

# 分子研レターズ

VOL. **57**  
MAY 2008  
ISSN 0385-0560

レターズ

## 共同利用機関としての 分子研

榎 敏明

[東京工業大学大学院理工学研究科教授]

自然科学研究機構  
National Institutes of Natural Sciences

●分子科学の最先端  
放射光テラヘルツ分光および光電子分光に  
よる固体の局在から遍歴に至る電子状態

木村真一 [極端紫外光研究施設]

## レターズ

## 02 共同利用機関としての分子研

- 榎 敏明 [東京工業大学大学院理工学研究科教授]

## 分子科学の最先端

04 放射光テラヘルツ分光および光電子分光による  
固体の局在から遍歴に至る電子状態

- 木村真一 [極端紫外光研究施設光物性測定器開発研究部門准教授]

## IMSニュース

- 08 長倉三郎先生講演会「我が国の科学研究について思うこと」  
付録「分子科学研究所前史」
- 12 第67回岡崎コンファレンス“Molecular Science and Chemical Biology of Biomolecular Function”
- 14 分子研組織再編について
- 17 新しい共同研究プログラム「若手研究会等」について
- 18 「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト  
「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」拠点の課題
- 19 第4回自然科学研究機構シンポジウム「生物の生存戦略」
- 20 受賞者紹介
- 24 国際研究協力事業報告

## IMSカフェ

- 31 OBの今 —— 青柳 睦 / 西原康師
- 35 分子研を去るにあたり
- 39 外国人研究職員の紹介
- 40 外国人研究職員の印象記
- 42 新人自己紹介
- 43 BOOKレビュー

## 共同利用研究

- 44 平成19年度(前期)共同研究実施状況

## @総研大

- 45 コラム —— 分子研での学生生活を始めて感じたこと 後藤 悠 [機能分子科学専攻]  
My impression for research and living experience in Okazaki Long Chen [機能分子科学専攻]

- 48 イベントレポート
- 50 総研大生受賞者紹介
- 50 修了学生及び学位論文名
- 50 新入生紹介

## ■各種一覧

- 51 分子科学フォーラム・  
分子研コロキウム開催一覧
- 51 人事異動一覧

榎 敏明 東京工業大学大学院理工学研究科 教授

# 共同利用機関としての 分子研



## えのき・としあき

1977-1987: 分子研極低温センター助手、1987- : 東京工業大学理学部助教授を経て大学院理工学研究科教授。2003-2004 : 分子研客員教授。物性化学、主として、ナノ炭素材料、分子性物質の電子・磁気物性の研究。これからの日本の科学を担ってゆく大学院生、若手研究者の研究活動の活性化、国際化や将来の展望が持てる環境の整備に向けて努力してゆきたいと思っています。

1977年から1987年の約10年間の間、分子科学研究所に助手としてお世話になりました。その後、2003-2004年は客員教授として分子研の研究活動に参加させていただき、学会等連絡会議委員、また、2006-2007年は運営委員として、分子研の運営の仕事をお手伝いさせていただきました。

助手として着任した時期は分子研の創設期に当たり、分子科学という言葉が真新しくった研究所の建設に参加させていただきしました。その後、分子研の外から分子研を見る立場となりましたが、創設以来約30年間の分子研の移り変わりを見てきたこととなります。その間、分子研自体は勿論、分子研、大学を取り巻く状況が大きく変化し、そこで研究活動に携わる研究者の方々の研究のやり方、考え方も大きく変化したように思います。建設当時の分子研は日本の化学研究のショウウインドウとして位置づけられ、世界に向けて日本の研究の第一線を発信する場となり、また、分子研の超一流の装置を用いた共同研究が重要な役割を担っていました。

その後、大学での研究環境が時代とともに好転し、研究機器が大学に豊富

に設置され、全国共同利用機関としての分子研の役割も変化してきたように思います。ここでは、この30年間の分子研との関わりを通して、分子研について現在感じていることに触れたいと思います。

まず第一は、共同利用施設としての分子研に関することです。1999年頃、分子科学研究所物質開発センターの委員として分子研での共同利用機器の現状についての議論に関ったとき、大学にごく一般的に備えられた汎用的機器が一覧として並んでいることを見て、一時、分子研でこのような共同利用機器を用意する必要があるかと疑問を持ったことがあります。しかし、国立大学が法人化された現在、この様な疑問は必ずしも正しくないことを感じていません。法人化により、競争的資金獲得に大学間の大きな格差が生じ、必ずしも汎用的機器が全ての大学に設置されている状況ではなくなり、また、大学予算の効率的利用の観点からは、大学間、大学と分子研との間で研究者が機器を互いに利用しあうことが必要となっています。その意味で、分子研がイニシアチブをとってスタートした全国の大学が所有する設備を相互利用するため

のプロジェクト「化学系研究設備活用ネットワーク」は、今後の分子研の共同利用施設としての役割として重要なものとなっていると思います。異なる環境におかれた研究者が全国の共同利用機器を自由に使用できるネットワークの仕組みのなかで、分子研が中心的役割を担うことは、化学系の全国共同利用機関として大切な分子研の役割となってくるものと確信しています。

分子研研究会、岡崎コンファレンス等の会議への支援も分子研の重要な活動ですが、この活動も時代とともに大きく変化してきているように思います。最近では科学研究費特定領域研究や様々なプロジェクト関連のシンポジウムが盛んに開催され、情報交換の機会が充分すぎるほどあります。このなかで分子研主催の研究会をどの様に位置付けるかは重要問題であると思いません。限られた予算の中で、的を絞って会議を主催する必要があります。日本の化学を代表する共同研究機関として、研究会主催には、分野を超えた学際的な研究領域の活性化、分子科学の新しい分野の創出を積極的に支援するというスタンスも重要なものと思います。

最後に、分子研の中での研究活動に

ついて触れてみたいと思います。創設以来、分子研は化学研究の中心として活発に研究活動を行ってきました。このことは分子研の研究者の研究成果が世界的に高く評価されていることがそのことを物語っています。また、分子研で研究活動を行ってきた研究者の多くが全国の大学、研究機関の研究活動の中での中心的な役割を担っていることも、分子研の高い研究活動の反映であります。しかしながら、現在、このような高い研究活動を支えるための分子研研究者を取り巻く環境が、人員の問題から深刻な状況となっているような気がします。典型的な分子研の研究グループは、グループのヘッドとなる教授或いは准教授と1名の助教を柱として、これにわずかな数の博士研究員、大学院生が加わる極めて小規模なものとなっています。そのことは、各研究グループが十分にその実力を発揮するためには大きな障害となっているように思えます。十分な人的支援のもとに、研究活動が集中的に行える環境を作ってゆくことが必要なものと思います。

## 放射光テラヘルツ分光および光電子分光による 固体の局在から遍歴に至る電子状態

木村 真一

極端紫外光研究施設  
光物性測定器開発研究部門  
准教授



きむら・しんいち

1966年福島県いわき市生まれ。1991年東北大学大学院理学研究科博士課程修了後、日本学術振興会特別研究員、神戸大助手、分子研助手、神戸大助教授を経て2002年4月より現職。研究テーマは、放射光を使った新しい分光法の開発とそれを用いた物質科学研究。毎朝自転車ですぐで正門を上げるのが日課になっている。2008年4月文部科学大臣表彰科学技術賞受賞。

有機超伝導体、遷移金属酸化物、希土類金属間化合物などの強相関電子系と呼ばれる電子間相互作用が強い系は、伝導と磁性が複雑に絡み合いながら、高温超伝導、巨大磁気抵抗、重い電子系などの特徴的な物性を作り出している。これらの物性は、電子状態論からいえば、伝導性（遍歴性）と磁性（局在性）のどちらが強いか起因している。有機超伝導体や遷移金属酸化物の基本的な物性は、前者は伝導を担う分子内、後者は遷移金属の3d電子内でのオンサイトクーロン相互作用（ $U$ ）と伝導帯のバンド幅（ $W$ ）の大小に依っており、 $U/W$ が大きい場合は磁性を持った絶縁体（局在）、小さい場合は金属（遍歴）になる。一方で、希土類金属間化合物では、磁性は局在した4f電子が担い、伝導性は別の電子が起源となっており、それらの混成の大小によって、局在性・遍歴性のどちらが主に現れるか決定される。（図1(b), (c)）

希土類金属間化合物で電子の役割が明確に分かれていることは、物性を理解する上で重要である。局在と遍歴の移り変わりは、キャリアと局在4f電子間の交換相互作用（cf交換相互作用）とフェルミ準位上の状態密度の積で決定されることが、Doniachによって導出されている。（図1(a)）<sup>[1]</sup>その後、局在と遍歴の境界である量子臨界点（反強磁性磁気相転移温度（ $T_N$ ）や遍歴性を定義する温度（ $T^*$ ）が絶対零度で現れる点、QCP）の近傍で、cf交換相互作用によって生じる重い準粒子

による超伝導や強磁性と超伝導の共存など、新奇物性の発現が観測されてきた。有機超伝導体や遷移金属酸化物でも、QCPの近傍で、はじめに示したような特徴的な物性が出現しており、希土類金属間化合物との共通の物理があるものと思われる。この物質系では、今後も新しい物性が現れることが期待できるため、世界各地で新規物質の探索や電子論からの起源の解明が進められているところである。

このような物性を発現する電子状態は、フェルミ準位（ $E_f$ ）極近傍に現れる。特徴的な物性の出現する温度は室温以下であるため、 $E_f$ から見て室温をエネルギーに換算した値（約24 meV）以下の電子状態が物性に主に効いている。つまり、 $E_f \pm 24$  meVの範囲の電子状態を決定できれば、物性の起源を特定することができることになる。電子状態を測定する重要な手法として、テラヘルツ分光と光電子分光がある。前者は電子占有状態と非占有状態の掛け合わせ（結合状態密度）を高い絶対値精度と高いエネルギー分解能で観測し、かつ、高磁場下や高圧下で測定できるという特徴がある。このような研究を行うために、2004年に、極端紫外光研究施設の放射光源（UVSOR-II）の赤外・テラヘルツビームラインを世界最大の取り込み角を持つように再構築し、最低エネルギー0.5 meVの領域での通常の赤外・テラヘルツ分光および5 meV以上の領域での顕微分光を可能にした。<sup>[2]</sup>一方で、後者は電子占有状態の状

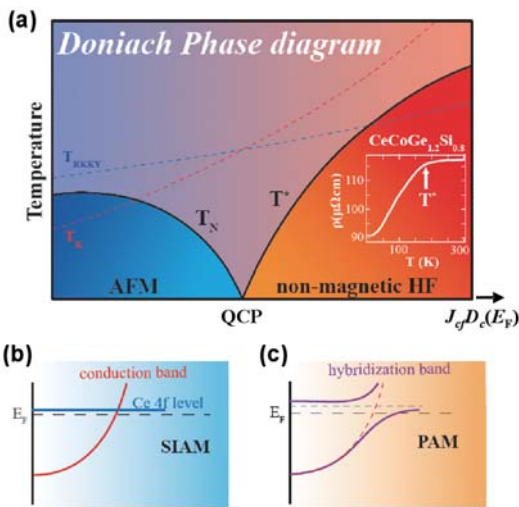


図1 (a)セリウム化合物のDoniach相図。 $J_c D_c(E_f)$  ( $J_c$ はcf交換相互作用、 $D_c(E_f)$ は、伝導帯のフェルミ準位の状態密度を表す)が小さい場合は局在性、大きい場合は遍歴性を表す。(b)局在性を記述する不純物アンダーソン模型と、(c)遍歴性を記述する周期的アンダーソン模型の概念図。

態密度だけではなく、放出される光電子の発散角度を分けた測定を行うことで、運動量空間内の各点でのエネルギー固有値 ( $E$ - $k$  曲線) を決定できる。また、放射光を使って励起エネルギーを変えることで、試料表面に垂直方向に運動する電子の固有値も測定できるため、三次元的にバンド構造を決定できる。このような三次元角度分解光電子分光を行うために、2003年にUVSOR-II真空紫外光電子分光ビームラインBL5Uの再構築<sup>[3]</sup>と、2006-07年に極低エネルギー高分解能角度分解光電子分光ビームラインBL7Uを建設した。<sup>[4]</sup>我々は、これらのビームラインの特徴を生かし、テラヘルツ分光と光電子分光を同一の試料に対して行い、物性を

担う電子状態を特定すべく、研究を進めている。なお、これらのビームラインはUVSOR施設利用に供されている。

### 重い電子系 Ce-112 の光電子分光

QCPでの電子状態を調べるためには、その点ピンポイントでの測定のみならず、キャリアと局在4f電子間の相互作用(混成強度)をコントロールして、局在からQCPを経由して遍歴に至る過程で、電子状態がどのように変化するかを調べることが重要である。混成強度は、物質の格子定数を変化させることでコントロールができる。そのためには、ダイヤモンドアンビルセル(DAC)などの高圧装置で試料に直接圧力を加えるか、試料を構成している元素の一部を他の元素に置換して化学圧力を加えればよい。前者は、純粋な試料を使って連続的に混成強度を変えられる利点があるが、DAC内での微小

な試料空間での測定が要求され、かつ、光電子分光測定は不可能である。一方で後者は、大きな試料を利用できるが、混合物質によるランダムネスの効果が否定できない。そこで、これら2つの方法を併用することでそれらの弱点をおさあいながら研究を進めている。

このような方針の1つとして、IM, Hojun 研究員と伊藤孝寛助教が中心となって、韓国成均館大学のKWON, Yong-seung 教授のグループとの共同研究として希土類金属間化合物の角度分解光電子分光および赤外・テラヘルツ分光を行っている。例えば、遍歴性が強い物質である  $CeCoGe_{1.2}Si_{0.8}$  では、Ce 4f と Co 3d のそれぞれの分散曲線を区別して測定できる Ce 4d-4f 吸収端近傍の共鳴角度分解光電子分光で調べたところ、Ce 4f と Ce 3d バンドの混成を明確に観測した。(図2)<sup>[5]</sup>ここで観測した電子状態は、この系で一般に用いられている周期的アンダーソン模型で予想された cf 混成バンド(図1(c))と一致している。この結果は、理論予測を目に見える形で測定できたところが重要である。

また、同じ結晶構造を持つ  $CeNi_{1-x}Co_xGe_2$  では、 $x < 0.3$  での局在状態から  $x = 0.3$  の QCP を経て  $x > 0.3$  で遍歴

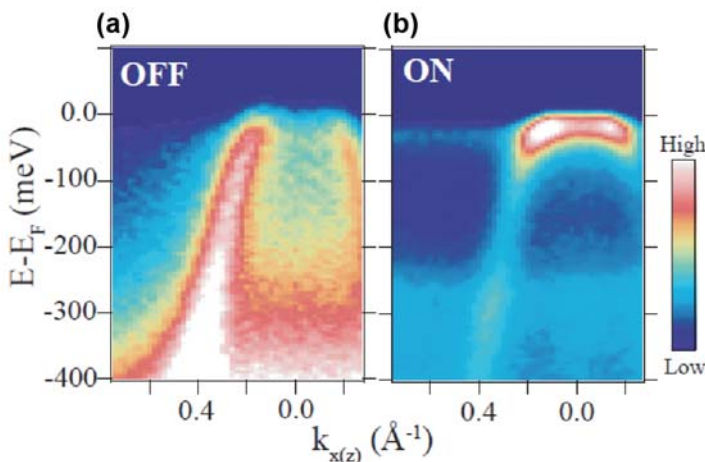


図2  $CeCoGe_{1.2}Si_{0.8}$  の4d-4f共鳴角度分解光電子分光イメージ。(a)是非共鳴での分散曲線で、主にCo 3dバンドを表し、(b)は共鳴での分散曲線で、主にCe 4fバンドを表す。図中の波数 $k_{x(z)}=0$ の点はある対称点を表す。

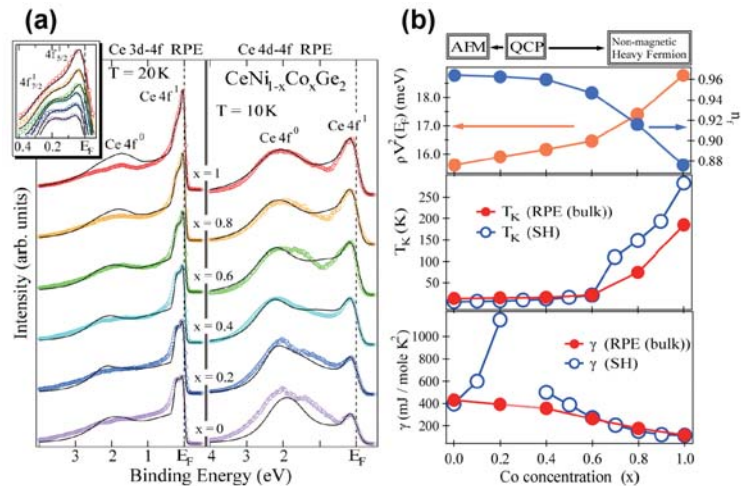


図3 CeNi<sub>1-x</sub>Co<sub>x</sub>Ge<sub>2</sub>の3d-4fおよび4f-4f共鳴光電子分光から得られたCe 4fスペクトルのx依存性(a)と、不純物アンダーソン模型で解析して得られた混成強度(ρV<sup>2</sup>)と4f電子占有数(n<sub>f</sub>)、近藤温度(T<sub>K</sub>)および電子比熱係数(γ)(b)。図中のSHは電子比熱測定から得られた値。

状態へと移行することが知られている。その途中の過程でCe 4fと価電子帯であるNi/Co 3dとの混成がどのように変化するのが、この系の局在性・遍歴性の出現に重要な情報を与える。そこで、xを変化させた際の4d-4fおよび3d-4f吸収端での共鳴光電子分光(図3(a))を行い、Ce 4fおよびNi/Co 3d電子状態のx依存性を測定し、不純物アンダーソン模型で解析を行った。その結果、Ce 4f電子状態およびcf混成強度の両方もQCPで局在・遍歴の境界から予想される不連続ではなく、連続的に変化することがわかった。(図3(b))<sup>[6]</sup> また、比熱の測定では、電子比熱係数γのQCPでの発散が見られていたが、光電子分光の解析によって得られたパラメータを使った電子比熱係数はQCPで連続的に変化するという矛盾が観測された。物性物理の教科書によると、比熱によるγ値はフェルミ準位上の状態密度に比例するとされているが、実際には、熱励起による電荷の自由度ばかりでなくスピンの自由度も含んでいる。光電子分光では電荷のみが観測されるため、γの矛盾は、スピンの

自由度(スピン揺らぎ)がQCPで大きいことを表している。QCPでのスピン揺らぎは他のQCP試料でも観測されており、局在から遍歴に至る電子状態には、スピン揺らぎの効果を考慮する必要があることがわかった。

### 量子臨界点物質 YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> の光学応答

それでは、実際にスピン揺らぎがあった場合、フェルミ準位近傍の電子の光学応答にはどのように現れるのだろうか。それを示したのが、YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>の極低温テラヘルツ分光である。この研究は、ドイツ・ドレスデンのマックスプランク固体化学物理研究所のJ. Sichelschmidt博士とF. Steglich所長との共同で行った。YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>は、QCPにきわめて近い試料であり、2000年頃から純粋な系のQCP試料の代表として世界的に研究されてきている。この物質の赤外・テラヘルツ分光を我々のグループが行い、キャリアの光学応答の温度依存性を調べた。光学伝導度(図4(a))は、室温の普通の金

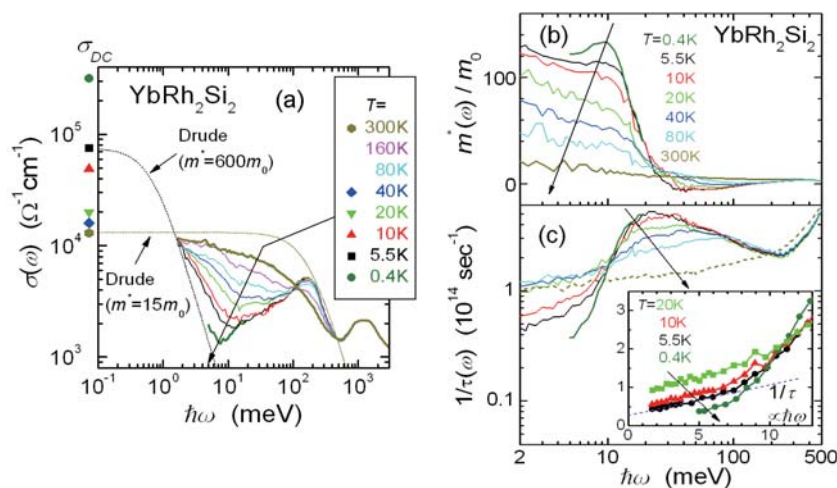


図4 量子臨界点直上の試料YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>の光学伝導度スペクトルの温度依存性(a)と、複素誘電率スペクトルから得られた有効質量(b)と散乱確率スペクトル(c)の温度依存性。[7]

属状態から、低温での準粒子のコヒーレント状態（10meV以下のエネルギー低下による光学伝導度の増加）およびインコヒーレント状態（200meV付近のピーク）の成長へと連続的に変化する。このスペクトルから有効質量と散乱確率を導きだした結果、低温での有効質量の増加（図4(b)）と散乱確率の急激な減少（図4(c)）が観測された。この結果は、低温での重い準粒子の生成の証拠を示している。また、散乱確率はエネルギーの1乗に比例していることがわかった。これは、フェルミ液体の振る舞い(エネルギーの2乗に比例)

と異なっており、単純なフェルミ液体的な準粒子が生成しているのではないことを示している。この物質の低温での電気抵抗率は、温度の1乗に比例しており、温度と光エネルギーに対してスケーリング則が成り立っている。この電気抵抗率の温度依存性はスピン揺らぎの効果と考えられているため、光学応答の散乱確率、つまりフェルミ準位近傍の電子はスピンによって散乱されていることを示している。[7]

以上で紹介した内容は、局在と遍歴の移り変わりを電子状態の立場から調べた研究成果の一部である。この他に、

有機超伝導体のモット転移境界での超伝導・絶縁体相分離電子状態の実空間イメージングや金属絶縁体転移物質の高圧下テラヘルツ分光などが進行中であり、それらを統一的に理解し、新奇物性の創造に貢献できることを望んでいる。なお、本研究は、分子研国際共同研究、科研費基盤(B)のサポートで行われた。

## 参考文献

- [1] S. Doniach, *Physica B & C* **91B**, 231 (1977).
- [2] S. Kimura, E. Nakamura, T. Nishi, Y. Sakurai, K. Hayashi, J. Yamazaki and M. Katoh, *Infrared Phys. Tech.* **49**, 147 (2006).
- [3] T. Ito, S. Kimura, H.J. Im, E. Nakamura, M. Sakai, T. Horigome, K. Soda and T. Takeuchi, *AIP Conf. Proc.* **879**, 587 (2007).
- [4] 木村真一, 分子研レターズ **55**, 24 (2007); S. Kimura, T. Ito, E. Nakamura, M. Hosaka and M. Katoh, *AIP Conf. Proc.* **879**, 527 (2007).
- [5] H.J. Im, T. Ito, H.-D. Kim, S. Kimura, K.E. Lee, J.B. Hong, Y.S. Kwon, A. Yasui and H. Yamagami, *Phys. Rev. Lett.*, in press.
- [6] H.J. Im, T. Ito, J.B. Hong, S. Kimura and Y.S. Kwon, *Phys. Rev. B* **72**, 220405(R) (2005).
- [7] S. Kimura, J. Sichelschmidt, J. Ferstl, C. Krellner, C. Geibel and F. Steglich, *Phys. Rev. B* **74**, 132408 (2006).



## 長倉三郎先生講演会「我が国の科学研究について思うこと」



分子科学研究所の創設者のお一人であり、所長、機構長を勤められた後、総合研究大学院大学の創設とその初代学長として大変大きな貢献を果たされ、更にこの10月12日まで日本学士院の院長として我が国の学術の要としてご活躍された長倉三郎先生をお迎えして、

分子科学研究所講演会が11月13日に岡崎コンファレンスセンターで開催された。

ご講演の主題は、西洋の近代科学がキリスト教的な絶対的真理の探究を目指すなかで価値観の画一化を強いてきた面が強いが、東洋の哲学にある真理の多面性を科学の追究に於いても重要視しな

ければならず、日本のこれからの学問の発展にはこのような視点を変えた取組が重要であろうというものであった。

特に、様々な先人の言葉を引用されながら、科学者として確固とした哲学体系と信念をもって独自の研究を展開することの大切さを説かれた。これは、

昨今の研究者の近視眼的で専門何とかに陥りがちな研究姿勢に、大きな警鐘を与えると共に、各人がしっかりとした目的とその成就への執念を持って研究にあたる必要性を教えられたものであった。

また、分子科学研究所が設立された経緯にも触れられ、多くの分子科学の先人達の思いが設立に至らせたことを改めて認識させられた。講演会は、約80名の分子研関係者の参加を得て、和やかな雰囲気の内に行われた。米寿を迎えられたとは思えない情熱的なご講演に多くの若者が心を打たれたであろう。今後もお元気でご活躍され、研究所のあるべき姿についてご指導をお願いしたい。

(西 信之 記)



## 分子科学研究所 前史

(化学研究将来計画委員会の審議から創設準備室の設置まで)

本前史は本文と注記で構成されている。

本文は、分子科学研究所の創設が日本化学会の将来計画委員会で取り上げられた1960年代の後半から1974年の創設準備室の設置までの約10年間における主要事項を年代順に列記したものである。その内容は、創設準備室が設けられた際にそれ迄の流れを記したメモに基づいている。

注記は各項目について補足事項をまとめたもので当時の資料や長倉の記憶によっている。

本前史は、分子科学研究所創設に関連する史料を分子科学研究所史料編纂室に提出するにあたり、2007年5月に執筆した原文に訂正補足を加えたものである。

昭和40年2月 (1965年) 昭和38年以来、日本化学会は委員会を設けて化学研究に関する将来計画を検討した。その結果、それまでに化学の諸分野から提案されていた6研究所(天然物有機化学、高分子科学、錯体化学、分子科学、基礎有機化学、地球科学の各研究所)の設立が必要であるとの結論が得られたので、内田俊一日本化学会会長より水島三一郎日本学術会議化学研究連絡委員会委員長にこれらの研究所の設立に尽力されるよう要望がなされた。(注記1)

昭和40年8月 (1965年) 日本学術会議第4部会に於いて化学研究将来計画について審議が行われ、提案された6研究所のうち化学研究の基盤を形成し、物理学との関連も深い分子科学研究所(仮称)を最初に設立するのが適当であるとの結論に達し、第44回総会に提案することとなった。(注記2)

昭和40年10月 (1965年) 第44回総会に於いて、分子科学研究所の設立に関する提案がまとめられ、日本学術会議は「分子科学研究所(仮称)の設置」について内閣総理大臣あて勧告した(昭和40年12月13日)。(注記3)

昭和41年2月 (1966年) 日本学術会議の勧告の線に沿って、化学研究連絡委員会のもとに18名の委員(赤松秀雄、安積宏、井早康正、大野公男、神田廣也、久保昌二、久保克立、後藤良造、小谷正雄、齊藤一夫、島内武彦、関集三、田中郁三、長倉三郎、東健一、福井謙一、森野米三、和田昭充)で構成される分子科学研究所小委員会が設けられ、委員長に森野米三が就任、研究所の具体化を進めることになった。(注記4)

昭和45年4月 (1970年) 分子科学研究所小委員会の委員交替を行い、委員長に赤松秀雄、副委員長に長倉三郎が就任した。(注記5)

昭和46年5月 (1971年) 昭和45年6月に申請した文部省科学研究費特定研究課題「分子科学」が正式に承認されスタートした。この特定研究を推進することによって、分子科学全般の基盤となる新しい研究方法を開発すると共に、分子科学研究所の発足に際し、研究設備の整備が円滑に進むよう準備することが可能になった。(注記6)

昭和47年5月 (1972年) 46年度に引続き、特定研究「分子科学」が認められ、分子科学研究所の設立に対処しつつ、46年度と同様な構想のもとで研究の遂行と研究設備の整備を行った。

昭和48年8月 (1973年) 文部省は49年度概算要求に於いて、分子科学研究所(仮称)の創設に要する経費を計上した。(注記7)

昭和48年10月 (1973年) 文部省学術審議会に於いて文部大臣あて、分子科学研究所、基礎生物学研究所及び生理学研究所を設立することが適当であるとの建議が出された。

昭和49年4月 (1974年) 分子科学研究所(仮称)創設準備に要する経費がまとめられ、分子科学研究所(仮称)創設準備室が設けられ、井口洋夫が準備室長に就任した。また、第1回創設準備会議が開催され、当時の山下次郎物性研所長が座長に就任した。

## 【注記】

### 注記1

「分子科学」という学問分野の名称の由来についてふれておきたい。「分子科学」という名称が公式に用いられたのは、1961年にスタートした文部省科学研究費補助金による総合研究「分子科学—分子の化学物理的研究」が最初であると思う。

わが国における分子の研究は各地の大学の理学部、工学部の化学ならびに物理関係の諸学科を中心に第二次大戦前から活発に行われ、国際的にも誇るべき優れた業績が挙げられていた。しかし戦後の厳しい状況は、研究条件の荒廃を招き、加えて電子計算機やレーザーの進歩をはじめ米英を中心に急速に進みつつある分子研究の新しい流れに対応できない状況をもたらしていた。

こうした困難を克服する方策について思いをめぐらしていたが、当時(1955年～1956年)滞在していたシカゴ大学のマリケン教授の研究室(分子理論のメッカであった)での体験や出席した国際会議で得られた知見などを通して得られた結論は、「戦前に示されたわが国における分子研究者の高い潜在力を、物理や化学などの既存の学問分野を超えて結集し、分子科学(分子化学でなく)とも称すべき新しい総合的な学問分野を構築する」ということであった。帰国後その第一歩として、上記総合研究を

文部省の科学研究費補助金の支援を得て進めることを計画した。幸いこの計画が認められ、小谷正雄先生を代表者として、総合研究「分子科学—分子の化学物理的研究」が、1961年にスタートした。

余談になるが、上記総合研究の計画案ができあがり、研究代表者をお願いするために東大理学部物理教室の小谷先生の教授室にうかがった時のことを今でも鮮明に記憶している。総合研究の計画を説明してご了承いただいた後に、小谷先生が“こんな本がありますよ”と一冊の本を書棚から取り出して示された。それは、von Hippel の「Molecular Science and Engineering」であった。この本の存在を知らず、われわれの分子科学の構想が国際的にみても最初の新しい構想であると自負していた私にとってはショックであった。しかし、この本を拝借して通読し、その内容が分子性結晶の強誘電性を扱ったもので、われわれの意図する方向とは異なることがわかって安心した。このことは私にとって忘れることのできない思い出の一つである。なお上記総合研究の申請書その他の関連資料を6回にわたる化学研究将来計画委員会の議事録や6研究所の計画書と共に参考資料として提出する。

なお、化学研究将来計画委員会においては、6研究所の優先順位を決めることはしなかった。しかし化学研究の基盤をなすものであり、物理関係の研究者の支持も得やすいことなどから、分子科学研究所の創設を6研究所の中で最初に日本学術会議の総会に提出することについては暗黙の了解がえられていたと思われる。このことは参考資料として提出した化学研究将来計画委員会の議事録、特に第6回委員会の議事録からも推察できる。

#### 注記2

1950年代の終わりから1960年代の始めにかけて、新しい学術体制の整備に関する議論が日本学術会議の主導のもとに学術の諸分野において活発に行われた。この活動の化学分野において中心的役割を果たしたのは、当時の日本学術会議第4部会員で長期研究計画調査委員会委員の小寺明東京教育大学教授であった。そのような関係もあって、化学研究将来計画委員会に提出された分子科学研究所の計画書作成にあたっては小寺研究室の井早康正博士に格別お世話になった。この案は当時の東京を中心とする若手研究者の集まりであった“電子状態懇談会”における活発な議論や井早・長倉両者の間の非公式な話し合いの結論を井早博士がまとめた原案に長倉が手を加えたものである。この第1次案について関係方面から寄せられた意見に配慮して第2次案、第3次案が作られた。注記1、2に関連した資料として分子科学サーキュラー第2号（1965年）に掲載された“分子科学研究所設立計画について”を参考資料として提出する。

#### 注記3

当時は、日本学術会議総会の設置勧告が、新しい研究所設置の必要条件であると、研究者の間で一般に考えられていた。分子科学研究所については、当時の日本学術会議会員であった小寺、赤松両先生の御尽力により、1965年秋の総会で分子科学研究所の創設を政府に勧告することが承認された。同時期に名古屋大学で開催された“分子構造総合討論会”の懇親会に日本学術会議の総会を終えた赤松先生が東京からかけつけ、分子科学研究所の創設の勧告が総会で認められた事を報告された。その時の会場全体の高揚した雰囲気は忘れることができない。

#### 注記4

分子科学研究所小委員会で議論された最初の案は、分子科学研究所を物性研と同様な東大附置の共同利用研究所として設立することであった。場所の候補としては、三鷹の東京天文台のキャンパスや千葉の東大第二工学部の跡地などが挙げられており、森野、赤松両先生を中心に東大に対する働きかけが活発に行われた。

しかし東大附置案は、主として大学紛争勃発のため、成功の見通しが立たなくなった。森野小委員会委員長は昭和44年1月の小委員会で次の2点を報告し了承された。

- (1) 素粒子研についての文部省学術審議会の審議が終了し、分子科学研究所を含めて日本学術会議から勧告されている26の研究所案について近く審議が開始されること。
- (2) 分子科学研究所を東大附置とする案を白紙にもどすこと。

分子科学研究所について、日本学術会議の勧告から実現までに、関係者の熱意と努力にもかかわらず、長時間を要した原因は二つあったと考えられる。一つは大学紛争に遭遇したことであり、もう一つは先に日本学術会議から勧告された素粒子研の計画が実施に移す段階で紛糾し、解決に時間を要したことである。前にダンプカーが止まって道をふさいでいるのでわれわれは前に進めないと、嘆いたことがしばしばであった。

#### 注記5

赤松先生を委員長とする分子科学研究所小委員会においては、分子科学研究所の設置形態を素粒子研と同様に全国の大学共同利用機関（当時の正式な名称は国立大学共同利用機関）とすることとし、その線にそって計画を改めることとした。また設置場所として東京近郊の他、静岡、浜松、岡崎、京都などについて検討した。

#### 注記6

昭和45年5月文部省大学学術局手塚晃研究助成課長より「分子科学分野の研究推進について意見をききたい」旨の電話があり、田中郁三博士に同道をお願いし、期待と不安のいりまじった複雑な気持ちで手塚課長との面談に臨んだ。手塚課長より分子科学の研究推進について文部省として考えている二つの案（研究所設立案と特定研究による推進案）が示され、いずれの案を希望するかとの意向打診があった。なお、特定研究は来年度からスタートすることが可能であるが研究所はスタートするまでに時間を要するであろうとの補足説明があった。この意向打診に対して次の2点を強調した。

- (1) 研究所の創設はわが国の分子科学研究者の長年の悲願であり、戦前から培われたわが国の分子科学の優れた伝統とポテンシャルを継承発展させて国際的にも誇ることでできる研究センターとして研究所を建設したい。
- (2) 分子科学の研究においては、新しい研究方法や装置の開発・選択が重要であり、その成否が研究所の将来を左右するといっても過言ではない。したがって新しい方法や設備（特に大型施設）について、準備研究を研究所創設前に2ないし3年間特定研究により実施したい。

これら2点について審議官にも説明してほしいということで、引き続き渋谷敬三審議官にも説明し、2年間の特定研究による準備研究の後、研究所の創設を進めることで大筋の了解がえられた。これは念願の研究所創設に向けての決定的とも言える大きな前進であった。しかしその時は、特定研究の計画作成をはじめ提出書類を限られた短期間で整えることなど多くの困難な問題を解決しなければならない責任に思いをいたし、手放しで喜びにひたる心境にはなれなかった。この了解の線に沿って申請した特定研究「分子科学」に関連する書類を参考資料として提出する。

#### 注記7

特定研究の実施と平行して、共同利用研究所としての分子科学研究所の組織、制度、運営、設備などについて笠木学術国際局審議官をはじめ文部省の関係者と討議するため、井口博士の車に同乗して物性研究所と文部省の間を何回も往復した。この討議を通じて、新しい制度（主なものは、外国人評議員制度、助手の任期制と内部昇進の禁止、岡崎コンファレンス、特別研究制度、博士研究員制度、技術課の設置など）を積極的に導入することになった。その際の基本的な考え方は、研究所が国の内外を含めて外に開かれた運営を進め、優れた研究者を集めて高い研究ポテンシャルを維持出来れば、水が高さから低きに流れるように、研究者も外部の研究組織に流れていき人事の新陳代謝も活発に行われるということであった。長倉個人は研究者が外に流れず停滞するようになった研究組織は廃止すべきであるという考えを当時もっていた。

当時としては極めて斬新な制度を分子科学研究所に導入できたのは、当時の笠木審議官、植木研究機関課長、重藤課長補佐をはじめ文部省関係者の高い見識に裏付けられた意欲と決断に加えて研究者との深い信頼関係による所が大きかったと考える。

## 第67回岡崎コンファレンス

## “Molecular Science and Chemical Biology of Biomolecular Function”

平成19年11月10日から12日までの3日間、岡崎コンファレンスセンターにて、第67回岡崎コンファレンス「Molecular Science and Chemical Biology of Biomolecular Function (分子科学とケミカルバイオロジーによる生体機能の理解)」を開催した。コンファレンスの開催趣旨と内容についての報告を述べる。

分子科学は、化学と物理学の境界領域として誕生し、発展してきた。その拡大したフロンティアのひとつとして、生体機能に代表される自己組織化した分子システムの理解と制御があげられる。他方、化学と生物学との境界領域では、これまでに生化学、生物無機化学などの融合分野が発展してきた。これらは今日ケミカルバイ

オロジーとして統合的に呼ばれている。分子科学とケミカルバイオロジーはアプローチを異にするものの、そのゴールは「生体機能の理解」という共通のものである。そこで、それぞれの研究の最前線を紹介し、それらに対する議論を行うためのフォーラムとしてこのコンファレンスを企画した。分子科学からのトピックスでは、個々の蛋白質の各論ではなく、水素結合ネットワークおよびソフトな界面という生体機能発現にかかわる根源的な問題に焦点を当てた。また、生体機能の理解に向けた先端的計測法についても議論を行った。ケミカルバイオロジーからは、蛋白質の構造-機能相関、活性部位のモ

デル化合物および人工設計、細胞での恒常性維持機構など、生体機能についての具体的なトピックスが提供された。

コンファレンスでは、合計31件の招待講演からなる5つのオーラルセッションとポスターセッションを設けた。ポスター発表には幸い53件と多くの発表申込があり、特に大学院生や博士研究員の若い世代から、これらの分野の今後の発展を期待させる元気な発表が



目立った。そのほかの参加者も含め全体として120名もの参加者があり、盛会であった。参加され議論を盛り上げてくださった方々に感謝したい。以下、セッションごとにコンファレンスの概要を報告する。

セッション1では、水素結合ネットワーク、プロトン移動に関する討論が行われた。まず、最大100個の水分子からなるサイズ選別された大規模水クラスタに関する研究発表があり、赤外分光法を使って水素結合ネットワークのトポロジーを詳細に調べた成果が述べられた。つづいて、分子間水素原子およびプロトン移動のダイナミクスに関する発表が行われ、移動過程の協

奏性やメカニズムが議論された。これら分子系の研究に加え、蛋白質内の水素結合ネットワークと機能発現との相関に関する研究成果も報告された。

セッション2では、ソフトな界面を観測する新しい計測法に関する討論が主に行われた。非線形効果を利用した界面選択的な種々の新規分光手法の特色とそれらを用いて明らかになった界面特有の物性に関する研究成果が紹介

された。ソフトな界面は、膜という生体機能における重要な場と密接な関係をもつ。このセッションでは膜構造を利用した機能性分子システムの構築についての発表も行われた。

セッション3は分光法や結晶構造解析を中心とした構造化学に基づいた蛋白質および生細胞の研究に関する討論が行われた。

前半では、新規な研究手法の開発とそれらを用いた最近の研究成果が発表された。単一分子分光法を用いた蛋白質の揺らぎと不均一性に関する研究、コヒーレント分光法および時間分解偏光赤外分光法を用いた蛋白質ダイナミクスの研究、蛍光およびラマン散乱光をプローブとする生細胞ダイナミクスの顕微分光研究を中心として、生体分子研究の新しい方法論について議論した。

セッション3の後半では、メスバウアー分光法を用いた非ヘム鉄蛋白質の構造機能相関解明に関する講演から始まり、チトクロームP450の反応機構解析、チトクロームP450の多様性と多機能性の解明、ヘムオキシゲナーゼ

によるヘム分解機構の解明などに関する講演が行われた。また、ヘム含有型COセンサー蛋白質、およびヘムをエフェクターとするヘムセンサー蛋白質の構造機能相関に関する講演も行われた。

セッション4では、合成化学的手法および蛋白質工学的手法を利用したチトクロームP450、チロシナーゼ、ヘモシアニンの機能変換ならびに反応機構解明、および新規機能性蛋白質の創製に関する講演を始め、モデル錯体を用いた酸素活性化および基質酸素化反応

の反応機構解明、人工光合成系の創製とその詳細な機能評価に関する講演が行われた。

セッション5では、バクテリア細胞中の遷移金属イオン濃度の恒常性維持に関与するコバルト/亜鉛センサー蛋白質および銅イオンセンサー蛋白質の構造機能相関解明、電子伝達蛋白質であるフェレドキシンを中心とした、植物内でのエネルギーおよび物質代謝ネットワークの解明、酵母細胞中での鉄イオン濃度の恒常性維持機構解明、肝臓においてCOが示す分子機能の解明など

に関する講演が行われた。

今回の岡崎コンファレンスは、水谷泰久（阪大院理）を提案代表者、青野重利（岡崎統合バイオ）を所内対応者とし、このほか石森浩一郎（北大院理）、齋藤正男（東北大多元研）、関谷博（九大院理）、田原太平（理研）、藤井正明（東工大資源研）の合計7名で組織した。開催にあたっては、これらの研究室のスタッフ、大学院生にさまざまな面でお手伝いをいただいた。深く感謝する。

（水谷泰久、青野重利 記）

#### 招待講演者

##### Session 1. Hydrogen bonding network and proton transfer

Asuka Fujii (Tohoku Univ.)

Masaaki Fujii (Tokyo Inst. Tech.)

Hiroshi Sekiya (Kyushu Univ.)

Rainer Weinkauff (Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Germany)

Hideki Kandori (Nagoya Inst. Tech.)

##### Session 2. Properties and dynamics of soft interface

Robert A. Walker (Univ. Maryland, U.S.A.)

Tahei Tahara (RIKEN)

Taka-aki Ishibashi (Hiroshima Univ.)

Hiroshi Onishi (Kobe Univ.)

Mamoru Nango (Nagoya Inst. Tech.)

##### Session 3. Protein structure and dynamics: spectroscopy and crystallography

Michio Matsushita (Tokyo Inst. Tech.)

Paul M. Champion (Northeastern Univ., U.S.A.)

Manho Lim (Pusan National Univ., Korea)

Shigeichi Kuamazaki (Kyoto Univ.)

Hiro-o Hamaguchi (Univ. Tokyo)

Takashi Ogura (Univ. of Hyogo)

Boi Hanh Vincent Huynh (Emory Univ., U.S.A.)

Michael T. Green (Penn State Univ., U.S.A.)

Koichiro Ishimori (Hokkaido Univ.)

Shigetoshi Aono (Okazaki Institute for Integrative Bioscience)

Yoshitsugu Shiro (RIKEN)

Masao Ikeda-Saito (Tohoku Univ.)

##### Session 4. Design of active sites of proteins and model complexes

Takashi Hayashi (Osaka Univ.)

Shinobu Itoh (Osaka City Univ.)

Yoshihito Watanabe (Nagoya Univ.)

Masatatsu Suzuki (Kanazawa Univ.)

Shunichi Fukuzumi (Osaka Univ.)

##### Session 5. Biomolecular function: from molecules to cells

David P. Giedroc (Indiana Univ., U.S.A.)

Toshiharu Hase (Osaka Univ.)

Kazuhiro Iwai (Osaka City Univ.)

Makoto Suematsu (Keio Univ.)



## 分子研組織再編について

平成19年度から分子研の研究組織が大きく変わり、研究者は全員以下の4研究領域に専任あるいは併任することになった。

- ・理論・計算分子科学研究領域
- ・光分子科学研究領域
- ・物質分子科学研究領域
- ・生命・錯体分子科学研究領域

各領域は、領域専任・併任研究部門、領域客員研究部門、施設専任・併任研究部門からなる。施設専任研究者は施設の共同利用業務を行いながら、研究者としては研究領域に属する（逆に、研究領域を専任、施設を併任も可能）。なお、研究者を置かない技術職員だけの施設（機器センター、装置開発室）は研究領域には属さない。組織図は最後に添付した。以下にその主旨、背景、経緯等について説明する。

平成の代になって、大学における研究環境の改善が進み、汎用機器は必ずしも分子研の機器を共同利用しなくても済むようになった。そのような背景の中、分子研では助教グループの増員によって機器センター、化学試料室、極低温センターを発展的に分子制御レーザー開発研究センターと分子物質開発研究センターに改組した。ここまで研究施設には、従来型（専任の教授は置かず、施設長には研究系教授が併任）の考え方が生きていたが、次に新たな流れが起きた。つまり、岡崎共通研究施設として電子計算機センターを計算科学研究センターに変更したり、岡崎統合バイオサイエンスセンターを新設したり、分子物質開発研究センターをコアとして分子スケールナノサイエ

ンスセンターを構築したりして、専任教授を置くような研究施設（センター）が次々生み出された。

このようなセンター構想を次々打ち出したのには学問上の新しいチャレンジ以外の理由もあった。ひとつは平成8～9年を最後に研究系（錯体化学実験施設を含む）を中心にした特別予算が廃止されたための予算獲得上の新たな戦略であり、もうひとつは山手地区（E地区）の土地確保のための戦略である。しかし、予算を生み出す可能性がなくとも分子科学研究の推進の中心である研究系を痩せ細るまま放置しているのは分子研の存在意義はなくなってしまう。当然、各所長は研究系の再強化の必要性を強く認識していたが、現実問題として概算要求を目の前にすると、研究系の再強化は先送りせざるを得なかった。特に、関係のある研究部門を集めるだけ集めて概算要求した分子スケールナノサイエンスセンターが要求通り認められたのは幸いであったが、その結果、研究系がかなりずたずたになったことに気づいたのはあとの祭りであった（概算要求がそのまますべて認められることはほとんどなく、通常、見直しが必要となる）。所長はセンター発足後、直ちにナノセンターをコアだけにして、ナノサイエンス推進のため関連研究系がセンターに協力する本来の分子研スタイルに戻そうとしたが、折しも法人化を控え、見直しの時間を失った。

平成16年度からの法人化によって、概算要求の状況が一変する。内部組織の再編成は、概算要求事項にする必要がなくなり、各法人の判断に任せられるところとなった。要するに、組織再

編等は身銭を切ってやりなさいということである。このことはプロジェクトをベースにして研究者が組織的に研究テーマを変えていくような大学共同利用機関に対しては理に適ったことであろうが、分子研のように各研究者が独自の研究テーマを展開するところでは、非常に都合が悪い。

ただ、法人化前にすでに、分子研に間借りしながら長年、錯体化学研究所実現を目指してきた錯体化学実験施設は計画を断念し、人事選考方法も分子研方式に合わせるようになっていた。一方、関連領域研究系は1助教グループだけの研究系になっていた。そのため、法人化後の現所長の最初の切り口として、錯体と関連の再編の課題があった。その課題に「系と施設の在り方等検討委員会」が対応することになった。その際、電子構造研究系と分子構造研究系をほぼ分ける必然性がなくなっていることや分子スケールナノサイエンスセンターの位置づけも併せて検討した。

「系と施設の在り方等検討委員会」では当初いろんな小手先の再編案を検討していたが、研究所を大きく3つ、あるいは4つの研究領域に大きくまとめることを皆で思いついた。各研究領域には関連する研究系と施設の両方の研究グループが属する。研究系と施設の関係は各分野によって違うし、施設に置く専任スタッフについてもそれぞれの考え方がある。これまでは必要に応じて概算要求して外部から専任枠を獲得してきたが、今後は、各領域で身銭を切って枠を作り出す必要がある。概算要求が認められないと何もできないというような理由は今後は一切通用し

ない。自分たちの判断で、研究者を併任させる形態で施設運営してもよいし、研究者を専任させる形態で施設運営してもよい。研究者ポストや各自の研究費を使って技術職員増員や共通設備整備を進めることもできる。施設が肥大化しすぎているならスリム化すればよい。要するに、各領域で研究系と施設がうまくタイアップして、研究成果を挙げ、その結果、組織として予算獲得に成功し、それによってさらに優れた成果を生み出せるような好循環に入ることが今後、求められる。

「系と施設の在り方等検討委員会」の検討結果（分子研レターズ53号, 2006や分子研レポート2005, 2006を参照）を踏まえて、現所長の判断で4大研究

領域にまとめることになり、主幹会議等で細部を決めていった。誰がどの領域に属するとか、研究部門の名前をどうするかなど、なかなか本人の希望どおりにいかない部分があったが、現所長が粘り強く説得し、詳細を決めていった。その過程で、領域を越えた所内併任も認めるところとなった。

組織再編によって枠組みはできた。今後はいよいよ中身の問題になる。時間のかかる人事流動を経て、組織のあるべき姿が定まってくるであろう。その際、留意すべきことがいくつかある。4領域主幹は所長補佐の役目を果たすように位置づけられるため、さらに研究総主幹職が必要かどうかについて見直す必要がある。また、3～5年後の教授

7名の大量定年時期を見据えて、世代交代を図っていく必要がある。今回、各領域に属する専任研究部門の基本構成は3グループとなったが、それは教授グループと准教授グループの数のバランスを2:1から1:2に是正していくことをある程度、考慮したものである。その際、専任研究部門の教授は部門の将来動向に責任を持つことになる。ちなみに4領域別の教授ポスト数は以下の表のとおりになっている。各領域での研究系と施設のバランスについては、准教授ポスト数を含めて、今後、各領域で自律的に見直す必要がある。

(小杉信博 記)

表. 4 研究領域における教授のポスト数の変化（研究系教授数＋施設教授数）

	現実員	5年後 <sup>1</sup>	定員 <sup>2</sup>	是正後 <sup>3</sup>	15年前の定員 <sup>4</sup>
理論計算（計算センター含む）	3+1	1+1	4+1	2+1	2+0
光（UVSOR、レーザーセ含む）	4+1	4+1	5+1	3+1	6+0
物質（ナノセンター含む）	3+1	1+1	4+1	3+1	3+0
生命錯体（統合バイオ含む）	3+3	1+2	3+3	2+2	2+0
小計	13+6	7+5	16+6	10+5	13+0
合計	19	12	22	15	13

<sup>1</sup>5年間、空きポストを埋めないとしたときの実員

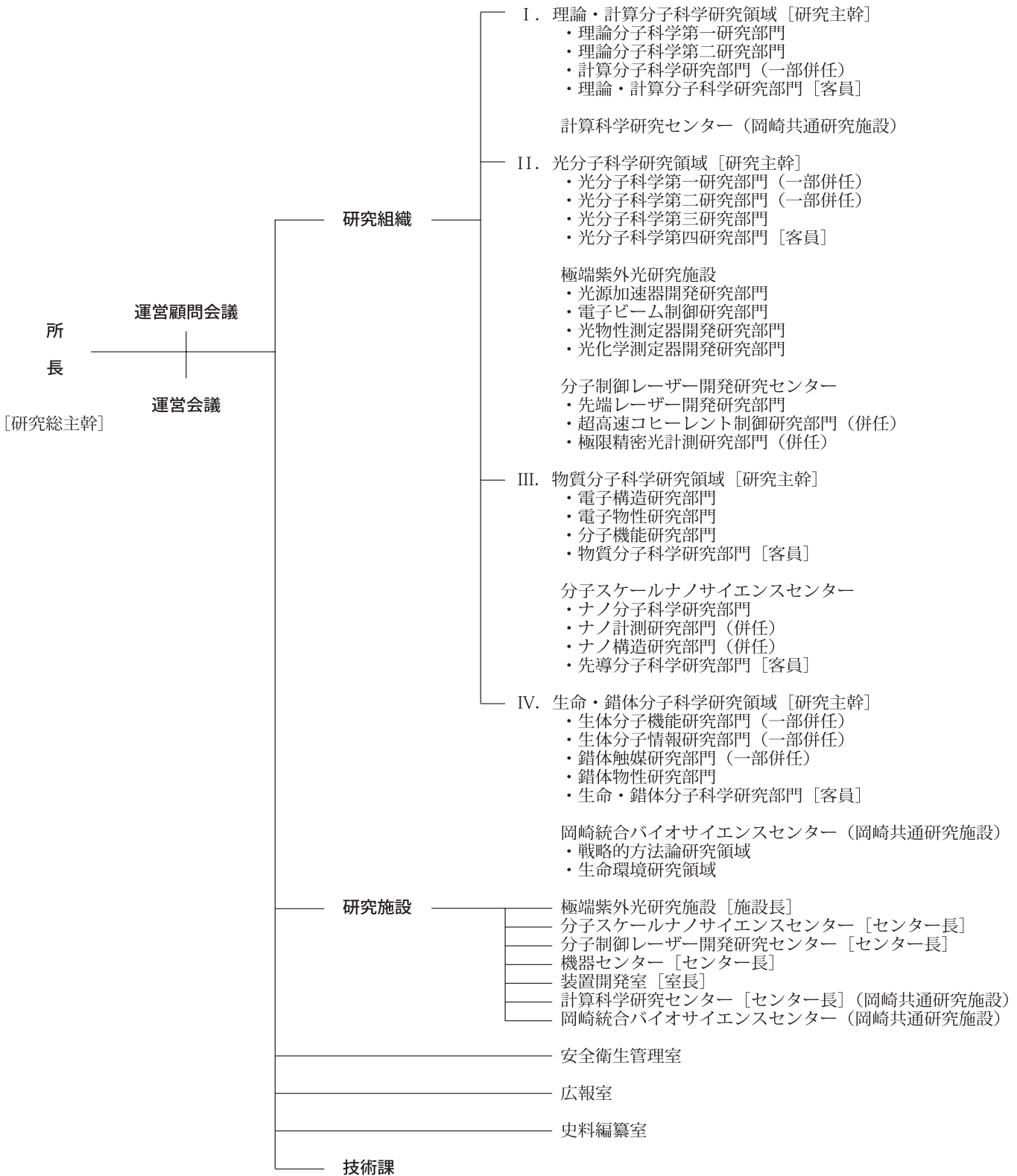
<sup>2</sup>平成16年度の法人化の時点での定員を4領域に割り振ったもの

<sup>3</sup>各領域の専任研究部門の教授：准教授の人数を1:1、1:2に是正したときの数

<sup>4</sup>流動研究部門は除く。当時の研究内容に従って4領域に割り振ったもの



組織再編 (平成19年度～)



[註] 外国人客員と研究施設客員はそれぞれの研究領域の客員部門で対応する。ただし、分子スケールナノサイエンスセンター客員は先導分子科学研究部門で対応する。また、研究部門間の併任は、研究領域を跨ぐことも可能であり、適宜、人事流動等に応じて見直す。

## 新しい共同研究プログラム「若手研究会等」について

分子科学研究所は創設以来、大学共同利用機関として各種共同研究プログラムを半年毎に公募してきた（応募締切は6月中旬と12月中旬。現在、随時受付も可能）。原則、すべて大学院生でも申請代表者として申請でき、旅費等の経費支援を受けることができる（一部、例外規定あり）。このことは、所外公開装置の「施設利用」や所内研究者との「協力研究」においては少ないながらも事例があり、ある程度は知られていると思われるが、「分子研研究会」においては知る限り事例がない。ただし、実態として、年度毎に院生が中心になって任意に組織する「分子科学夏の学校」についての支援が「分子研研究会」枠を流用する形で行われてきた（具体的支援内容：テキスト作成など講義内容に関して講師と担当院生が分子研で一堂に会して打合せする）。その際、関連研究室の教授が仮親として申請代表者になっていた。

分子研の共同研究の採否は「共同研究専門委員会」で審議する（上部組織の運営会議が最終決定）。その委員会で特に最近、「分子研研究会」枠を使って「分子科学夏の学校」支援を行うのは変ではないか、申請代表者は仮親に留ま

らず申請内容について責任を持つべきではないか、分子科学夏の学校以外の関連若手の主催する夏の学校も支援すべきではないか、などのいろんな議論が沸き起こり、見直しの必要に迫られた。

院生・若手研究者が自主的に行う勉強会である「分子科学夏の学校」の歴史は古く、1961年に発足している。数年して「分子科学夏の学校」で育った若手は、「分子科学若手の会」を作り始めるとともに、1965年に学術会議が勧告した分子研設立への期待を「分子科学研究会（通称古手の会）」に伝え、分子研の初期形成に影響力を持った。その後も、「分子科学夏の学校」を通じていろんな所属・分野の若手が交流し、そこで培った基礎学術的素養や人的ネットワークが分子科学や分子科学研究所を支えてきた。最近、研究内容の深化・細分化によって所属学会を越えて若手が交流する機会が激減している中で、分子研としても「分子科学夏の学校」のような古き良き伝統はできる限り応援していきたい。

一方、現在の分子研は、錯体化学研究所設立（1971年学術会議勧告）を最終目標としてきた錯体化学研究者や岡崎3研究所の接点としてバイオサイエ

ンス研究者を自らの研究分野に含めて、手を広げている。そういう中では「分子研研究会」枠を流用するというような関係者にしか判らない若手支援策では、所内でさえも理解されなくなってきた。

以上のような背景で従来の「分子研研究会」を申請代表者が院生以外的一般のものと院生に限定したものに分け、後者については、研究会に限らずいろんな所属・分野の院生が自主的にそれぞれの研究分野を越えて交流を持つような各種活動に対して大学共同利用機関の目的に合う範囲でできる限り経費支援することにした。それが平成20年度から始まった「若手研究会等」という枠である。大学では（たぶん）不可能なこの新たな院生支援策に対する読者諸氏のご理解とご支援をお願い致します。

また、法人化によって国立大学も大学共同利用機関も変質している現在、「若手研究会等」に加え、コミュニティの皆さんが分子研に期待する新たな共同研究プログラムについて、是非、アイデア等をお寄せ下さい。お待ちしております。

（小杉信博 記）

### 若手研究会等公募要項

#### 【1】研究会等

院生が主体的に企画する分子科学に関連する研究会等に対する各種支援を行います。

#### 【2】提案代表者

所内、所外の院生を問いません。

ただし、所内の教授又は准教授1名を共同提案者とし、事前に十分、打合せしたものを申請してください。

#### 【3】若手研究会等報告書

提案代表者はすべての企画が終了後15日以内に若手研究会等実施報告書を、所長へ提出していただきます。

#### 【4】開催場所

分子科学研究所あるいは岡崎コンファレンスセンターにおいて実施することを原則とします。

「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト  
「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」拠点の課題

分子科学研究所は昨年4月より表記の次世代スパコンプロジェクトにおけるグランドチャレンジアプリケーション研究拠点（ナノ分野）として活動を開始した。

次世代スパコンプロジェクトは我が国がIT分野における国際的なリーダーシップを確保ために「旗艦」的コンピュータを構築し、それを下方展開することによって我が国に強固なITインフラを整備することを目指す国家プロジェクトである。また、このプロジェクトの目的は単に「巨大なマシン」を構築することにとどまらず、同時に、我が国の計算科学における新しいパラダイムの創出を目指すものである。

計算科学はこれまでも物質設計や地球環境などの分野で重要な役割を果たし、社会の技術基盤のひとつとして確固たる基盤を築きつつある。とりわけ、物質や生体分子の様々な機能が発現するナノスケールの現象をターゲットとする計算科学は21世紀における産業を担うべき「知的ものづくり」や個人の遺伝情報に基づく「テーラーメイド医療」にといった技術基盤としておおきな期待を集めている。他方、ナノスケールの現象は伝統的な理論化学物理の視点からも極めて挑戦的な課題である。特に、量子力学、統計力学、分子シミュレーションなどの理論・計算科学的方法論にとって、これまでの枠組みを大幅に越えること無くして決して達成しえない研究課題である。

以上の観点から我々は本プロジェクトのナノ分野におけるグランドチャレンジ研究課題として、下記の3つの課題を設定した。

(1) 次世代情報・機能材料

超高密度実装、高速応答、省エネルギーなどをめざす電子デバイス設計の計算科学的方法論を構築。

(2) 次世代ナノ生体物質

生命体を構成するナノ物質のシミュレーションを可能とする方法論を確立することにより、テーラーメイド医療を目指した次世代生命体シミュレーションのナノ基盤を構築。

(3) 次世代エネルギー

化石燃料に代わる恒久的エネルギー源として太陽エネルギーの固定、利用、貯蔵技術、特に、セルロースから酵素反応によりエタノールを生成する技術における計算科学的方法論の確立に貢献。

これらの研究課題は国の「重点推進4分野」の中において重要な技術・課題として位置付けられていることから明らかのように、21世紀の「知的ものづくり」や個人の遺伝情報に基づく「テーラーメイド医療」など産業・医療の技術基盤を確立する上で本質的であるばかりでなく、人類の存立基盤そのものにも関わる重要課題であり、「グランドチャレンジ課題」と呼ぶにふさわしいターゲットである。

我々は本プロジェクトにおいてこれらの課題に挑戦する上で必要な新しい理論や計算科学的方法論あるいは計算プログラムを構築し、そのことを通じて次世代スパコンプロジェクトの成功に貢献する所存である。

(平田文男 記)



## 第4回自然科学研究機構シンポジウム 「生物の生存戦略」



2007年9月23日に東京国際フォーラム（東京都千代田区）において、第4回の機構シンポジウムが開催された。本シンポジウムは連続して春・秋のお彼岸に開催され、プログラムコーディネーターの立花隆氏も述べていたように「お彼岸シンポジウム」としてすっかり定着した感がある。これまで同様500名以上の参加者で会場が満たされ、全く空席がない状況であった。

今回は、基礎生理学研究所が中心となって「生命の生存戦略 われわれ地球生命ファミリーは いかにしてここに かくあるのか」というテーマのもとに講演・討論が繰り広げられた。まず、志村機構長の挨拶の後、立花氏の趣旨説明が行なわれ、引き続いて、以下の講演が行なわれた（講師の敬称は略させて頂いた）。

福島登志夫（国立天文台）

「生命を生み出すまでの宇宙進化」

長谷部光泰（基生研）

「ゲノム進化が生み出した動物と植物のちがい」

長濱嘉孝（基生研）

「性 - 多様性を生み出す原動力」

阿形清和（京都大学）

「有性生殖と無性生殖を支える幹細胞システム」

上野直人（基生研）

「動物の形作り戦略～背と腹はどのようにして決まるのか？～」

倉谷滋（理研）

「カメを生み出した発生的進化要因」

嶋本功（奈良先端大）

「植物の“花々しい”生活」

蘇智慧（JT生命誌研究館）

「昆虫の起源と進化」

深津武馬（産総合研）

「共生と生物進化」

野田昌晴（基生研）

「塩分水分の摂取を制御する脳内機構」

福島登志夫天文台副台長による講演は、宇宙の開闢から、銀河、恒星、惑星、そして生命の誕生へと続く壮大なスケールの内容であった。それ以降の講演はすべて、メインテーマである「生命の生存戦略」について様々な切り口から迫った、最先端の研究成果を紹介するものであった。これらを個別に紹介するのは、紙面の都合ならびに筆者の記憶の曖昧さから差し控えさせて頂くが（詳細は東大立花ゼミのホームページ<http://kenbunden.net/nins04/>に紹介されている）、全体を通して強く印象付けられた3点について簡単に述べたいと思う。

第1点は、程度の差はあるものの、全ての講演においてゲノム解析の最新の成果をもとに生物の生存戦略について議論されていたことである。遺伝子レベルで形態や生態とその進化を論ずる分子生物学が共通の基礎として確立しており、「分子の機能」と「生命現象」が直結している有様が明確に提示されていた。第2点は、前者の方法論的共通点とは対照的に、取り上げられるトピックが極めて多種多様であったことである。これは、講演題目をご覧になるだけで一目瞭然であり、植物と動物、性と生殖、個体の形態進化、花形成の分子機構、種としての分化と進化、さらには個体の生理機能までがカバーされている。この多様性が、取りも直さず生命現象の多様性を直接反映していると言えよう。第3点は、内容の具

体性、言い換えると、ある種の親しみやすさである。花はなぜ咲くのか、カメはなぜ甲羅を持つのか、等の問題の設定自体が興味を引き付けるに十分であるし、プラヌリア・アブラムシ・メダカ等のユーモラスな動画もふんだんに提供されて、会場の皆さんの笑いを盛んに誘っていた。分子科学の講演でこの「身近さ」を示すのは、もとより至難の業である。であるならば、もう少し別のレベルで普遍的な好奇心に訴えるために、どのような取り組みをすべきか考えさせるところが大であった。

閉会に際して、岡田清孝基生研所長が挨拶された。そのなかで、今回のシンポジウムで紹介されたような最先端の研究は全て、研究者個人の内的な好奇心を原動力として始めて実現されることを強調されたことが印象深い。また、これまでのシンポジウム同様に参加された方々の年齢層が高いことに対応して、「皆さんのお子さんやお孫さんに、このシンポジウムで感じた面白さを、是非、伝えてください」と述べられていた。熟年（老年？）パワーの知的活力の高さはすばらしいものがあるが、次代を担う年齢層の人たちも巻き込む方策の模索が必要であろう。

今回も途中で退席する方はほとんどなく、朝10時から夕方5時30分まで熱心に講演・討論をお聞き頂いていた。また、短い休憩時間をぬって分子研の展示スペースを訪れ、本質的な質問をされる方々もおられた。これら参加者の皆さんに敬意と感謝を表して、結びとしたい。

（大島康裕 記）

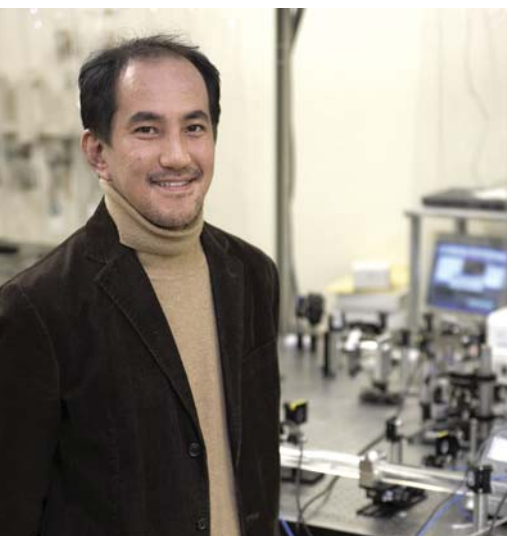
菱川明栄准教授に平成19年度分子科学奨励森野基金

高木康多助教に第2回日本物理学会若手奨励賞

彦坂泰正助教に第2回日本物理学会若手奨励賞

香月浩之助教に平成19年度光科学技術研究振興財団研究表彰

石村和也技術職員に第3回APCTCCポスター賞



フェムト秒のパルスレーザー光を集めて得られる強いレーザー場に置かれた分子は、通常の光との相互作用を扱う際の近似である摂動法では解釈できない特異なふるまいを示す。これは強レーザー場が、分子内の原子核と電子の間に働く相互作用と拮抗するほどの大きな電場成分を持つことに由来する。このため、強レーザー場における分子の動的過程を理解するには「光をまとった状態（光ドレスト状態）」として分子とレーザー場と一体的に扱うと見通しが良い。これは分子の基底状態と複数の励起状態の混合した状態と捉えることもできるが、その混ざり方は電磁波であるレーザーの振動（波動）電場の大きさによって刻一刻と変化しており、それに応じて核間ポテンシャル形状の変化と分子の動的過程が引き起こされることになる。

通常の光と異なり、強レーザー場では、

### 菱川明栄准教授に

### 「クーロン爆発イメージングによる強レーザー場中分子過程」で平成19年度分子科学奨励森野基金の研究助成が授与

一度に多数の電子が放出され、そのエネルギーも必ずしも飛び飛びではない。また、突然、電子を多数失った分子は正電荷を多数持った多価イオンに変化し、イオンは電荷間の反発的なクーロン力によって直ちにばらばらにちぎれてしまう。このような分子イオンの断片化現象は古くから内殻励起分子の脱励起過程などでも見つかっており、一般的に分子のクーロン爆発と呼ばれている。

菱川准教授は、クーロン爆発で生成した分子イオンの断片（フラグメントイオン）の持つ運動量を測定すれば、それまでよくわかっていなかったドレスト状態分子の構造変化についての情報を得られることに着目して、これまで強レーザー場中における分子の動的過程についての研究を進めてきた。特にフラグメントイオン毎にそれぞれの運動量（放出方向も含む）を観測するための手法として質量選別運動量(MRMI)画像観測法やコインシデンス運動量画像(CMI)観測法の開発をおこない、これらの新しい手法を駆使して、アセトニトリル分子では分子内水素移動が100フェムト秒程度の極めて短い時間内でおこること、二硫化炭素分子の爆発過程には同時に二つの炭素-イオウ結合が切れる場合と段階的に切れる場合があること、2価の二硫化炭素イオ

ンだけ取り出して見ると二つの結合が反対称的に伸び縮み（振動）する場合以外にエネルギー的に不利な対称的な伸び縮みが起きていることなど、強レーザー場によって新しい化学反応の経路が開かれることなどを明らかにしている。

さらに最近では、10フェムト秒領域の極短パルス高強度レーザーを用いた化学反応の制御に取り組み、レーザーの偏光方向に対する分子の向きによって動的過程が変化する様子を観測し、分子座標系で「電子をどの方向に揺さぶるか」によって分子の動的過程が制御できることを硫化水素分子に対して初めて示すことに成功した。

菱川グループは少人数ながら「クーロン爆発イメージングによる強レーザー場中分子過程」の全貌を捕まえるための高度な方法論の開発と観測に日々取り組んでいる。今回の助成は菱川准教授のこのようなチャレンジが認められたものであるが、国際会議の招待講演の依頼があったり、スウェーデンの研究者が技術を学ぶために次々と人を送り込んできたりしていることから、国際的にも認められていることがわかる。今後、光分子科学研究領域の柱のひとつとして強レーザー場の分子科学の推進が期待される。

(小杉信博 記)

## 高木康多助教に第2回日本物理学会若手奨励賞

物質分子科学研究領域・電子構造研究部門・助教の高木康多が平成19年度（第2回）日本物理学会若手奨励賞（領域9）を受賞した。受賞題目「走査トンネル顕微鏡を用いたキャリア注入によるGe(001)表面構造変化の研究」である。高木氏は平成19年9月1日に同部門横山Gに着任したばかりであり、今回の受賞はむしろ彼が採用されることになった助教人事選考において、ひときわ際立った研究成果であったといえる。

今回の受賞研究概要は以下のようである。超高真空中で清浄化されたゲルマニウム単結晶の(001)表面は表面再構成が起き、美しい二量体の列（ダイマー列）が形成される。ここで、（準）安定な表面再構成構造には $c(4 \times 2)$ と $p(2 \times 2)$ と呼ばれる2種類の相があり、両者の安定性はエネルギー的にほとんど差がないことが知られている。彼は、

走査トンネル顕微鏡（STM）の探針に印加する電圧を制御することによって、このふたつの構造を双方向に任意に変化させることが可能であることを見出した。また、この表面構造変化のダイナミクスを詳細に調べることによって、この転移が、STM探針の作る局所電場に起因することに加えて、探針から注入されるキャリア（電子またはホール）と表面原子との非弾性散乱にも由来することを明らかにした。Ge表面に関するこの研究は、同様の表面再構成構造を持つSi(001)表面の研究の蓄積を基礎として進められ、また同時期に行われていたSi(001)表面の研究にも影響を与えた。これらの相補的な研究・議論はIV族半導体の(001)面という半導体表面研究における代表的な系の表面物性の理解に大きな進展をもたらした。またSTM探針からのキャリア注入による表面構造への影響を詳細に研究した例はあまりなく、固体表面の電子状態と表面構造へのSTM測定の影響



を理解する上で本研究の結果は今後の重要な指針となると考えられる。

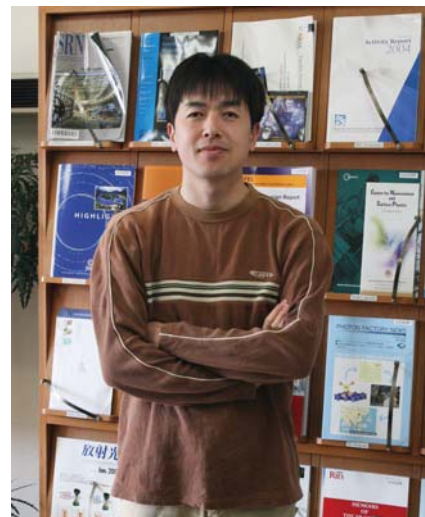
高木氏の自己紹介は本号で記載があるが、彼はこの一連の研究で博士の学位を取得した。その後、理研播磨（Spring-8）に博士研究員として勤務し、放射光X線誘起による元素選択的STMの開発を目指し、そこでも成果を挙げている。現在は横山Gで表面薄膜磁性の研究に従事し始めたところであるが、特に彼の持つSTMや放射光利用などの高度な表面技術を駆使することで、新たに参入してくれた表面磁性分野において、ますます研究が発展することを期待している。

（横山利彦 記）

## 彦坂泰正助教が「多重同時計測による原子分子の光多重電離過程の研究」で2008年日本物理学会若手奨励賞を受賞

光の中でも波長の短い（周波数の高い）紫外線やX線を物質に照射すると、原子核からのクーロン力によって捕らわれていた電子が物質から飛び出してくる。光電効果と呼ばれるこの現象の本質は、アインシュタインの光量子仮説によって説明される。すなわち、光はその周波数に応じたエネルギーを持つ粒子（光子）として振る舞い、物質中の電子はこのエネルギーを受け取ることによって運動エネルギーを獲得し、

原子核の束縛に打ち勝って物質から放出される。この光電効果の物理を説明する際には、一つの光子は一つの電子のみに作用してその状態を変えるという描像が前提となっている。しかしながら、物質としても最も単純な系である原子や分子の光電効果について詳細に調べてみると、この描像では説明できない現象が普遍的に見られることが分かってきた。最も顕著な例は、一つの光子の吸収によって原子や分子内の



複数の電子が同時に放出される現象であり、光多重電離と呼ばれている。光多重電離は、原子や分子内の電子がそれぞれ全く独立に運動している訳ではないことを直接的に示しており、このことは逆に、原子や分子の光多重電離過程の観測を通して、物質中の電子間の相互作用にアプローチできることを意味している。そのため、原子や分子の光多重電離過程は、原子分子科学において最もホットなトピックの一つとして注目されている。

光多重電離の詳細を理解するためには、放出される全ての電子の運動エネルギーの相関を観測することが極めて有効である。しかしながら、従来の手法では高効率で運動エネルギー相関を得ることはできず、光多重電離過程について断片的な情報しか得られていなかった。これに対し彦坂助教らは、運動エネルギー相関を高効率かつ精度良く測定出来る実験技術を導入し、原子や分子の光多重電離の研究において次々と特筆すべき研究成果を生み出している。今回の受賞は、以下に示した二例を含む原子分子の光多重電離に関する一連の研究に対するものである。

(1) 原子や分子の内殻電子を、電離しきい値より遙かに高い光子エネルギー

で電離すると、それに追従して外殻軌道からも電子が放出されることがある。このような光二重電離過程は、内殻電子が突然放出されるショックで外殻電子が飛び出すというモデル（瞬間近似）で説明されている。彦坂助教らは、この過程において放出された二つの電子の運動エネルギー相関を観測することに初めて成功し、その光子エネルギー依存性を測定した。その結果、光子エネルギーが十分に高い場合、光二重電離過程は瞬間近似で十分に説明できるが、光子エネルギーが低い領域では、このモデルでは説明できない振る舞いを示すことを突き止めた。この観測は、電子のスピンも考慮した新しい光二重電離ダイナミクス理論の構築の必要性を再認識させる実験結果として注目を集めている。

(2) 原子や分子を構成する電子の挙動は、ミクロな世界の力学である量子力学によって理解され、電子の状態はその量子状態を指定する波動関数によって記述される。一電子軌道近似に基づいて得られた波動関数は、原子軌道や分子軌道と呼ばれており、原子や分子の電子構造を理解する上で最も重用される基本的な概念である。しかし、原子番号が54付近の原子については、

この近似に基づいて光電子スペクトルを解釈できないことが古くから知られている。彦坂助教らは、キセノン原子の4p電離しきい値を超える光子エネルギーでの実験において、4d内殻軌道から同時に2つの電子が放出される二重電離が高効率に起こることを見出した。これは、4p電離強度が仮想的な電子遷移過程を介することにより、4d二重電離強度へ譲渡されたとして理解される。この研究は、光二重電離の観測によって、一電子軌道近似の破綻のメカニズムを顕在化し得ることを示した初めての実験である。

彦坂助教らの研究は、光多重電離のメカニズムとダイナミクス、更には関与する電子状態の分光情報等、関連するあらゆる側面についての理解を飛躍的に伸展させており、光多重電離過程の研究に新展開をもたらしている。彦坂助教は、これらの光多重電離に関する研究とともに、光イオン化動力学や分子動力学の研究などにおいても卓越した研究成果を挙げている。彦坂助教の原子分子科学の研究における更なる活躍を期待している。

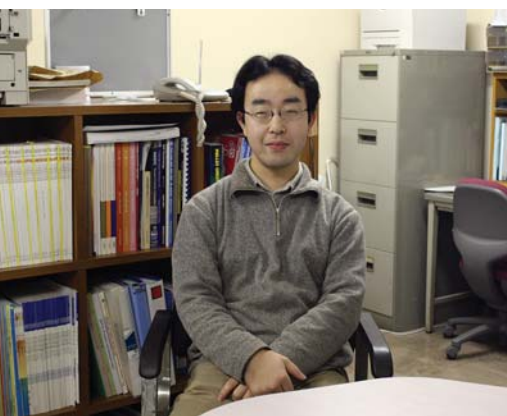
(繁政英治 記)

## 香月浩之助教に平成19年度光科学技術研究振興財団研究表彰

光分子科学研究領域の香月浩之助教が、「分子振動波束干渉の制御及び高分解能時空間イメージング」に関する業績で、平成19年度の光科学技術研究振興財団研究表彰を受賞された。本表彰は、光科学に関する基礎的な研究又は光科学技術の向上に役立つ研究で独創的な成果を挙げた35歳以下の若手研究

者を対象としており、過去2年以内に発表された研究論文、講演、報告等の内容により対象者を選定する。

香月氏は、京都大学大学院在学中に、周波数領域の高分解能分光を用いて固体バラ水素という特殊な系における分子の量子ダイナミクスを研究し、固体における量子コヒーレンスを考察す



る上で重要な知見を提供した。その後、今回の表彰の対象である時間領域の超高速分光実験へと転向することになったが、これは、自らが実験で目の当たりにした分子の量子性をさらに極めたい、そして制御してみたいという自然な欲求に導かれてのことであったと推測される。

分子研に赴任してからは、それまで受動的な制御しかできなかったアト秒位相変調器（二つのフェムト秒レーザーパルス間の相対位相をアト秒レベルの分解能で調節する高安定光干渉計）に

能動的なフィードバック制御機能を付加し、これを主にヨウ素分子の振動波束に適用した。そして、波束干渉を過去にない精度で制御し、波束内の振動固有状態の位相振幅情報を読み出すことに成功した。さらに二つの波束がぶつかってすり抜けるときに生じる過渡的なさざ波を、フェムト秒ピコメートル領域の時空間分解能で可視化した。これらの研究結果は、過去2年のうちに、Science誌, Physical Review Letters誌, Physical Review A誌といった一流国際ジャーナルに発表され学術的に

大きなインパクトを与えただけでなく、新聞各紙にも取り上げられ社会的にも大きな反響を集めた。

香月氏は今後、これまで行ってきた量子固体の研究とコヒーレント制御の技術を融合させ、凝縮系におけるコヒーレント制御の研究を行っていく予定であり、これによって光科学の新しい地平が切り開かれるものと大いに期待される。今回の表彰が、その第一歩を記す道標となることを祈ってやまない。心よりお祝い申し上げる。

(大森賢治 記)

## 石村和也技術職員に第3回APCTCCポスター賞

理論・計算分子科学研究領域の石村和也技術職員が2007年9月に中国の北京で開催されたアジア・太平洋地域の理論・計算化学分野の代表的な国際学会である第3回Asian Pacific Conference on Theoretical & Computational Chemistry (APCTCC)において「New Parallel Algorithm for MP2 Energy and Gradient Calculations and its Applications」というタイトルでポスター賞を受賞した。

現在、大きな分子の電子状態計算には密度汎関数法が最も多く使われているが、通常用いられている汎関数では、ホストゲスト相互作用、分子認識、自己集合等で重要な役割をする非共有結合相互作用をうまく取り扱えないという致命的な欠点がある。これとは対照的に、簡便

に電子相関を取り込める分子軌道法の代表であるMP2(second-order Møller-Plesset perturbation)法は非共有結合相互作用を取り扱えるが、分子が巨大になると計算時間が急激に増大してしまうという問題がある。このために、計算負荷を軽減するための近似を導入する幾つかの方法がこれまでに提案されてきているが、いずれも計算精度に任意性があるばかりでなく、どのような分子にも適用できるとは限らない。石村技術職員は、便宜的な近似法をいっさい用いることなく、MP2法のエネルギーとエネルギー微分計算を高速に実行できる新しい並列計算アルゴリズムを開発してプログラム化した。このプログラムにより、今まで扱えなかったナノサイズ分子の精度の高いエネルギー計算や構造最適化計算を実



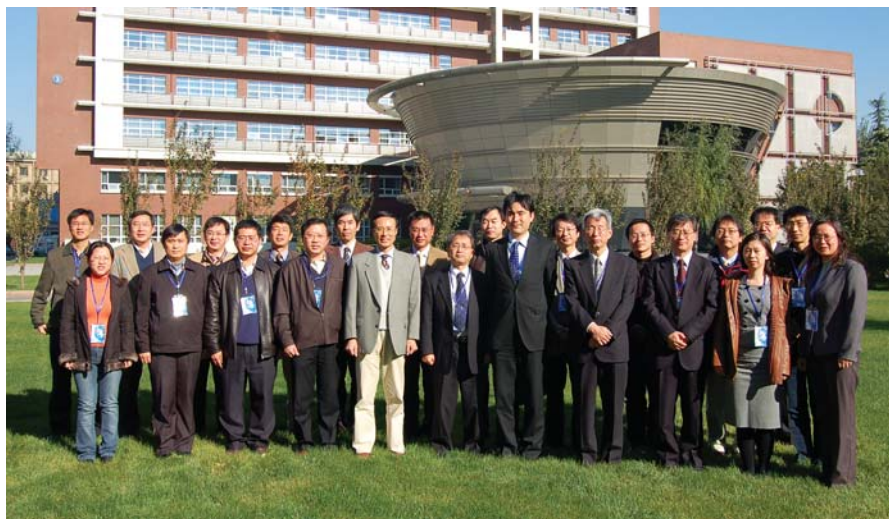
行できるようになったことが評価された。今回の受賞を心からお祝いするとともに、今後のさらなる進展を期待したい。

(永瀬 茂 記)



## 01 第一回日中ナノ化学生物学シンポジウム報告

報告：生命・錯体分子科学研究領域 教授 宇理須恒雄



2007年9月8日から10日にかけて第一回日中ナノ化学生物学シンポジウムが中国科学院化学研究所において開催された。日本学術振興会が主催するアジア教育拠点事業（以下アジアコア事業）の一環として、中国科学院化学研究所と分子科学研究所の共催として開催されたものである。講演者は日本側8名、中国側7名で、これにオープニング挨拶を中国側日本側各1名（Li-Jun Wan 化学研究所長および分子研宇理須恒雄教授）が行った。分子科学から生物学、医学にまでまたがる非常に幅広い学際領域の新分野であるにもかかわらず、研究発表の学術水準は日本側も中国側も非常にレベルが高く、かつ討論も非常に活気に満ちたものであった。研究水準の高さもさることながら、化学研究所のスタッフの1割近くがこの研究分野の研究者であるとのことで、中国がこのような最先端の研究分野にいかにか力を入れているかがうかがわれる。発表された講演テーマと発表者を以下に列記する。

## ■中国

Neuroelectroanalytical Chemistry:

Opportunities and Challenges, by Prof. Lanqun Mao (ICCAS).  
 Single-Molecule Study of Signaling Proteins in Living Cells, by Prof. Xiaohong Fang (ICCAS).  
 Fluorometric Assays for DNA and Protein with Conjugated Polyelectrolytes, by Prof. Shu Wang (ICCAS).  
 Stability of Hydrophilic Magnetic Nanoparticles under Biologically Relevant Conditions, by Y. Zhang (Southeast Univ.).  
 Magnetic Nanocrystals: from Preparations to Bio-applications, by Prof. Mingyuan Gao (ICCAS).  
 Application of Proton Driven DNA Nanomachine, by Prof. Dongsheng Liu (National Center for NanoScience & Technology).  
 Development and Applications of Aptameric molecular probes for Bioanalysis, by Prof. Dihua Shangguan (ICCAS).

## ■日本

Development of Ion-channel Biosensor and Applications, by Prof. Tsuneo Urisu, (IMS).  
 Analyses of Cell-biomaterial Surface Interactions, by Prof. Hiroo Iwata(Kyoto Univ.).  
 In-situ Detection and Classification of DNA by Porous Alumina Filter in Conjugation with Infrared Absorption Spectroscopy, by Prof. Michio Niwano(Tohoku Univ.).  
 Visualization of Biological Events using Optical Probe Molecules, by Dr. Masaki Takeuchi (IMS).  
 Nano Particle Assisted Mass Microscopy, by Prof. Mitsutoshi Setou (NIPS).  
 In vivo Functional Imaging of Neural and Secretory Activities by Two-photon Microscopy, by Prof. Tomomi Nemoto (NIPS).  
 Label-Free Detection of Antigen-Antibody Interactions at the GaAs/Water Interface through Surface Infrared Spectroscopy: Discrimination between Specific and Non-specific Interactions by Using Secondary Structure Analysis by Dr. Ayumi HIRANO-IWATA (Tohoku Univ.).

熱気のもった討論と同時にコーヒーブレイクや懇親会、交流会での研究者間の交流は価値観の近い同アジア人どうしという親近感に満ちたものがあり、アジアコアでのシンポジウムの一つの特徴ではないかと感じた。

## 02 JSPS アジア研究教育拠点事業 先端レーザー分光シンポジウム報告

報告：光分子科学研究領域 教授 大島康裕

昨年度より開始された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」の一環として、2007年9月25～26日に神戸大学ならびに神戸六甲山ホテルにおいて、「先端レーザー分光シンポジウム」が開催された。本シンポジウムは、東アジア地域において活発な研究を進めているレーザー科学・原子物理科学・分子科学の研究者が一堂に会して集中的に議論を行い、概念や方法論の共有をはかり、境界領域の発展を目指すことを趣旨としたものである。韓国から2名、台湾から3名、さらにカナダからも2名の研究者にご参加頂き、国内からは13名の口頭講演者を含む30名以上の研究者・学生が参加した。

本シンポジウムでは、4つの口頭講演セッションとポスターセッションが実施された。まず、25日午前中に神戸大学理学部において「分子の分光とダイナミクス」をテーマにしたセッションが行なわれた。ここでは、菱川明栄氏（分子研）が、パルス幅が10フェムト秒以下の高強度極短パルス光による分子のイオン化と構造変化の実験的追跡に関する研究を報告した。高口博氏（理研）は、イオン画像法を用いた反応ダイナミクス研究、特に、 $O(^1D) + HCl$ 反応に関して詳細な報告を行なった。住吉吉英氏（東京大）は、高分解能分光と量子化学計算によるラジカルと希ガス間の分子間相互ポテンシャルの精密決定を議論した。Hsu, Yen-Chu

氏（台湾原子分子科学研究所, IAMS）は、彗星の発光として有名な $C_3$ 分子の紫外遷移について、精密なレーザー分光の結果を紹介した。Jeoung, Sae Chae氏（韓国標準科学研究所, KRISS）は、CARSを利用した高分子膜の化学分析について講演し、レーザー医療との関連にまで言及した。



その日の午後は、ポスターセッションが実施された。発表件数は全部で10件であり、その内容は、極低温に冷却された原子の超精密分光（2件）、様々な有機分子の高分解能電子スペクトル測定（4件）、コヒーレントパルス光源の開発、キャリア位相制御したラマンサイドバンド光による極短パルス発生、超原子価ラジカルを含むクラスターの生成とダイナミクス、遷移金属原子と酸素分子の反応追跡、というように多様な分野に亘っていた。発表者や聴衆として大学院学生・博士研究員などの若手が多数参加し、極めて熱心に説明・議論が行なわれていた。4時間にも及んだセッションであったが、最後までポスター前に人だかりが絶えなかった。また、このセッションの後半では、希望者を対象と

して、神戸大学分子フォトサイエンスセンターならびに理学部化学科の関連研究室の見学も行なわれた。

25日の夕食後は、六甲山ホテルに会場を移して「分子のコントロール」をテーマにしたセッションが行なわれた。まず、Chung, Doo Soo氏（韓国ソウル大学）が、ナノ秒パルス光による分

子の並進運動制御に関して紹介し、長谷川宗良氏（分子研）は、フェムト秒パルス光による回転運動制御の研究を報告した。桂川眞幸氏（電通大）は、水素分子を媒体とするラマン過程を利用したキャリア位相を制御した周波数コムの実現について講演した。山北佳宏氏（東北大）は、シュタ

ルク効果によるリドベルグ分子の並進運動制御の研究結果を報告し、低速分子生成への展開を議論した。

26日午前中は、引き続き六甲山ホテルで「低温の原子、分子、イオン」をテーマとしたセッションが行なわれた。まず、百瀬孝昌氏（カナダブリティッシュコロンビア大, UBC）が、赤外共振器を利用した低温（＝低速）分子の生成・捕獲法に関する新規な提案を行い、Chen, Ying-Cheng氏（IAMS）は、レーザーやマイクロ波を利用した冷却分子捕獲への取り組みを紹介した。金森英人氏（東工大）は、シュタルク速度フィルターとHeバッファーガス冷却を併用した低温分子生成に関する実験結果を報告した。早坂和弘氏（情報通信研究機構, NICT）は、トラップ中の単一イ

オンに関する光学計測や運動制御について講演し、富宅喜代一氏（神戸大）は、液体He温度にまで冷却可能なトラップ中に捕獲した生体関連分子のイオンやクラスターの分光学的研究について報告した。

その日の午後は、「分子と光の極限」をテーマとしたセッションが実施された。鳥井寿夫氏（東京大）は、超放射に関する丁寧な解説を行なった後に、Bose-Einstein凝縮体での超放射の実現と様々な応用を紹介した。山口敦史氏（京都大）は、量子縮退したYb原子についての超高分解能レーザー分光の研究結果を報告した。穂坂綱一氏（分子研）は、高精度な分子波束干渉を利用した量子演算の実現を報告した。Merer, Anthony氏（UBC）は、電子励起状態におけるアセチレン分子の変角振動エネルギー準位構造に関する詳細な研究結果を紹介し、トランス→シス異性化との関連について議論した。笠原俊二氏（神戸大）は、比較的大きな芳香族分子についての高分解能電子スペクトル測定に関する研究結果を報告した。最後にCheng, Wang-Yau氏（IAMS）が、高精度に周波数安定化されたレーザーシステムの構築と様々な分子系への応用について紹介した。

各講演で紹介された内容は世界レベルのオリジナリティに溢れる研究ばかりで、光・原子・分子科学領域

における東アジア研究者のポテンシャルの高さが十分に示されていた。Hzに届く周波数精度での研究がある一方でアト秒の時間精度の実験があり、 $\mu\text{K}$ という極低温の原子集団から「瞬時に」解離する多価分子イオンまでが対象となっている等、内容の深さと広がり両面で研究の最前線を俯瞰できるシンポジウムであった。話題は極めて広範囲であったが、最先端のレーザーがもたらす光と物質とのコヒーレントな相互作用が共通の基盤となっており、多様な分野の研究者が自分なりのスタンスで議論に参加していることが印象的であった。

全てのセッションが終了した後に、六甲山ホテルのバーベキューテラスにてバンケットが開催された。神戸の港と街並みの夜景を眼下に望みながらのバーベキューはまた格別で、出席者一同、感嘆の声しきりであった。このバンケットの場に限らず、休憩や食事の際にも講演内容に関連した議論が行なわれ、また、各国の研究状況から生活までの様々な話題について談笑しあう風景もしばしば見られた。六甲山頂という「下界」からは隔離された場所に宿泊しての開催であったが、シンポジウムに集中できる環境として海外の参



加者からも大変に好評であった（歴史あるホテルなので、インターネットが利用できなかったことも1つの大きな要因であろう）。また、多数の国内参加者の方々から、今までにない分野横断的なシンポジウムであり非常に面白かったとの感想を頂いた。会を企画したものとして嬉しい限りである。

このように、極めて有意義なシンポジウムとなったのも参加者全員の方々のご協力のおかげであり、厚く御礼申し上げます。また、本シンポジウムの運営に関して大変お世話になった、神戸大学・京都大学の富宅喜代一教授、馬場正昭准教授、笠原俊二准教授、石川春樹准教授、ならびに研究室の皆さん、秘書の稲垣いつ子さん、アジア研究教育拠点事業の世話人の方々にも、心より感謝の意を表したい。本当にありがとうございました。

### 03 第9回有機固体の電気伝導と光伝導に関する日中合同シンポジウム

報告：物質分子科学研究領域 教授 薬師久弥

標記シンポジウムが平成19年10月27日より10月29日まで北京友誼賓館において開催された。この二国間シンポジウムは1983年に当時の分子研井

口洋夫教授と中国科学アカデミー科学研究所の銭人元教授によって開始され、北京において第一回が開催された。その後3年ごとに日本と中国で交互に開

催され、20年余にわたって継続されたシンポジウムである。

これまでは日本側窓口は分子科学研究所で、井口洋夫教授、丸山有成教授、

## 第九屆中日有機固體中的電導、光導以及相關現象學術研討會(CJOSS-9)

2007.10.28



薬師久弥教授と引き継がれてきた。今回の第9回シンポジウムの日本側参加者を組織するに当たり、第10回目をどのように組織するかについて日本側組織委員で議論した。この日中シンポジウムは従来以上に重要性が増すことが予想されるので、今後も継続すべきとの意見で一致した。これを踏まえて、組織委員の若返りを図った。その結果、井口洋夫 (JAXA)、佐藤直樹 (京大)、関一彦 (名大)、平本昌宏 (阪大)、古川行夫 (早大)、薬師久弥 (分子研) を組織委員とし、今後、退職した組織委員は井口先生をのぞき組織委員からはずし、現職の研究者と入れ替えることにした。さらに、次回からは組織委員が回りもちで日本側のシンポジウムを企画することにした。次回は佐藤直樹教授が組織する予定である。その結果、この日中シンポジウムを分子研の国際協力事業として位置づけるのは今回が最後で、次回から、分子研とは独立した事業になる。

このシンポジウムの目的は有機固体の物性・機能性について研究している日中の研究者の交流を行い、共同研究へつなげることである。従来は人の流れは中国から日本への一方通行に近かったが、今後は双方向になってゆることが予想される。今回のシンポジウ

ムは日本から52名が参加した。内訳は名誉教授3名、教授クラス16名、准教授クラス14名、助教クラス6名、博士研究員3名、大学院学生10名という構成で、将来を見据えて年齢的にバランスの取れた組織作りができた。従来、日本側で10名の中国の若手研究者の旅費を負担していたが、今回は中国側が日本の若手研究者の滞在費を負担したために多くの博士研究員や大学院生を派遣することができた。中国からは69名の参加者の他に近隣の大学院学生50名が参加したため、総勢約170名というこれまで最大のシンポジウムとなった。

予定では10月26日中に日本側参加者全員が友誼賓館に到着してレセプションを受ける予定であった。ところが、あいにく北京空港近辺で濃霧が発生し、多くの飛行機の便が取り消しになった。今回、成田空港、中部国際空港、関西国際空港の三空港から北京へ飛んだわけであるが、様々事例があった。(1) 運よく霧の晴れ間に着陸して予定通り到着しグループ、(2) 飛行機の離陸が4時間以上遅れたグループ、(3) 一度飛行機が飛んでその後日本へ引き返して翌日北京へ向かったグループ、(4) 飛行機が大連で着陸し大連で一泊したグループである。(1) と (2) のグルー

プは26日に北京へ到着したのであるが、レセプションに間に合ったのは10名以下であった。このような予想外の出来事があったにもかかわらず、会議はプログラムを変更しつつ予定通り進んだ。幸い、27日の午後までには全員が会場に到着し、あとは予定通り、滞りなく進められた。二日半の会議で、53件の口頭発表と63件のポスター発表が行われ、かなりきつい時間割ではあったが、老壮青の研究者交流という面では十分にその役割を果たしえたと考えている。また、28日には中国側の組織委員と日本側の組織委員で委員会を開き、今後もこの日中シンポジウムを継続すること、また、次回は京都で開催することの了承が得られた。

このシンポジウムの旅費の一部を学振のアジアコアプログラムから支援していただいた。アジアコアに関係された方々に心から感謝の意を表したい。



## 04 総研大／アジアコア共催「冬の学校」報告

報告：光分子科学研究領域 教授 大島康裕

総研大とJSPSアジア研究教育拠点(アジアコア)事業との共同主催のもとに、2008年1月24日(木)～26日(土)、岡崎コンファレンスセンターならびに分子科学研究所にて「アジア冬の学校」が開催された。

総研大・物理科学研究科では、研究科内の5専攻で行っている研究・教育活動をアジア諸国の大学生・大学院生および若手研究者の育成に広く供すべく、平成16年度よりアジア冬の学校を開催してきた。分子研(構造分子科学専攻・機能分子科学専攻)での開催では、これまでの総計で150名を越える学生・若手研究者がアジア各国から参加してきている。一方、JSPSアジアコア事業として、分子研では「物質・光・理論分子科学のフロンティア」と題して、中国・韓国・台湾・日本間での研究教育交流を2006年度よりスタートしている。この事業の一環として、2006年12月に北京にて第1回の冬の学校を開催し、100名近い学生・若手研究者が参加した。

2007年度は、この2つの冬の学校を融合する形で開催し、中国から18名、韓国30名、台湾7名、タイ4名、計59名の研究者・学生が参加した。この内、アジアコア事業の拠点機関である中国科学院化学研究所(ICCAS)・韓国科学技術高等研究所(KAIST)・台湾原子分子科学研究所(IAMS)からの参加者は合計34名であった。また、国内からは73名の参加があった(うち分子研より66名)。さらに米国から2名、カナダから1名の出席者があったので、総勢135名に達する大規模な会となった。

この冬の学校では、全体講義、一般講義、選択講義という3形態の講義と、

ポスター発表ならびに研究所内見学が行なわれた。日程の詳細は別記のプログラムを参照されたい。

全体講演では、物質・光・理論の各領域から、東アジア地域出身で世界的に活躍の研究者を招聘し、これまでの業績を中心に研究の背景や意義から今後の展望までを紹介頂いた。カナダMcGill大学のLi教授は、資源・環境問題に対して合成化学が取り組むべき方向性を明確に指摘し、試薬・溶媒を大幅に節約する新規合成反応の例を豊富に紹介した。東京大学の塩谷教授は、金属配位化合物を利用した超分子構造体の創製と、その多様な機能について講演した。米国Indiana大学のBaik准教授は、エネルギー問題への対策として期待されている水からの水素生産に関連して、有機金属触媒を利用した水の酸化反応に関する詳細な理論研究を紹介した。米国連邦標準技術研究所(NIST)のYe主任研究員は、極低温状態の分子の生成法と物理・化学・情報分野への応用について最先端の研究成果を紹介した。台湾Chiao-Tung大学のLin教授は、光吸収・発光・無輻射遷移に関する基礎理論を丁寧に説明し、光励起分子における動力学過程の統一的理解の枠組みを提示した。

一般講義では、アジアコア事業の拠点4機関からの講師が、分子科学の各領域における最先端のトピックスや関連事項に関する講義を行なった。ICCASのZhang教授は、単一分子素子について簡潔に基本事項を説明した後、様々な具体例を提示し分野の現状を概説した。IAMSのLin博士は、量子化学計算の利用に関して実験家の立場から問題点を整理し、また、交差分子

線実験による研究結果との対比を議論した。KAISTのChurchill准教授は、分子センサーとしての金属イオンの研究を例として、注目する研究領域の現状をサーベイする方法論を講義した。さらに、英語による学術文書作成に関する講義も行い、具体的に文章の校正例を示しながら留意すべき重要なポイントを説明した。ソウル大学のJung准教授は、過冷却液体やイオン液体の微視的構造に関する最新の統計理論的研究を紹介した。IAMSのChen博士は、レーザー光による原子の並進運動の冷却に関して、基礎事項から丁寧に解説を行なった。ICCASのWang教授は、新規な構造を持つフラレン類の創製や反応性、さらには医薬応用まで、豊富な研究例を示しながら概説した。

選択講義は、同一の時間帯に行なわれる3つの講義から受講者が選択するという形式で行なわれた。第1の時間帯では、分子研の見附・永田・柳井准教授が、それぞれ「分子の電子構造と光イオン化過程」「光合成の分子機構」「量子化学計算の概要と応用」について、基本事項の解説に十分な時間を割いて講義を行なった。第2の時間帯では、韓国Kyungpook大学のChoi准教授・ICCASのLiu教授・IAMSのWang教授が、それぞれ「QM/MM計算法の概要と応用」「有機半導体の合成と応用」「表面での原子・分子の自己組織化」について詳細な説明を行なった。これらの講義では、受講生ができるだけ主体的に参加できるように、参加者は30名以下に制限して、会場はセミナー室などの比較的小規模の部屋を利用した。実際に、講師が適宜、問題を出して受講生が答えたり、また、講義の途中

で質問が出たりと、双方向性の高い講義が行なわれていた。

以上の講義に加えて、当学校の参加者、特に、学生や若手研究者が自らの研究成果を発表する場として、ポスター発表が実施された。全70件の発表が行なわれ、その内で海外からの発表は39件に上った。夕方6時前にセッションが開始され、軽食を取りつつ、また、飲み物を片手に、熱心に質疑・議論が行なわれている姿が、会場のあちこちで見受けられた。2時間後のセッション終了時にも依然として議論が盛り上がり、アンケートに「ポスター発表の時間は、もう少し長くして欲しかった」との要望も寄せられた。

また、研究所内見学として、20名程度のグループに分かれて、極端紫外光研究施設・計算科学研究センター・山手キャンパス（各研究室ならびに920 MHz NMR）の見学を行なった。学生のアンケートでも「興味深かった」と

の評価が多く、講師として参加した海外の研究者からも、非常に有益で参考になったとの声が上がっていた。

最終日の夕方には、コンファレンスセンター中会議室にて懇親会が開催され、参加者が一堂に会して、親しく語り、近い将来の再会を約束しあっていた。また、各国の学生代表が自発的にマイクを握り、流暢とは言えない英語ながらも積極的に挨拶の言葉を述べ、満場の拍手を浴びていた。

終了時に寄せられた参加学生からのアンケートをまとめてみると、改善すべき点として最も指摘が多かったのは、学生間（特に、異なる地域・大学からの参加者間）のコミュニケーションをより活発にすべきというものであった。学生だけで企画運営するセッションの実施や少人数でのグループ討議等、真の異文化交流を促進する「仕掛け」が必要であろう。講義の程度については、もう少し丁寧な基本事項の解説を望む

声もあり、更なる改善が必要ではあるが、全体としては適当との評価が大多数であった。また、「分子科学の多様な分野にふれる良い機会だった」「これからの研究に役立つと思う」「今後も機会があれば参加したい」との声も多く、総じて、本「冬の学校」は有意義であったと評価されていた。

このように成功裏に当学校を終えることができたのも、素晴らしい講義を行なって頂いた講師の方々や、見学を担当頂いた所内研究者の方々のおかげであり、厚く御礼申し上げます。また、運営に関して大変お世話になった、アジアコア事業の世話人の方々ならびにグループメンバー各位、秘書の稲垣いつ子さん、片山修子さん、米満グループならびに大島グループのメンバー各位に、心より感謝の意を表したい。本当にありがとうございました。



## プログラム

**The Winter School of Sokendai/Asian CORE Program  
“Frontiers of Material, Photo-, and Theoretical Molecular Sciences”**

**January 23 (Wednesday)**

11:00 – 18:00 Registration  
18:00 – 20:00 Reception

**January 24 (Thursday)**

8:50 – 9:20 Opening Remarks  
9:20 – 10:10 Prof. Deqing Zhang (ICCAS, China)  
“Molecular switches, machines, and logic gates”  
10:10 – 10:30 Break  
10:30 – 11:20 Dr. Jim Jr-Min Lin (IAMS, Taiwan)  
“Probing chemical interactions between two closed-shell molecules with ab initio calculations and crossed molecular beam experiments”  
11:20 – 12:00 Prof. David Churchill (KAIST, Korea)  
“Word reduction editing”  
12:00 – 13:20 Lunch  
13:20 – 14:10 Prof. YounJoon Jung (Seoul National University, Korea)  
“Computational studies of dynamic heterogeneities in supercooled liquids and room temperature ionic liquids”  
14:10 – 15:00 Dr. Ying-Cheng Chen (IAMS, Taiwan)  
“Laser cooling of atoms”  
15:00 – 15:30 Break  
15:30 – 17:00 Prof. Koichiro Mitsuke (IMS, Japan)  
“Electronic structures and electron dynamics of free molecules”  
Prof. Toshi Nagata (IMS, Japan)  
“How to capture solar energy – molecular aspects of photosynthesis”  
Prof. Takeshi Yanai (IMS, Japan)  
“Computational and molecular modeling with quantum chemistry”  
17:00 – 17:45 Break  
17:45 – 20:00 Poster Session

**January 25 (Friday)**

8:50 – 9:40 Prof. David Churchill (KAIST, Korea)  
“Metal ions in solution molecular switching and sensing”  
9:40 – 10:30 Prof. Chun-Ru Wang (ICCAS, China)  
“Novel fullerene molecules, fullerene nanostructures, and fullerene applications as MRI contrast agents”  
10:30 – 11:30 Prof. Chao-Jun Li (McGill University, Canada)  
“Our future challenges in synthetic chemistry”  
11:30 – 12:30 Lunch  
12:30 – Visiting

**January 26 (Saturday)**

8:50 – 10:20 Prof. Cheol Ho Choi (Kyungpook National University, Korea)  
“Material studies with hybrid and fast theoretical methods”  
Prof. Yunqi Liu (ICCAS, China)  
“Design and synthesis of organic semiconductors and their application in organic field-effect transistors”  
Prof. Yuh-Lin Wang (IAMS, Taiwan)  
“Nanomaterial fabrication by constrained self-organization of atoms and molecules”  
10:20 – 10:40 Break  
10:40 – 12:10 Laboratory tour in IMS  
12:10 – 13:30 Lunch  
13:30 – 14:30 Prof. Mitsuhiro Shionoya (University of Tokyo, Japan)  
“Supramolecular approaches to nanoscopic metal array, space, and motion: artificial metallo-DNA, dynamic nanocapsules, and molecular machines”  
14:30 – 15:30 Prof. Mu-Hyun Baik (Indiana University, USA)  
“Understanding water oxidation catalysis: insights from computer simulations”  
15:20 – 15:50 Break  
15:50 – 16:50 Dr. Jun Ye (JILA, NIST and University of Colorado, USA)  
“Cold and ultracold molecules”  
16:50 – 17:50 Prof. Sheng-Hsien Lin (IAMS and National Chiao-Tung University, Taiwan)  
“Molecular principles of photochemistry and photophysics”  
17:50 – 18:00 Closing Remarks  
18:00 – 20:30 Dinner Party





## 計算化学から計算科学へ



### 青柳 睦

(九州大学 情報基盤研究開発センター 教授/システム情報科学府情報理学専攻 教授 (併任))

あおやぎ むつみ / 1985年 慶応義塾大学工学研究科計測工学専攻修士課程修了、1987年 名古屋大学理学研究科化学専攻後期博士課程単位取得退学、1987年 分子科学研究所理論研究系 研究技官、1988年 米アルゴン国立研究所 博士研究員、1990年 通産省工業技術院化学技術研究所 研究員 (1992年 同主任研究員)、1993年 分子科学研究所 電子計算機センター助教授、2002年 九州大学情報基盤研究開発センター 教授、2002年 九州大学 システム情報科学府 (併任) 教授、現在に至る。  
学位 1988年10月 名古屋大学理学研究科 理学博士、趣味は魚釣りと音楽鑑賞。

わたしは1993年春に電子計算機センターに就任して以来2002年までの8年余を分子研で過ごさせていただきました。

九大に移った時「分子研を去るにあたり」の執筆ができず申し訳ありませんでした。今回は「OBの今」の原稿を書く機会を頂き、わたしの現在置かれている情報科学寄りの視点からの計算科学について思っていることを書かせていただきました。雑文で恐縮ですが、日ごろ計算化学や理論分子科学分野でご活躍の若手研究者に計算科学からの観点で少しでもお役に立てれば幸いです。

1954年Fermi, Pasta, Ulamらは複数の非線型バネから成る結合振動子系の数値実験を行い、この数値実験は今日言うところの非線型結合を持つ有限多体系(ハミルトン系)におけるカオス的振る舞いと再帰現象のシミュレーションに相当するわけですが、「振動モード間のエネルギー移動は一見複雑に見えるが、Fermiらの予想に反し、ある時間間隔で初期振動励起モードにエネルギーが集中する再帰的な現象」を「発見」しました。この現象は当時、Fermiの再帰現象と呼ばれ、その後のソリトン等の物理分野へ大きな影響を及ぼしています。Fermiほどの理論研究者が計算機実験により「予想に反した発見」を行っていることに驚きます。

分子科学の分野では、1958年頃B. J. AlderとT.E. Wainwrightらは多数の分子の古典的な運動をシミュレーション (今の言葉で言えば分子動力学計算)

により研究していました。斥力だけを及ぼしあう剛体球(模型を用いた)分子の集まりに圧力を加えていくと、無秩序な状態(流相)から秩序ある状態(固相)に相転移することを数値実験によって初めて見いだした数値実験(B. J. Alder and T. E. Wainwright, "Phase transition in elastic disks", Phys. Rev. 127, 359-361 (1962).)は「Alder転移」として今日では物理の教科書にも載っています。今日では気相・液相間相転移では引力が支配的な役割を果たし、液相・固相転移では斥力が重要な役割を果たしていることが知られています。

前置きは、さておき、これらの数値実験例は、いずれもコンピュータでの大規模計算により予期されなかった現象が発見された好例です。現在のパーソナルコンピュータにも遙かに及ばない能力のコンピュータによりこのような基本的な発見がなされたことはとても驚きます。実験科学は、実験データや観測データを「帰納的に」分析して何らかの法則性を見だしモデル化を行うという方法論が根幹ではないでしょうか。一方、理論は、既存のモデルを改良・解析したり、自ら法則や原理を提案した上で、その論理的帰結を「演繹的に」推論する研究手法が多く見られます。これに対して、計算科学では、前の例で示したように、観測を通じた「予期せぬ発見」があります。計算科学は第一原理(理論)やモデルに基礎を置く点では理論科学に類似し、データ

を帰納的に分析する点では実験科学に近い点、どちらでもない第三の科学と呼ばれることもあります。

言うまでもなく、コンピュータ・シミュレーションは、多くの構成要素から成る系の振る舞いを、構成要素間の基本法則に従ってコンピュータで計算し、そのマクロな振る舞いを観測する手法です。ここで基本法則になら数学的または経験的な近似を用いずに(ある意味では)力づくで基礎方程式を数値的に解く方法を特に第一原理シミュレーションと呼ぶことがあるようですが、理論化学・理論物理の背景なしには困難です。対象が連続系と見なしうる場合は、(時空の)離散化により多くの要素に分解した上で、コンピュータで操作可能な離散データに変換した後にシミュレーションを実行することになります。ここで構成要素間の基本法則をマイクロ法則と呼ぶことにすれば、計算によりマイクロからマクロを予言するのがシミュレーションの方法論であるとも言えなくもないでしょう。例えば、分子動力学シミュレーションにおける「分子」は構成要素であり、分子間力に基づく多体系古典力学はマイクロな基礎方程式で、同様に天体シミュレーションにおける「惑星」もここではマイクロ要素として考えます。基礎方程式は分子動力学と同じく、多体系古典力学または求める精度と目的に依っては電磁輻射を考慮したり、一部に相対論的補正を行った多体問題です。電子状態計算の例では、「電子」



を構成要素として分子全体の電子状態を Schrödinger 方程式によって解いており、この場合は解析したい分子の諸物性がマクロ量となります。このような意味で、計算シミュレーションは“構成的手法”であるとも言われます。また、解けるかどうかには、計算機科学（ハード、通信・基幹ソフト、ツール類）、計算量理論、アルゴリズム論、数値解析、応用数学といった近接境界分野の研究者と協力することも必要であった（特に欧米で）歴史には学ぶべき姿があるように思います。

おわりに私が九大に移ってから始めたシミュレーション手法の一つとしての連成シミュレーション手法について触れたいと思います。シミュレーションの対象は粒子と連続体の双方が関係する問題や、複数の物理法則が絡んだ複雑な系が多いのは疑問の余地はありません。また、時間や空間スケールの異なる物理現象が互いに関わっている問題があります。これらは、Multi-Physics問題とか Multi-Scale問題と言われ、実験的手法や純粋理論手法でも扱いが非常に困難です。このような複雑系を対象とする計算シミュレーションでは、ミクロ階層からマクロ（全体系）を構成するプロセスを一旦、階層化する作業が必要です。すなわち系全体を複数の部分系に（再）構成し、まず部分系についてそれを支配するミクロ要素と基礎方程式に従い部分系を正確に解くことから始めます。次に部分系を代表する（と思われる）中間物理量を、部分系“相互を”結びつける外部パラメータとして導入し、全体が無矛盾となるまで部分と全体のシミュレーションを繰り返す手法が連成問題にはよく使われています。このような階層化による計算手法は“構成的手法”ならでの利点です。連成手法では部分系を代表する（と思われる）中間物理量を如何にして選択するか、またどのように他の部分系にその物

理量を取り込むかが鍵となります。例を挙げると、真空中の分子の電子構造を厳密に解く手法と、溶媒分子を統計力学的に解析する手法を結合させ、溶媒中のタンパク質分子の挙動をシミュレーションするなどがあります。また細部（亀裂などの注目部分）を分子動力学シミュレーションによって解析し、全体を有限要素法に基づく構造力学シミュレーションで扱いながら構造変形や亀裂の問題を扱ったり、大気シミュレーションと海洋シミュレーションを組み合わせ、台風の進路を数値予想したり、全地球規模の連成シミュレーションを行うなどがあります。溶液の例では遠方（溶媒側の）分子の形や分子個々の性質をいったん捨象し、分布関数という統計的な物理量で「疎視化」しているとも考えられます。また構造力学の問題でも、変形や亀裂が起こっていない部分では分子レベルのシミュレーションを行わずに、多粒子からなる固体結晶を連続弾性体として疎視化しています。大気海洋シミュレーションでは、界面における保存量に着目し中間物理情報を交換しています。わたしは、この連成シミュレーション手法の一般化について考え始めてまだ間もない段階ですが、空間次元の疎視化、接合面の（ある意味近似的）保存量と接合の対称性、時間次元では断熱性（時間軸での疎視化・平均化）という比喻が過ぎるかもしれませんが、いかにして、大自由度部分系の“ゆっくりした運動”を抽出して、もう一方の系に伝えるかに注目しています。分子研時代に計算センターや理論研究系との交流で学んだことが大きく役立っています。

連成シミュレーションにおいては、各部分系の背後にある物理理論（またはモデル）が異なるため、中間物理量の交換は当然のことながらユニークではない場合が少なくありません。ある場合には中間物理量の「意味の変換」が必要となり

ます。わたしは、前述のような溶液内タンパク質や界面の問題では、系の振舞いに長距離相関が支配的でなく、部分系の深部に他の部分系が介入することが無い場合に限って（界面の一意性）、それぞれの部分系を担当するシミュレーションプログラム間でのデータ量と情報交換の頻度が部分系の演算量に比べ低く抑えられることがかなり一般的に成立すると予想しています。かなり大胆な表現で恐縮ですが、連成問題（としてとらえること）は、裏にある物理法則の階層性の探求にも関係していると信じています。また情報科学的な視点からは、離散化手法や通信アルゴリズムの改良により通信遅延を隠蔽できる可能性を秘めている点から、ヘテロな計算機資源を活用する計算科学や将来のグリッドコンピューティング手法も少し模索しています。

最後に繰り返しになりますが、計算科学の1領域としての分子計算科学においても、これからのベタスケール時代を見据え、計算機科学（ハード、通信・基幹ソフト、ツール類）、計算量理論、アルゴリズム論、数値解析、応用数学といった近接境界分野の研究者との縦階層間の交流、そして構造数値解析、流体、天文、気象、電磁波、などの計算科学諸分野との横型の学術交流がこれまで以上に盛んになることを期待しています。

#### 謝辞

本稿を書くにあたって、工学院大学の小柳教授（前、東京大学）から教えていただいた計算科学全般に関する書籍や教授ご本人の随筆を参考にさせていただきました。また計算機科学と計算科学の接点では九州大学 村上教授（専門は再構成可能LSIの設計とHPCへの応用）と国立情報学研究所の三浦教授（NAREGIグリッドプロジェクト代表）との議論が多いに役立ちました。これらの先生に厚く御礼申し上げます。



## 理工系学生のための英語教育のすすめ



### 西原 康師

(岡山大学大学院自然科学研究科 准教授)

にしはら・やすし / 1992年3月 広島大学理学部化学科卒業後、同大学大学院理学研究科化学専攻修士課程、総合研究大学院大学数物科学研究科機能分子科学専攻博士後期課程単位取得退学、日本学術振興会特別研究員、東京工業大学資源化学研究所助手、岡山大学理学部化学科助教授、岡山大学大学院自然科学研究科(理学系)助教授を経て、2007年4月より現職。2006年1月より新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)「産業技術研究助成事業」を兼任。

あれから16年。まったく月日のたつのは早いものである。

先日、分子研(総研大)OBとしての寄稿を櫻井英博先生に依頼された。一瞬躊躇したが、卒業生としての多少なりとも義務感を感じたので観念してお引き受けすることにした。しばし駄文にお付き合いいただければ幸いである。

### 海外での大学院入学を目指した学部生時代

1991年当時、私は広島大学理学部化学科の4回生であり、助教授になられたばかりの中沢 浩先生(現在 大阪市立大学教授)に師事して錯体化学に関する卒業研究をおこなっていたが、研究室において英語の重要性を再認識した。特に、研究室が招へいした外国人研究者の講演内容(講演は言うまでもなく英語で行われる)がほとんど理解できなかった日には悔しくて眠れなかったことを思い出す。この時から海外に留学したい、できることなら海外の大学院に入学したいという野望が膨らんでいった。元々英語は好きではなかったが、研究室に配属して以来、将来化学で飯を食っていくのならいずれ英語は必要になるという半ば諦めを伴う危機感を抱き、実験の空いた時間を利用してよく屋上で「ラジオ英会話」を聞いたものだ(冬は寒かった)。

### いざ分子研へ

そんな中、私が分子研を最初に訪れたのは1991年11月下旬のことである。中沢先生が海外の大学院に行くのなら日本人の先生のところが無難では、との考えからアメリカ パーデュー大学教授である根岸英一先生(現在も72歳の現役教授)が、当時、分子研錯体化学実験施設の助教授だった高橋 保先生(現在北海道大学触媒化学研究センター教授)を訪問されるというので、滞在期間内に分子研を訪れ、海外留学を含めて根岸先生に色々相談する機会をセッティングしてくださった。私は、その有難い提案に甘え、その数日後、分子研に向った。東岡崎駅から分子研に向う途中、「研究所」とは一体どんな感じの場所なのだろう、まあ大学と同じような感じかな、などと勝手な想像をしながら分子研の正門から構内に入って驚いた。とにかく建物は極めて立派で広いのだが、構内(建物外)にほとんど人が歩いていないのである。当時は電子メールもない時代なので中沢先生の手書きのメモを片手に高橋先生のお部屋を多少迷子になりながら探し出し、高橋先生への挨拶を終えて部屋に通されるとそこに根岸先生がいらっちゃった。私の意向を根岸先生に説明すると、パーデュー大学の大学院入学に際して根岸先生から以下の2つの条件が提示された: 1) TOEFLで最低620点は必要であること、2) アメリカの大学院は博士前期・後期一貫なので博士号取得には通常5年かかる、というものであった。

つまり、日本の修士課程を修了したところで入学しなすと、そこから5年要するので博士号取得するころには30歳近くになっていることになる。理想と現実のギャップを目の当たりにし、海外大学院入学の夢が一瞬にして崩れ去った。いろんな意味で自分が何も知らないことを認識し、失意とともに広島に帰った。

### それでもやはり留学の夢は捨てきれない、そして、実現へ

広島大学の大学院に入学し、M1の学生として初めての学会発表を終えた1992年9月下旬のことである。広島市内に実家のある私は、週末に奈良女子大学でおこなわれた「錯体化学討論会」終了後、月曜日の午前中に広島市内のホテルに海外からの講演者を迎えに行っただけで一緒に東広島市に移転したばかりの広島大学に来るように中沢先生に厳命されていた。それにもかかわらず、学会参加前に依頼されていた上記の内容について、初めての学会発表を終えた安堵感からかすっかり忘れてしまったのである。何気なくいつもの調子で中沢先生に「おはようございます」と挨拶をすると「やけに早いな。お連れした先生はどちらに?」と。最初は何のことだかピンと来なかったが、そのうち自分のしでかした大変な失態に気付くが後の祭り。至急ホテルに電話をして改めて広島市内に自宅のある三吉克彦教授が直接、先生をお迎えにくという事態になってしまった。午後近

くになってようやくその先生が研究室に到着された。もちろん、私の失態はその先生に説明されており、研究室にお越しになられた際に挨拶したが、極めてバツが悪かったのを今でもはっきり覚えている。しかし、人生とは不思議なもので、この先生がその後、M1の冬から11ヶ月間お世話になったアメリカ ノートルダム大学のFehlner教授である。しかも毎月1000ドルの滞在費を援助していただきながらの滞在なのだから信じ難い。

### アメリカで高橋先生と再会

アメリカ滞在中の1993年4月、滞在3か月目を迎えようやく生活にも慣れてきた頃、アメリカ化学会の春季年會に参加されていた高橋先生から連絡をいただき、シカゴ空港でお会いすることになった。約1年半ぶりの再会であったが、高橋先生は私のことをよく覚えてくださっていて、今後の進路について色々相談にのっていただいた。その頃、違う分野の化学をやってみたいと思っていた私にとって、高橋先生の研究テーマである「ジルコノセン錯体を用いた有機合成」は非常に魅力的なものであったが、それ以上に私がその後、博士後期課程の学生として入学することを決意させたのは、高橋研究室の特色にあった。当時（現在でもそうだが）高橋研究室には外国人が常時2-4人いて、研究室でのミーティングはもちろん、会話もほとんど英語でおこなっているという点であった。様々な葛藤があったが、結局、再び分子研の門をたたくことを決意した。1993年9月のことである。

### 分子研での学生生活

分子研での研究生活で驚いたことは、実験室と居室が1階と3階にそれぞれ分

かれてあって、そのたびに階段がエレベーターをつかって移動すること、居室には現在使っている机より大きな机が学生1人ひとりに与えられ、十分な実験スペース、居室スペースがあったこと、(実にくだらしないかも知れないが)冷暖房が完備されていたこと、などである。

今から分子研（高橋研）での研究生活を振り返ると、まさにかげがえのない人々との繋がり、研究者として必要なものを学んだ日々を回想する。当時、錯体化学実験施設には2年間の「流動部門」という研究室が2つあったが、1つは、私が修士までお世話になった前出の中沢助教授であり、もう1つの研究室が、私が現在所属している岡山大学理学部化学科の前学科長である吉川雄三教授（岡山大学名誉教授）であった。今から考えるとこれもまた不思議な縁である。1994年4月から高橋先生が北海道大学の教授に昇任された1995年11月までの約1年半、分子研で研究に没頭できる充実した生活を過ごした。

### 自分が歩んできて良かったことを自分の学生にも

私は、その後、北海道大学へ受託学生として異動し、総研大生を中退して東京工業大学資源化学研究所助手となり、4年前に今の岡山大学に助教授として着任してきた。研究内容はさておき、現在おこなっている研究室運営、学生に対する英語教育について残りの紙面を割きたい。岡山大学に着任してすぐに始めたことは海外の大学とのネットワークを形成することであった。もちろん、研究室、ひいては学部、研究科、岡山大学の学生を送り出す、あるいは、受け入れるためである。高橋研究室で一緒だった北京大学化学学院の席 振峰教授や旧知の友人である国立台湾大学の陳 竹亭教授の協力の

もと、部局間協定、大学間協定をそれぞれ締結した。それらを利用してこれまでに当研究室の大学院生3名を2-4か月間派遣し、2名受け入れた。帰国後、派遣した大学院生の英語力が少なからず向上していることを実感できることが最大の喜びである。彼らは彼らなりに現地で慣れない文化に触れながら、同年代の友人をつくり、違う分野の化学と格闘しながら英語力を磨いて戻ってきたのである。

### 東アジアとの連携

私は、理工系の研究者にとって英語とは学問ではなく、あくまでお互いにコミュニケーションをとるための手段であると思っている。実際、私の話す英語など文法も出たらためて単語の羅列であることも多い。しかし、通訳を介して話をすると直接相手の目を見ながら自分の言葉で自分の意思を伝えることには大きな差があると思う。先日、北京大学の学生に学位取得後の進路を聞いたところ、1人はアメリカに、もう1人はドイツにボストクに行きたいと答えた。そして、その理由として「日本の化学の質が高いことはよく知っているが、日本に行っても英語が上手にならない」ことを挙げた。これが現実である。昨今、学部教育、大学院教育の改革が叫ばれて久しいが、同時に英語教育も見直すべきである。東大・京大などのトップの大学は、国内の他大学から学生を獲得するのではなく、アジアの優秀な学生を確保できるような魅力ある大学院にならなければいけないと切に思う。設置意義に多少反するかもしれないが、分子研のように最先端の研究をおこなっている機関、ひいては総研大も海外、特に東アジアから優秀な人材を確保、育成する機関としての一翼を担うべきである。日本における英語教育の遅れが海外からの有能な人材の確保を妨げているような気がしてならない。



## 分子研を去るにあたり

### 01 個 達哉

北海道大学 触媒化学研究センター 教授  
(前 物質分子科学研究領域電子構造研究部門 准教授)



## muddle through —分子研での日々を振り返って—

つくだ・たつや / 1989年東京大学理学部化学科卒、1994年同学理学系研究科化学専攻博士課程修了、理化学研究所基礎科学特別研究員、東京大学大学院総合文化研究科助手、2000年より分子研助教授を経て2007年10月より現職。同じく分子科学研究所物質分子科学研究領域教授（兼任）。

各界で活躍されている人達が如何にして目標を成し遂げたかを紹介するテレビ番組をご存知でしょうか。恥ずかしながら、私はこの手の番組が大好きで、人目につかない努力や人知れず流した涙を垣間みることで、自分の目前に立ち足る困難や壁に立ち向かう気力を奮い立たせています。その番組のなかで、過去の奮闘ぶりを「muddle through」と表現している方がいました。きちんと辞書をひいた訳ではありませんが、この言葉からは、泥まみれになりながらも強い意志で前へ前へと進もうとする強い意志が感じられます。分子研でお世話になった7年9ヶ月の日々を振り返ってみると、これ以上に的確に表現する言葉はなかろうと思い、拙文のタイトルとして拝借しました。

東大駒場の永田研で助手をしていたころ、クラスター科学の面白さを感じながらも、今後自分はこの分野でどんなことが出来るのだろうか、漠然とした不安を感じていました。すでに活躍されている一流の物理化学者、分子科学者の先生方に混じって、頭脳が明晰とは言えない自分が一体何をなし得

るのか、答えが見つからず悶々としておりました。あるとき永田先生が、戸嶋先生と米澤先生のコアシェル型合金クラスターに関する解説文を紹介してくださって「コロイド科学の分野ではこんなことまで出来るんだね。君、ちょっとこういうので遊んでみたら（不謹慎に聞こえたらすみません）？」と声をかけてくださいました。見よう見まねで金属ナノ粒子を作るうちに、クラスターを実際に目で見える化合物として作れることに興奮と可能性を感じるようになりました。それまで抛り所としてきた「クラスターのサイズ依存性」に対する偏質的とも言えるこだわりさえ固持し続ければ、自分なりの居場所を見つけられるのではないかと、思い込んでしまった瞬間でした。その熱い意気込みを抱いて分子研の助教ポストに応募したところ、独立して研究をする機会をいただきました。提案内容に関して全く実績のない私を採用するのは分子研としても非常に勇気のいる決断であったことは想像に難くありませんが、そのご英断に今はただ感謝の念で一杯です。

着任して、いざ研究を始めてみると、自分の考えが如何に甘かったかをいやというほど味わいました。実際に自分で出来ることは前に行く誰かの物まねに過ぎず、本当にやりたいことは難しすぎて出来ない、という状況にはまり込んでしまいました。成果は出ないし、外部資金も獲れない、勢いにまかせて退路は断ってしまっているのに逃げ道もない。自分の目指すゴールに近づいているのかどうか確信のないまま、ともかく前に進むしかないという状況でした。あまりに精神的にきつかったのでしょうか、私には当時の記憶がほとんどありません。この泥沼からどうにか抜け出すことができたのは、茅前所長、中村現所長をはじめとする所内の先生方、技術職員・秘書・管理局の皆様、そして所外の先生方が私を見捨てることなく継続してご支援していただいたお陰だと思っております。この場をお借りして厚くお礼申し上げます。また、ともに奮闘してくれたグループのメンバー、特に根岸君というタフで強力なエンジンがあったからこそ、当初には想像できなかったレベルにまで

研究を進めることが出来ました。研究室の立ち上げの頃に我々が試みた（結局失敗に終わる運命の）試行錯誤の数だけは、多分世界的にみてもトップレベルにあると自負しています。研究を好転させるきっかけは、今から思えば当たり前のことでしたが、それに気づ

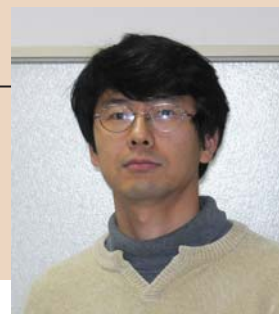
くのに（神から？）課せられた時間と労力であったのだらうと思っています。これからも自分の感性に忠実に、自分という人材を生かすという点に執着しながら、分子科学の発展に対して少しなりとも貢献ができればと願っております。今後ご指導ご鞭撻よろしくお

願いいたします。

最後に、岡崎で一緒に築き上げた生活基盤を投げ打って札幌についてくれた家族に感謝しつつ、この駄文を終わりにしたいと思います。有り難うございました。

## 02 渡邊 一也

京都大学大学院理学研究科化学専攻 准教授  
(前 分子制御レーザー開発研究センター 助教)



### 分子研での思い出

わたなべ・かずや / 1997年大阪大学大学院工学研究科博士後期課程修了（応用物理学）、1997年4月より分子科学研究所電子構造研究系基礎電子化学研究部門助手、その後、総合研究大学院大学先端科学研究科助手、分子科学研究所分子スケールナノサイエンスセンター助手、分子科学研究所分子制御レーザー開発研究センター助教を経て、2007年11月より現職

1997年4月から1999年3月までの2年間、そして2004年6月から2007年10月までの約3年半、分子研で仕事をさせていただきました。はじめは電子構造研究系（当時）所属で、1階の同年代の人達との議論が楽しい刺激でした。また教授・助教授の先生方はもちろんですが、先輩の助手の方々も既に世界に誇る成果を上げておられ、まだこれという成果のない自分は一体何をしているのかと、自問する日々でもありました。門外漢であった私に表面科学の手ほどきをしてくださった松本先生はじめ当時の松本Gのメンバー（渡邊量朗さん、穴澤俊久さん、木下郁雄さん、加藤浩之さん）には感謝の言葉もありません。グループ外でも特に間瀬先生（現KEK）にはCMA分光器製作講習会を開いていただくなどお世話になりました。松本先生には採用決定の日地に地久庵でカツ丼を食べながら、分野の近い人を採ると1+1=2になるかもしれないが、異分野の人を採ったのは

1+1→10の可能性に賭けたのだという趣旨の言葉を言われたのを記憶しています。雇っていただいた時点で自分の使命は超高速分光を表面科学に適用して、ダイナミクスの研究を行うことだと考えていましたが、はじめの2年間は表面科学の一般的手法をなぞるだけで過ぎていった感があります。総研大（葉山）にグループが転出後漸くそれらしい成果が出てきたところで、再び分子研に戻る機会をいただきました。2004年に戻ったときは分子スケールナノサイエンスセンター所属となりましたが、期せずして居室は再び明大寺研究棟1階となり、しかし昔見知った同年代の人達は皆他所にご栄転された後で、一人浦島太郎的な気分を感じたのを記憶しています。

戻ってからの3年強は自身の研究に加え、他のグループの方々（特に大森G、宇理須G、佃G、横山G）と共同研究をさせていただく機会に恵まれ、大変お世話になりました。自身の力不足で在

籍中に目覚しい成果にはつながらなかった場合もありましたが、このきっかけを種にして今後の研究で新しい方向性を生み出せればと考えています。また、他にも多くの方々との刺激的な議論によって、多大な影響を受けました。分子研で知り合った方々とのつながりが一番貴重な収穫であり、これからも新しい共同研究の可能性も含めて密接な関係を維持したいと考えています。自分の研究では、表面反応の光制御を何らかの形で実現することを1つの目標に掲げていたものの、未だ道半ばという感で去ることになり心苦しい限りですが、今後分子研で育てた種を开花させることで恩返しさせていただくつもりです。

最後になりましたが、分子研に戻ってからの立ち上げ・日々の研究を共にしたグループのメンバーの皆さんには本当にお世話になりました。この場をお借りしてお礼申し上げます。

## 03 持箸 晃

財団法人高輝度光科学研究センター 加速器部門 研究員  
(前 分子科学研究所極端紫外光研究施設 助教)

## 分子研を離れるにあたって

もちはし・あきら／修士（物理学）（'98年3月・筑波大）、博士（理学）（'01年3月・大阪大）。'00年1月～'01年7月 日本学術振興会特別研究員（DC2, PD）。'01年8月より'07年8月まで分子研UVSOR 助手（助教）。現在、財団法人高輝度光科学研究センター（JASRI）加速器部門・研究員。大型放射光施設SPring-8において、主に相対論的電子ビームによる光発生の研究・電子ビーム運動学・ビーム観測研究に従事しています。

私は2001年8月に分子科学研究所極端紫外光研究施設（UVSOR）の加速器グループに着任し2007年8月いっぱいまでお世話になりました。在任期間は6年余りでしたが、振り返れば長いようであっという間だった気がします。

UVSORは比較的小規模な加速器施設ながら、線形加速器・ブースターシンクロトロン・ストレージリングを備えており、この構成は施設の規模に関わらず世界中の多くの放射光源加速器に共通するものです。分子研では、これら加速器群を日常的に手で触り運転するという大変貴重な機会を得、加速器科学の専門的知識に加えて総合的理解を深めることができました。少人数ながらこれら加速器群の運転維持管理はもちろんのこと、加速器要素開発や先駆的な光源開発研究を推し進める加速器グループでの6年間は大変素晴らしいものでした。

在任中の2003年には、ストレージリングと入射器電子銃をほぼ完全に更新す

る内容の高度化改造が行われました。既設機器の撤去から始まり、ほぼ更地の段階から加速器を構築する場面に居合わせる事ができたのは大変貴重な経験でした。構築作業と一連の調整を経てUVSORは今の姿のUVSOR-IIへ新たに生まれ変わりました。これほど大規模な改造を比較的短期間で行うことができたのは、改造計画に携わった一人一人の尽力の賜物ですが、同時にこれはチャレンジングで前向きなUVSORの姿勢を象徴しているように思えてなりません。

光源加速器開発と並んで放射光利用研究においてもUVSORは世界的な業績を次々と挙げていますが、そのアクティビティの高さもまたUVSORのチャレンジングで常に前向きな姿勢の表れではないかと最近思います。これは、小規模施設ならではのフットワークの軽さもさることながら、新たなチャレンジを後押しする施設スタッフの姿勢も大きな要因であると思います。UVSORは加速器グルー

プと観測系グループ、施設スタッフと外部利用者との距離が短く、緊密に情報交換ができる環境でした。ざっくばらんな話の中から新しい着想が生まれてくることもあり、時には積極的に共同研究することもありました。自分のカバーする分野に捉われず興味の範囲を広く持つことの重要性を認識させられたことが多かったように思います。

そんなUVSORから離れ、現在は財団法人高輝度光科学研究センターの加速器部門に在籍し、SPring-8放射光施設において光源開発研究に従事しています。SPring-8は世界的な大規模放射光施設で、UVSORとは規模・人数ともに大きく異なる環境です。しかしながら、毎日の研究活動の中で、UVSORで培った経験と知識は随所に生かされていることに気付かされます。UVSORでの6年間、とても楽しく充実した時間が与えられたことに感謝したいと思います。

## 04 山田 陽一

理化学研究所 基幹研究所 物質変換研究チーム  
副チームリーダー (前 生命・錯体分子科学研究領域 助教)

## 夢のような岡崎での生活

やまだ・よういち / 1970年東京生まれ。東京大学薬学部卒、東京大学大学院薬学系研究科博士課程修了(博士(薬学))。帝京大学薬学部助手、スクリプス研究所リサーチアソシエイト、分子科学研究所助手(助教)を経て2007年10月より現職。有機合成化学協会研究企画賞、井上研究奨励賞、日本薬学会奨励賞、Thieme Chemistry Journal Award、Tetrahedron Most Cited Paper 2004-2007 Award受賞。

分子研での4年間はまさに夢のような生活でした。

研究のことを考え、自分の手を実際に動かして研究を遂行し成果を出す、この研究者として最も大切なことを実際に遣らせてくれたのが、ボスであった(今も理研で私の上司ですが)魚住泰広教授であり、分子科学研究所でした。「先生、僕は昇進できないこと以外、全く不満がありません。」と、かつて魚住教授に言ったことがあります。かつて大学で助手をしていたときに悩まされた雑用を始めとした様々な研究以外のことに苦悩することなく、研究のことを思う存分楽しませてくれ、若い時期に必死で研究だけを考えて暮らすことができたこの環境は、研究者山田陽一にとって夢のような生活に他なりませんでした。

岡崎に引っ越してきて岡崎城に赴き、徳川四天王である本多平八郎忠勝の像を眺めながら、自分の息子の名前をこの本多忠勝から名付けた私は不思議な因縁を感じました。息子を介して私と岡崎が繋がった、そんな想いから

スタートした私の岡崎生活でした。伸びやかな街、岡崎。郊外に行けば蚩狩り、海水浴、トレッキング、温泉(およびゴルフ)が楽しめる自然豊かな西三河。三河湾からあがる新鮮な魚介類、地場野菜・果物を始めとした豊かな食事。都会っ子である私は東京が恋しくなったり、海外勤務先だったサンディエゴのカリフォルニアの青空、碧海を懐かしく思ったりしましたが、岡崎の豊かな風土を家族ともども満喫することができました。

研究では最初の1年数ヶ月はグツとくる結果が出ず苦悩しました。しかし、ぶれる事無くネチネチと研究をおこなっていたある日、電子レンジ反応器でドンという音と共に反応が起こりました。そのサンプルをガスクロ分析したら、「これができたらとっても嬉しいな、でも出来るわけないな」という生成物のピークが現われました。あの時の鳥肌が立った武者震いの感覚はいまだに忘れることができません。あれがあるから研究って止められないんだよね。

分子研で出会えた仲間感謝しています。助手会(現若手会)で勉強会を行ったり酒を飲んだりして、あーでもないこうでもない、と議論をしたり、全然解らない他分野の研究について教わったり、酔った勢いで飲み会に参加して下さる所長に意見をぶつかけたり、と若手会で得られた刺激は私にとってまさに財産です。仕方ないことで分子研の若手は分子研に対して帰属意識は持ちませんが、分子研OB、OGのネットワークは意義深いものです。今後とも宜しくお願いしますね。

理研での私の立場は、5年プロジェクトの魚住研究室の番頭とか治安維持軍の親玉であるそうです。ということで、ガンガン研究をして研究生生活を楽しむとともに、自分にとって納得できる研究を行い、皆さんにも納得して頂けるようにしたいと思っています。グツとくる研究を行う、というのが目指し続けているキーワードです。それでは、会ったときには酒を飲みながら楽しい話をしましょう！



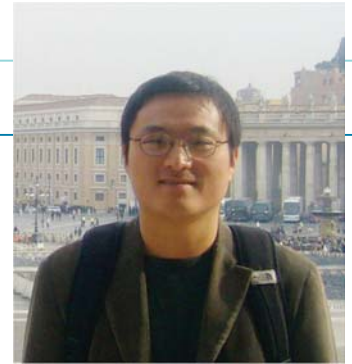
## 外国人研究職員の紹介

### Prof. JANG, Joonkyang from Korea

Jangさんは韓国で1967年に生まれて、1990年にソウル国立大学を卒業、1992年に同大学の修士課程を修了して、兵役に2年間従事しました。兵役後再びソウル国立大学でしばらく研究に従事して米国に行き、2000年にブラウン大学で博士の学位を取得しました。その後、ノースウエスタン大学で3年間博士研究員をして、2003年に韓国に帰国して釜山国立大大学ナノサイエンス・テクノロジー科の准教授になり、2006年よりナノマテリアル科の准教授をされています。Jangさんは若い頃は数学が非常に苦手でしたが、数学と物理の重要性を認識して、これらを基本とした溶液の研究を展開しています。最近では量子化学的な研究アプロ

チにも大きな興味をもっています。また多彩な趣味をもっていますが、何よりも愛妻家で家族のことを最優先にされます。

分子研では「カテコールのシリカへの吸着の理論的研究」を予定しています。ムラサキイガイ（食用の海産二枚貝）の吸着タンパク質の異常に高い吸着能は、DOPA (amino acid 3,4-dihydroxyphenyl-L-alanine) の存在によることが知られていますが、DOPAのカテコールが吸着能に特に重要な働きをします。この吸着能を明らかにするために、水共存下でのカテコールのシリカへの競争的吸着過程の詳細を理論的に明らかにすることを計画しています。これまでの研究業績が



示すように、ナノマテリアル理学と工学を専門とするJangさんは溶液および固液界面の統計的研究およびモンテカルロシミュレーションで面白い成果を上げてきています。これに我々の量子化学的手法を組み合わせることにより、固液界面のナノサイエンスの理論研究の興味ある展開ができることを楽しみにしています。また、Jangさんは水泳を毎日されているようなので、一緒にフィットネスクラブに行けることも大いに楽しみにしています。

(永瀬 茂 記)

### Prof. Aref Chowdhury from U. S. A

平成20年度に来研予定のDr. Aref Chowdhuryは、1994年に米国のNew York州立大学Honors Collegeから電子工学と応用物理学の2つの工学学士を取得の後、1995-1997年の期間にはAlcatelにおいて上級技師として勤務されました。2001年にはWisconsin-Madison大学より“特殊な空間-スペクトル特性を有する非線形光学構造”についてPh.D.を取得され、その後Bell研究所においてDr. Richard E. SlusherをリーダーとしたOptical Physics DepartmentにおいてTechnical staffとして所属、非線形光学とファイバー光学、特に新材料を用いた位相共役、非線形光学波長変換を中心とした研究に従事されました。その間の、顕著な成

果としては、GaNの極性選択エッチング法を見出し、自発分極を持たないGaNの擬位相整合(QPM)構造の作製に成功、世界に先駆けGaNのQPM-SHGをはじめて実証されました。この成果は2003年に奈良で開催された5<sup>th</sup> International Conference on Nitride SemiconductorsにおいてLate News Paper in 2003として発表を行い大変注目されました。また、これはGaNナノチップ・ピラミッドによるフォトニック結晶、すなわち非線形補償としての位相共役による二次元非線形フォトニック結晶も可能と期待されています。

最近では、負屈折率材料やこれによるメタマテリアルにも興味を持たれ、三波、四波混合による非線形効果補償、長波・

短波共鳴効果に関する研究にも着手されるなど、注目される若手研究者であります。

Arefさんは、これまでに35歳以下の部門における若手優秀研究者としてMITテクノロジーからMIT TR100 Young Innovator Award (2004)を受賞した他、7件の国際会議招待講演を依頼されるなどの栄誉も受けられています。

今回、約三ヶ月の間分子研に滞在されて研究されるので、私どもの研究室のマイクロ固体フォトンクスに関する研究、特に紫外域やテラヘルツ波領域における新たな非線形波長変換材料としてのワイドギャップ半導体によるQPM素子に関する研究について新たな研究の展開がもたらされることを期待しています。(平等拓範 記)



## My memorable two years in IMS

Nirmalya Kumar Chaki

It is a great privilege for me to share my wonderful experience of my two years stay at IMS, Okazaki. I started working at IMS in Prof. Tsukuda's Laboratory as a visiting researcher from the middle of October 2005, soon after submitting my doctoral thesis in India. I have been continuing as an IMS postdoctoral fellow from April 2006 till date. I completed my doctoral studies from National Chemical Laboratory, Pune, India. My doctoral thesis was devoted to the electrochemical studies of metal nanoclusters and their applications. In IMS my main research activities were to establish electrochemical studies of sub-nanometer sized gold nanoclusters. These are a novel class of model materials to understand the size-dependent evolution of electronic properties in nanoscale size-regime. I have also been involved in several other ongoing exciting research programs in Prof. Tsukuda's laboratory, such as catalysis by gold clusters, precision synthesis and mass-spectrometric analysis of magic-numbered alkanethiolate-protected gold nanoclusters. These two years of postdoctoral work in IMS has given me a fabulous opportunity to learn new science and to handle several new

instruments, thereby enabling me to broaden my research activities.

IMS has an excellent scientific environment due to the presence of plenty of internationally reputed scientific groups. This, in combination with a variety of modern instrumental facilities, excellent academic library and supported by very helpful and efficient administrative staffs makes it a scientific institute par-excellence. The seminars and symposiums, organized by IMS on a regular basis, give an excellent opportunity to interact with several international research groups and broaden one's exposure. The online library facility of IMS is very helpful for researchers to keep an easy track of the progress in their related fields. Beside the scientific aspect, in IMS there are plenty of congenial occasions I received to meet, discuss and share my views with several of members of IMS. Finally, I must convey my appreciation for the excellent accommodation facilities that IMS provides for foreign researchers.

My visit to IMS is very special not only for my research, but also for my daughter. She came here when she was 5 months old and has now started speaking in Japanese. I would like to also take this opportunity to thank all of the staffs and management committee members of Sakura day care center for their extreme care and hospitality of our daughter. I can never forget the Okazaki town



for its natural scenic beauty. We have enjoyed the sakura blossoms, fireworks, red maple leaves or mild snowing and these will be etched in our memory for a long time. We, as a family enjoyed an unforgettable and memorable Japanese life.

I am deeply indebted to Prof. Tsukuda for providing me a great chance to work in his group at IMS. I could discuss with him any problem, about science or life and every respect these discussions were very crucial to make important decisions. I would like to offer my sincere admiration to him for all his kind help and extreme hospitality. I hope that he is pleased with my work and wish to maintain a long term future scientific collaboration. I would like to thank all my lab members for their kindness and helping nature. I learnt the operation of several instruments and always enjoyed the lively scientific and personal discussions. I would also like to thank to all the members of the Department of Materials Molecular Science and Research Center for Molecular Scale Nanoscience for all of their kind helps and discussions. I wish all the members of IMS every success in both their scientific and personal endeavors.

## Wonderful research and experience in Okazaki

Hojun IM

I am a research professor at Sungkyunkwan University (SKKU), Korea, and am now here as a visiting researcher since Oct. 2006. In fact, I came here four years ago as a PhD student of SOKENDAI at Kimura group of UVSOR-II. Therefore, I would like to start the writing remembering the period of SOKENDAI. I have studied the strongly correlated electrons systems, especially, heavy-fermion systems, since the master's course. When I was a master student at Kwon group of SKKU, I had made new rare-earth intermetallic compounds and had studied their physical properties by thermodynamic experiments. During studying them, I had attracted a powerful technique of spectroscopy to observe electronic structures. This is why I had come here as a PhD student. As a result, my choice was right. When I first came here on Oct. 2003, it was very impressive that both laboratory and synchrotron experiments are carried out at the same place, IMS. In addition, it was lucky for me that there was a good supervisor, Prof. Shin-ichi Kimura. These provided a good opportunity of the advanced research. Actually, I have challenged a new subject, "understanding of quantum criticality in heavy-fermion systems by photoemission spectroscopy", and obtained good results; for the

first time, it is directly observed that the coherent peaks of Ce 4f electron in heavy-fermion systems disperse near the Fermi level in good agreement with the periodic Anderson model.

This encouraged me to further study this topic after PhD degree and to remain here as a visiting researcher. For this point, I really thank Prof. Kimura, who invited me as a visiting researcher, and Prof. Kwon, who is present boss and permitted my research in IMS. Very recently, I have obtained decisive results to explain the electronics structure of heavy fermions by using the angle-resolved photoemission spectroscopy: Strongly correlated Ce 4f electrons have periodicity and moment dependent at Fermi level, when the ground state varies from magnetic to non-magnetic regime via a quantum critical point. This is very important information to understand quantum criticality in heavy-fermion systems.

Beside my field, I would like to say about a whole impression of IMS. In a word, IMS is a well-organized research complex center. Harmony between experiment and theory deserves admiration. In addition, a synergy of collaboration between top-level researchers in similar fields is striking. A system for collaboration with foreign researchers is also well-developed such as visiting researcher, visiting professor, and exchanging students. It should be emphasized that IMS plays an important role in the educational



field as well as research area. As another good research environment, I would like to mention the accommodation provided by IMS. I live in Mishima Lodge together with my family. Lodge is very close to UVSOR-II and is comfortable place in both living and research.

The city of Okazaki seems to also exist for research. The quiet and niceness in the city enable me to think a new research idea profoundly. In fact, I am already used to the silence of Okazaki. When I came back to Seoul, where I lived in Korea, I felt very complicated. I often think that I can not live in Seoul any more because of complexity.

Now, IMS and Okazaki is very familiar with me due to not-short living. Everything becomes an everyday life. In spite of that, I have deeply impressed the excellent research environments and the passion of researchers who constantly pursue top-level research as mentioned above.

Finally, I would like to say about the people in IMS. I am very happy for the fact that I met good colleagues and friends at UVSOR-II. They welcomed me warmly as one of members, and I could forget the difficulty of life in a foreign country.

IMS is very special for me because IMS is not simple institute I visit but alma mater. I will keep it carefully in my life.



NEW STAFF

## 新人自己紹介

## 吉田 紀生

よしだ・のりお

理論・計算分子科学研究領域  
理論分子科学第二研究部門 助教

昨年7月より助教として採用されました。新人とは申しませんが、これまでも博士研究員として分子科学研究所にお世話になっていましたので本当は古参ですが、初心にかえて頑張りしたいと思います。今後ともよろしくお願ひします。

## 山田 篤志

やまだ・たかし

理論・計算分子科学研究領域  
計算分子科学研究部門 助教

名古屋大学理学研究科で学位取得後、分子研のポスドクを経て今年7月に現職に着任いたしました。分子研でこれまでに開発してきた量子化した核による分子動力学シミュレーションを用いて溶液中のプロトン移動反応の研究を行っています。気持ちを新たに、今後がんばっていききたいと思います。

皆様どうぞよろしくお願ひいたします。

## GUO, Jingdong

理論・計算分子科学研究領域  
理論分子科学第一研究部門 専門研究職員

In June of 2007, I joined the group of professor Shigeru Nagase (Theoretical and Computational Molecular Science) in IMS as a postdoctoral fellow. I received my PhD degree at Royal Institute of Technology in Sweden in 2004. The title of my PhD thesis was "Theoretical Modeling of Enzymatic Catalysis and Two-Photon Active Materials". My future research activity in IMS will mainly focus on reaction mechanisms of organometallic and enzymatic compounds using ab initio methods and hybrid density functional theory.

## 高木 康多

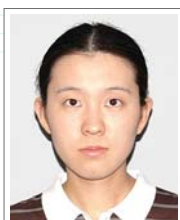
たかぎ・やすまさ

物質分子科学研究領域  
電子構造研究部門 助教

東京大学物性研究所において博士課程を修了後、理化学研究所播磨研究所 (Spring-8) での博士研究員を経て、平成19年9月に電子構造研究部門横山グループの助教として分子科学研究所に着任しました。専門は表面物性研究でこれまで主に走査トンネル顕微鏡を用いた研究に従事してきました。分子研ではUVSORの放射光やレーザー等を用いて、これまでよりも範囲を広げた研究をおこなっていききたいと思います。よろしくお願ひします。

## 阿部 仁美

あべ・ひとみ

物質分子科学研究領域  
電子物性研究部門 事務支援員

平成19年9月1日より、電子物性研究部門でお世話になっております。

至らないところも多く、ご迷惑をおかけすることもあるかとは思いますが、精一杯努めますので、どうぞよろしくお願ひいたします。

# B O O K レ ビ ュ ー

## 『爆発する光科学の世界—量子から生命体まで—』

編著者／プログラム・コーディネーター 立花 隆  
クバプロ ¥2,310

平成18年 9月 24日に東京で開催された「第2回 自然科学研究機構シンポジウム」の講演収録集が刊行されました。  
量子、レーザー、バイオ、脳の領域まで、多岐にわたる最先端の光科学をまとめた1冊です。

### 【目次】

#### 一章 新しい光源

オーバービュー 光シンセサイザーをてのひらに——マイクロ固体フォニクスの新展開——  
宇宙の光を地上でつくる——シンクロトロン光源——

#### 二章 光と分子

量子の波を光で制御する 光を吸う分子の木 研究にはセンスと雰囲気、それにプラスαが大切——光触媒を例にして——

#### 三章 光と生命体

オーバービュー 葉緑体の光による細胞内移動 光を見る微生物のしくみ 発達する脳を光で見よう



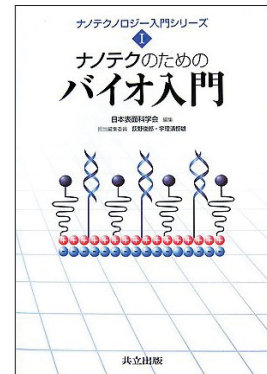
## 『ナノテクのためのバイオ入門（ナノテクノロジー入門シリーズ1）』

著者名／日本表面科学会編集／担当編集委員：荻野俊郎・宇理須恒雄  
共立出版 ¥2,835

バイオを専門としない学生・研究者・技術者のために、必要とされるナノテクの基礎知識を簡潔にわかりやすく解説しています。

### 【目次】

細胞（細胞の構造と機能：細胞内・細胞の構造と機能：細胞外）生体材料 I（タンパク質とバイオチップ・タンパク質超分子を用いたナノ構造作製・モータータンパク質とその利用）生体材料 II（DNAの構造と機能・DNAチップ、遺伝子診断技術・人工生体膜）計測、析技術（神経細胞ネットワーク・原子間力顕微鏡による生体材料計測・タンパク質の力学特性：計算機シミュレーションによる理解）



※紹介したい本がある著者は、分子研レターズ編集委員会 letters@ims.ac.jp までご連絡ください。なお、掲載の有無はレターズ編集委員会で決定します。

## 「ガリレオ」取材報告



フジテレビ系列放送ドラマ「ガリレオ」のPR番組に大森教授が出演されました。

「ガリレオ」の主人公が物理学者であるため、PR番組では実際の物理学者を紹介するコーナーが設けられました。大森教授は、分子研の広報に役立つなら、という思いで出演を引き受けてくださいました。

取材当日は、主人公のイメージに合わせるためほとんど着ることのない白衣を身にまったり、「主婦向けにわかりやすく研究内容を紹介してほしい」と取材者からのとてつもなく難しい注文に応じたり等で、当日の放送は5分程度でしたが、取材時間はなんと4時間も及びました。大森教授は、取材者の方に何度も丁寧に説明し、同行していた私も大変勉強になりました。

番組視聴率も好調でしたし、はやくも映画化が決まり今年秋に公開予定です。少しでも理科に興味を持つ方が増えると嬉しい限りです。ガリレオを見て研究者になった方が分子研で研究する日が来る？！（広報室）

平成19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」を始め2件
協力研究	「高周期14族元素を骨格に有する特異な芳香族系の構築とその電子状態及び物性の解明」を始め44件
UVSOR施設利用	「MFI上のMoOx触媒活性種のL-XANESによる微細構造解析」を始め70件
施設利用	「新規なキャリア輸送材料の合成と電子デバイスへの応用」を始め25件

平成19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
2007年 5月22日(火) ～23日(水)	生細胞の分子科学	太田 信廣 (北海道大学電子科学研究所)	64名
2007年 6月1日(金) ～3日(日)	金属と分子集合——新領域創成をめざして——	上野 隆史 (名古屋大学大学院理学研究科)	60名
2007年 6月23日(土)	若手分子科学研究者のための物理化学研究会	濱口 宏夫 (東京大学大学院理学系研究科)	15名
2007年 8月29日(水) ～31日(金)	分子科学における連成シミュレーションの基礎理論と応用	青柳 睦 (九州大学情報基盤研究開発センター)	40名
2007年 9月10日(月) ～11日(火)	放射光と表面電子顕微鏡——顕微ナノ材料科学の新しい進展——	朝倉 清高 (北海道大学触媒化学研究センター)	45名
2007年 9月28日(金) ～29日(土)	分子情報通信のサイエンス基盤	宇理須恒雄 (分子科学研究所)	40名

共同利用研究とは？



分子科学研究所は、極端紫外光研究施設、及び、計算科学研究センターなどの大型施設を「施設利用」という形で当該分野コミュニティの研究者の利用に供しています。また、機器センターにおいて、先端的な装置を共同利用に供すると共に、測定法や物質合成手法の開発、共同研究の実施等を当該分野の研究者との連携の下で行う「課題研究」を支援しています。さらに、これらセンターならびに各研究系における研究資源を広く解放し、研究者の個別なニーズに応じて共同利用研究を行う「協力研究」があります。これらのハードウェアを中心とした共同利用と共に、

当該分野の特定の課題に関する討論を深め、更なる新しい発展を探るための有効な手段として、所外の研究者の提案を基にしたワークショップである「分子研研究会」を毎年複数回開催しています。

申込受付は年2回、分子研ホームページより公募書類をダウンロード出来ます。また、協力研究、施設利用は随時申込を受付中です。詳しくは、<http://www.ims.ac.jp/joint/joint.html>をご覧ください。

## COLUMN 1

## 分子研での学生生活を始めて感じたこと

後藤 悠

総合研究大学院大学物理科学研究科機能分子科学専攻

光分子科学第二研究部門大森グループの後藤と申します。2007年4月から研究室の一員として迎えていただいたから、この原稿を書いている時点で、早いものでもう8か月が過ぎました。私は京都大学大学院修士課程において、ヘリウム液滴という極低温マトリクス中の分子の分光研究を行ってきましたが、博士後期課程からこちらに移り、大森先生のご指導の下、分子の振動波束の制御に関する研究を始めました。今までの研究と実験手法も違い、戸惑うこともあります。新鮮な気持ちで新しいテーマに取り組んでいるところです。分子研の存在については、以前からオープンハウスに参加したり、前の研究室の先輩方からお話を聞くなどしたりして知ってはいましたが、実際に自分が分子研で研究を始め、さらにはこのような原稿まで書いていることに、ちょっとした感慨を覚えます。たとえば、初めて大森グループの実験室を見学したのは2年以上前のことだったと記憶していますが、それがいまでは迎える立場となって多くの見学者の方と接する側になりました。外国からいらっしゃる先生方、日本の様々な研究分野で活躍されている先生方、学生さん、それから分子研に職場体験に来ていた中学生に実験室をお見せすることもありました。先日も20名弱の先生方をお迎えすることがあったのですが、皆さんとても熱心で、そして見学を楽しんでいらっしゃるのを見て、私自身

も刺激を受けることができました。

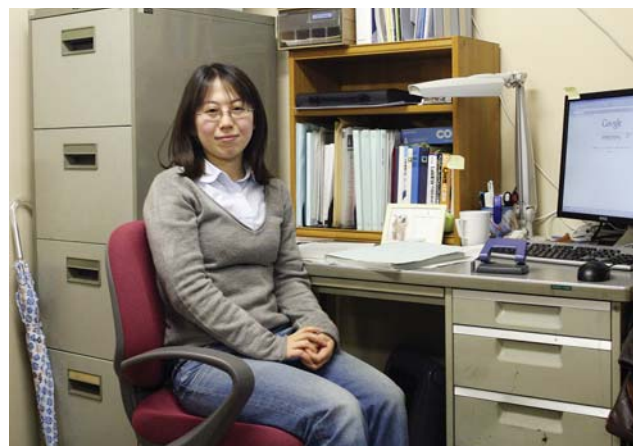
総研大生として実際に分子研に身を置く者として、これまでに感じたこととしては、やはり大学とはだいぶ違う、ということです。一つ一つの研究室の人数が少なく、学生の数も少ないため、全体としてにぎやかな感じはしませんが、色々なところから移ってきた人が集まっているため、同じ大学の中だけで過ごしていただけでは知り合うことのなかったであろう方々とお話できる機会が多くあります。研究室どうしの交流、他の大学・研究所との交流も深いので、こういった機会はさらに広がります。充実した研究設備に加えて、多くの研究者の方との交流の機会を与えてくれるということも、分子研の大きな魅力だと思います。

学生として籍を置いている総研大も普通の大学とは雰囲気が全く違うと思います。4月に総研大本部がある葉山で行われた入学式とその後のオリエンテーションでは、初めて全国各地に散らばる総研大生に実際に会うことができました。総研大の専攻分野は理系から文系まで多岐にわたります。いろんな分野の学生さんの話を聞くことができ、特に文系の分野や、理系でもフィールドワークを中心に研究を行っているような分野のお話は私にとって非常に新鮮で興味深いものでした。

また、ここ岡崎には分子研以外に基

ごとう・はるか

2007年4月総合研究大学院大学機能分子科学専攻入学。光分子科学第二部門大森グループにて、高精度波束干渉法を用いた分子の振動波束の制御に関する研究を行っています。



礎生物学研究所（基生研）と生理学研究所（生理研）があり、総研大の英語の授業については、3研究所に属する総研大生が合同で授業を受けます。分子研に比べて、生理研、基生研は学生数が多いので、英語の授業では生物系の学生に囲まれて授業を受ける格好になります。私は今、外国人講師による英会話のクラスと日本人の先生による論文・プレゼン英語の授業に参加しています。英会話のクラスについては研究とは全く関係のない様々なトピックについて簡単なディスカッションを行ったり、ときにはただのおしゃべりを楽しんだりするようなこともあり、比較的にリラックスした雰囲気です。一方、日本人の先生による論文・プレゼン英語の授業は正確な科学英語を書き・話すことを目的としているので、少々ハードで細部まで神経を使うことが要求されます。先日はこのクラスで自分の研究内容と近況報告をあわせて短くまとめたものを発表する、という課題でプレゼンの練習がありました。英語で書き・話さなければならぬことももちろん大変でしたが、一番難しかったのは畑違いの人にも自分の研究内容のある程度理解してもらえようという説明をする、ということでした。言葉の選び方だけの問題ではなく、

私自身が博士課程から新しいテーマと実験方法に取り組み始めたところであり、十分な説明をするにはまだまだ知識や理解が身につけていなかったということも原因であろうと思います。研究テーマとこれまで以上にしっかり向き合う必要性を再認識させられました。

岡崎での生活についてですが、想像以上に車社会であると感じました。車がなくてももちろん生活は十分にできるのですが、行動範囲が狭められる感じがします。私はこれまでほとんど車の要らない生活をしてきたので運転免

許すらもっていないのですが、地元の人には高校を卒業してすぐに免許を取るものらしく、ほとんど文化の違いと言っても良いのではないかと思います。しかし、行動範囲が狭められているとはいえ、普段の生活に必要なものはショッピングセンターなどで揃いますし、岡崎に慣れてくるにつれ、それほど不便は感じないようにになりました。夏には岡崎に遊びに来てくれた友人たちと、岡崎や名古屋の観光地を巡りました。岡崎も含め愛知県は食べ物など強烈な個性をもった県だと思うので、分子研

にいる間に少しずついろいろなところを見てみたいとも思います。

ここまで総研大生として分子研に移ってから感じたことをあれこれと書いてきましたが、この一年近くの間には本当にたくさんの貴重な機会を与えられてきたのだということを感じます。指導していただき、支えてくださる方への感謝を忘れずに、これからもできるだけ多くのことを吸収し、学んでいきたいと思っています。

## COLUMN 2

### My impression for research and living experience in Okazaki

Long Chen

総合研究大学院大学物理科学研究科機能分子科学専攻

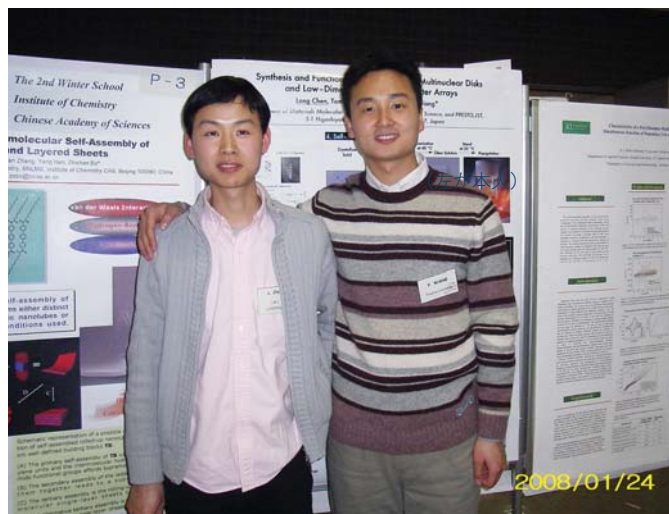
My name is Long Chen, a SOKENDAI Ph. D student in Department of Materials Molecular Science, IMS. I came to Okazaki in October 2006 and have already studied and worked here for almost one and a half years under Prof. Dong-Lin Jiang's supervision. Both the good research condition of IMS and a calm living environment of Okazaki city make me enjoy my research life very much. Besides, I am so lucky to get the MEXT scholarship, which is not only a financial support but also an honor, pride, and driving force for me. Thus, I fully concentrate

myself on the research work.

As many foreign students and researchers already mentioned before, IMS provides a wide-range and creative research platform for students. For example, the regularly scheduled open seminars and symposiums give a good chance for us to communicate with the world-class leaders in the frontiers of chemistry and physics. The facilities available in IMS are also impressive, and the instruments here are among

the best ones in the research fields of molecular science. For example, IMS has a powerful NMR (920 MHz) and X-Ray diffraction equipments for analyses or measurements and supercomputers for

※総研大冬の学校にて（写真左が本人）



Long Chen

After received a Master degree from Shanghai Jiao Tong University in March 2006, I joined Prof. Jiang's group since October 2006 as a MEXT Scholarship Ph. D student in Department of Materials Molecular Science, Institute of Molecular Science. My recent research work is focus on the synthesis and self-assembly of large conjugated functional materials.

simulation of complicated and even giant molecules. It is also worthy to note that the library here provides an easy access to many prestigious journals on line and articles published in minor journals with limited circulation.

IMS has many top-class labs studying in different fields such as photo-physics and -chemistry, surface chemistry, computational chemistry, organic chemistry, nano science, and biophysics, etc. Such a broad coverage in molecular science makes it possible for an interdisciplinary collaboration between groups. For example, we have started the collaboration on novel dinuclear metallo-arrays with other lab. As for me, one of my recent research subjects is on the self-assembly of conjugated organic molecules to fabricate well-defined nanostructures. Indeed, if without cooperation, I could not have determined the shape of assembled nanowires timely and frequently when I prepared the samples. Even within Jiang's group, because group members have different majors and research

backgrounds, I learnt a lot from other members. Dr. Ishizuka taught me a lot of organic synthesis technique and knowledge. I learnt the method for growing single crystal from Dr. He who is a specialist in inorganic chemistry. Dr. Guo has a lot of experience on preparing quantum dots, nanocrystals and is strong in SEM, TEM, and AFM measurements. I got understand why group staffs are strict with us, due to a simple reason that is organic synthesis usually requires concentration together with hard working. I now believe that the most important thing for a Ph. D student must learn is not the specific knowledge of their majorities but the general research method and attitude.

Ph. D students studied in IMS are enrolled in the Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI). Totally different from other universities, the students of SOKENDAI with different majors are separated in many independent institutes and thus lived in different cities. Thus, we take our major courses mainly in IMS, where we carried out our research work. By the way, we

benefit a lot from SOKENDAI's Japanese course, which helps foreign students for a quick adapt to the Japanese life style and enhances Japanese language ability. On the other hand, one interesting and important event for SOKENDAI students here is SOKENDAI annual winter school. From winter school, we cannot only learn the recent researches from the lectures given by famous professors both from Japan and abroad, but also have a chance to communicate with students and young scientists from other Asian countries. So far, I have already joined this winter school twice. In my opinion, making many good friends is very important for students, since it will help us to make big success in future upon others' cooperation.

I believe I can learn a lot here with fruitful results in IMS during my doctor course, under Prof. Jiang's supervision, upon others' help, and through hard working. I also wish each student studying here has a precious, invaluable, and memorable time in IMS.



E V E N T R E P O R T

第4回夏の体験入学

2007年度担当教員 分子スケールナノサイエンスセンター 櫻井英博

総研大広報事業の一環として始まった分子科学研究所夏の体験入学も4回を数え、花火大会と並び、8月の恒例行事として定着してきたように思います。今年は8月7—10日の4日間で開催されました。本事業は、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います。実施内容について簡単にご報告申し上げます。

今回は29名の事前申込みがありましたが、最終的には23名の参加となりました。参加学生の学年の内訳は以下の通りです。B2:2名、B3:8名、B4:9名、M1:3名、M2:1名。スケジュールはほぼ例年通りで、初日午後からオリエンテーション、UVSORならびに計算科学研究センターの見学ののちに歓迎会を行い、2日目、3日目の2日間で各研究グループに分かれて研究体験を行い、最終日に全ての参加学生による体験内容報告会を行いました。

参加学生のアンケート回答を見ると、今回の体験内容について貪欲に吸収しようとする意気込みがひしひしと感じられ、研究活動に対して高い関心があることがわかります。それもあっ

て、主に研究環境の面で分子研・総研大に対して好意的な印象を持ったようです。さらに担当する教員や研究員の研究に対する取り組みを目の当たりにできたことは、大変良い経験になったようです。ただし、理解度という意味では参加者によってばらつきがあるようです。これは参加対象が学部生~大学院修士課程まで広い範囲としているために、ある程度は仕方のないことかもしれませんが、プログラムの見直しを含め、今後も実施体制については議論を続ける必要があると思います。アンケート結果の一部はホームページ(<http://www.ims.ac.jp/taiken/>)に掲載されていますので、是非ご覧下さい。

今回の参加学生の特徴として、友人や先輩からの紹介、いわゆる口コミによる参加者が大きく増えてきたことが挙げられます。今回の感想文からも「是非後輩に勧めたい」などといった意見も見られることから、即効性は低いかもしれませんが、学部生レベルにおける総研大、ないしは分子研の知名度を高める極めて良質のツールとなっていることが伺えます。また、今回のもうひとつの特徴は、ホームページにより参加を決めた学生数が多くなったこと

です。前回までは各大学の掲示板(ポスター)が主たる媒体でしたが、昨今他大学・研究機関でも同様の行事が多く組まれていることもあって、積極的にウェブ検索で参加する学生が増えることは好ましい傾向かと思えます。今回はホームページを比較的早めに立ち上げ、またデザインにも工夫を凝らしましたが、今後も同様のウェブコンテンツの充実が重要となると考えられます。

このように回を重ねることによって、体験入学の効果が総研大入試にもあらわれ始めており、9月に行われた5年一貫制の受験者(構造分子科学専攻と機能分子科学専攻の合算)中、実に80%が体験入学経験者でした。今後も継続して本夏の学校を開催することにより、受験者数増加などの効果も期待されます。

最後に、本事業の実施にあたり、総研大関係者、大学院担当事務、またご多忙にもかかわらず快く学生を受け入れていただいた研究室の皆様、その他関係者の方々に多大なご協力をいただきました。この場をお借りして御礼申し上げます。

■体験内容一覧

- スピン転移物質の合成 光合成モデル化合物の合成
- 機能性を持つ単結晶薄膜の育成と電子状態評価
- 分子科学応用を目指した全固体新型レーザーの研究
- 金属錯体の合成実験—フェロセンの合成
- 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
- レーザー、質量分析、超音速分子線、この3つのアイテムを使いこなそう!
- 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
- 結晶中の電子運動についてモデル計算を行い、固体中の電子状態を考えてみよう
- 計算化学のハッキング体験学習 二酸化炭素の還元反応に関する研究を体験
- 固体NMRを用いた生体分子・分子材料の構造研究
- 超高真空中での磁性超薄膜の作成 超高真空中での磁性超薄膜の作成と *in situ* 磁化測定
- クラスター触媒を用いた反応の一例を体験 ナノの金属ロッドを作って波動関数を見る
- 金クラスターの合成と評価 スピン転移物質の合成 ナノ加工と生体分子情報受信素子の研究
- 金属タンパク質を対象とした研究を体験してみよう 緑色蛍光蛋白質の巻き戻りを調べてみよう



## 平成19年度後期学生セミナー

物理科学研究科構造分子科学専攻 5年一貫博士課程3年 服部 直史

平成19年度総研大後期学生セミナーが2007年10月11日、12日の2日間にわたって行われました。本セミナーは、総研大の全専攻から選出された学生を中心として企画されるセミナーで、入学式の直後に行われます。

今回の学生セミナーのテーマは、「Big things start small」でした。これからの研究生活において、「小さなことからコツコツとはじめ、やがて大きな成果にする”ことを念頭において研究生活を送ってほしいというメッセージがこめられています。

本セミナーでは、2人の先生方にご

講演をお願いしました。国立遺伝学研究所の太田朋子先生には「遺伝子とゲノム進化の偶然性と必然性」というテーマで、インドからお招きしたDilip Bhawalkar先生には「レーザーを用いた応用機器の開発」に関してご講演をしていただきました。その後には、新入生と先生方が議論を深める場としてフリーディスカッションの時間を設け、研究生活におけるアドバイスから、社会における科学の役割まで幅広いテーマで議論しました。ご講演された先生のほかに分子研からも櫻井英博先生にご参加いただきました。その他、鉱石

ラジオの製作、日本文化を知ってもらう目的でCultural Olympicsを行いました。

新入生のうち留学生の割合がかなり多く、他専攻との交流のほかに世界各国間の交流を深められるといった貴重な経験となりました。

## Naoshi Hattori

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2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。



## The impression notes of the Student Seminar

物理科学研究科構造分子科学専攻 博士課程2年 Shang, Zhi-Guo

The 2<sup>nd</sup> semester SOKENDAI student seminar in 2007 was held on 11<sup>th</sup>, October. All the department leaders and about forty students attended this seminar. Before the entrance ceremony, Mr. Toshiki Usui, a young and famous pianist, played some graceful music and the entrance ceremony was over after the president addressed. Then Dr. Tomoka Ohta gave an interesting lecture about the chance and necessity in evolution of genes and genomes.

After divided into several groups for free discussion, we had our dinner and after-dinner activity. The activity was very enjoyable and gave us the chance for communicating and making friends each other. On the second day, Dr. D. D. Bhawalkar, who has more than 45 years of experiment in developing lasers, lectured about the applications of laser and presented the invention of laser would certainly rank amongst the most important inventions of the last centu-

ry. Lastly all of the attendee took a few pictures together. It was a comfortable and successful seminar. I thank the student seminar committee for their arranging this seminar.



## Shang, Zhi-Guo

Obtained Master Degree from School of Physics and Information Optoelectronics, Henan University in Jun. 2007, and entered the Department of Molecular Structure, the Graduate University for Advanced Studies 2007. Now I am in my first year of doctoral course and studying the amyloid  $\beta$  aggregation reaction induced by ganglioside GM1.

## 「総研大 夏の体験入学」に参加して

物理科学研究科機能分子科学専攻 5年一貫博士課程1年 杉浦 晃一

「岡崎に研究所があったな……」という思いつきで分子科学研究所を見つけたのが参加のきっかけでした。私は電気電子工学出身でしたので化学分野出身ではありません。しかし高校のとき化学が好きで研究所を体験できる非常にいい機会になると思い参加しました。

研究所は非常に厳格で一般人にはとても近づきたい固いイメージが思い浮かぶのは私だけでしょうか？ 研究者の方が、自分の研究に対しては非常に熱心なのはもちろん思ったほど固いイメージとは当てはまらないのは意外でした。

参加者が化学系だけでなく、異なる分野の理系人たちが多く参加してまさに理系の小さな村のような感じでした。でも皆さん分野が違えども理系ですから、お互い思っていることを共感できることが多くありました。だからみんなともすぐに溶け込めましたし、妙に連帯感が沸きました。

実験では、各グループに分かれて希望の実験テーマを体験しました。例えば、私たちが行った実験テーマの1つは、超伝導体試料が常伝導体から超伝導体へ相転移していく様子をESRやSQUIDで観測することでした。ESRな

ど普段で扱ってない機器での初めての実験というのはとっても新鮮で楽しかったです。僕らのグループは3人で実験しましたが、1人は「もうちょっと遅くまで実験したいです。」と欲していたほどです。できるなら僕ももう1回参加したいって思っています。体験入学を企画して下さった分子研の方々、本当にありがとうございました。

体験入学風景  
(本人)



## 総研大生受賞者紹介

**北野 健太** (物理科学研究科構造分子科学専攻)

### 第23回化学反応討論会でベストポスター賞を受賞

総合研究大学院大学構造分子科学専攻博士課程の北野健太君が、2007年6月13～15日に神戸大学で開催された第23回化学反応討論会において、ベストポスター賞を受賞した。本討論会は、気相・液相・界面等における様々な化学反応の機構や動力学について実験ならびに理論の面から深く掘り下げた議論を行なう場として、毎年200名近い研究者が参加している化学反応に関する国内有数の学会である。8年前の第15回より、特に優れたポスター発表を行なった大学院生または学部学生を選考・表彰しており、本年度は50件以上の発表の中から7件がベストポスター賞に選出された。

今回の受賞対象となった北野君の発表は、「フェムト秒時間分解分光によるメチル基内部回転波束ダイナミクスの観

測」と題するものであり、大きな非調和性を有する大振幅振動の典型であるメチル基内部回転運動に着目して、フェムト秒の時間スケールで進行する量子波束運動の様子を実験的に捉えた結果を報告したものである。この研究において北野君は、電子遷移に共鳴した極短パルス光による非線形コヒーレント効果を利用することにより、電子励起状態ならびに電子基底状態における内部回転量子波束の生成・観測に始めて成功した。さらに、励起パルス光の波長を変化させると励起状態もしくは基底状態に選択的に波束を生成しうることを実験的に明らかにし、時間依存Schrödinger方程式に基づいた解析によって定量的な検証を行なった。今回の結果は、分子の大規模な構造変化をコヒーレントに誘起する方法論の開拓へ

とつながると期待される。

北野君は、本研究のほぼ全てを独力でっており、ポスター発表においては、自身の研究について自分なりの言葉で伝えようとする姿勢が高く評価されたとのことである。本受賞を契機に、同君のより一層の成長を期待している。

(光分子科学研究領域  
大島康裕・主任指導教員)



## 平成19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) [論文博士]

氏名	博士論文名	付記する専攻分野	授与年月日
石村和也	Development of efficient algorithms for quantum chemistry calculations of large molecules	理学	H19. 9.28

## 総合研究大学院大学平成19年度(10月入学)新入生紹介

### 平成19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	尚 治 国	生命・錯体分子科学研究領域	Analysis of the A $\beta$ aggregation reaction induced by ganglioside GM1.
機能分子科学	渡 部 敏 裕	生命・錯体分子科学研究領域	効率の物質変換を目的とする反応プロセスの構築

## 分子科学フォーラム・分子研コロキウム 開催一覧

### ■平成19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69回	2007年 6月13日	二セ科学を考える	菊池 誠
第70回	2007年 6月27日	量子乱流——もうひとつのダ・ヴィンチ・コード——	坪田 誠

### ■平成19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794回	2007年 5月 9日	プロトン・電子共役移動による縮退分子系の構築を目指して	北川 宏
第795回	2007年 5月30日	単一分子伝導理論の現状	浅井 美博
第796回	2007年 6月20日	Temperature regulation of photodamage to photosystem II in <i>Synechocystis</i>	Suleyman I. Allakhverdiev
第797回	2007年 7月 4日	和周波発生の分子理論とその応用	林 倫年
第798回	2007年 7月11日	熱電変換技術の紹介とトピックス	長谷川靖洋
第799回	2007年 7月18日	「ひので」搭載極端紫外線望遠鏡（EIS）による太陽コロナプラズマ診断——実験室プラズマとの共同研究——	渡邊 鉄哉
第800回	2007年 8月22日	Excited states and (NMR) relaxation: Mapping protein energy landscapes by relaxation dispersion	Peter E. Wright
第801回	2007年 9月12日	高分子・超分子を用いた金属イオンのスピン制御	江 東林

## 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
19. 6.17	UO, Jingdong	採用	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 専門研究職員	中国 Jiangxi Science and Technology Normal University 講師	
19. 6.30	吉田 紀生	辞職	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第二研究部門 助教	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第二研究部門 専門研究職員	
19. 6.30	山田 篤志	辞職	理論・計算分子科学研究領域計算分子科学研究部門 助教	理論・計算分子科学研究領域計算分子科学研究部門 専門研究職員	
19. 7. 1	吉田 紀生	採用	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第二研究部門 助教	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第二研究部門 専門研究職員	
19. 7. 1	山田 篤志	採用	理論・計算分子科学研究領域計算分子科学研究部門 助教	理論・計算分子科学研究領域計算分子科学研究部門 専門研究職員	
19. 7. 1	中野 千賀子	採用	物質分子科学研究領域電子物性研究部門 研究員	分子科学研究所 特別協力研究員	
19. 7. 1	ALLAKHVERDIEV, Suleyman	採用	分子スケールナノサイエンスセンターナノ分子科学研究部門 研究員	分子スケールナノサイエンスセンターナノ分子科学研究部門 研究員	
19. 7.25	ALLAKHVERDIEV, Suleyman	退職	ロシア科学アカデミー基礎生物学研究所 主席研究員	分子スケールナノサイエンスセンターナノ分子科学研究部門 研究員	

# 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
19. 7.31	梶本真司	辞職	東北大学大学院理学研究科 助教	理論・計算分子科学研究領域計算分子科学研究部門 専門研究職員	
19. 8.31	持箸晃	辞職	財団法人高輝度光科学研究センター加速器部門 研究員	極端紫外光研究施設光源加速器開発研究部門 助教	
19. 8.31	穂坂綱一	辞職	科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業 博士研究員	光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 研究員	
19. 8.31	MUHAMMAD, Awais	辞職	英国リバプール大学 博士研究員	生命・錯体分子科学研究領域生体分子情報研究部門 研究員	
19. 8.31	石田豊	辞職	生命・錯体分子科学研究領域錯体物性研究部門 助教	生命・錯体分子科学研究領域錯体物性研究部門 研究員	
19. 8.31	冨田奈緒	辞職		物質分子科学研究領域電子物性研究部門 事務支援員	
19. 9. 1	高木康多	採用	物質分子科学研究領域電子構造研究部門 助教	理化学研究所播磨研究所 協力研究員	
19. 9. 1	石田豊	採用	生命・錯体分子科学研究領域錯体物性研究部門 助教	生命・錯体分子科学研究領域錯体物性研究部門 研究員	
19. 9. 1	阿部仁美	採用	物質分子科学研究領域電子物性研究部門 事務支援員		
19. 9.11	中野千賀子	退職	分子科学研究所 特別協力研究員	物質分子科学研究領域電子物性研究部門 研究員	
19. 9.30	矢崎稔子	辞職		計算科学研究センター 技術支援員	
19. 9.30	加納聖子	辞職		計算科学研究センター 事務支援員	
19. 9.30	山田陽一	辞職	理化学研究所和光研究所フロンティア研究システム物質情報変換化学研究プログラム 副チームリーダー	生命・錯体分子科学研究領域錯体触媒研究部門 助教	
19. 10. 1	小川琢治	転出	大阪大学大学院理学研究科 教授	分子スケールナノサイエンスセンターナノ分子科学研究部門 教授	
19. 10. 1	佃達哉	転出	北海道大学触媒化学研究センター 教授	物質分子科学研究領域電子構造研究部門 准教授	
19. 10. 1	小澤岳昌	転出	東京大学大学院理学系研究科 教授	生命・錯体分子科学研究領域生体分子情報研究部門 准教授	
19. 10. 1	小川琢治	委嘱	分子スケールナノサイエンスセンターナノ分子科学研究部門 教授(兼任)	大阪大学大学院理学研究科 教授	
19. 10. 1	佃達哉	委嘱	物質分子科学研究領域電子構造研究部門 教授(兼任)	北海道大学触媒化学研究センター 教授	
19. 10. 1	小澤岳昌	委嘱	生命・錯体分子科学研究領域生体分子情報研究部門 教授(兼任)	東京大学大学院理学系研究科 教授	
19. 11. 1	渡邊一也	転出	京都大学大学院理学研究科 准教授	分子制御レーザー開発研究センター極限精密光計測研究部門 助教	
19. 11. 1	甲斐憲子	採用	分子スケールナノサイエンスセンターナノ分子科学研究部門 技術支援員		

## 編集後記

分子研レターズ57号をお届けします。年末年始のご多忙中にもかかわらずご執筆をお引き受け頂いた皆様に深く感謝いたします。また、本号から分子研関係者が関わった書籍の紹介なども行う事にしました。今後も分子研レターズは変わり続けますので、皆様からのご意見やご要望を是非お聞かせください。最後になりましたが、本誌発刊に際しまして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。この場をお借りしてお礼申し上げます。

本号編集担当 平等拓範



自然科学研究機構  
**分子科学研究所**  
 総合研究大学院大学  
物理科学研究科構造分子科学専攻 / 機能分子科学専攻

**分子研**

**オープンキャンパス**

[大学院説明会 / 共同利用研究相談会]

**同時開催 分子研シンポジウム**

**2008**

**6/13(金)・14(土)**

会場 自然科学研究機構 分子科学研究所  
(愛知県岡崎市～名古屋より電車で約30分)

**分子研オープンキャンパス 6/14(土)**

- 概要説明
- 分子科学研究所 / 総合研究大学院大学 / 共同利用研究 / オープンキャンパス
- 自由見学
- 気になる研究室を自由に訪問してください

**分子研シンポジウム 6/13(金) 14(土)**

- 稲辺 保 北海道大学・理 教授
- 小松崎民樹 北海道大学・電子研 教授
- 高橋 保 北海道大学・触媒セ 教授
- 谷口 弘三 埼玉大学・理 准教授
- 藤田 誠 東京大学・工 教授
- 緑川 克美 理化学研究所 主任研究員
- 朱 超原 台湾 National Chiao Tung University 教授

分子研の教員陣



理論・計算分子科学

[www.ims.ac.jp/opencampus/](http://www.ims.ac.jp/opencampus/)  
 シンポジウムおよびオープンキャンパスの詳細、参加申込はこちらへ。



●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](mailto: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>



発行日	平成20年5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） 平 等 拓 範（本号編集担当） 小 杉 信 博 櫻 井 英 博 手 老 龍 吾 中 村 敏 和 信 定 克 幸 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	株式会社コームラ

---

本誌記載記事の無断転載を禁じます



