

# 分子研レターズ

VOL. **58**  
AUGUST 2008  
ISSN 0385-0560

## ●巻頭言

分子科学——自然の豊かさの源を探る——

大峯 巖 [名古屋大学理事・副総長]

## ●分子科学の最先端

気体分子センサータンパク質の構造と機能

青野重利 [岡崎統合バイオサイエンスセンター教授]

## ●レターズ

## 私の歩んだ道と分子研への期待

故 関 一彦 [名古屋大学大学院理学研究科教授]

## 未来を拓く基礎学術

野口 宏 [中日新聞名古屋本社活性化審議室次長]

## ●共同利用研究ハイライト

## 金属内包フラーレンの分子変換

赤坂 健・土屋敬広 [筑波大学先端学際領域研究センター]

## 自己組織化ナノチューブにおけるラセン状電導挙動の実証

山本 洋平 [科学技術振興機構ERATO-SORST]

## 巻頭言

## 01 分子科学——自然の豊かさの源を探る——

● 大峯 巖 [名古屋大学理事・副総長]

## レターズ

## 02 私の歩んだ道と分子研への期待

● 関 一彦 [名古屋大学大学院理学研究科教授]

## 08 未来を拓く基礎学術

● 野口 宏 [中日新聞名古屋本社活性化審議室次長]

## 分子科学の最先端

## 10 気体分子センサータンパク質の構造と機能

● 青野重利 [岡崎統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域教授]

## IMSニュース

14 分子研シンポジウム2008

15 分子研オープンキャンパス2008

16 第7回所長招聘研究会「教育・研究環境のあるべき姿」

17 機構長裁量経費事業若手研究者によるアジア新興国研究機関との研究交流促進——マレーシア科学大学との分子科学シンポジウム——

19 機構長裁量経費事業若手研究会「理論分子科学のフロンティアを探る」開催報告

22 分子科学コミュニティの声

23 分子研広報活動の新たな取り組み

26 関一彦教授追悼

28 受賞者紹介

34 国際研究協力事業報告

36 新装置紹介 —— 超伝導磁石極低温X線磁気円二色性観測装置

## IMSカフェ

38 ニューラボ —— 平本昌宏／江原正博

43 0Bの今 —— 岩田末廣／三澤宣雄

48 分子研を去るにあたり

61 外国人研究職員の紹介

62 外国人研究職員の印象記

64 新人自己紹介

## 共同利用研究

69 共同利用研究ハイライト1 金属内包フラーレンの分子変換 赤阪 健／土屋敬広 [筑波大学先端学際領域研究センター]

72 共同利用研究ハイライト2 自己組織化ナノチューブにおけるラセン状電導挙動の実証

山本洋平 [科学技術振興機構ERATO-SORST]

74 平成19年度(後期)共同研究実施状況

## @総研大

75 コラム —— 岡崎に住んでいて 三宅伸一郎 [機能分子科学専攻]

分子研・岡崎あれこれ 三宅雄介 [機能分子科学専攻]

78 イベントレポート

80 総研大生受賞者紹介

81 修了学生及び学位論文名

81 新入生紹介

## ■各種一覧

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

## 分子科学——自然の豊かさの源を探る——

大峯 巖  
名古屋大学理事・副総長

32年前、今の東門あたりにあった牧場のような横に長い木戸を押し開けて、不思議な国に入るような感じがした。いろいろな植物が茂っており、その中にレンガ張りの新しい建物（実験棟）が建っていた。そして、諸熊先生に会った。諸熊先生は今も元気に活躍されているが、その頃はさらにまばゆいばかりのエネルギーに溢れていた。そして、部屋の奥のタバコの煙のなかに加藤重樹君がいた。研究の合間によくした夜中1時からの外灯の下での皆とのキャッチボール——あの頃の分子研は、創設期の特別な若い活気のある、空気が満ちていた。

米国での博士課程の学生を終え、MITでポスドクをしていた時に、新しくできた分子科学研究所で特定領域奨励研究員（現在のIMSフェロー）に来ないかという知らせがあり、豊橋から深い緑のあふれる名鉄の沿線を見ながら、岡崎にやって来た。それからの楽しいと同時に苦しかったポスドクの3年間、その後MITと慶応大学を経て、再び分子研に戻り自由な助教授を過ごした11年間と、計14年間分子研にお世話になった。直線的でわがままな、先の見えない不安な、エネルギーの溢れる若い時に、独立した研究者として、自由と無限とも言える贅沢な時間を与えてもらった。それから名古屋大学に移り、14年、分子研は何か遙か昔のような懐かしい思い出の場所であり、同時に自分なりの学問の方向を作ることができた大事な場所である。

分子研では、当然「自分たちの専門とする学問が確固たる存在である」と思っていた。しかし大学では、自分の立っている学問を見直すことが迫られる。いかに人が「考える力」によって、文学、法学、経済、工学、農学、医学を初めとする、多様な学問を作ってきたか、その中にある理学の意味、そして化学という学問の成り立っている「もと」を見つめざるを得ない。さらに、基礎科目、特に初年度生に化学の最も基礎となる考え方を教えることの難しさ、自分のもつ学問の浅さに啞然とする日々であった。しかし、大勢の学生の燃え立つよ

うな、溢れ返る若い力、また「無駄」、「余裕」のある心地よさがあつた。初め自分の研究室と教室の間だけで、この大学の心地の良さを満喫していた。しかし、7年前のあるきっかけから、評議員、学部長・研究科長、理事として大学運営に関わらざるを得なくなった。

大学院重点化以後、国立大学の姿が大きく変化してきている。特に法人化の前後から、大学が浮き足立って来ており、その根底が揺らいでいる。喩えれば、法人化によって大学という船が、岸壁を離れ未知の大海原への旅を始めたが、その不安から、岸に向かって陸への思いを叫んでいるような状態といえよう。

大きな海原にあつては羅針盤が必要である。羅針盤とは大切な方向、ものの根幹を示すものであり、大学にとっては、どう考えても、それは学問以外にあり得ないと思う。学問とは、「ものごと」の芯を極めようとする行為であり、同時に、我々を取巻く「もの」の多様さ、豊かさへの共感を得ていく過程である。それは我々の原点を示すものであり、芯であるがゆえに革新的であり社会に大きな影響を与えるものである。

分子科学は、原子、分子を司るシンプルな原理から、いかに多様なものが生まれ変化していくのかを知るための科学、即ち、自然の豊かさの源を探り、我々の存在の根源を探る学問である。

分子研が創られて30数年、次の飛躍に向けて大きなステップを踏むべきときにきていると思われる。その為には、分子科学が宇宙、地球、生命、さらに地球環境、医学、工学など多くの学問と共鳴しながら、真に新しいフィールドを作り、またそのことにより分子科学自身が深まり、分子科学という学問の豊かさや広がりが多くの学問の源となっていく、そのようなサイクルを描いていくことが求められている。

多くの国立大学や研究機関が財政的心配から国の政策を先取りしようと躍起になっているが、今こそ、その次元を脱却し、本質的な「学」のあり方についても



う一度見直すべきときであると思われる。「学」は、学を志す一人一人が、あるものを不思議と思い、それを知りたいと強く希求し、無限とも思われる試みと失敗の繰り返し、そして僥倖によって生まれてくる、一人一人の長い道のりである。また「学」はそれ自身が乗り越えられることを内包しており、先人、我々、そして継ぎ行く人々の連綿たる行為により作りだされていく。「学」をする者の一歩一歩の歩みを支えようとする大学・研究所の意志と、社会の深い共鳴と信頼が、その大切な支えである。

分子科学研究所が、学問に対する熱情と柔軟性と強い意志によって、真の学問の府としてさらに大きく発展して行くことを期待している。

### おおみね・いわお

東京大学工学部数理工学科1968卒、  
米国ハーバード化学物理博士課程修了1976 (Ph.D取得、1977)、  
パリ大学第7 研究員 (1974-1975)、  
MIT化学科博士研究員 (1976-1977)、  
分子科学研究所特定領域奨励研究員 (1977-1980)、  
MIT物理学科研究員 (1980-1981)、  
慶応義塾大学助手 (1981-1982)、  
分子科学研究所助教授 (1982-1994)、  
名古屋大学理学部教授、理学研究科教授 (1994-現在)、  
名古屋大学理学研究科評議員 (2002-現在)、  
名古屋大学研究科長・理学部長 (2003-2005)、  
名古屋大学理事、副総長 (総務担当: 2006-2007、財務担当: 2007-現在、CIO: 2006-現在)

### 専門分野

理論化学 水の多様性の発現機構、生体分子反応、分子の励起状態ダイナミクス、ゲルの相転移の研究

関 一彦 名古屋大学大学院理学研究科 教授

# 私の歩んだ道と分子研への期待

分子研には創設から10年間在籍し、その後も委員、UVSORなどで関与させて頂きました。分子科学を歩んだ私の研究や分子研との関わりを振り返り、分子研への期待を述べたいと思います。



## せき・かずひこ

東大理学部化学科卒業（1970）。  
同大理学系研究科化学専攻修了（1975）、理学博士。  
学振奨励研究員をへて分子研物性化学部門助手（1978-86）。  
その後、広大理学部物性学科助教授（1986）、名大理学部化学科教授（1991）、名大物質科学国際研究センター教授（1998）をへて2005年より現職。  
専門は有機固体・薄膜・界面の物性化学。  
21COE「分子機能の解明と創造」拠点リーダー（2002-2007）、  
学振先端研究拠点事業「有機エレクトロニクス関連薄膜・界面の電子構造と電子過程」日本側コーディネーター（2007-2008）

父：関集三（1915-）。大阪大学、関西学院大学の教授を歴任。化学熱力学。主著「純物質の物性化学」（共著）など。母方祖父：高田保馬（たかたやすま）（1883-1972）。広島高等師範（現広島大学）、東京商科大学（現一橋大学）、九州帝国大学、京都帝国大学、大阪大学、大阪府立大学、龍谷大学の教授を歴任。社会学、経済学。主著「社会学原理」「勢力論」など。父方祖父：関桂三（1884-1963）。東洋紡績（株）会長、関西経済連合会会長を歴任。主著「日本綿業論」など。

分子研との最近の主な関わりは  
学会等連絡会議委員（1994-1996、1998-2000）  
共同研究専門委員会委員（1994-1996）  
UVSOR 利用者懇談会初代会長（1995-1996）  
極端紫外光実験施設運営委員会委員（1997-1998）  
分子科学研究会 第13期委員長（1997-1998）  
運営協議委員会委員・人事選考部会委員（1997-2001）  
分子スケールナノサイエンスセンター 運営委員会委員（2004-2006）

## 東大理学部化学科と、東大物性研での院生生活（最初の共同利用研）

私は東大理学部化学科を1970年に卒業しました。卒論は電荷移動錯体の光伝導でしたが、指導教官の赤松秀雄先生の御定年が近く、物性研（当時六本木）の井口洋夫研究室に進学しました。外部から多くの方が出入りして本郷と一味違う開放感があり、共同研究や、長倉研、斎藤（喜彦）研などとの交流を通じて、助け合い・相互刺激の大切さを学んだと思います。原田義也先生の御指導下、希ガス光源を用いた光電子分光器を開発しました。芳香族炭化水素のスペクトルが測れ、黒田晴雄先生が英国から持ち帰られた気相データとの一対一対応を確認したときの喜びは忘れられません（*Chem. Phys. Lett.*, **20**, 197-200 (1973)）。

## 分子研の草創期に参加

この頃から井口先生は赤松・長倉先生等と分子研の設立に奔走され、1975年の発足と共に初代教授の一人になりました。私もPDになり、ゼロからの研究室作りを体験しました。最初は舗装が無く、雨が降るとゴム長が必須でした。初代技術課長の高橋重敏さんに、

装置開発や、自覚を持った技術職員の大切さを教わり、事務方まで一緒の花見等もありました。物性研で共同利用に慣れていた私にも、分子研の国際性や組織運営の風通しの良さ、世界を先導する研究をという緊張感、外国人研究者が周囲に普通にいる環境は新鮮でした。これを築かれた先生方の先見性と御努力に今も敬意を覚えます。当時の分子研は好条件に恵まれ、東大の藤山常毅さん（後分子研）から、「良い研究ができなかったら言い訳できない」と言い聞かされました。先生方は大きな責任感をもって着任されたと思います。

1978年に井口研の助手になりました。この時期、多くの有機伝導体の開発や有機超伝導体の発見（1980年）があり、理学系の固体研究者は次々にこの分野に進出し、有機半導体の研究は寂しくなりました。私自身は「次」を求めて試行錯誤し、試料を高分子系に広げ<sup>[1]</sup>、超高真空を導入してなんとか新しい方向を出しました。分子研の研究室も増え、那須奎一郎助教授（現高工機構）、三谷洋興助教授（後北陸先端大）、榎敏明助手（現東工大）、斎藤軍治助手（後京大）、佐藤直樹技官（現京大）等の若手と夕食後に時間無制限の「デ

スマッチ」討論を行う機会もあり、理論屋から合成屋までの思考や言葉の違いを悟ると共に、努力すればギャップはそれなりに埋められ、より広い視野が得られることも学びました。

また、多くの方々が共同利用で来訪されました。阪大の城田靖彦先生（現福井工大）の高分子や電子写真材料、千葉大の上野信雄さんと夢中になった長鎖アルカンの研究などが印象に残っています。当時アルカンは注目されなかったのですが、今になって多くの引用を受け、「自分のセンスに照らして本当に面白いと思うことを追求すれば、世界には必ず理解者がいる」ことを学びました。井口先生は、孫悟空を掌中に遊ばせるお釈迦様のように、私達に好きに研究をさせ、時に深夜の実験室に現れては、様子を聞いて下さいました。

[1] 総説として、K. Seki, "UPS of Polymers", in H. Baessler (ed.) "Optical Techniques to Study Polymer Systems", Elsevier, Amsterdam (1989).

## シンクロトロン放射光と UVSOR

放射光との出会いは、1979年に田無の物性放射光施設を使うお誘いで、

皆で出かけて、菅滋正助教授（後阪大）の御指導下、素粒子実験の加速器に付いた一本だけのビームラインに分光器を取付け、悪戦苦闘の末、何とか延伸高分子の軟X線吸収（NEXAFS）を測りました（*Chem. Phys. Lett.*, **70**, 220 (1980)）。有機物質の内殻異方吸収の第一例と思います。

その後分子研にUVSOR施設を作ることが決まり、所内ビームラインの一本を担当しました。有機物質は表面科学の方達には「汚染物」として嫌われていたので、世界でも珍しい、有機固体専用の光電子分光ラインを作ることになりました。まず、施設の渡辺誠助教授やその驚異的な人脈に支えられ、技術課、特に酒井楠雄氏（後技術課長）の献身的御支援などもあって、何とか使える斜入射分光器を作りました。

1983年には、E. E. Koch博士（ハンブルグ放射光施設）のもとに半年留学しました。世界から最先端の研究者と情報が集まるのを目の当たりにし、分子研を設立された先生方の目指されたCOEを実感できました。また、長鎖アルカン配向膜の角度分解光電子分光で、世界で初めて高分子（ポリエチレン）の分子内バンド分散を大部分実測する等の成果も挙げました（*Chem. Phys.*,

105, 247-165 (1986)). 帰国後、光電子分光装置の設計製作を行い、森健彦助手(現東工大)、藤本齊博士(現熊本大)の参加を得、藤本さんの奮闘で、最初のデータとして、上記のアルカンのバンド分散の全体を決定できました(*Chem. Phys. Lett.*, **141**, 485-488 (1987). 完全な決定は *Phys. Rev. B*, **60**, 9046-9060 (1999).).

### 広島大学：放射光による研究の展開と界面研究の開始

1986年、広島大学理学部物性学科の太田俊明教授(後東大、現立命館大)の助教授に転出しました。またゼロからの出発です。研究室を挙げて高工研へ放射光実験に行きました。ここでNEXAFSが測りやすくなり、薄膜の配向や電子構造解析の有力な新手法になっているのを太田先生や横山利彦氏(現分子研)に学びました。私が分子研で測ってきた物質群は幸い殆ど手つかずで、これらの系統的測定で、面白いように新知見が得られました<sup>[2]</sup>。

[2] 総説として、K. Seki, H. Ishii, and Y. Ouchi, in "Chemical Applications of Synchrotron Radiation" (Ed. T. K. Sham), pp. 386-516, World Scientific, Singapore (2002).

UVSORでの光電子分光研究も、関係者の御理解や優秀なPDの常駐もあって、高分子、フラーレン、高温超伝導体等で成果が次々に出ました。この時期、高工研からは旅費を頂き、分子研ではUVSOR客員助教授にして頂いて自由に往復でき、本当に助かりました。

もう一つ、写真関連系の研究があります。フィルム中の銀ハライド(AgX)微粒子に単分子層程度の色素を吸着させると、色素の吸収波長でも感光が起こります。この分光増感に関連し、富士フィルムの谷忠昭氏と共に色素/AgX界面の電子構造を調べ、色素からAgXへの光誘起電子移動で感光が起こるといふ谷氏らの機構が支持されました(*Phys. Rev.* **B49**, 2760 (2004)). これは次の有機/金属界面研究への跳躍台ともなる、重要な研究でした。

### 名古屋大学：有機界面研究へ

1991年、名大理学部化学科に転任しました。また皆で分子研や高工研に行って新データを確保し、お金を稼ぎ、有機界面研究用装置を作り始めました。大内助教授も分子研の客員にして頂き、大変助かりました。この結果、何とか界面研究用の超高真空光電子分光器ができ、UVSORでも金属単結晶が利用可能になり、石井久夫助手(現千葉大)らが有機/金属界面の系統的測定を開始しました。幸いその結果は、1980年代末から勃興してきた有機EL素子などの有機薄膜デバイスとの関連もあり、かなりの注目を集めました。最初の論文(*Appl. Phys. Lett.* **67**, 1899 (1995)) 発表直後の米国材料学会(MRS)で多くの研究者に声を掛けられたこと、翌年、有機ELの先駆者である九大の筒井哲夫先生が開かれた第一回有機EL国際会議に招待され、界面の基礎研究は重要だと励まされたのが有難い思い出です。この後、分野初の総説を書き(*Adv. Mat.*, **11**, 505

(1999))、初の国際研究集会を名大で開きました。

このころ名大化学チームが科研費拠点形成(COE)プログラムに採択され、主要大学に置かれたVBLにも加えて貰い、諸手法での総合的な有機界面解明が可能になりました。大学の貧困に社会の目が向き、改善された時期に、その恩恵を蒙ることができたのは幸いです。

分子研との関係は、研究面では主にUVSORで続き、名大・千葉大のメンバーが流動教官となり、BL8B2の装置を更新しました。また、運営協議員など、7つの委員を勤めました。色々と教えて頂いた一方、外部委員にしろ、科研費審査員にしろ、文科省の仲間同士として安く使い合うのではなく、専門家としての正当な待遇を行える制度を整備すべきだと思います。例えばJSTや民間財団と、同程度の選考を行った報酬を比べると明らかでしょう。

2002年からは、科研費学術創成研究費に採択され、上野さんらと有機界面の前線をさらに開拓できました。有機界面は予想より遙かに広く深い世界で、固体物理、有機物性化学、表面界面科学、電子工学にまたがる新しい学際領域として、新鮮なインパクトを与えています。世界の研究者との連携は2007年度開始の学振先端拠点事業に連なりました。

以上のように、分子研発足後の30年、色々な形で分子科学と分子研に関わってきました。以下、これらについて、特に私の専門に近い分野に関連して述べたいと思います。

## 精密科学としての分子科学

「分子科学」という分野は、1960年代の日本で独自の発展を遂げたと思います。水島三一郎先生に始まる分子構造研究、長倉先生や田中郁三先生らの電子状態研究などの化学者グループと、小谷正雄先生らの物理学者グループが科研費などで協力し、広い視点での研究が発展しました。討論の場としても分子構造総合討論会が1963年に発足しました<sup>[3]</sup>。物理学者との連携もあり、この分野には、徹底的に思考し、厳密な実験や理論でそれを検証するという、精密科学の考え方が根付いていると思います。これは基礎科学にとって大切に、十分な基礎的鍛錬を受けておれば、周辺分野に打って出ても、色々なバリエーションを安心して行えます。このような「空気」は、分野の財産として大切にしたいし、分子研でも是非尊重して頂きたいと思います。これは、純粋基礎研究しかやるな、ということではありません。堅固な基盤があれば、様々な発展形（いわば応用分子科学）が、適切に分子研の活動に含まれることは、分野の活性化のためにも、分子科学が社会に貢献できることを示すという意味でも、望ましいと思います。

[3] もう少し詳しくは、例えば：  
<http://www.molsci.jp/bkk/about.html>

## 分子研と分子科学コミュニティー

分子研は、勃興する分子科学で世界を先導する研究成果を出すと共に、分野

のセンターになることをめざして1975年に創設されました。具体的には分子科学研究会が設立されて分野の声を結集し、また多くの方々の御努力により創設に至ったものです。この経緯もあり、研究会は、分子研の委員を推薦する学会等連絡会議の構成員の半数の推薦枠を受けました。皮肉なことに研究会自体は大目的を達した後は活動が低迷しましたが、再建され、会勢は挽回されて、一昨年分子構造総合討論会と合同して分子科学会となりました。

分子研発足当初は、分子構造総合討論会・分子科学研究会を軸とする研究者と、分子研内の研究者はほぼ均質でしたが、諸施設・センター等の整備もあり、諸分野の方々が分子研に加わられました。この方々には、御自分の研究が「分子科学」であるのは当然ですが、それが、いわば伝統的「分子科学」との重なりが大きいとは限りません。

これらの新展開と「伝統的な分子科学」は、相互に刺激し、手を取って発展すべきものですが、現実には、発表の場や人脈の相違などで容易ではないかもしれません。これは分子科学会設立に当って表面化し、討論会・研究会の研究者が「分子科学」を独占するのといった議論がありました。この種の問題は、意識的に交流を刺激し、時間をかけて解消すべきものでしょう。ポイントは、「足を引っ張る」のではなく、「前向きに協力して進む」ということです。

## 分野のハブとして(1)：国際性と研究集会

分子研に移って、「外国人研究者が普通にいて、共同で研究、生活するのが当たり前」ということに別世界の観を覚えました。これは今でも教育のからむ大学では容易ではありません。分子研は、世界標準の研究所として、これを当初から実現してきました。そのメリットは事務体制、刊行物、宿泊施設などを含めて健在で、大きな財産と想います。これをさらに活かすには、人的交流や会合開催などで国際ネットワークを強化し、分野を先導する研究集会の開催などにより、世界のハブとなることと思います。卓越した研究成果とあいまって「誰もが知り、誰もが行きたがる」COEとしての地位を築き、保てるでしょう。

この点で、中断していた「岡崎コンファレンス」が再開されたのは大変喜ばしいと思いますし、分子研外の機関・資金も活用しての会合開催も有効と思います。また、小規模の国内外の研究集会の機動的開催も萌芽的分野の育成に有効で、小規模資金で「結晶核」形成が行えます。私の関与した例では、イオン液体分野で濱口宏夫教授（東大）と名大で開いた本当の小研究会から、特定領域研究まで発展した例がありました。

## 分野のハブとして(2)：いまひとたびの「共同利用」

分子研の発足当時、大学との間には設備面での明らかな格差があり、設備利用や共同研究は、大学の研究者にとって大きな魅力でした。私もこれに大きく助けられました。しかしその後、大

学の設備改善に伴って、このような魅力はかなり減退してしまいました。

ところが、最近事情は再び変わってきたように思います。COEなどで厳しい選別が行われ、選ばれた拠点の教員・院生は恩恵を享受するものの、選に漏れると研究環境は厳しくなります。このとき、意欲ある教員・院生が共同利用研を利用することで研究を継続し、成果を出し続けることには、大きな意義があります。基礎研究では、優れた研究者が潤沢な資金でピークを出すのは大切ですが、多くの研究者が自由な発想に立ち、様々な試みを行うことも同様に重要です。これは、生物学における「種の多様性」の確保と同様で、幅広い基礎研究という根があって、初めて太い幹が育つのです。このような共同利用研による基礎研究支援には、十分な旅費・滞在費と、ある程度の研究費の確保が重要です。最近は大型施設を軸とする共同利用に重点的支援が行われ、これも重要ですが、分子研や物性研などでの小中規模の共同利用が圧迫されてはならず、むしろ充実されるべきだと思います。

### 分子研と有機電子物性研究

分子科学では、孤立分子の研究と並んで、分子集合体や、分子と固体の複合系等の研究が重要です。これらは、合成化学の力で自由に作れる孤立分子の特性と、制御は容易でないが、多彩な可能性を与える集合体の構造・相互作用がおりなすもので、研究者の物質観に従って無限の展開があり、一つの分子、一つの集合系が世界を変える可

能性があります。

私自身は、このうち電子機能性有機固体とその薄膜を主に扱ってきました。日本でのこの分野は、上述したように、80年代から理学系研究者は導電体・超伝導体に集中し、これと別に、80年代後半から、主に工学系研究者の努力で、EL素子・太陽電池・トランジスターなどの有機半導体薄膜デバイスが発展しました。この両分野での日本のポテンシャルは高いものの、両分野の交流や融合は、欧米に比べてまだ不十分です。

関連分野として、さらに単分子、単層分子膜、ナノチューブなどの分子スケール電子電気物性の測定があります。この分野での日本の研究活動は、欧米に比べてまだ十分とは言えませんが、ナノ科学の基幹分野として重要で、是非さらなる活性化が望まれます。

分子研では発足当初、井口・丸山両教授を軸に結晶・膜物性の研究が展開され、後任の薬師・小林両教授による伝導体単結晶の研究に引き継がれました。一方、1997年度以降、分子物質開発研究センターが発足し、分子スケールナノサイエンスセンターに引き継がれています。後者は分子研独自のナノ科学の体系的な研究を掲げたセンターですが、専任教授は一名でテーマはかなり分散しており、物質科学研究領域の今後と併せて、集合体の科学のどこに着目して切りこむのか、研究所としての戦略を立案するのが大切でしょう。それを人事に反映し、上述した分野間の融合と併せて、日本・世界のハブとして機能されることを期待します。この分野は、基礎科学として重要なだ

けでなく、自然な形で応用につながり、社会貢献を通じて研究所の存在価値を示せるという点でも大切です。

またこれらの分野も含め、分子スケールからバルク単結晶まで、絶縁体から伝導体までの分子性物質の物性研究者が交流する場を分子研が提供することで、各分野での「次」の芽が出せると思います。これは特に若い世代にとって重要で、関連分野の息吹に触れることが、柔軟な頭脳に良い刺激を与えます。さらに国際的な側面を加えられれば、次世代を担う人々の世界的ネットワークが若いうちからできることになり、素晴らしいでしょう。

### 放射光とUVSOR

ここでは、分子性固体・薄膜などの研究について書きます。以前は超高真空には入れて貰い難かった有機物質ですが、今では表面科学と有機物性科学の境界領域として多くの研究者が参入し、活発な研究が展開されています。このような研究には、真空紫外～軟X線域をカバーでき、しかも光学素子が炭素の焼き付きで汚れていないことが重要ですが、世界的にもこんなビームラインは多くありません。この種の課題は分子性物質を主対象とする分子研には良く適合するものです。従来は残念ながら内部スタッフにこれを専門にする方がなく、我々の力では飛躍的發展まで実現する余裕はありませんでした。今後人的にも設備的にも注力して頂き、この分野でさらに世界をリードできれば素晴らしいと思います。



以上述べてきた、分子研への期待をまとめると、次のようになるかと思えます：

・分野を牽引する優れた研究者を招致し、世界の注目を浴びる成果を発信すること（発信に関しては、HPのない研究室やセンターがまだ多い。英文での整備も半分）。

・国内の関連研究室との連携ネットワークを構築し、共同利用にも積極的に取り組み、各分野での日本・世界のハブとなること。

・分野の将来を見据え、次世代を担う若い研究者を含めた先導的な国内・国際研究集会を、分子研内外で組織すること。

・機器センターに分野の標準的設備を備え、設備利用や客員の研究活動に供して、各グループの共同研究と併せ、日本のこの分野の根を支えること。

・分子集合体の物性に関しては、研究所全体としての、バルク～ナノサイエンスにわたる戦略を策定し、整合性のある人事を行うこと。

・放射光に関しては、UVSORに有機固体・薄膜・界面研究スタッフを充実させ、設備更新を含めてこの分野で世界を先導すること。

こうして書いて来てみると、分子研には創設から現在まで、大変お世話になりました。改めて深く感謝すると共に、今後の発展を心から祈って筆を擱きます。

(2008年6月30日急性骨髄性白血病で死去、享年60歳)

## この原稿の経緯

昨年、分子研レターズ委員になった私は分子研への提言を書きただけそうな候補者を探っていました。関先生からは「どんどん仕事が増えて、我が身が我が身でなくなっています」「互いにできるだけ無理をしないようにしましょう（と言いながらこちらもこの時間にキーを叩いているわけですが）」などのメールを以前からもらっていたため、無理だろうなと思いつつ、昨年10月にお会いした際、ご都合を尋ねてみました。案の定、当分忙しいので無理そう、とのお返事でした。

あきらめていたところ、入院1ヶ月後の12月末に病床から「できれば是非書かせて

頂ければ」「書くならば、研究を始めた頃から書き綴るスタイルで」とのメールがあり、その後、1月末に「転院や諸検査のやり直しなどで時間を食った」「誠に申し訳ないのですが、予定号の次に」、3月に「治療は当初予定より長引き、まだ当分は続きそう」「原稿は出来るだけ早く仕上げたい」との連絡が来ました。

しばらく間が空きましたが、関先生も国際諮問委員として深く関係されてきた国際会議シリーズのご報告を兼ねて、病状や原稿の状況をお伺いしようと思って帰国した6月30日その日、分子研に向かう電車の中で突然の訃報を受けた次第です。次回を2010年に主催するカナダ側では、関先生を基調講演者としたいが入院中なので決めかねている、その

次は日本ではどうかとの打診もある、ことも相談事項でした。

7月3日の告別式の際、関研究室の大内准教授に原稿の件をお話したところ、関先生は「一応預かっておいて」「また作業できるようなら、手を入れたい」「もしこれ以上手をいれるのが難しければ、小杉さんへの送付をお願いするかも」と、6月11日に研究室に原稿を託されていることが判明しました。

以上がこの原稿の経緯です。手直しされるおつもりもあつた原稿がそのまま提出されたことが無念でなりません。ご生前、同系同門の先輩である関先生にはUVSOR利用研究や国際交流などに多大なご恩を賜りました。心より感謝申し上げます。

(小杉信博)

野口 宏

中日新聞名古屋本社活性化審議室次長  
(前文化部長。2006年4月から2008年7月まで分子科学研究所運営顧問)

# 未来を拓く基礎学術



## のぐち・ひろし

1952(昭和27)年、長野県茅野市出身。

早稲田大学第一文学部仏文科卒業。

中日新聞飯田支局、東京・中部報道部、長野支局デスク、岐阜支社報道部長などを経て、2006年3月から名古屋編集局文化部長。旧石器・縄文時代を中心とした考古学取材がライフワーク。

08年8月から名古屋本社活性化審議室次長。

趣味は登山。今夏も八ヶ岳の硫黄一横岳一赤岳一阿弥陀岳、北アルプスの白馬一小蓮華一白馬乗鞍などを歩く。

新緑がまぶしさを増す五月初旬、京都へ出掛けた。歴史探訪は好きだが、今回は寺巡りではない。京大に山中伸弥教授を訪ねたのである。皮膚などの体細胞から、神経や腸管など体のさまざまな細胞に分化できる「人工多能性幹細胞(iPS細胞)」を作った研究者である。同じ万能細胞でも「胚性幹細胞(ES細胞)」は、受精卵を壊して作るため倫理上の問題が指摘されるが、iPS細胞にはその心配がなく、難病の原因解明や新薬の開発、移植医療など、幅広い応用が期待されている。

訪問の目的は、山中教授に弊紙の第61回中日文化賞を贈るにあたって、正式なあいさつと贈呈式の打ち合わせをするためであった。マウスの皮膚からiPS細胞を作るのに成功したのが二年前。昨年十一月には、ヒトの皮膚で成功したと発表して世界を驚かせた山中教授は、国内外を飛び回る多忙な生活を送られている。無理を言って取材の時間をつくっていただき、京都支局の記者二人と一緒に研究室に入った。ノーベル賞に近いと言われる研究者は、どんな人物か。膨らむ好奇心とともに、緊張感も高まった。

気さくで謙虚な人柄。第一印象である。柔道二段のスポーツマンで、よく鴨川沿いの道路を走るといふ。もともと

と整形外科医だった山中教授が基礎研究に移った理由についてお聞きすると、教授は次のように話された。

「基礎的な理詰めの考え方というか基礎研究を一度やって、また臨床に戻ろうと。いったん研修医になって、このままずっと外科でやっていくと思っていたんですが、その間にちょっとだけ(基礎研究の)考え方を身につけたいなと思いました。なかなか治らない病気がいっぱいあるのも事実で、そういうものにも基礎研究は役に立つ可能性がありますから」

臨床と基礎研究の間で揺れた時期。しっかりした基礎研究のやり方や考え方を学びたかったという研究者の情熱が伝わってきた。と同時に、山中教授が繰り返された「基礎研究」の言葉が、新鮮な響きをもって感じられた。基礎研究を選択された教授の決断が、iPS細胞作製につながったのだと思うと感慨深いではないか。

何事においても基礎は大事なのだ。私は、本筋を離れて妙に納得していた。新聞記者でも同じであると。今は、電話やインターネットでいくらでも情報を収集できる。しかし、私たちはネット情報をどこまで信用できるだろうか。やはり、基本は直接・対面取材である。取材相手の目の動きや息遣い、色、音、

臭いなど現場に立ち会わない限り、決して得られない“情報”がある。事実を、真実を客観的に伝えるには、そうした作業が不可欠なのである。若い時に比べ、取材に出ることは少なくなったが、一人の記者として「現場」を大事にする気持ちに変わりはない。

話が脱線してしまった。私が山中教授の話を伺っている時に頭に浮かんだことが、もう一つあった。それは、分子研の中村宏樹所長の言葉である。昨年十一月、上下二回にわたって弊紙の夕刊文化面に寄稿いただいた「先進文化国家・日本を築くために」。示唆に富んだ論考であった。特に印象に残っている言葉を紹介したい。『「学術研究」は技術的応用を直接の視野に置かない息の長い基礎科学の研究を意味する。それは、何十年、何百年の後に新しい科学技術を生み出す『種』となり、新しい文化の礎となるものなのである』。

私は、科学や芸術など文化の振興こそが未来を拓く力になると信じている。縁あって分子研の運営顧問を務めさせていただいているが、基礎学術研究の危機をこの国の危機ととらえている先生方が、憂国の志士、に見えたこともある。しかし、わが国の基礎学術研究への投資は先進国の中でも非常に低いレベルであると聞いた。経済至上主義

の社会にあつて、産業に直結しない研究に企業の資金は流れにくい現状もある。世の中全体が近視眼的で、懐の浅い社会になってしまっているのである。基礎学術の振興は、未来を拓く力になる——そうした視点で、私たちマスコミも報道を続けていかななくてはならないだろう。今、あらためて思うところである。

◇ ◇

何だかいかめしい。名前を聞いただけで身構えてしまいそうだ。「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」。基礎学術研究機関としての存在は聞いていたが、活動内容などはほとんど知らず「これは、手ごわいぞ」と。それが、分子研に対する正直な印象であった。

中村宏樹所長が中日新聞社を訪ねてこられたのは、一年余り前のことである。中村所長は二〇〇〇年に「化学反応における非断熱遷移現象の研究」で、第53回中日文化賞を受賞されている。そんな縁もあって、分子研の運営顧問をお引き受けすることになった。いや、なってしまったと言った方が当たっていよう。専門を離れ、文化的視点から、事業計画や管理運営について助言するのが仕事ということだった。しかし、安請け合いは怪我のもと。中村所

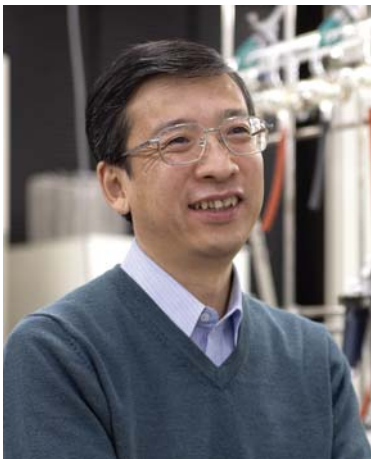
長や分子研関係者の期待を裏切ってしまった気がする。良い結果を挙げるとしたら、中村所長に寄稿いただいたことと、私自身の目が基礎学術研究の重要性と分子研の現状に向けたことぐらいであろうか。

最後に、報道に身を置く者として一点だけ申し添えておきたいことがある。それは、基礎学術研究の拠点として、分子研の存在意義を広く外部にアピールし続ける必要性である。確かに、目先の利害にとらわれず、未来を見据えた真理の探究を続けることは基本であり、理想だ。しかし、それを実現させるためにも広報の充実が求められる。岡崎の分子研ではなく日本の分子研であるという自負をもち、記者会見は少なくとも愛知県庁で行うべきだろう。重要な会見については、東京と名古屋で同時開催など、より積極的な“広報活動”を期待したい。国の将来を憂える内向のエネルギーを外向のエネルギーに変え、活動状況をできる限り分かりやすくアピールしてはどうだろうか。市民、マスコミ、政治家など、分子研への理解者を増やす努力も必要だと考えるのである。

# 気体分子センサータンパク質の構造と機能

## 青野 重利

岡崎統合バイオサイエンスセンター  
戦略的方法論研究領域  
生物無機部門 教授  
(併) 生命・錯体分子科学研究領域  
生体分子機能研究部門



あおの・しげとし

1959年愛媛県生まれ。1982年東京工業大学工学部卒業、1987年同大学院理工学研究科博士課程修了(工学博士)。日本学術振興会特別研究員、ジョージア大学博士研究員、東京工業大学助手、北陸先端科学技術大学院大学助教授を経て、2002年5月より岡崎統合バイオサイエンスセンター教授(分子科学研究所教授を併任)に就任、現在に至る。

研究テーマは、新規な機能を有する金属タンパク質の生物無機化学的研究。

### 気体分子が示す新たな生理機能

気体分子と生物との関わりを考えた時、まず頭に浮かぶのは酸素であろう。酸素は、我々人間を含め、酸素呼吸で生育するすべての生物にとって必須の気体分子である。光合成反応の基質として機能する二酸化炭素も、生物と関わる気体分子としてはポピュラーなものである。しかし、これら以外にも、一酸化炭素、窒素、一酸化窒素、水素、硫化水素、メタン、エチレンなど多くの気体分子が、様々な酵素反応の基質、あるいは生成物となることが知られている。

最近になり、気体分子が示す新規な生理機能として、酵素反応の基質あるいは反応生成物としてではなく、気体分子がシグナル分子として機能して様々な生理機能制御に関与していることが報告され始めた。これまでに、酸素、一酸化炭素、一酸化窒素などの気体分子が、細胞の運動性制御、遺伝子発現制御、細胞内での代謝系制御などのプロセスにおいてシグナル分子として機能していることが報告されている。これらの気体分子が生体中でシグナル分子として機能するためには、気体分子を感知するためのセンサータンパク質の存在が必要不可欠である<sup>[1]</sup>。我々の研究グループでは、気体分子センサータンパク質を研究対象とし、これら気

体分子センサータンパク質の構造機能相関の解明を目的とした研究を行っている。ここでは、それらの研究の中から、一酸化炭素センサータンパク質(CooA)と酸素センサータンパク質(HemAT)に関する研究成果を紹介する。

### 一酸化炭素センサータンパク質、CooA

一酸化炭素(CO)が呼吸毒となることはよく知られている。しかし、COがポジティブな生理作用を有しているとは、ながらく考えられてこなかった。ところが、COを「餌」として生育可能なある種の細菌では、COの代謝反応に関与するタンパク質の発現がCOの有無によって制御されていることが分かった。この発現制御は、転写レベル(DNAからメッセンジャーRNAが合成される反応)での制御であり、CooAと名付けられた転写調節因子が、COに依存したタンパク質発現制御に重要な役割を果たしている<sup>[2]</sup>。

CooAは、約25 kDaのサブユニットが二量体を形成したホモダイマー構造をとっており、各サブユニットには1分子のヘム(鉄プロトポルフィリン)が存在している。CooA分子中に含まれるヘムがCOセンサーの本体として機能しており、ヘムにCOが結合することにより、CooAは転写調節因子

(実際には、転写活性化因子として機能する)としての活性を獲得する。一方、酸化型(ヘム中の鉄イオンが $\text{Fe}^{3+}$ の状態)、および還元型(ヘム中の鉄イオンが $\text{Fe}^{2+}$ の状態)CooAは、転写調節因子としては不活性な状態である。CooAの転写調節因子としての活性は、CooAが標的DNAに結合できるか否かによって制御されている。すなわち、CO結合型CooAのみが標的DNAへの結合能を有しており、他の場合には標的DNAに結合することができない。

CooA中に含まれるヘムは、次に示すような特徴を有している。(1)酸化型、還元型、CO結合型、いずれの場合も6配位低スピン構造を有している。(2)酸化型、および還元型ヘムにはN末端窒素(光合成細菌*R.*

*rubrum*由来のCooA(Rr-CooA)の場合はN末端プロリン、CO酸化細菌*C. hydrogenoformans*由来のCooA(Ch-CooA)の場合はN末端 $\alpha$ -アミノ基)が軸配位している。(3)還元型は配位飽和な6配位構造を有しているにも関わらず、生理的条件下においてCOと容易に反応し、CO結合型を生成する。(4)ヘムに配位したN末端とCOとの間で配位子交換反応が進行し、CO結合型が生成する。

これらの性質は、CooAの機能発現とも密接に関係している。COによるCooAの活性化機構については、すべてが明らかになっている訳ではないが、COがヘムに配位することによりCooA分子のコンフォメーション変化が誘起されていることは確かである。

このコンフォメーション変化のドライビングフォースとして、次のような可能性が考えられる。CooA分子中のヘムにCOが配位する際には、ヘムに配位していたN末端がヘム鉄から解離する。このため、N末端を含むポリペプチド鎖のコンフォメーションは、CO配位の前後で大きく変化することとなり、このコンフォメーション変化が分子全体のコンフォメーション変化を誘起する可能性が考えられる。また、COがヘムに配位することにより、ヘムポケット中でヘムの回転が起こることが分かっており、このようなヘムの動きがヘム周辺のコンフォメーション変化を誘起し、最終的に分子全体のコンフォメーションを変化させている可能性もある。

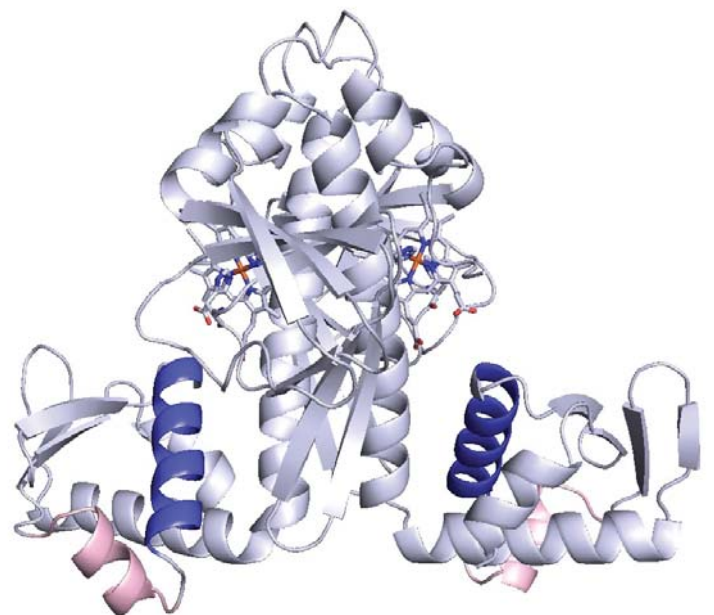


図1 イミダゾール結合型Ch-CooAの構造。タンパク質部分をリボンモデル、ヘムをスティックモデルで表示。青色で示したヘリックスが、DNA結合モチーフであるヘリックス・ターン・ヘリックスモチーフ中の認識ヘリックスであり、標的DNAと直接相互作用する部位にあたる。

COによる活性化機構も含め、CooAの構造機能相関を解明するためには、不活性型および活性型CooAの分子構造を明らかにする必要がある。現状では活性型CooAの構造解明には至っていないが、不活性型の構造についてはアメリカのグループが報告した還元型の構造と、我々が決定したイミダゾール結合型の構造の二つが明らかになっている。X線結晶構造解析により決定したイミダゾール結合型Ch-CooAの構造を図1に示す<sup>[3]</sup>。COが配位する場合と同様に、イミダゾールはヘムに配位していたN末端アミノ基と交換する形でヘムに配位しているにも関わらず、CooAは不活性型の構造であった。この理由として、図2に示すような、Met5の主鎖カルボニル酸素とヘムに配位したイミダゾールとの間に形成された水素結合の存在が考えられる。COがヘムに配位した場

合には、ヘムに配位したCOと周辺アミノ酸との間に特別な相互作用はない。しかしイミダゾールが配位した場合には、Met5カルボニル酸素とイミダゾール間に水素結合が存在するため、COが配位した場合に比べて、ヘムの回転およびヘムから解離したN末端ポリペプチドの動きが抑制されているものと推定される。その結果、CooAの活性化には不十分なコンフォメーション変化しか起こらないため、不活性型の構造に留まっていると考えられる。

## O<sub>2</sub>センサータンパク質、HemAT

HemAT-Bsは、枯草菌のO<sub>2</sub>に対する走化性制御系においてシグナルトランスデューサーとして機能するO<sub>2</sub>センサータンパク質である。枯草菌のO<sub>2</sub>に対する走化性制御系においては、HemAT-BsがO<sub>2</sub>の存在を感知した後、一連のシグナル伝達反応が進行し、最

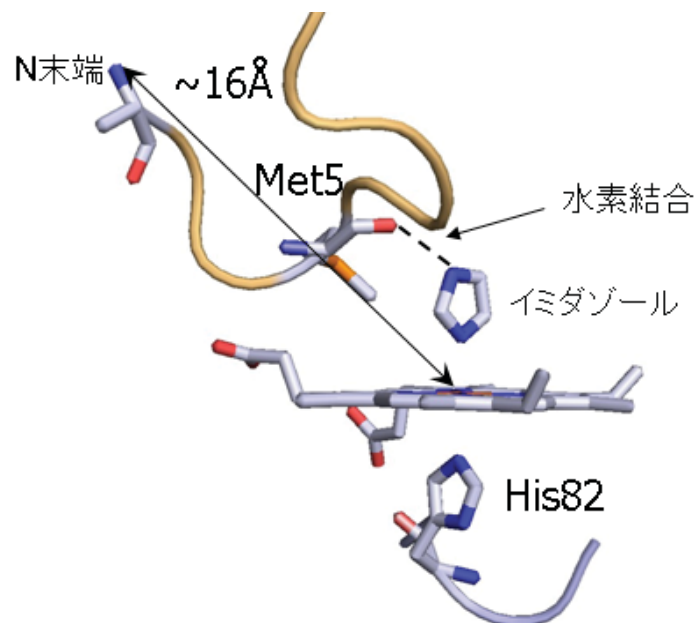


図2 イミダゾール結合型Ch-CooA中のヘム周辺の構造

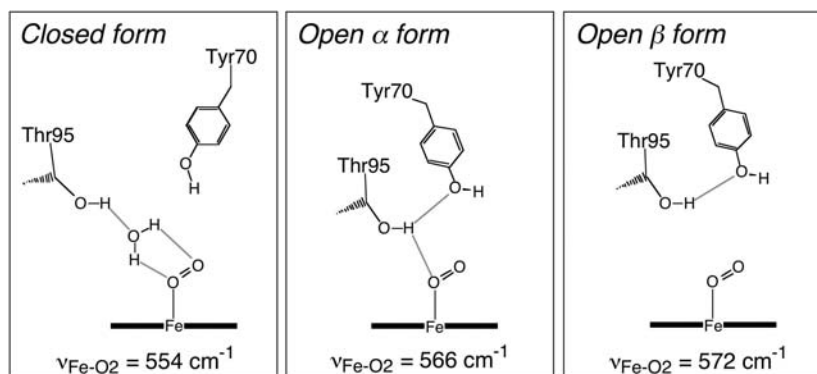


図3 酸素結合型HemAT-Bs中の酸化型ヘムが示す水素結合ネットワーク

最終的にべん毛の回転方向が制御されることにより細胞の運動性が制御されている。

HemAT-Bs中のセンサードメインは、ヘムを含んだグロビン構造を有している。共鳴ラマン分光法を用いた研究により、O<sub>2</sub>結合型HemAT-Bsには、ヘムに結合したO<sub>2</sub>と周辺アミノ酸残基との間に形成される、図3に示すような異なった水素結合ネットワークを有する3種のコンフォマーが存在することが分かった。ここでは、ヘムポケットに存在するThr95が、ヘムに配位したO<sub>2</sub>との水素結合に関与している。O<sub>2</sub>の代わりにCOやNOが結合した場合には、ヘムに配位したこれら外部配位子と周辺アミノ酸残基間に水素結合等の相互

作用は存在しない。これらのことから、Thr95とヘムに配位した酸素との水素結合の存在が、HemAT-BsによるO<sub>2</sub>の選択的センシングに重要な役割を果たしていると考えられる。

HemAT-Bsによる選択的O<sub>2</sub>センシングには、ヘムに配位したO<sub>2</sub>への水素結合のみではなく、ヘムプロピオン酸基と周辺アミノ酸残基間での水素結合ネットワークが重要な役割を果たしていることも明らかになっている。すなわち、HemAT-Bs中のヘムには、O<sub>2</sub>、CO、NOいずれも結合可能であるが、生理的なりガンドであるO<sub>2</sub>が結合した場合にのみ、His86とヘムプロピオン酸基との間で水素結合が形成される。この水素結合形成は、ヘム遠位空

間のコンフォメーションに影響を及ぼし、Thr95とヘムに結合したO<sub>2</sub>間での水素結合形成を誘起する。His86をAlaに置換したH86A変異体では、ヘムプロピオン酸基に対する水素結合が形成されない結果、Thr95とヘムに結合した酸素間での水素結合も形成されない。このように、生理的なりガンドがヘムに結合した場合にのみ、ヘムおよびヘムに結合したO<sub>2</sub>と周辺アミノ酸残基間での特異的水素結合ネットワークの形成がおこり、その結果、HemAT-Bsのコンフォメーション変化が誘起され、最終的にHemAT-Bsの機能発現へと至る一連の分子内シグナル伝達反応が完了するものと考えられる<sup>[4]</sup>。

## 参考文献

- [1] S. Aono, *Dalton Trans.* (24), 3137-3146 (2008)
- [2] S. Aono, *Acc. Chem. Res.* **36**, 825-831 (2003)
- [3] H. Komori, S. Inagaki, S. Yoshioka, S. Aono, Y. Higuchi, *J. Mol. Biol.* **367**, 864-871 (2007)
- [4] H. Yoshimura, S. Yoshioka, Y. Mizutani and S. Aono, *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **357**, 1053-10 (2007)

## 分子研シンポジウム2008

分子研シンポジウムが6月13日午後～14日午前に開催されました。このシンポジウムは14日午後のオープンキャンパスに連動させた企画で、昨年度からスタートし、本年度が2回目になります。お話をいただいた講師と講演題目は以下のとおりです（講演順に記載）。分子研OB、総研大OBを中心に4研究領域から推薦された7名の先生方です。

藤田 誠（東大・工 教授）

「自己組織化分子システム」

緑川 克美（理研 主任研究員）

「アト秒レーザーで探る原子・分子の超高速ダイナミクス」

稲辺 保（北大・理 教授）

「分子結晶の設計と機能開発」

谷口 弘三（埼大・理 准教授）

「超高压を用いた有機超伝導体の研究：新超伝導探索と発現機構の理解」

小松崎 民樹（北大・電子研 教授）

「1分子時系列情報から生体分子機能の複雑さを解読する」

Chaoyuan Zhu（台湾 National Chiao Tung University 教授）

「Semiclassical theory with applications for non-Born-Oppenheimer molecular dynamics」

高橋 保（北大・触媒セ 教授）

「新しい分野へのチャレンジ、炭素-炭素結合切断反応の開発」

参加者（参加登録された人数）は、所外53名、所内45名の計98名です。登録されなかった所内参加者もあったようで、一時はコンファレンスセンター小会議室がいっぱいになり、座れない方が十数名いました。所外からは学部生、大学院生、研究者、企業と幅広く参加していただきました。皆さんに総研大への進学や共同研究の提案・申請を促すことを意図して、それぞれの講演の最初に分子研との関わりを紹介していただきました。各講師の分子研や総研大への愛着を感じる話ばかりで、我々にとっても大いに励まされるものでした。13日夕方、所内外の学生、研究者の交流を深めるため懇親会を行いました。懇親会には所内の方の参加



が若干少なく、来年度は特に総研大生の積極的な参加を期待します。参加者の皆さんには分子科学の多様性ととともに、その基礎を支えている分子研の存在意義を感じ取っていただけたものと思います。お忙しい中をご協力いただいた講師の先生方にこの場をお借りして感謝申し上げます。

（藤井 浩 記）





## 分子研オープンキャンパス2008

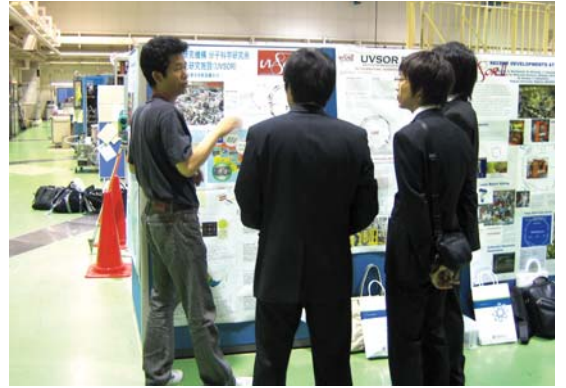
2008年6月14日(土)に分子研オープンキャンパスが分子科学研究所において開催された。本事業は全国の大学院生、学部学生および若手研究者を対象に、分子研で行なわれている研究内容を分かり易く解説することにより、共同研究の機会を拡大するとともに、総合研究大学院大学の物理科学研究科を担う教育機関であることについても、外部の方々に広く認識して頂くことを目的としている。本年度で18回目の開催となるが、広報室の発案でその名称が“オープンハウス”から“オープンキャンパス”へと変更された。また、例年前日から開催される分子研シンポジウムと連携して開催した。本年度は、オープンキャンパスでの申し込み総数は47名、キャンセルが2名で、北は北海道から南は鹿児島まで、学部学生15名、修士課程20名、博士課程4名、その他の方々6名の、総勢45名の参加となった。シンポジウム、オープンキャンパスの双方への参加者は28名であった。

当日は13:15より岡崎コンフェレンスセンター小会議室で説明会を行った。

受付では希望者に「分子科学者がいどむ12の謎」および、「爆発する光科学の世界」を各々6、4名に購入頂いた。分子研、総研大のパンフレット、および募集要項等を資料として配布し、中村所長、永瀬教授、田中教授から分子研、総研大、共同利用について丁寧な説明があった。その後、

明大寺、山手の両地区で14:00から18:00まで実験室を自由に見学して頂いた。写真撮影のため実験室を伺った際、各部屋では先生方がポスターや機器を前に熱心にご説明されていた。参加者は訪問した各グループで十分に時間をかけて、熱心に先生方のお話を聞いていた。また、対応した先生方からも、今年度の参加者は例年より熱心であったことを伺った。当日はシャトルバスの終了間際まで、所内を歩く参加学生さんの姿が見かけられた。

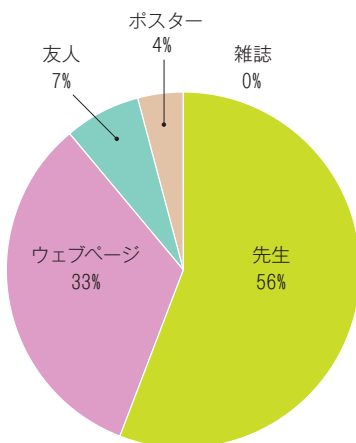
一方、アンケートは、説明会で提出を強くお願いしたが、回収率は51%に留まった。今回のアンケートでは情報の入手先、ポスターの印象等について



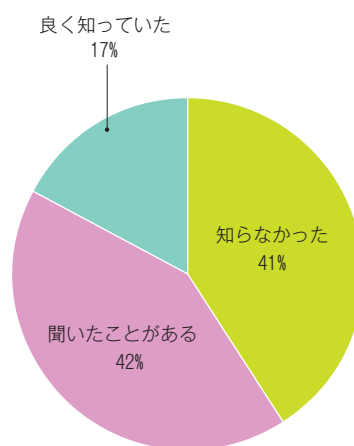
具体的な質問を行った。アンケート結果から、参加情報の入手先は、先生からの紹介、およびホームページが大きな割合を占め、残念ながらポスターは4%に留まった。また、ポスターに関して、その印象が参加に大きく左右するという返答は30%以下であり、所属の機関で過去に見たことがないという返答は73%を占めた。ポスターは目にする機会があれば一定の効果があると思われるが、その機会が十分でないことが伺えた。今回のアンケート結果は、学生さんの多くはインターネットを情報収集の手段としていることを表しており、名称の変更は効果があったのではないかとと思われる。また、自由コメント欄には、「先生方のお話が大変面白く、研究所の学生に不親切なイメージが払拭された。」「もっとこのような機会や、Web、ポスターなどを作成して知名度を高めてほしい。」など、これからの広報活動に有益なコメントを頂けた。

最後に今回のオープンハウスの開催にあたり、所内の皆様、各大学の先生方をはじめ、広報担当の原田美幸様、中村理枝様には大変にお世話になりました。この場を借りて、厚く御礼申し上げます。

(西村勝之 記)



オープンキャンパス開催情報入手先



総研大認知度

## 第7回所長招聘研究会「教育・研究環境のあるべき姿」

我が国が世界規模での資源・エネルギー・環境問題を抱えた現代社会の中で、科学技術創造立国として、これからも持続的に発展していくために、大学および大学共同利用機関が国際的に活躍できる人材を数多く育成し輩出するための大学院教育の改革が不可欠であるとの観点から、分子科学研究所では、毎年、日本学術会議化学委員会と日本化学会との共催で大学院教育戦略・国際化・学術動向・設備・科学政策について多角的統括的に討議する所長招聘研究会を行っている。平成20年度も、5月7日（水）13時から岡崎コンファレンスセンターで参加者70名で第7回所長招聘研究会「教育・研究環境のあるべき姿」が開催された。研究会は分子研所長・中村宏樹の挨拶と日本学術会議化学委員会委員長・岩澤康裕の趣旨説明の後、三つの課題に分けて、以下に示す講師が、それぞれの課題について講演を行った。

本年の研究会も講演後の活発な議論のため、最終的には予定時間から2時間の大幅な遅れを生じ、予定した自由討論の時間がなくなりました。本年の講演は、例年以上に優秀な若手人材獲得のための世界戦略の必要性が強く指摘された。おもな講演を取り上げると、

課題1で、野依良治氏は、米国、英国は国家戦略として多額の奨学金を出して海外からの優秀な留学生の世界的競争戦を行っているのに対して、科学技術創造立国を標榜する日本政府の高等教育への財政支援と国際的頭脳競争戦に関する国家戦力のなさを強く指摘された。大竹暁氏は「日本型研究室の問題点」、「補助金と委託費による競争的研究資金の相違の認識」、「公正な評価と研究者の実行責任」「科学コミュニティの社会に対する説明責任」等の問題点の解決による研究費の増額のための方法論に関して独自の意見を展開された。本田成親氏は、国際間での頭脳

獲得競争の成否が国家の存亡を左右する時代に突入しつつあることを、米国、英国、フランス、ドイツ、オーストラリア、シンガポール、中国の具体的な例を挙げて説明され、この問題に対する日本政府および大学の認識の低さに強い危機感を表明された。

課題2で、西 信之氏は、分子研が中心になって進めている「設備有効活用ネットワーク」の現状と出席者への支援を求める講演を行った。

課題3で、相澤益男氏は、イノベーション創出戦略、人材育成・獲得戦略、環境変動解決への国際的取り組み、持続的成長のための米国、EU、英国、中国、OECD諸国が採用している科学技術政策、第3期科学技術基本計画に沿って日本が取り組むべき財政改革、多様な人材の育成・確保・活躍促進のための方策、評価基準に関して説明された。岩瀬公一氏は「目標設定の明確化」に焦点を絞り、明確な目標設定に基づく

## 「課題1 大学院教育の属実化、戦略性、施策」

野依良治（理化学研究所理事長）「大学院教育の国際化にむけて」

大竹 暁（文部科学省研究振興局基礎基盤研究課長）「国際競争の中の日本——主として研究の側面から」

西本清一（京都大学教授）「グローバルリーダーシップ大学院工学教育の取り組み」

巽 和行（名古屋大学教授）「日独共同大学院プログラム——大学院教育国際化の取り組み」

本田成親（ジャーナリスト）「世界頭脳競争戦の現況とその戦略について」

## 「課題2 化学の学術動向と研究設備」

小池康博（慶応義塾大学教授）「フォトリソグラフィの研究を展開するにあたって」

西 信之（分子科学研究所教授）「化学系研究設備有効活用ネットワークの現状について」

小倉克之（千葉大学名誉教授）「化学の研究展開と研究設備——千葉大学の現状を中心に」

## 「課題3 科学政策と評価」

相澤益男（総合科学技術会議議員）「科学技術政策のグローバル化」

岩瀬公一（文部科学省科学技術・学術政策局科学技術・学術総括官）「政策のねらいと評価」

北澤宏一（科学技術振興機構理事長）「科学技術研究環境の変化について」

有本建男（科学技術振興機構社会技術研究開発センター長）「グローバル・イノベーション・エコシステム」

【世話人】理化学研究所理事長 野依良治、分子科学研究所所長 中村宏樹、日本学術会議化学委員会委員長 岩澤康裕



「ロードマップの策定」、「競争的資金の制度設計と成果の具体的例示」、「自立の法人運営のための目標設定」について説明された。北澤宏一氏は、年間10兆円に達する日本の貿易黒字が20年以上継続しており、さらに日本企業が行ってきた積極的な海外投資で、年間20兆円の投資利益を生み出している日本経済の現状を説明された。その結果として国内での新産業創成と輸出増への意欲の減退によるGDP飽和現象、失業

問題（フリーター問題）、非正規雇用の増大等の「日本病」が蔓延しつつある危険性を強く指摘され、その克服のためのイノベーションの仕掛け作りの緊急性を強く指摘された。有本建男氏は、中国、インドの急激な経済成長を踏まえて、我が国の緊急の課題として国際的に通用する人材の確保、科学と技術の融合、Funding制度と大学改革、国際化を取り上げられた。さらに、大学の質と量の分布を踏まえた人材の確保

の観点からは、今後ますます中国、インドからの人材確保が重要になることを指摘された。

今回の研究会で、筆者は国際間での人材獲得競争での日本の国家戦略の構築と、北澤宏一氏が指摘された定常的な貿易黒字と投資利益がもたらしている「日本病」に対する緊急の対応策を打ち出すことの必要性を強く印象づけられました。

(田中晃二 記)

## 機構長裁量経費事業 若手研究者によるアジア新興国研究機関との研究交流促進 ——マレーシア科学大学との分子科学シンポジウム——

若手研究者育成を目的とした機構長裁量経費事業として、2008年2月5～6日の2日間に渡って、分子研若手研究者助教8名がマレーシア科学大学（University Sains Malaysia, USM）を訪問し、ジョイントセミナー、研究交流を行ったので、この場を借りて報告致します。

本事業は、分子研若手研究者が研究成果を国際的に積極的に発信していくと共に、アジア地域においては特に科学研究発展の先導的役割を担うこと、また新しい国際的な連携関係を築くこ

とを目的として行った。マレーシアはASEAN諸国の中でも近年急速に経済発展する国の一つである。マレーシア科学大学はマレーシアペナン島に位置し、マレー大学に次ぐ教育・研究水準を有する総合大学として知られる。今回、同大学生物学部のKumar博士がホストを務めて下さり、同大学化学学部とのジョイントセミナーが実現した。分子研側は、物質分子科学領域から十代健、西條純一、根岸雄一、石塚智也、生命・錯体分子科学領域から手老龍吾、岡崎統合バイオサイエンスセンターから吉岡資郎、分子スケールナノサイエンスセンターから田中啓文、東林修平、の8名の助教が参加し、USM側からは化学学部からWan学部長、Baharuddin 副学部長を含む教授陣と助教授、講師の若手スタッフ及び学生、生物学部からKumar講師が参加し、セミナーは全体で約30名程度



の規模であった。

セミナー1日目は、冒頭に東林から分子研についてスライドを用いた研究所紹介を行った後、分子研側から8名が、USM側から5名の教授陣が、各々の最新の研究成果について講演し、研究討論を行った。2日目には、数グループに分かれ、化学学部、生物学部の共通施設及び各研究室を回り、施設・設備見学を行うとともに、各研究グループの研究内容について説明を受け、研究討論を行った。マレーシアにおける分子研の知名度はそれほど高いと思われなかったため、セミナーの冒頭で分子研の歴史、位置付け、施設、研究水準、各種プロジェクト、及び総合研究大学について、スライドを用いた紹介を行ったことは、正解であったと思われる。日本の分子科学研究領域における分子研の占める地位について認識を深めることができた。講演については、





分子研側はいずれの講演も高水準の研究内容に聴衆からの反応も高く、質疑応答も活発に行われ、USMの若手研究者、学生も討論に加わった。USM側の講演は、若手によるセミナーという趣旨がうまく伝わっていなかったためか、講演者はいずれも教授陣によるものであった。

USMの研究内容は、政府による応用重視の政策もあって応用研究を中心としたものであり、講演者の研究分野が有機材料化学、無機触媒化学、環境化学、高分子化学と多岐にわたったことを差し引いても、分子研側の基礎研究を中心とした研究内容とはかなりのギャップが認められた。研究設備については、NMR、ガス／液体クロマトグラフィー、マススペクトロメトリーなど基本的な設備が共通設備として近年導入され、またSciFinder、主要なジャーナルなどの情報ソースも利用できることから、基本的な研究環境は現在では整っているように思われる。各々の研究室の設備については研究室間でかなりの差が認められ、日本の研究室と遜色のないグループから最低限の器具さえ揃っていないグループと様々であった。これは、応用研究を目的とした政府のグラントの各グループの獲得状況によるものである。マレーシア全体として外資系メーカーの工場進出は盛ん

で、ペナン島周辺も化学産業、電子機器産業を含む外資系メーカーの工場が多く見られる工業地域であった。しかしながら、これらは製品製造を目的としたものであり、マレーシア国内で研究開発を行える職は極めて限られるとの話であった。このため、化学系の大学／大学院を卒業しても相応の職がなく、化学系への進学意欲が低い、あるいは研究意欲が低い一因となっている。こういったことから、自国産業育成のため、政府の大学機関への研究費は、日本の感覚における応用研究以上に、実際の製品開発を目的としたものを奨励しており、研究内容も必然的にそれを目的としたものとなっている。しかしながら、基礎的な高等教育や基礎研究が欠如していることから、応用研究も表面的なものに留まっており、一部を除いて総じて教員の水準が決して高くない結果となっているように感じられた。近年の経済発展に伴い、研究費の配分、大学の研究設備の改善は徐々に進んでい

るものの、高等教育／基礎研究とそれを担う教育者／研究者の育成が追いついていない。これらの発展なくしては、応用研究、産業育成も容易ではないと強く感じられた。

このような大きな研究の質の違いから、今後の共同研究や研究交流は分子研とUSMの双方にとって相乗的な効果は薄いと考えられる。しかし、日本への留学とその後の共同研究により、高いモチベーションと研究水準を維持している研究室も一部に見られたことから、教育レベルからの交流は双方にとって大きなメリットが得られると考えられる。事実、今回のジョイントプログラムを通して、純粋に向学意欲の高い積極的な学生も見られた。

最後に、今回のジョイントセミナーを通じて、終始お付き合い頂き歓迎して下さったUSM化学学部Wan学部長、Baharuddin 副学部長、生物学部Kumar講師に、この場を借りて御礼申し上げます。今回のプログラムはKumar博士と田中博士の理化学研究所時代からの交流により実現したものです。

(東林修平 記)



## 機構長裁量経費事業

### 若手研究会「理論分子科学のフロンティアを探る」開催報告

機構長裁量経費の支援を受けて、平成20年1月15日から3日間にわたり「理論分子科学のフロンティアを探る」と題する若手研究会（於岡崎コンファレンスセンター）を開催した。10月末に経費を認めて頂き、平成20年度中に開催せよとのことであったので、広く参加者を募るのではなく、発起人（筆者に筑波大学の重田氏、横浜市立大学の淵上氏を加えた3名）が話し合っただけで選んだ気鋭の若手研究者に直接参加を要請した。その際に掲げた開催趣旨は以下の通りである。

“一昔前の理論分子科学は、電子状態理論と化学反応理論とを中心とする、量子力学という強固な基礎体系を基盤とした exact science のことを指していた。適度な複雑さを持つ分子を対象に様々な理論が生まれ、孤立分子のことはほぼ分かるという段階にまで進歩した頃、我々はこの世界に足を踏み入れた。このような境界条件のもと、小さな孤立分子を対象としているだけではダメだという認識が我々の意識に生じ、結果として我々の世代の理論分子科学者の活躍するフィールドは大きな広がりを見せている。生体・ナノ物質、溶液や表面などの環境を含む分子のサイエンスをその代表例として挙げることができよう。理論分子科学者がこのように様々なフィールドで活躍することは、それ自体、非常によいことである反面、上述のサイエンスは理論分子科学として全体をくくるより、諸学問分野における微視的アプローチとして規定する方が実情をよく反映するほど、理論分子科学者同士の交流は希薄になってしまったように思われる。自ずからそうなったのであるから、それはそれで特に問題はないの

かもしれない。しかしながら、様々な分野に散らばった学問基盤を共有する同士が一堂に会して議論を行うということも魅力的なことだと発起人は考えた。流行の分野には様々なセンスの人々が集まり視野を広げることができる一方、議論の深まりは必ずしも期待できないのに対し、共通の学問基盤を持つもの同士、丁々発止の議論ができたとしたら面白いのではないか。このような趣旨のもと、若手准教授、助教、ポスドクを中心とした実際に手を動かして研究をしている実働部隊の皆様にお集り頂き、通常の研究成果報告会とは異なるスタイルでの研究会を開催したい。研究会を通じて多様な研究分野の共通基盤としての分子科学を再認識し、フロンティアに横たわる問題意識を参加者で共有することが本研究会の目的である。”

若手研究者間の横の繋がりを新たに作ることも目的としてこれまで交流の無かった方々にも参加を要請したが、若手研究者間の交流が希薄であるとの認識に賛同を頂いたようで、講演者はすぐに決定した。ところで、筆者にとって研究会の主催は初めてのことであったが、分子研には優秀な秘書さんがいらっしゃるし、コンファレンスセンターもあるので、事務・会場業務に煩わされることなく研究会を開催することができた。これほど簡単に研究会を開けるのだから、（グループリーダーの理解あってのことですが）若手所員もどんどん各々の興味を赴くまま、楽しい研究会を開いてはどうだろうか。閑話休題。研究会では21件の発表があった（表1）。

当日は、所内からのオブザーバー参加（柳井毅准教授・吉田紀生助教・石村和也技術職員）があり、参加者総数

は24人であった。個々の発表の内容を意味のある形で要約することは、紙数・筆者の能力をとともに大きく超えている。そこでここでは、筆者個人が研究会から受けた印象を記すこととする。研究会の雰囲気が伝われば幸いである。

#### 大規模計算とモデル化

孤立分子の性質を調べ上げる狭義の分子科学を超えて、本来の分子科学——溶液・表面など環境と相互作用する分子、もしくはタンパク質などの巨大分子の関与する現実系の分子科学——を理論的に押し進めて行くに当り、大規模計算が必要となるのは必然である。その意味で、大塚・中田両氏の大規模系へ向けた電子状態理論の開発は王道とも言うべきものである。大規模系電子状態理論が現在、理論分子科学の大きな潮流をなしていること自体が、この方向性の重要性を物語っていると言えよう。

一方で、研究会を通じて示されたもうひとつの考え方があった。それはつまり、いくら計算機の進歩が早いとは言っても、現実系を時間依存シュレーディンガー方程式に基づいてシミュレートできるようになるのは遙か先のことであり、それでも我々は孤立小分子の世界を超えて行かなくてはならないのだとすれば、現実系をうまくモデル化する手法の開発が重要だというものである。ある意味保守的な考えだとも言えるが、早い計算機を作って全てをその中にいれてしまえば何でも分かるという世の中の風潮に対しては、強いアンチテーゼとなっている。墨氏の2成分密度汎関数法による液体水素の金属-非金属相転移の話などは洗練されたモデルのよい例であった。

## 部分と全体、量子と古典

系の振る舞いがある程度ローカルに決まっているとすれば、重要な部分とそうでない部分に、つまりシステムと環境に分けるのが素朴であると同時に自然であろう。実際に、日野・鷹野両氏はそれぞれ、適切な部分系を取ってきて高精度な電子状態計算を行うことで、創薬化学や生体反応のある側面がうまく記述できることを示した。石田(干)氏は液相反応に対して、溶質を量子力学的に、溶媒を古典統計力学的に扱う時間依存RISM-SCF法によって光励起後の溶媒とダイナミクスを議論した。筆者自身は、このような部分系の抽出の際に、一般的には部分系を開放系として扱う必要があることを説明し、表面吸着分子系でその効果が著しいことを示した。中村氏は同様なバルク物質と接続された分子という開放系でおこる電子移動の理論をレビューし、コヒーレント極限のLandauer理論とインコヒーレント極限のMarcus理論の間に位置する理論の不備を指摘した。

コヒーレンスをどの程度真面目に扱うべきかという問題は、大規模系の動力学シミュレーションにおいても現在広く議論されている。山田氏は原子核の自由度に対する量子古典混合シミュレーションのレビューに加え、量子力学的自由度と古典力学的自由度が相互作用するとみる氏の取り組みについて述べた。長い歴史を持つアプローチとして、古典力学の側から量子性をいれていく半古典論がある。重田氏は新しい拡張された古典力学によって、中山氏は古典軌道の特殊なアンサンブルをとることで、古典力学+ $\alpha$ の手間で量子揺らぎを考慮したシミュレーションが実行可能であることを示した。コヒーレント・インコヒーレント両極限の間に、一般性のある、セミコヒーレ

ントとでも呼ばれるべき階層は存在しているだろうか。存在したとして、古典軌道間の干渉を自然な形で適度な計算量で記述する理論の構築は可能だろうか。電子・核自由度の連関の問題もある。大規模系のダイナミクスの理論には今なお多くの解決すべき問題があると感じられた。

## 分子科学のシニフィエ

佐甲氏は、量子ドットの研究で盛んに論じられる閉じ込められた電子系の多体波動関数を、分子振動で氏が議論に用いてきたローカルモード描像を適用して鮮やかに解析してみせた。このように、狭義の分子科学から一歩足を踏み出した分野で物事を考えるとき、まず我々は、その分野で用いられる概念・用語を分子科学的な概念に置き換えてみることから始めるであろう。例えば、蛋白質のフォールディングの問題を物理学者はある種の相転移とみなすが、分子科学者は巨大分子の異性化反応と捉え、ノーマルモードやIRCといった概念の適用を試みたいと考える。淵上氏は、蛋白質の動力学シミュレーションで“観測”される運動と低振動数のノーマルモードがよく対応することを指摘した。蛋白質の全反応経路を探索することは難しいが、前田氏はそれを近い将来可能にし得るであろう強力な反応経路探索手法について話した。宮下氏の示したアルツハイマー病感染の初期過程を、これらの概念から解析することも興味深いであろう。アルツハイマー病の感染を司る遷移状態とはこのようなものです、と提示することができれば、分子科学の意義を一般に知らしめることができるかもしれない。直接(一分子計測でない)通常の実験との対応を考えると、トラジェクトリーのアンサンブルに基づいた議論を

行うべきである。石田(豊)・河津両氏は、トラジェクトリー・アンサンブルからの自由エネルギー曲面の構成法について述べた。現状では、自由エネルギー曲面を描く座標を事前に仮定しなくてはならない点が、筆者には不満であった。この恣意性を除いた自然な反応座標を定義するために、一般化されたIRC(蛋白質のIRCは分岐を繰り返す、そのままでは適切な反応座標とはなり得ない)や、寺本氏の示した位相空間での反応チューブが利用できればと思う。また、熱的ダイナミクスの直感的な理解のためにはアンサンブルを代表するトラジェクトリーが分かるように感じた。高橋氏が示したように、量子論は古典軌道の特殊なアンサンブルから生成されると見ることもできる。だとすれば、量子論に古典的極限・半古典論があるように、熱的アンサンブルが少数の有効トラジェクトリーに帰着することがあってもいいかもしれない。筆者の妄想はともかくも、ノーマルモード、ローカルモード、反応座標、大振幅運動、分子内振動エネルギー再分配といった概念の総体からイメージされる、我々が“分子振動”というシニフィアンで語るところのシニフィエに基づいた直感が、蛋白質を語る新しい概念を生み出す可能性は大いにあると感じた。その他の分野への参入の際にも、分子科学のシニフィエは我々に力を与えてくれるであろう。

## 分子科学のテクニク

分子科学は物理と化学の境界領域に生まれた“元祖”学際分野であり、化学の問題への物理的手法の導入にその特徴があった。ところが近年では、理論分子科学において開発、洗練された電子状態理論の他分野への適用が一つの流れとなっている。袖山氏による

transcorrelated法の固体バンド計算への適用もその流れの中に位置づけられ、今後の発展が期待される。保木氏は、氏がレーザーによる分子制御の研究に従来より用いてきた最適制御理論のコンピューター将棋への応用（氏のプログラム“ボナンザ”は渡辺竜王との対戦でも有名）について話した。懇親会でのディスカッション(?)では、棋譜の評価法が平均場的であるとの指摘がなされ、多体相関を入れるためにcoupled-clusterにしる、励起演算子をexponentialの肩に載せろなどと、実にいい加減なアドバイスも飛び交い大いに盛り上がった。

### 研究会を終えて

これまで若手同士で集まると、ロラン・バルトが大都市東京の中心にある皇居を指して「その中心は空虚である」と言ったことをもじって、もともと物理と化学の境界に成立した分子科学には堅固な実体などなく、その中心は空虚なのではないかと穿ってしまうのが常であった。しかしながら今回、参加者各々が様々な分野に出て分子科学の視点を持ちながら活躍する姿を見ると、縁辺である山手線界隈が盛り場となっているそのとき、中心は確かに存在するのだと実感することができた。新しい物質が合成できればそれでよしとされる化学の世界で、ことさら分子科学

は現象の理解や概念の抽出にこだわってきた。21世紀の新しい物質科学、生命科学を理解する明確な概念を生み出すのは我々をおいて他にあるまい。研究会を通じて、このような大それたことを考えた。それだけの熱気が研究会にはあったのである。理論分子科学という枠組みで集まる意義があるのかどうかを見極めることも研究会の目的の一つであったが、その意義はあったと自信を持って結論する。最後に、このような格別なテーマのない実験的な集會に、機構長裁量経費からのサポートを頂けたことを改めて感謝して、報告を終えることとする。

(安池智一 記)

表1

※発表順

大塚 勇起 (分子研)	Configuration State Function を用いたプロジェクトモンテカルロ法
中田 真秀 (理 研)	二次の密度行列の変分法に関する研究：最近の進展より
佐甲 徳栄 (日 大)	擬1次元人工原子のエネルギー準位構造と多体波動関数
中村 恒夫 (東 大)	分子科学はナノサイエンスに有効なツールとなり得るか？——ナノスケールでの電子移動の考察——
安池 智一 (分子研)	表面吸着分子の局所電子状態：開放系量子力学に基づく分子科学
袖山慶太郎 (東 大)	平面波基底を用いたトランスコリレイティッド法による固体の第一原理計算
日野 理 (アドバンスソフト)	インシリコ創薬化学と電子相関理論
山田 篤志 (分子研)	凝縮系の量子シミュレーション——量子古典混合系近似による手法——
前田 理 (東北大)	超球面探索法による非調和下方歪み追跡：巨大系の反応経路解析と単分子反応ダイナミクス解析へ向けて
保木 邦仁 (東北大)	最適制御理論 —— 化学反応からゲームまで ——
石田 干城 (分子研)	Theoretical Investigation of Time-Dependent Phenomena in Solution : Pursuing Environmental Change around Solute Molecule and Polarization Effect
寺本 央 (北 大)	力学系としての分子ダイナミクスの普遍的側面の理解に向けて
石田 豊和 (産総研)	複合モデリングによる糖タンパク質 - 糖鎖複合体の解析
鷹野 優 (阪 大)	金属タンパク質の活性中心の電子構造
河津 励 (京 大)	古典動力学シミュレーションを用いた自由エネルギー差の計算
宮下 尚之 (理 研)	神経変性疾患のメカニズムに対する理論生物化学からのアプローチ
淵上壮太郎 (横浜市大)	タンパク質立体構造変化における経路の揺らぎと動的機構：タンパク質という分子の理解に向けて
高橋 聡 (東 大)	カオスの半古典エネルギー量子化
中山 哲 (北 大)	凝縮系における原子核の量子シミュレーション
墨 智成 (豊橋技科大)	高密度流体水素の金属——プラズマクロスオーバーおよび金属-非金属転移
重田 育照 (筑波大)	準量子キュミュラント分子動力学法

## 分子科学コミュニティの声

分子研では平成17年度より系・施設の在り方等検討委員会を設置し、分子研の今後の進むべき方向とその受け皿となる研究体制を探っているが（分子研レポート2005, p.340、2006, p.286;分子研レターズ53号(2006.3) p.14、57号(2008.5) p.14.参照）、平成19年度は大学共同利用機関としての在り方について検討した。検討結果を要約すると以下ようになる。

(A) 組織として国際的に分子科学研究を先導していくのはもちろんのこと、個人レベルでも真に独創的な研究を生み出すための特徴ある方策を打ち出していくこと。

(B) 分子研の研究成果を大学等に還元していくとともに、特徴ある研究設備を精査して組織的に整備し共同研究に供していくこと。

(分子研の特徴) 活発な人事流動を通して所内と所外が入れ替わる、つまり(A)と(B)は密接に関係していること。

詳細は分子研レポート2007, p.321~324にまとめ、公開しているが、それに対して、昨年末までに、コミュニティを代表している運営会議メンバーにそれぞれ意見をお願いし、さらに、共同研究者、分子研OBの一部からも意見をいただいた。以下はそのまとめである(順不同)。これらを参考に所内でさらに検討を進める予定である。

## 【運営会議メンバーからの意見】

・分子研に最も期待するのは大学から若い人材を採用してもらって成長したところで大学に戻してもらうことで

ある。研究レベルや国際化などは大学とあまりかわらない。

・大学と分子研の差がないという意見はごく一部の大学であって、研究をやるうにも何もできない大学が沢山あるので、そのような大学にとって分子研の共同利用や人事採用は不可欠である。

・教育は大学に任せてもらって、分子研は先端的研究に専念すべきである。  
・准教授の人事流動と同じように、教授についても若い人材を大抜擢して、成果が出れば大学に戻すことをもっと考えてはどうか。

・創設当時に比べて分子研の予算も激減しているようであるが、やはり所長が頑張っって大きな予算を獲得して、分子研は大学よりはるかに優れた研究環境にしてもらうことが重要。

・リスクのある研究でもやれる環境、短期的な成果を求めない姿勢はすばらしいので、もっと所外に宣伝したらどうか。日本で女性研究者が育ちにくいのは分子研のような研究環境が大学に少ないからなのかも知れない。

## 【共同研究者、分子研OBからの意見】

・准教授、助教に関する人事制度や研究支援はきわめてうまくいっており、このままでよい。(共同研究者、分子研OB)

・分子研は分子科学の専門家集団としてシャープなピークを作っており、その点では他の機関の比ではない。高い研究水準(数ではなく、質)を維持することが分子研の生命線。(共同研究者、分子研OB)

・分子科学の分野の指針となるべき基礎的かつ重要な分子研の研究成果を、

論文ばかりでなく学会や大学での講演などで発信してもらうことが重要。そうすれば自ずと研究所に人が集まり、共同研究も活発になるはず。(共同研究者)

・分子研の存在感がかなり減少している。教授は分子研の顔であり屋台骨でもあるので、それぞれの分野で高い質の研究をもって存在感を示すことが望まれる。そのためには、学問世界でその存在感を与えるリーダー的活動もやりやすくするように、とりわけ業績の高い教授層に対する人的サポート等の施策を考えて、研究所の存在感を増すための努力を払うことが喫緊に必要ではないか。たとえ教授ポスト数を減らすことになったとしても、各教授には助教2、ポスドク1を配分すべき。設立当時の分子研の教授グループは実質的にそのような体制だったはず。(分子研OB複数名)

・長期的ビジョンについてはあまり気張らないで自然な方がよい。建前論が先行すると却って自由な発想を阻害する。分子研の究極の存在意義は、基礎的な分子科学分野で優れた研究者のインキュベーターであることにある。物理と化学の境界領域をコアとして分子を理解するという立場は、生物関連にまで対象が広がった現在でも変わらない。この分子科学を志すものにポジションを与えて自由に研究させることこそ重要。(分子研OB)

・分子科学の対象が広がって来た現在、「分子を扱っていれば分子科学」「分子を扱っているので私も実はナノテク研究者」というような安易な基準で人事を進めないで欲しい。分子研では、異分野の人を採って研究対象を広げる



のではなく、分子のことを一番真剣に研究している分子科学者自身が研究対象を広げることが重要。(分子研OB)

・ 機器センター復活は大学との連携を考える意味で重要で適切である。その意味でも中型・小型機器の更新が不可欠と思うのでがんばってほしい。(共同研究者、分子研OB)

・ 国内の大学で設備が乏しくなっている事を補うための共同研究よりも日本の化学が国際的にピークを出すための共同研究を分子研が中心になって推進することの方が遙かに重要であろう。(分子研OB)

・ 共同利用研究を計画する際、有効に成果を出さなければならないとか、

面識のない方に迷惑をかけないようにしないといけなとか、短時間で実験をやらなければならないとかあって、どうしてもありきたりのテーマになってしまいがちである。リスクがあっても是非チャレンジしたいというような環境整備を望む。(共同研究者)

・ 所内でほとんど人に会わないし、すれ違っても誰も挨拶しない。夜は節電対策で廊下が暗く人の顔さえ見えず恐怖感を覚える。このような環境(明大寺地区だけ?)は大学では絶対にありえない。研究所の若い学生たちが親しみを感じるような、元気の出る雰囲気作りが大切ではないか。(共同研究者複数名)

・ 殺風景で閉塞感のあるような印象とか、研究会が優先されてロτζが取れずホテル滞在にならざるを得ないとか、ロτζが取れても値上げで高くなったとか、があつて研究室の学生は分子研に対しあまり好感を持っておらず、共同研究の際に付いてもきてくれなくなった。昔、夜も煌々としていてお互い見知らぬ共同研究者・院生・所内研究者であつても顔を合わせているうちに仲良くなるようなアットホームな雰囲気が懐かしい。(共同研究者複数名)

(小杉信博 記)

## 分子研広報活動の新たな取り組み

「アカウントビリティ」という言葉が喧伝される昨今、研究者コミュニティばかりでなく、老若男女を問わず広く一般の方々に、分子研の研究活動や役割を分かり易く伝えることの重要性が益々増加している。このような広報活動を進める組織として、分子研には広報室が設置されている。現時点のメンバー構成は、広報室長ならびに副室長として研究教員2名、技術職員1名、技術補佐員1名である。広報室では、この数年来、広報活動のより一層の充実を目指して、以下のような様々な改革を進めている。

- (1) 分子研ホームページの改善と全面改訂
- (2) Annual Review 誌の全面改訂
- (3) プレスリリースの支援と強化

### (4) 分子科学フォーラムの充実

ここでは、各項目に関して簡単に紹介したい。

#### (1) 分子研ホームページの改善と全面改訂

現在のホームページは平成17年に作成して以来、「トピックス欄」の増設、バナーの設置など誌面を魅力あるものにするための様々な改訂を行ってきたが、依然、いくつかの問題が存在していた。そのひとつは「トピックス欄」の更新頻度が低く、新鮮な情報を供給できていなかったこと、さらに、専門外の読者には内容が難しすぎることであった。この問題を解決するため、各研究領域から積極的に原稿を投稿するよう依頼し、また、原稿内容は広報室

担当教員がチェックして執筆者に改訂を求めるようにした。この改善により、少なくとも毎月ひとつは新たな「トピックス」が追加されるようになり、ホットな研究成果を平易に紹介する記事が掲載されるようになった。もうひとつの問題は、分子研共同利用業務との連携が不十分だったことである。すなわち、分子研ホームページにアクセスした研究者が共同利用申請に至るまでの「流れ」が「見えにくい」という問題が指摘されていた。この問題を解決するために、共同利用研究のページに「利用の手引き」や「機器一覧」等を追加するなど大幅な改訂を行なった。また、「4年目広報Womanが綴る分子研ウォッチング」という欄も、試験的に開設している。これは、分子研内



図1 分子研ホームページトップページ原案

の人々や日々の活動を技術職員がブログ形式で紹介するもので、一般の方々の「分子研って、いったいどんなところなの？」という疑問に少しでもお答えできることを期待している。お時間がありましたら、是非、トップページ <http://www.ims.ac.jp/indexj.html> 内のバナーから、お立ち寄り下さい。

以上のように、広報室では様々な改善を行ってきたが、依然「継ぎはぎ」

的な感を否めず、他の先進的な大学や研究機関に匹敵する「親しみ易い」ホームページにするためには全面的な改訂が必要であるという認識に至った。このため、「ホームページ改訂ワーキンググループ」を発足させ、所内の若い研究者の協力を得て、全面改訂の作業を進めている。動画なども効果的に利用することにより、より親しみ易いホームページとなるよう企画が練られている。この改訂では、研究面でのアクティビティーはもとより、共同利用研としての意義と具体的な利用の仕方、総研大を含む教育面での貢献等について、「誰が見ても直ぐ分かる」画面となることを最重要視している。図1に、トップページの原案を示す。今秋リリース予定であるので、「乞うご期待」である。

(2) Annual Review 誌の全面改訂  
Annual Review 誌は分子科学研究所の研究活動を外国に発信するための

唯一の年間レビュー誌として重要な役割を果たしてきた。しかしながら、これまで Annual Review は論文要旨を単に寄せ集めたような体裁になっていて、分量が多いにも関わらず内容に統一感がなく、読みにくいという声が出ていた。このことは単に外国の研究者に分子研の存在を知らしめる点においてマイナスであるだけではなく、特に、外国からの留学生を引きつけるという意味においては致命的な欠陥であるという認識に至った。このため、昨年度 Annual Review 誌の全面改訂 (図2) を行ない、ご覧の通りの、しゃれた体裁のブックレットに一新した。内容としては、各研究グループの1年間の研究業績を、図などを含めてトピックス的に見開き2ページに分かり易くまとめている。また、研究者や研究スタッフの写真を載せ、全てのページをカラー刷りとして親しみ易い紙面を目指した。

(3) プレスリリースの支援と強化  
新聞、テレビなど報道機関を通じて「できるだけ分かり易い形で」研究成果を社会に発信していくことを目指して、プレスリリースを支援・奨励する

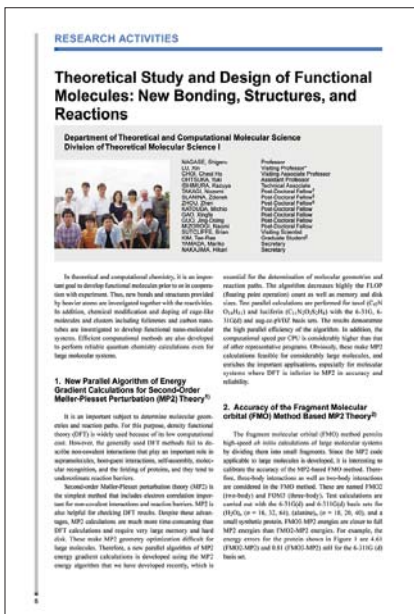


図2 Annual Review 誌





訃報

## 関一彦教授追悼

千葉大学先進科学センター 教授 石井 久夫

わたしは、関一彦先生が名古屋大学の教授に赴任された直後に助手としてチームに加えていただきました。当時、関先生は、銀塩写真の分光増感現象に関連して、色素とAgBrの界面の電子準位の接続問題を研究されていて、それに続く一連の有機-無機界面電子構造研究を始められようとしているところでした。無機表面の電子分光を研究していた私に、“有機固体と無機固体が接触した界面の不思議さ重要さ”を熱心に語ってくださり、界面研究の世界に誘っていただきました。このテーマは、基礎的なサイエンスとして奥深いだけでなく、有機エレクトロニクスという実用研究分野においても重要なものでした。一連の研究は、学術創成研究へと発展し、多くの成果を残されました。その間、関先生は国内外の大学や企業のデバイス研究者とも交流され、基礎研究と応用研究をむすびつけることも積極的に進められ、有機半導体の界面電子構造という一つの研究分野を作りあげられました。振り返ると、国際学会では先頭にたつて多くの質問・コメントを返し、若い研究者からシニアの先生まで広く交流し日本に招聘したり、日本の若手を派遣するなど、国際的な研究ネットワークづくりにもご尽力され、学術振興会のCore-to-coreプログラムへと展開されました。

以上のような界面研究を進める上で、UVSORのBL8B2の存在は重要でした。汚染物として敬遠されていた有機材料に特化した光電子分光ビームラインを関先生は立ち上げられました。先生が広島大学に転出された後は、関先生と千葉大の上野先生のグループのメンバーを中心とするユーザーグループにより維持されました。関先生は、ビームライン管理のため名大雇用のポストクの派遣を続けると共に、流動部門や客員部門も活用したり、UVSOR関連で人事公募があるときは必ず候補者を推薦するなど8B2の維持・発展にご尽力されました。このビームラインは、超高真空下での単結晶基板上の高秩序有機薄膜界面の測定や、スピんキャストした実用的高分子薄膜ならびにその大気効果の測定など、有機半導体薄膜界面の基礎から応用にかけての幅広い研究ニーズに対応できる、世界的にも貴重なビームラインとなり、多くの研究成果を成し遂げてきています。

6月30日に関先生は帰らぬ人となってしまいました。7月2日、3日のお通夜、告別式でお別れしたのに、今でも電子メールの受信箱を開くとき、深夜のタイムスタンプのついた関先生からのメールが届いているような気がしてなりません。本当に大事な方を失ってしまいました。関先生の教えを受けながら研究を進めてきた私たちは、各人の心の中にある関先生とディスカッションしながらそのご遺志を受けついで研究を発展させてゆきたいと思います。



2007年11月60歳お誕生日



2007年6月Bunsen Meeting

分子科学研究所 教授 薬師 久彌

2008年6月30日の関一彦氏（享年60歳）の訃報に接し、驚きと共になんとやりきれない思いが残っている。2007年10月27日-30日に北京で開催された第9回日中シンポジウムに関一彦氏が元気な姿（分子研レターズ57巻27頁の写真）を見せた僅か一カ月後に名大病院に入院したとの知らせを聞いたとき、全く信じられない思いであった。その後、「危機を脱した」との消息があり、今回の突然の訃報には愕然たる思いであった。関一彦氏とは学生時代短い間ではあったが、東京大学理学化学教室の赤松秀雄研究室で共に学んだ。1970年代から多くの物性化学研究者が有機導体の分野へ参入する中で、有機半導体薄膜の分野で独自の道を歩み、工学的な立場で研究されていた有機半導体薄膜、特に金属との界面の研究を精密科学にまで導いた手腕は並々ならぬものであった。数々の国際会議で基調講演を行い、学術創成研究代表者、21世紀COEプログラム名大物質科学国際研究センター拠点長、学振先端研究拠点事業コーディネーターとして活躍し、名実共に分子科学のリーダーであった。また温厚な人柄と几帳面な性格それにて的確に先を見通す洞察力は多くの人々に絶大な信頼感を与えていた。重責を担い、これからの活躍に期待が高まっていただけにいまなお悔やまれてならない。心よりご冥福をお祈りします

分子科学研究所 助教 山根 宏之

関一彦先生は平成20年6月30日早朝、名大病院にてご逝去されました。昨年11月下旬に体調不良で緊急入院され、その後の検査で急性骨髄性白血病との診断が下り、治療が始まりました。入院される前の先生は夕食後も深夜2～4時まで教授室で仕事をされていることが多く、徹夜されることもあるほど激務に追われており、病気の早期発見を逃したことが悔やまれます。関先生の入院中は准教授の大内先生と助教の金井先生のご尽力で、関研の研究・教育活動が進められましたが、関先生からも電子メールで研究室に連絡が届いていました。関先生は海外出張中で、出張先から研究室の指揮をとっておられる様な錯覚を関研メンバーは感じていたかもしれません。実際に治療の副作用でおつらい時もあったはずなのに、メンバーからのメールに以前と変わらず丁寧に返信しておられ、更にはご自身の教科書の執筆も続けておられました。そして、最期まで研究室に戻りたいと仰っていたそうです。本当に素晴らしく素敵な先生だったと思います。私は現在、小杉グループの助教ですが、この3月末まで関先生のポストクを務め、4月以降もやり残した関先生の宿題をやっておりましたので、その経緯を知るもの一人として寄稿させていただきました。関先生からは研究以外にも数多くのご指導を賜りました。今後の分子科学の発展に微力ながらも貢献することで関先生への恩返しをしていこうと思います。

分子科学研究所 所長 中村 宏樹

関教授急逝の報に接し驚きと共に心痛の極みであります。小生が着任時には、既に分子研で活躍しておられました。分子研転出後も様々な委員会委員を務めてくださり、直接、間接に分子研の運営に極めて真面目に、そして建設的に貢献してくださいました。入院中に分子研への提言を纏めておられたのを知り（本号レターズ記事）、しかも、ご自身の運命を悟っておられたのではないかとと思われることを感じ、涙を禁じえません。まだまだ、これから活躍いただくかねばならない時に、誠に残念であります。心よりご冥福をお祈り申し上げます。合掌。

諸熊奎治名誉教授に恩賜賞・日本学士院賞

木村真一准教授に平成20年度科学技術分野の文部科学大臣表彰科学技術賞

山田陽一博士に平成20年度科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞

根岸雄一助教に第57回日本化学会進歩賞

吉田久史氏に日本化学会化学技術有功賞

十代健助教にナノ学会第6回大会若手優秀発表賞

## 諸熊奎治名誉教授に恩賜賞・日本学士院賞



分子科学研究所および総合研究大学院大学の名誉教授（現在、京都大学福井謙一記念研究センターリサーチリーダー）の諸熊奎治先生が平成20年度の恩賜賞・日本学士院賞を受賞されました。授賞式は6月9日に天皇皇后がご臨席のもとに日本学士院で行われ、記念講演会と祝賀会は6月28日に福井謙一記念研究センターで盛大に行われました。恩賜賞は日本学士院の賞の中でも最も権威のある賞で、毎年授賞される学士院賞の中から特に優れた学術研究に与えられます。諸熊先生は理論化学と計算化学を現在の学術レベルに

まで育て上げられた草分け的存在であり、多岐にわたる分野で精力的に研究を進め、研究論文も600報にのぼります。その研究成果は理論化学、計算化学、実験化学という分野を問わずに極めて高く評価されています。このために、平成4年には日本化学会賞を、平成5年には世界理論有機化学会よりシュレーディング賞を、平成17年にはアジア・太平洋理論・計算化学会より福井謙一賞をも受賞されています。また、平成12年より国際量子分子科学アカデミー会長を2期6年間にわたって務められ、国際レベルで量子化学分野の発展と実験化学分野への波及に大きな業績を上げられています。

諸熊先生は、昭和32年に京都大学工学部工業化学科を卒業後、昭和37年に同大学大学院工学研究科博士課程を単位修得退学し、昭和37年に京都大学工学部燃料化学科に助手として採用され、昭和38年に京都大学より工学博士の学位を修得されました。昭和39年に米国コロンビア大学客員助教授、博士研究

員に採用され、米国ハーバード大学博士研究員、米国ロチェスター大学助教授、准教授を経て、昭和46年に同大学教授に昇進されました。その後、創設時の昭和51年に分子科学研究所に着任され理論研究系分子基礎理論第一研究部門の教授を、平成5年に米国エモリー大学教授に就任されるまで務められました。この期間、分子科学研究所の初代の計算センター長も兼務されて、我が国の理論化学と計算化学の国際的な発展に多大なる功績を残されたのは周知のことです。電子状態理論分野の第一線で現在活躍しているほぼすべての研究者が諸熊先生の指導や影響を直接にあるいは間接に受けて育ったと言っても過言でないほど、人材育成にも大きな足跡を残されました。

今回の恩賜賞・日本学士院賞の受賞は、諸熊先生の長年にわたる「分子の構造・機能・反応設計に関する理論的研究」に対するものであり、受賞理由（日本学士院ホームページより引用）は、「量子理論に基づく計算化学の新しい手法

を開発し、電子計算機を駆使することによって、様々な分子の構造と機能の予測およびその反応設計に関して、顕著な理論的業績を挙げた。研究対象も、小分子系の化学反応の精緻な研究からタンパク質などの巨大分子の構造と機能に関する研究などと多岐に亘っている。例えば、フラレン、ナノチューブなどの炭素系分子材料の生成過程の解明や、遷移金属錯体による均一系触媒反応の反応機構の解明は、特に顕著な業績である。さらに、化学反応の機

構と経路を研究するための有用な方法を展開して、化学反応の理論設計を容易にするとともに、巨大分子系を効率的に研究するためのオニウム法を開発して、巨大分子系の量子理論の研究に新しい道を開いた」で、理論・計算化学学術分野の発展への貢献が特に認められたもので、物質科学全般へ波及効果がますます高められることが期待されています。

諸熊先生は現在も、独創的な考えによる様々な新しい理論的研究アプロー

チ法を開発して、物質科学ばかりでなくバイオサイエンス分野の計算ターゲットを格段に広げておられます（最近の具体的な研究内容や発表論文は、<http://falcon.fukui.kyoto-u.ac.jp/top/eng/>を参照）。今回の受賞を心よりお祝いします。今後とも日本の理論化学と計算化学のさらなる発展とこの分野の人材育成の国際的なトップリーダーとして精力的なご活躍を続けられることを是非ともお願い申し上げます。

(永瀬 茂 記)



物質の物理化学的性質を分子・原子のミクロなレベルでの非破壊分析ができる赤外・テラヘルツ（遠赤外）線を用いる分光分析・顕微分析技術は、基礎科学から犯罪捜査に至る幅広い分野で重要な役割を果たしており、現在では簡便な分析技術として普及しています。しかしながら、従来の赤外・テラヘルツ分光は低輝度の黒体放射光源を用いているため、微小試料やテラヘルツなどの長波長での実験研究に不向きであり、新光源の開発が待ち望まれていました。

そのような中で、木村准教授は神戸大学の難波孝夫教授とともに、従来の光源よりはるかに高輝度なシンクロトロン放射光が赤外・テラヘルツの光源として利用可能なことを世界最初に検証しました。また、赤外放射光利用のための専用観測システムをUVSORにおいて世界に先駆けて開発し、かつ、従来の空間分解能をはるかに超える赤外・テラヘルツ顕微分光法の開発をUVSORおよびSPring-8で行いました（図1）。さらに、赤外放射光を用いて、これまで不可能と考えられていた各種の分光法を実現しました。すなわち、新奇物質や高機能性材料の遠赤外領域の光学定数の精密測定や電子状態の決定、高圧下の赤外・テラヘルツ分光（図2）、赤外磁気円偏光二色性、お

よび、低温・高圧・高磁場下のいわゆる多重極限環境下での赤外分光などです。これらの方法論は、放射光の特徴である高輝度性および偏光特性を利用したものであり、他の光源では実現が難しいものです。

難波・木村両氏が開発した赤外放射光は、物質科学にとどまらず生命科学の分野でも有用であり、現在では世界的な赤外放射光利用研究の普及へと

## 木村真一准教授に 平成20年度科学技術分野の文部科学大臣表彰科学技術賞

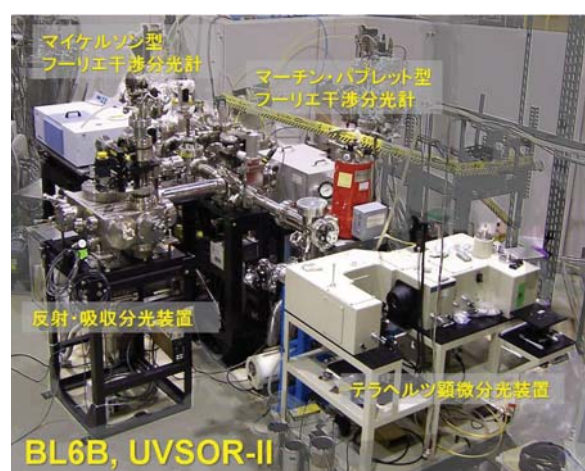


図1 2004年にUVSORで再構築された世界最高強度の赤外放射光が得られる赤外・テラヘルツビームライン。

発展しています。今後も、両氏は物質科学での超伝導や巨大磁気抵抗などの新奇機能性の開発などをはじめとして、広く放射光利用研究の発展に貢献して下さるものと期待しております。

(小杉信博 記)

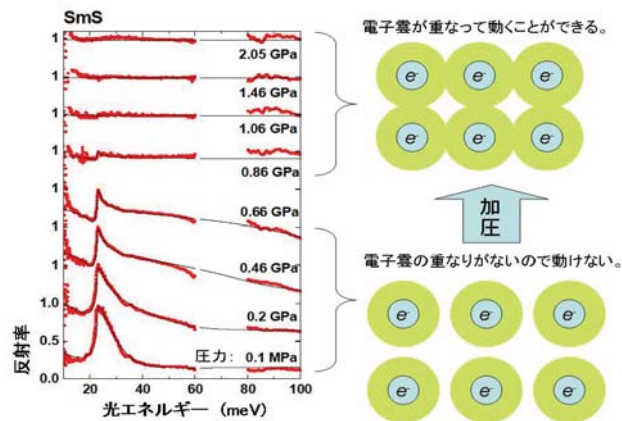


図2 硫化サマリウム (SmS) の圧力誘起絶縁体・金属転移のテラヘルツ反射スペクトルの変化と電子状態の概念図。

## 山田陽一博士に平成20年度科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞

理化学研究所基幹研究所副チームリーダーである山田陽一博士(元: 錯体触媒研究部門助教)が、「自己組織化金属高分子触媒創製の研究」で平成20年度科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞を受賞した。本賞は文部科学省より授与されるもので、萌芽的な研究、独創的視点に立った研究等、高度な研究開発能力を示す顕著な研究業績をあげた40歳未満の若手研究者を対象としたものである。表彰式は平成20年4月15日(火)に虎ノ門パストラルにて行われた。

平成19年9月まで私の主宰する研究室の助教であった山田博士は、平成11年に東京大学大学院薬学系研究科(指導教官: 柴崎正勝教授)で博士号(薬学)を取得後、帝京大学助手(池上四郎研究室)、スクリプス研究所リサーチアソシエート(K. C. Nicolaou研究室)を経て、平成15年より分子研の助教として赴任した。平成19年10月に理化学研究所・物質情報変換化学研究グループ物質変換研究チーム(魚住研究室)の副チームリーダーとして転出し、現在に至っている。

山田博士の受賞対象となった研究成

果は下記の通りである。

1) 水・有機分子に対し親和性を有する鎖状高分子配位子と金属化合物との自己集合により金属架橋された不溶性高分子触媒を創製した結果、高活性で再利用可能な固相触媒の開発を実現した。従来の固相触媒に比べ、著しく触媒活性が向上し、再利用が可能となった触媒の創製に成功し、鈴木-宮浦反応にて世界最高の触媒回転数(100万回以上)を誇る固相触媒を開発した。

2) 金属ナノ粒子分散型触媒の開発に成功し、今まで実現されていなかった空気雰囲気下、有機溶媒非存在下での、アルコールをアルキル化剤としたケトンの $\alpha$ -アルキル化が達成された。今までに実現されなかった反応を実現することができたばかりなく、有毒で環境汚染が指摘される有機溶剤を溶媒に用いる必要のない反応系の構築に繋がった。

3) 金属導入型低分子有機ゲルが初めて、芳香族ハロゲン化合物と芳香族ホウ素酸との反応である鈴木-宮浦反応で水中空気雰囲気下にて有効に機能することを示した。

4) 世界で初めてマイクロリアクター



内の界面上に固相触媒膜を導入することに成功し、世界最速(4秒)の固相反応系を開発に成功した。マイクロリアクターの層流界面(マイクロ流路の中心)に触媒膜を導入する方法論が今までに存在しなかったため、候補者が開発した触媒膜導入法は、マイクロリアクターでの固相触媒システムの構築法のブレークスルーとなった。

分子研から羽ばたいた山田博士には、理研においても最先端のさらなる研究推進を期待したい。

(魚住泰広 記)



## 根岸雄一助教に第57回日本化学会進歩賞



100個以下の原子で構成される金属クラスターは、バルク金属ではみられない、構成原子数に顕著に依存した特異的な構造・物性を発現するため、機能性ナノ材料の基盤物質として大きな可能性を秘めている。金属クラスターの特質を生かした材料創成を実現するためには、クラスターの構造や物性が構成原子数の変化に対してどのように振る舞うかを追跡し、機能発現のメカニズムを理解することが必要不可欠である。根岸助教は、チオラートやホスフィンなどの有機配位子で保護された金属クラスターを対象として、化学組成（金属原子数と有機配位子数）を原子・分子レベルで規定しながら系統的に合成する方法を初めて確立した。さらに、本手法で合成した有機配位子保護金属クラスターの構造や物性の評価に取り組み、金属クラスターに関する基礎学術の進展に資する先駆的な成果を挙げた。根岸助教の研究成果は、大きく分けて以下の3つになる。

### 1. 有機配位子保護金属クラスターの精密分画法と同定法の確立

有機配位子の共存下で金属イオンを化学的に還元して得られる有機配位子保護金属クラスターのコアサイズは、金属原子の凝集過程の統計性に由来する分布幅をもつ。根岸助教は、配位子の性質に応じた方法でサイズごとに分画し、その化学組成を非破壊質量分析

により決定することによって、有機配位子保護金属クラスターの精密、かつ系統的な合成を実現した。例えば、解離性官能基をもつ有機配位子で保護された金クラスターに対しては、その電荷を利用してポリアクリルアミドゲル電気泳動法によって分画し、自作の高感度エレクトロスプレーイオン化(ESI)質量分析装置によって組成を決定した。一方、疎水性有機配位子を用いた場合には、リサイクルサイズ排除クロマトグラフィーや溶解度の差を利用して分画した後に、化学的酸化/還元反応によって金クラスターをイオン化し、ESI質量分析法によって組成を決定した。本手法は、再現性および他の系への拡張性も高いことから、今後、クラスター研究における基盤技術として利用されるものと期待される。さらに本手法によって、これまで気相に孤立した状態でのみ生成が可能であったサイズの規定された金クラスターを安定化合物として取り扱うことができるようになり、多角的かつ複合的な構造・物性の評価が可能となった。

### 2. チオラート保護金クラスターの安定性・構造・物性の解明

チオラート(RS)で保護された金ナノ粒子(直径2 nm以上)については、すでに「粒径」を制御する方法が確立され、電子デバイスやバイオセンサーへの応用展開が活発に検討されている。一方、新規な物性・機能の発現が期待される金クラスター(直径1 nm以下)については、これまでサイズ選択的合成法が確立されていないため、構造や基本的性質に関する情報は極めて限られていた。根岸助教は、チオラート保

護金クラスターの安定性・構造・物性を系統的に調べ、化学組成との相関について、以下に挙げる成果を得た。

(1) 魔法組成の発見：根岸助教はまず、調製ルートやチオール分子骨格を変えながら単離されるクラスターの組成を網羅的に調べ、湿式法で得られる多くのクラスターはコアの成長に対して保護膜の形成によって速度論的に安定化されていることを見いだした。そこで次に、熱力学的・化学的に安定な組成を決定するために、チオール(RSH)によるコアのエッチング反応に対する安定性を調べた。その結果、 $\text{Au}_{25}(\text{SR})_{18}$ 、 $\text{Au}_{38}(\text{SR})_{24}$ 、 $\text{Au}_{144}(\text{SR})_{59}$ など魔法組成と呼ばれるクラスターを発見した。根岸助教はさらにこの安定性の差に着目し、ワンポットで魔法組成クラスターのみを選択的かつ大量に合成することに成功した。

(2) 構造・物性の解明：根岸助教は、紫外可視吸収分光、X線光電子分光などの汎用的な測定に加え、 $^{197}\text{Au}$ メスバウワー分光、X線円二色性分光など最先端計測によって構造・物性に関する基礎データを収集した。単結晶X線回折法による構造解析が困難な $\text{Au}_n(\text{SR})_m$ クラスターの幾何構造については、理論部門の信定准教授と連携しながら解析を進め、金コアの周囲を金/チオラートオリゴマーが取り囲んだ構造をもつことを見出した。この界面構造は、現在最も広く受け入れられているバルク金表面上のチオラート自己組織化単分子膜構造とは対照的であり、クラスター領域では特異的な界面構造をもつことを示している。また、フォトルミネッセンス・強磁性的なスピン偏極・光学活性の発現が、この界面構造と密接に

関わっていることを明らかにした。

### 3. 表面修飾による金クラスターの構造制御

チオラート配位子が金原子を架橋しやすいという性質に着目し、二つのAu<sub>13</sub>クラスターがチオラートにより連結された双二十面体クラスターの創製に成功した。魔法数クラスターが連結することによって新しい光学特性が観測されたことから、本クラスターはク

ラスター集積化合物群の足がかりと言える画期的な化合物である。また根岸助教は、金クラスターをBINAPやシクロデキストリンなどの特殊な構造をもつ配位子と複合化させ、金クラスターに対して光学活性や分子認識能を付与することにも成功した。

以上のように、根岸助教は、有機配位子保護金属クラスターを精密かつ系統的に合成するための一般性・汎用性

の高い実験手法を確立し、それを活用することで金属クラスターの構造・物性の理解に対して飛躍的な進展をもたらした。得られた知見は、金属クラスターを基盤とする機能性ナノ物質の創製に向けた設計指針を与えるものと期待される。

(佃 達哉 記)

## 吉田久史氏に日本化学会化学技術有功賞

このたび技術課電子機器・ガラス機器開発技術班長の吉田久史氏が日本化学会化学技術有功賞を受賞された。受賞タイトルは「分子科学研究のための先進的計測・制御機器の開発」である。同氏は、1980年に分子科学研究所装置開発室に着任し、以来永年にわたり分子科学の先端的研究に不可欠な実験装置の開発に従事されてきた。代表的な製作装置には「ナノ秒時間分解蛍光寿命測定装置」や「マルチチャンネル吸光度測定装置」などの分光測定装置をはじめ、「パルス分子線発生装置」、「TOF型質量分析器のための超高速高圧パルス発生回路」、「有機電解合成用多チャンネル定電流源」、「物理特性測定装置を使用した熱電能測定プログラム」などが挙げられる。また、分子科学の研究分野で培った測定技術は、東京大学および国立天文台との共同開発で製作したわが国初めてのサブミリ波電波望遠鏡の観測装置にも活かされ、化学研究の分野を超えた広い領域で業績を残されている。以下に、受賞理由となった代表的な業績を紹介する。

### 1. 電子線コンプトン散乱の反応顕微鏡のための多次元同時計測回路

空間的配向を特定した分子を標的として高速電子衝撃イオン化の動力学的完全実験を行う装置のための多次元同時計測回路を開発した。この計測装置により、イオン化で生成する非弾性散乱電子、電離電子、解離イオンの3種の荷電粒子のベクトル（エネルギーおよび角度）相関の測定が可能となり、標的分子の空間的配向をもパラメータとする電子・分子衝突立体ダイナミクス研究の開拓と共に、分子軌道の形を運動量空間において3次元観測する原理の実証に大きく貢献した。本装置の開発は、東北大学との十数年にわたる共同利用研究の実績の積み重ねによるものである。また、この時に始まった東北大学技術職員との技術交流は、全国の技術職員を対象とした技術課の受け入れ研修として制度化され現在も実施されている。



### 2. 液体ヘリウム自動供給システム

極低温センター（現機器センター）技術職員との技術協力により、液体ヘリウム貯槽から移送用の小口容器への汲み出し作業を自動化するシステムの開発を行った。同氏は、システム全体の計測・制御回路およびソフトウェアの製作に携わった。とくに、液体ヘリウム充填時の蒸発ガスの圧力特性から充填完了を確実に検知するためのプログラムの開発により、不慣れな研究者でも簡便な操作で確実に作業することを可能とした。本装置は順調に稼働し実績を挙げ、全国の大学や附属研究所の寒剤供給施設で同様のシステムを導入する際の原型となっている。

(宇理須恒雄 記)

## 十代 健助教にナノ学会第6回大会若手優秀発表賞



物質分子科学研究領域・電子構造研究部門・助教の十代 健氏がナノ学会第6回大会若手優秀発表賞を受賞しました。受賞題目は、「自己組織化銅アセチリドを前駆体としたカーボン材料」です。

今回の受賞研究は銅アセチリドナノワイヤー結晶を爆発を起こさないように徐々に200℃まで昇温し、炭素被覆中に銅の芯をもったナノケーブルを生成させ、この銅を酸やアルカリで部分的に溶かしだして、機能を持たせ

ることに成功したものです。銅を完全に着けたままのケーブルが低温領域での酸素センサーとして機能することは既に、J. Am. Chem Soc. 誌のCommunicationに掲載されましたが、今回は、炭素層の中に僅かな銅を残した炭素材料の分光学的な研究と興味ある機能発現の高いポテンシャルを示したことによります。このユニークなナノ材料の開発研究が高く評価されました。

(西 信之 記)

## 01 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」 日本—中国合同次世代触媒創製を目指した機能物質シンポジウム報告

報告：生命・錯体分子科学研究領域 教授 魚住泰広

JSPS アジア研究教育拠点事業の一環として「日本—中国合同 次世代触媒創製を目指した機能物質シンポジウム (China-Japan Joint Symposium on Functional Materials toward Future Catalysts)」と題する学術集会を平成20年1月16日に中国科学院化学研究所（北京）にて開催した。シンポジウム当夜の会食はもとより、前日および翌日にも学生も含めた多くの参加者が各々銘々に学術情報から両国の文化習慣の紹介など大いに交流を深め、実りあるイベントとなった。本稿ではとくにシンポジウムの概要を紹介したい。

本シンポジウム開催に当たって、日本側は筆者と澤村正也北海道大学教授が世話人となり、中国側は Sun 化学研究所教授がホストとなり、先端的な研究成果の学術発表と討論を実施した。学術発表は12の招待講演と6件の一般講演からなり、そのいずれもが次世代型化学反応触媒の創製を目指した先端的有機材料、機能分子ユニット、触媒創製方法論などの開発研究、学術的挑戦、先端的かつ基礎的知見に充ちたものであった。演題は招待講演、一般講演とも日中両国の研究発表が半数づつ

を占め、相互のインタラクティブな学術交流持たれた。日本側は主催機関である分子科学研究所に限定せず北海道大学、京都大学からも登壇を得、また中国側も科学研究所に加えて北京大学、精華大学からの発表もなされた。今回、特に嬉しかったことは、一般講演において日中両国の大学院生が英語で口頭発表する機会を得たことである。大きな国際会議では大学院生にはなかなか oral presentation の機会は与えられず、どうしてもポスター発表に終始しがちである。発表形式の善し悪しではなく、口頭でのプレゼンはポスター発表とは全く違った準備が必要であり、緊張感も達成感も格別である。大学院生の時点で海外での口頭英語発表・討論の実績を積むことは必ずや当該大学院生にプラスの刺激となったであろうと教育的視点からも自負している。さて、日本からは北大（修士課程院生1名）、京大（修士課程、博士課程院生各1名）が堂々たるプレゼンテーションをお披露目することができた。またさらに、口頭発表で自信と勢いを得た大学院生諸君はその後シンポジウム内での質疑討論にも進んで関わり、自ら進んで発言機会を求めるとなど刮目すべき積

極性を呈した。

既に各研究者相互間で個別には将来的な大学院生の交換（短期留学）への希望なども議論されつつあり、アジアの学術連携と研究上の相加・相乗効果は明白である。また、分子研（魚住）は昨年度には別の切り口での共同シンポジウムを実施しており、本シンポジウムは開催2例目となるが、今回の懇親会の席上では既に翌年度（平成20年度）のシンポジウムテーマと主催者について中国側から積極的な働きかけがあった。このことは、本形式の共同シンポジウムが両国の化学研究者にとって効果的であり、期待の大きからんことを示している。

我々の北京滞在中は視界良好とまでは言えないまでも、有名（悪名？）なスモッグもおとなしく身を潜めていたようで、積雪が「すすけた」汚れ雪になることもなく、また火鍋も北京ダックも各種餃子も大変安く美味しくいただけだ。ただ、北京名物（？）のエンドレスで続く「白酒（ばいぢゅ）」の乾杯（かんぺい）合戦は、例年のこととはいえ、今年も白旗を掲げてKO負けであった……残念！

## 02 日本学術振興会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」 日・中機能性分子の合成と自己組織化シンポジウム報告

報告：物質分子科学研究領域 准教授 江東林

日本学術振興会 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」「日・中機能性分子の合成と自己組織化シンポジウム」は2008年2

月23—25日の三日間にわたって、中国科学院化学研究所にて開催された。本シンポジウムでは、両国の機能性分子の自己組織化分野で活躍している第

一線の若手研究者が一同に介し、最前線の研究成果を報告するとともに、集中的に議論する機会を持つことで相互理解を深め、このシンポジウムを通じ、

当該分野の若手ネットワーク構築を目指した。本シンポジウムの中心テーマは、最近急速な発展を見せている分子組織体である。分子組織体は光、電気、磁気、熱、イオン、分子などに応答する機能を有しており、外部刺激に応じて物質運搬・物質変換をはじめ、エネルギー伝達、分子センシング・光スイッチングなど様々な働きを示し、次世代ナノテクノロジーの根幹をなすと考えられている。

シンポジウムでは、フラーレンに代表されるサイズの小さな共役分子から巨大拡張共役系分子、そして共役ポリマーまで幅広い物質群をカバーする口頭講演とポスター発表が行われた。口頭発表は30代の若手教授や准教授クラスを中心に、多数の大学院学生や博

士研究員などの若手が参加し、長時間にわたり熱心に質疑・議論が行われた。口頭講演で発表された研究は、世界トップレベルの極めてプライオリティの高い成果ばかりで、当分野における日中両国の研究の先進性が示された。新規共役小分子の合成やその自己組織化などの基礎研究に加え、共役ポリマーを用いたFETやソーラーセルなどの光電素子の検証など応用面までを対象としており、基礎研究の深さと応用展開の広さの両面から、日中両国の研究の最前線を一望できた。機能という観点では、アニオン認識、カチオン認識、光機能性、FET効果、エネルギー変換、結晶工学、ソフトマテリアル、磁気機能性材料など、極めて広範囲にわたる話題が提供されたが、自己組織化におけ

る様々な分子間相互作用を巧みに利用していることが各系の共通の特徴であった。この点で、機能性材料開拓における自己組織化手法の重要性があらためて認識された。ポスター発表は7件と比較的少なかったが、研究内容は異分野を横断するものであった。多数の若手参加者の積極的な議論を見ると、本シンポジウムは当分野の日中間の若手研究者のネットワークの形成・構築に貢献できたと言える。すでに、数件の共同研究の意向も示されたため、その繋がりがより確実なものになることが期待できる。多数の出席者から「両国の若手研究者交流のよい場であった」との評価を受けており、当領域における日中若手ネットワーク構築への大きな一歩を踏み出せた、と総括している。

## 03

## 日本学術振興会アジア研究教育拠点事業「物質・光・理論分子科学フロンティア」第2回年次会議報告

報告：物質分子科学研究領域 准教授 江東林

日本学術振興会 アジア研究教育拠点事業「物質・光・理論分子科学フロンティア」第2回年次会議は2008年3月6-9日の四日間にわたり、韓国大田市韓国科学技術院（KAIST）において開催された。本年次会議は、共同研究・研究交流の推進と、次年度へ向けての計画の進展について議論することを目的とした。その際、各共同研究における具体的な進行状況と各セミナーの開催状況をチェックするとともに、その後の研究計画の再検討や、新たなセミナーの計画について議論を行った。拠点研究機関を中心とした分子科学研究者の講演、ポスターセッションを行い、最前線の分子科学研究の現状を俯瞰す

るとともに、新たな共同研究の可能性を検討した。

年次会議では、各共同研究の進捗状況および各セミナーの開催状況が報告され、今後の研究計画の再検討や、新たなセミナー計画について議論することにより、次年度の事業をより充実したものに発展させるための基盤を築くことができた。講演会においては、理論、光、物質分子科学各重点分野に関する11件の口頭発表が行われ、各拠点研究機関の研究水準の高さを再認識した。ポスターセッションでは共同研究やセミナーに関する報告が行われ、本プログラムの現状をお互いに知ることができた。またその講演会やポスター

セッションでは、研究内容に関する活発な議論があり、新たな共同研究の契機となる話し合いも行われた。さらに全体会議の今後のあり方に関する率直な意見交換もあった。前回と今回は、広い分野の研究者が主体的に参加できるようにとの配慮から、本プログラムに関係するトピック全てを扱う会議としてきたが、一方でテーマが分散し過ぎ、焦点が定まらなくなっている面があるとの意見もあった。報告・講演の場としての全体会議の方式は一旦見直し、テーマを絞った会合とするなどの再検討を今後、行っていくこととなった。

## 新装置紹介

## 超伝導磁石極低温 X線磁気円二色性観測装置

横山 利彦

[物質分子科学研究領域・電子構造研究部門]

コンピュータ記憶・記録媒体の著しい高密度化・高速化に伴い、様々な機能を発現する磁性体の開発や評価はますます重要になっている。X線磁気円二色性(XMCD, X-ray Magnetic Circular Dichroism)は、シンクロトロン放射光からの円偏光X線を利用して、磁性体の磁気的な円二色性(左右円偏光あるいは磁化反転でのX線吸収強度差)を測定する手法である。元素毎の磁性評価、スピンと軌道磁気モーメントの分離観測、数原子層以下の超薄膜の磁気測定など、他の手法では得にくい情報を供給する手段として、最近非常に汎用性が高くなってきた。

ところが、磁気測定では必須とも言える、超伝導磁石を利用した高磁場下、液体Heクライオスタットを用いた極低温下での測定が可能な装置、特に共同利用に供されている装置は、フランス・グルノーブルのヨーロッパ・シンクロトロン放射光施設(ESRF)のシステムが有名であるものの、世界的にも非常に数が限られている。我が国では、硬X線(高エネルギーX線)領域においてJASRI/SPring-8に大変立派な共同利用装置があるが、Fe, Co, Niなどの重要な磁性元素のL吸収端が測定可能な低エネルギー軟X線領域では、物質構造科学研究所と原研SPring-8の装置が一般的な共同利用に供されてはならず、さらなる導入が望まれていた。横山グ

ループでは、科研費特定領域研究を財源として超高真空仕様の超伝導磁石を導入し、現在は特別研究費や文科省ナノネットプロジェクト等で付帯設備や維持費を工面しながら、広く利用していただきたくXMCD観測システムを構築した。

光源は通常UVSOR-IIの斜入射不等間隔回折格子分光ビームラインBL4B<sup>[1]</sup>を利用する。測定システム<sup>[2]</sup>を含めて仕様等を表1にまとめた。すべて超高真空仕様で、試料準備槽と測定槽から成る。写真と概要図を図1に示す。試料準備槽はユーザーの希望機器を取り付けることが可能であるが、通常は、基板単結晶清浄化とその評価、磁性金属などの蒸着、気体導入等が可能である。作成された試料はもちろん超高真空下でそのまま測定槽に移送され、高磁場極低温下での角度依存を含むXMCDスペクトルやXMCD信号を利用した磁化曲線の測定ができる。

測定例<sup>[2]</sup>として、Cu(001)清浄表面上に作成した0.4原子層Co超薄膜のCo-L吸収端XMCDの結果(測定温度6.0 K)を示す。図2の挿入図に表面垂直方向の磁化曲線を示した。この試料は、面内方向には容易に磁化されるが、強い磁気異方性のため薄膜垂直方向にはなかなか磁化されず、~3.4 T程度で漸く飽和磁化に達していることがわかる。また図2にCo-L吸収端円偏光

吸収スペクトルとXMCDを示した。非常に大きなXMCD信号(赤線)が観測されている。このデータを解析して、スピン磁気モーメント $m_{\text{spin}}=1.65 \pm 0.10 \mu\text{B}$ 、表面平行(//)・垂直( $\perp$ )方向の軌道磁気モーメント $m_{\text{orb}}^{\parallel}=0.29 \pm 0.05 \mu\text{B}$ 、 $m_{\text{orb}}^{\perp}=0.23 \pm 0.05 \mu\text{B}$ などが得られた。バルクCo( $m_{\text{orb}}=1.55 \mu\text{B}$ 、 $m_{\text{orb}}^{\parallel}=0.15 \mu\text{B}$ )に比べて、 $m_{\text{spin}}$ は12%、 $m_{\text{orb}}$ は平行・垂直成分がそれぞれ96%、53%も増加していることがわかった。クラスター的な薄膜の特徴が顕著に現れた結果である。また、 $m_{\text{orb}}$ の異方性( $m_{\text{orb}}^{\parallel} > m_{\text{orb}}^{\perp}$ )が、この試料の磁気異方性の起源になっていることが明らかとなった。

利用を希望される方はUVSOR施設利用に申請いただきますが、まずは横山(yokoyama@ims.ac.jp, TEL: 0564-55-7345)まで、お気軽にご連絡して下さい。

## 参考文献

- [1] T. Gejo, Y. Takata, T. Hatsui, M. Nagasono, H. Oji, N. Kosugi and E. Shigemasa, *Chem. Phys.* **289**, 15 (2003).
- [2] T. Nakagawa, Y. Takagi, Y. Matsumoto and T. Yokoyama, *Jpn. J. Appl. Phys.* **47**, 2132 (2008).

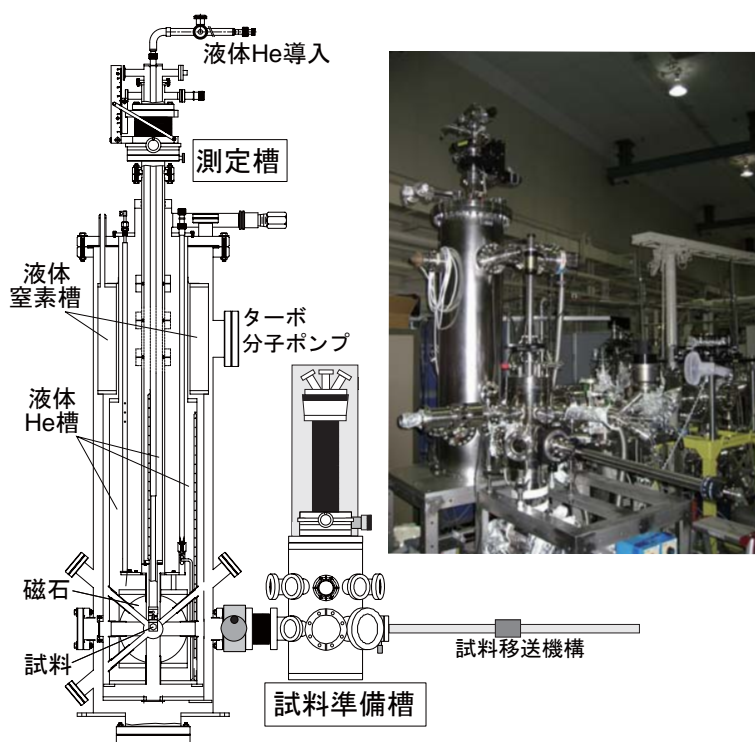


図2 本装置によるXMCD測定例。 $\mu^+$ と $\mu^-$ が測定で得られた円偏光吸収スペクトルで、これからXMCDを得る。軌道磁気モーメントなどの異方性を知るため、磁化方向依存性（表面平行または垂直）を測定している。挿入図は垂直方向に磁化した場合の磁化曲線で、縦軸はXMCD強度。

図1 超伝導磁石極低温X線磁気円二色性観測システムの概要図と写真。放射光は紙面垂直上方に入射される。

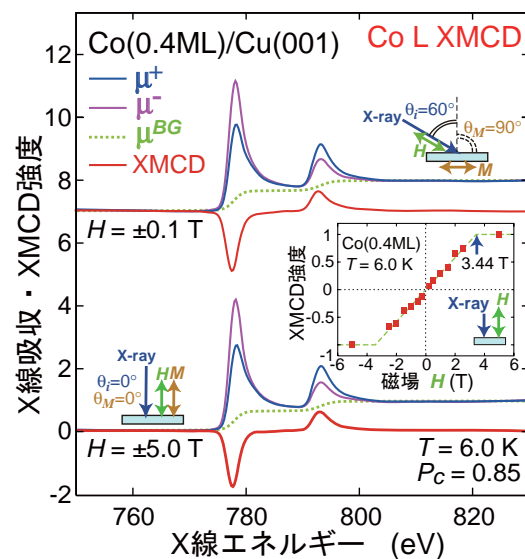


表1 UVSOR-II BL4Bと超伝導磁石極低温XMCD観測システム仕様等

項目		仕様等
ビームライン		UVSOR-II BL4B 偏向電磁石 斜入射不等間隔回折格子分光器
X線エネルギー		100~1000 eV (回折格子3種)
エネルギー分解能		700~2000 程度で使用 (入出射スリットあり)
偏光度 円偏光		<0.85 (上流4象限スリットにより切り出し) 通常0.7程度で使用
磁石	磁場	超伝導 NbTi スプリット型 0~ ± 7 T (± 5 T 標準)
	磁場安定度	0.5% (1cm 四方)
	掃引速度	1 T/min. (0~ ± 5 T), 0.25 T/min. (5~7T)
	He 保持時間	容量 25 L, 実験中 12 時間、休止中 24 時間
試料温度		4.8 K (He 蓄積時), 3.8 K (He 排気時)
計測法		試料電流 それ以外のモードは検討中
試料回転		試料準備槽、測定槽とも 360° 回転可 (角度依存観測可)
試料準備槽装備		加熱、イオン銃、LEED/AES または RHEED、蒸着源 (ほか)
真空度		測定槽 $2 \times 10^{-10}$ Torr (試料位置ではこれよりはるかに良い) 試料準備槽 $8 \times 10^{-11}$ Torr



## 20年ぶりの分子研にて 思うこと

ひらもと・まさひろ

1980年大阪大学基礎工学部卒。1984年大阪大学大学院基礎工学研究科博士課程中退。工学博士。1984年分子科学研究所文部技官。1988年大阪大学工学部助手。1997年大阪大学大学院工学研究科准教授。2008年4月より現職。超高純度化、ナノ構造制御、有機/金属界面解明などの有機半導体の基礎科学を推進し、有機太陽電池、新しい有機エレクトロニクスデバイスとして社会還元することを考えている。

学生時代、私は、阪大基礎工学部の坪村 宏教授（現、阪大名誉教授）の研究室におりました。坪村研は太陽電池をやっていると聞いて興味をひかれたためです。博士3年のとき、就職活動をし、東芝の内定をもらって先生に報告に行きました。すると、ところでこういう話があるんだが、と、次のような提案をされました。「坪村研に助手でいた坂田忠良先生が、助教授で分子研におり、技官をさがしているとのことです。いってみませんか？」

どちらにしようか悩んだ末に、梅田、カッパ横町の占い師に聞きました。おおよそ、占い師というものは、人の顔色をみて判定しているのですが、心の底では分かっていることであっても、さいごの一押しが必要だったのです。「東芝のほうが分子研の技官より給料は高いだろう。けれども、研究所は面白そうだと思っているだろう。今は、給料は安いかもしれないが、将来を見通すと、末広がりでこちらが良い。」というのが占い師のご託宣でした。

技官として技術課に所属し、電子構造研究系の坂田忠良助教授（現、東大名誉教授）のもとで、光触媒、光電

極を用いた太陽光エネルギー変換の研究に従事しました。橋本和仁助手（現、東大教授）がおられ、3人のグループでした。今思うと極楽のような、研究三昧の生活でした。機器センターで山中孝弥氏からレーザーの扱いを教わったり、低温センターで加藤清則氏からヘリウムの汲み方を教わったりしました。技術課から送別にいただいたマグカップは、頑丈でこわれることがないので、いまだに使っています。

研究もしましたが、同時によく遊びました。夏、実験棟の屋上で花火見物。さくらまつりの家康行列。馬上の分子研総大将は、篠原久典先生（現、名大教授）でしたが、私といえば足軽で、市役所でみそとおにぎりの包みをもって、鉄砲をかついで行進しました。定期的に、電子構造研究系でパーティー、忘年会をしていましたし、坂田グループでもよく飲みに行きました。日頃も、電子構造の談話室で夜遅くまで話していたり、夜、急にドライブに行こう、ということになって、三ヶ根山に行ったこともありました。岡崎にいたのは、20年以上も前のことで、約3年と短い間でしたが、楽しい思い出と

して心に残っているのは、雑事にとらわれることなく、研究に集中できていたためだと思います。

坂田忠良先生は、ある意味で悟っている風格があり、人間的な魅力のある方で、私は、進んで影響されようと願ったように思います。研究では、オリジナリティーを何よりも大切にされました。誰も行かないような全く未知の領域にすすんで挑戦したり、些細なことにこだわらず、大局的な見地からみて、大胆な仮説を提出されるような、勇氣をもっておられました。また、日々の雑事に追われるだけではだめで、常に余裕を持つという生活態度も教えていただきました。

近年、大学の仕事が加速度的に忙しくなり、日々の雑事に追いまわられることが多くなりました。けれども、意識的にでも、静かに深く考える時間をとることは、良い研究をする上で不可欠だと思います。

ちょうど30才のときに、分子研から阪大工学部の横山正明教授（現、阪大名誉教授）の研究室に転出し、有機半導体に分野を変えました。新しい分野に移った直後は、未経験の実験、未知



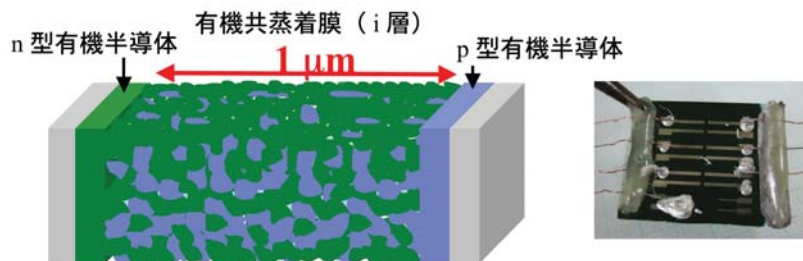


図1 p-i-nバルクヘテロ接合有機太陽電池の模式図とセルの写真。有機共蒸着膜は、アクセプターとして働くn型有機半導体分子と、ドナーとして働くp型有機半導体分子が共蒸着によって混合されている。

の結果の続出、学生指導の試行錯誤など、無我夢中でした。ところが、不思議なことに、今、思い返すと、本質的な仕事の多くが、移ってから3年以内、すなわち、無我夢中で四苦八苦している時に出てきています。その中の1つが、有機太陽電池におけるp-i-n接合（バルクヘテロ接合）の概念（図1）の提出<sup>1)</sup>で、これは、現在の有機太陽電池の基本構造となっています。

研究の分野を変えたり、場所を移ったりすることは、本人にとってはストレスを伴いますが、新しい研究分野を切り開いていくには、チャンスと云えると思います。新しい人との出会いや異なった環境によって刺激されて、新たな視点が開け、未開拓の分野への挑戦につながります。今回、思いがけなくも、分子研に再度お世話になることになりましたのも、そのようなチャンスを与えていただいたのだと、感謝しております。

着任後3ヶ月がたち、実験ができるようになりました。6月からIMSフェローとして加わってくれた池滝何以君、阪大工学研究科から受託学生として岡崎にきてくれた修士2年の北田敬太郎君、SEMやFIBの専門家である中尾聡君、9月からは、新しい助教として、嘉治寿彦君もメンバーに加わる予定です。

私たちの研究グループは、有機半導体の基礎科学を推進し、有機太陽電池、新しい有機デバイスとしてその成果を結実させようと考えております。

昨年、有機ELテレビが話題になりました。有機エレクトロニクス分野では、有機太陽電池、有機トランジスタが次のターゲットとして精力的に研究されているところです。ところが、有機半導体の基礎科学は、シリコンに代表される無機半導体のそれに比べて非常に遅れています。半導体としては当

然の、超高純度化とドーピングによる自在な伝導タイプ制御（pn制御）、有機/金属接合界面や有機/有機接合界面の制御は、高度なデバイスを設計・製作する上で、避けて通れない課題ですが、有機半導体においては未解明の部分だけで、ブラックボックスと云って良い状況です。私は、これらの課題を解決して初めて、実用レベルの有機太陽電池や、これまでにないタイプの有機デバイス（例えば、有機半導体レーザーなど）が実現できると確信しています。また、エネルギー問題の解決は科学者の使命であり、将来の選択肢を増やす意味においても、実用レベルの有機太陽電池を実現し、社会還元することを考えております。

各論になりますが、理解を深めるために、すこし、具体的に紹介したいと思います。



図2 結晶析出昇華精製装置の写真。温度勾配下、窒素、水素雰囲気中で、対流を起こすことにより、有機単結晶を作製できる。

1つめは、有機半導体の超高純度化についてです。シリコンは、通常、イレブンナイン99.999999999%まで非常に高純度化して用いられます。純度に9が11個つくことから、イレブンナイン（11N）と呼ばれます。有機半導体も例外ではなく、こと電子材料への応用を考える場合は、純度に関してppmからppbのレベルの桁外れの精度が要求されます。ところが、有機半導体材料に対するppmオーダーの正確な純度決定技術がほとんどないこともあって、同じ有機半導体を用いたデバイスであっても、研究グループによって異なる特性が観測されることが少なからずある状況です。私たちのグループでは、結晶析出昇華精製装置（図2）を用いて、有機半導体を大きな単結晶として取り出し、精製を行っております。例えば、C<sub>60</sub>の場合、数ミリ角のサイズの単結晶が得られ、単結晶化を3回繰り返したサンプルは、2次イオン質量分析（SIMS）測定によって、セブンナイン（99.99999%）以上の純度であることを確認しています（図3）。この7N C<sub>60</sub>を、図1の有機太陽



図3 セブンナインC<sub>60</sub>の写真。大きさは2 mm x 2 mmに達する。

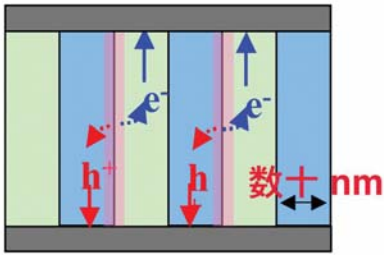


図4 直立超格子理想ナノ構造。電子とホールが異種半導体界面で光生成し、電子はフラレン（緑色）、ホールはフタロシアニン（青色）を通して外部に取り出される。超格子幅は励起子の移動可能距離で決まり、数十nmの精度の設計・製作が必要。

電池に組み込むと、5.3%の世界最高効率を得られ、超高純度化がいかに大きな効果を持つかが分かります。これを足がかりとして、有機半導体の純度について、グローバルスタンダードを作りたいと考えています。

2つめは、ナノ構造設計・制御についてです。図1のp-i-n有機太陽電池の中間層（i層、または、バルクヘテロ接合層と呼ばれる）は、フタロシアニン等のドナー性の分子とC<sub>60</sub>などのアクセプター性の分子を共蒸着して混合した層となっています。これは、光誘起電子移動を利用して光生成キャリアを発生させるためです。ところが、この共蒸着層は、通常、分子レベル混合となっており、電子とホールをそれぞれの電極まで取り出すには、それぞれの取り出しルートを数十ナノレベルの精度で形成することが必要になってきます。現在、そのような構造を作るには、

熱処理等の、偶然にたよったパーコレーションしか方法がありません。光キャリア生成とキャリア取り出しを両立した理想構造をつきつめると、図4に示した直立超格子ナノ構造<sup>2)</sup>となります。もし、この理想構造を全く人工的に設計・製作できる一般的な方法を見出すことができれば、効率20%以上の有機太陽電池も夢ではありません。私たちは、ナノインプリントと真空蒸着を融合した方法によって、これに挑戦することを考えています。これによって、パーコレーションのような偶然にたよらず、特定の分子にしか適用できない自己組織化のような制限の多い方法にもよらない、完全に人工的で、どのような材料にも適用できるナノ空間構造設計・製作の新原理が提出できると考えています。

3つめは、有機/金属接合についてです。有機デバイスには金属/有機界

面が少なくとも必ず2つは存在し、デバイス特性を決定的に左右します。ところが、金属/有機界面の電子注入バリア高さでさえ、正確に実測されておられません。私たちは、弾道電子放出顕微鏡によって、この実測に挑戦しようと考えております<sup>3)</sup>。STM探針を弾道電子源として用いれば、バリア高さの2次元マッピングもできます（図5）。電子注入バリア高さは、分子配向、結晶面、結晶表面ステップ、結晶粒界、蒸着金属の構造などの、様々な界面のナノ空間構造、さらには、有機-金属相互作用などの種々の因子が影響を及ぼしているのは確実です。有機デバイスの真の実用化には、このような金属/有機界面の深い理解と制御が必要不可欠です。有機太陽電池を例にとって説明しますと、有機/金属接合に自由自在にオーミック接合（界面における電荷キャリアの注入、取り出しが全く律速にならない接合）が形成できるようになり、セル抵抗の抜本的な低減、ひいては、曲線因子、効率の抜本的向上につながります。

ここで述べたのは例であり、他にも多くの課題が山積しております。また、今回は新しい有機半導体デバイス

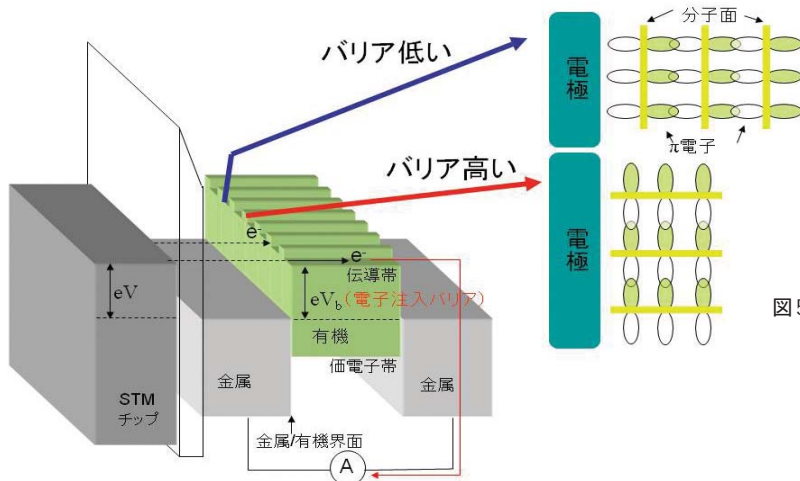


図5 弾道電子放出顕微鏡 (BEEM) の原理。金属/有機接合の電子注入バリアより低いエネルギーの電子は有機半導体の伝導帯に侵入できないが、電子注入バリアより高いエネルギーを持つ電子は伝導帯に入って電流として検出できる。このBEEM電流の立ち上がるトンネル電圧から、電子注入バリア高さが決定できる。バリア高さの分子スケールでの空間分布も画像化できる。

の研究に関しては全くふれませんでした。研究を進めていくうちに、新しいアイデアもでてくると思います。なすべきことは多いですが、前半で述べましたように、静かに深く考える時間をとって、オリジナリティーのある研究を1つ1つ確実にすすめていこうと考えております。

最後になりましたが、分子研着任にあたり、西 信之先生、横山利彦先生、中村宏樹所長をはじめ、所内の多くの方々にお世話になりました。この場を借りて、お礼申し上げます。

また、長年、研究交流があり、目をかけてくださり、分子研着任にあっても心から激励くださった、故 関

一彦先生（名大教授）にも心からお礼申し上げます。本稿を執筆する直前に、ご逝去の悲報を受け取りました。岡崎に移って近くなり、これからもっと共同研究など行いたいと願っております。悲しく、残念でなりません。心からご冥福をお祈り申し上げます。

#### 参考文献

- 1) M. Hiramoto, H. Fujiwara, M. Yokoyama, "p-i-n Like Behavior in Three-layered Organic Solar Cells Having a Co-deposited Interlayer of Pigments", *J. Appl. Phys.*, **72**, 3781 (1992).
- 2) M. Hiramoto, T. Yamaga, M. Danno, K. Suemori, Y. Matsumura, M. Yokoyama, "Design of Nanostructure for Photo-electric Conversion by Organic Vertical Superlattice", *Appl. Phys. Lett.*, **88**, 213105 (2006).
- 3) 平本昌宏、横山正明、公開特許2001-343318、「金属・有機界面の電子注入エネルギーバリアの測定方法及び装置」、2001.11.4.



## 電子状態理論を核とした 新しい理論化学を求めて

えはら・まさひろ

1988年京都大学工学部合成化学科卒、1993年同大学大学院工学研究科博士課程修了、博士（工学）。1993年（財）基礎化学研究所、1994年ハイデルベルグ大学博士研究員、1995年京都大学大学院工学研究科助手、2002年同助教授を経て、2008年6月に着任。

平成20年6月1日付で、京都大学大学院工学研究科から自然科学研究機構計算科学研究センターに着任いたしました江原です。岡崎は落ち着いた雰囲気があり、自然にも恵まれ、とても環境のよいところです。研究室からは木々のそよぐ音や鳥のさえずりが聞こ

え、自然を感じながら研究できることがとても幸せです。所内に「新しい科学の芽ここに生まれ大樹とならん」という長倉三郎先生のお言葉がありました。このすばらしい環境の中で、研究生活を満喫したいと思っております。

私はこれまで分子の励起状態につ

いて高精度な電子状態理論に基づいた研究を行ってきました。励起状態の理論研究には、独特の面白さがあります。励起状態には多くの複雑な電子構造の状態があり、これらを一挙に正確に求めることが重要になります。私が京都でお世話になりました中辻博先生は、

励起状態理論の黎明期にSAC-CI法を開発されましたが、この理論は励起状態の有用な理論として確立しています。この理論を応用していく段階で、複雑な状態では必ずしも十分ではないケースがあり、そのような場合にも高精度なGeneral-R法を開発しました。理論の開発と実装には時間がかかりましたが、Gaussianに導入して一応の完成をみたときには達成感がありました。それ以来、複雑な電子状態の精密な理論研究が私の研究の一つの流れになりました。励起状態の研究でもう一つ重要な点は、励起状態の安定構造を探索することです。特に励起状態では複数の電子状態が交差したり、複雑な電子状態が現れる場合があります。そのような場合にも対応できるエネルギー・グラジエント法を開発しました。

次に、開発した理論を用いて、理論分光の精密な研究を行いました。理論分光の研究では、多くの実験研究者の方々にお世話になり、とても楽しく研究を行うことができました。バレンス励起から内殻電子過程まで様々な分子分光に応用し、特に内殻電子過程ではGeneral-R法が有効で、サテライト状態や振動スペクトル、バレンス・リドベルグ混合などについて研究しました。この分野は実験が急速に進展しており、分子研では最先端の実験グループがありますので、今後、実験との研究交流を楽しみにしております。

光物性科学にも関心を持って応用しました。有機ELやバイオセンサーの光電子過程について基礎的な研究を行いました。分子科学的にも大変興味深い内容を含んでいました。高分子系の有機EL分子では、柔軟なコンフォメーションを考慮した統計的な取り扱いが光物性に重要であることが分かりました。また、バイオセンサーの研究では、

励起状態と電子移動の状態が複雑に交差しており、その光電子過程では、構造緩和や溶媒効果が重要であることが分かりました。これらの研究では励起状態の構造最適化法が有効で、複雑に交差する電子状態における励起緩和を理論的に追跡しました。

表面触媒反応は工業化学的にも重要ですが、無限系と有限系の接点で起こる現象であり、理論的にも大変興味深い研究対象です。固体表面の触媒作用では、固体表面と吸着分子の間の相互作用や電子交換が鍵となっており、この点に興味を持って研究しました。また、吸着分子の光電子スペクトルは気相に比べて大きく変化しますが、これは表面-吸着分子間の電子移動が反映しているものと考えられ、とても興味深い現象です。表面-吸着分子系の理論モデルは開発段階にあり、今後、理論による解析が益々発展していくと思えます。

化学反応の動的過程や時間に依存した現象の研究も重要と考えています。ポスドク時代に基礎化学研究所において山下晃一先生のご指導の下、量子ダイナミクスの研究を行いました。ここでは三原子分子の光解離反応や擬回転運動を、量子波束法を用いて研究しました。また、ハイデルベルグ大学では多次元の量子ダイナミクス法の開発に携わり、固体表面における分子の非弾性散乱による回転励起の研究を行いました。その後、ダイナミクスの研究から離れていますが、今後、量子ダイナミクスの研究にも挑戦していきたいと考えています。

以上の研究を行ってきましたが、今後は、電子状態理論を核とした新しい理論化学の開拓を目指したいと思えます。理論開発では、やはり電子状態理論の高精度化と大規模化を軸とする

ことが重要であると考えています。結合解離や励起状態などの複雑な電子状態を効率的に記述できる理論を開発し、理論精密分光の励起ダイナミクスの研究を深めたいと考えています。また、理論の大規模化を行い、生体系や集積系における光電子過程、電子・プロトン移動、励起エネルギー移動など量子的な過程について研究したいと思えます。電子状態理論と量子ダイナミクス理論を用いて、光電子過程や化学反応を実時間で解明する研究にも興味を持っています。これらの研究では、分子研で最先端の研究が展開していますので、積極的な研究交流ができることを期待しています。

計算科学研究センターは、次世代スパコンのプロジェクトがあり、大変重要な時期にあると思えます。これを機に、諸先生方の高い理念を受け継ぎまして、世界から注目されるセンターに発展させ、分子科学の発展に寄与したいと思えます。最新の特徴あるハードウェアを提供し、計算科学ライブラリーを充実させることで、分子科学全体、さらに科学の広い分野に活用していただけるセンターを目指したいと思えます。また、シンポジウムや講習会を開催して、研究者の交流の場として、そして若い人に魅力のある情報を発信できるセンターとして発展させることが大切と考えています。これらのシンポジウム等を通じて、協力研究などの研究交流に貢献できればと思えます。

最後になりますが、計算科学研究センターに研究グループを持つ機会をいただきましたことにつきまして、ご支援と激励をいただきました先生方に深く感謝いたします。



## 卒業後9年目



【5月某日】

丁度、2週間の一人旅をする直前に、「OBの今」の原稿依頼が舞い込んできた。分子研を「卒業」してから、すでに、2回も雑文を書いているので<sup>1)</sup>、何人かの別候補を推薦して逃れようと試みたのだが、結局断り切ることができなかった。そこで、分子研計算機センター長時代に「センター長報告」としてしばしば試みたように「旅日記」風に、近況を報告させていただこう。今回のアメリカ行きは、旅行ではなく、私が開発しているプログラムを、PNNLのグループたちが長年かけて作っている総合化学プログラムパッケージNWChemに接続できるかを検討するため、PNNL (Pacific Northwest National Laboratories) に滞在する。

1) 分子研レターズ44号巻頭言「変わるってドキドキ」；分子研レターズ49号「どこへ行くのか研究の評価」

【6月3日】

PNNLは、いろいろとsecurityが高く、建物に入るカードの交付を受ける前に、web上で、「講習と試験」を受けな

### 岩田 末廣

(財団法人豊田理化学研究所 フェロー／広島大学大学院理学研究科特任教授 (非常勤) ／分子科学研究所名誉教授)

いわたすえひろ／1967年東大理学研究科博士課程修了後、理化学研究所研究員。1972年から75年まで諸熊教授とK. Freed教授の下で博士研究員。1981年慶応大学理工学部化学科助教授、86年同教授。1994年分子研教授。2000年広島大理学研究科教授。2001年大学評価・学位授与機構教授。2004年広島大学量子生命科学プロジェクト研究センター・理学研究科特任教授。2008年豊田理化学研究所フェロー。

ればならない。まずその前に持って行ったMacBookProをネットワークにつなげるための「講習と試験」に通過しなければいけない。この二つのシステムはなかなかよくできていて興味深かったが、正直に画面を読んで解答していくと結構時間をとられてしまった。

【6月6日】

この2、3日でNWChemのSource Licenceを取り、downloadするところまではできた。Programers マニュアルを眺め始めた。いろいろな量子化学計算やシミュレーションのタスクから構成されている。主にFortran77で書かれているが、各タスクがモジュール化されていて、何よりもcommonがないのがよい。Include文で処理しているようだが、どうせならfortran90にしてmodule文を使えばよいのに。gfortranというpublic domainのfortran90(95) compilerがある今fortran77に固執する意図がわからない。しかし、GAMESSやHONDOに比してずっと私の玩具パッケージMOLYXとは相性が良さそうだ。今晚は、NWChemの中の多電子理論の部分の開発に携わっているDr.Fang,P.-D.とDr.Kowalskiに夕飯を誘われている。広島大の相田研からDupuisのところに来ていた山田君も一緒だ。Fangさんとはフロリダ大の平田聡さんのところで

知り合っており、Kowalskiは平田さんがPNNL時代に開発始めたTCEプロジェクトを引き継いでいる<sup>2)</sup>。私はこのところ、彼らのような若手の量子化学者には、So HirataとSeiichiro Ten-noのポストであったことがある人として知られており、今晚のようにいろいろ得をさせていただいている。食事の後は、山の上のwineryで地元の赤ワインもご馳走になってしまった。PNNLのあるTricity近傍はこのところワインの製造で売り出しており、カリフォルニアワインを越えたという説も聞かされた。

2) 平田さんはこの6月に国際量子分子科学アカデミー賞を受賞している。日本人では1978年の諸熊先生以来である。彼のその他の近況はこのシリーズ、分子研レターズ56に詳しい。これでtenureを確実にしたといえよう。

【6月8日 (日曜)】

今日は、PNNLのHostであるSotiris Xantheasがドライブでワシントン州の北にあるリゾートCoeur D'Aleneまで連れて行ってってくれる。ドイツから夏の間だけ来ている大学院生Werham, Jasperと一緒に。Sotirisとは、十数年のつきあいになる。彼はギリシャ人だが、娘たちが手を離れたら、車で3時間ほどのこの湖畔のリゾートで週末を過ごすんだといっている。この長いド

ライブでSotirisとはいろいろな話をした。その一つが「卒業証書」だ。確か西さんが主催してくれたのだと記憶しているが、1999年12月にIMS COE 国際会議”Interplay of theories and experiments in structural analyses of molecular clusters”に、Sotirisは参加している。その夕食会の際に、外国からの出席者たちが私に「分子研卒業証書」なるものを贈ってくれたのだ<sup>3)</sup>。Jim Lisy、Klaus Muller-Dethlef、Denis Salahub、Mike Duncan、Niedner-Schattenbergなどが署名をしてくれた。翌3月に分子研を辞すとしても、それで私がretireするつもりもないことを知っていた誰か（多分Lisy）が「分子研を定年で辞める」を「分子研を卒業する」と言い換えてくれたのだ。幸いにも、「卒業後」にも国家公務員を4年務めることができ、4年の常勤の特任教授（うち1年は公務員共済に加盟）を加えると、8年間full salaryの勤務に就いていたことになる。

ドライブ中のもう一つの話は、この雑文に添付した写真についてだ。これは、昨年Sotirisが来日した折、広島大の江幡さんと尾道に遊んだ時千光寺で撮影したものである。「なぜおまえの名前のpine treeがあるのか」の説明を簡単に「めでたい言葉だから」と説明しただけですましていたのだが、長ドライブのさなかでこの質問がぶり返されたのだ。正直言って私もこの名で父が何を意図したのかまじめに考えたことがなかった。私のすぐ上の兄は桃太郎といい、これは当時の軍国主義の風潮の中で軍隊に入れば「桃太郎閣下」ということで、そのかっこよさが名の由来といわれてきた。この春岡山を観光する機会があり、もう一つの「桃太郎」の由来に気がついた。父はウキタ家の出で、私の祖父に当たる「ウキタ」

達は明治の始めに八丈島から東京に出てきたことがわかっている。宇喜多秀家は流刑地で子孫を残したことになるのだ。このウキタ達は、「宇喜多」を避けて、「浮田」を使っているが、いこの話では今でも一緒に八丈から出てきた人の子孫たちとは連絡がとれているという。桃太郎伝説の岡山は、宇喜多家のゆかり土地なのだ。兄の名の由来はともかくも何で俺は「末廣」何だ。ともかく「めでたい言葉だからレストランの名によく使われるよ」という説明で今までごまかして来たが、Sotirisとの会話の中ではたと気がついた。これが確かに本当の理由なのだ。私が生まれた当時、両親は銀座5丁目「お京」というふぐ料理屋をやっていた。そして今も銀座にある「末廣」は、洋食レストランとして当時すでに繁盛していたという。父達は自分たちと同じ仕事するのに便利な「末廣」を私に与えたと考えるとつじつまが合う。Sotirisのしつこい質問攻めのおかげで長年の私の謎を解くことができた。

3) 何度かの私の移転で今見つけることができなかった。確か、博士記と一緒に大切に保管してあるはずなのだが。

【6月10日】

NWChemをMacBookPro上でcompileすることに成功。テストjobの半分ぐらいは正常終了したが、残りは多分すべて同じ理由で途中までしか走らない。過去の質問・回答集を調べるとMacBookPro、Leopard、intel compilerの組み合わせの例が見つからない。ともかくも、MacBookPro上でCompileした人に問い合わせのメールを打つ。また、FangさんにNWChemの移植に詳しいWang, Dunyouを紹介してもらう。

【6月11日】

問い合わせの返事が戻ってきたがあまり助けにならない。Intel compilerは高価だからgfortranにしたという。Wangの部屋を訪問する。彼はMacMiniしか持っていないし、OSも新しくしていないという。彼は、LeopardのXcodeとintel compilerの相性ではないかという。これらをはじめからinstallし直すことを勧められた。帰国後ということになる。

【7月某日】

いっぺんに2、3週間飛んでしまう。名古屋大学の岡崎さんと岡本さんの招待で、名古屋大工学部でセミナーをさせていただく。この数年間の「研究成果」を話す。感心していただいたのは、中身よりもむしろ「単著」の研究成果であることだ。もちろんセミナーの後には、飲み会。天能さんも加わり楽しく歓談する。皆さん、分子研のOBだ。誰かがどこかに書いていたが、分子研の最大の業績は、優れた人材を日本全国の大学に供給してきたことという話がある。「最大」では、かなり困った事だとは思いますが、確かに、どこの大学を訪ねても、分子研を通過してきた先生方にお目にかかる。広島大学でも、多くの先生が分子研を経験されていたが、名古屋大学は地元であることもあって、たぶん十指を越える方々が現役で名古屋大におられることだろう。斉藤真ちゃんのように<sup>4)</sup>、分子研に舞い戻った方もいるが。

4) 斉藤真司教授が私にとってまだ真ちゃんであること理由は、分子研レターズ53号参照。

【7月某日】

編集委員に催促されて、ともかくも

書き上げることにする。今は、名古屋から日吉の我が家に戻る途中。新幹線の700号車両の先頭と後尾の席では電源コンセントが使える。指定ではなかなか1xや13xの席を取ることができないこともあって、もっぱら、自由席を使っている。もちろん価格面の理由もあるが、この4ヶ月弱の往復で自由席に座れなかったことがない。

今日はまあハッピーだ。平尾特定で2001年に購入し、一橋から東広島を経て、長久手にまで供をさせてきたCompaqのDS20Eを立ち上げ、無事にネットワークにつなげることができた。あまり高速とはいえないが個人的な量子化学計算専用機としては十分使えると判断している。RCCSにsubmitする入力データのテストをする計算として使うつもりでいる。

今日ようやく科学研究費の報告書が製本されてきた。分子研から広島大に移った2000年の春にはまだ「平尾特定」の計画班に参加しており、上記のDS20eはこの予算で2001年大学評価学位授与機構時代に購入した。その後も、基盤研究Cを2002-2004と2005-2007に採用していただいた。今日届いた報告書はこの2005からの3年間の成果報告書である。これは、広島大学の相田美砂子教授の主宰する「ナ

ノ・バイオ・IT融合教育プログラム（文科省科学振興調整費振興分野人材養成）」の特任教授に採用された年（2004年）の秋に申請したもので、広島大でのこの4年間の私の研究を支えてくれた。2008年3月にはこのプログラムが終了になることになっていたが、その後も客員の肩書きがいただけそうであったので、広島大学を通じて2008年からの科学研究費を申請させていただいた。幸いこの4月から豊田理化学研究所のフェローとして研究を続けられることになった上に、申請していた科学研究費も採用されたので、一人で理論・計算化学研究を続けるには研究費に不便をしなくてすむことになった。いくつか課題を進めているが、単著の論文を1年1報書くことを目指したい。

豊田理研には、吉原名誉教授と北川名誉教授が先任でおられ、元気にご活躍されている。ここは、特に、理論・計算研究をするのに適している<sup>5)</sup>。私はこのところ主にMacをUNIX機械として使っているが、その性能の高さには驚かせる。豊田理研の予算と科研費で購入したQuadra duo MacProはかなり大規模の量子化学計算を実行できる。NWChemは、CPU=8と設定すると8CPU並列実行ができるという。残念ながら、まだ完全にはうまく

compileに成功していない。

5) この唯一の不満は、VPNで家からオフィスのMacを使えないことである。オフィスは豊田中央研究所の一室なので、ネットワークのsecurityが高いのである。独立棟がそのうち作られると聞いているが、そのときにはぜひVPNが使えるようにしていただくよう希望を出している。

#### 【7月某日】

最後は、名古屋駅から藤が丘までの地下鉄内で打ち込むことになってしまった。かくのごとく、ともかくも、卒業後9年目を迎えた今も、それぞれ異なるOSで動いている複数の計算機と戯れて、研究を文字通り楽しんでいく。「自己批判」とか「自己否定」という言葉がむしろそれが強制されるものであったことを見抜いていた私の青春時代の仲間たちは意図的にこれらの言葉を自分に対しては使わないできた。今はやりの「自己評価」も似た性格を持っていて、好きになれる言葉ではない。しかし、「公の」研究費を使って研究をしているのであるから、自分で判断を下して、ある時点で、これまでのような「研究生活」を打ち切るつもりではいる。



## 岡崎を離れて約二年



### 三澤 宣雄

(東京大学 IRT 研究機構 生産技術研究所 特任助教)

みさわ・のぶお / 2003年3月 東京農工大学大学院 生命工学研究科 修士課程修了  
 2003年4月 総合研究大学院大学 物理科学研究科 進学  
 2006年3月 総合研究大学院大学より博士(理学)の学位取得  
 2006年4月-10月 分子科学研究所 極端紫外光科学研究系 博士研究員  
 2006年11月-現在 東京大学 IRT 研究機構 生産技術研究所 特任助教

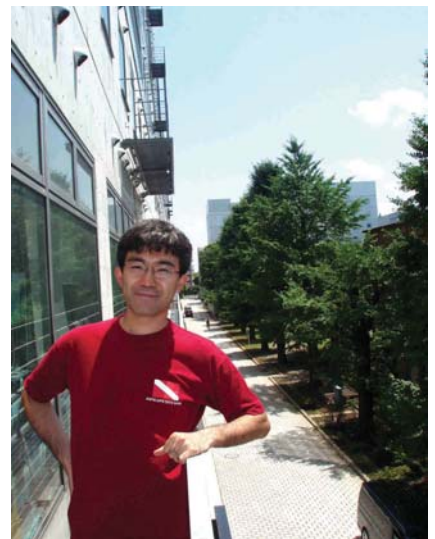
そろそろ研究室の時計の針が午前1時を指そうとしています。つい今の今まで次の会議で使う資料の準備に追われ、今日も実験室に入る時間はありませんでした。

略歴にもある通り、2006年の3月に総研大で博士課程を修了し、半年ほどそれまで所属していた研究室にいました。その秋に東京の駒場にある東京大学 生産技術研究所(生研)にかわりました。現在、自分はInformation Technology(いわゆるIT)とRobot Technology(RTというらしいです)が融合したIRTというプロジェクトの特任助教として雇用されています。IRTプロジェクトの詳細な内容は<http://www.irt.i.u-tokyo.ac.jp/>で確認できますので興味のある方は是非ご覧下さい。実験は駒場の生研でしていますが、IRT研究機構の拠点は本郷の工学部です。自分の正式な所属先は本郷にあります。そのため、最低一週間に一回は行われる全体の会議やグループの打合せのために駒場キャンパスから本郷キャンパスへ移動しなくてはなりません。駒場から本郷への移動は専ら地下鉄なのですが、電車内ではたいてい情眼を貪っています。たまに研究のことも考えていますが、“ひとりブレインストーミング”は5分ともたないので、最近ほとんど熟睡しています。この移動の時は寝ていても、いつも不思議

と降りるべき駅で目が覚めるのですが、先日は途中で目が覚めて間違えて降りてしまいました。岡崎の研究所が輩出した人材がこの体たらくとは本当に恥ずかしい限りですが、今日び、過労でドロップアウトするよりはマシだろうという心意気で生活しています。

このように自分で書いていても大丈夫かと思う日々なのですが、思った以上に大丈夫ではないようです。それでも現在、携わっている研究は(最近では雑務が多いのですが……)やはり面白く、その点で非常に救われています。もちろん、こちらにうつってきて、研究室やプロジェクトのメンバーが気持ちの良い人たちということもあります。そう考えると、岡崎で博士後期課程を過ごした三年間に会った人たちも先生をはじめ、親切な方々ばかりで、思い出すのは楽しい風景ばかりです。特に分子研の総研大同期はみんな根が真面目な連中ばかりでした。冬になると研究室の目を盗んでスキーに明け暮れる奴もいれば、先生も交えた輪講に顔も出さずにバイトに精を出している奴もいました。良い意味でそういう同期がいたおかげもあり、研究所の外でも楽しい岡崎生活を送ることができました。UVSOR入口付近のテニスコートの隣でしばしば行われるバーベキューにも性懲りもなく頻繁に参加させて頂きましたし、東岡崎駅界隈でもよく飲み

梅雨の中休みに生産技術研究所の研究室のベランダで。



ました。どれも楽しい思い出です。誘って頂いたり、お付き合いして頂いた方々には本当に感謝の念に耐えられません。まるで研究以外の時間が充実しているように書いていますが、ひとり静かにクリーンルームで行うシリコンウエハの洗浄や原子間力顕微鏡(AFM)につききりの時間もまた好ましい時間でした。修士号取得まで在籍していた東京農工大学とは違い、分子研は人口密度の低さから、設備や装置の使用でユーザー同士がかち合うという煩わしさを感じることは自分の場合、まずありませんでした。人が少ないことに対して学生としては少しつまらない? という農工大の同窓生(彼は研究会か何かで数日間、岡崎に滞在していました)が言っていたのを覚えています。自分はむしろその閑散とした雰囲気好



きでした。休日にも気兼ねなく実験でき、隣接の図書館も重宝していました。研究環境には本当に恵まれていたと実感しています。

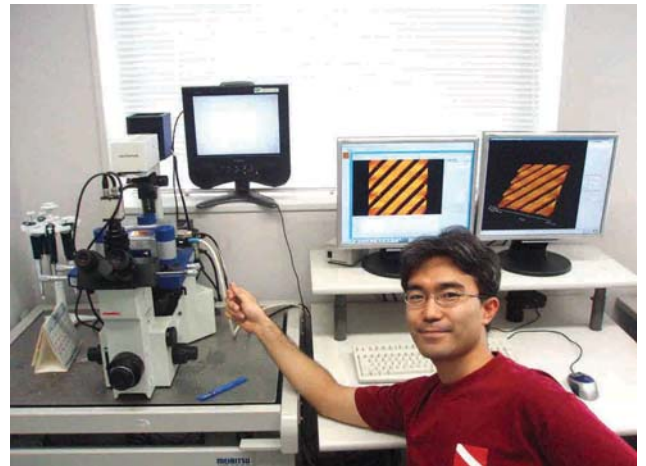
さて、岡崎を離れて二年が過ぎようとしていますが、生研にうつってきて何をなし得たかという、前述の通りの日々なので正直なところ、あまり成果はありません。既に小ネタで学会発表も何件か行いましたが、IRTプロジェクトで目指すところとしてはまだまだ道のりは長い印象です。現在、自分は生研の近くに住んでおり、終電を気にせずに実験ができます。頻繁に使用する装置はAFMなのですが、比較的、その操作に慣れているのは研究室では自分だけです。そのため、自分がAFMをほとんど独占しており、観察実験だけなら非常にやりやすいですが、クリーンルームは混雑しています。

生研は駒場リサーチキャンパスという場所にあり、先端科学技術研究センター（先端研）の隣に位置しています。生研と先端研の設立目的は今春のキャンパス公開の冊子によると、それぞれ「生産に関する技術的問題の科学的総合研究ならびに研究成果の実用化試験」と「先端科学技術やその関連分野の研究教育を行うこと」だそうです。当然

ですが、両研究機関の研究の垣根はないので、先端研の研究室とも交流でき、実際に研究の相談ができるのは心強い限りです。

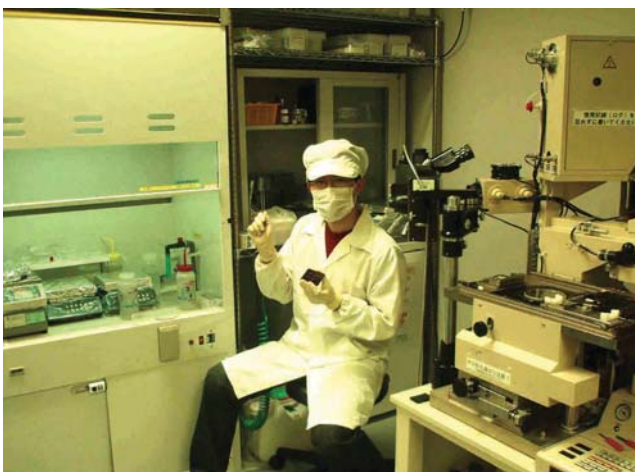
駒場キャンパス周辺は低層の建物が多いので生研の8階からの眺めは気持ちよく、非常に気に入っています。自転車を全速力でこげば、20分程度で新宿駅に着く距離ですので、ちょうど新宿のビル群を一望できるくらいの近さです。深夜、8階の実験室から居室へ戻る際に廊下から見える新宿副都心や六本木ヒルズ、東京タワーの夜景は実験疲れの頭には沁み入る光景です。また、反対側を臨めば、実験室の窓から十分に確認できる大きさで富士山が見えます。冬の朝など、空気が澄んでいる時は非常にはっきりと富士山が見え、夕方は特に日没直後の残光に映えるシルエットが格別です。

かなり滅裂な構成ですが、以上が断片的な自分の現状です。本稿を書くに



現在使っているAFMの前で。映っているのはガラス表面に作製した10 nm段差の縞模様です。

あたり、幾つかこれまでの「OBの今」を読ませて頂きました。みなさん真面目な話題を簡潔に述べられており、今更ながら自分が寄稿することに恐縮しています。そろそろ規定の字数も超えたようですし、明日もありますので、ここで筆をおきたいと思います。今、午前3時の少し前です（実際には後日、読み直したので二時間で書き上げたわけではありません）。



クリーンルーム内にあるイエロールームでガラスマスクを持って実験をしているふり。



## 分子研を去るにあたり

### 01 岡崎 進

名古屋大学大学院工学研究科 教授  
(前 計算科学研究センター 教授)

### 岡崎での6年半

おかざき・すすむ / 1977年京都大学工学部工業化学科卒業 1982年同大学院博士課程修了、工学博士 大阪工業技術試験所、東京工業大学助手、助教授を経て2001年10月より分子科学研究所教授、2008年4月より現職。



岡崎から名古屋に引越して、早や4ヶ月が経とうとしています。ようやくのことで研究室も落ち着きを取り戻し、なんとか研究も順調に進み始めようとしているところです。思えば、分子研でお世話になった6年半は、長いようでいて実はあっという間のできごとであったように感じられます。ここでは、多少個人的な思いもまじえながらその6年半を振り返って見たいと思います。

今は去ること30年前、学生のころから計算機センターには大変お世話になり、またその後もよく分子研にお伺いしていたこともあり、先生方にはお付き合いをいただいている方も多く、赴任に当たって全く心配はありませんでした。これは、現在の名大の応用化学には、当初よく存じ上げている先生がほとんどいらっしやらなかったことと思わせると全く対照的なことです。赴任したその週末には早速ソフトボール大会があり、新人ながらも出場の機会を与えていただき、「たとえ水溜りの中であっても」すべり込みの命令の出る理論の本気な試合を存分に楽しませていただきました。来てすぐのことはよく覚えているもので、三壘

を回って足がもつれてこけてしまったところに中村先生から「突っ込め」という厳しい叱責(厳格な指示?)が飛び、四つんばいで這いながら必死で本塁ベースにたどり着いたことがつい昨日のこのように思い出されます。また相手チームとのやり取りの中では、その後現在に至るまで大変お世話になった平田先生の戦闘的な性格も十二分に発揮され、勝利に向けて全く有効に作用していたように思います。ソフトボールは、その後腰を痛めるまで何年か大会に出させていただき、その間何回かは優勝の経験もさせていただきました。金木犀の香りとともに、全く楽しい岡崎の秋の日の一日を過ごさせて来ていただいたように思います。

ソフトボールに象徴されるように、分子研の誇るべき文化のひとつとして、グループ間の交流が非常に活発であることが挙げられます。これは遊びに限らず、研究面でもディスカッションが極めて盛んで、実にいい雰囲気でした。わからないことは分子研の誰かに聞けば分かるといった“便利さ”も、研究を進めていく上では意外と重要なファクターだと思います。このようなある種の横型社会は、分子研の適度な研究

所規模に依拠しているところが大きいと思いますが、ぜひともこれからも守っていただきたい文化だと思います。

もうひとつ、分子研において決して忘れることのできないこととして、計算科学の大きなプロジェクトの立ち上げとその運営があります。このプロジェクトは、現在でも「次世代スパコン」の「ナノサイエンスグランドチャレンジ研究」として分子研を拠点として展開中であり、小生も外部からではありませんが引き続き事務局を仰せつかっており、微力ながら分子研のお力になればと日々努力しているところであります。この件につきましても、赴任して2、3か月たった頃、茅先生が突然部屋にお越しになられて、まさに「よろしくお願ひします」という先生の一言で始まったように記憶しています。出発当初は「グリッド」のプロジェクトでしたが、それが「次世代スパコン」へと発展的に継承され、その時からの6年強は全力疾走に次ぐ全力疾走で、まさにあっという間に過ぎ去ってしまったように思います。あまりにも忙し過ぎ、悩みも多いプロジェクトではありますが、大変貴重な経験と、そして何より実に色々な方々とお近づきになること

ができ、大いにプラスであったと確信しています。さらに申し上げることをお許しいただけるとすれば、このような国家基幹技術とも称されるような大きなプロジェクトに参加し、拠点としてそれを継続的に推進し展開して行くことこそが計算分子科学分野の分野としての発展にも繋がって行くものであると信じています。

このような活動は、計算科学研究センターという場があって初めて可能となるものであることは言うまでもあり

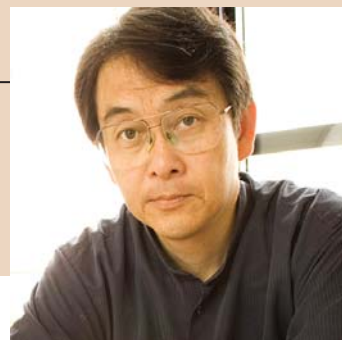
ません。一方で、センターとしては共同利用についても水準を下げることなくさらに発展、向上させて行かなければならないわけであり、さらにはネットワーク管理室の技術支援という重い役割も担って行かなければならないわけです。このような困難な局面の中でも何とかセンターとしてやって行けたのは、まぎれもない水谷班長をはじめとした優秀な技術職員の存在あつてのことだということは、いくら強調してもし過ぎることはないと思います。大

変な道ではありますが、技術職員の皆さん方が、これからもセンターの中でこのような重責を担って行っていただけるものと心から期待しています。

最後に、斎藤先生、江原先生を中心として、センターがこれからもさらに発展して行くことを確信していますが、途中で転出したことに対しての心からのお詫びとともに、分子研そして計算科学研究センターのさらなる展開を祈念して筆を置かせていただければと存じます。

## 02 小川琢治

大阪大学大学院理学研究科 教授  
(前 分子スケールナノサイエンスセンター 教授)



### 長い夏休みの終わり

おがわ・たくじ/最近の楽しみは、スポーツジムに通うこと。全身筋肉痛、関節痛になるほど動いているにもかかわらず、体重・脂肪率とも変化がありません。エネルギー保存の法則に疑念を感じています。

2001年4月から2003年1月までは分子集団研究系の客員として、2003年2月から2007年9月まではナノサイエンスセンターの常勤職員として、計6年5ヶ月にわたり分子研にお世話になりました。急に大阪大学に異動することになり、職務の引き継ぎその他で多くの先生方にご迷惑をおかけすることになり、申し訳なく思っております。

分子研の前は、典型的な地方大学におり教員数が少ないため教育・行政負担が非常に重く、平日5時まではほとんど自分の研究のことを考える時間がとれず、5時過ぎ、土日、連休、夏休み、冬休みに集中的に研究をする生活でした。分子研に来て、最初の頃は実験室の確保や移

転の準備などに追われていましたが、それも一段落してふとその日のスケジュールを見ると、平日にもかかわらず会議も授業も出張も何もない日が有りました。その時に感じた至福感は今でも忘れません。小学生の夏休み1日目の幸せ感と言えば分かって頂けるでしょうか？ 自由研究だけをしていれば良い、他に宿題も何もない夏休み！ 来てすぐにセンター長を仰せつかりましたが、それでも前地に比べればはるかに自分のために使える時間が長く、とても幸せな日々でした。再び大学に戻ることを決めて、また多くの学生達を相手に忙しい日々が始まるのだな、長い長い夏休みがついに終わったなと思いました。

再び大学に戻ってから、大学にも分子研にもそれぞれのメリット・デメリットがあることを強く感じます。大学は教育主体の組織です。教育は、本質的に保守的であるべきだと思います。研究は、常に動いている物ですから保守的な組織にはそぐわないこともできます。分子研では、動的な研究に合わせて組織を素早く再編できますが、大学では困難です。そのため大学では時には組織の論理が研究の自由な発想を縛りがちになる危険性があります。一方、分子研は教育機関ではないので多数の学生を受け入れることが困難です。そのため学生同士の切磋琢磨・社会性涵養が不足しがちで、それが学生にとって分子研の魅力を半減させる一因に

なっていると思います。

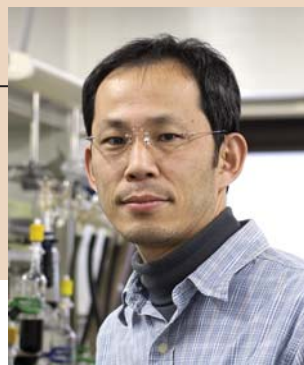
日本が持つ優れた研究資源を最大限に活用するために、大学と共同利用機関の再編を考えるべきだと思います。それによって、多くの科学者が「自由研究だけをやっていればよい夏休み」の楽しみを味わえる「科学者の天国」を創出することができると思います。ひとつのアイデ

アは、研究所のグループの大半を5年程度の時限連携ポストにして、大学の研究室ごと移ってきてもらうことです。客員ポストの実体化、流動的な客員ポストと例えば分かり易いかもしれません。常勤と同じ程度の実験室、研究費、スタッフの配分を受けてそこに学生も来てもらう。単位の互換契約を結ぶ。全国の優秀な大

学の大学院生達が集まれば、お互いに刺激しあい、新しい芽も出ることも期待できます。先入観にとらわれない研究所の未来像を運営会議などで建設的に議論することで、「科学者の天国」ができることを期待しています。

## 03 川口 博之

東京工業大学大学院理工学研究科化学専攻 教授  
(前 生命・錯体分子科学研究領域 准教授)



### ありがとうございました

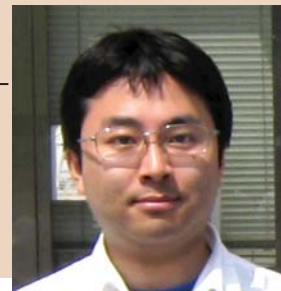
かわぐち・ひろゆき / 1990年大阪大学理学部卒業、1994年同大学大学院基礎工学研究科後期課程中退、理学博士  
名古屋大学理学部助手を経て2000年より分子科学研究所准教授、2008年4月より現職

分子研では約8年間お世話になりましたが、大変充実した研究生活を過ごせたと自分では思っています。前所長の茅幸二先生、現所長の中村宏樹先生、領域長の田中晃二先生をはじめ分子研の皆さんには、この場をお借りしてお礼申し上げます。現在、研究室のメンバーは分子研の時と変わらず、石田豊助教、渡邊孝仁博士と私の3人です。彼らの頑張りのおかげで、5月中旬にはなんとか実験を開始することが出来ました。しかし、5月の連休明けまで、機器の搬出や研究室の後片付けに、東京—

岡崎間を頻繁に往復していたため、分子研を去ったという実感が未だにしません。それが理由か、4月からは学部学生への講義も行い、学生が道路に溢れている様子を毎日眺めています（居室が学生食堂のすぐ近く）、まだ妙な違和感、場違いな所にいる様な感じがあります。頭を切り替えるにはもう少し、時間が必要です。この原稿を書くのに分子研では何をしたのかなと、振り返ってみました。カタチとして残っているものとして、昨年度に行った「Annual Review」の改訂があります。運よく、

編集委員長の順番で、広報委員のメンバーとして改訂に参加しました。広報室の中村理枝さんと1年間相談しながら進めました（実際には中村さんが全て行ってくれましたが）。特に、表紙のデザインとしていろいろ候補はあったのですが、「100年変更する必要のないもの」として現在のものを選びました。いかがでしょうか？ カタチとして残らないものは、ここには書きません。ですが、分子研で得たものを核に、東工大発の研究を発信しようと現在、研究グループのメンバーと奮闘中です。

## 04 山田 篤志

名古屋大学大学院 工学研究科化学・生物工学専攻 応用化学分野 助教  
(前 計算科学研究センター 助教)

## 分子研の思い出

やまだ・あつし / 1998年 名古屋大学理学部物理学科卒業、2003年 名古屋大学理学研究科物質理学専攻博士課程修了後、博士研究員として計算科学研究センター岡崎グループに加わり、分子研助教を経て、2008年4月より名古屋大学工学研究科 助教、現在に至る。

分子研では2003年9月から2008年3月までの4年半の間お世話になりました。思い返せば分子研ではいろいろなことを学んだなと思います。学位を取る時期に分子研でプロトン移動反応のシミュレーションの研究を行うためのポスドクを募集しているという話を聞き、この分野には以前から興味を持っていたのですぐにお問い合わせして採用して頂くことになりました。岡崎先生とのディスカッションのみならず、時には所内の他のグループの先生方にディスカッションをして頂いたりした中で、様々なことを学ぶことができたとともに方法論の開発や原理の立場に立つことなどを重んじる分子研の風土にも刺激を受けました。実家からの通勤だったため往復3時間半の電車生活は体力的にはきつかったのですが、毎日電車の中でひたすら研究のことを考えたり

勉強したりしたことは懐かしく有意義だったと思えます。また度々催される夜の飲み会の帰りに電車の中で寝過ごして漫画喫茶で宿泊することもしばしばありましたが、懐かしい思い出です。

分子研での最後の半年は助教として過ごさせて頂きましたが、センターワークショップ等のセンター業務やグループ内の運営、岡崎グループの名古屋大学への引っ越し等、慣れないことが多く何かと苦労しましたが、皆様に助けられながらなんとかこなすことができました。これらを通じていろいろと勉強させて頂くことができました。

岡崎グループが名古屋大学へ引っ越したことに伴い私も異動させて頂きはや数カ月立ちましたが、引越しのドタバタは収まり今は落ち着いて研究活動をしております。学生が増えたり、理学部や分子研とは異なる工学部の風土、

学生実験や演習の準備等、不慣れなことも多いですが、それらも楽しく感じています。

分子研在職中は多くの方々にお世話になりました。秘書の方々には主に助教になってからは事務のことをいろいろと教えて頂きました。技官の水谷さんや岩橋さんにも計算機関連やプログラムのことでアドバイスを頂き大変助かりました。岡崎グループの皆さん、特に同じ部屋で毎日研究のことから私的なことまでいろいろと相談にのって頂いた吉井さん（現在姫路独協大准教授）には大変お世話になりました。そして岡崎先生にはすべてにおいてお世話になりました。これからも分子研の皆様にお世話になることもあるかと思いますが、今後ともよろしくお願いたします。

## 05 根岸 雄一

東京理科大学理学部応用化学科 講師  
(前 物質分子科学研究領域 助教)

### 分子研での思い出



ねぎしゆういち / 1996年慶應義塾大学理工学部化学科卒、2000年同大学大学院理工学研究科博士課程中退、同大学化学科助手、分子科学研究所助手（助教）を経て、2008年4月より現職。

2000年7月から2008年3月まで、佃Gの助手（助教）として7年9ヶ月、分子研にお世話になりました。大変恥ずかしながら助手（助教）としての任期を大きく超えつつ長いこと在籍させていただきましたので、入所したときと出所したときとでは周りの先生方や研究室の顔ぶれも大きく変わっています。この7年9ヶ月の間、佃先生、茅所長、中村所長をはじめ、大変多くの先生方や研究仲間にお世話になりました。この場をお借りして心より感謝とお礼を申し上げます。

分子研での思い出はといいますと、分子研には新進気鋭の研究者の方が沢山いらっしゃいますし、そのような方々と出会い、話し、飲む機会が沢山ありましたので、刺激的なことが多く、思い出も数多いのですが、その中でも研究室の立ち上げに参加できたことが私の中ではもっとも印象深く、また良い経験となっています。

着任前の慶應時代、同期の十代氏（現

西G助教）が隣で研究に装置開発から取り組んでいるのをみていて、いつか自分も研究課題については装置制作も含め全て最初から取りくんでみたいと思っていました。そうしたさなかに佃Gの研究室立ち上げ時の助手として採用していただき、課題・装置のみならず研究室自体も0から始めることになり、このことに大きな興奮を覚え、鼻息荒く岡崎に乗り込んだことを今でも良く覚えています。

現実的には当時の私は学位も持っていない半人前で、研究課題である金属クラスターの化学合成についても全くの未経験の状態でした。着任当初は実験もほとんどうまくゆかず、目的達成に向けた方法論も何度も変え、装置も幾度となく作りかえることになりました。ラボとしてはこの時期、何年も出口の見えない状態にも陥ってしまい、その結果、佃先生には（分子研レターズ57号に執筆されていたように）記憶を失うほどの御苦勞をおかけするこ

ともなり、このことについては大変申し訳なく感じています。ですが、ラボ立ち上げ、分子研ならではの課題への取り組み、素晴らしい研究環境など、私にとっては全てのこと新鮮で、興奮を覚えたというのが当時の思い出です。また、この時期のトライアンドエラーの中、多くの実験技術や考え方を学ぶことができ、そもそも研究とはどういったものなのかということ自体も学ばせていただき、この時期の経験が私の研究人生における大きな糧ともなっています。そのような機会を与えてくださった分子研と佃先生には大変感謝しております。

この4月から私は今度は東京理科大学にて自分自身の研究室を立ち上げています。分子研時代に得た良い経験を活かし、すこしでも分子科学に貢献できる研究室をつくってゆきたいと思っています。

## 06 竹内 雅宜

東京大学大学院理学系研究科化学専攻 特任助教  
(前 生命錯体分子科学研究領域 助教)



## 分子研での日々

たけうち・まさき / 1994年3月 東京大学理学部生物学科卒業

1996年3月 東京大学大学院理学系研究科生物科学専攻修士課程修了、2000年3月 東京大学大学院理学系研究科生物科学専攻博士課程修了、  
2000年4月 理化学研究所基礎科学特別研究員、2001年3月 理化学研究所植物科学研究センター形態構築研究チーム研究員、  
2003年1月 理化学研究所中央研究所中野生体膜研究室協力研究員、2005年12月 分子科学研究所分子構造研究系分子動力学研究部門助手、  
2007年4月 分子科学研究所生命錯体分子科学研究領域助教、2008年4月 東京大学大学院理学系研究科化学専攻特任助教

私は、2005年12月から2008年3月までの2年4ヶ月の間、分子研の皆様にはたいへんお世話になりました。3月末の研究室と自宅の引っ越し直後は、身の回りのあらゆる環境が激変し、適応するのがやっとという状態でありましたが、分子研を去って数ヶ月がたち、最近、ようやく東京での生活にも慣れて来た感じがいたします。

毎朝の通勤ラッシュに耐えながら大学にやって来て、デスクで一息つく時などに分子研で研究していた頃を懐かしく思い出します。岡崎では、私は宿舎に住まわせて頂きましたので通勤ラッシュとは無縁な快適な生活を送っておりました。朝、研究所にやって来てから、晩に帰宅するまでの時間の大部分を研究にあてることができたのはたいへん幸せでした。また、研究所は、研究環境・研究設備の面でも非常にすばらしく、広々とした実験室で落ち着いた気分で日々実験を行うことができ

ました。また、分子科学に関するセミナーやシンポジウムが研究所内やコンファレンスセンターで頻繁に開かれており、分子研のアクティビティの高さを感じました。

私の在職期間は非常に短いものでしたが、研究教育活動において、国際シンポジウム、エクストリームフォトニクス研究会、夏の学校、冬の学校、オープンハウスなどと数多くの経験を積む機会に恵まれました。特に、分子研と韓国化学会物理化学部会、ならびに、分子研と中国科学院化学研究所が共催する二つの国際シンポジウムにおいて英語講演の機会を頂いたことはたいへん貴重な経験となりました。発表機会を与えて下さった両シンポジウムのオーガナイザー、岡本先生、宇理須先生には改めてお礼申し上げます。2007年7月に韓国済州島で開催された第12回日韓分子科学シンポジウム「光分子科学の最前線」では、小分子やクラス

ター、大きな新機能性分子やナノ物質系、生体分子といった多様な研究対象の解析に用いられている最先端の光分子科学的手法を勉強させて頂き、韓国化学会物理化学部会の先生方とも交流を深めることができました。2007年9月に北京で開催された第一回日中ナノ化学生物学シンポジウムでは、分子科学から生物学、医学にまたがる非常に幅広い学際領域で形成されつつある新研究分野の最先端の研究について勉強させて頂きました。両シンポジウムの質と密度の高い内容、活気に満ちた討論を通じて、日本、韓国、中国における分子科学研究の研究水準の高さとアジア諸国の中でも世界レベルの研究を行いつつ、中心的な役割を担って活躍している分子研の姿を実感し、大いに刺激を受けました。今後、分子研で得た研究や教育の経験を活かしつつ、私自身も新しい環境で頑張っていきたいと思っています。

## 07 田中 啓文 大阪大学大学院理学研究科化学専攻 助教 (前 分子スケールナノサイエンスセンター 助教)

### 刺激のあった分子研での研究生活 ～もがいて悩んだ異分野交流～



たなか・ひろふみ / 1998年日本学術振興会特別研究員 (DC2) 1999年学位取得、理化学研究所基礎科学特別研究員 2002年ペンシルバニア州立大学化学科博士研究員 2003年岡崎国立共同研究機構 (現自然機構) 分子研助手 2008年より現職。趣味はバドミントンと国際交流。2004年に趣味が興じて(?) 国際結婚。長男は2歳。

平成15年5月の連休すぎの頃でしたでしょうか、米国のペンシルバニア州立大 (ペンステート) でポスドク研究員をしていた私に朗報が舞い降りました。「あなたを助手に採用することにしました」。小川教授からの一報でした。この知らせに私はすごく驚きました。それまで先生とは全く面識もなく、専門外の有機専門の研究室に私が採用されるとは全く予想だにしていなかったからです。私はナノ材料工学 (主に金属工学・表面科学) 分野の出身で、それまで主に無機物の電気伝導特性や結晶構造解析をメインに仕事を進めてきました。ペンステートでは初めて「化学」の研究室にお世話になったものの、やっている仕事は自己組織化有機分子膜を用いた半導体プロセスのナノ化であり、それもやはり有機分子の物性には程遠いものでした。正直 (今だから言えるが)、小川教授の論文を一報も読んだことはありませんでした……。それにも拘らず何故、小川教授の研究室の助教公募に応募したかという、某先生が偶然ペンステートに訪れた際に私の仕事の内容を説明したところ、「非

常に優秀な先生があなたの持っているスキルを活かせる仕事をしていて、助手の公募を今やっているから応募しないか？」と勧められたからです。当時、小川先生は有機合成の分野から足を踏み出し、有機分子単分子の伝導に興味をお持ちでしたので、私の無機ナノワイヤーの電気伝導測定手法が活かされると判断されたのでしょう。半信半疑ながらも当時、私自身も異分野交流の大切さは強く感じていたので、ようしやってみよう！ と決意を固めたのでした。

何はともあれ、採用された私は意欲に燃えて分子研にやってきました。しかし、その意欲はあつという間に打ち砕かれてしまいました。まず、勉強会をしても学生さんの話している専門用語がほとんど分かりませんでした。研究対象の有機分子名を文字で書かれても??? とクビを傾げるばかりでしたし、実験装置を見ても何に使うものかも察しようがありませんでした。私が何かを説明しても皆さんに「キョトン」とされてしまいました。異分野の研究に足を踏み入れるとはこんなに大変なものかと思い知らされました。私

の着任前には学生さんは有機合成をメインに仕事をしていただけですから、当然といえば当然なのですが、私は「とんでもないところに来てしまった気がする……」と、半分冗談、半分後悔交じりに思うことがありました。しかし、慣れとは恐ろしいもので、色々やっているうちに何となくではありますが、この有機伝導の分野での問題点がおぼろげながら把握できるようになり、論文も何報か出し、小さいながら賞を頂くまでになりました。また、分子研内の多くの方が共同研究を持ちかけてくださるようになりました。異分野なればこそ興味を持っていただけたのだと思います。こんな私の無知振りに多くの方にご迷惑をおかけしたと思いますが、今でも何とか有機の分野で仕事を続けています。今から振り返れば、もがいて悩みながらトライアンドエラーを繰り返していた頃が一番刺激のあった時期だったと思います。今後とも分子研での経験が役に立つよう切磋琢磨していく所存です。4年半の間本当にお世話になりました。



## 08 長澤 賢幸

信越化学工業株式会社 新機能材料技術研究所  
(前 分子スケールナノサイエンスセンター 助教)



## 分子研を去るにあたって

ながさわ・たかゆき / 1996年静岡大学理学部化学科卒、2001年名古屋大学大学院理学研究科博士課程終了。博士（理学）。岡崎統合バイオサイエンスセンター博士研究員を経て、2002年11月～2007年12月まで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教。2008年1月より信越化学工業株式会社新機能材料技術研究所所属。

私は分子研には2002年11月から2007年12月までのほぼ5年間お世話になりましたが、実はこの着任時期以前より分子研には数々のご縁から何度も足を運ばせていただいております。分子研での思い出となればさらに長い期間に渡るものとなります。具体的に申し上げれば、出身研究室の関係から分子研錯体実験施設（当時）との様々な形での研究交流会、学生時代に錯体合成の手ほどきをしていただいた恩師が分子研助教授としてご活躍されていたこと、学生時代に同級生として同じ分野を学んだ友人達とめぐりめぐっての再会、さらには着任以前に統合バイオサイエンスセンター（生理研）でポスドクとして所属していたことなど、着任当初は「新任地」というよりも「勝手知っ

たる分子研」だったようにも思います。しかし、実際に中に入ってから研究生活となると、それまで所属した研究室とは大きなギャップがあり、大きな研究室でガヤガヤと研究を進めてきた私にとっては、廊下でめったに人とすれかわらない分子研での少人数の研究室メンバーで、原料合成から分析まで、いかに効率的に実験を行い、新しい研究を進めていくかという事はとても新鮮であり、また勉強になる事でもありました。その一方で、グループの各メンバーや他研究グループとの距離が近く、研究室内では目標に向けて焦点を絞り、密度の濃い議論を繰り返しつつ集中して取り組み、他グループ間では様々な研究を進める方々との合同セミナーや研究会、交流会などから、新しい発想

や角度の異なる物事の見方などを培える素晴らしい環境であったとも思います。また、所属グループリーダーの永田準教授は気さくで話し好きだったこともあり、研究はもちろん、公私に渡り深いご指導をいただき、特に深くご指導いただいた光化学は現職のフォトレジスト基礎開発の職務において非常に有用であり、現在の研究生活の礎の厚みを増してくださったものと感じております。分野の垣根を越えて様々なテーマが融合し、新しい流れを生み出すという分子研の恵まれた環境において研究生活を送らせていただいた事を宝とし、今後も研究を続けていきたいと思っております。

## 09 笹川 拓明

日本電子株式会社 分析機器本部 応用研究グループ  
(前 分子スケールナノサイエンスセンター 助教)

## 分子研での3年間

ささかわ・ひろあき / 1972年東京生まれ。1996年神戸大学理学部卒業、2001年神戸大学自然科学研究科博士後期課程修了、その後科学技術振興事業団グループメンバー、名古屋市立大学薬学部研究員を経て2005年4月から分子研に3年間勤め、現在日本電子株式会社にて勤務。

2005年、分子研へ赴任した私を待っていたのは前年度に分子研に導入された920MHz NMR分光器でした。この装置は分子研でも目玉の装置の一つであり期待もされているということで、赴任した頃は装置を目にするたびに責任の重さをひしひしと感じたものです。幸い(?) NMR分光器には大きなトラブルも無く、今では分子研の共同利用装置の一つとして立派に稼働しています。これも魚住先生、加藤先生をはじめとする分子研のスタッフの成果であり、多少なりとも自分がそこに関わっていたことはその後の人生において非常に有意義なことであったと思えるの

ではないかと思えます。

また、初めてのアカデミックポストということで学生気分が多少残っている研究員時代とは異なり、色々不慣れな私をグループのボスである加藤先生にはたびたび叱咤激励をいただき、大変感謝いたしております。さらに私の不手際などでNMRオペレーターである中野さんや秘書の佐々木さんは大変ご迷惑をおかけしたと思いますし、私の無理なお願いを聞き届けていただいたことも一度や二度ではありませんでした。この場をお借りしてお礼を申し上げます。

NMRの運営に多少関わることがで

きたおかげで、年に1、2度行われたNMRに関する研究会やフォーラムでは運営に携わるだけでなく世界各国の先生方の講演を聞くことができたり、交流できたことは非常に良い経験、思い出になりました。在所期間は3年ということで長く居たわけではないため、果たしてどれだけのことができたかを考えると色々不安はありますが、非常に充実していた3年間であったことは間違いなかったと思います。

最後にもう一度、分子研では多くの人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。

## 10 加藤 清則

名古屋大学グローバルCOEプログラム 分子性機能物質科学の  
国際教育研究拠点形成 プロジェクトマネジャー  
(前 技術課 技術課長)



## 分子研を離れるにあたって

かとう・きよのり / 1983年10月、東京大学低温センターより分子研技術課に転勤。極低温センター（当時）に配属される。技術班長を経て、2004年、大学共同利用機関法人化と同時に技術課長に就任。2008年3月定年退職。同年4月より、名古屋大学グローバルCOEプログラム 分子性機能物質科学の国際教育研究拠点形成 プロジェクトマネジャー（理学部A-273）。  
e-mail: kato.kiyonori@chem.nagoya-u.ac.jp http://gcoe.chem.nagoya-u.ac.jp/index\_j.php

今年の4月から岡崎市の自宅から、名大に通い始めた。はじめの1ヶ月間は、電車で通勤したが、5月の連休明けからは、マイカー通勤に変えた。今は東名高速をトラック列に混じってのんびりと車を運転している。東名高速の岡崎—名古屋間はほとんど緑に囲まれた丘を縫っている。岡崎インターから入るとすぐに、豊田15分：名古屋20分という掲示板が目に入る。豊田インターと名古屋インターの間は、5分しか掛からないのか、とその近さを感じ入りながら、走っていく。矢作川を越えてすぐに高速道が交差している。伊勢湾岸道路と交差する豊田ジャンクションだ。ここで、相当数のトラックと乗用車が伊勢湾岸方面へ流れていく。東名高速を走行する車の数は大きく減少した。電光表示には、草津インターまで、東名高速経由120分、伊勢湾岸道路経由100分と表示されている。所要時間がだいぶ違うな、東名高速の交通量が少なくなる訳だ。不思議と渋滞はなく、快適に走っていく。

余談だが、渋滞がおこる原因についての研究成果抄録が名大のホームページに掲載されていた。それによると、交通渋滞の主要な原因は、交通のボト

ルネックにあるのではなく、単に車の数が道路の許容を越えているから渋滞が発生するのだという。すると、豊田ジャンクションから名古屋インターまでの間は通勤時の経験から判断して、交通量が大きく減っているから渋滞は起きないことになり快適な通勤ができそうな気がする。

1983年に分子研の技術課に転勤になった。業務先は、極低温センター（所属は転々と変わり今は機器センターになっている）に配置された。転勤したばかりの私を分子研のカルチャーに引き込んでくれたのは、ジョギングクラブだった。当時の20代から40代までの助手、技官、研究員、施設利用者までが集まり、そして走る人も走らない人も集まるジョギングクラブができた。一種のコミュニティだったように思う。そして週に3~4回南公園まで集団ジョギングを始めた。メンバーは休日も岡崎市内外を勝手に走り回っていて、東公園や矢作川の土手は格好のコースだった。10人くらいの集団が分子研から桑谷山荘まで走り登りお風呂に入り食事をしたこともあった。これは岡崎市民駅伝出場とともに懐かしい思い出となった。

平成16年4月、大学共同利用機関法人発足と時を同じくして技術課長になった。国の機関と法人の安全衛生のへだたりはかなりのもので、それから毎週、実験室の巡視を行うことになる。安全衛生の保持は組織的に行う分野である。所長、安全衛生管理室長、安全衛生委員、安全衛生管理室員のそれぞれの役割を持った人の協力で強固な安全体制が構築された。法人になってから大きな事故が起きなかったのは、その組織と個人の役割分担がうまく機能していたからだろうと思う。

最後に：私は、分子研の持つカルチャーに育てられてきました。その意識はこれからも消えることはないと思います。「厳しさに裏付けられた自由」をかなり堪能してきました。内部昇格がない世界、その結果いろいろな学歴・経歴の持ち主が集まっている世界を陰から見えてきました。日本にはまだまだ少ないシステムと思います。このシステムが日本で発展していくことを信じて、分子研で身に付けた技術と知識と人のつながりを生かして働いていきます。分子研の方々と先輩方には本当にお世話になりました。

## 11 大石 修

日本電子データム株式会社  
国際技術センター EO/MI技術サポート部係長  
(前 技術課 技術職員)



## 分子研での思い出

おおいし・おさむ / 1989年九州大学理学部化学科卒業 1994年同大学理学研究科化学専攻博士課程終了。  
1994年より2007年12月まで分子科学研究所技官、技術職員を経て2008年1月より現職。

1994年の4月、旧宮島研に文部技官として採用されて以来2007年12月末までの14年近くお世話になりました。私の分子研時代は技官として過ごしていたので、研究における技術的側面の開発に取り組んでいた日々が今では懐かしく感じます。

研究者を目指した時よりの目標達成のために模索し続けていると、よく壁にぶつかりました。私の場合、このぶつかった壁は回避することなく、乗り越えるか壊しながら突き進んできたように思います。そして、避けて通れない道に立ちだかこの壁を壊すために非常に多くの事に手を出すことになりました。計算機科学に始まり、有機合成で自分が欲しいものを全部作れるようになり、自分の求める結果を出せる測定機器が無いので、装置製作も行いました。なお、専門を聞かれた時は、現在従事している業務に関わらず、14年近く最も長期間携わった核磁気共鳴(NMR)の装置開発と答える事になっています。

機器測定の研究分野では、通常、測定原理や基本構造はるか昔に解明されています。私の行った液晶の自己拡散係数測定においても理論面は1960年代に既に完了したものであり、拡散係数測定におけるNMRの手法は、論理面の明快さと結果の精度において現

在の最終想定手法と言えるものでした。ゆえに液晶の分野でも誰もが考え、多くの人が試みましたが、その結果としては、ほぼ全滅と言っていいほど失敗してきました。単純明快であるがゆえに、装置に求められる性能が桁違いに高く、単純であるが故にその性能を他の物で代用することもできないため、私自身も現在の最高性能の部品を用いた上での技術と技能の力技でしか解決できませんでした。性能だけを求めた装置では、安全回路や操作の補助機能は性能低下を持ち込む邪魔なものではないので、究極の性能を出そうとすると、最悪の場合は作った本人しか動かせない装置になり、商用の製品としては成立しません。液晶の拡散係数測定の以前の研究では、市販装置を使ったり、製作依頼をした時点で失敗することが確定していたのだと思われます。

測定装置を製作する場合、分業は性能を低下させ作業時間を増加させる結果となって、一人で全部行った方が結果的に良い装置を早く作れる場合があります。測定機器の性能は装置を構成する要素の中で最も精度が悪い部品の性能がボトルネックとなって決まってしまうため、私の行ったNMR装置の性能を上げるために行う作業も、電気、機械、材質の性質、測定試料の性質すべてにおいて、最も精度の悪い部

分から順次性能を改善することの繰り返しの作業でした。そもそも、液晶や固体を対象とした、このパルス磁場勾配の研究自体が、日本では事実上分子研でのみの研究で、参考となる論文数も数報しかない、競合相手もほとんどいないテーマでした。最終的に結果を出せるようになるまでには多くの苦勞はあったものの、誰の意見も参考にできない中で、自分の信じるままに好き勝手にやらせてもらった事は非常にありがたかったと思っています。

結局ほとんど一人で、市販品の要求性能を満たせない部品を排除すると、汎用計測機等以外は何も残らず、NMR装置の主要部分をほぼ全て自作する事になりました。自作の場合、材料費のみの僅かな費用で研究を行える半面、成果がでるまで非常に時間がかかり、不完全なりにても、このパルス磁場勾配NMRの装置で液晶や固体の拡散係数が測定できるようになるまでには3年以上の時間を要しました。未だに世界中でこの性能を出している測定例が無いので、自分が行った結果に対してそれなりの自負を持っていますが、数年かけて論文数報にしかならない業績の装置開発系の研究スタイルは、あまり他人に推奨できるものでもありません。

それでも、一つの装置全部を一人で作れるようになるまで打ち込める自由

もありましたし、その中では信念とも言えるような思想も生まれました。私の場合、たどり着いた真理はいくつかありますが、主要な物は『単純であるほど美しく、実行するのは困難である。』、『装置の製作も、測定も全て一人で行うのが最も効率的』、『結果が全て』でした。最高の性能を出せるように技術の調和を行うには、結局全ての技術と目的を理解している人が必要になりますが、技術的に全ての分野で十分な能力を持つ人でも目的性能を把握するためには自分で作っている部品の性能を確かめる必要があります。結局は一人で作りながら性能を検証したほうがその都度フィードバックがかかって早く仕上がります。ある程度技術方針が決まっている作業であれば、分業や共同作用も可能なのですが、誰も到達したことが無い領域で装置製作を行う場合は、多人数だと意思の伝達を行う時間の分だけ余計に手間がかかる事を気づかされました。

分子研の最後の5年間程はナノテクノロジー総合支援プロジェクトの透過電子顕微鏡 (TEM) 業務を行っていましたが、NMRもTEMも測定原理を別にすれば装置は機械と電気回路でできており、得られたデータをソフトウェア処理する点で、何ら変わるところはありません。そのような訳で私のTEMの測定法は極めてNMR的で、NMRの装置製作の手法が装置の管理運営、測定、試料作りにまで及んでいます。最終的な結果を出すための方法は、携わっている人の分野や技量などで色々な方法を選ぶことができますが、どんな方法を用いて良い代わりに定められた期間内に必ず結果を出さないと、失敗に終わってしまいます。ナノ支援プロジェクトの業績は当初、外部から持ちこまれた依頼を処理することだった

ため、外から依頼に来てもらう必要がありました。最初は宣伝が必要ですが、この業務では最終的には、他所で断られた依頼、他所で測定できなかった依頼、今まで誰も行ったことがない依頼を、試料製作から測定まで全て含めて引き受ける業務体制になりました。外部依頼者が、わざわざ測りに来ようとする場合、その理由は、装置が無かったり他所に頼むより安価であるといった経済的なものか、試料を作れなかったり既に測定字体が失敗したと言ったような技術的なものしかありません。TEMの通常観察業務では市販装置を使用しているために、他の大学の装置と比べてそれほど大きなアドバンテージを持たせられなかったため、最終的には試料の製作と装置の安定化で特徴を持たせることになりました。実際は、誘電体や磁性体、分子性結晶の有機物など、他所で行おうとして失敗したものや現在まだ成功していない物が持ち込まれた時に、これらをターゲットとして、一つずつ測定できるようにしていき特長を作っていく作業でした。失敗の原因を排除するため原理原則に帰って、問題点を除去していくと試料の製法などは驚くほど単純になり、高エネルギーの加工条件を排除した段階で、結局は力学的切削に辿り着きます。そして、人の技能は持てる知識と経験的感覚を総動員すれば、原始的な切り貼り作業も何とかなるもので、100nm程度の加工精度の装置を用いても、条件を突き詰め変動を押さえ込めば数nmの制度まで行き着き、折角なので極限性能を確認するまで試行錯誤していると1nm以下までの粒径まで加工できるようになりました。分子研にいたる間に、硬い刃でそれよりも柔らかい物を加工する技法、即ち磨製石器の技術でnmまでの加工ができること

を示しましたが、この技法は刃と同じ硬さの物は加工できません。同じ硬さの物を物理的に加工できれば、ダイヤモンドナイフなどでも使い捨てにできるぐらい安価に作れますが、そのためには打製石器の技法まで遡る必要があります。時間的に打製石器の技法まで確立できなかったのはとても残念です。

今、私はTEMの業務の流れから分子研を出て、現在の職場ではTEMの技術統括部門に属しています。国内外のエンジニアに対するTEMの教育や技術指導に携わったり、製品の技術導入やマニュアル作り、その他現場で解決できなかった問題の原因究明から解決方の指示まで、技術的なものであれば全部回って来る部署です。このような立場で研究や学問を考えた場合、私自身というよりは、私が教育を行い技術や知識を教えたエンジニアが国内であれ、国外であれ各研究機関や大学に赴き、装置の納入、修理から測定法の伝授まで行うこととなります。そのため、少なくとも装置の調整を行う彼ら全てを、研究機関で日常的に測定されているような試料ぐらいいは問題なく測れるレベルまで導けたらと思っています。

また、専門であるNMRの方は市場規模の関係で仕事とは関わりなくなりましたが、装置的には全部一人で作れるので、特定目的では世界最高性能になるように設計して、休日にちまちま家で作っていたりします。私の師も言っておられましたが、やはり『研究とは貴族の道楽』であるのかもしれませんが、少なくとも専門分野は、今後は何者にも縛られずに、自分の信念で追い求めて行ければと思っています。

最後に、今までお世話になった先生、同僚であった技術職員の皆様に感謝しつつ、この場を借りてお礼申し上げます。

## 12 石村 和也

株式会社豊田中央研究所計算物理研究室 客員研究員  
(前 理論・計算分子科学研究領域 技術職員)



### 分子研を振り返って

いしむら・かずや／2000年京都大学工学部工業化学科卒、2002年京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻修士課程修了、分子科学研究所技官、2007年総合研究大学院大学構造分子科学専攻、博士(理学)、2008年4月より株式会社豊田中央研究所計算物理研究室客員研究員。

分子研には2002年4月から6年間、技術職員としてお世話になりました。2007年に総研大で学位を取得することができ、永瀬茂先生をはじめ、理論系、技術課の皆様には大変お世話になりました。振り返ってみると、ソフトボール大会や、ボウリング大会、機構のバドミントンサークルの活動など研究以外での思い出も多く、充実した6年間でした。ただ、ソフトボール大会で1勝もできなかったのは心残りです。

分子研では、自由な環境で研究、勉強に取り組むことができました。特に、計算機関連の勉強は、2000年以降研究道具である計算機が大きく変わりつつあり並列計算が重要になる中で、論文に直結するものではありませんが、研究を進めるための基礎になりました。ソフトウェア、ハードウェア両面について、試行錯誤を繰り返しながら経験を積むことができ、様々な技術が身に付いたと思います。また、分子研に訪

れた外国人研究者との議論や共同研究、そして長期滞在の方々との交流は貴重な財産になりました。そして、計算科学研究センターをはじめ技術課の皆様には、研究だけでなく様々な面でサポートしていただき、心から感謝しています。

車で1時間のところにいるので、これからも分子研の皆様にはお世話になると思います。今後ともよろしく願います。



## 外国人研究職員の紹介

### Prof. PENG, Shie-Ming from Taiwan

Shie-Ming Peng教授は1949年に台湾で生まれ、1970年に台湾大学を卒業し、米国に渡り1975年にシカゴ大学で博士号を修得され、ノースウェスタン大学で1年間博士研究員を務めた後、1976年に台湾大学助教授として台湾に戻られ、1980年に教授に昇任されました。その後、Academia Sinica Director (1985-1987)、台湾大学副学長 (1999-2002)、中国 (台湾) 化学会会長 (2001-2002年) 等を歴任されておられます。現在、Peng教授はアジアで最も著名な錯体化学研究者の一人であり、毎年、数度日本を訪問されており、日本の各大学での記念講演会・国際会議で招待講演を行われており数多くの大学院生も同教授の講演を聴かれたことがあると思います。

私とPeng先生が知り合う切っ掛けとなったのは、分子科学研究所・錯体化学実験の初代施設長・故 斎藤一夫先生が東北大学教授時代に台湾大学に客員教授として赴任されたことに始まります。斎藤先生から台湾大学のPeng Shie-Mingの人柄、研究を良く聞かされており、Shie-Ming Pengは間違いなく将来の台湾の化学を背負う人材であると、度々、斎藤先生は断言されておられました。1991年にPeng教授が台湾大学のサバティカル休暇を持つことが可能になった際に、斎藤教授が金属錯体の電子状態に依存した反応性に関する研究に興味があるなら、分子科学研究所・錯体化学実験施設で共同研究を行うことを推薦されたようです。しかしながら、当時の日本では台湾の大学の先生を客員教官として招聘する

ことが許されておらないため (日本の国立大学の先生は台湾の大学の客員教授にはなれました)、Peng教授は台湾大学で旅費、滞在費を捻出され来日されました。

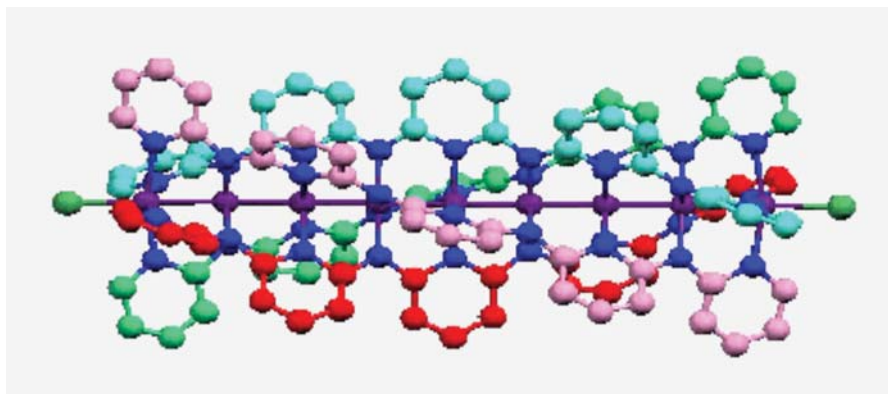
このような状況下でもPeng教授は、我々との共同研究を喜んでおられました。当時、我々は二酸化炭素還元反応の反応中間体の単離と、そのX線結晶解析を目指しておりましたが、結晶の品質もあり、結晶構造が解けずに困っておりました。Peng教授は、我々の化学に非常に興味を抱いてくれ、同氏の援助でRu- $\eta^1$ -CO<sub>2</sub>錯体の分子構造を決定することが出来ました。我々が、それまでに提案していたとはいえ、水、空気、熱的に安定で、かつOCO角120°のsp<sup>2</sup>炭素でRuに結合したRu- $\eta^1$ -CO<sub>2</sub>錯体の分子構造が決定出来たときには、二人で非常に喜んだことを昨日のこのように思い出されます。この結果、特定の金属(M)上に炭素で結合したM-CO<sub>2</sub>錯体はM-C(O)OHを経由してM-CO錯体と水中で平衡混合系で存在することが証明され、その共

同研究が二酸化炭素の化学に大きな貢献をしたと自負しております。

Peng先生の名前が世界的に著名になった研究は、一連のオリゴ ( $\alpha$ -ピリジル) アミド配位子の合成と、それらの配位子を用いた直線的な金属—金属結合を有するオリゴマー—金属錯体の合成「金属ストリング」であり、確か5, 7, 9, 11, 13核錯体までの結晶解析に成功されておられます。これらの金属錯体の金属—金属結合の詳細を各種の測定で明らかにされておられ、いくつかの1次元金属ワイヤーの導電性が量子化されているのを知り驚いたことが御座います。

今回、公式にPeng Shie-Ming教授を8月31日から12月31日まで分子科学研究所・外国人客員教授として招待し、その期間に生命・錯体分子科学領域で同氏と金属錯体の合成と物性に関して数多くの議論が出来ることを楽しみにしております。

(田中晃二 記)



Peng教授等が合成した9核Ni錯体

## From 1999 to 2008: Collaboration is the Best, Namely in IMS

Lubomir Iordanov PAVLOV

I came in IMS-Okazaki for the first time in the Winter of 1999, as a visiting scientist. After my returning then back to Bulgaria, I was approved by IMS to get a visiting professor position for another seven months, which started from September 1st 1999, including the Millennium. I would like to share my impressions from the IMS researchers and from the level of science in Okazaki, that this is quite active place with National Institutes which follows the most contemporary topics of the natural science. Especially, the IMS has also Laser Research Center, computational center and all facilities in order to support the high quality research on the most perspective and applied projects in the modern molecular science.

When following the progress of Photo-Molecular Science Department in IMS, I obtained a JSPS fellow position and I came again in June 2007 when I joined the group of Professor Yasuhiro Ohshima. Before, in 1990 I was awarded of Doctor of Science (DSc) degree in Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria. My DSc thesis was devoted to Nonlinear Laser Spectroscopy of new type of resonances in atoms, molecules and solids. Such experience allows me to be engaged with the research activity in Photo-Molecular Science group of Prof. Ohshima, which is mainly connected with high-resolution coherent spec-



troscopy of molecules. For Long-term of JSPS fellowship program starting from June 2007 up to April 2008, we performed several academic activities.

My research was mutual with Prof. Ohshima as well as with all members of his group, which includes theoretical and experimental work together. The high level of the science in this group allows solving the problems. The first activity corresponds to experiments on dispersion compensating of injection seeded optical parametric oscillator. When using a pair of walk-off compensating crystals, we can avoid the apparent inter-crystal phase shift and we measured a substantial increase of the parametric signal.

Next activity in IMS in 2007-2008 is the optimizing the powerful coherent UV source for laser spectroscopy of benzene molecules. We use in experiment a simultaneous phase-matching on both polar and azimuthal angles of SHG in LBO crystal, which is quite preferable when giving substantial SHG efficiency increase from the fundamental 789 nm to double frequency at 394.5 nm. Next step of nonlinear frequency conversion is the 3rd harmonic generation in BBO crystal at 263 nm. The experimentally obtained ultraviolet (UV) radiation at 263 nm for cascade 3rd harmonic generation is directly used for laser spectroscopy of benzene molecules.

We performed in IMS also experiments on dynamics of femtosecond (fs) pulses propa-

gation. Recently, the progress in ultrafast lasers has opened up the possibility of quantum control on molecular processes and quantum manipulation of molecular motions. Thus, study of dynamics of fs pulses propagation is of great importance. The obtained experimental results give a new interpretation of the transient dynamics of fs propagation and non-stationary phenomena with linear stability and unexpected reduced diffraction in dispersive nonlinear media as well as in dispersion-less media.

The program of Prof. Ohshima group includes also scientific seminars of high level. This Photo-Molecular Science group is quite open for contacts on national and on international projects, involving foreign scientists. This gives advantages in exchange of new ideas and topics of perspective research. I would like to note, that all facilities in this department and totally in IMS are quite impressive, due to the new experimental equipment. There is very stimulating and favorable atmosphere in Prof. Ohshima group for most efficient mutual work – experimental and theoretical. Such circumstances in the Laboratories of IMS give warm conditions which are conducive to working here.

Besides, my colleagues in IMS and all members of the group helped me to visit some remarkable sight-seeing in Okazaki and in its region. Okazaki is nice city with pleasant landmark and eminent shrines and history. It is very quiet and good place to live and to work in this city.

Further, I would like to continue the scientific collaboration with IMS, in order to have next and more contacts with Department of Photo-Molecular Science and with IMS researchers.

I will deeply acknowledge my host Professor Yasuhiro Ohshima



for his hospitality and kind reception, for his great support in performing our mutual research work in IMS. His interesting project gives important scientific problems and due to our further collaboration we would be able to make new

contributions in developing of contemporary research work.

I am very grateful also to all members of IMS, and to the Department of Photo-Molecular Science for the scientific contacts and discussion, for ensuring the

best collaboration of the work. All nice traditions of the National IMS in Japan make strong stimulation for further scientific exchange and further progress in molecular science.

外国人研究職員の

## 印象記 02

### Good memories of the Institute for Molecular Science

Yanli Mao

Department of Physics, Hennan University, China

It is a pleasure to write my impression of IMS in Okzaki. My stay at the IMS started at spring 2006. It is two years science research in Professor Tsuneo Urisu group as a postdoc. There are a lot of good memories and favorable impression.

There are many high quality speech and symposiums in IMS given by representative scientist in the world, with whom we can have the interesting discussions. The collaboration and communication between different research groups have been established. These groups are not only in IMS or Japan, but also in many other countries. There are regularly seminars in every group, and many chances to take part in the conferences. The facility of library in IMS is well equipped. It is easy to find any paper or book what we expected. The staff in library will copy for us from other libraries if some journals are limited in IMS library. These scientific environments of IMS are of great benefit to researchers. This was very help-

ful to keep our work excellent and fruitful.

I was really impressed by the great effort of every group member. They work very hard, especially Professor Urisu. His scientism to seek the truth and work with perseverance affected me deeply. Furthermore, our group is active and cooperative, and everybody is warm and accommodating. Dr. Ryugo Tero is friendly young chemist and specializes in the preparation in biomembrane and AFM operation. I have learnt a lot from him. My work would not go on well without their precious helps. I would like to thank all the group members.

I spent enjoyable Japanese life for two years. There are many traditional festivals all the year, at that time we can watch traditional entertainments, such as cherry blossom, fireworks, and cultural festivals and so on. These activities were held at the Otokawa river banks, where is an important place in Okzaki. Okzaki is in beautiful surroundings. It is very suitable to live due to it is always very quiet and clean everywhere. I was surprised at many kinds of flowers in every season, and every family has the lovely and neat garden, although some of them are small. I like to walk along the river

or in the parks after one working week. Moreover, Japanese are friendly and patient, you could feel it deeply in the bank, station, restaurant, supermarket, even on the street.

NINS has the special facility, Mishima lodge, which is very few for other institutes. It is very convenient for foreigner researches, avoided many troubles in renting the house. Moreover, it is good accommodation, where is always quiet and clean, and surrounded by fresh flowers and flourished plant. Gymnasium is also equipped in IMS. We could take exercise, and play table tennis, and play the piano at any time including the weekend.

I would like to say thanks to Professor Urisu for giving me such a chance to work in IMS. I also appreciate all the peoples who helped warmly me, and best wish to you. I shall remember and miss these days living in Japan.





## 大迫 隆 男

おおさこ・たかお

生命・錯体分子科学研究領域  
錯体触媒研究部門 助教



大阪市立大学大学院理学研究科で学位取得後、米国ワシントン大学博士研究員（学振海外特別研究員）を経て、平成20年1月に錯体触媒研究部門魚住研究室の助教として分子科学研究所に着任致しました。現在、不均一系触媒として機能する配位高分子錯体の開発を目指し研究を展開しています。新たな分子科学の開拓を目指し、頑張っていきたいと思えます。皆様どうぞよろしくお願い致します。

## 野 中 大 輔

のなか・だいすけ

岡崎統合バイオサイエンスセンター  
戦略的方法論研究領域 非常勤研究員

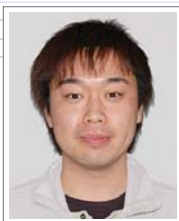


九州大学にて学位を取得後、同大学での研究員を経て、平成20年2月から研究員として藤井Gに在籍しております。分子研へは九州大学に在学中から協力研究という形で何度か実験にお邪魔しておりましたが、今年からは研究員として気持ちも新たに頑張っていこうと思っています。専門はヘムタンパク質の機能解析ですが、こちらでは様々な機器を使った分析手法を駆使することで、研究の幅を広げて行ければと考えています。よろしくお願いいたします。

## 阿 達 正 浩

あだち・まさひろ

極端紫外光研究施設  
光源加速器開発研究部門 助教



3月よりUVSOR加藤グループにお世話になっております。大学ではレーザーとプラズマとの相互作用を利用した小型電子加速器の開発を行い、その後、原子力機構高崎研では高速クラスターイオンビームの照射効果に関する研究を行ってきました。こちらでは電子ビームとレーザーとの相互作用による新しい光源の開発・研究を行っています。

どうぞよろしくお願い致します。

## 戸 谷 明 子

とや・あきこ

計算科学研究センター  
事務支援員



皆様、こんにちは。レターズには2回目の登場で新人と呼べるかどうか？ 主人の転勤で一度退職し、戻って参りましたので再びお世話になることになりました。よろしくお願い致します。

## 平 本 昌 宏

ひらもと・まさひろ

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



広島に生まれ（1958年）、大阪大学基礎工学研究科において博士課程中退後、分子研文部技官（84年）、大阪大学工学部助手（88年）、同工学研究科准教授（97年）を経て、今年4月に現職に着任いたしました。超高純度化、ナノ構造制御、有機/金属界面解明などの有機半導体の基礎科学を推進し、有機エレクトロニクスデバイス、有機太陽電池に応用していこうと考えております。20年ぶりの分子研でなつかしいですが、知らないことも多くあり、いろいろとお教えいただけましたら助かります。よろしくおねがいいたします。

## 加 藤 晃 一

かとう・こういち

生命・錯体分子科学研究領域  
生体分子機能研究部門 教授



昨年度まで名古屋市立大学大学院薬学研究科教授を本務とし、先導分子科学研究部門の客員教授をつとめてまいりましたが、本年度より岡崎統合バイオサイエンスセンターを本務地として着任いたしました。超高磁場NMR分光法を基盤に、複合糖質・タンパク質およびその複合体を対象にした生命分子科学の新機軸を開拓することを目指した研究を展開したいと考えてます。

今後とも、よろしくお願い申し上げます。

## 倉重 佑輝

くらしげ・ゆうき

理論・計算分子科学研究領域  
理論分子科学第一研究部門 助教



東京大学工学系博士課程を修了し、4月1日より理論第一(柳井グループ)の助教に着任しました。

博士在学中は、ナノ・バイオ系に向けた大規模電子状態計算法の開発を行って参りました。

気分を変えて分子研では、金属含有化合物をターゲットとした高精度電子状態理論の開発に取り組んでいます。

至らぬところも多いかと思いますが、どうぞよろしくお願いいたします。

## 山根 宏之

やまね・ひろゆき

光分子科学研究領域  
光分子科学第三研究部門 助教



千葉大学大学院自然科学研究科博士後期課程、日本学術振興会特別研究員(名大院理)を経て、4月から小杉グループでお世話になっています。これまでは真空紫外領域の光電子分光法を利用した有機半導体薄膜の電子状態に関する研究を行ってきました。今後は軟X線による内殻励起を利用してこれまでの研究を発展させる予定です。趣味? は育児です。メロメロです。よろしくお願いいたします。

## 齊藤 碧

さいとう・みどり

技術課 機器利用技術班  
機器利用技術一係 係員



立命館大学理工学研究科博士前期課程を修了し、平成20年4月より、機器センターの技術職員としてお世話になっております。高分解能透過型電子顕微鏡を担当しております。

力不足ではありますが、皆様との交流を通じて多くの技術や知識を身につけて、お役に立てるよう努力していきます。よろしくお願いいたします。

## 長屋 貴量

ながや・たかかず

技術課 計算科学技術班  
計算科学技術二係 係員



平成20年3月に名古屋大学大学院理学研究科博士前期課程を修了し、同4月よりこちらに着任いたしました。それまでは金属含有タンパク質の機能改変や、鉄/コバルト酸化物から成るピンポン球型磁石の磁性について研究してきたので、計算科学や大型計算機についてあまり知識がないのですが、日々勉強し皆様のお役に立てるように頑張っている所です。どうぞよろしくお願いいたします。

## 原田 洋介

はらだ・ようすけ

光分子科学研究領域  
光分子科学第一研究部門 研究員



東京工業大学理工学研究科にて学位取得後、東工大資源化学研究所での特別研究員を経て、この4月から研究員として採用されました。学生時代はレーザー光化学、特に時間分解分光法を用いた光化学反応ダイナミクスの研究を行い、資源研では高分子化学にも携わりました。分子研に来て、気持ちも新たに、さらに研究に邁進していくつもりです。

どうぞよろしくお願いいたします。

## 山本 勇

やまもと・いさむ

物質分子科学研究領域  
電子構造研究部門 研究員



平成20年3月に千葉大学大学院自然科学研究科で博士(工学)を取得後、同年4月より横山グループでお世話になっております。これまでは超短パルスレーザーを用いた顕微光電子分光法の開発を行い、有機半導体薄膜の電子状態研究を行ってきました。分子研では、さらに視野を広げ、積極的に新しいことに挑戦していきたいと考えています。

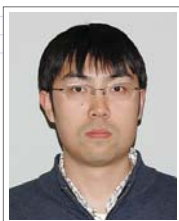
どうぞよろしくお願いいたします。



## 岩瀬 文 達

いわせ・ふみたつ

物質分子科学研究領域  
電子物性研究部門 非常勤研究員



東京大学工学系研究科博士課程修了後、電子物性部門中村グループの研究員として採用されました。IMSでは心機一転、磁性や電気伝導性・強誘電性などが複雑に絡み合う有機導体の物性研究に励んでいきます。

よろしくお願いします。

## 浜 坂 剛

はまさか・ごう

生命・錯体分子科学研究領域  
錯体触媒部門 非常勤研究員



平成20年3月に北海道大学大学院理学研究科化学専攻を修了し、この4月から魚住グループにてIMSフェローとしてお世話になっています。

学生時代はシリカゲル担持錯体を用いた触媒反応に関する研究を行っていました。分子研という非常に恵まれた環境のもと、日々研究に励みたいと思います。

よろしくお願い致します。

## 今 宏 樹

こん・ひろき

分子スケールナノサイエンスセンター  
ナノ分子化学研究部門 非常勤研究員



平成20年3月に北海道大学大学院理学研究科博士後期課程を修了し、同年4月よりナノセンター永田グループでお世話になっています。

これまでずっと札幌で過ごしてきた、初の本州という事で暑さ等が若干不安ですが、充実した研究生活を送れるように努力したいと思います。

よろしくお願いします。

## 近 藤 直 子

こんどう・なおこ

理論・計算分子科学研究領域  
理論分子科学第一部門 事務支援員



平成20年4月1日より事務支援員としてお世話になっています。仕事の方はまだまだ半人前ですが、周りの方々に助けていただきながら何とか日々を過ごしております。

最初は迷路のような分子研の建物にとまどいましたが、それにも少しずつ慣れてきました。

早く仕事にも慣れて少しでも皆さんのお役に立てるように頑張りますので、どうぞよろしくお願い致します。

## 眞 壁 幸 樹

まかべ・こうき

岡崎統合バイオサイエンスセンター  
戦略的方法論研究領域 助教



東北大学工学研究科で学位取得後、シカゴ大学での博士研究員を経て、平成20年4月1日より現職に着任いたしました。ポリペプチドである蛋白質が、どのようにして複雑な高次構造を形成するのか研究をしています。分子研では新たな測定技術を用いて、研究の幅を広げたいと思っています。

今後ともよろしくお願いいたします。

## 石 谷 隆 広

いしがい・たかひろ

計算科学研究センター  
特定契約職員 専門研究職員



4月から「次世代スパコンプロジェクト・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）」（分子研レターズ前号P18 参照）の事務局で広報ほかを担当しております。6月には本プロジェクトの第一回国際会議開催をお手伝いし、ノーベル賞受賞者も含め国内外の著名な研究者の皆様にお会いすることができました。このような機会が得られるのも分子研ならではの感謝しております。尚、本プロジェクトにつきましては、以下のURLをご覧ください。

URL:<http://nanogc.ims.ac.jp/nanogc/>  
今後とも、よろしくお願い致します。

## 神谷 由紀子

かみや・ゆきこ

生命・錯体分子科学研究領域  
生体分子機能研究部門 研究員



名古屋市立大学大学院薬学研究科で学位取得後、今年4月より分子科学研究所の博士研究員として採用されました。分子科学研究所では糖鎖の立体構造やダイナミクスを解析することによって、糖鎖を物理化学的に理解し、糖鎖が担う生命現象の仕組みを新たな視点で捉えていきたいと思っています。皆様どうぞよろしくお願いたします。

## 種村 博代

たねむら・ひろよ

分子スケールナノサイエンスセンター  
ナノ分子科学部門 技術支援員



平成20年5月1日より、分子スケールナノサイエンスセンター ナノ分子科学部門で技術支援員としてお世話になっております。  
永田先生をはじめ研究室の皆様と一緒に、毎日楽しく仕事ができることをたいへん感謝しております。  
精一杯頑張りますのでどうぞよろしくお願いたします。

## 鈴木 万里子

すずき・まりこ

岡崎統合バイオサイエンスセンター  
生命環境研究領域 技術支援員



平成20年5月より、生命分子研究部門の加藤グループで、技術支援員としてお世話になっております。  
機構の立派な施設と研究室のなごやかな環境の中で、自分も早く成長できるように頑張りたいと思っています。  
皆様のご指導よろしくお願いたします。

## 山口 拓実

やまぐち・たくみ

生命・錯体分子科学研究領域  
生体分子機能研究部門 助教



東京大学大学院工学系研究科にて博士課程修了の後、同技術補佐員を経て、5月より統合バイオ加藤グループに加わりました。これまで専攻してきた有機化学・錯体化学を礎に、心機一転、新しいサイエンスへ挑んでいこうと思っています。研究分野においても駆け出しの、名実ともに新人ですが、どうぞよろしくお願いたします。

## 江原 正博

えはら・まさひろ

計算科学研究センター 教授



京都大学で博士課程終了後、基礎化学研究所博士研究員、京都大学工学研究科助手、助教授を経て、本年6月に計算科学研究センターに教授として着任致しました。専門は量子化学で高精度な電子状態理論の開発と理論精密分光・光物性科学への応用を行ってきました。今後は電子状態理論を核として新しい理論化学を切り拓く研究を目指します。  
よろしくお願致します。

## 池 滝 何 以

いけたき・かい

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 非常勤研究員



このたび6月1日付をもちまして、分子スケールナノサイエンスセンターの平本グループに着任しました。名古屋大学で学位を取得するまでは、主に、有機半導体薄膜の構造と電子構造に関する研究を行っていました。平本グループでは、有機太陽電池の高効率化に取り組みます。早くこの分野の研究に慣れて、成果を出せるよう努力していきたいと思ひます。  
今後ともよろしくお願いたします。



NEW STAFF

## 新人自己紹介

### 田中 景

たなか・けい

戦略的方法論 生体分子物性（桑島G）、  
生命分子（加藤G） 事務支援員



岡崎統合バイオサイエンスセンター時系列生命現象研究領域 神経分化で2年勤めた後6月1日より戦略的方法論 生体分子物性（桑島G）生命分子（加藤G）で事務を担当しております。

生理研から分子研への異動で勝手のわからないところもありまた至らない点も多く、ご迷惑をおかけすることもあるかと思いますが精一杯努めますのでよろしくお願いいたします。

## Happy Hour で「幸せな泡」

山手地区では有志が中心となって月に一度のペースで Happy Hour を開催している。これは米国の大学などで department や school 単位で催されるものを模して「研究所や研究室の垣根を超えた自由な交流の場を提供する」ことを眼目とし山手地区教官有志の寄付で運営されるビール、ソフトドリンクなどのコップを片手に気ままに談笑する会である。参加無料、参加資格は特になく参加の意思を持つ人なら誰でも口元をホップの効いた「幸せな泡」で飾ることができる。



山手地区は3研究所及び統合バイオセンターが一つ屋根に集うため、そのせっきくの地の利を活かし自由闊達な交流を持つことが相互にメリットが大きいと考え、かねてより研究上の交流が浅からぬ永山（統合バイオ）魚住（分子研）両グループが言い出しっぺとなり、統合バイオ事務室の協力を得て2008年3月に船出をした集まりであり、これまでの数回は各会50～60名の参加を得て和やかかつ賑やかな会となっている。

過度に「宴会」「飲み会」の態になることなく、節度ある研究所間交流の場として今後末永く定着させて行きたいと切に願っている。もちろん明大寺地区からの参加も大歓迎である。どこかで Happy Hour の案内を見かけたら「のどを潤す」くらいの軽い気持ちで是非一度覗いてみてほしい。  
(魚住泰広)

## 金属内包フラーレン の分子変換

赤坂 健

筑波大学先端学際領域研究センター 教授

土屋敬広

筑波大学先端学際領域研究センター 講師

(所内対応) 永瀬 茂、溝呂木直美

C<sub>60</sub>の発見以来、炭素ケージの内側の空洞に原子を入れるという試みが活発に行われ、金属原子、希ガス、窒素原子などを内包したフラーレンが生成・単離されている<sup>[1]</sup>。なかでも、最近、金属原子が球殻状炭素ケージのなかに内包されたフラーレンの生成と単離には、その特殊な構造だけでなく新規な特性を示す物質として非常に大きな関心が寄せられている。金属内包フラーレンが注目される一番の理由は、金属原子からフラーレンへの電子移動であろう。例えば、La原子を1個内包したフラーレンでは、La原子から3個の電子が移動し、形式的にLa<sup>3+</sup>Cn<sup>3-</sup>と記述できる電子構造となる。このように非常に興味深い構造と性質を有する金属内包フラーレンであるが、その構造が明らかになっているものは未だ少ない。それは、生成量が少ないことや分離精製が困難であることに加え、多くの金属内包フラーレンが常磁性であり、空フラーレンの構造決定に非常に有用な<sup>13</sup>C NMRによる構造決定ができないことに由来する。そこで、我々は常磁性金属内包フラーレンの電解法によるイオン化を検討し、得られるアニオン体を用いた<sup>13</sup>C NMRによる構造決定法を確立した<sup>1)</sup>。この結果を基に、金属内包フラーレンイオンの特異な溶解性に着目し、新規な金属内包フラーレンの大量分離法の開発にも成功

している<sup>[2]</sup>。本稿では、大量に得られるようになった金属内包フラーレンを用いた分子変換に関して、「実験と理論のinterplay」による共同研究を通して得られた最近のトピクスを中心に解説する。

### 金属内包フラーレンの化学修飾

M@C<sub>82</sub> (M = Y, La, Ce, Pr) の主異性体は、これらのアニオン体の<sup>13</sup>C NMR測定によって何れもC<sub>2v</sub>対称の構造をとり24種類の非等価炭素があることが明らかにされている<sup>[1]</sup>。このため、M@C<sub>82</sub>への付加反応において多くの反応点が存在するので、付加位置の異なる数多くの異性体が生成する可能性がある。実際に、La@C<sub>82</sub>とケイ素-ケイ素結合を有する三員環化合物ジシリラン (disilirane) やジアゾメタン (diazomethane) との反応では、共に数種類の付加体が生成する<sup>[1]</sup>。しかしながら、La@C<sub>82</sub>とアダマンタンジアジリン (adamantanediazirine) との光反応では、位置選択的にアダマンタン付加体 (La@C<sub>82</sub>Ad) が生成することが見出された (図1)<sup>[3]</sup>。この反応を詳細に解析したところ、C<sub>82</sub>ケージの電子状態とπ電子系の歪みが重要な役割を果たしており、アダマンタンジアジリンの光照射によって生成する求電子性のアダマンタンカルベンは、La原子近くの負に荷電した炭素へ選択的に付加していることが明らかとなった。これに対し、求核試薬との反応では、+3の電荷をもつLa原子から遠い炭素上への付加が予想される。塩基性条件下、臭化マロン酸ジエチルエステル (diethyl bromomalonate) を用いた反応 (Bingel反応) により求核的な環化付加反応を行うと、確かにLa原子から遠い炭素上へ付加した化合物が主として得られた (図2)<sup>[4]</sup>。興味深いこ

とに、このBingel反応においては求核的な付加反応は進行したものの、引き続いて起こると予想された環化反応は進行せず、求核付加により生成したアニオンが酸化された付加体La@C<sub>82</sub>R (R = CBr(CO<sub>2</sub>Et)<sub>2</sub>) が主生成物であった。

このように金属内包フラーレンのケージ上の電荷の偏りをうまく利用した反応点の制御が可能であることは、今後、様々な金属内包フラーレンの化学修飾を行う上で非常に重要な知見である。

一方、La<sub>2</sub>@C<sub>80</sub>の2つのLa金属原子はC<sub>80</sub>ケージ内を自由回転運動していることが明らかにされている<sup>[1]</sup>。このような金属内包フラーレンの金属原子の位置や動きに関する研究は最近始まったばかりであるが、金属原子の動的挙動に由来する新しい物性の発現が期待される。特に炭素ケージへの付加反応等による電子的な摂動で内包金属

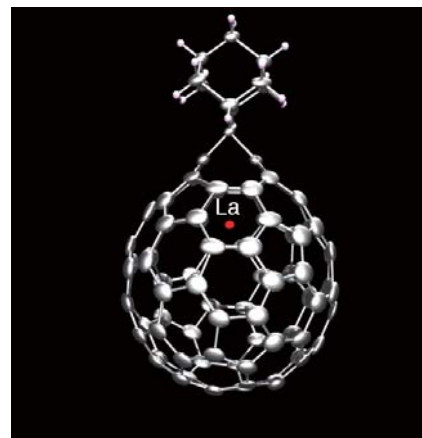


図1

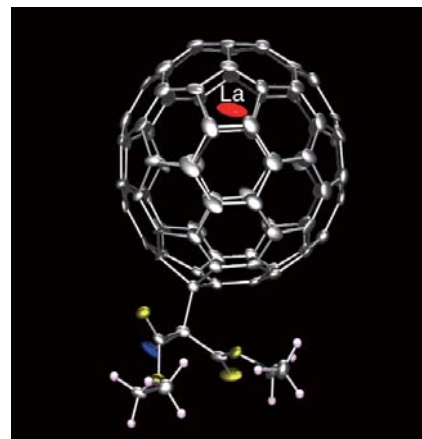


図2

原子の動きを制御することが出来れば、金属原子の内部運動を情報として取り出し分子スイッチとして利用する等多方面への応用が期待される。内包金属の動的挙動はフラレンケージ内の静電電位の分布によって決まる。このことは、フラレンケージの静電電位の形を変化させることによって内包金属の動的挙動の制御が可能であることを示している<sup>[1]</sup>。そこで、金属内包フラレンを化学修飾することによりフラレンケージ内の静電電位分布を変化させ、金属の動的挙動を制御することを検討した。金属内包フラレンとしてはM<sub>2</sub>@C<sub>80</sub> (M = La, Ce) を用いて検討した。

Ce<sub>2</sub>@C<sub>80</sub>とジシリランとの熱反応により、相当する1:1付加体を合成した。HPLCにより単離精製された付加体の温度可変<sup>1</sup>H NMRの測定において、幾つかのシグナルが温度に依存してシフトした。これはCe原子上のf電子に由来する常磁性シフトと考えられる。ケージ内部のCe原子上のf電子の影響が、ケージの外側に付加した置換基の水素にまで及んでいることは非常に興味深い。付加体の構造は、X線結晶構造解析により決定された(図3)。2つのCe原子は、赤道上の2カ所に局在化していることが明らかとなった<sup>[5]</sup>。La<sub>2</sub>@C<sub>80</sub>やCe<sub>2</sub>@C<sub>78</sub>についてもジシリランとの反応により1:1付加体を得てい

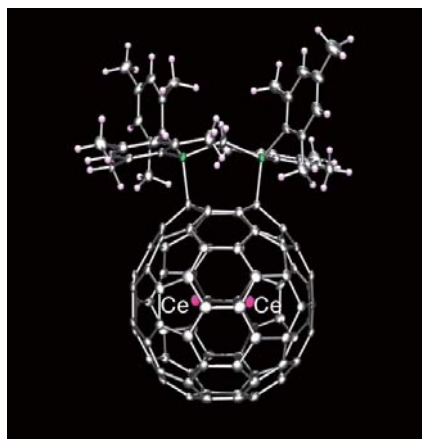


図3

る(図4, 5)。

また、オキサゾリジノン(oxazolidinone)との反応による炭素置換基のLa<sub>2</sub>@C<sub>80</sub>への導入では、2種類の誘導体が生成するが、そのうちの1つについてはX線結晶構造解析により構造が決定された。非常に興味深いことに、図3のケイ素置換基を導入した場合は異なる位置で、2つのLa原子が止まっている(図6)<sup>[6]</sup>。これらの結果は理論計算によっても支持された。

化学修飾によりフラレンケージ内部の静電電位を変化させ、内包金属の位置や動的挙動の制御が可能であることが分かった。炭素ケージに囲まれて外部から触ることのできない内包金属原子を、化学の力で制御したと言える。今後様々な機能性分子創製への足掛かりになると期待される。

### 金属内包フラレン錯体の超分子化学

特異な電子的性質と磁気特性を示す金属内包フラレンの超分子化学については興味を持たれるが、これまでほとんど研究例がなかった。最近筆者らは常磁性金属内包フラレンLa@C<sub>82</sub>とアザクラウンエーテル<sup>[7]</sup>および硫黄間をcis-オレフィンで架橋した不飽和チアクラウンエーテル<sup>[8]</sup>との特異的な電子移動型包接錯体の形成を見いだした。これまで有機分子からC<sub>60</sub>等の空フラレンへの電子移動については数多く報告されているが、これらは光誘起によるもので、基底状態での電子移動はほとんど起こらないとされていた。これに対し、空フラレンよりも非常に優れた電子受容能をもつ金属内包フラレンでは、アザクラウンエーテル等の比較的ドナー性が低い化合物からでも基底状態で電子移動が起こることが明らかとなった。ま

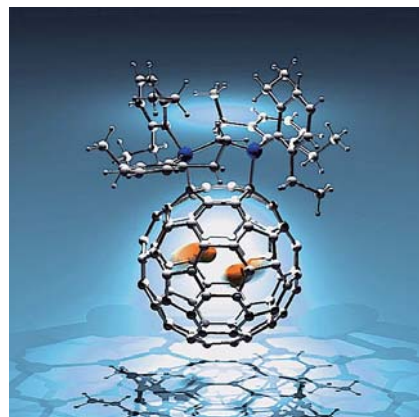


図4

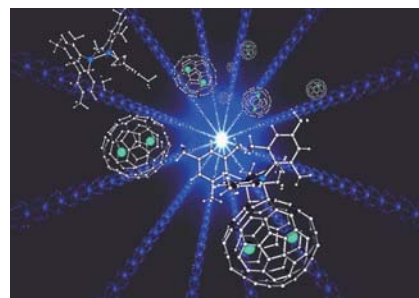


図5

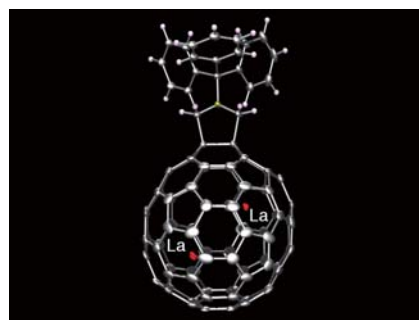


図6

N,N,N',N'-テトラメチル-p-フェニレンジアミン(N,N,N',N'-tetramethyl-p-phenylenediamine, TMPD)との溶液中での挙動について検討を行ったところ、反磁性La@C<sub>82</sub>アニオンとTMPDラジカルカチオンの生成が確認され、この場合にも基底状態において電子移動を伴い1:1の錯体を形成することが分かった(図7)<sup>[9]</sup>。興味深いことに、この電子移動は完全な平衡状態にあることから溶媒の誘電率や温度を変化させることによって平衡が偏り、電子移動を可逆的にコントロール出来ることが明らかとなった。さらに電子移動の前では可視-近赤外吸収スペクトルが大きく異なることから、ソルバトクロミズムやサーモクロミズムといった現象も観測されている。この様なスピンサイト交換現象の発現は非常に低い還元電位を有し、且つ還元体が



安定な常磁性金属内包フラーレン特有の現象である。

## おわりに

金属内包フラーレンは、次世代の金属-炭素ハイブリッド材料として非常に注目されている分子である。化学修飾による機能化は材料への応用として非常に重要であり、炭素ケージへの置換基の導入だけでなく、内包された金属原子やクラスターの位置の制御も可能で、これまでのC<sub>60</sub>等の空フラーレンの化学修飾とは大きく異なり幅広い多様性が期待される。さらに、金属内包フラーレンの超分子化学も今後大変興味深い発展が期待される。優れた酸化還元特性をもち、常磁性化と反磁性化をも容易に制御できる金属内包フラーレンを超分子的に自在に配列して集積化することができれば、次世代のスピナノデバイスへの応用の可能性が飛躍的に高まる。金属内包フラーレンの化学修飾や超分子化学に関する研究は始まったばかりであり、今後研究が進むに連れてより精密な構造や物性の制御が可能になると期待される。

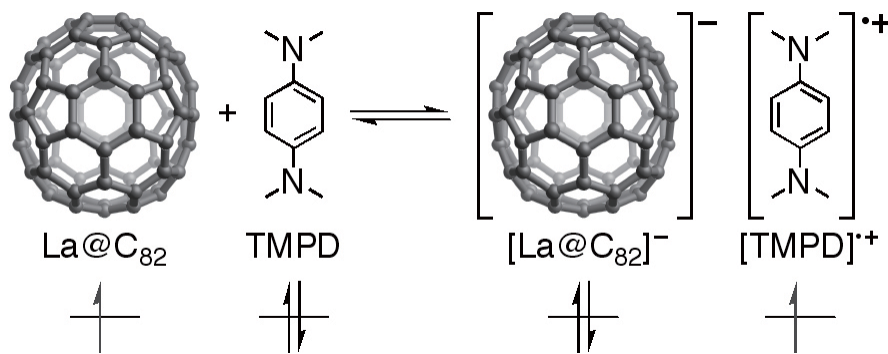


図7



あかさか・たけし

1948年に京都で生まれ、大阪で育つ。1974年に東京教育大学大学院博士課程を中退後、筑波大学準研、その後1979-1981年米国ブルックヘブン国立研究所博士研究員、1981年筑波大学化学系講師、1987年同助教授、1996年新潟大学教授、2001年1月より現職。研究テーマは、フラーレン・金属内包フラーレン・カーボンナチューブ等ナノ炭素材料の有機化学研究。



つちや・たかひろ

1974年に東京で生まれる。2002年に東京都立大学大学院博士課程修了後、筑波大学先端学際領域研究センター博士研究員、その後2004年同助手、2005年4月より現職。研究テーマは、フラーレン・金属内包フラーレン等ナノ炭素材料の有機化学および超分子化学研究。

## 参考文献

- [1] T. Akasaka, S. Nagase, Eds.: *Endofullerenes: A New Family of Carbon Clusters*, Kluwer, Dordrecht, The Netherlands (2002).
- [2] (a) T. Tsuchiya, T. Wakahara, S. Shirakura, Y. Maeda, T. Akasaka, K. Kobayashi, S. Nagase, T. Kato, K. M. Kadish: *Chem. Mater.*, **16**, 4343 (2004). (b) T. Tsuchiya, T. Wakahara, Y. Lian, Y. Maeda, T. Akasaka, T. Kato, N. Mizorogi, S. Nagase: *J. Phys. Chem. B.*, **110**, 22517 (2006).
- [3] Y. Maeda, Y. Matsunaga, T. Wakahara, S. Takahashi, T. Tsuchiya, M. O. Ishitsuka, T. Hasegawa, T. Akasaka, M. T. H. Liu, K. Kokura, E. Horn, K. Yoza, T. Kato, S. Okubo, K. Kobayashi, S. Nagase, and K. Yamamoto: *J. Am. Soc. Chem.*, **126**, 6858 (2004).
- [4] L. Feng, T. Nakahodo, T. Wakahara, T. Tsuchiya, Y. Maeda, T. Akasaka, T. Kato, E. Horn, K. Yoza, N. Mizorogi, and S. Nagase: *J. Am. Chem. Soc.*, **127**, 17136 (2005).
- [5] M. Yamada, T. Nakahodo, T. Wakahara, T. Tsuchiya, Y. Maeda, T. Akasaka, M. Kako, K. Yoza, E. Horn, N. Mizorogi, K. Kobayashi, S. Nagase: *J. Am. Chem. Soc.*, **127**, 14570 (2005).
- [6] M. Yamada, T. Wakahara, T. Nakahodo, T. Tsuchiya, Y. Maeda, T. Akasaka, K. Yoza, E. Horn, N. Mizorogi, and S. Nagase: *J. Am. Chem. Soc.*, **128**, 1402 (2006).
- [7] T. Tsuchiya, K. Sato, H. Kurihara, T. Wakahara, T. Nakahodo, Y. Maeda, T. Akasaka, K. Ohkubo, S. Fukuzumi, T. Kato, N. Mizorogi, K. Kobayashi, S. Nagase: *J. Am. Chem. Soc.*, **128**, 6699 (2006).
- [8] T. Tsuchiya, H. Kurihara, K. Sato, T. Wakahara, T. Akasaka, T. Shimizu, N. Kamigata, N. Mizorogi, S. Nagase: *Chem. Commun.*, 3585 (2006).
- [9] T. Tsuchiya, K. Sato, H. Kurihara, T. Wakahara, Y. Maeda, T. Akasaka, K. Ohkubo, S. Fukuzumi, T. Kato, S. Nagase: *J. Am. Chem. Soc.*, **128**, 14418 (2006).

# 自己組織化ナノチューブ における ラセン状電導挙動の実証

山本 洋平

科学技術振興機構 ERATO-SORST  
「分子プログラミングによる電子ナノ空間の創成  
と応用」グループリーダー

(所内対応) 中村敏和

私が分子研の存在について知ったのは今から10年ほど前、大阪大学大学院理学研究科修士課程在学時のことです。当時、分子研から赴任してこられた鈴木孝義先生（現岡山大学准教授）から研究のご指導を頂いたこともあり、分子研の人々や設備等に関するさまざまな逸話を伺うことができました。博士課程への進学時に所属研究室を変えたため、その後分子研とは疎遠になりましたが、茅コンファレンスなどの機会

に何度か訪問させて頂いたことを覚えております。学位取得後、今後の研究テーマとして超分子を用いた物性研究が面白いのではないかと考え、超分子化学の分野で目覚ましい研究成果を発表されておりました相田卓三先生（東京大学教授）の門戸を叩き、2004年4月より日本学術振興会特別研究員として新たな研究のスタートをきりました。

その当時、相田先生を総括責任者とする科学技術振興機構「ERATO相田ナノ空間プロジェクト」では、ベンゼン環13個が縮環した構造を有するヘキサベンゾコロネン（HBC）と呼ばれる分子に、親水および疎水部位を左右非対称に修飾した誘導体（図1a）が、極性溶媒中で自発的に集合化し、直径20ナノメートルのナノチューブ（図1c）を形成することがまさに発見された直後でした<sup>[1]</sup>。そこで私は、このナノチューブを用いて新たな電気・磁気物性を引き出すことができないかと考え、相田

先生や福島孝典グループリーダー（現理化学研究所 機能性ソフトマテリアル研究チームチームリーダー）と様々な可能性について議論しました。このHBC誘導体は、自己組織化過程においてHBC部位の $\pi$ スタッキングと疎水鎖のパッキングにより2分子膜テープを形成します（図1b）。そしてこのテープがラセン状に巻き上がることによりナノチューブが構築されます。すなわち、ナノチューブ一本はラセンキラリティーを有しており、壁はHBCが無限に重なり合っていてできていることとなります。したがって、ドーピングにより電荷キャリアをHBCカラム内に誘起できれば、キャリアがラセン状に流れるのではないかと考えました。そして、このことが実証できればナノメートルスケールのソレノイドや電磁誘導コイルが実現できるのではないかと思索し、研究計画を立てました。

しかしながら、それまで行ってきた錯体や金属酸化物の磁性に関する研究から分子集合体の電気特性に関する研究にテーマを大きく変更したこと、研究室内に電気物性を計測するための機器がほとんどなかったこともあり、何から手をつければよいか分からず苦心し、まずは手探りで電気測定のための装置の立ち上げを始めました。1ヶ月程を要しましたが、ようやく白金線をガラス管に通し、減圧下でヨウ素蒸気などを吹きかけることのできる簡単な電気測定システムを構築しました。その中にナノチューブの薄膜を金線で配線し、減圧下でヨウ素蒸気に晒したところ、薄膜の色が黄色から茶色に急変し、電気抵抗が7桁程度も減少しました。あまりにも急激な電気抵抗値の変化に驚き、興奮したことを今でもはっきり覚えています。

このように化学ドーピングによりHBCナノチューブは導電性を示すこと

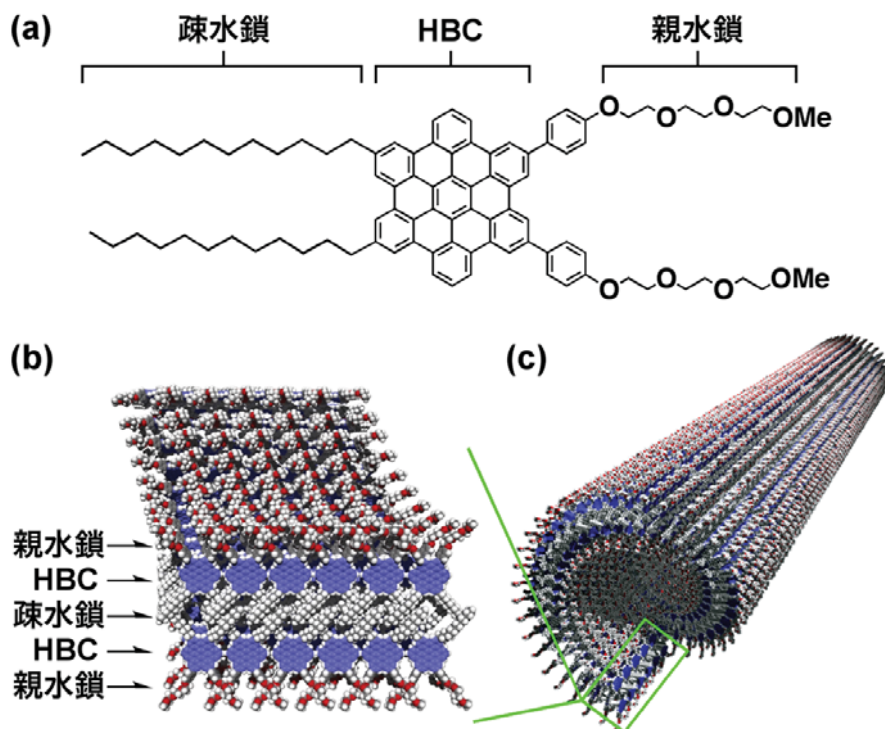


図1 (a) 両親媒性 HBC 誘導体の分子構造。  
(b) HBC 誘導体の自己組織化により形成する2分子膜の模式図。  
(c) 自己組織化ナノチューブの模式図。

が明らかとなりましたが、より詳細に伝導電子の挙動について知りたいという欲求に駆られ、大阪大学在籍時に同じ研究室で分子の導電性に関する研究を行なわれていました谷口正輝先生（現大阪大学准教授）に相談しました。そして、以前谷口先生が共同研究をされていたというご縁から、分子研の中村敏和先生を紹介していただきました。中村先生に共同研究のお願いを申し出たところ、すぐにご快諾のお返事を頂き、試料を抱えて分子研へ飛んで行きました。

まず始めに、ドーピングにより実際にキャリアが誘起されているかについて調べるために、電子スピン共鳴法（ESR）を用いて詳細な検討を行いました。HBCナノチューブはもともと ESR 不活性ですが、ヨウ素蒸気を導入すると明確でシャープな ESR シグナルが出現しました。ドーピング時間の経過とともにシグナルはブロードになり、確かに伝導キャリアに起因する電子スピンからのシグナルであることが確認できました。ドーピング開始から 18 時間経過後の ESR シグナルの積分強度からキャリア密度を見積もったところ、おおよそ 10 個の HBC に対し 1 つのキャリアが生成していることが明らかとなりました。

先に述べましたように、この HBC ナノチューブは構造要素としてラセンキラリティーを有しています。相田プロジェクトではある種の HBC 誘導体を用いることにより、自己組織化で生成するほぼすべてのナノチューブを一方巻きにできることを見出していました<sup>[2]</sup>。私はこのナノチューブが非常に長く成長することに目をつけ、その性質を利用してナノチューブが一方向に配向したマクロスコピックなファイバーを製作することに成功しました<sup>[3]</sup>。このファイバー試料を用いて ESR シグナルの角

度依存性を調べた結果、確かに g 値やピーク幅 ( $\Delta H_{pp}$ ) に角度依存性があり、ナノチューブ内では伝導電子が異方的に振る舞うことを確認しました<sup>[4]</sup>。

さらに、ヨウ素でドーピングした HBC ナノチューブのプロトン核磁気共鳴 ( $^1\text{H NMR}$ ) スペクトルの測定を中村先生に行なっていただき、ナノチューブ内を流れる伝導電子の性質についてより詳細に調べていただきました。その結果、プロトン原子核のスピン格子緩和時間の逆数 ( $1/T_1$ ) の対数が、温度の対数に対し 1/2 乗で直線的に相関していることが明らかとなりました。このことは、伝導電子はナノチューブの壁内部を 2 次元的に流れている（図 2 左）のではなく、1 次元的に流れている（図 2 右）ことを意味しており、間接的ではありますが、実験的にラセン状の電気伝導の実証に成功したといえます<sup>[4]</sup>。ごく最近、Spring-8 でのシンクロトロン放射光を用いた配向性 HBC ナノチューブ試料の X 線回折測定から、ナノチューブを形成する分子の詳細な配列構造の決定に成功し、確かに HBC 平面同士が少しずつずれながら積層してラセンを形成していることが実験的にも明らかとなりました<sup>[5]</sup>。この解析結果をふまえて考えてみても、HBC

ナノチューブ中に誘起された電荷キャリアはラセンの巻き方向に沿ってスパイラル状に伝導している可能性が極めて高いと結論づけることができます。

以上のように、本共同研究から、ナノチューブ内に生成した電荷キャリアはナノスコピックなレベルにおいてラセンを形成した HBC カラムに沿って 1 次元的に伝導するという重要な結果を得ることができました。このことは、今後このナノチューブを用いたソレノイドや電磁誘導コイルなど、電気—磁気物性の応用に向けた非常に大きな一歩であると考えています。また、本 HBC ナノチューブは、親水性側鎖の末端に様々な機能部位を付加することが可能であり、これまでに顕著な光電導性を示す同軸型ナノチューブの作製にも成功しています<sup>[6, 7]</sup>。今後、このような表面修飾 HBC ナノチューブを用いて、光起電力特性や電界効果トランジスタ特性の発現、さらには金属ナノチューブや磁性ナノチューブなど、さまざまな物性の発現にチャレンジしていきたいと考えております。その際には、中村先生を始めとする多くの共同研究者の方々の多大なお力添えを頂くことになるかと思ひます。今後ともどうぞよろしくお願い申し上げます。

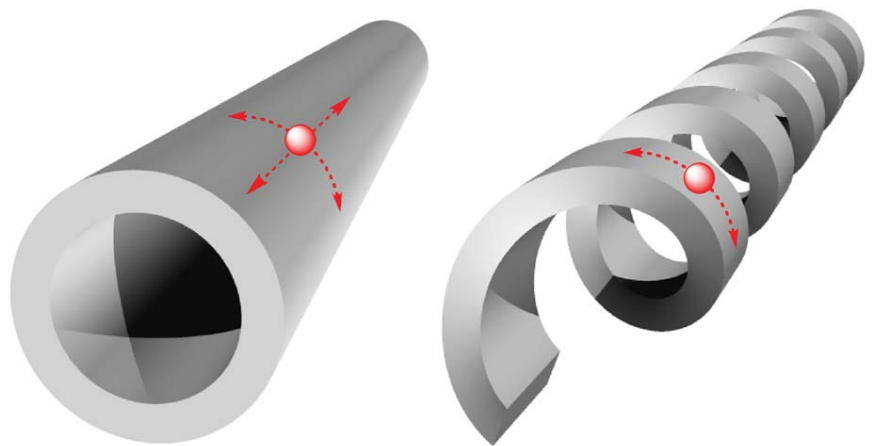


図 2 (左) 電荷キャリアがナノチューブの壁内を 2 次元的に動いている様子を示す模式図。(右) ラセン状に積層した HBC に沿って電荷キャリアが 1 次元的に動いている様子を示す模式図。今回の実験で、右のモデルがより確からしいことが示された。

参考文献

- [1] J. P. Hill, W. Jin, A. Kosaka, T. Fukushima, H. Ichihara, T. Shimomura, K. Ito, T. Hashizume, N. Ishii, and T. Aida, *Science* **304**, 1481–1483 (2004).
- [2] W. Jin, T. Fukushima, M. Niki, A. Kosaka, N. Ishii, and T. Aida, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* **102**, 10801–10806 (2005).
- [3] Y. Yamamoto, T. Fukushima, W. Jin, A. Kosaka, T. Hara, T. Nakamura, A. Saeki, S. Seki, S. Tagawa, and T. Aida, *Adv. Mater.* **18**, 1297–1300 (2006).
- [4] T. Hara, K. Furukawa, T. Nakamura, Y. Yamamoto, A. Kosaka, W. Jin, T. Fukushima, and T. Aida, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 034710 (6 pages) (2008).
- [5] W. Jin, Y. Yamamoto, T. Fukushima, N. Ishii, J. Kim, K. Kato, M. Takata, and T. Aida, *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 9434–9440 (2008).
- [6] Y. Yamamoto, T. Fukushima, Y. Suna, N. Ishii, A. Saeki, S. Seki, S. Tagawa, M. Taniguchi, T. Kawai, and T. Aida, *Science* **314**, 1761–1764 (2006).
- [7] Y. Yamamoto, T. Fukushima, A. Saeki, S. Seki, S. Tagawa, N. Ishii, and T. Aida, *J. Am. Chem. Soc.* **129**, 9276–9277 (2007).



やまもと・ようへい

1975年7月 福井県に生まれる。2000年3月大阪大学大学院理学研究科修士課程修了、2003年3月大阪大学大学院理学研究科博士課程修了。日本学術振興会特別研究員を経て、2005年4月より科学技術振興機構ERATO相田ナノ空間プロジェクト研究員、2005年10月よりERATO-SORST「分子プログラミングによる電子ナノ空間の創成と応用」研究員、2008年7月より現職。研究テーマは、自己組織化ナノマテリアルの創成と物性。趣味は、3歳の娘と週末遊ぶこと。学生時代には体育会ヨット部に所属しており、全日本インカレ出場も果たしたが、研究を始めてからはほとんど海に出ていない。

共同利用研究実施状況

平成19年度（後期）共同研究実施状況

協力研究	「積分方程式理論を用いた有機溶媒-水混合溶液の相分離に関する研究」を始め47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77件
施設利用	「核酸化学修飾方の開発」を始め34件

平成19年度（後期）分子研研究会

開催日時	研究会名	提案代表者	参加人数
2007年12月 4日（火） ～ 5日（水）	光機能性と高選択的反応性の融合が切り拓く新しい錯体光化学	鈴木 孝義 （大阪大学大学院理学研究科）	33名
2007年12月17日（月） ～ 19日（水）	先端的 ESR 手法による分子性物質の新機能性探索	溝口 憲治 （首都大学東京大学院理工学研究科）	58名
2008年 3月10日（月） ～ 11日（火）	分子の視点から見る光合成	杉浦 美羽 （大阪府立大学大学院生命環境科学研究科）	47名

COLUMN 1

## 岡崎に住んでいて

三宅伸一郎

総合研究大学院大学物理科学研究科機能分子科学専攻

分子研の周囲には畑が広がっていてそこでは麦が栽培されています。五月ごろには50cmくらいにまで伸び青い穂を結んでいました。オオムギで無いのは判りましたが、コムギなのかどうなのかはわかりませんでした。後日小麦について調べてみると、国内の小麦の9割が輸入で、国内生産の7割を北海道が、以下福岡6%、群馬5%と続き愛知東海地方で最多の3%の生産量となっています（平成18年 東海農政局）愛知の農家の方々ががんばっています。

春、麦がまだ青いころ豊田市との境界近くの麦畑を歩いているとキジの鳴き声が聞こえました。藪の中にいるのかなと思っていると河川敷の方からも後方の麦畑からもなわばりを主張するのがわかりました。3匹はいそうです。キジはどこかなと探索することにしましたが、安易に鳴き声の方向に歩いていくのは危険です。近づきすぎると警戒され静かにされてしまいます。畑で鳴いていたのは顔の真っ赤な雄と地味な雌のつがいでした。意外とキジは馬鹿なところがあって畑に隠れてもオスの尻尾が見えていたり、つい他のオスの鳴き声に反応してしまったりします。

構内にはタヌキがくらしているという話をよく聞きます。私は分子研に来て1年と2ヶ月が経ちましたが一回もタヌキに会えていません。イヌと同じくらいタヌキが好きなのでいつあえるのだろう心待ちにしていたのですが、いっこうに出会いがなく寂しい生活を

強いられていました。代わりにハクビシンをみかけました。サントリーさんの講演があった日に研究棟と南実験棟の間の庭をうろろろしていたところ目が光ったのでタヌキかなと思ったのですが、顔の中心が白くてしっぽが長かったのでどうやらハクビシンだったようです。その後も研究棟の庭や駐車場で頻繁に見かけるので南実験棟と実験棟の間の藪にひそんでいるのでしょうか。非常に警戒心が高くて人間の姿を見かけただけで逃げられてしまいます。夏になると除草が行われるのでハクビシンの安住が脅かされるのではないかと危惧していたのですが、装置開発室の近くで目撃されているので元気に過ごしているようです。

私は分子研から見て北西に住んでいるので伊賀川沿いに歩いて通学していますが、四月くらいからつがいのムクドリもよく見かけるようになります。西三河総合庁舎の通りの街路樹は晩夏に入るくらいからムクドリだらけになります。ムクドリのことが嫌いではないのですが「ギョルギョル」とよそではちょっと聞くことのできない音のすく木の下を通る気にはなれません。

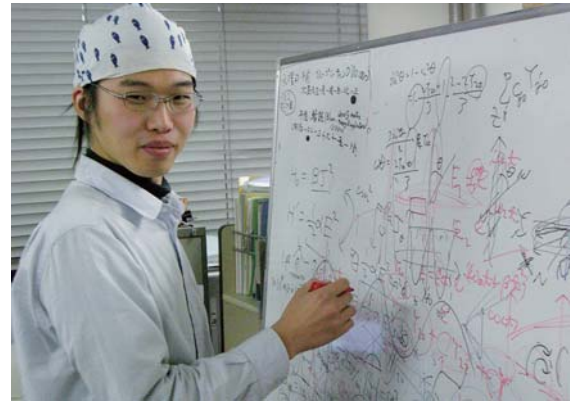
少し暖かくなると蛇が出てきます。伊賀川の河原には2mくらいのアオダイショウとシマヘビがいます。アオダイショウは神社近くの護岸で寝そべてひなたぼっこをしています。除草

みやけ・しんいちろう

京都大学大学院理学研究科修士課程を3年かけて終了。内最後の半年は分子研です。

分子研レタース51で知ったサイバーレーザーに入社後1年間で出奔。現在に至る。

趣味は散歩。好きな味噌汁の具は麩。好きな麺類はうどん。好きな豆腐はもめん。好きなお菓子はグミ。苦手なものは分子科学。



が行われると岡崎公園の方まで逃げてきたりします。伊賀川のアオダイショウは右目の上に白いふが入っていました。左目については近くで観察する機会が無かったのでわかりません。このアオダイショウ、陸上にいるときは人間以外に恐れるものは無いのですが、人影を避けたりして川に逃げ込むとカラスにちょっかいをかけられます。カラスは川から上がるときを狙って襲います。へびが川に入ると数匹のカラスがやってきてへびが陸に上がろうとするところで待ち構えます。カラスに襲われるのは一度や二度ではないのですが毎回へびは何度も上陸を試みカラスにつつかれ、結局は草むらまで泳いでいってへびが隠れてからすが飽きて終わります。一方シマヘビは二度しか見たことが無いのですが、伊賀川河原に降りる階段のあるお稲荷さんの真下にある畑の近くに住み着いているようです。このシマヘビをはじめ見たときはゴム製のおもちゃか干物かと思うくらい色がまっくらだったので「かわいそうにと」油断して近づいたところ、ガラガラへびのようにしっぽを垂直に立てて震わせて威嚇されました。私はまんまと威嚇され一人ぼっちの河原で奇

声をあげてひるんだ際に川に逃げられました。今までにマムシにしっぽを振られたことはあるのですが、ツヤがあり細身でまっくろだったので「やばいやつが岡崎にいる。」とおおはしやぎで調べたところ、シマヘビは黒化することがあって威嚇するときはしっぽを立てて振る、マムシはしっぽで地面をたたいて威嚇するのだそうで、少しがっかりです。7月の始めの週に川底で細長い物が沈んだ木の枝に太いほうをを挟んで白くなびていました。どうやら溺れ死んだようです。河原で自転車に

乗っている名前は分からないおじさんも最近ヌシを見かけないと言っていました。

八幡（はちまん）通りでは一の位が二と七の日には二七（ふな）市という市が開かれます。八幡通りは殿橋から電車通りを北上して三菱東京の南側にある通りです。普段は心なしか殺風景に感じる通りですが二七市の日にはお祭りでもやっているかのような賑わいです。八幡通りと電車通りの角にあるパチンコ店も二七市の日には二七市感謝デーをします。地域ぐるみの取り組

みのようです。ちなみに二七市は12時位には終わります。私は福岡の小倉出身なのですが京都の吉田神社の節分祭でハサミや鎌を売っている出店があったのが印象的で、そこに来て二七市なので普通のお祭りはハサミや鎌を売っているところがあたりまえで小倉のお祭りが異常というのは間違った認識なのでしょうか。だれか教えてください。

書くことがなくなりました。  
俳句を盗作します。

すばらしい分子研だ蚊が居る

COLUMN 2

## 分子研・岡崎あれこれ

三宅 雄介

総合研究大学院大学物理科学研究科機能分子科学専攻

今回、総研大コラムの執筆を仰せつかりました小川グループ、博士後期過程3年の三宅です。分子研ってどういふところか、分子研がある岡崎という場所について簡単に紹介できたらと思います。共同研究で来訪される研究員や、これから総研大に入学を希望される学生の方々のほんの少しでもお役に立てたら幸いです。

まず大学ではなく分子研という研究所で学ぶメリットはなんでしょうか。

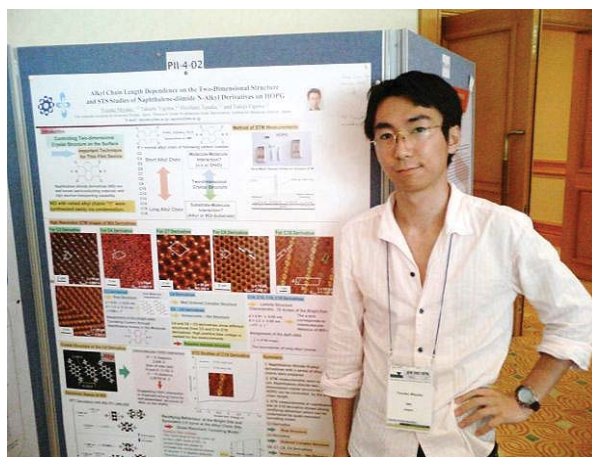
1) 恵まれた研究の設備環境。これは私が説明するまでもなく非常に恵まれています。人が少ないこともあるのですが、研究設備は、待たされることなく比較的自由に使えると思います。データベース関係も充実しています。

2) アクティビティの高い研究者と過ごせる。個人的にはこれが一番良い点

ではないかと考えています。分子研は少人数のグループ同士が、合同でセミナーをやることが多く、異なる分野の専門家と意見交換ができます。研究会も多いです。そこから、共同研究に発展することもしばしば。セミナーだけでなく、各種のイベントの後に行われるラウンジでの飲み会でも、濃密な研究者同士のやりとりが楽しめます（床で転がって寝ている方もいらっしゃいますが(笑)）。研究所外に出ても、岡崎3機関（分子研、生理研、基生研）関係者が良く出入りする場所なんかがあります。今日も公務員宿舎の近くのワインバーなんかでは、ナノ構造の研

みやけ・ゆうすけ

2006年3月東京都立大学修士課程修了。同年4月より総研大機能分子科学専攻5年一貫博士課程3年次編入学。D3として分子スケールナノサイエンスセンター小川グループに所属。研究テーマは、有機分子を用いた自己組織化ナノ構造、およびその電子状態を主に走査トンネル顕微鏡（STM）を用いて研究している。AsiaNano 2006 Outstanding Research Award, 受賞、2007 International Scanning Probe Microscopy Conference Best Poster Award 受賞。専門分野：有機合成・表面物理科学



究する学生と昔の専門家などが楽しくお酒を飲みながら議論していたりしよう。ひょっとしたら分子研の広報担当者なんかは飲みに来ているかもしれません。

3) 語学関係のプログラムが充実している。岡崎3機関には、2名の専任ネイ

ティブ英語教師がおり、会話とプレゼンテーションの授業が開講されています。分子研以外の2研究所の学生、スタッフも参加するので、そこで交流が深まってよい友人が出来たりします。個人的な感想ですが、非常に授業の雰囲気が良く、毎回得られるものも多かったです。また機会があれば受講したいと思うプログラムでした。分子研の場合、研究室に海外から研究員が来ることもしばしばあるので、この語学関係の知識は即実践できます。私の場合は、分子研来て一年目にインド、ドイツ、中国から、2年目にはインドからの研究者がグループ内にいましたので、英語をしゃべる機会には事欠きませんでした。

他にも色々メリットはあるのですが、じっくりモノを考えたい、研究したいという学生には分子研最適な場所だと思います。研究に疲れたら仲間たちとバレーボール、バドミントンやサッカーなんかの課外活動（サークル）で汗を流すのも良いかと。研究所内にはテニスコートや、卓球場、トレーニング施設なんかもあります。山手地区のラウンジでは音楽が趣味の有志が集まって不定期に演奏会や、月に一回ほどの割合で、Happy Hourという名の

パーティが催されており、非常に良く賑わっております。週末には、友人に車を出してもらって海や山に繰り出すことも多いです。岡崎自体は、都会的な刺激がほしい人にはちょっと物足りないかもしれませんが、名古屋に出るのも比較的容易なので結構便利な場所なのではないでしょうか。

このコラムを書くに当たって、岡崎という土地を紹介するに当たり、岡崎在住の友人に岡崎といえば何という質問をぶつけたところ、「……味噌。」という答えが返ってきました。味噌というトピックのみでコラムの後半を書ききる自信はありませんので、簡単に岡崎という街を紹介させていただきます。岡崎という土地は、地理的には坂が多く、生活をするうえでは、車はあったほうがよいです。しかし車の運転が荒いお土地柄なので、運転の際にはご注意ください。私の目線から見て岡崎の特徴と言えば、意外に思われるかもしれませんがエスニック料理、特にインド料理屋（一般的なカレー屋は除外する）が多いことだと思います（ここでは触れませんがタイ料理屋も多い）。岡崎という街には外国の方（多数派は南米系）が多いので、そのことも一因だと考え

られます。研究所から数キロ圏内に知っている範囲でも7軒のインド料理屋があります（全国的にはもっと密度の濃い場所があるかもしれませんが）。岡崎市内のインド料理屋の特徴としては、なぜか料理人には、ネパール系の人々が多いということです。そのためインド料理といってもネパール系の味が多いです。料理人が変わると味が変わるため、店によっては日によって全然違う味になっていたりするのもある意味、魅力の一つです。ベジタリアンのインド系の研究者の来訪に備えて、ベジタリアン向けのメニューがあるインド料理屋をいくつか知っておくと便利です（うちのラボでは今まで3回の来訪ありました）。駅前のインド料理屋ではスパイス類もスーパーなどより格安で購入できるので、長期滞在のインド系研究者には教えておくと喜ばれます。常連になると、いろいろと面白い情報（腰痛の民間療法とか変な言葉とか）を教えてくれるのも魅力です。岡崎にお越しの際には、一度、足を運んでみてはいかがでしょうか。

取り留めのない文章になってしまいましたが、最後に、ぜひ分子研で最良の研究生活を楽しんでください。では。

E V E N T R E P O R T

平成20年度前期学生セミナー

物理科学研究科機能分子科学専攻 5年一貫制博士課程3年 谷川 貴紀

総合研究大学院大学（以下、総研大）の博士後期課程にこの4月に編入した筆者にとって、総研大生としての初めての行事が入学式とこの学生セミナーであった。本セミナーは前年度入学生が企画する「学生による学生の為のセミナー」であり、これには全専攻の新入生及びスタッフが集まる為、バラエティー豊かな人材で構成され個性に溢れた内容となっていた。

今年度の本セミナーは「Wa」という言葉をキーワードに「我」「話」「和」という3つのテーマが用意された。「我」は自分の専門を異分野の者（以下、他者）

にわかるように説明するという自己表現のスキルが、「話」は自分と他者の間に生ずる知識の溝を配慮し協調し合うという相互理解のスキルが各々求められた。また、「和」は他者同士で新しい科学の可能性を探るというセッションであった。

筆者は本セミナーを受講して、研究者としての考え方や在り方を改めて考えさせられ、有意義な時間を過ごせた。「我」というテーマでは他者に自分の専門を簡潔に理解させた上で興味を持たせる話術の重要性を、「話」では他者と接するにあたり自分の専門外の知識を

持つことの重要性を各々考えさせられた。「和」では新しい科学を発掘し付加価値を生み出すには自力だけでは困難であり、他者とバランスのとれた幅広い知識を持ち合い歩み寄ることでその可能性を感じた。

本セミナーで得た経験を今後の研究生活に活かすことでより精進していきたい。

Takanori Tanikawa

兵庫県立大学物質科学研究科修士課程修了後、平成20年に総合研究大学院大学物理科学研究科に編入。分子科学研究所極端紫外光研究施設加藤グループにて、新方式の短波長自由電子レーザー光源の研究開発に従事している。



物理科学研究科機能分子科学専攻 5年一貫制博士課程2年 小野木 寛

4月2日の入学式に続き、今年も平成20年度学生セミナーが開催されました。今年のテーマは「Wa」。これは漢字の「我、話、和、輪」を意味し、「我を表現し、仲間と話し合い、力を和せて、分野を越えた大きな輪を創って欲しい」という願いが込められています。

始めに、国立科学博物館の小川義和先生より、サイエンスコミュニケーションについてご講演いただきました。つづいて一風変わった自己紹介を行いました。他分野の人に自分の専門を伝え、理解してもらうのは予想以上に困難で、もどかしさを感じた新入生も少なくな

かったようです。

夕食後には、美容整形や携帯電話など、身近で一般的なテーマについて班ごとに議論し、その内容を4コマ漫画で発表してもらいました。出来上がった作品は、説得力がある上に個性的で、会場には笑いが絶えませんでした。

最後に、言語脳科学を研究されている酒井邦嘉先生より、他分野へ進出する喜びや、苦勞についてご講演いただきました。それにつづき各班で、班員の専門を融合したプロジェクトを立案し、その内容を発表してもらいました。学問の枠にとらわれない自由な発想が

生まれ、分野を越えて一つの目標に向かう事を体験できました。

私たち実行委員にとっても、このセミナーを創りあげるうえで、いつしか自分たちの中に大きな「Wa」ができ、とてもよい経験であると共に、大切な思い出になりました。

Satoru Onogi

名古屋大学理学部化学科を卒業後、平成19年に総合研究大学院物理科学研究科機能分子科学専攻へ入学、現在5年一貫制博士課程2年。分子スケールナノサイエンスセンター櫻井グループにて、非平面共役分子ハツキーボウルのひとつ「スマネン」に、窒素や酸素などの「ヘテロ原子」を導入する研究に取り組んでいる。





## 冬の学校

物理科学研究科構造分子科学専攻 5年一貫制博士課程4年 北野 健太

私は修士課程1年の時から計3回冬の学校に参加しました。最初の年は、全日程がほぼ2人の講師による授業で構成され、時間をかけて基礎的な内容を重点的に説明されていました。学会やシンポジウムの講演とは異なり、まさに“学校の授業”という印象で感銘を受けたのを良く覚えています。年々スタイルは変わってきていますが、“学校”的なエッセンスが引き継がれていて、例えば今年のカリキュラムでは選択受講制の講義が良かったと思います。受講の様子に関しては、私も含めて少

し消極的な印象を受けました。各国の生徒が集まって同じ授業を受けることができる貴重な機会ですので、受講生がもっと積極的に発言し、生徒間のディスカッション等が活発に行われればより良い授業になると思います。

授業以外での国際交流に関しては、毎年参加される？ お決まりのメンバーもいて、また去年、今年と担当研究室だったこともあり、知り合いをたくさんつくることができました。その中の数人とは時々研究経過などを連絡し合っており、今後も互いに影響を与

え合える仲にできればいいなと考えています。ちなみに、3年前に知り合ったタイの学生は、3人中2人がアメリカ留学中、一人は今夏オーストリアに留学予定とのことで、「やるなあ！」と一方的に刺激を与えてもらっている状況です。私も負けられないようがんばります。

## Kenta Kitano

京都大学大学院理学研究科化学専攻修士課程を修了後、平成19年に総合研究大学院大学構造分子科学専攻入学、現在博士課程2年。光分子科学研究領域光分子科学第一研究部門大島グループで、分子の回転波束制御に関する研究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 5年一貫制博士課程4年 Md. Abu Sayed

The Academic exchange sessions FY2007 held on 18<sup>th</sup> march 2008, at Shonan Village Center, Hayama. About 35 *Sokendai* students, including former students joined in the exchange session from different countries of Asia and Europe. On the day in lecture season Dr. Riikka Lansialmi (Head of the Japanese Language section, Dept. of Japanese & Korean studies, Leiden University, The Netherlands) talked about language, economy and globalization, and Prof. Zhenfeng Xi (College of Chemistry, Peking University, China) presented his present research activity. They also

shared their memorable *SOKENDAI* life with us.

In separate meeting, I attended Dr. Akira Kinjo presentation, titled “Bioinformatics of protein structure”. In this season, *SOKENDAI* president Dr. Kodaira Keiichi also joined with us. Dr. Akira Kinjo in his lively presentation, he talked about his research activity from graduate study to present day. It was difficult to understand the computational technique for protein study in his lecture, although my work is relating to protein.

In exchange reception, we talked about poster and exchange

our ideas as well as research experience. The academic exchange sessions also make a platform in social communications among students. I was very happy to make some new friends in this day.

It was a short program, but it was very helpful for mental growth of young scientists. Finally, I would like to thank *SOKENDAI* authority to make such exchange sessions.

## Md. Abu Sayed

I joined Prof. Urisu group as a doctoral student in Oct. 2005. For my graduate study, I am constructing a new IR system for observing adsorbed biomaterials on solid surfaces under water.



総合研究大学院大学 <http://www.soken.ac.jp/>

総合研究大学院大学（総研大）は1988年に、全国の大学共同利用機関を基盤機関として、新しい理念と組織の下に創設された博士課程だけを有する大学院大学です。本部を神奈川県葉山町に置き、学生のみならず研究者自身の総合性と学際性を高めることを目指して、学生セミナー、国際シンポジウム、共同研究等々のユニークな活動を本部で行い、平素の授業や研究活動は各基盤研究機関において行っています。



## 総研大生受賞者紹介

**陳 龍**（物理科学研究科構造分子科学専攻）

### 日本化学会第88回春年会において学生講演賞を受賞

総合研究大学院大学構造分子科学専攻博士課程の陳龍君が日本化学会第88回春年会において、学生講演賞を受賞した。日本化学会第88回春年会は去る3月26日から30日までの5日間、立教大学池袋キャンパスで開かれた。

日本化学会年会「学生講演賞」は発表内容、プレゼンテーション、質疑応答などにおいて優れた講演で、講演者の今後の一層の研究活動発展の可能性を有すると期待されるものに対して贈呈するものである。

今回の受賞対象となった陳君の発表は、『新規 $\pi$ 共役多核シフ塩基錯体(II)：自己集積化によるナノ構造の構築と機能』と題するものであり、 $\pi$ -共役系で連結した新規多核金属錯体の合成および自己集積化を報告したものである。陳君は、種々

の $\pi$ -共役系をコアとして持つ、サイズやモルフォロジー、金属の数などの異なる一連の共役ディスク状多核金属錯体を合成した。同じモルフォロジーを有するにもかかわらず、異なる集積化能を示すと共に、形態の全く異なるナノ構造体を与えることを見いだした。さらに、形成されたナノ構造体の発光特性及び磁気的な相互作用を検討し、ナノ構造体ならではの光・磁気相互作用を見いだした。今回の研究成果は、金属錯体の新しい機能の開拓へとつながると期待される。本受賞を契機に、同君のより一層の成長を期待している。

（物質分子科学研究領域・分子機能研究部門 江 東林・主任指導教員）



**沼尾 茂悟**（物理科学研究科構造分子科学専攻）

### ナノ学会第6回大会若手優秀発表賞を受賞

総合研究大学院大学構造分子科学専攻博士課程2年の沼尾茂悟君がナノ学会第6回大会若手優秀発表賞を受賞しました。受賞題目は、「新しい炭素材料：Mesoporous Carbon Nano Dendrite」です。

今回の受賞研究は銀アセチリドナノ樹状体結晶を急激に200℃まで昇温し、ナノスケールの発熱爆発反応によって結晶の部分温度を2200℃以上にし、銀を突沸蒸発させてグラファイト性の多孔性炭素ナノ樹状体を生成させ、この新しい炭素樹状体がBET表面積1500m<sup>2</sup>/cm

以上を示し様々な電極材料や触媒担体としての機能を持たせることに成功したものです。さらに、大電力用スーパーキャパシタとしての性能を発現する事も示しました。このユニークなナノ材料の開発が高く評価されました。

なお、同じ研究室の十代健助教もこの賞を受賞しており、同一研究室から2名の若手優秀発表賞受賞者が出た事が懇親会では話題となりました。

（物質分子科学研究領域・電子構造研究部門 西 信之・主任指導教員）



## 平成19年度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）

氏名	博士論文名	付記する専攻分野	授与年月日
張 振 友	Fabrication of incubation type planar ion-channel biosensor using silicon-on-insulator substrate	理 学	H20. 3.19
KAFLE, Bhim Prasad	Study of Photoionization and Dissociation Dynamics of Fullerene C <sub>60</sub>	理 学	H20. 3.19
白 鳥 和 矢	Finite-temperature density functional approach to electrochemical reaction	理 学	H20. 3.19
福 嶋 貴	Synthesis, Properties and Photochemical Multi-electron Reduction of Ruthenium Complexes Having NAD <sup>+</sup> Analogous Ligands	理 学	H20. 3.19
河 尾 真 宏	Synthesis and Self-organization of The Giant Porphyrin Wires	理 学	H20. 3.19

## 物理科学研究科（機能分子科学専攻）

氏名	博士論文名	付記する専攻分野	授与年月日
PONSECA Jr. Carlito	Development of Integrated Optics for the first Principle Analysis of the terahertz Spectrum of Some Biomolecules	理 学	H20. 3.19

## 総合研究大学院大学平成20年度（4月入学）新入生紹介

## 平成20年度（4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	飯 塚 拓 也	極端紫外光研究施設	強相関物質および薄膜の電子状態の研究
	塚 原 侑 平	生命・錯体分子科学研究領域	二酸化炭素の電気化学的多電子還元反応の構築
	藤 原 邦 代	生命・錯体分子科学研究領域	プレーナー型パッチクランプによる神経細胞解析素子の開発
機能分子科学	清 田 泰 臣	理論・計算分子科学研究領域	3D-RISM 法による生体分子の物質輸送に関する理論的研究
	水 上 涉	理論・計算分子科学研究領域	局在化軌道を用いた大規模高精度分子理論の開発
	谷 川 貴 紀	極端紫外光研究施設	新方式の放射光源の開発研究

## 平成20年度（4月入学）5年一貫制博士課程新入生

専攻	氏名	所属	研究テーマ
構造分子科学	遊 佐 仁 暁	物質分子科学研究領域	新規 $\pi$ 共役系の設計と合成
機能分子科学	杉 浦 晃 一	物質分子科学研究領域	分子性導体の示す特異な電子状態を磁気共鳴（ESR, NMR）を用いて研究する
	小 林 昂	生命・錯体分子科学研究領域	ピリジン環を有するピンサー型錯体を触媒とする不斉合成の開発

## 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(後期)分子科学フォーラム

回	開催日時	講演題目	講演者
第71回	2007年11月14日	ナノテクノロジーで生命を測る	馬場 嘉信
第72回	2008年2月13日	星空に巡らす化学の夢	山本 智
第73回	2008年2月20日	分子が拓く物性革命	高橋 利宏
第74回	2008年3月12日	冷却原子で観る量子論の不思議	久我 隆弘

### ■平成19年度(後期)分子研コロキウム

回	開催日時	講演題目	講演者
第802回	2007年11月28日	高強度数サイクルレーザーパルスによる原子・分子の超精密実時間イメージング	森下 亨
第803回	2007年12月12日	Ultra-fast spectroscopy to study the mechanism of photoreceptor activation	Klaas Jan Hellingwerf
第804回	2007年1月16日	$\alpha$ ヘリックス蛋白質中での振動子ポーラロンによる生体エネルギー伝播と量子音波	Tomio Petrosky
第805回	2008年1月30日	溶媒分子の粒子性と巨大分子間相互作用	秋山 良
第806回	2008年2月27日	分子研のアーカイブズ活動について	木村 克美
第807回	2008年3月19日	Molecular Electronics with TTF Derivatives	Concepció Rovira Angulo
第808回	2008年3月26日	量子コヒーレンスの断熱操作と超短パルス光発生への応用	桂川 眞幸

## 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
19.11.30	初井 宇記	辞職	財団法人高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門 研究員	光分子科学研究領域 光分子科学第 三研究部門 助教	
19.12.31	長澤 賢幸	辞職	信越化学工業株式会社 新機能材料 技術研究所 所員	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 助教	
19.12.31	大石 修	辞職	日本電子データム株式会社	技術課 学術支援班 学術支援技術 係 技術職員	
19.12.31	八木 創	退職	光分子科学研究領域 光分子科学第 三研究部門 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	
19.12.31	角山 寛規	辞職	北海道大学 触媒化学研究センター 博士研究員	物質分子科学研究領域 電子構造研 究部門 研究員	
19.12.31	七分 勇勝	辞職	北海道大学 触媒化学研究センター 博士研究員	物質分子科学研究領域 電子構造研 究部門 研究員	
20. 1. 1	大迫 隆男	採用	生命・錯体分子科学研究領域 錯体 触媒研究部門 助教	日本学術振興会 海外特別研究員 (米国ワシントン大学にて研究従事)	
20. 1. 1	八木 創	採用	光分子科学研究領域 光分子科学第 三研究部門 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	

# 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
20. 2. 1	野中 大輔	採用	岡崎統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域 研究員	九州大学 大学院システム生命科学 府 人材養成ユニット 特別研究員	
20. 2. 1	高橋 一暢	所属変更	岡崎統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域 研究支援員	分子科学研究所 研究支援員 (RA)	
20. 2.16	深津 恵子	採用	生命・錯体分子科学研究領域 生体 分子情報研究部門 技術支援員		
20. 3. 1	阿達 正浩	採用	極端紫外光研究施設 光源加速器開 発研究部門 助教	日本原子力開発研究機構 高崎量子 応用研究所 博士研究員	
20. 3. 1	戸谷 明子	採用	計算科学研究センター 事務支援員		
20. 3.10	伊藤 暁	辞職	米国 国立衛生研究所	計算科学研究センター 専門研究職 員	名古屋大学 勤務
20. 3.30	梶田 理恵	退職		理論・計算分子科学研究領域 専門 研究職員	
20. 3.30	生田 靖弘	退職		理論・計算分子科学研究領域 専門 研究職員	
20. 3.30	三上 泰治	退職	名古屋大学 大学院工学研究科 研 究員	理論・計算分子科学研究領域 専門 研究職員	
20. 3.30	安藤 嘉倫	退職	名古屋大学 大学院工学研究科 研 究員	理論・計算分子科学研究領域 専門 研究職員	
20. 3.30	江 宗乙	退職		生命・錯体分子科学研究領域 生体 分子情報研究部門 技術支援員	
20. 3.30	赤木 史生	退職	山口東京理科大学 基礎工学部 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	
20. 3.30	中岡 由美子	退職		計算科学研究センター 特定事務職 員	
20. 3.31	根岸 雄一	辞職	東京理科大学 理学部第一部 講師	物質分子科学研究領域 電子構造研 究部門 助教	
20. 3.31	竹内 雅宜	辞職	東京大学 大学院理学系研究科 特 任助教	生命・錯体分子科学研究領域 生体 分子情報研究部門 助教	
20. 3.31	笹川 拡明	辞職	日本電子株式会社	分子スケールナノサイエンスセンタ ー 先導分子科学研究部門 助教	
20. 3.31	加藤 清則	定年退職	名古屋大学 物質科学国際センター COE 特任准教授	技術課長	
20. 3.31	石村 和也	辞職	株式会社 豊田中央研究所 客員研 究員	技術課 学術支援班 学術支援係 技術職員	
20. 3.31	矢ヶ崎 琢磨	退職	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	理論・計算分子科学研究領域 計算 分子科学研究部門 研究員	
20. 3.31	古屋 亜理	退職		物質分子科学研究領域 電子構造研 究部門 研究員	
20. 3.31	比田 直輝	退職	東京大学 大学院理学系研究科 特 別研究員	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 (非常勤研究員)	
20. 3.31	大江 洋平	退職		生命・錯体分子科学研究領域 錯体触 媒研究部門 研究員 (非常勤研究員)	
20. 3.31	渡邊 孝仁	退職		生命・錯体分子科学研究領域 錯体物 性研究部門 研究員 (非常勤研究員)	
20. 3.31	島田 美帆	退職	高エネルギー加速器研究機構 物質 構造科学研究所 博士研究員	極端紫外光研究施設 研究員 (非常 勤研究員)	
20. 3.31	金安達 夫	退職	九州シンクロトロン光研究センター 研究員	極端紫外光研究施設 研究員 (非常 勤研究員)	
20. 3.31	日野 貴美	退職	大阪大学 大学院理学研究科 非常 勤研究員	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	
20. 3.31	神谷 育代	退職	JSR 株式会社	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 (非常勤研究員)	
20. 3.31	森田 明弘	兼任終了	(東北大学 大学院理学研究科 教 授)	理論・計算分子科学研究領域 計算 分子科学研究部門 教授 (兼任)	

# 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
20. 3.31	佃 達 哉	兼任終了	(北海道大学 触媒科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 教授(兼任)	
20. 3.31	小 澤 岳 昌	兼任終了	(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 教授(兼任)	
20. 3.31	浅 井 美 博	客員終了	(産業技術総合研究所 計算科学研究部門 基礎解析研究グループリーダー)	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 客員教授	
20. 3.31	秋 山 良	客員終了	(九州大学 大学院理学研究院 准教授)	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 客員准教授	
20. 3.31	林 倫 年	客員終了	(国立台湾大学 凝態科学研究中心 副研究員)	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 客員准教授	
20. 3.31	北 島 正 弘	客員終了	(物質・材料研究機構 材料研究所反応・励起のダイナミクスグループディレクター)	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員教授	
20. 3.31	曾 田 一 雄	客員終了	(名古屋大学 大学院工学研究科教授)	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員教授	
20. 3.31	馬 場 正 昭	客員終了	(京都大学 大学院理学研究科 准教授)	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員准教授	
20. 3.31	前 田 大 光	客員終了	(立命館大学 理工学部 准教授)	物質分子科学研究領域 物質分子科学研究部門 客員准教授	
20. 3.31	北 川 宏	客員終了	(九州大学 大学院理学研究院 教授)	生命・錯体分子科学研究領域 生命・錯体分子科学研究部門 客員教授	
20. 3.31	片 山 睦	客員終了	(理化学研究所 ゲノム科学総合センター 遺伝子構造機能研究グループ チームリーダー)	生命・錯体分子科学研究領域 生命・錯体分子科学研究部門 客員准教授	
20. 3.31	近 藤 満	客員終了	(静岡大学 機器分析センター 准教授)	生命・錯体分子科学研究領域 生命・錯体分子科学研究部門 客員准教授	
20. 3.31	加 藤 晃 一	客員終了	(名古屋市立大学 大学院薬学研究科 教授)	分子スケールナノサイエンスセンター 先導分子科学研究部門 客員教授	
20. 3.31	野 田 真 史	退職	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 専門研究職員	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 研究員	
20. 3.31	禿 子 瞳	退職		計算科学研究センター 事務支援員	
20. 4 .1	平 本 昌 宏	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 教授	大阪大学 大学院工学研究科 准教授	
20. 4 .1	倉 重 佑 輝	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 助教		
20. 4 .1	山 根 宏 之	採用	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門 助教	日本学術振興会 特別研究員(名古屋大学にて研究従事)	
20. 4 .1	齊 藤 碧	採用	技術課 機器利用技術班 機器利用技術一係員		
20. 4 .1	長 屋 貴 量	採用	技術課 計算科学技術班 計算科学技術二係員		
20. 4 .1	榮 慶 丈	採用	理論・計算分子科学研究領域 専門研究職員	広島大学 大学院理学研究科 特任助教	名古屋大学 勤務
20. 4 .1	竹 村 和 浩	採用	理論・計算分子科学研究領域 専門研究職員	東京大学 分子細胞生物学研究所 産学官連携研究員	東京大学 勤務
20. 4 .1	小 林 正 人	採用	理論・計算分子科学研究領域 専門研究職員	日本学術振興会 特別研究員(早稲田大学にて研究従事)	早稲田大学 勤務
20. 4 .1	吉 留 崇	採用	理論・計算分子科学研究領域 専門研究職員	京都大学 エネルギー理工学研究所 博士研究員	京都大学 勤務
20. 4 .1	高 見 利 也	採用	理論・計算分子科学研究領域 専門研究職員	九州大学 情報基盤研究開発センター 特任准教授	九州大学 勤務
20. 4 .1	原 田 洋 介	採用	光分子科学研究領域 光分子第一研究部門 研究員	東京工業大学 資源化学研究所 特別研究員	
20. 4 .1	山 本 勇	採用	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 研究員		
20. 4 .1	岩 瀬 文 達	採用	物質分子科学研究領域 電子物性研究部門 研究員(非常勤研究員)		

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
20. 4 . 1	KIM,Yong Hoon	採用	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	韓国 Hankuk University for Foreign Studies 非常勤講師	
20. 4 . 1	浜坂 剛	採用	生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門 研究員(非常勤研究員)		
20. 4 . 1	今 宏 樹	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(非常勤研究員)		
20. 4 . 1	近藤 直子	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 事務支援員		
20. 4 . 1	野田 真史	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 専門研究職員	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 研究員	
20. 4 . 1	矢ヶ崎 琢磨	採用	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	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 研究員	
20. 4 . 1	加藤 晃一	採用	岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 教授	名古屋市立大学 大学院薬学研究科 教授	
20. 4 . 1	眞壁 幸樹	採用	岡崎統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域 助教	米国 University of Chicago 博士研究員	
20. 4 . 1	石谷 隆広	採用	計算科学研究センター 専門研究職員	富士通株式会社	
20. 4 . 1	神谷 由紀子	採用	岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 研究員(非常勤研究員)		
20. 4 . 1	加藤 晃一	勤務命令	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門 教授	(岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 教授)	
20. 4 . 1	眞壁 幸樹	勤務命令	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門 助教	(岡崎統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域 教授)	
20. 4 . 1	川口 博之	転出	東京工業大学 大学院理工学研究科 教授	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 准教授	
20. 4 . 1	山田 篤志	転出	名古屋大学 大学院工学研究科 助教	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 助教	
20. 4 . 1	田中 啓文	転出	大阪大学 大学院理学研究科 助教	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 助教	
20. 4 . 1	岡崎 進	転出	名古屋大学 大学院工学研究科 教授	計算科学研究センター 教授	
20. 4 . 1	永瀬 茂	併任	理論・計算分子科学研究領域研究主幹	(理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 教授)	
20. 4 . 1	平田 文男	併任	計算科学研究センター長	(分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 教授)	
20. 4 . 1	平田 文男	併任解除	(理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 教授)	理論・計算分子科学研究領域研究主幹	
20. 4 . 1	岡崎 進	兼任委嘱	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 教授(兼任)	(名古屋大学 大学院工学研究科 教授)	
20. 4 . 1	相田 美砂子	客員委嘱	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 客員教授	(広島大学 大学院理学研究科 教授)	
20. 4 . 1	西野 正理	客員委嘱	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 客員准教授	(物質・材料研究機構 計算科学センター 主任研究員)	
20. 4 . 1	北尾 彰朗	客員委嘱	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 客員准教授	(東京大学 分子細胞生物学研究所 准教授)	
20. 4 . 1	緑川 克美	客員委嘱	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員教授	(理化学研究所 中央研究所 緑川レーザー物理工学研究室 主任研究員)	
20. 4 . 1	富永 圭介	客員委嘱	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員教授	(神戸大学 分子フォトサイエンス研究センター 教授)	
20. 4 . 1	雨宮 健太	客員委嘱	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員准教授	(高エネルギー加速器研究機構 物質研究所 主幹研究員)	
20. 4 . 1	阿波賀 邦夫	客員委嘱	物質分子科学研究領域 物質分子科学研究部門 客員教授	(名古屋大学 物質科学国際研究センター 教授)	
20. 4 . 1	伊東 忍	客員委嘱	生命・錯体分子科学研究領域 生命・錯体分子科学研究部門 客員教授	(大阪市立大学 大学院理学研究科 教授)	

# 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
20. 4. 1	長谷川 美 貴	客員委嘱	生命・錯体分子科学研究領域 生命・錯体分子科学研究部門 客員准教授	(青山大学 理工学部 准教授)	
20. 4. 1	高 橋 聡	客員委嘱	生命・錯体分子科学研究領域 生命・錯体分子科学研究部門 客員准教授	(大阪大学 蛋白質研究所 准教授)	
20. 4. 1	鈴 井 光 一	昇 任	技術課長	技術課 機器開発技術班長	
20. 4. 1	澤 昌 孝	配置換	技術課 計算科学技術班 計算科学技術一係員	計算科学技術班 計算科学技術二係員	
20. 4. 1	岩 橋 建 輔	配置換	技術課 計算科学技術班 計算科学技術二係員	計算科学技術班 計算科学技術一係員	
20. 4. 6	磯 貝 美 穂	退 職		岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 事務支援員	
20. 4.16	永 田 武 史	採 用	理論・計算分子科学研究領域 専門研究職員		産業技術総合研究所勤務
20. 4.16	米 澤 東 夫	採 用	計算科学研究センター 専門研究職員	日立製作所	
20. 4.30	松 田 晃 孝	退 職	スウェーデン王国 Stockholm University, Department of Physics, 博士研究員	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門 研究員	
20. 4.30	中 島 彩	退 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 事務支援員	
20. 5. 1	森 田 将 人	採 用	理論・計算分子科学研究領域 専門研究職員		慶応義塾大学勤務
20. 5. 1	種 村 博 代	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	岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 技術支援員	
20. 5. 1	鈴 木 万里子	採 用	岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 技術支援員		
20. 5.15	坂 井 恭 子	辞 職		機器センター 事務支援員	
20. 5.16	山 口 拓 実	採 用	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門 助教	東京大学 大学院工学系研究科 技術補佐員	
20. 5.16	福 嶋 貴	採 用	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 研究員		
20. 5.16	中 川 信 代	所属変更	機器センター 事務支援員	分子制御レーザー開発研究センター 事務支援員	
20. 5.31	深 津 恵 子	辞 職		生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門 技術支援員	
20. 6. 1	石 田 豊	転 出	東京工業大学 大学院理工学研究科 助教	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 助教	
20. 6. 1	江 原 正 博	勤務命令	分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 教授	(計算科学研究センター 教授)	
20. 6. 1	池 滝 何 以	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 (非常勤研究員)		
20. 6. 1	江 原 正 博	採 用	計算科学研究センター 教授	京都大学 大学院工学研究科 准教授	



## 編集後記

分子研レターズ58をお届けします。本号では関一彦先生からご逝去後に原稿をいただく結果となりました。あまりにも早いご逝去に私自身もやるせない気持ちでいっぱいです。心よりご冥福をお祈り申し上げます。本号に関先生の原稿と追悼を掲載するにあたり、奥様の眞千子様・ご子息の眞一郎様・名古屋大学の犬内幸雄准教授ほかの方々にお世話になりました。この場でお礼申し上げます。

本号でも、巻頭言の大峯巖先生、レターズの関先生・野口宏先生からを中心に、分子研に対するいくつかの貴重なご提言を賜りました。レターズ・広報委員としては、大峯先生のお言葉をお借りすると、分子研が学問に対する熱情と柔軟性と強い意志によって、真の学問の府としてさらに大きく発展して行くためには、社会の深い共鳴と信頼を大切な支えとすることが必須であり、そのためにはより積極的な広報活動が必要であると改めて認識いたしました。

昨年より始まった共同利用研究ハイライトも本号では2編を掲載することができました。いずれも共同利用者の方々が分子研の特徴を存分に活かして達成されたすばらしい成果だと感じました。

分子研レターズでは皆様からのご投稿やご意見をお待ちしておりますので、よろしく願いいたします。最後になりましたが、ご多忙中にもかかわらずご執筆いただいた著者の皆様に深く感謝いたします。

本号編集担当 横山利彦

●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8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）  
横山利彦（本号編集担当）  
大迫隆男  
小杉信博  
櫻井英博  
平等拓範  
手老龍吾  
信定克幸  
眞壁幸樹  
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 株式会社コムラ

