

分子研レターズ

VOL. **63**

FEBRUARY 2011
ISSN 0385-0560

●レターズ

韓国における 大学イノベーション点描

阿久津 秀雄 [大阪大学・名誉教授、大阪大学蛋白質研究所・客員教授]

●巻頭言

新たな分野創成への期待

佐藤 勝彦 [自然科学研究機構・機構長]

●共同利用研究ハイライト

トポロジカル絶縁体超薄膜の電子構造

平原 徹 [東京大学]

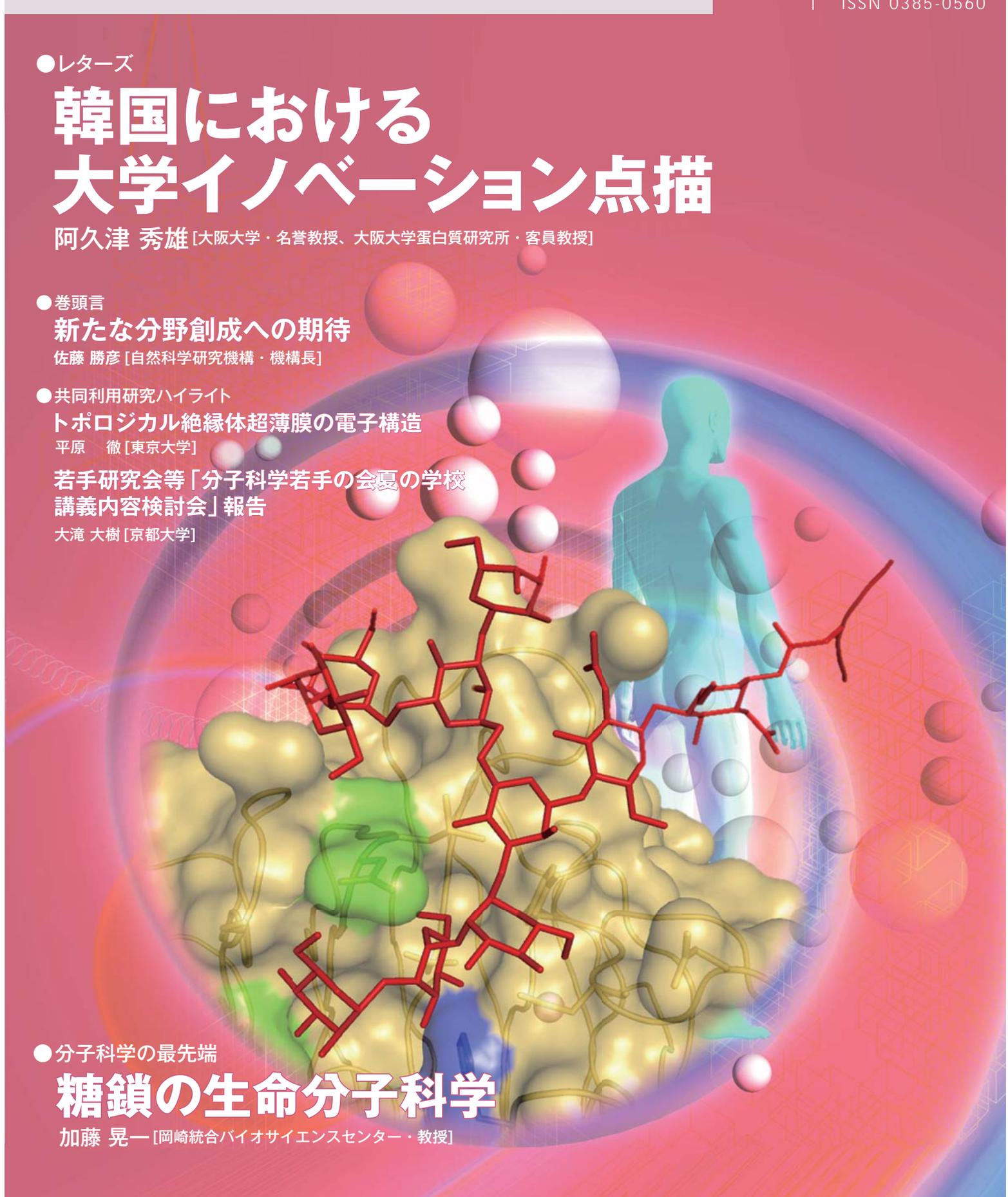
若手研究会等「分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」報告

大滝 大樹 [京都大学]

●分子科学の最先端

糖鎖の生命分子科学

加藤 晃一 [岡崎統合バイオサイエンスセンター・教授]



巻頭言

- 01
- 新たな分野創成への期待**
- 佐藤 勝彦 [自然科学研究機構・機構長]

レターズ

- 02
- 韓国における大学イノベーション点描**

● 阿久津 秀雄 [大阪大学・名誉教授、大阪大学蛋白質研究所・客員教授]

分子科学の最先端

- 04
- 糖鎖の生命分子科学**
- 加藤 晃一 [岡崎統合バイオサイエンスセンター・教授]

IMSニュース

- 08 第70回岡崎コンファレンス “Molecular Mechanism of Photosynthetic Energy Conversion: The Present Research and Future Prospects”

- 10 所長招聘研究会「2020年の物質分子科学を語る」

- 11 受賞者紹介

- 14 国際研究協力事業報告

IMSカフェ

- 18 OBの今 —— 水谷 泰久 / 細越 裕子 / 佐藤 啓文

- 23 OBの今 受賞報告

- 25 分子研を去るにあたり

- 30 外国人研究職員の紹介

- 31 外国人研究職員の印象記

- 32 新人自己紹介

共同利用・共同研究

- 34 共同利用研究ハイライト

—— トポロジカル絶縁体超薄膜の電子構造 平原 徹 [東京大学]

若手研究会等「分子科学若手の会夏の学校講義内容検討会」報告 大滝 大樹 [京都大学]

- 37 施設だより

- 40 共同利用・共同研究に関わる各種お知らせ

分子科学コミュニティだより

- 41 運営に関わって —— 高田 昌樹 / 木寺 詔紀

- 43 関連学協会等の動き

分子研技術課

- 46
- アナログ集積回路設計技術習得に向けて**
- 内山 功一 [電子機器・ガラス機器開発技術班]

- 47 技術職員OBの今 —— 岡田 則夫

大学院教育

- 49 コラム ——
- ドイツ滞在記**
- 小野木 覚 [機能分子科学専攻]

- 50 イベントレポート

- 54 受賞紹介

- 54 修了学生及び学位論文名

- 54 新入生紹介

13 トピックス

新しくなった分子研コロキウム
分子科学フォーラム

33 IMS Space

56 各種一覧

新たな分野創成への期待

佐藤 勝彦

自然科学研究機構 機構長

自然科学研究機構は創設から7年目となり、2010年度より2期目の中期目標・計画期間に入りました。私はこの新しい期に、志村前機構長より引き継ぎを受け2010年4月より機構長に就任いたしました。

いうまでもなく大学共同利用機関は、世界に誇る我が国の独自の研究機関であり、「研究者コミュニティ」総意の下に、全国の国公私立大学等の研究者に共同利用、共同研究の場を提供する中核拠点として組織されたものです。この8月、自然科学研究機構は国立大学法人評価委員会大学共同利用機関法人分科会においてヒヤリングを受け、評価を受けましたが、教育研究などの質の向上の状況をはじめほとんどの項目において「順調に進んでいる。」と評価を受けております。分子科学研究所は本機構を構成する中核的研究機関として、わが国の分子科学のセンターとしてこの分野の発展に寄与してこられました。今回の評価においても「光分子科学研究領域、物質分子科学研究領域および生命・錯体分子科学研究領域の連携によって、分子の回転運動の光制御の手法の開発等に成功したほか、……」というように高い評価を得ております。

分子研がこのように研究成果において高い評価を得ているだけでなく、大学共同研究機関として、特に高い評価を得ていることは、繰り返し言われていることではありますが、内部昇格を厳密に禁じ、極めて多くの研究者を広く大学、研究機関に供給していることでしょう。最近の調査ではこれまで全国の教授や助教授として分子研から転出された方が146人おられるとのこと、

また日本の物理化学研究者のほとんどが何らかの方で分子研に関係されているとのこと。しかし、大峯所長からお聞きすることによれば、数年以内には7名程度の教授の方が退職されるとのこと、分子研は大きくかわろうとしています。分子研は創設から35年、誇るべき伝統を持っている研究所であります。世界のCOEであり続けるためには、常にかかわることのできる体制を持っていることが必要不可欠です。分子研内部においてすでに新たな研究分野を含めて今後のあり方について議論が始まっているとのこと、大峯所長のイニシアティブの元に常になり得る組織体制、方向が出されるものと期待しております。今、国の予算の半分は借金、国債でまかなわれているという異常な財政の下、運営費交付金は毎年削減という厳しい状況ですが、ピンチはチャンスと捉え、新たな分野の創成をも含めた改革がおこなわれ、数年後にはさらに強力な新生分子研として進化するものと信じております。

さて、機構は2期中期目標・計画の時代となっております。1期からずっと言われていることですが、機構は分子研はじめ5つの自然科学の異なった分野の研究機関が束ねられ発足したものであり、この統合を生かした取り組みが求められています。幸い、機構長のイニシアティブによる5研究機関にまたがる共同研究を支援するプログラム、若手研究者による分野間連携研究プロジェクトには多くの研究者が応募していただいております。高い競争率のためすべての計画を支援することはできませんでしたが、分子研からの優れた研究も採択されており、その成果



をお聞きするのを楽しみにしております。また機構には異なる分野間の垣根を越えた先端的な新領域を開拓することを目指し新分野創成センターが設置されております。現在ブレインサイエンス研究分野及びイメージングサイエンス研究分野の二分野がおかれていますが、さらに5機関が統合したメリットを生かす新たな提案もいただければありがたいと思っております。分子研研究者、また関連研究者の皆様の新分野創成へのさらなる協力と支援をお願い申し上げます。

さとう・かつひこ

昭和43年3月京大理物理卒、昭和48年3月京大理理学研究科博士課程単位取得退学、理学博士（昭和49年）、昭和48年4月日本学術振興会奨励研究員、昭和51年12月京大助手、昭和57年12月東大助教授、平成2年10月～21年3月東大理学系研究科教授、平成11年～22年同ビッグバン宇宙国際研究センター長、理学系研究科長・理学部長、数物連携機構主任研究員、同特任教授を歴任、平成22年4月より現職。宇宙論の理論的研究に関して、平成元年井上賞、平成2年仁科記念賞受賞、平成14年紫綬褒章、平成22年日本学士院賞を受賞。また、1998年度及び2006年度日本物理学会会長。詳細は<http://utaprc4.phys.s.u-tokyo.ac.jp/~sato/ja/personal.htm>

阿久津 秀雄 大阪大学名誉教授、大阪大学蛋白質研究所客員教授

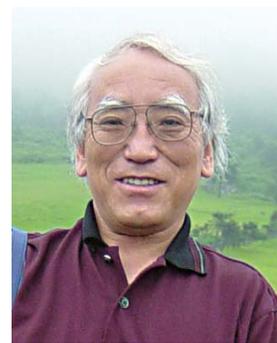
韓国における 大学イノベーション点描

朝7時、ソウルの冬の朝は寒く、暗い。しかし、ソウル大学の裏門ではラッシュアワーが始まっている。窓から眺める道には車の列が引きも切らない。この光景は現在のソウル大学の教員、学生、職員の意気込みと重なって見える。現在、ソウル大学は世界の一流大学へ駆け上ることを目指して、自信と活気にあふれている。わが国にごく近い韓国での教育・研究分野の動きは分子研の関係者にも興味ある話題だと思うので筆者のごく狭い見聞をお伝えしたいと思う。

筆者はWorld Class University(WCU)プロジェクトとの関連でしばらくソウル大学に滞在した。これは世界の優れた研究者を迎え入れて韓国の大学における教育・研究の質を短時間で世界レベルに引き上げることを目指した韓国政府の特別プロジェクトである。外国人教員を迎えての新分野大学院専攻の設立・運営、外国人教員参加の下での国際的共同研究グループの創設、ノーベル賞受賞者による教育・研究活動の活性化という3種類からなる。例えば、筆者の関係するソウル大学自然科学大学院「生物物理学および化学生物学専攻」は化学科中心の地元教員9名と外国からの教員6名の参加で創設された。

授業は韓国教員も含めて英語で行い、学位論文も英語で書く。この専攻の入試の重要な基準が英語であるので、授業における学生の英語理解にはあまり問題がない。英語でのコミュニケーションとなるとかなり個人差が出るが、日本に比べると学生の学習意欲は高い。

「漢江の奇跡」といわれる経済の急速な発展に支えられて、この20年くらいで研究を取り巻く環境は大きく変わった。以前はソウル大学でも博士の学位は外国で取る場合が多かった。今60歳前後になっている人達が学位を取り、ポスドクを終えて帰国したころは研究費が少なく、とても研究できる環境にはなかったとのことである。しかし、現在では政府の科学技術振興策に基づいてさまざまな研究助成金が出ており、経済界からの研究費あるいは大学への寄付は日本の比ではない。ソウル大学では毎年どこかの企業が寄付した建物が建設されている。このようにして、機器の整備と博士課程への進学率の上昇、外国人留学生の受け入れ、ポスドクの雇用が進み、欧米・日本と競争できる環境が整いつつある。この変化の速さは日本の高度成長期を超えるもので、韓国人研究者の自信の源になっている。それを示すのが、韓国人



阿久津 秀雄（あくつ・ひでお）
 1972年 東京大学大学院博士課程単位修得退学
 1972年 大阪大学蛋白質研究所助手
 1973年 理学博士（東大）
 1985年 横浜国立大学工学部助教授
 1991年 横浜国立大学工学部教授
 2000年 大阪大学蛋白質研究所教授
 2004年 大阪大学蛋白質研究所長
 2007年 大阪大学名誉教授、
 大阪大学蛋白質研究所客員教授

のランキング好きである。つい先日、OECDの教育ランキングで韓国が多く
の課題で1位、2位を占めて話題になっ
たが、ソウル大学ではことあるごとに
大学ランキングが出てくる。ある大学
ランキングによれば、ソウル大学は数
年前には世界で100位以下であったも
のが一昨年には50位になり、昨年就任
した総長は任期内の20位以内入りを目
指している。この右肩上がりの経済に
支えられた自信は今の学生や若い研究
者に世界への雄飛の希望を与えている。
朝鮮半島の政治的、軍事的緊張の中
でも若い人々の表情は非常に明るい。わ
が国では忘れられつつあるハングリー
精神がここには脈々と息づいている。

わが国も経験したことではあるが、
急速な発展はさまざまな歪みをも生み
出す。国からの教育・研究予算のかな
りの部分は競争的資金になっているが、
結果としてほぼ二つの国立大学と三つ
の私立大学に集中する傾向にある。そ
のため、大学間の格差が広がっている
といわれる。もっと深刻なのは制度的
歪みである。大学イノベーションの流
れの中で、米国にならって、医学部
には学士を持つ者のみ入学できる制度が
数年前に導入された。薬学部も昨年度
から6年制となり、他学部で2年の教育
を終えたものが入学できる。今年2011

年3月に第一回の入学生を受け入れる。
ところがこれらの制度改革は他学部の
教育に予想もしない影響を及ぼしてい
る。特に、化学系、生物系への影響は
深刻である。医学部の人気は圧倒的で、
レベルの高い大学の化学系、生物系の
優秀な学生はほとんどが医学部を目指
すようになった。学部でも薬学を目指
して転身する学生がかなりの割合を占
め、化学系、生物系専攻・学科は優れ
た研究者・技術者を教育計画にしたが
って社会に送り出すことに支障をきたす
可能性が出てきている。これについ
ては全国の教育機関から強い批判が出
ており、制度を見直さざるを得ないの
ではないかと言われている。韓国企業
は日本企業に比べると意思決定が早く、
行動力に優れていることはよく知られ
ているが、政府についても同じことが
言える。しかし、教育制度改革ではこ
れが裏目に出ているように見える。

韓国の大学でも間接経費の獲得が
重要な課題である。大型研究費を獲得
するためには研究の質を上げる必要が
あり、年々教員の採用条件は厳しく
なっている。インパクトファクターの
高い雑誌に多くの論文を出しているこ
とが重要な要件となる。この点ではア
メリカ帰りの研究者が有利になる。た
だ、教員定員には女性枠があって、こ

れがかなりの強制力を持っているため、
女性教員を増やす流れは定着している。
もう一つ研究の質を上げるものとして
サバティカル制度が採用されている。6
年間勤務すると1年のサバティカルが
ある。あるいは3年勤務して6ヶ月を
選択することもできる。これを使って
外国の研究室に滞在することが多くの
研究者の望みだが、理工系ではグラ
ントから来る制約や、学生指導の不安
のため長期に外国に行くことは難しい
という意見をよく聞く。安全策として
国内の他大学、あるいは他学部
に滞在する。または、サバティカル
をとって授業から解放され、研究
室で研究に専念することにも使
われている。既述のWCU
プロジェクトも教育・研究の質
を上げる試みの一つである。

現在、アジアは急速な経済発展を遂
げており、アメリカ、ヨーロッパと
ともに第三の経済、文化圏を形成す
ることが期待されている。しかし、
韓国の目は主に米国に向いており、
植民地支配の影響で日本への信頼感
は一般民衆レベルでまだまだ低い。
これまでの点描からも分かるように
研究者のレベルでも事情はあまり
変わらない。信頼関係の構築には
まずお互いを個人のレベルで知
りあうことが大切で、地道で息
の長い学術交流の必要性を感じる。

糖鎖の 生命分子科学

加藤 晃一

岡崎統合バイオサイエンスセンター
生命環境研究領域
生命分子研究部門 教授
(併) 生命・錯体分子科学研究領域
生体分子機能研究部門



かとう・こういち
1986年東京大学薬学部卒
1991年同大学院薬学系研究科博士課程修了、薬学博士 東京大学助手・講師、名古屋市立大学大学院薬学研究科教授を経て2008年4月より現職

はじめに

私たちが研究対象としている糖鎖は、核酸・タンパク質とならぶ第3の生命鎖ともよばれる。自然界に存在するタンパク質全種類の実に半数以上は糖鎖による修飾を受けた糖タンパク質として存在していると言われている。糖鎖はタンパク質の溶解性や安定性といった物理化学的性質を規定しているばかりでなく、細胞間コミュニケーションやウイルス感染にあずかる生体分子認識を媒介している。このような生物学的重要性にもかかわらず糖鎖の分子科学的研究はタンパク質や核酸に比べて著しく立ち遅れてきた。それは糖鎖の複雑性に起因している(図1)。例えば、糖鎖の構造はゲノムに直接コードされておらず、他の生命鎖にはみられない分岐構造と著しい不均一性を示している。そのために、糖鎖の合成や配列決定は容易ではない。加えて糖鎖は運動性が高いために結晶化は困難である。このためこれまでの構造生物学研究は往々にして糖鎖の存在を無視して行われてきた。私たちはこうした様々な困難を克服して糖鎖が担う生命情報を解読する体系的な研究戦略を構築(図2)してきた。

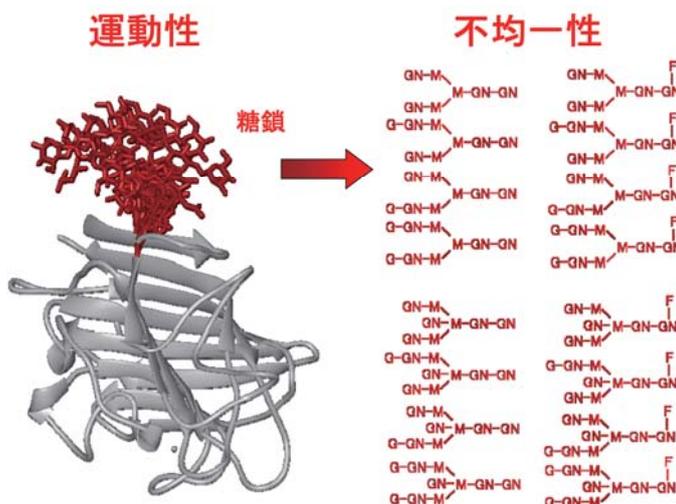


図1 糖タンパク質の構造解析の困難さを示す概念図。タンパク質を修飾する糖鎖は構造が不均一であるうえに内部運動の自由度に富んでいる。

糖鎖を研究するための基盤技術の構築

糖鎖は残基間の連結様式が多様であるために膨大な数の異性体が存在し得る。そのために配列決定すら困難である。幸いなことにこの問題は名古屋市立大学の高橋禮子博士(現・名誉教授)が考案した3次元HPLC法によって解決される。この方法は、蛍光標識した糖鎖混合物を3種類のHPLCカラムによって分離するとともにその溶出位置に基づいて構造を同定する方法である^[1]。私たちはこの方法に基づいて構築した3次元HPLCデータベースGALAXYを構築し、ウェブアプリケーションとして公開している(<http://www.glycoanalysis.info/>)。これを用いることにより、構造機

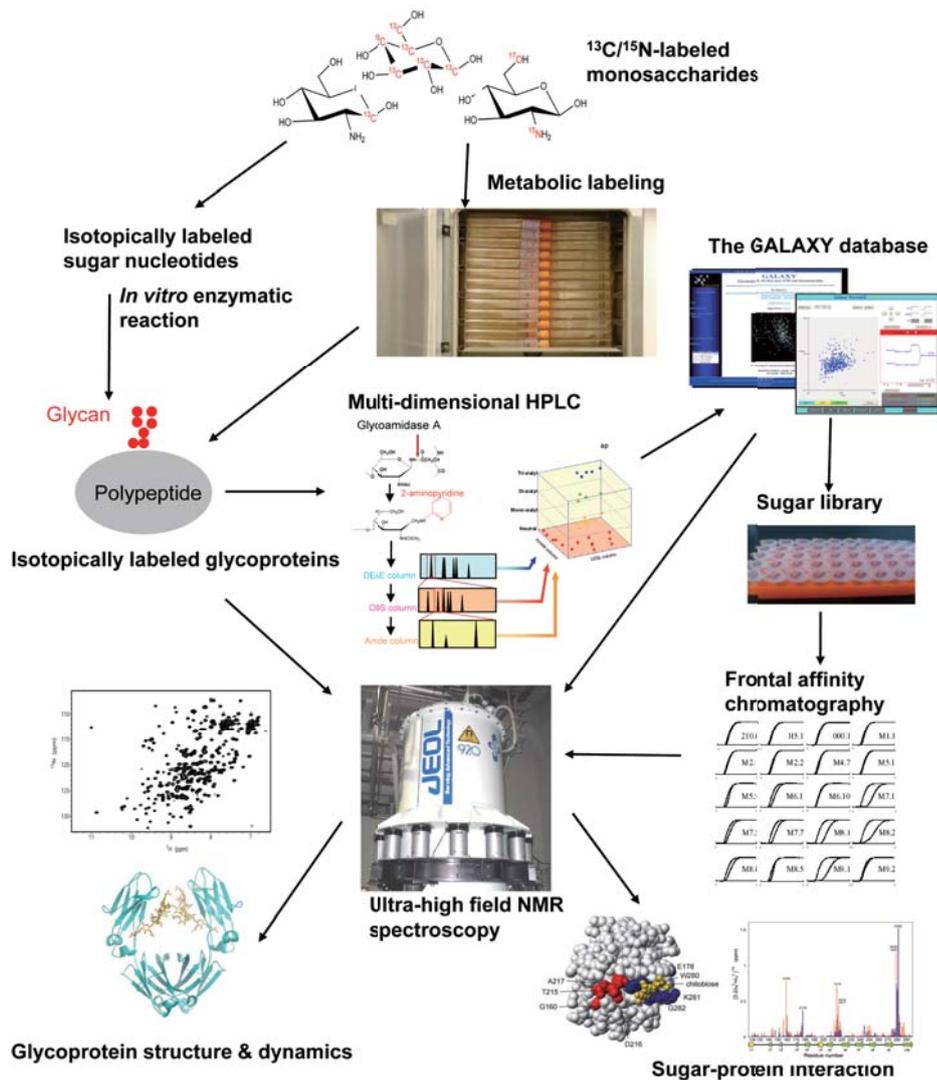


図2 糖タンパク質の構造解析を行うための体系的戦略。

能解析を行うための糖鎖標準品のライブラリーを整えることもできている。

NMRは結晶化が困難な糖タンパク質の構造解析においても潜在的な有用性を有している。しかしながら、糖鎖はタンパク質などに比べて官能基の多様性に乏しいためにスペクトル中でのピークの重なり合いが激しい。こうした場合に威力を発揮するのが超高磁場NMR装置である^[2]。ただし、糖鎖は水溶液中でNMRシグナルを与える¹Hの数が少ないため、核オーバーハウザー効果に基づく原子間距離情報を収集す

ることが困難である。山口拓実助教らはこの問題を解決するために化学修飾によって糖鎖の末端にランタノイドイオンを配位することが可能なタグを設計・導入し、常磁性効果を利用した糖鎖のコンフォメーション解析に取り組んでいる。

NMRを利用した生体高分子の構造解析の可能性は、試料を¹³Cなどの安定同位体で標識することにより格段に広がる。糖鎖を対象にした安定同位体標識はこれまで未開拓な状況にあったが、私たちは試験管内における酵素反応や

真核細胞の代謝経路を利用してこれを実現するための方法論の開発にも力を注いできた^[3]。図3は全ての炭素と窒素を¹³Cと¹⁵Nで標識した免疫グロブリンのFc領域の920 MHz NMRスペクトルを示す。こうした試料を用いることにより、糖タンパク質の糖鎖とポリペプチド鎖に由来する信号を系統的に観測することが可能となり、糖鎖構造の改変に伴う分子の3次元構造の変化を原子レベルの分解能で追跡することができるようになった。

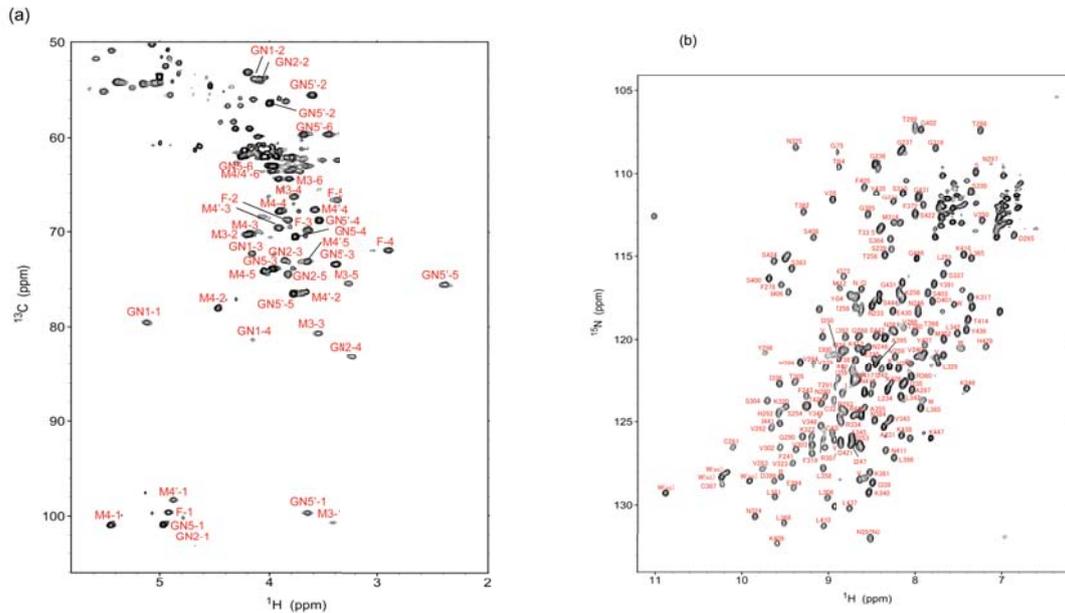


図3 ^{13}C と ^{15}N で標識した免疫グロブリンのFc領域(52kDaの糖タンパク質)の (a)糖鎖と(b)ポリペプチド鎖のHSQCスペクトル^[3]。

タンパク質による 糖鎖認識の構造基盤

糖鎖の機能は多くの場合、タンパク質との相互作用を通じて発揮視されている。糖鎖を認識するタンパク質は一般にレクチンとよばれている。古典的なレクチンは主に細胞外の環境で機能しているが、最近は細胞の中にも様々なレクチンが存在することが明らかになってきた。神谷由紀子特任助教は、糖鎖ライブラリーを駆使してこれら一連の細胞内レクチンの糖鎖認識の特異性を解き明かし、その機能発現メカニズムの理解の進展に貢献してきた^[4, 5]。その成果をまとめたのが図4である。細胞の中で新たに生合成されたポリペプチド鎖には3本の枝をもった糖鎖が付加されるが、特異的な酵素反応によって糖残基が端から順次切除されていく。こうした糖鎖のプロセッシングの過程で現れる中間体に対して細胞内レクチンが順次相互作用し、糖鎖を担うタンパ

ク質を異なる運命（フォールディング、輸送、分解）へと導いていくのである。

このような巧妙な仕組みは、レクチンが標的となる糖タンパク質と細胞内環境に応じて調節的に相互作用することに基いている。例えば、積荷受容体として機能するレクチンは細胞内pHを感知する仕組みを糖鎖認識部位に獲得していることを明らかにしてきた(図5)。さらに、細胞内レクチンがパートナータンパク質と連携して血液凝固因子の細胞内輸送を司るメカニズムにも迫りつつある^[6]。

糖鎖クラスターを舞台とする 分子間相互作用

糖鎖のなかには脂質分子を修飾して細胞表層でクラスターを形成するものもある。例えば、アルツハイマー病の発症に関与するアミロイド β ($\text{A}\beta$)の重合は、神経細胞表層に存在する糖脂質GM1ガングリオシドのクラスター

との相互作用を契機として促進される。したがって、本疾患の発症メカニズムを解明するためには、GM1と $\text{A}\beta$ の相互作用の実体を明らかにすることが重要である。しかしながら、ペプチドと糖鎖と脂質からなる複合体は不均一かつ不安定であるため、通常の構造生物学によるアプローチは困難であった。私たちのグループの矢木真穂博士は、GM1の小型クラスターの構築と超高磁場NMR計測によりこうした問題を克服し、 $\text{A}\beta$ がGM1クラスターの親水領域と疎水領域のインターフェースにおいて一定のトポロジーを呈して捕捉されていることを明らかにした(図6)^[7, 8]。この結果は、GM1クラスターが $\text{A}\beta$ の構造変化と分子間相互作用を誘起するための限定された空間を提供していることを初めて示すものである。こうして空間配置を規定されることにより、 $\text{A}\beta$ 分子間の特異的な相互作用が促され、重合体形成に至るものと考察される。

まとめと今後の展望

以上述べたように、多次元HPLC法、糖鎖ライブラリー、糖鎖の安定同位体標識、超高磁場NMR解析など、糖鎖の体系的な構造解析を行うための基盤技術を整え、これを応用した研究を展開してきた。糖鎖分子科学の今後の重要課題は、水溶液中における糖鎖のコンフォメーションの揺らぎや水和の問題を積極的に取り扱うことである。糖鎖-タンパク質相互作用さらには糖鎖-糖鎖相互作用のエナジェティクスを定量的に議論するためには、遊離状態と結合状態のそれぞれについて理解を深めることが不可欠である。また、糖鎖による分子認識は本質的に弱い相互作用の集積を通じ実現されていることから、精密な構造解析を行うためには適切にクラスター化した糖鎖を設計してNMR計測を行うことが必要である。このような基盤の上に展開される超高磁場NMR分光と計算科学との連携が、糖鎖の分子科学の今後の進展において重要となってくるであろう。

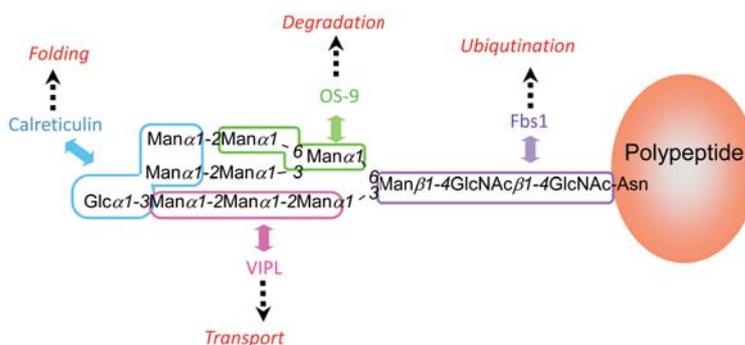


図4 糖タンパク質の細胞内運命を決定するレクチンによる糖鎖上の認識部位。

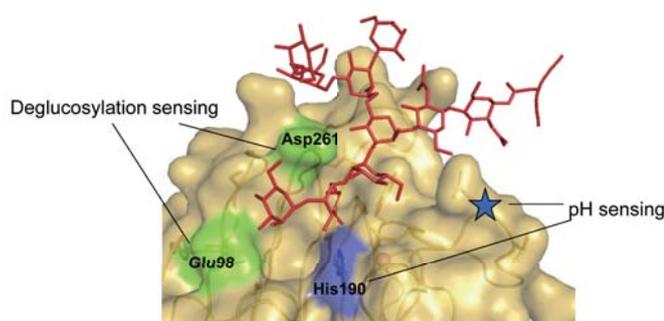


図5 積荷受容体として機能する細胞内レクチンVIP36が糖鎖結合部位に獲得した分子機能^[4]。

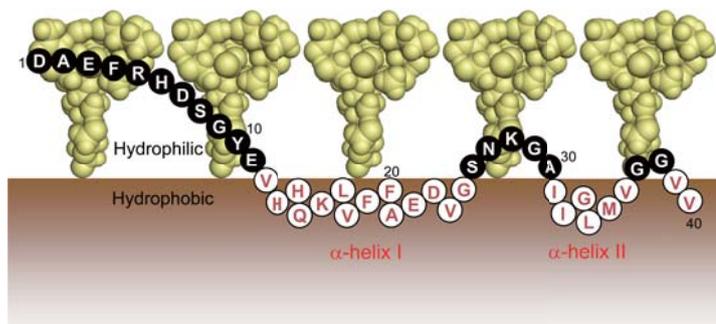


図6 NMR解析の結果に基づくAβとGM1クラスターの相互作用の模式図^[7]。

参考文献

- 1) K. Kato and N. Takahashi, *Experimental Glycoscience: Glycobiology*, Springer, pp. 413-416 (2008)
- 2) K. Kato, H. Sasakawa, Y. Kamiya, M. Utsumi, M. Nakano, N. Takahashi, and Y. Yamaguchi, *Biochim. Biophys. Acta –General Subjects* **1780**, 619-625 (2008)
- 3) K. Kato, Y. Yamaguchi, and Y. Arata, *Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy* **56**, 346-359 (2010)
- 4) Y. Kamiya, D. Kamiya, R. Urade, T. Suzuki, and K. Kato, *Glycobiology Research Trends* NOVA Science Publishers, pp. 27-40 (2009)
- 5) N. Hosokawa, K. Kato, and Y. Kamiya, *Methods in Enzymology* **480**, 181-197 (2010)
- 6) M. Nishio, Y. Kamiya, T. Mizushima, S. Wakatsuki, H. Sasakawa, K. Yamamoto, S. Uchiyama, M. Noda, A.R. McKay, K. Fukui, H.-P. Hauri, and K. Kato, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **107**, 4034-4039 (2010)
- 7) M. Utsumi, Y. Yamaguchi, H. Sasakawa, N. Yamamoto, K. Yanagisawa, and K. Kato, *Glycoconjugate J.* **26**, 999-1006 (2009)
- 8) M. Yagi-Utsumi, T. Kameda, Y. Yamaguchi, and K. Kato, *FEBS Lett.* **584**, 831-836 (2010)

第70回岡崎コンファレンス “Molecular Mechanism of Photosynthetic Energy Conversion: The Present Research and Future Prospects”

光合成研究の最近10数年の進歩はめざましく、中心的なタンパク質の構造がX線結晶構造解析などによって次々と明らかとなっている。一方、光合成は物理・化学の第一原理から積み上げて理解するにはあまりにも複雑であり、生物系以外の研究者にとっては未だ敷居が高い。しかしながら、光合成の学術的・社会的重要性を鑑みると、物理・化学・生物のさまざまな分野の研究者が一堂に会して相互理解を深めることは、今後の研究の発展に大きな意義を持つ。

このような背景のもとに、第70回岡崎コンファレンス “Molecular Mechanism of Photosynthetic Energy Conversion: The Present Research and Future Prospects” 「光合成によるエネルギー変換機構の分子レベルでの解明と将来の展望」

を2010年12月4日(土)～6日(月)に開催した。国内16名・海外9名の招待講演者によるオーラルセッションと、27件のポスターセッションを設けて、討論を行った。事前登録数が89名、当日登録を加えて総計108名が参加した。

会はいきなり、欧州の豪雪と航空会社のストライキというハプニングに見舞われ、一部の招待講演者の到着が遅れたため、一日目のプログラムを大幅に変更せざるを得なくなった。しかしながら、学術的内容は充実していた。どの講演にも多数の質問が寄せられ、フリーディスカッションの時間にも活発な討論が展開された。終了後アンケートを実施したところ、異なる研究分野の話が聞けて刺激になったという感想が多く、会議の目的は達せられたと言える。

会の最後に、組織委員長の杉浦より、今後の展望について2つの提案を行った。1つは、今回の招待講演者を中心に一般向けの解説書を編むこと、もう1つは、今回のような趣旨の集会を定期的に開いて新しい研究者コミュニティの形成を進めることである。新分野の開拓は分子研のミッションの1つであり、岡崎コンファレンスはそのきっかけを与える役割を担っている。第70回という記念すべき会にあたって、分子研および分子科学コミュニティからの絶大なサポートに深く感謝しつつ、光合成・エネルギー科学研究の新展開に向けて、今後とも確かな歩みを進めて行きたい。

(世話人 杉浦美羽、永田 央、石北 央、加藤 祐樹、三野 広幸)



The 70th Okazaki Conference “Molecular Mechanism of Photosynthetic Energy Conversion: The Present Research and Future Prospects”, 4–6 Dec 2010, Okazaki, Japan.

Program

December 4 (Sat.)

9:30 - 9:40 **Iwao OHMINE** (*Director-general of Institute for Molecular Science, Japan*)

Opening Address

9:40 - 9:50 **Toshi NAGATA** (*Institute for Molecular Science, Japan*)

Objective of the Conference

Session 1: Structure of Photosystem II *Chair: Alain BOUSSAC*

9:50 - 10:25 **Miwa SUGIURA** (*Ehime University, Japan*)

Overview of Photosystem II and Artificial Photosynthesis Research

10:25 - 11:00 **Yasuhiro KASHINO** (*Hyogo University, Japan*)

Small Subunit Proteins in Photosystem II Complex

11:00 - 11:35 **Tatsuya TOMO** (*Tokyo University of Science, Japan*)

Characterization of Photosystem Complexes in a Chlorophyll *d*-dominated Cyanobacterium

11:35 - 13:00 **Lunch and Poster Hanging**

Session 2: Photosystem II and Water Oxidation *Chairs: Hiroyuki MINO and Miwa SUGIURA*

13:00 - 13:35 **James MURRAY** (*Imperial College London, UK*)

Recent Work on the Structure and Assembly of Photosystem II

13:35 - 14:10 **Alain BOUSSAC** (*CEA Saclay, France*)

Spectroscopic Studies of the Mn₄Ca cluster in Photosystem II from *Thermosynechococcus elongatus* in Mutants and upon Exchanges of Br⁻ or I⁻ for Cl⁻ and Sr²⁺ for Ca²⁺

14:10 - 14:45 **Johannes MESSINGER** (*Umea University, Sweden*)

New Insight into the Electronic Structure of the Mn₄CaO₅ Cluster in Photosystem II Based on ⁵⁵Mn ENDOR Spectroscopy and Ca/Sr Exchange

14:45 - 15:20 **Hiroyuki MINO** (*Nagoya University, Japan*)

The Origin of the EPR Signals around g=2 in Untreated and Ca²⁺-Depleted Photosystem II

15:20 - 15:40 **Coffee Break**

15:40 - 16:15 **Richard DEBUS** (*UC Riverside, USA*)

Evidence from FTIR Difference Spectroscopy for a Network of Hydrogen Bonds near the Oxygen-Evolving Mn₄Ca Cluster of Photosystem II

16:15 - 16:50 **Takumi NOGUCHI** (*Nagoya University, Japan*)

Infrared Studies of Photosynthetic Oxygen Evolving Reactions

16:50 - 17:25 **Jian-Ren SHEN** (*Okayama University, Japan*)

Crystal Structure of Oxygen-evolving Photosystem II at an Atomic Resolution

17:25 - 18:15 **Discussion Session 1&2** (*Chairs: Hiroyuki MINO and Miwa SUGIURA*)

18:15 - 20:30 **Poster Session 1**

December 5 (Sun.)

Energetics of Photosystem II *Chairs: Hiroshi ISHIKITA and Fabrice RAPPAPORT*

9:00 - 9:35 **Alfred HOLZWARTH** (*Max-Planck Institute, Germany*)

Switching from Light-Harvesting to Quenching and Back: How Does Photosystem II Do It?

9:35 - 10:10 **Ernst-Walter KNAPP** (*Free University of Berlin, Germany*)

Computation of Cofactor Redox Potentials in PSII: How Does It Work

10:10 - 10:45 **Hiroshi ISHIKITA** (*Kyoto University, Japan*)

Oxidation Power of the Chlorophyll Pair P680 in Photosystem II

10:45 - 11:05 **Coffee Break**

11:05 - 11:40 **Yuki KATO** (*The University of Tokyo, Japan*)

Energetics within Photosystem II Based on the Redox Potentials of Cofactors on the Acceptor Side Determined by Spectroelectrochemistry

11:40 - 12:15 **Fabrice RAPPAPORT** (*Institut Biologie Physico Chimie, France*)

The Energetic Picture of Photosystem II: Where Do We Stand?

12:15 - 12:45 **Discussion Session 3** (*Chairs: Hiroshi ISHIKITA and Fabrice RAPPAPORT*)

12:45 - 13:50 **Lunch**

13:50 - 14:00 **Taking Photograph**

Session 4: New Approaches for Photosynthesis Research *Chairs: Miwa SUGIURA and Yuki KATO*

14:00 - 14:35 **Graham FLEMING** (*UC Berkeley, USA*)

Design Principles of Natural Light Harvesting - How Hard Is It to Achieve 100% Quantum Efficiency

14:35 - 15:10 **Warwick HILLIER** (*The Australian National University, Australia*)

Developments in Stable Isotope Mass Spectrometry: Chemical Insights into Catalysis of Water Oxidation

15:10 - 15:45 **Shigeichi KUMAZAKI** (*Kyoto University, Japan*)

Simultaneous Sensing of Photosynthetic Activity and Thylakoid Morphology Realized by Fluorescence and Absorption Spectral Microscopy

15:45 - 16:05 **Coffee Break**

16:05 - 16:40 **Hiro-o HAMAGUCHI** (*The University of Tokyo, Japan*)

Structure/Function Analysis of Photosynthetic Pigments in a Single Living Cyanobacteria Cell by 1064 nm Near-infrared Excited Raman Microspectroscopy

16:40 - 17:15 **Michio MATSUSHITA** (*Tokyo Institute of Technology, Japan*)

Single-Molecule Spectroscopy of Bacterial Photosynthetic Antenna Complexes at Liquid Helium Temperature

17:15 - 17:45 **Discussion Session 4** (*Chairs: Miwa SUGIURA and Yuki KATO*)

17:45 - 19:00 **Poster Session 2**

19:00 - 21:00 **Banquet**

December 6 (Mon.)

Artificial Photosynthesis by Using Synthesized Compounds *Chair: Yutaka AMAO*

9:00 - 9:35 **Hitoshi TAMIYAKI** (*Ritsumeikan University, Japan*)

Photochemistry of Chlorophylls and Their Synthetic Analogs

- 9:35 - 10:10 **Toshi NAGATA** (*Institute for Molecular Science, Japan*)
Single-Molecular Quinone Pools: A Synthetic Model of Biochemical Energy Transducer
- 10:10 - 10:45 **Shigeyuki MASAOKA** (*Kyusyu University, Japan*)
Molecular Mechanism of Water Splitting into Hydrogen and Oxygen Catalyzed by Metal Complexes
- 10:45 - 11:05 **Coffee Break**
- Session 6: Artificial Photosynthesis and Application** *Chair: Toshi NAGATA*
- 11:05 - 11:40 **Yutaka AMAO** (*Oita University, Japan*)
Artificial Photosynthesis System for Solar Hydrogen and Fuel Production
- 11:40 - 12:15 **Mamoru NANGO** (*Osaka City University, Japan*)
Artificial Photosynthetic Antennas and Development of Nanobiodevices
- 12:15 - 12:45 **Discussion Session 5** (*Chairs: Yutaka AMAO and Toshi NAGATA*)
- 12:45 - 12:50 **Remarks and Closing** (*Miwa SUGIURA, Ehime University*)

所長招聘研究会「2020年の物質分子科学を語る」

平成22年12月1日(水)に、多種多様な物質を生み出す化学において、基礎学問として分子科学に期待される役割を、10年先を見通しながら、第一線で活発にご活躍中の若手の先生方に自由に語っていただくことを目的として、所長招聘研究会「2020年の物質分子科学を語る」が研究棟201号室にて開催されました。発表者9名を含めて37名の参加(登録者のみ)がありました。世話役は、魚住泰広教授・青野重利教授と横山がさせていただきました。

冒頭で大峯所長の挨拶があり、分子研の目的として、(1)新しい学問の創成、(2)人材育成はもちろんのこと、(3)共同利用研として各大学法人等を連携する横串的役割を担う必要があることが示されました。創設以来35年を経て、300名もの研究者を所外に輩出してきた分子研も、ここ3年のうちに7名もの教授が定年退職するにあたり、質的変化の時期に来ており、今ここで分子研の基本的なあり方を考えたい、との言葉がありました。

今回は物質分子科学に焦点を当てた研究会でしたが、その中でも光と物質

の相互作用に言及された講演がいくつかあったことが特徴かと思えます。最初の講演者の阿部二郎先生(青学大理工)は、新しいタイプの有機ラジカル分子を用いた高速フォトクロミズムに関する成果と、これを用いたキラルネマチック液晶における光による動的螺旋長制御の可能性に関して言及されました。若宮敦志先生(京大化研)は、ホウ素の特性を活かした新しい機能性物質として発光材料への展開の成果をお話になり、含ホウ素有機化合物の色素増感太陽電池やCO₂還元への応用可能性を述べられました。辻勇人先生(東大院理)は、これまであまり注目されてこなかったフラン系に着目した有機EL・発光センサー・バイポーラ半導体材料としての成果を話され、炭化水素によるバイポーラ有機半導体の新規開発目標に言及されました。篠原健一先生(北陸先端大)は、ポリマー単分子が光により段階的に解離していく過程をリアルタイム動的単分子イメージングにより上映され、今後のポリマーを用いたバイオ機能模倣などの可能性について述べられました。

分子研からは唯美津木先生が、不斉自己組織化やモレキュラーインプリント法による新しい高機能固定化分子性触媒に関する成果を話され、今後の分子認識触媒への展開について言及されました。一方で、燃料電池などのナノ粒子触媒の重要性と、評価手段としての時間あるいは空間分解X線吸収分光法のさらなる高性能化の話題を提供されました。金有洙先生(理研)は、独自に開発した走査トンネル顕微鏡分光を用いた1分子振動観測やエネルギー励起を通して、単分子マニピュレーションや表面化学反応観測に関しての成果を話され、今後の目標として発光素子の光励起状態における単分子電子・振動状態挙動観測を挙げられました。福村知昭先生(東大院理)は、Co含有TiO₂希薄磁性半導体において室温強磁性を実現した成果に関して話され、今後の展開として高速不揮発素子を見据えた電界効果強磁性の発現、あるいは発光素子への応用について言及されました。宮坂等先生(東北大院理)は、金属錯体を用いた低次元物質のさまざまな磁性発現に関する研究成果を通し

て、分子間相互作用を制御することでボトムアップ的な次元制御を目指す必要性を強調されました。

いずれの講演も素人にも大変わかりやすく、しっかりと先を見据えた突出した研究成果と研究目標紹介であり、分子研が今後の物質分子科学という研究領域を再構築していくにあたって、さまざまな方向性を勉強できた素晴らしい研究会であったと思います。ナノ

テクに批判的なご主張もいただきました。確かに予算取りに対してナノは収束しつつあることは間違いなく、今後ナノを中心軸とした展開はないかもしれません。しかしながら、ナノテクの成果は情報技術のみならず厳然と挙がっており、化学分野からの貢献も多大であり、今後も微細化高速化省エネ化が必須であることに鑑みて、社会的な要請に応えていくことも研究者の使

命であるかと認識いたします。

講演者の皆様、ときには厳しい質問をして下さった参加者の皆様、素晴らしい研究会にさせていただき誠にありがとうございました。翌々日の主幹会議にて、所長から、大変意義のある研究会だったので近いうちにもう一度やや分野を変えて行うようにと、さっそくの指令をいただけてしまいました……。

(横山 利彦 記)

IMS news

受賞者の声

金鋼助教に日本物理学会第5回若手奨励賞 原田洋介研究員にナノオプティクス賞

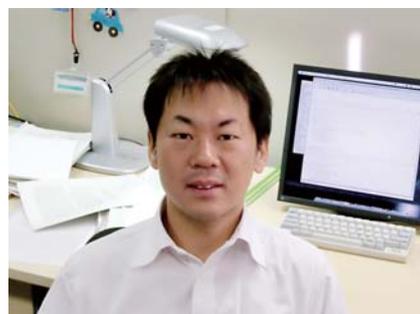
金鋼助教に日本物理学会第5回若手奨励賞

このたび、「ガラス転移および荷電コロイド分散系のダイナミクスに対する計算シミュレーション」の研究において、日本物理学会第5回若手奨励賞をソフトマター物理・化学物理・生物物理を専門とする領域12で受賞することとなりました。私はこれまで、統計力学の理論およびシミュレーションによる研究を行ってきました。液体のような多数の構成要素が凝縮した系は統計力学理論の応用の場として古くから発展してきましたが、最近ではコロイド・ガラス・粉体などいわゆるソフトマターとよばれる物質群まで幅広く対象とし、これらの新奇な非線形・非平衡現象の解明に多くの注目が集まっています。

分子研着任前まで、コロイド微粒子の電気泳動など界面動電現象に対するシミュレーション手法の開発に従事しました。コロイドの電気泳動は流体力学と静電力学が動的にカップルする現

象で、この動的過程を正確に再現できるシミュレーションはありませんでした。そこで電気流体力学を近似なく解く手法を新規開発し、定量的に満足いくシミュレーションを世界で初めて行うことに成功しました。開発したプログラムはKAPSELと名付け無料公開しており、ソフトマター物理だけでなくコロイド界面化学にも大きなインパクトを与えたと自負しています。

また分子研着任後は、ガラス転移に伴う恐ろしく遅い動力学の起源を解明すべく研究を行っています。ガラス転移現象は実際の材料設計といったエンジニアリングに関係するだけでなく、純粋にアカデミックな観点から統計力学における最後の未解決問題とも言われるようになり、世界中の研究者間で熾烈な競争が繰り広げられています。私は、凝縮相動力学において有用な高次非線形分光法における理論形式を参



照することで多体・多時間相関関数による独自の解析手法を提案し、ガラス転移に特徴的な不均一運動の時空間構造を抽出することに成功しました。

これらの研究成果に対して今回このような栄誉ある賞を受賞することができ大変嬉しく思っています。これまで、齊藤真司教授をはじめ多くの共同研究者の先生方から多くの薫陶を受けました。この場を借りて改めて感謝いたします。

今後ともこの受賞を励みに、分子科学と統計力学を行き来して、全く新しい分野の開拓やユニークな研究を目指したいと考えています。

(金鋼 記)

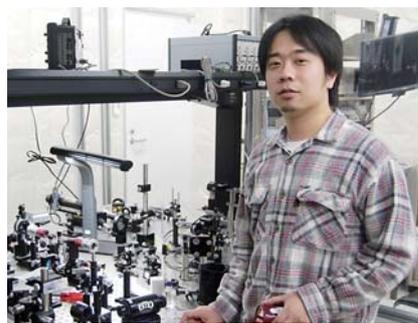
原田洋介研究員にナノオプティクス賞

この度、7月に行われたナノオプティクス研究グループ第19回研究討論会にて、「金ナノ粒子が相互作用した半導体光電変換素子の近接場光電流イメージング」の発表をナノオプティクス賞に選んでいただきました。この討論会は、ナノオプティクスの分野で先進的な研究を行っている国内のグループから、特に若手研究者が多く参加しており、私自身の発表では数多くの意見を頂き、また他の参加者の発表も興味深いものばかりで、有意義な討論会でした。そのような会で賞をいただき、大変光栄です。

近年、光学分野におけるナノテクノロジーの強力なツールとして、貴金属ナノ粒子の表面プラズモン共鳴の利用が提案されており、そのうちの一つ

に、太陽電池等の光電変換素子への利用があります。プラズモンによる光エネルギーの捕集効果により、光電変換効率を高められるとして多くの研究者が試み、報告例も年々増えてきています。しかし、空間的に局所的な現象であるプラズモンが、如何にして光電変換効率を増強し得るか、その機構については、実験的な困難さもあり、未だ不明な点が多いというのが現状です。

我々は、高い空間分解能を有する近接場光学顕微鏡を用いて、金ナノ粒子を修飾した半導体光電変換素子について近接場光電流イメージングを行いました。金ナノ粒子近傍に局所的に生じる光電変換効率の変化をナノスケールで観測することに成功し、様々な形状の金ナノ粒子について得られた結果から、プラズモンと



光電変換効率がどのように結び付くかを議論しました。本研究が、プラズモン共鳴をベースとした光電変換素子開発において、基盤となり得る情報を与えるものと考えています。

本研究に対し、御指導頂きました岡本裕巳教授に心から感謝いたします。また、早稲田大に異動された井村考平准教授を始めとした共同研究者の先生方に、深く感謝いたします。

(原田 洋介 記)

TOPICS 新しくなった分子研コロキウム

分子研コロキウムは既に800回を越える歴史のあるセミナーですが、元々のコロキウムの趣旨は、所長を筆頭に全ての教授、准教授（当時は助教授）が参加し、各人の専門分野を越えて学問的な刺激を受ける場を提供することであったとお聞きしています。若い研究者を巻き込んでのブレインストーミングの場でもあり、また、前号レターズ欄で理研の田原先生がいみじくも述べられているように「分子研で話して大丈夫ならたぶん間違いではない」という役目も講師の方（さらには分子科学コミュニティ）に与えていたのだと思います。しかし、山手地区への展開や法人化以降の組織改編や国民への説明責任などが優先され、分子研コロキウムが隅に追いやれてしまうような状況に陥ってしまいました。そこで、所内有志で議論した結果を大峯新所長にぶつけたところ、ご理解して頂き、世話人として本年度（H22）から分子研コロキウムの改革に着手しました。分子科学の最先端で自ら先陣を切って研究をされている方々を講師としてお招きし、山手地区の人たちや客員の先生方も参加できるように、定例で毎月第3金曜日に開催される教授会議終了後にコロキウムを行うことにしました。多忙を極めている研究者を第3金曜日の教授会議後にピンポイントでお招きするわけですから、日程交渉がかなり大変なことになります。ところがこのような無茶な依頼を突然メールでお願いしても、我々のコロキウム改革の趣旨を御理解頂き、可能な限りの日程調節を試みてくださる先生が多いことが分かり、正直なところ予想外の嬉しい反応です。あらためて講師の先生には感謝申し上げます。コロキウムにはもう一つ大きな変革があります。大峯所長の発案で、コロキウム終了後に所長差し入れのワインを飲みながら講師の先生と研究談話会を行うことにしております。リラックスした雰囲気で行うことは素晴らしい試みで、参加者の皆さんには「これは良いね」と非常に好評です。コロキウム委員が用意するビールと比べものにならないワインなので、所長に毎回数本ものワインを差し入れて頂いているのが非常に心苦しい限りですが、個人的にはこの企画は何としてもコロキウム改革の一部として続けたいと勝手に思っています。以上、試行錯誤でコロキウム改革を進めております（教授会議も早く終わるようになりました）。皆様のご理解とご協力をよろしくお願い致します。

（信定 克幸 記）



TOPICS 分子科学フォーラム

1996年より開催している分子科学フォーラムですが、今年度は昨年11月5日に「はやぶさ」のプロジェクトマネージャーである宇宙航空研究開発機構の川口淳一郎教授を、今年の1月14日にノーベル物理学賞受賞者の益川敏英教授をお招きしました。

川口教授の講演会では、300名以上の参加者で会場は超満員となりました。参加者の中には、はやぶさの模型を作った自動車エンジニアや、はやぶさを紹介している本を握りしめた小学生等熱狂的ファンも多数参加していました。

益川教授は岡崎市民会館大ホールで開催しましたが（通常は岡崎コンファレンスセンター）、約900名の市民、学生が集まってくださり、こちらも大盛況となりました。講演前は、岡崎3機関の若手研究者と懇談会を行いました。質問や意見が絶えることなく、くつろいだ雰囲気の中、楽しい懇談会となりました。

来年度の第一弾は、巻頭言に執筆いただいた佐藤勝彦機構長を予定しています。

（広報室 記）



01 日本学術振興会アジア研究教育拠点事業「物質・光・理論分子科学のフロンティア」 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

JSPSアジア研究教育拠点事業によって、2010年7月25日（日）～28日（水）に中国・吉林大学で「日中機能性超分子構築シンポジウム」が開催された。このシンポジウムは、JSPS研究教育拠点事業セミナーとして、日中両国の中堅・若手研究者による最先端の研究成果の発表を通じて、機能性超分子分野におけるネットワークを構築するために、2007年度より開催してきた。今回の吉林大学での開催は4回目にあたり、日中両国から70名を超える中堅・若手研究者が参加した。

本シンポジウムでは、日中両国の自己組織化分野で活躍されている第一線の中堅・若手研究者を中心に招待講演を実施した。また、博士研究員や博士

課程学生を中心にポスター発表が実施された。専門分野として有機化学、無機化学、高分子科学、生体関連分野、物質科学、物理化学などの幅広い分子科学をカバーする最新の研究発表が実施されたため、当分野の最先端を一覧することができた。日本側では、JSPSアジア研究教育拠点事業の支援のもと、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、北海道大学、立命館大学等研究機関から第一線で活躍されている計17名の研究者をお招きした。中国側では、吉林大学、中国科学院化学研究所の他に、北京大学、清華大学、浙江大学、復旦大学、南開大学、上海交通大学などの研究機関から中国のトップ研究者を代表する

中堅・若手教授21名が参加され、併せて計38件の招待講演を行った。個々の講演内容は分野を横断するものが多く、各講演に対して熱心に質疑・議論を行うことができた。本シンポジウムでは、最先端の成果発表を通じて、お互いに知り、また、議論することによりネットワーク構築に向けて良い知的関係を築くことができた。本シンポジウムに参加された中国科学院の院士から高い評価を受けており、また、多数の参加者から来年の開催についての問い合わせがあり、是非継続してほしいという要望があった。なお、プログラムの詳細は下記のとおりである。

Japan-China Joint Symposium on Functional Supramolecular Architectures

July 25-28, 2010 at Changchun, China

Funded by Japan Society for the Promotion of Science (JSPS) & National Natural Science Foundation of China (NSFC)

Organization Committee

Hirimitsu Maeda (Risumeikan Univ., Japan), Hidetoshi Kawai (Hokkaido Univ., Japan), Donglin Jiang (Institute for Molecular Science, Japan) Changchun Wang (Fu Dan Univ., China), Zhishan Bo (Institute of Chemistry, China), Yuguang Ma (Jilin Univ., China)

Program

7.24 (Saturday) Registration

7.25 (Sunday)

Invited Lectures

- 8:30 ~ 8:40 Opening Remark: Prof. Bai Yang
- 8:40 ~ 10:10 Chairperson: Yuguang Ma
- 8:40 ~ 9:10 **Jiang Lei** "Bio-Inspired, Smart, Multiscale Interfacial Materials"
- 9:10 ~ 9:40 **Shuichi Hiraoka** "Gear-Shaped Amphiphile: A Rational Design for Discrete Self-Assembled Capsules"
- 9:40 ~ 10:10 **Shu Wang** "Conjugated Polyelectrolytes as New Optical Probes for Biosensing and Imaging"
- 10:30 ~ 12:00 Chairperson: Bai Yang
- 10:30 ~ 11:00 **Hiroshi Shinokubo** "Synthesis of Novel Porphyrins through Transition Metal Catalysis"
- 11:00 ~ 11:30 **Junqiu Liu** "Construction of Artificial Enzymes Based on Supramolecular Concept"
- 11:30 ~ 12:00 **Kenichiro Itami** "Chemical Synthesis of Sidewall Segments of Carbon Nanotubes"

Parallel session 1

Invited Lectures

- 13:30 ~ 15:30 Chairperson: Donglin Jiang
- 13:30 ~ 14:00 **Zhanting Li** "Hydrogen Bonded Aromatic Amide and Hydrazide Foldamers: A Study of the Structure-Function Relation"
- 14:00 ~ 14:30 **Norimitsu Tohnai** "Fluorescence Tuning System by Supramolecular Process in Crystalline State"
- 14:30 ~ 15:00 **Yongfeng Zhou** "Effects on the Control of the Self-assembly of Hyperbranched Polymers"
- 15:00 ~ 15:30 **Tetsuro Murahashi** "Construction of Low-Dimensional Metal Frameworks in Sandwich Complexes"
- 15:50 ~ 17:50 Chairperson: Lixin Wu
- 15:50 ~ 16:20 **Guangtao Li** "Functional Materials Based on Ordered Porous Structure"
- 16:20 ~ 16:50 **Hidetoshi Kawai** "Thermo-Responsive Switching in Imine-Bridged Rotaxanes"
- 16:50 ~ 17:20 **Junqi Sun** "Layer-by-layer Assembly of Polymeric Complexes"
- 17:20 ~ 17:50 **Huaping Xu** "Stimuli Responsive Selenium-Contained Polymers"



Parallel session 2

Invited Lectures

13:30 ~ 15:30 Chairperson: Zhaohui Wang

13:30 ~ 14:00 **Bin Hu** "Inter-Molecular Excited States and Spin-Dependent Optoelectronic Functions in Organic Semiconducting Materials"

14:00 ~ 14:30 **Seiya Kobatake** "Photoresponsive Solid State Property Change of Photochromic Crystals"

14:30 ~ 15:00 **Yuguang Ma** "Highly Luminescent Organic Crystals and Applications"

15:00 ~ 15:30 **Taishi Takenobu** "Bright Light Emission from Ambipolar Single-Crystal Transistors"

15:50 ~ 17:50 Chairperson: Taishi Takenobu

15:50 ~ 16:20 **Hongzheng Chen** "Vertically Aligned Inorganic Nanorods/Nanotubes for Organic/Inorganic Bulk Heterojunction Solar Cells"

16:20 ~ 16:50 **Masateru Taniguchi** "Toward Molecular Electronics"

16:50 ~ 17:20 **Zhaohui Wang** "Hetero-Atom Decorated Organic Semiconductors: Synthesis, Self-Assembly and Property"

17:20 ~ 17:50 **Susumu Ikeda** "Ambipolar Behavior and Light Emission of Organic Field Effect Transistors"

7.26 (Monday)

Invited Lectures

8:30 ~ 10:10 Chairperson: Yanchun Han

8:30 ~ 9:00 **Changchun Wang** "Multi-Functional Thermosensitive Composite Microspheres with High Magnetic Susceptibility Based on Magnetite Colloidal Nanoparticle Clusters for Drug Delivery"

9:00 ~ 9:30 **Jun-ichi Fujita** "Direct Transformation of A Resist Pattern into A Graphene FET through Interfacial Graphitization of Liquid Gallium"

9:30 ~ 10:00 **Shiyong Liu** "Responsive and Functional Polymeric Assemblies"

10:20 ~ 11:50 Chairperson: Jun-ichi Fujita

10:20 ~ 10:50 **Hiroimitsu Maeda** "Supramolecular Chemistry of Anion-Responsive Molecules"

10:50 ~ 11:20 **Yanchun Han** "Tunable Spectral Range and Broadband Antireflection Polymer Film by Regulating Its Inner Nanoporous Structure"

11:20 ~ 11:50 **Yasujiro Murata** "Organic Synthesis and Properties of H₂@C₆₀, H₂@C₇₀, and H₂O@C₆₀"

Parallel session 1 Invited Lectures

13:30 ~ 15:30 Chairperson: Takashi Uemura

13:30 ~ 14:00 **Zhishan Bo** "Recent Advances in Catalyst Transfer Suzuki-Miyaura Cross-Coupling Reaction and Suzuki-Miyaura-Schlüter Polycondensation"

14:00 ~ 14:30 **Donglin Jiang** "Design and Functions of Two-Dimensional Macromolecules"

14:30 ~ 15:00 **Yuqing Wu** "Highly Sensitive and Selective Water-Soluble Fluorionophores"

15:20 ~ 17:00 Chairman: Zhishan Bo

15:20 ~ 15:50 **Feihe Huang** "Threaded Structures Based on Crown Ether Derivatives"

15:50 ~ 16:20 **Takashi Uemura** "Polymer Chemistry in Coordination Nanospaces"

16:20 ~ 16:50 **Yuguo Ma** "Supramolecular Chemistry Based on Arene-Perfluoroarene Interaction: Gel and Liquid Crystalline Phase Formation"

Parallel session 2 Invited Lectures

13:30 ~ 15:30 Chairperson: Jun Terao

13:30 ~ 14:00 **Kiyohiko Kawai** "Reading Out the DNA Sequence Information by Measuring the Charge Transfer Kinetics"

14:00 ~ 14:30 **Wenke Zhang** "Single Molecule Force Spectroscopy Study of Nucleic acid-Protein Interactions"

14:30 ~ 15:00 **Yukikazu Takeoka** "Structural Colored Gel"

15:50 ~ 17:50 Chairperson: Junqiu Liu

15:20 ~ 15:50 **linqi Shi** "Self-assembly of Block Copolymer in Soft Confined Space"

15:50 ~ 16:20 **Jun Terao** "Syntheses of CD-based Insulated Molecular Wires"

16:20 ~ 16:50 **Hao Zhang** "Synthesis and Assembly of Functional Nanoparticles"

16:50 ~ 17:00 Closing Remark: Donglin Jiang

19:00 ~ 21:00 Poster Section

7.27 (Tuesday) Morning Group Discussion, Afternoon Lab Tour and Sightseeing

7.28 (Wednesday)

Morning Group Discussion

Afternoon

14:00 ~ 14:30 **Shu Seki** "Charge Carrier Mobility in Conjugated Macromolecules and Supramolecular Architectures: the Mobility Differences in Long Range Translational and Local Oscillating Motion of Charge Carriers"

14:30 ~ 15:00 **Lixin Wu** "Self-Assembly and Aggregation Structure of Polymer-Polyoxometalate Supramolecular Complexes"

15:00 ~ 15:30 **Masayoshi Higuchi** "Electrochromic Properties of Organic-Metallic Hybrid Polymers and the Device Application"

15:30 ~ 16:00 **Feng Li** "Narrow Emissions from the Edge of Optically and Electrically Pumped Organic Semiconductor Film"



02 日本学術振興会アジア研究教育拠点事業「物質・光・理論分子科学のフロンティア」 China-Japan Joint Symposium on Advanced Organic Chemistry 先端有機化学に関する日中シンポジウム

報告：生越 専介（大阪大学・工学部）

平成22年9月24－26日の三日間、南開大学において「China-Japan Symposium on Catalytic Organic Synthesis（触媒的合成化学に関する日中シンポジウム）」と題するシンポジウムを開催した。日本側は、分子科学研究所の魚住泰広教授とその依頼を受けた（崇りを恐れた）生越（大阪大学）が、人選およびプログラムの作成などを行った。中国側は南開大学のQilin Zhou教授が世話人となりシンポジウム会場や宿泊施設の確保を進めた。本シンポジウムは、5回目の日中シンポジウムとなっており、両国の参加者には既にお互いによく知っている化学者も多く、シンポジウムの開始段階から活発な議論、より正確にはより活発な雑談が繰り広げられる光景が見られた。日本からは、分子研、北海道大学、慶応大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、奈良先端大、岡山大学、九州大学からの11名、中国からは、南開大学、北京大学、精華大学、科学研究所、武漢大学、上海有機化学研究所、蘭州大学、浙江大学からの12名の講演が行われた。シンポジウムは、表題からも察せられるように、触媒を

使用する有機合成反応に関する最先端の研究を日本と中国の研究者が交互に発表する形で行われた。比較的分野の近い研究者同士の発表を同じセッションにまとめたこともあり活発な質疑応答が行われた。某京都大学教授の講演中に、「朝青龍」との発言があり日本側世話人としてはどのような意図で発せられたのか確認した。その結果、本人は「As I show you」と言ったつもりであったことが判明した。また、全体写真を二日目の朝に撮影予定であったが、日本側の世話人の一人であるU教授が時間になっても撮影場所に現れないというハプニングがあった。本人は、場所を間違えたと弁明されたが会場のすぐそばの撮影場所に行くのに、どれほどの困難があるのかはどうしても想像できなかった。この報告にある写真は、シンポジウム終了後に撮影したものである。

南開大学のある天津は、日本人にとっては「天津甘栗」があまりに有名であるが現地で見えた天津甘栗には、日本語の表示があり殆ど観光用のおみやげであった。一方、日本人には殆どなじみ

はないが、天津で最も有名な食べ物である狗不理（ゴブリ）と呼ばれる肉まんじゅうは極めて美味であった。その後、中国チェスを教わって楽しんだものの日本の将棋によく似ているため、それなりに駒を動かせるものの肝心な所での思考回路が日本将棋になるため最後まで慣れることはなかったが、中国的思考を少し楽しむことができた。天津の町並みは北京や上海と比べて非常に整然としており、また幹線道路だけではなく比較的細い路地も綺麗でありゴミも殆ど落ちておらず、快適に滞在することができた。現地の教授に尋ねると天津は、わずかに「800年」前に出来た非常に新しい街であるからとの説明をいただいた。確かに、かれらにとっては800年しか歴史がないのであろう。

非常に実りの多かった本事業も、今年度をもって一旦終了となるが、実際に共同研究の芽も息吹いてきており今後もAsia-Coreプログラムの事業として採択され、さらに日中間の交流が深化することを切に希望する。



日本学術振興会アジア研究教育拠点事業「物質・光・理論分子科学のフロンティア」 03 日韓有機金属化学シンポジウム

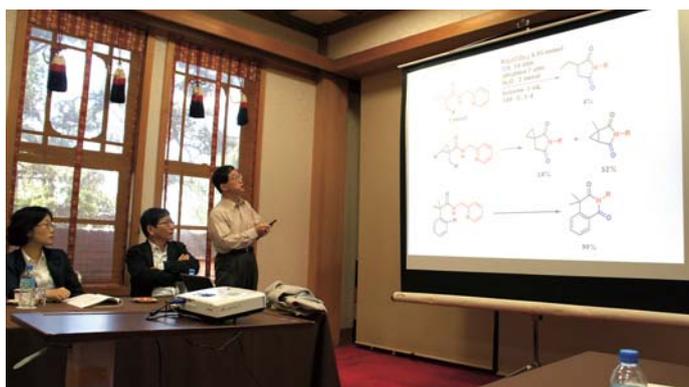
報告：笹井 宏明（大阪大学・産業科学研究所）

平成22年10月1～3日、奈良ホテルにおいて「日韓有機金属化学シンポジウム」をJSPS アジアコアプログラムの一環として開催した。参加者は、韓国側6人日本側6人と小人数ながら、何かと忙しい世代で日程調整が難しく、授業や会議と重ならない土日を利用しての開催となった。シンポジウムでは、参加者12名が、それぞれ1時間ずつ未発表データを含む最先端の成果を紹介し、活発な討論をすることができた。本シンポジウムは、その前身となったCMD5-KANSAI meetingから数えて5回目となる会合であり、参加者の気心

も知れていることが強みである。

会場の奈良ホテルは、創業100年を超える老舗であり、阿修羅像で有名な興福寺や「ならまち」も徒歩圏である。2日目の午後には、古い街並みを残す「ならまち」を散策し、日本の伝統文化に触れることができた。重要文化財の今西家書院での懐石料理や、造り酒屋での利き酒など、韓国側参加者にとって珍しいのはもちろん、日本人参加者にとっても得難い体験であった。英語でのボランティアガイドをしていただいた松村洋子さんに感謝！ ならまちをゆっくり散策するあまり、メインの興

福寺国宝館には閉館ギリギリでの到着となった。奈良は、その昔、渡来人と呼ばれた朝鮮人との交流が盛んであった都である。韓国側参加者からも日本と韓国との交流の原点を見ることができたと好評であった。会期中は好天に恵まれたものの、3日目のシンポジウム終了と同時に雨が降り出し、閑空に着くころには土砂降りとなった。日頃の行いの良い12人であった。





将来の分子科学にこんにちは



水谷 泰久

(大阪大学 大学院理学研究科 化学専攻 教授)

みずたに・やすひさ / 1987年京都大学工学部工業化学科卒業、1992年総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程修了、博士(理学)。日本学術振興会特別研究員、分子科学研究所助手、神戸大学分子フォトサイエンス研究センター助教授を経て、2006年4月より現職。P.T.A. 会員およびCIRCLE会員。

分子研を離れてから10年になろうとしています。月並みな言い方ですが、月日が過ぎるのは本当に早いものです。分子研には、総研大院生として3年間、その後博士研究員として9ヶ月、アメリカでのポストドク生活をはさんで、助手として7年5ヶ月、合計11年2ヶ月という長い期間にわりお世話になりました。その後、平成13年6月に神戸大学に異動しましたが、分子研という研究100%の環境から移りましたので、はたして自分には教育ができるのだろうかと非常に不安でした。分子研では学生の指導らしい指導をしたこともないし、またドクターの院生時代も、総研大であったせいもあり後輩がおらず、後輩の面倒をみた経験がほとんどなかったからです。しかし、幸い、研究室では志の高い学生に恵まれ、彼らからたくさんのことを学ぶことができました。特に、「教員(つまりわたくしです)ができそうにない研究テーマでも学生はうまく成功させてくれる」という教訓を学んだのは、わたくしにとって大きな収穫でした。5年弱という短い期間でしたが、そのような学生達と一緒に研究ができたことは、わたくしにとって大きな幸せであり誇りでもあります。その後、大阪大学で教授として研究室を主宰する機会に恵まれ、ここ阪大でも学生と研究を楽しんでいます。神戸大学にいるときに比べ、担当する

講義の数が少し増えました。神戸大学でもそうでしたが、講義の内容をよく理解し、鋭い質問をしてくる学生がいて、答えに窮することがあります。教員にとってそのような緊張感のある環境で講義ができるというのはとても幸せなことです。

この紙面をお借りして、阪大理学部で行っている教育に関するオリジナルな取り組みをいくつか紹介したいと思います。理学部では、文部科学省の理数学生応援プロジェクトに採択され、理数オーナープログラムという試みを行っています。これは学部2年生あるいは3年生が、研究テーマを自分で考え、研究室で自主研究を行うというものです。これに参加できるのはやる気と余力を持っている学生に限られますが、化学科では毎年10~15人の学生が自主研究を行っています。半期単位で一つのテーマの研究をし、期末には成果発表会を行います。講義期間中は学生も時間にそれほど余裕がありませんので、まとまった実験はどうしても夏休みあるいは春休みを利用してということになります。丁寧に行えば大抵うまくいく学生実験とは違い、初めて試みる実験は、最初はそうそううまくはいきません。学生はそのことに最初は戸惑いますが、試行錯誤の結果に一喜一憂し、次第に研究を楽しむようになります。彼らのそんな成長をそばで見守っ

ているのは楽しいものです。研究ってやみつきになりますが、それは実際にやってみないとわかりません。やる気と能力のある学生が早い段階から研究の現場に身を置くことはきっと貴重な経験になるでしょう。また彼らの頑張りは研究室にとってもよい緊張感をもたらしてくれます。研究室の大学院生も刺激を受けますし、わたくしも彼らのやる気に引っ張られているところが大きいにあります。

境界領域への広がりや教育の分野でも進んでいます。大阪大学理学部では、生命理学コースという新しいコースが平成20年度にスタートしました。このコースの目的は、広く理学を基盤として生命科学を開拓する人材を養成するというものです。コースは生物科学科に属していますが、理学部全学科がこのコースの教育に参画しています。わたくしも化学専攻からの委員として、このコースの運営にかかわっています。入試もユニークで、生物科学科でありながら理科の入試科目は化学と物理学を指定しています。この記事を読んでおられる方は、自然はひとつであり、サイエンスの最前線では、生物学、化学、物理学、数学という境界線引きは意味を持たないことはよくおわかりでしょう。しかし、受験する高校生にそのことを理解してもらうことは容易ではなく、現在このコースへの理解を

受験指導の現場に浸透させるべく努力しているところです。入学した学生も新しいコースに不安はあると思いますが、その緊張感をばねにしてよく勉強しています。わたくしも総研大の一期生として似た経験をしましたが、緊張感の中で得るものは大きかったと感じます。1年生のガイダンスではその経験を話し、彼らにエールを送っています。コースの一期生として入学した学年も、来年卒業の年度を迎えます。学年の進行とともに整備すべき点が出てきまして、軌道に乗るまでは大変ですが、学生のがんばりを見ていますと、教員も彼らのためにしっかりやらねばという力が湧いてきます。

阪大理学部取り組みについて紹介しました。講義をしていますと、当たり前ですが、大学の中心はやはり学生なのだということを実感します。これは研究100%の分子研時代には感じることもなかった新しいやりがいです。彼らの中から、将来の分子科学を開拓する人材がひとりでも多く出てほしいと願っています。

わたくし自身のことも少し書いておきます。現在とりくんでいる研究テ-

マは、時間分解共鳴ラマン分光法を用いたタンパク質のダイナミクスに関する研究です。助手時代のわたくしをご存じの方は、「なんだ、あの頃と変わっていないじゃないか?!」と思われるかもしれません。たしかに、現在の研究は分子研時代の延長線上にあります。分子研を助手から出られた多くの先輩方が分子研での研究とは異なった分野に挑戦され、新しい分野を開拓しておられます。助手のころはそれを憧れて見ていましたが、よく考えた末、わたくしは分子研での研究と関連した研究を続けることを選択しました。まだまだやるべきこと、やりたいことが残っているし、われわれの研究グループしかできないことがあると考えているからです。

分子研の助手時代から、タンパク質をはじめとする生体分子に対して、分子科学としてどのような研究ができるのか、ずいぶん自問自答してきました。当たり前ですが、ただ分光法を使った研究というだけでは分子科学にはとうていなりません。また、生体分子の分子科学が生物物理学としばしば混同されることも大いに不満でした。生命現

象の理解だけではなく、分子の理解に貢献できてこそ生体分子の分子科学とよべるものでしょう。小さな分子についてわかったことの応用問題ではなく、生体分子を研究して初めてわかる分子の特質を何とか明らかにしたい一スタートして5年目を迎え、徐々に大きくなってきたラボで、少しずつですが手応えを感じつつ研究を行っています。

わたくしが助手でいたころ、たしか1998年だったと記憶していますが、分子研で「2010年の分子科学を考える」という研究会が開かれました。その2010年もあと1カ月ほどで終わろうとしています。これから10年後、20年後、分子科学はサイエンスとしてどのように発展しているのでしょうか。また、今学部で学んでいる若者のどれだけが、夢中になれる研究分野として分子科学を選んでくれているのでしょうか。ワクワクする将来をときどき考えてみましょう。将来の分子科学にこんにちはをしてみることが、日々の教育と研究にエネルギーを与えてくれることだと思ふのです。





物理学者も有機合成を！



細越 裕子

(大阪府立大学大学院 理学系研究科 物理科学専攻 教授)

ほそこし・ゆうこ / 1991年埼玉大学理学部化学科卒業、1996年東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士後期課程修了、博士(理学)。同年岡崎国立共同研究機構分子科学研究所相関領域研究系助手、2002年大阪府立大学総合科学部物質科学科助教授、2005年改組により同大学大学院理学系研究科物理科学専攻、2009年より現職。

1. はじめに

「細越さんは女性だから就職では苦労すると思うよ。」博士後期課程の入学試験の翌日に、当時の指導教官から言われた言葉です。快適な大学院生活を送らせてもらいましたので、先生は心底心配してくださっていたようです。幸いなことに学位取得後、分子研に助手の職を得ることができましたが、上司は心ある知り合いの教授から「女性を採用して6年後に助教にできるのか」と心配されたとも聞きます。分子研最初の女性教員と言われ全くプレッシャーを感じなかったと言えば嘘になります。6年余りで無事、助教ポストを得て転出できたときは正直ほっとしました。

2. 化学から物理へ

私は学部も院も化学専攻でしたが、現在は物理学専攻の教員をしています。大学院の5年間で東大物性研究所という物理の研究所で過ごしたために、知らず知らずのうちに物理の影響を受けていたようです。私は分子研で新しい有機磁性体の合成研究を行いました。ターゲットとする物性として、化学者よりもむしろ物理学者が興味を示すものを狙いました。分子磁性研究のまだ初期の頃で化学者を中心に研究が盛んになりつつある状況の中、私は有機磁性体が物性物理学の研究対象になり得ることを実証したいと思いました。分子性化合物の物性研究では、どのよう

な物性を狙ってどのような分子設計をするかが重要です。自分にしかできない独自性を追求することに重きを置いてきました。女性研究者としての生き残りには独自性の追求が不可欠の思いもあったかもしれません。さて私は、日本化学会と日本物理学会の学会発表を掛け持ちして、物理の雑誌に論文を投稿するようになり、とうとう物理学教室の磁性分野の教員公募に応募してしまっていたのです。

分子研には物理学科や化学科といった区別がありませんし、相関領域研究系は流動部門も含め各研究グループの専門は多岐に渡り、研究テーマは自由に何でもありの雰囲気がありました。井上先生も化学と物理の融合の必要性を認識しておられ、ずいぶん自由にさせてもらい、感謝しております。

3. 物理学者も有機合成を

私は物質合成が評価されて物理科学科(=物理)に採用されたと思っていますので、有機磁性体の新物質開発は、我が分子磁性研究室の看板です。現在、物理学者も酸化物等の遷移金属化合物の合成は行っており、その背景には化学の世界から物理の世界に入った先達の存在があると思われます。私は、30年後に物理の世界で当たり前のように有機磁性体の合成研究が行われるようになって欲しいという野望を持っています。

我が物理科学科の学生実験室はドラフトを3台備え、学部3年後期のプレ卒論形式の専門実験では、簡単なラジカル合成を行っています。昨年度、理学部の新しい実験棟が建設され、自分の実験室をデザインする幸運に恵まれました。物性測定室と合成室を設け、合成室には有機合成系の研究室と共通仕様のドラフト・卓上フードを備えました。卒研配属の説明会では、物性物理学における試料作製の重要性——オリジナリティのある物質合成の重要性——を説き、有機合成は合理的であることを強調しています。自分の手で何かを作り出すということは本質的に楽しいようで、物理の学生も嬉々として有機合成に励んでくれています。卒業研究では合成から測定まで一通り行うようにして、多くの学生が大学院に進学しています。博士後期課程進学者を出すことは今後の課題です。10月から研究室メンバーに加わった二代目助教は、物理の出身で物性測定・装置開発を経験してきているのですが、物質合成も覚えたいと意欲的です。学生に測定や解析を教える一方で、学生から有機合成の操作を教わりうまいことやっています。来年4月には准教授が加わるので、私の野望実現に向けて楽しみにしています。

4. 大阪での生活

私は東京で生まれ育ちました。大阪とはかなり文化が異なるはずですが、

どういう訳か私は全く何の違和感もなく溶け込んでしまいました。最近では怪しげな関西弁まで操り、関東の方から関西の出身と勘違いされるほどの適応力を見せています。

分子研から大阪府立大へ移り早8年です。この移動によって夫婦同居が叶い、すぐに子供に恵まれました。見知らぬ土地で研究室構成員も1人だけという状況での出産であり、正直なところ研究者生命の危機を感じました。大学の雑事は案外多く、大学に居られる貴重な時間を事務的な用事に吸い取られるのがたまらなく嫌でした。年度途中で大学近くの無認可保育所に運よく入所できたもののほぼ毎週のように熱をだしました。小児科医から0歳の赤ちゃんは月3回くらい熱を出すものと聞いた時は大いに納得しました。4月からは認可保育所に入所でき、堺市ファミリーサポートセンターに登録し、保育所のお迎えと預かりを援助してくれる提供会員を紹介してもらいました。その方のお宅で預かってもらうので夕食も出してもらえます。そのお宅のお兄ちゃん・

お姉ちゃんがとても可愛がってくれて子供もすっかりなついています。乳児期は、朝4時に子供の発熱に気が付いて、朝7時に京都の姑に電話をして来てもらい、バトンタッチで講義に出かけたこともあります。子供の急な発熱時にすぐに迎えに行けるように、住まいは府大の近くに構えました。そのおかげで夫には1時間半の電車通勤を強いてしまっているのですが、歩いて通えるおかげで妊娠中も大学に通えましたし、小学校入学後も役立っています。平日に家庭訪問、授業参観、懇談会、個人面談等があるのです。周囲の支えに感謝する一方で、何事も一人で抱え込まないことが肝要と開き直ってしまうと、随分と気が楽になりました。

5. おわりに

大阪府立大学では現在3つの科学振興調整費のプロジェクトが進行中で、私は若手教員と女性研究者支援の運営委員をしています。若手プログラムでも女性の積極採用を謳っており、理系の女性研究者支援策には、私の経験が

らだいが要望を出しました。若手支援をする年になったのかと感じると同時に、かつて某若手の会で「若手とは自分で手を動かしている人」と定義をした重みを感じます。子供ができた時点で一から十まで自分で実験をすることをあきらめざるを得なかったのですが、増え続ける大学の雑事のなかでもう少し自分でも実験をしたいという気持ちもあります。研究室メンバーが増えるにつれ運営責任も重くなり、だんだん年相応というのでしょうか、40歳を過ぎて現状を受け入れる自分が居ます。30半ばで研究室を構えたころは研究生生活が無限に続く錯覚を抱いていましたが、最近は研究生生活が有限なことに気が付き、やりたいことはさっさとやらねばと強く感じます。

平成24年度からは再度の改組で理学部・物理科学科から自然科学類・物理科学課程へ名称を変えます。生命環境科学域の下に自然科学類があるというあべこべさから改組の拙速さがうかがい知れますが、学生定員が増えるのでまあ良しとしますか。



近況



佐藤 啓文

(京都大学 工学研究科 分子工学専攻 教授)

さとう・ひろふみ / 1996年京都大学大学院理学研究科化学専攻博士後期課程修了(理論化学分科・加藤重樹研究室)、理学部研修員を経て同8月より岡崎国立共同研究機構分子科学研究所助手(平田G)。2002年5月より京都大学工学研究科分子工学専攻(榊好研究室)に講師として着任、助教授、准教授を経て、2010年7月より教授(分子理論化学講座)。この間、2006年度に分子科学研究所・客員研究部門助教授を併任。

『OBの今』を読むのをいつも楽しみにしている。分子研を「出所」された方々が様々な分野・場所で活躍されている姿を拝読できるのは同窓生である筆者としては楽しく、心強い。各人

が所属されている国内外の大学や研究所の一端を垣間みられるのも興味深い。しかし、いざ自分が依頼されると困り果ててしまった。近況を、とのことだが、この半年あまりは筆者にとって大きな

出来事が続いた。一つは恩師・加藤重樹先生が亡くなったことである。出来の悪い学生だったが、実に様々なことを教えて下り、また機会を与えて下さった。先生の亡き後、気持ちも考え

も未だ整理できておらず喪失感は筆舌尽くし難い。編集委員の方の勧めもあり本稿では加藤先生を偲びたい。もう一つは、筆者が分子研を出所して以来ご指導下さった榊茂好先生が工学研究科を定年退職され（現所属：京都大学iCeMS）、後任として講座の担任を拝命したことである。重責に身の引き締まる思いだが、これまでに培われて来た研究室の雰囲気を大切に、また発展させつつ、分子科学の発展の一端を担える場所となれるよう、微力ではあるが尽くしていきたい。

現在の京都大学工学部において化学に携わるのは「工業化学科」という定員235名の一学科であり、全員が共通のカリキュラムでスタートすることになっている。二回生後期からは「創成化学」「工業基礎化学」「化学プロセス工学」と3つのコースに分かれ、少しずつ専門に特化したカリキュラムにシフトしていく。我々が所属する工業基礎化学コースは一学年おおよそ100名程度である。三回生位になると、講義はもとより学生実験を通して、学生さん一人一人の顔がよく見えてくる。四回生からは研究室に配属になり、多くの学生さんはそれまで通った吉田キャンパスを離れ、2003年に出来た桂キャンパスや、化学研究所のある宇治キャンパスなどへと移っていく。上述の3つのコースは工学研究科等、大学院の専攻と関連しており、創成化学コースは材料化学専攻、高分子化学専攻に、工業基礎化学コースは物質エネルギー化学専攻、分子工学専攻、合成・生物化学専攻とエネルギー科学研究科に、化学プロセス工学コースは化学工学専攻に対応する。このうち工学研究科の6つの専攻はまとめて「化学系」と呼ばれている。2008年度分からは、3つコースに概ね対応する専攻群（創成化学専攻群、

先端化学専攻群、化学工学専攻）を単位として修士課程入試を実施している。

2002年に榊茂好先生の研究室に講師として分子研から着任した時に、榊先生と相談して教科書の輪講と基礎的な量子化学計算のプログラムを読み書きするためのトレーニングと、別途修士課程の院生を対象とする輪講を始め、これまで毎週続けて来た。これ以外に学生さんが主体となって立ち上げた「裏ゼミ」と呼んでいる自主的な輪講が常に走っている。また分子科学夏の学校などの学外での活動にも多くの院生が積極的に参画している。これらは研究室の雰囲気を作ってくれた池田昌司さん（現：筑波大学）、大西裕也さん（現：イリノイ大）、横川大輔さん（現：大阪大学）ら初期のメンバーによるところが大きい。言うまでもなく物理化学分野は積み上げ型の学習の比重が大きく、三回生までに基本事項が身に付いていることが望ましいが、大部分の学生さんにとっては実際に自分の研究課題と格闘し始めることで、その大切さと面白さに気がつき、初めてスイッチが入る場合が少なくない（もちろん容易にスイッチが入る人だけではない）。物理化学離れの話をよく耳にする。その論理の積み上げを加藤先生は「推理小説みないなもんや」と喩えられたが、謎解きの面白さをいかに伝えるかは、分子科学の長期的な発展には重要であろう。しかも論理の積み上げの教育は、それだけに留まらない、もっと広く深い大切な意味を持っていると思う。

単純な演算さえ怪しげだった学生さんは、鍛えられることで次第に主体的に考える術を身につけ、各々の興味を具体化していく。それを互いに持ち寄って、ぶつけ合うことで新たな興味を見つけ出し、必要な理論を作り出していく。その進展（と発散）に着いて

いくのに苦勞することも皆無ではないが、結果的に目を見張るような発展につながる場合もある。あるいは、思いだけが空回りしてなかなか苦しんで途切れてしまう場合もある。学生の頃、加藤先生が、「学生さんとやっていくのは研究としての効率は悪いかもしれないが、やっぱり一緒にやっているのが楽しいし、それこそが大学の価値なんだ」という趣旨のことをしばしば仰っていた。私自身があの頃の加藤先生と同じ年代になり、昔に比べ、その気持ちが多少は正しく解るようになったのかもしれないと思う。今振り返ってみると分子研時代は、大学の先生方が「教育にかけている時間が長い」という意味が恥ずかしながら正しく理解できていなかったように思う。京大に着任したのは、国立大学法人への転換の時期でもあり、21世紀COEや中間評価など、当然分子研では関わった事もなく随分と戸惑った記憶がある。学生さんとの研究のスタイルを確立するまでも時間を要し、今もって日々格闘中である。とりわけ当初はまったくもって頼りない教員であったが、何とかやってこられたのは榊先生や専攻の先生方をはじめ多くの先生方に教えて頂いたお陰であり、心から感謝申し上げたい。

加藤先生は二度目の研究科長を終え、還暦を迎えられた。2009年の夏に、吉田紀生さん（分子研）、中野晴之さん（九州大学）、安藤耕司さん（京都大学）、山本武志さん（京都大学）、林重彦さん（京都大学）とともに「若手研究会」を催した。加藤先生が来て下さるだろうかと気をもみながら、筆者はいつもの様に最後列に中野さんと座った。加藤先生はいつものように一つ前の席に陣取られ、しばしば我々の方に振り返っては片手を頬にあてて声をひそめ、ニコニコ（というよりニヤニヤ）

されながらあれこれコメントをされていた。「研究会、またやろうや」と仰っていたが叶わなかった。学生時代から「君ら若い世代が僕らの世代を超えてか

な（超えていかなきゃ）」とアジられ続け、折に触れて研究・教育そして学問に関するご教示を頂戴した。病床でも伺ったが「やっぱり、これからの若い

人が……」といういつものフレーズが耳に残る。ご冥福をお祈りするとともに、不肖の弟子なりに少しでも恩返しをと決めている。

受賞報告 ■ OBの今



富宅 喜代一 神戸大名誉教授に第2回(2010年度)分子科学会賞

この度、「気相クラスター分光による構造と反応機構の分子科学の先導的研究」の理由で平成22年度分子科学会賞を頂いた。受賞対象になった研究の多くは分子科学研究所で芽生えたテーマである。

1988年11月に分子科学研究所に赴任し、機器センターの維持、管理をしながら研究を進めることになった。研究の方は前任地の慶応大学で茅幸二教授と共同で温めた気相クラスターの研究の発展を目指してスタートした。当時すでに溶液や固体・固体表面の微視的モデルの視点からクラスターの研究が始まっていたが、溶液化学との接点での研究では、主にクラスターの熱力学量の測定に限られていた。新しい展開として電子の局在化・非局在化を伴った溶媒和金属原子(イオン)クラスターの分光研究を提案した。井口洋夫所長に御配慮頂き、翌年には美齊津文典氏にグループに加わって頂くことになり、また装置開発室の支援もあって、光解離分光装置の開発が一気に進み実験に取り掛かることができた。この装置をアルカリ土類金属イオン (Mg^+ 、 Ca^+) の水和クラスターに適用して電子スペクトルを測定することにより水和構造が詳細に分かってきた。さらに金属イオンの酸化反応経路と水和水数や構造の相関が分子レベルで初めて明らかに

なり、同様の研究が国内外で活発に行われるようになった。またアルカリ原子を含む溶媒和分子のクラスターの生成法と負イオン光電子分光法を開発し、クラスター内で溶媒和電子が生成する臨界サイズと生成初期過程を分光学的に捉えることを試みた。他方、半導体素子の超集積化で問題となるナノサイズ領域での構造と物性の情報を得るために、真空紫外レーザー光源を開発し、数百個以下の原子からなるシリコンクラスターのイオン化過程を調べ、サイズ毎にイオン化エネルギーを決定した。

地震の半年後の1995年7月に赴任した神戸大学では、分子研で芽生えた研究をさらに発展させることができた。特にアルカリ原子や NH_4 のクラスター内での溶媒和電子の生成初期過程が詳細に解明できた。半導体クラスターの研究もゲルマニウムに拡張でき、得られた測定値は標準データとして現在も世界中で広く引用されている。新たな取り組みとして電気スプレー法を用いた光解離分光法を開発し、ポリペプチド等の水和過程の検討をした。また、実験的に温度制御が困難な気相クラスターの新規な温度制御法を開発し、生体分子イオンの溶媒和効果と温度依存性の研究を進めている。

最近、生命科学を始め多くの分野で質量分析を用いた分子の構造解析が盛

んに行われているが、この方法では質量の情報しか得られず構造解析に著しい制限があり、研究の進展の大きな障害となっている。この問題を克服するため、クラスター研究の延長として磁気共鳴加速原理に基づいた気相イオンのNMR検出法を新たに発案し、科学技術振興機構の支援のもとで質量分析機能を備えた気体NMR分光法の開発を進めている。

今回の受賞は茅幸二先生、そして岩田末廣先生や橋本健朗氏等の理論グループや多くの方々のご協力と分子研装置開発室や機器センターのご支援のお蔭であり、皆様方にこの場を借りて、改めて感謝の意を表したいと思います。



富宅 喜代一 (ふけ・きよかず)
元 分子科学研究所機器センター 助教授
現 神戸大学大学院理学研究科 名誉教授



天能 精一郎 神戸大教授に第2回(2010年度)分子科学会賞

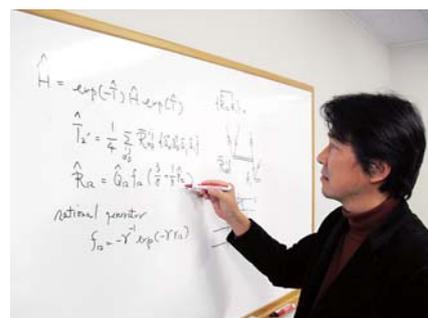
この度、「露に電子相関を考慮した高精度電子状態理論の開発」に関する研究成果に対しまして、第2回(2010年度)分子科学会賞を頂きました。身に余る賞であり、推薦して頂いた先生からメールを頂いた時は、あて馬役を引き受ける心算で書類を準備したのですが、本当にもらおうとは思っていませんでした。ただに申し訳ない気がしています。露に電子相関を考慮した電子状態理論は歴史の古い分野なのですが、分子研・岩田グループの助手時代に関心を持ち、1999年に名大に移ってから直ぐに始めた研究テーマです。Slaterジェミナルや電子間カスプ条件を用いたSP仮説の提案が現在F12理論と呼ばれる分野の基礎に寄与しましたが、Slater関数を相関因子に用いるという考えは、平尾公彦先生など国内外の他の量子化学者も持っておられたようです。Boys関数を拡張した解析的な積分表現を見つけてプログラム実装出来たのは、当初の着想から5年も後の事であり、幸運であったと思っています。論文がア

クセプトされると同時にACSで結果を示し、帰国直後に慌ただしく森野基金の受給式の言葉を緊張しながら述べた事を覚えています。量子化学の基礎研究は直接実験と関係する結果をもたらすものではありませんので、ある程度分野の理解が無いと継続していきません。これまで数々の支援を頂きました理論化学の諸先輩方と国内外の共同研究者たちに心から感謝しています。

中村前所長も同じような事を言われていたと思いますが、分子研は特に准教授にとって最も魅力的な所ではないでしょうか。私が名大の情報化学部(人間情報学研究科)に移った時は、教養の化学実験や講義が多く残っており、夏休みにまとめてとか、通勤電車の中で研究をするような感じでした。スタッフはもちろん学生も殆ど居らず、いつも何か新しい成果を出さないといけない焦燥感にかられていた気がします。分子研の規模が云々と言う声もありますが、研究環境としては随分優遇されており、ここで准教授だったら全く違っ

た展開もあったのかなと思う事があります。現在、神戸大の計算科学に関係した新研究科では、恵まれた研究環境を与えて頂きました。

これからも少しでも世界をリードする研究を行い、微力ながら分子科学の発展に貢献出来ればと願っています。又、F12理論以外の研究テーマでは、タンパク質中の動力学を絡めたCDスペクトルやNMR遮蔽テンソルの計算など色々面白い事がやれるようになって来ました。共同研究の話などありましたら、どうぞ気楽にお声がけ下さい。



天能 精一郎 (てんのう・せいいちろう)
元 分子科学研究所理論研究系 助手
現 神戸大学大学院システム情報学研究科 教授



分子研を去るにあたり

中村 宏樹

国立交通大学理学院 客員教授
(前 分子科学研究所 所長)



守・破・離

なかむら・ひろき／1965年 東京大学工学部物理工学専攻修士修了、工学部助手
1969年 東京大学工学博士、1971年 オハイオ州立大学及びピッツバーグ大学博士研究員
1974年 東京大学工学部物理工学科 講師、1979年 東京農工大学工学部 助教授
1981年 岡崎共同研究機構 分子科学研究所 教授、
2004年 自然科学研究機構 分子科学研究所 所長、2006年から理事
2010年 3月上記退職、8月から国立交通大学理学院 客員教授、
分子科学研究所 名誉教授、総研大 名誉教授、西安交通大学 名誉教授

平成22年3月に分子研所長を退職してから早いもので、9か月が過ぎようとしています。5月に分子研レターズの小杉編集委員長から原稿を書くようにとの指示を受けながら、退職後間もないこともあり先延ばしにしていました。8月末から台湾に来ており、少し生活も落ち着いてきたことから、筆をとらねばと頭を捻っているところです。日本の学術行政の諸問題から始まって、分子研にも色々な課題が残されており、考え始めると頭がまともにならなくなりますので、これらの課題については今後の発展に期待することにして、ここでは小生の近況を中心にお話することとします。

退職後、特に職もなくどうしようかと考えていたのですが、台湾から大変寛大なお話を頂きました。もう管理的な職には就かずに、細々とでも研究生生活に戻ることが出来れば嬉しいな一と思っていましたので、喜んでこちらにやって来ました。新竹にある国立交通大学です。原子分子科学研究所の元所長の林聖賢先生と交通大学の学部長をやられた李遠鵬先生の暖かいお計らい

によるものです。隣には国立精華大学があり、両キャンパスを自由に行き来出来ますので、極めて広い緑に囲まれたキャンパスは散策に最適です。近くにはシンクロトロンを擁する同步放射研究中心もあります。中国語がまったく出来ないのが問題なのですが、小生の元大学院生がここのスタッフになっていますので、彼の助けを受けながら生活をエンジョイしています。昼食は彼と一緒に家内も加わって学生食堂で食べています。日本円に換算して150円-200円位という安さで結構味の良いものが食べられます。しかも、台湾料理は塩分控え目で小生にとっては大変ありがたい限りです。台湾には日本の古き良きものが残っていると言いますが、その通りで、皆さん親切ですし、地下鉄などでは若い人から席を譲られて驚くことがしばしばです。複雑な気持ちで好意を受け座っています。こういう教育がまだしっかりしているのでしょう。キャンパス内の歩き以外にも、教職員のバドミントンクラブに所属して、些か足手纏いになりながら週2回汗を流しています。実は、交通大学

理学院には今現在沢山の日本人スタッフがいて活躍しています。日本で退職してから来られた方だけでなく、若手も活躍しています。大変親日的な扱いを受けていると有難く感じるとともに、頼もしくも感じる次第です。仕事面では、現在は単行本“Nonadiabatic Transition”の第二版を執筆していますが、そのうち少し研究面でも貢献出来れば良いなと思っています。

ところで、以前OECD諸国の科学技術と高等教育への国家投資の状況を調べ、日本が情けない状況にあることを知りましたが^[1]、台湾の状況にも興味があり少し調べてみました^[2]。先ず、研究開発総経費に占める政府支出の割合をみますと2004-2007年で33.6-28.2%あり、やはり日本(18.1-15.6%)よりかなり高いです。因みに、アメリカ30.8-27.7%、韓国23.1-24.8%、シンガポール37.9-34.9%、フランス38.7-38.4%です。研究開発の中で基礎研究への投資は応用等に比べると当然少ないですが、それでも、2004-2008年での年平均増加率は4.8%で、2007-2008年に限ると7.8%にもなります。

不況による企業の投資が減っている中で、政府の投資が増えているお陰の様です。研究開発総経費のGDP比は日本より低い（2004-2007年で、日本3.17-3.44%、台湾2.32-2.77%、シンガポール2.20-2.61%、アメリカ2.59-2.68%、フィンランド3.45-3.46%、韓国2.85-3.47%）ので、政府が頑張っていることが分ります。高等教育への投資も2004-2008年で年率9.0%増加しています。

上述の通り、日本政府の投資はやはり情けない状況にあります。最近では予算削減が更に行われ、しかも、一般受けする研究でないと支援が受けにくくなりそのような気配で、日本の学術行政の将来が誠

に心配です。学問・学術のあり方を強く、正しく訴え続けて行く必要があるでしょう。また、アジア諸国の勢いある発展を目の当たりにするにつけ、人材発掘も含めたアジア協力をなお一層促進していくことが強く望まれます。一方、分子科学は、物理、化学、生物の広い分野にまたがる基礎科学として益々その重要性が増していると思います。学問自身がその垣根を取り払う必要がありますが、垣根を越えて広い視野をもった元気な若手が育って行くことを祈っています^[1]。以前、大学院新入生の歓迎会か何かで「守・破・離の哲学」の話をしたことがあります。「守」は自己の分野の教えをしっかりと身につけること、「破」はその上で殻を破っ

て新しい世界を学ぶこと、そして「離」は新しい世界を開き独自の境地を生み出すことです。茶道の祖である千利休の言葉とされていますが、芸の道のみならず、武道においても重要な教えとなっています。学問の道でも同じだと思います。分子科学研究所が自由闊達な学問の梁山泊として新しい世界を切り開いていくことを祈っています。

- 1) 「学術と教育について思うこと」中村宏樹（退職記念冊子、ブラザー印刷）（2010年）
- 2) 「科学技術統計要覧 Indicators of Science and Technology, Taiwan 2009年版」（行政院国家科学委員会編）

菱川 明栄

名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻（化学系） 教授
（前 光分子科学研究領域光分子科学第三研究部門 准教授）

モノローグ



ひしかわ・あきよし / 1989年京都大学工学部物理工学科卒、1994年同大学大学院工学研究科博士課程修了。同年東京大学大学院総合文化研究科助手、1997年同大学院理学系研究科助手、1998年同講師、1999年同助教授を経て、2003年4月分子科学研究所助教授（准教授）、2010年4月より現職。

閉じられた門を左に、少し急なスロープを下って車をとめる。暗証番号を押して扉を開け、階段を上るとレーザー冷却水チラーのノイズが聞こえる。もう夜中と言っていい時間だが、いつものようにまだ実験中。グループのメンバーに状況を聞いて、どうしたものかと思いながら、暗い廊下をわたって居室に向かう。しばらくして実験を終えて戻ってきたメンバーと雑談。方向を見いだす。光学部品が足りないが、どこかで借りられるだろう。お互いによく知った仲なので、どの研究室に何が

有りそうか把握しているようだ。金属工作が必要かもしれないが、装置開発室ですみやかに対応してくれるだろう、たぶん。どうやら1週間くらいで試せそうだ。

それにしても、と思う。これまで何度もこんなことがあり、その度、周囲のサポートを得てなんとか前に進めた。いろんな先生方と時間を気にせず、思いつくまま部屋を尋ねて密接な議論を重ねることもできた。研究所ではグループの大きさが問題になることがあるが、グループ間の密接なコンタクト、技術

職員の方々の厚いサポートを考えると、実効的なmassはかなり大きい。この環境だけでしかできない研究がやはり歴然と存在していることを実感する。こうした得難い場所を築いてこられた諸先生方の尽力を思い、はたしてそれに見合うことを成し遂げたか不安に感じながら、ここから離れて新しい場所での研究にむけて思いを新たにする。

2003年から過ごした7年の間に、本当にいろんな先生方、職員の皆様にお世話になりました。有り難うございました。

長谷川 宗良

東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻 准教授
(前 光分子科学研究領域光分子科学第一研究部門 助教)



岡崎生活の思い出

はせがわ・ひろかず / 1974年茨城県生まれ。1996年東京理科大学理学部卒、1998年東京大学大学院総合文化研究科修士課程修了、2002年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了、博士（理学）。理化学研究所基礎科学特別研究員、2005年4月より分子科学研究所大島グループ助手（助教）を経て、2010年9月より現職。

2005年4月の着任以来、5年半にわたり分子研に在籍しました。その間、大峯所長、前所長の中村先生はじめ多くの分子研のみなさま、そして大島先生および秘書の稲垣さんには大変お世話になり、この場を借りてお礼を申し上げます。

まだやり残した実験もあり、文字通りあつという間の岡崎生活であったと感じています。大島グループ発足直後の着任であったため、チャンバーの設計から計測系の構築、制御プログラムの作成と、ゼロからの研究室立ち上げに関わる事ができ、非常によい経験をしました。そして、作成した装置で2度大きな感動を味わう事ができました。一度目は、狙っていた信号が初めて得られた時で、何週間も実験をし、サンプルも変えたりして、ようやく得られた信号に喜び、また安堵しました。実験ノートを読み返すと年の瀬の12月20日に初めて信号が得られて

おり、なんとか今年中にといい思いがあったのかもしれません。

もう一つの感動は、実験と理論で非常によい一致が得られた時です。実験で複雑なビート信号が得られていたのですが、なかなか解析が進まない。大島先生と何度も議論して、ようやく一つの理論式を得る事ができました。これを数値計算してみると、実験にビタリと合致し興奮した事を覚えています。現在、新しい研究室で装置を立ち上げていますが、また新たな感動が得られるよう頑張っていきたいと思っています。

研究から離れたところでは、太公望として三河湾や近海に行っていました。蒲郡・幡豆といった岡崎の近場では、夏はセイゴ、秋はハゼ、冬・春はメバル・アイナメと季節により様々な魚を釣りましたが、夏の夜はアナゴも釣れ、海面にはワタリガニやヒイカが泳いでいるのも見え魚種の豊富さに驚かされま

した。夜中出会った地元の方に聞いたところでは、夏場、三河湾に南風が吹くと苦潮（海中酸素濃度が少なくなる）になるそうで、海面に酸素を求めて魚たちが集まってくるそうです。少し車を飛ばして浜名湖や御前崎まで行くと、さらに魚影は濃くなり、アジ・サバ・イワシ、変わったところではタコやウツボもあがりました。みな防波堤からお手軽に釣れ、研究で疲れた頭をリフレッシュしていました。

最後に、今後は分子研で得た様々な事、実験技術、知識、人脈を生かし、研究・教育に邁進したいと思います。研究に関しては、高強度レーザー光と分子の相互作用について、特にイオンに着目して、イオン化メカニズムの解明やイオンを用いた分子配列・配向について行おうと思っております。さらに、夢のある大きなテーマも練ってゆければと思っています。

伏谷 瑞穂

名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻 助教
(前 光分子科学研究領域第三研究部門 助教)



振り返れば、振り返らず。

ふしたに・みずほ／2002年京都大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了、ベルリン自由大学長期博士研究員、分子科学研究所助教を経て、2010年より現職。

2010年7月に名古屋大学・理学研究科・物質理学専攻(化学)・光物理化学研究室に異動しました。分子研では2006年8月に基礎光化学部門(現 光分子科学第三部門)の菱川准教授のグループに加わりましたので、およそ4年間岡崎で研究生活を送ったことになります。分子研に赴任する前はドイツのベルリン自由大学で長期博士研究員として4年程勤務していました。この頃は日本に何のツテもなく、海外から日本で職を見つけることの難しさを痛感していました。このまま海外放浪生活かと苦慮していたとき、運良く菱川先生に拾って頂き、帰国、しかも分子研で研究ができることになり本当に嬉しく思いました。実際に、分子研に来てみると、京都大学時代の知り合いが何人かおり、互いに切磋琢磨している雰囲気におおいに刺激を受けたことが思い出されます。

研究生活では分子研の伝統でもある

少数精鋭のグループメンバーとともに最先端分子科学のテーマに挑戦させて頂けたことがとても良い経験となりました。もちろん、様々な困難に遭遇しましたが、菱川先生のご指導のもとグループメンバーとひとつひとつ乗り越えていくことができました。本当に良いグループに所属していたと思います。また、光分子科学領域の研究室は横のつながりが広く、他の光分子科学の先生方とも気軽に話せる雰囲気がありましたので、いろんな意味で知的刺激に富んだ議論ができたことが印象に残っています。

分子研の魅力は予算と時間を最大限活用した研究を行える点であることに疑問の余地はないのですが、自分が特に素晴しく感じたのは装置開発室やレーザーセンターなどの技術職員皆様のお力添えでした。技術レベルの高い方が多く、一見無茶な要望も親身になって一緒に解決法を考えて頂き、本当に

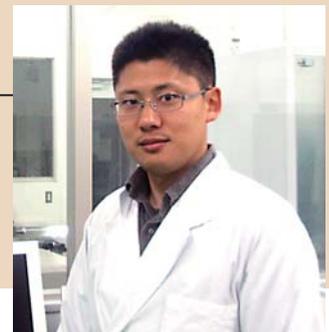
助かりました。実際、製作した実験装置などを来所された国内外の研究者の方々にみていただくと、みなさん分子研の持つ世界レベルの技術力に感心されていました。改めて分子研技術職員皆様からのご支援の有難さを認識した次第です。

と、あれこれ分子研での研究生活を懐古していると、先日、ある分子研OBから教えてもらった話を思い出しました。

「あのさ、さあ分子研を去るぞってときに坂を下って正門を出て行くよね。その時、ふっと分子研の方を振り返った人は分子研にまた戻って来られるらしいよ……。」

思い返すと自分は実験棟地下の南出口から去ったために、そもそも正門(そして東門も)を通り過ぎていないではないか、と自分の選択した帰路を少し残念に思いました。

手老 龍吾 豊橋技術科学大学エレクトロニクス先端融合研究所 テニユアトラック教員(特任助教)
(前 生命・錯体分子科学研究領域 助教)



8年間の思い出と経験

てろう・りゅうご / 2002年10月、東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程中退。2003年4月、同研究科より博士(理学)の学位取得。2002年11月から分子科学研究所技官、2005年11月極端紫外光科学研究系助手、2007年4月生命・錯体分子科学研究領域助教。2010年9月から現職。

分子研には2002年11月に、学生生活を中断して着任しました。研究者として仕事を始めた最初の場所でしたが、2010年8月に離れるまで、いつの間にか約8年が経ってしまいました。

学生時代は超高真空の表面化学を専門にしていたのですが、宇理須グループに来てから脂質やタンパク質など生体分子を使った表面・界面研究を立ち上げることができました。まだ博士課程の学生だったときに恩師に紹介されて初めて宇理須先生にお会いした際、真空表面の研究をされてきた先生がウェット系、しかもバイオロジーに関連する研究を始めるつもりだ、と聞かされ、その決断力に正直戸惑いを覚えるほど驚きました。ただ、詳しく聞けば研究テーマはとても面白そうでしたし、新しい研究系を築くことのできるまたと無い機会だと思って飛びつきました。岡崎に来てすぐに静岡大学の山崎先生の研究室に通わせていただいて、生体材料を扱う実験系のイロハから教わりました。月曜日の朝に岡崎を発って1週間操作を習い、土曜日の朝に戻ってきて必要な器具を注文する、という生活を3週間続けました。宇理須先生も私も生物実験用の器具についての知識も経験が全く無かったので、2人でカタログの索引を引きながら一つずつ品物を探しました。岡崎と静岡、馴染み

の無かった土地を往復して、初めての実験手法習い、使ったことのない器具を全くのゼロから揃えていく、不安と興奮が混ざったような感覚を今でも強く思い出します。

ある程度設備が整ったあとは、最初の1~2年間それぞれそそ手当たり次第、といった感じでいろいろな実験手法を模索しました。私個人の課題は平面脂質膜の作製・観察の設備と手法を確立することででしたが、宇理須G伝統の放射光エッチングやフォトリソ・集束イオンビームでの固体基板加工、酸化物表面の化学修飾とタンパク質固定化、探針修飾AFMを用いたタンパク質の機能マッピング、大腸菌からのタンパク質の抽出・精製などに総研大の学生さんと一緒に取り組みました。これらの全てについてまとまったアウトプットを残せた訳ではありませんが、このときの知識と経験は今でも生きています。

私は着任後のはじめの3年間は技官として技術課に所属していました。最初の歓迎会で酒井課長(当時)から親睦会幹事に任命され、勝手の分からないまま忘年会や次年度の歓迎会などを企画しました。おかげで技術課の方々に名前を覚えてもらうことができましたので、今になって思えば酒井課長の親心だったのかもしれない。

宇理須先生には、着任当時から最後

まで私がやりたい研究を好きにやれる環境を提供していただき、心から感謝しています。宇理須Gの歴代メンバーのおかげで楽しく研究を行うことができ、国際会議などの困難なタスクもこなすことができました。一人一人挙げればきりがありませんが、分子研の先生方、助教・ポスドクの方々、技術課の皆様にご世話になり、ありがとうございました。おかげさまで9月より、豊橋技術科学大学に新設されたエレクトロニクス先端融合研究所にテニユアトラック教員として着任することができました。新築の建物にまっさらのオフィスと実験室が用意されていて、独立して研究を運営する立場になります。ここでもまた研究室の立ち上げからですが、今回は宇理須先生のご厚意で持参できた実験装置と、分子研8年間の経験が揃っています。テニユアトラックの同僚はMEMS、神経生理、磁気微粒子など様々な分野から私と同年代の研究者が集まっており、非常に刺激的な環境です。オリジナリティを發揮し、なおかつinterdisciplinaryな成果も挙げられるよう、今は装置をセットアップしながらいろいろと考えを巡らせているところです。同じ県内ですし、豊橋まで是非一度遊びに来てください。

**Prof. MUKHERJEE Debashis**

from India



Mukherjee 教授は、平成 23 年 9 月から 11 月の三ヶ月間、理論・計算分子科学研究領域系に招へい外国人研究職員として滞在される予定です。Mukherjee 教授は、カルカッタ大学で学部から博士課程まで学ばれました。当時は実験のグループに所属されていましたが、独自に理論開発のご研究を進められ、その研究で学位を取得されました。現在は Indian Association for the Cultivation of Science においてラマン分光法の創始者である Raman 教授の記念センター (Raman Center for Atomic, Molecular and Optical

Sciences) に所属されておられます。Raman Center ではセンター長など重要なポストを歴任されましたが、現在は Chair Professor としてご自身の研究に専念され、世界的なご研究を展開されています。

Mukherjee 教授のご研究は理論化学の広い分野をカバーしています。電子状態理論、量子ダイナミクス、多体系の統計力学などを研究されていますが、特に、多配置クラスター展開法 (multi-reference coupled cluster theory) のパイオニアであり、多配置クラスター展開法の開発において、世界をリードするご研究をされています。また、クラスター展開法に基づく励起状態の理論として、線形応答クラスター展開法 (coupled cluster linear response theory) を発表されており、励起状態理論においても重要なご研究をされています。

クラスター展開法は分子の電子状態を効率よく精密に記述する理論であり、近年の *ab initio* 法では CCSD(T) が信頼性の高い理論として認識されてい

ますが、この方法は単配置 (Hartree-Fock) を参照関数としており、分子の結合解離や擬縮退の電子状態などには適用できないことが知られています。Mukherjee 教授は、このような記述が難しい電子状態にも応用できる多配置クラスター展開法を開発されています。特に、目的の状態のみをターゲットにする方法が様々な系で有用であることが示されており、この方法は Mukherjee 教授にちなんで M_kMRCC 法として世界的に利用されています。

Mukherjee 教授は、日本にも度々訪れておられ、JSPS 外国人研究者招へい事業で京都大学に滞在されたこともあります。また、日本国内に広い分野の沢山のご友人がおられ、分子研に来られることをとても楽しみにしておられます。量子化学だけでなく広い分野の見識をもっておられ、研究を深く理解し、議論をしていただけます。分子研に滞在される時には、皆さんのご研究について議論をしていただき、研究交流をしていただけたらと思います。

(江原 正博 記)

外国人研究職員の 印象記

A sizzling summer in Japan, in IMS

Pascal Loiseau

Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris

What a tricky challenge to summarize 6 months of full experience in Japan in IMS! Where to start?

My first time in Japan was already 4 years ago in Okazaki. I indeed had the chance to join Prof. T. Taira's group (IMS - Laser Research Center) from 2006 to 2009 for 3 weeks each year. So, when Prof. T. Taira told me about the opportunity to ask for a visiting scientist position in his group, I did not hesitate half a microsecond: I got a sabbatical half-year to experience 6 wonderful months in IMS, from June to November. Right now, just back to France, by writing this letter, my memory is still full of all the Japanese images I was immersed in during my stay.

Japan is an amazing destination for French people, not only because of the distance (about 10 000 km) but mainly because of its attractive culture. When I was at the high school, my French teacher called us the “Goldorak” (UFOロボ グレンダイザー) generation: this Japanese animated series was extremely famous in late 70's- early 80's among all the French kids. But, for sure, at this time, I didn't know that this animated series was Japanese, as well as so many other animated series that followed. In 6 months, you get step by step immersed in the way of life of the country you are living. In my case, I realized that some images I was seeing in Japan were familiar to me, putting me back to my childhood. Part of this Japanese atmosphere, actually promoted by animated manga from my childhood, was just coming to reality under my eyes. A few examples: the traditional Japanese clothes, the typical and tiny restaurants where you are face to face with the chef, the urban environment - sometimes mixing modern and traditional buildings-, the excitement of big cities - by comparison, Paris could just sound a village -, or the spectacular and fascinating spectacle of seasons and nature. A kind of summary of all these impressions was the “hanabi” festival, when Okazaki became a spot where so many people dressed in kimonos converged, making their path among all the booths stacked along the river, before to enjoy the giant firework.

This experience was enriched with some sightseeing. For instance, I had the chance to visit such gorgeous places like Miyashima, Nikko where temples and nature are just celebrated



altogether, or to do hiking in the sunny rice fields of Kibiji area (near Okayama) and in the hillside narrow streets of Onomichi. As a French guy, I cannot speak about Japan without mentioning its cuisine too: so rich in taste! So many wonderful experiences! It was just a pleasure to learn (and to taste) about the specialities that each region can offer to you in Japan. If I will always regret not to speak Japanese, I must confess that most of the Japanese words I learned for 6 months are related to Japanese food!

I would tend to say that Japan, as an island, has known over time how to preserve its culture, its specificity and its identity, despite the “tsunami” of the current globalisation. My only wish is that this fact will last as long as possible, that is to say, forever!

Beyond, these personal impressions, my professional experience was very rewarding and fruitful too. A visiting scientist is a privileged position, free of most administrative and educational duties, so that you can centre only on research. But IMS offers to you much more. As a mirror of Japan, everything is perfectly organized and the material conditions for work are just ideal. Moreover, in Prof. Taira's group, I only met nice, helpful and competent people. Secretary staff was always very swift to answer my everyday life questions, from administrative to social or cooking subjects! Researchers were always available to help me in my experiments and to give me invaluable advices: how much time I saved thanks to their help! Moreover, I had the chance to meet and exchange with researchers from many foreign countries: Romania, India and China. What an extraordinary melting pot to learn from each other! At last but not least, I size the opportunity of this letter to express my gratefulness to Prof. Taira for our discussions, his passion for research and his ability to motivate people and to pull them to their best.

Definitively, as you may guess, I have become a Japan lover! Even if I miss many people stayed in Japan, I want to communicate them part of this passion that animated me for 6 months: this letter is not a definitive farewell!



Daniel Sindhikara

計算・理論分子科学研究領域
理論分子科学第二研究部門 研究員



In May of 2009 I received my PhD from University of Florida under Professor Adrian Roitberg studying enhanced sampling techniques and various molecular dynamics analysis methodologies. From July 2009 to July 2010, I worked as a postdoc under Professor Yuko Okamoto at Nagoya University developing new enhanced sampling techniques. Now, I work as a postdoc in Hirata lab studying molecular recognition using statistical theory of liquids.

どうぞよろしくお願ひ致します。

郭 兆 琦

GUO Zhaoqi

物質分子科学研究領域
分子機能研究部門 研究員



I got my Ph.D. degree from Technical Institute of Physics and Chemistry, Chinese Academy of Science in Organic Chemistry in 2010. Then I joined Prof. Jiang's group as a postdoctoral fellow in July 2010. Now I focus on synthesis and characterization of COFs with novel properties. Research conditions in Institute for Molecular Science are excellent. Hope I can do a good job and make friends here.

どうぞよろしくお願ひ致します。

宮 脇 真紀子

みやわき・まきこ

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



8月より平本グループでお世話になっております。

地元の岡崎市出身ですが、今までに分子科学研究所に訪れたことはありませんでした。

最先端の研究に携わるお仕事をさせていただき、大変感謝しております。

色々なことを吸収してがんばっていききたいと思いますので、どうぞよろしくお願ひいたします。

永 井 篤 志

ながい・あつし

物質分子科学研究領域
分子機能研究部門 助教



京都大学工学研究科中條研究室にて博士研究員ならびに特任助教を経て2010年9月より分子研の助教に着任いたしました。これまではホウ素を含む共役系高分子の合成などの研究を行ってきましたが、今後は、 π 電子系が空間特異的に配列した新規な光・電子機能物質の研究を江先生と協力して進めていきたいと思っています。

どうぞよろしくお願ひいたします。

大 坪 裕 子

おおつぼ・ゆうこ

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



岐阜大学にて修士卒業後、派遣会社に就職し、企業での業務を経て9月より分子スケールナノサイエンスセンター・平本研究室に派遣研究員として配属になりました。

有機薄膜太陽電池に関する研究に従事するにあたり、これから実験スキルや考え方をどんどん吸収して、使える人材になりたいと思っています。

みなさんどうぞよろしくお願ひ致します。

山 中 優

やまなか・まさる

岡崎統合バイオサイエンスセンター
戦略的方法論研究領域 研究員



広島大学生物圏科学研究科にて学位取得後、平成22年10月から岡崎統合バイオサイエンスセンターの青野Gに研究員として加わりました。恵まれた研究環境の中、多くの成果が出せるよう精進していきたいと思っています。麦酒が主食です。

よろしくお願ひ致します。

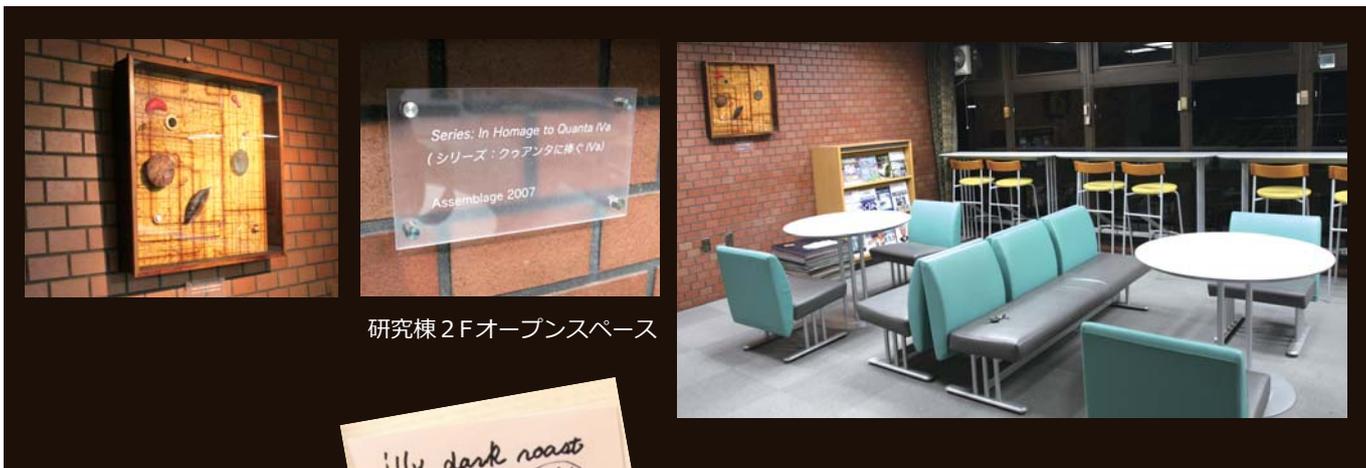
山上 由希子

やまがみ ゆきこ

光分子科学研究領域
光分子科学第二研究部門 技術支援員



11月1日より大森グループでお世話になっております。出産を機に離れておりました機構に、縁あって12年振りに舞い戻って参りました。前職の事務センターとは業務も雰囲気も違い久々のMacに戸惑い、まだまだ戦力外ですが支えて下さる周りの皆様のお陰で楽しく過ごさせて頂いています。早く仕事を覚えて少しでもお役に立てるよう頑張りますので、どうぞよろしくお願い致します。



研究棟2Fオープンスペース

IMS Space



研究棟2Fラウンジ

共同利用研究ハイライト

トポロジカル絶縁体超薄膜の電子構造

平原 徹 東京大学大学院理学系研究科 助教

1. はじめに

トポロジカル絶縁体は量子スピンホール相とも呼ばれる新奇な物質状態 (a new state of matter) であり、物性物理学全体のホットトピックとして研究が盛んに行われています。これは量子ホール効果のスピ教版で、バルク (物質内部) は絶縁体だがエッジにフェルミ準位を横切り常に金属的であるような状態が存在します。量子ホール効果は低温・強磁場下で実現しますが、量子スピンホール効果は物質の内部磁場ともいえるスピン軌道相互作用が重要な役割を果たして2次元のみならず3次元物質でも実現されます。さらにエッジでの反転対称性の破れにより、エッジ・表面状態は非磁性物質であるにも関わらずRashba効果によってスピン偏極してスピン流を運びます。「トポロジカル」という語源の由来はこのエッジ・表面状態がトポロジーで定義される量により非磁性不純物の乱れの散乱から保護されていることによって、通常の絶縁体と区別されます。

ここまで読まれた時点で興味を持たれた方はより詳しい文献をご覧になることをお勧めします^[1]。そしてこれまでの多くの研究の結果トポロジカル絶縁体のバルク部分を本当に絶縁体にするのが難しいことが明らかになりました。つまりエッジ・表面状態の「トポロジカル」な性質を理解するにはバルクの体積を減らし表面を際立たせた方が有利であるということが分かり、執筆者はトポロジカル絶縁体を超薄膜に

成長させて研究しています。特に執筆者の所属する東京大学大学院理学系研究科長谷川修司研究室では従来から *in situ* でマイクロ・ナノスケールにおいて表面状態の電気伝導を測定する研究を行っており、トポロジカル絶縁体の表面状態の電気伝導測定もその延長線上で実現できると考えています。しかし電気伝導のデータ解釈においてバンド分散を知ることは不可欠であり、UVSORの高分解能角度分解光電子分光ビームラインBL5Uを2009、2010年度に使わせていただきました。本稿ではその成果の一部を紹介させていただきます。

2. ビスマスアンチモン合金超薄膜のフェルミ面と表面状態電気伝導

ビスマスアンチモン ($\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$) 合金は $0.07 < x < 0.22$ でトポロジカル絶縁体になると理論的に予言され実験的にも2008年にバルク結晶の光電子分光測定で実証されました^[2]。執筆者は以前からシリコン表面上にBi超薄膜を成長させて研究していましたが、BiとSbを同時に蒸着させることにより合金の超薄膜を成長させることにも成功しました。そのフェルミ面を測定したところ一番薄く成長できる29 Åの膜でも図1(a)のようにバルク結晶の場合と同じくトポロジカルな表面状態が存在していることが明らかになりました。そしてその電気伝導をマイクロ4端子法で測定したところ、図1(b)に示す通り膜厚が厚いとき (239 Å) は温度が下がるほど抵抗率が上がる絶縁体的な

振る舞いを示していたものが、膜厚を薄くしていくと98 Åの膜では低温で金属伝導に転移し、29 Åの膜では室温からずっと金属的になるという結果を得ました。これは確かに一番薄い薄膜では表面状態によって電気伝導が支配されていることを意味してトポロジカル表面状態の電気伝導検出に成功したと言えます^[3]。

3. ビスマスセレン合金超薄膜の量子トポロジカル相転移

ビスマスセレン (Bi_2Se_3) は上記の $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 合金の次にトポロジカル絶縁体であると同定された物質でバンドギャップが0.3 eVと大きく、また表面状態の分散が理論から予言される最も単純な単一ディラックコーンであるということで現在多くの関心を集めています^[4]。図2(a)に80 Åの厚さの Bi_2Se_3 超薄膜のバンド分散を示します。フェルミ準位直下の強度が強い部分はバルクバンドを示していて、これはSeサイトでの欠損によりバルクがn型にドーピングされていることを示しています。このようなnドーピングの傾向はバルク半無限結晶でも見られており、上述のように表面状態の性質を調べる上で障害となっています。その脇に見られるやや強度が小さい直線的なバンドが表面状態で、スピン分解測定によりスピン分裂していることも直接示されておりヘリカルディラックフェルミオンと呼ばれます^[5]。膜厚を薄くしていくと図2(b), (c)にあるように直線的な分散は見られなくなり表面状態にギャップ

プが開きます。これはもはや30 Å厚さ以下の超薄膜はバルク結晶と同じとみなせないことを意味しています。理論によれば^[6]Bi₂Se₃を薄膜にした場合、50 Å以下で膜の表裏の表面状態が混成し3次元物質ではなく2次元系と考えるべきだと示されました。そしてそのような混成効果によって3次元では表面状態であったバンドの分散にギャップが生じますが、次元が変わってもトポロジカルな物質であることは変わりません(図2(b)、30 Å)。興味深いのはさらに膜厚が薄くなった場合(図2(c)、20 Å)には通常の絶縁体へと相転移が起きることが予言されていることです。詳細は省きますが、理論計算との比較によって図2(b)、(c)においてそのようなトポロジカル量子相転移が確かに起きていることが実験的に明らかになりました^[7]。

4. おわりに

2、3で示したように高分解能角度分解光電子分光法によってトポロジカル絶縁体を超薄膜にしたときの興味深い現象を測定することができました。今後さらに研究を進めてトポロジカル表面状態の新たな性質を明らかにしたいと思っています。

本研究を遂行する上で(課題番号21-524、22-521) ビームライン担当の木村真一准教授、宮崎秀俊博士をはじめUVSOR、分子研のスタッフの皆様にはお世話になっています。特に2010年度よりトップアップ運転が定常化されたことに伴い、入射時の待ち時間が減りビーム強度が減衰しなくなったことで測定時間が大幅に短縮されてユーザーとしては大変ありがたく思っています。この場を借りて皆様に厚く御礼を申し上げます。

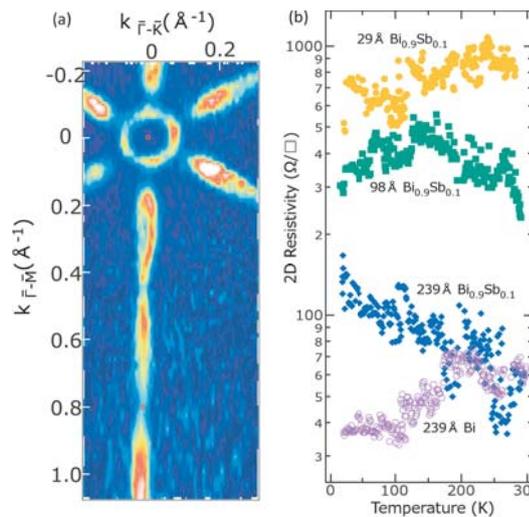


図1 (a) ビスマスアンチモン (Bi_{1-x}Sb_x) 合金超薄膜 (30 Å 厚さ) のフェルミ面。(b) ビスマス (239 Å) およびビスマスアンチモン合金超薄膜 (239、98、29 Å) 電気抵抗率の温度依存性。

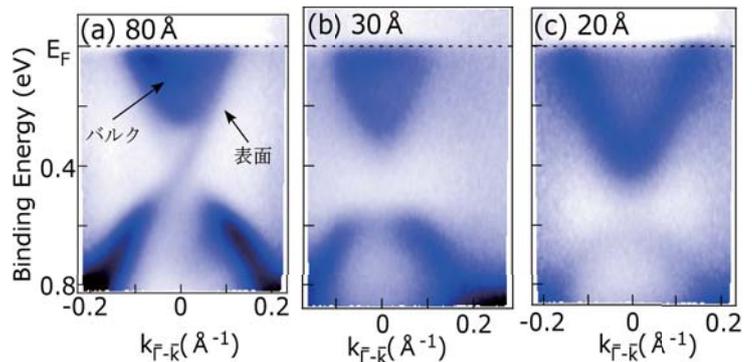


図2 ビスマスセレン (Bi₂Se₃) 超薄膜のバンド構造。厚さはそれぞれ80 Å (a)、30 Å (b)、20 Å (c) であり、30 Å まではトポロジカル絶縁体、20 Å は通常の絶縁体である。

参考文献

- [1] 村上修一、平原徹、松田巖、日本物理学会誌 Vol. **65**, No. **11**, 840 (2010).
- [2] D. Hsieh *et al.*, Nature **452**, 970 (2008).
- [3] T. Hirahara *et al.*, Phys. Rev. B **81**, 165422 (2010).
- [4] H. Zhang *et al.*, Nature Phys. **5**, 438 (2009).
- [5] T. Hirahara *et al.*, Phys. Rev. B **82**, 155309 (2010).
- [6] H. Z. Lu *et al.*, Phys. Rev. B **81**, 115407 (2010).
- [7] Y. Sakamoto *et al.*, Phys. Rev. B **81**, 165432 (2010).



ひらはら・とる

1980年米国ワシントン州生まれ、埼玉県育ち。2006年東京大学大学院理学系研究科物理学専攻博士課程中退、2007年東京大学大学院理学系研究科物理学専攻・助教、2008年東京大学大学院理学系研究科物理学専攻博士(理学)学位取得。専門は表面物理学。特に表面状態におけるスピン軌道相互作用が関係した電子・スピン構造と電気・スピン伝導特性に興味を持っている。

共同利用研究ハイライト

若手研究会等「分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」報告

大滝 大樹 京都大学大学院理学研究科 博士課程2年

分子科学若手の会（以下、若手の会）は分子科学の全分野を広く対象とする唯一の若手の会である。若手の会は主に大学院生で構成され、毎年夏には「分子科学若手の会夏の学校」（以下、夏の学校）を開催している。夏の学校は五つの分科会からなり、専門の講師からその分野の基礎から研究の最先端までを短時間で集中的に学ぶことができる。運営形態からも分かるように、若手の会には固定メンバーはおらず、代表者や事務局の所在なども年度毎に移り変わる流動的な組織である。それにも関わらず、これまでの分子研からの援助および関係者の御協力により、今年の夏の学校は第50回という節目を迎えることとなった。

分子研の共同利用研究「若手研究会等」の公募にも採択され、我々は夏の学校の準備として、2010年7月2日に「分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」を開催した。参加者は分科会の講師の方々、分科会の担当者、若手の会・夏の学校事務局の計15名である。検討会では主として夏の学校での講義内容、講義の進め方などの詳細の打ち合わせを行った。講師と分科会担当者は検討会以前にも講義について電子メールで連絡を取り合っているが、検討会は予定時間を超過するほどで

あり、実際に面と向かって話をすることの重要性を感じさせられた。また、講師の方々と分科会の担当者の以後の議論をする上で有意義なものであった事のみならず、同研究会に参加したメンバー同士が協力して夏の学校の運営を円滑に行う上で大きな成果を得た検討会となった。

夏の学校は2010年8月1日から5日の五日間の日程で茨城県神栖市波崎にて行われた。第一分科会では京都大学の山本量一先生をお招きし、「粗視化」をキーワードにソフトマターのダイナミクスを理論的・数値的に取り扱うための手法やモデルの構築について講義を行って頂いた。第二分科会では東京大学の加藤毅先生に超高速強光子場における電子ダイナミクス・分子ダイナミクスを理論的に記述する方法についての講義を行って頂いた。講義に加えて総説の輪読も行い、近年急速な進歩



を遂げているアト秒領域の科学についての理解を深めることができた。第三分科会では静岡大学の杉田篤史先生を講師にお迎えし、フェムト秒・ピコ秒オーダーの超短パルスレーザーを光源とする非線形光学分光について講義を行って頂いた。基礎から最近のトピックスの紹介までと、幅広い内容を集中的に学ぶことができる夏の学校ならではの講義であった。第四分科会は神戸大学の石川春樹先生をお招きし、気相中レーザー分光実験という立場から分子分光の基礎から応用までを幅広く講

義して頂いた。多岐に渡る分光法や実験結果の解釈の仕方など、分光法から分子の性質を理解するための多くを学ぶことができた。第五分科会では、豊橋技術科学大学の墨智成先生に密度汎関数理論についての講義をして頂いた。物



理・化学現象の本質を見落とさないモデルをいかに構築するかという、分子科学において重要な考え方も学ぶことが出来る非常に良い機会であった。分科会だけでなく、講師の先生方をお願いしている全体講演やポスターセッションなどもあり、最先端の研究に触れることや学生同士の交流を図ることで非常に良い刺激を受けた。

一方、実際に夏の学校を運営する中で若手の会の現状について様々な問題点が浮き彫りになった。例を挙げれば、参加者が減少傾向にあることである。今年度の参加者は57名であり、前年度(75名)に比べて大幅に減少した。開

催時期が例年に比べて数週間ずれたことも理由として挙げられるが、博士課程進学者の減少といった本質的な問題、高額な参加費・交通費という金銭面の問題など、複合的な問題が原因になっていると考えられる。また、「参加者の出身校が固定化されつつある」といった指摘も頂いた。若手の会の活動内容をより多くの方に知って頂くための広報活動など、問題の解決のためにできる所から実行に移したいと考えている。また、冒頭に述べた若手の会の性質上、問題意識までは上手く引き継がれないという流動的な組織故の問題点も存在する。この点については、筆者

を含めた今年度の運営側のメンバーが来年度の運営にも携わることで改善に向けて努力していく所存である。分子研には新たな試みについてご相談に乗っていただき、また、ご助言等を頂ければ幸いである。

事務局は今年度の夏の学校終了直後から来年度に向けて活動を始めている。冒頭にも述べたように、夏の学校は50周年という1つの大きな節目を迎えた。51年目として新たな一歩を踏み出す分子科学若手の会夏の学校をより良いものにするべく鋭意努力していくので、今後も引き続き分子研および皆様のご理解とご支援をお願いしたい。

施設だより

分子スケールナノサイエンスセンターの現状

分子スケールナノサイエンスセンター長 横山 利彦

分子スケールナノサイエンスセンター(以下ナノセンター)は、原子・分子レベルでの物質の構造及び機能の解明と制御、新しい機能を備えたナノ構造体の開発及びその電子物性の解明を行い、これらが示す物理的・化学的性質を体系化した新しい科学を展開するとともに、ナノサイエンス研究に必要な研究設備の管理を行い、これらを研究所内外の研究者の利用に供し緊密な連携協力の下で共同研究等を推進することを目的としたセンターです。平成19年度の分子研組織改編に伴い、ほとんどの汎用機器や低温施設が機器センターに所属することとなり、ナノセンターは超高磁場(^1H 920 MHz)核磁気共鳴(NMR)装置(図1)、300kV分析型透過電子顕微鏡(図2)、高性能走査電子顕微鏡(図3)、集束イオン

ビーム加工機(図4)、クリーンルームを維持管理するとともに、やはり平成19年度から5年間にわたって分子研が受託している文部科学省・先端研究施設共用イノベーション創出事業ナノテクノロジー・ネットワークプロジェクト(ナノネット)を運用する母体センターとしての業務を行っています。ナノネットの詳細はHP: <http://nanoims.ims.ac.jp/>に記載されていますが、上記ナノセンター共通機器のほか、分子研の特徴を活かした世界最先端オリジナル分光装置(超高速近接場顕微鏡、紫外磁気円二色性光電子顕微鏡、生体専用透過電子顕微鏡)、大規模量子化学計算、機能性有機分子合成、UVSOR-IIを利用した高磁場極低温軟X線磁気円二色性測定(図5)など多岐にわたる支援を実施しています。

超高磁場NMR(http://nano.ims.ac.jp/ims_920nmr/920nmr.html)は平成16年度から共同利用に供されているもので、溶液から固体試料のナノ構造精密研究を実現する世界最高レベルの装置です。本機の機能を縦横に活用して、タンパク(中でも膜タンパク糖タンパクのような難結晶性複合タンパク)、固体ナノ触媒、有機-無機複合コンポジット、CNT及びフラーレン類縁体の精密構造研究、海洋性巨大天然分子などのナノサイズ分子構造体の高次構造や動的挙動の精密解析などの研究が行われています。特に、利用時間が年間7500時間にも達し、かつ、その7割以上が外部からの施設利用と協力研究に充てられている点は、外国人を含む専門家からも高く評価されています。また、安定な共同利用運用に加えて、新

たに西村勝之准教授が温度可変固体プローブを開発中であり、来年度からの共同利用供与を目指しています。さらに、昨年度、920MHzNMRと同じ環境で作動する予備装置として、600 MHz 溶液固体NMR装置が機器センターに納入されました。これにより920 MHz NMR測定の準備測定が可能となり、さらに920 MHzNMRが有効利用できるかと期待しています。

ナノネットにおける共同利用機器のうち、UVSOR-IIを利用する高磁場極低温X線磁気円二色性(XMCD)測定装置(電子構造研究部門所有、図5)は、

海外からも含めて利用者数が多くなったため、UVSOR-II BL4Bのピームタイムのうち一定時間をナノセンターが利用し、その中で利用者支援を行うという、UVSORとナノセンターの共同運用体制を整えました。XMCDは元素選択的な磁気情報(スピン・軌道磁気モーメントに関する定量的な情報を含む)が得られる手段として、現在では大変汎用的な方法になっています。他の国内外の放射光施設の装置と比べて有用な特徴を出すため、超高真空中でin situ条件下で薄膜や表面を作成し、その磁性をそのまま研究するのに適し

た仕様になっています。図5には、測定例としてMnフタロシアニン(MnPc)をCo薄膜に吸着させた系の実験データを示しています。MnPcがわずか1分子層でも非常に良質のデータが得られ、超薄膜の磁性研究に適切な手法です。

ナノセンターが現在受託しているナノネットは平成23年度も継続され、それ以降も何らかの体制の共同利用を続けますので、超高磁場NMR他の高性能機器装置群や他では得られないオリジナル装置等の支援を是非ご利用ください。

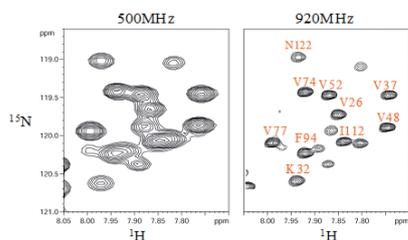


図1 920MHz 核磁気共鳴装置JEOL JMNECA920(山手5号館)。500MHzとデータと比較して、分解能が大きく向上し、各ピークが完全に分離できていることが分かる。



図2 300kV 透過型分析電子顕微鏡JEOL JEM-3200(明大寺実験棟B10)。粒子像分解能0.17 nm、格子像分解能0.10 nm。電界放出型エネルギーフィルターを有する。走査像の観察も可能で、電子エネルギー損失分光も行えるので、元素分析が可能である。試料は液体窒素により冷却できる。



図3 電界放射走査電子顕微鏡 JEOL FE-SEM: JSM-6700F (山手4号館1階SEM室)。試料の直径4インチまで、倍率は最高65万倍(数 nmまで)。エネルギー分散型X線分析(EDS)、表面元素定性分析、定量分析、面分析が可能。



図4 集束イオンビーム加工機 JEOL FIB: JEM-9310FIB (山手4号館1階SEM室)。試料の直径1インチまで、SEM用断面試料加工やTEM用薄片試料加工が行える。走査型イオン顕微鏡(SIM)、100 nm程度の組成構造観察、部分的カーボンCVD蒸着が可能。

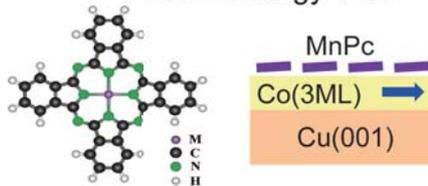
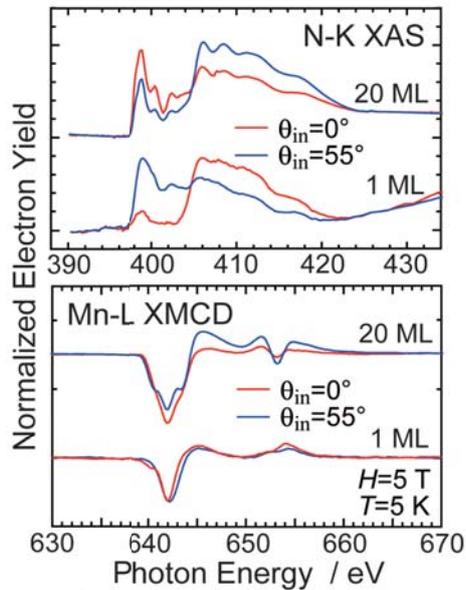
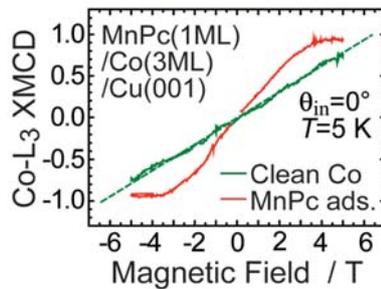


図5 超伝導磁石高磁場極低温X線磁気円二色性測定装置(左上)と測定例。磁場最大 ± 7 T、試料温度最低5 K。試料はCu(001)単結晶表面にCoを3原子堆積させ、その上にMnフタロシアニン(MnPc)を吸着させたもの(右下)。MnPc吸着前後での表面垂直方向の磁化曲線(左下)から磁気異方性が顕著に変化したことがわかる。N-K吸収端吸収スペクトル(N-K XAS)からMnPcの配向情報が得られる(MnPc 1分子層では分子が寝て吸着し、20分子層ではかなり立って吸着している)。Mn-L吸収端X線磁気円二色性(Mn-L XMCD)からは、Mnの磁化情報が得られる。Coと直接相互作用する1層目は電子状態・スピン状態に関して大きな変化が見られる。

共同利用・共同研究に関わる各種お知らせ

共同研究専門委員会よりお知らせ

分子科学研究所が公募している課題研究、協力研究、分子研研究会、および若手研究会については、共同研究専門委員会において申請課題の審査を行っています。それぞれの公募の詳細については分子研ホームページ (<http://www.ims.ac.jp/use/>) を参照いただきたいと思います。今回のお知らせでは、協力研究について一部変更された点をお伝え致します。

協力研究の申請にあたっては、申請代表者と同一研究室から同伴者がある場合には、3名まで同伴者を申請可能であり、同伴者にも旅費等が支給されておりました。今回の変更においては、協力研究の進展状況の変化に合わせ、同伴者の追加・変更が必要になった場合に対応し、協力研究採択後の同伴者（学生に限る）の追加・変更を認めることとなりました。また、当初に配分された予算内において、追加・変更した同伴者に旅費等を支給することも可能です。

共同研究の現状について、平成17年度から今年度（11月30日現在）までの申請数の推移をまとめたものを下記に示しました。協力研究については、多少の増減はありますが、毎年90から100件程度の申請数で推移しています。今年度も最終的には、昨年度並の申請数となるものと予想しています。協力研究は、大学共同利用機関である分子研が果たすべき役割の重要な一部を担っているものです。是非、積極的に応募頂きますようお願い致します。

分子研研究会の申請数は、ここ数年減少傾向が続いています。これは、以前に比べて、各大学、学協会において開催される各種研究会やシンポジウム等が増加していることも一因になっていると思われます。現在、分子研研究会は、分子研研究会（一般分）・アジア連携分子研研究会・学協会連携分子研研究会の3区分に分けて公募しています。分子研研究会の申請は、原則は前期・後期の年2回ですが、予算が許す限り、随時の申請にも対応いたしますので、所内対応教員にご相談下さい。こちらも是非、多数の皆様からの申請をお願い致します。

なお、共同研究専門委員会では時代の変化に応じて、新たな共同研究の枠組みについて継続して検討しておりますので、ご要望などございましたら、所員までお伝えいただけると幸いです。

共同利用研究の実施状況について

種 別	平成17年度	平成18年度	平成19年度	平成20年度	平成21年度	平成22年度 (8/30現在)
課題研究	1	1	2	2	1	0
協力研究	96	84	91	90	119	117
分子研研究会	11	13	9	4	5	6
若手研究会等	—	—	—	1	1	1
施設利用(機器センター)	43	41	50	63	52	51
施設利用(装置開発室)	10	6	8	9	8	5
電子計算機利用(施設利用Ⅱ)	132	142	144	147	171	153
UVSOR 研究会	1	3	2	2	2	1
UVSOR 施設利用	126	113	146	156	147	137
計	420	403	452	474	506	471

平成17、18、19年度の施設利用(機器センター)については、分子スケールナノサイエンスセンター及び分子制御レーザー開発研究センター施設利用の合計です。

運営に関わって

高田 昌樹

独立行政法人 理化学研究所 播磨研究所 放射光科学総合研究センター・副センター長
 高田構造科学研究室・主任研究員
 財団法人 高輝度光科学研究センター (SPring-8/JASRI) 利用研究促進部門・部門長
 東京大学大学院新領域創成科学研究科物質系専攻・連携講座教授



たかた・まさき / 【学歴】1982年広島大学理学部物性学科卒業、1987年広島大学大学院理学研究科博士課程後期物性学専攻単位修得満期退学、1988年広島大学大学院理学研究科理学博士

【職歴】1987年に名古屋大学工学部応用物理学科助手、1997年に島根大学総合理工学部助教授、1999年に名古屋大学大学院工学研究科助教授、2003年に(財)高輝度光科学研究センター (SPring-8/JASRI) 利用研究促進部門 I 主席研究員、2005年より(財)高輝度光科学研究センター (SPring-8/JASRI) 利用研究促進部門 部門長、2006年より(独)理化学研究所放射光科学総合研究センター主任研究員、2007年より東京大学大学院新領域創成科学研究科物質系専攻教授、2010年より(独)理化学研究所 放射光科学総合研究センター副センター長

近年、世界各国では研究開発の強力な戦略ツールとして、放射光施設が次々と建設されています。一方、我が国には既に7つの放射光施設が存在し、日本は世界のなかでも類を見ない放射光大国と言えます。その放射光施設の一つである自然科学研究機構・分子科学研究所・極端紫外光研究施設 (UVSOR) の運営委員会委員に平成18年04月～22年03月の間、就任しました。UVSORは極紫外領域のエネルギーの放射光源を有し、その強力な光を使った全国共同研究を対象とする、特徴ある放射光施設です。これまで、分子科学研究所の附属施設として、我が国の、化学、物理、物質科学の基礎分野の研究を支えてきた研究所の運営に、何かお役に立つことができればと考え、委員をお引き受けしました。

私自身も、大型放射光施設 SPring-8 で、理化学研究所及び高輝度光科学研究センター (JASRI) に所属し、放射光を活用したサイエンス、「放射光科学」の研究を推進しています。そして、放射光の先端的利活用の開発と、大学の先生方や企業の研究者の方々の施設の共同利用支援に携わっています。この様な共同利用施設を運営していくうえで、放射光施設の先端性と、利用分野

の新規性を確保する事は極めて重要であり、共同利用実験の効率的な支援とともに両立させていく責務を負っています。SPring-8においては、理化学研究所の放射光科学総合研究センター (RIKEN SPring-8 Center) が、先端的利活用の先導研究開発を担い、それを基盤化したものを、JASRIが共用ビームラインに於いて一般ユーザーに利用支援するという役割分担がなされています。共用開始から10年を経過した今、トップアップ運転・低エミッタンス運転などの光源性能の革新から、SPring-8の光源性能を活かした計測技術の急速な進歩へとつながり、ユーザーコミュニティとその研究分野を、新たに開拓させていくことができました。しかし、UVSORは、分子科学研究所の附属施設という有利な面は持ちながらも、限られた予算の中で大学共同利用施設として責務を果たさなければならず、運営委員会での議論を通じて、その舵取りの難しさを実感いたしました。

言うまでもなく、施設の運営には、ユーザーコミュニティとの密接な協力関係の構築が必要不可欠です。しかしながら、研究施設に求められるものは、ユーザーの獲得ではなく、研究拠

点としての研究・開発の成果を挙げることです。多くの努力を要するユーザーの獲得は、研究成果を挙げる手段の一部であるとしか見なされません。よって、放射光科学の進歩をミッションとする者として、常に、国内外のサイエンス・コミュニティ全体を視野に入れ、施設の高度化を新規サイエンス・産業の開拓に位置づけながら、施設の先端性に相応しい成果を挙げるための発展的な運営に取り組んでいます。この基本的な考え方は、SPring-8では、XFEL (X線自由電子レーザー) 計画が推進されていく中で、施設の *demarcation* の概念が具体化される過程で、広く理解を得られるようになってきたのではないかと思います。UVSORも、近年進められてきた高度化が実を結び、FEL (自由電子レーザー) の開発への挑戦や、極紫外光源の特長を活かした様々な研究成果を創出したことを、運営委員として目の当たりにすることができました。今後は、新規分野からの若い研究スタッフの導入による人事の刷新等により、大学共同利用機関としてだけでなく、分子科学研究所の国際性をさらに高めるための強力な戦略的機関への飛躍を遂げられる事を期待しております。そのためにも、分

子科学研究所の戦略／方針上重要な位置づけを確保して予算化することが重要であると思います。その中には、定常的な研究員・技術職員不足の解消、その対策としての外部との人事の還流や、業務のアウトソーシング、そして、

分子科学研究所や大学との運営面における連携強化の議論も必要と思われます。

今後のUVSORが直面するかもしれない運営の問題について考えた事を、私の身の回りで起こった様々な運営に関わる最近の事柄を思い浮かべながら、

本稿を書かせていただきました。今後のUVSORの国際的な研究拠点への、更なるステップアップを期待しております。

運営に関わって

木寺 詔紀

横浜市立大学生命ナノシステム科学研究科・教授

きでら・あきのり／横浜市立大学生命ナノシステム科学研究科教授。工学博士。1982年に京都大学工学研究科で工学博士を取得後、Cornell大学化学科 博士研究員、1986年京都工芸繊維大学工学部 助手、1988年蛋白質工学研究所 主任研究員、1996年京都大学理学研究科 助教授を経て、2001年より現職。2006年分子科学研究所 理論分子科学研究系 客員教授。2008年4月～2010年3月まで計算科学研究センター運営委員会委員。専門は生命計算科学。



昨年度まで、計算科学研究センターの運営委員を務めさせて頂いたときに感じたことを若干述べさせて頂きたいと思います。そこでの任務は当然のことながら、計算科学研究センターで行う分子科学計算の申請課題の評価でありますので、その過程で感じたことについてです。

最近の次世代スーパーコンピュータプロジェクトやTop500の話題にも端的に表れているように、ハードウェアとしての計算科学は、未だに広義のムーアの法則に従って進展し続けています。広義と言ったのは本来の意味である半導体の集積度の向上がそのまま計算機の高速化につながっていたものが、今では集積度の技術的飽和に伴い、並列化、GPU化などのハードウェアとそれに関わるメモリ、通信技術の進展が高速化を担っているところを指しています。近年の計算科学の進歩の実体を見れば、そのようなハードウェアの進展に主導され、計算機資源の規模に沿った進歩が見られると言って、その0次

近似的見方としては間違いのないところでしょう。その状況に基づいて言えば一般的には、いわゆる質の高い計算科学の研究には不可避免的にそこで用いる計算量も十分に大きいことが要求されることになっています。

私は、生体分子の古典分子動力学計算の分野にありますが、その分野では“heavy computation”への傾向には著しいものがあります。例えば、10年ほど前であれば数万原子系で高々全体で10 nsec程度の計算時間があれば、計算量として十分であるとされていました。ところが現在では、数十万原子系でも、最低で数100 nsecから1 μsecの計算時間が必要であるとされるようになってきています。それは、作業概念としての「平衡状態」（厳密な意味ではなく、計算可能な時間範囲で、初期構造近傍でダイナミクスが定常状態にあることを指しますから、その意味は時代によって徐々に変わってきています）に、より長時間の計算時間を要求するようになってきていることに対応

します。また非平衡現象では、その現象の多数回の観察を要求されることとなります。その意味で、シミュレーションで議論されるべき現象（生体分子であれば、生物機能をシミュレーションでどうとらえるかの問題に対応します）自体が変化しているといえます。ごく最近でいえば、我々がAnton shockと呼んでいるD. E. Shawの1msecを超えるシミュレーションの結果に、最も典型的にその傾向が現れています（Science 330, 341）。彼らの結果は、Antonという専用計算機によるもので、通常の我々が行っているシミュレーションの時間スケールを優に 10^3 超える時間スケールのものになっています。最近の実験生物学者との会話では、「もう1msecのシミュレーションができるのでしょうか」などという会話があり、困惑させられることがあります。

これは単なる一つの分野の状況であるばかりでなく、計算科学の不可避免的な流れであると思います。もちろん計

算機資源のみに依拠することは正しいことではありませんし、現実的にそれ以外の重要な課題は山ほどありますが、その流れの中に我々はいることも間違いがありません。さて、そこで分子研の状況に戻りましょう。申請の多くは、必ずしも“heavy”でない計算を行うという比較的modestなものが大半を占めます。“heavy”な計算をしたくても、共同利用システムの制約から、その計算の全体（試行錯誤の過程を含んで）のすべての行うだけの占有時間とデータ蓄積容量を期待することは困難だという現実があります。仮に、この計算機センターが日本における分子計算科学の中心であり続け、さらには世界的

なレベルでリードすることを考えるならば、現在の最高水準として要求される計算量を確保することと、また同時に多くの研究者のフォーラムであるというふたつの役割を適切に両立させる努力をする必要があると思います。その「適切に」ということばで申し上げたいことは、すでにある程度の準備が完了して、product runのみで成果を出すことのできる巨大資源を要求する少数の課題と、多数のより準備的なもしくは簡易な計算の課題を峻別して、前者により大きな重点を置く配分を行う必要があるということです。現在でも、施設利用Sという前者に対応する枠組みがありますが、私の希望はその枠組

のより一層の充実です。それに対して、小さな計算機資源を用いるものはすでに個人が購入し得る計算機のレベルで実施できるものも多く、それらへの全面的支援をこのセンターがすべき時代はすでに終わったのではないかと考えます。計算機資源を提供することばかりでなく、分子計算科学の中心としての立場から、分子計算研究者のフォーラムを充実させる役割をより積極的に果たすべきであるとも考えます。

以上のような感想を抱いた2年間でありましたが、幅広い分子計算科学についての研究内容を学ぶ機会でもありました。ここに感謝申し上げます。

関連学協会等の動き

特定領域研究「実在系の分子理論」を振り返って

榎 茂好 京都大学物質・細胞統合システム拠点・特任教授
分子科学研究所・短時間研究員

特定領域研究「実在系の分子理論」は2006年10月から始まり、2010年3月に終了致しました。この間、本特定領域研究の推進に当たり、分子科学関連の諸分野の皆様大変お世話になりましたことに心から御礼申し上げます。3年半の研究期間に約1年間近い準備期間と取りまとめを行った今年の4月から9月までを加えますと、合計5年間、この特定領域研究に携わっていたこととなります。振り返って見ますと、準備期間、特に、申請書の提出とヒアリングの準備を行っていた時期は緊張し、研究開始後約1-2年は気分が高揚していました。それに比べ、研究とりまとめを行った今年1月頃から9月までは、定年間際、定年直後ということもあり、

しんどいのみで、「特定領域研究はしんどい」と言うのが正直な印象です。それはさておき、分子研レターズに執筆の機会を与えて頂きましたので、この「実在系の分子理論」で私たちが何をしようとしていたのか、そして、何が達成され、理論化学・計算化学の将来はどのようなものになったのか、感想を交えて述べさせていただきます。

準備期間では総括班として参加して頂いた永瀬茂先生、加藤重樹先生、高塚和夫先生、田中秀樹先生と月1-2回程度、加藤研のゼミ室に集まり、議論を重ねました。この時期は、忙しかったのですが、総括班の皆さんとのdiscussionは非常に楽しく、良い思い出ばかりです。皆さんご多忙な方ばか

りですのに、本当に良くご協力頂きました。亡くなってしまった加藤さんの口調とご意見を今も良く思い出します。電子状態理論、反応ダイナミクス、分子動力学法を方法論的な基盤とし、構造的・電子状態的に複雑で、かつ柔軟な、すなわち、変化しやすい分子および分子集団を研究対象とし、広い視野から本質にアプローチし、また、実験化学者との連携を重視しよう、と言う構想は比較的早い時期からまとまっていた。それをどう表現するか、と言う点に悩みました。「実在系の分子理論」という名称でまとめるに至ったのは、実験化学者とのdiscussionの賜物です。この名称は、以下に述べるように、理論化学・計算化学の使命を考えてみ

でも適切であると同時に、私たちの感覚にじっくり来ました。

10年くらいより前は、モデル化合物、モデル系の構造や分子物性、反応過程が理論化学・計算化学の対象とされ、研究が行われていました。もちろん、そのような時期でも理論化学・計算化学は化学事象の本質を明らかにし、予測を行い、化学およびその関連分野に大きな貢献をして来ました。しかし、実験化学者の目から見ると、やはり、「ピーカーやフラスコの中と違うのではないか、実験では置換基が変われば、あるいは、溶媒が変われば、反応が進行したり、しなかったりするの、それは一体どうなっているのだ」、と言うフラストレーションを理論化学・計算化学研究に感じていたはず。「実在系」と命名したことにより、実験化学と対等にインタープレイを行える理論化学・計算化学の確立を目的としている、実際の系をそのまま研究対象としようとしていると好意的に受け取られたと思われる。そのような実在系をそのまま研究対象にする、と言うことは非常に重要なことで、私たちの目的の一つであったことは確かです。しかし、理論化学・計算化学の目的は、実験化学をそのまま再現したり、予測したりすることだけではありません。一口には「理論化学・計算化学は本質の解明と予測」と言いますが、もう少し、付け加えるなら、複雑な化学事象にアプローチするための新しい分子論的な視点を提供し、化学事象の本質を解明し、それをさらに進め、一般則を確立し、新しい概念を提供し、本質に基づいた予測を示すことが理論化学・計算化学の使命と考えられます。そのためには、複雑で、理論化学・計算化学の手に負えないような化学事象こそ理論化学・計算化学の目から見つめることが必要不可欠です。それが、理論化学・

計算化学を現在のレベルから一層高いレベルに、望むらくは、より高い次元に発展させることにつながるはずであり、同時に、新しい概念や法則性の確立にもつながると期待されます。現実の化学事象へアプローチには、理論的方法・計算化学的方法の大規模化、高精度化が必要なことは言うまでもありませんが、それと共に複雑な事象を解明するための高度化も必要と考えます。マルチスケール・マルチフィジックスという言葉が良く言われていますが、私たちの言いたいことは少し違います。最も良い例は、高塚和夫先生たちの **Beyond Born-Oppenheimer** の理論でしょう。これはけっして、マルチスケール・マルチフィジックスではありません。現在の電子状態理論は多くの場合 **Born-Oppenheimer** 近似に基づいて成立しています。しかし、レーザー化学で見出されている化学事象を正しく理解するには **non-Born-Oppenheimer** 近似の理論が必要不可欠です。レーザー化学だけでなく、昔から研究されている遷移金属錯体の物性でもこのような視点は不可欠です。このように実在系を正面から見て行くことにより、現在の理論の不足している部分とその高度化の方向性が明らかになると期待されます。実在系に正面からアプローチすることによる理論化学・計算化学の高度化、より高い次元での発展、そして、それらを通して実験化学と対等のパートナーシップを確立することを期待して、申請課題を「実在系の分子理論」としました。

事後評価のヒアリングで「実在系の分子理論の当初目的を達成しましたか？」と聞かれました。もちろん、「Yes」とお答えしました。その回答の通りにたくさんの成果を上げることが出来ました。一つ一つの紹介は止めますが、この3年間半で、理論化学・計算

化学的方法は大きく進展しました。特に、本特定領域研究から大規模化、高精度化、そして、本質にアプローチする計算結果の解析法などで大きな進展がありました。実験化学者から指摘されて来た溶媒効果の取り込みも進展しました。また、複雑な系の動的過程についてもこれまでにない研究成果が上げられました。従来の分子動力学法では弱点であった量子効果の取り込みも試みられ、成功裏に第一段階を達成し、今後の展開が期待されています。遷移金属を含む複雑な系、フラーレンやカーボンナノチューブなどの巨大系、タンパクなどの生体系についても多くの研究成果を上げることが出来ました。この意味で、当初の目的を上げることが出来たと自負して居ます。

しかし、現在の化学が研究対象としている化学事象はやはり、この特定領域研究を計画していた時点とは異なり、新しい分野や研究対象が次々に登場しています。無機化学・配位化学では多孔性高分子錯体 (**Porous Coordination Polymer** ; **PCP** と略称、**Metal-Organic-Framework (MOF)** とも言う) が新しい機能物質として登場してきました。また、結晶や無定形固体の中での孤立分子のふるまいが重要な研究対象となってきています。良い例は太陽電池や燃料電池の中での分子や分子集合体の振る舞いでしょう。金属タンパクの理論研究は進んでいますが、まだ、タンパク部分の構造最適化を含んだ反応解析はなされていませんし、さらに言えば、タンパクの揺らぎを考慮した電子状態計算は未だ不可能です。膜タンパクやイオンチャネルの分子論研究も不十分です。最近、細胞の中と試験管の中の相違が次々と実験的に指摘されています。分子科学はきれいな環境の中の分子の振る舞いを研究するのではなく、複雑な環境の中で、

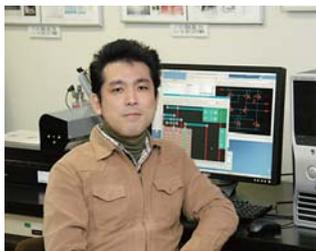
どのように分子が特性を発揮しているかを明らかにすることが求められてきていると考えます。このような新しい研究対象の登場以外にも、電子状態理論への統計力学的因子の取り込み、複雑な反応系の反応速度の理論的見積もりなど、理論化学・計算化学が解決しなくてはならない課題は目の前にいくつもあります。それらの諸問題の解決は従来の理論的方法ではなく、新しい次元の方法の登場を必要としている場合がほとんどです。この意味で、「実在系の分子理論の達成」という視点は今後も化学とその周辺分野に対して重要であると考えます。

以上のように、この3年間半で、理論化学・計算化学は大きく進展しました。もちろん、本特定領域が無くても進展して来たはずですが、本特定領域で理論化学・計算化学研究者、それに加え、理論化学・計算化学研究に期待する実験化学研究者が集まり、シンポジウムを開催し、お互いに研究交流をし、共同研究を行ったことが大きな刺激となり、大きな貢献をしていたと考えられます。特に、異分野間の交流、若手研究者間の交流の活発化は現時点に止まらず、今後5年後、10年度の大きな成果につながるはずですが、このような表にすぐに出ない長所が特定

領域研究にあります。それは、事後評価のヒアリングで紹介したいいくつかの研究成果と共に、むしろ、それ以上に大切な研究成果とも言えます。その意味で、特定領域研究、現在は、新学術領域研究となっていますが、このような科学研究費補助金制度は必要不可欠であり、我が国が乏しい予算で諸外国に対抗して研究成果を上げてゆくにはベストの制度と言えます。「特定領域研究を予算のばらまき」、と考える向きもありますが、決して、そのようなことはありません。異分野の研究者、世代を超えた研究者が同じ場で研究を議論し、進めることは非常に大切なことであり、このような協力体制を保障する新学術領域研究は、我が国が世界に誇るファンドと言えます。文部科学省、日本学術振興会もぜひ、この制度の長所を認め、育てて頂きたいと切望しております。

最後に、次世代スーパーコンピュータにも触れておきたいと思います。文部科学省が設定した5分野の内、第2分野「物質・エネルギー」で、分子科学研究所は、東京大学物性研究所、東北大学金属材料研究所とともに戦略拠点に選ばれました。東京大学物性研究所が取りまとめ機関とした計算物質科学研究拠点（CMSI）に参画し、分子

科学分野において、次世代スーパーコンピュータによる画期的な研究を展開するための活動を開始しています。本特定領域は、この次世代スーパーコンピュータには直接関係ありませんでしたが、班員は大きな関心を持っていました。次世代スーパーコンピュータが超高並列機であることから、分子動力学計算が適しているように考えられますが、電子状態理論もそれに対応する準備が進んでいます。本特定領域研究でも次世代スーパーコンピュータに適した理論・計算方法が提案されています。また、超並列計算機であることから、これまでの理論化学・計算化学研究に統計力学的視点を取り込める可能性もあります。反応過程の経路積分計算などが具体的候補としてすぐに上げられます。分子理論による研究に新しい息吹が吹き込まれることが期待されます。このように分子理論は基礎、応用双方の面で今後大きく発展し、今以上に化学と周辺分野において大きな存在になることを確信しています。そのような中で、「実在系の分子理論」と言う視点が、理論化学・計算化学において重要な役割を果たすことが出来ることを願って、拙文を終えたいと思います。



アナログ集積回路設計 技術習得に向けて

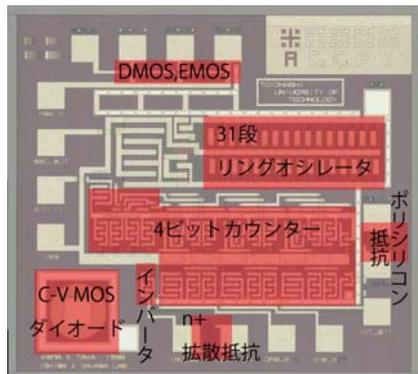
電子機器・ガラス機器開発技術班 内山 功一

電子機器開発技術係では、日々進歩する電子回路技術に対応できるよう常に心がけています。現在はアナログ集積回路設計技術、プログラブル論理素子によるカスタムIC設計技術、ワンチップマイコンを利用した組み込み制御回路技術、LANやUSBなどのインターフェース技術などに重点を置き技術の向上に努めています。その中でアナログ集積回路設計技術の習得の取り組みについて紹介します。この取り組みを始めたきっかけは、装置開発室室長である生体分子情報部門の宇理須教授が提唱するバイオチップを開発するために、デジタル・アナログ回路の集積化が必要な技術であったためです。また最近になってCMOSアナログ回路設計の技術情報が豊富になってきたことと、LSI試作サービスへのアクセスが比較的容易になったこともあげられます。この時点でスタッフ全員が半導体設計の経験もなく、半導体プロセスについてもよく理解していない、そんな状態からのスタートとなりました。

まず集積回路の試作についてですが、これは東京大学の大規模集積システム設計教育センター（VLSI Design and Education Center、以下VDEC）を利用して行うことにしました。VDECは、日本の国公立大学と工業高等専門学校におけるVLSI設計教育の充実と研究活動の推進のために発足された全国共同利用施設で、Cadence、Synopsys、Mentor Graphics社をはじめとする多くのEDA/CADベンダの最新設計ツールが無料で利用することができます。またVDECは、各チップベンダと提携してLSIの試作サービスも行っています。早速、開発環境を整えるべく専用のマシンを用意す

ることになりました。ここで問題になったのが設計を行うマシンのOSが不慣れなLinuxを選択しなければならないということでした。VDECで用意されているツール群は、基本的にUNIXベースで動作するものであったため、この選択は必須でした。そこで我々はPCにプリンストールされているLinux OSで入手しやすいRed Hat Linux Enterprise 5を導入することにしました。ここから設計環境の構築を行ったわけですが、先程申し上げたとおりスタッフ全員Linuxに不慣れなこともあってなかなかスムーズに作業を進めることができませんでした。中でも到底対処することができないクリティカルなトラブルは、その都度Linuxに詳しい計算科学研究センターの岩橋技術職員に装置開発室まで出向いていただき手助けをお願いしていました。

開発環境をなんとか整えることができたので、実際にLSI設計作業をどのように進めるかを理解するため、スタッフ全員でVDEC主催のトランジスタレベル設計講習会を受講することにしました。この講習会ではアナログ集積回路を設計し、VDECの試作サービスにデータを提出するまでの手順とその方法を理解することができました。この講習会の冒頭、MOSFETのレイアウト図を指し示して講師が「この絵を見てNMOSだとわかる人は手を挙げてください」との質問に「え、あれがNMOSなの？」と頭上に来るで漫画のようにクエスチョンマークがいくつも浮かんでしまいました。本当に自分が素人であるのだなと痛感したのを覚えています。他のスタッフも同じ思いだったようで、もう少し半導体プロセスや設計について学習する必要があると判

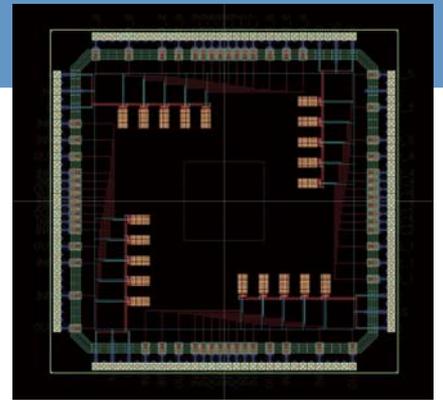


上：集積回路技術講習会実習作業風景
(手前：手老前助教、奥：筆者)
下：実習で製作したTEGチップ

断し週一回のペースで勉強会を行うことにしました。この勉強会は昨年の11月から開始して、教科書としては現在3冊目を継続して行っています。

VDEC講習会の内容がある程度理解できるようになった頃、宇理須教授の助力により豊橋技術科学大学のベンチャー・ビジネス・ラボラトリーが開催した第30回集積回路技術講習会を受講することができました。この講習会に参加することで、半導体プロセスについてより深く学べると期待してのことでした。参加者は例年20名前後らしいのですが、今年は続く不況の影響からか6名しかいませんでした。しかも内2名が分子研からの参加者（筆者自身と宇理須グループの手老助教）でした。講習会は6日間の日程で行われたので、製造に数ヶ月かかるCMOSプロセスではなくNMOSプロセスの実習が行われました。NMOSプロセスでも完成までに一週間近く時間がかかるため、講習会のほとんどの

設計した試作オペアンプレイアウト図



時間はクリーンルームでのNMOSプロセス実習作業を行っていました。実習で製作するチップはTEG (Test Element Group) と呼ばれるもので、LSIチップの特性評価用としてそのLSIで使用されている素子や要素回路を集めたものです。内容としては、EMOS (エンハンスメント型MOSFET)、DMOS (デプレッション型MOSFET)、E/DMOSインバータ評価回路、31段リングオシレータ、4ビットカウンタ、ポリシリコン・n+拡散抵抗評価素子、C-V特性測定用MOSダイオードとなっています。NMOSプロセスの実習は、フォトリソグラフィ法を使ってシリコン基板にマスクパターンを生成することが主な作業になります。これ以外の工程、酸化膜生成やイオン拡散、アルミ配線蒸着等は、すでにセッティングされている装置で行うので、作業中にそれぞれの装置で何を行っているのかの説明を受けながら待つといった感じでした。酸化膜生成などの長い時間必要な作業中は、講義の時間に当てられていました。講義は、半導体デバイスの基礎、MOS集積回路の基礎と製造技術、最新の集積回路技術について受講しました。それぞれの講義の後半は講師である先生方の研究内容についての話があり、どの先生もこちらに時間を費やしたいのではないかとと思うほど熱心に説明をされていました。実習と講義以外にわずかな時間ですがCAD講習も行われました。ここで使われたCADは、VDECで提供さ

れているものと同じであったため短い時間であったにも関わらずとても参考になりました。参加人数が少なかつたため、施設見学の時間も多くとっていただき、また従来行っていなかったLSIチップのパッケージング(ICパッケージとチップ間のボンディングを行い、回路素子として使用可能な状態)したものをいただくことができました。この講習会に参加できたことによって、LSIプロセスがどのような物なのかということが、より理解できるようになりました。ここまでで試作設計を行う準備が整ったと判断し、アナログ集積回路の試作設計を行うことにしました。試作チップは、最初ということと設計締め切りまでの時間的猶予も無かつたことから、3種類の差動入力オペアンプを複数個実装することにしました。設計で行う作業はおおまかに、機能ブロック設計(今回はオペアンプ) > シミュレーション > レイアウト設計 > ルールチェックとなります。これらの工程はシミュレーション結果やルールチェックの結果により、途中でもその前の工程に戻ってやり直しを行う必要があります。実際に設計を進めていくと、オペアンプ回路の設計が不十分だったり、レイアウトルールがおかしかったりと様々な問題が発生しました。問題が発生したらその都度一つずつ問題を解決しながら作業を進めたため、設計デー

タの作成は締め切り日の直前までかかってしまいました。最終的に特性の違う3種類のオペアンプを合計20個集積したチップを試作することになりました。

この試作チップの納入は2011年2月予定のため、残念ながら原稿執筆時点で手元に届いていない状況です。本来なら試作チップが正しく動作するのか、特性はどうかかなどのテスト結果や実際に出来上がったチップやパッケージングされた写真などを掲載できればベストなのですがそこまでは無理でした。今後の予定としては、試作チップの評価テストを行うことと、次回の試作に向けての準備を行います。次の試作では、今回のような単純機能素子(オペアンプ)を複数個パッケージングしたものではなく、オペアンプとコンパレータを組み合わせたPWM回路のような複合機能のより実用的なLSIを設計したいと思っています。

今回のLSI試作に関しては、今年度の大峯所長奨励研究費にて行っております。最後になりましたが、今回集積回路設計技術習得の機会を与えていただいた方々や、LSI試作設計までに助力いただいた方々に感謝いたします。

技術職員
OBの今

岡田 則夫

国立天文台 先端技術センター 主任研究技師

みなさん、こんにちは、お変わりありませんか？

私は1977年10月から1994年3月まで17年ほど技術課に勤務しておりました。装置開発室にて旋盤やフライス盤を使って実験装置などを製作しておりました。現在は国立天文台(三鷹)

先端技術センターで天文機器開発(引き続き機械工作)をしています。天文台在籍もまもなく17年になろうとしていまして、あらためて年月の経過の速さに驚いております。天文台に移ってからも分子研の皆さんには、いろいろとお世話になっています。

特に装置開発室の皆さんには、天文台との共同開発研究や技術的な相談などで頻繁にお世話になっており、この場をお借りしてお礼申し上げます。

昨年、山手地区を訪れる機会があり、初めて建物の中に入ったのですが、その大きさにびっくりいたしました。愛

分子研技術課

教大のグラウンド跡はソフトボールの試合が同時に4つできるほど大きな面積と記憶しておりましたが、今は聳え立つような巨大な研究棟に変貌していて頼もしいと思うかわら、多くの思い出が残るグラウンドの消滅にちょっぴり寂しさも感じました。

さて、ここからは現在の職場についてお話しします。

国立天文台は岩手県水沢、長野県野辺山、岡山県鴨方、米国ハワイ島に観測所があり、他にも小笠原諸島父島、鹿児島島入来、石垣島、南米チリにも望遠鏡など観測施設があります。国立天文台三鷹キャンパスは、これらの本部になっています。国立天文台のスタッフ数は総勢5百人ほどで、その約半数の250人ぐらいが三鷹キャンパスにいます。

私の所属する先端技術センター(Advanced Technical Center 略してATCと呼んでいます)は60人ほどのスタッフで、天文機器開発の中核を担っていて、現在は①南米チリのALMA計画に用いる受信機カートリッジの開発、②すばる望遠鏡搭載用次世代主焦点カメラの開発、③ミリ波からサブミリ波帯の電波カメラの開発、④次期太陽観測衛星や太陽偏光観測ロケット開発などが重点的に行われています。天文台の工作工場はこのセンターの中にありMEショップ(Mechanical Engineering Shop)と呼ばれていて、これらの開発

チームや共同利用研究者からの依頼を受け、設計から機械加工、出来上がったものの形状測定まで一貫して行なっています。特に①では約3年間にも及ぶ受信機カートリッジの主要部品の量産加工(73台)を担当しています。また最近は上記以外にも2011年8月に打ち上げ予定の超小型位置天文観測衛星(Nano-JASMINE)のミッション部構造体のフライト部品も製作担当するなど、とても繁盛しています。スタッフは30代4名、40代2名、50代1名、60代1名の合計8名の構成です。主力の工作機械はマシニングセンター1台、NC操作フライス盤4台、CNC旋盤2台、ワイヤー放電加工機1台などです。分子研の工作では材料はSUS304に代表されるステンレス鋼が多かったのですが、天文台では約8割がアルミ合金です。板材はA5052、丸棒材はA5056やA6061などを用いています。加工に使用する機械は分子研では旋盤とフライス盤が半々ぐらいに思いましたが、天文台では約8割がフライス盤を用いる加工になっています。真空装置、低温に関する実験装置の製作依頼も時にはあります。分子研のような質の高い超高真空などは皆無ですが、O-リングを使用する中真空程度の断熱真空用デュワーの部品製作は割りと頻繁にあります。真空デュワーの中で使用する温度伝達用の無酸素銅製の熱パスもしばしば作り

ます。銅の部品の接合には酸素+アセチレンガスをを用いたバーナーで銀口一付けも行います。アルゴンアーク溶接機もありますがステンレスの加工が滅多にないため出番はあまりありません。私は溶接作業が好きでしたが、腕を発揮する機会がなく、とても残念です。

MEショップの主力機械には、上記に加えもう一つ、超精密非球面加工機があります。これはいわゆる鏡面加工を実現できる極めつけの工作機械で、単結晶ダイヤモンド工具を用いて非鉄金属を素材とする金属ミラーの切削加工を得意としています。分子研装置開発室、名古屋大学全学技術センター、国立天文台MEショップの3者はこの機械を通じ、脆性材への延性モード加工実験などの共同開発研究を4年ほど続けており、超精密加工技術の追求を通じて交流と連携を深めています。いつもながら思うのですが、共同実験に来てくれる若手の技術者はどなたも研究心が旺盛で素晴らしく、頼もしい限りです。

最近の私についてですが、会議やなんやで、機械の前に立つことがめっきり少なくなりました。「昔取った杵柄」で多少の自信はあるのですが、車の運転みたく、やらないと鈍ってしまう現実に直面しているところです。なんちゃって。

長くなりましたが、近況報告まで。

みなさま、今後ともよろしく願いいたします。



国立天文台 先端技術センター



MEショップ

COLUMN

ドイツ滞在記

小野木 覚

総合研究大学院大学物理科学研究科機能分子科学専攻

おのぎ・さとの

名古屋大学理学部化学科を卒業後、平成19年に総合研究大学院大学物理科学研究科機能分子科学専攻へ入学、現在5年一貫制博士課程4年。分子スケールナノサイエンスセンター櫻井グループにて、非平面共役分子バッキーボウルのひとつ「スマネン」に、窒素や酸素などの「ヘテロ原子」を導入する研究に取り組んでいる。

ドイツベルリン自由大学Lentz研究室。左から2番目が筆者。右隣がLentz教授。



2007年4月1日に5年一貫制博士課程の1年生として入学してから早くも4年の月日が経とうとしており、入学当初は8人だった櫻井グループのメンバーもべで55名を超えました。数えてみて驚くことにそのうち30名が外国からの研究者で、私の分子研での日々の半分以上は半数上の外国人研究者に囲まれていたことになります。このような環境で3年、4年と過ごしていると、日常的に英語でコミュニケーションが必要で、まるで日本に居ながら語学留学をしているようでした。このコラムではその経験を活かせる絶好の機会だった、ドイツへの滞在について記したいとおもいます。

事の始まりは、ドイツから3ヶ月の短期滞中に櫻井グループへやって来たBernd君とベルリンの話をしていた時のことでした。「君はベルリンに研究しに来る気はないか？」初めは話の流れから出た社交辞令的なものだと思っていましたが、それからすぐに担当教官の櫻井英博准教授からも「ドイツ行きたい？」とお話を頂きました。詳しい話を聞いてみると、Bernd君のボスであるDieter Lentz教授が、一人研究者を招いてくれるとのことでした。これはまたとないチャンスだと思い、二つ返事で「行きたいです」と言いたい

所でしたが、10月には総研大のセミナーでタイ、12月には学会でハワイに行く事が既に決定しており、こんなに海外にばかり行ってよいものか悩みました。しかし、最終的にドイツへ行って研究が出来るという魅力が勝ち、2010年11月のドイツベルリン自由大学Lentz研への滞在が決定しました。

「滞在先のベルリン自由大学は東西ベルリン時代に、東側の統制的な大学運営に反発した学生や教員達が、西側のダーレム地区に古い民家などをキャンパスとして創立された大学で、大学周辺は住宅街なので大きな商業施設は少し離れた所にバスで行く必要がある。」などなど、事前に知るべき情報は、日本に滞在中だったBernd君より十分に聞く事ができ、ベルリンまでの航空券をおさえた後はまったくスムーズに準備が整って、出発の日を迎える事が出来ました。

到着したベルリンテーゲル空港へは、やはりBernd君とそのガールフレンドのBeritさんが迎えに来てくれていました。このふたりは大の親日家で日本へ3回訪れており、そのうち2回おおよそ半年間を櫻井グループで共に過ごしました。特にBernd君は年齢も学年も同じで気が合う友人として、ラーメン屋を案内したり、観光スポットを紹介した

りする仲となり、今回のドイツ滞在中でもいろいろとお世話になりました。そんな訳で、お互いに「ここが日本ではなくドイツなのが信じられない、夢のようだ」と言いながら私のドイツ滞在がスタートしました。

ベルリン自由大学はベルリンの南西に位置するダーレム地区にあり、その創立の歴史からかいったいどこが境目なのかわからない程、まわりの住宅街にだけ込んでいました。そのなかでひと際目立つ背の高い建物が私が通った無機化学研究棟でした。周りにはレンガ調の茶色っぽい建物が多いなか、比較的新しいダークグレーのタイルで覆われた鉄筋コンクリート造の研究棟はとても印象的で、Lentz先生や学生たちは「アグリーな建物だ」と嫌っていました。このようにドイツ人が伝統的なものを愛するところは、ベルリンの町並みや会話の端々にみられ、なんだかドイツの文化に触れることが出来た気がします。

さて、日本からのお土産も無事渡したところで、研究を初めるにあたりLentz先生とディスカッションを行う事にしました。私はそのディスカッションで、具体的な実験内容や予定などを決めるつもりで臨んだのですが、なかなか話が具体的にならず、大学の歴史

やら化学の歴史やらなんだか昔話のようになってしまいました。はじめは私の英語力の問題かと悩んでいましたが、ラボのメンバーにその話をすると、みな声をそろえて「先生はそういう人だから仕方ないさ」と大笑い。彼らの助言を受けて、具体的な研究予定を立ててディスカッションに臨むと「それは面白い是非やろう」と、5分で終了してしまいました。確固たる自分の意志を持ってディスカッションに向かう事の大切さを痛感した瞬間でした。

Lentz研は教授と学生がいるだけで、

助教やポスドクなどのスタッフがいません。そんな環境とLentz先生の人柄のおかげで、学生はそれぞれ独立した考えを持っていて、研究も個々が自分のアイデアで進めているようでした。もちろん先生は助言をくれますが、いき詰まるまでは自分でなんとかする習慣が根付いているようで、日本でも見習いたいと思います。また、活動時間は朝は9時頃から夜の7時頃で、日本と比べると短いように感じましたが、そのぶん集中して研究に取り組む事ができ効率的に進める事ができたように思

います。これも日本に持ち帰りたい習慣の一つです。

今回のように短い期間ながら海外で生活する機会を頂き、日本での研究生活にあらたな視点を持ち帰る事ができたように感じます。また、英語でのコミュニケーション能力や外国人と意思疎通を行う能力は、分子研での生活で確実に養われている事が確認できました。このような機会を与えてくださった櫻井先生やLentz先生に心から感謝いたします。

E V E N T R E P O R T

学生報告 平成22年度海外総研大レクチャー

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 杉浦 晃一

平成22年11月22日から4日間にわたり海外総研大レクチャーに参加し、タイのチュラロンコン大学を訪問しました。私は、「アジアの学生と交流してみたい、英語の研究発表をしてみたい」と思い参加を決めました。まず驚いたのは、タイの学生が話す英語の流暢さです。私も流れるように英語が出てくればいいなど実感しました。次に驚いたのが、タイの料理です。非常に辛いものが多く、香草のパクチーで味付けしてあり、日本にはない香ばしい味のものが多かったように思います。

チュラロンコン大学において、両大学の先生方の研究活動について講義を受けました。3分間の口頭ポスター紹介では、英語のプレゼンテーション

に戸惑いながらも、学生全員が英語で説明することができました。その後のポスターセッションでも、英語でのポスター発表なので説明が難しい反面、次回の発表への課題がわかり大変勉強になりました。また本レクチャーに宇宙科学専攻の学生が参加したことで、専攻間を超えた異分野学術交流の場ともなりました。

昨今、学術領域でも若者が海外に行きたがらないという傾向が強いと報道されていますが、海外総研大レクチャーをきっかけに「海外で自分の研究結果を発表したい」という積極的な学生がもっと増えればいいなと思います。



Koichi Sugiura

豊橋技術科学大学工学部電気・電子工学課程を卒業後、平成20年4月に総合研究大学院大学物理科学研究科機能分子科学専攻へ入学。現在、五年一貫性博士課程3年。電子物性研究部門中村グループにて磁気共鳴装置やX線構造解析を用いた有機導体TMTTF塩の電子状態研究に取り組んでいる。



学生報告 平成22年度海外総研大レクチャー

物理科学研究科宇宙科学専攻 5年一貫制博士課程4年 三浦 政司

10月20日から二日間にわたり、バンコクのチュラロンコン大学にて、CU-IMS JOINT SYMPOSIUMが開催されました。私は分子研ではなくJAXA宇宙科学研究所にて研究を行っている他専攻の学生なのですが、海外総研大レクチャーの一環としてこのシンポジウムに参加させていただきました。

シンポジウムでは、日本・タイ両国の研究者による分子科学のホットな話題についてのレクチャーと、参加学生によるポスター発表が行われました。レクチャーでは講演者の皆様分かりやすくかつ魅力的に研究の話をして下さったので、専門外である私でもとても楽しむことができました。逆に、ポスター発表においては自分の専門分野の話を知りやすく異分野の方達に説

明しなければならず、その大変さを実感しました。また、シンポジウムの合間や夕食会などにおいては、タイの学生や分子研の学生たちとお互いの研究生活や文化などについて語り合い、交流を深めることができました。

私は学際交流と国際交流を通して視野と見識を深めることを求めて今回のシンポジウムに参加することを希望したのですが、この目的を十分に達成することができたと思います。エキゾチックなバンコクの地にて、分子というミクロで魅力的な世界に思いを馳せた時間は、私にとって非常に有意義な経験になりました。このような素晴らしい機会を与えて下さった分子研およびチュラロンコン大学のオーガナイザーの皆様はこの場を借りてお礼を申し上げます。

Masashi Miura

東京大学工学部を卒業後、総合研究大学院大学物理科学研究科5年一貫博士課程に入学（平成18年）。JAXA宇宙科学研究所にて、ロケット飛翔体の誘導制御に関する研究に取り組む。研究活動の傍ら、学際的ワークショップの企画や水ロケットを用いた宇宙教育活動などを展開している。



E V E N T R E P O R T

教員報告 第7回夏の体験入学

2010年度担当教員 分子スケールナノサイエンスセンター 准教授 永田 央

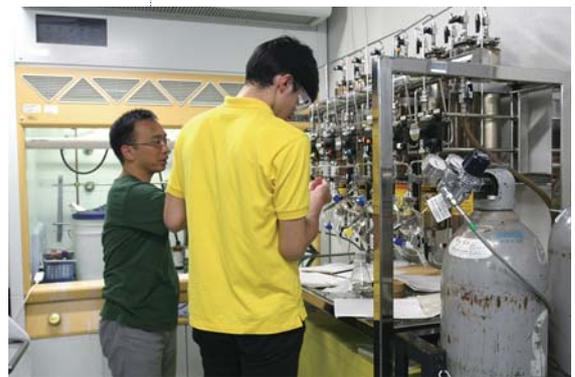
総研大広報事業の1つである分子科学研究所夏の体験入学は、今回7回目となりました。この事業は、全国の大学生・大学院修士課程の学生を対象に、分子研での研究活動を実際に体験し、研究所を基盤とする大学院大学の魅力と特色を知ってもらうことを趣旨としています。今年は、8月9日～12日の4日間に開催し、24名（留学生2名を含む。男性15名、女性9名）の参加がありました。学年の内訳は、B1:1名、B2（高専5年を含む）:7名、B3:9名、B4:4名、M1:3名でした。

スケジュールは例年と同様、初日午後からオリエンテーション、UVSORと計算科学研究センターの見学のあと歓迎会を行いました。2日目・3日目は研究体験で、2日目の夜に研究所若手中心の懇親会を実施しました。最終日に行った内容報告会は非常に力が入ったもので、参加学生たちがそれぞれの

研究室で有意義な体験をしたことがよく伝わってきました。各研究室で工夫をこらし、大変な手間をかけて接していただいた成果があったと思います。

アンケートで「進路の選択肢として総研大に関心がある」と7割程度の人が答えています。入学者確保のための広報事業としては、少なくとも入り口としての役割は果たしていると言えます。一方、総研大の入学志願者・合格者は漸減傾向にあり、入学者を増やすという結果には必ずしもつながっていません。総研大を「知ってもらう」という努力は重要ですが、入学者の確保につながるためには別方向の努力も続けて行く必要があります。

この事業は、総研大特定教育研究経費「新入生確保のための広報的事業」、および「物理科学研究科大学院教育改革推進プログラム」の一環として行われました。財政支援にご協力をいただきました物理科学研究科と総研大葉山本部の皆様方、および実施にご協力いただいた分子研関係者の皆様方に御礼を申し上げます。



参加者感想 新潟大学大学院自然科学研究科 学部1年 池田 悠

私は今年度のオープンキャンパスで分子研を訪れ、最先端の研究の講義をしていただいたり、分子研の方々ともたくさん貴重な話をすることができ、とても実りの多い経験をさせていただいた事が縁となって今回の体験入学に参加しました。

私は大学で錯体化学を専攻しているのですが、今までしたことがない分野に触れてみたいと思い、木村先生のもとで「固体表面電子の相対論効果をみよう！」という実験をさせていただきました。全く予備知識もなかったのですが、丁寧な指導のおかげで実験も

スムーズに進み様々な知識を身に付けることができました。細かい作業が多く、丁寧に作業を進めなくてはいけなかったのが大変でしたが、一つの現象を調べるためのプロセスを学べたことや、概念を学べたことは大変貴重だったと思います。

今回の体験入学では、新しいことを学び、新しい友人ができ、とても密度の濃い時間を過ごすことができました。今後も分子研の方々や今回できた友人と学会などでお会いすることがあると思います。人脈をつくるという意味でも今回の体験入学は大変有意義だった

と思います。

最後になりますが、開催してくださった関係者の皆様、受け入れてくださった木村グループの皆様に深く御礼申し上げます。



E V E N T R E P O R T

学生報告 平成22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1年 Fei Wang

I joined the student seminar of SOKENDAI during October 7th to 8th, which I would keep it in my memory as a forever treasure. The deepest impression is that all of the new students were separated into 5 groups and the team members worked together to competed with other teams.

It is a precious experience to me since I have never had such an experience of communicating with so many foreigners. To me, it is a tough work to discuss in English,

however, we cooperated with each other smoothly.

It is also an inspiration to all of us. Because of the different culture of our own, it was difficult to meet an agreement and everyone had to persuade the opposite site. Although it was a competition to us, it inspired us for everyone got the benefit of another eyes of his culture.

The Japanese culture gave us unlimited joy. Origami and handwriting pulled the student

seminar to a highlight and everybody immersed into the atmosphere of Japanese culture.

I really enjoyed myself in the student seminar for the diversity of culture, for the happiness atmosphere and the wonderful food provided for us.

Fei Wang

中国の福州大学で学士の学位を取得後、平成22年10月に総合研究大学院大学物理科学研究科構造分子科学専攻5年一貫制博士課程へ入学。新たな気持ちで触媒化学の研究を行っています。



学生報告 平成22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1年 Mahesh Chandak

The student seminar for the year of 2010 was held on 7 to 11 October, 2010. Seminar was full of different personal and group activities. It was started with the Musical performance followed by president's message. Prof. Friedrich Paul had given interesting lecture about knowledge, imagination and ethics. After lecture all new students were divided into few groups for free discussion on the topic of knowledge and imagination. It was nice platform to discuss with each other, to acknowledge others views and to gain knowledge because all students were from different background. On the second day,

Dr. Genshiro Kitagawa presented lecture on scientific research in the information era with the broad prospective about creation of knowledge. After this lecture we had group photos and special interactive activities. Finally, university arranged Japanese culture and Japanese language course. Different traditional celebrations, a tour to museum which has variety of artistic collection, short summary of ongoing Antarctic research and course of Japanese language were fascinating events for remaining days. I appreciate the efforts of student committee for arranging such a wonderful seminar.

I thank you to the respected

president and professors for all concern and spending time with new student.

Mahesh Chandak

I have Obtained my Masters in Biophysics from Government Institute of Science,India.

After having research exposure at Advanced Centre for Treatment, Research and Education in Cancer (ACTREC), Mumbai, India, I worked as a Faculty for 2.5 years at Department of Physiology,MGM Medical College,India. Now I am doing my PhD a Department of Functional Molecular Science, Institute of Molecular Science. My research work includes a molecular medicine oriented interdisciplinary research project focussed on protein structure and dynamics.



受賞者紹介

平 義隆 (UVSOR特別共同利用研究員)

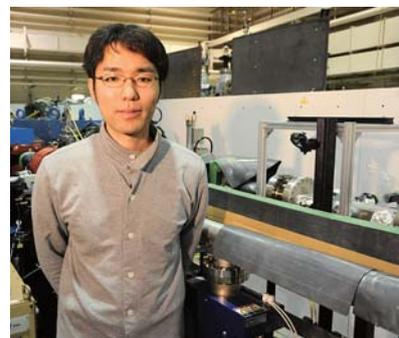
第53回放射線化学討論会 若手優秀講演賞および第23回日本放射光学会年会 JSR10学生発表賞

この度、「レーザーコンプトン散乱を用いた超短パルスガンマ線の発生*」に関する研究発表に対して、第23回日本放射光学会年会においてJSR10学生発表賞、第53回放射線化学討論会において若手優秀講演賞を受賞致しました。

私は、名古屋大学大学院工学研究科の博士課程に在籍しており、2009年の5月から特別共同利用研究員として分子研のUVSORにお世話になっています。現在は、加速器を用いた新しい光源開発の研究を行っていますが、過去には全く別の研究を行っていました。修士課程までは、名古屋大学大学院理学研究科に在籍し、原子核乾板と呼ばれる検出器を用いた素粒子実験系の研究室に所属していました。私は、その検出器を加速器周辺で発生する漏洩放射線測定に応用する研究を行っていました。その研究過程で、加速器を用いた量子

ビーム発生に興味をもち、博士課程進学を機に工学研究科で量子ビーム応用を研究している曾田研究室に進学し、UVSORの加藤政博教授に受託学生として受け入れて頂きました。UVSORでは、フェムト秒レーザーを高エネルギー電子ビームに衝突させることでサブピコ秒のガンマ線パルスを生成する技術の開発に取り組んでいます。

博士課程から研究テーマを変えて、新たに研究を始めることに一抹の不安がありましたが、修士課程のときに培った基礎的な知識と現在の研究グループの皆様の指導の下、研究を進めてきました。UVSORは、放射光施設として、大学共同利用が実施されており、加速器を利用した新たな光源開発に割ける時間は決して多くは無く、私の研究に割けて頂ける時間はさらに少ないです。しかし、その限られた時間で研究成果をあげる



ために、計画的に研究に取り組んできました。入念なシミュレーションや実験の準備を行い、研究成果をあげることができました。今回、この努力がこのような形で評価されて大変嬉しく思っています。今後は、世界でまだだれも試みたことのない、ガンマ線のパルス幅測定とその利用方法の開拓に挑戦していこうと思っており、粛々と実験準備に励んでいます。

*Y. Taira, et al., Nucl. Instr. and Meth. A, in press 2010.

平成22年度9月総合研究大学院大学修了学生及び学位論文名

専攻	氏名	博士論文名	付記する専攻分野	授与年月日
構造分子科学	尚 治国	Study of Sphingomyelin/Cholesterol/Ganglioside GM1-SPB Domain Structures Which Accelerate Amyloid Beta Aggregation Reactions	理学	H22. 9.30
機能分子科学	渡部 敏裕	Development of Catalytic Membrane-Installed Microchannel Devices and Their Application to Organic Transformations	理学	H22. 9.30
	後藤 悠	Using high-precision coherent control to investigate molecular wavefunctions distorted by intense femtosecond laser pulses; Toward a model study of decoherence	理学	H22. 9.30

総合研究大学院大学平成22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	王 飞 (Wang Fei)	物質分子科学研究領域	表面固定化 Ru3 核クラスターを用いたニトリル類の水素化
	陳 雄 (Chen Xiong)	物質分子科学研究領域	Design and Functions of Two-Dimensional Macromolecules
	金 尚彬 (Jin Shangbin)	物質分子科学研究領域	Design and Functions of Novel Organic Porous Polymers
機能分子科学	Shrestha Binod Babu	分子スケールナノサイエンスセンター	Synthesis of Novel Buckybowls & its Derivatives
	Chandak Mahesh Shantilalji	岡崎統合バイオサイエンスセンター	Hydrogen-exchange kinetics of supermolecular protein complexes studies by the 920MHz NMR spectroscopy

各種一覧

■分子研研究会

開催日時	研究会名	提案代表者	参加人数
平成22年 6月18日～19日	プラズモン増強光電場の分子科学研究への展開	井村 考平 (早稲田大学理工学術院)	41名
平成22年10月 5日～ 6日	グリーンイノベーションのための表面・界面化学	松本 吉泰 (京都大学大学院理学研究科)	54名
平成23年 1月 7日～ 8日	分光学が係わるクラスター科学および機能性ナノ構造体科学の将来展望	西 信之 (分子科学研究所)	41名
平成23年 1月 8日～ 9日	金属錯体の機能化の現状と将来展望	田中 晃二 (分子科学研究所)	35名
平成23年 1月13日～14日	大強度テラヘルツ光の発生と利用研究	木村 真一 (分子科学研究所)	51名

■若手研究会等

開催日時	研究会名	提案代表者	参加人数
平成22年 7月 2日	分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会	大滝 大樹 (京都大学大学院理学研究科)	15名

■分子科学フォーラム

回	開催日時	講演題目	講演者
第85回	平成22年 6月16日	水、水、水：不思議な水のミクロの世界	大峯 巖 (分子科学研究所)
第86回	平成22年 9月 3日	化学は“くすりづくり”にどのように役立っているか	大島 正裕 (田辺三菱製薬株式会社)
第87回	平成22年11月 5日	「はやぶさ」が挑んだ 世界初の往復惑星飛行	川口淳一郎 (宇宙航空研究開発機構)
第88回	平成23年 1月14日	益川流・フラフラのすすめ	益川 敏英 (名古屋大学素粒子宇宙起源研究機構)

■分子研コロキウム

回	開催日時	講演題目	講演者
第824回	平成22年 7月21日	21世紀の有機伝導体	森 健彦 (東京工業大学大学院理工学研究科)
第825回	平成22年 9月24日	Cruising inside cells	宮脇 敦史 (理化学研究所)
第826回	平成22年11月19日	量子化学計算の二極限	平田 聡 (イリノイ大学アーバナ・シャンペン校化学科)
第827回	平成22年12月24日	動的構造科学は新しい物質科学につながるのか？	腰原 伸也 (東京工業大学理工学研究科)

■人事異動 (平成22年6月2日～平成22年11月1日)

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
22. 6.30	伏谷 瑞穂	辞職	名古屋大学大学院理学研究科 助教	光分子科学研究領域光分子第三研究部門 助教	
22. 6.30	TSENG, Chien-Ming	辞職	Institute of Atomic and Molecular Sciences Post Doctral Researcher	光分子科学研究領域光分子科学第三研究部門 研究員	
22. 6.30	久保田 陽二	退職	九州大学 ポストドクター	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 研究員	
22. 6.30	福田 達哉	退職		光分子科学研究領域光分子科学第三研究部門 技術支援員	
22. 7. 1	SINDHIKARA, Daniel Jon	採用	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第二研究部門 専門研究職員		
22. 7. 1	竹中 健朗	採用	岡崎統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域 研究員		
22. 7. 1	CHEN, Jin	名称付与	岡崎統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域 専門研究職員(特任助教)	岡崎統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域 専門研究職員	
22. 7.16	LIM, Jong Kuk	採用	光分子科学研究領域光分子科学第一研究部門 研究員	米国 Northwestern University Postdoctoral Researcher	
22. 7.17	GUO, Zhaoqi	採用	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 研究員		
22. 7.31	PAVEL, Nicolaie	退職		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	
22. 8. 1	高塚 和夫	兼任	理論・計算分子科学研究領域理論・計算分子科学第一研究部門 教授(兼任)	(東京大学 大学院総合文化研究科 教授)	
22. 8. 1	JOLY, Simon	採用	分子制御レーザー開発研究センター先端レーザー研究部門 専門研究職員	フランスグルノーブル理工科大学グルノーブル電気工学研究所 研究員	
22. 8.10	LUO, Guangfu	採用	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 専門研究職員		
22. 8.16	宮脇 真紀子	採用	分子スケールナノサイエンスセンター ナノ分子科学研究部門 技術支援員		
22. 8.16	中川 貴文	採用	岡崎統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域 研究員	イスラエルワイツマン研究所 博士研究員	

各種一覧

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
22. 8.21	GHOSH, Manik Kumer	採用	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 専門研究職員	ノルウェー SINTEF Materials and Chemistry 博士研究員	
22. 8.31	長谷川 宗 良	辞職	東京大学大学院総合文化研究科 准教授	光分子科学研究領域光分子科学第一研究部門 助教	
22. 8.31	手 老 龍 吾	辞職	豊橋技術科学大学エレクトロニクス先端融合研究センター 特任助教	生命・錯体分子科学研究領域生体分子情報研究部門 助教	
22. 8.31	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	
22. 8.31	森 田 将 人	退職	台湾原子分子研究所 博士研究員	理論・計算分子科学研究領域(慶應義塾大学理工学部勤務) 専門研究職員	
22. 9. 1	永 井 篤 志	採用	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 助教	京都大学大学院工学研究科 研究員	
22. 9. 1	西 岡 圭 太	採用	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第二研究部門 研究員(IMS フェロー)	高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 研究員	
22. 9. 1	ZHANG, Shenghong	採用	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 研究員		
22. 9. 1	MURSHED, Mushfeka	採用	生命・錯体分子科学研究領域生体分子情報研究部門 技術支援員		
22. 9. 2	BHANDARI, Rakesh	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 専門研究職員	インド Infres Methodex Ltd.	
22. 9.27	SERVE, Olivier Pierre Andre	辞職		岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 研究員	
22. 9.30	田 中 雅 人	退職	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	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 研究員(IMS フェロー)	
22. 9.30	WANG, Fei	辞職		物質分子科学研究領域電子構造研究部門 技術支援員	
22. 9.30	YUE Yue	退職		物質分子科学研究領域電子物性研究部門 研究員	
22. 9.30	BAIG, Nasir Rashid Baig	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	
22. 9.30	安 念 小百合	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 技術支援員	
22.10. 1	矢 野 隆 行	昇任	技術課機器開発技術班機器開発技術一係 主任	技術課機器開発技術班機器開発技術一係 係員	
22.10. 1	近 藤 聖 彦	昇任	技術課機器開発技術班機器開発技術二係 主任	技術課機器開発技術班機器開発技術二係 係員	
22.10. 1	内 山 功 一	昇任	技術課電子機器・ガラス機器開発技術班電子機器開発技術係 主任	技術課電子機器・ガラス機器開発技術班電子機器開発技術係 係員	
22.10. 1	林 憲 志	昇任	技術課光技術班極端紫外光技術二係主任	技術課光技術班極端紫外光技術二係係員	
22.10. 1	岡 野 芳 則	昇任	技術課機器利用技術班機器利用技術二係 主任	技術課機器利用技術班機器利用技術二係 係員	
22.10. 1	原 田 美 幸	昇任	技術課学術支援班学術支援係 主任	技術課学術支援班学術支援係 係員	
22.10. 1	OBULI RAJ, Senthil Kumar	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	島根大学 博士研究員	
22.10. 1	田 中 雅 人	採用	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 専門研究職員	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 研究員(IMS フェロー)	
22.10. 1	後 藤 悠	採用	光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 研究員	分子科学研究所 研究支援員(RA)	
22.10. 1	山 中 優	採用	岡崎統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域 研究員	広島大学大学院生物圏科学研究科 研究員	
22.10.13	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		
22.10.31	GUO, Jingdong	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	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 研究員	
22.10.31	中 井 直 史	退職		生命・錯体分子科学研究領域生体分子情報研究部門 技術支援員	
22.11. 1	GUO, Jingdong	採用	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 専門研究職員	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 研究員	
22.11. 1	山 上 由希子	採用	光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 技術支援員		

編集後記

小杉委員長から分子研レターズの編集委員を拝命し、期待と不安の入り交じる中、初めての編集会議に出席した。どこか他人事のように会議の時間を過ごしているそのときに、「次号の編集担当は古谷さんで」と聞き間違いかと思うような発言が。これまでは分子研関係者の様々な意見に考えさせられ、最先端の研究成果について楽しませて頂くだけの一読者だったのですが、その私が編集担当！？「初めての人でもできるように編集作業を見直したから。」と小杉委員長の不敵な笑みが忘れられません。過去の分子研レターズを史料編纂室から取り寄せて、実験の合間に読んだりしてみたものの、重責に押しつぶされそうな気持ちにも成りました（知り合いの先生方の若かりし頃の写真を発見して楽しんだりもしましたが）。しかし、実際に編集作業を進めてみると、多くの作業をレターズ担当秘書の鈴木さんに助けて頂いて、ほとんど私がするようなことはありませんでした。また、他の編集委員の方々には担当の執筆者に原稿の依頼と入稿をして頂きました。締め切り日を過ぎてからは少しジリジリとする気持ちもありましたが、良い原稿を頂ければという思いで、できるだけ催促はせずに待たせて頂いたので、デザイン担当の原田さんにも色々のご心配をお掛けしました。レイアウトが完了した出来たての63号を拝見したときは、大げさかもしれませんが我が子を初めて見るのに少し似たような気持ちになりました。最後に、ご多忙の中、御執筆頂いた皆様方に深く感謝致します。

編集委員長 古谷 祐詞

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。また、投稿記事も歓迎します。下記編集委員会あるいは各編集委員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

ご希望の内容について下記編集委員会あてにお知らせ下さい。

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/know/publication.html>

I M S Letters

分子研と研究者をつなぐ

VOL. 63

分子研レターズ

発行日 平成23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 小 杉 信 博（委員長）
古 谷 祐 詞（編集担当）
大 迫 隆 男
加 藤 晃 一
木 村 真 一
斉 藤 真 司
櫻 井 英 博
平 等 拓 範
西 村 勝 之
見 附 孝 一 郎
柳 井 毅
原 田 美 幸（以下広報室）
寺 内 か え で
中 村 理 枝
鈴 木 さ と み

デザイン 原 田 美 幸

印刷 株式会社コームラ

