

柳井毅准教授に2009年 Wiley-International Journal of Quantum Chemistry Young Investigator Awards

唯 美津木准教授に第11回守田科学研究奨励賞

香月浩之助教に第3回PCCP Prize

長坂将成助教に第25回(平成20年度)井上研究奨励賞

真壁幸樹助教に第2回(2009年)日本蛋白質科学会若手奨励賞

水谷文保氏に平成20年度日本化学会化学技術有功賞



理論・計算分子科学研究領域の柳井毅准教授が、2009年3月にアメリカ・ジョージア州で開催された理論・量子化学の分野で最も古い歴史をもつ国際学会 Sanibel Symposium (第49回)において、2009年 Wiley-International Journal of Quantum Chemistry Young Investigator Awards を受賞した。

柳井准教授は、分子の量子化学計算、

柳井毅准教授に2009年 Wiley-International Journal of Quantum Chemistry Young Investigator Awards

電子状態計算のための手法開発に取り組む若手研究者であり、本受賞はこれまでの研究の成果が評価されたものである。分子研では、共役有機・遷移金属分子に現れる複雑な電子状態を、大規模にそして今までにない高い精度と計算効率で記述する新しい多参照電子状態理論を開発し、その大型量子化学計算により、共役有機・遷移金属分子の化学的性質の解明に取り組んでいる。これらの研究対象の難解さは、共役有機分子の π 電子、また遷移金属のd電子に由来する擬縮退状態にあり、この擬縮退状態を支配する物理は、分子サイズに対して指数関数的に複雑化する強い電子相関であるため、既存

の手法では取り扱いに限界があった。柳井准教授の方法は、大きな自由度を効率よく扱える密度行列繰り込み群を基礎とする新しい理論手法に加えて、独自の正準変換電子相関理論を用いた電子状態理論の構築に基づき、これまでの限界を大きく超える強力な手法として大きな前進を遂げている。これらの研究成果のもとで、共役有機・遷移金属分子の大規模で複雑な電子状態が世界に先駆けて理論解析され、それに基づく新しい電子状態理論が開拓されることが期待される。今回の受賞を心からお祝いするとともに、今後のさらなる発展を期待したい。

(永瀬 茂 記)

唯 美津木准教授に第11回守田科学研究奨励賞

物質分子科学研究領域の唯美津木准教授が、大学婦人協会第11回守田科学研究奨励賞を受賞しました。受賞題目は、「表面を媒体とした高機能金属活性構造の創出と触媒反応機構のリアルタイム解析」です。

現代社会で汎用される多種多様な有用化合物の殆どが、固体触媒の存在下、人工的に大量合成されており、高活性・高選択性を担う固体触媒表面の合理的設計は、次世代の化学プロセスを支える重要

課題の一つです。このためには、固体表面上で高活性・高選択性を担う触媒活性構造を分子レベルで均質に作成する触媒表面の設計手法を持ち、また触媒反応が効率良く進行しているその場 (in-situ) で、また、物質変換が成される時間スケールで、表面の触媒活性構造がどのように働くか、そのダイナミックな構造変化を理解することが重要です。

唯美津木氏は、金属錯体の表面固定化法とその表面での選択的な構造変換法を



駆使して、固体表面上に均質な高活性触媒構造を作り分ける新しい触媒表面の分子レベル設計法を提案し、高い触媒機能を有する新型触媒を複数開発することに成功しました。例えば、最高難度触媒反

応であるベンゼンと酸素からのフェノール直接合成に世界最高の触媒性能を示す担持Reクラスター触媒を創り出し、ゼオライト表面で形成される高活性触媒活性構造を様々な表面構造解析手法により明らかにしました。また、大型放射光施設から供給される硬X線を利用したin-situ 時間分解XAFS法の開発研究にも

取り組み、エネルギー分散型DXAFSやQXAFS法の時間分解XAFS法を駆使して、一過性の単発反応過程において、時々刻々変化する触媒自身の動きや働きをリアルタイムで明らかにすることに成功しました。一連の時間分解触媒構造解析の研究により、物質変換における触媒自身の構造速度論という新しい概念を提案し、

次世代の触媒開発につながる分子レベルでの触媒構造情報を引き出しています。これらの研究業績は、次世代の高機能触媒の開発研究に大きなブレークスルーを与えるものとして、第11回守田科学研究奨励賞の受賞が決まりました。

(西 信之 記)

香月浩之助教に第3回PCCP Prize

光分子科学研究領域の香月浩之助教が、「Wave Packet Interferometry with Attosecond Precision and Picometric Structure」に関する業績で、第3回PCCP Prizeを受賞されました。本賞は、物理化学、光化学、理論化学、無機化学、錯体化学・有機金属化学、高分子化学、触媒化学、分析化学、電気化学、コロイド・界面化学、ナノテク・材料などPCCP (Physical Chemistry Chemical Physics) がカバーする研究領域で傑出した成果があり、将来の活躍が期待される若手研究者にRoyal Society of Chemistry, PCCP and Faraday Discussionから授与されます。

今回の授賞の対象となった研究では、気相中の孤立ヨウ素分子の電子励起状態

に発生させた2個の振動波束の干渉がくりだす時空間模様(量子カーペット)を100フェムト秒・数ピコメートルという分解能で可視化するとともに、2個の波束を発生させる2発のフェムト秒レーザーパルスの照射のタイミングを数百アト秒という高い精度で長時間安定に制御することで、量子カーペットを多彩にデザインすることに成功しました。これら一連の研究結果は、Science誌, Physical Review Letters誌, Physical Review A誌といった一流国際ジャーナルに発表され学術的に大きなインパクトを与えただけでなく、新聞各紙にも取り上げられ社会的にも大きな反響を集めました。

香月氏は現在、この高精度コヒーレント制御技術を応用して、強電場と相互作用



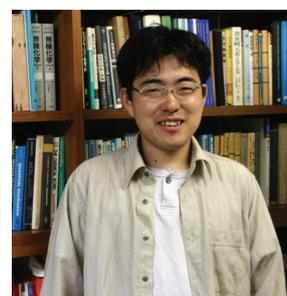
用する系におけるデコヒーレンスの制御や、緩和過程が無視できないバルク固体中における励起子のコヒーレント制御の研究を進めており、こちらでも素晴らしい成果が達成されつつあります。こうした一連の研究によって光科学の新しい地平が切り開かれるものと大いに期待されます。今回の表彰が、その第一歩を記す道標となることを祈ってやみません。心よりお祝い申し上げます。

(大森賢治 記)

長坂将成助教に第25回(平成20年度)井上研究奨励賞

井上科学振興財団による本奨励賞は理系全分野で過去3年の間に優れた博士論文を提出した若手研究者を対象として毎年30名に授与されるものです。今回、受賞した長坂将成助教(光分子科学研究領域)は、東京大学大学院理学系研究科博士課程において博士論文「X線吸収分光法とモンテカルロ法による金属表面上の触媒反応機構の研

究」を提出し、平成19年3月に学位を取得したのち直ちに助教として着任した新進気鋭の若手研究者です。対象となった研究内容は<http://www.ims.ac.jp/topics/2008/090113.html>をご覧ください。現在、長坂助教はクラスターや溶液の軟X線吸収分光や光電子分光に精力的に取り組んでおり、その一部はトピックスとして<http://www.ims.ac.jp/>



[topics/2008/090302.html](http://www.ims.ac.jp/topics/2008/090302.html)にも紹介されています。今後の更なる活躍を期待しています。

(小杉信博 記)



平成21年5月20日(水)から22日(金)まで、熊本全日空ホテルニュースカイで開催された第9回日本蛋白質科学会年会において、岡崎統合バイオサイエンスセンターの真壁幸樹助教が、蛋白質科学会若手奨励賞を受賞されました。日本蛋白質科学会では、2008年東京年会より若手研究者による優れた研究発表に対し、「若手奨励賞」と「ポスター賞」の表彰を行ってきました。毎年、3件程度の若手奨励賞と合計10件程度のポスター賞が授与されています。受賞

真壁幸樹助教に第2回(2009年)日本蛋白質科学会若手奨励賞

者は年会の懇親会席上で表彰され、学会から記念品と表彰状が授与されます。今回の2009年熊本年会においても10件の若手奨励賞シンポジウム発表者の中から、3名の若手奨励賞受賞者が選ばれました。

真壁氏の研究発表タイトルは「 β シート形成における主鎖水素結合の役割」です。これまで、隣り合った β ストランドの相対配置がどのように決定され、 β シートが形成されるかは、研究モデルシステムが欠如しているため、調べることが困難でした。真壁氏は、このチャレンジングな課題に、OspAとよばれる細胞表層蛋白質をモデルとして、取り組みました。OspA蛋白質の単層 β シート(SLB)は、疎水コアを持たず、 β シートの純粋な特性を調べるために最適の系です。SLBの構造に重要なター

ン部位に摂動を加え、構造がどのように変化するかを結晶構造解析を含め、詳細に検討しました。摂動により大きなシート構造の再編成が生じ、主鎖水素結合の数を最大にしているという事実を明らかにしました。この結果に基づき、OspAのドメイン間配置をデザインし、デザイン通りの構造が形成されることも証明しています。真壁氏は、主鎖水素結合に依存した β シートの形成は特異的な側鎖間相互作用を必要としないことから、アミロイドのような構造においても β シート構造が広く見出されるのではないかと推定しています。今回の受賞はこの優れた研究発表に対して与えられたものです。今後の真壁氏のますますの活躍を期待します。

(桑島邦博 記)



技術課計算科学技術班長の水谷文保氏が、「計算分子科学研究のための大型計算機運用管理技術と先進的計算機活用技術の開発」に関する業績により平成20年度日本化学会化学技術有功賞を受賞され、日本化学会第89春季年会において表彰されました。

今回の受賞対象となった水谷氏の業績を簡単に紹介いたします。分子研電子計算機センター(現計算科学研究

水谷文保氏に平成20年度日本化学会化学技術有功賞

センター)へ水谷氏の異動と前後して、センターにある汎用およびスーパーコンピュータのOSがそれまでのVOS3(大型機のOS)からUNIXへと変わり、また複数の異なる種類の計算機から構成された分散計算機環境へと変化しました。これらの変化への対応するために水谷氏は分散処理環境における障害監視システムを開発し、全国共同利用マシンの安定運用を実現してきました。また、ほぼ二年毎の繰り返される大仕事である汎用およびスーパーコンピュータのシステム更新においても、仕様策定からマシンの移行・導入・立ち上げ等の重要な役割を担うだけでなく、ジョブ投入環境、ジョブフロー監

視およびCPU負荷状況監視ソフトウェア等の提案・開発を進め、分子科学分野に安定で世界最高水準の計算環境を構築し全国の共同利用研究者に提供してきました。さらに、NAREGIプロジェクトにおいては、国内の産学官のナノサイエンス研究者に省エネルギー化を実現した安定な計算環境を提供し、最新グリッド環境の運用を通してグリッド実証研究に多大な貢献をしてきました。

また、水谷氏はwebの応用技術開発についてもインターネット普及当初から積極的に進めてきました。分子軌道計算の結果からブラウザを通じて高画質の分子・電子雲の3次元表示ツール

PGVの開発、センター利用のためのオンラインマニュアルや情報交換環境など共同利用の環境整備にも取り組み、それらを全国の研究者に公開してきました。最近では、多数のアプリケーションを連携させる変換ツールGIANTを開発し、マルチフィジクスに関わる研究

推進にも大きな貢献をしています。

このように、水谷氏は全国共同利用および産学官連携プロジェクトにおける「大型計算機の導入と安定した運用管理技術の開発」および「計算機の先進的活用技術の開発」を進め、我が国における理論・計算分子科学研究の推

進をしっかりと支えてきてくれました。

分子研および計算科学研究センターのメンバーとして、さらに施設利用している一ユーザーとして、今回の受賞を心よりお祝い申し上げますとともに、今後のさらなるご活躍を期待します。

(齊藤真司 記)

国際研究協力事業報告

01 若手研究者交流支援事業～東アジア首脳会議参加国からの招へい～

報告：分子スケールナノサイエンスセンター 准教授 櫻井英博

本事業は、安倍晋三内閣が2007年の第2回東アジア首脳会議（EAS）の時に提唱した、EAS参加国から5年間、毎年6,000人程度の青少年を日本に招へいする交流計画（JENESYSプログラム）に基づいたJSPSの事業である。次世代を担う若手研究者の計画的な交流により、アジアを中心とした国々との研究者間のネットワークの形成・強化、当該地域における高度人材育成及び科学技術コミュニティの形成等が期待される。対象国はASEAN加盟国（インドネシア、カンボジア、シンガポール、タイ、フィリピン、ブルネイ、ベトナム、マレーシア、ミャンマー、ラオス）で

あるが、全体の30%以内であれば、オーストラリア、ニュージーランド、インドを含めることが可能である。20年度後期より本プログラムは開始されたが、その初年度は計8件が採択され、その

うち化学分野は、分子研の主催する下記プロジェクト1件であった。また21年度前期に第二期の募集が行われ、計18件が採択され、規模が拡大された。

分子研が主催するプロジェクト課題

するための基礎研究基盤の確立は極めて重要である。本交流事業においては、環境・エネルギー問題に関わる基礎科学に関して、主として学位取得前後の若手研究者を広く招へいし、また

本交流事業後のフォローアップとしての共同研究体制を確立し、自国における基礎研究の継続を力強くサポートすることで、基礎科学の定着を推進することを目的としている。

20年度後期においては、応募がお盆前後の極めて短い期間のみであり十分な準備期間と協力体制が整わなかったため、まずは13研究室（うち分子研10、



名は『「環境・エネルギー」基礎研究基盤の確立』である。現代自然科学が解決すべき問題のひとつである環境・エネルギー問題において、東アジア諸国における自国での研究開発を可能に

所外3)を受入研究室としてスタートした。公募を原則とし、各候補者に対しresearch proposalおよび帰国後のfuture planの提出を求め、その妥当性や将来性等に関して審査することによ