

# 分子研レターズ

VOL. **61**  
 FEBRUARY 2010  
 ISSN 0385-0560

●レターズ

## 共同研究から見た分子科学研究所

関谷 博 [九州大学大学院理学研究院・教授]

●巻頭言

### 青年は大志を抱けるか

川合真紀 [東京大学・教授/理化学研究所基幹研究所・副所長]

●分子科学の最先端

### バッキーボウルの科学

櫻井英博 [分子スケールナノサイエンスセンター・准教授]

●共同利用研究ハイライト

### 高分解能レーザー分光による励起分子の構造とダイナミクス

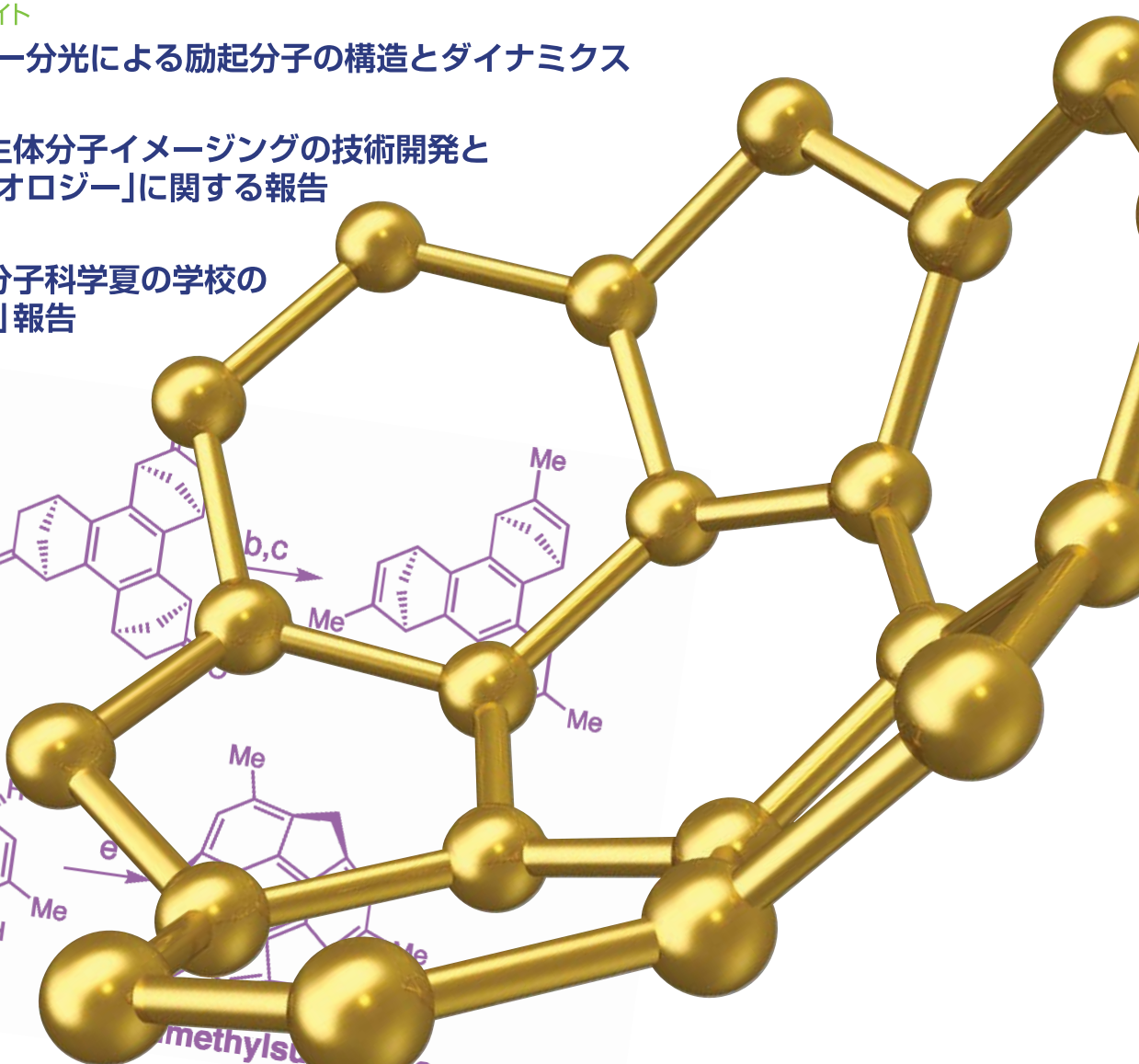
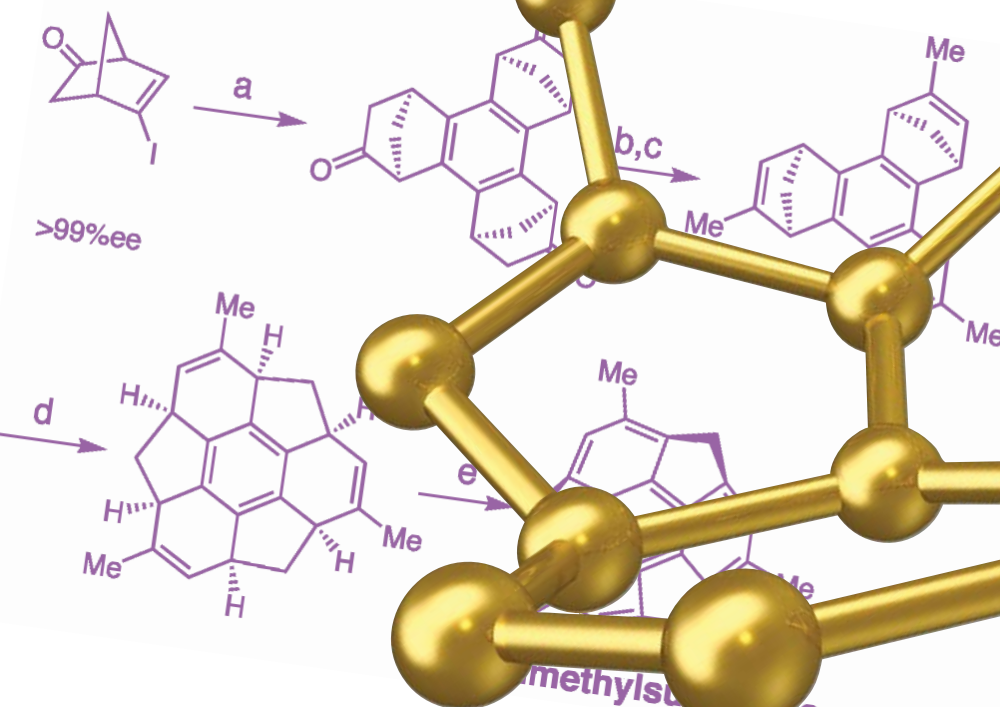
馬場正昭 [京都大学]

### 分子研研究会「生体分子イメージングの技術開発とシステムズバイオロジー」に関する報告

小澤岳昌 [東京大学]

### 若手研究会等「分子科学夏の学校の講義内容検討会」報告

田中 翠 [京都大学]



## 分子研レターズ

VOL. 61

## CONTENTS

分子研ホームページにて、本誌のバックナンバーをご覧になることができます。  
<http://www.ims.ac.jp/indexj.html>

## 巻頭言

## 01 青年は大志を抱けるか

● 川合眞紀 [東京大学・教授/理化学研究所基幹研究所・副所長]

## レターズ

## 02 共同研究から見た分子科学研究所

● 関谷 博 [九州大学大学院理学研究院・教授]

## 分子科学の最先端

## 04 バッキーボールの科学

● 櫻井英博 [分子スケールナノサイエンスセンター・准教授]

## IMSニュース

08 UVSOR Workshop on Low-Energy Photoemission of Solids using Synchrotron Radiation (LEPES 09)

(UVSOR国際ワークショップ「放射光を用いた固体の低エネルギー光電子分光」)

09 International Symposium on Chemistry and Material Scienc

10 第10回エクストリームフォトニクス研究会「凝縮系における量子の世界」

11 分子科学研究所一般公開2009

13 科学未来館と岡崎3研究所の協力協定

14 新所長の紹介

14 分子研実験棟耐震改修工事

15 第8回自然科学研究機構シンポジウム「脳が諸学を生み、諸学が脳を総合する」

16 受賞者紹介

22 国際研究協力事業報告

## IMSカフェ

27 OBの今 —— 渡辺芳人/天能精一郎

31 分子研を去るにあたり

32 外国人研究職員の印象記

33 新人自己紹介

## 分子研技術課

34 UVSORトップアップ運転に向けて——全周遮へい新規導入 林 憲志 [光技術班]

35 技術職員OBの今

## 共同利用研究

37 共同利用研究ハイライト

高分解能レーザー分光による励起分子の構造とダイナミクス 馬場正昭 [京都大学]

分子研研究会「生体分子イメージングの技術開発とシステムズバイオロジー」に関する報告 小澤岳昌 [東京大学]

若手研究会等「分子科学夏の学校の講義内容検討会」報告 田中 翠 [京都大学]

42 平成21年度(前期)共同利用研究実施状況

## @総研大

43 コラム —— 夏のドイツ派遣 飯塚拓也 [構造分子科学専攻]

44 イベントレポート

47 修了学生及び学位論文名

48 新入生紹介

## ■各種一覧

49 分子科学フォーラム・

分子研コロキウム開催一覧

50 人事異動一覧

# 青年は大志を抱けるか

川合 眞紀

東京大学 教授  
理化学研究所基幹研究所 副所長

平成20年はまさに変革の年でした。年の初めには米国のサブプライムローン問題に端を発し、世界経済が砂上の楼閣のように崩れ、実体のある物品・製品を産出する産業が実体不明のイメージナリーワールドの上に建っていたことに恐怖にも似た驚きを覚えました。我が国もまた、昨年、長年続いた自民党から民主党へと政権交代があり、今、科学研究や大学教育の運営が拠り所としている国の予算配分の考え方も大きく変わろうとしています。予算の査定（事業仕分け）のやり取りが、TVで全国放映される日が来るなんて、誰が予想したことでしょうか。定常状態にあると思われていた国の予算編成作業が、いとも簡単に崩されていく様は、小気味よくもあり、また、一方通行にも似た査定作業には、多くの賢明な国民は疑問をもったことも事実でしょう。

科学研究費補助金の総額は平成元年が526億円であったのに対し、平成22年度には2000億円にまで達し、競争的資金は確実に増加しています。まだ十分とはいえないまでも、間違いなく競争的資金の環境は改善されてきています。長倉三郎先生や井口洋夫先生が分子科学研究所設立に尽力された35年以上前とは異なり、科学研究の各分野に軸足を置く研究所も数多く存在するようになり、研究を推進する母体である研究機関も充実してきています。明治維新以来の大改革と言われた国立大学の独立法人化から6年が経とうとしています。大学の特徴を生かした自律した運営が可能になりましたが、この6年間は定率で運営交付金が減る中で競争的資金に3割の間接経費が付加されるようになり、運営費交付金の削減

を凌ぐ競争的資金を獲得しようと、申請作業に多くの時間が割かれるようになってきました。競争的環境を充実させ、実力あるものがより優遇されるシステムを作ろうという活性化施策としての効果は絶大だったといえましょう。

改革の時代であることには間違いはないのですが、なにか釈然としないものがあります。改革というのは本来、何か目標があって行われるものであるはずなのに、今、目の前で進んでいる「改革」には、微分値の議論はあるものの、目標とすべき到達点の像が見えていません。

こういう時代だからこそ我々が、科学者としての大志を明確に持つ意味があるのではないのでしょうか。そして、大きな夢のある科学を実践するためにどういう環境が必要かをナイーブに考えるべき時なのではないでしょうか。若手を対象とした競争的資金は益々充実の一途を辿ってはいますし、任期性やテニアトラックの導入などにより、長年丁稚奉公のような研究環境に置かれて、なかなか日の目を見ることのないという待遇は過去のものになりました。一方、機関経費（運営費交付金）が減額されて、競争的資金に人件費までもが移るにつれ、現実的には、若い研究者の雇用環境が不安定になってきています。次の時代を担う研究者がある程度安定した雇用環境の中で、厳しい中にもものびのびと研究できる環境を整えるべき時期が来ているようです。分子科学研究所においても以上の背景の中で今一層の存在感を期待しております。



かわい・まき

東京大学大学院新領域創成科学研究科教授、理化学研究所基幹研究所副所長、理学博士

1952年東京都出身。1980年東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程修了。1985～1988年理化学研究所研究員。1988～1990東京工業大学工業材料研究所（現応用セラミックス研究所）TDK寄附研究部門客員教授。1991～2004年理化学研究所主任研究員（表面化学研究室を主宰）。2004～東京大学大学院新領域創成科学研究科教授、理化学研究所主任研究員を兼務。2009～理研基幹研究所副所長を兼務。

第16回猿橋賞（1996）、日本表面科学会賞（2005）、文部科学大臣表彰（2008）、第64回日本化学会賞（2009）を受賞。

関谷 博 九州大学大学院理学研究院 教授

# 共同研究から見た 分子科学研究所



## せきや・ひろし

昭和54年 九州大学大学院理学研究科  
化学専攻博士課程修了

昭和55年 東京芝浦電気株式会社半導体事業部

昭和57年 九州大学生産科学研究所気相系  
反応中間体部門助手

昭和63年 九州大学機能物質科学研究所  
素子開発部門助手

平成4年～5年 フンボルト財団研究員  
(ミュンヘン工科大学 理論物理化学研究所)

平成7年 九州大学理学部化学科助教授

平成9年 九州大学大学院理学研究科化学専攻教授

平成12年 九州大学大学院理学研究院化学部門教授

平成18年～ 分子科学研究所運営会議委員

平成21年3月 日本化学会九州支部化学教育協議会議長

平成18年9月～ 分子科学会 幹事・運営委員、広報委員長

平成18年～ 分子科学研究所運営会議委員  
共同研究専門委員会委員

平成21年～ 分子科学研究所客員教授

1992年の冬の早朝、博多駅で新幹線に乗り、お昼前に東岡崎駅に到着した。さらに坂道を登って分子研に辿り着いた。吉原教授のグループとの共同研究のためである。分子研というと、今でも、まずあの急な坂道が目につかぶ。分子研に到着した日から数日間、PetekさんとBishtさんが深夜まで電子スペクトル測定を手伝ってくれた。九大の研究室では、Molectron社の窒素レーザー励起の色素レーザー1台が入って間もない頃、分子研の最新のレーザーシステム、真空装置や計測器を見学して設備の著しい違いに驚いた。吉原教授グループとの最初の共同研究以後、2001～2002年には藤井教授のグループとレーザー赤外分光の共同研究を行い、同時期から西教授のグループと赤外分光や高速時間分解分光の共同研究を継続的に行ってきた。これまで10数名の修士課程や博士課程の学生が共同研究に参加し、実験データの取得だけでなく、学外の研究者と接しながら、実験技術を学び、情報を得る良い機会となっている。装置が少ない自分のグループが15年もの長期間に渡り中断することな

く研究を継続できたのは、分子研の関係者や共同研究者の多大なるご支援のお陰である。この紙面をお借りして深く感謝申し上げたい。

共同研究においては、申請者が魅力ある課題の提案を行うことがまず重要であるが、特色ある装置の設置およびこれを最大限に引き出せるサポート体制なしに良い結果は期待できない。最近、分子研が設立当初の魅力を失っているとの感想を耳にする。最先端の設備をもつ大学の研究グループの増加に伴い、分子研の実験装置が“格段に突出している”印象は薄れてきている。しかしながら、必要十分な装置を設置できる大学の研究グループの割合は、全国的にみればわずかではないかと思う。自分の研究課題に近い光実験分野など分子研の実験設備と研究成果のレベルは、国際的にみて極めて高いものであり、全国共同利用研究機関としての魅力は、依然として保たれている。何よりも、共同研究における分子研関係者の絶え間ない努力に深く感謝を申し上げる。平成23年度には、分子研では4名の教授の定年に伴い、多く

のスタッフの入れ替わりが予定されている。新体制になった後、共同研究が更に発展することを期待している。

分子研には共同研究の他に、分子研研究会、課題研究など分子科学分野の研究をサポートする制度が充実している。残念ながら、平成21年度前期は分子研研究会の応募数が前年度に比べて激減した。その原因として、大学で様々な研究会やシンポジウムを開催するのに手が一杯のために、大学教員が分子研で研究会を開催する時間が無いことが挙げられている。実際、九大でも、毎週のように講演会や研究会が企画されており、教員はかなり多忙である。しかしながら、分子研研究会は、大学における研究会やシンポジウムとやや性格を異にする。テーマを絞って全国の研究者と共通の課題について積極的に討論できる絶好の機会である。また、旅費などの経費だけでなく、事務的な処理もサポートしてもらえ素晴らしい制度である。自分も過去2回分子研研究会の提案者となった。いずれの研究会においても、大いに刺激を受け、その後の研究生活に良い影響を及ぼしている。一方、研究会などの広報活動においては改善の余地がある。分子研のスタッフが、講演や講義で大学を訪問される機会に分子研の説明会を開催

する試みがあっても良い。九州大学理学研究院では、毎年、大学紹介と理学の啓蒙を兼ねて高校での出前授業が行われている。自分も毎年出前授業に参加している。今後、九州地区各全県の少なくとも一つの高校を出前講義で訪問したいと考えている。高校生は敏感に反応してくれるので、授業が楽しい。授業の後は新鮮な気分になり、教育の原点に戻った気分になる。大学での広報活動は、大学の実情に触れる良い機会かも知れない。

九州地区では、この10年間に、かつては分子構造総合討論会の常連であった実験分野の研究グループ数が減少している。さらに、物理化学系の博士課程の充足率が目立って低下している。分子科学分野の未来にとって深刻な問題である。最近、分子研に大学院生の入学制度ができたにも拘わらず、所内で若手研究者や学生と出会う機会がめっきり減った。分子研の運営会議では、大学院生の入学者が少ないことがしばしば話題となる。分子研の状況には大学の現状が反映されている。

学生の勧誘と言えば、20年程前に九大機能物質科学研究所の教授が「総合理工学研究科には学部生が配属されないの、博士課程の学生を増やすのは難しい。九州はアジア諸国に近いので、

アジア諸国から留学生を勧誘するしかない」と話されたことを思いだす。自分も修士課程進学希望者の勧誘のために、学内の他の学部を訪問したり、他大学に電話をしたりしたことがある。その後、工学部に新しい学科が新設され、総合理工学府の研究室に学部生が配属されるようになった。この経緯は、大学院の教育改革にエネルギーを集中するだけでは、未来を担う人材の養成に限界があることを示唆している。10年～20年の長期的プランに基づいて大学入試、学部・大学院に繋がる教育全体を見直す時期が来ている。

研究活動を軸としている分子研には、基礎研究における特色ある最先端分野の開拓を最も期待している。一方、分子科学分野の底辺が小さくなりつつある現在、大学（特に地方大学）の現状から離れて分子研の未来は考えにくい。この問題については、大学と分子研などの研究機関が連携して取り組むことが重要と思われる。

【連絡先】

〒812-8581  
福岡市東区箱崎 6-10-1  
九州大学大学院理学研究院化学部門  
TEL/FAX: 092-642-2574  
E-mail: sekiya@chem.kyushu-univ.jp

# バッキーボウルの科学

## 櫻井 英博

分子スケールナノサイエンス  
センター  
准教授



さくらい・ひでひろ

1989年東京大学理学部卒業

1994年同大学大学院理学系研究科博士課程修了、博士(理学)

東京大学大学院理学系研究科助手、学振海外特別研究員(ウイスコンシン大学)、大阪大学大学院工学研究科講師、助教授を経て、2003年10月より現職(併任、2004年4月より専任)

2007年10月よりJSTさきがけ研究員兼任

### はじめに(余談)

以前、佃さん(佃達哉現北海道大学教授)が分子研在籍時、「分子研レターズの執筆依頼が来たら、そろそろ出て行きなさい、というサインみたいなものだ」と言っていたのを思い出す。つまりそろそろ仕事もまとまった頃でしょ? ということなのだろうか。赴任当時から進めてきた佃さんとの共同研究である金属ク

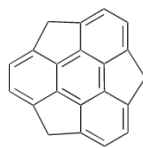
ラスター研究は、研究体制をスムーズに構築する上で有益であったばかりでなく、最近では本稿のバッキーボウルの研究にも密接に関わりはじめています。ただし既に佃さんのレターズもあるので(本誌50号)、本稿ではもうひとつのプロジェクトであるバッキーボウルの科学について述べる。

### バッキーボウル(Buckybowl)について

バッキーボウルとは、フラレン類の部分構造、あるいはナノチューブのキャップ構造に相当するお椀状共役化合物の総称で、ベンゼン環(6員環)と5員環からのみ成る非常にシンプルな構造である。単にフラレンやナノチューブなどの3次元 $\pi$ 共役炭素化合物の最小ユニット、あるいはモデル化合物としての興味だけではなく、お椀構造に立脚した独特の物性を示すことから、独自の研究が進められている。



コラヌレン

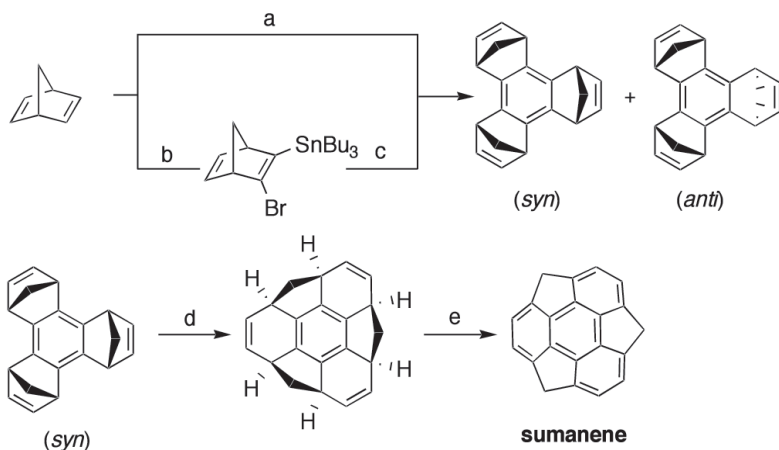


スマネン

一見単純な構造であるにもかかわらず、その高歪み構造が故にバッキーボウル合成は一般に困難である。 $C_5$ 対称基本バッキーボウルであるコラヌレンは、フラレン発見よりもはるか昔の1966年に初合成が達成されたが<sup>1)</sup>、合成に多段階を要し、簡便合成法が確立されたのは1990年代に入ってからである<sup>2)</sup>。一方、 $C_3$ 対称基本バッキーボ

ウル「スマネン」は、1993年に最初の合成法が提案されて以来<sup>3)</sup>多くの研究者の試みにもかかわらず、2003年まで合成は達成されなかった(Scheme 1)<sup>4)</sup>。これまで「平面構造の $\pi$ 共役化合物をいかにお椀状に曲げるか?」に焦点が向けられていた従来のアプローチとは反対に、はじめに有機合成が得意とする、3次元構造である「お椀構造を $sp^3$ 炭素を用いて構築」したのちに、「最後に芳香化する」アプローチが成功に結びついたと考えている。本第1世代経路は安価で入手容易な出発物質からわずか3~4段階で合成可能であり、多少でも合成化学のトレーニングを受けた人ならば容易に追試できるレベルである。

バッキーボウルは、単に学術的興味だけでなく、応用面でも注目を集めている。動的挙動を利用した分子マシン、スイッチ分子への応用の他、お椀構造に由来した積層構造を利用した、 $n$ 型電子移動材料としての応用などに大きな期待が集まっている<sup>5, 6)</sup>。そのため、機能発現を目的とした分子デザインを満足する合成技術の革新が求められている。



Scheme 1

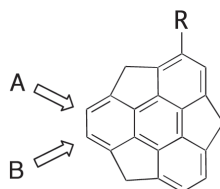
Conditions: a) BuLi, *t*-BuOK, BrCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>Br, THF, -78 °C to -45 °C then CuI, rt, 7% yield (*syn*:*anti* = 1:3). b) BuLi, *t*-BuOK, BrCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>Br, THF, -78 °C to -45 °C then Bu<sub>3</sub>SnCl, rt. c) Cu(2-C<sub>4</sub>H<sub>3</sub>SCO<sub>2</sub>), -20 °C to rt, 47% yield (2 steps; *syn*:*anti* = 1:3) d) cat. [P(C<sub>6</sub>H<sub>11</sub>)<sub>3</sub>]<sub>2</sub>RuCl<sub>2</sub>=CHPh, CH<sub>2</sub>=CH<sub>2</sub>, toluene, -78 °C to rt, 24 h, 30% yield. e) 2,3-Dichloro-5,6-dicyano-1,4-benzoquinone, toluene, 110 °C, 3 h, 70% yield.

## バッキーボウルの自在合成を目指して

コラヌレンの短工程合成が発表されたのは1992年、スマネンが2003年である。しかし、その後すぐにこれらバッキーボウルの化学が一気に伸張したかという点必ずしもそうではなく、コラヌレンを用いた応用研究が盛んになったのはつい最近のことである。その理由は「分子デザインに足るだけの官能化技術」の欠如である。芳香族化合物への置換基導入は古典的だが未だに問題の多いプロセスである。最も信頼性の高い反応は芳香族求電子置換反応であるが、位置選択性の点で問題がある。例えば、コラヌレンの10カ所ある最外殻芳香環上に複数の置換基を完全に位置を特定して導入するのは困難である。しかし、五置換体の位置選択的の合成法が確立されて以後<sup>7)</sup>、置換基導入による積層構造の制御<sup>8)</sup>など、一気に多くの発展研究が報告され始めている<sup>9)</sup>。

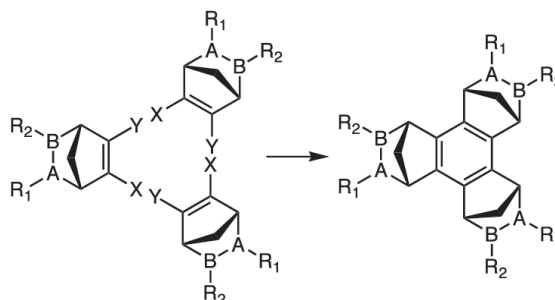
スマネンに関して言えば、ベンジル位への置換基導入は極めて容易である<sup>5)</sup>一方、芳香環上への置換基導入において、右図のAとBの位置選択性を実現するのは極めて困難である。特に、C<sub>3</sub>

対称性を保持するためにはこの置換基導入の位置選択性の実現は不可欠であるが、残念ながら現代精密合成では高い一般性でこのA、B選択性を実現する手法は存在しない。



ならば、「後から導入するのが難しいのなら、はじめから導入すれば良い」、すなわち最初のノルボルナジエンの三量化のときにC<sub>3</sub>対称を保ったまま置換基を導入すれば全て解決する。そもそも、スマネン第1世代合成におい

て最ももどかしいステップは三量化反応であった。ラセミ体の中間体を経由する反応であるため、収率は低く、かつ必要とする*syn*体と、不必要な*anti*体の比は常に1:3となり、最大収率が25%を越えることはない(Scheme 1)。Scheme 2に示したように出発物質としてホモキラルなノルボルネン誘導体を用い、XとYで位置選択的にカップリングが進行すれば、望みの*syn*体のみが得られるだけでなく、生成物もホモキラル体である。このXとYの組み合わせも、できれば合成が容易であることが望ましい。そのような合成法はそれまで知られていなかったため、我々自ら開発する必要があった。

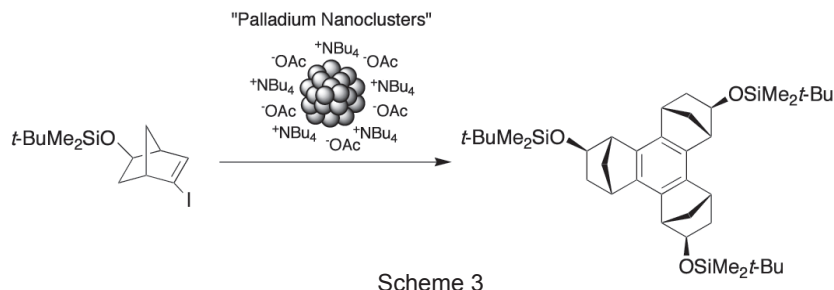


Scheme 2

以上の要請のもと、最終的に我々はパラジウムナノクラスター触媒条件を用いることで、対応するケトンから容易に誘導されるハロアルケンを用いた位置選択的環化三量化反応を開発することができた (Scheme 3)<sup>10)</sup>。本反応の開発により、出発原料にホモキラル体を用意する必要はあるものの、第1世代スマネン合成法の問題点であるノルボルナジエンの三量化における低収率と立体選択性の低さを解決することができた。

同様の反応を用いてトリケトンを合成し、熊田—玉尾カップリングによるメチル基の導入、三置換オレフィンのROM-RCMタンデムオレフィンメタセシス、そして低温での高速酸化芳香化反応を経て、 $C_3$ 対称に置換基が導入されたトリメチルスマネンの不斉合成にはじめて成功した (Scheme 4)<sup>11)</sup>。

バッキーボウルの特徴的な動的挙動のひとつにボウル反転があるが、「ボウルキラリティ」を持つバッキーボウルの場合、このボウル反転がラセミ化過程に相

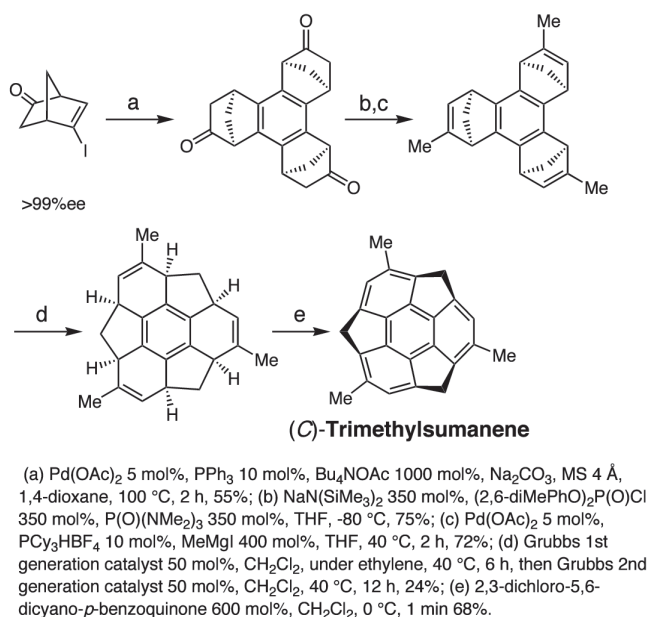


当する。そこで不斉合成したトリメチルスマネンを 10 °C において CD スペクトルを測定し、その減衰を観測したところ、半減期が 89 分と求められ、そこからボウル反転障壁が 21.6 kcal/mol と算出することができた。この値は DFT 計算で予測した値と一致しており、CD スペクトルがボウル反転エネルギーの測定手法として有効であることを示している (Figure 1)。

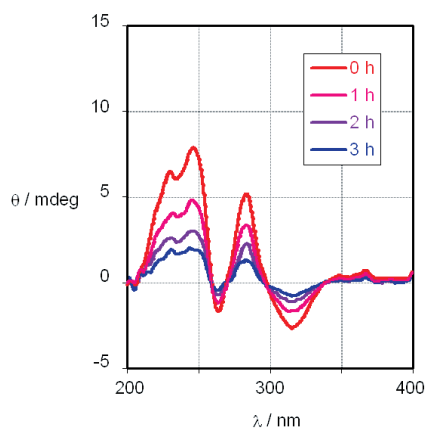
この新合成経路で最も重要なのは、「原理的に」スマネンの外環部の全ての位置に、 $C_3$ 対称性を保った形で置換基を導入することを可能にしている点である。本稿執筆時にはまだ論文発表前

なので詳細は述べないが、相当なバリエーションの官能化スマネンや、さらに  $\pi$ 系を拡張したバッキーボウルのデザインが可能になった。今後は、実際に物性を意識した分子のデザインとその合成が重要な課題となる。

ひとつ付記すると、Scheme 3 のハロアルケンの環化三量化反応を用いると、バッキーボウルだけでなく、様々な次元制御された  $C_3$ 対称ホモキラル分子を容易に合成することができる。これまで剛直構造を有した  $C_3$ 対称ホモキラル分子の合成法はあまりなかったため、ホスト—ゲスト化学や、新規配位子の設計などにも役立つものと期待されている<sup>12)</sup>。



Scheme 4

Figure 1. Decay of CD spectrum of (C)-Trimethylsumanene in CH<sub>3</sub>CN at 10 °C



## 今後の課題および将来展望

さて、我々はようやく非平面 $\pi$ 面のキラリティを制御することが可能になってきた。応用分野は数多く、今後挑戦すべき課題は山積しているが、その中で、敢えて合成化学者がナノサイエンスに貢献すべき課題として、現在「カーボンナノチューブの単一構造体合成」に取り組んでいる。

バッキーボールはカーボンナノチューブのキャップ構造に相当する。そこで、半球型のバッキーボールを種としてそこからナノチューブを成長させることができれば、ナノチューブの構造はバッキーボールの構造で決定されることになる。すなわち、

- 1) 半球バッキーボールの位置／立体／エナンチオ選択的合成
  - 2) 炭素骨格の異性化を伴わない温度領域でのグラフェン成長のための触媒開発
  - 3) バッキーボール先端からの選択的なグラフェン成長
- の3手法の開発を達成すれば、原理的に直径／カイラル角／螺旋方向が一義

的に決まったナノチューブを選択的に合成することができる。これらはいずれも現代有機合成ではいまだ不可能なことばかりであるが、ナノサイエンスの発展に寄与すべく、何らかの答えを見つけていきたいと考えている。

最後に、物質科学において有機合成化学者が能動的に担うべき役割とは何か考えてみたい。その答えは昔も今もあまり変わっていない。

ア) 標的化合物を原理的に合成可能にする新反応を開発すること

イ) 分子デザインに足るだけの官能化技術を提供すること

の2つであろう。もちろん、

ウ) 複雑な分子を実際に合成し、物性評価に供すること

も重要な役割であることは言うまでもないが、今後益々合成技術が進歩しルーティン化していけば、有機合成手法そのものは、「誰でもできる」技術となっていき、最終的には合成化学者は、物性測定者にとっての単なる「道具」になっていくであろう。また今後、デー

タベースや合成経路予測ソフトの質が更に向上していけば、既知反応の組み合わせだけであれば、合成計画ですら合成化学者の出番はなくなってくるかもしれない。そこまで有機合成化学は「成熟された」学問分野であると言える。

ただし、我々がターゲットにすべき新物質は無限にあり、その新しい物質群に対する合成技術はまだまだ「無力」であるのも厳然たる事実である。我々は益々難易度を増していくであろう、ア) イ) で述べたような新反応開発をこれからも続けていかなくてはいけない。しかもそれは「合目的」であることが求められている。

以上紹介した成果のほとんどは、東林修平助教の不断努力によるものである。また $C_3$ 対称ホモキラル分子の合成は、総研大A. F. G. Masud REZA氏の学位論文の内容である。ここに感謝したい。また紙面の都合で他のメンバーの成果は報告できなかったが、彼らのお陰でダイナミックな研究を日々楽しんでいる。

## 参考文献

- 1) W. E. Barth, R. G. Lawton, *J. Am. Chem. Soc.* **88**, 380 (1966).
- 2) L. T. Scott, M. M. Hashemi, M. S. Bratcher, *J. Am. Chem. Soc.* **114**, 1920 (1992); A. Borchardt, A. Fuchicello, K. V. Kilway, K. K. Baldrige, J. S. Siegel, *J. Am. Chem. Soc.* **114**, 1921 (1992).
- 3) G. Mehta, S. R. Shah, K. Ravikumar, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* **1993**, 1006.
- 4) H. Sakurai, T. Daiko, T. Hirao, *Science* **301**, 1878 (2003).
- 5) H. Sakurai, T. Daiko, H. Sakane, T. Amaya, T. Hirao, *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 11580 (2005).
- 6) T. Amaya, S. Seki, T. Moriuchi, K. Nakamoto, T. Nakata, H. Sakane, A. Saeki, S. Tagawa, T. Hirao, *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 408 (2009).
- 7) A. Sygula, P. W. Rabideau, *Org. Lett.* **7**, 713 (2003).
- 8) Y.-T. Wu, D. Bandera, R. Maag, A. Linden, K. K. Baldrige, J. S. Siegel, *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 10729 (2008).
- 9) Y.-T. Wu, J. S. Siegel, *Chem. Rev.* **106**, 4843 (2006).
- 10) S. Higashibayashi, H. Sakurai, *Chem. Lett.* **36**, 18 (2007).
- 11) S. Higashibayashi, H. Sakurai, *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 8592 (2008).
- 12) A. F. G. M. Reza, S. Higashibayashi, H. Sakurai, *Chem. Asian J.* **4**, 1329 (2009).

## UVSOR Workshop on Low-Energy Photoemission of Solids using Synchrotron Radiation (LEPES 09)

(UVSOR国際ワークショップ「放射光を用いた固体の低エネルギー光電子分光」)

放射光分野では大きな国際会議が毎年のように開催されているが、UVSORの得意とする低エネルギー分光分野で研究者が集まって議論をする場がなかなかないため、UVSORがときどき国際ワークショップを企画している。今回は、平成21年10月3、4日に、岡崎コンファレンスセンターにおいて、「放射光を用いた固体の低エネルギー光電子分光」に関してUVSOR国際ワークショップを開催した<sup>[i]</sup>。このワークショップは、平成19年9月23、24日に行われたテラヘルツ領域のコヒーレント放射光に関するUVSOR国際ワークショップ<sup>[ii]</sup>に続くものであり、低エネルギー高輝度放射光であるUVSORの特徴を生かした新しい分光研究の1つである低エネルギー放射光励起による角度分解光電子分光 (ARPES) によって、様々な機能性をもつ固体の電子状態研究を議論することを目的として開かれたものである。今回の国際ワークショップは1日強という非常に短いものであったが、10月2日までオーストラリア・メルボルンで開催された放射光装置国際会議 (SRI 09) と10月5日から奈良で開催された電子分光国際会議 (ICISS-11) の間を狙って、それぞれの参加者に都合を付けてもらうことで企画した。参加者は、招待講演者9名を含む42名であり、11件の口頭発表 (招待講演を含む) と16件のポスター発表があった (プログラム参照)。

10月3日のGet together partyに引

き続いて、4日の朝からセッションが始まった。まず、主催のUVSORを代表して、木村からOpening remarkとして、UVSORの光電子ビームラインの現状とこれまでUVSORで得られた光電子分光の成果について紹介があった。その後、低エネルギー光電子分光分野の重要な研究対象である、超伝導、伝導性酸化物、機能性材料、また放射光と相補的な関係にある新規光源を使った光電子分光の現状についての議論が行われた。



午前前半の超伝導セッションでは、従来の銅酸化物超伝導体ばかりでなく、昨年発見された鉄系超伝導物質に関して、ARPESから得られる軌道や超伝導の対称性などの超伝導を生み出す電子状態に関する議論が行われた。その後の伝導性酸化物セッションでは、酸化物の物性の起源の1つである強い電子格子相互作用と電子間相互作用をARPESで観測した結果について報告された。昼食とポスターセッションを挟んで、午後のセッションでは、いくつかの代表的な機能性材料の電子状態をARPESで観測した結果について議論された。熱電材料では熱電能がバンド構造に依存すること、重い電子系で

は、重い電子を特徴付ける伝導帯と局在4f電子との混成バンドがARPESで観測できたことが報告された。また、次世代太陽電池材料でも低エネルギー電子状態が重要な役目を果たしており、ARPESによる観測が重要であることが示された。最後に、紫外CWレーザーを使った超高分解能・極低温光電子分光、Xeランプを使ったスピン分解光電子分光の開発の現状が紹介された。昼食後に行われたポスターセッションでは、UVSOR、KEK-PF、SPring-8、SOLEIL (フランス) での放射光を使ったARPESの現状や結果について盛んな議論がおこなわれた。同時に行われたUVSOR施設見学でもARPES装置に関して活発な意見交換が行われた。

今回のUVSOR国際ワークショップは、木村真一 (UVSOR)、伊藤孝寛 (名大工) による企画であり、国内のARPES研究者からは有益な助言や講演者の推薦をいただき、またUVSORスタッフと名大の大学院生にはお手伝いをいただきました。これらの方々に深く感謝いたします。

(木村真一 記)

[i] <http://www.uvsor.ims.ac.jp/staff/skimura/UVSOR/UVSORWorkshop2009/index.html>; 伊藤孝寛, 放射光 **23** (2010) in press.  
[ii] <http://www.uvsor.ims.ac.jp/WIRMS2007/UVSORWSonCSR/index.html>; 島田美帆, 放射光 **20**, 391 (2007)

講演者（講演のタイトル・アブストラクトなど、詳しくはwebサイトを参考にしてください。）

**1. Superconductors** D. Feng (Fudan Univ.), T. Yoshida (Univ. Tokyo), A. Ino (Hiroshima Univ.)

**2. Oxides and theory** C. Kim (Yonsei Univ.), L. Petaccia (Elettra), K. Ji (KEK)

**3. Functional materials** T. Takeuchi (Nagoya Univ.), H. J. Im (Hiroshima Univ.), T. V. Kuznetsova (Russian Academy of Science)

**4. Low-energy PES using other sources** T. Kiss (Univ. Tokyo), S. Souma (Tohoku Univ.)

**Poster presentation** K. Iwano (KEK), Y. Takeichi (Univ. Tokyo), T. Hirahara (Univ. Tokyo), K. Soda (Nagoya Univ.), M. Imamura (Kobe Univ.), K. Nakayama (Tohoku Univ.), T. Nakagawa (IMS), J. Onoe (Tokyo Inst. Tech.), Y. Miyata (Ritsumeikan Univ.), V. I. Grebennikov (Russian Academy of Science), A. Sekiyama (Osaka Univ.), A. Taleb-Ibrahimi (SOLEIL), H. Miyazaki (UVSOR), T. Ito (Nagoya Univ.), M. Sakai (UVSOR)

## International Symposium on Chemistry and Material Science

分子研、理研共同開催 International Symposium on Chemistry and Material Scienceが平成21年11月2日に岡崎コンファレンスセンター大会議室で開催された。当初、9時20分より開始、国内から5人、中国から7人の先生をお招きし、講演して頂く予定であった。しかしながら、シンポジウム前日の北京は大雪で、空港が閉鎖されてしまったため、講演者が搭乗する予定であった飛行機が欠航になってしまった。さらに、新型インフルエンザの影響で、

国内からの講演者の先生の参加もキャンセルになるなど、シンポジウム自体の開催が危ぶまれる状態に陥った。幸いにも北京の天候が回復し、当日の昼前に講演者を乗せた飛行機が無事、中部国際空港に到着した。予定していたプログラムの大幅な変更は余儀なくされたが、無事、午後2時からシンポジウムの開催となった。本シンポジウムでは、有機分子変換や超分子化学などの日中両国の最先端の研究成果について、国内から3人、中国から6人の先生に講演して頂いた。中国からのお招き

した先生方にとっては、到着後すぐのシンポジウム開催となり、かなりの強行スケジュールにもかかわらず、活発な質疑・議論が展開され、大変有意義なシンポジウムとなった。その後の懇親会においても、乾杯とともに熱い意見交換、日中間での学術および文化交流が夜遅くまで続いた。

(魚住 泰広 記)



### International Symposium on Chemistry and Material Science

November 2nd

12:00- Lunch

14:00-14:10

Opening Remarks: Prof. Hiroki Nakamura (IMS)

Chairperson:

Prof. Hiroshi Shinokubo (Nagoya Univ.)

14:10-14:25

Prof. Atsushi Ohtaka (Osaka Institute of Technology)

"Facile Preparation of Linear Polystyrene-stabilized Pd Nanoparticles in Water"

14:25-14:50

Prof. Deqing Zhang (Chinese Academy of Science)

"New Organic Functional Molecules for Molecular Switches, Logic Gates and Sensors"

14:50-15:15

Prof. Zhangjie Shi (Perking Univ.) "Organic Transformations Based on C-O Activation"

Chairperson:

Prof. Deqing Zhang (Chinese Academy of Science)

15:30-15:55

Prof. Hiroshi Shinokubo (Nagoya Univ.) "Synthesis of Novel Porphyrins through Transition Metal Catalysis"

15:55-16:20

Prof. Haiqing Guo (Perking Univ.)

" Synthesis of Fluorescent/Magnetic Micro Beads by Using Organic-Inorganic Assemblies as Structural Units"

16:20-16:45

Prof. Zhihua Gan (Chinese Academy of Science)

" Controlled Synthesis and Biofunctions of Biocompatible and Biodegradable Polymers"

Chairperson:

Prof. Donglin Jiang (IMS)

17:00-17:25

Prof. Chuanfeng Chen (Chinese Academy of Sciences)

"Novel Triptycene-Derived Hosts; Synthesis and Applications in Supramolecular Chemistry"

17:25-17:50

Prof. Yuguo Ma (Perking Univ.) "Supramolecular Chemistry Based on Arene-Perfluoroarene Interactions"

17:50-18:05

Prof. Shuhei Higashibayashi (IMS) "Asymmetric Synthesis of Chiral Buckybowls"

18:05-18:15

Closing Remarks: Prof. Yasuhiro Uozumi (IMS)

## 第10回エクストリームフォトンクス研究会「凝縮系における量子の世界」

去る2009年11月4～5日に、愛知県蒲郡市のホテル竹島において、標記研究会が開催された。本研究会は、平成17年度から分子科学研究所と理化学研究所が連携融合事業として推進してきた「エクストリーム・フォトンクス研究」の一環として開催された。毎回、特定のテーマについて集中的な議論を行ってきたが、今回のテーマは「凝縮系における量子の世界」である。

近年、レーザー光源の極短パルス高強度化やパルス制御技術の発展に伴い、孤立した原子分子ばかりでなく、液体や固体、あるいは生体分子などデコヒーレンスの激しい系でも量子コヒーレンスの観測が試みられるようになりつつある<sup>[1]</sup>。なぜなら、もしこれらの凝縮系でコヒーレント制御が可能になれば、物性科学や情報科学、あるいは生体科学といった広範囲の研究分野に学術的

にも工学的にもブレークスルーを及ぼす可能性があるからだ。例えば、ナノテクノロジーを上回る精度で物質を制御する加工技術、量子情報処理を大きく発展させる固体量子デバイスの開発、視覚や光合成などの生体過程の制御などが可能になるかもしれない。また、コヒーレント制御を巨視的な多体

相互作用系で実現する可能性を追求すること自体が量子論的な世界観の検証である。そこに、量子／古典境界に関する100年来のミステリーを解くためのヒントが隠されているかもしれない。

このような趣旨の下に、本研究会が企画された。プログラムを以下に掲載する。口頭発表はすべて招待講演である。



2009年11月4日（水）

13:00 - 13:10 開会の辞 大森 賢治（分子科学研究所）

13:10 - 14:00 岡本 裕巳（分子科学研究所）「近接場顕微分光に基づく金属ナノ構造における局在光電場分布と励起波動関数の可視化」

14:00 - 14:50 田中 拓男（理化学研究所）「プラズモニク・メタマテリアル」

15:20 - 16:10 萱沼 洋輔（大阪府立大学21世紀科学研究機構）「極端光子場中の新現象」

16:10 - 17:00 五神 真（東京大学大学院）「半導体における励起子ボース・アインシュタイン凝縮相の探索」

17:00 - 18:30 ポスターセッション

2009年11月5日（木）

9:00 - 9:50 岡本 博（東京大学大学院）「強相関電子系の超高速光誘起相転移」

9:50 - 10:40 信定 克幸（分子科学研究所）「ナノ構造体における光誘起電子・核・電磁場ダイナミクス」

11:00 - 11:50 水落 憲和（筑波大学大学院）「ダイヤモンド中の単一NV中心 ～室温での光による単一スピン検出と操作～」

11:50 - 12:00 閉会の辞 大島 康裕（分子科学研究所）・緑川 克美（理化学研究所）

初日の第1講演者である岡本は、近接場顕微分光を用いた金属ナノ構造における表面プラズモン・ポラリトン波動関数の可視化に関する一連の研究成果を紹介した。田中は、プラズモニッ

ク・メタマテリアル研究の背景とその設計指針、人工的な磁性を付加したメタマテリアルの光学特性とその応用、メタマテリアルを作製する手段として開発した2光子還元法について報

告した。萱沼は、強レーザー場による固体電子状態のコヒーレント制御と硬X線光電子スペクトルにおける反跳効果に関する理論研究の成果を紹介した。五神は、半導体励起子系の挙動に

関する一連の分光学的研究成果に基づき、励起子系の物質相探索の現状と励起子ボース・アインシュタイン凝縮相実現への展望について報告した。続いて、ポスターセッションでは、エクストリームフォトンクス研究事業の数々の研究成果に関する発表と活発な議論が行われた。二日目は、まず岡本が、強相関電子系を対象に、フェムト秒レーザー分光を用いた光誘起相転移の超高速ダイナミクスに関する最近の研究の進展を紹介した。信定は、非一様な電場とナノ構造体の相互作用によって引き起こされる電子ダイナミクスの詳細、および量子開放系クラスターモ

デルに基づく表面吸着モデル系の光誘起電子・核波束ダイナミクスに関する理論研究の成果を報告した。最後に水落が、ダイヤモンド中の窒素-空孔複合体(NV中心)の電子スピンおよび核スピン状態の量子制御と量子情報科学への応用について報告した。いずれの招待講演も、独自の視点に基づいた緻密かつ重厚な研究成果の報告であり、深く感銘を受けるとともに、一流の学術研究のみが醸し出す文化の香りを満喫した二日間であった。

今回もほとんどの参加者が、会場となったホテルに宿泊し寝食を共にした。異分野、異文化の研究者達が、ともに

夜風に吹かれながら仲良く露天風呂につきり親交を深めた。凝縮相には未知の量子の世界が大きく広がっており、この未知の世界は物理、化学、工学など様々な分野の研究者達が協力しなければ探索は難しいだろう。今回の研究会は、これら異分野の研究者達が共通の興味に基づいて議論する貴重な機会を提供したと思う。

(大森 賢治 記)

[1] K. Ohmori, "Wave-Packet and Coherent Control Dynamics," *Annu. Rev. Phys. Chem.* **60**, 487-511 (2009).

## 分子科学研究所一般公開2009

分子科学研究所は3年毎に一般公開を行っているが、分子研一般公開を平成21年10月17日(土)に開催した。5月に入ってから実行委員会を組織し、5月26日の第一回実行委員会では(1)開催日の決定、(2)教員、技術職員、事務職員からなる、公開展示班(8名)、講演会班(4名)、広報班(5名)、記録班(3名)、設営班(3名)、総務班(4名)の決定、(3)会場として岡崎コンファレンスセンターを使用することの決定を行った。8月6日の第二回実行委員会で、(1)会場を明大寺キャンパスの極端紫外光施設、岡崎コンファレンスセンター、山手キャンパス2号館とすること、(2)東岡崎南口から巡回バスを走らせること、(3)展示に関しては、小学生でも楽しめるものと科学に関心の高い大人でも満足できるものの二つのタイプのものを用意することを

決定し、そのほか一般公開シンポジウムの講師2名の候補者を決定した。10月2日に第三回実行委員会を開催し、(1)展示の概要説明、(2)配布物の点検、(3)会場設営の工程表確認、(4)役割分担の確認を行った。

今回は実験棟改修工事と重なり、十分なスペースが取れなかったために、前回行った中学生のための科学実験の指導(サイエンスレンジャー)は行わなかったが、体験型展示でこれに対応した。今回の新しい試みとして、岡崎コンファレンスセンターの中庭を利用したフードコート(岡崎の物産店)を企画し、3軒の協力を得た。一般公開の標語を「分子の森を探検しよう!」とし、ポスターを約700の大学、公的機関、小中学校に配布した。また、折り込みチラシを約5万世帯に配布、回覧板を三島学区3881世帯に回覧、岡崎市の

広報紙(岡崎市政だより)と岡崎三研究所の広報誌(「OKAZAKI」33号)に記事を掲載するなど広報に努めた。このほか、ラジオ(FMおかざき)でも一般公開の前日(16日)の朝夕10分間放送し、10月5日には30分程度の記者発表を行った。事後のアンケート調査によると、友人・知人との口コミが最も多く、次が折り込みチラシ、岡崎市政だよりと続いていた。今年インフルエンザの蔓延が懸念されていたが、幸い大きな流行には至らず、予定通り開催することができた。

一般公開日当日は肌寒い曇天で風も強くよい天気とは言えなかったが、会場には9時30分の開始時間前から見学者が訪れたため、急遽開始時間を早めて対応した。展示数としては明大寺キャンパス(極端紫外光施設)が2件、岡崎コンファレンスセンターが25件、山

手キャンパスが12件であり、内容としては非体験型展示が16件、体験型展示が23件と多数の体験型展示が実施された。体験型・非体験型ともに好評で、5段階評価のアンケート結果では3.70から4.40の間に分布しており、大きな差はでなかった。岡崎コンファレンスセンター大会議室並びにホワイエを用いた展示は一ヶ所にまとまっているため、一体感があり、好評であったが、その分会場設営のための準備は大変であった。一方、見学者によっては実験室内部を見たいという希望もあり、山手会場は従来のように実験室を回覧する従来型で、今回は図らずも両方を体験できる企画となった。

14時20分より岡崎コンファレンスセンター中会議室で「どこへ行く？ 日本のサイエンス」という主題の一般公開シンポジウムを実施した。演題は中村宏樹分子研所長の「頑張れ日本人の若人——サイエンスを超えて“科学”へ

の挑戦を！」と辻村竜哉共同通信編集委員兼論説委員の「50年でノーベル賞の野望はどうなる？」で、シンポジウムは16時頃盛況のうちに終了した。このシンポジウムに先立って、岡崎市小中学生の理科自由研究に対する「未来の科学者賞」の授賞式が行われた。これは岡崎三研究所の基生研、生理研と共同で行っているアウトリーチ活動の一つである。一般公開に先立って岡崎市総合体育館で行われた研究発表の中から岡崎三研究所の広報関係教員が選考した8件の研究成果を一般公開の会場でポスター展示し、中会議室において8名の表彰式を行った。

このほか、当日飛び入りで、坂田東一 文部科学省事務次官の視察があった。事務次官は山手キャンパスの920 MHz NMRを見学された後、岡崎コンファレンスセンターでは未来の科学者賞のパネル展示のほか4か所を見学し、その後、明大寺キャンパスの極端紫外光施設を

見学された。岡崎コンファレンスセンターでは熱心に質問され、時間が足りなくなるほどであった。

インフルエンザの流行期に重なり、中高等学校での学級閉鎖の情報が事前に入っていたので、見学者数が少なくなることを懸念していたが、予想通り、例年の2000名程度の見学者数に対し、今年は1346名であった。中高等学校生徒の課外活動としての見学者が少なかったのが大きな原因ではないかと思う。平成21年度の一般公開を成功裡に終えることのできたのは、数多くの展示を企画準備していただいた研究教育職員の努力のたまものであり、また、この行事が円滑に進行し、無事終了できたのは、事務センター職員、技術職員、一部非常勤職員の厚いご支援によるものである。心から御礼申し上げたい。

(薬師 久弥 記)



岡崎コンファレンスセンターでの展示風景



山手キャンパスでの展示風景



極端紫外光施設での展示風景



一般公開シンポジウムの風景

## 科学未来館と岡崎3研究所の協力協定

東京のお台場にある「日本科学未来館」をご存知でしょうか？ 我が国の科学者の研究成果を広く国民に知らせることを目的に作られた一種の科学博物館で、宇宙飛行士の毛利衛さんが館長をされています。

この度、この科学未来館と岡崎の3研究所（分子研、生理研、基生研）との間で協定が締結され、岡崎3研究所における研究の成果を国民の間に普及するために双方が協力していくことになりました。

今、世の中では科学者の国民に対する「説明責任」が問われ、研究者は国民に対して自らの研究成果をできるだけ分かりやすく説明することが求められています。一方、多くの研究者は自らの研究と社会的な科学リテラシーの間のギャップを埋めることに大きな困難を感じており、そのギャップを埋める専門家の援助を必要としています。科学未来館はまさにそのような専門家（サイエンス・コミュニケーター）の集団であり、彼らの支援を受けることは国

民に対する「説明責任」を果たす上で、研究者のバリアを下げられることになります。一方、科学未来館にとっては我が国の代表的な基礎研究機関である岡崎3研究所の最新の研究成果を国民に伝えることによって、科学未来館の位置づけを大きく高めることができます。

この度の協定締結によって、岡崎の3研究所の研究が多くの国民に知られるようになることを期待しています。

（平田 文男 記）

### 相互協力に関する協定書

独立行政法人科学技術振興機構 日本科学未来館（以下「甲」という。）と大学共同利用機関法人自然科学研究機構のうち愛知県岡崎市に位置する3機関（基礎生物学研究所、生理学研究所及び分子科学研究所。以下「乙」という。）は、相互に学術研究交流の推進、一般を対象にした科学コミュニケーション活動の推進に資する活動を図ることを目的として、次のとおり協定を締結する。

第1条 甲及び乙は、次に掲げる事項について、広く相互交流を図るものとする。

- (1) 科学コミュニケーション手法開発に関する相互協力
- (2) 未来館スタッフの研究機関視察
- (3) 講演会、シンポジウム、イベント等の共同開催、協力、後援
- (4) 学術研究資料の提供、交換
- (5) 展示物等の共同開発
- (6) 乙による最新研究動向に関する甲の研修への協力
- (7) 乙のアウトリーチ活動に対する甲の協力
- (8) その他上記目的を達成するために必要と認められる事項

第2条 第1条記載内容について、経費が発生する場合は事前に甲乙協議の上、その負担を定め、必要な手続きを行うものとする。

第3条 第1条記載内容を実施した結果生じた知的財産等については、甲乙協議の上、その配分や責任を明確にし、別途、覚書等を交わすこととする。

第4条 本協定を継続しがたい事情が生じたときは、甲乙いずれか一方の申出により協議の上、協定を解除することができる。

第5条 本協定の期間は、締結の日から平成23年3月31日とする。ただし、甲乙協議の上、期間を定めて更新することができる。

第6条 本協定に定めのない事項については、必要に応じて甲乙協議の上定める。

平成21年7月8日

## 新所長の紹介

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大峯巖先生が、分子科学研究所の次期所長として、平成22年4月1日より就任されます。

大峯先生は、東京大学を卒業後ハーバード大学大学院に進学し、理論化学・物理学の研究によってPh.D.を取得し、帰国後、量子力学や統計力学を武器に、「水の多様性の発現」についての理論的研究を、慶応大学、分子研、そして名

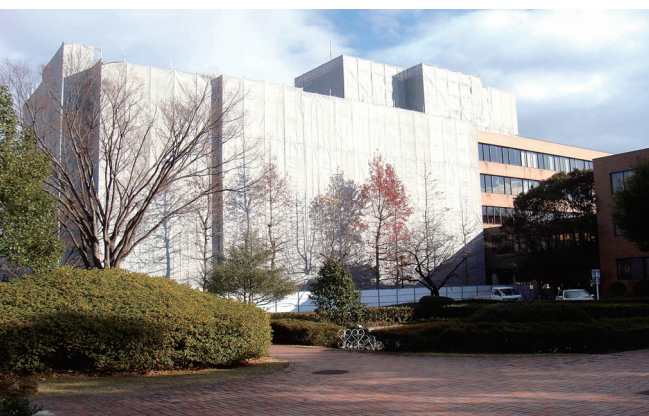
古屋大学で展開し、水の持つ多様な性質の物理的要因やその生命現象・自然現象との関わりなどを明らかにしてこられました。その代表的成果は、「水が凍る過程」が分子レベルでいかに起こっているかを明らかにしたもので、**Nature** 2002年、**Cover Article**に発表されました。また、大峯先生は研究面だけではなく、名古屋大学において、総務企画担当および財務担当理事とし

て、大学運営にも豊富な経験をお持ちです。

未曾有の世界的経済不況を反映して、学術研究は非常に多難な時代を迎えつつあるように思われますが、先生のこれらの豊富なご経験を生かして、この難局を乗り切れるようご指導いただけたらと思います。

(宇理須恒雄 記)

## 分子研実験棟耐震改修工事



分子研レターズVol. 60でお知らせしました分子研実験棟耐震改修工事の第1期工事は21年度末(平成22年3月末)竣工に向けて順調に進んでおります。

さてここで、あえてお知らせしなければならぬことがあります。それは、平成22年度から予定していた第2期工事は延期となり、実施時期については現在のところ未定という状況になってしまった事です。そろそろ第2期工事の準備をと予定していた矢先の事でした。国の厳しい財政状況や政権交代が

起きたことなど様々な要因があり、決定されたことと思われま

す。この結果は受け入れざるを得ませんが、少々問題も多く困惑しているところもあります。建物の耐震性能は、2期工事まで完了して性能を発揮する耐震構造設計だったもの

が、1期工事の途中つまり設計の変更も不可能な時期に延期が決断され、現行設計のまま工事を行っています。そのため1期工事が完了しても実験棟全体の耐震強度は上がり逆にならなくなってしまふことが判明しています。また、実験棟で研究を進めているグループには工事に伴う実験室移転が強いられました。実験室規模を縮小し窮屈な研究環境で実験研究を行ってもらい、移転にも時間や費用をかけ、様々な面で辛抱して頂いています。この状況を少しで

も短期間で済ませ、なるべく経費も少なく効率的に行うように1期2期工事を通して移転を計画したのですが、これも工事期間に間が空くことによって大変非効率な作業を行うことになってしまいます。従って、早急に2期工事を再開していただく様に文科省に要求する必要があります。

分子研実験棟は中途半端ではありますが、エコ仕様窓枠の設置や屋上緑化の実現、5階の居室部分への改装など、新しく生まれ変わる環境に期待して、工事期間の間、更なるご協力を頂けますよう、共同利用・共同研究をされる全国の分子科学コミュニティの皆様方をお願い申し上げます。

(鈴木光一 記)

※なお、本原稿締め切り直後の平成22年1月に文科省より工事再開の通達があり、引き続き22年度に2期工事を実施することになりました。



## 第8回自然科学研究機構シンポジウム「脳が諸学を生み、諸学が脳を総合する」

2009年9月23日（水）に学術総合センター 一橋記念講堂（東京都千代田区）において、第8回の機構シンポジウムが開催された。今回は、「脳が諸学を生み、諸学が脳を総合する」というタイトルのもとに講演・討論が繰り広げられた。今回は、これまでより若者の数が若干増えていたように感じられた。また、毎回のことであるが、途中で退席する方はほとんどなく、朝10

時から夕方4時過ぎまで熱心に講演・討論をお聞き頂いていた。

休憩時間には、分子研の展示スペースをかなりの方が訪れて下さった。現在の展示内容はパネルや分子研紹介ビデオ、分子模型であるが、今後は体験型の展示物を取り入れる等して、より多くの方に分子研の研究・教育アクティビティをお伝えしていきたい。

（原田 美幸 記）



### プログラム

- 10:00～10:05 機構長挨拶 志村令郎（自然科学研究機構・機構長）
- 10:05～10:20 趣旨説明 立花 隆
- 10:20～10:50 「マウス嗅覚系を用いて「遺伝子—神経回路—行動」を読み解く」 坂野 仁（東京大学・教授）
- 10:50～11:20 「計算神経科学の道具としてのBMI」 川人光男（株式会社国際電気通信基礎技術研究所・脳情報研究所長）
- 11:20～11:50 「チンパンジーから見た人間の心の起源」 松沢哲郎（京都大学・教授）
- 11:50～13:30 昼休み
- 13:30～14:00 「情報とエネルギー：生体と人工機械の違い」 柳田敏雄（大阪大学・教授）
- 14:00～14:30 「意識と行動の乖離——盲視の脳内機構——」 伊佐 正（生理学研究所・教授）
- 14:30～15:00 「精神機能はニューロン回路から生まれるか？ ——想像力の起源を訪ねて」 宮下保司（東京大学・教授）
- 15:00～15:10 休憩
- 15:10～15:50 パネルディスカッション 「脳科学の新しいパラダイム」  
立花 隆  
川出由己 京都大学・名誉教授  
川人光男 株式会社国際電気通信基礎技術研究所・脳情報研究所長  
松沢哲郎 京都大学・教授／柳田敏雄 大阪大学・教授  
伊佐 正 生理学研究所・教授／宮下保司 東京大学・教授
- 15:50～16:00 閉会の挨拶 勝木元也（自然科学研究機構・理事）

大森賢治教授にアメリカ物理学会フェロー表彰

江原正博教授に APATCC から 2009 年度 Pople メダル及び  
CMOA から 2009 年度 QSCP Promising Scientist Award

邨次智助教に英国王立化学会 (Royal Society of Chemistry) Dalton Transactions Poster Prize 及び  
第 26 回井上研究奨励賞

中川剛志助教に日本物理学会若手奨励賞

山根宏之助教に第 14 回日本放射光学会奨励賞

秋山順研究員に第 26 回応用物理学会講演奨励賞

西條純一助教に分子科学会優秀講演賞

## 大森賢治教授にアメリカ物理学会フェロー表彰



光分子科学研究領域教授、分子制御レーザー開発研究センター長の大森賢治博士に、アメリカ物理学会フェローの称号が授与されました。これは、大森教授の以下の業績が評価されたものです。

*“For his pioneering development of spatiotemporal wave-packet*

*engineering in which the ultrafast wave-packet interference in a molecule is visualized and controlled with precisions on the picometer spatial and attosecond temporal scales.”*

本表彰は、既存のアメリカ物理学会フェローからの推薦を受けて、ディヴィジョン（レーザー科学）、アメリカ物理学会フェローシップ選考委員会、アメリカ物理学会評議会による3段階の厳正な選考を経て決定されました。大森教授にとっては、一昨年の日本学士院学術奨励賞、日本学術振興会賞に続き、初めての国際的に権威ある表彰となりました。表彰式は、アメリカ物理学会 Division of Laser Science の年次会議 (LASER SCIENCE XXVI: APS/DLS 26th ANNUAL MEETING, October 24-28 2010, Rochester, NY) にて行われます。分子科学研究所、また分子科学の分野にとって、たいへん喜ばしいことであり、心よりお祝い申し上げます。

ます。

近年、光を用いて物質の波動関数を操作しようとする試みが物質科学や情報科学など様々な分野で行なわれるようになりました。このような量子制御は「コヒーレント制御」と呼ばれ、原子からナノ構造に至る様々な階層において、結合選択的な化学反応制御を可能とする他、量子コンピューティングなどの先端的な量子テクノロジーに結びつくものとして注目されてきました。大森教授は、このコヒーレント制御において、2つの光パルスの位相差をアト秒 ( $10^{-18}$  秒) スケールの精度で調節することが何よりも大切であるということを見抜き、「アト秒位相変調器 (APM)」を自らの着想の下に設計し製作されました。さらに、それを用いて「分子の中を動き回る二つの原子波（振動波束）が衝突し干渉する様子」を世界で初めて観測し制御することに成功しました。これまでの量子力学的波動性の検証実験では、有名なヤングの実

験を始めとして、主に波が重なった後にできた定常的な干渉縞を測定し、それに基づいて議論がなされて来ました。大森氏は、その干渉現象を、時間と共に発展する現象として捉えることに成功したのです。これは、従来の干渉縞計測という手法を超えた、量子干渉実験の新たな方法論を開拓したものと位置づけられます。

さらに大森教授は、このような分子内の波束干渉がつくりだすピコメートル ( $10^{-12}$ メートル) スケールの波動関数の空間模様を、APMによって多彩にデザインすることに成功しました。この波動関数の模様はタペストリーのように美しく、量子の世界の芸術のように感じられます。これは恐らく「これまでで最も微細な空間領域での加工」と考えられ、それが量子波の干渉によって成し遂げられた点は、量子科学に携

わる多くの研究者にインパクトを与えました。最近では、このような波束の精密干渉を応用して、分子の中の波動関数に情報を書き込み、これを一定時間保存した後に読み出すとともに、論理ゲートを実行するための開発研究を進められています。同様に、環境との相互作用によって波動関数が乱される様子を検証し制御するための基礎研究も推進されています。これら一連の研究成果は、**Science**誌や**Physical Review Letters**誌など超一流の学術雑誌に相次いで発表されたばかりでなく、多数の新聞各紙やYahooトピックスあるいはTV番組等で取り上げられ、社会的にも反響を呼びました。

以上のように、大森教授のこれら一連の研究成果は、これまでに無い新しい概念を分子科学に導入するものであり、これによって「アト秒時空間波束

エンジニアリング」という新たな学術分野が開拓されました。分子科学の分野で独創性の顕著な業績として認められており、物理化学、物性科学、量子光学、あるいは情報科学などの様々な学術分野においても重要な「学際的な成果」として国際的に注目を集めています。それは、大森教授がゴードン会議、アメリカ物理学会、アメリカ化学会を始めとする世界の主要な国際会議にしばしば招待されていることでも明らかです。今後、アト秒時空間波束エンジニアリングが、従来の分子科学の枠組みを越え、物性科学や情報科学などより多くの分野を融合した学際的な研究領域を形成し、化学反応制御や量子情報処理などの量子テクノロジーの開発や量子論の基礎的な検証の新たな扉を開いていくものと大いに期待されます。  
(岡本 裕巳 記)

## 江原正博教授に APATCC から 2009 年度 Pople メダル及び CMOA から 2009 年度 QSCP Promising Scientist Award

計算科学研究センター・理論計算分子科学研究領域（併任）の江原教授が、2009年度の APATCC (Asia-Pacific Association of Theoretical & Computational Chemists) の Pople メダルを受賞した。APATCC はアジアおよび環太平洋の理論化学と計算化学を進展させるために 2004 年に設立された学会で、Pople メダルは毎年 1 名の 45 歳以下の優れた若手研究者に贈られる栄誉ある賞である (<http://www.apatcc.org/>)。また、スペイン El Escorial で開催された理論・量子化学分野の国際会議である第 14 回 QSCP (Quantum Systems in Chemistry and Physics) においては、

QSCP Promising Scientist Award of CMOA (Centre de Mecanique Ondulatoire Appliquee) を受賞した。

江原教授は、分子の励起状態を高精度に記述する電子状態理論を開発し、理論精密分光の分野を開拓し、光物性化学の分野にも研究を展開した。今回の二つの受賞はこれまでのこれらの研究成果が高く評価されたものである。分子の励起状態には複雑な電子構造をもつ状態が多く存在する。江原教授は、このような多様な電子状態を精度よく記述する SAC-CI General-R 法を開発し、複雑な励



起状態の理論研究を可能にした。さらに、General-R 法のエネルギーグラジエント法を開発し、励起状態における構造緩和や発光に関する精密な理論研究を行った。また、最先端の実験と共同研究を行い、励起状態の関与する様々

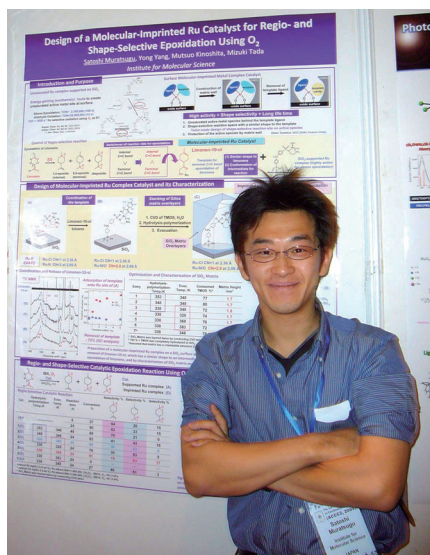
な化学現象について研究を行ってきた。とくに内殻電子過程の研究では、多電子過程のスペクトルやその振動構造について最新の実験結果の解析を行い、価電子・リドベルグ混合やその温度効果等の本質を明らかにした。さらに、工学的にも重要である光機能性分子を

研究し、有機EL分子の光吸収や発光過程、バイオセンサーの光電子過程の解明を行った。定量的な解析が難しい長鎖共役分子の励起エネルギーや構造変化を精密に評価し、熱分布による統計性を考慮することによって、光物性の精密な理論予測に成功した。表面光

化学と表面触媒作用に関する理論的な研究も展開している。今回の二つの受賞を心からお祝いすると同時に、さらなる大きな研究の進展を期待します。

(永瀬 茂 記)

## 邨次智助教に英国王立化学会 (Royal Society of Chemistry) Dalton Transactions Poster Prize 及び 第26回井上研究奨励賞



物質分子科学研究領域・電子構造研究部門の邨次智助教が、第2回アジア錯体化学会議 (11月1日～4日、中国 (南京)) において英国王立化学会 (Royal Society of Chemistry) の Dalton Transactions Poster Prize を受賞しました (発表者360人中、受賞者6人)。受賞題目は「Design of a Molecular-Imprinted Ru Catalyst for Regio- and Shape-Selective Epoxidation Using O<sub>2</sub>」(モレキュラーインプリンティングRu (ルテニウム) 錯体触媒の設計と酸素によるエポキシ化反応の位置選択性制御) です。

今回の受賞研究は、触媒反応における分子内位置選択性制御を目指して、シリカ表面に固定化したRu錯体に、反応中間体と類似形状の分子を鑄型配位子として導入することで、新しい表面モレキュラーインプリンティングRu触媒を設計したものです。表面モレキュラーインプリンティング法は、酸化物表面に固定化した金属錯体の配位子を鑄型分子とすることで、触媒反応活性点である金属種の近傍に鑄型分子の形状を記憶した反応空間キャビティを構築する手法です。今回触媒反応 (エポキシ化反応) の対象とした有機分子、リモネンは、一つの分子の中に、内部および末端の二ヶ所にアルケン (C=C 二重結合) を有する分子です。しかし、末端アルケンより内部アルケンより反応活性が低くエポキシ化反応速度が遅いため、一般に末端アルケンのみを選択的にエポキシ化することは大変困難です。今回、リモネンの末端アルケンエポキシ化の中間体に類似した構造を有する分子を鑄型配位子として、リモネンの末端アルケンエポキシ化のための反応空間を有する表面モレキュラーインプリンティングRu触媒を設計しました。触媒調製各段階の構造を各種表面

構造解析を駆使して決定し、リモネンエポキシ化において末端アルケンが優先的にエポキシ化されることを明らかにし、エポキシ化反応の位置選択性制御、形状選択性の発現に初めて成功しました。

このような触媒反応における形状選択性、位置選択性の自在制御は、医薬品などの複雑な分子の合成のような現代社会で必要とされる様々な有用物質を選択的に創り出す新しい触媒設計に指針を与えるものであり、触媒設計における斬新なアイデアと一連の研究成果が高く評価されました。

また、井上科学振興財団第26回井上研究奨励賞を受賞しました。本奨励賞は理学、医学、薬学、工学、農学等の分野で過去3年の間に優れた博士論文を提出した毎年30名の若手研究者に対して贈呈されるもので、今回の受賞は邨次助教の東京大学大学院理学系研究科博士課程における研究成果をまとめた博士論文「新規レドックス多核遷移金属錯体の創製と核間電子相互作用の制御」に対するものです。以下にその内容の概略を示します。

電子移動反応は生体内における光合成システム、導電性ポリマーなどの

機能性分子や多電子触媒反応など様々な化学系において重要な役割を果たしています。本研究では、電子移動の担い手であるレドックス核間を連結する架橋部位が、電子移動の本質に大きく関与していることに着目し、それ自身が構造変化を起こす架橋部位 (**active bridging unit**) を組み込んだ新規なレドックス多核遷移金属錯体系を創製し、架橋部位の構造変化が電子移動に摂動を与える系の構築に成功しました。1例目では、モリブデンカルボニル錯体をコバルトおよびロジウムジチオラト錯体間に **active bridging unit** として組み込んだ異種金属三核錯体において、ジチオラト錯体間の電子的相互作用を電

極上の多電子移動の変化として取り出すことに初めて成功しました。また、本系の電極電子移動の多様性は、架橋部位のカルボニル基の構造変化、錯体自身の基底スピン状態変化に溶媒一支持電解質の外的効果が絡んだものであることを理論計算と実験を組み合わせで実証しました。2例目では、閉環⇔開環の光異性化率が極めて高く、さらに自身のレドックス活性のオン/オフが異なる波長の光により実現できるフォトクロミック分子、ジメチルジヒドロピレンを **active bridging unit** としてフェロセンと組み合わせた新規錯体系の合成に初めて成功し、光によるフェロセン核間の電子的相互作用の可逆変

換を達成しました。さらに、フェロセン部位の酸化により光を用いずに開環体から閉環体への異性化が起こることを新規に見出しました。

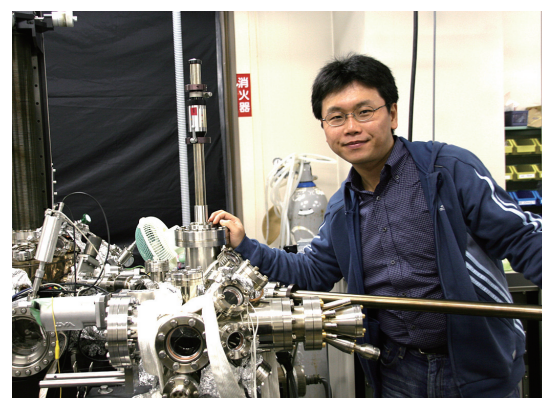
これらの研究は、電子移動に摂動を与える **active bridging unit** を導入した新しいコンセプトに基づく分子系を提案したものであり、1電子、多電子移動系の構築とその制御が可能となる指針を示した意義は極めて大きく、今後厳密な電子移動制御が求められる分子エレクトロニクスや電子移動材料、触媒等多くの分野に貢献することが期待され、井上研究奨励賞に選定されました。

(唯 美津木 記)

## 中川剛志助教に日本物理学会若手奨励賞

物質分子科学研究領域・電子構造研究部門の中川剛志助教が、第4回(2010年)日本物理学会若手奨励賞(領域9)を受賞した。受賞内容は、磁性超薄膜におけるレーザー光電子磁気二色性に関してであり、一連の3論文[(1) *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006) 237402; (2) *Rev. Sci. Instrum.* **78** (2007) 023907; (3) *Phys. Rev.* **B79** (2009) 172404]が対象論文とされた。中川氏は、磁性薄膜試料から放出される光電子の磁気円二色性を測定すると、ちょうど仕事関数程度のエネルギーの光を照射した際に、磁気円二色性感度が通常の場合よりも約2桁も向上することを発見した[論文(1)]。この発見によれば、現在、磁気ナノ構造を観測する分光学的手段として活用されている第3世代シンクロトロン放射光源を用いたX線磁気円二色性光電子顕微鏡法が、紫外光を用

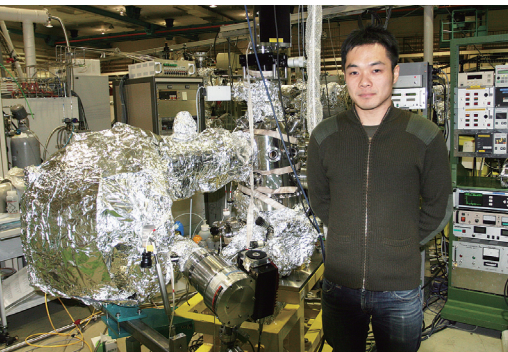
いてもある程度同様に遂行可能であることを示唆しており、これまで紫外光利用はX線利用に比べて感度が2桁程度低く、磁気円二色性光電子顕微鏡法の適用が困難とされていたが、本研究により2桁の向上が見込めればX線と同程度の感度での計測が可能となる。実際、中川氏は、Ni薄膜のナノ磁気構造の紫外磁気円二色性光電子顕微鏡像の観測に、紫外レーザーを用いて見事成功した[論文(2)]。さらに、レーザー光電子法では光子エネルギーが小さいため、より一般的な手法とするには二光子励起の利用が必須であるが、中川氏は、二光子光電子磁気円二色性の初観測にも一光子と同程度以上の高感度で成功し、光電子顕微鏡像も観測した[論文(3)]。これらの一連



の成果に対して同賞が受賞された。中川氏の一連の成果は、本賞以外にも既に日本表面科学会若手講演奨励賞が与えられ、また、国際会議での招待講演(3回)、日本物理学会誌ほかの総説(3篇)でも取り上げられるなど、広く国内外の各方面から注目を集めている。今後のさらなる発展が期待できる最先端研究である。

(横山 利彦 記)

## 山根宏之助教に第14回日本放射光学会奨励賞



日本放射光学会では、放射光科学分野において優れた研究成果をあげた35歳未満の若手研究者の功績を称えるとともに、今後の更なる活躍を奨励するために、毎年3名以内で奨励賞が授与されます。歴代の受賞者は全員大きく飛躍をしている人ばかりです。このたび、平成21年度（第14回）受賞者として光分子科学研究領域の山根宏之助教が選ばれ、平成22年1月の日本放射光学会年会で受賞講演を行うことになりました。タイトルは「高度構造制御による有機薄膜・界面電子状態の精

密実験」で、UVSOR施設における光電子分光研究の成果が認められたものです。対象となった研究内容は<http://www.ims.ac.jp/topics/2009/091209.html>をご覧ください。現在、山根助教はUVSOR施設の新たなツールである軟X線発光測定を手がけるとともに、有機・無機薄膜用精密電子分光装置を日韓の国際協力で立ち上げています。賞の趣旨に違わず今後の大きな飛躍を期待しています。

(小杉 信博 記)

## 秋山順研究員に第26回応用物理学会講演奨励賞



分子制御レーザー開発研究センター先端レーザー開発研究部門の秋山順研究員が、2009年9月に開催された第70回応用物理学会学術講演会において、第26回応用物理学会講演奨励賞を受賞した。対象となった講演タイトルは「異方性材料による新たなレーザーセラミックスに向けた検討」である。秋山氏はレーザー媒体の母材に光学活性元素として添加された希土類イオンにより顕在化する結晶磁気異方性に着目し、電磁場による光学材料の配向組織形成手法を確立すると共に、2at.%ネオジム添加フッ素アパタイト材料を用いた実証実験において従来不可能とされてきたレーザーグレードの異方性

透明セラミックスの創成に世界で初めて成功した。なお、本成果に関しては、米国光学会（OSA）のトピカルミーティングであるAdvanced Solid-State Photonics (ASSP) 2009(Denver, USA, Feb 1-4)のPost deadline Paperの一位に採択される等、現在多くの研究者から注目を集めている。今後、本研究独自の材料組織制御手法である電磁場を用いたマイクロドメイン構造制御による新規レーザー媒体の創成、更にそれらを駆使した“ジャイアントマイクロフォトンクス”というべき新たな光科学の展開が期待される。

(平等 拓範 記)

## 西條純一助教に分子科学会優秀講演賞

有機ラジカルや遷移金属錯体などの分子からなる磁性体は分子性磁性体と呼ばれていますが、これらの分子は特定の部位で隣接分子と接触した場合のみスピン間での相互作用が強くなるため、擬低次元磁性体が容易に得られるなど古典的な無機磁性体とは大きく異なる特徴を持ち磁気物性の研究上重要な役割を担っています。西條純一君は遷移金属アセチリド錯体が磁性材料としてかなりの可能性を秘めているという立場から、スピン  $S = 3/2$  のアセチリド錯体  $[\text{CrCyclam}(\text{C}\equiv\text{C-R})_2]^+$  ( $\text{R} = 3\text{-thiophene, Ph, Cyclam} = 1,4,7,11\text{-tetraazacyclotetradecane}$ ) をカチオンに用いた物質探索を行ない、

$S = 1/2$  の磁性アニオンである  $[\text{Ni}(\text{mdt})_2]^-$  ( $\text{mdt} = 1,3\text{-dithiole-4,5-dithiolate}$ ) との組み合わせにより  $[\text{CrCyclam}(\text{C}\equiv\text{C-3-thiophene})_2][\text{Ni}(\text{mdt})_2]$  (1) および  $[\text{CrCyclam}(\text{C}\equiv\text{C-Ph})_2][\text{Ni}(\text{mdt})_2](\text{H}_2\text{O})$  (2) という遷移金属アセチリド錯体からなる初の弱強磁性体を構築することに成功しました。今回の例では隣接するフェリ鎖同士の磁気モーメントが完全な反平行にはならず、互いに少し傾くことによってわずかな自発磁化が外部に現れていることを意味しています。この弱強磁性の発現機構として、本来なら結晶の持つ中心対称な対称性によって禁制となるはずのジャロシンスキー-守谷相互作用



が、結晶水分子の **disorder** によって局所的に対称性が破られるために許容となりスピンを傾けている、というモデルを提唱しました。本研究は新奇な磁性体を提供することにとどまらず、遷移金属アセチリド錯体の分子性磁性体としての可能性を実証することで新たな物質群への道を開いており、今後多様な物質開発が行われることが期待されます。

(西 信之 記)

## 若手研究者交流支援事業

## 01 東アジア首脳会議参加国からの招へい～第2期および第3期

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

20年度後期より開始された「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～」(JENESYSプログラム)も、21年度前期の第2期、後期より開始された第3期と無事連続採択となり、順調に活動が行われている。

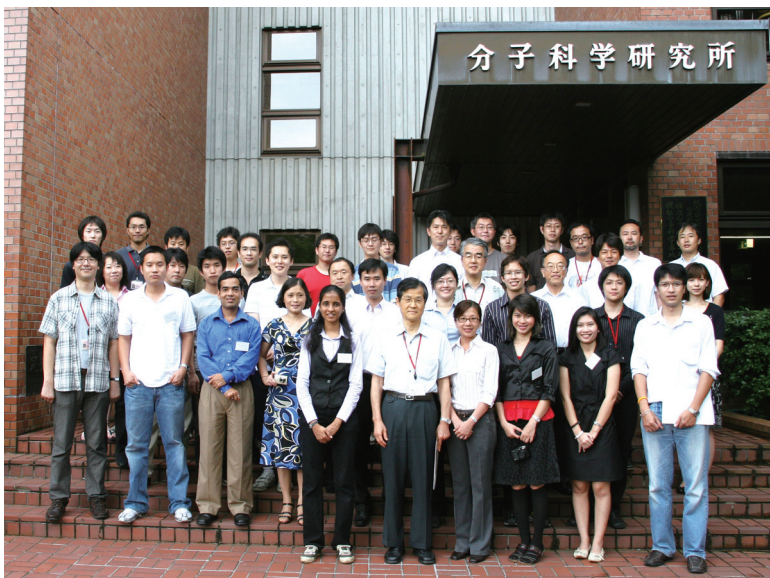
本事業は、安倍晋三内閣が第2回東アジア首脳会議(2007)の時に提唱した、EAS参加国から今後5年間、毎年6,000人程度の青少年を日本に招へいする交流計画に基づいたJSPSの事業である。次世代を担う若手研究者の計画的な交流により、アジアを中心とした国々との研究者間のネットワークの形成・強化、当該地域における高度人材育成及び科学技術コミュニティの形成等が期待される。

分子研が主催するプロジェクト課題名は『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。

第2期では、第1期よりも受入研究室

を増やし(13→23研究室)、より広範な研究分野をカバーすることが可能となった。半年のプロジェクトのためスケジュールはタイトで、4月に公募を原則とした応募を行い、4月末で候補者を全て決定した。準備期間が非常に短かったため、山手ロッジ閉鎖の影響により三島ロッジの空き部屋が足りず、今回は外部のマンスリーマンションと契約して各参加者の宿泊施設とせざるを得なかった。



募集はほぼ前回と同様、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り決定した。今回は1回目ということで応募者の動向が掴めなかったため受入教員からの推薦を採用したが、今回は直接推薦を撤廃しほぼ完全公募となるよう、

- 1) 指定交流相手機関からの推薦(学内公募を原則)
  - 2) ホームページを利用した公募
- の順で募集を行った。指定交流相手機関は以下の通りである：チュラロン

コーン大学(タイ)、マラヤ大学(マレーシア) 南洋工科大学、シンガポール国立大学(シンガポール) ベトナム科学技術アカデミー(ベトナム)。

また今回から、継続的な基礎研究、共同研究を奨励する目的で、前回参加者の中から希望者に対し、再度research proposalおよび帰国後のfuture planの提出を求めて審査を行い、招へい費用の一部を援助し、再来訪による共同研究の継続を支援する「revisit program」

を新たに開始することにした。

その結果、指定交流機関からの推薦6名、公募5名、リビジットプログラム2名、計13名の招へいを実施した。国別では、マレーシア1名、シンガポール2名、タイ6名、ベトナム2名、インド2名と、今回も多少タイに偏った結果となった。このことは、タイ国内において既に本事業が

高い評価を受けていることを意味しており、実際非常に多くの応募がタイから寄せられている。またキャリアの内訳は、博士研究員6名、博士課程学生7名となった。

招へいは2009年6～9月にかけて実施され、各研究者に応じて、30～60日の期間での研究プログラムが組まれた。また7月31日に、1名を除くほぼ全員の招へい者を一同に会し、全体会議とミニシンポジウムを開催した。本プログラムの大きな目的のひとつとして、将来にわたるアジア分子科学ネットワークの形成があり、各国の同世代



の若手研究者の横のつながりを形成する上でこの全体会議の役割は非常に大きく、実際参加者からは複数回の実施を希望する意見もあったほどである。

研究内容によっては既に論文投稿されている例もあり、またこのプログラムを機に共同研究が開始された例もあるなど、着実に成果が現れている。将来の広くアジア圏全体への分子科学ネットワーク形成へ向けてのひとつのチャンネルとして機能していくことが期



待される。

なお、21年10月からの第3期にも採択され、準備が開始されている。

第3期からの大きな違いは、これまで問題の多かった半年開催から1年間になったことである。その結果、審査、招へいまでに時間的余裕ができ、これまで活用できなかったロτζジの優先予約が可能となり、より円滑な招へいが可能となることが期待される。

また予算も通年になったことで増額



された(700万円→1000万円)ため、これまで予算枠の都合上60日間を限度としていた招へい期間を、短期滞在ビザの上限である90日間まで延長することが可能となり、これまでの参加者の多くの希望である、滞在期間の延長に応えられることとなった。本稿が掲載される頃には、参加者も全て決定し、4月からの招へい開始に向けての準備が行われているものと思われる。



## 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」

### 02 日韓分子科学シンポジウム報告

報告：光分子科学研究領域 教授 岡本 裕巳



去る2009年7月12日から14日にかけて、日韓分子科学シンポジウムが兵庫県淡路市の淡路夢舞台国際会議場で開催された。これは1984年以来、分子科学研究所と韓国科学技術院(KAIST)自然科学部の間の分子科学協定(2006年度から韓国側主体が韓国化学会(KCS)物理化学部会となった)に基づき、その事業の一環として2年

に1度、その都度テーマを決めて日本と韓国において交代で開催してきているものである。今回はその第13回目に相当する。

今回のシンポジウムは「物質分子科学・生命分子科学における化学ダイナミクス」を主題とし、日本から13名、韓国から11名の、この分野の最先端で活躍する研究者の招待講演で構成した。化学ダイナミクスは、分子物質の励起と緩和等の高速現象に始まり、構造変化、化学結合の組み替え、高次構造変化、物質特性の変化など、様々なタイムスケールの素過程を含み、化学反応のみならず、様々な物質や生体分子の機能などで重要な役割を担っている。その研究方法は、様々なレーザー分光法、

超高速分光法・回折法など、常に時代の先端の実験手段が用いられてきており、また近年では大きく進展した様々な顕微鏡法とも結びついて、新たな展開が生まれている。反応ダイナミクスの理論的方法も近年格段の進歩を遂げており、また大型計算の分野でも常に先端的研究の対象となっている。その意味でこの討論主題は、最先端の研究方法論を結集した、物理化学の中心的課題の一つとなっている。分野の進展を概観することで、今後の物理化学の動向を議論する格好の主題であるとの考えで日韓の執行部の考えが一致し、この主題でシンポジウムを行うこととなった。講演者は下記のとおりである。

## 分子・光ダイナミクスの基礎に関する実験的・理論的研究

高橋正彦（東北大）、岡田美智雄（大阪大）、Sang Kyu Kim（KAIST）、Yoon Sup Lee（KAIST）、高橋 聡（東京大）、Seokmin Shin（ソウル国立大）、Sang Kuk Lee（釜山国立大）、太田 薫（神戸大）、Taiha Joo（浦項工科大）

## 物質科学とイメージング

信定克幸（分子研）、Dae Hong Jeong（ソウル国立大）、井村考平（早稲田大）、Yong-Rok Kim（延世大）、伊都将司（大阪大）、横山利彦（分子研）、Cheol Ho Choi（慶北国立大）、松本吉泰（京都大）

## 生体分子科学におけるダイナミクス研究

Young Kee Kang（忠北国立大）、林 重彦（京都大）、Young Min Rhee（浦項工科大）、平田文男（分子研）、水谷泰久（大阪大）、Manho Lim（釜山国立大）、桑島邦博（分子研）

日韓ともに、いずれも質と密度の高い講演内容で、また多くの講演者が広い専門分野の聴衆の興味をそそる内容で講演し、議論も大変活発であった。今回も日韓両国がこの分野において世界レベルで十分リードしていることが感じられた。会場に関しては、韓国サイドからの提案もあり、分子研から離れたリゾート地に設定したが（前回済州島で歓待を受けたこともあり、無下には断れなかった面もある）、それによって参加者は会期中シンポジウムに没頭でき、結果的に大変満足の行くものとなった。多くの参加者が、会期中晴天に恵まれたにもかかわらず、殆ど会場から離れず、会議に集中していた。前回の韓国開催のシンポジウムでは、KCS物理化学部会のサマーシンポジウムを兼ねていたため、多くの学生・若

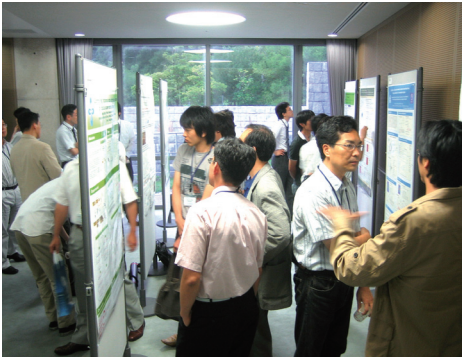
手研究者の出席があり大変盛会となった。日本側ではそのような開催形式は取れなかったが、前回同様に若手の積極的な参加を奨めたいと考え、ポスターセッションを設定したところ、25件のポスター発表があった。結果、参加者総数は52名を数え、規模としても盛り上がったと思う。

今回はスケジュールが相当タイトとなり、エクスカージョンを設定することができなかったが、セッション終了後に、明石海峡大橋の近くの日帰り温泉への入浴ツアーと、地元の鮮魚料理店での打ち上げを行い、大半の韓国側参加者と数名の日本側参加者が露天風呂と刺身を楽しんだ。韓国からの参加者も楽しんで帰国してくれたものと思っている。

本シンポジウムは、齊藤真司教授（分

子研）、水谷泰久教授（大阪大）、筆者（岡本、事務取扱）、およびKCS物理化学部会から選出されたManho Lim教授（釜山国立大）がco-chairとして組織を担当した。組織委員の各位、特に韓国サイドを一手にとりまとめて頂いたLim教授には、心から謝意を申し述べたい。また、このシンポジウムの実行にあたっては、日本学術振興会（JSPS）のアジア研究教育拠点事業（Asian COREプログラム）、（財）井上科学振興財団及び（財）兵庫県国際交流協会の国際研究集会開催助成、また私企業2社からの援助を頂いた。これらの資金援助にも謝意を表す。次回の日韓分子科学シンポジウムは、2011年に韓国で開催する予定（テーマは来年度議論の予定）である。





## 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」 03 「日中機能性超分子構築シンポジウム」

報告：物質分子科学研究領域 准教授 江 東林

平成21年8月2日から5日にかけて、札幌にてJSPSアジアコアプログラム「日中機能性超分子構築シンポジウム」が行われた。本シンポジウムでは、自己組織化を中心議題に、有機分子、無機分子、高分子、生体関連分子などの幅広い物質群をカバーする招待講演とポスター発表が実施され、当分野の日中両国研究の最先端を一覧することができた。本JSPSアジアコアプログラムの支援のもと、分子科学研究所に加え、東京大学、京都大学、名古屋大学、大阪大学、東京

工業大学、北海道大学、立命館大学等の研究機関から第一線で活躍されている15名の研究者をお招きした。また、博士課程学生、博士研究員、助教を中心に、12名の若手研究者がポスター発表を行った。中国側では、中国科学院化学研究所の他に、北京大学、清華大学、吉林大学、復旦大学、四川大学などの重要研究機関から中国を代表する研究者14名が参加され、また、台湾側から教授1名が参加され、併せて計31件の招待講演を行った。研究内容は異分野を横断す

るものが多く、長時間にわたって熱心に質疑・議論を行うことができた。

本シンポジウムでは、極めてプライオリティの高い成果が発表され、当分野における日中両国研究の先端性が示された。また、多数の大学院学生や博士研究員などの若手が参加しているため、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。日中両側の参加者から互いに理解を深めた「非常にいい機会」との評価を受けました。



## 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」 04 第4回「冬の学校」開催報告

報告：理論・計算分子科学研究領域 准教授 信定 克幸

日本学術振興会は平成17年度より新たな多国間交流事業として、アジア研究教育拠点事業を開始しているが、本事業は「我が国において先端的又は国際的に重要と認められる研究課題について、我が国とアジア諸国の研究教育拠点機関をつなぐ持続的な協力関係を確立することにより、当該分野における世界的水準の研究拠点の構築とともに次世代の中核を担う若手研究者の養成を目的として」実施されるものである。分子科学研究所はこの趣旨に基づき、平成18年度より「物質・光・理論分子科学のフロンティア」と題して、分子科学研究所、中国科学院化学研究所、韓国科学技術院自然科学部、台湾科学院原子分子科学研究所を4拠点研究機関とする日本、中国、韓国、台湾の東アジア主要3カ国1地域の交流事業を行っている。その事業の一環として、分子科学の今後の発展を担う人材を東アジア地域から多数輩出することを目指し、毎年4拠点研究機関が持ち回りで大学院生や若手研究者を対象とした冬の学校を開催している。既に3回(第1回北京、第2回岡崎、第3回台湾)が行われており、今回は第4回目の冬の学校が2009年12月13日(日)～12月15日(火)までソウル国立大学(ソウル市)で開催された。日本からは20名(教授・准教授6名、助教・博士研究員・総研大生12名、事務スタッフ2名)の参加であった。

今回の冬の学校は、実質2日間に一般講義と大学院生、若手研究者によるポスター発表が行われる密度の濃い形式となった。日程の詳細は右プログラム参照。一般講義は「物質・光・理論」3分野からバランスよく講演者が選ばれており、日本、中国、韓国、台湾から各3件ずつの講演、客員等の形でソウル大学と

関係のあるフランスとアメリカからの研究者による1件ずつの講演、合計14件の講演が行われた。いずれの講演も大学院生や非専門の若手研究者も意識した基本的なイントロダクションを含みながらも最新の研究成果も盛り込んだものであり、参加した若手の皆にとっては非常に得るものが多い講義の連続であったと言える。一方、大学院生や若手研究者によるポスター発表も「物質・光・理論」の3分野に渡って合計31件行われた。1時間30分の割り当てがあったが、いずれのポスター発表も割り当て時間中は正に休む暇も無く盛んに質疑応答が行われており、特に大学院生にとっては英語での学術発表の絶好の機会になったと思われる。

全体としては例年よりは少し規模が小さくなったかもしれないが、逆にお互い

のコミュニケーションが緊密になり、会議全体を通じて和やかな雰囲気があったような印象を受けた。帰国前の前日夜には、韓国焼肉料理の店に参加者が一堂に会して、親睦会を行い更に友好を深めることができたと思われる。

今回の冬の学校開催にあたっては、特に韓国側の献身的な準備と運営に負うところが極めて大きい。ソウル国立大学のS. Shin教授とH. Kang教授、韓国科学技術院のY. S. Lee教授とS. K. Kim教授には厚く御礼申し上げる。また、日本側の諸般の事務手続きを一手に引き受けて頂いた野村恵美子さんと朝岡歩美さんに感謝の意を表します。最後になりましたが、逐一名前を挙げることはできませんが、今回の学校に参加、携われた皆様、あらためてありがとうございます。

### The 4th Winter School of JSPS Asian CORE Program for Frontiers of Materials, Photo-, and Theoretical Molecular Sciences

#### December 13 (Sun)

18:30 - 20:00 Welcome Dinner

#### December 14 (Mon)

08:50 - 09:00 Welcoming Address (Director, BK21, SNU) Opening Address (Director, CMD, SNU)

Session 1 [Chair: Seokmin Shin (SNU)]

09:00 - 09:50 **Jean Pierre Shermann** (U Paris13) Experimental determination and modelling of intrinsic properties of small biomolecules

Session 2 [Chair: Sanky Kim (KAIST)]

10:10 - 11:00 **Kaito Takahashi** (IAMS) Theoretical Calculation of Overtone Spectra: what is the origin of the large width

11:00 - 11:50 **Yousung Jung**(KAIST) Fast methods for electron correlation energies

Session 3 [Chair: Taiha Joo (POSTECH)]

13:30 - 14:20 **Kenji Omori** (IMS) Spatiotemporal Coherent Control with Picometer and Attosecond Precision: from Laser - Cooled Atoms to Bulk Solid

14:20 - 15:10 **Manho Lim** (PNU) Femtosecond IR spectroscopy and its application

Session 4 [Chair: Katsuyuki Nobusada (IMS)]

15:30 - 16:20 **Hua Jiang** (ICCAS) A discovery journey at the interface of chemistry and biology

16:30 - 18:00 Poster & Refreshments

18:00 - 20:00 Banquet

#### December 15 (Tue)

Session 5 [Chair: Donglin Jiang (IMS)]

09:10 - 10:00 **Jinsang Kim** (U Michigan) Design Principles of Functional Conjugated Polymers for Biomedical and Optoelectronic Applications

Session 6 [Chair: Taek Dong Chung (SNU)]

10:20 - 11:10 **Masahiro Hiramoto** (IMS) Solar Cells Using Organic Semiconductors

11:10 - 12:00 **Hong - Bing Fu** (ICCAS) Controlling the Size and Shape of Organic Lowdimensional Materials and Its Effect on the Optical Properties

12:00 - 13:30 Lunch & Campus Tour

Session 7 [Chair: Younjoon Jung (SNU)]

13:30 - 14:20 **Seonghoon Lee** (SNU) Materials Science on a Nanoscale

14:20 - 15:10 **Wei - Hua Wang** (IAMS) Electrical spin injection and transport in graphene layers

15:10 - 16:00 **Sheng - gui He** (ICCAS) Bonding and reactivity of transition metal oxide clusters

Session 8 [Chair: Cheolho Chai (KNU)]

16:20 - 17:10 **Ching - Ming Wei** (IAMS) Material Simulation using Quantum Monte Carlo

17:10 - 18:00 **Hisashi Okumura** (IMS) Generalized - Ensemble Molecular Dynamics Simulations for Biomolecules

18:00 - 18:10 **Heon Kang** (SNU) Closing Remarks

18:30 - 20:00 Dinner

December 16 (Wed) Departure



## 外から見た分子科学研究所



### 渡辺 芳人

(名古屋大学 副総長)

わたなべ・よしひと / 1975年東北大学理学部化学科卒。筑波大学化学系博士課程、Michigan大学化学科博士、Princeton大学化学科上級研究員を経て、慶応大学医学部助手、通産省工業技術院化学技術研究所主任研究員、京都大学工学部助教授。

1994年10月に分子科学研究所教授、2002年4月より名古屋大学大学院理学研究科教授、2006年11月同物質科学国際研究センター教授、2009年4月より名古屋大学副総長（研究・国際企画関係担当）

### はじめに

僕の研究分野が生物無機化学ということもあり、名古屋大学に移動して以降、学会などで分子研の皆さんにお会いする機会はほとんど無くなった。もちろん、田中晃二先生や青野重利先生は無機・錯体化学、生物無機化学がホームグラウンドなので例外的にしょっちゅうお会いする。その他には、時折、名誉教授の北川禎三先生と顔を合わせることがあるが、海外の学会で会う回数の方が多いかも知れない。昨年、大森賢治先生に「量子のさざ波」というタイトルのご講演を、名古屋大学化学G-COEセミナーでお願いしたが、久しぶりに分子研らしいお話を伺うことが出来たような気がする。

### 分子研の存在感

名古屋大学の理学研究科・物質理学専攻（化学系）には、分子研出身者が大勢いる。現役教授では、私以外に篠原久典先生、阿波賀邦夫先生、田中健太郎先生、OBでは大峯巖先生、一昨年亡くなられた関一彦先生である。そういう意味で、我々の学科における分子研の存在感は、相当なものである。当然、彼らの研究室の学生にとって分子研は非常に近い存在となっているが、これは、名古屋大学が特殊な環境にあるだけで、一般の大学では、分子研そのものを知らないという大学院生がほとんどであろう。たとえば名古屋大学でも、

工学部系化学の学生がそれ程分子研や総研大を認識しているかということ、答えはNOである。また、流動教員制度がなくなったことで、多くの大学の化学系教員にとっても、分子研は物理化学系の研究所という以上の認識は無いのではなかろうか。

分子研が出来た当時は、「助手の人でも、希望すれば一億円程度の大型装置がかなり自由に購入できた」と何人もの先生から体験談として聞いている。しかし、法人化に加えて、昨今の経済状況の悪さによって、分子研の中型・大型の測定装置なども更新が難しくなってきた。昨年の補正予算でやっと一息ついたのではあるまいか。事情は大学も同じ事であるが、最新の装置が分子研には揃っているという状況が崩れてくると、分子研自体の位置づけが再検討される時期が来るのではないかと思われる。

### 分子研の役割

そもそも、分子研の今日的な役割とは何であろうか？ 日本に数台しかない時間や空間などに対して最高分解能の測定装置やレーザー関連装置、高真空装置などを特権的に導入していた時代は、分子科学の総本山として物理化学以外にも錯体化学、有機化学、生化学分野の大学関係者が「分子研詣で」によって、自前では出来ない測定などを行っていた。そこには分子研に行けば

何とかなるという状況があり、測定機器等の共同利用が盛んに行われていた。もちろん、現在でも共同利用や共同研究などは行われているが、利用者が限られた分野に集中しており、広い意味での「化学者のための分子研」という機能を果たしているとは言い難い状況である。私は、Scienceそのもので分子研の存在をアピールする必要がこれまで以上に求められるようになってくると考える。残念ながら、分子研を離れておおよそ10年、分子科学の外で仕事をしている僕の耳に分子研の活発な活動が余り見えてこない。という事は、一般の化学者コミュニティの中では、それ以上に分子研の存在感が薄いということになる。

ここでScienceという言葉を使ったが、この点については、二つの側面から考えたい。一つは、分子研の研究者個人の研究活動である。この点については、世界中の研究者による分子研の個々の研究者に対する評価が高いことは言うまでもないし、様々な指標でも高い評価が出ていると思う。もう一つの側面は、研究所という組織、あるいは総研大の専攻としての活動である。喩えとして、21世紀COE、グローバルCOEやWPIなどを挙げれば良いであろうか。これらは、組織としての教育・研究活動が重要であるが、分子研がそれらに採用されていないことはOBとしては、残念なことである。COE等

は、採用された国内の各々の拠点が相互に意識しながら、大学院生、ポスドク、さらに若手助教が研究者として成長するように様々な支援プログラムを提供している。本来、COEであるべき分子研が、こうしたプログラムをどう位置づけているのであろうか？ 海外から研究者を中・長期に招聘する予算を持ち、ポスドクの人件費も手当てされている分子研だからこそ出来る、「グローバルCOEかくあるべき」という活動が見たかった。

新政権になって、政府の学術研究、高等教育の位置づけが不鮮明になっている。首相は、それらは非常に重要だと言いながら、一方で「仕分け」という別働隊が、活動の中味や実績評価とは無関係に予算をバツバツと切り捨てていく。これも政府の方針である。一方で、おいしい約束をしながら、「そうしたいけど、『仕分け』で指摘されているので……」と、あたかも自分とは関係ないところで反対が出ているので、なかなか学術予算が確保できないかのような責任を転嫁する態度である。こうした状況では、WPI等の施策は消えてしまうかも知れない。そういう意味でも、日本の学術研究を飛び抜けて牽引する研究機関としての分子研の役割は、益々重要になってくる。自分の研究が素晴らしいことで満足することなく、組織としての分子研の存在感を是非示して欲しい。

## 分子研の社会的役割

研究以外で分子研が化学者コミュニティで果たしてきた重要な役割の一つに、「学術基盤」に関する約十年に及ぶ意見交換会の主催を挙げたい。学術会議化研連と日本化学会との共催の形を取りながら、会議のアレンジ、報告書の作成など、非常に重要な役割を分

子研が果たしている。この会議が始まった当初は、学術政策について積極的に発言し、文部科学省の学術政策に影響を与えてきた諸先輩がいらっしまった。現在の分子研は、このような活動でも影が薄いのではなかろうか？ 分子研の教員の中には、「それは違う」と反論したい方もいらっしやるであろうが、やはり、見えてこない。日本化学会や学術会議などの広範な科学者コミュニティの中で、分子研はオピニオンリーダーとしての役割を果たしているであろうか？ 組織がコンパクトである分、教員が負うべき様々な「雑用の負担」は、大学に比べて圧倒的に少ない。その分、研究者コミュニティに対する貢献が求められるのではなかろうか。

## 番外編

昨年4月から、思いがけず研究と国際を担当する副総長を拝命することになった。副総長は教授の併任職なので、理事のように大学運営に100%責任を負う行政職とは異なる。そういう意味で、多少精神的には負担が軽いと思っていたのだが、ある高名な方から、「ほとんどの大学の理事や副学長は、相撲協会の理事と同じで、ただ相撲が強いだけで……。君は、そんなことにはならないだろうね。」と釘を刺された。実際に仕事を始めて見ると、これはものすごく重労働の世界である。会議、打合せ、出張、プラン作成など、一週間のスケジュールはびっしりである。その主因は（私の個人的な見解であるが）、法人化である。法人化以前は、大学の自治という言葉は格好がよいが、基本的には文部科学省の担当部署が様々な指示を行い、その範疇で大学の独自色が申し訳程度に出ていたのである。分子研も含めて、大学の執行部はその範疇で文部科学省と折衝していた。それ

に対して、法人化によって、文部科学省は「大学の責任でやってください」という態度に出ている。これは、本当は実に素晴らしいことで、運営費交付金に、これは「人件費」、あれは「旅費限定」などという面倒な色がつかなくなった。大学が自由な裁量で経費を「仕分け」出来るのである。ところが、そうは言っても勝手に何をしても良いわけではない。会計検査が目を光らせており、年度計画の達成状況、大学評価等が目前に迫ってくる。一方で、グローバルCOEをはじめとして、振興調整費など様々なカテゴリーで競争的資金を獲得するために、大学は多少背伸びをした提案を行う。予算を獲得し、それに付随する間接経費がなければ、大学運営はたちまちバンクするからである。背伸びをしてみたものの、実行する段階で申請書の提案が実施困難となる局面も出てくる。こうしたことを、当然のことであるが、大学の責任でクリアしていく必要がある。組織規模が大きくなれば、それに応じて懸案事項も増えてくる。

忙しさの余り、ついつい「文句を言いたくなる」事も多い。すなわち、「我、笛吹けど、汝ら踊らず」と。しかし、一般の教職員に対する発言として、自戒の意味を込めて僕自身が禁句にしている言葉は、「時間が無くて……」、「色々難しくくて……」、「周りが言うことを聞いてくれなくて……」である。

本年4月からは、大峯巖先生が分子研の所長に就任される。「時間が無くて……」、「色々難しくくて……」、「周りが言うことを聞いてくれなくて……」等の言葉が大峯先生の口から出ないように、分子研の皆さんがしっかりと支えて、新たな分子科学研究所を創り上げてくれることを期待して、本稿を閉じたい。



## 分子研から十年

### 天能精一郎

(神戸大学大学院工学研究科教授)

てんのう・せいいちろう / 1989年京都大学工学部石油化学科卒業、1994年同大学大学院理学研究科博士後期課程修了、分子科学研究所助手、名古屋大学助教授・准教授を経て、2009年より現職

1994 - 1999年までの5年間、理論研究系(部門)・岩田グループの助手として分子研でお世話になりました。所属が名古屋に変わった後も竜美ヶ丘の宿舎から通い続け、分子研時代と合わせると計15年間岡崎の住民として生活しました。分子研は楽しい思い出ばかりで、この紙面では到底書き尽くすことが出来ません。国研で何も考えずに基礎研究に没頭できる恩恵に浴することが出来たのが最大の理由でありますし、これまで機会が有りませんでした。当時お世話になった方々(入所時の伊藤所長、出所時の茅所長、岩田先生や現所長の中村先生を始めとする当時の理論系の先生・同僚達)に深く御礼申し上げます。

2009年4月に計算科学専攻を含む神戸大学大学院システム情報学研究科の設置母体である工学研究科に移りました(システム情報学研究科は2010年4月設置予定、現在の所属は工学研究科情報知能学専攻)名古屋大学ではポスドク主体の研究室を運営していましたので、3名の優秀な研究員と共に殆どアクティビティーを落とすこと無く新しい環境に移行出来ました。工学研究科は六甲台に位置しています。ブダペストの量子化学仲間がドナウ河岸の世界一眺めの良いオフィスを自慢していましたが、キャンパスから楽しめる大阪湾の眺望はそれに勝るとも劣りません。神戸は魅力的な街であり、学生時代を

過ごした京都やお隣の大阪とは同じ関西圏でもかなり異文化です。(帽子を冠った老若男女が多く、私も大して使わない夏帽子を2ヶ月で5つも買ってしまいました。)

東西の交通も便利が良く、専攻の新歓などは毎回違う三宮のレストランで行なわれています。

研究の方は、名古屋で始めた露に電子相関を考慮した高精度電子状態理論が主力課題です。従来の「一電子軌道」の概念を超える「ジェミナル(二体相関因子)」を量子化学計算に使おうという考えですが、5年前に湯川ポテンシャル経由の計算法を見つけたスレーター型ジェミナルを用いたF12理論が、近年の分子軌道法の分野で大きなブレークスルーとして世界的な発展を見せています。一部の手法は、多くの量子化学プログラムで数年以内に一般の研究者が使用可能になると思います。4年程前からは Crest の予算を頂き、研究室で開発していた Gellan 量子化学プログラムをベースに生体系の励起状態や物性計算のマルチスケール計算法の研究を行っています。KAIST から来た Jung 博士が中心となって一般化混成軌道QM/MM法の開発を行ない、大学の後輩でもある理研の杉田さんらとやっている酵素反応の他、量子化学計算をエンベッドした分子動力学シミュレー

阪神御影にある某立ち呑み居酒屋。神戸はB級グルメもお洒落で女性客も多い。



ションによるCDスペクトルやNMRの遮蔽定数とタンパク質の構造変化の関係を研究しています。従来の量子化学計算あるいは分子シミュレーション単独では得られない重要な計算化学のアプローチです。Gellan プログラムには RISM-SCF 法等の積分方程式関係の手法も実装されています。又、地理的に京都も近いので、分子研時代からの付き合いである谷村さん(京大理化)とその学生さんで量子化学的手法を利用した溶液の振動スペクトルの研究も始めました。

神戸大学には理学研究科と工学研究科に化学と応用化学がそれぞれ有り、理学研究科には富宅先生や富永先生といった物理化学でお馴染みの分子研OBの方々が活躍されています。神戸に赴任して先ず驚かされたのは理論化学の研究室が一つも無いということです。(少し前まではやはり分子研OBの高田さん(京大理生物物理)が理学研究科に居られたのですが。)それまで理論研究の盛んな所ばかりを渡り歩いて来ましたので、化学に理論が無いというのは考えた事ありませんでした。確かに以前から日本では東大を始めとして理論・計算化学の研究室が不在のデパー

トメントが多いようで、諸外国のスタンダードと比べるとかなり見劣りする状況ですので、少し考えないとまずい気がします。量子化学も統計力学も長い歴史がある学問であり、実験家の中にも理論に理解の深い方が居られるのに感心させられますが、研究や専門性となると視点が違うケースが多いように思います。

分子研へは次世代スパコンの会議等で訪れる機会があり、理論部門や計算機センターのメンバーにお会い出来るのを楽しみにしています。次世代スパコンに限らず、今回の事業仕分けのような先進国の証である科学技術や基礎研究に必要な予算を無駄か否かとかい

う議論は殆ど意味がありませんし、極めて客観性に乏しい気がします。私も殆どの論文の計算はノートパソコンで済ましてしまう方なので、最初は並列計算等というテクニカルなことに労力を費やすことに積極的ではありませんでした。しかしながら、現在使える並列計算機のコア数はせいぜい数千であるのに対し、次世代スパコンは64万であり、ここ1-2年でコア数が2桁も増加することが予想されています。このような劇的に進化する計算資源を本当に使いこなすことが出来れば、リアルで100年かかる計算が1時間強で可能となる訳であり、極めて重要な意味を持つ理論計算の論文がNatureや

Scienceに幾らでも出るでしょう。それを実現するには、既存の量子化学の計算手法やプログラムの徹底的な見直しを行なう必要がありますし、そこに新しい飛躍とチャンスがあります。若い研究者の方々には是非ともそのような機会を積極的に活かし、世界をリードする活躍をして頂きたいと思います。

注：大型計算機がとてつもない巨人となるであろうという先駆者の予測と、根本問題の提案と解決は人間の頭でしか出来ないという事実については以下の文献を参照

湯川秀樹 創造的人間  
藤永 茂 分子軌道法



初夏にドイツ・カールツルーエのWim Klopper教授を訪問した時の写真。  
奥の私の右からTew博士、Wim、Stephan Bernadotte君。Stephanは既に名古屋時代の私の研究室に二度滞在している。





## 分子研を去るにあたり

**彦坂 泰正** 新潟大学 理学部自然環境科学科 / 大学院自然科学研究系 准教授  
(前 極端紫外光研究施設 助教)

### 異動のご挨拶

ひこさか・やすまさ / 1992年東京工業大学理学部化学科卒、1997年東京工業大学大学院理工学研究科博士課程修了。分子科学研究所、物質構造科学研究所、英国オックスフォード大学での博士研究員を経て、2003年10月分子科学研究所極端紫外光研究施設助手。2009年9月より、現職。



分子科学研究所には、博士課程の3年間（特別研究学生）とその後の1年間（博士研究員）、さらに数年おいて、助手/助教としての約6年間、通算すると計10年間も在籍させていただいたこととなります。特に、助手/助教としての6年間はあっという間であったように感じます。これは、歳をとって月日が過ぎるのが早く感じるようになったためだけではなく、それだけ充実して楽しい日々を過ごすことができたからだと思っています。分子研の皆様、とくにUVSOR関係の方々には、公私に亘りいろいろ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。

UVSORは、2003年の蓄積リングの高度化とそれ以降に順次行われた挿入光源の導入により、真空紫外域では世界的に最も競争力の高い放射光施設の地位を維持しています。そのような先鋭的な施設であるUVSORですが、それに関わる誰もが昔から変わらず感じることで、それは他の放射光施設には無いアットホームさでしょう。これは、単にスタッフの面々の人柄だけではなく、利用者に優しい運用やサポートの体制等の全般的な印象から、そのように感じるのだと思います。面白そうな

データが取れつつあるので運転時間を延長して欲しい、とか、運転条件を変えて欲しい、というような利用者の我儘な要望を柔軟に聞き入れようとする放射光施設は、世界的にも稀有でしょう。一方、施設スタッフといえども施設の中に拘束されず、世界の他の先端的放射光施設で経験を積むことが奨励されていることは、数ある放射光施設の中でUVSORに特異なことのように思います。これは、他の施設での経験をフィードバックすることでUVSORの重点化の方向性を決めようという、施設長の英明な戦略によるものです。そのおかげで、私は後ろ髪を引かれることもなく積極的に外に打って出て、多くの経験を得ることができました。このような度量の広い施設のスタッフの一員であれたこと、またこの施設を利用して長期間自在に研究できたことは、大きな幸運であったと思っています。

大学に異動して、すでに数か月が過ぎました。研究所とは全くミッションの異なる地方大学の職場環境に若干は戸惑うこともあります。予想していたよりも居心地良く過ごしています。私は、放射光を用いた原子や分子

の電子状態や素過程の研究をしております。このような放射光を利用する研究は、実は（地方）大学の研究者にマッチしているかもしれないと感じ始めています。当然ですが、放射光を用いる実験は必然的にUVSORのような放射光施設で行うことになります。そのため、大学の研究室に大きな実験スペースが必須というわけではありません。また、放射光施設で共同利用に提供されている計測機器等を活用することにより、研究装置の全てを自分で賄わなくても研究の実施が可能です。

今後は、これまで以上にUVSORにお世話になりながら、研究を進めてまいたいと思っています。



外国人研究職員の

# 印象記

## IMS impression

---

Dah-Yen Yang

Institute of Atomic and Molecular Science,  
Academia Sinica, Taipei, Taiwan

### 1. October IMS, perfume

Walking in the IMS garden in October, fragrance floats in the air everywhere. This scent comes from the petals of sweet osmanthus. I realized a lot of bush being arranged in tiers in front of IMS buildings. This kind of shrub does not grow in Taiwan. Starting from the end of January, I was here more than nine months.

### 2. January, arrive IMS

Though it is the second time for me to visit IMS, I am still confusing of the circumstance at beginning. Within one week, I have a chance to visit Chiba University. We take Shin-Kan Sen to pass through Tokyo. When closing to Tokyo, from the train I saw Fuji Mountain. It is the first time for me to see it. The top of Fuji Mountain is covered by snow. It is hard to describe how pretty it is. One more week later I also attend a nano-medicine conference. This is the first time for me to know the activeness of Japanese science.

### 3. April 10, Cherry blossom view Festival

There is an Okazaki river crossing the downtown. In my first time visiting Okazaki, I leave in the Grand Okazaki Hotel. It is close to the riverside. I already realized this is a

beautiful river. Certainly close to the hotel there is an Okazaki castle. Nowadays most of Japanese castle is turned into museum. Archeology is always fascinating to me. In April, there is a blossom view festival. Many people come to the riverside, with some friends or families, enjoy their meal and drinking. But amazingly enough it is not clamor. Along the river bank there are many cherry blossoms cultivated with pink and white colors.

### 4. August 1, 2009 fire work festival

In August 1st there is a very famous fire work show. Starting from the noon, there is a parade with samurai suits. At the night time, many people dressed traditional Japanese kimono joining the annual celebration. However, after two third of the fire work show there came a heavy rain.

I then learned that since Tokugawa Ieyasu (徳川家康) the cherry blossoms were brought up and the wire work had been hold for a long time. I like a country with tradition.

Many thanks to Prof. Ohmori and JSPS for this wonderful opportunity.



## 安 念 小百合

あんねん・さゆり

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



6月16日より、分子スケールナノサイエンスセンター平本Gでお世話になっております。有機太陽電池の分野はこれまで携わったことがなく、まだまだわからないことだらけで、いろんなことを教わっている毎日です。また、この辺りに来て間もないので、地理やお店なども勉強中です。いろんなことを吸収していけるようにがんばっていきたいと思います。よろしくおねがいします。

## 田 代 基 慶

たしろ・もとみち

理論・計算分子科学研究領域  
計算分子科学研究部門 特任助教



京都大学理学研究科にて博士課程を修了した後ドイツ・アメリカなどを転々としてきましたが、平成21年7月より計算科学研究センターの江原グループに加わりました。

ここしばらくは散乱理論を利用した電子・分子衝突過程や光電離課程の計算などをやっています。

分子研という恵まれた環境にいる機会を活かして、面白い研究を進めて行ければと思います。

## 岡 野 泰 彬

おかの・やすあき

技術課  
光技術班 光計測技術係 係員



東京工業大学にて学位取得後、NTT物性科学基礎研究所、大阪大学レーザーエネルギー学研究中心、東京大学理学系研究科を経て、平成21年10月に分子研レーザーセンターに着任しました。これまでは、高強度のフェムト秒レーザーを用いた量子ビーム発生や応用に関する研究を行ってきました。レーザーセンターでは装置・方法論の開発および装置の維持発展を担当します。

どうぞよろしくお願いいたします。

## 松 田 晃 孝

まつだ・あきたか

光分子科学研究領域  
光分子科学第三研究部門 研究員



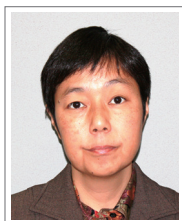
東京工業大学大学院総合理工学研究科で学位取得後、分子科学研究所IMSフェロー、ストックホルム大学物理学部博士研究員を経て平成21年10月に再び分子科学研究所に研究員として着任いたしました。

新たな気持ちで頑張っていきたいと思いますので、どうぞよろしくお願いいたします。

## 寺 内 かえで

てらうち・かえで

技術課  
学術支援班 学術支援係 係員



11月から広報室に加わりました。これまでに、技術者、研究者、教育者など、大変に変化に富んだ人生を送ってきました。これらの経験を活かし、サイエンスコミュニケーターとして、分子科学を一般の方々に身近に感じていただけるよう、さまざまな活動をさせていただきたいと思っております。

皆様にご協力をお願いすることが多いかと思いますが、よろしくお願いいたします

## 分子研技術課

UVSOR トップアップ運転に向けて  
——全周遮へい新規導入

光技術班 林 憲志

UVSOR 施設は30年近くも全国の大学・研究機関の研究者に放射光を供給し、分子科学の研究に利用されている施設で、年間のべ1000人ものユーザーが週単位で10以上ある実験装置（ビームライン）を使用するために来所しています。

本施設は加速器施設であるため、文部科学省から放射線障害防止法に基づく承認を受ける必要があり、私は平成12年から法で定められた放射線取扱主任者を務めてきました。日常の安全管理、業務従事者に係る事務手続き等に加え、文科省に対する変更申請や、それに必要な放射線に係る安全対策を行ってきました。

UVSORの加速器は、線形加速器・ブースターシンクロトロン・電子蓄積リング（ストレージリング）という3段ロケットのような仕組みになっています（ただし、ストレージリングでは加速はしません）。ユーザーに放射光を供給するストレージリングは、35m四方の大きな部屋にあります（加速器本体とユーザーの実験エリアは同じ部屋にあります）。ビームは通常1日に2回（9時と15時）に入射され、時間とともにわずかずつ失われ、6時間後には約3分の1にまで減少します。

近年、UVSORでは、ユーザーがストレージリング室に在室した状態でストレージリングに電子ビームを入射（補充）して周回電子量が減らないようにする、いわゆるトップアップ運転を目標に掲げてきました。それまでもストレージリング周囲にはコンクリートブロックや鉛板による遮へい（写真 Before）を備えていましたが、入射時には蓄積時よりも多くの放射線が発生しますので、ストレージリング室内

の実験者を放射線から守るためには、よりしっかりとした遮へいが必須です。そのため、2006年に、ストレージリングを囲む新しい全周遮へいの導入を行いました。

全周遮へい設置の計画は、2002年頃に、方法の検討からはじまりました。用途は「遮へい壁」なので、通常の加速器施設ではコンクリートを使うところですが、今回の計画は、施設ができてから20年以上経った後から遮へいを設置するすなわち、所狭しと並んだビームラインがその場にある状態で、それをよけるように遮へいを設置するということが決定的に違います。そのため、厚さも含めて、可能な限りコンパクトにすることが必要でした。そこで、材質は鉛とし、鉄のケースの中に流し込む方式に決定しました。このようなものを作製できる業者の数は、限られてきます。

厳密に考えれば壁だけでなく屋根も設けて完全に加速器を覆うようにすることも考えられましたが、様々な難しい点があり、衝立状の壁とすることにしました。鉛の厚みは場所により100mmないし120mmあり、1mあたり2トン以上になります（合計では、150トンもあります）。このように大変重くなるため、遮へいが倒壊すると非常に危険です。倒れないための支えの強度もたせなければなりません。これが、そもそもの大問題「本当に置けるのだろうか？」に続いて、最も気にした点です。にもかかわらずこの支えの設置スペースが大変に厳しく、最終的に、どこでもほぼ自由に使用できるスペースとして、リング周囲にめぐらされているケーブルピットを使用すること

Before



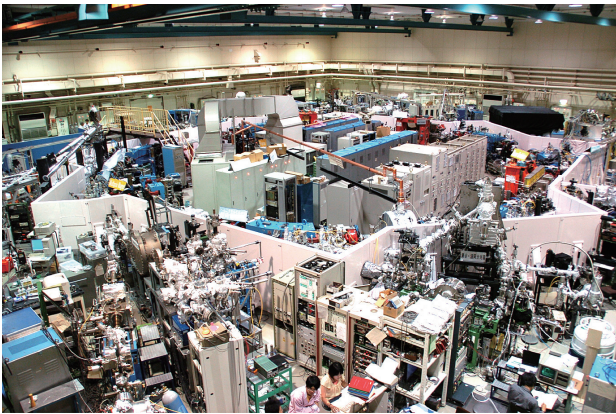
にしました。遮へいのすぐ隣、30cmの距離で30cm下がったところに支えの足を設置するのです。この方法はうまくいき、今のところ問題は発生していません。じゃまになることは、最低限に抑えられていると思います。遮へいそのものの設計は業者が行なうのですが、準備段階で大変だったのは、①予算内におさめるための検討（+交渉）、②主として耐震上の強度の確保、③ルートの選定（可能な限りビームラインとの干渉を避けて通り、やむをえない場合はビームライン側で対応をお願いする）でした。中でもBL7Bは元々2階建てのビームラインで、遮へいを置いた後もユーザーが遮へいの上に存在することになる（遮へいが効かない）ため、ビームラインを折り曲げて遮へいの側面におさまるようにしたことが、BL側の多大な協力を得た大きな改造であり、印象に残っています。

下見段階で大変だったのは、本当にここを通せるか？ という見当をつけることで、原寸大の紙（図面）を用意して現場に持って行き、干渉がないか調べるといった地道な方法もしばしば用いました。

設置作業は、業者により主として2006年7月に行われました。加速器と数cmという距離で何トンもの重量物を設置する非常に緊張を強いられる作業でした。

それに加えて予想外に大変だったのは、アンカーボルトを打てるか、という

After



ことです。ストレージ室の床はコンクリートですが、当然、鉄筋が走っています。これにアンカードリルが当たると、鉄筋をこするようにして斜めにむりやり穴を開けます。これが大変難航することが「しばしば」あるのです。かといって、アンカーを打たなくても強度がもつ、というまでの余裕はありません。場合によっては1本の足を設置するのに半日もの時間を費やすこともありました。現場で最後に頼りになるのはアンカーを打ち続けてうん十年というベテランのおやじさんで、困難な状況を切り抜けてくれたときには、とてもカッコよく見えたものです。

ともあれ、加速器を壊すような事故や、ビームライン等と干渉してしまってどうしても設置できないといったトラブルは一切なく、無事に全ての遮へいを設置することができました（写真After）。当時の苦労の後、今はあたり

りまえのように全周遮へいが立っていますが、工事が終わったときは感慨深かったことを思い出します。

その後、文部科学省への変更申請が承認され、目標としていたトップアップ運転もすでに開始されています。

思い返してみると、このようにまとまりのある仕事をさせていただくことができたのは、放射線取扱主任者であったこと、UVSOR施設で予算を手当てくださった中村所長、小杉施設長、加藤教授、そして何より、有形無形にご協力いただいた施設職員の皆様のおかげであったと思います。関わった全ての皆様に、感謝します。



遮へい設置工事の様子

技術職員  
OBの今

田中 邦彦

株式会社イー・シー・プラネット 代表取締役（平成3年から6年まで技術課在籍）

皆さん、はじめまして。正確には「ご無沙汰しています」というほうが正解かも知れませんが。現在、株式会社イー・シー・プラネットの“営業”として分子研にも時々出入りさせていただいている田中と申します。よろしくお願いたします。なぜ、「ご無沙汰しています」なのかと申しますと、実は、平成3年から平成6年までの約4年間を分子研の技術課でお世話になっていたからです。技術課の鈴木課長をはじめ、当時いらっしゃった方々には、今でも時々お会いする機会がござ

います。

分子研にお世話になるきっかけとなったのは、FHL（ファコムハイタック株式会社）の社員として分子研に常駐していたことでした。そこでお誘いを受け、お世話になることになりました。今回、レターズの原稿執筆に際しては、15年ほど前になる当時の記憶を振り返ってみたいことにしました。

一番記憶に残っている当時の仕事は、インターネットへの参加に関わる一連の業務です。企業経営をしている現在も含



# 分子研技術課

めて、あの時が一番働いたものだと思います。当時は、まだ、WIDEプロジェクト<sup>1)</sup>が実験ネットワークとしてインターネットの試みがされている時代でした。その時に、日本で初めての運用型ネットワーク組織であったTISN(東京大学国際理学ネットワーク)<sup>2)</sup>に分子研が参加することになり、その参加に係わる一切を任せられたのがはじまりでした。もちろん、所属していた計算機センターでは初めての試みで、誰もそのノウハウを持っていませんでしたし、民間のISP<sup>3)</sup>なども存在しない時代でしたので、TISNのお膝元である東京大学理学部の坂村健先生の研究室へ足を運び、その研究室にいらっしゃった高田浩章さん(現名古屋大学院教授)から、接続に関する助言を多く頂き、研究所へ戻っては、目の前にある数台のサーバとでっかいルーターを相手に七転八倒していたことを思い出します。事務的な手続き、会議への出席、環境構築などで作業に没頭し、深夜になることがほとんどでしたが、仕事の充足感はたっぷりあり、むしろ、こんな機会

をいただけるのも分子研にいるからこそだ、と感謝の毎日を送っていたことを思い出します。

このように私が分子研で経験できたことは、人生でもなかなかできないことばかりだと思っています。当時、不謹慎にもスーパーコンピュータのメインコンソールで、キーボードの練習などを行っていたことは、身の程知らずもいところで、まがりなりともそれが許される(本当は許されませんが)環境にいたこととそのスケール感を今となっては充分実感しています。目の前に当たり前のようにある環境は、誰もそれが特別なことと疑いもしないのですが、それが偉大な組織の中で守られ、その中で自分を育ててくれたことを、今はしみじみと感じます。たった4年間でしたが、分子研に在籍できたことは、自分の人生に大きな道筋をもたらしてくれました。

現在は、企業の経営の傍らで、岡崎市内で行われるさまざまなイベントからんでいます。地域SNSサイト「オカコミュ」<sup>4)</sup>の運営、りぶらまつり<sup>5)</sup>への支援、

市内へのイベント情報の提供など、地域活性化に少しでもつながればと地道な活動を行っています。そんな折、分子研の存在を知らない市民の方がとても多いことも事実として知りました。こんな世界的権威のある研究所を、岡崎の人はもっと知らなければいけないと思っています。なんとか、自分の活動を通じて、分子研の存在を知ってもらえることができるよう、その仲介の担い手として、買って出たいと思っています。それは、自分ができる分子研やそこでお世話になった方々への恩返しだとも思っています。

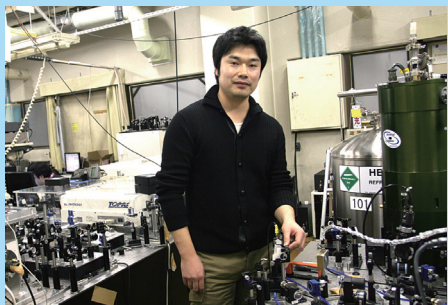
このように、分子研には本当に感謝の気持ちでいっぱいです。最後に、当時お世話になりました内田技術課長、諸熊奎治先生、中村宏樹先生、北浦和夫先生、青柳睦先生、長嶋雲兵先生、そして、西本史夫(当時班長)さんにこの機会をお借りして感謝申し上げたいと思います。また、このような機会をいただいたレターズ編集委員会および技術課の皆様にご挨拶申し上げます。

本当にありがとうございました。

- 1) WIDEプロジェクト 慶應義塾大学の村井純教授らが中心になって1988年に設立された、インターネットに関する研究プロジェクト。
- 2) TISN (Todai International Science Networkの略) 1989年に東京大学理学部を中心に構築された日本発の運用型の学術ネットワーク。
- 3) ISP (Internet Service Providerの略) インターネットに接続するためのサービスを提供する企業あるいは団体。日本ではIJJが1993年日本発のISPサービスを行った。
- 4) オカコミュ (岡崎コミュニティの略) 岡崎市の地域SNSサイト。NPO関係者、地元雑誌関係者、地元FM局の関係者など、岡崎市の活性化のための情報交換サイトとして運営中。http://okacomm.acplanet.biz/。
- 5) りぶらまつり 2010年2月27,28日に開催予定のりぶらサポーターズクラブ主催の岡崎市民手作りのお祭り。

平成21年10月1日付

## 光技術班に 岡野泰彬さん 着任



主な業務：  
レーザーを利用した装置・方法論の開発および維持発展を担当。

自己紹介文はP.33をご覧ください。

平成21年11月1日付

## 学術支援班に 寺内かえでさん 着任



主な業務：  
サイエンスコミュニケーターとしてプレスリリース、アウトリーチ活動等を担当。

## 高分解能レーザー分光 による励起分子の構造 とダイナミクス

馬場 正昭

京都大学大学院理学研究科准教授

昨今、学術基礎研究を続けていくことが難しくなっています。すぐに利益につながらない、役に立たない。特に私がこよなく愛している高分解能レーザー分光は日本では非常に厳しい状況で、それゆえ優れた研究設備とポテンシャルをもっている機関との共同研究は我々の生命線ともなっています。幸い分子科学研究所の多くの方々にご支援を頂き、ここ数年こつこつと共同研究を重ねて満足すべき成果を得ることができました。お礼の気持ちも込めて、ここにその経緯を紹介します。それともうひとつ、大学ではできないような研究が分子研との共同研究で実現できた私の喜びを感じてもらい、少しでも共同研究が増えたらいいかなと思っています。

5年前のある秋の日、その夏の集中豪雨で実験室が壊滅的な被害に遭って途方に暮れていた私に、分子制御レーザー開発センターの山中技術職員からメールが届きました。25年前、私が電子状態動力学部門の花崎研究室で働いていたときに装置開発室で製作してもらった超音速ジェットの真空チャンバーが保管されているので、これを使って分光測定システムを整備したいとのことでした。元々非常に感激しやすいタイプの私は感極まり、すぐに施設利用の手続きを行って分子研との共同研究が始まりました。最初は古いマシンの修復と新しい部品の製作、そして装置の組み立て。これまた感激しやすいタイプ

だった私の研究室の学生がしんどい作業を手伝ってくれて、半年後にやっとスペクトルが取れるようになりました。

とにかくジェット分光を最高のパフォーマンスでやりたかったので、装置開発室の施設利用も申請して工作をさせてもらいました。設計や工作手順については、水谷さん、青山さん、実際の作業は高松さん、宮下さんのベテランが懇切丁寧に指導をしてくれました。パルスレーザーの制御回路は、こんなものを作ってくださいとお願いしただけで吉田さんがあっという間に作ってくれました。極め付けは回転楕円体面特殊反射鏡。超音速ジェット中の分子からのけい光を立体角90%以上の高効率で集光できる反射鏡を万能加工機で製作してもらいました。ただし、最終的な鏡面仕上げは手磨き。すると、国立天文台先端技術センターから超精密旋盤を使えば機械的に鏡面仕上げができるというオファーがあって、そちらにも施設利用を申請しました。かつて装置開発室にいてまさにこのジェットの真空チャンバーを製作してくれた岡田さんと超精密旋盤の専門家の三ツ井さん。二日間の共同作業で3セットも作ることができました。多くの技術者が熱心に取り組んでくれたので、報告書をまとめる際に意見を聞いてみたのが、「アナログの手仕上げか、デジタルの機械仕上げか」。双方にそれぞれこだわりがあってももちろん結論は出せませんでした。完成した鏡はどちらも素晴らしい出来映えで、これまでに測定できなかった弱いシグナルがS/N良く取れるようになりました。お金がなくとも技術と心意気があれば最高水準の実験装置ができるということを学んだ施設利用でした。

ジェットの装置の準備をしているうちに、「化学系研究設備有効活用ネット

ワーク」がスタートし、ナノ秒のパルスレーザーが整備されて有効に使えるようになりました。さらにその拠点のひとつとして、かつては分子研の共同研究の窓口として重要な役割を果たしていた「機器センター」が復活し、山中さんはそちらに移られて、測定システムの整備、ソフトウェアの開発を手掛けてくれました。おかげで蛍光励起スペクトル、分散蛍光スペクトル、フォトンカウンティング、蛍光寿命測定が非常に簡便にできるようになりました。短時間で測定を完了しなければならない共同研究では、システムの簡便さは極めて重要です。

こうしてまずは再検討が必要とされた分子のスペクトルを測定することから始めました。

### ジベンゾフラン：

ダイオキシンのひとつで、超音速ジェット中のスペクトルとab initio計算を基に、S<sub>0</sub>およびS<sub>1</sub>状態での振動構造を明らかにしました<sup>[1]</sup>。その結果、この分子の骨格は堅固なものであり、両状態で平面をしっかりと保っていることがわかりました。同じ毒性のジベンゾダイオキシンやピフェニルでは電子励起による構造変化が著しく、低周波数の大振幅振動が重要であるのとは対照的になっています。

### 9-メチルアントラセン：

メチル基の内部回転のエネルギー準位とポテンシャル曲線を電子スペクトルの測定によって解析することは25年前からの私の目標でした<sup>[2,3]</sup>。トルエンと9-メチルアントラセンは6回対称ポテンシャルをもつ分子の数少ない例で、観測バンドを二重共鳴の実験によって正確に帰属し、ポテンシャル曲線および回転障壁の高さをab initio計算の

結果を参照して解析しました<sup>[4]</sup>。トルエンでは回転障壁の高さは非常に小さいことが知られていますが、9-メチルアントラセンではそれがかなり大きくなっています。

このような研究が進むにつれて、特に電子励起状態の理解はこれまでの研究では全く不十分であることを知らされました。そこで、すでに解明が終わっているとされている分子ではありますが、骨格がしっかりしていて大振幅振動のない多環芳香族炭化水素 (PAH) について高分解能レーザー分光を行い、スペクトルをきちんと見直してみました。

**ナフタレン：**

これまでの多くの研究により、S<sub>1</sub>状態での主な無輻射過程は三重項状態への項間交差であると考えられていました。しかし、我々は寿命が短くてけい光量子収率が小さいバンドについても高分解能分光を行い、項間交差の効率は非常に小さくて主な無輻射過程はS<sub>0</sub>状態への内部転換であることを明確に示しました<sup>[5]</sup>。また、分子内振動再分配 (IVR) が有効に生じている振動準位でも回転エネルギー準位のシフトはみられず、高い振動準位で観測された予想よりもはるかに数の多いスペクトル線はS<sub>2</sub>状態との振電相互作用によることも明らかになりました。20世紀の多くの分子分光研究に関しては、技術的な未熟と過度の競争による本質的な過ちを犯している論文が少なくありません。現在の最新装置ではるかに高精度高分解能の質の高いスペクトルを測定するとそれを明確に結論できるということを示した、私としては誇りに思っている共同研究の成果です。

こうしているうちに、光分子科学領域の大島康裕教授が単一モードレーザーのパルス色素増幅を基にした新しい高分解能分光のシステムを開発されていると聞き、早速協力研究の申請をして共同研究を始めさせて頂くことにしました。さらに分子研で進んでいた日本学術振興会の「アジアコアプロジェクト」にも参加し、台湾の原子分子科学研究所とも共同研究をさせて頂くことになりました。そこには無輻射遷移の理論の権威である林聖賢教授 (S. H. Lin) が、李遠哲教授 (Y. T. Lee) のグループとともに光化学反応の研究を続けていました。私はその中の面白そうな分子に注目し、分光学的な研究を始めました。

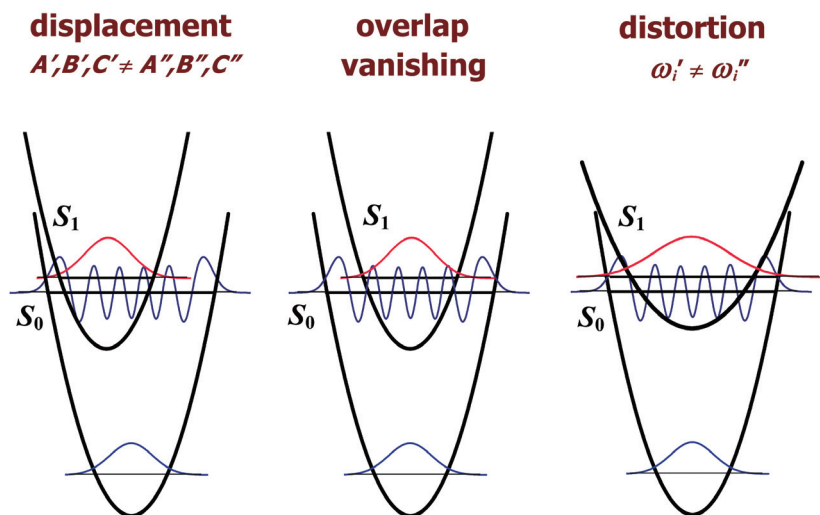
**アズレン：**

1979年、私がまだ院生だった頃、Michael Kasha教授が京都大学にいらっしゃってさまざまな分子の吸収と発光の話がされました。分子からの発光はそのスピン多重度の最低エネルギーの電子状態から生じるというよく知られているKasha則。その数少ない例外がアズレンで、S<sub>1</sub>状態からは非常に速いS<sub>0</sub>状態への内部転換によって全くけい光が出ず、その代わ

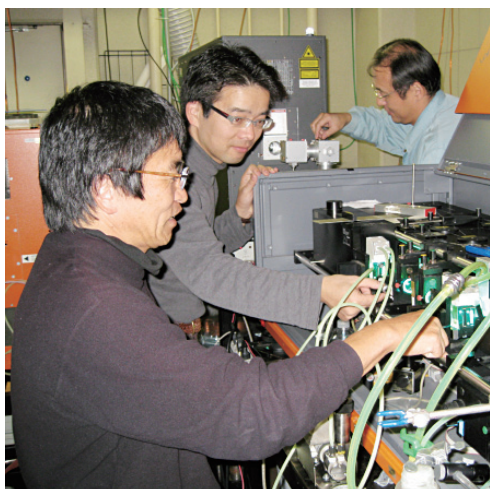
りにS<sub>2</sub>状態からのけい光は弱いながら観測されます。我々は得られた回転定数と分子軌道を考察し、その機構を詳細に明らかにしました<sup>[6]</sup>。その理論的な取り扱いはとりわけ新しいことではなく、1960年代に発表されたS. H. Lin<sup>[7]</sup>、W. Siebrand<sup>[8]</sup>、R. Bixon and J. Jortner<sup>[9]</sup>の論文の中にありました。図は、S<sub>1</sub>状態のゼロ振動準位とS<sub>0</sub>状態の高振動準位の波動関数の重なりを示したもので、たとえばS<sub>0</sub>とS<sub>1</sub>のポテンシャル曲線が同じであれば振動波動関数の重なりがなくなって内部転換は起こりません。アズレンでのKasha則の破れは安定平衡構造の違い (displacement) ではなく、ポテンシャル曲線の深さの違い (distortion) によるものであることが示唆されました。

**ピレン：**

六員環を4つもつPAHのひとつであるピレンはS<sub>1</sub>状態でのけい光寿命が1.4 μsと非常に長く、けい光量子収率は高いことが知られています。分子サイズが大きくなると準位密度が大きくなって無輻射遷移は速くなるというのが一般的な傾向ですが、そういう意味ではピレンは例外です。我々は、回転







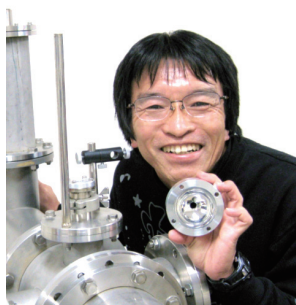
定数の決定から  $S_0$  状態と  $S_1$  状態で分子構造の違いがほとんどなく、それが非常に遅い無輻射遷移の原因になっていることを明らかにしました<sup>[10]</sup>。

これらはすべて何も特別な現象が起こっていないことを厳密に示した全くの基礎研究で、利益応用偏重の今の日本ではもちろん評価されるべくもないのですが、一步海の外へ出るとこれが楽しい。たとえばアジアコアプロジェクトで台湾へ行くと、仙人のような顔立ちの林聖賢老師が嬉しそうに私の話を聞いてくれます。この夏には分子分光のメッカであるオハイオ・コロンバスで招待講演をさせ

てもらいたいが、たくさんの方が真剣に聴いてくれて、そのあとは質問攻めでした。とにかく欧米では、老いも若きも活発に交流して楽しそうに議論や共同研究をしています。私が師として仰ぐ Jon Hougen はこのコロンバスミーティングで 50 年連続講演の表彰を受けました。David Pratt、Anthony Merer、S. H. Lin、みんな 70 歳なのに 55 歳の私より元気で基礎研究、というか学問を続けています。楽しんでるから長く続けられるんだなとつくづく思います。

この 4 月からは分子制御レーザー開発センターにおられた上田さんも機器センターのメンバーに加わり、化学系研究設備有効活用ネットワークの機器もますます充実しています（写真）。耐

震工事の引っ越しで使えなかった大島グループの高分解能レーザーシステムも復活し、超音速ジェットの装置も改善してもらいました。ほんとは少し休みたいなという私の意志とは裏腹に共同研究は自発的にどんどん膨らんでいて、嬉しい悲鳴です。とにかく、その度に親切にお世話して下さる技術職員、秘書の方々には心から感謝しています。喩えは悪いかもかもしれませんが、分子研は豊かな畑のような気がしています。そこに大きな可能性を秘めた種を播き、こつこつ育てて花を咲かせ実を結ぶ。それはとっても楽しいことです。おかげでこの秋にもいっぱい種を播かせてもらいました。来年の収穫が楽しみで、所長としてずっと懐深く支えて下さった中村宏樹先生に是非見て頂きたいと思っています。



ばば・まさあき

1955年福岡生まれ、玄海育ち。1981年に京都大学大学院博士課程を中退後、分子科学研究所文部技官、1986年神戸大学理学部助手、1989年京都大学教養部助教授、2004年4月より現職。研究テーマは、高分解能レーザー分光と ab initio 計算による分子の構造と励起状態ダイナミクス。3度のメシよりサッカー好きMF。

## 参考文献

- [1] M. Baba, K. Mori, M. Yamawaki, K. Akita, M. Ito, S. Kasahara, and T. Yamanaka, *J. Phys. Chem. A*, **110**, 10000 (2006).
- [2] M. Baba, I. Hanazaki, and U. Nagashima, *J. Chem. Phys.*, **82**, 3938 (1985).
- [3] M. Baba, U. Nagashima, and I. Hanazaki, *J. Chem. Phys.*, **83**, 3514 (1985).
- [4] M. Baba, K. Mori, M. Saito, Y. Kowaka, Y. Noma, S. Kasahara, T. Yamanaka, K. Okuyama, T. Ishimoto, and U. Nagashima, *J. Phys. Chem. A*, **113**, 2366 (2009).
- [5] K. Yoshida, Y. Semba, S. Kasahara, T. Yamanaka, and M. Baba, *J. Chem. Phys.*, **130**, 194304 (2009).
- [6] Y. Semba, K. Yoshida, S. Kasahara, C.-K. Ni, Y. -C. Hsu, S. H. Lin, Y. Ohshima, and M. Baba, *J. Chem. Phys.*, **131**, 024303 (2009).
- [7] S. H. Lin, *J. Chem. Phys.*, **44**, 3759 (1966).
- [8] W. Siebrand, *J. Chem. Phys.*, **46**, 440 (1967).
- [9] M. Bixon and J. Jortner, *J. Chem. Phys.*, **48**, 715 (1968).
- [10] M. Baba, M. Saitoh, Y. Kowaka, K. Taguma, K. Yoshida, Y. Semba, S. Kasahara, T. Yamanaka, Y. Ohshima, Y. -C. Hsu, and S. H. Lin, *J. Chem. Phys.*, **131**, 224318 (2009).

## 分子研研究会 「生体分子イメージング の技術開発とシステムズ バイオロジー」に関する 報告

小澤 岳昌

東京大学大学院理学系研究科

(所内対応) 宇理須恒雄

平成21年11月6日(金)、岡崎コンファレンスセンター大ホールにて、「生体分子イメージングの技術開発とシステムズバイオロジー (Molecular Imaging for Systems Biology)」と題する研究会を開催した。参加者総数は、発表者12名を含め、計71名となり大変に盛況であった。日本国内で本領域をリードする7名の研究者に加え、海外からM. White博士 (Liverpool大学)、R. Campbell博士 (Alberta大学)、F. J. Kao博士 (Yamg-Ming大学)、M.G. Gao博士 (Chinese Academy of Sciences)、M. Awais博士 (Liverpool大学)の5名に発表を依頼した。そのため、発表および質疑応答は英語で行った。

本研究会を企画した意図は、分子イメージング研究の現状を理解し、未来の方向性を共通の理念をもって展望することにあつた。すでに分子イメージングに関連する研究会は、愛知県科学技術交流財団の助成を受け、20名の小人数でこの2年間に計6回行ってきた。アカデミアの研究者のみならず企業の技術者を含めた密なディスカッションを繰り返すことにより、新たなイメージングの方向性を見いだしてきた。本分子研研究会の特筆すべき点は、システムズバイオロジーの研究者を含め生命科学のための新たな技術を開拓する点にある。蛍光タンパク質GFPとその誘導體、有機小分子プローブ、高

速画像取得が可能な蛍光顕微鏡や超解像蛍光顕微鏡、生物個体イメージングに威力を発揮する蛍光顕微鏡など、この10年間のイメージング技術は目覚ましい発展を遂げている。下村脩博士によるGFPの発見とその開発にノーベル化学賞が与えられたことも記憶に新しい。しかし、イメージング研究の成果が指数関数的に挙がる一方で、得られるデータは真の生命現象を反映しているかどうか、データに対する信頼度や不確実性が問題視されることも事実である。イメージングにより得られたデータを如何に解析し、生命の本質を解明するためにどのように活用していくか、単一細胞内シグナル伝達の理解の深化に向け、生体分子イメージングは新たなステージにある。

プログラムは、始めにM. White博士とR. Campbell博士がkeynote lectureを行った。M. White博士は、NF- $\kappa$ Bシグナル伝達のイメージングと数理的シミュレーションに関する最新の成果を講演され、細胞内シグナルの包括的理解における数理的解析の重要性を説明された。R. Campbell博士は、R. Tsien博士の下で開発した赤色蛍光タンパク質 (mRFP) の構造と機能に関する話から始まり、最新のイメージングプローブの開発戦略とその成果について紹介された。どちらも、発表後に闊達な質疑応答があり、この分野の研究が活発化している様子がうかがえた。

午後は、「Fluorescence & MRI imaging」、「Systems biology」、「Bioluminescence imaging」の3セッションに分け、3~4名のスピーカーが各セッションを受け持った。Fluorescence & MRI imagingでは、蛍光タンパク質を利用した様々な分子プローブの開発に加え、超解像イメージングを可能にする蛍光顕微鏡や新たなイメージング用無



機材料に関する話題について討論された。Systems biologyのセッションでは、各々の研究者の独自の数理モデル説明とその裏付けとなるイメージングデータ取得方法等について紹介された。実験とシミュレーションの両歯車を噛み合わせることは必要不可欠であり、そのための現状の問題点や今後の課題について討議された。

Bioluminescence imagingのセッションでは、発光タンパク質の特徴や利用方法、さらに最新のプローブ開発技術について討論した。発光イメージングは蛍光イメージングに較べまだ発展途上であるが、蛍光イメージングにはない優れた特徴について紹介された。新たなイメージング技術の一つとして、今後さらに期待されることと思われる。

シンポジウム参加者は、数学、物理学、化学、生物学、医学に携わる研究者、学生、さらに企業の技術者が主体であり、分野や領域の垣根を越えて本研究会で議論ができたことは大きな成果であった。またナノメディシン国際シンポジウムとの連携は、両参加者の交流の輪と視野を広げるうえで、大変効果的であった。

最後に、研究会の所内対応を快く受け入れていただいた宇理須教授、事務作業を一手に引き受けて頂いた秘書の清水様、研究会の会場係など献身的サポートをして頂いた宇理須研メンバーの方、皆様に心より感謝の意を表します。ありがとうございました。

### Opning Remarks

10:30-10:40 **Takeaki Ozawa** Graduate School of Sciences, University of Tokyo, Japan

### Keynote Lectures

10:40-11:20 **Michael R. H. White** School of Biological Sciences, University of Liverpool, UK

"Spatial and temporal information coding by the NF- $\kappa$ B system"

11:20-12:00 **Robert E. Campbell** Department of Chemistry, University of Alberta, Canada

"Moulding fluorescent proteins into new biotools: engineering of protein surfaces, topology, and chromophores"

### Session 1: Fluorescence and MRI Imaging

13:00-13:30 **Takeharu Nagai** Research Institute for Electronic Science, Hokkaido University, Japan

"Toward understanding biological phenomena by genetically-encoded molecular spies"

13:30-14:00 **Fu-Jen Kao** Institute of Biophotonics Engineering, National Yang-Ming University, Taiwan

"Visualizing Cellular Metabolism with Fluorescence Lifetime of Reduced Nicotinamide Adenine Dinucleotide"

14:00-14:30 **Mingyuan Gao** Institute of Chemistry, the Chinese Academy of Sciences, China

"Magnetic Nanocrystals: from Preparations to Bioapplications"

14:30-14:50 **Muhammad Awais** School of Biological Sciences, University of Liverpool, UK

"Measuring dynamic protein interactions in living cells over time"

### Session 2: Systems Biology

15:10-15:40 **Hiroyuki Takeda** Graduate School of Sciences, University of Tokyo, Japan

"Coupling cellular oscillators in vertebrate segmentation: analysis with high-resolution imaging of gene transcription"

15:40-16:10 **Atsushi Mochizuki** Theoretical Biology Laboratory, RIKEN Advanced Science Institute, Japan

"Structure of regulatory networks and dynamics of bio-molecules: Predicting unknown from known"

16:10-16:30 **Yuichi Ozaki** Graduate School of Sciences, University of Tokyo, Japan

"High throughput quantification of single cellular signaling events by use of immunostaining and image cytometry"

### Session 3: Bioluminescence Imaging

16:50-17:20 **Yoshihiro Ohmiya** Research Institute of Genome-based Biofactory, National Institute of Advance Industrial Science and Technology, Japan

"Application of luciferases for in vivo bioluminescence imaging"

17:20-17:50 **Michitaka Ozaki** Department of Molecular Surgery, Hokkaido University School of Medicine, Japan

"Bio-imaging of Surgical Stress, *dynamic analysis of liver oxidative stress and damage*"

17:50-18:10 **Akira Kanno** Graduate School of Sciences, University of Tokyo, Japan

"Bioluminescent Probes to Visualize Biological Functions in Living Cells"

### Closing Remarks

18:10-18:20 **Tsuneo Urisu** Institute for Molecular Science

## 共同利用研究ハイライト 3

# 若手研究会等 「分子科学夏の学校の 講義内容検討会」報告

田中 翠

京都大学大学院 理学研究科 修士課程2年

(所内対応) 菱川 明栄



講義風景 (講師: 古谷先生)

分子科学夏の学校は1961年から毎年、若手研究者(主に大学院生)が主体的に分子科学を学ぶ場として運営されてきました。分子科学若手の会は特定の団体があると誤解されることも多いですが、毎年の夏の学校参加者で構成される会です。

分子研には陰に陽に分子科学夏の学校に対する援助を頂いてきました。平成20年度から「若手研究会等」という新たな共同研究プログラムで、大学院生が代表者となり、研究会の開催や夏の学校等の準備会の開催の申請ができ

るようになりました。昨年度に引き続いて今年度も、夏の学校事務局、分科会担当研究室と連携して申請内容を決め、申請書を提出しました。審査により採択され、講義内容の検討会を分子研で開催させて頂けることになりました。さらに、6月12日に分子研で開催された分子科学シンポジウムで、分子科学夏の学校の宣伝をさせて頂きました。これにより、昨年夏の学校に参加できなかった研究室にも夏の学校を紹介することができ、広く参加者を募ることができてよかったです。一時

は参加者不足で夏の学校の開催が危ぶまれたこともありましたが、今年は昨年の60名を上回る75名の学生が参加して、盛況なものとなりました。

実際に「若手研究会等」で行ったことは、夏の学校を8月17日から5日間開催するための前準備です。講師の方々と世話役の研究室担当者が7月21日に分子研に集まり、各テーマに関わる学生が自らの研究の成果を発表し、学生自身の問題意識を高めながら講師の指導を受けました。また、これらをもとに各講師が夏の学校での講義内容テキストの詳細、講義の形式、進め方等を打ち合わせました。その結果、分子研出身者で現東北大学の森田明弘先生（第一分科会担当）には「界面和周波発生分光の理論」、分子研の信定克幸先生（第二分科会担当）には「ナノ構造体の光学応答：時間的・空間的分光の理論とその応用」、分子研の古谷祐詞先生（第三分科会担当）には「赤外分光法による膜タンパク質の機能発現に伴う構造

変化解析」、豊田工大の市橋正彦先生（第四分科会担当）には「クラスター入門—構成原子数から見た科学」、分子研の柳井毅先生（第五分科会担当）には「多参照電子相関理論の基礎と繰り込み群の手法」を講義頂くことが決まりました。

夏の学校当日には、日頃学会以外では顔を合わせる機会のない人たち75名と交流しながら、自分の研究分野に留まらない広い知識と先端的な研究成果に触れることで、良い刺激が得られたと思いますし、諸先輩の経験と同じように将来同じく分子科学を推進する研

究者同士で強い絆を生むことにつながると思いました。

現在、事業仕分けでは大学関係の基盤的予算にも削減や見直しが相次ぎ、若手支援が減らされる可能性があるなど、将来に不安を覚えなくはありませんが、そういった状況でも、分子研には若手支援を継続して頂きたいと思えます。今後も、分子科学を志す若い世代の大学院生が毎年分子科学夏の学校を組織し、「若手研究会等」に申請していくと思えますので、引き続きご理解とご支援を宜しくお願い申し上げます。



夏の学校の会場となった広島県もみのき森林での集合写真

## 共同利用研究 実施状況

### 平成21年度(前期)共同利用研究実施状況

課題研究	「生体分子情報システムの研究方法論の構築」1件
協力研究	「ナノギャップ金構造の電場増強空間分布の可視化」を始め60件
UVSOR施設利用	「X線照射により生成する欠陥の発光測定(2)」を始め70件
施設利用	「有機-無機複合材料としての多核・クラスター金属錯体の交流磁化率測定」を始め22件

### 平成21年度(前期)若手研究会等

開催日時	研究会名	提案代表者	参加人数
2009年 7月21日(火)	分子科学夏の学校の講義内容検討会	田中 翠 (京都大学大学院理学研究科)	14名

COLUMN

## 夏のドイツ派遣

飯塚 拓也

総合研究大学院大学物理科学研究科構造分子科学専攻

極端紫外光研究施設 (UVSOR)・光物性測定器開発研究部門・木村グループに所属しております総合研究大学院大学D2の飯塚と申します。

このコラムでは、私が2009年7月に総研大の海外学生派遣事業の支援を受けて、ドイツ・マックスプランク固体化学物理研究所 (MPI-CPfs) にて過ごしてきた研究生活について書きたいと思います。実際の研究成果については、すでに海外学生派遣事業実績報告書として総研大のHPより閲覧できます (<http://www.soken.ac.jp/education/haken/pdf/h21iizuka.pdf>) ので、研究内容以外のことに焦点を合わせて述べたいと思います。また、このコラム欄の前任の方のものを参考として読んでみますと奔放に書かれている方もおられますので、堅苦しい文章は避けて書こうと思います。

すべての始まりはその年の4月、私の担当教員である木村真一准教授から掛けて頂いた一言からでした。「派遣先の当てならあるけど (海外学生派遣事業に) 応募する?」というもの。後は「ゼヒユキタイデス」と唱えればよいだけの、絶好のチャンスです。総研大の入学時にこのような事業があることは知っており、また他大学では経験できないことだと思い、一機会があれば是非活用したいものだ—と頭では考えていたのですが、いざ言われた時には流石に怯みました。何しろ私は海外渡航の経験が乏しく英語力も岡崎三機関で開講されている英会話コースであたふたしているほどであったので、1ヶ月

の間、世界的に有名な研究機関に単身乗り込むということに不安で一杯になりました。しかし今振り返っても行って良かった。行って良かった。

いざ決めてしまうとそれからの準備は流れるように進んでしまうもので、(周りには大変な迷惑をかけながら) 本人としては比較的スムーズに準備ができたと思っております。

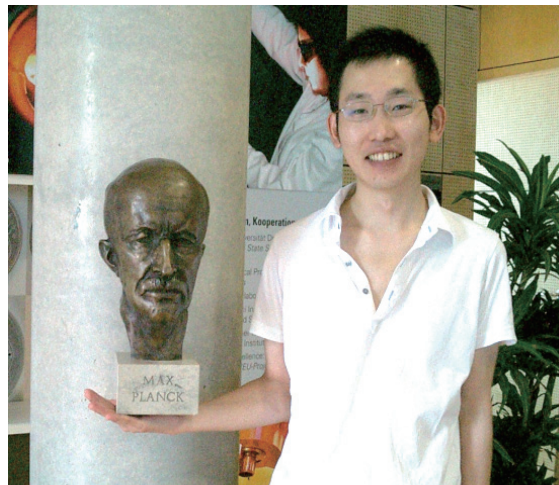
派遣先は、木村先生と以前より共同研究を行っている Jörg (ヨーク) Sichelschmidt 先生の研究グループで、場所はドレスデンのマックスプランク固体化学物理学研究所です。

行きの飛行機が、発券ミスのおかげで (?) エコノミーからビジネスクラスにランクアップするという、実に幸先のいいスタートで私のドイツ研究生生活が始まりました。フランクフルトで国内便に乗り継ぎドレスデンへと到着。この空港に、ヨーク先生の研究グループの学生である Herzog (ハルツォック) 氏が迎えに来てくれました。

彼は私の帰国後に、夏休みを利用して EU 最北端の North Cape までおよそ 6000 ㎞の道のりをバイクで往復したり、友人たちと画期的なビール瓶の王冠の開け方を集めた動画を作り某動画サイトに投稿したりと、なかなかの愛すべきファンキーな人間です。私も彼に師事したおかげで、どこでもビール瓶の王冠を開けることができるようになりました。

いづか・たくや

2007年から特別共同利用研究員としてUVSOR木村グループに所属。翌年総合研究大学院大学構造分子科学専攻に3年次編入。主に圧力下での反射率分光法などを用いて、強相関電子系物質の量子臨界点近傍に現れる電子構造変化の起源解明に向け取り組んでいる。写真はMPIの大講堂前にてMax Planckの肖像と撮影。



彼とはその後もメールのやり取りをしており、互いの近況から検出器の改良方法まで連絡を取り合う仲になりました。この派遣で得られた大きな宝です。

MPIはドレスデン中央駅からトラムで4駅のところに位置しており、隣接施設にはドレスデン工科大や情報学研究所等があります。工科大の時代が漂う建物とは対照的に、道路を挟んだ向かい側のMPIや情報学研究所の近代的な建物が印象的でした。私は煙草を吸うので、今回の派遣で心配していましたが、有難いことにMPIの建物中央のこれまたパステルカラーな温室テラス3階に喫煙場所がありました。また所内の方は、多国籍であるからかとても社会的で話しやすく、コーヒーサーバーの前やこの喫煙所で楽しく雑談をすることができました。このように気さくに話しかけて頂いたおかげで私の緊張もだいぶ和らぎました。私の所属している木村グループやUVSORでは、しばしば海外から研究者の方を中・長期間受け入れることがあるので、この滞在期間の経験を踏まえてより良い対応ができればと思います。

MPIの平日は朝の8時から活動が始まり、夕方は5時くらいになると殆どの方が帰られます。最初のころは郷に入りてはという事で、この時間に合わせていましたが、宿舎の工科大の寮に帰ってもやる事が無く、持参した文庫本も3日で読み終えてしまいました。結果、夕食を食べた後に再び研究所に行き、滞在最終週の国際学会に向けてのポスター制作などをし、日が沈み始める夜10時ころに帰り、16階の寮の自室から、暮れゆく空と街並みを眺めながらビールを飲む……というリズムを編み出すに至りました。やはり国民性なのか中国からの学生さんは夜10時

くらいでも見かけられ、妙な親近感とともに手を振りあったりしました。

今回の派遣では、訪問する先々でコーヒーカップをお土産に頂き、最終的に3個のコーヒーカップを携えての帰国になりました。現在そのコーヒーカップたちは、MPIのものは長野県のある村に住む父のもとに、放射光施設BESSY-IIのものは東京に住む兄のもとにあります。

この場を借りて、岡崎で参加している英会話コースのJeremiah Sechrist先生にお礼を述べたいと思います。このコースに参加していたおかげで、スタックすることもなく楽しく会話すること

ができましたし、コースで出てきた英会話のフレーズが大変役に立ちました。

分子研／総研大はこのように出会う“機会”というものが、量・質ともに優れているように感じます。研究者として見たときのみならず、大学院として見た時も、他に比べて魅力的な点が多いと思います。それは歴代のこのコラムを読み返してみても多くの方が触れられている通りです。私の今回の場合では英会話コース然り、この派遣事業然りです。このたびの海外学生派遣事業という得難きチャンスに巡り合えたことに感謝をし、次のチャンスも逃してなるものかと目を光らせていく所存で御座います。

## E V E N T R E P O R T

### 学生報告 平成21年度後期学生セミナー

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 石山 仁大

10月8日から二日間に渡って総研大葉山本部にて入学式ならびに後学期学生セミナーが開催されました。今年度は初日に台風18号が接近した影響でセミナーの開催自体が危ぶまれましたが、新入生大半の参加の下で無事開催されました。

10月入学の新入生は過半数が外国人留学生であるため、セミナーは全て英語で行われました。これを敬遠したのか、日本人学生の参加率が低かった（新入生10名中3名のみが参加！）ことが残念でした。セミナーの主題は“Unity & Identity”であり、

異文化・異分野交流を意識した内容でした。2名の外国人講師による講演および主題に関するフリーディスカッションが行われ、“Unity & Identity”について大いに考えさせられました。また、夕食懇談会および2つのアクティビティも催

され、留学生の人たちとの相互理解を深めることが出来ました。私自身は英語に不安があったために、セミナー開始当初はどうなることかと思っていましたが、いざとなれば言葉の壁はどうにでもなることが分かりました。今回のセミナーは自分自身について考える良い機会になったと思います。

最後になりましたが、今回のセミナーを企画・運営して下さった総研大の先輩方並びに先生方にこの場を借りてお礼申し上げます。

#### Norihito Ishiyama

金沢大学自然科学研究科博士前期課程修了後、民間企業勤務、分子科学研究所研究生を経て、平成21年10月総合研究大学院大学物理科学研究科に編入。  
分子スケールナノサイエンスセンター平本グループにて、有機薄膜太陽電池の研究に取り組む。豊橋市出身。



## E V E N T R E P O R T

## 教員報告 アジア冬の学校

2009年度担当教員 物質分子科学研究領域 准教授 江 東林

総研大の特別教育研究経費によって、2009年12月1日（火）～4日（金）に岡崎コンファレンスセンターで「総研大アジア冬の学校」が開催された。総研大・物理科学研究科では、研究科内の5専攻で行っている研究・教育活動をアジア諸国の大学院生および若手研究者の育成に広く供するために、2004年度よりアジア冬の学校を開催してきた。分子研（構造分子科学専攻・機能分子科学専攻）での開催では、これまでの総計で310名を超え

る学生・若手研究者がアジア各国から参加してきている。

外国からの応募は63名あり21名を受け入れた。国籍別の内訳は、中国12名、タイ5名、韓国1名、インド1名、マレーシア1名である。国内からの参加者は12名、うち総研大生は9名、国籍は日本、中国、タイ、韓国等である。冬の学校では10件の講義、29件のポスター発表（外国からは21件、国内からは8件）があった。極端紫外光研究施設（UVSOR）や計算科学研究セ

ンター、920 MHz NMR装置などを中心に分子科学研究所を見学した。

開催より充分前からウェブページを通して、講義やポスターの概要と分子研全グループの最近の活動報告を参加者に伝えておいた。参加者が充分な予習をしていたためか、非常に活発な議論がなされ、かなり高度な質問が多かった。なお、プログラムの詳細は下記のとおりである。

## 2009 Sokendai Asian Winter School at IMS "Molecular Sciences – Central Role in Multidisciplinary Fields"

## December 1

14:00-17:30 Registration  
17:30 Reception

## December 2

09:00-10:30 Prof. Kenji Ohmori "Exploring Quantum/Classical Boundary"  
10:30-10:40 Coffee Break  
10:40-12:10 Prof. Akiyoshi Hishikawa "Molecules Dressed with Light"  
12:10-14:00 Lunch  
14:00-15:30 Prof. Tsuneo Urisu "Development of the Neural Network Device"  
15:30-15:40 Coffee Break  
15:40-17:10 Prof. Hiroshi Fujii "Molecular Mechanism of Metalloenzymes"  
17:30-20:00 Poster Presentations

## December 3

09:00-10:30 Prof. Kyuya Yakushi "Electronic state of molecular conductors studied by infrared and Raman spectroscopy"  
10:30-10:40 Coffee Break  
10:40-12:10 Prof. Masahiro Katoh "Basics of Synchrotron Radiation and Free Electron Laser"  
12:10-14:00 Lunch  
14:00-15:30 Prof. Masahiro Hiramoto "Organic Thin-film Solar Cells"  
15:30-15:40 Coffee Break  
15:40-17:10 Prof. Toshiyasu Suzuki "Organic Semiconductors for Plastic Electronics"  
17:30-20:00 Banquet

## December 4

09:00-10:30 Prof. Hidehiro Sakurai "Chemistry of Buckybowls: Bowl-Shaped  $\pi$ -Aromatic Compounds"  
10:30-10:40 Coffee Break  
10:40-12:10 Prof. Toshi Nagata "How to Capture Solar Energy—Molecular Aspects of Photosynthesis"  
Afternoon of December 4: Lab Tour and Free Time

## December 5 Departure



E V E N T R E P O R T

教員報告 第6回夏の体験入学

2009年度担当教員 理論・計算分子科学研究領域 准教授 柳井 毅

総研大の広報事業の一環として、第6回分子研夏の体験入学が開催されました。この事業は、全国の大学生・大学院修士課程の学生を対象に、分子研での研究活動や教育活動を実際に体験し、研究所を基盤とする大学院の特色を知ってもらうことを趣旨としています。今年は、7月28～31日の4日間で開催され、9名の参加がありました。参加学生の内訳は、以下の通りです。学部3年生：4名、学部4年生：2名、修士1年生：1名、修士2年生：2名。今回は、開催の日程が7月下旬に設定され、例年より1、2週間早めだったこと、また新型インフルエンザの流行の影響を受けて他大学の代講と重なるなどの理由で、本年度は少人数による催しとなりました。開催期間での参加が難しい学生4名は、別日取りで希望研究室で体験入学を行いました。

体験入学の初日は、UVSORならびに計算科学研究センターの見学ののち、合同のオリエンテーションでは、受け入れ研究室による体験研究の紹介が合同で行われた。翌日から2日間、参加

学生は各研究室に訪問し、実際の体験研究に取り組みました。体験のテーマは次の通りです。「光合成モデル化合物の合成」「有機EL素子の作製と発光測定」「緑色蛍光蛋白質の巻き戻りを調べてみよう」「NMRを用いてタンパク質のかたちと動きを実感する」「『スピン転移物質の合成』に関する体験入学プログラム」「クラスター触媒を用いた反応の一例を体験」「金属タンパク質を対象とした研究を体験して

みよう」。最終日に全ての参加者による体験内容の報告会を行いました。

本事業の実施にあたり、総研大関係者、大学院担当事務、またご多忙にもかかわらず快く学生を受け入れていただいた研究室の皆様、その他関係者の方々に多大なご協力をいただきました。この場をお借りして御礼申し上げます。この事業は、総研大特定教育研究経費（教育）の新入生確保のための広報的の一環で行われました。



学生報告 夏の体験入学に参加して

岐阜大学工学部生命工学科 学部4年 田中 朝子



1日目はガイダンスの後、体験入学を受け入れている研究室および施設内の見学をさせていただきました。放射光施設や大規模なスーパーコンピュータも見学できました。研究員一人当たりのスペースに余裕があったと思います。

2日目と3日目は実験を行いました。体験入学では桑島先生の研究室にお世話になり、緑色タンパク質の巻き戻り実験を体験しました。まず、酸変性により緑色タンパク質が消色した後中和させて再び発色する様子を観察しました。次に、蛍光分光光度計で酸変性の後にタンパク質が巻き戻る速度について解析しました。酸変性させる時間が短いほど巻き戻る速度は大きくなるはずでしたが、一部あまりいい結果ではありませんでした。3日目には実験終了後にタンパク質の巻き戻りについて

の講義がありました。

4日目には、2日間の実験内容を各自スライドなどで発表しました。私はスライドに載せる画像を研究室のデータからいただきました。スライド発表では自分の学んできたこととは異なる分野を知るきっかけになると思います。

体験入学の期間中に懇親会が開かれるので、様々な大学の方とお話できるよい機会だと思いました。短い間でしたが、お世話になった研究室の方々や親切にくださった方々に心から感謝いたします。



## 総研大生受賞者紹介

### 北野 健太 (物理科学研究科構造分子科学専攻) 平成21年度分子科学会優秀講演賞を受賞

総合研究大学院大学構造分子科学専攻博士課程の北野健太君が、2009年9月21～24日に名古屋大学で開催された第3回分子科学討論会において、優秀講演賞を受賞した。本討論会は皆様も良くご存知の通り、2000名にのぼる研究者が参加する分子科学分野で国内最大の学会である。その前身である分子科学総合討論会からの伝統を継承して、分子および分子集合体の構造・反応・物性について実験ならびに理論の面から深く掘り下げた議論が活発に繰り広げられる場となっている。2006年の分子科学会設立によって現在の名称に変更されたのと合わせて、優秀な口頭発表を行った若手研究者を表彰する「優秀講演賞」を設立し、本年度は60件以上の応募の中から9件が選出された。

今回の受賞対象となった北野君の発表は、「直線偏光極短パルスによる回転角運動量オリエンテーション」と題するも

のであり、分子回転の角運動量が実験室系で特定の方向にそろった状態を作り出す新しい試みに関して報告したものである。このような角運動量の整列状態（オリエンテーション）は、アンサンブル平均においても分子の異方性の情報を与え、原子・分子物理学ならびに化学反応動力学において高い重要性を有する。従来の研究では、オリエンテーションの実現には円偏光のみが利用されてきた。北野君は、直線偏光の極短パルス対を用いても、パルス間隔と相対偏光角を適切に調節すれば回転角運動量のオリエンテーションが実現できることを理論的に導き、さらに、極低温に冷却された気体ベンゼン分子を試料として実験を行い、この新手法の有効性を実証した。この方法論は、分子の回転周期の時間内でオリエンテーションが実現できること、さらに、右回り・左回りの古典的剛体の回転に対応し



た量子波束を生成するものであることなど、数々の新しい特色があり、今後の幅広い応用が期待される。

北野君は、本研究成果をまとめて本年1月に博士論文として提出しており、また、内容の一部は既にPhysical Review Letters 誌に発表済みである。今回の受賞を大きな励みとして、今後、新天地において分子科学の発展におおいに貢献してくれることを期待している。

(光分子科学研究領域  
大島 康裕・主任指導教員)

### 水上 渉 (物理科学研究科機能分子科学専攻) 第3回分子科学討論会においてポスター賞を受賞

総合研究大学院大学機能分子科学専攻博士課程の水上渉君は、2009年9月21～24日に名古屋大学で開催された第3回分子科学討論会において優秀ポスター賞を受賞した。受賞対象となった水上君のポスター発表は、「密度行列繰り込み群によるポリカルベンの多参照電子状態とそのスピン配列」と題する研究発表であり、彼が総研大博士課程に進学後に学位取得のために精力的に取り組んでいる研究の一部である。今回水上君が、研究対象とした分子、ポリカルベンは、有機分子でありながら磁気的な性質をもつ有機磁性体の基本モデルとなる分子である。有機磁性体が単分子磁石としての分子デバイスとして機能するには、より大きな磁気モーメントを持ち、かつ寿命が長く、異

なるスピン状態間のエネルギー差が大きく高温でもスピン配列を崩さないものが望まれる。水上君は、ポリカルベンの磁気的な性質を詳細に解析するために、分子の電子状態に関して新しい理論手法を用いて高精度に大規模に理論計算することで、そのスピン状態の特異的な性質を初めて明らかにすることができた。水上君の成果は、カルベンの数に対する、高スピン状態と低スピン状態のエネルギー差が、カルペン数の増加にしたがい縮まるという発見であり、この性質は、従来型の古典スピン論に基づく理論解析（密度汎関数法など）の結果を覆すもので大変興味深い。この理論解析では、密度行列繰り込み群法に基づく新しい方法論（多参照法）を用いて、従来扱えなかつ



た多数の電子配置を取り扱うことで複雑な電子スピン状態を精密に一般的に取り扱うことで初めて解析可能となった。水上君は、スピン状態やその多体性に関して詳しい波動関数解析を行い、彼の発見の基本原則を説明することができた。今回の発表内容は、国際的学術雑誌に投稿中である。今回の受賞を糧に、今後の水上君のさらなる活躍を期待している。

(理論・計算分子科学研究領域  
柳井 毅・主任指導教員)

平成21年度9月総合研究大学院大学修了学生及び学位論文名

物理科学研究科（構造分子科学専攻）[課程博士]

氏名	博士論文名	付記する専攻分野	授与年月日
CHEN, Long	Design and Functions of Novel Supramolecular and Macromolecular Nanoarchitectures	理学	H21. 9.30
YUE, Yue	Spectroscopic Study of the Charge-ordering Phase Transition in $\alpha'$ -(BEDT-TTF) <sub>2</sub> IBr <sub>2</sub> and $\alpha$ -(BEDT-TTF) <sub>2</sub> I <sub>3</sub>	理学	H21. 9.30

物理科学研究科（機能分子科学専攻）[課程博士]

氏名	博士論文名	付記する専攻分野	授与年月日
Reza A.F.G. Masud	Synthesis of C <sub>3</sub> Symmetric Cup-Shaped Molecules	理学	H21. 9.30

物理科学研究科（機能分子科学専攻）[論文博士]

氏名	博士論文名	付記する専攻分野	授与年月日
尾上 靖宏	Single-molecule observation of conformational changes in membrane proteins reconstituted in a giant liposome	理学	H21. 9.30

総合研究大学院大学平成21年度（10月入学）新入生紹介

専攻	氏名	所属	研究テーマ
構造分子科学	Ding Xuesong	物質分子科学研究領域	Synthesis and Characterization of Covalent Organic Framework
	Xu Yanhong	物質分子科学研究領域	Design and Synthesis of Novel Covalent Organic Framework (COF)
機能分子科学	石山 仁大	分子スケールナノサイエンスセンター	有機薄膜太陽電池の研究
	Dhital Raghu Nath	分子スケールナノサイエンスセンター	Preparation of bimetallic gold nanoparticles as a notable catalyst and its application towards the synthesis of organic compounds
	Kong Weipeng	分子制御レーザー開発研究センター	Micro Photonics based IR-OPCPA
	Wang Chunlan	岡崎統合バイオサイエンスセンター	高酸化マンガンサレン錯体の電子構造と反応性の研究

■平成21年度（前期）分子科学フォーラム

回	開催日時	講演題目	講演者
第81回	2009年 5月13日	水と緑の国, 日本～地球環境と日本の農・林・漁業～	富山 和子
第82回	2009年 7月 8日	女性の美を極める：分子からデザインする化粧品	東久保和雄
第83回	2010年 2月17日	低炭素社会に機能性炭素が役に立つ：次世代電池開発とナノサイエンス	西 信之
第84回	2010年 3月16日	プラズマと核融合	伊藤 公孝

■平成21年度（前期）分子研コロキウム

回	開催日時	講演題目	講演者
第821回	2009年 7月 9日	Using femtosecond laser pulses to 'see' small molecules	Joseph Sanderson
第822回	2009年 9月16日	Ultrafast vibrational dynamics of hydrated DNA	Thomas Elsaesser
第823回	2009年 9月30日	擬縮重電子系の量子化学理論： $\pi$ 共役系や多核金属化合物に対する電子状態理論	柳井 毅

# 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
21. 6.16	安念 小百合	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		
21. 6.30	越山 圭美	辞職		生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 研究員	
21. 7.16	田代 基慶	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 (分子科学研究所特別研究員/特任助教)	京都大学 福井謙一記念研究センター センターフェロー	
21. 7.31	永廣 武士	辞職	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	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	
21. 7.31	三宅 敏子	辞職		理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 専門研究職員	
21. 8. 1	永廣 武士	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	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	
21. 8.31	彦坂 泰正	辞職	新潟大学 理学部自然環境研究科 准教授	極端紫外光研究施設 光化学測定器 開発研究部門 助教	
21. 9.30	VALIPARAMBIL, Sanjaya Sajisha	辞職		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	
21. 9.30	黒川 悠索	退職		理論・計算分子科学研究領域 (京都大学 大学院工学研究科勤務) 専門研究職員	
21.10. 1	岡野 泰彬	採用	技術課 光技術班 光計測技術係員	東京大学 大学院理学系研究科 特任助教	
21.10. 1	JEBAMALAI, William John Bosco	採用	分子ナノスケールサイエンスセンター ナノ分子科学研究部門 研究員	Jubilant Chemsys Research Scientist	
21.10. 1	YUE, Yue	採用	物質分子科学研究領域 電子物性研究部門 研究員		
21.10. 1	松田 晃孝	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	スウェーデン ストックホルム大学 博士研究員	
21.10. 1	CHEN, Long	採用	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 研究員		
21.10. 1	PAVEL, Nicolaie	採用	分子制御レーザー開発研究センター 先端レーザー開発研究部門 研究員	ルーマニア 国立レーザー・プラズマ・放射物理研究所 上級研究員	
21.10.16	NI Yang	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		
21.10.31	田中 康寛	辞職	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 助教	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 専門研究職員 (分子科学研究所特別研究員/特任助教)	
21.10.31	MURUGADOSS, Arumugam	辞職	日本学術振興会 外国人特別研究員	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	
21.10.31	PRODHAN, Md. Serajul Islam	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	
21.11. 1	寺内 かえで	採用	技術課 学術支援係 係員	名古屋大学 大学院理学研究科 研究員	
21.11. 1	田中 康寛	採用	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 助教	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 専門研究職員 (分子科学研究所特別研究員/特任助教)	

## 編集後記

分子研レターズ61号をお届けします。年末年始のご多忙中にもかかわらずご執筆をお引き受け頂いた皆様に深く感謝いたします。「分子研レターズ」ではこれからも分子科学コミュニティへの情報発信を行う媒体として様々な企画を考えていきます。今後も皆様のご意見やご提案などレターズ編集委員会までお寄せいただければ幸いです。最後に本号のまとめるあたり、多大なサポートを頂いた分子研広報室の原田さんに感謝を申し上げます。また、タイトなスケジュールの中、ご執筆頂いた著者の皆様に深く感謝を申し上げます。

本号編集担当 柳井 毅

## 分子研レターズ編集委員会よりお願い

### ■ご意見・ご感想

本誌についてのご意見・ご感想をお待ちしております。「氏名」「年齢」「連絡先」「職業」を添えて、下記分子研レターズ編集委員会あてにお送りください。

### ■住所変更・送付希望・送付停止を希望される方

ご希望内容について「氏名」「住所」「連絡先」「職業」を添えて、下記分子研レターズ編集委員会あてにお送りください。

分子研レターズ編集委員会

FAX : 0564-55-7262

E-mail : letters@ims.ac.jp

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

I M S Letters

分子研と研究者をつなぐ

VOL. 61

分子研レターズ

発行日 平成22年2月(年2回発行)  
発行 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構  
分子科学研究所  
分子研レターズ編集委員会  
〒444-8585  
愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38  
編集 大 森 賢 治 (委員長)  
柳 井 毅 (本号編集担当)  
大 迫 隆 男  
倉 橋 拓 也  
小 杉 信 博  
櫻 井 英 博  
平 等 拓 範  
手 老 龍 吾  
西 村 勝 之  
原 田 美 幸 (広報室)  
中 村 理 枝 (広報室)  
デザイン 原 田 美 幸 (広報室)  
印刷 株式会社コームラ

本誌記載記事の無断転載を禁じます

## 分子研レターズ vol. 61

発行月／2010年2月 編集発行／分子研レターズ61号編集委員会

〒444-8585 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地 E-mail : letters@ims.ac.jp URL : www.ims.ac.jp

 分子科学研究所