stabilized by Organic Molecules”、小川琢治先生による、“Preparation of Organic Molecules and Inorganic Nano-

Structures toward Molecular Scale Nano Devices”と続き、2日目は大島康裕先生による、“Fundamentals of Molecular Spectroscopy as Micro and Macroscopic Probes in Labo and Field”の後に、国立天文台からご参加いただいた廣田朋也先生による、“Astrochemistry – Molecules in space”、そして菱川による“Molecules in Few-Cycle Intense Laser Fields”についての講演がありました。

今年は、参加者および講演者との交流を図る目的でポスターセッションが行われました。自らの最新の研究内容や研究室で行われている研究紹介など、理論科学から光科学、物質科学まで多岐にわたる内容で、軽食をつまみながらの議論にセッションの時間が瞬く間に尽きました。2日目には、参加者全員に講師の先生方および中村宏樹所長を交えて懇談会が開催され、活気のある雰囲気の中で自由に情報収集や意見交換が行われました。

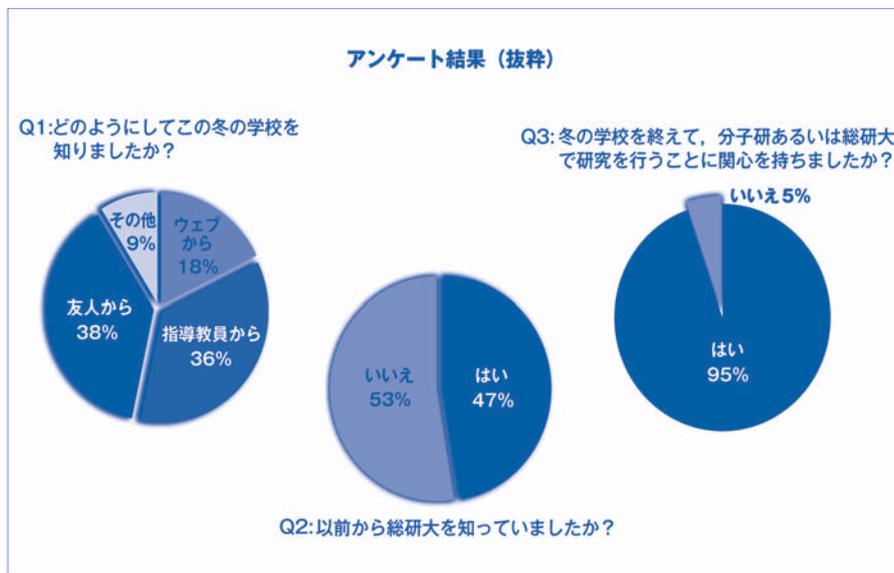
参加者へのアンケートでは、「もう



少し期間を延長してじっくりと講義を聴きたい」、「ラボツアーを行ってほしかった」などの意見もあり、今後の開催において改善の余地が見受けられましたが、全体として「講義を受けてこれからの自分の研究を進める上で大きく役に立った」、「他国の学生と交流ができて楽しかった」、「今後も機会があればもう一度参加したい」との声が多く寄せられ、ひとまずは成功裡にこの冬の学校を終えることができました。

最後になりましたが、入念な準備の上ですばらしい講義をいただいた講師の先生方、開催にあたって御手伝いいただいた基礎光化学研究部門秘書の中根淳子さん、大島グループおよび菱川グループのメンバーの方々に、この場を借りて御礼申し上げます。

（菱川明栄 記）



受	賞	者
紹	Prizes and Awards	介

- ◆大森賢治教授に平成18年度日本学士院学術奨励賞
- ◆大森賢治教授に平成18年度日本学術振興会賞
- ◆佃達哉助教授に「GOLD2006」触媒部門で
Best Presentation Award
- ◆江東林助教授に平成18年度高分子学会 Wiley 賞
- ◆鈴木俊法先生に第20回日本IBM科学賞
- ◆初井宇記助手に日本放射光学会奨励賞
- ◆山田陽一助手にThieme Journal Award 2007
- ◆神谷育代博士に名古屋大学21世紀COE有機化学若手研究会ポスター賞

大森賢治教授が「アト秒コヒーレント制御法の開発と応用」に関する業績で 平成18年度日本学士院学術奨励賞ならびに日本学術振興会賞を受賞



電子構造研究系の大森賢治教授が、「アト秒コヒーレント制御法の開発と応用」に関する業績で、平成18年度の日本学士院学術奨励賞ならびに日本学術振興会賞を受賞されました。表彰式は平成19年3月2日に、秋篠宮殿下妃殿下をお迎えして、日本学士院において開催されます。日本学術振興会賞は、我が国の学術研究の水準を世界の

トップレベルにおいて発展させるために、創造性に富み優れた研究能力を有する若手研究者を早い段階から顕彰し、その研究意欲を高め、研究の発展を支援していく趣旨で、平成16年度に日本学術振興会によって創設されました。今年度は人文・社会科学及び自然科学の全分野から25名の研究者が表彰されます。さらに日本学術振興会賞受賞者の中から特に優れた者5名以内に、日本学士院より日本学士院学術奨励賞が授与されます。大森教授はこの度、物理や化学の分野から初めて日本学士院学術奨励賞を受賞する運びとなりました。また、表彰式では受賞者代表挨拶の大役も務められることになりました。分子科学の分野にとって、たいへん喜ばしいことであり、心よりお祝い申し上げます。

近年、量子論の理解を深め新たな応用分野を切り拓く事を目標に、位相の揃った光を用いて物質の波動関数の振幅や位相を操作しようとする試みが

様々な分野で行なわれるようになりました。このような量子制御は「コヒーレント制御」と呼ばれ、原子からナノ構造に至る様々な階層において量子コンピューティングや結合選択的な化学反応制御などの先端的な量子テクノロジーに結びつくものとして注目されています。大森教授は、アト秒(10^{-18} 秒)精度のコヒーレント分子制御法の開発と応用を目指した一連の研究で世界をリードする成果を挙げて来ました。

同教授はまず、原子衝突の途上における光吸収を観測する独自のレーザーポンプ・プローブ法を用いた斬新な分子分光法を開発し、フェムト秒スケールで進行する化学反応素過程の途中に位置する「遷移領域」を観測することに成功しました。これら一連の超高速分子ダイナミクスに関するレーザー分光学的研究は、後のアト秒コヒーレント分子制御法の確立のための重要な基礎となっています。

大森教授は近年、波としての光の位

相を分子の波動関数に転写するという方法を用いて、かつてない高精度のコヒーレント制御法（アト秒コヒーレント制御法）を開発する事に成功しました。同教授が開発したアト秒位相変調器（APM）は光の位相を精密に操作する装置です。真空中でフェムト秒レーザーパルスを二つに分けて、一方をアルゴンや水素などの気体が入ったチューブに通しスピードを微妙に変化させることで、アト秒レベルの安定性と分解能で二つのパルスの位相差を調節することができます。同教授は、それらのパルスを分子に照射する事によって発生させた二つの波束の量子干渉を自在に制御する事に成功しました。さらには、このような波束の精密干渉を用いて、分子の中に波動関数の振幅位相情報を書き込み、これを一定時間保存した後に読み出す事にも成功しました。

また、最近ではこのような量子干渉をリアルタイムで観測することにも成功しています。この実験で大森教授らは、APMによって高度に制御された量子干渉の様子を別のフェムト秒レーザーパルスを使って追跡しました。すると、分子の中に1個目の波束が出現し、分子内を行ったり来たりした後に、2個目の波束に衝突して複雑な干渉が始まる様子がリアルタイムに観測されました。さらには、このような二つの波束が衝突する際に一瞬だけ現れる量子力学的なさざ波を、ピコメートルレ

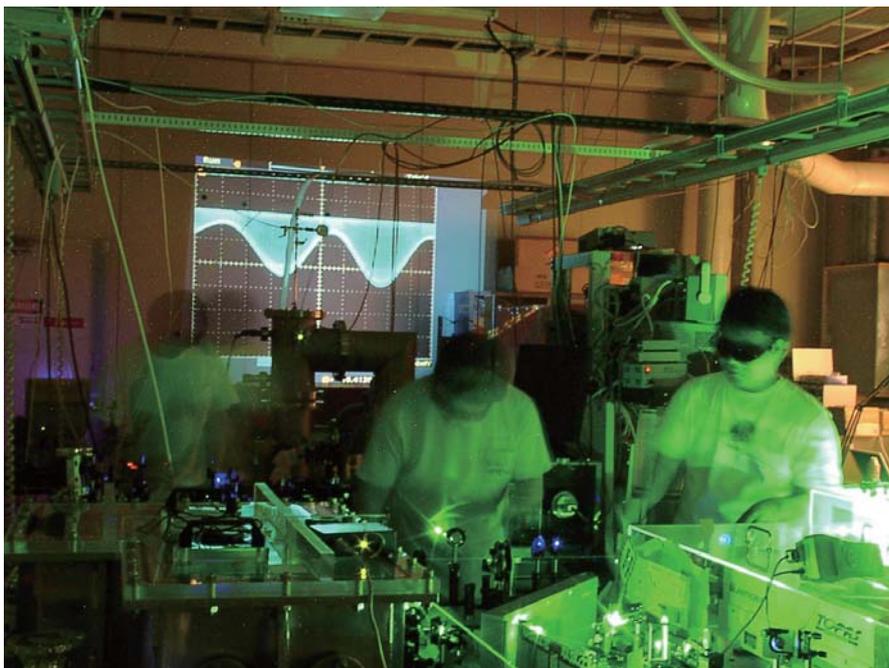
ベルの空間分解能とフェムト秒レベルの時間分解能で可視化することに成功しました。有名なヤングの実験を始めとして、これまで物質の波動性の研究では、物質波が重なった後にできた定常的な干渉縞が観察されてきました。大森教授らは、ごく最近の一連の研究によって、従来の干渉縞を観察する手法を超えた、「動的量子干渉法」とも呼ぶべき量子干渉実験の新たな局面を切り開いたのです。

大森教授の一連の研究成果は、分子科学の分野で世界のトップレベルにあるばかりでなく、物理化学、量子光学、物性科学あるいは情報科学といった様々な分野で学際的な注目を集めています。また多数の新聞各紙等で大きく

取り上げられ、社会的にも反響を呼びました。昨年アメリカ物理学会年会においてシンポジウムオーガナイザーとして迎えられるなど、同教授への国際的な注目度は非常に高いものがあります。

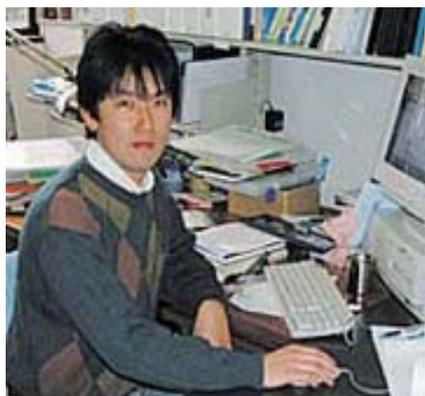
今後、大森教授が開発したアト秒精度のコヒーレント制御法が、従来の分子科学の枠組みを越え、物性科学や情報科学など、より多くの分野を融合した学際的な研究領域を形成し、化学反応制御や量子情報処理などの量子テクノロジーの開発や量子論の基礎的な検証の新たな扉を開いていくものと大いに期待されます。

（西 信之 記）



アト秒精度のコヒーレント制御実験

佃達哉助教授に「GOLD2006」触媒部門でBest Presentation Award



このたび、佃達哉助教授（分子スケールナノサイエンスセンター）が、「GOLD2006」触媒部門でBest Presentation Awardを受賞した。

GOLD2006とは、近年各方面で急速な進展を見せている金の科学・技術について統合的に討論する国際会議であり、本年はアイルランドで開催された。討議分野は「触媒」「化学」「材料」「ナノテクノロジー」の4部門で、それぞれの部門から最も卓抜した発表1件ず

つに対して、Best Presentation Awardが贈られるが、今年の「触媒」部門で佃助教授の発表「Polymer-stabilized gold clusters as quasi-homogenous catalysts for aerobic oxidation in water」が見事受賞となった。

首都大学東京（当時産総研）の春田正毅教授らの報告以来、ナノメートルサイズの金クラスターの酸化触媒活性については精力的な研究が世界的に行われているが、触媒活性のサイズ依存性など、反応の詳細については必ずしも明らかにはなっていなかった。今回の佃助教授の研究においては、まず水溶性ポリマーで保護した金ナノクラスターのサイズ選択的な調製方法を開発し、これらの金クラスターが水中、室温条件でアルコールの酸化活性を示すことを見出した。反応速度を精査することにより、はじめてクラスターのサイズ効果を定量的に評価することに成

功し、その結果、2 nm以下のクラスターで劇的に触媒活性が増大することを明らかにした。以上の結果は、学術的にも大きな意味があるだけでなく、担持型触媒設計などに対する重要な指針になると同時に、また環境調和型精密有機合成への展開も期待されている。

佃助教授の研究は、あくまでも基礎研究に軸足を置きつつ、同時に、応用研究に関する道筋を明確に示している点で、多くの研究者に影響を与えており、今回の受賞はまさに時宜にかなったものといえる。また、今年の「ナノテクノロジー」部門の同賞は、佃助教授の協力研究者である筑波大学の寺西利治教授が受賞しており、金の科学における佃助教授の高い貢献度を如実に示している。今後のますますの発展、活躍を期待する。

（櫻井英博 記）

江東林助教授に平成18年度高分子学会Wiley賞



江東林助教授が「樹状形態を有する高分子の合成と機能」で平成18年度高分子学会Wiley賞を受賞した。この賞は高分子科学の全領域において独創的かつ優れた研究成果を挙げた45歳以下の高分子学会会員に授与される賞である。平成11年度から設立され平成18年度は第8回目に当たる。江

東林助教授の受賞対象となった高分子は dendrimer とよばれる樹木状に規則正しく枝分かれしたナノメートルスケールの分子である。これらの分子を用いて高機能をもつ一連の物質を合成し、その構造と機能を明らかにした。以下に概要を説明する。

dendrimer は球状の分子であり、球の表面付近は原子が混み合っているものの、中央付近には隙間がある。江東林助教授は dendrimer の中央部が反応場として利用できることに注目し、鉄ポルフィリンを中央に配置した hemidendrimer を合成した。そして、酸素濃度を変えることにより、酸素分子を鉄ポルフィリンへ可逆的に吸脱着できることを示した。さらに、球状の dendrimer が光捕集アンテナとして機

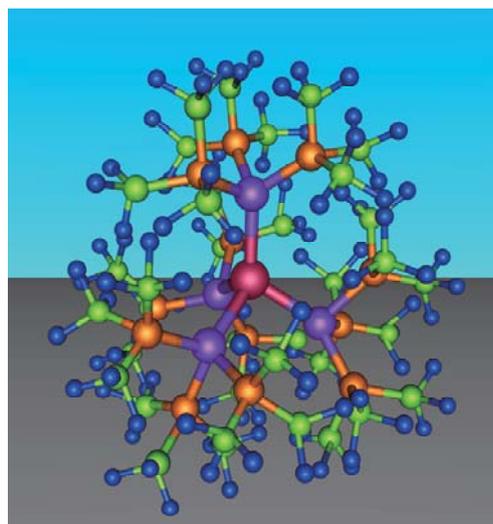
能することを発見した。光捕集アンテナ効果とは dendrimer の表面近くの分子が光を吸収し、その光励起エネルギーが中央部の分子に効率よく移動してゆく効果である。この現象は国内外で注目を浴びた興味深い現象である。また、江東林助教授は柱状 dendrimer を設計して、水の光還元による水素発生を触媒する物質を合成した。この光還元反応は太陽光の下でも可能であり、水素発生効率は従来の例を大きく上回り、実用の第一関門である10%を越えている。また、末端に光機能性ユニットを導入した両親媒性 dendron を合成し、この分子の自己組織化を利用して、サイズのそろった有機ナノチューブが形成されることを電子顕微鏡によって明らかにした。このナノチュー

ブでは電子供与性と電子受容性の分子がそれぞれ層状に形成されているので、光励起によって発生した電子・正孔対が解離され、効率よく光伝導に寄与できる構造になっている。また、アルキル基を有するデンドロン型の配位子を設計し、この配位子を用いて鎖状構造をもつ高分子鉄錯体を合成した。この物質は温度を変えることにより構造を可逆的に変化させ、その構造変化に伴って鉄のスピン状態（高スピンと低スピン）を変化させることができる。このようにソフトマテリアルを用いたスピン状態の制御に成功している。

以上のように、江東林助教授は高分

子合成・有機合成・超分子科学を駆使し、独創的な発想のもとに樹状高分子における光、電子、ホール、およびスピンの相互作用とその制御を通じて、従来とは大きく異なる新しい化学・物理現象を発見し、それらを基盤として新しい機能性ナノマテリアルを開拓した。これらの成果は国際的にも高く評価されている。

(薬師久弥 記)



巨大な樹木状高分子は分子一つでナノメートルスケールの構造体を提供し、かつ分子設計によりサイズ・形態を精密制御することが可能

鈴木俊法先生に第20回日本IBM科学賞



前電子構造研究系電子状態動力学研究部門の鈴木俊法助教授（現理化学研究所主任研究員）が、「超高速光電子分光法の開発と化学反応ダイナミックスの研究」の業績によって、第20回日本IBM科学賞を受賞されました。心からお祝い申し上げます。この賞は、「わが国の学術研究の振興と優れた人材の育成に寄与すること」を目的として、日本アイ・ビー・エム株式会社が1987年に、会社設立50周年を記念して創設した賞です。受賞の対象者は「物理、化学、コンピューターサイエンス、エレクトロニクスの基礎研究の幅広い分野で優れた研究活動を行っている、国内の大学あるいは公的研究機関に所属している研究者」とあり、鈴木先生

はその化学部門を受賞されました。

鈴木先生は、1992年に分子科学研究所助教授に着任されて以来、分子線技術、レーザー分光、そしてイオンおよび光電子画像観測の手法を用いて、化学反応素過程の実験的研究を展開されました。その後、2002年に現職の理化学研究所に移られ、鈴木化学反応研究室を主宰されています。

鈴木先生の受賞は、日本IBMから10月25日に発表されました。受賞理由は、「化学反応途上の量子状態の変化を直接的に追跡する新手法として、超高速光電子画像分光法を世界に先駆けて開発し完成させた」ことが挙げられています。化学反応素過程を実験的に理解するためには、これまで反応の入口と出口を規定するいわゆる「state-to-state chemistry」が最も詳細な研究方法であると考えられていました。従来、反応途中の量子状態を観測することはできないと考えられていたためです。しかし、鈴木先生は「超高速光電子画像分光法」を開発し、フェムト秒レーザーによって開始した光化学反応途中の電子状態から、光イオン化に

よって光電子を放出させ、そのエネルギーおよび角度分布の時間変化を測定することに成功されました。その解析から反応過程における分子の電子軌道の形状の変化や振動回転波束運動に関する知見が得られ、従来の方法では考えられない精密さで、「化学反応が如何に進行するか」を実験的に解明できるようになりました。「state-to-state chemistry」から「超高速光電子画像分光」への展開は、写真から動画への進化にも例えられる大きな発展です。（この超高速光電子画像分光法については鈴木先生の総説に詳細な説明があります。Ann. Rev. Phys. Chem. 57 (2006) 555-592.）

鈴木先生は、先の第1回日本学術振興会賞（「分子研レターズ」53号31ページ）に引き続いてのご受賞となりました。先生にご指導いただいたものの一人といたしまして、ここに重ねてお祝い申し上げますとともに、先生の今後益々のご発展を祈念いたします。

(片柳英樹 記)

初井宇記助手に日本放射光学会奨励賞

極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門の初井宇記助手が、2006年1月に開催された日本放射光学会年会において奨励賞を受賞した。受賞理由は「次世代軟X線発光分光器の開発」である。受賞の際には軟X線発光のパイオニアとして世界的に著名な Upsala 大学 Nordgren 教授（平成17～18年度分子研外国人運営顧問）も来賓として喜んで下さった。

日本放射光学会が授賞するのはこの奨励賞だけであり、その選考は論文査読や国際的視点から慎重に行われる。世界各国での放射光科学分野の発展にこれまでの受賞者の研究成果や技術開発が大きく貢献している実績もあって、本奨励賞は国際的な意味でも重要な賞になりつつある。

放射光源の性能向上によって、軟X線発光のような非常に微弱な信号の高分解能測定が急務の課題となっている。初井君の考案した次世代軟X線発光分光器の斬新な設計思想は国際会議でも注目を浴びるものであったが、従来のものと全く違うデザインであるがゆえにその実現性が疑われていた。

私のグループの研究費を使って開発を開始したのはいいが、いくら予算を集めたところで到底足りない。頼みの UVSOR 施設の開発研究費も予算削減の煽りを食って消滅していた。予算が足りない中での我慢、工夫、妥協も大事な側面であると言っても、今の時代にそぐわない。施設として、研究グループとして、また、研究者個人として、いろいろと外部資金獲得に手を尽くすことになった。

結局、予算獲得に成功したのは初井君自身であった。科学技術振興調整費の若手任期付研究員支援（2003-2006）である（この予算は今ではテニユアトラック制のための予算に変更された）。初井君には研究課題に

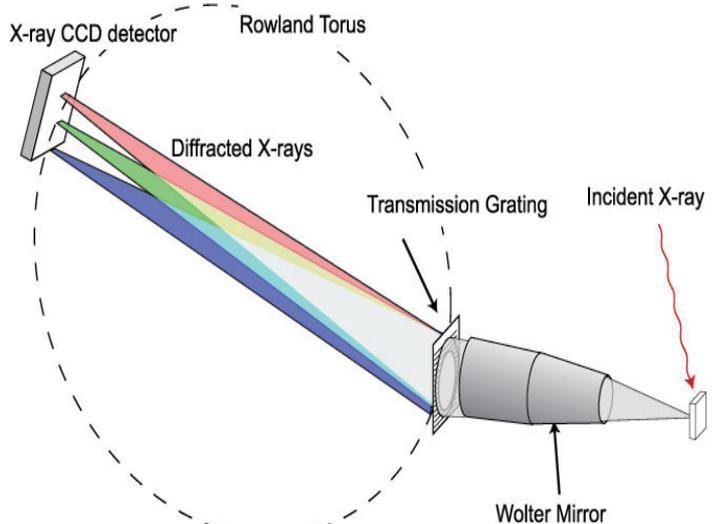
専念することを示すエフォート値や中間評価などで短期的な成果が求められた。精神的にまだ強くはない若い助手にこのような重圧がかかるのは見ておられないくらいであった。

いずれにしても、予算的な面で妥協をしなくても済むくらいの予算が認められたことで、世界最高水準の先端技術導入など、やるべきことをすべてやり尽くし、ついに初井君は世界的に自慢できる性能を持つ次世代軟X線発光分光器の開発に成功した。この成功には分子科学研究所の装置開発室と UVSOR 施設の高い技術力と精神的支えがものを言っており、分子科学研究所の総合力の成果

でもある（初井君自身の言葉）。

今、精神的にタフになった初井君の次の開発計画は首尾よく科学技術振興機構・戦略的創造研究推進事業の個人型研究（さきがけ、2006-2009）に採択された。今後の益々の活躍を期待するとともに、関係者とともに長期的な視点での研究にじっくりと取り組んでいただきたい。

（小杉信博 記）



初井助手考案の次世代軟X線発光分光器の基本概念



次世代軟X線発光分光器開発の成功を祝って技術職員の人たちと
（初井宇記助手は最後尾真ん中右寄り）

山田陽一助手に Thieme Journal Award 2007



分子スケールナノサイエンスセンター助手の山田陽一博士が、2007年のThieme Journal Awardを受賞した。本賞は、国際学術誌SYNLETT及びSYNTHESISのEditorial Board Membersの選考により、有機化学の分野で活躍する若手研究者

分子スケールナノサイエンスセンター助手の山田陽一博士が、2007年のThieme Journal Awardを受賞した。本賞は、

に対して送られるものである。山田博士には、シュツットガルト（ドイツ）に本社を置く医学・薬学・化学関連の出版社であるGeorg Thieme Verlag KGから2007年1月に本賞が授与された。

山田博士は、自己組織化パラジウムナノ触媒を開発し、アルコールをアルキル化剤としたケトンのアルファアルキル化反応への適用に成功するとともに、金属ネットワーク触媒を開発し、水中でのSuzuki-Miyauraカップリング反応

を円滑に触媒し、回収再利用を実現する反応系を提示した。さらに、マイクロリアクター内にパラジウム高分子薄膜のボトルシップ手法での導入に成功し、滞留時間4秒という超高速で反応を定量的に完結させるSuzuki-Miyauraカップリング反応の開発を実現した。

山田博士の今後の更なる研究の推進を期待したい。

(魚住泰広 記)

神谷育代博士に名古屋大学21世紀COE有機化学若手研究会ポスター賞

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の神谷育代研究員が、名古屋大学21世紀COEプログラム「物質科学の拠点形成：分子機能の解明と創造」第3回有機化学若手研究会（平成18年12月1～2日開催）において、ポスター賞を受賞した。対象となったポスタータイトルは「空気雰囲気下金ナノクラスターを触媒として用いるアルケンの分子内ヒドロアルコキシル化反応」である。

ナノメートルサイズまで微小化した金クラスターは、不活性なバルク金とは異なり触媒活性が発現することが知られているが、その多くは酸素分子

吸着を鍵とする空気酸化反応であった。今回、神谷博士は酸素吸着金クラスターがルイス酸触媒としての機能を示し、アルケン類の分子内ヒドロアルコキシル化反応を触媒することをはじめて明らかにした。このルイス酸触媒活性は酸素を完全に遮断した条件や、酸素吸着活性を示さない粒径サイズの大きな金クラスターでは全く発現しない。また酸化反応との競争条件検討や、置換基効果などから、上記の空気酸化とルイス酸は同一活性種で進行しており、しかもクラスター表面における反応であることを明らかにした。さらに神谷博士は、本ヒドロアルコキシル化反応がラジカル機構で進行していることも

見出している。このことは、金クラスター上の有機基が安定なラジカル前駆体となり得ることを意味しており、有機合成化学のみならず高分子化学などにも大きな影響を与える結果であるといえる。このような従来の常識を覆す発見を緻密な実験から明確に導き出した内容に対して、同賞が授与された。

神谷博士は上記反応の他にも、これまでになかった新たな金ナノクラスターの酸化活性も見出しており（未発表）、実験化学者としての能力を十分に発揮して研究を進めている。今後の更なる発展に期待したい。

(櫻井英博 記)

訃報

大瀧仁志先生を悼む

平成18年11月5日未明に元・錯体化学実験施設長の大瀧仁志先生が心筋梗塞のため横浜市の自宅で死去されました。大瀧先生とは昨年8月の南アフリカでの錯体化学国際会議の計画委員会で同席し、帰国後もお会いし、お亡くなりになった数日前にも、ある問題で助言をいただいておりますので、突然のご逝去の報にただ驚くのみでございました。

私が分子研に着任した時には大瀧先生は第二代錯体化学実験施設長として錯体化学研究所設立問題ならびに錯体化学国際会議（平成4年）の準備で多忙は極められておられました。前者の問題では初代施設長の故・斉藤一夫先生、大瀧仁志先生と数多くの会合を持ちました。その過程で両先生から組織、教育、海外での研究体制等の問題で多くの教えを頂きましたが、両先生の語学力、記憶力、文章を纏める速さには驚きの連続でした。私が当時の両先生の年齢になっても両先生の幅広い知識と素養には遠くおよびませんし、今で

も、初代、第二代錯体化学実験施設長の個性と行動力には感嘆しております。私の分子研着任から錯体化学国際会議開催（京都）まで4年ほどありましたが、その期間に大瀧先生が示した強烈な責任感、行動力、国際的な交友関係には圧倒されました。分子研の定年後にはヨーロッパの某有名大学から勧誘があり、ご本人も希望されておりましたが、国際会議のため断念されました。当時、アジアとの学术交流を声高に叫ばれていた大瀧先生の行動に対して学問的メリットがないと多くの批判が寄せられており、公的な資金援助が期待出来ない情勢下でも、先生はヨーロッパの有力者の協力を得てアジア諸国の先生方と折衝されてユーラシア化学会議を設立されました。同会議は毎回、ノーベル賞受賞者か同等クラスの研究者の基調講演を行い、アジアの化学の発展に大きな貢献しており現在も発展し続けております。

大瀧先生がヨーロッパのみならずアジアとの学术交流と人間関係を築

くため奔走されておられましたので、私は先生が国内外の溶液化学のリーダーであることは十分承知の上で、先生が国内外の学术交流のために費やした時間を自分の専門分野の研究に費やされていたら大変な学問的業績を築かれたはずであると、何度か言ったことがあります。その度に先生は微笑みながら、これが私の生き方ですよと答えられました。大瀧先生は日本の研究者は整備された国際組織での委員は引き受けるが、組織形成の段階で指導的な役割を担わないことに不満を述べておられましたので、先生の行動は自分の哲学そのものだったと思います。私の生き方に強烈な影響を与えられた初代錯体化学実験施設長・斉藤一夫先生に続いて第2代施設長・大瀧仁志先生も他界されました。人間には様々な考え方、生き方があることを、自ら実践して我々にお示し頂いた大瀧仁志先生に対して心からお礼を申し上げ、ご冥福をお祈り申し上げます。

(田中晃二 記)

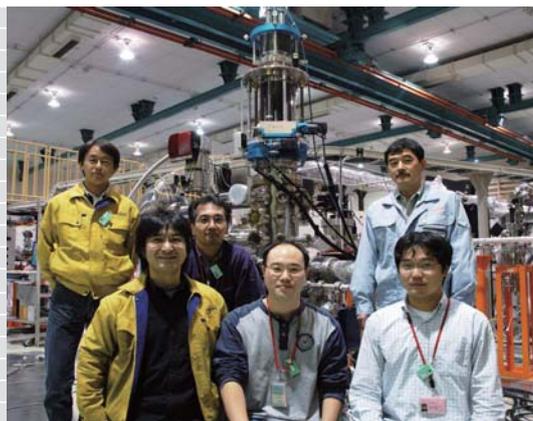


上：大瀧先生テーブルマウンテン頂上にて
左：大瀧先生との最後の写真—喜望峰にて

新装置紹介

高分解能真空紫外角度分解光電子分光
ビームライン：UVSOR-II BL7U

木村真一 [極端紫外光研究施設]



2003年に高度化されたUVSOR-IIは、加速エネルギー1 GeV以下のシンクロトロン放射光源としては世界最高輝度を誇る。この性能は、特に真空紫外領域の分光において高輝度性や経済性などの点で高いパフォーマンスを示す。その性質を有効に利用するため、真空紫外領域 ($h\nu = 6 \sim 40$ eV) で高いエネルギー分解能 (1 meV以下) を持つ角度分解光電子分光ビームラインを建設した。このビームラインの全体図を図1に、構成を表1に示す。

最近の角度分解光電子分光は、マイクロ波で励起されたHe放電管を光源とし、静電半球型光電子分析器でエネルギーおよび光電子放出角度を決定し、MCP+フォスファースクリーンでエネルギーと角度を縦・横軸として出てきたイメージをCCDカメラで画像として検出するというのが一般的な手法になっている。この場合、励起光のエネルギーは固定であるが、装置分解能としては1.2 meV程度まで可能である。また、7 eV程度の紫外レーザーを用いることで、さらに高い分解能での光電子分光が可能になってきている。このような高分解能化の一方で、上記の手法は、いずれも励起光エネルギーが固定のため、ブリルアンゾーン中の対称点や対称軸上における選択的な測定をすることは不可能であり、その結果、電子状態(バンド構造、フェルミ面)の起源の特定は困難である。さらに、

励起エネルギーが低いために、終状態効果も考慮しなければならない。このような問題点は、励起光のエネルギーを連続的に変化させることによって解決することができる。すなわち、ここで紹介する放射光を使うことで励起光エネルギーを変化させることができる「放射光励起光電子分光装置」は、電子状態研究に重要な役割を果たす。

本装置の大きな特徴は、UVSOR-IIの高い輝度によって発光点がきわめて小さいことを利用して、入射スリットを設置することなく、光源からの光をそのまま回折格子に照射および分光することで、高い分解能を達成している点である。さらに、入射スリットがないことにより、光源の強度をそのまま生かすことが出来るという利点をもつ。その結果、高分解能と高強度を併せ持つビームラインを実現している。放射光を単色化する分光器は、そのカバーする全領域で1 meV以下の分解能で試料上の光子数が 10^{11} 光子/秒以上になるように設計されている。入射スリットがないということは、分光器の性能が光源に依存することを示している。近い将来にUVSOR-IIのトップアップ運転(常時入射で蓄積電流を一定に保つ運転モード)が可能になれば、さらに発光点のビームサイズを絞ることができ、より高い分解能が実現出来る。

光源は、水平・垂直直線偏光や左右円偏光などの偏光モードが可能で高

い光子数が得られるAPPLE-II型アンジュレータである。ここで作り出された光は、その偏光度をほとんど変えることなく試料上に導かれる。

光電子分光装置には、半径200 mmの静電半球型光電子分析器(MB Scientific社製A-1アナライザー)を採用し、光電子分析器単体のエネルギー分解能は1 meV以下を達成している。また、試料の操作は、試料を液体ヘリウム温度に冷却が可能なパルスモータ駆動6軸(x, y, z, θ_x , θ_y , θ_z) マニピュレータを用いる。このマニピュレータとAPPLE-IIアンジュレータ光源の偏光性、および励起光エネルギー可変性を用いることによって、電子状態の空間対称性、光電子放出断面積、波数ベクトル、エネルギー固有値を特定した角度分解光電子分光実験が可能である。また、ユーザーフレンドリーな装置にするために、アンジュレータギャップ、分光器スキャン、光電子分析器、マニピュレータの駆動のすべてが1つのプログラム上で動くようなプログラムの開発も進めている。

本装置は、2007年度後期よりUVSOR施設利用ビームラインとして一般に開放される予定である。詳細は、木村(kimura@ims.ac.jp)までお問い合わせください。

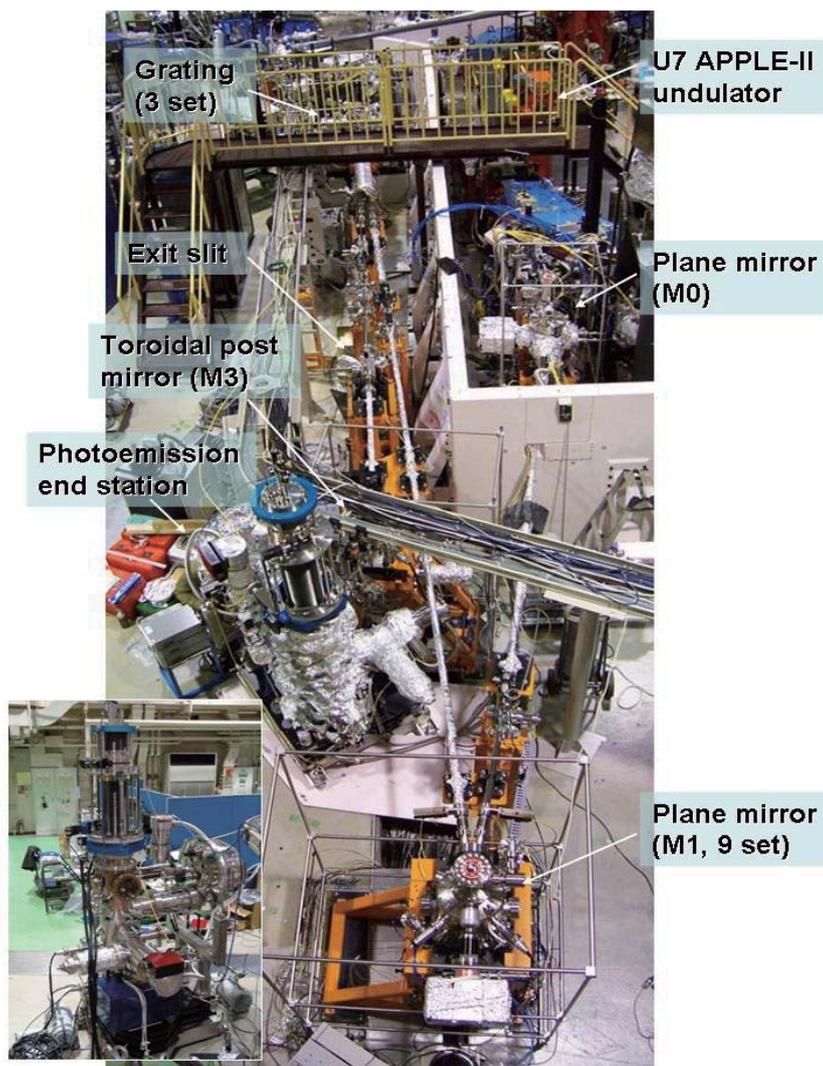


図1 UVSOR-II BL7Uの全体図

表1 UVSOR-II BL7Uの構成

光源：APPLE-II型アンジュレータ（ネオマックス社製）

周期長：76 mm、周期数：38

一次光のエネルギー範囲：4 ~ 60 eV

水平・垂直直線偏光、左右円偏光、楕円偏光可能

分光器：Modified Wadsworth型（トヤマ社製）

入射スリットなし

回折格子の焦点距離 10 m

回折格子 3 枚

格子定数：1200 本/mm（10 eVに最適化）

2400 本/mm（20 eVに最適化）

3600 本/mm（33 eVに最適化）

エネルギー範囲：6 ~ 40 eV

分解能： $E/\Delta E > 10^4$

光電子分光装置：静電半球型電子分析器（半径200 mm、MB Scientific社製 A-1）

エネルギー分解能：1 meV以下（パスエネルギー 2 eV以下, slitサイズ0.1 mmにおいて）

試料用低温6軸マニピュレータ：アールデック社製i-GONIO-LT

パルスモータ駆動：x, y, z, θ_x , θ_y , θ_z

最低温度：10 K以下

国際研究協力事業報告

第一回 JSPS アジア研究教育拠点事業 「物質・光・理論分子科学フロンティア」冬の学校

JSPS アジア研究教育拠点事業物質・光・理論分子科学フロンティア第一回冬の学校は分子科学研究所 (IMS)、中国科学院化学研究所 (ICCAS)、韓国科学技術高等研究所 (KAIST)、台湾中央研究院原子分子科学研究所 (IAMS) の共催で、12月5日から9日にわたって、中国・北京の中国科学院化学研究所において行われた。今回の冬の学校は本拠点事業発足後の第一回目の会合にあたり、開校の挨拶を兼ねて、中村所長をはじめ4研究所の各所長から、各々の研究所に関する紹介が行われた。次いでIMSから小川教授、岡崎教授、菱川助教授が参加し、他にKAISTから2名、IAMSから3名、ICCASから3名の講師を迎えて、若手の参加者向けに計11件の講義が行われた。また参加した若手研究者によるポスター発表と、ポスターの内容を紹介する3分間の口頭発表が、IMSから17名、KAISTから8名、IAMSから5名、ICCASから36名が参加して行われ、参加者が93名になった。当コアプログラムは、日中韓台の4拠点研究所を中心に、国際交流を活発にし、アジアに分子科学の一大潮流を起こせるような人材を養成することを目的としている。この観点から、冬の学校は、学生を中心とした若手研究者に分子科学の現状を伝え、もって新分野を創出するための契機と位置づけられる。さらに4国間の若手研究者に積極的に交流する場を与え、将来的にアジアにお

いて活発な人的交流、情報交流を担える人材の育成も目標の一環である。

本冬の学校は、「物質、光、理論科学の最前線」をテーマに行われた。物質科学に関しては、小川教授が「分子エレクトロニクスのための有機ナノ構造の構築」というタイトルで、ナノテクノロジーの基礎から、点接触電荷イメージング原子間力顕微鏡 (PCI-AFM) を用いたカーボンナノチューブやポルフィリンによるナノ物性という、同グループの最新の研究成果までを講義された。またIAMSのWang教授は「強制自己集積化により構築された単分散ナノ構造体の整列」という演題で、シリコンなどの基板上にGa原子などを自己集積化して形成された2次元パターンに関して、多数のSTM像などを駆使して解説された。さらにKAISTのChoi教授は「センサーのためのナノ構造」と題して、金微粒子や量子ドットを使ったバイオセンサーなどの応用に関して、内外の最新の研究成果を門外漢にも理解しやすいように講義された。またICCASのLiu教授は、「カーボンナノチューブの大量合成と電子デバイス」というタイトルで、窒素などを含んだ新たなカーボンナノチューブの合成、カーボンナノチューブの膜などへの集積化、さらにはそれらを用いた電子デバイスの製造に関して講義された。

光科学に関しては、菱川助教授が「強



光子場中の分子」という演題で、強光子場中の分子の振る舞いや、高強度のレーザーによる化学反応の制御に関して、美しいスライドを使って講義された。またICCASのYang教授が「有機光物理と高圧効果」と題して、初めに光科学の重要性に関して基礎から丁寧に解説された後、高圧下の光反応などに関して、ご自身の研究成果を含めて講演された。

理論科学に関しては、岡崎教授が「分子動力計算——古典系から量子ダイナミクスまで」というタイトルで、ミセルやタンパク、また水素移動などの複雑な系に関して分子の動きを理論的に解析する方法について講義された。またKAISTのLee教授が「確率論的力学系の理論的研究および数値解析」というタイトルで、確率論的な振る舞いをするバイオナノマシンなどへの応用が可能な、理論的解析に関して、ノイズなどを含めた数値解析に基づき解説された。またIAMSのLi教授は「分散力の理論およびその結晶表面での分子集積化への応用」と題して、結晶表面上に自己集積化する分子の理論的考察を、ファン・デル・ワールス相互作用や分散力というキーワードを駆使して講演された。さらにICCASのShuai教授は「高電子移動度を持つ有機機能性材料設計の理論的アプローチ」というタイ

トルで、導電性有機物や導電性結晶に関して理論計算に基づく分子設計の指針を解説された。またIAMSのYang教授は「隣接アミノ酸の相互作用」というタイトルで、分子動力場計算をポリペプチドに応用し、その結果を電子移動などの実験事実と比較、考察した内容を講義された。

講義に引き続いて、若手研究者から自己紹介代わりに3分間のポスター紹介が行われた。その後、2時間に渡って、67件のポスター発表が行われた。ポスターの内容は、光科学、レーザー科学、有機合成、錯体化学、ナノ科学、材料科学、生体分子、理論科学、高分子化学、超分子科学、電気化学と、非常に多岐に及んでおり、自分の専門外の分野に関して知見を深める契機になったと考えられる。全体として若手研究者同士の活発な議論が行われていた印象である。



アンケートの集計によると、分野の異なる参加者が多かったために、講義ではもう少し基礎的な部分の解説を望む意見が多かった。また他国間の学生同士のコミュニケーション不足を指摘する旨も多数見られた。この点に関しては、他国間の学生を、あえて同部屋に宿泊させるなどの工夫を含めて、今後の検討を要する。が、全体として多くの参加者が講義の内容にも満足し、今回の冬の学校の趣旨にも賛同して、来年以降2回目の開催を希望していた。

(江 東林 記)

The 1st Winter School of JSPS ASIAN CORE Program in Beijing for Frontiers of Materials, Photo, and Theoretical Molecular Sciences

December 5, 2006 (Guest House of CAS)

11:00-18:00 Registration
18:00 Reception

December 6, 2006 (The Conference Hall of ICCAS)

Chairman Ming-Hua Liu (ICCCAS)

08:00-09:00 Opening remarks and Introduction of ICCAS, IMS, KAIST and IAMS
Li-Jun Wan, Hiroki Nakamura, Yoon Sup Lee, and Yuh-Lin Wang
09:00-10:00 Construction of Organic Nano-structures for Molecular Electronics
Takuji Ogawa, IMS
10:00-10:25 Gathering picture and coffee break

Chairman Hiroki Nakamura (IMS)

10:25-11:25 Theoretical and Numerical studies on Stochastic Dynamical Systems
Eok Kyun Lee (KAIST)
11:25-12:25 Ordered Arrays of Monodispersed Nanostructures Fabricated by Constrained Self-Organization
Yuh-Lin Wang (IAMS)
12:25-13:30 Lunch

Chairman Kenji Ohmori (IMS)

13:30-14:30 Organic Photophysics and High Pressure Effects
Guo-Qiang Yang (ICCCAS)
14:30-15:30 Molecules in Few-Cycle Intense Laser Fields
Akiyoshi Hishikawa (IMS)
15:30-15:45 Coffee Break

Chairman Yoon Sup Lee (KAIST)

15:45-15:55 Brief Introduction of Posters: 3 Minutes Each/3 Persons
15:55-16:55 Nanomaterials for Sensors
Insung S. Choi (KAIST)
16:55-17:55 Theory of Dispersion Forces and its Application to Molecular Assemblies on a Crystalline Surface
Je-Luen Li (IAMS)
18:00 Dinner

December 7, 2006 (The Conference Hall of ICCAS)

Chairman Yuh-Lin Wang, IAMS

08:30-09:30 Theoretical Approach to Design Organic Functional Materials with High Mobility
Zhi-Gang Shuai (ICCCAS)
09:30-10:30 Molecular Dynamics Calculation - from Classical System to Quantum Dynamics
Susumu Okazaki (IMS)
10:30-10:45 Gathering picture and coffee break

Chairman Li-Jun Wan (ICCCAS)

10:45-11:45 Preparation and Electronic Devices of Carbon Nanotubes
Yun-Qi Liu (ICCCAS)
11:45-13:00 Lunch
13:30-17:30 Visiting
18:00 Dinner

December 8, 2006, The Conference Hall of ICCAS

Chairman Sang Kyu Kim (KAIST)

08:30-09:30 Interaction of Adjacent Amino Acids
Dah-Yen Yang (IAMS)
09:30-10:30 Brief Introduction of Posters: 3 Minutes Each/20 Persons
10:30-10:45 Coffee break

Chairman Dong-Lin Jiang (IMS)

10:45-12:00 Brief introduction of posters 3 minutes each/24 persons
12:00-13:00 Lunch
13:00-14:00 Visiting of Exhibition Room, labs of ICCAS

Chairman Dong-Lin Jiang (IMS)

14:00-15:00 Brief Introduction of Posters: 3 minutes Each/20 Persons
15:00-15:15 Coffee break
15:15-17:00 Poster Exhibition (Room 101, 3rd Building of ICCAS)
18:00 Banquet

December 9, 2006 Leaving



分子科学へのあこがれと回帰

桑島 邦博

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

くわじま・くにひろ

昭和46年北海道大学理学部高分子学科卒業、理学博士（北海道大学）。北海道大学理学部教務職員、スタンフォード大学博士研究員（NIH奨励研究員）、北海道大学理学部助手、東京大学理学部物理学教室（平成5年より東京大学・大学院理学系研究科物理学専攻）助教授、同教授を経て1月に着任。球状蛋白質のフォールディングの分子機構に関する実験的研究を行っている。



平成19年1月1日付けで、東京大学大学院理学系研究科から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へ着任しました桑島です。東京大学在任中は千葉県柏市にある自宅から徒歩と電車で合わせて1時間余りをかけて本郷にある研究室に毎日通っていました。岡崎は東京とは大いに異なり、閑静な住宅街の中に研究所があります。昨年12月に教授室を岡崎に移して以来、東岡崎駅近くのアパートから山手地区にある研究所に三回ほど通勤しました。朝、鳥のさえずりを聞きながら徒歩15分ほどで研究室に着きます。私はもともと北海道の田舎で育ったので、この自然に恵まれた静かな環境が大変気に入っています。

私は昭和46年に北海道大学理学部高分子学科を卒業し、平成4年3月まで北海道大学にお世話になりました。北大の大学院生時代にその当時の須貝教授と新田助手の指導のもとで行ったウシ α ラクトアルブミンの構造転移の物理化学に関する研究が今でも私の研究の基礎になっているように思います。この間、昭和55年8月より二年間は、米国NIHのフェローシップを頂いてスタンフォード大学生化学のRobert L. Baldwin教授のもとで、ポストドクとして、リボヌクレアーゼのフォール

ディング分子機構に関する研究に携わりました。それ以来、球状蛋白質のフォールディング分子機構の解明が私の研究におけるライフワークとなっています。平成4年に東京大学理学部の物理学教室に生物物理学の助教授として採用頂き、独立した研究室を持つことができました。それ以来、優秀な大学院生に恵まれたおかげで、今年3月修了も含めて14名の博士と6名の修士の学生が研究室を巣立つことになります。大学はこのように人を育てるには大変恵まれています。東京大学には足掛け15年間お世話になりましたが、ここで心機一転して、こちらの研究所に新しい研究室を持つ機会が得られたことは大変ありがたく思っております。

平成15年度より、分子研の平田教授や大阪大学蛋白研の後藤教授らと一緒に文科省の科学研究費特定領域研究「水と生体分子が織り成す生命現象の化学」を行っており、平成19年度まで続く予定です。この特定領域研究では、蛋白質のフォールディング、生体分子のダイナミクスと機能発現、蛋白質のアミロイド形成など、水と生体分子が関わる分子レベルの生命現象を化学と物理学の立場から解き明かすことを目的としています。私がこちらに移ることに伴って特定領域のホームペー

ジも <http://gagliano.ims.ac.jp/tokutei/> に移りましたので、是非一度ご覧になって頂ければと思います。この特定領域の組織は計画研究班員13名、公募研究班員46名の計59名からなりますが、班員の中には、名古屋大学物理の岡本祐幸さん、名古屋大学情報科学の笹井理生さん、神戸大学化学の高田彰二さん、大阪大学蛋白研の高橋聡さんなど分子研関係の方々も多数いらっしゃいます。また、分子研名誉教授をされている吉原経太郎先生と北川禎三先生には評価委員として特定領域研究に関するいろいろ有益なご助言を頂いております。こうして見てみると、私は今まで直接分子研と関係があったことはありませんが、いろいろな方々を通して分子研と繋がっていたのだと感じます。

近年学術研究がますます学際的となり、物理学・化学・生物学という従来の基礎科学の枠組みが、現代的な研究の流れにはそぐわなくなりつつあると思います。基礎科学の研究に携わる多くの研究者は、今でも、自分のバックグラウンドは物理学である、化学である、あるいは、生物学であると思っています。私は物理学教室におりましたので、そこではしばしば、「その研究は物理学としていかなる意義があるのか?」、「それは物理学にど

のような貢献をしたのか？」という問いかけを受けました。このような問いかけを聞くたびに、物理学という明確なバックグラウンドを持っていらっしゃる方々を大変うらやましく思うと同時にとまどいを覚えたものです。私の研究の基本的立場は分子レベルの生命現象を化学と物理学の立場から追求することであり、生物科学であるという部分を置き去りにして、すべてを物理学の中に閉じ込めてしまうととも問題が矮小化されてしまいます。今後の基礎科学研究においては、物理学は物理学を超えてより一層化学や生物科学と交わり、化学も化学を超えてより一層物理学や生物科学と交わって行くことが必要とされています。その意味で、こちらの岡崎統合バイオサイエンスセンターはディシプリンの異なる三つの

研究所が連携してその学際領域を推進する目的で設立されたものであり、私にとっては大変魅力的な存在です。

よく考えてみますと、そもそも分子科学は、それ自身化学でも物理学でもあり、また、生物科学とも通じているので、これからの基礎科学を推進する上において大変良い切り口であると思っています。私にとって、分子科学は一種のあこがれであり、分子科学の立場から生命現象を追求しているのだと思っています。また、もともと高分子科学が出身である私にとっては、分子科学研究所に移ることは一種の回帰であるということもできるかも知れません。

最後に私たちの研究を簡単に紹介させていただきます。桑島グループでは、球状蛋白質のフォールディングを、高分解能NMRを含めた各種分光学的測定

法やストップフロー法などの高速反応測定法を用いて研究しています。また、同様の手法を用いて大腸菌シャペロンなどの分子シャペロンが蛋白質フォールディングにどのように関わっているかを研究しています。分子シャペロンの問題は、フォールディングという分子レベルの現象を細胞レベルや個体レベルの生命現象へと繋げてゆくことのできる重要な問題であり、今後一層力を入れて研究してゆきたいと考えております。分子研の皆さんや統合バイオの皆さんとの共同研究などが芽生え、新たな展開が生まれることを期待しています。山手地区の2号館4階東に研究室を構えることになります。これから、よろしくお願い致します。



分子研OBが語る OBの今



加藤 立久

(城西大学大学院理学研究科物質科学専攻 教授)

かとう・たつひさ／平成4年から10年以上分子科学研究所分子構造研究系助教授としてお世話になり、平成16年4月に城西大学大学院理学研究科物質科学専攻に転出しました。分子研時代に国内外に多くの友人を得たことが他に代え難い宝です。

分子科学研究所を「出所」して関東の片田舎にある私立大学に移ってから早3年が経ちました。毎日私立大学の教員としての職務に追われるうち、すっかり「私立大学の先生」になってしまいました。労力の85%以上は講義とその準備に費やし、残りの15%で細々と研究を続けているという有様です。細々と続ける研究活動ではありますが、分子科学研究所の協力研究や施設利用を通して共同利用機器を大い

に利用させて頂いています。研究内容に関しても、分子科学研究所を中心にして広がった人的ネットワークに支えられ、多くの方々と共同研究させて頂いています。人と人の繋がりほど有り難いものはないとつくづくと思います。そんな「私立大学の教官」が、外から見ている分子科学研究所への思いを述べようと思います。

一般的な理系私立大学の学生諸君は、毎年大衆車1台分ほどの授業料を支

払っています。彼らの受けている平均的な受講時間で割り算すると、毎講義毎に上寿司1皿を食べていることになります。ですから講義する側は、上寿司一人前のサービスを差し上げようとEdutainment (Education + Entertainmentの合成語)に努め、解りやすく聞いて面白い講義を心がけています。しかし講義を聞く側はそれほど空腹ではないようです。そこで私は講義毎に「しっかり聴講・演習をして、上寿司一人前

出所して3年

の満足を持って帰りなさい！」と言っています。さて、そんな講義を聞いて卒業する学生諸君は、四分の一が他大学・本学を含めて大学院へ進学し、十分の一が何らかの形で教員として旅立っています。これらの進路をとる学生諸君には、私が教えている量子力学や電子スピンの知識は少しは役に立っているだろうと思っています。けれども、残りの三分の二以上の学生諸君の一部は化学系製造業へ就職しますが、多くはIT関連のSE、営業、サービス業へと就職していきます。この学生諸君にとって、私の教える波動関数やスピンハミルトニアンが何の役に立っているのだろうか？ 一流とはいえない私立大学理学部で何を教えれば良いのだろうか？ 小難しい量子力学を教えるよりは、危険物取り扱い試験や基本情報試験など取得可能な国家試験の試験勉強をしたほうが良いのではないかと？ 資格取得志向の強い今の学生諸君にとって、旧態依然とした理学部教育をやめ、なりふり構わず資格取得を目指す専門学校のような授業をしたほうが、幸せではないだろうか？（事実、基本情報試験の試験対策講座も担当しています。）今の大学に移ってから3年間、真面目に悩んでしまいました。そして悩んだあげくに得た答えは、「我々のすべきことは、学生諸君に自分で学ぶ場を与えること」でした。波動関数やスピンハミルトニアンが直接就職に役に立たずとも、それらを学んで4年生の卒業研究を実行し、まとめ上げ、発表会でプレゼンテーションする、という一連の行為を「達成」することが重要であると思に至りました。そのような行為を達成するための「場」を与えることが我々の仕事なのだと思納めました。「場」を与えるとは、卒業研究のテーマを与え、実験設備を整備し、実験を実行させることですが、それ以上に研究室でその行為を行う先輩・仲間と同じ時間を共有することが重要な

のだと思います。同じ志（卒業研究や修士論文研究）を持つ人間同士の相互作用の「場」を提供することです。私の85%の教育義務の遂行も、15%の研究活動も、そのために必要なのだと思っています。

全世界に質の高い研究「場」を提供する分子研

ところで、欧米の大学の広い広いキャンパスや静かな図書室・談話室で学生たちが思い思いの時間を過ごしている姿を見ると、欧米は豊かだと思っています。つまり欧米の大学には、学生たちに自由な場を十分に提供する豊かさがあります。それに比べて日本の大学は、キャンパスの狭さや学生たちに解放されている空間の貧弱さで劣っています。日本の私立大学では、できるだけ多くの学生をとろうとしますので、その事情はさらに貧弱です。いきおい学生諸君は、キャンパスの外に「居場所」を求めているようです。最近ではブログやMixiといったネットワークの中にバーチャルな「居場所」を作っているようにも見えます。そのような日本の大学は、2007年から全入時代に突入しました。しかし少子化で学生数が減少する今だからこそ、大学がもっと豊かな「場」を与えられるように改善されるチャンスではないでしょうか？ そして、より豊かな「場」を提供でき、学生諸君に学びの満足感を与えられる大学が生き残っていくのだと思います。

分子研に求められることも同じではないでしょうか。全国の分子科学者へ質の高い研究の「場」を与え続けてほしいと思います。つまり、分子科学を目指す学生諸君に教育・研究の「場」を与え、学位を取得して間もない若い研究者には美しく羽化する孵卵器としての「場」を与え、全国の研究者には共同研究の「場」と世界に開いた交流

の「場」を解放し、質の高い研究者間の世界的ネットワーク作りの機会を提供することです。

もっと「解りやすい情報発信」を

また、もう一つ分子研に「解りやすい情報発信」を求めたいと思います。最近の研究活動にも経済効果が求められ、「役に立つ」研究が奨励されています。ですが分子研が実用研究に走る必要は全くありません。直接に一般市民生活に役に立たなくても、分子研は全世界の基礎科学ネットワーク作りに“役に立っている”のです。そのことを大いに宣伝すれば良いのです。そんな世界的ネットワークから生まれた研究成果を、一般の人々に解り易く、また子どもたちをワクワクさせるように宣伝して下さい。この分子研レターズにも、もっと一般人が面白く読める記事を書けるべきです。または一般市民向け冊子や一般市民向けのホームページをますます充実させるべきです。「分子研レターズ54」に掲載された立花隆氏の意見に賛同します。自分自身が分子研に在職していた当時は、「一般向け広報の仕事」を雑用と嫌っていました。しかし、分子研スタッフには100%の研究する時間があるのですから、そのうち5%だけでも「一般向け広報の仕事」という雑用に振り向けても罰は当たりません。ただし、世界的ネットワークの中心的役割を担うためにも世界をリードする研究が続けられる設備、のみならず優秀な人材の確保は不可欠だと思います。以上がすっかり「私立大学の教官」になってしまったOBからの“愛する分子研”への思いです。



化学が苦手な学生と格闘する 私大教員の日々と苦悩



六車 千鶴

(中京大学教養部 助教授)

むぐるま・ちづる / 1989年3月 お茶の水女子大学理学部化学科卒業、1991年3月 お茶の水女子大学理学研究科修士課程修了。1991年4月第三期生として総合研究大学院大学に入学、1993年2月より総研大に在籍したまま、諸熊奎治教授についてエモリー大学に留学、1994年9月に総研大にて博士(理学)を取得。紆余曲折を経て1999年4月より現職。現在は主に文系の大学生を対象に一般教養の化学を担当し、『理科離れ』を嘆く日々を過ごしている。

私は今、文系・理系を問わず、高校で化学を履修しなかった学生から化学が得意だという学生を相手に一般教養の化学を教えている。化学の基礎知識を駆使すれば日常生活やニュースの中に出てくる化学の話を知りやすく説明できる気がしたのだ。現実には、思惑に反して、何冊かの専門書とあわせて『おもしろい』『やさしい』『わかる』と題した化学関連の本を何十冊も読み、毎回の授業で学生から集めたコメントを整理しつつ授業を振り返り、学生が興味を持つ内容に焦点を合わせて内容を練り直しながら授業期間を乗り切っている。まだまだ「こうすればよい」などという結論は出ないが、ありのままをここに書き記しておく。

化学の苦手な学生の実情

いわゆる一般向けの本は、分子研が中心となって編集した某書も然りだが、想定している読者がはっきりせず、挿絵にしても、図表にしても、説明にしても、その多くが授業で使うには中途半端だ。従来の説明に比べれば格段にわかりやすくなっているものもあるが、同じ論法ではもはや伝わらないだろうものや説明が仇になっているもの、提示された例が古くてピンとこないもの、本当に知りたいことは書いていないものが散見される。更には、語られている内容に現実味がなかったり、説明が簡潔すぎたり、化学の基礎知識との関連や全体像が見えなかったりするため、どうしても面白みに欠け、自分なりに

アレンジする必要が出てくる。

化学が苦手な学生は決して化学に興味がないわけではない。そういう学生も身近な例を挙げただけで興味を持ち、新しい機能や性質をもつ化学物質やニュースで見聞きした化学物質の話に目を輝かせる。下手に手加減したつもりで高校のおさらいをしたり、難しい部分を端折った説明をしたりすると、過去に『化学』と何かあったかと心配になるくらい拒絶反応を起こしている。

そして、化学が苦手な学生はある意味潔癖である。だからこそ中途半端な説明には手厳しい。何度も繰り返し説明したはずなのに「また説明してほしい」と要望したり、定義だと説明したはずの部分を「どうして」と食い下がったり、三段論法で説明したはずの結論に「なぜそうなるのか」と問い詰めたります。しかし、同じ説明をもう一度すべきか、別の角度から説明すべきかという判断は難しい。下手に違う方向から説明すれば「さっき言っていたことと違う！」と混乱させることになる。とはいえ、それほどまでにこだわっていた割には、授業の終盤になって「ガンソ(元素)って何ですか」、「原子と分子は何がどう違うんですか」といったコメントに脱力することにもなる。

また、化学が苦手な学生は算数の文章題も苦手だ。彼らは当てずっぽうにクイズに答えるかのように、私には想像しえない複雑な四則演算や式を追うごとに変わるマイルールを駆使して問題を解き、正解からは程遠い答えを導きだす。恐らく彼らはルールに囚わ

れないからこそ、ルールに従って答えを導く理系科目が苦手なのだ。その奔放さ故であろうか、彼らのコメントには配布したプリントにある言葉をつなぎ合わせたかのような迷文もでてくる。そんなときは「どうか『化学で習った』とだけは言いませんように」と祈るしかない。

彼らのコメントには「こんなところにも説明が必要だったか！」と驚かされることもある。授業の最初に原子や分子の説明をしたときのことだ。まず「世の中のすべてのものは原子でできていて、身の回りのもの全部、そして人の体もまた原子でできています。」と言い、次に分子の説明に移って「人の体にはタンパク質の分子、脂肪の分子、炭水化物の分子、水分子などがあります。」と続けた。その日のコメントには「人の体は原子でできているのか、分子でできているのか？」とあった。

表記されていない事柄にも要注意だ。被爆の説明をしたときのことだ。「被爆という言葉は怖いイメージがあるかも知れないけど、この表を見ればわかるように、宇宙からくる宇宙線や食事などの日々の生活でも少しずつ被爆しています」と説明した。その日は「私、女の子でよかったです♡」、「どうして男だけなのか？」というコメントがいくつも出てきた。不思議に思っ提示したプリントを見返すと、表には『日本人男子の食事(年間) 0.35 mSv』と書いてあった。

学生が発した言葉をそのまま受け取るのも危険だ。学生からは当日の授業

内容のコメントだけでなく、今後の授業で取り上げてほしいトピックスを募集し、「虹はどうして見えるか」、「どうやって飛行機が飛ぶのか」、「おなからは燃えるのか」などの素朴な疑問にも化学の枠を超えない範囲で答えている。ある時、学生から「サイエンスよりバイオレンスの方がいい」と言われた。格闘技を化学で説明するのだろうか。ちぐはぐなやりとりをした挙げ句、最後に彼の口から出てきたのは「バイオレンスってほら、バイオってやつ！」だった。彼の『violence』は『bioscience』だったようだ。彼の意図する『science』もまた『chemistry』に違いない。

譲らない三つの要望

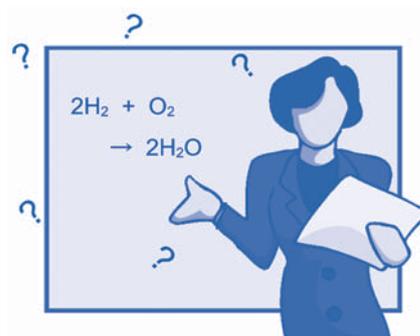
残念なことだが、コメントを読む限り、私が伝えたいことは学生にはあまり伝わっていない。準備に費やした時間を考えると正直がっかりする。もちろん中には授業内容をより深く考えさせられるコメントや質問もあり、新しい視点が加わることで私の授業はより面白く進化している。しかし、私の努力が空回りしてマニアックな内容にな

ることもある。学生の我慢が限界に達すると、図らずも苦情を頂戴する。そうすると、いくつかのこだわりポイントを捨てざるをえない。それでも何人の学生が指摘しようとして意識して譲らない要望が三つある。

一つ目が、「化学式が出てくるとわからなくなるので出さないでほしい」というものだ。授業では、分子の構成原子や官能基や分子構造が化学物質の性質と関わっていることを繰り返し説明している。自ら率先してファンタジーと見分けがつかないような授業はしたくない。

二つ目が、「専門用語を使わないでほしい」というものだ。一般向けと書かれた科学書でも専門用語は使われている。そこでつまずくと科学的な記述の正確さは判断できない。いつか自分で調べたいことが出てきたときに備えて専門用語が理解できる素地は作りたいたい。もっとも学生の言う専門用語が一般用語である可能性も捨てきれない。

三つ目が、「今は〇〇である可能性が高いという言い回しが気持ち悪いので言い切りたい」というものだ。科学の進歩は、ある日突然、灰色の事



象を白や黒に変えたりしない。その途中では、たくさんある可能性から他の可能性を排除したり、新しい可能性を導き出したりしながら真実に近づいていることも意識して欲しい。「可能性が高い」という表現は学生が想像する以上の意味を持っている。

最後の授業では、「化学が進歩していることがわかって興奮した」、「授業は面白かった」というコメントが少なからず出てくる。依然として「やっぱり化学は嫌い」、「授業についていけなかった」というものもある。こうして学生のコメントに一喜一憂しつつ、「彼らなりに授業を通して掴むものがひとつでもあればいいじゃないか」と諦観や妥協も学びながら、私は自分の授業スタイルを試行錯誤で確立している。

ビーカーとフラスコから



柘植 清志

(北海道大学大学院理学研究院・化学部門)

つげ・きよし / 1990年 東京大学・理学部・化学科卒業、1995年 東京大学・大学院理学系研究科・化学専攻博士課程修了、1995年-2000年 分子科学研究所・錯体化学実験施設・助手、2000年より 北海道大学大学院理学研究科 助手

現在、私は北大の理学研究院・化学部門の錯体化学研究室で、金属錯体の合成研究を行っています。分子科学研究所は基本的には物理科学関係の研究者の方が多いので、「錯体」の「合成」というと、大分縁遠いところに位

置しているのではないかと思います。OBの今と言うことで、今の私のいる所を紹介させていただきます。

私は、学部4年で研究室に配属された時から、金属錯体の合成とその性質について研究をしています。学生時

代にクロムやモリブデンの金属クラスター錯体から出発して、分子研・錯体化学実験施設では、専らルテニウム錯体、北大に移ってからは、ちょっとレポートリーを広げて、バナジウム、モリブデン、ルテニウム、パラジウム、

白金、金、銀、銅の錯体の研究をしています。色々な金属を使っていると思われる方もあるかもしれませんが、いわゆる遷移金属元素ですら30近く、典型金属やランタノイド、アクチノイドまで含めると、周期表上の元素のほとんどは金属ですから、ほんの限られた金属元素しか扱ったことがないことになります。

新しい化合物に辿り着くために

私の行っている合成は、由緒正しい古典的な物で、ピーカー、フラスコ、還流冷却器など古式懐かしいガラス器具を用いて、常圧下、溶液中で金属源と有機配位子を室温±約100度の範囲で反応させるという物です。学生時代に御指導頂いた齋藤太郎先生が、「実験室にある化学合成の器具というのは進歩しないね、100年前と同じじゃないかな。」と言われていたのが記憶に残っています。確かに、攪拌するのはマグネチックスターラー、溶解するには超音波洗浄機など、少しずつ便利になっていますが、今日もやっぱり、ピーカーとフラスコの中で反応が進行していきます。今取り組んでいる銅の錯体の合成も、三角フラスコの中で適当な有機溶媒中、ハロゲン化銅とトリフェニルホスフィンとピリジン系配位子を室温で反応させ、目的の錯体の結晶が生成したところで濾別して取り出す、というものです。もちろん、もう少し手のかかる合成もしていますが、合成時に、常圧、室温±約100度の範囲を出る事はほとんど有りません。我々が“低温”で結晶化と言っても、高々この範囲であって、mKの世界を意味するわけがありません。(分子研時代に、電子物性をされている先生が、100 Kと言う高温でも……と話しているのを聞いて、随分温度差があるな、と思った記憶があります。)

今でも、そんな古典的なことで研究

が出来るのかと言われそうですが、どこの分野でも同じように、簡単で単純な事は大抵やりつくされて、「簡単で複雑な」(=忍耐力を要する)合成や、「非日常的な」(窒素下、発火性、毒性、高温、高圧など)合成、「職人芸的な」(=その人でないと出来ない)合成をしないと、なかなか新しい化合物には辿り着けない時代になっています。

上に書いた銅錯体の合成も一見簡単なのですが、「簡単で複雑な」、「職人芸的な」合成に分類されます。一度出来る条件が見つければ良いのですが、そこにはなかなか行き着きません。反応させるピリジン配位子の置換基の位置が変わっただけで、迷路に迷い込んでしまうことも度々です。正しい方法に行き着くまでには、適切な溶媒系を選択し(ある時は混合溶媒の比率が重要になります)、反応当量を調節し(目的化合物の組成比で反応させても出来ないことが多々あります)、濃度を調節し(濃すぎても薄すぎても狙いの化合物は出てきません)条件を絞っていく事が必要で、全部について一回りぐらいした所で、“その人なら”再現性良く合成できるようになります。(他の人が同じ事をやっても出来ないことがあります。)上の合成の場合には、一価の銅が配位子交換を起こしやすい、と言うことが問題になって、やり尽くされていない合成になっていたわけです。

こんな調子で条件の吟味をしながら合成するのですが、溶液中になんとか目的錯体が生成しても、分離が出来ずに涙を飲むこともあります。NMRでは見えているけれども、どうしても分離できなくて、合成法そのものを考え直さざるを得ない時もあります。100年前に比べれば、カラムクロマトグラフィーの手法が大発展し強力になっているのだと思いますが、それとて万能ではなく、無色の結晶と黄色い結晶を

顕微鏡下でより分けるなんて言う、人間クロマトグラフィーが登場する場合があります。(質量分析の方法を見ていると、そのうち合成スケールの分取用マススペクトロメーターなんて出来たら、きっと便利だろうな、なんて思う事があります。)

金属錯体合成は困難で魅力的なプロセス

さて、合成の愚痴のようになってしまいましたが、私の現在地はこんな感じの金属錯体の合成研究にあります。寄り道、回り道をさせられながら、新しい化合物を合成し、新しい性質を出していくのは、自然を相手にした手抜きが出来ない、困難で魅力的なプロセスです(一緒に研究している学生さんもそう思って楽しんでくれていると良いのですが……)。北大に来てからは、それまでの興味であった「多核錯体構築」と「酸化還元」に加えて「発光性」にも興味を持って研究を進めています。特に銅と銀の錯体は、単純な化合物にもかかわらず強い発光性を示し、上に述べたような合成の再現性を出すのに苦労しながら、発光色、発光強度の制御を目指して研究を進めています。少しずつでも視界の開けた所へよじ登って、ピーカーとフラスコと良いアイデアで、分子研の少し縁の遠い研究者の方々の目も引くような金属錯体を合成できたらと考えています。





分子研を去るにあたり



分子研の良き時代

北川 禎三

豊田理化学研究所 フェロー

(前 岡崎統合バイオサイエンスセンター生命環境研究領域 教授)

きたがわ・ていぞう/昭和44年阪大・理(無機・物理化学専攻)で理博を得る。41年に阪大蛋白研助手、55年阪大医助教授、58年に分子研教授、平成12年に統合バイオサイエンスセンター教授。学位論文はポリエチレン結晶の物性と振動分光で、中性子スペクトルを日本で初めて取り扱った。その後ヘム蛋白質の赤外分光、共鳴ラマン散乱、時間分解共鳴ラマン散乱、紫外共鳴ラマン散乱などで国際的COEとして認められた。特定領域研究の班長、領域代表、特別推進研究などを受ける。現在、日本学術会議化学委員会副委員長。



私は昭和58年に分子動力学研究部門の2代目教授に選ばれた。初代の藤山常毅教授が病気で急逝された後任だったので、部門全体が藤山先生の研究目標に向かっていった。当然、助手の空きポストはなく、私の助手を採用するためには前任助手の移動先を世話することから始めねばならなかった。そしてその人達が占有していた実験スペースを少し空けてもらって自分の装置を置かせてもらう交渉からスタートした。実験棟504号室の片隅にラマン散乱測定装置を置いた。1年半後くらいに自分の助手を採用できたが、前任の助手とも共同研究を進め、部門としての成果をあげる事を考えた。隣室には広田榮治先生が居られ、高分解能分光による分子精密構造の決定で世界の先端を走っておられたので、かなりのプレッシャーを感じた。最近の新任教官とは環境条件がかなり異なるが、それでもその時代が「分子研の良き時代」という印象で私の心に残っている。その理由を考えてみた。

当時分子研は、非常に生物アレルギーであった。それでも私には、気相分子の物理化学の詳細を論ずるより、蛋白質が何故うまく機能するかに関する1桁目の構造化学に興味があった。それで、「機能性高分子の構造化学」というテーマで特別研究を申請し、研究費を

受けた。現在では「機能性高分子」という言葉が別な概念をもつので、私は「うそではないが少しごまかす」方策をとったことになる。というのは、頭のにぶい私が精鋭そろいの分子研で、傍目対等に研究を進めている印象を外に与えるためには、その精鋭達とは別なセンスで「泥くさいがユニークな展開」をしようと考え、蛋白質を主テーマにした。

そういう逃げ腰の非力な私を育てて下さったのが、井口洋夫所長や主幹の先生方で、真のリーダーシップを発揮されていた。所長自ら大きなプロジェクトを文部省に提案し、日本の主な分子科学者をそこに集め、その中に分子研の若手教官を少し加えられた。無名の私にとってそこでの研究交流は、単に分子科学のリーダーと知り合いになるだけでなく、プロジェクトの進め方や分子科学という分野の学問的位置づけ等、簡単には語れない多くの事を学びとった。研究所所長の理想的なありようを見た感じであった。

その時代に学んだ事は、その後私が特定領域研究の班長や領域代表を務めたり、多くの科研費をいただけた基礎になっている。分子研就任前、自分一人で小さい穴蔵で実験していた時代が14年もあり、「万年助手を覚悟してくれ」と家族に頼み込んでいただけ

に、分子研着任後の一見みじめな研究環境でも、しあわせに思えた。そういう出発であったが、分子研の実験棟から山手に引越す時点では、実験棟502、504～509、204、205号室を使っていたので、研究グループは非常に成長した事になる。それが実現した背景には、「部屋を無駄に多く占有すべきではないが、研究が発展して人数、装置が多くなり、実動面積として必要なら使わせてやろう」という寛大さが、当時の所長に強かった事がある。これは研究所の大切なflexibilityで、全員が最初から同じ面積を持つべきだという悪平等の考えとは異なる。

このような自分の研究の進展の一方で、研究所独自の大学院を持ちたいという動きが総研大の創設につながった。長倉三郎先生のすごいリーダーシップを目の前面に見た。幸いにも私は、その理想的形態の討論から実際の規則づくり、光科学専攻づくり等に直接関与する事ができた。2006年9月の学位授与式では、小平学長から総研大全体を通して学位授与者の数が最も多いと誉めいただいた。その中には井上奨励賞受賞者3人、長倉賞1人、森野奨励賞2人が含まれ、既に教授2人、助教授1人が誕生した。強調したい事は、分子研に「creativeな活動を尊ぶ精神が強かった」事であり、それが今後も大切であると思う。

上に述べた基本精神とか思考法の指導というものこそ所長に求められている最も大事な要素であり、所員と外界とのつながりも所長の力に負うところが大きかったと痛感する。そんな私を育ててくださった昔の所長先生方に感謝の気持ちで一杯である。また無事退官するまで男の美学に耐えてくれた家内にも感謝の意を表したい。



外国人研究職員の紹介

Prof. CHOI, Cheol Ho



Choi助教授は韓国で1967年に生まれ、1986年にソウル大学に入学して1992年修士課程を修了して、兵役で韓国空軍にしばらく従事した後米国に行き、1998年にジョージタウン大学で学位を取得しました。その後、アイオワ州立大学アメス研究所のゴードン教授のもとで博士研究員として量子化学を学び、2001年に韓国に帰国して慶北大学の助教授をされている量子化学

者です。Choi助教授とはほとんど毎年国際会議等で会っています。最近では、2005年の第11回日韓合同シンポジウムでは分子研に、2006年の国際量子化学会議では京都に来られています。温厚誠実な方ですが、アルコールが入ると話題が大いに盛り上がります。量子化学の数学的な展開に特に興味があり得意です。

小さい分子の理論と計算は実験に匹敵する有力な方法として進展しているが、大きい分子系への適用と実用汎用化が現在では重要な課題となっている。Choi助教授は、(1) 量子化学計算のNオーダ法の開発と生体分子とナノ分子への応用、(2) SIMOMM (Surface Integrated Molecular Orbital and Molecular Mechanics) 法と高速FMM (Fast Multiple Method) 法の開発と表面化学反応への応用、(3) 大規模MCSCF (Multi-configurational

Self-consistent Field Method)) 計算法の開発、(4) 化学センサー、酵素の触媒作用等の量子化学計算等を活発に展開しています。これらは、最近の話題であるナノ機能分子やナノ素材の理論と計算法の開発と応用にいずれも非常に興味あるもので、Choi助教授のこれまでに開発された方法論とプログラムの幾つかは代表的な汎用量子化学計算パッケージである「GAMESS」に取り入れられています。今回、平成19年3月1日から平成20年1月31日までの11か月間分子研に滞在されて研究されるので、ナノ分子系の分子理論を進展させると同時に精度の高い大規模量子化学計算を高速に実行できる方法とプログラムを開発して、ナノ分子、生体分子、表面化学反応等への応用が展開できることを楽しみにしています。

(永瀬 茂 記)

Prof. KIM, Bongsoo

Kim教授は液体の非平衡統計力学の分野、特に、ガラス転移の分野で韓国における第一人者である。Kim教授は、場の理論的な手法を用いて、液体の統計力学の問題、特にガラス転移の問題に取り組んで来られている。

ガラス転移点付近における過冷却液体のスローダイナミクスを第一原理的に記述する微視的理論としては、いわゆるモード結合理論(MCT)が最も成功を収めた理論として知られている。実際、MCTが予言する過冷却液体の複雑な緩和の挙動と実験や計算機シミュレーションとの一致は驚くほどである。しかし、MCTは実際のガラス転移点よりかなり高温で非エルゴード転移を示すといった、深刻な問題も古くから指

摘されてきている。また、平衡状態の液体論に立脚した現在のMCTを不均一な系(例えば、ずれ応力存在下での過冷却液体の挙動)や非平衡系(例えば、エイジングの問題)にそのまま適用するのは問題があるように思われる。一方、場の理論的な手法を用いても、「1ループ近似」と呼ばれる近似を用いるとMCTと「同等な」方程式を導けることが古くから認識されている。ところが、これまでの場の理論的な手法に基づく方法論には数々の問題があり、特に(i) 数学的には非常に似通っているが、MCTと厳密に同等な方程式が導けるわけではないこと、(ii) Fluctuation-Dissipation Relation と呼ばれる関係式を満足しないこと、が大きな問題として知られてきている。

Kim教授が最近なされた仕事はまさに

これらの問題を解決されたことである。

このことにより、(i) 「1ループ近似」を超える近似を用いることによって、MCTの問題点が解決される可能性がある、(ii) これまでのMCTでは取り扱いの難しかった不均一系や非平衡系への拡張が行える可能性がある。

以上のようにこれまでもつぱら物理分野における問題で統計力学を進めてこられたが、分子科学分野(化学)での研究に新境地を拓くべく、川崎恭治先生の紹介により、分子研を訪問されることになった。分子研においては溶液内化学反応や液液相分離における動的臨界現象など分子科学が深い関わりをもつ非平衡過程の研究において新しい研究成果が期待される。

(平田文男 記)

Prof. DASCALU, Traian

Dr. Traian Dascalu (トライアン・ダスカル) は、ルーマニア (Romania) ブカレスト大学物理学部を卒業後、同国の原子炉研究所、電気工学研究所を経て、レーザーとプラズマ物理学研究所にて学位を取得された。その後同研究所に席を置きドイツ (博士研究員)、メキシコ (客員研究員)、そして日本ですが、最初はJST福井地域結集事業客員研究員 (2001年4月～2003年3月) として来日、その間、共同研究で分子研に来られた。帰国後2006年1月には1級研究主任に昇進され、2006年10月からは分子研の客員として約半年招聘されることとなっ

た。研究題目は「高効率・高出力フェムト秒小型レーザー発振に関する研究 (Study of efficient high power femtoseconds laser emission in compact configuration)」で、分子研レーザーセンターで準備してきたエッジ励起Yb:YAGマイクロチップレーザーを基に、高出力超短パルスレーザーに向けた研究を行う事になっている。研究期間も短く実験的な成果を挙げるのは大変であるが、すでに、レーザーセラミックスが内包する問題について新たな事実を見だし、その内容で国際会議にも投稿するなどの成果が出つつある。

ところで、先の来日で彼は日本文化に興味を持たれ、特に2004年より

岡崎弓道会 < <http://www.i-chubu.ne.jp/~okayumi/syoukai.html> > にて弓道を始められた。すでに、2005年には初段の試験にも合格されているなどの腕前である。現在も、一週間に2回、岡崎中央総合公園の一角にある岡崎市弓道場で練習されるなど、大変お気に入りのようである。氏にとって、弓道は自己の能力を伸ばす良い方法 (a way of personal development) で、皆さんにも是非弓道をお勧めしたいとのこと。

早いもので3月の初旬には帰国される。残された期間が氏にとって充実したものとなる事と今後のますますの御活躍をお祈りしたい。

(平等拓範 記)

外国人研究職員の



印象記

Wonderful experience in Okazaki

Wen-Ping WANG

It is a pleasure to memory my wonderful experience during my stay at IMS, Okazaki. Arrived at the end of March, 2006, I have been working in IMS for three quarters of a year now. Lots of things about wonderful experience are worthy of being written, although my visit to IMS is short. I recorded only a few main ones of them here.

The first is about the scientific environment of IMS. I think that every foreign researcher working at IMS has a precious opportunity to meet, discuss, and collaborate with the best scientists in their fields. Open seminars held in IMS, provide chances for researchers to freely discuss with others both from and outside of IMS. I have attended more than ten seminars. Among them, seminars such as

reported by Dr. Michel Mortier and by Prof. Bonacic-Koutecky were very impressive and broadened my eyeshot. I have also established a new relationship with these research groups now. I hope it will be very useful for future collaboration. The frequently professional exchange established among the research groups in IMS and these outside of IMS is also nice evidence that the level of the research work in IMS is at the top of their fields in the world.

The facilities of IMS are abundant, effective, and are of great benefit to researchers in molecular sciences. During my stay here, I can find the instruments that I need to measure my samples and obtain data just in IMS. The abundant facilities also allow for a nice training in operating various machines.

I find that IMS has a very nice library, where researchers can get on-line papers or literatures they are looking for. The easy access to many key journals and the nice research system enable researchers in IMS exactly and timely updating the progress in the related fields.

The second I would like to say is people and lifestyle in Okazaki. People I met both in IMS and on the streets in Okazaki city are friendly and kind enough. Mild and comfortable expression appears naturally on their faces all the time. Sakura blossoms in spring, fireworks in summer, and red maple leaves in autumn are beautiful and difficult to forget. What a nice and quiet place for research! I will tell my friends that I had a nice experience both of work in IMS and life in Okazaki town,

when I return two months later.

Finally, I would like to thank Dr. Donglin Jiang for helping me to arrange a wonderful opportunity to

stay in Japan and work with him at IMS. I have learnt a lot from him, such as the operation of instruments, the techniques of organic synthe-

sis, and the modulation of seminars. I would also like to thank all the members of his group for their kind supports during my stay.

Wonderful experience and research in Okazaki

Suleyman Allakhverdiev

I am Chief (Leading) Research Scientist, at Institute of Basic Biological Problems, Russian Academy of Sciences, Pushchino, Moscow Region, Russia. I obtained my Ph.D. in Physics and Mathematics (specialization: Biophysics and Biochemistry) and Dr.Sci. in Biology and Biochemistry (specialization: Photo- and Biochemistry). Dr.Sci.-Doctor of Science is the highest/top degree in sciences in several countries, including Russia.

It was the greatest opportunity for me to receive an invitation letter from Prof. T. Nagata to visit to his laboratory as IMS visiting professor. This is not the first visit to Okazaki for me. Actually, almost for 10 years I had engaged in NIBB in the laboratory of Professor Norio Murata and I have very strong collaborations with him.

My research interest is investigation on structure and function of the reaction centers and water oxidizing complex in photosystem II; the function and assembly of oxygen-evolving complex; oxygen evolution; hydrogen evolution; electron transfer in photosynthetic reaction centers and their models; synthetic analogues of water-oxidizing complexes that mimic natural photosynthesis.

Prof. T. Nagata and his laboratory are recognized in the international scientific community as experts in the field of artificial photosynthe-

sis. Numerous articles of Prof. T. Nagata reflect this recognition as guest editor of scientific journals. The scientific productivity of Prof. T. Nagata and his group is very high. The research of this laboratory is aimed to understand the molecular mechanisms of photosynthesis by use of biomimetic nanoscale molecules. In particular, we are now focusing our attention on photochemical water splitting complex in photosystem II, and doing research on synthetic analogues of water-oxidizing complexes. My this visit is fruitful scientifically, and already one research manuscript is accepted for Photosynthesis Research, and I hope this is just the beginning of a very fruitful long-term collaboration with IMS colleagues. I would like to have a more extensive collaboration with Japanese scientists and especially with the laboratory headed by Prof. T. Nagata.

During my visit to Japan I am very impressive by the very high level of research activity in the Prof. T. Nagata's laboratory which has made a great contribution to our understanding on molecular mechanisms of artificial photosynthesis. It is very important that the experimental work in the laboratory is nicely organized and can be performed using the modern instruments and approaches. In the laboratory well stocked library is available on photochemistry sciences.

Good tradition is the organizing of regular monthly research report seminars in this department. In this seminar members of the department including foreign scientists present his (her) current own results with lively discussions. This is one day seminar which is a way to look more carefully in details, to predict the best development in right direction, and to get faster good results in field of all research work of this department. Scientific discussions on general topic of interest are one of the best ways where one can educate himself. Every week there is a 2-hours Journal Club that is characterized by lively discussion. Papers from the recent literature are presented in this seminar not only by the students or post-docs, but also by the foreign scientists, by the staff people of the laboratory including professors. In addition, people from different laboratories freely visit each other to discuss various scientific matters, to share instruments and to do experiments jointly. This is also a very good tradition for creative research.

I am very impressive by new IMS-Yamate Area. I have visited more than 35 different countries for research work and such facilities I could see only in Sweden, in Umea Plant Research Center. It is great. The IMS visiting professor-program is very helpful for providing collaborative work (especially for us, for

Russian researchers) with Japanese colleagues.

My visit to IMS is very special not only for my research, but also for my son. Since, my son of 9-year-old, Elvin, opened his eyes here in Okazaki and he had been in kindergarten, in Mishima Elementary school. He has many friends in Okazaki and it was his dream to come back to Okazaki. He always

says that <He is Japanese>. Japan, is the second mother country for my family.

In Okazaki we enjoy unforgettable, memorable Japanese life. We cannot forget it. Here we have many friends. Some of them already visited us in Russia. We cannot forget the Japanese gardens, sakura, temples and many other things.

Finally, I am deeply indebted to

IMS administration for rewarding me by making my research visit, to Prof. Nagata for invitation and support, for his kind help and extreme hospitality and also to his group members for their hospitality and kindness. I should like to take this opportunity and to say many tanks to all the people I met at IMS. I hope that I will visit IMS again and again. I wish you all the best.

NEW STAFF | 新人自己紹介01

有井 秀和

ありい・ひでかず

錯体化学実験施設 錯体物性研究部門
研究員



平成15年3月に名古屋工業大学大学院工学研究科博士後期課程を修了後、科学技術交流財団研究員、中央大学理工学部任期制助手を経て、本年6月中旬より川口グループでお世話になっています。これまでは主に、二核遷移金属錯体による酸素分子の捕捉・活性化を行ってきましたが、現在は捕捉対象を窒素分子に変え、研究を行っています。

どうぞ宜しくお願い致します。

富川 友秀

ふかわ・ともひで

錯体化学実験施設 錯体物性研究部門
研究員



平成18年3月に筑波大学大学院数理物質科学研究科化学専攻を修了し、同4月から6月まで分子研特別協力研究員を経まして、7月より川口グループでお世話になっています。学生時代は、主にゲルマニウムやスズといった典型元素を扱う化学を行ってきましたが、現在はチタンなど遷移金属を用いた錯体化学を行っています。毎日が新しいことばかりのこの環境を生かして頑張っていきたいと思います。

伏谷 瑞穂

ふしたに・みずほ

極端紫外光科学研究系
基礎光化学研究部門 助手



平成14年3月に京都大学大学院理学研究科で博士(理学)を取得後、ドイツのベルリン自由大学実験物理学研究所にて長期博士研究員を勤め、平成18年8月16日より菱川グループでお世話になっております。これまでは、位相固定フェムト秒パルス対などを用い、凝縮相における分子のコヒーレンスや反応ダイナミクスについて研究してきました。今後は、分子研での恵まれた環境をいかし、アト秒パルスを用いた分子科学に取り組んでいきたいと思っています。どうぞよろしくお祈いします。

KIMBERG, Victor

極端紫外光科学研究系
基礎光化学研究部門 研究員



I joined the group of Professor Nobuhiro Kosugi (Photochemistry) in August 2006 as a JSPS Postdoctoral fellow. I received my M.S. degree in Physics from Krasnoyarsk State University which is situated in a big scientific center in Russian Siberia. After that, I spent few years doing research in the field of non-linear optics at the Institute of Physics Siberian Branch of Russian Academy of Science. I got my PhD year 2006 from Royal Institute of Technology in Stockholm, Sweden. My thesis was devoted to theoretical study of short pulse propagation in photonic crystals and non-linear media, however other related phenomena were also included (pump-probe spectroscopy, wave packet dynamics, x-ray spectroscopies). My research activity in IMS is basically devoted to ab initio study of x-ray spectroscopies of ultra high resolution. どうぞよろしくお祈いします。

GAO, Xingfa



理論分子科学研究系
分子基礎理論第一研究部門 研究員

2001 Graduated from East China Normal University, Department of Chemistry. 2006 Completed the doctoral course in Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences. Specialty: Theoretical Chemistry.

黄超群

Huang, Chaoqun



極端紫外光科学研究系
反応動力学研究部門 非常勤研究員

I am very pleased to introduce myself to you. My name is Huang Chaoqun. I come from China and has joined Prof. Mitsuke's group as an IMS postdoc fellow in August of 2006.

In July of 2006, I graduated from University of Science and Technology of China and received my Ph. D degree.

I am very happy to work in IMS as a postdoc fellow. It is an good opportunity and exciting challenge for me. I know in this lab there is an advanced synchrotron radiation facility-UVSOR. It is probably the most stable and the best vacuum ultraviolet synchrotron radiation in the world. Especially, I know Prof. Mitsuke has been doing very well in his field using synchrotron radiation. So I wish I could get good academic results in the future under the aid of my colleagues.

安藤 嘉倫

あんどう・よしみち



計算分子科学研究系
計算分子科学第一研究部門 研究員

平成16年10月より岡崎進教授のグループでお世話になっております。

博士課程在学中は主にエタノール水溶液気液界面におけるエタノール吸着単分子膜に注目した分子動力学計算を行っていました。その経験を生かし今後は脂質分子の自己組織化構造物(脂質二重層膜, 脂質単層ベシクル)を対象とした大規模分子動力学計算に取り組む予定です。

よろしくお願いします。

高橋 みさき

たかはし・みさき



計算科学研究センター
事務支援員

平成18年10月よりナノ統合拠点事務局でお世話になっております。

出身は北海道なので、まさに慣れない中ではありますが、皆様親切で暖かいので、なんとかがんばれています。これからも何かとご迷惑をおかけすると思いますが、自分なりに精一杯やっていきますので、どうぞよろしくお願いいたします。

桑島 邦博

くわじま・くにひろ



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

平成19年1月1日付けで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へ着任いたしました。

球状蛋白質のフォールディングを、高分解能NMRを含めた各種分光学的測定法やストップフロー法などの高速反応測定法を用いて研究しています。また、同様の手法を用いて大腸菌シャペロンなどの分子シャペロンが蛋白質フォールディングにどのように関わっているかを研究しています。こちらの研究所の皆さんとの共同研究などが芽生え新たな展開が生まれることを期待しています。よろしくお願い致します。

共同利用研究

平成18年度（前期）共同研究実施状況

課題研究	「パルスおよび高周波ESRを用いたスピン科学研究の新しい展開」 1件
協力研究	「ポリジアセチレンLB膜の色相転移に関する顕微分光学的研究」を始め45件
UVSOR施設利用	「X線照射有機発光及びXAFSを利用したセラミックス欠陥種の状態解析」を始め51件
施設利用	「Attachment of heavy metal to DNA molecules for rapid analysis」を始め20件

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

■平成18年度（前期）分子研研究会

開催日時	研究会名	提案代表者	参加人数
2006年 6月 2日（月） ～ 3日（火）	分子科学のフロンティア領域へ	寺嶋 正秀 （京都大学大学院理学研究科）	88名
2006年 6月 12日（火）	若手分子科学研究者のための物理化学	木村 佳文 （京都大学国際融合創造センター）	13名
2006年 6月 15日（火） ～ 16日（水）	金属機能中心をもつ高性能分子システムの創成 ——その構造と機能——	小寺 政人 （北海道大学大学院理学研究科）	43名
2006年 7月 31日（日）	New Frontiers of NMR Molecular Science	加藤 晃一 （分子科学研究所）	62名

分子研での研究と学生生活

服部 直史 総合研究大学院大学構造分子科学専攻5年一貫博士課程1年

はっとり・なおし

2006年3月東邦大学理学部生物分子科学科卒業後、同年4月総合研究大学院大学構造分子科学専攻に入学、5年一貫博士課程1年。分子構造研究系分子動力学部門小澤グループにて、植物細胞内タンパク質輸送検出プローブの開発に取り組んでいます。



私は、2006年3月に東邦大学理学部生物分子科学科を卒業し、同年4月、総研大物理科学研究科5年一貫博士課程に入学しました。学部学生ときは、分子科学部門古田研究室において、光により遺伝子の機能を制御する機能性有機分子の開発をテーマに研究を進めてきました。有機合成の一端と細胞の扱いについて学びましたが、研究を進めていくにつれ、生命現象の巧妙な仕組みに感銘を受け、より深く、より詳細に分析していきたいと考えました。そこで、現在は、分子構造研究系分子動力学研究部門の小澤グループにて、生命現象を詳細に分析できる光プローブの開発をテーマとして研究を進めております。ここでは、私の入学後を研究と学生生活の両面から紹介しようと思います。

研究面：多くの方が述べられているように、分子研での研究は、思う存分研究ができるゆえ、自分を成長させるのには大変適しております。さらに、精神力を養うのに最適な場所であると思っています。ここでの精神力を養うとは、自分の研究に対する考えを確立していくということです。自分の研究と同じ分野での進展や日々創出される方法論に対して、自分の研究を照らし合わせるといったこともあります。一方で、研究そのものに対する哲学を、自分の中で確立させていこうと考える機会も多々あります。過去の偉大な科学者の言葉を用いて、普段考えていることを紹介したいと思います。

「贅沢や富への激しい欲望が支配する私たちの社会は、科学の価値を理解していません。私たちの社会は、科学がその最も貴重な精神的遺産の一部であることに気づきません。また、科学が人間の生活から負担を減じ、苦痛を

和らげる全ての進歩の基礎であることを十分理解してもいないのです。」この言葉は、キュリー夫人の言葉です。自分が行っている研究は、社会に何の役に立つのか、研究に従事している自分は社会貢献をしているのか。このことについて深く悩むことがしばしばありました。修士課程の時期に就職する仲間を見る機会が多かったためです。その悩みに対する一つの答えとして、この言葉は強く胸に響きました。科学の本質は、言うまでもなく真理を追い求めることだと思います。そして、そこから生まれる富が、その真理を礎として成立していることは言うまでもありません。このような考えから、科学が社会に貢献することができるのであろうと考えるようになりました。では、何ゆえ悩むのか。それは、社会貢献の形が具現化するのに、相当な時間を必要とする為であると思います。むしろ、自分では気づくことができない成果が、遠い将来に達成されることも多いことと思います。それを如実にあらわしているのが、次のファラデーの言葉です。“What good is a new-born baby?” この言葉は、研究が何の役に立つのかはわからないということを明確に示しています。核兵器に使われてしまったウランの核分裂の発見を見ると、科学の価値は、社会によって決められてしまう面も大いにあるようです。社会が科学の価値を決めているという事実があるからこそ、社会を学び、その上で科学にどのような価値があるのかを判断するという、文理の枠組みを越えた理解が大切なのだと思います。

分子研の環境は、周りに同級生がいなく、さびしいという感想が多いです。しかし、実際にそう感じることもあります。しかし、研究に集中できること、科学

に対して正面から向き合えることは、分子研をとりまく環境の中でしか味わえないことです。学生たるがゆえ、今は、学ぶことに全力を注ぐ時間があっても良いと思います。

学生生活：特筆すべき点は、学生の中に外国人留学生が多いということがあります。入学以前は、まったく予想できなかった国際的な雰囲気が総研大にはありました。現在の環境は、今までほとんど英会話に触れることがなかった自分にとってプラスになる環境です。中でも、後期の学生セミナーは、大きな影響を与えてくれました。セミナー中の相部屋では留学生と一緒に、各国の研究環境について、また日常の研究生生活について、夜遅くまで議論できたのは大変良い経験でした。学生セミナーで知り合った友人が、自分の分野とは異なる専攻であるということもかなり重要です。また、分子研の中に限っても、自分が相対的に量子化学、物理化学の理解が不足しているという、その分野に精通した先輩が基礎的な部分を指導してくださったことなど、満足できる生活があります。現在では、学生同士のセミナーも計画していけたらという話しまで発展しています。

以上のように、研究と学生生活を振り返ると、今のところ充実した日々を送れていると思います。しかし、現在の環境に対して、受身であってはならないと考えています。自分から能動的に何かをつかもうとする意欲こそが、これから先の生活をより有意義なものとして送ることができる力になると考えています。学生たるがゆえ、学べるものはすべて残らず学ぶ。自分としては、この分子研での生活が、最初の勝負どころだと捉え、日々精進していけたらと思います。

分子研生活を振り返って

前田 圭介 総合研究大学院大学機能分子科学専攻博士課程



まえだ・けいすけ
 現在、機能分子科学専攻3年生。
 物性化学研究部門、中村敏和助教授グループで、有機導体の電子物性を電子スピン共鳴の立場から研究している。クラシック音楽とスキーをこよなく愛する。4月からは企業の研究者として活躍予定。

このたび、レターズの執筆の依頼を頂いて、岡崎での生活を振り返って思い出されること、これから総研大に入学する人へのアドバイスなど思いつくままに書いていこうと思います。

私が分子研にやってきたのは平成15年春。当時平成の大不況の真っ最中で、毎年のように就職率は過去最低だとか、内定にたどりつけない学生の生活がニュースの特集で報道されていたように記憶しています。私も御多分に漏れず、企業に書類を送っては面接に呼ばれたの呼ばれないので一喜一憂していました。分子研にやってくる1年ちょっと前、当時M1だった私は研究開発職を志望していたものの、研究結果が思うよう出ていなくて、面接でプレゼンする内容にも苦勞していました。そして何より、研究生活に満足がいていなくて、もっと大学で研究したい、という想いを抱えていました。そんな折に、大学の助手さんから分子研の中村先生を紹介して頂きました。恥ずかしいことに、この時初めて分子研の存在を知ったのでした。そして、日本を代表する最先端の研究所で大学院教育を行なっているという話を聞き、迷わずそこに飛び込みました。

現在は、有機導体の電子物性を電子スピン共鳴（ESR）の立場から研究していますが、以前の研究室では有機光化学反応の反応中間体を分光学的に検出するという研究を行っていました。まったく異なる分野に迷わず飛び込むことができたのは若気の至りか蛮勇か。いえいえ、物理化学の研究に携わっているうちに、より物理学寄りの研究をしたいと思ったのです。とって、物理を一生懸命勉強してきたわけではありませんでしたし、極低温での物性測定も初めてでした。ですから、入学して

一年以上は、基礎を固めるのにとっても苦勞しました。たとえば、同期の友人を集めて学部の教科書を使っただけの輪読に付き合ってもらったりしました。分野の違う学生が集った輪講会だったので、大学院生としてはとてもレベルの低い内容だったと思います。時々、参加者の研究室の助手さんが面倒を見に来てくださったこともありましたが、非常に恥ずかしい思いをしながら喋った覚えがあります。実験面では、与えられたサンプルとは別に、作成条件を変えて独自のサンプルを作っては測定したり、先生のサンプルの測定もさせていだいたり、とにかく測定の実験スキルを高めていきました。さらにありがたいことに、一年目から学会発表に参加させていただくことができたので、理解不足ながらもたくさんのデータを持って学会に行き、多くのディスカッションの場を経験させていただきました。

2年目以降はどんどん測定手段が増えていきました。それまでより高周波のESR装置を使用したり、X線結晶構造解析、分子軌道計算など、実験データをさらに詳細に多方面から解析できるようになりました。さらに国際学会にも参加させていただきました。基礎的な勉強をしてきたことで、最前線の論文の内容もだんだん理解できるようになってきて、コツコツと蓄えた基礎力がようやく実り始めた実感を覚えることができました。

研究以外の面では、同期の学生や職員の方と放課後（？）にバドミントンをしたり、カラオケにいたり、冬はスキー合宿に参加したり。バーベキューやキャンプ、釣りに連れて行って頂いたこともありました。岡崎という土地は、海にも山にも気軽にいけるおいしい土地なのです。なんとなく、

研究者というと暗いイメージをもつ人もいるかと思いますが、意外にもという失礼でしょうか、気さくでアウトドア好きな人がたくさんいます。しかも、頭のいい人というのは話も面白いときです。文句ありません。友人や親切にしてくださる職員の方に恵まれて、とても楽しい分子研ライフを送ることができました。

4月からは某セラミックメーカーの企業戦士として、会社を盛り上げていく仕事をしていきます。進路を決めるときは、とても悩みました。大学での研究者として生きていくことを夢見て入学しましたが、この業界のパワフルでクリエイティブな人々に触れるにつれて、自分にはそのような力はないな、と思う気持ちが大きくなっていったからです。そこで、マテリアル系のメーカーへの就職活動することにしました。活動開始時期は、すでに秋採用の時期だったので、ドクターの学生としてもかなり遅めだったと思います。高倍率の選考に応募しては落ちてを繰り返して、猛烈アピールでなんとか勝ち抜いていく覚悟を決めていましたが、なんと1社目で内定をもらいました。4年前とは大違いです！ その理由で一番大きなのは経済情勢と分子研のネームバリュー（残念なことに総研大ではない！）でしょうが、私は面接で、分子研で得たものをありったけ、そして少しだけ背伸びして喋ることができたからだと思っています。

その分子研で得たものとは、やはり物事を見る視野の広さだと思っています。修士までとは研究分野を大きく変えたことで、物事を見るモノサシの幅が広がったと思います。物理をするときのモノサシ。化学をする時のモノサシ。さらに、私が評するのおこが

ましいことですが、師匠の中村先生は物理学、化学のみならず、IT、経済、法律関係にと、世の中のことに對してそれは広い視野を持っておられる方です。そのような方に師事できたこと、そして研究室のスタッフの方々と触れ合うことができたことで、知らず知らずのうちにモノサシの幅が広がっていったなど、今振り返って思います。

申し訳ないことに、モノサシが広がっている最中にはそれを実感できないもので、失礼な言動をとってしまったことも多々あるように思いますが、今は感謝の気持ちでいっぱいです。

これから総研大に入学する人へのメッセージを書くスペースがなくなりましたが、この文を読んでもう一度かを感じていただければ幸いです。

24時間研究に没頭するもよし、「よく遊び、よく学ぶ」スタイルを目指すもよし。師匠にもよると思いますが、ここは自分のスタイルを自分で決めることのできる環境だと私は思います。その分、責任はすべて自分でとらなくてはけません。充実した分子研ライフを送ってください！

分子研での学生生活

吉村 英哲 総合研究大学院大学構造分子科学専攻博士課程

統合バイオ青野研究室の吉村と申します。総研大コラムを書かせて頂くことになり、何を書こうかと悩んでいますが、まずは岡崎に来ることになってから今まで総研大生として感じたことを書いてみたいと思います。

私は修士課程では酵素モデル錯体触媒の作成をメインテーマに研究をしていました。そのうちにモデルではなく、実際の生体分子の作動機構を研究したいと思い、センサーとして機能するヘムタンパク質の研究を行っている青野研究室で博士後期課程の総研大生としてお世話になることとなりました。現在は博士前期課程からの入学もあるようですが、私が入学した頃はまだ博士後期課程からの入学しかありませんでした。

博士後期課程から入学してきた総研大生の多くに当てはまるかと思いますが、修士課程から博士課程に進学する際に研究テーマが変わり、しかも私の場合には実験手法ですっかり変わってしまいました。修士課程在学時は有機合成実験（といっても文献合成に毛の生えた程度）と触媒反応の定量など、純粋な化学実験に従事していましたが、青野研では大腸菌を用いたタンパク質の発現系の構築をはじめとする遺伝子工学実験、そして得られたヘムタンパ

ク質の精製と分光測定が主な実験内容となりました。分野としては修士課程時も現在も「生物無機化学」の範疇ですが、扱っているモノが変わることで作業がガラッと変わりました。望んでやっていることとは言え、当初は作業に慣れず、測定に耐えうるサンプルが得られず、今思うと当たり前のような解決策も当初はパッと思いつかず、ずいぶん苦勞した覚えがあります。周囲の人からのご助力のおかげで、徐々に仕事も進めて来られましたが、新しいことをする時は事前の準備を怠ってはいないと痛感しました。

もう一つ、多くの総研大生に当てはまることとして、一つの研究室の人数が他大学と比較して少なく、特に周囲の学生が少ないという特徴があると思います。分子研の研究室は多くの大学の研究室と比較して試薬や機器に恵まれているため、さらにそれを少人数で使えるということは、実験作業を進める上では大変有利かもしれません。

このような物理的な利点がある一方、見習う先輩や指導する後輩がいないまま、卒業するまでラボでいちばん下っ端ということも珍しくありません。私の場合には幸運にも後輩が1人いましたが、周囲の学生と切磋琢磨しにくい状況は研究を進める上で不利な面もある

かと思っています。

分子研の研究室では学生が少ない代わりに、ポスドクをはじめとする研究員やスタッフの方々は他大学の研究室の場合よりも多く在籍されていることが多いので、博士後期課程の学生でありながら多くの先輩方と接することができます。青野研究室でもポスドクの方がこれまでに3人在籍していました。また、ラボによって程度の差があるとは思いますが、近隣の研究室との交流や共同研究等もあり、そこでも多くのスタッフの方々と交流を深めることができます。私の場合は同じく統合バイオの北川研究室と共同研究をさせていただき、北川先生や直接共同研究の相手をしていただいたポスドクの方はもちろん、他のスタッフやポスドクの方々にもいろいろとお世話になりました。

このように、研究室内外の多くの方々によるご協力を頂きながら、人よりゆっくりと仕事を進め、人より1年余分にかけてようやく卒業できるかな？というところまでやって来ました。卒業文集の作文のようになってしまいましたが、岡崎で経験したことを忘れずに、これからも研究活動に精進していきたいと思っています。

よしむら・ひであき
岡崎統合バイオサイエンスセンター・青野グループに所属。
酸素センサーとして機能するヘムタンパク質HemATの作動機構、特に選択的な酸素の感知からシグナル発生に至る機構を、遺伝子工学的手法と様々な分光法を組み合わせ研究している。



E V E N T R E P O R T

The Sokendai Asian Winter School

総合研究大学院大学 構造分子科学専攻 博士課程1年 Wu, Hui Jun

From 20th to 22nd November, 2006, the Sokendai Asian Winter School was successfully held by the Institute for Molecular Science (IMS). Over 40 young graduate students from China, Japan, Korea and some other Asian countries got together in the Okazaki conference center. Seven professors from different departments presented ten very nice lectures and reported the latest progress in their own research fields during those three days. These lectures covered a wide research area of molecular science, ranging from the basic theory to experimental setup and from the sample preparation to spectroscopic analysis, which made our foundation more solid and widened our viewpoint in research.

Since it's difficult to understand all the knowledge mentioned in the lectures well, it's a very good opportunity for me to have a deep discussion with so many profes-

sors. Their penetrating physical analyses, informative discussions and strict attitude in science and technology research are tremendous gifts for me in this winter school. It gave me much edification and provoked sensation for my future work to a great extent.

The winter school also provided an underlying platform to facilitate social communication for young students. The different cultures, customs and languages of other countries fascinated me a great deal. So the topics that we talked to each other were not only limited on scientific research, but also included some other interesting themes, such as religions and arts, war and peace, reality and dream, etc. We exchanged our ideas and shared research experience together. I felt very happy to make so many new friends in the past three days.

The only small pity is that the duration of the winter school is a little bit shorter than I expected. Time passed so fast before we knew it. We have to say goodbye to each other when we were enjoying the friendship. So I wonder whether it could be longer or not in the next Sokendai Asian Winter School, and hope more professors and students will participate in it in the next time. It's very helpful for the growth and development of the young students.

At last, I'd like to send my sincere thankfulness to the organizers. It's your hard work that makes everything become a reality.



Wu, Hui
I joined Prof. Okamoto's group as a doctoral student in Apr. 2006. My current work is to study the dynamic behavior of Surface Plasmon in the nanostructures using the ultrafast scanning near-field optical microscope.

夏の体験入学

総合研究大学院大学 構造分子科学専攻 博士課程2年 福嶋 貴

2006年8月7日から10日の4日間にわたり「夏の体験入学」が開催されました。これは、全国の大学生・大学院修士課程学生の方に、総研大での研究活動を数日間体験していただき、研究所を基盤とする大学院の特色を知っていただくことを目的としています。実際には、分子研の各研究室が数名の学生を受け入れ、その研究室が普段行っている実験を体験してもらおうこととなります。

私は、自分の所属する研究室に配属された体験入学生の実験指導を行いました。普段後輩がいない中で研究をしている私

にとって、これは貴重な体験で、「教えることは、教わること」などとよく言うように、普段あまり意味を考えずに行っている実験操作にも、深い意味があることに気がつきました。このように、頼りない私が指導をしていましたが、実験自体は概ね順調に進行し、体験入学生は興味を持ってくれたようで、夜遅くまで熱心に実験を行ってくれました。

体験入学のプログラムには、体験入学生と分子研若手研究者による懇親会もありました。ここで、体験入学生達は自分の体験した研究室以外の研究について

も様々なことを知ることが出来たでしょうし、また、他大学の学生と交流することも出来て、大変有意義な時間を過ごせたのではないかと思います。

このように今回の「夏の体験学習」は体験入学生にとっても、受け入れ側の総研大生にとっても、実りの多いものになったと考えております。



Takashi Fukushima
学習院大学大学院自然科学研究科化学専攻博士前期課程修了後、平成17年に総合研究大学院大学物理化学研究科構造分子科学専攻入学。現在、博士後期課程2年。錯体化学実験施設、錯体物性研究部門田中グループにて、遷移金属錯体を触媒に用いた二酸化炭素の電気化学的還元反応を研究しています。

The impression notes of the Student Seminar (Oct 12-13, 2006)

総合研究大学院大学 構造分子科学専攻 博士課程1年 YUE, Yue

The 2006 2nd Semester Sokendai student seminar was held on Oct 12th. "Challenge" was the central theme for this year. After the piano concert and Entrance ceremony, three lecturers, who are characterized by their resilience to withstand hardship, shared their experiences with the new students: Mr. Radosinski talked about his fourteen-days astronaut training. Prof. Mariko Hasegawa lectured about her research on animal behavior, ecology and evolution and shared some stories of when she observed

wild animals in Africa, England and Japan. Lastly, Prof. Hajime Fujisawa gave a talk on the molecules and genes that play essential roles in the organization of neuronal networks in the CNS and the PNS. After dinner, the students engaged in group discussions with invited speakers, who exchanged ideas with and gave advices to the students on various topics of interest. The social gathering was a good time to communicate with everyone. On the second day, we were divided into several teams

to create a functionally - sound water-rocket. The invited professors were the ones who won the prize of rocket with the longest range. The seminar concluded with photographing and we were all enjoyed the warm and intellectual atmosphere of the seminar.



Yue Yue
私は中国の北京から、平成18年に総合研究大学院大学構造分子科学専攻に入学し、現在は博士課程1年です。

総研大生受賞者紹介

三宅 雄介 (物理科学研究科機能分子科学専攻)

AsiaNano 2006 国際会議で “Outstanding Research Award” を受賞

機能分子科学専攻D1の三宅雄介君が、韓国プサンで行われたAsiaNano 2006 国際会議で “Outstanding Research Award” を受賞した。“AsiaNano” は第1回を2002年に東京で、第2回を2004年に北京で開いた国際会議で、ナノ材料やナノデバイス分野におけるアジアの国際協力を目指した会議である。今回は、ポスターを含めて約500件の発表が行われたが、その中で5件が “Outstanding Research Award” に選ばれた。発表の題名は、“Direct observations of naphthalene diimide n-alkyl derivative on graphite” である。大気下における走査トンネル顕微鏡 (STM) は、観察したい分子の表面に空気や水分等様々な分子が吸着するため、高分解能での観察が困難である。

超高真空中であればこのような問題点はないが、実験操作が困難となり1回の実験に長時間がかかってしまう。ところが、溶液中のSTMは、サンプルと条件が整うと大気下でも超高真空中STMなみの高分解能が可能になる。三宅君は、この手法を最大限に利用して、小さな分子の内部構造まで精査に議論できるレベルの計測を行う技術を持っている。典型的なドナー分子としてポルフィリンを、アクセプター分子としてはジイミド化合物を対象に研究を行っているが、今回の発表では、ジイミド分子がそのアルキル鎖の長さにより3種類の自己集合様式を取ることを見出し、その組織体の構造を分子の単結晶X線解析の結果と対応させて明らかにした。更に、 π 電子系部分とアルキル鎖部分のI-V特性を別個に計測

して、 π 電子系部分で大きな整流性が見られることを明らかにした。この研究は、三宅君がこの4月から総研大に入学して7ヶ月の間に行った研究であり、彼の優秀さを表すものであると考えている。

(分子スケールナノサイエンスセンター
小川琢治・主任指導教員)



(中央：本人)

平成18年度9月総合研究大学院大学修了学生及び学位論文名

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
IM, Hojun	Electronic Structure of Heavy Fermion Ce Compounds Studied by Photoemission Spectroscopy	理 学	H18.9.29

総合研究大学院大学平成18年度 (10月入学) 新入生紹介

平成18年度 (10月入学) 博士後期課程新入生

専 攻	氏 名	所 属	研究テーマ
構造分子科学	CHEN, Long	関連領域研究系	新規ポリマーの分子設計と機能
構造分子科学	YUE, Yue	分子集団研究系	反射分光法と振動分光法を用いた分子導体の電子状態の研究
機能分子科学	REZA, A.F.G. Masud	分子スケールナノサイエンスセンター	Studies on the synthesis of homochiral bowl-shaped aromatic compounds and their photochemical properties

■平成18年度(前期)分子科学フォーラム

回	開催日時	講演題目	講演者
第63回	2006年 5月17日	X線自由電子レーザー計画	石川 哲也
第64回	2006年 6月14日	青いバラの物語	田中 良和
第65回	2006年 9月27日	光量子科学の黎明期	霜田 光一

■平成18年度(前期)分子研コロキウム

回	開催日時	講演題目	講演者
第784回	2006年 4月12日	セラミックレーザーの進展	池末 明生
第785回	2006年 5月10日	表面光化学における超高速ダイナミクス	松本 吉泰
第786回	2006年 6月 2日	溶液中タンパク質型変換の非線形分光	Prof. VLADISLAV YAKOVLEV
第787回	2006年 6月21日	放射光で分子性物質の電子状態はどこまで見えるか?	澤 博
第788回	2006年 7月19日	実時間・実空間領域で見た光誘起電子ダイナミクス	信定 克幸
第789回	2006年 9月13日	Probing dynamics at the molecular level by single molecule spectroscopy	Prof. Dr. Johan Hofkens

人事異動一覧

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
18.6.16	有井 秀和	採用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門 研究員	中央大学 理工学部 任期制助手	
18.6.30	Bradeanu, Ioana Lavinia	退職		極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門研究員(非常勤研究員)	
18.6.30	岡 沙佑美	退職		計算科学研究センター技術支援員	
18.7.1	手島 史綱	昇任	技術課五班(計算科学技術班) 計算科学技術一係主任	技術課 五班(計算科学技術班) 計算科学技術一係 技術職員	
18.7.1	千葉 真人	採用	計算分子科学研究系専門研究職員		産業技術総合研究所勤務

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
18.7.1	富川友秀	採用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門 研究員	分子科学研究所 特別協力研究員	
18.7.1	桑島邦博	委嘱	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	(東京大学 大学院理学系研究科 教授)	
18.8.16	伏谷瑞穂	採用	極端紫外光科学研究系基礎光化学研 究部門助手	ドイツ ベルリン自由大学実験物理 研究所 博士研究員	
18.8.6	Gao, Xingfa	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		
18.8.23	王堅毅	採用	計算分子科学研究系専門研究職員		京都大学化学 研究所勤務
18.8.30	黄超群	採用	極端紫外光科学研究系反応動力学研 究部門研究員(非常勤研究員)		
18.8.31	Huang Wei	退職	中国南京大学配位化学研究所副教授	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 研究員	
18.8.31	長尾昌志	辞職	キャノン株式会社正社員	分子スケールナノサイエンスセンター ナ ノ光計測研究部門 研究員(非常勤研究員)	
18.8.31	北野健太	退職		分子科学研究所 研究支援員(RA)	
18.9.1	中野千賀子	採用	分子集団研究系物性化学研究部門研 究員	分子科学研究所 特別協力研究員	
18.9.15	皆川真規	辞職	米国スクリプス研究所博士研究員	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	
18.9.30	ESTACIO Elmer	退職	大阪大学レーザーエネルギー学研究 センター特任研究員	分子制御レーザー開発研究センター 放射光同 期レーザー開発研究部研究員(非常勤研究員)	
18.9.30	呂明	辞職		分子科学研究所 研究支援員(RA)	
18.9.30	鈴木恒佑	退職		分子科学研究所 研究支援員(RA)	
18.9.30	太田俊二	退職		分子科学研究所 研究支援員(RA)	
18.9.30	舩金尚哉	退職		分子科学研究所 研究支援員(RA)	
18.9.30	李江	退職	分子科学研究所特別協力研究員	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 研究支援員	
18.9.30	高影	退職		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 研究支援員	
18.9.30	久保稔	辞職	米国ノースイースタン大学 Postdoctoral research associate	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 研究員	
18.10.1	小野晋吾	転出	名古屋工業大学大学院工学研究科助 教授	分子制御レーザー開発研究センター放 射光同期レーザー開発研究部 助手	
18.10.1	安藤嘉倫	採用	計算分子科学研究系計算分子科学第 一研究部門専門研究職員		
18.10.1	伊藤雅大	採用	分子科学研究所研究支援員(RA)		
18.10.31	三澤宣雄	退職	東京大学生産技術研究所科学技術振 興特任助手	極端紫外光科学研究系 反応動力学 研究部門 研究員	
18.10.31	中野千賀子	退職	分子科学研究所特別協力研究員	分子集団研究系 物性化学研究部門 研究員	
18.11.1	高橋一志	転出	東京大学物性研究所助手	分子集団研究系 分子集団動力学研 究部門 助手	
18.11.1	保坂将人	転出	名古屋大学大学院工学研究科助教授	極端紫外光研究施設 助手	
18.11.1	YUE, Yue	採用	分子科学研究所 研究支援員(RA)		

海外渡航一覽

氏名	所属	渡航期間	渡航先	渡航理由
平等 拓 範	分子制御レーザー開発研究センター 助教 授	18.4.16 ～18.4.23	ア メ リ カ	Defense and Security Symposium 2006にて講演及び情報収集 ベル研究所にて研究発表及びびうちあわせ
岡本 裕 巳	分子構造研究系 教 授	18.4.25 ～18.5.1	ス イ ス	Molecular Plasmonic Devices に出席し、研究成果発表と討論をおこなう
小杉 信 博	極端紫外光科学研究系 教 授	18.4.27 ～18.4.29	台 湾	台湾 3GeV 放射光施設計画に関するワークショップに参加、講演
田中 晃 二	錯体化学実験施設 教 授	18.5.18 ～18.5.21	韓 国	第3回遷移金属錯体の日韓合同シンポジウムへの参加と招待講演をおこなう
魚住 泰 宏	分子スケールナノサイエンスセンター 教 授	18.5.18 ～18.5.24	モ ナ コ	国際有機合成化学プロジェクト打ち合わせ
平等 拓 範	分子制御レーザー開発研究センター 助教 授	18.5.19 ～18.5.28	ア メ リ カ	スタンフォード大学にて研究打ち合わせをおこなう 国際会議 CLEO/QELS2006にて研究発表及び情報収集をおこなう
石月 秀 貴	分子制御レーザー開発研究センター 助 手	18.5.19 ～18.5.28	ア メ リ カ	スタンフォード大学にて研究打ち合わせをおこなう 国際会議 CLEO/QELS2006にて研究発表及び情報収集をおこなう
伊藤 孝 寛	U V S O R 助 手	18.5.21 ～18.6.2	韓 国	ポーン加速器研究所 BL3A1におけるユーザー利用研究 2006放射光技術国際学会・ポスター発表
木村 真 一	U V S O R 助 教	18.5.24 ～18.6.2	韓 国	共鳴光電子分光実験 シンクロトロン放射光装置国際会議 (SRI2006) 研究発表及び情報収集
江東 林	相 関 領 域 研 究 系 助 教 授	18.5.25 ～18.6.16	中 国	アジアコアについての打ち合わせ・講演 (中国科学院化学研究所) 共同研究のうちあわせ・講演 (北京大学・清華大学) 4th East Asia Polymer Conference (南海大学) International Symposium on Polymer Physics PP-2006 (蘇州ホテル) International Symposium on Polymer Chemistry PC-2006 (大連理工大学) 分子研国際共同研究打ち合わせ・講演 (復旦大学・浙江大学・上海有機化学研究所)
山田 陽 一	分子スケールナノサイエンスセンター 助 手	18.5.26 ～18.6.5	キ プ ロ ス	International Symposium on Chemistry, Biology and Medicine に出席し研究発表及び情報収集をおこなう
加藤 政 博	U V S O R 教 授	18.5.28 ～18.6.2	韓 国	第9回シンクロトロン放射光技術に関する国際会議・研究発表
初井 宇 記	極端紫外光科学研究系 助 手	18.5.28 ～18.6.3	韓 国	The Ninth International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation にて発表
見附 孝 一 郎	極端紫外光科学研究系 助 教 授	18.5.30 ～18.6.1	韓 国	The Ninth International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation にて研究成果発表と情報収集
平等 拓 範	分子制御レーザー開発研究センター 助教 授	18.6.12 ～18.7.15	フ ラ ンス	ピエール・マリキエリ大学 (パリ第六大学) にて客員教授として講演 (兼業)をおこなう。また同大学の Gerard P. AKA 教授と共同研究及び情報交換をおこなう
宇理 須 恒 雄	極端紫外光科学研究系 教 授	18.6.20 ～18.6.24	スウェーデン	The International Workshop on Approaches to Single-Cell Analysis に出席し研究成果を発表し、情報収集をおこなう
山本 薫	分子集団研究系 助 手	18.6.27 ～18.7.8	アイルランド	国際シンポジウム "The International Symposium on Materials and Devices for Nonlinear Optics" に出席、発表、討論および情報収集をおこなう 国際会議 "The International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals" に出席し発表、討論および情報収集
山下 靖 文	理論分子科学研究系 助 手	18.7.1 ～18.7.8	アイルランド	ICSM2006 に参加し情報収集、最新の研究成果を発表討議する
中村 敏 和	分子集団研究系 助 教 授	18.7.1 ～18.7.8	アイルランド	ICSM2006 に参加し、ナノワイヤー金属錯体の科学に関する研究成果の発表及び研究動向調査をおこなう
小林 速 男	分子集団研究系 教 授	18.7.1 ～18.7.9	アイルランド	国際学会 ICSM2006 に出席し、研究成果発表、および研究情報収集のため
高橋 一 志	分子集団研究系 助 手	18.7.1 ～18.7.9	アイルランド	国際学会 ICSM2006 に出席し、研究成果発表、および研究情報収集のため
青野 重 利	岡崎統合バイオサイエンスセンター 教 授	18.7.1 ～18.7.13	イ タ リ ア	4th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (第4回ポルフィリンおよびフタロシアニン国際会議) に出席し講演を行うため、およびフィレンツェ大学 Ivano Bertini 教授と共同研究の打ち合わせのため
藤井 浩	岡崎統合バイオサイエンスセンター 助 教 授	18.7.1 ～18.7.9	イ タ リ ア	4th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (第4回ポルフィリンおよびフタロシアニン国際会議) に出席し研究発表を行うため
米満 賢 治	理論分子科学研究系 助 教 授	18.7.2 ～18.7.8	アイルランド	ICSM2006 に参加し、ナノワイヤー金属錯体の科学に関する研究成果の発表及び研究動向調査をおこなう

氏名	所属	渡航期間	渡航先	渡航理由
横山利彦	分子構造研究系教授	18.7.8 ～18.7.16	アメリカ	第13回X線吸収微細構造国際会議 参加、成果発表、情報収集、国際XAFS委員会出席
岡崎進	計算分子科学研究系教授	18.7.8 ～18.7.16	アメリカ	FOMMS 2006 に出席し、情報収集を行う
江東林	相関領域研究系助教	18.7.9 ～18.7.16	中国	国際共同研究における研究打ち合わせのため
初井宇記	極端紫外光科学研究系助手	18.7.11 ～18.7.15	イギリス	次世代軟X線発光分光器のため電子増倍 CCD 検出システム開発の調整および実験
西信之	電子構造研究系教授	18.7.21 ～18.7.29	スウェーデン	International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC) に出席し、研究成果の発表・学術情報交換・及び討論を行う
十代健	電子構造研究系助手	18.7.22 ～18.7.29	スウェーデン	International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC) に出席し、研究成果の発表・学術情報交換・及び討論を行う
佃達哉	分子スケールナノサイエンスセンター助教	18.7.23 ～18.7.30	スウェーデン	International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC) に出席し、研究成果の発表・学術情報交換・及び討論を行う
根岸雄一	分子スケールナノサイエンスセンター助手	18.7.23 ～18.7.30	スウェーデン	International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC) に出席し、研究成果の発表・学術情報交換・及び討論を行う
斉藤真司	計算分子科学研究系教授	18.7.29 ～18.8.6	アメリカ	Gordon Research Conference, Water & Aqueous Solutions discussion leader として参加し情報発信、情報収集をおこなう
岡崎進	計算分子科学研究系教授	18.7.30 ～18.8.6	アメリカ	Thermo International 2006 に出席し研究発表、情報収集
田中晃二	錯体化学実験施設教授	18.8.13 ～18.8.19	南アフリカ	第37回錯体国際会議での講演発表と国際計画委員会に出席
永田央	分子スケールナノサイエンスセンター助教	18.8.18 ～18.8.29	ロシア	国際会議 Structure and Functin of Photosystems に出席し、講演を行いロシア科学アカデミー基礎生物学研究所を訪問し研究打ち合わせをおこなう
長澤賢幸	分子スケールナノサイエンスセンター助手	18.8.18 ～18.9.2	ロシア	国際会議 Structure and Functin of Photosystems に出席し、講演を行いロシア科学アカデミー基礎生物学研究所を訪問し研究打ち合わせをおこなう
笹川拡明	分子スケールナノサイエンスセンター助手	18.8.20 ～18.8.27	ドイツ	XXII International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems に出席し研究発表及び情報収集を行う
中村敏和	分子集団研究系助教	18.8.22 ～18.8.28	ロシア	国際シンポジウム Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006 (APES2006) に出席し、発表、討論、および情報収集を行う
小川琢治	分子スケールナノサイエンスセンター教授	18.8.24 ～18.9.1	インド	International Conference on Nanoscience (ICNSNT2006) に出席し研究成果発表と研究打ち合わせをおこなう
平等拓範	分子制御レーザー開発研究センター助教	18.8.26 ～18.9.7	ルーマニア フランス	"Micro-toNano-Photonics-ROMOPTO 2006" にて研究発表及び情報収集をおこなう Workshop on "Advanced Photonics Materials and Sources" にて研究発表及び情報収集をおこなう ピエール・マーキュリー大学 ENSCP にて共同研究及び情報収集をおこなう
信定克幸	理論分子科学研究系助教	18.8.28 ～18.9.2	韓国	国際会議 Conference on Computational Physics に出席し、研究業績発表をおこなう
中村宏樹	所長	18.8.30 ～18.9.3	ロシア	第6回 ICLTC (低温化学国際会議) に出席し招待講演をおこなう
佃達哉	分子スケールナノサイエンスセンター助教	18.9.3 ～18.9.8	アイルランド	Gold 2006 New Industrial Applications for Gold に出席し、研究成果の発表・学術情報交換・及び討論をおこなう
宇理須恒雄	極端紫外光科学研究系教授	18.9.6 ～18.9.12	アメリカ	スタンフォード大学を訪問し国際共同研究の研究情報収集 The Second Annual Meeting of American Academy of Nanomedicine に出席し成果発表、情報収集
井村考平	分子構造研究系助手	18.9.10 ～18.9.16	スイス	第9回近接場ナノ光学国際会議に出席し研究成果発表、討論
鄭誠虎	理論分子科学研究系助手	18.9.16 ～18.10.1	イタリア、ドイツ フランス	IV Workshop on Non Equilibrium Phenomena in Supercooled Fluids, Glasses and Amorphous Materials に参加し情報収集と討論をおこなう Technische Universitat Munchen, Prof.W.Gotze と共同研究に関する討論をおこなう 1' Universite de Montpellier 2, Prof.Kob と共同研究に関する討論をおこなう
平等拓範	分子制御レーザー開発研究センター助教	18.9.17 ～18.9.22	アメリカ	2006SPRC シンポジウムに出席し討論及び情報収集を行う
宇理須恒雄	極端紫外光科学研究系教授	18.9.23 ～18.9.27	中国	上海交通大学の王長順教授を訪問し先端ナノバイオエレクトロニクスの研究打ち合わせをおこなう
森田明弘	計算分子科学研究系助教	18.9.25 ～18.9.29	台湾	日本学術振興会 (アジア研究教育拠点事業) による共同研究のため、中央研究院原子分子科学研究所を訪問。Sheng-Hsien Lin 博士と研究打ち合わせ

編集後記

分子研レターズ前号（54号）をお読みになっていた方には既にお気付きのことではありますが、これまでの分子研レターズの長所や特徴を踏まえた上で、前号から内容・装丁共に大幅な刷新を行っております。本号はその第二弾とも言えるべきものです。分子研OB、更には分子科学コミュニティーの方々との開かれた情報交換の場を提供すべく、編集委員一丸となって企画・編集した形が本号でもご覧いただけたかと思えます。少し距離をおいた形で大所高所から分子科学研究所に対するご意見を頂く「巻頭言」のページから始まり、今回大森編集委員長の発案で始めた「座談会記事」、研究に関する報告、そして今回も総研大に纏わる記事を少なからず掲載し、その他多くの内容を取り込んだものとなっております。特に今述べました座談会は、私が知る限りここ最近の分子研レターズでは新しい試みです。今回は分子科学研究所顧問の三人の先生方に、非常にお忙しいところお時間を割いていただき、正に貴重なご意見をお伺いできました。ご意見の中にはもちろん我々にとって厳しい内容も含まれていたのですが、この先の分子科学研究所、更には分子科学の発展のためにお伺いした叱咤激励全てを真摯に受け止めたいと思っております。先生方にはあらためて編集委員一同お礼申し上げます。

前号出版に際して、内容・装丁刷新に関する編集会議を長時間行ったとは言え、まだまだ試行錯誤の段階であるために今回も昼食を挟んでの長丁場の編集会議を開催しました。今回は不肖ながら私が編集担当をさせて頂いたのですが、何かと不備な点を露呈してしまい、他の編集委員の方々にお手数をお掛けすることになってしまいました。また、編集作業の都合上執筆者の方々には短期間での原稿執筆をお願いすることになってしまったことをお詫びさせていただくと共に、今回の原稿執筆のお礼を申し上げます。最後になりましたが、本号でも大森編集委員長と分子研広報の原田さんには多大なご尽力を頂きました。この場を借りてお礼申し上げます。

本号編集担当 信定克幸

●本誌についてのご意見・ご感想をお待ちしております。お名前、年齢、ご職業をお書き添えの上、**分子研レターズ編集委員会** letters@ims.ac.jp へてにお送りください。

●分子研ホームページからもご覧いただけます。
分子研ホームページ
<http://www.ims.ac.jp/indexj.html>

分子研と研究者をつなぐ
IMS 分子研
レターズ
Letters VOL.55

発行日	平成19年2月（年2回発行）
発行	大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 分子科学研究所 分子研レターズ編集委員会 〒444-8585 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38
編集	大 森 賢 治（委員長） 信 定 克 幸（本号編集担当） 石 田 干 城 小 澤 岳 昌 川 口 博 之 櫻 井 英 博 中 村 敏 和 彦 坂 泰 正 菱 川 明 栄 吉 岡 資 郎 原 田 美 幸（広報室） 中 村 理 枝（広報室）
デザイン	原 田 美 幸（広報室）
印刷	ブラザー印刷株式会社

本誌記載記事の無断転載を禁じます

