

# 分子研レターズ

VOL. **64**  
SEPTEMBER 2011  
ISSN 0385-0560

●レターズ

## 分子研は生命科学に どう取り組むべきか？

神取 秀樹 [名古屋工業大学大学院工学研究科・教授]

●巻頭言

### 「双子」の使命

高畑 尚之 [総合研究大学院大学・学長]

●共同利用研究ハイライト

### 計算科学の超精密化と巨大化

中辻 博 [量子化学研究協会研究所]

●分子科学の最先端

## ナノ構造体における 光と物質の相互作用と 量子デバイス科学への展開

信定 克幸 [理論・計算分子科学研究領域・准教授]

●特別企画「震災関連特集」

### 科学コミュニケーションと「第3の波」

横山 広美 [東京大学大学院理学系研究科・准教授]

大学・研究機関からの報告 5件

## 巻頭言

- 01 「双子」の使命 ● 高畑 尚之 [総合研究大学院大学・学長]

## 震災関連特集

- 02 科学コミュニケーションと「第3の波」
- 
- ～震災後を経て専門家の情報発信に必要なシステムを考える～
- 
- 横山 広美 [東京大学大学院理学系研究科・准教授]

- 04 大学・研究機関からの報告 5件

## レターズ

- 10 分子研は生命科学にどう取り組むべきか？
- 
- 神取 秀樹 [名古屋工業大学大学院工学研究科・教授]

## 分子科学の最先端

- 13 ナノ構造体における光と物質の相互作用と
- 
- 量子デバイス科学への展開 ● 信定 克幸 [理論・計算分子科学研究領域・准教授]

## IMSニュース

- 16 所長招聘研究会「2020年の物質分子科学を語るII」
- 
- 17 3機関若手交流会開催報告
- 
- 18 学協会連携分子研研究会「分子科学会シンポジウム(第5回)」報告
- 
- 19 宇理須教授・西教授・薬師教授退職記念の会
- 
- 20 分子研実験棟耐震改修工事
- 
- 22 受賞者の声
- 
- 26 国際研究協力事業報告

## IMSカフェ

- 33 New Lab —— 正岡 重行
- 
- 35 分子研出身者の今 —— 森田 明弘 / 高橋 聡
- 
- 38 分子研出身者の今 受賞報告
- 
- 39 分子研を去るにあたり
- 
- 43 外国人研究職員の紹介
- 
- 44 外国人研究者の印象記
- 
- 45 新人自己紹介

## 共同利用・共同研究

- 49 共同利用研究ハイライト —— 計算科学の超精密化と巨大化 中辻 博 [量子化学研究協会研究所・所長]
- 
- 53 施設だより
- 
- 54 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

- 55 運営に関わって —— 緑川 克美 [理化学研究所・主任研究員]
- 
- 56 関連学協会等の動き

## 大学院教育

- 62 コラム —— 岡崎を去るにあたり 谷川 貴紀 [機能分子科学専攻修了生]
- 
- 63 総研大ニュース
- 
- 64 イベントレポート
- 
- 67 受賞者紹介
- 
- 68 修了学生及び学位論文名
- 
- 68 新入生紹介

21 トピックス  
分子科学フォーラム

48 IMS Space

69 各種一覧

# 「双子」の使命

高畑 尚之

総合研究大学院大学 学長



大学共同利用機関を母体とする総合研究大学院大学（総研大）の学長としてはいささか恥ずかしいことかも知れない。国立教育政策研究所の徳永保所長から、思いも及ばなかったことを最近教えていただいた。それは分子研の設立と密接に関わることである。分子研が「分子科学とも称すべき新しい総合的な学問分野を構築する」ために設立された経緯は、分子研レターズ57（May 2008）にある長倉三郎先生の講演記録に詳しい。分子化学ではなく「分子科学」であることに強い思いが込められている。

このような分子研の設立には、日本学術会議の勧告が重要な役割を果たした。私が全く予期していなかったことは、勧告では分子研の設立と大学院の設置が「双子」として構想されていたことである。しかも、この大学院は博士課程を主体としていた。実際には、制度的な問題のためか、分子研と総研大は双子としては誕生しなかった。そのため、1984年にはすでに設立されていた分子研やその他の大学共同利用機関を母体とした大学院の設置に関する答申が、改めて学術審議会からだされている。そしてこれを受けるかたちで大学院問題の検討が直ちに済み、まもなく大学共同利用機関を基盤とする総研大が誕生した。このような経緯もあって、大学共同利用機関と総研大の制度的な関係は、双子の兄弟というよりは親子となった。

ところで、昨年、科学技術・学術審議会からだされた「大学共同利用機関法人及び大学共同利用機関の今後の在り方について」（審議報告書）では、「総研大との連携の意義や在り方等につい

て、今後、改めて検討することが必要である」と指摘されている。いま、研究と教育を一体化した分子研の当初構想を想いつつ、この指摘を再び考えている。すぐに思うことは、親子関係にあるとはいえ、いやそれだからこそ、理念や使命にはいくつかの共通点があることだ。分子研にしる、総研大にしる、目標のひとつは新しい学問分野の形成である。また、そのための有力な方法が、既存諸分野の総合化であることも共通に認識してきた。

総合化のハードルは決して低くない。学問の細分化や専門化が進み、全体の把握がますます難しくなっている。分子科学の領域内でもそうかも知れない。いわんや、文系と理系となると両者は接点のない、異なる世界のように感じる人も多い。異分野を理解する必要性については数々の指摘があるが、実行できる人は多くない。閉じた専門分野で染み付いた狭量さのためであろう。しかし、医者であり、物理化学者であり、哲学者でもあったMボラニーのような人がいる。自然の研究と人間の研究の間の不連続性を一切否認するために、「個人的知識」理論を展開した人でもある。私はこの主張を信じる。そして、総合化は個人的な知識として実現できる部分も少なくないと思う。分子研と総研大は制度的にも主機能においても異なるが、総合化による新しい学問分野の創造という点ではやはり双子であり、使命を共有している。この使命は、佐藤勝彦機構長が分子研レターズ63（Feb. 2011）の巻頭言で期待されたことに他ならない。

たかはた・なおゆき

昭和46年3月京大理化学卒、昭和48年3月京大理学部修士課程卒、昭和52年3月九大理学研究科博士課程単位取得退学、理学博士（昭和52年4月）、昭和52年4月国立遺伝学研究所助手、昭和61年8月助教授、平成4年3月総合研究大学院大学教授、平成13年4月副学長、平成20年4月より現職。理論集団遺伝学の研究に関して昭和61年度日本遺伝学会奨励賞、平成14年米国科学芸術アカデミー外国人名誉会員、平成15年度日本遺伝学会木原賞、平成18年度日本進化学会木村賞を受賞。また、平成15年度のThe Society for Molecular Biology and Evolutionの会長、平成2年-11年Max-Planck生物学研究所国際評価委員会会員、平成11年以来理研バイオリソースセンターアドバイザーカウンシル委員。

# 震災関連特集

2011年3月11日の東日本大震災は単なる地震の被害を越えて、大津波、原発（放射能、電力不足）の被害の深刻さと広域性をまざまざと全世界に見せつけました。政府・自治体、専門家、メディアなどの対応が問題になっていますが、我々自身も、個人として、あるいは組織として、もっとやれることがあるのではないかとこの思いに駆られています。今回、分子研レターズ編集委員会では、特設コーナーを設けて、今後に向けて考える材料をいろいろな側面から集めることにしました。趣旨に添って協力いただいた執筆者の方々にお礼を申し上げます。

**横山 広美** 東京大学大学院理学系研究科 准教授

## 科学コミュニケーションと「第3の波」 ～震災後を経て専門家の情報発信に必要なシステムを考える～

### 概要

東日本大震災を経て、専門知の社会への実装がいっそう問われている。日本における科学コミュニケーションは、日本への導入時の意向が反映され、科学好きの子供や支援者を増やすための広報、教育普及の側面が強い。一方で、「双方向コミュニケーション」をキーワードに科学技術にかかわる意思決定の市民参加が進められてきた。しかしこれまで、専門家の社会的責任や役割をしっかりと位置づける議論は、一部を除いて<sup>[1]</sup>日本ではあまりされてこなかったし、それぞれの科学分野の専門家も聞く機会がなかったであろう。海外では、専門知を活かしきれない無条件の科学政策への市民参加を善とする今の活動を再考し、専門家もつ専門知をいかに活用するか、という「第3の波」<sup>[2]</sup>の議論が広く行われている。非常時に専門家もつ専門知をいかに役立てるか。役立てることに専門家としての社会的責任があるのは明白である。ここでは震災後の日本で、専門知をいかに社会に実装するか、また科学コミュニケーションがその際にどのような役割を果たすべきか、その可能性を探りたい。

### 「本当の」ではなく「それぞれの」専門家を活かすシステムが必要

東日本大震災と福島第一原発の事故を経て、「専門家とは誰か」という議論をよく耳にした。地震とそれによって起きた津波による日本史上最大ともいえる甚大な被害を前に、地震学者、津波学者などはこれまでの学術と社会との交流について真剣に再考を始めている<sup>[3]</sup>。原子力発電、放射性物質の拡散についてもテレビをはじめとする報道で顔なじみになった原子力工学の専門家のほか、原子核物理の専門家、拡散については大気・海洋の専門家、さらには生物濃縮の研究を進める専門家など多くの「専門家」が関わっている。

被害があまりに甚大で問題解決のための道筋ははっきりせず、関わる専門家も多い。こうした状況では、一人で全ての問題を網羅できる専門家など、当然いない。ある専門家が自分の専門を超えて議論することは、「善」とされてきた。しかし震災後の放射性物質の拡散については、専門外の研究者が原発や放射線の人体影響について誤った発言をし、その「善」とされる発言により混乱が生じているのも事実である。そうした混乱を見ている市民が「本当の専門家などいないのではない」と思

うのも無理はない。

しかし「本当の専門家などいない」というには、まだまだ情報公開のルートが整備されていないのではないだろうか。世の中には数多くの専門家がいる。筆者の所属する東京大学大学院理学系研究科だけでも、放射性物質に関しては物理、化学専攻の原子核物理や放射化学の研究者、放射性物質の拡散については地球惑星化学専攻の大気や海流の研究者、生物科学専攻には放射生物学の専門家のほか生物濃縮について議論できる生物科学の研究者がいる。気をつけたいのは、こうした非常時においては、専門家は2種類いることだ。①地震、津波や原子力工学、放射線の人体影響などそのものずばりの専門家と、②原子核物理や海流の研究者のように普段は異なる研究を行っているが、震災後の現在、社会が必要とするサイエンスを行うことができる専門家がいます。筆者から見ると、政府は①の専門家を網羅することができないばかりか、②の研究者の存在に気付かず、そしてこれらの専門家もつ専門知を活用できていない。特に②の研究者たちは自主的に社会貢献できるテーマを見つけ、活動を行っている。

研究者に近い立場で科学と社会の間



よこやま・ひろみ

東京大学大学院理学系研究科准教授。専門は科学広報・科学コミュニケーション。日本学術会議若手アカデミー委員会若手アカデミー活動検討分科会(特任連携会員)。2004年、東京理科大学大学院理工学研究科満期修了退学。同年9月、博士(理学)。東京工業大学研究員、総合研究大学院大学上級研究員を経て2007年から現職。2007年、科学ジャーナリスト賞を受賞。

題を見ている筆者からすると、東日本大震災を経て研究者集団に足りなかったのは、そうした専門知を束ね、そして社会に実装する効率的なシステムだったのではないか。震災直後に研究者のリスト化を考え一部に提案したが、そうした単純なことでは上手くいかなかった。しかし国がもっている専門知を必要とときに最大限、活かすための何かしらのシステムは必ず必要である。震災を経て、日本にこうしたシステムがないことに愕然とした。イギリスには首相の直下に科学顧問の委員会がある。世界的にそうした国々は少なくない。専門知を社会に実装するシステム作りに、科学コミュニケーション分野の研究者・実践者がもっと活躍する方法がなかったか、反省を込めて現在も考え続けている。

### 日本におけるふたつの科学コミュニケーション

科学コミュニケーションが科学者と市民の双方向コミュニケーションを促し、科学技術に関する意思決定の市民参加を促してきたことはすでによく知られている。こうした活動はイギリスの狂牛病をきっかけに拡大し、2005年に科学コミュニケーションに関する

人材を養成する3つの機関をつくることで日本に導入された。日本が文部科学省を中心に科学コミュニケーションを導入した経緯には、日本独自の理由があった。ひとつは子供たちが理科に興味を持つための楽しい科学コミュニケーションの導入、そしてもうひとつは5年間に25兆円という莫大な科学技術予算を目標とする科学技術基本計画の説明責任としての科学コミュニケーションである。日本が文部科学省を中心に科学コミュニケーションを導入する際に、市民参加を促すための科学コミュニケーションへの意識がどれだけあったかはわからない。もちろん、近年では活発に各省庁のパブリックコメントなど市民参加が促されている。しかし主には科学の広報・普及のために日本は科学コミュニケーションを導入したといつてよいだろう。

整理すると日本において科学コミュニケーションには二つの流れがある。ひとつは広報・普及的、そして科学を進める上で欠かせない倫理的社会的問題群に関する科学コミュニケーションであり、もうひとつは科学的な意思決定に市民が関与することを促すヨーロッパからの流れを汲んだ科学コミュニケーションである。前者は理系

出身の人材や教育関係者によって推進されてきた一方、後者は人文系の研究者が多く関わっている。もちろん両者はゆるやかに融合し協力体制もある。しかし両者は、同じ科学コミュニケーションという言葉を使いながらも独立にそれぞれの道を歩み始めている。

筆者は、震災後のような非常時に専門知を活かすシステムを構築するのに、前者の科学コミュニケーションの役割が重要だと感じている。研究者も活かせる専門知があってもそれを発表するルートや政府に届ける方式が決まっていなくて声を挙げるのが難しい。特に不確定性が大きいデータについてはそうである。日々、専門知の動向を知る、現場の科学コミュニケーションの関係者はそうしたデータを扱うことに慣れている。例えば、日本気象学会が自らのデータの発表を迷うとき、その相談相手になれたはずである。

### 「第3の波」と科学コミュニケーション

2002年、コリンズとエヴァンスによって「科学論の第3の波」という論文が発表され反響を呼んだ。これはこれまでの科学論を整理し、科学技術の公共的な意思決定に市民参加を無条件に推奨する論調を批判したのだ。日本

にはこれまであまり紹介されることがなかったが、2011年6月号の岩波書店『思想』に特集号が出ているので興味のある方はご覧いただきたい。「第1の波」は50年代から60年代にかけての科学知の進展を促すものであり、「第2の波」は70年代初頭からでてきた専門家ではない市民が意思決定に参加することを促す動きで、これが上記のふたつの科学コミュニケーションのうち片方に継続している。そして「第3の波」は無条件に市民参加を促す動きを、専門知を活かせないと批判し、専門知・専門家の活用について議論を展開している。

日本では「第2の波」を受けて欧米諸国での科学コミュニケーション活動の高まりにより、科学コミュニケーションが導入された。このときから理系出身者が多く関わる科学コミュニケーション、つまり広報・普及に関わる人材が増え始め、それは「第2の波」を引き継ぐ科学コミュニケーションとは同じ言葉を使いながらもそこから独立し、別のコミュニティとして形成されつつある。そして今、「第3の波」を受けて、第2の波から独立した科学コミュニケーションのコミュニティによ

り、専門知をいかに社会に実装するか、手探りの活動が続いている。

### ふたつの科学コミュニケーションの未来

「第3の波」論文の主張を踏まえ、今後の科学コミュニケーションをどのように考えるか。市民参加を目指す科学コミュニケーションはその手法を議論するにとどまらず、専門知をどのように生かし、どのような場合が市民参加に有効であるのか、エビデンスを示すべきであろう。また「市民とは誰か」という古くからの問いについても明快な答えが必要だ。さらに第3の波を超える議論をするため、第3の波についても広く知らせるべきであろう。一方で広報・普及に関する科学コミュニケーションのコミュニティは、単なる科学者の声を拡大する装置としてではなく、専門知を普及すると同時に専門家の社会的役割の自覚を促し、専門家と共に悩み考え、そして意思決定の際に必要な専門知を広く社会に示すことが今後の役割になるだろう。同時にこうした知見の「科学化」、つまり科学コミュニケーションの実践を理論化する活動もますます必要になってきた。筆者が関

係者と共に運営する科学コミュニケーション研究会は、科学コミュニケーションを学術にする活動を目指している。世界でも科学コミュニケーションがひとつの専門として成り立つ必要性が議論されている<sup>[4]</sup>。こうした活動を通じて、広く社会と学術に貢献していきたいと願っている。

### 参考文献

- [1] 藤垣裕子、「専門知と公共性」、2003年（東京大学出版）。本書は現代版「科学者の社会的責任についての覚え書」（唐木順三）であり科学技術社会論の教科書としても位置付けられている。
- [2] ハリー・コリンズ、「科学論の第三の波」、岩波書店『思想』2011年6月号
- [3] 地球惑星科学関連学協会共同声明「自然災害に向き合う強い日本社会の復興のために」（平成23年6月30日）  
[http://www.jpogu.org/whatsnew/110630\\_311state.html](http://www.jpogu.org/whatsnew/110630_311state.html)
- [4] Toss Gascoigne, *et al.*, "Is science communication its own field? (Road maps for the 21st-century research in Science Communication), *J. Sci. Commun. (JCOM)*, 9(3), 2010.

## 大学・研究機関からの報告

### 研究施設における震災被害の実態

報告：佐藤 太久真 特別研究員（理化学研究所・基幹研究所グリーンナノ触媒研究チーム）

3月11日午後2時46分、突如我々を襲ったその揺れは立っていることもままならぬ程であった。当時、東北大学理学研究科の学生であった私は、後輩七人を引き連れて、仙台市中心部

の某うなぎ店で特二段お重を丁度完食したところであった。崩落するビルの外壁を見て一大事と悟った我々は、信号機の消えた道路を車で飛ばしてキャンパスへと向かったが、つい二時間前

まで居たはずのその場所で見えたものは、異臭の漂う中、黒煙を噴き上げる化学棟であった。変わり果てた居室に再び足を踏み入れることができたのは、それから二ヶ月の後のことである。



図1



図2

上述のように、私は幸運にも研究室で被災した訳ではないが、以下は震災直前まで居室があった東北大学青葉山キャンパス化学棟の被害状況を中心に紹介する。まず、建物自体の被害状況は深刻であった。例えば、化学棟のエレベーターホールと居室側の境界で、文字通り建物が裂けている（図1）。実験室内は非常に危険な状態であり、以下いくつか列挙するが、ドラフトチャンバーの下部が崩壊している例が散見される（図2）。その他、倒れたガスボンベのレギュレーター破損によるガスの漏出、書棚や大型のオープン等の重量のある物品の転倒等が発生している。NMRは一階に設置された六台中、三台はクエンチするか傾いた程度だが、上層階に設置されたものはマグネットが転倒するなど著しい被害を受けている。このような建物および室内の揺れによる直接被害は上層階ほど甚だしい。一方で、化学棟は2007年度に耐震補強工事を完了しているし、キャンパス内では非常用電源搭載の無線放送設備の設置、定期的な防災訓練および全構成員への防災ヘルメットの配布を行っていた。また現場では

棚等の固定、廊下に物品を置かないことを徹底する等の取り組みを行ってきた。このことが未曾有の災害の中、大きな怪我人を一人も出さぬ迅速な対応を可能にしたと言えよう。

さらに、火災は地震に伴う典型的な二次災害であるが、先に触れたように化学棟では実際に上層階の試薬室から出火している（図3）。本件が爆発事故に至ることがなかったのは不幸中の幸いであった。消防法で規定するところの危険物を取り扱う研究者は、それらの性質への十分な理解に基づき、保管場所の区分設定や環境の適正管理に普段から留意すべきなのは言うまでもない。

現在、被災研究室においては復旧作業が進行中であるが、被害が甚大であった研究室は研究疎開に伴う内外施設への離散を余儀なくされている。また、予算の都合上、補修が後回しになる事例が顕在化してきており、一刻も早い対処が必要である。

以上、私の見聞きした事例について



図3

簡単に列挙した。現場では物品の転倒防止等の基本的対策を講じると同時に、有事の対応に関して各研究室の実態に即した想定こそが重要であろう。最後に、本稿を執筆するにあたり、詳細な情報提供および写真の使用許諾を頂きました東北大学理学研究科の寺田眞浩教授に厚く御礼申し上げます。

## Photon Factoryにおける震災への対応

報告：加藤 政博 施設長（分子科学研究所・極端紫外光研究施設）

今回の東日本大震災では、つくば市も震度6弱の揺れに見舞われ、数多くの研究機関が被害を受けた。その中で、高エネルギー加速器研究機構（KEK）の放射光科学研究施設 Photon Factoryの被害の状況、共同利用者への対応などについて、同施設の光源加速器担当の小林幸則主幹、利用系担当の野村昌治主幹にお話を伺うことができた。

Photon Factoryでは、2010年度のユーザー運転が朝9時に終了したが、まさにその日の午後に被災した。多くの共同利用者は既に施設を離れていたが、その日KEKで開催されていた研究会に参加していた人も多かったとのことである。

地震の直後、研究所内に数ヶ所設けられている避難所に集まり、点呼を行った。このあたりは毎年行っている避難訓練が活かされたといえる。ただし、所在の確認ができなかったものも若干名出たようであり、全員の安否確認が完璧に行えたというわけではなかったようである。人的被害は皆無であったのは幸いである。

職員の安否確認は上記のような状況であるが、外部から来所している共同利用者の安否確認はさらに困難で、避難、安否確認は行ったものの、施設側では完全に安否を確認することはできなかった。来訪者は基本的に自助努力で帰宅したようであるが、交通事情などにより帰宅が困難であった人々には、所内の宿舍や会議室などが開放され、そこで一夜を明かした人たちもいたようである。学生も含め、共同利用者の状況を完全に把握することは極めて困難であることは容易に想像できる。

分子研でも共同利用で来所した大学の先生方や学生さんたちの所在の把握をどこまで責任を持ってやるのか、どのような手法でやるのか、今後、検討が必要であると感じた。

当日夕方には、職員には帰宅が命じられた。つくば市内は停電は短時間であったが、断水は数日間続いた。一方、所内でも、変電施設の被災により停電し、所内の宿舍で生活する外国人研究者など長期滞在者の生活は大きな影響を受けた。電力は自家発電設備によりある程度確保でき、また、受電設備も2日後には復旧した。水道とガスの復旧には1週間程度かかった。震災直後は所内の売店の食糧を所がすべて買い上げ配布するなどの対応を取った。その後、外国人研究者は可能となり次第順次帰国したとのことである。

実験装置自体の被害であるが、Photon Factoryの光源加速器とそれに電子ビームを供給する直線加速器、さらに放射光を取り出して利用するビームライン装置のそれぞれに被害が出た。光源加速器においては、電子ビームの通り道であるビームパイプの一部が損傷し、超高真空系に破れが生じた。200m弱の加速器のおよそ半分に大気が侵入した。しかし、損傷を受けた装置そのものはごく一部であった。直線加速器の被害はやや深刻で、電子ビームの発散を防ぐ電磁石装置の一部が床に落下し、また、ビームパイプの損傷も多く、装置全体に大気が侵入した。ビームライン装置ではX線回折装



図1 放射光実験ホールでの制御ラックの転倒。  
(KEK-PF 野村主幹よりご提供いただいた。)

置や分光器に被害が出たものがあるが、諸般の事情により固定がしっかりなされていなかったとのことである。また、ターボ分子ポンプ類が10数台（全台数の1割弱）故障した。

大型実験装置はその多くが床面などにしっかり固定されており大きな被害を免れていた。むしろ周辺装置や小型機器類で被害が多く出ている。制御用ラックで床面に固定されていないものは転倒し、またツールボックスも引き出しの固定機構のないものは転倒した（図1）。小型計測機器、PC、ディスプレイなどは固定されていないものが多く、テーブルから落下するなどして損傷したケースが多かった。ボンベ類の転倒も多く見られたとのことである。装置以外では、化学試料や生物試料など冷蔵が必須のものが停電により大きな被害を受けたとのことである。なお、今回は実験が終了していたこともあり、電気火災や化学火災、有害ガス漏れなどの発生はなかったが、もし実験中であれば深刻な事態が生じた可能性もある。小型機器類の固定、試料の損傷、化学火災などは分子研でも対応を考え

の必要があると思われる。

このような大規模災害時の情報発信ではWEBやメールが有効であると思われるが、震災当初は停電のため機能せず、情報発信に苦労したとのことである。メールやWEBの復旧には3-4日かかった。特に外国人（キャンパス外にも居住）への情報発信が

十分にできなかったことが反省点として挙げられていた。分子研でも、大規模災害時の情報発信手段の確保は今後の重要な課題と思われる。

なお、その後の復旧状況であるが、復旧作業は比較的順調に進み、2011年6月現在、放射光関連装置の試運転を行うところまで来たとのことである。高

エネ研の職員の皆さんの復旧に向けた努力に敬意を表したい。また、Photon Factoryは2011年度前期の共同利用を中止したが、これに対して国内の放射光施設が連携して特別枠で利用者を受け入れるなど迅速な対応を取った点は、今後同様な事態が発生した場合のよき前例となるものと思われる。

## 東北大学におけるコンピューター・ネットワーク環境の復旧状況

報告：河野 裕彦 教授（東北大学大学院理学研究科）

3月11日に発生した東北地方太平洋沖地震と大津波のために東日本は壊滅的な被害を受けました。東北大学もいくつかの高層階の建物が立入禁止になり、教育・研究に大きな支障が出ています。特に、高層階では、その揺れは仙台の揺れとされている震度6弱を遙かに超えていました。青葉山にある私たちの理学研究科化学棟の6階以上では、床や壁に固定していた実験台、試薬棚も倒れました。ここでは、東北大学の計算機やネットワークの被害、特に、化学棟内の被害・対応などを今後の対策の参考としてまとめました。

青葉山にある教職員用メールサーバーや大学のスパコンに大きな被害が無かったことは幸いでした。電気が復旧した3月13日以降、このサーバーを通して情報を交換できるようになり、スパコンも、大きな余震で停止することがありますが、4月4日以降は動いている状態です。ただし、長期間使用できなくなった大型計算機もいくつかあります。川内キャンパスの建屋の5階にあった全学の学生用メールサーバーは横転し、使えなくなりました。安否確認などは主に携帯電話やそのメールを使いました

が、復旧する5月2日までの学生への連絡に大きな支障が出ました。化学専攻では、その間、森田明弘専攻長らが中心となって、民間サイトに携帯アクセスもできる無料掲示板を開設しました。また、理学研究科情報基盤室には、ネットワークを利用できなくなった教職員のために無線LANが使える部屋を緊急に増やし、電気や水道の使えない化学棟などからサーバーを安全な低層建屋に移して稼働させるなど、迅速な対応をしていただきました。普段からの情報交換や連携が大いに役立ちました。重要なサーバーの低層階への設置の遵守はもちろん、あり得る被害を常日頃から想定して、複数の対応策を準備する必要性を痛感しました。

授業は5月9日から再開され、学生も研究室に戻ってきました。全員研究を軌道に乗せるべく努力しております。研究室単位での計算機類の被害に関しましては、高層階を除き廃棄処分にしなければならないほどの状況は少なかったようです。落下や横転によるケース、光学ドライブ、ファンの破損およびヒートシンクの脱落、電源の故障などは多数見られましたが、最近のワークステーションでは、横転時にCPUが上になるように重量バラン

スが調整され内部の結線も堅固なものが多く、被害が最小限に抑えられたようです。一方、今回のような激震では、計算機をきつく固定することが必ずしも有効とは限りませんでした。アンカーで固定されたラックのほうが、キャスト付きのものよりも多く障害が出ているようです。振動のエネルギーを逃がすには、耐震マットなどの利用が有効と思われます。各対策がどの程度の揺れまで堪えられるか定量的な調査が必要です。

化学棟3階の私の研究室で最も深刻だったのはハードディスクの被害でした。数十台のうち、初期段階での不調は2台だけでしたが、強い衝撃の後遺症でその後故障が頻発し、結局3割近くを点検・修理に出すことになりました。このような被害の中、多くの皆様から激励やご支援を頂きました。分子研からも、「共同利用研究特別プロジェクト」などのご支援を頂き、研究を継続する上で大きな力となっています。全国どこでも震度6以上の地震に見舞われる危険性があることを考えると、今後、分子研などを中心として計算機に対する種々の耐震対策の評価と勧告がなされることを願っております。

## つくばでの被害

報告：服部 利明 教授（筑波大学大学院数理物質科学研究科）

東北地方の陰に隠れてあまり大きく報道されていないが、茨城県は今回の震災で大きな被害を受けた。3月11日金曜日の地震で、つくばでは震度6弱のゆれがあり、大学全体として70億円の被害額があったことが報告されている。その内訳は、体育館1棟（建て直しが必要）、学生会館のホール（天井等が破損）、図書館の蔵書などが大きなものである。研究設備の被害は、原稿執筆の時点（6月初旬）では明確になっていないものも多いが、一部に大きな被害があったものと思われる。

金曜午後の地震の際は、全員屋外に避難し、揺れが収まってから、部屋に荷物を取りに帰り、帰宅した。その時点では停電しており、また建物への被害の詳細が不明であることから、月曜日まで出勤停止となった。翌土曜日に予定されていた後期日程入試は中止された。卒業式は中止され、入学式は日を遅らせて陸上競技場でおこなわれた。

筆者の研究室ではレーザー実験を主とした研究をおこなっているが、幸

いにして高額な被害はなかった。最も大きな被害は、光学テーブルの脚部であった。ゆっくりとした大きなゆれのために、写真の脚は斜めになってしまい、業者に調整を依頼する必要がある。別の光学テーブルは、エアダンパーのセンサー一部が破損し、交換が必要であった。その他、複数台のレーザーで、再調整が必要であった。

他の研究室では、水道管の破損により大量の水漏れがあった。また、つくばの他の研究所では、復旧作業における通電時に漏電による火災が発生し、大きな2次被害になったとのことである。大学としての復旧の作業は、そのような危険をひとつずつクリアしながらであったので、かなり時間がかかった。始めの数日は、建物の構造への被害の懸念から、学部生の入構制限、建物立ち入り時の記名がおこなわれた。大学の電子メールシステムが回復したのは月曜日であり、それまで海外の知人に心配をかけた。実験室の電源は15日に回復し、一つ一つ確認しながらブレーカを上げた。水道は、漏水が



ないかを確認しながらの作業であったので、4月初旬まで復旧しなかった。

筆者の研究室では、上に記した大きな被害以外に、実験室および居室で、棚が倒れたり、ガラス製品が落下して破損したりした。ピーカーなどのガラス製品や、薬品、ガラスのついた棚などが破損したり、重量物が落下したりすると、危険であるだけでなく、その後の作業の大きな妨げになる。日ごろより転倒防止など通常の地震対策をとっておくことが、大きな助けになる。また、棚やテーブルの上の重量物が落下しないように、留めておくことも役に立つ。また、日ごろより関係者の連絡先を共有しておくことも必要だろう。

## ナノネットでの東日本震災対応と震災からNIMSが学んだこと

報告：平原 奎治郎 室長、古屋 一夫 副拠点長、野田 哲二 拠点長（独）物質・材料研究機構 ナノテク拠点）

東日本大震災で被災された地域の方々や、ご家族の皆様へ、心からお見舞い申し上げますとともに、1日も早い復旧によって、安定した生活を取り戻されることをお祈りいたします。

この度の大地震災とそれに引き続く計画停電は、東北、関東地区のナノテクノロジー・ネットワーク（ナノネット）参加各機関の施設運営を困難にすると

ともに、施設を利用しているユーザーの研究活動支援に多大な支障を及ぼしました。ナノネット参加13拠点26機関のとりまとめ業務を行っている物質・材料研究機構（NIMS）国際ナノテクノロジーネットワーク拠点では災害後、直ちに被災地域の施設・設備状況を把握するとともに、ナノネットを利用する研究者のために、ナノネット

内の被災していない支援拠点の利用可能な施設・設備等をナノネットのホームページ“ナノテクジャパン”（<http://nanonet.mext.go.jp>）、あるいはメール配信、さらに電話受付などを通じて紹介してきております。

平成23年5月末現在、問い合わせ件数は50件を超えており、そのうち、30件が現在、ネットワーク内の拠点

で実際の利用を開始しております。具体的には、(1) つくばのNIMS強磁場NMRのユーザーが中部(分子科学研究所)拠点装置を利用、(2) 東北大分子・物質合成施設のユーザーが京都(奈良先端科学技術大学)拠点装置を利用する等、東北や関東地区の企業ならびに大学の研究・開発者が関東・東北地区拠点以外のナノネット拠点(北海道、中部、京都、大阪、広島、九州)で、ナノ計測や微細加工設備を使用しております。平成23年5月20日現在の支援の内容を下記、図、表にまとめております。

ナノネットでは、大震災発生後、被災された機関から他機関への施設利用対応が直ちに開始されました。これは、一部機関の研究開発活動に支障を生じた場合に、他の機関がフォローする、いわばセーフティネットが機能していることを意味します。第4期科学技術基本計画の見直し検討では、先端研究施設及び設備の整備、共用促進に関して、自然災害等によっても施設、設備の安定的、継続的な運用、利用に支障が生じない取り組む必要があるとの指摘がされており、災害に備える意味でもこのようなネットワークの充実が望まれている状況となってきております。

発生後の被災地域の研究活動機能が回復するに伴い、これまでの被災地域研究者への支援に加えて新規ユーザーへの支援も増えてきております。また、今回の被災では、ナノテクノロジー関連以外の分野の研究者からも問い合わせがあり、共用施設として、ナノテクノロジーに間接的に関わる研究、技術であれば、可能な限り幅広く施設・設備の利用希望者に対応していく所存です。

さて、物質・材料研究機構(NIMS)における今回の震災から学んだことを以下に紹介させていただきます。震度6の地震を受け、場所によっては地盤沈下などで地面と建物との間で段差が生じ、あるいは壁にクラックが生じるなどの影響を受けたものの建物自体の大きな損傷はなく、構内では安全が確保され、幸い人的被害はありませんでした。しかし、大型の装置では、揺れによって固定ボルトが床面から抜け、装置が移動、傾き、また、それによって装置に連結された排気ダクト、冷却水パイプなどの破損が生じました。特に大型の強磁場NMRでは、装置内部にも被害が生じ、相当期間使用が困難な状態となりました。6階以上の高層階に設置された装置では、揺れがより一層大きかったため、固定されていな

いものは、転倒や移動し、他装置との衝突損傷などが起こりました。地震による停電は冷却水の供給ストップも意味し、スパコン、各種真空装置などは、約2カ月間は運転できない状態がつづきました。つくばは震度4程度の地震の多発地域であり、キャビネット、ボンベ等は、転倒防止などの処置がされてきましたが、装置に関しては必ずしも安全対策が十分ではありませんでした。大型の装置を含め、床へしっかりと固定する、配管が他装置あるいは壁などにつながっている場合には、装置が移動することを想定して、装置との接続部をフレキシブル構造とする事、中小の機器で構成されている装置は一つの架台上に設置する事、薬品庫などのキャビネットは、壁に固定するとともに戸は開きでなく引き戸型とする事、また、LANなどの基本的な情報インフラについては、長時間の停電にも対応できる電源整備が必要である事を新たに認識いたしました。

最後になりましたが、去る3月30日、豊田工大で開催された「平成22年度中部地区ナノテク総合支援成果報告会」において中部地区ナノネット参画機関より暖かい支援の言葉をいただいたことに深く感謝申し上げます。

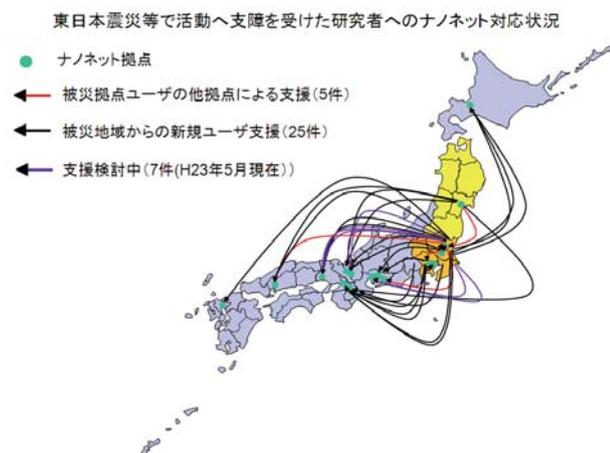


表 支援例

支援場所	支援概要
北海道地区	関東地区企業 微細加工3件
関東地区	損傷を受けなかった設備で、東北、関東地区の大学、研究機関、企業の微細加工・計測等支援 8件
中部地区	NMR強磁場ユーザー(関東地区大学)、研究所、企業の微細加工・ナノ計測など3件、支援検討段階2件
関西地区	東北地区大学、関東地区大学・研究機関・企業からの微細加工、計測評価等12件、PF放射光関係検討段階5件
中国地区	NIMSユーザーおよび東北地区大学、関東地区企業からの微細加工3件
九州地区	関東地区大学(PFユーザー)支援1件

**神取 秀樹** 名古屋工業大学大学院工学研究科 教授

# 分子研は生命科学に どう取り組むべきか？



かんどり・ひでき

1989年 京都大学大学院博士課程修了(京大理博)、1988年 日本学術振興会特別研究員、1990年 分子科学研究所博士研究員、1992年 理化学研究所博士研究員、1993年 京都大学理学部助手、1999年 同講師、2001年 名古屋工業大学助教授、2003年 同教授。

分子科学研究所ではライフサイエンスに関する研究をする必要はないという意見が根強くあったような印象をもっている。1つの理由として、同じ敷地内に2つもあるライフサイエンスを標榜する研究所(基礎生物学研究所・生理学研究所)の存在が挙げられるかもしれない。しかしながら、研究のゴールは違っているらしいことに、バクテリオロドプシンやロドプシンといった最も理解の進んだ生体分子を研究する中で、私は気づかされてきた。本稿では、生命科学の発展の中で、分子研が行うべき研究について論じてみたい。

## 1. 自己紹介：自分と生命科学と分子研との関わり

分子研ができたのは筆者が中学3年に進級した4月だったらしいが、その翌年、筆者は同じ市内の岡崎北高校に進学した。当時はスーパーサイエンスハイスクール(SSH)のような高校と大学・研究機関を結ぶ交流はほとんどなく、市内に何か難しい研究をしているところがあるらしいというだけの認

識だった。真宗の末寺に長男として生まれ、企業への就職が想像できなかった筆者は、何か物事の本質に関わるような研究に取り組めたらいいな、と考え京大理学部へと進学した。しかしながら、京大の秀才連中の中で自分の頭の程度に失望し、物理学教室に進んで卒研でレーザー分光に取り組んだものの先の見えない日々が続いていた。そんな自分に光明が差したのは、当時、京大に唯一、ピコ秒レーザーをもっている研究室が理学部の生物物理学教室というところにあり、視覚の研究をしていることを知った頃からであった。私は大学院の修士課程から生物学専攻に所属する生物物理学教室の吉澤透先生の研究室に進学し、25ピコ秒のパルスレーザーを用いた視覚の初期過程の研究を開始した。当時の生物物理学教室は、建物の5階で理論生物学、4階で生物物理学、3階で分子生物学、2階で発生生物学の研究を行うという実にユニークな構成をしており、このようなヘテロな環境は光生物物理学に取り組んだ自分自身にとって大きな意味が

あったと思っている。

私と分子研との関わりは、京大の大学院在籍中に始まった。超高速分光のリーダーであった吉原経太郎先生と吉澤研との共同研究がスタートしたのである。その縁もあって学位を取得し学振の特別研究員が終了した1990年4月から2年半、分子研に博士研究員(豊田理化学研究所奨励研究員+IMSフェロー)としてお世話になることとなった。私は高校の頃から暗記の多い化学が嫌いであり、大学に入っても化学の教育を受けたことはなかった。しかしながら、視覚の初期過程を物理の言葉で語りたい、という私の夢を実現するための営みは、蛋白質場の複雑さを考えると結局は「化学(あるいは物理化学)」そのものではないかと気がつくようになった。私たちが視物質で証明し、私の最重要研究キーワードである「異性化」という言葉そのものが化学の言葉である。分子研では内外の優れた物理化学者の先生方と知り合うことができ、自分にとってかけがえのない財産となった。

化学者でなかった私が化学者になっていくエピソードを1つ紹介しよう。岡崎機構のサッカーチームと一緒にボールを蹴っていた有機系の学生さんとたまたま図書館で会ったとき、「君にとっていちばんいい論文はどこに投稿するの?」と何気なく尋ねた私の質問に対する彼の答えは意外であった。私は当然、NatureとかScienceという返事が来ると思っていたところ、彼はきっぱりと「ジャックスのコミュニケーションです」と答えたのであった。当時、私はすでにJ. Am. Chem. Soc. 誌の存在は知っていたはずなのであるが、記憶の中では「化学にはジャックスという最高の雑誌があるらしい」と初めて認知したことになっている。「ジャックスのコミュニケーション」が化学者にとって重要な雑誌であれば、よし、そこに出してやろうと決めて、分子研在籍中の1992年にそれを実現することができた。この最初のJACS論文は基礎生物学研究所(基生研)の徳富 哲先生との共同研究であり、山崎 巖先生と三室 守先生(基生研)、北川 禎三先生と徳富先生、吉原先生と伊藤 繁先生(基生研)の共同研究と並んで当時、垣根の高かった岡崎機構内での共著論文を実現した最初の例に数えられる。私自身は分子研を離れた後も、面白いデータが出ると図1つでまずJACSのCommunicationsに出した上で、フルペーパーをBiochemistryに出す、といったスタイルを定着させていった。

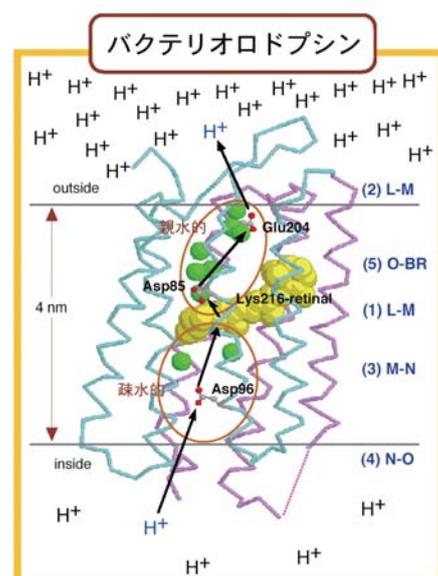
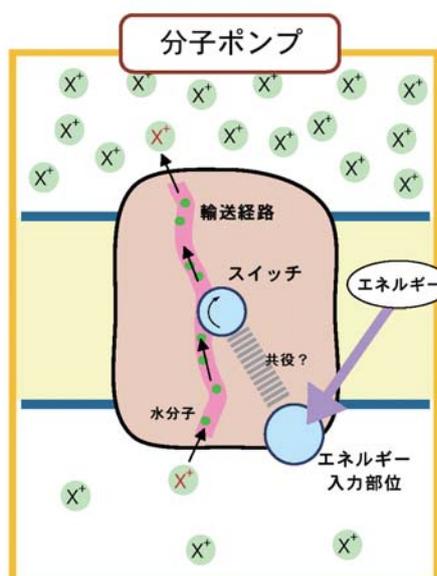
吉原先生は超高速分光の可能性を切り拓く研究には理解があり、私は博士研究員という身軽な立場だったためあまり意識することはなかったが、当時、分子研全体として生体分子を研究することはあまりウエルカムでないような雰囲気を感じていた。興味深いことに、事情は基生研の側も同じであり、

伊藤先生、三室先生、徳富先生といった物理化学にも精通した研究者の仕事はあまり評価されていない印象があった。私自身は「もったいない」「もっと活発に交流すればいいのに」という思いを抱いていたが、今ではこの原因は生命科学者と分子科学者との本質的な違いに由来するものと理解している。

## 2. 生命科学者が目指すものと分子科学者が目指すべきもの

生命現象には不思議なことが多いが、その1つに分子ポンプの存在が挙げられる。分子ポンプは生体膜に存在する膜蛋白質であり、濃度勾配に逆らってイオンや有機分子を輸送(能動輸送)することができる(図)。系のエントロピーは減少するが、ATPなどのエネルギーを使うことで能動輸送が実現する。分子ポンプのはたらきを明らかにするためには、(1)構造を解明し、(2)輸送経路を解明した上で、(3)エネルギー入力がかかると輸送をもたらしメカニズムを解明する、という3段階の道筋が必要であろう。しかしながら分子ポンプはすべて膜蛋白質であり、膜蛋白質の構造

決定は今もって困難であるため、多くの分子ポンプが第一段階に達していない。仮に結晶構造が決まったとしても、イオンや有機分子の輸送過程はダイナミックなものであるためその輸送経路を明らかにするのは容易ではない。第二段階である輸送経路が確定しているのは、バクテリオロドプシンという光駆動プロトンポンプだけである。この膜蛋白質の場合、輸送されるプロトンは内側から Asp96、retinal Schiff base、Asp85、Glu204を中心とした水クラスター、という4カ所を経由することが明らかになった(図)。この事実を知ったとき、皆さんはどう感じるだろう? 分子科学の研究者であれば、いちばん面白いエネルギー入力と輸送という仕事との共役を研究できるワクワクする瞬間だと感じられるのではないだろうか? しかし、私は国内外の優れた生命科学者から輸送経路が決定した段階をもって「バクテリオロドプシンの研究は終わったね」という感想をもらった。これから始まるのに、これから面白くなるのになんでだろう、という思いが強かったのであるが、今はこれが



分子科学者と生命科学者の違いであると考えている。

すなわち、既存の手法を用いて生命科学の諸問題に取り組むのが生命科学者であり、例えば、構造生物学の創設期ではなく成熟期に参入してX線結晶構造解析やNMRを用いた構造解析を行う研究者、というイメージである。エネルギー入力と共役した仕事のメカニズムを解明する（分子ポンプ解明の第三段階）といった既存の手法では困難な分子内の詳細な解析には生命科学者は無力であり、それゆえ興味をもたれないことは当然なのかもしれない。一方、分子科学者にとって、4～5ナノメートルの膜間を4カ所の結合基を経由する5回のプロトン移動によってポンプが起ころるのであれば、水分子のはたらきが重要であることが予想できるため、それを実験的（あるいは理論的）に明らかにしようとするであろう。水溶液中の水の濃度は55 Mであり、55  $\mu$ Mの蛋白質分子に結合した1個の水分子を捉えようとすると、百万個の中から1個の水の信号を選別しなければならない。こんな馬鹿げたことを生命科学者は考えるはずがないが、一方、分子科学者はそれがメカニズム解明のため必要なことであればどうやってそれを捉えるか、方法論を必死で考えるのではないだろうか？ 機能を保った状態で水を減らし、なんとか1万個あるいは1千個の中から1個の水を捉えてやろう、というのが私たちのバクテリオロドプシン研究であったが、これなどは分子科学者としての研究の姿勢に他ならないと考えている。機能がわかり、構造がわかればそれで終わりではなく、構造と機能をつなぐブラックボックスの解明に挑むのが分子科学者の生体分子研究であろう。

### 3. 分子研ですべき生体分子研究

分子生物学の勃興から半世紀が経過し、今世紀に入って生命科学の事情も変わってきた。かつて生命科学者の夢は新しい蛋白質（遺伝子）を発見してそれに自分が（あるいは自分の）名前を付けることだったが、ヒトゲノムの解明もあり、今後、未解明な機能が見出されることは少なくなるだろう。また今や構造を決定しただけでNatureに出せる蛋白質はきわめて少なくなってきた。生命科学は役者をみつけてその姿を見る時代から、役者の絡むシステムを理解する時代へ移ろうとしている。

私が思うに、構造解析・機能解析は構造生物学者・生命科学者がやってくれるので、分子科学者は構造と機能を結ぶ構造変化や構造ダイナミクスを行うべきではないだろうか？ Structural dynamicsは生命科学の発展の中での時代の要請でもあり、生体分子の理解なしに複雑な生命活動を理解することはできない。分子科学者の生体分子研究としてのstructural dynamics、しかしこれは容易ではない。例えば酵素反応を取り上げてみると、ナノメートルサイズの生体分子がサブオングストロームレベルで行う構造変化の時間スケールはミリ秒からマイクロ秒、あるいはそれ以下のダイナミクスが反応を決定する。生体分子のもつ広大な時空間の階層構造の中で、時間分解能と空間分解能という2つの大きな壁に挑むことは容易ではないが、よく考えてみればこれは分子科学者が過去により小さな分子に対して行ってきたことではないか。より複雑な生体分子に対しても、分子科学のマインドをもって挑戦することが期待される。

分子研での生体分子研究の体制を考える上で、大学院生がほとんどいないことはふつうに考えるとマイナス材料

かもしれない。生命科学や材料科学といった手数の必要な研究を日本で支えているのが主に修士課程の大学院生であるからだ。しかしながら、structural dynamicsを切り拓く新しい手法開発に挑むのであれば、量より質が問われるのであり、学生の不在はさほど負の要素とは思われない。それよりも、そのような意欲をもつレベルの高い研究者（生体分子だけでなく材料など物質科学の研究者も含む）が結集することで、何らかの相乗効果まで期待できるのではないだろうか。また同じ岡崎の地にある基生研や生理研の生命科学者は実験対象となる貴重な試料を提供することが可能であり、岡崎ならではの味のある共同研究がデザインできるだろう（20年前のように国際的には評価されても、各研究所での評価がいちばん低いという事態は避けるべきですね）。加えて分子研には優れた理論科学者がおり、素晴らしい計算環境がある。生体分子のような複雑な系を理解するためには理論研究は必須であり、実験と理論が切磋琢磨して生体分子のstructural dynamicsを解明するような研究を分子研に期待したい。

本稿では分子研がすべき生体分子研究に関する私見を披露させていただいた。生命科学の発展についての事情を振り返ってみると、私が博士研究員として在籍した20年前に岡崎機構内での交流が活発でなかったのは仕方のないことかもしれない。しかしながら今や、生命科学のさらなる発展には分子科学が不可欠であり、分子科学の発展にとっても生体分子にはフロンティアが詰まっていることは明らかであろう。今後、分子研からオリジナリティ溢れる生体分子研究がどのように発信されるか、期待して見守りたい。

# ナノ構造体における光と物質の相互作用と量子デバイス科学への展開

信定 克幸

理論・計算分子科学研究領域  
理論分子科学第一研究部門  
准教授



のぶさだ・かつゆき

1991年東北大学理学部卒業 1995年  
東京大学大学院理学系研究科博士課程中退  
博士(理学) 1995年分子科学研究所助手、  
1999年北海道大学理学部助手を経て  
2004年6月より現職。

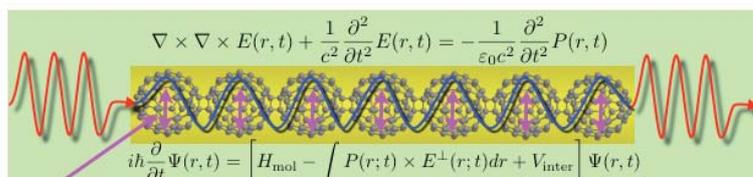
## はじめに

光（電磁場）に対する物質の応答を考える場合、いわゆる双極子近似と呼ばれる簡便な近似を使うことが多いが、最近の実験やナノテクノロジーの飛躍的な進歩に伴い、より正確に光と物質の相互作用を取り込まなければ理解出来ない現象が多数報告されるようになってきた。また、そのような新規な光学応答を積極的にデバイス開発等の応用科学へと展開する試みが盛んに行われるようになってきた。我々のグループでは、ナノ構造体と光の相互作用を記述するための光学応答理論及びその理論に基づく数値計算手法の開発を行い<sup>[1,2]</sup>、機能性を持った量子デバイスを設計するための指針を理論・数値計算の観点から与えるべく研究を進めている。ここではその試みの一つを紹介する。

## 光と物質の相互作用

物質の光学応答をより正確に記述するためには、光と物質の相互作用の“自己無撞着性”と“空間的非一様性”の二点を考慮に入れなければならない。相互作用の自己無撞着性とは、電子と電磁場のダイナミクスが露わにカップルした状態のことを指す。通常、物質に光が照射されると分極が生じるが、古典電磁気学（マクスウェル方程式）に従えばこの分極を源として新たな電磁場が発生する。新たに発生した電磁場には遠方まで伝播する成分だけではなく、電磁場の発生源のごく近傍のみ現れる短距離成分（しばしば近接場光と呼ばれる）も含まれる。もし電磁場発生源の近傍に別の粒子が存在すれば、その粒子中の電子とこの近接場光との間に相互作用が起こり、その結果、

隣接粒子にも分極が誘起され、それに伴う新たな電磁場が発生する。この新たな電磁場は更に隣接する粒子中の電子と相互作用する。結果的に、電子と電磁場のダイナミクスが再帰的に露わにカップルしたモード（ポラリトン）が延々と繰り返される（図1）。これが光と物質の自己無撞着的相互作用であり、この延々と繰り返されるモードを介してエネルギーを伝播させることが期待できる。一方、空間的非一様な相互作用とは、光の空間的变化を考慮に入れた相互作用である。光の波長に比べて物質のサイズが十分に小さい場合には、一様な光が物質に照射されると見なすことが多い。いわゆる双極子近似は、光と物質の空間的非一様相互作用を無視した近似である。ところが上



分極発生

図1 誘電体中に埋め込まれた分子の電子ダイナミクス（プラズモン励起）と入射電磁場（左赤線）のカップリングの結果生じるプラズモンポラリトン（青線）伝播の様子。

記した様に分極を源として新たに発生する近距離電磁場（近接場光）はその相互作用距離がせいぜい電磁場発生の源となっている物質のサイズ程度しかなく、もはや光は空間的に一様であると見なせなくなる。逆にこの様な光を使えば、入射光の回折限界に関係無く、入射光波長よりも桁違いに小さいナノ粒子系に対して非一様な光（より正確に言えば、物質中の電子の位置に依存した強度勾配を持つ電場）を照射することができる。その結果、電子の空間的位置ごとに光との相互作用の大きさが変わり、この差を利用して力を与える事ができる。以下では光を利用した力と言う意味で光学力と呼ぶ事にする。

我々のグループでは先ず光と物質の空間的非一様な相互作用を理解すべく研究を行った。以下ではその結果を紹介する。

### 空間的非一様な相互作用を利用した電子励起と光学力

図2は直線配置を持つNC<sub>6</sub>N分子を通常の方法でレーザー励起した場合（a-b）と空間的に非一様な光（近接場光）で照射した場合（c-d）に発生する高調波パワースペクトルを比較したものである<sup>[3]</sup>。前者は双極子近似を使って計算し、後者は我々の開発した光学応答理論に基づいて計算したものに对应する。直線分子は反転対称性を持つので奇数次の高調波しか発生しないが、これはあくまでも双極子近似の下での話であって、光と物質の相互作用の非一様性を考慮に入れると図2（c）、（d）に見られるように、奇数、偶数どちらの次数の高調波も発生し、更には高次

の高調波も同程度の強度で発生していることが分かる。これは空間的に非一様な光を使えば、分子の空間対称性を破り、かつ非常に高い電子励起状態へ

も励起できるからである。また、このような非一様な電子励起を利用して銀粒子に光学的な力を与えることができる。図3は空間的に非一様な強度勾配

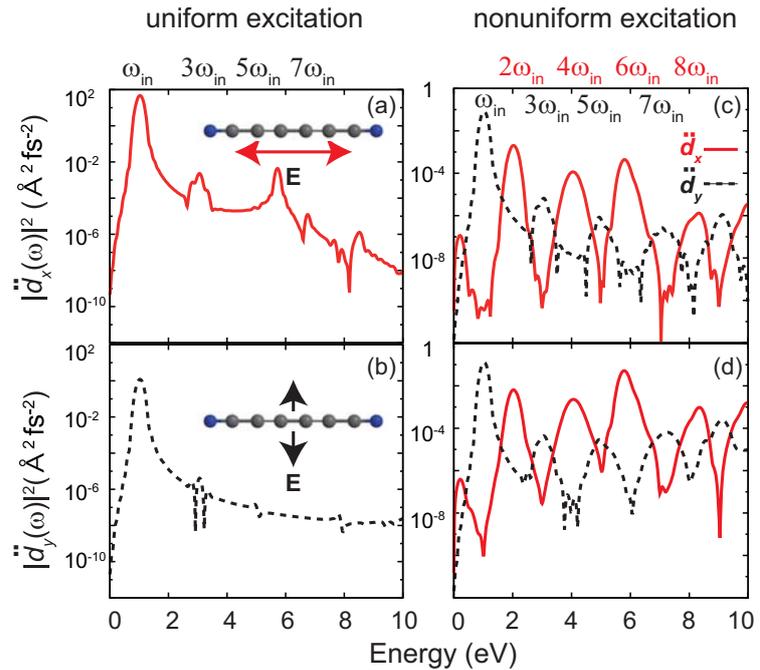


図2 直線配置を持つNC<sub>6</sub>N分子を通常の方法でレーザー励起した場合（a-b）と空間的に非一様な光（近接場光）で照射した場合（c-d）に発生する高調波パワースペクトルを比較したものである。 (a)、(c) は分子軸に並行な方向に偏向した光、(b)、(d) は分子軸に垂直な方向に偏向した光で励起した結果。

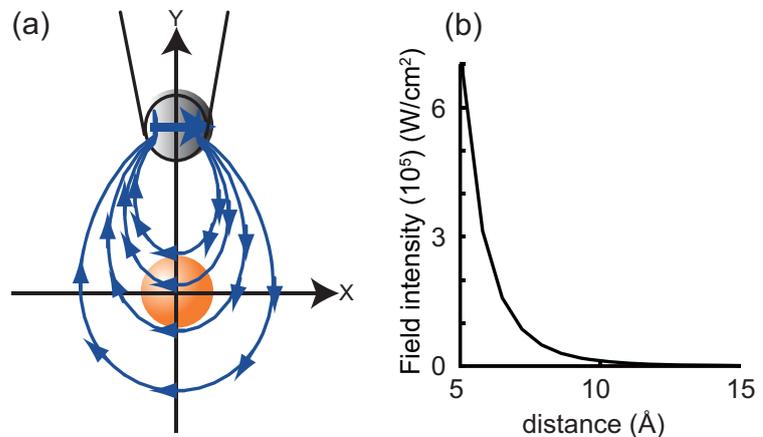


図3 (a) 灰色球から発生した強度勾配を持つ近接場光で銀粒子（オレンジ色）を電子励起する様子。青矢印は電気力線を表す。(b) 照射する光の強度勾配。縦軸は光の強度、横軸は近接場光源からの距離。

を持った光が銀粒子に照射される様子を表す<sup>[4]</sup>。我々の計算によると、必ずしも分子系が持つ共鳴電子励起の条件の下で常に最大の光学力が働くわけではなく、図4に見られるように照射する光の振動数に依存して光学力の大きさが複雑に変化することが分かった。これまでに幾つかの理論モデル計算があるが、いずれも電子系の問題を極めて簡単なモデルで置き換えてしまい、光学力が複雑な変化をすることは示しておらず、しかも共鳴電子励起の場合に光学力が最大になるとの結論を導いている例も見られる。この光学力の複

雑な変化には、分子を構成する電子状態が大きく関与しており、近接場光の照射によって応答する電子とそれを遮蔽しようとする電子の動きの詳細なバランスで光学力の強さが決まっている。この成果は、原子や分子レベルでの究極的な物質操作の技術に繋がり、光学力駆動を利用したナノマシン設計にも展開できると考えている。

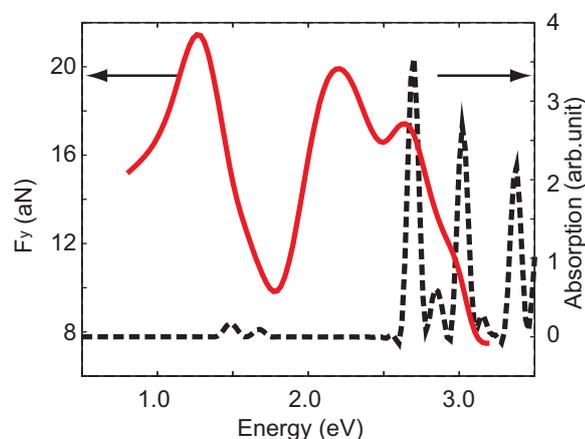


図4 銀粒子に加わる光学力の振動数依存性(赤実線)。銀粒子の吸収スペクトル(黒点線)。

## 今後の展開

光と物質の相互作用のもう一つの重要な効果、すなわち自己無撞着性の効果を取り込む為に、物質系(電子系)の運動と光(電磁場)の運動を同時に扱う理論及びその数値計算手法の開発も現在進めている。上記したように自己無撞着性とは電子ダイナミクスと電磁場ダイナミクスが露わにカップルした状態(ポラリトン)であるが、このポラリトンの伝播を利用して高効率のエネルギー伝播量子デバイスの設計を試みようとしている。

光と物質の相互作用の空間的非一様性

と自己無撞着性を考慮に入れることにより、これまで見えてこなかった新しい光学応答の世界が広がり、その現象が直接的に新規機能量子デバイス設計の重要な鍵になると思われる。また、このように十数ナノメートルを超える物質を計算の対象にする場合、市販の数値計算プログラムや、既存の数値計算手法に基づくプログラムでは膨大な計算時間が掛かってしまい、事実上計算を実行することができない。我々のグループでは、京コンピュータで実機稼働できる超並列数値計算プログラムの開発も同時に行っている。分子科学の基礎理論が超並列大規模計算を介して最先端デバイス科学と融合し、

新しい物質科学の世界へと展開していくと考える。

ここで紹介した光と物質の相互作用の研究は岩佐豪氏(元総研大学生、現JST博士研究員)との協同研究であり、大規模数値計算は野田真史氏(博士研究員)との協同研究である。紙面の都合で紹介出来なかったが、励起子ポラリトンダイナミクス<sup>[5]</sup>やデバイス設計で重要となる固体界面でのダイナミクス<sup>[6,7]</sup>等の研究を通じて、上述した光学応答に対して安池智一氏(助教)と久保田陽二(元博士研究員、現九大博士研究員)が多くの寄与をしてくれた。これら全ての協同研究者に感謝したい。

## 参考文献

- [1] K. Nobusada and K. Yabana, Phys. Rev. A **75**, 032518 (2007).
- [2] Y. Kawashita, K. Yabana, M. Noda, K. Nobusada and T. Nakatsukasa, J. Mol. Struct.: Theochem **914**, 130 (2009).
- [3] T. Iwasa and K. Nobusada, Phys. Rev. A **80**, 043409 (2009).
- [4] T. Iwasa and K. Nobusada, Phys. Rev. A **82**, 043411 (2010).
- [5] Y. Kubota and K. Nobusada, J. Chem. Phys. **134**, 044108 (2011).
- [6] T. Yasuike and K. Nobusada, Phys. Rev. B **76**, 235401 (2007).
- [7] T. Yasuike and K. Nobusada, Phys. Rev. B **80**, 035430 (2009).

## 所長招聘研究会「2020年の物質分子科学を語るII」

平成23年3月3日（木）に、所長招聘研究会「2020年の物質分子科学を語るII」が研究棟201号室にて開催されました。この研究会は、平成22年12月1日（水）に行われた所長招聘研究会「2020年の物質分子科学を語る」の第2弾で、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夢を語っていただくことを目的としています。発表者6名を含めて33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す。

冒頭で大峯所長の挨拶があり、現在の化学分野は静かな時期にあり、過去に素粒子研究が静かな時期の後に大きな新展開を迎えたことを引き合いに、このような時代には今すぐには役に立たないと思われる研究こそが重要ではないか、そのために10年を見据えた夢を存分に語っていただきたいとのコメントでした。

前回は新材料開発に視点が置かれた研究会でしたが、今回はもう少し新規機能・物性にも着目した講演者の方々をお招きしました。前半の3名の先生方のお話は、新しい物質群の創製に関するご講演で、はじめの阪大院工の村橋哲郎先生は、多核金属クラスターを

サンドイッチした独自の鎖状・層状分子の合成に関する成果を語られました。ポリエンが鎖状Pdクラスターをサンドイッチした分子、多環芳香族分子が層状Pdクラスターをサンドイッチした分子等に関し、独自のアイデアに基づく合成法の開拓に加え、そのredox挙動などの物性にも言及されました。今後の触媒活性能などへの展開が大いに期待できる発表でした。東大院総合の平岡秀一先生は、van der Waals相互作用を利用した分子噛み合わせの化学に関して講演され、特にヘキサメチルベンゼン誘導体が6量体を形成して立方体型のカプセル構造を作り、そのカプセルが疎水性アニオンを内包する成果に関して話されました。今後さまざまな形のカプセルを作るにあたって、ギヤのデザインの困難性を克服していきたいとのコメントでした。広島大理の安倍学先生は、 $\pi$ 結合のみを有する新しいC-C化学結合を有する分子の開拓に挑戦し、これまでに1  $\mu$ s程度の長寿命ピラジカロイドの創製に成功したと発表されました。今後、この新しい化学種のイオン性や構造の評価によって、その性質を詳細に検討したいとのことでした。

後半の3名の先生方は、電子素子を指向したご講演で、産総研の堀内佐智雄先生は、既知の有機分子結晶で非常に高いキューリー点を有し低電場で反

応する強誘電体群を続々と発見したことを報告され、プロトン移動型分極と電子移動型分極の2例を詳細に紹介されました。今後、薄膜化を進め、ドメイン形状のダイナミクスを観測したいとの抱負でした。理研の山本浩史先生は、有機強相関系BEDT-TTF錯体を用いたFET開拓について講演され、ゲート電圧印加によりハバードギャップが消失し金属的になってFET動作する機構について言及されました。将来のレーザー発振やFET超伝導への展開に期待するという抱負を語られました。最後の阪大産研の竹谷純一先生は、高性能有機単結晶トランジスタに関するご講演で、トランジスタ特性に最も重要な高い易動度をもつ分子の特徴について言及されました。特に、極端に大きな平坦性をもつ有機単結晶を塗布法で作成する技術は圧巻であったと思います。

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ご講演あるいは将来の有効性を強く感じさせるご講演で、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。講演者の皆様、活発な議論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。

（横山 利彦 記）

### 3機関若手交流会開催報告

平成23年2月19日、京大理学研究科セミナーハウスにて、京大院理・基生研・分子研の3機関若手交流会を開催した。昨年の9月に、大峯所長より京大院理・基生研との若手の交流会をすることになったから宜しくとのことをお話を頂いたのが事の発端である。分子研側の世話人は、筆者、古谷グループの木村助教に総研大生の三宅君（大島グループ）を加えた3名であった。

筆者はこう見えて堅物であるので、3機関の若手が集まるにふさわしい共通テーマを設定しなくてはならないと頭を抱えた。普段筆者が扱う世界は、分子研の中でも最も小さくて短いであろうナノメートル・フェムト秒の時空にある。京大院理には分子研OBも多数在籍されているのでどうにかなるであろうが、基生研で議論されているのは、幹細胞の生殖細胞への変化のような、余りにも巨大で長い時間スケールの事象である。彼らは「分子論的機構」を議論すると標榜しているが、その中身は（現在の）分子科学とは余りにも隔絶している。

世話人ミーティングの結果、若手交流会の参加者はいわゆるPIではないのだから、短期的に共同研究が生まれることをそもそも目指す必要はない。よって共通テーマなど設定せず、ただ3機関の若手が集まる、それだけの会とすることとなった。正直に言えばこんな

いい加減なことでも大丈夫なのか、と当日を迎えるまで不安であったが、それは杞憂に過ぎなかった。

京大での開催ということで、筆者による分子研の紹介、基生研小林教授（林助教が欠席のため）による基生研の紹介の後、3機関を代表する若手研究者5名に口頭発表をして頂いた。分子研からは香月助教にお願いした。分子のコヒーレント制御から、分子シミュレーション、人工生体膜の実験、アマガエルの鳴き声における同期現象、幹細胞から生殖細胞への変化を司る蛋白質の話に至るまで、様々な時空スケールを一気に旅するような、爽快感を味わえた楽しい時間であった。その後、参加者全員によるポスターセッション、懇親会とあつという間に時間は過ぎた。

参加者の感想を総合すると、事前に考えていたよりも断然面白かったとの声がほとんどだった。皆さん未知のものに対する好奇心で昂り、若手だけの会なことであつて率直な質問を気安くぶつけていたように思う。筆者にとってはハミルトニアンも持たず複雑な自然へ土足で踏み込んで行く行為が新鮮であった。逆に基生研の参加者からは、分子研流のカチっとしたアプローチを凄いと感じたという声も聞かれた。生命は追い風でいいですねと言うと、彼らの閉塞感も小さなものではないとのこと。もしかすると閉塞感を感じるの



は、その人の所属する分野のせいというよりも、感じる人がその分野の空気しか吸っていないためであるのかもしれない。だとすれば、交流会で感じた爽快感は他の分野の空気を吸ったことによるのだと合点がいく。これは若手にとっては特に大事なことだと思う。

さて、概ね参加者から喜ばれた交流会であったが、少ない反省点として多くの人から挙げられたのは、半日では短すぎるとの点であった。これは世話人としては嬉しい反省点で、より充実したものにして頂くよう今年度メインの世話人に昇格した木村助教に引き継ぎ済みであるのでご期待頂きたい。

若手の皆さんへ：PIにもなれば、レベルの高い異分野との交流機会も多々あると思いますが、若い世代には貴重です。この機会を逃す手はありません。かなり楽しいです。木村助教から案内が届きましたら、是非参加をご一考下さい！

(安池 智一 記)

## 学協会連携分子研研究会「分子科学会シンポジウム(第5回)」報告

平成23年6月28日(火)、29日(水)の2日間にわたって、岡崎コンファレンスセンターにて、学協会連携分子研研究会が開催されました。本研究会は分子科学会が毎年開催している分子科学会シンポジウムとの共催という形で行われました。大学院生と若手研究者を中心に73名の方々にご参加いただきました。「埋没界面が分子科学に何をもたらすか」をメインテーマとして、3つのセッションが開かれました。セッション(1)「界面の液体計測」では、これまで全く観ることのできなかった界面の現象が、先端的な測定法の開発により明らかになりつつある現状が示されました。総合討論では、分子科学の新

しい方向性を見出そうとする意欲的な意見が多く出ました。セッション(2)「界面の液体シミュレーション」では、界面現象を取り扱う新しい理論的手法の紹介、シミュレーション結果に基づいて埋没界面をどのように理解するのかといった解説がなされました。総合討論では、理論と実験の発展的關係という分子科学に不可欠な問題に対しても議論が及び、それぞれの専門家による本音の討論がなされました。この様子は、本研究会ならではの光景として参加者への強い刺激となりました。日をまたいでセッション(3)「界面の固体計測」では、不連続・不均一である埋没表面で起きていることを、「その場で

そのまま観る」ことの重要性が示されました。総合討論では、興味深い実験結果に触発され、さらにその先のごとが知りたいという質問が多く出ました。

それぞれのセッションが大いに有意義であったことは、研究会の企画に多大なご尽力を頂いたディスカッションリーダー、ご自身の最新成果を含めてわかりやすく研究分野の現状と未来をお話し下さった講師の先生方、さらに、積極的に議論に加わっていただいた参加者の皆様のお蔭にほかなりません。ここに厚く御礼を申し上げます。

(中井 浩巳 記(早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 教授、分子科学会 企画委員長))



## 宇理須教授・西教授・薬師教授退職記念の会

生命・錯体分子科学研究領域・生体分子情報研究部門・教授の宇理須恒雄先生、物質分子科学研究領域・電子構造研究部門・教授の西信之先生、物質分子科学研究領域・電子物性研究部門・教授の薬師久弥先生が、平成23年3月をもって分子科学研究所を定年退職されました。宇理須先生は、平成4年に極端紫外光科学研究系教授として着任され、極端紫外光科学研究系主幹、装置開発室室長、運営会議議長を務められました。西先生は、昭和54年に電子構造研究系助教授として着任され、平成3年に九州大学の教授として栄転された後、平成8年から関連研究領域流動研究部門の教授を併任、平成9年より再び電子構造研究系に教授として着任され、電子構造研究系研究主幹、分子構造研究系研究主幹、組織再編後の物質分子科学研究領域研究主幹、研究総主幹、機構研究連携室員・評議員、総研大・物理科学研究科長・評議員などを歴任されました。薬師先生は、昭和63年に分子集団研究系・物性化学研究部門教授として着任され、極端紫外光施設長、分子集団研究系主幹、極低温センター長、装置開発室長、機器センター長、運営協議会人事選考部会長、運営会議議長総研大・物理科学研究科・

構造分子科学専攻長を務められました。

定年退職にあたって、平成23年3月11日午後より岡崎コンファレンスセンター大会議室において退職記念の会を開催しました。記念事業として、所長・大峯巖先生のお祝いの言葉の後、宇理須先生による最終講義「43年の研究生生活を振り返って」、西先生による最終講義「学生堅気で通した38年：新分野の学びと創造・発見の繰り返しから」、薬師先生による最終講義「分子導体と分子振動」が行われました。

宇理須先生は、学生時代（東大理・化学・森野～朽津研）の原子・分子衝突とマイクロ波分光、電電公社・NTT（電気通信研究所・水島研、LSI研究所・吉川研）時代の現在の光通信技術の基となるレーザー量子光学、やはり現在のIT革命の基盤となる超LSIの放射光励起半導体プロセスによる製作技術の開発、分子研に着任してからの放射光表面光化学反応、さらには、半導体と生体をつなぐ、現在も継続中の研究である脳や神経のイオンチャンネル・神経細胞ネットワークの素子化等のお話をされました。ご定年時は装置開発室長でいらっしゃいましたが、いずれの時代も一貫して装置開発を通じた研究であったと締め括られました。

西先生は、学生時代（九大理）から東大物性研（木下實研）助手時代の励起3重項発光、オランダ・ライデン大学留学時のスピンエコー法による光合成発光中心などの電子移動機構の研究、分子研助教授時代のレーザー光解離ダイナミクス・ラジカル発光、九大教授時代の気相クラスターや液滴ビーム作成技術開発、分子研に戻られたあたりのアルコールや酢酸の水中でのクラスター構造、さらには現在の継続中の金属アセチリドを用いた肺胞状の新しいカーボン材料の合成とリチウムイオン電池への応用などのお話をされました。新しい装置・物質・手法を見出すことを目標に自分で失敗し成功することの喜びを学生気質と表現され、38年にわ



たる公費による研究費支援を感謝されました。

薬師先生は、分子研に着任されて以降のご研究、フタロシアニンの伝導電子と局在スピンの相関、有機電荷移動錯体における普通は光では見えないプラズモンの観測、BEDTTTF系有機電荷移動錯体における電荷秩序相のラマン分光等による状態解明、さらには最近の電子強誘電体の発見、光励起強誘電性への期待、SHG顕微鏡による微視的観察などのお話をされました。お祝いに駆けつける予定で急遽来日がかなわなくなったテキサス大学ダラス校のZakhidov教授との金属ドープC<sub>60</sub>の超伝導に関する共同研究についても紹介がありました。

夕刻、岡崎コンファレンスセンター中会議室において祝賀会が開催され、研究所内・所外合わせて175名（所外88名、所内87名）が出席しました。3教授の先生の奥様もそろってご出席されました。祝賀会は、日立製作所中央

研究所フェローの神原秀記先生、名古屋大学大学院理学研究科教授の篠原久典先生、東京大学大学院工学系研究科教授の鹿野田一司先生のご祝辞に続いて、所長・大峯巖先生の挨拶と乾杯で始まりました。続いて、横浜国立大学・大学院工学院・教授の荻野俊郎先生、九州大学・大学院理学研究院・教授の関谷博先生、北海道大学・大学院理学研究科・准教授の河本充司先生がご挨拶され、ご祝辞を述べられました。また、急遽来日できなくなったZakhidov教授から薬師先生宛に肖像画の贈り物があり披露された他、宇理須先生宛には中国・上海交通大学・教授のChangshun Wang先生、インド・マドラス工科大・教授のRanga Rao先生、西先生宛には米国・ペンシルバニア州立大学・名誉教授のA. W. Castleman, Jr先生、英国・ノッティンガム大学・教授のA. J. Stace先生らからのお祝いの電子メールも紹介されました。最後に、記念品・花束の贈呈、3先生方のご挨拶がありま

した。3名の先生をお送りするにはかなり手狭の中会議室でしたが大変盛会だったと思います。

この日、西先生の最終講義のさなかの14時46分に未曾有の東日本大震災が発生しました。祝賀会でご挨拶いただく予定の榎敏明先生（東京工業大学・大学院理工学研究科・教授）はじめ数名の方々がご来所不可能になり、また多くの方々が帰れなくなり岡崎や名古屋に宿泊されることになりました。最終講義や祝賀会もかなり騒然とした状況だったと思いますが、なんとか最後まで執り行うことができました。数々の不手際をお詫びし、参加して協力いただいた175名の皆様と不参加ながらお祝いをお送りくださった95名の皆様に対して心より感謝の意を表します。また、被災された方々には心からお見舞い申し上げたく存じます。最後にこの記念事業のために様々なご支援をいただいた分子研の皆様に御礼申し上げます。

（横山 利彦 記）

## 分子研実験棟耐震改修工事

約2年間にわたり所内の方々や分子科学コミュニティの皆さま方のご協力により実験棟の耐震改修工事が平成22年度末に竣工し、実験室のフル稼働に向けて始動しました。

これまでは、工事スケジュールに合わせて実験室移転や工事停電、断水などの対応で騒々しい研究活動の日々であったと思います。実験棟は分子研の建物群の中央に位置しているので付属施設棟、南実験棟、研究棟に行くためのアクセスの要所となっています。そのため毎日の

生活ではどうしても工事エリアの中を通行しなければなりません。その工事エリア付近ではコンクリートを砕く音、粉じん、ペンキの溶媒臭、そして多くの工事業者らと行き交う喧騒の日常でしたが、今は祭りの後の静けさのように感じられます。

さて、実験棟全体は真新しくなりましたが、実は館内の案内サインだけまだ古びた物が掲げられています。中でも一番大きな、部屋の配置図看板が改



改修後の実験棟

修工事の前から、しかも一番目立つ壁に掛かっています。いつ頃制作されたのでしょうか。看板の中に「分子クラスター部門」と記載されています。部門名の中では一番新しく、設置されたのは1996年で2004年には改組でこの

部門名はなくなっています。山手地区への展開前の状態から時間がストップしてしまったようです。その後の明大寺地区での人の動きの中で、老朽化して使うのが困難な実験室がそのままとなり、さらに各研究グループの実験室が飛び地状態になってしまい、看板でも表示しにくい状況でした。今回の耐震改修工事で昔のように各研究グループに4~5スパンずつまとめて割り振ることができようになり、現在、ようやく新しい案内サイン看板の制作に入っ

ています。この冊子がお手元に届く頃には、完成予想図のような配置図看板が実験棟に掛かっているはずです。

工事後の実験棟は廊下や室内も明るい色調となり、実験室ドアも桜色に塗装され、以前に比べてずいぶん温かみのある雰囲気となっています。もちろん設備面も新しくなり実験研究が一層進むよう配慮しています。今後も共同研究、共同利用にも盛んに活用されることを期待します。

(鈴井 光一 記)



実験室の配置図看板



完成予想図

## TOPICS 分子科学フォーラム



1996年から通算して89回目となる分子科学フォーラムが、6月10日に開催されました。自然科学研究機構長であり、インフレーション宇宙の提唱者でもある佐藤勝彦機構長に、『宇宙の創生とマルチバース』についてお話しいただきました。“マルチバース”とはこの十数年の間に創られた新しい言葉で“多く”を意味するmultiと、“宇宙”を意味するuniverseをたし合わせたものとの説明から始まり、膨張する宇宙、ビッグバン、インフレーション宇宙という宇宙論の流れを分かり易く解説していただきました。そして、仏教の三千大千世界を物理の言葉で表したともいえるマルチバースの超大な時間と空間の世界に、1時間半たっぷりと浸ることができました。定員200名の岡崎コンファレンスセンター大ホールは満席となり、補助席や中会議室も使用して、ほぼ250名に方々に宇宙の壮大なるストーリーをお楽しみいただきました。岡崎コンファレンスセンターの向かい側に位置する岡崎高校からも、普段より多い20名程度の生徒さんが聴講しました。佐藤機構長からは、「量子宇宙論」という未完の理論について、若い世代の人たちにぜひチャレンジして欲しいとのメッセージも送られました。

(寺内 かえで 記)



永瀬茂教授に平成23年度科学技術分野の文部科学大臣表彰・科学技術賞(研究部門)

加藤晃一教授に平成23年度日本薬学会学術振興賞

香月浩之助教に平成23年度科学技術分野の文部科学大臣表彰・若手科学者賞

松波雅治助教に第15回日本放射光学会奨励賞

山本薫助教に第16回日本物理学会論文賞

矢木真穂研究員に第11回日本蛋白質科学会若手奨励賞

## 永瀬茂教授に平成23年度科学技術分野の文部科学大臣表彰・科学技術賞(研究部門)



このたび、「実験と理論による新規ナノ炭素クラスター開拓の体系的研究」に関して、筑波大学の赤阪健教授と共に平成23年度科学技術分野の文部科学大臣表彰・科学技術賞(研究部門)を受賞しました。具体的な研究内容は、光によるフラレーンの電子特性の制御法の開発、金属内包フラレーンの分子変換と機能化および材料化学への応用、カーボンナノチューブの金属性と半導体性の分離法の確立と導電性薄膜とし

での活用等で、これらの学術論文の被引用回数は4000を超えました。

2001年に分子研に着任して以来、「望む構造、物性、機能をもつ分子を自在に組み立てて思うように反応をさせる」ため理論と計算およびコンピュータシミュレーションに興味をもって研究を行ってきました。このために、(1)量子化学計算の高速化と高精度化、(2)元素の特性を利用した新規分子の設計と反応、(3)分子のサイズと形状が生み出す機能性ナノ分子の開拓を研究の3本の柱にして、実験グループとの共同研究を重視してきました。このたびの受賞で、理論・計算と実験のインタープレイの研究成果が評価されたことを特に嬉しく思っています。

理論・計算と実験のインタープレイは現在では当たり前になっていますが、

昔ははそうではありませんでした。理論予測と実験が一致しない時には、理論予測が間違っているとされました。しかし、量子化学計算の高速化と高精度化は、複雑な系の性質を高い信頼度で理論予測できるようになっています。また簡略化したモデル計算ではなく、現実の系をそのまま扱えるようにもなっています。このために、内外の数多くの実験グループと共同研究を実施してきました。我々の理論計算と予測は信頼できると認められていると自負しています。実験の強力で不可欠なパートナーとなる分子理論と計算法の開発を今後も目指しています。最後に、研究室のこれまでの数多くのメンバーの活躍と赤阪教授の研究グループに深く感謝します。

(永瀬茂 記)

## 加藤晃一教授に平成23年度日本薬学会学術振興賞

このたび、「タンパク質の翻訳後修飾の構造生物学研究」に対して平成23年度日本薬学会学術振興賞を受賞いたしました。大変光栄に存じております。3月末に静岡で予定されていた授賞式は、あいにく震災の影響でとり行われなかったのですが、日本薬学会からは立

派な盾と副賞をお送りいただきました。

生命体を構成しているタンパク質分子の多くは、糖鎖修飾やユビキチン化など多種多様な翻訳後修飾を経てその物性・機能・運命が決定されています。そのため、タンパク質の構造・機能研究において、翻訳後修飾の問題を

避けて通ることはできません。しかしながら、翻訳後修飾は往々にしてタンパク質の立体構造解析に困難をもたらすため、構造生物学の研究課題として積極的には取り扱われてきませんでした。私たちは、こうした状況のもとでタンパク質の糖鎖修飾とユビキチン修

飾に着目し、その生物学的意義を高次構造の観点から探究することに取り組んできました。

私は、2000年3月（東京大学大学院薬学系研究科在職中）に日本薬学会奨励賞をいただきました。その受賞講演後の質疑において、「今後は何をを目指すのですか?」というご質問をいただき、「タンパク質を修飾している糖鎖の機能を構造生物学の観点から明らかにしたいと考えています。」と答えました。その後の10年間にわたる名古屋市立大学薬学研究科ならびに分子科学研究所・岡崎統合バイオサ



イエンスセンターにおける研究活動を通じて、この問題に対して私なりに取り組んでまいりましたことが、このたびの受賞というかたちで評価していただいたものと思います。そのことを、とても嬉しく思っております。そして、

研究を行ううえで苦楽をともにしてきた両研究室の過去・現在のメンバーにもあらためて感謝の意を表したいと思っています。

さて、受賞講演は延期になりましたので、今後何をを目指すのかを公言する機会

もしばらくはなさそうです。当分の間は、言葉や図譜で表現できないような将来構想を自由奔放に夢想する日々を楽しむことができます。このたびの受賞を機に、そのような夢を馳せることができる環境を与えてくれる分子研のありがたみをあらためて実感しています。

(加藤 晃一 記)

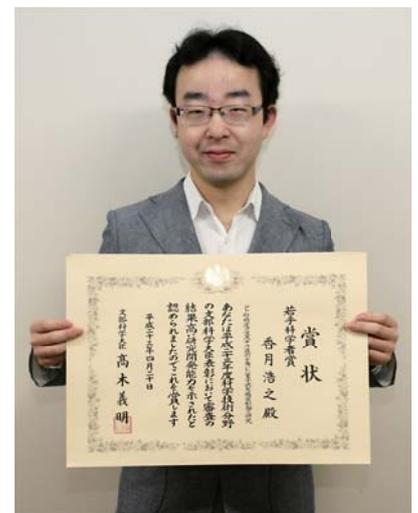
## 香月浩之助教に平成23年度科学技術分野の 文部科学大臣表彰・若手科学者賞

このたび、「アト秒精度の波束干渉技術を用いた量子状態精密制御の研究」という題目にて、平成23年度科学技術分野の文部科学大臣表彰・若手科学者賞を頂きました。分野の異なる人には、このタイトルだけではどういう研究なのかなかなか伝わらないと思うので、この場を借りてもう少しわかりやすく説明します。

気相中の孤立二原子分子（実際用いたのはヨウ素分子）に可視域の超短パルスレーザー光を照射することで、その電子励起状態中に振動固有関数の重ね合わせ（波束）を作ることができます。この波束と呼ばれる状態は、時間の経過とともにその形を変え、ポテンシャル上を運動します。この状態の分子に、もう一発同じ超短パルスレーザー光を入射すると、最初の波束と二発目のパルスで生成した波束が重ね合わさって干渉が起こります。これが波束干渉です。この波束の状

態の位相は、およそ2フェムト秒（1フェムト秒= $10^{-15}$ 秒）という短い周期で振動しているので、二発目のパルスを入射するタイミングを数十アト秒（1アト秒= $10^{-18}$ 秒）の精度で制御することで、二つの波束間の相対位相を制御しながら波の重ね合わせを作成することができます。波束に含まれる各振動固有状態はそれぞれに少しずつ異なる周期で振動しているため、波束間の相対位相を制御することで、これらの状態毎に異なった「操作」を施すことが可能となります。これまでの私の研究では、こうした波束干渉の様子を時空間で観測・制御することを行ってきました。

このような技術は一般的にコヒーレント制御と呼ばれ、化学反応の生成分岐比制御や、分子や原子の量子状態を媒体とした量子計算、量子情報通信などの分野への応用が期待されています。最近、波



束干渉制御の手法をより複雑な固体凝縮系に応用する研究を行っており、ようやく結果が出始めたところです。今回の受賞に驕ることなく、一方で自分の研究に誇りと確固たるビジョンを持ちながら、今後も研究を続けていきたいと思っています。最後になりましたが、分子研赴任以来、一緒に研究を続けてきた大森教授、千葉技術職員にこの場を借りて改めて感謝いたします。

(香月 浩之 記)

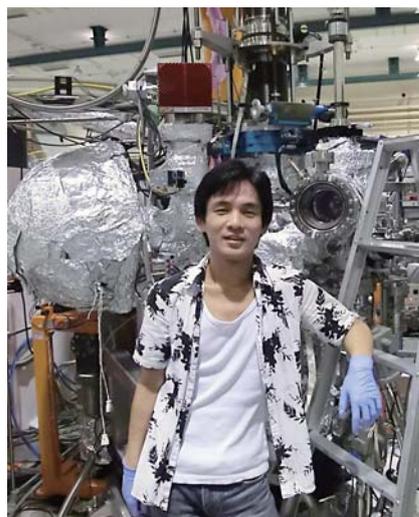
## 松波雅治助教に第15回日本放射光学学会奨励賞

2011年1月につくば市で開催された第24回日本放射光学学会年会・放射光科学合同シンポジウムにおいて、「光電子分光と光反射分光を組み合わせた強相関電子系の研究」に関する業績により、第15回日本放射光学学会奨励賞を受賞いたしました。本賞の歴代受賞者は、放射光科学の第一線で活躍されている立派な方々ばかりであり、このような荣誉に浴することができましたことを大変光栄に思います。

私はこれまでに、近年の物性物理学において最も重要なテーマの一つである強相関電子系の研究に取り組んできました。特に、シンクロトロン放射光を利用した「硬X線・軟X線光電子分光」と「赤外-紫外光反射分光」による固体電子状態の研究を推進してきました。本賞では、(1) これら二つの手法を相補的に組み合わせる新しい情報を得るための方法論を確立したこと、及

び(2) 超高压力下における赤外分光法を開発し、強相関電子系の研究に適用したことを評価して頂きました。前者では、Yb化合物の内殻光電子スペクトルに現れるサテライト構造を、光反射スペクトルから得られるエネルギー損失関数との比較によって解析するという手法により、Yb価数を精密に決定できることを示し、これまでの価数評価における問題点を解決しました。後者では、常圧で単純なイオン性絶縁体であるYbSという物質に対して、10万気圧を超える圧力を加えると、強相関金属へと電子状態が劇的に変貌する様子を観測することに成功し、その絶縁体-金属転移のメカニズムを解明しました。以上の研究成果は、いずれも近年のシンクロトロン放射光を用いた実験技術の発展によって初めて可能となったものであります。

今後の研究としては、これまでに習



得してきた赤外線やX線を利用した実験手法に、UVSORにおける真空紫外線を用いた光電子分光という新しい“武器”を追加することにより、赤外線からX線までの切れ目のない波長範囲の光を駆使して、固体物理における謎に挑み続けていきたいと考えています。

なお、本賞には木村真一准教授にご推薦頂きました。この場を借りて御礼申し上げます。

(松波 雅治 記)

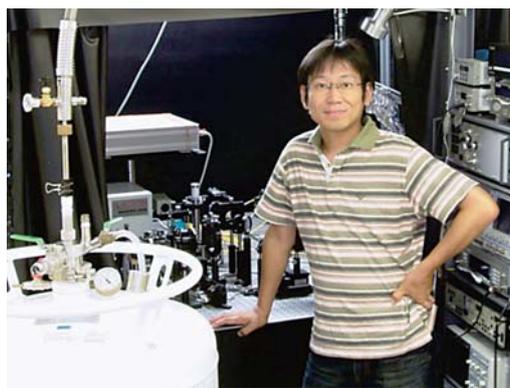
## 山本薫助教に第16回日本物理学会論文賞

このたび“電子型の強誘電性に基づく有機伝導体の高い光学非線形性とその超高速応答”に関する我々の研究論文が第16回日本物理学会論文賞に選出されました。共同研究者を代表して関係者の方に厚くお礼申し上げます。

研究の発展は直感と食い違う現象から始まることが多いかと思います。たとえば、有機物は通常電気を流さないものだと考えられていますが、このような物質から伝導体を創成すると、他の物質では観測できないさまざまな興味深い性質が発現します。今回の研究で、我々は、ある有機伝導体が金属絶縁体転移に伴って強誘電体のように電

気分極することを光学第二高調波の観測により明らかにしました。このたびの賞は、以下に記すようなこの実験結果の“意外感”に贈られたものと理解しています。

電気伝導体の伝導電子は結晶中で非局在化していますが、研究対象とした物質を含むある種の有機伝導体では伝導電子が互いの間に働くクーロン斥力により、結晶のような格子をつくって凍結してしまうことが指摘されてきました。関連する物質は、条件によっては超伝導を示すものも多く、研究者の注目はこの電子の結晶が伝導特



性にどのように寄与しているかということに集まっていました。

一方、我々は、この電子の結晶化現象によって電子密度が増大した部分と減少した部分の間に局所的な電気分極が発生することに注目しました。このような局所分極が方位をそろえて分布しているならば結晶は強誘電的な電気

分極をもつはずで、電子が結晶化することが事実であればこのような分極の発現は予想できたはずですが、そもそもが金属的な伝導性を示すような高伝導性の物質であったため、結晶全体が電気分極するとは想像しにくく、ましてやそれによる機能性の発現は真剣に検討されていなかったようです。実

際、関連する混合原子価錯体に対してSHG測定がなされたのは、今回の研究がはじめてでした。

通常の強誘電体は結晶中におけるイオンの変位によって分極していますが、この塩ではその役割を電子が担っています。今後の研究では、このような新しいタイプの強誘電体をもつ機能性の

探索が重要になるでしょう。“意外感”の真価がこれから問われることにはなりますが、今後の研究の発展性でそれを示していきたいと思います。

(山本 薫 記)

K. Yamamoto et al. *J. Phys. Soc. Jpn.* **77** (2008) 074709.



### 矢木真穂研究員に第11回日本蛋白質科学会若手奨励賞

いただき、とても光栄な時間でした。

私はこれまで一貫して、ガングリオシドクラスターに結合したアミロイドβペプチドのNMR構造解析を通じて、アルツハイマー病の原因解明を目指した基礎研究に取り組んでいます。アルツハイマー病などの神経変性疾患の発症には、神経細胞膜上で分子集団（クラスター）を形成している糖脂質の存在が深く関わっていることが明らかにされつつあり、特に最近、神経系に豊富に存在するGM1ガングリオシドは、アルツハイマー病に関わるアミロイドβというタンパク質の異常会合を引き起こすことが注目されています。

私は、分子科学研究所の920 MHz高磁場NMR計測を中心とする分光学的手法を用いて、GM1ガングリオシドとの相互作用を契機として促進されるアミロイドβの重合に関する分子メカニズムを明らかとしました。すなわち、GM1が

クラスター化することによりAβ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示すことができ、ガングリオシドクラスターを舞台とするアミロイド形成一般に通ずる新規メカニズムを提起することができたと考えています。

このような研究成果に対して、今回、このような素晴らしい賞を受賞することができて大変嬉しく思っています。本研究に対しご指導いただきました加藤晃一教授をはじめ、共同研究者の先生方に深く感謝いたします。

今後ともこの受賞を励みに、日々精進し、多くの研究成果を残せるようにさらに頑張りたいと考えています。

なお、研究成果は分子科学研究所ホームページ (<http://www.ims.ac.jp/topics/2010/110217.html>) にも紹介していますので、是非ご覧ください。

(矢木 真穂 記)

このたび、6月に大阪で開催された第11回日本蛋白質科学会年会にて、「ガングリオシドクラスターを舞台とするアミロイドβの構造転移と分子間相互作用」の研究において、若手奨励賞を受賞いたしました。この若手奨励賞は2008年度から始まり今年で第4回となります。表彰式は、懇親会の会場にて、300名を超える懇親会参加者に見守られる中行われました。講演発表以上に緊張しましたが、多くの方に祝福して

## 01 Symposium on Cooperative Catalysis 協同機能触媒シンポジウム

報告：生命・錯体分子科学研究領域 教授 魚住 泰広

平成22年12月17日～18日の二日間、ハワイのヒルトンハワイアンビレッジにおいて、「協同機能触媒シンポジウム」をJSPSアジアコアプログラムの一環として開催した。中国側はKuiling Ding教授（上海有機化学研究所）が、日本側は西田教授（千葉大学）と魚住（分子研）がそれぞれ世話人として準備を行った。今回のシンポジウムは、Pacifichem学会の会期に合わせて開催するという事で、アジアのみならず、世界各国の関連領域研究者等とともに議論、情報交換する集大成的なシンポジウムにしたいという思いもあり、アメリカからもRick Danheiser教授（MIT）をセミナー座長としてお迎えした。

本シンポジウムでは、主に中国、日本、アメリカから同研究分野において世界的に著名な研究者を招待講演者としてお招きし、二日間で18名の招待講演と12名の一般講演を実施した。また、博士研究員や博士課程学生を中心に22件のポスター発表が実施され、日本、中国、韓国からは100名以上、その他各国から約150名にも及ぶ参加者があった。特に、柴崎教授（微化研）、K. C. Nicolau教授（The Scripps Research Inst.）、B. M. Trost教授（Stanford Univ.）、E. N. Jacobsen教授（Harvard Univ.）の講演では、押し掛けた聴衆が会場に入りきらず、廊下まで人が溢れるほどの盛況ぶりであった。なかでもNicolau教授と柴崎教授は30年以上前に米国Harvard大学のノーベル賞科学者であるE. J. Corey教授の研

究室で博士研究員として共に過ごされて以来の親友の間柄で、互いの若かりし日の写真などを講演に織り込んだり、Nicolau教授の講演では立ち見の聴衆に席を譲るべく柴崎教授みずから通路床に座り込んだり、第一級の研究内容に加え和やかな空気をシンポジウム全体に与えて下さった。また柴崎教授の講演では化学領域の最高レベルの学術誌Angew. Chem.誌の編集長Peter Göllitz博士が来聴に見える（Pacifichemでは同時に数十～100近いシンポジウムが開催されている中で！）など本シンポジウムの学術レベルと注目度の高さを伺わせるものであった。

アジアコアの一環としても、魚住がKuiling Ding教授とともに展開して来た共同研究の成果、さらには関連周辺領域のアジア地域の研究アクティビティーを世界に発信する好機となったものと考えている。ポスターセッション

ンでは分子研日韓交流にプログラムでかつて魚住研究室に滞在されていたRhee教授が参加して下さり久々に旧交を温める機会を得、個人的にも有意義な国際研究会となった。

今、2011年の夏を迎えつつある中で本稿を書いている。昨年12月にハワイで購入したアロハシャツが活躍しそうな夏である。本シンポジウムに参加して下さい下さった皆様のますますのご活躍を確信している。

ポスターセッションにて



シンポジウム講演者、世話人などの集合写真

## 02 アジアコア・総研大共催「アジア冬の学校」

報告：光子科学研究領域 教授 大島 康裕、極端紫外光研究施設 准教授 繁政 英治

2011年2月19日(土)～22日(火)の期間、岡崎コンファレンスセンターにおいて、「アジア冬の学校」が開催された。今回の冬の学校は、総研大とJSPS アジア研究教育拠点(アジアコア)事業との共同主催であった。また、プログラムの一部に、JENESYS計画に基づく学生交流支援事業で分子研に滞在する学生の口頭及びポスター発表会を含めることにより、参加者間の交流を深めることを企画した。総研大・物理科学研究科では、研究科内の5専攻で行っている研究・教育活動をアジア諸国の大学生・大学院生および若手研究者の育成に広く供すべく、2004年度よりアジア冬の学校を開催してきた。分子研(構造分子科学専攻・機能分子科学専攻)での開催では、これまでの総計で330名を超える学生・若手研究者がアジア各国から参加している。一方、分子研でのJSPSアジアコア事業として、中国・韓国・台湾・日本間での研究教育交流を2006年度よりス

タートしており、その事業の一環として、初年度から冬の学校を開催し、多数の学生・若手研究者が参加している。

本年度は、この2つの冬の学校を融合し、更にJENESYSの学生7名も参加する形での開催とした。海外からは、韓国18名、中国から17名、タイ12名、台湾7名、マレーシア3名、ベトナム2名、フィリピン2名、シンガポール1名、インドネシア1名、インド1名、計64名の研究者・学生が参加した。国内からは61名の参加があり、そのうち総研大生は21名であった。当冬の学校では、一般講義と全体講義、及び参加者による口頭・ポスター発表が行われた(プログラムの詳細は下記のとおり)。一般講義では、アジアコア事業の拠点4機関からの講師8名が、分子科学の各領域における最先端のトピックスや関連事項に関する講義を行なった。また、物理科学研究科内の交流事業の一環として、核融合科学専攻及び宇宙科学専攻から派遣された講師各1名が、エネルギー及び生命に関連

する研究についての講義を行った。全体講義として、理論及び物質分子科学領域から、世界的に活躍している研究者2名が、これまでの業績を中心に研究の背景や意義から今後の展望までを紹介した。さらに、本冬の学校では、学生・若手研究者が司会進行ならびに口頭発表を行う「若手セッション」を初めて開催した。様々な地域から集まった多数の同年輩の研究者を前に、英語で研究発表ならびに質疑応答を行うという機会に恵まれた発表者たちは、緊張しつつも十分準備してきた成果を遺憾なく発揮した。司会進行の担当者も、建設的な議論の場をいかに作り出すかという重要な役割を精一杯こなしていた。このセッションをうけて若手全員によるポスターセッションも開催され、例年にも増して活発な意見交換が行われた。これらの若手による取り組みは、当初の目的であるコミュニケーション能力や研究企画能力の主体的な開発へと繋がるものと大いに期待できる。



## The Winter School of Sokendai/Asian CORE Program

## “Frontiers of Molecular Science - Life Material Energy and Space”

## Program

## February 19

14:00-17:30 Registration  
18:00-20:00 Welcome Reception

## February 20

9:00-10:00 **Prof. Hiroki Nakamura** (Natl. Chiao Tung University Taiwan)  
“Future Perspectives of Nonadiabatic Chemical Dynamics --- From Comprehension to Control”  
10:00-11:00 **Prof. Jae Ryang Hahn** (Chonbuk National University Korea) “Seeing and Touching Single Molecules at a Time”  
11:20-12:20 **Prof. Katsumi Ida** (NIFS) “Live Plasma”  
13:30-15:30 Oral Presentation by Participants  
15:50-17:50 Mini-Symposium Organized by JASSO-JENESYS Program  
18:20-20:00 Dinner

## February 21

9:00-10:00 **Prof. Yuji Furutani** (IMS) “FTIR Studies of Membrane Proteins”  
10:00-11:00 **Prof. Dong Qiu** (ICCAS China) “Biomedical Materials by Non-toxic Sol-gel Route”  
11:20-12:20 **Prof. YounJoon Jung** (Seoul National University Korea)  
“Molecular Dynamics Simulation Study on Carbon Nanotubes in Benzene”  
12:20-12:30 Group Photograph  
12:30-15:00 Poster Session 1 (with light meal)  
15:00-16:00 **Prof. Mei-Yin Chou** (IAMS Taiwan) “Electronic and Transport Properties of Graphene Systems”  
16:00- Lab Tour

## February 22

9:00-10:00 **Prof. Mizuki Tada** (IMS) “Structure and Reactivity of Heterogeneous Catalysts”  
10:00-11:00 **Prof. Yong Sheng Zhao** (ICCAS China)  
“Controlled Synthesis and Photonic Properties of Organic One-Dimensional Nanomaterials”  
11:20-12:20 **Prof. Noriaki Ishioka** (JAXA) “Biomedical Research in Space”  
12:30-15:00 Poster Session 2 (with light meal)  
15:00-16:20 **Prof. Biman Bagchi** (Indian Institute of Science India) “Single Molecular View of Fundamental Biological Processes”  
16:40-18:00 **Prof. Toshiaki Enoki** (Tokyo Institute of Technology) “Physical Chemistry on Nanographene and Graphene Edges”  
18:30-20:30 Dinner Party

## 03 「物質・光・理論分子科学フロンティア」第5回年次会議

報告：光分子科学研究領域 教授 大森 賢治

去る2011年2月23日に、岡崎コンファレンスセンターにおいて標記会議が開催された。本会議は、平成17年度から分子科学研究所 (IMS)・中国科学院化学研究所 (ICCAS)・韓国科学技術院自然科学部 (KAIST)・台湾科学院原子分子科学研究所 (IAMS) が連携して進めてきた標記事業の一環として開催された。最新の研究成果を議論し親睦を深めるとともに、2010年度の事業活動を総括し今後の展望を議論するのが主な目的である。今回は特に、本事業の最終年度を締めくくるにあたって、5年間の総括と、本事業後の研究交流の在り方を議論する場として設定された。

プログラムを以下に掲載する。今回はポスター発表を行わなかった。

会議の最後に、IAMSのMei-Yin Chou新所長を始めとする各4機関の責任者の中でビジネスミーティングが行われ、今後も4機関の間で独自のアジアコアプログラムを継続推進して行くこと、そのための自己財源を確保すべく各機関が努力を続けること、分子研は再びJSPSアジア研究教育拠点事業への採択を目指し努力すること、次回のアジアコア冬の学校および全体会議を中国で開催すること、次々回は韓国で開催すること、などで合意が取り交わされた。また、これまで交流の際

に訪問者側が自ら負担して来た現地経費を、現地の受け入れ側が負担する方針に切り換えることで合意した。このビジネスミーティングにおいて、中国、韓国、台湾の責任者が本事業の発展的な継続を強く望んでいる事がわかったことは有意義であった。日本以外のアジア諸国が急速に力をつけてきているとは言え、アジア地域の今後の分子科学の発展においては日本が果たすべき責任が未だに大きいようである。

最後に、大島康裕教授を始めとして、本会議の成功のためにご尽力いただいた分子科学研究所のみなさんに感謝します。

## 「物質・光・理論分子科学フロンティア」第5回年次会議

## Welcome address

10:00 - 10:10 Kenji Ohmori (IMS Japan)

## Session 1: Introduction by Representatives

10:10 - 10:25 Iwao Ohmine (IMS Japan) Future Prospects of Molecular Science in Japan

10:25 - 10:40 Sang Kyu Kim (KAIST Korea) Yesterday, Today, and Tomorrow of us in Asian Core

10:40 - 10:55 Dong Qiu (ICCAS China)

10:55 - 11:10 Mei-Yin Chou (IAMS Taiwan) Research Activities at the Institute of Atomic and Molecular Sciences of Academia Sinica in Taiwan

## Session 2: Activity Reports

13:45 - 14:10 Donglin JIANG (IMS Japan)

Design Strategy and Synthesis of Two-dimensional Polymers and Frameworks

14:10 - 14:35 Hiromi Okamoto (IMS Japan) and Penglei Chen (ICCAS China)

Nano-optics of characteristic nano-molecular systems:

Part 1 (Okamoto) : Motivation and near-field imaging/spectroscopy developments

Part 2 (Chen): Self-Assembled One-dimensional Nanostructures by  $\pi$ -Conjugated Molecules: Fabrication,

Characterization and Functionalization

14:35 - 15:00 Kaito Takahashi (IAMS Taiwan) Effect of Hydrogen Bonding on OH Vibrational Dynamics

15:00 - 15:25 Seokmin Shin (SNU Korea) Center for Space-Time Molecular Dynamics (CMD Korea)

## Session 3: General Meeting to Exchange Opinions

15:45 - 16:00 Hiroki Nakamura (N. Chiao Tung U. Taiwan) Rising of Asia and Asian Collaboration in Molecular Science

16:00 - 17:30 General meeting

## 04 台湾—日本ナノバイオメディカル交流セミナー

報告：生命・錯体分子科学研究領域 教授 宇理 須恒雄（現 名古屋大学特任教授）

アジアコアの共同研究「アミロイドベータの凝集と脂質二重膜との反応」の成果を報告する目的で、平成23年2月24日-25日と台湾アカデミアシニカのゲノムセンターにて開催された第2回台—日ナノメデシ国際シンポジウムに出席し、講演を行った。日本側からは、宇理須恒雄、鈴木光一、吉田久史、青山正樹、水谷伸雄、近藤聖彦、高田紀子の分子研職員と、京大再生医科学研究所の岩田博夫教授他3名と日本ナノメデシ交流協会事務局長松岡亜継子、さらに現在台湾で客員教授として研究をされている、増原宏先生、小林孝嘉先生などが参加した。日本側からは、“Living cell manipulation, nanoparticle fabrication, and molecular crystallization by laser: an expository research” (増原)、“Cell surface modification with polymer

for biomedical studies” (岩田)、“An invitro neural network device as an useful research platform of neuro science and nanomedicine” (宇理須)、“Possibility of multi color imaging with several light sources” (小林)、“Development of multi-channel incubation-type planar patch clamp biosensor using PMMA substrate” (高田)等の発表を行った。

台湾側からは、台湾を代表するナノメデシ分野の研究者、Kuan Wang, Pei-Lin Chen, Yuh-Lin Wang, Chung-Hsuan Chen などから多数の非常に高いレベルの発表があった。

会議の中程には、台湾の科学技術行政の中核におられる方とおぼしき、Maw-Kuen Wu アカデミアシニカ教授から “An overview of the nanotechnology development in Taiwan” の講演が有り、

現在世界一を誇るSi半導体技術の中核として、台湾を戦略的にナノテクアイランド化して行く抱負を聞いた。この中でナノメデシは台湾が今後最も力を入れる研究分野の一つであるということであった。分子研からの参加者は、特にナノテクノロジーに興味があることから、この会議の前日に、Pei-Lin Chen アカデミアシニカ教授の研究室や、中興大学のGou-Jen Wang教授の研究室を訪問し、勉強する機会を持った。アジアコアプロジェクトが22年度で終了し、また、宇理須が4月から名大に移ることが決まっているのであるが、今後もこのような日本-台湾の交流を継続し、共同研究を発展させることで、お互いの意思を確認することが出来た。

## 05 第3回韓日生体分子科学セミナー（実験とシミュレーション）

報告：生命・錯体分子科学研究領域 教授 桑島 邦博

蛋白質を始めとする生体分子の構造形成と機能発現の分子機構に関する研究は、ポスト・ゲノムの重要な研究として位置づけられる。特に、バイオインフォマティクスやシステム生物学などの情報科学を基盤とした新しい研究分野が大きく進展しつつある中で、生体分子の物理化学を基盤とした研究の重要性も今後ますます高まって行くと期待される。このような研究を担って行くのは分子科学者、生物物理学者、生化学者などであり、日本の分子科学研究所、韓国のKIASとKAISTでは、このような生体分子の物理

化学に関する研究も盛んである。そこで、本セミナーは、これらの研究所が中心となって日韓の共同セミナーを開催し、両国間のこの分野の研究交流を深めることを目的に平成20年度から開催され、今回で第3回目となる。第3回のセミナーは、平成23年2月27日-3月1日の3日間、韓国済州島ロッテホテル内で開催された。全部で40件の講演があり、内訳は、日本側から22件、韓国側から15件の計37件に加え、中国から2件、米国から1件の講演があった。参加者は、一般参加者を含め70名程度であった。こちんま

りとしたセミナーであったが活発な討論があり、皆大変満足できる内容であった。

今回の発表内容は、蛋白質のフォールディングとアミロイド形成などに関する分子レベルの実験とシミュレーションに加え、蛋白質超分子複合体形成機構、蛋白質のリガンド認識に関する実験とシミュレーション、腫瘍細胞を特異的に細胞死に導く脂質複合体や蛋白質脂肪酸複合体に関する発表などがあった。学振の事業として行われるセミナーは今回が最後となるが、次年度も同様のセミナーを続けたいとの要望が日韓双方からあった。



<sup>1</sup>Shigetoshi Aono, <sup>2</sup>Yoshitsugu Shiro, <sup>3</sup>Hiroshi Fujii, <sup>4</sup>Jooyoung Lee, <sup>5</sup>Sun Chou, <sup>6</sup>Zengyu Chang, <sup>7</sup>Weontae Lee, <sup>8</sup>Ryuichi Ueoka, <sup>9</sup>Fumio Hirata, <sup>10</sup>Hang-Cheol Shin, <sup>11</sup>Kunhiro Kuwajima, <sup>12</sup>Mikio Kataoka, <sup>13</sup>Masahide Terazima, <sup>14</sup>Sung Jong Lee, <sup>15</sup>Changbong Hyeon, <sup>16</sup>Yumlembam Hemajit, <sup>17</sup>Tomoki P. Terada, <sup>18</sup>Leihan Tang, <sup>19</sup>Koichi Kato, <sup>20</sup>Lehan Tang, <sup>21</sup>Tae-Young Yoon, <sup>22</sup>Young Min Rhee, <sup>23</sup>Yuko Okamoto, <sup>24</sup>Sajida Akhtar, <sup>25</sup>Keehyoung Joo, <sup>26</sup>Sihyun Ham, <sup>27</sup>Bobee Jang, <sup>28</sup>Dae Seok OH, <sup>29</sup>Mikyung Nam, <sup>30</sup>Kay Tanaka, <sup>31</sup>Sangjin Sim, <sup>32</sup>Nomura, <sup>33</sup>Norio Yoshida, <sup>34</sup>Satoru Ito, <sup>35</sup>...

## 06 EXODASS general meeting and mini-symposium

報告：物質分子科学研究領域 准教授 櫻井 英博

20年度後期より3期にわたって実施された、JSPS事業「若手研究者交流支援事業～東アジア首脳会議参加国からの招へい～」(JENESYSプログラム)の後継プログラムとして、分子研独自予算によるEXODASS(EXchange prOgram for the Development of Asian Scientific Society)プログラムが発足し、4月より第1回目の招聘が開始された。

本事業は、現代自然科学が解決すべき問題のひとつである環境・エネルギー問題を中心とした分子科学の諸問題に対して、東南アジア諸国における自国での研究開発を可能にするための基礎研究基盤の確立を協力を支援すべく、主として学位取得前後の若手研究者を招聘し、また本交流事業後のフォローアップとしての共同研究体制を確立し、自国における基礎研究の継続を力強くサポートすることで、基礎科学の定着を推進することを目的としている。

今回は昨年12月から1月にかけて募集及び候補者選考が行われ、その結果12名の招聘を内定した。しかし、3月

11日に発生した東日本大震災の影響で、中国系マレーシア人を中心に4名の辞退があり、最終的には8名という比較的少数の招聘となった。内訳はタイより6名、ベトナムより1名、シンガポールより1名である。

招聘は2011年4～8月にかけて実施され、各研究者に応じて、25～60日の期間での研究プログラムが組まれた。また5月26日に、全員の招聘者を一同に会し、全体会議とミニシンポジウムを開催した。本プログラムの大きな目的のひとつとして、将来にわたるアジア分子科学ネットワークの形成があり、各国の同世代の若手研究者の横のつながりを形成する上でこの全体会議の役割は非常に大きい。今回も、分子研に在籍している多くの留学生も参加し、大いに盛り上がった。

なお、JSPSから改めてアナウンスがありJENESYSプログラムの第4期の実施が決まり、分子研はこの4期についても実施研究期間として採択された。今後これらJENESYS/EXODASS両プログラムの発展により、アジア地

域における分子研のプレゼンスと分子科学ネットワークの強化が益々図られることが期待される。



## 07 第14回日韓分子科学シンポジウム

報告：理論・計算分子科学研究領域 教授 斉藤 真司

7月5日から8日にかけて、韓国釜山市において第14回日韓分子科学シンポジウムが開催された。この日韓分子科学シンポジウムは、1984年の分子研と韓国科学技術院（KAIST）の間の協定に遡る。この協定に基づき、1984年に第1回シンポジウムが分子研で開催され、その後、毎回テーマを設定し2年毎に韓国と日本で交互に開催し現在に至っている。なお、2006年からは韓国化学会物理化学分科会がこのシンポジウムの韓国側対応組織となっており、今回も2011年韓国化学会物理化学分科会夏季シンポジウムを兼ねて開催された。

今回のシンポジウムでは、“New Visions for Spectroscopy and Computation: Temporal and Spatial Adventures of Molecular Sciences” という主題のもと、日本、韓国からそれぞれ12、15件の講演が行われた。またそれらの内容は、超高速分光法による電子状態・位相、回転、振動制御・操作から表面選択的分光法および原子間力顕微鏡

による界面の構造およびダイナミクス、ナノ物質の電子的・光学的性質、触媒反応、生体分子のダイナミクスや機能、生細胞のイメージングにまで及ぶ広範かつ非常に興味深いものであった。議論もとても活発で、私自身どの講演も非常に楽しませていただいたが、十分な質疑応答時間を設定・確保できなかったのが残念であった。

冒頭に記したように、本シンポジウムは韓国化学会物理化学分科会夏季シンポジウムを兼ねており、大学院生による74件のポスター発表も行われた。日韓の講演者による投票により5件のポスター賞を決定し、懇親会ではポスター受賞者による英語での挨拶も披露された。懇親会においては、受賞者以外にも多くの大学院生が感想を述べ、学部時代に交換留学生として日本に滞在した学生による流暢な日本語による挨拶など、非常に和やかで楽しい時間を共有させていただいた。また、物理化学分科会会長を始めとする方々から東日本大震災に対する心

温まるお見舞いのお言葉をいただき、分子科学における日韓の友好関係の深さを再確認させていただいた。

講演会や懇親会、エクスカージョンなどの準備、温かいもてなしに、今回のシンポジウムの代表Seokmin Shin教授（ソウル国立大学）および組織委員のメンバー（とくにManho Lim教授（釜山国立大学））には心よりお礼申し上げたい。同時に、最新の研究成果を紹介していただいた日本側講演者の方々にも改めてお礼を申し上げたい。

次回の日韓分子科学シンポジウムは2013年に開催予定である。今しばらく余韻に浸った後、友人たちとの再会を楽しみに準備を進めていくことにしましょう。



## 開拓者精神で挑む 錯体型人工光合成

まさおか・しげゆき

1999年同志社大学工学部卒 2004年京都大学大学院工学研究科博士課程修了、工学博士。リバプール大学博士研究員、九州大学助手/助教を経て2011年2月より現職、2009年10月より科学技術振興機構さきがけ「光エネルギーと物質変換」研究員(併任)。



2011年2月1日付で、錯体物性研究部門に着任しました。分子研の恵まれた環境と自由な雰囲気感動しながら、新しい研究グループの立ち上げに没頭しています。九州大学から特別共同利用研究員として研究グループに参画してくれているD2の吉田将己君とM2の木本彩乃さん、総研大に進学してくれたM1の岡村将也君の助けもあり、実験環境が整ってきています。技術支援員の久我れい子さんと鳥居世菜さんも献身的に頑張ってくれており、山口ゆみ子秘書にもお世話になりっぱなしです。8月からは、近藤美欧助教が新しくグループに加わる予定です。これから更に忙しくなる日々を想像し、毎日わくわくしています。

さて、研究室紹介の記事ということで執筆を依頼されましたが、立ち上げの真っ最中であり、紹介できるようなことはまだほとんどありません。そこで、自己紹介のつもりで、これまでの研究経歴と今後の抱負について書かせていただきます。

専門は錯体化学です。合成化学と物理化学を両方できる研究がしたいと思いい、大学院進学の際に京都大学の北川

進先生の研究室を選びました。研究室配属当初は「ラジカル錯体の集積化」というテーマで研究をスタートさせましたが、その後は研究テーマの制約を特に感じなかったため「新テーマ開拓が自分のテーマ」と勘違いして、興味のあることに手当たり次第に取り組みさせていただきました。大学院生活の終わりになって自分の研究が発散まくっていることによるやく気づき、コンセプトがバラバラの5つのオムニバス研究を無理やり1つのストーリーにまとめ上げて学位をとりました。強引なストーリー展開であったにも関わらず、博士論文公聴会では副査の青山宏先生が「この博士論文は最近10年間で一番面白い」と評価してくださいました。今思い出しても涙が出るほどうれしいです。現在、多孔性金属錯体の大研究室となった北川研では、私が“開拓”したテーマは誰も後に続かず、痕跡さえ残っていません。しかし、新テーマの開拓を中心に行った学生時代の経験は、どのような分野に進んでも戦える自信につながっています。好奇心の赴くまま、さまざまな研究に自由に取り組む機会を与えてくださり、辛抱強

くご指導いただいた北川先生にはとても感謝しています。

イギリスのリバプール大学で博士研究員を一年間務めた後、九州大学の酒井健研究室に助手として加わりました。九州大学での研究テーマは、金属錯体を触媒とした水の分解反応です。助手になって3年目からは、水の分解反応の最重要課題である酸素発生触媒の開発を始めました。研究を始めるにあたり、関連論文を全て集めて片っ端から勉強してみましたが、何度読み返しても理解が深まるどころか混乱が増すばかり。論文によってさまざまな機構が乱立しており、分子設計と反応機構がどのように相関しているのか、全く理解できませんでした。案ずるより産むが易し、と自ら実験してみると、従来は活性がないとされてきた金属錯体が高活性触媒として機能することがわかりました。しかし、当時の“常識”では考えられない本発見は、学会発表当初はなかなか受け入れてもらえず、論文も通るような状況ではありませんでした。更に、その後1年もたたないうちに激しい競争に巻き込まれ、国際社会でコテンパンにやられてしまいました

た。しかし、国際競争の厳しさと戦い方、そして研究のパラダイムシフトを身をもって学ぶことができたことは、大変貴重な経験となりました。また、九州大学での約6年間は、優秀で純朴な九大生に刺激され、研究活動だけでなく、学生の将来に大きな影響をもつ教員という重職について真摯に考えることができた良い期間だったと思います。酒井先生のご指導のもと、学生さんと研究活動を共にした経験は、研究・教育・運営など多くの面で、現在の私の基礎になっています。

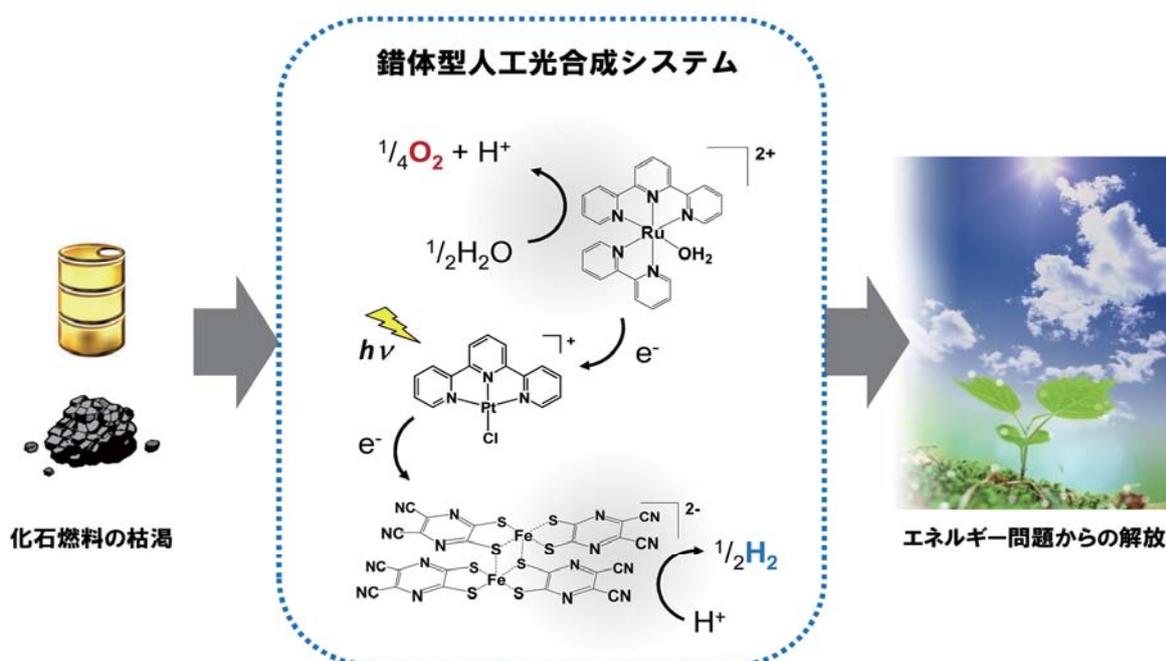
大学院を過ごした京大北川研と助手を務めた九大酒井研は、幸いにしてどちらも発足1年目、つまり、研究室創成期のメンバーとして加わることができました。“生みの苦しみ”は並大抵で

はありませんが、実験設備ができ、人が増え、研究室がじわじわと盛り上がっていくあの感覚は何度味わっても格別です。現在、私の研究グループに所属しているメンバーにも、研究室創成期というかけがえのない時間を楽しんでもらえればと思います。

さて、当グループでは、分子科学に立脚した人工光合成システムの構築を目指しています。人工光合成は、実用化に成功すれば人類が直面しているエネルギー問題が一気に解決する可能性がある極めて重要な研究対象です。我々は、生体機能の中心的な役割を果たしている金属錯体を用いて、光・プロトン・界面をキーワードに、水の光酸化・光還元を体系化できるような研究をしたいと考えています。開拓者精神

を忘れず、常に“新概念の創出”にこだわって研究を進めていきます。私個人でできることは微力ですので、個人プレーではなく、現在のグループメンバー、そして今後加わるメンバーとともに、世界の第一線で活躍できるチームを作っていきたいと思います。また、分子研内の様々なグループとも連携し、分子科学の発展に貢献できればうれしいです。是非ともよろしく願います。

最後になりましたが、私がこのように楽しく研究グループの立ち上げに専心できているは、大峯所長をはじめ所内外の多くの先生方からの様々なご支援、激励の賜物です。この場を借りて心より御礼申し上げます。



錯体型人工光合成の概念図。金属錯体を用いて、水などの小分子を光化学的に自在に活性化する手法の開拓を目指します。



## 仙台に移って



岡崎より仙台に移って早くも4年になります。岡崎で過ごした時期は、3年間とは思えないほど楽しい思い出にたくさん恵まれ、私自身の成長にとってもかけがえのない時代であり、当時お世話になった分子研や計算センターの方々には大変感謝しております。4年前からみると、自分の立場も責任もずいぶん変わりました。昨年度には専攻長も務め、その最後には化学専攻での震災対応の当事者になる経験まですると、全くの想定外でした。震災復興については別途企画があると伺いしたので<sup>\*)</sup>、「分子研出身者の今」ということで、仙台に来てからの生活や思うこととお話できればと思います。

分子研の頃と比べてまず変わったのは、教授としての仕事をこなさなければならなくなったことでしょうか。分子研の時代より、岡崎先生や平田先生など教授の方々を間近に見ていて、その多忙さと仕事をこなす能力の高さに圧倒される思いでおりました。自分に務まるのか全く自信も実感ももてないまま東北大に移り、分子研とは多少職務内容は異なるものの、慣れない教育や

### 森田 明弘

(東北大学大学院理学研究科 化学専攻 教授)

もりた・あきひろ / 1988年東京大学理学部化学科卒業、1990年東京大学大学院理学系研究科相関理化学専攻修士課程修了、1992年京都大学大学院理学研究科博士後期課程中退、博士(理学)。日本学術振興会特別研究員、京都大学理学部助手、岡崎国立共同研究機構計算科学研究センター助教授を経て、2007年より現職。

運営に全力を尽くす羽目となりました。ジムでのウェイトリフティングと同じで、いきなり

重いバーベルでは潰れてしまうので、周りの先生方の配慮で徐々に重さを増やしていったようで、慣れてくると重いバーベルを上げることができる自分に気づくようになります。当時の分子研の先生方の域には及びませんが、これも一種の教育の成果とっております。4年前の自分と比べて最も変わったところでしょうか。

東北大に移ったとき、はなむけとして京大の中原先生から非常に暖かい激励をいただきました。教授とはそれまでとは別の職種で、やってみると戸惑うことも多いと思うが、基本的にそのノウハウを誰かに教えてもらうという機会は殆どない。だから、もし相談したいことがあったらいつでも相談に来なさいと言っていました。確かに教授職はそれまでとは大きく異なることを実感します。自らのキャリアの向上を目指して努力する准教授以下では多かれ少なかれ共通の努力目標がはっきりしていますが、教授職になるとキャリアの向上が目に見えなくなり、各人の目指すものが個性に応じて多様化していきます。教授になって失速しな

いたためには、それまでのキャリア向上の目標に代わって新たな価値をつくるイメージをもたなければなりません。このイメージは個人的な目標かもしれない、私自身まだ模索中で、学問的実力にも人間的実力にも磨きをかけなくては今後第一線で務まらないというプレッシャーを感じています。ただ明らかにいえることは、それまでと違って基本的に周りの人の世話をして耕す仕事であり、ある程度長いタイムスパンで研究室の繁栄、分野の繁栄につながる見通しをもっていなければ務まらないだろうと思います。日頃は多くの仕事をかかえながらも、時間をみつけて研究のアイデアを練り、それを周りの人たちと共有しながら研究と人材を同時に育てていくことに、数年たってやっと手応えを感じるようになってきました。

研究面では、分子研に来る少し前より溶液界面の不均質化学に興味をもち、計算センターに在任中は豊富な計算資源を生かして、界面和周波発生分光の理論計算を集中的に展開させていただきました。おかげで国際的にも新しい計算手法として評価される機会を得て、多くの実験家とのつながりも得ることができました。分子研の准教授研究室では、多くの場合魚鱗の陣を敷いて一点突破を目指すのが最善手であると思いますが、しかし大学では人員および

<sup>\*)</sup> 東北大学化学専攻の震災については、「現代化学」2011年9月号「研究室を地震から守るには一東日本大震災の教訓」もご参照ください。

研究資源の点からみて、考え方を広げなければ対応できません。界面と周波分光を掘り下げていく研究は十分にやりつくされておらず、我々の研究室の独自性を示すミッションの一つとっていますが、東北大に来てからは同時に研究テーマを広げる方向にも進めてきました。溶液界面の関わる不均質化学は分子科学としては非常に未開拓であり、気泡とその応用、大気環境化学、相間移動触媒など分子シミュレーションを使って解明すべき対象が多く残されています。また昨年より高橋英明先生が研究室に赴任され、QM/MMを用いた溶液内での自由エネルギー計算の研究が始まりました。溶液界面での化学反応過程も、今後解明すべき大きな研究対象となると考えています。研究者として自分のもっている蓄積をすべ

て開示するつもりで、今後も仙台発の成果を見せていきたいと思っています。

大学にいと、やはり人材を育成することは大きな使命であることを実感します。東北大学の学生の能力のスペクトルは極めて広く、将来一流の研究者になれそうな優秀な学生からどうしようもなく振るわない学生まで玉石混交です。そのスペクトルは、都会の大学と比べても広いかもしれません。優秀な学生には大いに機会を与え、そうでない学生にもそれなりにケアをする必要があります。人材育成にとって最大の障害と感ずるのは、全体に化学を専攻した学生がその専門を追求してキャリアに生かす意識が希薄なことで、ある種の驚きを感じます。私の専門でいえば計算化学の研究が大好きな学生でも、経済的な支援や将来のめどが立

たないとみると早々に化学をあきらめてしまうことが多いのは、日本の将来にとっても非常な損失です。とくに専門を深めたい人が博士課程に進学して実力をつけたとき、博士のキャリアの多様化は多くの日本の大学に共通する課題です。何も狭い意味のアカデミックポジションだけが専門を生かす道ではなく、企業や官公庁、ジャーナリストなど専門を生かすたくさんの道があるはずで、私の限られた視野と力量では改善への見通しを実現するには及びませんが、その改善に向けて私にできることがあれば、尽力を惜しむつもりはありません。分子科学の将来のためにも、コミュニティーの重点課題として是非取り組んでよいのではないかと考えております。



## バンコック、仙台、花蓮

### 高橋 聡

(東北大学 多元物質科学研究所 教授)

たかはし・さとし／平成元年：東北大理化学・修士課程修了(指導教官・安積徹教授)、平成4年：総研大機能分子(分子研)・博士課程修了(指導教官・北川禎三教授)、AT&Tベル研究所など数カ所での博士研究員を経て、平成8年：京大理工分子工学・助手、平成15年：阪大蛋白研・助教授、平成21年から現職。

連絡先／東北大学多元物質科学研究所 〒980-8577 仙台市青葉区片平2-1-1  
Tel: 022-217-5842 Email: st@tagen.tohoku.ac.jp

震災のあった3月11日に、私はバンコックにて東北大学理学部が実施したグローバル30プロジェクトにおける面接入試に臨んでいました。まさに受験生が質問に答えようとしていたとき、私の携帯が響き渡って慌てました。これが、名古屋に住む弟からの安否確認であり、図らずも私と他の試験員に地震の発生を告げる連絡となりました。この電話以来、私の生活は地震と研究

とグローバル30を中心として進んできました。この間の経緯を記したいと思っています。

東北大学は地震により大きな被害を受けました。特に、私が兼担する理学部化学専攻の被害はひどく、建物の大幅な改修が必要となりました。建物の上層階では、ドラフトや実験台が固定ボルトを引きちぎって迫り寄ってきたと聞きます。一方で、低層階の被害



は比較的小さかったそうです。できる限りの対策を行っていても被害が大きかったことを考えると、化学実験室は4階以上には作らないことが望ましいのかもしれませんが、しかし、大変幸運なことに、大きな揺れにも関わらず、キャンパス内における重傷事故はありませんでした。これには、休暇期間であったこと、初期の揺れが比較的小さく逃げ出す余裕があったことなどの説明が

されます。わずかでも条件が異なれば、人命に関わる事故が起きていたはずだと多くの方から聞きました。

私は、3月15日ようやく仙台に入りました。電話連絡は行っていたのですが、まずはスタッフや学生さんが元気であることを確かめて安心しました。また、片平の建物の一階に位置する私の研究室の被害は最小限であり、装置もデータも無事でほっとしました（ただし、同じ建物の4階の被害は大きく、困惑するばかりです）。このときは余震も続いており、食料確保にも時間がかかる状況だったため、仙台にいた研究室のメンバーには山形空港経由でご実家に帰っていただきました。その後しばらくの間、単身赴任だったこともあり、私は一人で研究室に残りました。

仙台市内は平穏でしたが、機能を停止してあちこちに買い出しの行列がなれば街は現実感がなく、三月中は夢のなかにいるような感じのまま時間が過ぎました。原発事故のニュースも、非現実感に拍車をかけます。この間、私はバラバラになった研究室のメンバーと連絡を保つことを心がけました。メールを使った回覧ニュースを研究室のスタッフで順番に書き、携帯やGmailのアドレスなどを使ってメンバーに流しました。

3月の終わり頃から、助教の鎌形さんをはじめとして、スタッフが順次戻ってきて下さいました。とりあえず実験室や居室の片付けを行ないましたが、暖房も入らず、実験再開のめどはたちません。そこで、追加実験は行わずに手持ちのデータのみで論文をまとめると決め、博士研究員の小井川さんと毎日のように議論を行いました。私達の手法を用いると、タンパク質ダイナミクスに関する一分子データを大量に得ることができます。しかし、デー

タの意味を抽出する作業は困難を極めており、震災前は他の実験に逃げていた感がありました。私達は、データのノイズの特性を解析することからタンパク質の性質を見いだせることに気づき、それを手がかりに論文化にむけたストーリーを構成することができました。小井川さんとの議論は、震災のなかで心が休まる時間になりました。

もう一つ気持ちが安らぐ経験となったのが、研究室の全てのメンバーが揃い、実験も再開した5月半ばに、花蓮で開催された台湾の生物物理学会に出席した時です。招待講演を終えてポスターセッションを巡った時に「私はこのような機会を待ちこがれていたのだ」と悟りました。我々には大切な研究テーマがあります。そのテーマを巡って自身がどんな努力を行ったのか、他の研究者達がどのようなアイデアを出してきたのかという議論を行うことほど楽しいことはありません。この楽しさを実感することで、私自身が「地震モード」から「通常モード」に戻ることができたように思います。

グローバル30プログラムは、海外の優秀な若者に日本の大学で学んでいただくことを目的としています。そのために、優秀な学生を集める入試方法の確立や、魅力的なカリキュラムの構築など、多くの準備を行う必要があります。しかし、入試整備のための学内の意見調整の煩雑さなどを経験すると、このようなことに研究者が時間を費やしていいのかと自問することがあります。また、文科省が大学に丸投げする形でプロジェクトが進められていることに対する不満もあります。けれども、いろんな国籍の学生や教員が入り交じる将来の大学の姿には、私は共感を覚えます。このための努力は続けようと思ひ直します。

話が前後しますが、地震の翌日に、飛行機便の変更を交渉するために、夜明け前にバンコクの空港に向かいました。この時に、現地の方々が示して下さいた親切心を思い出します。台湾に招待して下さったChen教授と研究室の方々の気遣いもありがたいものでした。さらに話が飛びますが、グローバル30のために、去年は韓国、中国、シンガポールなどを訪れ、現地の高校生や高校の先生との交流を持ちました。これらの経験から、日本の大学や学会はもっと国際化しなければならないと強く思います。また、海外との交流は、どのようなレベルでも心温まるものになると改めて実感します。今後も、共同研究を行う研究者として、また、グローバル30に関わる教育者として、微力ながら現場における海外との交流を進めたいと思います。



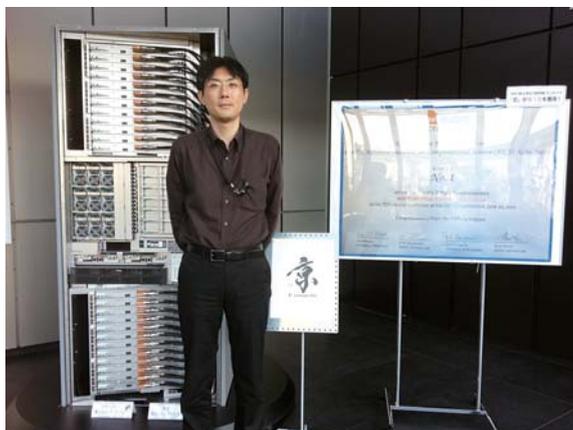
## 今井 隆志上級研究員に溶液化学研究会第4回奨励賞

この度、「分子液体論に基づくタンパク質の水和熱力学と分子認識に関する研究」に対して、溶液化学研究会第4回奨励賞を受賞致しました。受賞対象となった研究は、私が総研大の学生るとき分子研において平田先生のご指導の下行った研究を足掛かりにし、その後発展させた研究です。

私が学生の頃（1997年度～2000年度）は、まだタンパク質は複雑すぎて液体論（液体の統計力学。RISM理論など）の対象外でした。理論上の問題だけでなく計算機能力の問題もありました。私が、タンパク質に挑戦したのは、分子研から立命館大学に移ってからのことです。その少し前に、当時平田Gに在籍していたコバレンコさんが3D-RISM理論という有望な理論を開発しました。私は、3D-RISM理論を使ってなんとかタンパク質を解こうとしましたが、これが一筋縄ではいきませんでした。仕込んだ計算が次の日には発散しているという虚しい日々が続きました。当時は、タンパク質のような複雑な系で3D-RISM方程式の解が存在するかどうか自分分かっていませんでしたので、徒労に終わる可能性もあったのですが、それまでに培ってきた“RISMを解く職人技”を駆使しながら粘り強く試行錯誤を続けた結果、ついに最初のタンパク質の計算に成功しました。それを足掛かりに、大学院生るときしなくてできなかったタンパク質の部分モル体積の問題に取り組み、タンパク質の構造変化に伴う体積変化と水和の関係を明らかにすることができました。さらには、タンパク質の分子認識の問題にも取り組みました。3D-RISM理論を用いれば、タンパク質のどの部分にどのぐらいリガンドが吸着するかを水

和の効果も含めて予測できることを示しました。理研に移ってからは、さらに創薬への応用を目指して、3D-RISM理論に基づく新しいリガンドマッピング法を開発しました。本年の4月からは、神戸ポートアイランドにある計算科学研究機構（京速コンピュータ「京」の設置機関）で研究を行っています。タンパク質の構造変化をリガンドマッピング法に取り入れるなど、今後「京」を最大限活用し方法論をさらに発展させるため奮闘中です。

今回の受賞は、分子研時代の研究をきっかけにし、その後、立命館大学と理研において様々な人に支えられながら行ってきた研究すべてを総合して頂いた賞だと認識しています。平田先生をはじめすべての共同研究者の皆様にご場をお借りして改めて感謝の意を表します。



今井 隆志（いまい・たかし）

2000年3月に総合研究大学院大学数物科学研究科（分子研・平田G）博士後期課程を修了後、分子科学研究所博士研究員、立命館大学総合理工学研究機構博士研究員、立命館大学情報理工学部講師、理化学研究所次世代計算科学研究開発プログラム上級研究員を経て、2011年4月より理化学研究所生命システム研究センター上級研究員。

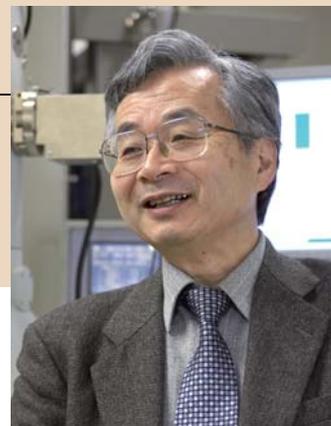


## 分子研を去るにあたり

西 信之 名古屋工業大学工学研究科 プロジェクト教授  
(前 物質分子科学研究領域電子構造研究部門 教授)

## 大学と共同利用研究機関 (分子研を卒業して思うこと)

にし・のぶゆき / 1968九州大学理学部化学科卒業  
1973年同大学院博士課程修了同年東京大学物性研究所助手、1979年分子科学研究所助教授、  
1991年九州大学理学部教授、1996年分子科学研究所流動研究部門教授・九州大学理学部教授併任、  
1998年分子科学研究所教授、2011年より現職



分子研に、教授・助教授職あるいは外部運営委員として務めた期間は、実に30年となる。1979年6月16日付けで電子状態動力学部門の助教授として赴任して、途中6年間九州大学教授として転出したにもかかわらず、人事委員等として係わり、この最後は流動部門教授として係わっていた。この流動部門に参加した期間は、私にとって忘れられない充実した時であったことは、間違いない。今、研究所を離れて、名古屋工業大学と東京工業大学の非常勤職員として研究に専念すると共に、学部学生や院生と共に昼の時間を過ごし、(名工大では4名の女子学生が研究室に所属しているので)大いに若返っている。余談はさておき、再び大学に籍をおき、改めて大学共同利用機関の役割は、と思うことが大きいので、この原稿の主題としたい。

分子科学研究所は、1973年に始まったオイルショックという時代背景の中で、物質エネルギー変換の研究の一つの大義名分として時代の要請に応える形で1975年に設立された。社会が研究所に期待したのは、基礎研究の発展ばかりでなく、研究所の設立が社会のニーズに応えるであろうという事で

あったのは、間違いない。しかし、研究者の立場からは、我が国の物理化学という研究分野を世界のトップレベルで牽引し、全く新しい概念や法則の発見に繋がるような超一流の研究成果を生み出す事こそ最も重要だと主張したいであろう。これは当然のことと言える。このような純粋な目的を達成する一つのやりかたとして、分子研を拠点として特定装置や特定課題を中心とした大学間共同研究がある。これは、旅費や研究費のサポートが可能であるため共同利用研究機関としてはその成果を期待できる。但し、大学の研究者にとっても真に魅力的な課題でなければ、効果的ではないであろう。私の場合、初期には「真空紫外レーザーを用いた、分子やクラスターの光解離ダイナミクス」という課題を設けたが、これは、海外からも多くの第一線の研究者が積極的に参加してくれたし、国内からも7大学からの参加者がありそれなりの成果を挙げることができた。もう一つは、「赤外解離分光法によるクラスターイオンの構造決定」及び「波長可変ピコ秒レーザーを用いた光反応ダイナミクスの研究」というプロジェクトであった。前者は、九州大学で開

発した装置を流動部門として分子研で発展させ主として4大学が、後者は分子研に戻ってから独自にレーザー製作会社と連携して開発したシステムをベースにした装置中心の課題であり主としてやはり4大学が参加した。いずれも、開発後暫くは分子研にしか存在しなかった装置を中心としている。共同研究にあたっては、共同研究者の主体性を重んじ出来るだけ協力するという立場を貫いたが、共同研究者からのもっと積極的に関与して欲しかったという声もあるようだ。これらの共同研究は、それぞれ分子研だから実現できたと言えるが、今後の物理化学の進展が大学のみでは用意できない大規模あるいは中規模な装置の利用の必要性を要求する限り、共同研究という方法は分子科学研究の重要な部分を占めるであろう。また、これからの分子科学研究所は、UVSORや920MHzNMRに続く大きな柱を立てる必要があるが、それが物質科学の分野で十分なニーズがあり多くの大学研究者を集められる装置で無ければならない。

一方、分子科学研究所は多くの優秀な人材を輩出し、全国の大学に300名を超えるアカデミックスタッフを供給

してきた。また、流動部門制度によって全国の大学の教員ばかりでなく大学院生も研究所で研究に専念する機会を持ち、研究所の知名度を上げるばかりでなく、関連分野の研究水準の向上にも貢献して来たと言える。流動部門に参加された先生方が、分子研の研究者を参加大学に積極的に採用していただいたということも忘れてはならない。また、分子研の研究者が大学の研究者と一緒に研究室内で展開する協力研究も、(現在は大変少なくなっているとは言え) 共同利用機関としての重要な役割を果たして来た。これは、これまでの分子研が、最先端の研究分野を開拓し、これに多くの大学の研究者が共鳴し、新しいサイエンスの展開に向けた情熱を共にしたからである。この意味で、研究所のグループリーダーが展開すべき研究は、決して個人研究であってはならず、オリジナリティーを主張しつつ、その分野での重要な課題の解決に向かって多くの研究者を巻

き込むものでなければならない。

これに対して、大学の研究室は多くの大学院生や卒論の学生を抱え、各論的なテーマをこなしつつも、小さな成果の積み重ねの上に立って大きな発展を志すという道をたどる所が多い。しかしながら、最近では若い研究者が准教授、教授のポジションを得るチャンスが少しずつ増加しているように思える。彼らは、評価に耐えうる仕事をしており、その仕事の更なる発展を目指す場合と、研究室を新たに立ち上げるのを機会に、新しいテーマに取り組んで行こうという意欲に満ちた時を迎えている場合とがあるだろう。彼らは、学会の場を通じてその方向を模索する。分子科学研究所の発表が、新しく、真に魅力的であり、これからの大いなる発展を示唆するものであれば、必ずや多くの研究者の関心を集め、大きな集団となって共に刺激しながら新しい分野を築いて行く事になるだろう。ありきたりのように見えるが、これはいつの

時代にあっても変わりがないと信じている。ここで重要な事は、この集団の多くのメンバーが大きな発展に寄与出来る仲間として成長することであろう。分子研の様々なシステムは、このような活動を十分に支えるものとなっているはずである。

大学共同利用機関を卒業して、現在は、堰を切ったように企業4社との共同研究に専念している。ここには、全く別の厳しさがある。基礎研究に専念できたことは大変幸せであったと実感している。支えて下さった多くの先生方、特に、吉原先生、長倉先生、井口先生、伊藤先生、茅先生、中村先生に心より感謝をしている。また、分子研の多くのスタッフの皆様、秘書の皆様、特に、装置開発室、機器センター、広報室、そして、大学連携研究設備ネットワークの皆様への支えは、感謝という言葉だけでは表せない込み上げてくる記憶としてこれからの私にいつまでも残り続けるであろう。

## 薬師 久彌

豊田理化学研究所 フェロー  
(前 物質分子科学研究領域電子物性研究部門 教授)

## 昭和から平成へ

やくし・きゅうや / 1968年東京大学卒、1972年同大学院理学系研究科中退、理学博士  
東京大学理学部化学科助手、講師、助教授、1988年分子科学研究所教授、2011年より現職。



最終講義では披露できなかった思い出の一端を綴ることにして、「分子研を去るにあたり」欄への寄稿の責を果たすことにしたい。小生が分子研へ赴任したのは昭和63年5月である。翌年の1月7日に昭和天皇が崩御されたので、昭和63年は事実上昭和最後の年にあた

る。平成元年は大変な年で、ベルリンの壁の崩壊や天安門事件といったソビエト連邦の崩壊に先立つ様々な政変が起こった。ソ連はこの時期深刻なハイパーインフレに見舞われ、ルーブルが紙くず同然の状態に陥った。ソビエト科学アカデミーの研究者たちは給料で

は暮らせなくなり、多くの研究者がヨーロッパの西側諸国、米国、日本へと脱出した(わが国も昭和20年に類似の経験をしている。日本国崩壊への序曲を思わせる現状から一刻も早く抜け出すことを願う次第)。ザヒドフ博士を客員助教授として分子研へ受け入れたのは

このような時期の平成元年12月であった。

その後、ザヒドフ博士の熱心な招へいに応じて、ソビエト連邦崩壊4か月前にあたる平成3年8月、中央アジアタシケントの熱物理学研究所を訪問する事になった。家族を同伴するという強い勧めに甘えて、同年8月スウェーデンのヨーテボリで開催されたICSM'92へ家内と娘を同伴して出席し、学会終了後モスクワ経由でタシケントへ向かう計画（旅行費用はすべて自費）を立てた。その当時は名古屋からモスクワへエアフロートの直通便があったので、行きも帰りもエアフロートを使った。行きは名大から同じ便でヨーテボリの会議へ向かう一行と一緒に戻った。帰りは明るく清潔なヨーテボリから薄暗いシェルメチボ空港へ降り、僅かばかりの円を換金したところ、財布に入りきれないほどのルーブル札を積まれて後悔した。その日はモスクワのインツォリストホテルで一泊したが、ホテルのレストランは一部の予約客以外には食事を出してくれないし、売店

も開店休業。空腹をこらえながら、陰々滅滅とした気分で予約してあった翌日の朝食を待った。翌日タクシーを拾って当時国内線専用のドモジェドボ空港へ向かった。空港は昭和40年頃の帰省客でごった返す暮れの東京駅さながらで、大勢の人が大きな荷物を抱えて座り込み、長蛇の列をなしており、足の踏み場もない状況であった。空港の無愛想な案内係は英語を解せず、空港案内もすべてロシア語という状況で、どうやってタシケント行きのゲートを探し当てたのか記憶に残っていない。ともかく、人混みをかき分へて建物の外へ出、駐機中の飛行機の横を延々と歩いて、田舎のバスの待合所みたいのところへたどり着いた。タシケントの空港にはハイルーリン博士が迎えに来てくれたのであるが、案の定預けた荷物が届いていない。翌日は丸一日着の身着のまま、OHPのないまま黒板に図を描いて不満足な講演をする羽目になった。その翌日はハビブラーエフ所長の計らいで、サマルカンドへ案内してもらった。サマルカンドはシルク

ロードの中央に位置し、タシケントの南西約150 kmほどのウズベキスタンの古都である。圧巻はレギスタン広場で、抜けるような青空の下、モザイク模様のタイルで装飾されたイスラム様式の建物群に目をみはる。次の日は所長と研究協力について相談し、ハイルーリン博士を分子研へ派遣してもらうことが決まった。午後は市内観光の後、ザヒドフ家の親戚一同に油脂だらけのウズベク料理で歓待を受けた。帰りはモスクワでザヒドフ博士の親戚ヴィクターに会うことができた。彼は赤の広場と地下鉄を案内してくれた。スターリンが国力を誇示するために作った地下鉄の駅は美術館さながらの装飾が施されていることで有名である。日本へ帰り着いたときはさすがにホッとした。この旅行は前後に経験したいろいろな外国旅行の中で最も忘れがたい旅行となり、分子研の思い出の中でひときわ鮮烈な記憶として残っている。そろそろ紙数が尽きる頃なので、この辺で筆をおきたい。長い間お世話になりました。

## 宇理須 恆雄

名古屋大学革新ナノバイオデバイス研究センター 特任教授  
(前 生命・錯体分子科学研究領域生体分子情報研究部門 教授)

## 分子研を去るにあたり

うりす・つねお / 1968年東京大学卒、1973年東京大学理学系大学院博士課程修了、理学博士。NTT電気通信研究所、LSI研究所研究員を経て1992年分子科学研究所教授、2011年4月より現職。



グリーンビークル材料研究施設に新しく作った413号室実験室にて。

私は今から19年前の平成4年5月にNTT-LSI研究所から、分子研に移ってきました。企業から移った最初の例ではないかと思えます。LSI研究所では、分子研でいえば装置開発のような部署で、毎

年1億円近い研究費を使っていたにもかかわらず、異動にあたって持って来た装置は何も無く、全くの手ぶらで来ました（移るとわかっていたら上手に装置を集めていたのですが、全く予期していま

せんでした）。こんな教員は私が最初で最後ではないかと思えます。しかし、その当時は、“学”の世界を何も知りませんでしたので、恥ずかしいとも思いませんでした。最初の10年間は、半導体や

絶縁物材料の赤外反射吸収分光技術を開発し、Si表面の水素や水の化学反応を調べるとを行いました。生命科学分野に興味を持ち始めたのは、今から9年くらい前で、2001年のフランス Saint Malo での表面振動分光の国際会議あたりからです。会議の帰りに、東北大学の庭野教授と、Max-Planck の Wolfgang Knorr を訪問し、脂質二重膜の研究を調査した事を覚えています。この直後から、所持している超高真空系の装置を原子間力顕微鏡や生物材料研究用の装置に切り替え、脂質二重膜や水中のタンパク質の振動分光の研究に移行しました。この変更はまだ、振動分光を基礎としており、連続性

があったのですが、現在の神経細胞ネットワーク素子の研究への、不連続的な変更は2008年頃であったと記憶しています。現在、名大に来て思うのですが、このような大胆な分野変更は、分子研にいたからこそできたのではないかと思います。外部資金がゼロでも研究を最低限維持できる環境、そして、採用した教員を信じて分野変更を許容する気風などが私を支えてくれた大きな要因と思います。また現在CRESTという豊かな研究費をいただいているのですが、この採択については、装置開発の皆さんの支援がなくてはあり得なかったと思っています。

名大キャンパスの敷地はとても広

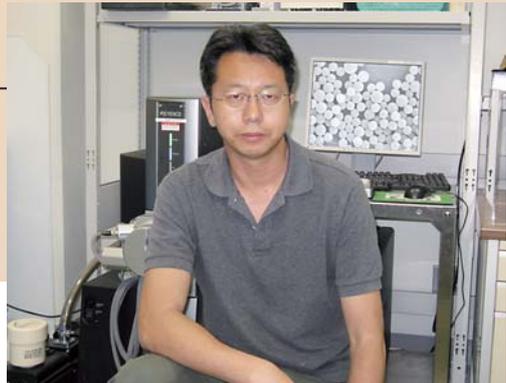
く、地下鉄の名古屋大学駅から私の研究室まで約20分の道のりは、左手の林に沿って、右手に農学部の演習用の花畑や、野菜畑、桑畑を見ての楽しい一時です。教授会や委員会への出席義務は全く無くありません。現在開発を進めている神経細胞ネットワーク素子は、完成すれば多くの難病と言われる病気の原因解明や薬剤開発に役立つと期待されます。神様が与えてくれたとも言ふべきこの自由な時間を精一杯生かして、この素子開発を成功させたいと思っています。分子研の今後のさらなる発展と皆様のご多幸を祈ります。

## 十代 健

日本大学文理学部物理生命システム科学科 准教授  
(前 物質分子科学研究領域電子構造研究部門 助教)

## 分子研での「シャイセ」

じゅうだい・けん / 1996年慶應義塾大学工学部化学科卒、1998年日本学術振興会特別研究員(DC1)、1999年慶應義塾大学工学部化学科助手、2001年慶應義塾大学大学院理工学研究科化学専攻博士課程修了、博士(理学)号取得、2002年アレクサンダー＝フォン＝フンボルト博士研究員(ドイツ)、2003年日本学術振興会海外特別研究員、2004年5月より分子科学研究所西グループ助手(助教)を経て、2011年4月より現職。



ドイツ留学から帰国し分子研に着任したのが、すぐ最近の事のように思えるのですが、すでに7年も経っています。今、そのことに驚くと同時に、良き仲間に出会い、尊敬する先生方に囲まれ、充実した楽しい日々を分子研で送ることができたと感じています。この場を借りて皆様にお礼を申し上げます。最初にお礼を述べれば、後は適当な話題でも良いかと考え、ドイツ留学時代から分子研へと持ち込んだ「シャイセ」について書きたいと思います。

ドイツ語「シャイセ」は、綴りを Scheisse と書きます。全く、お上品とは言えない、強いて日本語に訳するとす

れば、関東弁だと「畜生お～～」、関西弁だと「糞お～～」のような感じで、下品なドイツ語の代表格ともいえる言葉です。この「シャイセ」、ドイツ留学時代に非常に多用しておりました。実験研究者ならお分かりだと思いますが、新しい実験は、失敗の連続です。良くて1割、成功率1%の実験もそんなに珍しくない世界です。それでも、毎回、今度こそ実験はうまく行くのではないかと信じ、実験を行い、また、やはり、裏切られ、そんな時に口に出てしまう言葉が、「シャイセ」だったのです。ちなみにドイツ人研究者が実験室で多用していたため、私も習慣となっていました。

分子研へ着任後も、その口癖は直ることもなく、また、実験も順調に進まず、「シャイセ」を連発しておりました。ドイツで「シャイセ」を口走ると日本人には意味が通じてしましますが、日本では「シャイセ」の意味をしっている人は居らず、ある意味、隠語のように自分の中では使用していました。でも、やはり、日本は空気を読む習慣のある国です。「シャイセ」がどんな意味が分からなくても、雰囲気から実験がうまく行っていない、機嫌も悪いかもしれない、大きな声も出してたし、と周囲に感じ取られるようになってきました。そうして、思わず声に出してしま

うのを年に数回程度に抑え、普段の実験の度には、心の中で「シャイセ」を連発するようにしていました。

さて、こう振り返ると、分子研での研究は「シャイセ」の連続で、実験の失敗ばかりしていました。特に、狙って行った（野心的な？）実験は、ことごとく、

失敗しています。幸いにも、たまたま見つけた現象で、いくつかの論文を書くことができたため、今、こうして他大学に転出することができましたが、その偶然の発見が無かったらと考えると恐ろしくなります。実力を伴って研究成果を残した分子研を転出していく方々も多くいるの

を十分認識していますが、私のように運で転出できちゃう人も居るのではないかと思います。若手の登竜門的位置づけの分子研には、助教・ポスドク等の若い研究者の成長を長い目で応援して頂きたいと願望しつつ、私の「シャイセ」の話を締めたいと思います。



## 外国人研究職員の紹介

**Dr. Narahari G. Sastry**

from India



Sastry 博士は、平成 23 年 12 月より 4 ヶ月間、分子スケールナノサイエンスセンターに招へい外国人研究職員として滞在される予定です。Sastry 博士は 1995 年にハイデラバード大学で学位を取得後、ヘブライ大学、フライブルグ大学での博士研究員を経て、1997 年に帰国、ポンディチェリー大学でポジションを得た後、2002 年に現在所属の IICT (Indian Institute of Chemical Technology) に移り、現在は Molecular Modeling Group の主席研

究員を務めておられます。

Sastry 博士の研究は計算科学、量子化学の広範囲をカバーしており、特に実験科学者との共同研究を非常に重視しておられます。特に近年では非共有結合性相互作用に関連する研究に力を入れており、タンパクをはじめとする生体分子の高次構造やドラッグデザイン、超分子化学における分子間相互作用などの分野で、方法論の開発を含め精力的に研究を行ってきています。分子研には当該研究を進めておられる先生も多いことから、コラボレーションを楽しみにしているご様子です。まだ若手といえる世代ながら、既に 170 報あまりの論文を報告し、国内外の主要な賞を数多く受賞されており、今後のインドの計算科学を牽引するリーダーの一人です。

Sastry 博士はインドの有機化学のリーダーである G. Mehta 教授の薫陶を受けていたこともあり、大学院学生時代よりバッキーボウルの理論研究の論文を数多く報告しており、その縁で小生とも数年来バッキーボウルに関する共同研究を実施してきました。平成

20-21 年には INSA-JSPS 二国間共同研究に採択され、その時を含め既に数度分子研を訪問しています。また、今年度の客員教授である九州大学の吉澤一成教授や広島大学の安倍学教授など、日本人の友人も多く、今回の滞在を機に、更に多くの方と議論をする時間を持っていただければと思います。

Sastry 博士は肉食主義者（スラングでいうと Eggitalian）で残念ながら日本の魚や肉、日本酒等を召し上がることはできませんが、それ以外での好き嫌いなどはほとんどなく、どんな料理でも楽しめます。例えばこれまでの岡崎訪問では、伊ト、キャナリーロウ、ひな野などにもよく足を運ばれましたし、一昨年日本化学会大阪年会においては、事前をお願いしておいた肉食主義者仕様の懐石料理を堪能しておられました。残念ながら小生は岡崎在住ではないので、あまり近辺のレストランに詳しくありません。もし肉食主義者用にアレンジできるレストランをご存知の方がおられましたら、是非ご紹介ください。

(櫻井 英博 記)

# 外国人研究者の 印象記

## Japan Diary

Osman Murat Ozkendir

Mersin University, Turkey



Butterfly's are known to have a short life. But, for me, length of a life is up to how much you reach your aims in this period. If a butterfly fulfill its mission and die; it means it has a long life.

According to my life; I have an aim to satisfy myself with science. I was always interested in Synchrotron light based researches on electronic structure of materials. However, there is no synchrotron facility in my country yet. So I have to sent proposals to synchrotron labs abroad and if they approve my proposal I can get beamtimes. In such an occasion, I met Prof. Youichi Murakami (his field of study was parallel to mine.) from KEK who told me that I can also use Japan Synchrotron facilities. After the conversation with Prof. Murakami, I began to think about a scientific visit to Japan. Japan synchrotron facilities were attracting my attention. I applied and offered a research grant from Turkish Science Council in 2010. Japan was my first choice in order to meet Japanese scientist and Japanese culture. The grant had provided me a nice opportunity to make my wishes come true.

Kimura Group at UVSOR-IMS was serving an elusive chance for both to upgrade my synchrotron based experimental experience/skills and a new technique, ARPES, for my future researches. I am really so grateful to Kimura Sensei accepting me in his group as visiting Scientist. Before arriving to Japan, Kimura Sensei had advised me to learn some Japanese daily life vocabulary/sentences, and so I tried. I learned how to read Hiragana and a little bit Katakana. I was supposing that I can read and understand Japanese daily conversation. However, when I arrived to Japan in December 2010, at the Chubu airport,

I realized that I could neither read Japanese nor understand. It was a big disappointment and I met with KANJI!!! Nihongo wa Muzukashi desu!!!

In my first days in Okazaki, I intended to discover the city, but mostly lost my way. Thank God NINS campus is located at a peak of a hill so it can guide me to find my way. Okazaki is a nice and historical place where Tokugawa Iyaesu, the founder and first shogun of the Tokugawa shogunate of Japan, was born. At weekends, I enjoyed so much with cultural visits to shrines and temples. Especially in spring weekends, if you wander in Okazaki on Sunday's, you probably can meet a festival where you may find cultural events and spend nice times. I participate in two of them, The Iyaesu Parade, as a Samurai, and Shinmeigu Festival where I pulled a wooden carriage. You can breath the cultural heritage in Okazaki.

I need so many pages to write my IMS impressions but I am limited with one page. Opportunities provided for scientist and students at NINS-IMS is great. So many facilities for delicate research studies, hardworking, helpful and kind staff motivates you in studies. Departments for guiding foreigners at IMS makes you feel secure in Japan. I am so thankful to Kimura group members (and UVSOR staff) for their thoughtfulness, kindness in my upgrading/learning period at IMS. I am so grateful to Assoc. Prof. Dr. Shin-ichi Kimura for being here.



## 野村 雄高

のむら・ゆたか

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 助教



東京大学物性研究所小林研究室にて特任研究員および学振特別研究員を経て、2010年12月より分子研レーザーセンターの藤Gの助教に着任いたしました。これまでは高次高調波発生や非線形光学結晶を用いた波長変換による紫外光源の開発を行ってきましたが、今後はファイバーレーザーなどによる赤外光源の開発研究を進めていきたいと考えております。

どうぞよろしくお願い致します。

## 正岡 重行

まさおか・しげゆき

生命・錯体分子科学研究領域  
錯体物性研究部門 准教授



京都大学で学位取得後、リバプール大学博士研究員、九州大学の助手/助教を経て、2011年2月1日付で分子研に着任しました。専門は錯体化学です。分子研の自由な雰囲気と恵まれた設備のもと、毎日わくわくしながら研究に取り組んでいます。現在は、金属錯体を利用した水的光変換反応の体系化を目標としています。

どうぞよろしくお願い申し上げます。

## 矢木 真穂

やぎ・まほ

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



名古屋市立大学大学院薬学研究科にて学位取得後、日本学術振興会特別研究員を経て、平成23年2月より加藤グループに研究員として加わりました。神経変性疾患の発症に関わるタンパク質の重合メカニズムの構造基盤の解明を目指し、NMRなどの構造生物学的手法を用いて研究を行っています。これまでの経験を活かし、新たな気持ちで頑張ります。

どうぞよろしくお願いいたします。

## 中根 大輔

なかね・だいすけ

生命・錯体分子科学研究領域  
錯体物性研究部門 研究員



名古屋工業大学で博士号取得後、同大学で博士研究員を務めた後、2011年3月1日より錯体物性研究部門の田中グループに研究員として加わりました。

以前は生物無機化学が主たる研究テーマでしたが、ここではより実用的な触媒開発に携わることになりました。

分野は多少異なりますが、ともに金属錯体を扱う研究ということで、自分の経験を生かすことができたらと思います。

皆様よろしく願いいたします。

## 吉澤 一成

よしざわ・かずなり

理論・計算分子科学研究領域  
理論・計算分子科学研究部門 客員教授



京都大学で学位を取得後、コーネル大学で客員研究員、京大で助手助教授を経て、九州大学先端物質化学研究所で活動中です。量子化学の基本概念に基づいて、生命化学現象や分子の電子物性の研究を行っています。学生時代から分子研機器センターや計算機センターでお世話になっています。九大自転車部の顧問をしていますが、練習中に鎖骨骨折を二度経験しました(笑)。研究以外でも声をかけて下さい。

## 杉田 有治

すぎた・ゆうじ

理論・計算分子科学研究領域  
理論・計算分子科学研究部門 客員教授



平成23年4月から理論・計算分子科学研究部門の客員としてお世話になっています。分子研在籍時代に岡本祐幸先生らと一緒に開発した拡張アンサンブル法などの計算手法の開発に加えて、膜蛋白質や細胞環境での蛋白質ダイナミクスなどに興味を持って研究しています。どうぞよろしくお願い致します。



NEW STAFF

## 新人自己紹介

## 近藤 寛

こんどう・ひろし

光分子科学研究領域  
光分子科学第四研究部門 客員教授

東京大学理学系研究科で博士号を取得後、工業技術院、東京大学理学系研究科を経て、平成20年より慶應義塾大学理工学部教授として勤務しております。この4月より分子科学研究所客員教授を拝命いたしました。専門は放射光による表面化学的諸現象の機構解明です。UVSORの特徴あるビームラインで所員の皆様にご助力をいただきながら、超高速界面電荷移動やナノ空間反応の研究に取り組む予定です。どうぞ宜しくお願い申し上げます。

## 安倍 学

あべ・まなぶ

物質分子科学研究領域  
物質分子科学研究部門 客員教授

京都工芸繊維大学で学位を取得後、大阪大学に職を得ました。2007年から、広島大学大学院理学研究科化学専攻の反応有機化学研究室を担当しています。専門は物理有機化学、光化学で、面白い構造と物性を持つ $\pi$ 電子系 ( $\pi$ 単結合)の創製とその機能にワクワクしながら研究をしています。分子研に籍を頂いたこの機会を活かして、 $\pi$ 電子系の物性と機能との関関に興味を持たれている研究者の皆様と共同研究をお願いいたします。

## 加藤 立久

かとう・たつひさ

物質分子科学研究領域  
物質分子科学研究部門 客員教授

4月より客員教授をさせていただきます。新人紹介欄に過去2回載せて頂き、今回は3回目です。また、分子研レターズにも3、4年に1回のペースで寄稿させて頂いています。前回はVol. 55 (2007) だったと記憶していますから、今回載せて頂ければこれまでのペース通りです。それほど分子科学研究所には御世話になっています、今後ともどうぞよろしく御願いたします。

## 水瀬 賢太

みずせ・けんた

光分子科学研究領域  
光分子科学第一研究部門 助教

東北大学で学位を取得し、4月より大島グループに加わりました。かつての指導教員の藤井朱鳥先生が分子研OBということもあり、岡崎の地で最先端の研究を存分にできることに喜びを感じています。これまでは水をはじめとした分子集合体の構造化学に尽力してまいりました。今後は分子のダイナミクスや化学反応といった領域に手を広げていきたいと思っております。

よろしくお願い致します。

## 石川 理沙

いしかわ・りさ

極端紫外光研究施設  
光源加速器開発研究部門 研究員

東京工業大学にて学位取得後、平成23年4月から分子研UVSORにて博士研究員としてお世話になっています。これまでは、電子衝突による分子の多電子励起状態の研究を行っていました。放射光に関しては全くの初心者ですので、今までの経験を生かしながら素晴らしい研究環境の下、気持ちを新たに明るく元気に頑張っていきたいと思っております。

## 西山 嘉男

にしやま・よしお

光分子科学研究領域  
光分子科学第一研究部門 特任助教

京都大学理学研究科光物理化学研究室での博士学位取得の後、5月より岡本研究室の特別研究員として着任いたしました。前研究室では、イオン液体と呼ばれる新しい液体中での超光速光反応を研究してきました。今後は、超高速分光が可能となる近接場測定装置の開発を行い、金属ナノ粒子をはじめとしたナノ構造体の光物理初期過程の解明に取り組んでいきたいと思っております。

よろしく願いたします。

## 久我 れい子

くが・れいこ

生命・錯体分子科学研究領域  
錯体物性研究部門 技術支援員



5月16日より、正岡グループでお世話になっています。  
実験が好きなので、毎日楽しく過ごさせて頂き感謝しています。  
分からないことばかりで、色々教えて頂くばかりですが、  
迷惑にならないよう一生懸命がんばりますのでよろしくお願い致します。

## 鳥居 世菜

とりい・せな

生命・錯体分子科学研究領域  
錯体物性研究部門 技術支援員



5月16日より正岡グループにて技術支援員をやらせていただいています。  
錯体に関する知識が浅く戸惑うこともありますが、研究室の皆さんの親切なご指導により徐々に作業にも慣れてきました。  
少しでもお役にたてるよう一生懸命に励みますので、どうぞよろしくお願い致します。

## 田中 誠一

たなか・せいいち

極端紫外光研究施設  
光源加速器開発研究部門 研究員



日本大学大学院工学研究科にて学位を取得し、6月1日より分子研UVSOR 加藤Gにて研究員として加わることとなりました。加速器分野という、これまで体験したことのない領域での研究となるので不慣れなこともありますが、知識や技術を学び、一日でも早く本格的な研究活動に参加できるよう努力していきたいと思っています。  
よろしくお願い致します。

## 大 舘 彰 道

おおつき・あきみち

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



3月に京都大学理学研究科化学専攻で博士号を習得し、6月から藤井グループにお世話になっております。  
学部時には有機ケイ素の、修士および博士課程では有機化学的視点からのDNAの機能や損傷の研究を行ってまいりました。研究分野が変わり、至らないところもありますが有機や無機に拘らず合成化学や反応化学が心底好きなので良い結果を残せるようがんばって参ります。  
よろしくお願い致します。



(撮影：分子研花火観賞会世話人 安池智一)



## 屋上緑化

実験棟第1期耐震工事の際、断熱性を高めるため屋上に芝生を施しました。

8/6に恒例の岡崎花火大会が盛大に開催され、昨年に引き続き、芝生の上でのんびりと観賞会を催すことが出来ました。



研究棟207号室 個室 (PCも設置予定)



研究棟209号室 打ち合わせも可能な相部屋



## 名誉教授室

研究棟3階は物質分子科学領域、1階は光分子科学領域(レーザー関連)、2階はその他の光分子科学領域や所長等の居室になっています(過渡期の今はまだ混在)。また、2階にはセミナー室、談話室に加えて、研究所共通居室(206~209号)があります。研究所共通居室は代表名として名誉教授室を名乗っていますが、空いていれば、随時、数日から数時間の利用が可能です。山手地区の職員の短時間控室などにも対応しています。所外の方の利用については研究所受付にお尋ね下さい。

## 共同利用研究ハイライト

## 計算科学の超精密化と巨大化

中辻 博 量子化学研究協会研究所 所長

## 1. はじめに

物質科学の世界は、Schrödinger方程式やDirac方程式によって代表される量子的科学原理によって支配されているので、これをできるだけ正確に、しかも、多様な対象に即して解くことができれば、わたくしたちの自然認識は正確になり深まることが期待される。私達はこのような認識に立って、それを可能にする理論の作成とその実用化を目指して、研究を進めてきた。特に、2007年からは、計算科学研究センターのS-申請を承認いただき、これらの研究を大いにサポートしていただいた。私達のプロジェクトは上のタイトルにある通り、計算科学の「超精密化」と「巨大化」の二つからなり、いずれも分子研の計算リソースの利用によって大いに進展できた。私たちの力不足もあって、なかなか所期の目的を達していない部分も多いのであるが、ここにその現況を報告させていただき、私たちの感謝の印としたい。

## 2. 計算科学の超精密化

「物質科学の世界が、Schrödinger方程式やDirac方程式によって支配されている」という認識が正しいとすれば、実験によって物質世界の真髄を究めるという所作だけでなく、これらの方程式を解くことによってその真髄とその機作を明らかにするという道があってもよいように思われる。これは理論科学者の夢と言ってもいいもので、多くの先達が試みてきた。私たちの方法は、これらの方程式の解になることが保障

される「数学的構造」を持つ波動関数を作り上げることから始まる。2000年に発表した「正確な波動関数の構造論」はその端緒となるものである<sup>[1-3]</sup>。さらに、原子・分子のようにポテンシャルにクーロン項のような発散する関数を含む場合には、その影響を受けない理論展開を準備しなくてはならない。そのために、逆数型のSchrödinger方程式を考えるのも一つの方法だが<sup>[4]</sup>、実用上もっと簡単なのは、発散関数をスケールする関数を掛けたScaled Schrödinger方程式(SSE)を導入することである<sup>[5]</sup>。2004年に発表したこの方法の導入によって、Schrödinger方程式と相対論的なDirac方程式<sup>[6]</sup>を解析的に解く方法が確立され、上に述べた「理論科学者の夢」の実現を追い求めていくための一つのルールが敷かれた<sup>[7]</sup>。

## 2-1. 理論と計算手法

上に述べた正確な波動関数を計算するための理論では、系のハミルトニアンを使って作成される解析関数(complement function: 完員関数)の和として、正確な波動関数が与えられ、その前にある未知数を決めることだけが残される。Iterative Complement(IC)法<sup>[1-3]</sup>やFree Complement(FC)法<sup>[5]</sup>がそれである。そのハミルトニアン積分が解析的に計算できるときは、常法により変分解を求めることで、いくらでも精密な解を得ることができる。また、解析的な積分が困難となる場合には、Local Schrödinger Equation(LSE)法と言って、Schrödinger方程式を局

所的に必要な条件として使う方法によって解くこともでき、この方法だと、どんな原子・分子系も、原理的に解けることになる<sup>[8]</sup>。これに加えて、1. Local Sampling法、2. From Atoms to Molecule(FATM)法、3. 反対称化高速アルゴリズム等、より大きな系にも応用できるよう考えた方法を開発し、計算した。特にLSE法は、サンプリングを基礎とし、対角化を除くすべてのステップが原理的に並列化に向いており、IC法やFATM法では対角化の次元も小さい。そのため、計算全体に対して非常に高い並列化度の実現が期待でき<sup>[8]</sup>、超並列に特化した本格的なプログラム開発も並行して行っている。

## 2-2. 原子・分子系の超精密計算

まず、上述の理論の数値的な実証として、小さな原子・分子系に対してFC-変分法を応用し、得られた解の検証を行った。He原子では40桁をも超える精度のSchrödinger方程式の変分エネルギー値が得られた<sup>[9]</sup>。またH<sub>2</sub>分子等でも変分的な意味でworld bestな結果を得ることに成功した<sup>[10]</sup>。He原子では、この変分原理により得られる正確なエネルギーの上限値とH-square errorと呼ばれる量から計算できるエネルギーの下限値から、解の存在範囲をアプリオリに特定することができた。すなわち、基底状態のエネルギーは、-2.903 724 377 034 119 598 311 159 245 194 4 (a.u.) と得られ<sup>[11]</sup>、この値は32桁までも"数学的に厳密に"正しい。このように、数値的にも

表 1. 第二周期原子の計算

	電子数	次数	次元	エネルギー (a.u.)		
				FC LSE 法	推定正確値	差
<sup>2</sup> Li	3	6	1496	-7.478 043	-7.478 060	1.70 x 10 <sup>-5</sup>
<sup>1</sup> Be	4	4	1770	-14.667 300	-14.667 36	6.00 x 10 <sup>-5</sup>
<sup>2</sup> B	5	4	15038	-24.653 872	-24.653 91	3.80 x 10 <sup>-5</sup>
<sup>3</sup> C	6	3	2380	-37.845 492	-37.845 0	-4.92 x 10 <sup>-4</sup>
<sup>4</sup> N	7	3	5640	-54.586 720	-54.589 2	2.48 x 10 <sup>-3</sup>
<sup>3</sup> O	8	3	7623	-75.064 756	-75.067 3	2.54 x 10 <sup>-3</sup>
<sup>2</sup> F	9	2	893	-99.726 616	-99.733 8	7.18 x 10 <sup>-3</sup>
<sup>1</sup> Ne	10	2	1021	-128.935 032	-128.937 6	2.56 x 10 <sup>-3</sup>

理論の正当性とその高い精度を実証することができた。また、励起状態の計算<sup>[12]</sup>、非相対論極限でもある核の動きを考慮した Non-BO 計算<sup>[13]</sup>、そして宇宙での超強磁場下の小さな原子・分子の計算<sup>[14]</sup>なども行ったが、これらは、宇宙化学分野でも有用となる研究成果である。

次に、FC-LSE 法を様々な小規模な原子・分子系に適用した。表 1 に第二周期 (Li-Ne) 原子の計算結果を示した。実験値から推定された正確な値と比べほぼ化学精度を満足する結果を得た。分子系の計算では、原子の精密波動関数を用いる FATM 法の利用により、効率的に計算を行うことができた。例えば、図 1 に示されているように、CH<sup>+</sup> や CH<sub>3</sub><sup>+</sup> の CH 結合同時解離ポテンシャルカーブの計算では、CCSD 法が結合距離の増加と共に破綻するの

に対し、FC LSE 法では解離極限まで正しいポテンシャルカーブが計算されている。第四周期遷移金属を含む計算は、現段階では Order=1 のテスト段階で、その全エネルギーの精度は 0.1 (a.u.) と推定される結果しか得られていないが、とりあえず 25 電子系 Mn のような多電子原子の計算も実行できた。

さらに、相対論効果を正確に扱うため、Dirac-Coulomb 方程式の精密解を求める方法を開発した。FC 法では、ハミルトニアン自身により波動関数が生成され、スピノール成分間の関係も自動的に正しくなる (FC balance)。また、変分崩壊を防ぐため、逆ハミルトニアン法を導入し、解が安定に得られることも示した。これらの理論的手法により、近似を導入することなく Dirac-Coulomb 方程式を精密に解くことができる。

現在、普通の系の計算を実現するた

めの新しい方法とそのプログラム開発を進めており、有機化合物や遷移金属化合物の精密計算にも着手していきたい。

### 3. 計算科学の巨大化

「計算科学の巨大化」のプロジェクトでは、光が関与する現象を、小分子から巨大分子系まで、同じ化学精度で取り扱うことのできる方法論の開拓を行っている。

SAC/SAC-CI 法<sup>[15-17]</sup>は、分子の基底・励起状態、イオン化・アニオン化状態など様々な状態を高精度に記述する電子相関理論であり、Gaussian プログラム<sup>[18]</sup>にも搭載され、世界中で研究・開発に利用され、その有用性が実証されている。Giant SAC/SAC-CI 法<sup>[19]</sup>は、この方法をシームレスに巨大分子系にまで拡張した理論であり、小分子から

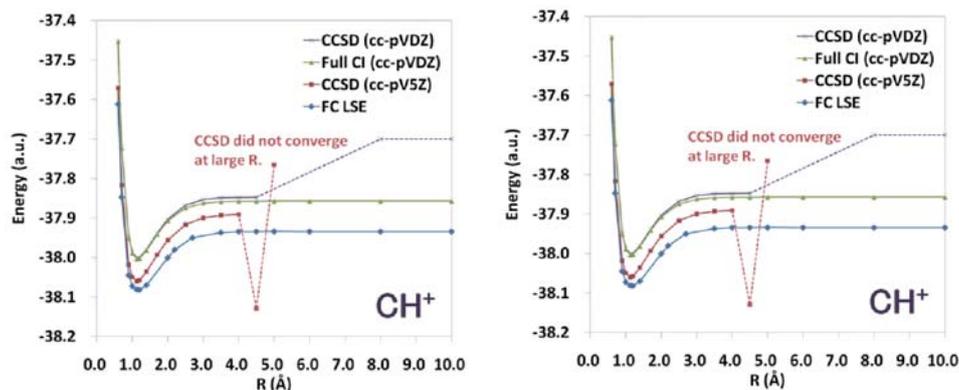


図 1 CH<sup>+</sup> と CH<sub>3</sub><sup>+</sup> の結合解離ポテンシャルカーブ。

巨大分子系まで、同じ理論で高精度な計算ができる。これにより、光・電子が関与する材料設計や生物現象へと応用を拡大し、新しい分子設計等を提案することを目指している。

### 3-1. DNAの二重螺旋構造と

#### CDスペクトル

円二色性 (CD) スペクトルはDNAやRNAの溶液中の構造を調べるために非常によく用いられており、例えば、右巻きと左巻きで、正負逆のCDスペクトルが観測されるが、その理論的考察はほとんど行われていない。

DNA中では核酸塩基は、他の核酸塩基との水素結合やスタッキング相互作用によって、その安定構造を保っている。実験構造から、左巻きDNAであるZ-DNAは強くスタッキングしていることが分かっている。強くスタッキングしたZ-DNAのCDスペクトル(黒)では、核酸塩基1個のスペクトルとは異なり、300 nm付近に強い負の符号が現れる<sup>[20]</sup>。そこで、B-DNAとZ-DNAから図2のような2個の核酸塩基を含む構造を取り出し、そのSAC-CI計算から、水素結合とスタッキングがUV吸収とCDスペクトルに与える影響について研究した。B-DNAとZ-DNAのどちらの場合でも、水素結合のSAC-CI UVスペクトル(青)は1個の強い吸収が現れるが、スタッキングのSAC-CI UVスペクトル(赤)は2個に分裂している。これは水素結合によって最低励起状態が大きくシフトし、核酸1個の計算では2個に分裂していたピークが、1個に集約されるためである。スタッキングのSAC-CI CDスペクトル(赤)は、実験と同様にZ-DNAで負の符号を持つが、B-DNAでは正の符号を持つ。このことから300 nm付近のCDスペクトルの符号はスタッキング相互作用の強度を示していて、負の符号がZ-DNAの指標に

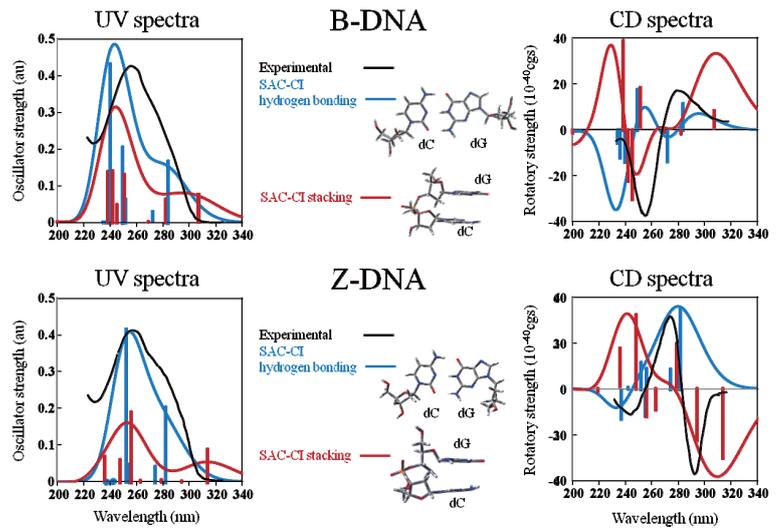


図2 DNAの吸収(UV)と円二色性(CD)スペクトル。

なることがSAC-CI計算から示された。

### 3-2. TTF-TCNE系光誘起相転移のメカニズムの解明

光誘起相転移とは、少数の光子によって結晶単体間に電子移動が誘起され、これが結晶の巨視的な相転移を促して、結晶の性質が全く変わる現象である。そのメカニズムやダイナミクスはドミノ現象(図3)<sup>[21]</sup>として説明され興味もたれている。光誘起相転移を起こす例としてTTF (Tetrathiafulvalene)-CA (p-Chloranil)の分子性結晶が有名である<sup>[22]</sup>。この系では、等間隔に並んだ中性相に光を当てると、2量化したイオン性相に転移することが知られている。本研究では、TTF-CAのモデルとしてTTF-TCNE (Tetracyano ethylene)の分子性結晶(TTF-TCNE)<sub>10</sub>を用いてGiant SAC-CI法により計算した。

図4の(TTF-TCNE)<sub>10</sub>の励起状態の計算によると、吸収強度は結晶全体に広がった全対称な励起状態のみ大きな値を持ち、それ以外の局所的に励起するような励起状態は光を吸収しない。従って、(TTF-TCNE)<sub>10</sub>に光を当てると強度を持つEx1またはEx2に励

起し、Ex1への励起では青矢印のように、Ex2への励起では黄矢印のように、分子全体が同時に協奏的に動くと考えられる。このメカニズムは「協奏的メカニズム」と呼ばれるべきものであり、局所的な変化が順次伝搬する「ドミノ倒しメカニズム」(図3)とは異なる。

そこで、系全体が垂直励起状態から協奏的に同時に動くときの励起状態のポテンシャルを計算すると、ちょうど2量化したところで、安定になることが確かめられた。以上の研究から、等間隔に並んだ中性相のTTF-CA(TCNE)結晶に光が照射されると、結晶全体に広がった全対称な励起状態に励起し、分子全体が同時に2量化化する「協奏的メカニズム」(図5)により、イオン性相へと相転移する可能性が示唆され興味深い。このメカニズムは、以前から提唱されていた局所的に転移する「ドミノ倒しメカニズム」(図3)とは異なるものである。この2つのメカニズムでは「協奏的メカニズム」の方が速いプロセスである等、ダイナミクスに大きな差異があり、実験的検証が望まれる。

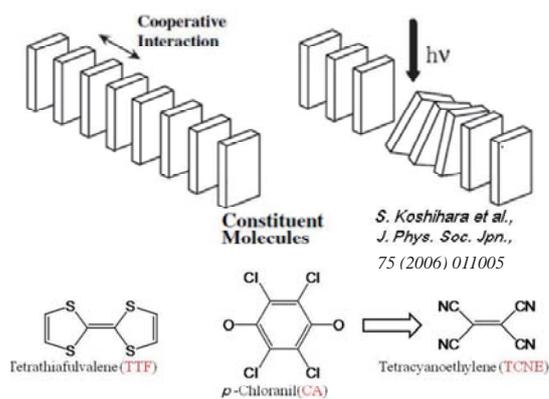


図3 TTF-CA (TCNE)の光誘起相転移<sup>[21]</sup>

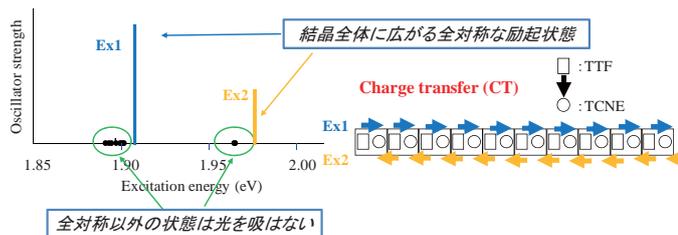


図4 TTF-TCNE 結晶の吸収スペクトル

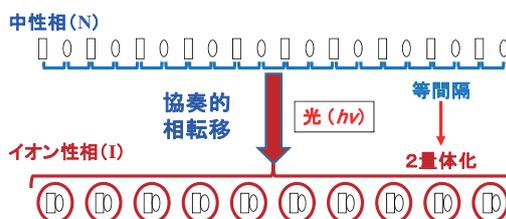


図5 協奏的メカニズム

### 3-3. Giant SAC-CI法の

#### 非周期系への応用

SAC-CI法による蛋白質計算を可能にするために、Giant SAC-CI法を非周期系に拡張するプログラムの開発を行い、まず、グリシンのポリペプチドに応用した。Giant SAC-CI法の結果は Gaussian 09 SAC-CI法の結果をよく再現した。他方、計算時間は Giant SAC-CI法の利用により、普通の SAC-CI法と比較して、7倍加速された。また、実験の UV 吸収・CD スペクトルと Giant SAC-CI法の結果を比較することにより、それぞれのピークがどの部位のグリシンによる励起であるかを同定することができることも分かった。このように、Giant SAC-CI法は蛋白質の UV・CD スペクトルの計算や解析にも有力な手段となり得ることが示された。さらにこの Giant SAC-CI法は全系を部分系に分割して計算を行うため、ある程度並列化が可能であり、その並列化効率も高いはずである。従って、スーパーコンピュータを利用することによるメリットは大きく、将来飛躍的な計算結果をもたらす手法になるものと期待している。



なかつじ・ひろし

私たちの研究所では「自由の学風とオリジナリティーを尊重することによって、高水準の世界に冠たる研究を生み出し、もって、科学技術の発展と人の幸福に寄与すること」を所是としている。これを研究所の基盤とし実現することが私たちの活動の基本であるが、やはり容易なことではない。分子科学研究所をはじめ多くの方々から陰に陽にサポートを頂いていることを思い、非力に鞭打って努力していかなければと、しきりに思うこの頃である。

#### 参考文献

- [1] H. Nakatsuji, J. Chem. Phys. 113, 2949 (2000).
- [2] H. Nakatsuji, E. R. Davidson, J. Chem. Phys. 115, 2000 (2001).
- [3] H. Nakatsuji, M. Ehara, J. Chem. Phys. 117, 9 (2002); J. Chem. Phys. 122 194108 (2005).
- [4] H. Nakatsuji, Phys. Rev. A 65, 052122 (2002).
- [5] H. Nakatsuji, Phys. Rev. Lett. 93, 030403 (2004).
- [6] H. Nakatsuji, H. Nakashima, Phys. Rev. Lett. 95, 050407 (2005).
- [7] H. Nakatsuji, Phys. Rev. A 72, 062110 (2005).
- [8] H. Nakatsuji, H. Nakashima, Kurokawa, Ishikawa, PRL 99, 240402 (2007).
- [9] H. Nakashima, H. Nakatsuji, J. Chem. Phys. 127, 224104 (2007).
- [10] Y. Kurokawa, Nakashima, Nakatsuji, Phys. Rev. A 72, 062502 (2005).
- [11] H. Nakashima, H. Nakatsuji, Phys. Rev. Lett. 101, 240406 (2008).
- [12] H. Nakashima, Y. Hijikata, H. Nakatsuji, JCP 128, 154108 (2008).
- [13] Y. Hijikata, H. Nakashima, H. Nakatsuji, JCP 130, 024102 (2009).
- [14] H. Nakashima, H. Nakatsuji, Astrophys. J. 725, 528 (2010).
- [15] H. Nakatsuji Chem. Phys. Lett. 59 362 (1978).; 67,329,334(1979); Bull. Chem. Soc. Jap. 78 1705 (2005).
- [16] SAC-CI homepage. <http://www.qcri.or.jp/sacci/> (6/6/2005)
- [17] M. Ehara J. Hasegawa H. Nakatsuji Theory and applications of Computational Chemistry The First 40 Years Elsevier Oxford 2005; p1099.
- [18] M.J. Frisch et al. GAUSSIAN 09 Gaussian Inc. Wallingford CT 2009.
- [19] H. Nakatsuji T. Miyahara R. Fukuda J. Chem. Phys. 126 084104 (2007).
- [20] S. Tran-Dinh J. Taboury J. M. Neumann T. Huynh-Dinh B. Genissel B. L. d'Estaintot and J. Igoien Biochemistry 23 1362 (1984).
- [21] S. Koshihara and S. Adach J. Phys. Soc. Jpn. 75 011005 (2006).
- [22] E. Collet MH. Lemee-Cailleau M. Buron-Le Cointe H. Cailleau M. Wulff T. Luty SY Koshihara M. Meyer L. Toupet P. Rabiller S. Techert Science 300 612 (2003).

## 岡崎統合バイオサイエンスセンター設立10周年を迎えて

平成22年度岡崎統合バイオサイエンスセンター長 青野 重利

岡崎統合バイオサイエンスセンターは、分子科学・基礎生物科学・生理科学などの学際領域にまたがる諸問題に対し、総合的な観点と方法論を適用、駆使し、新たなバイオサイエンスを切り開くことを目的として、2000年4月に分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所の共通研究施設として設立された。岡崎統合バイオサイエンスセンターに所属する教員は、岡崎の3研究所のうちいずれかの研究所の教員を兼務している。分子研関連の教員としては現在、教授3名（青野重利、加藤晃一、桑島邦博）と准教授1名（藤井浩）が分子研を兼務する教員としてセンターに所属している。

昨年度、岡崎統合バイオサイエンスセンターが設立10周年を迎えたのを機に、これまでの成果の取りまとめと、今後のセンターの方向性を議論することを目的とし、「岡崎統合バイオサイエンスセンター10周年記念シンポジウム」を、平成23年2月10日から2月

12日の3日間、岡崎コンファレンスセンターにおいて開催した。当日は、佐藤勝彦 自然科学研究機構長、ならびに小山晴己 文部科学省学術機関課研究調整官からのご挨拶の後、シンポジウムを開始した。シンポジウムでは、「方法論・装置開発」、「生命機能分子解析」、「生命機能分子探索」、「高次生命現象」、「計算機シミュレーション」という5つのセッションを設定し、センターの教員6名と外部研究機関（岡崎3研究所を含む）19名による講演、ならびにセンターの研究グループからのポスターセッション29件が発表された。センター教員によるシンポジウム講演においては、これまでにセンターにおいて実施されてきた研究の成果と今後の研究の方向性が、外部機関からの講演者の先生方からは、岡崎統合バイオサイエンスセンターにおいて今後取り組むべき研究分野に関する意見も含めながら、対応する研究分野における最先端の研究成果が紹介された。ポスターセッショ

ンにおいては、センターの各研究グループが実施している研究についての詳細が報告された。

10周年記念シンポジウムにおけるセッション設定は、現在センターにおいて実施している研究事業である「生命機能分子から生命システムの全体像にせまる統合バイオサイエンス」における重点研究項目を反映して設定されたものである。本研究事業は、構造生物学、分子遺伝学、神経生理学等の分野において世界をリードする多くの研究者が岡崎統合バイオサイエンスセンターを中心として連携し、高次生命現象を生命機能分子の構造的側面にまで掘り下げて理解することにより、生命システムの全体像を解き明かすことを目的として、平成22年度から6年間の予定で実施されており、岡崎統合バイオサイエンスセンターの中心的研究プロジェクトである。

センター設立以後、10年間の経過を振り返ってみると、センターに所属し



ている各研究グループはいずれも、それぞれの研究分野において高い研究成果を挙げてきた。しかしながら、センターと岡崎の3研究所との間の連携が、必ずしも充分でない部分があったことも一因となり、外からみた時に、セン

ター全体としての統一した大きな方向性が見え難い部分があったかもしれない。そこで、過去10年間の成果と問題点を総括したうえで、岡崎統合バイオサイエンスセンターが今後どうあるべきかについて、現在、岡崎統合バイオ

サイエンスセンターと岡崎の3研究所からの委員により議論・検討が行われている。今年度のできるだけ早い時期に、センターの一層の発展を目指した新たな方向性が示される予定である。

## 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

共同研究専門委員会では、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、および若手研究会の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。共同研究の現状について、平成17年度から今年度前期(6月1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。ここ数年は、ほぼ定常的な件数で推移しています。

分子科学研究所では通常の利用研究とは別枠で、東日本大震災により被災し、研究活動に支障を生じている研究者の支援プロジェクト(岡崎3機関「共同利用研究特別プロジェクト」<http://www.ims.ac.jp/whatsnew/2010/110317.html>)を3月17日に立ち上げ、現在も実施しています。通常の協力研究に準じて申請を受け付けており、それぞれの申請毎に、すみやかに審査を行い採否をお知らせしています。また、施設利用の枠での随時受付でも対応しておりますが、上記プロジェクトの一環として、通常の施設利用の枠に収まらないものについては、施設長・センター長(例えば、機器センター所有の共同利用装置を優先的に利用したい場合は機器センター長)を所内対応者とする協力研究として受け付けています。研究支援の内容については、可能な限り柔軟に対応していますので、要望等がある場合には、申請の際に所内対応者、あるいは共同研究専門委員会委員長にご相談下さい。

本支援プロジェクトの協力研究枠では、現在(6月10日現在)までに7件の申請が採択されています。申請者の所属機関の内訳は、東北大学4件、筑波大学1件、東京大学1件、慶応義塾大学1件となっています。大学院生の受入れについては通常の利用者として滞在期間を調整することも可能ですし、それ以外の便宜も図っています。例えば、1件の協力研究においては、大学院生を特別共同利用研究員として受入れ、研究教育活動の支援を行っています。その他、研究スペースの提供等も可能ですので、申請前に所内対応者にご相談下さい。

### 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	平成23年度 (6/1現在)
課題研究	1	1	2	2	1	0	1
協力研究	96	84	91	90	119	122	49
分子研研究会	11	13	9	4	5	6	1
若手研究会等	—	—	—	1	1	1	1
施設利用I	43	41	59	72	60	65	32
電子計算機利用(施設利用II)	132	142	144	147	171	170	149
UVSOR研究会	1	3	2	2	2	1	0
UVSOR施設利用	126	113	146	156	147	140	58
計	420	403	452	474	506	505	291

施設利用Iについては、平成19年度以降は、機器センターと装置開発室の合計件数である。

## 運営に関わって



## 緑川 克美

理化学研究所 基幹研究所 エクストリームフォトンクス研究グループ・ディレクター  
緑川レーザー物理工学研究室・主任研究員

みどりかわ・かつみ / 1983年慶應義塾大学大学院工学研究科博士後期課程修了(工学博士)。1983年理化学研究所レーザー科学研究グループ研究員、1994副主任研究員を経て、1997年レーザー物理工学研究室主任研究員。2005年より基幹研究所エクストリームフォトンクス研究グループならびにテラヘルツ光研究グループディレクター、2009年より基幹研究所副所長を兼任。

分子科学研究所は、創立以来、分子分光や光化学の輝かしい伝統があり、その中心の一つを為してきたのがレーザーによる分子科学であり、分子制御レーザー開発センター（以下、レーザーセンターと呼ぶ）が存在する所以でもある。レーザーセンターは、光分子科学研究領域との連携のもとに、分子科学の新分野を切り拓くための装置、方法論の開発研究を行なう施設で、新たに開発される装置や方法論は、所内外の分子科学者との先端的な共同研究のリソースとして提供される。

現在の主な開発研究分野としては、(1) テラヘルツから軟X線にいたる先端光源の開発、(2) 高出力超短パルスレーザーを用いた量子制御法の開発、(3) 高分解能光イメージングとナノ領域顕微分光法の開発などが挙げられる。

私は平成19年度から2年間光科学部門の客員教授を務めるとともにレーザーセンターの運営委員として運営に係わってきた。また、分子研と理研の連携研究として平成17年より「エクスト

リームフォトンクス研究」がスタートし、毎年2回合同でシンポジウムを開催してきた。本研究では、それぞれの有するレーザー科学における実績とポテンシャルを融合連携により発展させ、先端的な光源を用いて分子から細胞レベルまでの諸階層におけるダイナミクスを観測する手法の開拓と分子制御ならびに機能の解明を目指してきた。

理化学研究所におけるレーザー研究グループとの違いは、理研が新しいレーザーの開発そのものが主要なテーマになりうるのに対して、分子研の場合は頭に“分子科学”という冠がついているため、どうしても分子科学への応用を見据えた開発が要求される。もちろん、研究者の個性や予算の性格にも左右されるが、それは分子科学における全国共同利用施設という分子研の宿命でもあると言える。

分子研が設立された当初は、レーザー装置は非常に高価であり、共同利用機器として広くユーザーに共用されることを目的としてレーザーセンターが設

立されたと聞いているが、現在における状況は、当時とは大きく異なっていると思われる。市販のレーザーの性能が向上するとともに、特別な仕様でない限り一般のユーザーが研究費で購入できるようになってきた。

一方、近年の急速なレーザー光源とその制御技術の発展は、非専門家にはその先端的な性能を十分に応用研究に取り入れることは困難になってきている。しかし、そのような最先端の装置が駆使できなければ応用研究の最先端に位置することができないのも事実であり、今後は装置開発と応用研究の連携がますます重要になってくるであろうと考えられる。レーザーセンターで開発されるレーザー技術や装置は、一般的なツールであるべきではなく、それを駆使するには光源開発に携わる研究者とそれを利用する応用研究者の綿密な協力体制とその間の信頼関係が不可欠であり、それが、分子研で望まれるレーザー開発のあり方の理想であろう。

## 関連学協会等の動き

## TCCI/IMS

高塚 和夫 東京大学 大学院総合文化研究科 教授／分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 教授（兼任）

標題は「分子研・計算分子科学拠点」の略称です。TCCIは、Theoretical and Computational Chemistry Initiativeの頭文字で、英語名にはTheoreticalがわざわざ入れてあります。この4月からの5年間、計算科学研究機構（理研）のペタフロップスマシン「京」を同心円の中心として配された他分野との連携を行いつつ、超並列計算機による大規模計算分子科学研究を主業務とし、実験研究者や産業界との連携、次世代育成などを含めた分野振興などを核とする活動を行っていきます。

文科省は、「京」の設置を機に、全国の大規模計算機の連携関係を構築するとともに、利用者側の態勢を整備し、単発的な計算機開発ではなく、永続的な計算機利用環境の発展を企図する措置を開始しました。その一つに、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）の設置があり、戦略的研究分野としては、以下の5件の分野が選定されています。

- 1) 予測する生命科学・医療および創薬基盤（理研）
- 2) 新物質・エネルギー創成（東大物性研、分子研、東北大金研）
- 3) 防災・減災に資する地球変動予測（JAMSTEC）
- 4) 次世代ものづくり（東大生産研）
- 5) 物質と宇宙の起源と構造（筑波大、高エネ研、天文台）

上の各項目の最後の括弧の中の組織名は、それぞれの戦略分野において中心的な役割を果たすいわば担当機関

であって、戦略機関と呼ばれています。第2分野「新物質・エネルギー創成」は、東大物性研が代表機関となって、分子研、東北大金研の三つの戦略機関が、それぞれ物性科学、分子科学、材料科学を担当し、互いに分野の壁を超えながら強気に連携して展開することになりました。この3機関を纏める形で、計算物質科学拠点（CMSI）が設置され、物性研に事務局が置かれています（統括代表：常行真司東大教授）。

戦略機関としての分子研においては、冒頭に述べたTCCIが置かれ、4月から正式発足したところです。分子研の実験棟511号室から515号室がそれに当てられ、拠点長室（兼会議室）、事務室、三つの研究室からなる広いスペースで運用されますが、経費としては、本来の分子研予算とは独立に運営されます。因みに、分子研の計算科学研究センターは、HPCIにおいて資源提供機関としての役割を果たすことが期待されており、分子科学コミュニティへの計算環境の提供に加えて、CMSIへの一定の寄与を行うことになっています。

とはいえ、CMSIもTCCIも突然発生したわけではなく、全国の理論・計算化学者が研究立案それに伴う実施可能性予備調査などに長時間を費やし、分子研の諸先生方の取り纏めを主とすることをご尽力をいただき、形を成してきたものです。昨年度（2011年）、2月4日と5日には、岩本文科省研究振興局情報課長や平尾計算科学研究機構長などのご来賓をお迎えして発足の会を岡崎コンファレンスセンターで行い、大峯

分子研所長からTCCIの発足を宣言していただくとともに、本拠点のコンセプト、組織の概要、活動予定などの報告を行いました。当日は、大規模計算に関わる研究報告もいただくとともに、懇親会では多くの期待と熱い激励のお言葉を頂戴いたしました。

さて、もう少しTCCIの内容について述べてみたいと思います。先に書きましたように、文科省は、戦略分野に対しては、「京」を使った真に革新的な研究の達成を求めるとともに、戦略機関に対しては、そのサポートを含めた「分野振興」をミッションとして打ち出してきました。ユーザー群のために一過性の利便性を提供するというより、次世代の計算機をも視野に入れた、分野と人材の育成に資する永続的な活動を強く求めているわけです。分子研はこれを積極的に受けることとし、他の2戦略機関とも密接に協力し、大学の枠を超え、活動を展開することになりました。それを担保するため、TCCIのなかに、研究支援、研究課題対応、人材育成、社会連携、資源提供、国際交流、広報などの部門からなる運営委員会を設置し、すでに活動を開始しております。具体的な例としては、相当数の研究員の採用、量子化学や分子動力学のための冬の学校を初めとする研修会・勉強会の支援、諸研究会の開催などを行います。特に、「理論・計算研究の重要な萌芽は実験研究の中に見出される。実験化学者にも「京」の恩恵を還元する。」という考えの下に、実験家と

の強い連携を図るための研究会、および、理論・計算化学の大学院生の企業へのキャリアパスを太く多くすることを長期的な目標に掲げ、企業内研究者とアカデミアとの交流や再研修などを視野に入れた産官学の連携研究会などを実施してまいります。このような情報は<http://tcci.ims.ac.jp/tcci/>に随時掲載されて参りますので、継続的にご覧いただきますようお願いいたします(因みに、CMSIのホームページは<http://www.cms-initiative.jp/ja>です。こちらも随時ご覧ください)。

最後に、若干の私見を述べることをお許しいただきたいと思います。「京」がいくら国家規模の超大型プロジェクトであるにせよ、たかが計算機一台(といっても64万CPUですが)で、研究者が全員、一定の方向にベクトルを合わせてしまうなどということがあつ

てはならないと思います。研究の本質は自由と独創的なアイデアだからです。従って、「京」に背を向けている研究者が居ることは、それ自体健全なことです。しかしながら、ひとたび大規模計算に打って出たいと考えたときに、「超並列計算機が利用可能である」という豊かな学術的環境が存在することを知っておくことは重要なことです。さらには、それに関与すること、あるいはそれを育てていくことはもっと大切なことです。それは、自分が紙と鉛筆だけで完結する研究者であっても、その学生が、次世代の大規模計算環境を必要とする領域に船出するかもしれないからです。彼らが、技術的なことも含めて、そのような最新の研究環境から隔離されているようなことがあつては、教育の責任が果たせたとはいえないと思います。超並列計算機は、大量の計算を分割・並立させて行うための、

いわゆるシミュレーションのための装置というだけではありません。「研究機器」としては、他に代替の利かない特殊な能力を持っています。たとえば、会話型の相互作用をする多数の部分系からなる全系の自発的な秩序生成やルール(広い意味の言語など)の形成などの研究には、並列計算は最も相応しい研究手段です。(この意味でも、上の戦略分野に、複雑系、経済学や脳科学などを包含する一般非線形科学・数学などが選ばれていないのが私には残念です。)学生たちは、将来の研究においてどのような着想を持つかわかりません。超並列計算機を当たり前のように必要とする可能性は高いのです。次世代のために、研究環境や就職を含む諸機会を整備することは「現世代」の務めだと考えます。TCCIの活動に積極的なご参加とご協力をお願いする次第です。

## 関連学協会等の動き

### 学協会連携分子研研究会

# 「物理化学・生物物理化学の更なる発展のための提案と方策」

北川 禎三 兵庫県立大学 生命理学研究科 特任教授

本研究会は、学協会連携研究会というカテゴリーで、日本学術会議化学委員会の物理化学・生物物理化学分科会と分子研の共催で企画されたもので、平成23年3月1日に分子研201号室で開催された。プログラムを表1に示す。

## 1. 企画の背景

物理化学は、化学の基幹であることはもとより自然科学の基礎であり、生物学と物理学を繋ぐインターフェース

の役割を果たす重要な学問分野である。この研究分野で国際的に先導的な研究成果を挙げ続ける体制を整えることが、化学を基礎にした自然科学の発展に必須である。物理化学分野の学問的特色は、物質変換などの現象の本質を分子レベルで理解すること及び、生命や環境などマクロに捉えられる現象の観測方法の原理・手法の開発や高度な観測機器の製作を行い、新たな解析手法を提案するところにある。これまでも本

分野が、科学の発展のために多大な貢献をしてきたことは科学史が明確に示しているが、将来の科学の発展のためにもその重要性は益々高くなっている。

わが国では、物理化学研究の発展のために本分科会から発議され、学術会議全体の賛同を得て政府に提言されたことによって1975年に創設された分子科学研究所は、その目的を十分果たし、優れた学術成果を挙げると共に非常に多くの優秀な若手研究者を育成

表1 研究会プログラム

13:00	北川禎三	趣旨説明
第1部司会 北川禎三		
13:15	濱口宏夫	生命を計測し、理解し、保全する化学
13:45	藤井正明	高次分子システム研究のためのバーチャル研究所（高次分子システム研究所）
14:15	寺嶋正秀	融合領域のためのバーチャル研究所：生命分子科学
14:45	中嶋 敦	ナノクラスター化学の最前線
第2部司会 吉原経太郎		
15:45	岩澤康裕	物理化学のプレゼンス：日本の展望（理学・工学）、大型計画マスタープラン及び化学の夢・ロードマップを俯瞰して
16:15	内丸幸喜	科学技術政策の動向報告
16:45	大峯 巖	生命現象とポストナノ分子科学；新しい分子科学の方向へ向けての若手育成、融合、そのインパクト
第3部司会 茅幸二		
17:15-18:30	自由討論（コメンター：井口洋夫）	

した。その結果、この学問分野に関して日本がアメリカと共に国際的なリーダー国として認識されるに至った。とりわけ、分子科学研究所が全国の主要大学の教授を非常に多く輩出してきた点は、この分野の学術の中心としての役割を果たし、日本の化学をリードしてきたことを的確に示している。しかし、その勢いが最近なくなってきた事が懸念されていた。本誌においても、分子研OBの山下正廣氏（分子研レターズ60号、p.2-7、2009）と渡辺芳人氏（分子研レターズ61号、p.27-28、2010）が非常に的確な現状認識と「日本の学術研究を牽引する研究機関への再発展」を期待して、寄稿しておられる。更に田原太平氏（分子研レターズ62号、p.3-5、2010）は、それが分野の成熟に伴う必然的な閉塞感によるものであって、学問内容を「分子の科学」に変えて新分野を切り開く事の必要性を指摘しておられる。それらの指摘を参考にして、新しい施策を考え提案していくことが我々の責務であると言う認識で、この研究会を企画した次第である。

## 2. 現状分析と望まれる方向

分子研創設時は、孤立した分子の立体構造や電子状態を詳しく調べて分子を知る事、それが集合して固体になった時に新たに出てくる物理的性質を物理化学として理解する事、等が大きな目標であった。この方向は正しく、そして分子科学研究所はその方向に向かって走った結果、国際的に認知された研究所となり、日本全体の研究をリードしてきた。その目標がある程度達成され、今では研究対象が「生細胞や現実的材料などの複雑系で機能する分子」に飛躍的に拡大する一方で、理論的にも非線形の項を取り入れないと理解できない現象に直面するようになってきた。したがって、物理化学の研究を進展させるうえでいくつかの課題が顕在化してきている

複雑系を取り扱うには、現状の一研究グループでは手におえなくなっている。例えば、観測手段も既存の方法では駄目で、新原理を持ち込みそれを自作の装置で試していく必要があるが、それを実行するための中規模装置（1億から数10億円規模）の開発が、既存の科研費制度のもとで単独の研究室レベルでは難しくなっている。分子性

物質で新材料を合成する事も材料開発のために非常に重要であるが、合成した新規な物質の変った性質を物理化学的な観測で明らかにしたいが観測法がわからないので、新しい分析法の確立が望まれる場合もある。独自に開発した装置によってもたらされる新発見は、基礎科学の重要性の根幹であるばかりでなく、その装置が後に有用な分析機器として発展して、化学全体で使われる可能性が高い。そして、わが国の研究が世界的に見て新規な装置を開発するに十分な力量をもっていることを踏まえると、これはわが国が優先的に取り組むべき課題であると位置づけられる。

その達成のためには、複雑系の研究対象に対して基本問題を共有する人達、すなわち新規な物質を合成して問題点を提案する研究者、分子の基本的性質に戻って新規物性を観測する方法論を考案し装置を試作する研究者、その装置を使って新物質の性質を調べ積極的に利用していく研究者等、専門を異にする研究室がまとまって一つのプロジェクトを組み、中型予算を申請できる制度を作ることが必要である。

表2 協働的バーチャル研究所の構成

理事会	常務理事（所長）と助言担当非常勤理事、及びプロジェクトリーダーの執行理事で構成する。
事務局	常務理事の所属する大学法人または独立行政法人内に設置し、間接経費で事務員を採用する。
プロジェクトチーム	プロジェクトリーダーを代表とし、新装置製作分野、物質合成分野、物性測定及び応用分野等の代表3、4人で推進委員会を構成して、メンバーの選考やメンバーへの予算配分、外部評価に全責任を持つ。
実施拠点	1つのプロジェクトチームにメンバーとして、5～10研究室が属し、それぞれがその専門分野の研究拠点として共同利用研究室の形にする。会計事務はその研究室の所属する機関が担当する。

### 3. 協働的バーチャル研究所の提案

グローバル化した化学の更なる発展のためには、優れた研究者のリーダーシップのもとに協奏的に進める先端的な融合的研究拠点の形成が現実的な案と思われる。具体的には8～10年の時限付き中型研究プロジェクトを公募し、選考委員会で選抜する。採択課題にはそのリーダーをヘッドとするプロジェクト推進委員会を作り、毎年外部評価を受けながら研究を推進する。それを実行するメンバーは同じ場所にいる必要はないが、強いネットワークで結ばれ、時折集まって報告・討論をする。メンバーの研究室は実施拠点として設備を充実し、共同利用研究室の形で運営することが望まれる。プロジェクトとしては例えば、(1) 生命を分子レベルで理解するための原理・手法開発を目指すもの、(2) 光科学技術を物質開発、機能解析・分析に応用することを目指すもの、(3) コンプレックスマター（複雑液体、高分子、表面・界面など）の物性解明のための新原理・手法開発を目指すもの、(4) ナノサイズ分子集合体の作り出す新物性やその表面の生み出す特性（触媒活性、吸着、電子・磁気特性など）探求のための原理・手法

開発を目指すもの、等が考えられ、研究会でも具体的な提案があった。

生命や環境をも視野に入れ、新しい測定原理・測定法の開発を中心にすえた新たな基礎研究プロジェクトを公募し、プロジェクトの内容に応じて研究期間や予算額、さらに執行事務局が異なる複数のプロジェクトを取り仕切るのが、協働的バーチャル研究所で、そのスキームを表2に示す。

### 4. 講演内容

2010年の学術会議による「日本の展望—学術からの提言」のなかで、化学委員会は「化学分野の長期展望」と題する提案書の項目3の(5) (p. 5)に「協働的バーチャル研究所の設立」という形で、上記の内容を提案した。その提案内容を広く化学全体で討論してもらおうべく、平成22年3月の日本化学会年会の特別シンポジウムでその内容を説明したが、化学分野全体としては十分な討論がなされる途上にあるとの認識を得た。次のステップとして、化学全体にまたがって全国の大学の先生方に討論に参加していただく事が重要と考え、分子研研究会を提案したところ採択されたので、「化学と工業」誌にも

掲載する公開シンポジウムとして、この研究会を開催した。

研究会では、研究現場で最先端領域を牽引しているリーダーから「研究者側からの要望」をプロジェクトの具体案として提案していただき、それに対して行政側からのコメントをいただいた。その後、参加者全員からの研究会課題に関する意見を自由討論という形で聞いた。これは茅幸二、元分子研所長のユーモアを交えた名司会のもと、殆ど全員が意見を述べた。「物理化学」が現在カバーする学問内容が、分子科学研究所創設当時とは大きく変わっている点で認識は一致した。物理化学を基礎とする化学システムの発展のさせ方を軸に議論を深めた。この充実した討論の果実を活用し、より有効な成果に結び付けるためには、専門分野を横断する活動を展開するなどの、より広範な戦略的アプローチが必要であると考えている。

以下にプログラム順に講演の要点を説明し、その後自由討論での各発言を簡単に紹介するが、それらは筆者のノートに基づき、筆者の偏見の元にまとめたもので、発言者の承認を得たものではない事をはじめに断っておく。

**濱口宏夫**：「生命を計測し、理解し、保全する化学」を展開する分野横断型、目的縦貫型、省庁融合型バーチャル研究所として、「生細胞化学研究所」を提案する。生命物理化学を純粋科学、基礎科学、応用科学の全レベルで研究して、「生命の保全」を目標にする。そのためには、生細胞内の「何時」「何処」で「何」が起きるかを分子レベルで観測する手段が必要で、その方法の一つが、ラマン分光顕微鏡による単一細胞活性診断である。実際、生命のラマン分光指標や大腸菌バイオフィルムのラマンスペクトルも出ており、生細胞の分光イメージングで世界をリードしている若手研究者は日本に何人かいる。

**藤井正明**：分子科学の次の発展を目指して「高次系分子科学研究」の展開を提案する。これまでの分子科学が築いてきた「分子の先端計測法の開拓による素過程的理解」を複合高次系に拡張し、超高速の緩和や反応素課程の解明を膜機能を持つ系まで対象を広げ、空間分解能を高めていく。多成分間の分子間相互作用の解明が基本になるが、階層構造の上段には、生体分子の関与する高次系をも研究対象と考えていく。

**寺嶋正秀**：生命を担う分子の化学反応の理解を目指す融合分野の「生命分子科学研究」を目指す。含まれる反応はサブピコ秒から年まであり、サイズは酵素蛋白やDNAの分子レベルから細胞、器官まで広く、分野的には理学、医学、薬学、農学、工学にまたがる。過去のノーベル賞リストを見ると、物理化学の生命科学への貢献は非常に大きい事がわかる。例えば、「揺らぎが機能を決める生命分子の科学」という分野だけでも、日本には多くの優秀な若い研究者が居る。

**中嶋 敦**：クラスター化学の最前線を進む「ナノクラスターサイエンスファウンダリー」を提案する。1～500

nmの微粒子の物性論は1962年の久保亮五先生の研究に始まる。分子の1 nmレベルでの精密集積構造の制御は新しい材料を生み出す。SPring8に今年から公開されるXFELを用いると、分子ビームを用いた単粒子解析も可能となる。原子ともバルク固体とも違うクラスターの化学は、物質材料研究の上でも、ナノデバイス技術の創出の上でも、非常に重要である。

**岩澤康裕**：日本学術会議が発表した「学術からの日本の展望：提言・提案」の11項目の第6項に、「滞在型国際的研究拠点の実現と強化」、があり、ここでは「新たなネットワーク型の研究方法論（例えばe-サイエンス）や新しい研究推進体制（例えばバーチャル研究所）を構築し、滞在型国際共同研究拠点とネットワーク化する事により、人材育成を含めたわが国の学術基盤の格段の向上と国際貢献の機能強化を図るべきである」という文章で、物理化学分科会からの提案が取り上げられている。また『化学分野からの提案』9項目もそれとは独立に提言にいった。文科省により実施されたものとして、2001-2006年の「物理学と化学の真の融合を目指したネットワーク研究プロジェクト」（代表、茅幸二）や2006-2012年の「局所電子構造の理解に基づく物質科学の新展開」と題する機関連携研究が、これまでの発展に寄与してきた。日本学術会議は「大型研究計画のマスタープラン」を作成しているが、物理や生物系から沢山の提案があるのに、化学からはほとんどないことが残念である。そして、2011年度から始まる第4期科学技術基本計画の柱はこれまでの個別分野への重点投資から大きく変わり、課題解決型になる。『協働的バーチャル研究所』はそれになっっている。日本化学会は、「化学の夢・ロードマップ」を発表し、広く一般社会に化学の重要

性をアピールしている。その中でも本研究会で取り上げた化学の挑戦が幾つも取り上げられている。

**内丸幸喜**：内閣府が実施した2011年度の世論調査結果を見ると、「国際的な競争力を高めるためには科学技術を発展させる必要がある」という意識が最近国民全体により高くなりつつあることがわかるが、それが主に医療や環境の分野である。それらを参考に、我が国として取り組むべき重要課題を設定し、科学技術イノベーション政策を総合的に展開していく。その重要課題の一つに「世界と一体化した国際活動の戦略的展開」がある。平成22年に閣議決定された『新成長戦略』では推進力となる科学技術はグリーンイノベーション（環境・エネルギー）とライフイノベーション（医療・介護・健康）で、問題解決型の研究開発費は主にその分野における。それに対して、イノベーションの源泉となる重厚な知の蓄積は主に科研費による。その2種の予算のバランスが大事であるが、後者については、多様性が重要であり、第4期科学技術基本計画（平成23-28年）でも絞り込みはされない。政府研究開発投資を対GDP比1%にし、5年間で25兆円とする。そして、基礎研究と若手研究者等の人材育成を推進する。このところでは、大学運営に必要な基盤的経費の充実と、研究重点型大学群の形成や世界トップレベル拠点の形成が謳われ、また大学院教育の抜本的強化、博士課程進学支援及びキャリアパスの多様化、公正で透明性の高い評価制度の構築、女性研究者の活躍の促進、等が取り上げられている。政府は、こうした科学技術イノベーション政策を「社会及び公共のための政策」の一環と位置付け、国民理解を得つつ実施していきたい。

**大峯 巖**：過去に立派な業績を挙げた

分子研の次への飛躍として、「エクストリーム（超精密・極限場）分子科学」と「ポストナノサイエンス」に焦点をあてる。ここで、「ポストナノサイエンス」は、時間軸を積極的に組み込み、時空間不均一性のコントロールにより穏やかな条件下で起きる分子システムの機能発現を目指す。したがって、ナノスケールからマイクロスケールの高次階層分子システムの機能発現を含む。具体的には、分子系による高度情報処理、超高効率なエネルギー移動・変換、真のグリーンケミストリー、不均一性揺らぎを利用した分子機能発現、生命体的システムの構築が主題となる。それを実行するため、学位取得後1~2年の人に、若手独立ポジションを作り出し、将来ノーベル賞を取るような優秀な若い人材を集める工夫をしたい。

## 5. 自由討論

**井口洋夫**：1956年、私が英国に留学中、シカゴ大学に滞在中の長倉先生がOxford大学の招聘で英国に來られた。そして一夕、先生とお会いする機会に恵まれた。その際、化学の分野で研究所の必要性の構想が語られた。55年前のことで、分子科学研究所創設の原点であったと思う。今回提案されたネットワーク研究所は、研究費を削っても、安心して仕事に打込める若手研究者の地位のための人件費の充実する方策を考えてほしい。そして多彩な人材が互いに切磋琢磨してきた共同利用研の特徴は生かしてほしい。

**岩澤康裕**：今回の提案を、日本学術会議の「大型プロジェクト」として提案する事が一つの方向である。

**小杉信博**：今は、研究所が新設できた時代と違う。いくらバーチャルとは言っても、既存の研究所（分子研）を母体にして、内部に計画責任者が専任していただく実体がないと動かない。

**茅 幸二**：自分が分子研所長時代に、京大化研、東大物性研、等いくつかの研究所で、研究所連携プログラムを実施した。所長が全責任を持つもので、これはうまくいった。

**榎 敏明**：分子研が現在実施している研究機器ネットワークは、有機化学、無機化学の分野にプラスになっているが、物理化学分野にはプラスになってない。研究そのもののネットワークを分子研が作り、客員制度を有効利用して共同研究プロジェクトを実行していったらどうか。

**田原太平**：ネットワーク研究所に階層を付けて、裾野を広げる事が大事。

**大西 洋**：若い人はpermanent jobの得られない分野には集らない。提案の新研究所には企業が加わり、Ph.Dの行く先の保証が必要である。

**井口洋夫**：分子研創設の目的の一つに「物質循環の原理を考える」ことが述べられている。それは現在の分子研の役割の中でも生きていと思う。

**吉原経太郎**：最初の頃は「物質循環」は研究所内でよく話題になり、エネルギー問題が話題となった。循環の内容は大中小とあって、大には宇宙や大気の循環など、中には体内循環やリサイクルなど身近の循環、小には生体内のクレブスサイクルやカルビンサイクルなどの多くのサイクルがある。分子科学が問題とすべき多くの新しい課題が含まれている。

**赤坂一之**：大峯所長の指摘された「穏やかな条件下で起きる分子システムの機能発現」に注目する。これは、私には、まさに生命現象そのもの、もっと詳しく言えば、蛋白質そのものを表現したものに思える。生命現象をただ単なる複雑な分子集合体とみ、物理化学はその観測のための技術を提供するものであるなら、物理化学は生命科学に対して本質的な貢献を成し得ない。地球上

の生命の全ては、DNAの情報を蛋白質によって発現するという、共通の原理で動いている単純性に注目すべき。生命の本質である環境適応性は、蛋白質機能の環境適応性に由来しており、それを支えるのは「熱力学とカップルした構造」であって、その本質は物理化学。蛋白質をはじめとする生体高分子について、これを明らかにするために重要な熱力学摂動は圧力である。物理化学に根ざした圧力軸生物科学の推進を提唱する。

**古谷祐詞**：分子科学の若手が「さきがけの領域会議」のように異分野間交流しながら自由な発想を試す場が少ない。

**内丸幸喜**：科研費がライフサイエンスに偏っているという話を聞くが、目に見えないバリアーをなくす事は制度的に難しい。

**神取秀樹**：連携する事が非常に大事。生物と化学の間に線がひかれていた感があつた。

**藤井正明**：ネットワークが出来る事が非常に重要。バーチャル研究所はその意味で有効である。

**茅 幸二**：自分は、有機化学と無機化学を融合させる事に失敗した。生命科学の人は、物理化学は不必要と考えている。しかし分野融合の考えは重要。

**大峯 巖**：分子研は若い人が作ってきた。今後もそうでありたいと思っている。

COLUMN

## 岡崎を去るにあたり

谷川 貴紀

総合研究大学院大学物理科学研究科機能分子科学専攻に在籍、  
現在リール第一大学(フランス) 博士研究員

たにかわ・たかのり

2008年度から2010年度まで総合研究大学院大学の博士後期課程学生として、分子科学研究所・極端紫外光研究施設(UVSOR)の加藤グループに所属。2011年2月、同大学にて理学博士の学位を取得。同年5月より現職。高強度超短パルスレーザーと放射光源加速器を組み合わせた高輝度短波長コヒーレント放射光源の開発に従事。

愛車デミオに乗って岡崎の電車通りと呼ばれる県道を走り抜け、自然科学研究機構の守衛室の前で軽く挨拶をし、UVSOR(分子科学研究所(以下、分子研)・極端紫外光研究施設)棟の横に車を停める。隣には休みの日なのに今日も白いコペンが停まっている。総合研究大学院大学(以下、総研大)の同期で居室を共にしている友人の車だ。彼とは、共に励まし合い、一緒に御飯に行ったり、色々馬鹿やったりしたなあと、そんな日々を思い返ししながらこのコラムを執筆している。その傍らではフランス語と思われる楽しげな会話が聞こえてくる。

2008年4月に総研大に3年次編入し、八丁味噌の街岡崎で暮らすこと3年。あっという間の日々だった。生まれてこの方、実家のある兵庫県で学生生活を送ってきたので環境の変化をほとんど感じることなく過ごしてきたが、総研大に入学するにあたり岡崎に引越すということで、まるで英単語を調べが如く、引越し前に三河弁を調べていたことが懐かしい。しかし分子研では三河弁を話す人はほとんど見かけられず、ただの取り越し苦労であった。味噌の街というだけあって、色々なものに味噌を和えて食べる習慣に驚きはしたものの、これが意外と自分に合っていて、また食事は基本的に外食だったので、食事の美味しい店を探すこと

がいつの間にか趣味になっており、岡崎を出る頃には多くの店の人に顔を覚えられてしまっていた。その分お店の人と仲良くなれたのは嬉しく思う。

余談はさておき、岡崎での3年間の研究生活について振り返ってみたい。私は修士の時、兵庫県にある大型放射光施設SPRING-8地区内に建設された放射光源加速器(自由電子レーザー)を使って、一般的なレーザー装置では発生できない波長領域(真空紫外線~軟X線)のレーザー光を作っていた。博士後期課程に進学するにあたり、超短パルスレーザーと光源加速器を組み合わせた自由電子レーザーの理解を深める為、その原理の基礎研究ができる大学を探していたところ、そのような研究を行っている施設が国内にあることを知り、その時に知り合ったのが現UVSOR施設長であり、私の指導教員でもあった加藤先生であった。偶然にも、そこには大学院教育があることを知り、総研大を受験した、というのが入学のきっかけである。

総研大では、大学院の学生しかいない特殊な環境である為、学生数は少ないものの、多岐に渡る分野の学生と交流することができた。特に、分子研は生理学研究所と基礎生物学研究所と隣接していることもあり、分野の垣根を越えた学術交流だけでなく、プライベート



リール第一大学でお世話になっている先生方と研究室メンバーで撮影(筆者は下段右端)。

でも多くの交流を持つことができたことは自分にとって多くの糧となった。また研究面においては、UVSORの職員の方々に支えてもらいながら、自由に研究をさせていただいた。と言っても、限られた時間内で実験を行い、最終年次では学位審査まであとわずかという時間の中、投稿論文及び博士論文の執筆を性急に行わなければならないという、常に時間に追われた生活であった。しかし、多くの人に支えられ、無事審査を終了することができ、学位を頂くことができた。今思い返せば、もう少し頑張ればもっと他に成果を出せたのではないかと等々思うところはあるが、正直あの時に戻ることを考えるのは恐ろしい。

そんなこんなで、UVSORの職員の方々だけでなく分子研の先生方にも多くの迷惑をかけたつも、幸い学位を取得できたわけだが、就職先という壁が立ち上がった。自分のやりたい研究を行える環境が整っている場所は、世界的に見てもごく少数の施設しかないからである。色々就職先を探しつつ、SPRING-8で学生をやっていた時にお世話になったフランスのM.E.Coupric先生に相談しようかと思っていたちょうどその時、加藤グループとの海外協力研究という形で光源開発の実験に来て

いたリール第一大学のS.Bielawski先生とC.Szwaj先生から、「うちのプロジェクトでポストクを探しているからフランスに来てみないか」というお誘いを頂いた。しかもそのプロジェクトにはCouprie先生も参加しているとのことで、断る理由が見つからなかった。それに海外の研究者らがいかにして質の高い論文を量産しているのか気になっていたり、何かしら所縁のあったフランスには行ったことがなかったので行ってみたいという気持ちは強かった。しかし言葉の問題（フランス語は勉強したことがない）や、文化や生活環境の違う異国の地で果たして長期生活していけるのかという不安に駆り立てられた。だが、このチャンスを逃したら海外で生活するという貴重な経験は一生できないぞと自分にプレッシャーをかけて、ようやく腹をくくることができ、フランスに行くことを決意した。

渡仏に向けて様々な手続きに追われながら5月からフランスでの生活がスタートした。しかし、その生活はカ

ルチャーショックの連続であった。まず研究者以外英語を話せる人がほとんどいないことである。言葉が通じないのに、これからどうやって生活していけばいいのだろうか。また周りには日本人はおらず、フランスでの生活の仕方もネットで調べておいた内容だけでは全く事足らずであった。そして、ショッピングをしようと思いきや日曜日は飲食店以外は基本お休み。日本のコンビニのような深夜でも開いているお店もない。大学も夜と週末はセキュリティの為に進入するのも一苦労。こういう状況に初めは全く馴染めず、生活のリズムが作れず厳しい日々であった。しかしそんな自分を救ってくれたのが、自分が好きな中世の西洋建築物の街並みを物見遊山に散歩することであった。また、日本食が恋しくなるかと思いきや、意外とこちらの料理は日本人の舌に合っていて、さらに好きなワインも安く手に入り、つまみにソーシーソンと呼ばれるサラミのようなものとおいしいフランスパンを食

べたりしつつ、ようやくこちらの生活を楽しめるようになってきた。少しずつフランス語も勉強し始め、カフェやちょっとしたレストランなら一人でも行けるようになった。色々トラブルに見舞われながらも、フランスの先生らに助けられつつ、海外生活を堪能している。まだまだフランス語が話せないなので、コミュニケーションに苦労しているが、大学の人らと外でお日様にあたりながらのコーヒータイムを楽しみつつ、早くフランス語で会話できるように、研究と並行して頑張っていきたいと思っている。

末筆ながら、3年間お世話になったUVSORの先生方やスタッフの皆さん、そして友人ら、これまで陰ながら支えてくれた家族・祖父母らにこの場を借りて感謝を捧げたい。

## 総研大ニュース

### カセサート大学理学部とMOUを締結

平成23年4月より5年間の期間、総合研究大学院大学物理科学研究科がカセサート大学理学部とMOUを締結することになりました。カセサート大学はバンコクにある大学で、もともと農学系の大学でしたが、現在は総合大学になっており、4つのキャンパスがあります。すでにMOUを締結しているタイ国のチュラロンコーン大学と同様に、研究・教育のアクティビティは高く、学生数はタイ国では最大で、5万3千人を超える大きな大学です。これまでもカセサート大学からは、総研大アジア冬の学校などで多くの大学院生

が分子研に訪れています。また、JSPS-JENESYSプログラムにおいても、カセサート大学から毎年数名の大学院生や若手研究者が分子研に短期滞在し、研究活動を行っています。さらに、これらの分子研訪問を契機としていくつかの共同研究も行われています。この度、MOUが締結されたことによって、これまで以上に教育や研究の交流が深められることが期待されます。

(江原 正博 記)



カセサート大学、バンコクのBangkhenキャンパス

E V E N T R E P O R T

学生報告 総研大物理科学研究科セミナー

物理科学研究科構造分子科学専攻 5年一貫制博士課程4年 堀川 武則

2011年2月26日から2日間にわたり総研大物理科学研究科セミナー（大学院教育改革推進プログラム「研究力と適性を磨くコース別教育プログラム」の一環）に参加しました。初日は、実行委員ということもあり、専攻紹介を行いました。私は、構造分子科学専攻と機能分子科学専攻の理論分野の紹介を担当しました。先生方の前で分野の紹介をしたので、とても緊張しましたが、良い経験になりました。また、天文学や核融合など他専攻の専攻紹介を聞くことができ、とても自分の視野が広がりました。専攻紹介の後、グループごとに具体的な研究を含めて自己紹介を行いました。他分野の最先

端の研究を聞くことができ、興味を持つことができました。二日目最終日は、メインのキャリアパス（博士課程を卒業されて就職された方からの話し）でした。文系就職、理系就職、教職のお三方をお招きして講演をしてもらいました。就職した後の現場の状況などが具体的に聞けて、参加した意義を感じました。

このようなセミナーは参加するのが億劫になりがちですが、実際参加してみると思いのほか勉強になったり、得るものがあると感じました。今後も他分野交流のイベントがさらに増えればよいと思いました。

開催プログラムの概略

2月26日

企画1：研究内容の相互理解

2月27日

企画2：院生生活の改善方法

招待講演 林亮子（金沢工業大学）

企画3：博士号取得後のキャリアパス

招待講演 瀬々将史

（秋田県立横手清陵学院高等学校）

神保成昭（セイコーエプソン）

宮内洋宣（日本総研）

（敬称略）

**Takenori Horikawa**

京都大学工学部工業化学科卒業、  
京都大学理学研究科化学専攻修士課程修了、平成22年に総合研究大学院大学物理科学研究科博士後期課程入学。現在、自然科学研究機構岡崎共通研究施設計算科学研究センター江原研にてSAC-CI法を使った高精度電子励起状態計算を研究中。



学生報告 平成23年度前期学生セミナー

物理科学研究科機能分子科学専攻 5年一貫制博士課程3年 櫻井 扶美恵

4月7日～8日の2日間にわたり、入学式および学生セミナーが総研大葉山キャンパスにて開催されました。本年度前期学生セミナーのテーマは“DNA”（＝“Discover” “Network” “Announce”）であり、生命の設計図ならぬ研究者の設計図を意味したものでした。そのテーマの意図に沿って本セミナーは“Discover” “Network” “Announce”の3つのセッションに分かれていました。

最初に行われた“Discover”のセッションは、学生が専攻に関係なくランダムに席に着き、学生同士で研究に関する事を話し合い、面白い人を発見していくというものでした。自分の研究分野とは大きく異なる学生がほとん

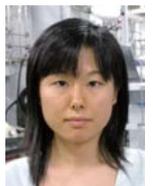
どで、最初は心細く不安もありましたが、多くの他分野の学生との会話も弾み、楽しく本セッションに参加することができました。次に行われた“Network”のセッションでは、自分と周りの人々とのつながりを実際に紙面上に示すことによって、自分の夢を実現するために必要な事は何かを改めて考えることができ、私にとって最も印象に残るものとなりました。3つめの“Announce”では、全く分野の異なる学生に対して自分の研究内容やその意義を伝えることに挑戦しましたが、相手に理解してもらえるよう伝えることの難しさを実感しました。

今回の学生セミナーを通して、私は

総研大の他専攻の学生と幅広いつながりを持つことができたと同時に、将来研究者として活躍するために何が必要なのかという疑問に対して何らかのヒントが得られたような気がします。これから3年間の分子研での生活において、「自分は何を目的として研究を続けていきたいのか」を日々意識しながら、今後の研究生活を過ごしていきたいと思っております。

**Fumie Sakurai**

名古屋市立大学大学院薬学研究所博士前期課程を修了後、平成23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に博士課程3年次編入学。生命・錯体分子科学研究領域魚住グループにて、自己組織化ナノ構造体を利用した水中での反応駆動システムの開発に取り組んでいる。



## 教員報告 分子研シンポジウム2011

2011年度担当教員 理論・計算分子科学研究領域 准教授 米満賢治

分子研シンポジウムが平成23年5月27日(金)午後から28日(土)午前にかけて岡崎コンファレンスセンター中会議室で開催されました。このシンポジウムは土曜日のオープンキャンパスに連動する企画として、平成19年から始まり今年が5回目になります。これまでと同様に、分子研に縁のある先生方に講演をお願いしました。修士課程の学生を主な対象として、それぞれの分野を紹介する話、最新の研究の様子、将来展望などをお話いただきました。参加登録者は所外43名で、所内参加者や当日に所外から来た人たちを含めると70名以上の聴衆が集まりました。所外の参加登録者の内訳は、学部生5名、修士課程18名、博士課程5名、大学の職員5名、企業または財団の職員10名です。本シンポジウムのプログラムは以下の通りです。

細越裕子 (大阪府立大学)

「分子と磁石：

分子でつくる新しい磁気状態」

中林孝和 (北海道大学)

「蛍光寿命を用いた細胞のその場観察」

高橋 聡 (東北大学)

「タンパク質のフォールディング研究：

高分子が構造を記憶するための条件は何か？」

佐藤啓文 (京都大学)

「分子レベルで見る化学過程の理論」

田原太平 (理化学研究所)

「超短パルスで分子を観る」

すべての講演時間は質疑応答も含めて60分としました。講師の方々のそれぞれが研究に至った背景や動機をわかりやすく説明されました。講演後の質問のほかにも、休憩時間などを使って熱心に講師から話を聞きだしている様子が見受けられました。若い参加者

のよい刺激になるように、懇親会では所内からも多数の出席をお願いしました。そこでは若い参加者と所内の研究者との和やかな会話や活発な議論が盛んに行われました。講師の方々の全員が、ご本人と分子研の交わりや思い出を紹介してくださいました。また若いときから研究の場所を変えて、異なる環境や分野の研究者と交わることの大切さを熱心に語ってくださった先生方もおられました。今回は東日本大震災の後でもあり、参加学生と話をしてみると影響を受けた人も少なからずいました。そのような状況でも時間を都合して参加してくださったことはありがたく思います。また、それぞれに工夫をこらし、学部生にも大変に興味をそそるように、ご講演の準備をされた先生方に、深く感謝を申し上げます。



E V E N T R E P O R T

教員報告 分子研オープンキャンパス2011

2011年度担当教員 物質分子科学研究領域 准教授 中村敏和

2011年5月28日(土)に分子研オープンキャンパスを分子科学研究所において開催した。オープンキャンパスの参加者構成は、鳥取から北海道まで、学部学生5名、修士過程20名、博士課程4名、教員・研究員4名、民間7名であり、あわせて合計40名(このほか分子研シンポのみの参加者が6名)で昨年度の8割程度となった。教員、民間の参加者が増加している一方で、学生の参加者数は激減している。東北、関東地域の参加人数が減少しており、震災の影響が大きかったと考えられる。当日は12:45より岡崎コンファレンスセンター中会議室で、大峯所長、

横山教授、青野教授、著者の順番で分子研、総研大、共同利用、およびオープンキャンパスの説明を行い、明大寺・山手の両地区を14:10から17:00まで実験室を自由に見学してもらった。天気には恵まれず雨模様であったが、台風襲来前日だったので交通の便には問題が無く幸いであった。アンケートの回収率は昨年よりやや低い57.5%である。参加情報の入手先は先生からの紹介52%、ポスター13%、今回はホームページが4%となっている。ポスターを見た人の多くは先生からの紹介と重複している。しかし、ポスターがあつたからこそ教員からの紹介があ

るわけなので、ポスターの重要性は依然として高いと思われる。実際、ポスターを見たことがある人は57%と昨年度同様に高い。以上の結果は、本事業が広報室の弛まない努力と大学におけるOB等の分子研に縁のある先生方に支えられた形で成立していることを表していると思われる。特に近畿地域の学生・教員参加者と東海地区の民間参加者が増加しており、感謝したい。最後に今回のオープンキャンパスの開催にあたりご協力頂いた皆様に、この場を借りて厚く御礼申し上げます。

総研大の知名度



オープンキャンパス情報入手先



## 受賞者紹介

### 谷川 貴紀 (総合研究大学院大学物理科学研究科機能分子科学専攻に在籍、現在リール第一大学(フランス) 博士研究員) 第24回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム学生発表賞

この度は、「UVSOR-IIにおける飽和領域でのコヒーレント高調波の観測」という題目で第24回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム学生発表賞に選ばれました。

私は、総合研究大学院大学(以下、総研大)に入学する以前より超短パルスレーザーと光源加速器を組み合わせた自由電子レーザーに関する研究を行ってきました。博士後期課程に進学するにあたり同研究の基礎研究を行える施設・大学を探していたところ、指導教員であったUVSOR施設長の加藤先生と出会いました。UVSOR-IIは新しく光源開発をするのに非常に小回りが利く施設で、私

もこの研究成果を得る為に用意した、超高真空下で動作する真空紫外領域の分光測定装置やガス媒体を用いた入射レーザーの波長変換装置の設計・構築を自由に行わせていただきました。成果が出るまで時間がかかりましたが、施設の職員の方々、そして分子科学研究所の先生方に支えられ、博士後期課程修了という節目の時期に、自分の研究成果を評価していただけたことに大変喜ばしく感じております。お世話になった方々にこの場を借りて厚く御礼申し上げます。この受賞を励みに、今後も精進して参りたいと思います。



UVSOR-II電子蓄積リングの偏向電磁石の上で撮影。

(Ref) T.Tanikawa *et al.* Appl. Phys. Express **3** (2010) 122702

### 郭 浩 (Guo Hao) (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4年) 平成23年度(第2回)総合研究大学院大学 学長賞

平成23年4月6日(水)に平成23年度(第2回)学長賞ポスター発表会が開催され、4月7日(木)入学式時に最終候補者10名の学生全員に学長賞が授与されました。構造分子科学専攻からは3年次編入の私費留学生である私が、研究課題名「Exploring ion-transportation mechanism of halorhodopsin and channelrhodopsin: in situ monitoring by stimulus-induced difference surface-enhanced infrared absorption spectroscopy」について表彰して頂きました。

私は、中国の河南省にある河南大学の出身ですが、表面増強効果と振動分光法による生体分子の研究を深めるため、総研大に入学し、生命・錯体分子科学研究領域の古谷祐詞准

教授の研究グループで学位取得を目指して研究を行っています。学位研究課題では、脂質二重層に埋め込まれた膜タンパク質のイオン輸送過程に伴う構造変化を表面増強赤外分光計測により明らかにすることを目的としています。これまで金薄膜の蒸着、光駆動イオン輸送タンパク質であるハロロドプシンの表面への固定化に成功し、それぞれの過程での赤外スペクトル変化を確認しました。イオン結合に伴うスペクトル変化を取得することも試み、現在は金薄膜の作製条件、タンパク質の固定化方法など様々な条件を検討しているところです。将来的には、光反応に伴う赤外スペクトル変化を実時間で計測することも目指しています。



真空蒸着装置では薬師 久彌 教授(現:名誉教授)、AFM観察では宇理 須 恆雄 教授(現:名誉教授)、手老 龍吾 助教(現:豊橋技科大 特任助教)には大変お世話になりました。この場を借りて御礼申し上げます。

平成23年度3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	塚原 侑平	Redox Behavior of Ru Complexes Modified on Carbon Electrode Surface and Reactivity toward Electrochemical CO <sub>2</sub> Reduction	理学	H23. 3.24
機能分子科学	清田 泰臣	Molecular Recognition Process of Biological Molecules Studied with a Statistical Mechanics Theory	理学	H23. 3.24
	谷川 貴紀	レーザーシーディング技術を用いた真空紫外コヒーレント放射光発生の研究	理学	H23. 3.24
	水上 渉	Quantum chemistry of $\pi$ conjugated systems through multireference theory	理学	H23. 3.24

総合研究大学院大学平成23年度(4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	岡村 将也	生命・錯体分子科学研究領域	プロトン共役電子移動を利用した金属錯体触媒の創製
機能分子科学	櫻井 扶美恵	生命・錯体分子科学研究領域	自己組織化ナノ構造体の構築と触媒反応への応用
	張 英 (Zhang Ying)	岡崎統合バイオサイエンスセンター	NMR studies of structures, dynamics, and interactions of gangliosides
	子安 邦明	光分子科学研究領域	超高速量子シミュレーターの開発と応用

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23年 3月 1日	物理化学・生物物理化学の更なる発展のための提案と方策	北川 禎三 (兵庫県立大学大学院生命理学研究科)	36名

■分子科学フォーラム

回	開催日時	講演題目	講演者
第89回	平成23年 6月10日	宇宙の創生とマルチバース	佐藤 勝彦 (自然科学研究機構)
第90回	平成23年 8月 6日	ビールのアート&サイエンス—麦とホップが生み出すおいしさの秘密—	渡 淳二 (サッポロビール株式会社)

■分子研コロキウム

回	開催日時	講演題目	講演者
第828回	平成23年 5月20日	Cooling and Trapping of Molecules with Buffer Gases	John Doyle (Harvard University)
第829回	平成23年 6月17日	Kinetic assembly of porous coordination networks	Masaki Kawano (Pohang University of Science and Technology)
第830回	平成23年 7月15日	「時間」の生命科学	上田 泰己 (理化学研究所)

■人事異動 (平成22年11月2日～平成23年6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
22.11.3	MD. MASHIUR RAHMAN	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	バングラデシュ North South University Assistant Professor	
22.11.16	VESHAPIDZE, Giorgi	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	日本学術振興会 外国人特別研究員	
22.12.1	野村 雄高	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 助教	日本学術振興会 特別研究員	
22.12.10	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	
22.12.31	池 滝 何 以	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(IMS フェロー)	
22.12.31	NI Yang	辞職		生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 研究員	
23.1.1	高木 望	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	ドイツ フィリップス・マールブルク大学 博士研究員	
23.1.16	川合 茂子	採用	分子制御レーザー開発研究センター 事務支援員		
23.1.31	霍岡 亮治	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(IMS フェロー)	
23.2.1	正岡 重行	採用	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 准教授	九州大学 大学院理学研究院 助教	
23.2.16	矢木 真穂	採用	岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 研究員	日本学術振興会 特別研究員	
23.2.18	LIM, Jong Kuk	辞職	韓国 Chosun University Department of Chemistry Assistant Professor	光分子科学研究領域 光分子科学第一研究部門 研究員	
23.2.28	森 龍也	辞職	筑波大学 助教	極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門 研究員	
23.3.1	中根 大輔	採用	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 研究員	名古屋工業大学 産学官連携研究員	
23.3.27	VESHAPIDZE, Giorgi	辞職		光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門 研究員	
23.3.30	渡邊 秀和	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	
23.3.30	高木 望	退職	京都大学 福井謙一記念研究センター 特定研究員	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 専門研究職員	
23.3.30	田中 雅人	退職	広島大学 大学院理学研究科 研究員	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 専門研究職員	
23.3.30	PURQON, Acep	退職	金沢大学大学院 自然科学研究科 助教	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 専門研究職員	
23.3.30	永田 武史	退職	京都大学 薬学部 (産業総合研究所勤務) 研究職員	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 専門研究職員	

各種一覽

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
23. 3.30	竹村和浩	退職	東京大学 分子細胞生物学研究所	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 専門研究職員	
23. 3.30	小林千草	退職	理化学研究所 基幹研究所 協力研究員	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 専門研究職員	
23. 3.30	JOLY, Simon	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 専門研究職員	
23. 3.31	十代健	辞職	日本大学 文理学部 准教授	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 助教	
23. 3.31	西信之	定年退職	名古屋工業大学工学研究科 プロジェクト教授	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 教授	
23. 3.31	薬師久彌	定年退職	豊田理化学研究所 フェロー	物質分子科学研究領域 電子物性研究部門 教授	
23. 3.31	宇理須恆雄	定年退職	名古屋大学 革新ナノ・バイオデバイス研究センター 特任教授	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門 教授	
23. 3.31	田中晃二	併任終了	(生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 教授)	生命・錯体分子科学研究領域 研究主幹	
23. 3.31	青野重利	併任終了	(岡崎統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域 教授)	岡崎統合バイオサイエンスセンター長	
23. 3.31	平田文男	併任終了	(分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 教授)	計算科学研究センター長	
23. 3.31	中井浩巳	客員終了	(早稲田大学 先進理工学部 教授)	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 客員教授	
23. 3.31	谷村吉隆	客員終了	(京都大学 大学院理学研究科 教授)	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 客員教授	
23. 3.31	西山桂	客員終了	(鳥根大学 教育学部 准教授)	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 客員准教授	
23. 3.31	解良聡	客員終了	(千葉大学 大学院融合科学研究科 准教授)	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員准教授	
23. 3.31	中澤康浩	客員終了	(大阪大学 大学院理学研究科 教授)	物質分子科学研究領域 物質分子科学研究部門 客員教授	
23. 3.31	関谷博	客員終了	(九州大学 大学院理学研究院 教授)	物質分子科学研究領域 物質分子科学研究部門 客員教授	
23. 3.31	東雅大	退職	日本学術振興会 特別研究員	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 研究員 (IMS フェロー)	
23. 3.31	宮崎秀俊	退職	名古屋工業大学 テニユアトラック助教	極端紫外光研究施設 光物性測定器開発研究部門 研究員 (IMS フェロー)	
23. 3.31	原田洋介	退職	東京大学 物性研究所 研究員	光分子科学研究領域 光分子科学第一研究部門 研究員	
23. 3.31	KOU, Yan	退職		物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 研究員	
23. 3.31	長岡靖崇	退職	名古屋大学 革新ナノバイオデバイス研究センター 研究員	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門 研究員	
23. 3.31	WANG, Zhihong	退職	名古屋大学 博士研究員	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門 研究員	
23. 3.31	OBULI RAJ, Senthil Kumar	退職		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	
23. 3.31	MD. MASHIUR RAHMAN	退職		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	
23. 3.31	BAI, Zhengshuai	退職		生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 研究員	
23. 3.31	宮地麻里子	退職	東京大学 特任助教	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 研究員	
23. 3.31	中川貴文	退職	東京大学 理学系研究科 博士研究員	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	
23. 3.31	上野晴美	退職		理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 事務支援員	
23. 3.31	廣瀬義人	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	
23. 3.31	MURSHED, Mushfeka	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	
23. 3.31	宮脇真紀子	退職		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	
23. 4. 1	水瀬賢太	採用	光分子科学研究領域 光分子科学第一研究部門 助教		

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
23. 4. 1	横山利彦	併任	物質分子科学研究領域 研究主幹	(物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 教授)	
23. 4. 1	魚住泰広	併任	生命・錯体分子科学研究領域 研究主幹	(生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門 教授)	
23. 4. 1	大島康裕	併任	機器センター長	(光分子科学研究領域 光分子科学第一研究部門 教授)	
23. 4. 1	加藤政博	併任	装置開発室長	(極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門 教授)	
23. 4. 1	吉澤一成	客員嘱託	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 客員教授	(九州大学 先導物質化学研究所 教授)	
23. 4. 1	杉田有治	客員嘱託	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 客員教授	(理化学研究所 基幹研究所 准主任研究員)	
23. 4. 1	近藤寛	客員嘱託	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員教授	(慶應義塾大学 理工学部 教授)	
23. 4. 1	安倍学	客員嘱託	物質分子科学研究領域 物質分子科学研究部門 客員教授	(広島大学 大学院理学研究科 教授)	
23. 4. 1	加藤立久	客員嘱託	物質分子科学研究領域 物質分子科学研究部門 客員教授	(京都大学 高等教育研究開発推進機構 教授)	
23. 4. 1	榮慶丈	採用	理論・計算分子科学研究領域 (名古屋大学大学院理学研究科勤務) 専門研究職員	名古屋大学 大学院理学研究科 特任助教	
23. 4. 1	SINDHIKARA, Daniel Jon	採用	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 専門研究職員	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 専門研究職員	
23. 4. 1	嶋田ゆう	採用	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 事務支援員		
23. 4. 1	才田隆広	採用	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 研究員		
23. 4. 1	井村敬一郎	採用	極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門 研究員	名古屋大学 大学院理学研究科 助教	
23. 4. 1	石川理沙	採用	極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門 研究員		
23. 4. 1	森田悠紀	採用	分子スケールナノサイエンスセンター ナノ分子科学研究部門 研究員		
23. 4. 1	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 研究員(IMSフェロー)	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 専門研究職員	
23. 4. 1	野田真史	採用	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 研究員	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 専門研究職員	
23. 4. 1	福富幸代	採用	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 事務支援員	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 技術支援員	
23. 4. 1	齋藤真司	併任	計算科学研究センター長	(分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 教授)	
23. 4. 1	植草義徳	採用	岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 研究員	日本学術振興会 特別研究員	
23. 4. 1	BOBUATONG, Karan	採用	計算科学研究センター 研究員		
23. 4. 8	SUBRAMANIAN, Karthikeyan	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		
23. 4.16	池田由佳子	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 技術支援員		
23. 5. 1	西山嘉男	採用	光分子科学研究領域 光分子科学第一研究部門 専門研究職員(分子科学研究所特別研究員/特任助教)		
23. 5. 1	櫻庭俊	採用	理論・計算分子科学研究領域 (京都大学化学研究所勤務) 専門研究職員	京都大学 化学研究所 特定研究員	
23. 5.16	久我れい子	採用	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 技術支援員		
23. 5.16	鳥居世菜	採用	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 技術支援員		
23. 5.31	松田晃孝	辞職	名古屋大学 物質科学国際研究センター 助教	光分子科学研究領域 (名古屋大学) 研究員	
23. 6. 1	田中誠一	採用	極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門 研究員		
23. 6. 1	野田真史	所属・職名変更	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 専門研究職員	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 研究員	
23. 6. 1	大舘彰道	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		

## 編集後記

分子研レターズ64号では、震災関連特集を設けました。今回の地震によって、岡崎に直接的な被害はありませんでしたが、東海地震への備えの意識を高める目的もあって、今回、このような特集を組ませていただきました。

震災によって、大きな被害に見舞われ、今でも復旧作業で苦労されている方もいらっしゃると思いますが、本号の特集への寄稿を快く承諾していただいた皆様に深く感謝いたします。特に、分子研内の方たちの原稿が遅れる中、震災特集の原稿はすべて締切り前に揃っており、大変恐縮しております。

分子研レターズでは、今後、共同研究のハイライト欄を充実したいと考えております。共同研究の成果の報道や受賞などの事例がありましたら、お知らせいただくと幸いです。

最後に、ご多忙の中、御執筆いただいた皆様方に深く感謝いたします。

編集担当 藤 貴夫

## 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. 64

# 分子研レターズ

発行日 平成23年9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）  
藤 貴 夫（編集担当）  
大 迫 隆 男  
加 藤 晃 一  
木 村 真 一  
斉 藤 真 司  
江 東 林  
西 村 勝 之  
古 谷 祐 詞  
見 附 孝 一 郎  
柳 井 毅  
原 田 美 幸（以下広報室）  
寺 内 か へ 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

本誌記載記事の無断転載を禁じます

