

## 分子研レターズ

VOL.

65

MARCH 2012

ISSN 0385-0560

## ●レターズ

## 分子研のために(その1~4)

谷村 吉隆 [京都大学理学研究科・教授]

## ●巻頭言

## 分子科学の「ときめき度」

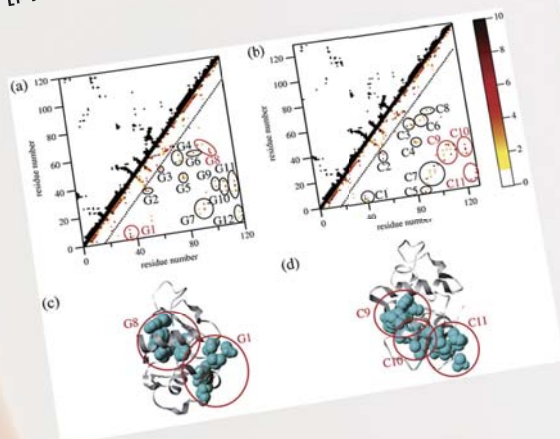
濱口 宏夫 [東京大学大学院理学系研究科・教授]

## ●分子科学の最先端1

蛋白質フォールディング  
の分子機構

桑島 邦博

[岡崎統合バイオサイエンスセンター・教授]

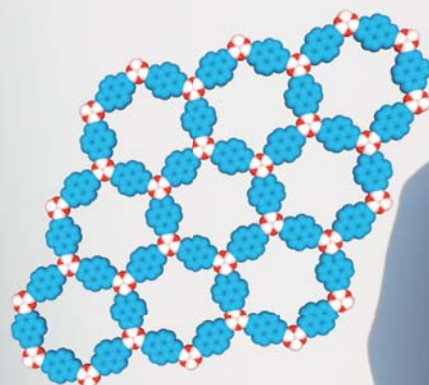


## ●分子科学の最先端2

二次元高分子を  
つくり出す合成化学

江 東林

[物質分子科学研究領域・准教授]



## 共同研究について

富永 圭介 [神戸大学]

宇宙におけるアミノ酸ホモキラリティーの起源  
——円偏光放射光を用いた実験的研究——

小林 憲正 [横浜国立大学]

## 有機・無機ハイブリッド型ダイオード

伊崎 昌伸 [豊橋技術科学大学]

## 若手研究会等「分子科学夏の学校の講義内容検討会」報告

赤瀬 大 [広島大学]

## 巻頭言

- 01 分子科学の「ときめき度」 ● 濱口 宏夫 [東京大学大学院理学系研究科・教授]

## レターズ

- 02 分子研のために(その1~4) ● 谷村 吉隆 [京都大学大学院理学研究科・教授]

## 分子科学の最先端

- 04 蛋白質フォールディングの分子機構

● 桑島 邦博 [岡崎統合バイオサイエンスセンター・教授]

- 08 二次元高分子をつくり出す合成化学

● 江 東林 [物質分子科学研究領域・准教授]

## IMSニュース

- 12 所長招聘研究会「2020年の物質分子科学を語るIII」
- 13 分子研シンポジウム“Recent Developments of Spectroscopy and Spatial and Temporal Hierarchical Structures in Molecular Science”
- 14 第71回岡崎コンファレンス“New perspectives on molecular science of glycoconjugates”
- 16 若手独立フェロー制度の試行について
- 17 受賞者の声
- 19 事業報告
- 21 国際研究協力事業報告

## IMSカフェ

- 24 分子研出身者の今 ——— 篠原 久典／藤田 誠
- 27 分子研出身者の今 受賞報告
- 28 分子研を去るにあたり
- 29 外国人研究者の印象記
- 30 新人自己紹介

## 共同利用・共同研究

- 31 共同利用研究ハイライト

共同研究について 富永 圭介 [神戸大学分子フォトサイエンス研究センター・教授]

宇宙におけるアミノ酸ホモキラリティの起源

——円偏光放射光を用いた実験的研究—— 小林 憲正 [横浜国立大学大学院工学研究院・教授]

有機・無機ハイブリッド型ダイオード 伊崎 昌伸 [豊橋技術科学大学大学院工学研究科・教授]

若手研究会等「分子科学夏の学校の講義内容検討会」報告 赤瀬 大 [広島大学大学院理学研究科・博士課程後期2年]

- 38 施設だより

- 39 共同利用・共同研究に関わる各種お知らせ

## 分子科学コミュニティだより

- 41 関連学協会等の動き — 特定領域研究「高次系分子科学」の終了に向けて
- 42 大学等との連携 — 名工大—分子研の連携に向けて

## 分子研技術課

- 44 研究支援よもやま話 齊藤 碧 [機器利用技術班]

## 大学院教育

- 46 コラム — 先端研究指向コースを活用した海外短期留学 井本 翔 [機能分子科学専攻]
- 47 総研大ニュース
- 48 イベントレポート
- 50 受賞者紹介
- 52 修了学生及び学位論文名
- 53 各種一覧



# 分子科学の「ときめき度」

濱口 宏夫

東京大学大学院理学系研究科 教授

筆者は東京大学理学部化学科3年生の「分子量子論」の講義で、ハイゼンベルグの運動方程式を教えている。この方程式は、力学変数の時間変化を表す2つの項、時間偏微分項とハミルトニアンを含む交換子項、から成る。第1項は何らかの理由で力学変数が陽に時間依存する場合の変化、第2項はハミルトニアンによって導かれる運動による変化を表す。

この方程式を、「分子科学」の系に適用してみよう。分子科学のハミルトニアンには、知的探求心、功名心など個人的なものから産業、経済、環境などの社会的なものまで様々な力がポテンシャルとして含まれる。元来、科学の発展は知的探究心によるところが大きかったが、近年はそれ以外の項が大きな寄与をするようになっており、分子科学の原動力は大きく変遷してきている。結果として、個人レベルでの分子科学の「ときめき度」が低下しているように筆者には感じられる。もしこれからの時間発展がハイゼンベルグの運動方程式の第2項のみで決まるとすると、現状と大きく異なる方向への発展は起こらず、「ときめき度」の大きな回復は望めないことになる。

ハミルトニアンを含む第2項を「理性の項」とすれば、第1項は「感性の

項」ということができるかも知れない。この第1項は、外的要因と因果律では必ずしも説明できない何らかの理由により、分子科学の「ときめき度」が変化し得ることを意味しており、**理屈ぬきで分子科学にときめく**ことの重要性を示唆しているように思われる。ときめく理由を探してからときめこうとすると、永遠にときめくことができない。ちなみに、筆者が若いころ分子科学にときめいたのは、「目に見えない分子世界の不思議」に魅せられたからであり、何故かと聞かれてもうまく答えることができない。趣味のクワガタに何故ときめくのかと聞かれても、返答に窮するのと同じである。

理屈ぬきでときめくことができるのは、感性に富んだ若者の特権である。この文章を読んでいる学生、若手研究者の諸君、ハイゼンベルグの運動方程式の第1項を使って、分子科学の「ときめき度」を大きく上昇させていただきたい。それこそが分子科学をさらに発展させて行く唯一の道だと筆者は思っている。そして、ときめいている若手を見つけ出し、大きく育む、感性ある運営を分子科学研究所に期待したい。



はまぐち・ひろお

東京大学大学院理学系研究科化学専攻教授。1975年東京大学大学院理学系研究科化学専門課程修了（理学博士）。東京大学助手、講師、助教授、神奈川科学技術アカデミー研究室長、東京大学教授（教養学部）を経て1997年より現職。「スペクトルは分子からの手紙」というロマンチックなフレーズに魅せられて分子分光学の道を選び、故島内武彦先生の門をたたきました。島内先生には、研究を楽しむことが最も大事だという研究者の原点を教えて頂きました。分子分光で何がどこまで見えるか、常にそのことを念頭において研究してきました。最近ではそれに加えて、開発した新しい分子分光法の実用、とくに生命現象の解明に向けた応用にも興味を持っています。

谷村 吉隆 京都大学大学院理学研究科 教授

# 分子研のために(その1~4)

たにむら・よしとか

1989年 慶應義塾大理工博士課程終了、理学博士(物理)。イリノイ大学アーバナ・シャンペン校ベックマン研究所(P.G. Wolynes グループ)及びロチェスター大学化学科(S. Mukamel グループ) 博士研究員、分子科学研究所助教授を経て2003年6月より京都大学大学院理学研究科化学専攻教授。非線形分光、非平衡統計力学、物性等を中心とした化学物理理論がグループの主な研究テーマ。趣味は登山で分子研時代にもモンブラン、アコンカグワ、玉山等の世界の最高峰に登る。



分子研レターズの下稿は論文書くより難しい(厳しいレフリーもいるし)。このタイトルは漫画「あしたのジョー」の「あしたのために」をもじったものです。「あしたのために」は、鑑別所に入っている矢吹ジョーという主人公が、強敵である力石徹と戦うために、土方風のおっちゃん(丹下段平)が、あしたのためにその1、その2……という葉書を書いて、ジョーにボクシングの神髄を教えるというものです。タイトルは「エースをねらえ」でもよかったのですが、分子研レターズの読者層の年齢構成を考え表記のものにしました。

## 分子研のために(その1)

### ひじを左わきの下から離さぬように総研大生を集めるべし

総研大の充足率が低くても、分子研にはあまり切迫感があるように感じられません。総研大は分子研の屋台骨を形成しているわけでもないのに、総研大の定員充足率は大学ほど切実ではないのでしょうか。有名大学の大学院が容易に入れる昨今、総研大に学生が向かう積極的な理由が思い浮かびません。有名大学と言ってもお金や教員の魅力もたいしたものではありませんが、分子研がそれに勝っているでもないのが

実情でしょう。が、もともと定員が少ない総研大は、少し工夫するだけですぐに定員は埋められるはずです。国内市場をあてにできないのは他大学と同様ですが、分子研は海外から5~10人も呼んでくれれば十分なのです。そう考えると、漠然と世界に向け宣伝するやり方は効率的ではありません。対象を絞り集中投資するのです。例えば開発途上の国や、開国したばかりの国のトップの大学と戦略的互惠関係を結び、共存の道を探るのです。教育レベルが心配かもしれませんが、分子研から人を送りこみ、学部教育からコミットすればよいのです。素質があり士気の高い学生に、しっかりした教育をほどこせば、分子研の欲する学生を獲得することが可能でしょう。それら学生は、母国で教育や政治を動かす人材となり、将来的には分子研を助けてくれることでしょう。JICAや政府からお金を取ってプログラム化すれば、懐も痛めないし、それは分子研のかかえる各種人材問題を解決するカギになるかもしれません。人がかかわる問題は、結局信頼関係が基礎です。特にアジアとの関係を強化するためには、学部レベルの学生からアプローチすべきだと思います。

## 分子研のために(その2)

### クロスカウンターパンチで理研を打つべし

文部省が文科省になり科学技術庁を父とする異父兄弟の理研がやってきました。八方美人で社交的な理研は、分子研が基礎学問にこだわり、流行りもので規模拡張に走る事を恥じている間に巨大化し、それがまたお金と人を集め分子研の存在感がどんどん小さくなっているような感じがいたします。そうではないと反論する人もいるとは思いますが、これは相対的なもので、分子研の中にいてわかるわけはないと私は思います。もちろん、理研のようになることが良いか悪いかは別の話です。そして、その状況を私流に比喻するなら、郊外型スーパーに客を取られた駅前の八百屋です。

郊外型スーパーに対抗するには何が必要でしょう。特徴を出せというのは簡単ですが、1軒でやったところで客足はもどらないでしょう。それには地元の商店が運命共同体として連携する、すなわち岡崎の3研究所は、一丸となるぐらい連携を深める必要があると思います。例えば、3研究所内にそれぞれ流動部門を設け、教員を異なる研究所へ出向させるというのはいかがでしょう。交流により

新たな息吹が吹き込まれ、人事の閉塞感もかなり取り除けるはずです。山手地区は3研究所交流のために作られたと聞いていますが、辺境にある山手地区は、そもそも交流にあまり適した場所だとは思えません。そこは3研究所のプロジェクトスペースか、新たな研究所にでもして、交流は母屋のある明大寺地区で、かつ戦略的にやるべきです。商店街を盛り上げる行事も必要です。部門別全国修論コンテストや、岡崎3研究所の癒し系キャラをつくるとか。

### 分子研のために（その3）

#### フットワークで分子科学研究所になるべし

何度も言われてきたことですが、分子科学研究所と言う名前、上手くつけたものだと思います。が、分子科学研究所は、実は物理化学研究所ではないでしょうか。実際、分子研が華々しいと言われた時代は、物理化学の黄金時代に一致していたような気がします。昨今、物理化学は学生の人気も、そのイノベーションも、もひとつパツとしませんが、分子研の方が少し先行しつつも、その傾向は同じだと思います。物理化学研究所としては、それ相応の業績を上げているのだとも思います。皮肉なことに、物理化学研究所と名付けなかったゆえに非難されているわけですね。となると解決方法は2つあります。一つは物理化学研究所と改名するのです。いまさらそんなのいらんと言われるかもしれませんが、もうひとつは真の分子科学研究所になることでしょう。その芽はたくさんあったはずなのですが、物理化学の景気よさに慢心したせいかと、とりこぼしてきた印象を持ちます。

具体的に言うと素材開発に結び付いた無機や錯体にまたがる超分子系です。読者の皆さんも、この分野を引っ張っ

ている景気よさそうな顔の人たちが何人か浮ぶことと思いますが、この分野は分子研にいた、あるいは分子研にかかわった人が多いのです。思うにこの分野で成功している方々の多くは、物理化学的な手法の持つ普遍的な力を早くから見抜き、それを合成や素材設計へと生かし、大成功したのではないのでしょうか。アカデミックには大変面白いが、意外に実用的でない場合が多いのもその影響かもしれません。そして、その触媒になったのが分子研だったのだと思います。斯くしてこの分野に大成功を導いた分子研なのですが、肝心な分子研は取りこめてない、あるいは見捨てられてしまいました。ユニークな人材を輩出した関連部門ももうありません。10～15年位前は、米国で活況を呈し始めた生物物理化学に注目が行き、日本固有のこの分野が注視されなかった感じがいたします。今更この分野を取りこむことは現実的ではありませんが、この話は今後の分子科学の発展にヒントを与えてくれます。それは、物理化学的手法は強力であり、まだその洗礼にさらされてない地に持ち込むなら、強壮剤になりうるということです。

有機や創薬を初めとする伝統的化学に、物理化学的手法をもっと積極的に取り入れるなら、まだまだのびしろはあるのではないのでしょうか。異分野に入る時に大切なことは信頼関係です。例えば超分子関係をみると、その母体となる分野が、分子研に優秀な人材送り込んでくれた事実は見逃せません。化学においては分野としてのサポートを取り付ける事が重要なのだと思います。これまでもそういう動きがありましたが、もっと戦略的に行うことが重要なのだと思います。

### 分子研のために（その4）

#### 攻撃の突破口を開くジャブ

分子研の存在感は、その先取性にあったのだと思います。助教授の昇進禁止、紳士協定による助手の任期制、ポストシステムなど、分子研の人事システムが大学で話題になった時代もありました。ある種、法人化を先取りしたところもあった分子研ですが、過去の制度に足を引っ張られたのか、最近では制度改革が後手に回っている気がいたします。分子研は多少肥大化しましたが、まだまだ小回りが利くサイズであり、新しいことをどんどんやれるはずです。そのアイデアの源は構成員の飲み会から教授会議、主幹会議等の各種会合であり、雑談から激論まで強弱さまざまな議論を通して形成されていったと認識しています。分子研の職員は、まあまあの研究し、与えられた雑用をこなしているだけでよいとは思いません。分子科学活性化のために新しいアイデアを出し、積極的に動く人はいないのでしょうか。昨年度、私は客員教授をやり、京大の教授は暇だと言われながらも、かなりまじめに分子研の教授会議に出ておりました。が、そのような動きは教授会議に出るだけでは見えませんでした。動きはあるのだと思います。が、分子研のような共同研究機関において、改革は自己満足ではなくて、外から見えるべきものだと思います。分子研で大変根深い問題は「先進的」であるというブランドイメージが損なわれつつあることです。それを立て直すためには、改革をジャブのように連発しないと。そして、その一連の動きは企業のCI戦略のように、統一的なイメージのもとに戦略的にやらないと、あまり効果がないのではと思います。



# 蛋白質フォールディングの分子機構

桑島 邦博

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



くわじま・くにひろ

1971年 北海道大学理学部卒業

1975年 同大学院理学研究科博士課程中退

1979年 理学博士

北海道大学教務職員、助手、東京大学助教授、教授を経て2007年1月より現職

## はじめに

天然の球状蛋白質は、そのアミノ酸配列（＝遺伝情報）によって決定づけられた、特異的な三次元立体構造に折り畳まり、その生物機能を発現する。Anfinsenの実験以来、球状蛋白質の特異的な立体構造の形成（フォールディング）は物理化学の原理に基づいて起こると考えられている<sup>[1]</sup>。蛋白質フォールディング分子機構の解明は生体分子科学の根源的課題の1つであるが、未だそれが達成されたとは言えない。われわれは、蛋白質フォールディングに関する研究を、「(1) 試験管内の蛋白質フォールディングの実験とシミュレーション、(2) 細胞内の蛋白質フォールディング介助に関わる分子シャペロンの作用機構、(3) 蛋白質フォールディングとヒトの疾患との関係」の三つの観点から行っている。(2)に関わる研究成果については、本年度の「機器センターたより」<sup>[2]</sup>に書かせていただいたので、本稿では、(1)に関わる研究成果について紹介する。

## 蛋白質フォールディングの古典的見解と新しい見解

今から50年も前にAnfinsenは蛋白質フォールディングの熱力学仮説を提唱したが、熱力学だけではフォールディング分子機構を理解出来ないことに最初に気付いたのはLevinthalであった。彼は思考実験によって、100残基の蛋白質がランダムサーチで可能な全てコンフォメーションを経験しながら天然構造に至るには超天文学的な時間が必要なこと（Levinthalのパラドックス）を示し、蛋白質フォールディングにはアミノ酸配列によって規定された特異的な経路が存在し、経路上には特異的なフォールディング中間体が存在するはずだと主張した（図1(a)）<sup>[1,3]</sup>。その後、このようなフォールディング中間体を検出し特徴付けることがフォー

ルディング研究の主要な流れとなり、この流れに沿った考え方をフォールディングの「古典的見解」という。筆者が関わった、球状蛋白質のモルテン・グロピュール（MG）状態はこのような蛋白質中間体の代表的なものであり、多くの球状蛋白質（通常100残基以上）についてフォールディング中間体の特徴付けがなされた<sup>[3]</sup>。

1990年代になると、キモトリプシン・インヒビター2を始めとする100残基以下の小さな蛋白質において、中間体を経ずに二状態的に天然構造に折り畳まる例が次々と報告された（図1(b)）<sup>[4]</sup>。中間体は正しいフォールディングにとって必須ではなく、むしろ、間違っただフォールディングによって速度論的

(a)



(b)



(c)

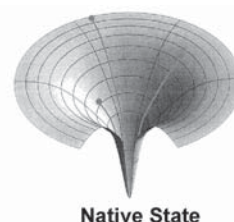


図1 蛋白質フォールディングのモデル。(a) 中間体を伴う非二状態フォールディング、(b) 二状態フォールディング、(c) ファネルモデルの概念図。

に捕捉された状態であるとの主張がなされた。丁度時期を同じくして、蛋白質の簡単なモデル（蛋白質の主鎖構造のみをあらわに含んだC $\alpha$ モデルなど）を用いた理論的な研究によりフォールディングのエネルギー地形理論が生まれた。この理論によると、正しいフォールディングにとって特異的な経路や中間体は必須ではなく、コンフォメーション-エネルギー超空間におけるエネルギー地形がファネル状で、常に天然構造に向かった傾きを持っていればよい（ファネルモデル）（図1(c)）<sup>[5]</sup>。このようなエネルギー地形理論に基づく考え方をフォールディングの「新しい見解」という。

1998年にPlaxco等は、二状態蛋白質（その当時全部で12種）のフォールディング速度が主鎖構造のトポロジカルな複雑さと顕著な負の相関を持つことを示した。この結果は、フォールディングの律速段階が、天然主鎖構造のトポロジカル探索によってもたらされるエントロピー障壁であることを示しており、「新しい見解」を支持するものだと考えられている<sup>[6]</sup>。このPlaxco等の発見以来、二状態蛋白質の実験データがたくさん蓄積され、現在では、主鎖

構造のトポロジカルな複雑さが蛋白質フォールディング機構を決める要因であることが定説となりつつある。

それでは、はたして、フォールディングの「古典的見解」と「新しい見解」は互いに相容れないものであろうか。単純な二状態フォールディングと中間体を伴った非二状態フォールディングの、いずれが、現実の蛋白質フォールディングをより正しく表しているものであろうか。この疑問に答えるため、非二状態蛋白質の中間体形成の速度定数 ( $k_I$ ) と天然状態形成の速度定数 ( $k_N$ ) がどのように主鎖構造のトポロジカル・パラメータに依存するかが調べられた<sup>[7,8]</sup>。図2は、 $k_I$  と  $k_N$  が天然主鎖構造の遠隔配列天然コンタクト対の数（一時配列上離れた残基同士のコンタクト対の数）( $Q_d$ ) にどのように依存するかを示している。 $k_I$  と  $k_N$  のいずれも  $Q_d$  に同じように依存し、その依存性は二状態蛋白質の  $k_N$  の  $Q_d$  依存性に類似していることがわかる。 $Q_d$  値の小さなところでは、二状態蛋白質の  $k_N$  は非二状態蛋白質の  $k_I$  に近く、 $Q_d$  値の大きなところでは、それは非二状態蛋白質の  $k_N$  に近くなる。以上の事実は、二状態フォールディングと非二状態フォールディングの背景にあ

る物理機構は同じであり、二状態フォールディングは中間体の不安定化などによって非二状態フォールディングが単純化したためにもたらされたと考えることができる。

## ヤギ $\alpha$ ラクトアルブミンとイヌ乳リゾチームのフォールディング

ヤギ $\alpha$ ラクトアルブミン (GLA) とイヌ乳リゾチーム (CML) は相同蛋白質であり、両者は41%の配列同一性を有し、主鎖の立体構造も実質上同一である。天然主鎖構造のトポロジカル探索によってフォールディング機構が決まるとする理論に従えば、同じ主鎖構造を有する相同蛋白質のフォールディングは同じ機構で同じような遷移状態を経て進行するはずである。事実、相同蛋白質のフォールディング遷移状態が類似している例はいくつか知られている。しかし、われわれは、最近、GLAとCMLのフォールディング経路や遷移状態が大きく異なることを見出した<sup>[9,10]</sup>。

GLA、CMLともに非二状態蛋白質であり、フォールディング反応初期にMG状態が蓄積し、MG状態から天然

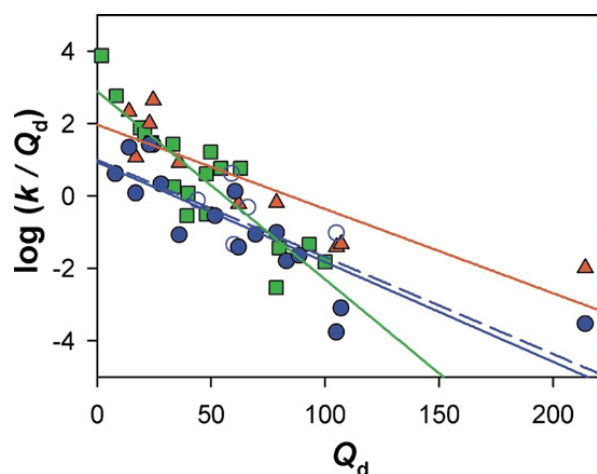


図2 非二状態フォールディングを示す蛋白質のフォールディング速度定数 ( $k_I$  (赤三角)、 $k_N$  (青丸)) と二状態蛋白質のフォールディング速度定数 ( $k_N$  (緑四角)) の  $Q_d$  依存性<sup>[7]</sup>。白丸は速度定数の変性剤濃度依存性から非二状態蛋白質であることが期待されるが、中間体が直接検出されていない5つの蛋白質のデータ ( $k_N$ ) を示す。

状態の形成される過程が律速段階である。両蛋白質とも、 $\beta$ サブドメインのC末端側とCヘリックスのN末端側に挟まれたループにカルシウムイオンを強く結合するカルシウム結合蛋白質である。われわれは、MG状態の水素重水素交換2次元NMR解析とストップトフロー蛍光スペクトルを用いたフォールディングの速度論的解析を行い、GLAとCMLのフォールディング経路と遷移状態の構造を明らかにした<sup>[10]</sup>。図3はその結果を示す。GLAのMG状態ではCヘリックスとカルシウム結合部位の構造が一部形成され、天然状態に比べると1,000倍以上弱い、カルシウム結合能を一部回復する。遷移状態では、Cヘリックスとカルシウム結合部位周辺がさらに構造化し、カルシウム結合定数は天然状態の1/10程度にまで

回復する（図3の下経路）。一方、CMLのMG状態では、カルシウム結合部位から離れたAヘリックスとBヘリックスの構造が一部形成される。遷移状態ではこの部分の構造形成がさらに進むが、カルシウム結合部位の構造は壊れたままで、カルシウム結合能は全く回復していない（図3の上経路）。このように、GLAとCMLではフォールディング開始部位と遷移状態の構造が大きく異なる。GLAとCMLは実質上同一の主鎖構造を持つので、主鎖構造のトポロジカル探索が蛋白質フォールディングにおいて支配的役割を担っていると最近の理論では、両者の違いを説明することは不可能である。

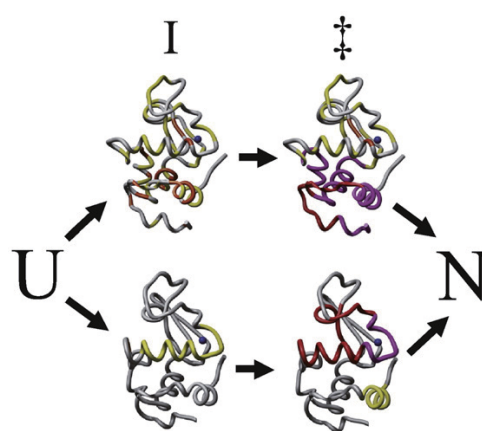


図3 GLA (下) とCML (上) のフォールディング反応<sup>[10]</sup>。Iはフォールディングの初期中間体を、Uは遷移状態を示す。黄色の部分は天然コンタクトが10%以上回復している領域、赤は30%以上、マゼンダは60%以上回復している領域を示す。

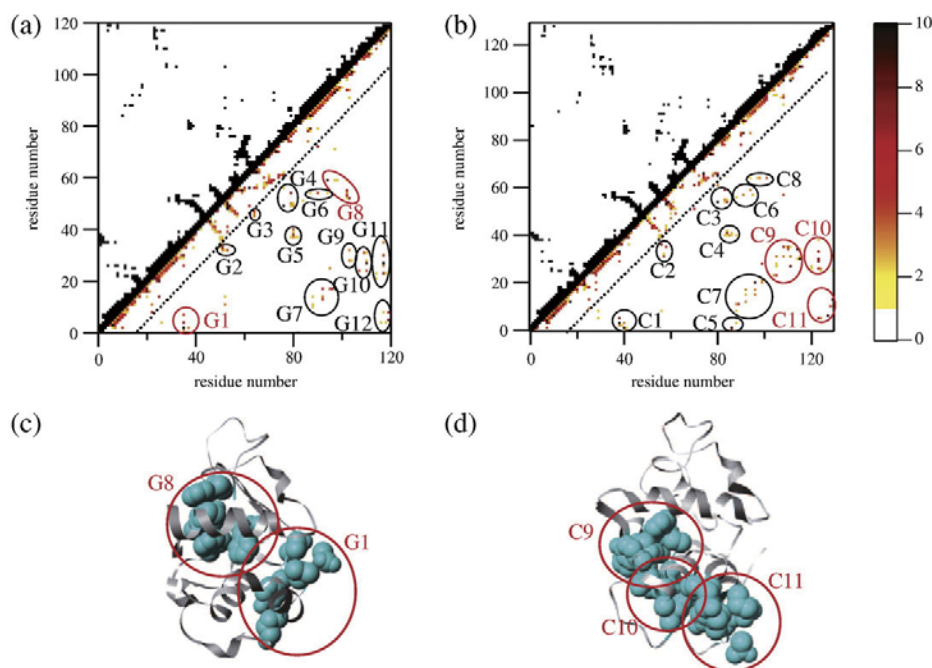


図4 GLA (a) とCML (b) の残基-残基原子コンタクトマップ<sup>[10]</sup>。丸で囲われた領域は非局所的コンタクトクラスターであり、赤丸で囲われた領域は強いクラスターを示す。(c) と (d) の実体積模型は強いクラスター中で強くコンタクトしている残基対を示し、これらがフォールディングの開始部位になっていると考えられる。



## 側鎖間相互作用と フォールディング開始部位

われわれの以前の研究より、非二状態蛋白質のフォールディング速度は非局所的コンタクト・クラスター数 ( $N_C$ ) と良く相関することがわかっている<sup>[8]</sup>。 $N_C$ は蛋白質の天然三次元構造を表すコンタクト・マップから求められ、 $\alpha$ ヘリックスや $\beta$ ヘアピンなどの構造単位間の相互作用領域の数を表していると見なされる。図4はGLAとCMLのコンタクト・マップであり、丸で囲まれた領域が非局所的コンタクト・クラスターである (GLAでは $N_C=12$ 、CMLでは $N_C=11$ )。さらに、図4では、コンタクト・マップに側鎖間の相互作用も含めるため、コンタクトしている残基間の原子-原子コンタクトの総数を10段階で表示してある。コンタクト数が4以上の残基対を強くコンタクトしている残基対とし、強くコンタクトしている残基対が4以上のコンタクト・

クラスターを「強いクラスター」と定義した<sup>[10]</sup>。そうすると、GLAとCMLで、強いクラスターのコンタクト・マップ上の分布が大きく異なることがわかる。GLAではG1とG8が強いクラスターであり、G8はCヘリックスと $\beta$ サブドメイン間に位置し、これは丁度フォールディング開始部位に相当する。CMLではC9, C10, C11が強いクラスターであり、これらはCMLのフォールディング開始部位であるAヘリックスとBヘリックスの近傍に位置する。

以上の結果より、側鎖間相互作用も含めた残基間の相互作用強度を取り入れることにより、GLAとCMLとの間のフォールディング経路の違いを合理的に説明できることがわかった。

## まとめと今後の展開

二状態蛋白質に対しては主鎖構造のトポロジカル探索がフォールディング機構を決めることが定説となりつつ

あるが、同じ考えを、より複雑な非二状態蛋白質にそのまま拡張することはできない。GLAとCMLの強いクラスターを形成する残基対を調べてみると、TrpやTyrなどの芳香族残基と嵩高い側鎖を持った残基間の対が多いことがわかった<sup>[10]</sup>。芳香族側鎖と嵩高い側鎖間の相互作用が蛋白質フォールディング開始部位に一般的に見出されるか否かは、今後、フォールディング開始部位が実験的に明らかにされている蛋白質を網羅的に調査することにより明らかとなる。計算分子科学の進歩により、小さな球状蛋白質については、1ミリ秒のオーダーの全原子分子動力学シミュレーションが可能になりつつある<sup>[11]</sup>。分子シミュレーションを用いて、GLAやCMLくらいの大きさの蛋白質のフォールディング開始部位とフォールディング経路の詳細が明らかになるのも遠い先の話ではない。

## 参考文献

- [1] C.B. Anfinsen and H.A. Scheraga, *Adv. Protein Chem.* **29**, 205–300 (1975)
- [2] 桑島邦博, 分子科学研究所「機器センターたより」No. 11, 57–61 (2011)
- [3] M. Arai and K. Kuwajima, *Adv. Protein Chem.* **53**, 209–282 (2000)
- [4] S.E. Jackson, *Fold. Des.* **3**, R81–R91 (1998)
- [5] P.G. Wolynes, J.N. Onuchic and D. Thirumalai, *Science* **267**, 1619–1620 (1995)
- [6] D. Baker, *Nature* **405**, 39–42 (2000)
- [7] K. Kamagata, M. Arai and K. Kuwajima, *J. Mol. Biol.* **339**, 951–965 (2004)
- [8] K. Kamagata and K. Kuwajima, *J. Mol. Biol.* **357**, 1647–1654 (2006)
- [9] K. Kuwajima, T. Oroguchi, T. Nakamura, M. Ikeguchi and A. Kidera, *In Water and Biomolecules—Physical Chemistry of Life Phenomena*, (K. Kuwajima, Y. Goto, F. Hirata, M. Kataoka and M. Terazima, eds.), pp. 13–35 Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, (2009)
- [10] T. Nakamura, K. Makabe, K. Tomoyori, K. Maki, A. Mukaiyama and K. Kuwajima, *J. Mol. Biol.* **396**, 1361–1378 (2010)
- [11] K. Lindorff-Larsen, S. Piana, R.O. Dror and D.E. Shaw, *Science* **334**, 517–520 (2011)

# 二次元高分子をつくり出す合成化学

江 東林

物質分子科学研究領域

分子機能研究部門 准教授



JIANG, Donglin

1998年 東京大学 博士課程修了

1998年 東京大学助手

2000年 JST ERATO 相田ナノ空間プロジェクト グループリーダー

2005年5月 分子科学研究所准教授

2005年10月-2009年3月 JST さきがけ研究者兼任。

2009年10月-2013年3月 JST さきがけ研究者兼任。

## はじめに

高分子は、小分子ユニット（モノマーと呼ぶ）を化学結合でどんどんつないでいてできる分子である。一次的に連結した場合長い鎖（線状高分子）を与え、また、枝分かれるように成長していくと三次元形態をなすことが従来の高分子の姿である。シートのように平らで、分子1枚が原子1個分の厚みを持つような究極な高分子はあり得るのだろうか。自然界では黒鉛（グラファイト、石墨とも呼ぶ）という鉱物が存在しており、その積層構造を剥離することで二次元の炭素原子層、すなわち、グラフェンを得ることができる。果たして小分子から化学結合で二次元高分子を人工的につくることは可能だろうか。本稿では、我々の例を中心に、二次元高分子の設計・合成戦略、構造特徴及び機能発現について紹介する。

## 設計・合成戦略：幾何学形状と動的共有結合

二次元的に連結していくためには、モノマーは特定な幾何学形状を持つことが大事である。なぜならば、成長点において、各連結ユニットの中心軸が二次元平面から逸脱しないように制限しなければならないからだ。図1のように、モノマーの形状に対して位相幾何学的に設計することが必要である<sup>[1]</sup>。ベンゼンなどの芳香族分子は硬直な平面構造を有し、さらに、結合が明確な方向性を持つため、二次元高分子の形づくりに適している。

二次元高分子は、シート内で規則正しい多孔構造を生み出すユニークな高分子である（図1）。グラフェンとは異なり、二次元合成高分子は、炭素以外に、様々な元素を分子に導入することができ、また、特異な多孔構造を固有していることも特徴である。

二次元高分子は、ナノポアを形成しながらモノマーを連結して分子骨格を形成している。この場合、複数の成長点で連結反応が同時に進行され、ポアに欠陥が残りにやすい。動的共有結合は平衡反応に支配された共有結合で、反応条件によって平衡を左右させることが可能であるため、欠陥構造を修復することができる。ビルディングブロッ

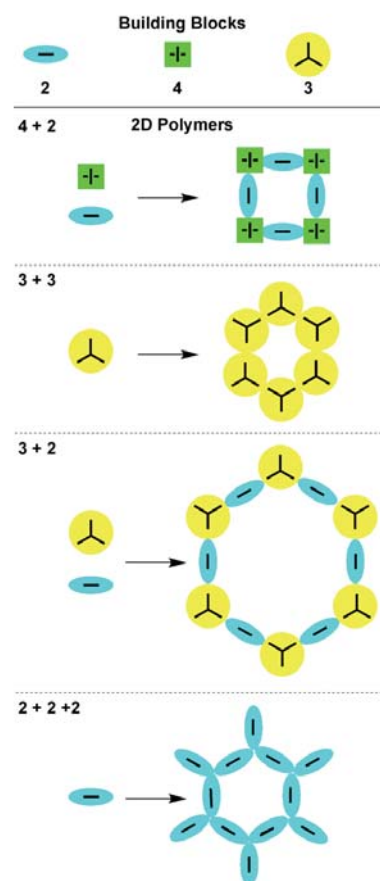


図1 二次元高分子の幾何学設計と結合パターン。

クの特定な幾何学形状と特殊な反応形式が二次元高分子の合成における最大な特徴と言える<sup>[1]</sup>。

ボロン酸と水酸基との縮合反応は典型的な動的共有結合反応であり、また、形

成されるリンカーによって両モノマーを同じ平面に保つことができる。もしモノマーの構造を幾何学通りに設計することができれば、ボロン酸と水酸基との縮合反応による二次元高分子の合成が可能となる。実際、私たちは、芳香族のトリフェニレンとピレン誘導体からモノマーを合成し、溶媒熱条件下で重縮合反応を行い、

二次元高分子の合成を試みた。幸運なことに、二次元高分子をつくることに成功した（図2）<sup>[2]</sup>。

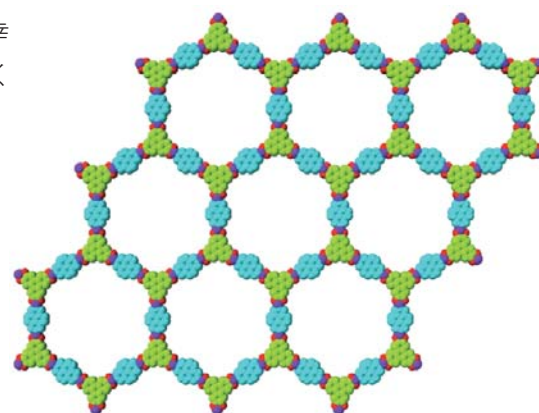


図2 トリフェニレン（緑色）とピレン（青色）からなる二次元高分子（3×3編み目構造；ポアサイズ3.1 nm）。

### 構造特徴：原子層、積層及び一次元チャンネル構造

構造という観点から、二次元高分子は、面内構造、すなわち、構成ユニットや連結方式、ポア形状、ポアサイズ、平面内の周期構造などの一次構造と積層構造、すなわち、積層モードやチャンネル構造、カラム配列などの高次構造から成り立っている。高次構造では、特に、二次元高分子はどのようなマクロ的な形を取っているのか興味深いことである。反応系から析出した二次元高分子を電子顕微鏡で観察すると、例えば、トリフェニレンとピレンからなる二次元高分子はベルト形状態を有し（図3、FE-SEM）、さらに、透過型電子顕微鏡（図3、HR-TEM）で観察すると、ベルトの中には、原子層の厚みを持った分子シートが真直ぐに伸びており、お互いに平行に積み重なっていることが分かった（図3、Layers）<sup>[2]</sup>。二次元高分子の形状は、原子層の形に左右されるが、モノマーの構造にも大きく依存し、ベルト状以外に、キューブ状や円盤状など多彩多様である。

ところで、二次元高分子はどのように積層しているのだろうか。二次元高分子は周期構造のため、極めて強いX線回折ピークを示し、そのパターンを

解析することで、結晶群を決定することが可能である<sup>[2-7]</sup>。また、DFTB計算によって、安定化エネルギーが積層構造を決めるキーファクターであることが明らかになった。これまでの例では、構成ユニットが真上に積み重なるもの、1–2Å程度横ずらして積層していくものがほとんどで、シート間の $\pi$ - $\pi$ スタックが有利に働くように原子層を配列していることが分かった<sup>[2-7]</sup>。

積層することによって、二次元高分

子は一次元チャンネルの周期構造をもたらす。チャンネルのサイズや形状はモノマーの形、サイズ、及び結合パターンによって規定され、原理的に分子設計することが可能である。これは、従来の多孔構造体とは根本的に相違する点である。二次元高分子は、1グラムあたり数百から数千平方メートルという巨大な表面積を持ち、また、設計可能であるため、ガス吸着・貯蔵媒体として魅力的である<sup>[2-7]</sup>。

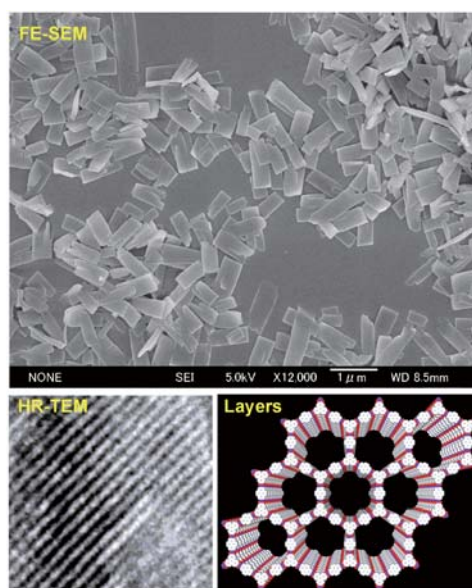


図3 電子顕微鏡写真と積層構造。



## 機能発現：分子骨格・ポアを舞台に

二次元高分子は、シート内の周期構造が積層することによって、面の垂直方向軸に沿ってさらに拡張され、巨視的なカラム周期構造を生み出す（図2）。我々は、これまでに、様々な $\pi$ 分子をモノマーとして開発し、重縮合反応により種々の二次高分子の構築に成功し、それらをベースとした新規な物質群を開拓してきた。

トリフェニレンとピレンからなる二次元高分子（図2）は、トリフェニレンやピレンユニットを励起すると、いずれも強い青色蛍光を発した。ヨウ素をドーピングすると電気伝導が増大し、 $p$ 型半導体であることが示唆された<sup>[2]</sup>。一方、ピレンのみからなる単一成分二次元高分子では、励起子は平面内およびシート間を高速移動することが可能で、高い光伝導性を示す（図4）<sup>[3]</sup>。

最近、筆者らは、 $18\pi$ 電子を有するポルフィリンやフタロシアニンユニットをモノマーとして開発し、それぞれ

の二次元高分子を合成した（図5と6）。この場合、紫外から近赤外まで幅広い波長領域での光吸収が可能となる。同時に、積層によって形成されるポルフィリンやフタロシアニンのカラム周期構造が極めて高い光伝導性を誘起する。例えば、フタロシアニン二次元高分子はなんと $1.3 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$ という類のない高いホール移動度を示した<sup>[4]</sup>。一方、ポルフィリンからなる二次元高分子はキューブ状形態を有し、反応時間が長くなるにつれて、キューブサイズが次第に大きくなる。興味深いことに、表面積や細孔容積が分子サイズとともに、大きくなることが分かった<sup>[5]</sup>。これは、二次元高分子の高次構造を精密に制御できることを意味している。

フタロシアニンを連結する部位に電子吸引性ユニットを導入するだけで、二次元高分子はもとの $p$ 型から $n$ 型に劇的に変化した（図7）。従来の $n$ 型半導体と違って、 $n$ 型二次元高分子は優れた熱安定性、極めて高い電子移

動度（ $0.6 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$ ）と光伝導性を兼備することが可能である<sup>[6]</sup>。二次元高分子は特異な周期構造を有する $\pi$ 電子系物質として期待されている。

多孔構造の表面は材料の物理・化学的な性質、例えば、ガス吸着、分子分離、触媒反応、エネルギー貯蔵などの機能発現に決定的な影響を与える。このため、チャンネルの表面をいかに制御してつくるかということが、多孔材料の開拓において中心的な課題となっている。我々は、二次元高分子のポアを思いのままに自在に制御できる手法を開拓した（図8）<sup>[7]</sup>。この手法では、チャ

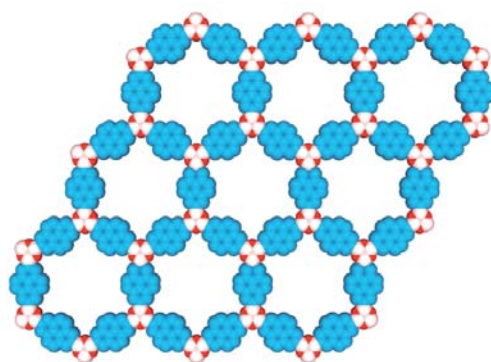


図4 ピレンからなる二次元高分子。

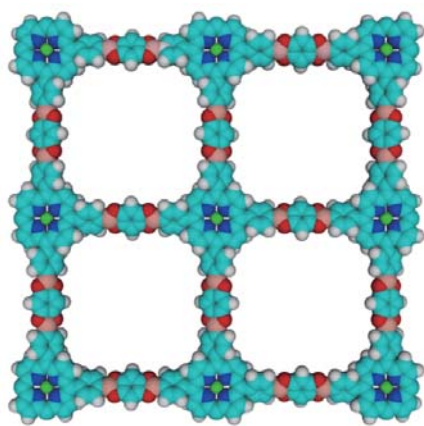


図5 ポルフィリンからなる二次元高分子。

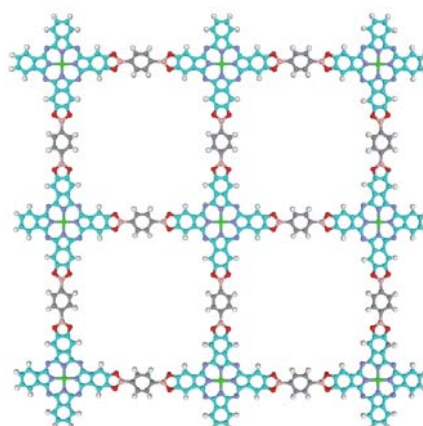


図6 フタロシアニン二次元高分子。

ンネル表面に官能基を植え付けることができ、設計とおりにその密度をコントロールすることができる。例えば、官能基をチューニングすることで、同じ分子骨格でも窒素に対する二酸化炭素の吸着選択性を16倍も向上することを可能にした。この手法は、種々の官能基に対して適用でき、様々な形の二次元高分子にも適用できることを検証した。この手法は、テーラーメイドで多孔性構造を作り出す技術として、機能性二次元高分子の開発に大きく貢献するものと期待されている。

## 今後の展開

二次元高分子は、特異な周期構造を有する高分子として、特にどのような光・電子機能やガス吸着機能を秘められているのか、今後の更なる展開が期待できる。以上で紹介した二次元高分子に関する研究は永井篤志助教をはじめ、多くの共同研究者によるものであり、この場を借りて感謝したい。

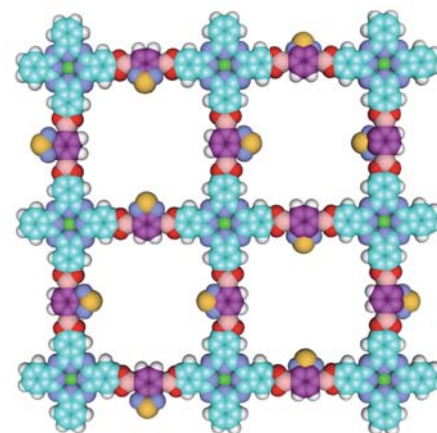


図7 n型二次元高分子。

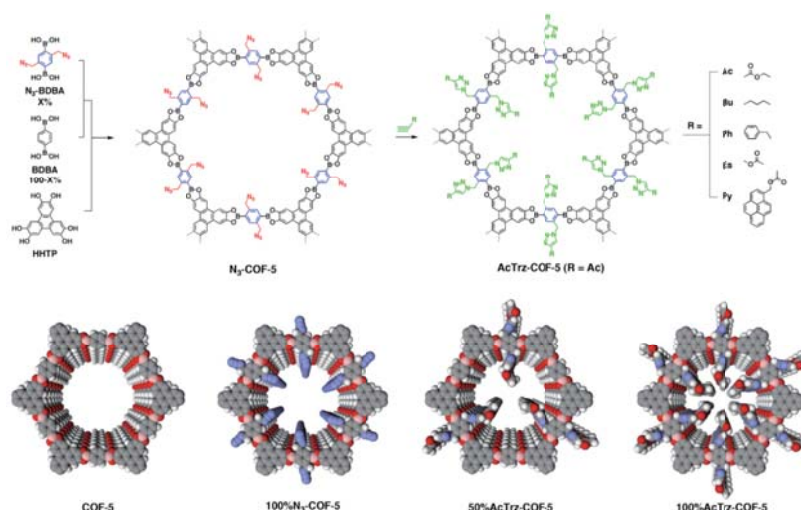


図8 二次元高分子のポアエンジニアリング。

## 参考文献

- [1] D. Jiang, X. Ding and J. Guo, *Supramolecular Soft Matter: Applications in Materials and Organic Electronics*, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, USA. 2011.
- [2] S. Wan, J. Guo, J. Kim, H. Ihee and D. Jiang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **47**, 8826-8830 (2008).
- [3] S. Wan, J. Guo, J. Kim, H. Ihee and D. Jiang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **48**, 5439-5442 (2009).
- [4] X. Ding, J. Guo, X. Feng, Y. Honsho, J. Guo, S. Seki, P. Maitrad, A. Saeki, S. Nagase and D. Jiang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **50**, 1289-1293 (2011).
- [5] X. Feng, L. Chen, Y. Dong and D. Jiang, *Chem. Commun.* **47**, 1979-1981 (2011).
- [6] X. Ding, L. Chen, Y. Honsho, X. Feng, O. Saengsawang, J. Guo, A. Saeki, S. Seki, S. Irle, S. Nagase, P. Vudhichai and D. Jiang, *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 14510-14513 (2011).
- [7] A. Nagai, Z. Guo, X. Feng, S. Jin, X. Chen, X. Ding and D. Jiang, *Nature Communications* **2**:536 doi: 10.1038/ncomms1542 (2011).

## 所長招聘研究会「2020年の物質・生命分子科学を語るⅢ」

平成23年6月28日（火）に、所長招聘研究会「2020年の物質・生命分子科学を語る」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）および平成23年3月3日（木）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3弾で、これまで開催された研究会では主に物質科学領域の若手研究者に講演を頂きましたが、今回は生体関連分子科学分野において第一線でご活躍中の若手研究者の方々を中心に講演をお願い致しました。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、自由に夢を語って頂くという研究会の目的は前回と同様に踏襲しました。発表者6名を含めて58名の参加（登録者のみ）がありました。世話役は、横山利彦教授・永田央准教授と古谷が務めました。

最初の講演者である東工大院理工の藤芳暁先生は、単一タンパク質の蛍光分光を温度数ケルビンで行うための対物レンズを開発するにあたって苦労したところや工夫したところを実際のデータやレンズ業者との開発裏話を交えてご講演をされました。液体ヘリウム温度下にて材料の収縮による光軸のズレを極力抑えるために、合成石英製のシュバルツシルド型の反射型対物レンズを自身で設計し、数多くの光学機器メーカーに問い合わせたところ1社のみ実用に耐えうる対物レンズを作製することに成功したことなど具体的に臨場感あふれる講演となりました。その後、開発した対物レンズを用いて、蛍光タンパク質GFPやフラビンタンパク質PACなどの単一分子蛍光スペクトルを計測し、大きな波長シフト揺らぎ

を観測するなど発色団分子そのものでは観測されない新たな現象を見いだした例も発表されました。また、タンパク質のamide Iモードに対応する波長の赤外光照射下において、蛍光がON/OFFされるなど現時点では詳細なメカニズムが不明な現象など興味深い実験結果も紹介頂きました。

学習院大の西坂崇之先生には、光学顕微鏡の極限に迫るともいえるタンパク質分子1個の動態をナノメートル精度で明らかにすることを目指された研究についてご講演を頂きました。三次元トラッキングという手法を活用することで生体分子モータータンパク質の一種であるKinesin Eg 5が微小管の周りをらせんを描きながら回転する様子を明らかにした例を紹介されました。また、輪帯型TIRFMという蛍光顕微鏡を開発され、蛍光プローブの偏光変調の位相のズレからF1-ATPaseタンパク質内部の動きを明らかにするという研究例も紹介されました。ナノメートル精度の顕微鏡計測にあたっては実験室の温度調節が極めて重要とのことで、熱源として無視できない観測者を排除するために無人操作を可能とし、さらには無風型冷却装置とPID制御を組み合わせることで温度を精密に制御した特別な顕微鏡観察用実験室を紹介頂きました。

金沢大院理工の内橋貴之先生からは、タンパク質の構造変化を原子レベルで追跡することを可能にした高速原子間力顕微鏡の開発と研究例についてご講演を頂きました。ミオシンVがhand-over-hand歩行する様子を直接観察した例やF1-ATPaseの回転触媒機構の観察、バクテリオロドプシンの光誘起プロトン輸送過程における構造変化など、

分子が動く様子を動画として直接見せることのできる高速原子間力顕微鏡の威力を余すところなく見せつけるようなご講演でした。さらには、現在の数十ミリ秒/フレームの時間分解能をさらに上げることや、蛍光顕微鏡と組み合わせた計測法の開発についての見通しなど、高速原子間力顕微鏡の未来を見据えたご講演も頂きました。

九大院工の井川善也先生からは、RNAを素材にした生体超分子化学についてご講演を頂きました。リボザイムという言葉があるようにRNAは遺伝情報を担うだけでなく、酵素として触媒機能を示す物質であり、注目を集めている生体分子の一種である。特にRNAを構成する塩基の相補配列を利用することで、タンパク質酵素では実現することが難しい自己複製する酵素などの実現が可能になる可能性を秘めています。ご講演では、人工RNA触媒創製を目指された研究例について紹介を頂きました。具体的には、既存の安定な立体構造を示すRNA配列をscaffold（土台）として用い、その一部分に活性部位構築のためのライブラリー配列を導入してスクリーニングを行うという手法についてご講演を頂きました。

名工大院工の出羽毅久先生には、分子集合系として連動・協同して機能する実在分子として光合成膜タンパク質、集光アンテナタンパク質の研究例についてご講演を頂きました。アンテナタンパク質のみからなるLH2と光合成反応中心RCを含むLH1-RC複合体の離合集散が脂質組成によって劇的に異なることを原子間力顕微鏡で明らかにした研究を紹介頂きました。分子複合体の集合状態が機能に密接に関わる光合



成タンパク質の分子機構について脂質分子が果たす役割についての研究の最前線について講演頂きました。

静岡大院理の小堀康博先生には、ナノ秒時間分解電子スピン共鳴法を用いた研究についてご講演して頂きました。特に長寿命電荷分離の現象、電荷再結合を抑制する分子機構を探索されており、高効率な太陽光エネルギー変換の実現には重要な研究と思われます。ご

講演では、ヒト血清アルブミンに光受容能を持たせたタンパク質試料に対して偏光レーザーを照射して電子スピン共鳴スペクトルを時間分解計測するという最新の研究成果について紹介頂きました。

いずれの講演も分子科学分野の研究者に分かりやすく工夫されており、将来の展開が期待される内容でした。分子研が今後の生命および物質分子科学

分野における研究の方向性を検討するにあたり、さまざまな最新の研究例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して頂きまして誠にありがとうございました。

(古谷 祐詞 記)

## 分子研シンポジウム “Recent Developments of Spectroscopy and Spatial and Temporal Hierarchical Structures in Molecular Science”

10月16日から1週間、分子研研究顧問のGraham Fleming教授（米国カリフォルニア大学バークレー校）が評価のために研究所を訪問された。彼の訪問を契機に、10月18日に表記シンポジウムを開催した。

現在、研究所では、電子・分子世界の多様性・階層性、物性や機能発現の解明を目指した「協奏的分子システム研究」を進めている。また、機構プロジェクトである「シミュレーションによる「自然科学における階層と全体」に関する新たな学術分野の開拓」を全所的に進めている。このプロジェクトでは、天文台や核融合科学研究所との自然科学における階層構造の解明に向けた研究会や共同研究に加え、分子科学における階層構造の解明を通して協奏的分子システム研究分野の開拓、国際的学術拠点形成を目指し、所内ワークショップや関連セミナーを通して国内外の研究者との交流を進めている。夏に開催した日韓分子科学シンポジウムもその一環である。

反応、物性や生体の機能は、分子の構造・運動を引き金として起こる幅広

い時間・空間スケールをもつ階層的かつ不均一的ダイナミックスによりもたらされる。階層的ダイナミックスの解明は協奏的分子システム研究の一つの課題であるばかりでなく普遍的な課題である。また、NMRや中性子散乱などを含めた広義の分光法は、超高速ダイナミックスから生体やガラスのような遅く不均一な運動の解析にも威力を発揮し、分子に立脚した科学におけるその可能性は今後さらに増していくであろう。そこで、協奏的分子システム研究および機構プロジェクトの一環として、本シンポジウムを開催した。

シンポジウムでは、気鋭の若手研究者を含め所内外から合計10件の講演（講演者はFlemingの他、M. Cho（韓国高麗大学）、香月浩之（分子研）、神取秀樹（名工大）、島田林太郎（東大）、高田彰二（京大）、田原太平（理研）、富重道雄（東大）、富永圭介（神大）、林重彦（京大）（敬称略））が行われた。シンポジウムの題名通り、超高速分光法による分子の構造変化ダイナミックスや固体水素の量子状態制御から、溶液における分子間相互作用・

振動ダイナミックス、励起エネルギー移動ダイナミックス、プロトンポンプ機構、モータータンパク質の一分子分光、生体分子のダイナミックスまで非常に幅広い時間スケールに及んだ。また、系のサイズも二原子分子から、液体・生体分子にまで及んだ。実験研究に加え、ATP加水分解反応、コンフォメーション変化を伴うリガンドの運動・酵素反応に関する理論計算の紹介もあった。今後も電子・分子世界の多様性・階層性に関する研究会などを開催していきたいと思う。さらに、読者の方から様々な多くのアイディア・提案をいただけたら幸いである。

最後に、十分な準備期間もない状況で快く発表に応じて頂き、さらにシンポジウムを興味深いものに仕上げて頂いた講演者の方々に改めてお礼を申し上げます。

(斉藤 真司 記)

## 第71回岡崎コンファレンス

## “New perspectives on molecular science of glycoconjugates”

糖鎖は、核酸・タンパク質とならぶ第3の生命鎖ともよばれており、その生物学的重要性が次々と明らかになっている。しかしながら、糖鎖の分子科学は、他の生命分子の場合に比べて著しく立ち遅れてきた。なぜなら、糖鎖の情報はゲノムに直接記されておらず、その分子構造は不均一でかつ運動性に富んでおり、しかも糖鎖は弱い分子間相互作用を集積して機能を発現しているからである。すなわち、糖鎖が担う生命情報の解読には、今後の分子科学が取り組むべき課題の多くが集約されている。

こうした問題意識のもとで、第71回岡崎コンファレンスNew

perspectives on molecular science of glycoconjugates「糖鎖分子科学の新たな展望」を2011年10月12日（水）～14日（金）に開催した。24件の講演（うち海外5名）と18件のポスター発表をもとに、総計73名の参加者が討論を行った。

本コンファレンスでは、最先端の糖鎖科学者とともに、異分野の研究者にも講演や討議に加わっていただいた。そのため、前夜のミキサーであらかじめ打ち解けた雰囲気をつくり、初日冒頭でスクリプス研究所のJames C. Paulson博士に糖鎖入門的な講演を行っていただいた。おかげでいずれの講演においても活発な質疑応答が展開

され、講演者の方々も普段は受けることのないナイフかつ核心をついた質問を、緊張感をもって楽しんでおられた。最終日の総合討論も大いに盛り上がり、糖鎖機能の分子論的理解に向けたアプローチ法の将来展望について緊密な議論が繰り広げられた。参加者の間で新たな共同研究も芽生え、海外招待講演者からも、これまでに参加した学術集会のなかでもベストの部類であり、とても有意義な経験であったといった賛辞が次々と寄せられた。

糖鎖研究を通じて新たな分子科学の胎動が予感される刺激的な3日間であった。

（世話人 若槻壮市、加藤晃一、加藤龍一、山口芳樹、佐藤匡史、神谷由紀子）



The 71<sup>st</sup> Okazaki Conference “New Perspectives on Molecular Science of Glycoconjugates”, October 12 – 14, 2011

## Program

### October 12 (Wed.)

9:15- 9:30 Taking Photograph

9:30- 9:40 Opening Remarks (Iwao Ohmine, Director-General of Institute for Molecular Science)

9:40-10:00 Introductory Talk (Soichi Wakatsuki and James C. Paulson)

#### **Session 1: Trends in Molecular Science of Glycoconjugates** Chair: Naoyuki Taniguchi

10:00-10:35 James C. Paulson (The Scripps Research Institute, USA)

"Structure Aided Design of Siglec Ligands for *in vivo* Targeting of Nanoparticles to Immune Cells"

10:35-11:10 Toshiyuki Kawasaki (Ritsumeikan University) "Recognition of Endogenous Ligands by C-Type Animal Lectins"

11:10-11:45 Koichi Kato (Institute for Molecular Science) "Structural Views of Functional and Pathological Roles of Sugar Chains"

11:45-13:00 Lunch and Poster Viewing

#### **Session 2: Structural Glycobiology (I)** Chair: Ryuichi Kato

13:00-13:35 Kay-Hooi Khoo (Academia Sinica, Taiwan)

"Towards Direct Glycopeptide Sequencing and Identification in Glycoproteomic Applications"

13:35-14:10 Kunihiko Gekko (Hiroshima University)

"Structural Analysis of Carbohydrates by Synchrotron-Radiation Vacuum-Ultraviolet Circular Dichroism Spectroscopy"

14:10-14:45 Katsumi Matsuzaki (Kyoto University) "GM1 Cluster Mediated-Aggregation of Alzheimer's Amyloid  $\beta$ -Protein"

#### **Session 3: Chemical Glycobiology** Chair: Yoshiki Yamaguchi

15:05-15:40 Koichi Fukase (Osaka University) "Glyco-Imaging for Glycan Dynamics Study"

15:40-16:15 Mikiko Sodeoka (RIKEN) "Synthesis and Biological Activity of Ganglioside Analogues with  $CF_2$ - and  $CH_2$ -Sialoside Linkage"

16:15-16:50 Leonard M.G. Chavas (High Energy Accelerator Research Organization)

"Influenza Virus Sialidases' Targeted Drugs: Their Interaction With Human Sialidases"

16:50-17:25 Mark von Itzstein (Griffith University, Australia) "Exploring New Opportunities in Influenza Virus Sialidase Inhibitor Discovery"

### October 13 (Thu.)

#### **Session 4: Glycobiology and Glycophysiology** Chairs: Toshiyuki Kawasaki and Koichi Furukawa

9:00- 9:35 Shinji Takada (National Institute for Basic Biology)

"Post-Translational Modification in the Secretion and Extracellular Transport of Wnt Proteins"

9:35-10:10 Koichi Furukawa (Nagoya University) "Functional Analysis of Globo-Series Glycolipids Using Gb3/CD77 Synthase Knockout Mice"

10:30-11:05 Kazuhiro Ikenaka (National Institute for Physiological Sciences)

"N-Linked Sugar Chains: Regulation of Their Synthesis and Their Physiological Significance"

11:05-11:40 Shoko Nishihara (Soka University)

"Maintenance and Induction of Naïve State Embryonic Stem Cells Require LacdiNAc Carbohydrate Structure"

11:40-12:15 Naoyuki Taniguchi (RIKEN) "Regulation of Brain-Specific GnT-IX (Vb) Expression by Neural Histone-Code"

12:15-13:25 Lunch and Poster Viewing

#### **Session 5: Theoretical and Computational Science of Glycoconjugates** Chairs: Suyong Re and Yukiko Kamiya

13:25-14:00 Kiyoko F. Aoki-Kinoshita (Soka University) "Methods and Applications of Glycome Informatics"

14:00-14:35 Keiko Takano (Ochanomizu University)

"Theoretical Studies of the Interaction between Proteins and Glycans Using *ab initio* FMO Method"

14:35-14:55 Toyokazu Ishida (AIST) "Computational Modeling of Carbohydrate Recognition in Selectin Complex"

15:15-15:50 Fumio Hirata (Institute for Molecular Science) "Exploring Life Phenomena with a Statistical Mechanics of Molecular Solution"

15:50-16:25 Robert J. Woods (University of Georgia, USA)

"Computational Carbohydrate Grafting Leads to the Discovery of Novel Glycan-Binding Specificities for an Anti-Tumor Antibody"

16:25-17:25 Short Talk from Poster Presentation Chair: Tadashi Satoh

17:25-18:30 Poster Presentation

18:30-20:00 Banquet

### October 14 (Fri.)

#### **Session 6: Structural Glycobiology (II)** Chair: Koichi Kato

9:00- 9:35 Yoshiki Yamaguchi (RIKEN) " $^{13}\text{C}$ -NMR Quantification of Proton Exchange at LewisX Hydroxyl Groups in Water"

9:35-10:10 Daisuke Kohda (Kyushu University) "Comparative Structural Biology of Oligosaccharyltransferases"

10:30-11:05 Thomas Peters (University of Lübeck, Germany) "NMR Provides Insights into Virus-Carbohydrate Interactions at Atomic Resolution"

11:05-11:25 Soichi Wakatsuki (High Energy Accelerator Research Organization)

"Structural Glycobiology as Part of Integrated Structural Life Science"

11:25-11:50 General Discussion (Chairs: Soichi Wakatsuki and Koichi Kato)

11:50-12:00 Closing Remarks (Soichi Wakatsuki, High Energy Accelerator Research Organization)



## 若手独立フェロー制度の試行について

従来、分子科学研究所の若手ポストと言えば、助手、研究技官、IMSフェロー（博士研究員、任期2年＋延長1年可）であった。研究技官制度はなくなったが、助教やIMSフェローのポスト数は維持している。これは、研究者の高い流動性と内部昇格禁止の方針によって、平均年齢の上昇が抑えられ、空きポストを埋めてもすぐ空きがでるなど、若手ポストの柔軟性を維持できているからである。

また、平成21年度からは、運営費交付金に基づく博士研究員制度の弾力的運用と強化のために、IMSフェローか、特別研究員（特任助教、任期3年＋延長2年可）かを選択できるようにした（分子研レターズ59号16ページ参照）。さらに、平成24年4月からは、特任職員が年俸制の常勤職員となり、文部科学省共済組合に所属するなど、特別研究員（特任助教）は実質的に助教とあまり差がなくなる。

今回、所長の提案で特任准教授相当の年俸制の「若手独立フェロー」という新たな若手研究者育成プログラムを試行的に開始した。応募時の資格は、博士号取得2年以内（取得見込を含む）、

あるいは博士号取得後に海外で研究中の人は帰国後1年以内（海外滞在中を含む）である。普通なら助教・特任助教で採用する年齢層の若手を、敢えて「若手独立フェロー」として採用する理由はなにか？

大学では、予算削減によって助手・助教のポストを減らし、外部資金のポスト等に置き換えざるを得なくなっている。そのため、発想豊かな若手をいろんな試行錯誤を経験してもらいながら育てていく余裕がなくなり、短期的な成果が問われる特定プロジェクトのために若手を専従させるケースが増えている。若手育成はこのような方向だけでよいのだろうか？

「若手独立フェロー」は、5年間、独自の自由な発想に基づく研究（実験、理論）に専念できる。分子研内には近い分野の研究者が多く、技術職員等の研究支援体制も整っており、たとえ一人で独立であっても数々の支援が受けられる。また、新たな分野形成のコアになりそうな場合には、若手独立フェロー自身にさらに若手をしっかり育ててもらうなどの柔軟な対応も必要になるだろう。しかし、本来このようなケース

では、正規の准教授として研究グループを構成すべきである。そのためにも、現在、「若手独立フェロー」をテニユアトラック化する方策を探っているところである。

ここ2、3年で毎年1～3名程度の採用を考えている。今年度は平成23年10月10日を〆切として公募した。すばらしい応募者が多数おり、その中から誰を選ぶか選考がむずかしかった。審議の結果、理論系2名を決定し、実験系は今回見送ることにした。実験系の場合、ひとつの研究室だけで過ごしてきた若手に最初から「独立」を期待するのは少し無理があるかもしれない。実際の選考でも、「独立」を考えた場合、異なる研究室での武者修行経験が非常に重要であることを実感した。今回、採用に至らなかった候補の中に、来年その成長をもう一度見てみたい候補が多数いた。是非、再チャレンジして欲しい。「若手独立フェロー」制度が若手研究者に刺激を与え、若手育成の新たな制度として定着することを願っている。

（小杉 信博 記）

加藤晃一教授に第48回（2011年度）ベルツ賞

吉田紀生助教に平成23年度溶液化学研究会奨励賞

香月浩之助教に平成23年度分子科学研究奨励森野基金

## 加藤晃一教授に第48回（2011年度）ベルツ賞

1列目右から4番目が筆者

このたび、「アミロイド蓄積開始機構の解明と治療薬開発への展開」と題した私たちの論文が第48回（2011年度）ベルツ賞を受賞いたしました。ベルツ賞（正式名称はエルウィン・フォン・ベルツ賞）は、日本とドイツの間の歴史的な医学領域での交流を回顧し、また両国間の交流関係をさらに深めていく目的で1964年にドイツの製薬会社バーリンガーインゲルハイムが設立した伝統ある医学賞で、日本の近代医学の発展に大きな功績を残したドイツ人医師ベルツ博士の名を冠して名付けられました。毎年常任委員会の定めるテーマについての医学論文が募集されるのですが、このたびのテーマは「アルツハイマー病」でした。柳澤勝彦 国立長寿医療研究センター認知症先進医療開発センター長、松崎勝巳 京都大学薬学研究科教授と共同で執筆した上記論文が本年度1等賞を受賞する栄誉に浴し、11月25日に東京南麻布のドイツ大使

公邸において厳かに贈呈式が行われました。

共同研究者の柳澤勝彦博士は、アルツハイマー病発症にかかわるアミロイド $\beta$  ( $A\beta$ ) 分子の重合が、神経細胞の表層に存在する糖脂質GM1ガングリオシドとの相互作用を契機

として促進されることを見出しました。この現象の分子機構を解明するために、私たちは柳澤博士と8年間にわたる共同研究を行ってきました。幸いなことに、共同研究を開始して間もなく、分子研に920MHz超高磁場NMR装置が設置され、当時、名古屋市立大学の大学院生であった矢木真穂さんが、本装置を駆使してGM1クラスター存在下における $A\beta$ の初期構造変化を捉える道筋をつけることに成功しました。研究成果につきましては、「分子研レターズ」



63号などでも紹介させていただいています。

超高磁場NMRを用いた分子科学の研究成果が、アルツハイマー病発症機構に関する知見をもたらし、医学の領域でも高く評価していただけたことはとても大きな喜びです。共同研究者の皆様にあらためて感謝の意を表したいと思います。

（加藤 晃一 記）

## 吉田紀生助教に平成23年度溶液化学研究会奨励賞

この度、“液体の積分方程式理論を用いた溶液内化学過程に関する研究”において、平成23年度溶液化学研究会奨励賞を受賞いたしました。本賞の歴代受賞者は、溶液化学分野の第一線で活躍されている立派な方々ばかりであり、

本賞に恥じないよう、今後も研究に邁進したいと考えています。

本賞の受賞課題となった液体の積分方程式理論を用いた溶液内化学過程の解析では、(1) 溶液内分子の電子状態理論の構築と応用、(2) 生体分子の分

子認識過程の解析、(3) 溶液内生体分子の電子状態理論の構築の3つの課題に取り組みました。溶液内化学反応は気相とは全く異なる特徴を示すことが多く、したがって、1の課題は化学の中心的問題のひとつであり、これまでに



多くの理論が提案されてきました。私はこれまでに液体の積分方程式理論と電子状態理論を組み合わせた理論

(MOZ-SCF理論、RISM-SCF理論、3D-RISM-SCF理論)を提案・応用して参りました。また、2の課題となる生体分子の分子認識は、生命活動の素反応とも言うべき過程です。3D-RISM理論を用いた解析で、これまでタンパク質の選択的イオン認識、チャネルタンパクの作動機構、薬剤分子の認識の解析など多くの成果をあげてきました。第3の課題に関しては、1,2の課題

で発展させてきた手法を組み合わせることで、生体分子の電子状態に及ぼす溶媒の効果を評価することのできる理

論を提案しました。これにより酵素反応において、分子認識から化学反応までを統合的に評価することのできる理論的枠組みが構築できたと考えています。

一連の研究に対して、ご指導を頂きました平田文男教授をはじめ、平田グループメンバーの皆様、共同研究者の皆様に深く感謝の意を表します。今後ともご指導ご鞭撻のほどお願いいたします。

(吉田 紀生 記)

## 香月浩之助教に平成23年度分子科学研究奨励森野基金

このたび、「アト秒精度の波束干渉制御技術を用いた量子系の精密制御についての研究」という題目にて、平成23年度分子科学研究奨励森野基金を頂きました。故森野米三先生は分光的なアプローチから分子の構造を決定する研究を確立され、日本に於ける分子構造研究の基盤を築いた、まさに分子科学研究の巨人というべき先生です。といっても、私が研究の道に進む以前におなくなりになられているため、直接お会いすることはありませんでしたが、現在でも第一線でご活躍されている分子科学の重鎮たる先生方を数多く研究室から輩出されているということだけをとっても、優れた研究者であったと同時に、優れた教育者であったことが伺われます。

評価していただいたこれまでの研究内容につきましては、レターズの前号でも紹介する機会がありましたので、

ここでは割愛させていただきます。現在、さきがけ「光の利用と物質材料・生命機能」の研究者として、これまで行ってきた孤立分子系でのコヒーレント制御を多体凝縮系へ応用することを目指して、新たな実験装置の開発を行っています。光を照射するスポット径がバルクな量子系の結晶サイズより十分に

小さいとき、光を平面波として扱うことはもはや適当ではなくなり、光照射後に生成される励起状態は結晶の様々な非局在固有状態の重ね合わせで記述できるはずであり、結果的に気相中の分子振動波束の運動と同じようにこの状態は時間発展し、量子的な特徴を維持したままその波動関数が拡散していくような描像が考えられます。この様子をなんとか直接観測・制御できない

1列目左から4番目が筆者



か、ということで現在、新たに研究を進めております。まだ、端緒についたばかりの研究ですが、早く実を結べばと思ってがんばっています。

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先生にこの場を借りて改めて感謝いたします。

(香月 浩之 記)



## 01

## 第4回文部科学省「最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム」シンポジウム報告

報告：光分子科学研究領域 教授 大島 康裕

文部科学省が推進する「最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム（以下PFNと略す）」には、「先端光量子アライアンス（APSA）」と「融合光新創生ネットワーク（C-PhoST）」の2つの拠点が参画している。分子研は、日本原子力研究開発機構、大阪大学、京都大学とともに通称「西の拠点」と呼ばれるC-PhoSTの構成機関である<sup>[1]</sup>。この2つの拠点は年に1回のペースで、合同でシンポジウムを開催してきた。本年度は分子研が世話役となって11月14日に名古屋駅近くのキャッスルプラザホテルにて、第4回目の合同シンポジウムが開催された。前2回はレーザー学会の場を借りて実施されてきたので、実質的には今回が初の単独開催となる。そこで、当PFN事業と関連の深いCRESTならびにさきがけの研究者の方々にもお声をかけて、積極的に参加して頂くことにした。

当シンポジウムのプログラムのうち、何といっても目玉であったのはパネルディスカッションであろう。まずAPSA、C-PhoSTの両拠点責任者より、各拠点の概要を交えつつ、超高精度に制御された光および超強力な光を利用することにより、基礎科学や応用分野で今後どのようなブレークスルー

が期待されるか、という話題提供があった。1960年代のレーザーの創成期に続いて現在が第2の劇的发展期にあることが時代的背景とともに語られ、また、唯一人為的に操作できる「力」である電磁相互作用の究極的な利用がレーザーであると指摘されるなど、科学論としても示唆に富む内容であった。引き続いて、元廣友美氏より豊田中研における光科学技術への取り組みに關してのご紹介があった。「石油に替わる新エネルギーがどのように変化していくかは自動車ビジネスそのものを左右する、自らが研究開発を行い創エネルギーに関する知見をもっておく必要がある」との考えのもと、核融合から太陽光発電・光合成までを含む広範な領域で研究開発を展開しているとのことであった。現在の事業にとらわれずに網羅的にサーチして将来を見据えた企業戦略を構築していることに、深い感銘を受けた研究者が多かったことと思う。立花隆氏は、現在の光科学の進展によって全サイエンスが精緻化し、パラダイムシフトが引き起こされつつあると指摘し、光科学はとてつもない広さと深さを有する故、全ての分野で大きな発展可能性があるが、それだけ迷子になりやすくなる、研究者は「見

当識」を常に失わない（自分は大で、今何をしており、どこに向かっているのかを「識る」）ことが重要だと締めくくられた。以上の話題提供に引き続いた自由討論では、企業における基礎研究の意義、人材育成の重要性、光科学技術施策の方向性など、多岐の問題について意見交換が行われた。特に印象的であったのは、「研究者は毎日オリンピックを戦っているに等しい」「一般の人たちがアスリートのように研究者を応援する社会の実現が必要だ」という立花氏の言葉である。登壇者全てが深く同感され、「研究のワクワク感」を広く社会と共有するための具体策について様々な提言がなされた。

午後のポスターセッションでは、APSA、C-PhoST、CREST、さきがけの研究者により合計123件の発表が行われた。光源開発から基礎物理学、さらにはバイオサイエンスまで、極めてバラエティに富む研究内容であり、光科学がまさに科学全般の「根幹」であることを端的に示すセッションであった。引き続いての口頭講演では、拠点内で活発な研究活動を進めている若手・中堅の研究者を中心にホットな研究成果が紹介された。

以上、当シンポジウムは、当初の予想をはるかに上回る数の方々にご参加頂き、



パネルディスカッションの様子



ポスターセッションでの一コマ

盛会裏に終了することができた。参加者の皆様に主催者として篤く御礼申し上げます。また、ご多忙にも関わらずパネリストをお引き受け頂き稠密なご準備を頂

いた立花先生、元廣先生には、心より感謝致します。さらに、企画・運営に携わったAPSAならびにC-PhoSSTの関係者の方々にも感謝申し上げます。

[1] 当拠点プログラムの詳細に関しては、分子研レターズ、59号、12-13頁を参照されたい。

## 事業報告

# 02 計算分子科学研究拠点 (TCCI) 活動報告

報告：拠点長 高塚和夫（東京大学、分子研）

分子研は他の2つの戦略機関（東大物性研、東北大金研）とともに神戸にあるスーパーコンピュータ「京」を中心とする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）の戦略的研究分野のひとつ「新物質・エネルギー創成」を担っている。これら3機関は戦略計算物質科学イニシアティブ（CMSI）を構成している。戦略機関における分子科学分野の本部が分子科学研究所（実験棟5階）に置かれており、計算分子科学研究拠点TCCIとしての活動をまとめている。詳しくは分子研レターズ64で説明したところであるが、ここでは具体的に始まった活動状況と方針について報告したい。

## 1) TCCI研究会（全体シンポジウム）

8月11日、12日に、TCCIの全体シンポジウムである第2回研究会を理研・計算科学研究機構（神戸市）で開催した。100名を超える研究者（民間研究者15名）が集り、「京」用プログラム開発の状況や研究の進捗についての発表・議論を行った。今後も、毎年1回は公開の全体シンポジウムの開催を予定しており、「京」に関心のある方々の参加をお願いしたい。

## 2) 実験化学との交流シンポジウム

11月10、11日に京大福井謙一記念研究センター（京都市）において、TCCIの関わる有機化学、物理化学、生命科学の実験サイドから計算科学への

期待・要望等に関する交流シンポジウムを開催した。80名程度（1割が民間）の参加があった。優れた講演者の参加によって、非常に興味深く有意義なシンポジウムとなった。今後は、TCCIにおける実験研究者との交流の進捗に合わせて公開シンポジウムを開催していく予定である。今後も実験研究者の方々の参加をお願いしたい。

## 3) 産学連携シンポジウム

11月24日に野村コンファレンスプラザ日本橋（東京）において、企業における計算科学の利用と学術研究への期待、TCCIにおける研究状況等の紹介・意見交換を通じた産学連携を目的に産学連携シンポジウムを開催した。70名程度の参加のうち、半数以上が民間からの参加であり、この分野における産学連携への期待の高さが垣間見られる。TCCIでは、今回のシンポジウムを切っ掛けに産学連携のより具体的な活動を継続的に実施していく予定である。

## 4) 新・元素戦略に関する実験計算連携検討会

文科省からCMSIへ元素戦略に関する支援要請を受け、TCCIでもその対応を進めている。そこで、「電池材料」および「触媒」に関する実験および理論計算研究の研究紹介を11月9日（東大小柴ホール）および11月12日（京大福井謙一記念研究センター）にて行った。参加者はそれぞれ90名弱（半数が

民間）、約60名（2割が民間）であった。今年度まとまる予定の新元素戦略に計算化学の立場から積極的に関与していく予定である。

## 5) 夏の学校、冬の学校など

大学院生レベルの教育をかねて、夏の学校や冬の学校の企画している。夏の学校としては、第15回分子シミュレーション夏の学校を共催で企画協力した。また、分子研とTCCIの主催のもと、TCCIウインターカレッジとして分子シミュレーション冬の学校を12月12日～15日に、量子化学分野冬の学校を12月19、20日に岡崎コンファレンスセンターで開催した。参加者はそれぞれ約90名、約50名であった。

## 6) 国際ワークショップ

超並列計算は国際的にも進んでおり、量子化学等に関する超並列プログラミングに関する公開ワークショップを2月28日に東大駒場ファカルティハウスで開催する。超並列計算に興味のある方は是非参加して頂きたい。

## 7) その他

CMSIは分子科学、物性科学、材料科学分野の理論計算科学に関する全国的な組織であり、適宜、情報交換し「京」の有効活用、分野振興のための公開シンポジウムや研究会を3分野で企画している。3分野の積極的な連携で、今後も分野の振興に努めていく。



## 01 若手研究者招聘事業～東アジア首脳会議参加国からの招聘 第4期

報告：物質分子科学研究領域 准教授 櫻井 英博

1年あまりの中断期間を経て、20年度後期より3期にわたって実施されてきたJSPS-JENESYSの第4期プログラムが6月より実施され、分子研は過去3期に引き続き、実施研究機関として採択された。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。

中断期間中に実施されたJASSO-JENESYSプログラム、分子研独自プログラムであるEXODASSプログラムと合わせると、同種のプログラムは6期目となり、本プログラムはすっかり分子研に定着した感があるとともに、

東南アジア諸国にとっても、若手研究者における重要なキャリアパスのひとつとして認識されるようになってきている。そのため、今回は採択決定から公募、採択までの期間が極めて短く、応募者が集まるか少々不安だったが、ふたを開けてみると、わずか2週間弱の募集期間で、さらにリサーチプロポーザルの提出を求めているにもかかわらず、過去最高の7カ国、61名の応募が集まった。またその提案内容もこれまで以上に充実していたため、予定の12名より多い16名を最終的に採択し、分子研をはじめ、協力機関である大阪大学、甲南大学に招聘した。内訳はタイ10名、インド2名、マレーシア、ベトナム、インドネシア、フィリピン各1名である。

招聘は2011年8～10月にかけて実施され、各研究者に応じて、29～72日の期間での研究プログラムが組まれた。また10月11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。既に9月に開催された第14回アジア化学会議においても、JENESYS関係者の各方面での活躍が見られたのは嬉しい限りである。今回の全体会議においても、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。

本プログラムによって蒔かれた種は東南アジア諸国で確実に根付いており、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は確実に強化されている。安倍政権時に提案された本JENESYSプログラムはひとまず終了となり、今後の後継プログラムについての詳細はまだ不明であるが、独自事業のEXODASSプログラムをはじめ、様々なチャネルを利用した今後の継続が望まれるところである。





## 02 中日機能性超分子構築シンポジウム

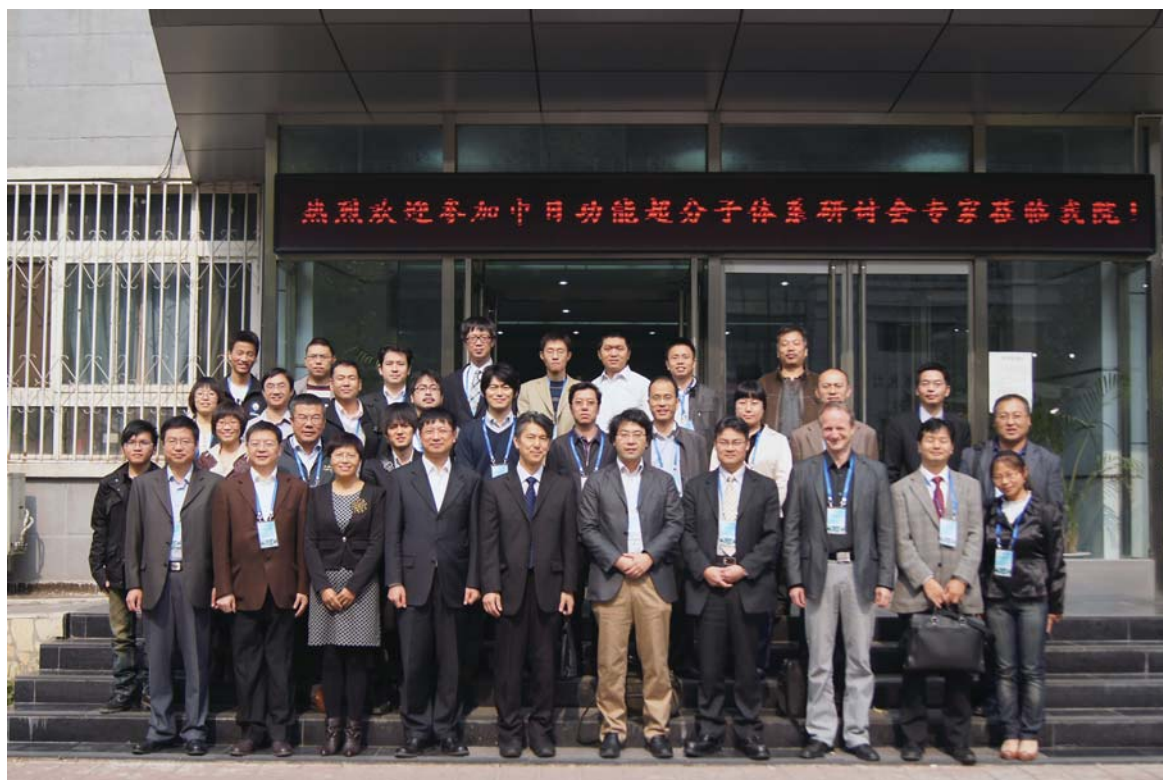
報告：物質分子科学研究領域 准教授 江 東林

分子が自己組織化し、望み通りの構造や機能を作り出すことが分子科学の究極な目標の一つである。本シンポジウムでは、日中両国の自己組織化分野で活躍されている第一線の若手研究者を一同に集め、集中的に議論する機会を提供することで、最前線の研究成果を報告するとともに、相互理解を深めることを目的とした。

2011年10月6日—9日、北京師範大学において、中日機能性超分子構築シンポジウムが開催された。日本側は、分子研をはじめ、東京大学、大阪大学、

九州大学、立命館大学、物質材料研究機構、東北大学、慶応大学、奈良先端大、中央大学から計11名の先生が参加された。また、中国側では、中国科学院化学研究所に加え、長春応用化学研究所、北京大学、清華大学、上海有機化学研究所、武漢大学、北京化工大学、北京師範大学から計14名の若手が参加され、併せて計25件の招待講演を行った。専門分野として有機化学、無機化学、高分子科学、生体関連分野、物質科学、物理化学などの幅広い分子科学をカバーする最新の研究成果が発表され

たため、当分野の最先端を俯瞰することができた。特に、分野を横断するものが多く、各講演に対して熱心に質疑・議論を行うことができた。それにより、日中両国で活躍されている若手研究者の相互理解が深め、より良い知的ネットワークを築くことができた。参加した中国科学院院士からも非常に高い評価を受けており、また、多数の参加者から来年の開催を是非継続してほしいという要望があった。



## 03 第4回日韓生体分子科学セミナー(実験とシミュレーション)報告

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。特に韓国においては、2011年9月にソウル大学にお

いてThe 1st Korean Protein Society Symposiumが開催され、生体分子科学や蛋白質科学の振興に対する気運が高まっている。

本セミナーは、上記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4回目となる。第4回のセミナーは、IMS Asian-Core Programの支援によって、平成24年1月9日-11日の3日間、奈良市の東大寺文化センター内で開催された。全部で41件の講演があり、内訳は、日本側から22件、韓国側から19件であった。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。プログラムなど詳しい内容は<http://gagliano.ims.ac.jp/jk/jksymp.html>をご覧ください。

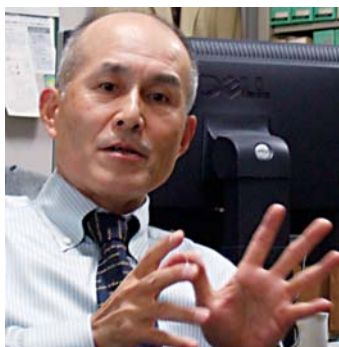
今回の発表内容は、蛋白質のフォールディングとアミロイド形成などに関する分子レベルの実験とシミュレーションに加え、蛋白質超分子複合体形成機構、蛋白質のリガンド認識に関する実験とシミュレーション、天然変性蛋白質、神経ネットワークのダイナミクス、蛋白質の構造機能予測、ガスセンサー蛋白質や光受容蛋白質の構造と機能に関する発表などがあった。







## ナノカーボンとの運命の出会いとオデッセイ



### 篠原 久典

(名古屋大学大学院理学研究科／名古屋大学高等研究院)

しのはら・ひさのり／1977年、信州大学理学部卒、京都大学大学院博士後期課程中退、分子科学研究所助手、三重大学工学部助教授、名古屋大学理学部教授を経て、1996年から名古屋大学大学院理学研究科教授。2003年、名古屋大学高等研究院教授（併任）。2009年より、名古屋大学大学院理学研究科副研究科長。現在、他に、東北大学 WPI（原子分子材料科学高等研究機構）連携教授、Shanghai University（上海大学）物理学科客員教授。

岡崎を去ってから、今年で23年になる。ファインマン先生流に言えば、“Time flies when you're enjoying finding things out!”である。その間、私の学問には大変革があった。それも、まったく予期せぬ変化であった。そう、今から思うと、学問の神様が私を導いてくれたとしか、理解しようがない。

すでに、色々なところに書いてきたが<sup>[1-3]</sup>、それは偶然のきっかけだった。1990年9月12日水曜日、ドイツ・ボデン湖畔にある小さなホテルの朝食のテーブルで、Rick Smalley（故人、当時、ライス大学教授、1996年度ノーベル賞受賞者）は私に一枚の講演用のスライドを見せてくれた。しかもそのスライドの右下にはC<sub>60</sub>の粉末が付いていた！Smalleyが手渡してくれたスライドを見ながら、私はしばらく呆然としていた。なにが起こっているのか、すぐには理解できなかった。

私とSmalleyはコンスタンツ大学で開かれていたThe 5<sup>th</sup> International Symposium on Small Particle and Inorganic Clusters (ISSPIC 5) に出席のために、偶然、同じホテルに滞在していた。C<sub>60</sub>がグラファイトの蒸発で簡単に作れるとの最初の発表は、クラスターや超微粒子の分野で有名なこの国際会議で行われた。しかも、Wolfgang Krätschmer（マックスプランク研究所

ハイデルベルグ教授）らによるフラーレンの多量合成法についての世紀の発表は10分足らずの飛び入り講演だった。私も自分の研究発表のためにこの会議に出席していた。この世紀の飛び入り講演が、その後のナノカーボン（フラーレン、カーボンナノチューブ、ナノピーポット、グラフェンなどの）研究、さらには「本格的なナノテクノロジー研究のすべてののはじまり」だった。Krätschmerの講演に大きな衝撃を受けた私は、それまでの気相マイクロクラスターの研究を、すべて捨てた。36歳の夏、だった。

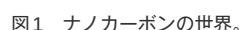
世界中でフラーレン研究に火がついた。途端に、関連論文が1日に30報以上も出るという異常な事態になった。こうなると研究者は恐怖観念にかられる。寝ている暇もない。今自分がやっている仕事は、明日には先を越されてしまうという恐怖観念だ。私も当時学生と一緒に大学に寝泊まりをするという、むちゃくちゃな時代だった。この狂乱的なフラーレン研究のフィーバーの中で、私はいくら実験して論文を書いたとしても、この状況では2～3年で忘れ去られてしまうだろう、と思った。そこで、フラーレン研究のターゲットを絞り込んで、齋藤弥八（現、名古屋大学教授）と共同でフラーレンのゲージの中に金属を入れる『金属内

包フラーレン』の研究を開始した。金属内包フラーレンを選択したのは、私がフラーレンの研究に入る前に水のクラスターの研究をしていたのが大きなヒントになった。水の分子はフラーレンのようにかご状のケージクラスターを作るので、真ん中の空間に分子や原子を入れることができる。同じように、炭素のケージへも金属原子を『内包』させることができるのではないかと。フラーレンの中の空間は完全な真空なので、この空間に金属原子を入れたら、今までにない全く新しい電子・磁気物性をもつフラーレンが作れるのではないかと。

金属内包フラーレンの多量合成の第一報はライス大学のSmalleyグループに先を越されたが、この研究は非常にうまく行って、この分野で齋藤との共同研究は世界のトップを走っていった。1992年には世界に先駆けて金属内包フラーレンの精製・単離に成功した。さらに、1995年には、坂田誠（名古屋大学名誉教授）と高田昌樹（現、理化学研究所播磨研究所主任研究員）らの全面的な協力を得て、シンクロトロンX線回折実験により金属原子の内包性をはじめて実験的に証明した。今では、金属内包フラーレンはMRIの造影剤や太陽電池などへの応用・実用化研究が急速に進んでいる。そして、金属内包



さらに、金属内包フラーレン・ピーポッドは極めて特異な電子輸送特性をもつことが分かった。2001年の夏、Young Kuk（ソウル国立大学教授）との共同研究により、温度5 KでのUHV-STISの観察から1本の金属内包フラーレン・ピーポッドは、軸方向の場所によってバンド・ギャップが変調されることを発見した（バンドギャップ変調）。カーボンナノチューブが半導体の場合は、金属内包フラーレンが存在する場所で伝導帯が急激に減少することを見出した。この現象は通常のカーボンナノチューブでは考えられない、金属内包フラーレン・ピーポッド特有の電子物性である。固体物理の伝統的なバンドギャップの概念に一石を投じる



実は、グラフェンとCNTはその構造と電子物性が親子関係にある。であれば、グラフェンからCNT、あるいは、CNTからグラフェンが作れないか？という素朴な疑問に駆られた。そして、ついに、一昨年（2010年）、多層CNTから内側のCNTを取り出す技術を開

[3] H.Shinohara, In Pursuit of Nanocarbons, *Chem.Record*, in press.



## 研究所と大学を行き来して

### 藤田 誠

（東京大学 大学院工学系研究科 応用化学専攻 教授）

ふじた・まこと／1982年千葉大学大学院工学研究科修士課程修了、1987年東京工業大学工学博士。相模中央化学研究所研究員、千葉大学助手、同講師、同助教授、分子科学研究所助教授、名古屋大学教授を経て、2002年4月より現職。

岡崎から名古屋を経て東京に赴任し、早10年が経ちました。私が分子研に在籍したのは、実は1997年春からわずか2年間（正確には1年9ヶ月）と、専任助教授の在籍最短記録ではないかという短い期間でした。それでも、分子研で過ごした時間はよほど印象的だったのでしょう。私の脳裏には、分子研ではじめて自分の研究室を持ち、明大寺キャンパス実験棟3Fに少人数ながらもグループを構え、心地よさと緊張感が同居した不思議な気持ちで研究を開始した（まさに船出をした）のがつい昨日の事のように、今でも鮮明によみがえります。

振り返ると私は、人の出入りの多い研究所を2カ所経験しました。はじめは相模中央化学研究所です。ここは当時国内にポスト制がほとんどなかった時代にポスト制（3年契約）を敷いたことと、若きグループリーダー全員が大学の教授ポストを狙っていたことなどから、とにかく全員がここを出ることを目標に研究に励むという特殊な環境でした。分子研も似たような空気をすぐに感じました。なかでも、田中晃二先生に「ここは“そろそろ出ていけ”が褒め言葉なんや」と聞かされたのが印象的でした。つまり、成果が挙げられないことには出ようにも出られません。「そろそろ出ていけ」は、「もう十分な成果が挙げただろう」という最上級の褒め言葉になるという理屈でした。

相模中研時代から数えて20年あまり。気がついたら、相模で知り合った同僚たちは、日本全国の主要大学の教

授ポストに収まりました。また、私の所属する錯体化学会も現在の中心的メンバーのほとんどが分子研の錯体化学実験施設を駆け抜けた人たちです。出入りの激しい研究機関がいかに高い研究アクティビティーを持っているかが、この二つの事例で十分に証明されているように思います。分子研は今後も是非このアクティビティーを保って欲しいと願っております。

さて、当時を振り返ると書きたいことは山ほど出てきますが、本稿の掲載は「分子研出身者の今」欄です。話題を今の話しに切り替えたいと思います。写真1をご覧頂くとお分かりいただけるように、東大ではスタッフ、ポスドク、学生、秘書を含め約30名のグループで研究を行っております。分子研での少数先鋭の効率の良さが身に染み付いているせいか、これでもグループが膨らまないよう努力をしております。しかし修士までは1学年定員5名を受け入れる必要がありますので、B4からM2までで15名、これにD学生7名、PD2名、スタッフ5名（私を含めて）でどうしてもこのぐらいの人数になってしまいます。分子研の先生方にはひんしゅくを買う人数ですね。このぐらいの人数ですと、研究のアイデアより、研究室を円滑に運営するアイデアの方が重要になってきます。どこの研究室でも行っている雑誌会や研究報告会などの活動に加え、研究活動をマンネリ化させないいろいろな仕掛けを考えて試行錯誤を繰り返した結果、よそではあまり見られないユニークな企画がずいぶん増え

ました。この場を借りて、その取り組みの一端を紹介させて頂こうと思います。

**研究プロポーザル合宿：**毎年春先に泊まり込みの合宿を行い、修士以上の学生に1年間練った研究構想を提案してもらいます。修士学生はこれまでのテーマをどれだけ膨らませることができるか、博士学生ですと、もう少し大きな視点で将来の独立も視野に入れた提案を期待します。始めた頃は「研究は思い通りにはいかないので、年に一度ぐらい思い通りに進む話しを自由に語ろう」という気軽な趣旨でしたが、年々レベルが上がり、感心するアイデアもずいぶん聴けるようになりました。もちろんそういうアイデアは即採用で、修士の学生でも自分のアイデアでその年の研究を進めてもらいます。合宿は体育館やプール付きのスポーツ施設で行い、初日は終日発表会の後、大きなコテージで夜中まで語り合い、翌日は（二日酔いで）スポーツ大会というスケジュールです。

**藤田研コロキウム：**学内外から若手研究者を講師に招き、研究室内での講演会を目標年数回で開催しています。学科の講演会では遠慮がちな学生も活発に質問してくれるようになりました。最近講演をお願いできる人が減ってしまいましたので、私の研究室で話しをしてみたいという方、是非ご一報ください。

**学生交換セミナー：**学位論文が仕上がりがけけたD学生が対象ですが、他大学の研究室に交換セミナーを申し込み、





双方の研究室から学生が相手方研究室に単身で乗り込み単独セミナーを行うという企画です。研究室の看板を背負って出かけてもらいます。これまで北川進先生や大須賀篤弘先生の研究室との交流があります。これも、一緒に輪を広げてくれる研究室を募集中です。

**海外研究室との合同セミナー**：国際会議への参加と併せて、海外研究室を学生7-8名とともに訪問し、合同セミナーを行います。英語での発表はもちろんのこと、ディスカッションに積極的に加わることを条件にメンバーを選抜します。これまで、オックスフォード大、ケンブリッジ大、アーヘン工科大（写

真2）、グラスゴー大での開催実績があります。2年に一度のペースですが、お金がかかるイベントなので、財源に余裕のある年に限られています。

その他、研究室公用語の英語化や、外国人学生の積極的な短期滞在の受け入れ、ネイティブポスドクの常時雇用など、国際化にはすいぶん力を注いでいます。他にもいろいろありますが、気がついたらそろそろ字数制限を超えそうなので、以下は割愛させていただきます。

はじめに書きましたように、私は大学と研究所をほぼ交互に移りましたが、大学には大学の良さ、研究所には研究所の良さがあり、私は両者を楽しませ

ていただきました。分子研の皆様、研究所（特に分子研）でなければできないことを、是非今のうちにご堪能ください！ところで、肝心の私の研究ですが、千葉大時代に萌芽した自己組織化の研究を分子研、名古屋で開花させ、東大でさらに新しいベクトルを……と拡げています。今後もご指導とご鞭撻のほど宜しくお願いいたします。



## 島田美帆研究員に第8回加速器学会年会 加速器学会奨励賞

分子研出身者の今■受賞報告

このたび、2011年8月につくばで行われた第8回加速器学会年会にて加速器学会奨励賞をいただき大変うれしく光栄に思います。受賞理由が2つの研究テーマにまたがっているため、「コヒーレント放射光に関するビーム力学的研究」と漠然としています。そのうち分子研UVSORの成果について簡単な説明をしたいと思います。

UVSORは2005年からバンチスライズという手法でテラヘルツ光の発生に取り組んでいます。この手法ではフェムト秒パルスレーザーを電子バンチに照射することによりディップをつくり、テラヘルツ領域で強い放射光を得ることができます。この放射光は位相の揃ったコヒーレント放射光となっており、通常の放射光に比べて5-6桁の強度を持ちます。今回の研究テーマでは、このディップが蓄積リングを周回するとどのような変化があるかを確認するこ

とでした。

そのために、蓄積リングを低 $\alpha$ オプティクスと呼ばれる特殊なモードで運転を行い、バンチ中で電子が進行方向に振動することを抑えました。また、時間応答の速い半導体検出器を用いて、周回毎の信号を切り分けて測定を行いました。その結果、ペータトロン振動と呼ばれる横方向の振動と同じ周波数で、進行方向にも振動していることを観測し、シミュレーションによって裏付けることができました。この現象はすでに理論的に指摘されており、間接的な実測結果もありましたが、直接観測に成功したのは初めてでした。

このような成果を出すことができたのは、UVSOR加藤政博教授、名古屋大学保坂将人准教授のご指導と多くの共同研究者のお陰と深く感謝していま



島田美帆（しまだ・みほ）

2001年3月に筑波大学工学研究科で博士（工学）を取得し、生体計測に関わる研究を行っていた。2004年に研究分野を変更し、高エネルギー加速器研究機構・非常勤講師COE、分子科学研究所・非常勤研究員、高エネルギー加速器研究機構・博士研究員を経て、2010年4月より高エネルギー加速器研究機構・助教。

す。また、同時に受賞したテーマ「コヒーレント放射光による逆コンプトン散乱」は分子研を出た後に提案したのですが、UVSORでの経験があったことが土台になったものと確信しております。今後もこの受賞を励みに加速器科学の発展に貢献していきたいと思っています。





## 分子研を去るにあたり

全 炳俊

京都大学エネルギー理工学研究所量子放射エネルギー研究分野 助教  
(前 極端紫外光研究施設電子ビーム制御研究部門 助教)

## 分子研での研究生活を振り返って

ぜん・へいしゅん／2004年京都大学工学部卒業、2009年京都大学エネルギー科学研究科博士課程修了、  
博士（エネルギー） 同年分子研助教、2011年7月より現職

分子研に採用以前は、加速器の中でもリング型のUVSORとは少し異なる直線型の加速器を扱っており、また、採用関連の書類も締め切り間際に提出した事もあり、『やっぱり、採用されないかな……』と思いつつ、2008年12月の寒い風の強い日に行われた採用面接後、研究棟前の階段をトボトボと下りた事が今でも鮮明に思い出されます。

無事に採用されたらされたで、当初は『果たして私とほぼ同年齢の放射光リングUVSORにこれ以上、新しい課題があるのか?』、『採用されたのは良いが、自分が何かの役に立つ事ができるだろうか?』と不安を抱えておりましたが、UVSOR光源加速器グループの加藤先生・阿達先生・山崎さん・林さんのご指導・ご支援により、徐々にではありますが自分で仕事を見つける事ができるようになり、その仕事を通

してUVSORをより良いものにする事に微力ではありますが貢献できたのではないかと思います。

また、分子研採用以前は博士学生であり、純粋に加速器・自由電子レーザーの開発を行っていたのですが、分子研採用後は主に所内ユーザーの皆さんとではありますが交流を持ち、ユーザーの指摘により加速器は更により良いものになっていくのだという事を学ぶ事ができました。

現在は母校である京都大学に異動し、博士学生時代に開発していた自由電子レーザー装置のユーザー利用に向け、日々、不安定な加速器と格闘しながら、学生さん達の若さを吸い取りながら研究活動に励んでいます。UVSORのように加速器駆動光源をユーザーに『喜んで』使ってもらえるようなレベルまで洗練していくのは非常に難しく、道

は険しいですが、将来ユーザーの皆さんの喜ぶ顔を見られるよう、日々、汗を流しています。

一方では、分子研UVSORの共同研究者として、自由電子レーザー相互作用や電子ビームからのコヒーレント放射の研究を行う事を予定しております。ですので、稀に分子研に出没します。見かけた際にはお声掛け頂ければ幸いです。

最後になりましたが、前UVSOR施設長の小杉研究総主幹、現施設長の加藤先生、UVSORの木村先生、繁政先生、助教の皆様、技術職員の皆様、秘書の萩原さん、ユーザーの皆様には2年3ヶ月という短い期間でしたが、大変お世話になりました。本当にありがとうございました。また、多岐に渡り今後ともお世話になります。どうぞよろしくお願い致します。



## Impressions of my stay in IMS last year

MUKHERJEE, Debashis

Indian Association for the Cultivation of Science

I spent three wonderful months (September–November, 2011) in IMS Okazaki, collaborating with Professor Masahiro Ehara of the Computational Chemistry Division. The intellectual stimulus generated by my continuous interactions with him and his colleagues, notably Professor Yanai has been deep and pervasive, which I will cherish forever. Professor Nagase had been a very pleasant company too. My stay was further enriched by the visit of other scientists from abroad, and the international meetings organized by IMS. I enjoyed the chat over lunch sessions, daily post-lunch and afternoon coffee with Masahiro and sharing chocolates with his students. The students were very kind and friendly, though sometimes communication had been a bit of a problem. The secretaries and the staff were invariably helpful and very kind.

I have been in IMS several times before, but my last visit had been the longest. The international character of IMS has been less apparent to me this time. Perhaps the colleagues may think of invit-

ing more scientists from abroad? The international character of an Institute like IMS had been a great strength and perhaps this can be kept in mind? This has a synergistic effect, whose benefit we are all aware of.

A special trait, which impressed me very deeply, is the ambiance of easy informality which permeates all the strata of the people of IMS. I want to believe that this is a quality intrinsic to the culture of IMS, which does not depend on the closeness of relations with the visitor. I had known Masahiro and Takeshi for years, but the colleagues I met for the first time had all been very informal and approachable—altogether a very memorable experience. Last, but certainly not the least, my stay in IMS was made all the more enjoyable by the care and concern of the Director General Professor Ohmine—an old friend of mine—who took personal interest in my welfare and took time out to show me around.



NEW STAFF

## 新人自己紹介

## 塚 本 寿 夫

つかもと・ひさお

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



2011年の7月1日にアメリカのOregon Health and Science Universityから分子研に異動しました。これまで蛍光標識や生化学的な手法を用いて、動物の光受容タンパク質ロドプシンの機能発現メカニズムを解析してきました。これからは、古谷先生・木村先生と共同して赤外分光などを組み合わせて膜タンパク質の解析を進めていきたいと思いません。よろしくお願い致します。

## 大 東 琢 治

おおひがし・たくじ

極端紫外光研究施設  
電子ビーム制御研究部門 助教



筑波大学で学位取得後、東北大学、SPRING-8、立命館大学を経て、8月より分子研UVSORの助教として着任致しました。X線顕微鏡開発を礎に、広い視野を以て研究に臨みたいと思います。

宜しくお願い致します。

## 近 藤 美 欧

こんどう・みおう

生命・錯体分子科学研究領域  
錯体物性研究部門 助教



東京大学大学院理学系研究科にて学位取得後、日本学術振興会特別研究員、JST ERATO 北川統合細孔プロジェクト博士研究員を経て、2011年8月1日付で分子研正岡グループの助教に着任いたしました。学生時代から錯体化学を専門として研究を行ってきました。現在は、金属錯体を利用した触媒開発という今までとは少し異なる分野で研究を始めたところです。まだまだ勉強しなければならないことは多いですが、毎日楽しく研究をしています。どうぞよろしくお願いいたします。

## 藤 澤 敏 孝

ふじさわ・としか

生命・錯体分子科学研究領域  
生体分子情報研究部門 総研大・客員教授



2007年に三島の遺伝学研究所を定年退職し、その後2年間ハイデルベルク大学で客員、帰国後基生研の小林研究室で特別協力研究員をしました。思いがけず、本年9月1日から総研大の「統合生命科学教育プログラム」のプログラム長として、本務先は分子研で勤務することになりました。何とかして本プログラムを意義のあるものにしたいと考えておりますが、皆様のご協力なしには不可能ですので、ご協力、ご提言をよろしくお願い申し上げます。

## 矢 崎 稔 子

やさき・としこ

生命・錯体分子科学研究領域  
生体分子機能研究部門 技術支援員



4年ぶりに分子研に戻って参りました。10月にスタートした「統合生命科学教育プログラム」の遠隔講義配信を担当しております。新人としてドキドキしながら新しい仕事に向き合う一方で、懐かしい顔に再会して里帰りした気分になることも……。

岡崎から発信した授業が、全国の総研大生のビッグな研究のヒントとなってくれることを願いつつ、自分も少しでも学生気分を味わいながら、管理画面を見守る毎日です。



## 共同利用研究ハイライト

## 共同研究について

富永 圭介 神戸大学分子フォトサイエンス研究センター教授、同大学院理学研究科化学専攻兼務

我々のグループは、分子研の斉藤研究室とは長年にわたり、溶液中における動的挙動や局所構造、分子間相互作用に関する共同研究を行ってきた。我々のグループが実験を、斉藤グループに理論および計算を、それぞれ、担当し、様々な形で議論を通じて共同研究を行っている。ここでは、最近の斉藤研究室との共同研究の成果について報告する。

最近、研究テーマを水と水溶液にテーマを絞り、水の特異性の発現の源である、局所構造の形成とその揺らぎについての実験、理論の研究を展開している。また、そのダイナミクスが溶質の電子状態や振動状態に及ぼす影響や、さらに、タンパク質等の生体高分子の揺らぎや機能発現における水と水の役割にも興味を持ち共同研究を行っている。水溶液中における溶質分子と水の相互作用に関する研究については、最近、赤外領域の短パルスを用いた非線形分光の実験的、理論的研究を実施している (*J. Chem. Phys.* **133**, 014505 (2010).)。以下、この論文を紹介する。重水中のアジ化物イオンの $\text{N}_3^-$ の反対称伸縮振動をプローブの振動モードとして、この振動モードの分布緩和や回転緩和をポンププローブ分光で、遷移振動数の揺らぎの時間相関関数を3-パルスフォトンエコーで調べている。

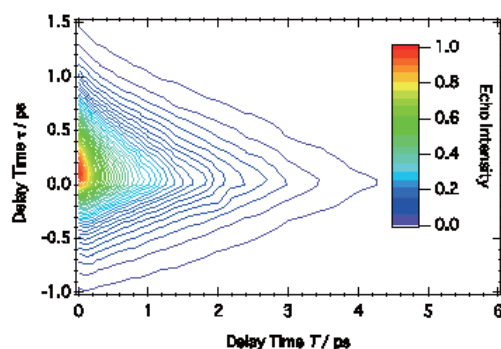
溶液中では、溶質の振動モードは周囲に存在する溶媒分子による影響を敏感に反映し、振動バンドの線形やピーク位置が変化する。すなわち、溶質分子の振動スペクトルの線形には系に存在する微視的な情報、例えば、溶

質-溶媒相互作用や溶媒分子の動的挙動、溶媒の局所構造等、が含まれている。本研究では、水溶液中における溶質分子( $\text{N}_3^-$ )の振動数揺らぎに対する温度変化と同位体効果( $\text{H}_2\text{O}$ と $\text{D}_2\text{O}$ の違い)を調べ、揺らぎに対する機構の研究を行なった。その結果を電子状態の揺らぎの相関関数に相当する、蛍光の動的ストークスシフトの応答関数と比較した。電子状態の揺らぎは溶媒との誘電的な相互作用で記述することができる。振動状態の揺らぎの時間相関関数は、時定数が数十フェムト秒と1~2ピコ秒の二つの指数関数の和で表現することができることがわかり、このピコ秒成分は電子状態の揺らぎの相関関数と同程度である。一方、今回の実験から振動モードの振動数揺らぎは、軽水と重水を溶媒とした場合、それほど大きな変化はなく、電子状態の場合と異なる結果を示した。また、温度変化では、電子状態の場合、揺らぎの時定数は水のデバイ緩和時間で決まるため、大幅に変化するが、振動状態の場合はそれほど大きな変化は示さなかった。また、以前からの研究から遷移振動数の揺らぎの振幅は溶質、溶媒に依存するが、時定数は溶質を変化させても変わらないという結果を得ている。以上のことから、振動状態と電子状態の揺らぎでは、見かけの時定数は同程度だが、ダイナミクスを支配する分子運動が異なり、振動状態では誘電的な相互作用ではなく、溶質から近距離の相互作用が重要であ

ることを示し、振動数揺らぎに関する理論モデルを提唱し示した。現在、この研究は振動数揺らぎを分子動力学計算の立場から説明することを目指している。

また、以上の共同研究のほかに、無極性溶媒中における水素結合性錯体の分子間振動をテラヘルツ時間領域分光で観測し、多モードブラウン振動子モデルで解析した研究 (*Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 14742 (2011)) や、ポリペプチドのテラヘルツ領域のスペクトルの水和依存性、温度依存性を調べ、ポリペプチドの低振動モードの熱活性と水と水の役割、また二次構造による違いを議論した仕事 (*Soft. Matter*, in press)、アルコール中における溶質分子の振動緩和の溶媒-溶質間の水素結合が及ぼす影響を分子動力学および赤外ポンププローブ分光から調べた研究などを実施している。

最後に共同研究について一言。分子研が大学共同利用機関法人である以上、共同研究実施は分子研の大きな特徴であり、また使命の一つでもある。ただ、あまり多くの共同研究を抱え込めば、



重水中におけるアジ化物イオンの3-パルスフォトンエコー信号

本来その研究室が力をいれるべき研究の進展に支障がでるであろう。自分たちの研究のベクトルと方向性が、だいたいにおいて整合している、そういった共同研究の実施が理想的である。我々の共同研究では学生をできるだけ参加させるようにしている。大学院生が複数の研究グループで研究に従事できることは教育効果が高いと考えている。ただ、いきなり多くのことをやれば地に足が着かなくなってしまうので、ある程度、こちらの研究が軌道に乗った学生を参加させるようにしている。齊

藤先生やグループの方に、懇切丁寧に理論、計算の指導を受けた学生、若手研究者はたくさんおり、この場を借りてお礼を申し上げたい。分子研の共同研究では学生を参加させることができるため、教育的な効果もはなはだ大きいと感じている。ただ、こういったことは、外部評価などのときになかなか数字となっておもてに現れてこない。



とみなが・けいすけ

平成2年 京都大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了（理学博士）、平成元年 米国ミネソタ大学化学教室 Research Scholar、および博士研究員、平成4年 分子科学研究所助手、平成10年 神戸大学理学部化学学科助教授、平成13年 神戸大学分子フォトサイエンス研究センター教授（現在に至る）。平成20年4月から22年3月まで分子科学研究所客員教授。

## 共同利用研究ハイライト

# 宇宙におけるアミノ酸ホモキラリティの起源 ——円偏光放射光を用いた実験的研究——

小林 憲正 横浜国立大学大学院工学研究院 教授

## 1. はじめに

生命の起源は宇宙の起源などと並ぶ、人類に遺された最大の謎である。生命は、一般に40億年前頃の地球の海で、物質の進化（化学進化）の末に誕生したのではないかとされている。生命の誕生のためにはアミノ酸などの生体分子が無生物的に生成し、原始の海に供給されなければならない。1953年の「ミラーの実験」<sup>[1]</sup>などの結果から、当初は原始大気中で、放電などのエネルギーによりアミノ酸が生成したのではないかと推定されてきた。

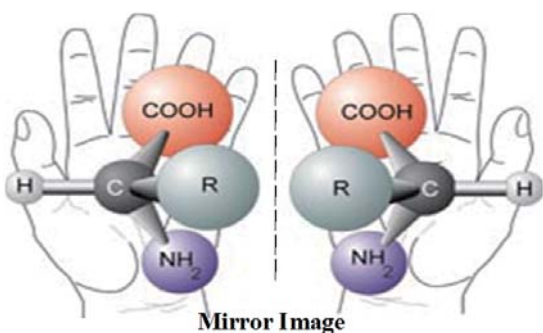


図1 L-アミノ酸（左）とD-アミノ酸（右）。

しかし、原始大気中でのアミノ酸の生成に関して、2つの問題が生じてきた。ひとつは、原始大気がミラーの実験で使われたような、CH<sub>4</sub>やNH<sub>3</sub>を多く含むようなものではなく、CO<sub>2</sub>やN<sub>2</sub>を主とするようなものとするモデルが主流になってきたことである。このような大気からは、アミノ酸などの生体分子の生成が格段に難しくなる。

第二は、アミノ酸を無生物的に合成しようとする、生じるアミノ酸はラセミ体になってしまうことである。グリシンなどの一部を除き、アミノ酸には、鏡像異性体—いわゆる左手型（L体）と右手型（D体）—が存在する（図1）。両者の化学的性質はほとんど同じであるが、地球生命は基本的にL体のアミノ

酸を好んで用いている。どのようにして、L-アミノ酸が選択されたかというのは、生命の起源研究の中でも大きな謎であった。

## 2. ホモキラリティ起源の諸説

いきなり、L-アミノ酸のみが生じたというのは考えにくい。そこで、ホモキラリティーが生じるには、まず、L-アミノ酸のD-アミノ酸に対する小さな偏り（過剰）が生じ、それが増幅されたという考え方が主流となる。この最初の偏りのでき方としては、偶然説から必然説まで様々なアイディアが提唱されてきた。完全な偶然説は、統計的なゆらぎに起因するものである。それに対し、偏りを生む、物理的な作用としては、まず、地球内説、地球外説に分類できる。地球内説は、非対称な鉱物表面への選択的な吸着によるとする説や、選択的結晶化説、地球の磁場に

由来する磁気キラル二色性由来説などがある。一方、地球外に起因するものとしては、中性子星などからの円偏光紫外線や、超新星爆発時の大線量 $\beta$ 線(左偏極電子線)による不斉分解が注目されてきた。さらに、パリティ非保存に基づく、光学異性体間の固有エネルギーの差により、L-アミノ酸がD-アミノ酸よりも絶対的に安定であることに基づく内因説も議論されてきた。

### 3. 宇宙にホモキラリティの種を求める

炭素質隕石に多種類のアミノ酸をはじめ、種々の生体関連有機物が存在することが20世紀後半より確認され、さらにStardust探査機により持ち帰られた彗星ダストにもアミノ酸が検出された。これらの有機物の生成機構には諸説があるが、有力なものとしては、分子雲中で星間塵のまわりに凍り付いた分子( $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{CO}$ 、 $\text{NH}_3$ 、 $\text{CH}_3\text{OH}$ など)に宇宙線や紫外線があたり、そこで生成したというものである。実際に、これらの分子の混合物を凍結したものに高エネルギー陽子線を照射すると、アミノ酸(前駆体)が生成することが確かめられた<sup>[2]</sup>。これらの結果は、原始地球大気中での有機物生成が困難であった場合、宇宙からの有機物供給が重要であることを示唆する。ただし、隕石中のアミノ酸はラセミ体であり、ホモキラリティの起源の問題は残ってしまう。

1997年、Croninらは、炭素質隕石のひとつ、マーチソン隕石中のアミノ酸がL体優位であることを報告した<sup>[3]</sup>。それ以前にも隕石中のアミノ酸のL体過剰は報告されていたが、それらは地球上での生物由来のアミノ酸の混入の結果とみなされていた。Croninらの報告では、アラニンやバリンなどのタンパク質アミノ酸が完全なラセミ体であるのに対し、イソバリンなどの $\alpha$ -水素を持たないアミノ酸(非タンパク質ア

ミノ酸なので、地上での混入はほとんど考えられない)に高いL-体の過剰が見られたところに特徴がある。

また、円偏光源に関しても新たな知見が得られた。2010年、国立天文台の福江らは、大質量星形成領域周辺において、赤外線円偏光領域が太陽系の400倍もの広さで広がっていることを観測した<sup>[4]</sup>。中性子星モデルでは、太陽系が中性子の極方向に位置した場合に限って大量の円偏光を浴びることができるが、今回の結果は、原始太陽系がこのような円偏光領域にどっぷりとつかっていた可能性を示唆するものである。

以上の知見から、次のような生命の起源へのシナリオを描くことができる。分子雲でアミノ酸(前駆体)などの有機物が生成する。これに星間の円偏光の作用によりL-アミノ酸の過剰が生じる。これらは太陽系生成時に隕石母天体や彗星に取り込まれ、やがて地球に運び込まれる。原始海洋中で、このエナンチオ過剰は、“Soai反応”(エナンチオ過剰を増幅するような自己触媒反応)<sup>[5]</sup>により増幅され、ほぼL体のみとなる。このようにしてできたホモキラルなアミノ酸(や糖)を用いて生命が誕生した。

### 4. UVSORでの円偏光紫外線照射実験

上記のシナリオにも、まだまだ問題は多い。円偏光によるエナンチオ過剰創生は、アミノ酸エナンチオマーの一方が他方よりも円偏光を強く吸収して分解するためといわれている。しかし、アミノ酸のCDスペクトルは、全波長範囲で積分すると0になるため、どの波長領域の円偏光が当たるかが問題となる。また、光分解により十分なエナンチオ過剰を生むためには、大部分のアミノ酸を分解しなければならない。また、隕石中でのエナンチオ過剰を有

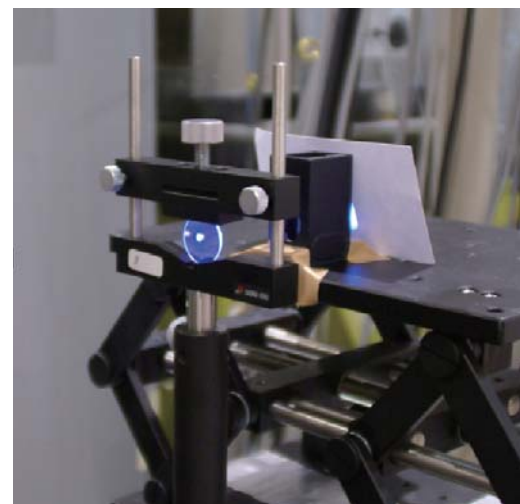


図2 アミノ酸薄膜への円偏光紫外線照射。(UVSOR II 自由電子レーザー使用)

しているのは、イソバリンのような非タンパク質アミノ酸である。

われわれは、これらの問題を検証するため、シンクロトロンからの円偏光を用いる研究を開始した。まず、UVSORで実験を行う前に、アミノ酸そのものではなく、模擬星間物質から陽子線照射により合成した「アミノ酸前駆体」にシンクロトロン(NTT)からの円偏光紫外線を照射することにより、アミノ酸のエナンチオ過剰が生じることを見いだしたが、この場合、照射によるアミノ酸(前駆体)の分解はほとんど起きておらず、前駆体の構造変成が起きたことが示唆された<sup>[6]</sup>。

われわれは、強力な円偏光光源を求めて、分子科学研究所UVSOR IIの自由電子レーザー(FEL)を用いた、アミノ酸やアミノ酸前駆体への円偏光紫外線照射を開始した(図2)。試料としては、イソバリンなどの水溶液や薄膜を用いた。主として215 nmの単色円偏光を用いているが、水溶液への照射により、pHなどの条件によってはエナンチオ過剰が生じることを見出すことに成功した。また、薄膜への左右円偏光照射により、Cotton極大符号が逆転する対称なCDスペクトルが得られ、



分解のみではない、構造・状態変化による光学活性発現が示唆された（図3）。

## 5. 今後の課題

星間に存在するのは、遊離アミノ酸よりはむしろアミノ酸前駆体であると予想される<sup>[8]</sup>。そこで、遊離アミノ酸の他に、アミノ酸前駆体をターゲットとした実験を行っていく予定である。例えば、5-エチル-5-メチルヒダントイン（図4；イソバリン前駆体）や、模擬星間物質や模擬惑星大気への粒子線

照射や紫外線照射により生じる複雑態アミノ酸前駆体をターゲットとした照射を行い、アミノ酸のエナンチオ過剰の定量や、CDスペクトル測定を試みていく予定である。

また、照射する円偏光の波長を様々に変えた実験、特に、UVSORでの円偏光軟X線の照射や、UVSORで現在開発中の円偏光γ線・偏極電子線の利用などにトライしたい。さらに、自己触媒反応を利用した、ごく微小なエナンチオ過剰の検出法にも挑戦していきたい

と考えている。

本研究（課題番号21-225, 22-225）を行うにあたり、BL-5Uご担当の加藤政博教授、阿達正浩博士、全炳俊博士、および保坂将人博士（名古屋大学）に多大なるお世話になった。また、本研究は、高橋淳一博士（NTT）、三田肇教授（福岡工業大）、金子竹男氏（横浜国立大学）、P. K. Sarker氏ほかの小林研究室の学生諸氏との共同によるものである。篤く感謝する。

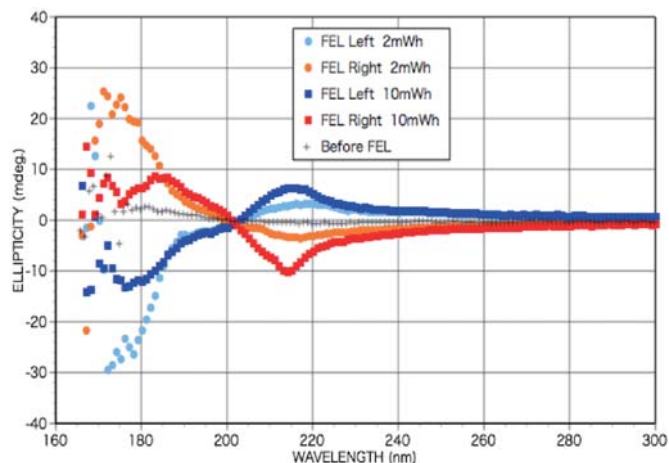


図3 DL-アラニン薄膜への左右円偏光紫外線（215 nm）照射後のCDスペクトル。

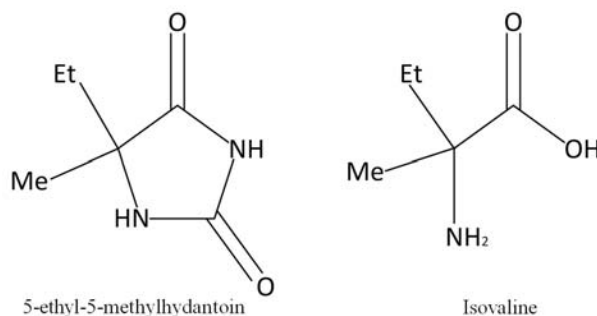


図4 イソバリン（右）とその前駆体、5-エチル-5-メチルヒダントイン（左）。

## 参考文献

- [1] S. L. Miller, *Science* **117**, 528 (1953).
- [2] K. Kasamatsu *et al.*, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **70**, 1021 (1997).
- [3] J. R. Cronin and S. Pizzarello, *Science* **275**, 951 (1997).
- [4] T. Fukue *et al.*, *Origins Life Evol. Biosph.* **40**, 335 (2010).
- [5] K. Soai *et al.*, *Nature* **378**, 767 (1995).
- [6] Y. Takano *et al.*, *Earth Planet. Sci. Lett.* **254**, 106 (2007).
- [7] J. Takahashi *et al.*, *Int. J. Mol. Sci.* **10**, 3044 (2009).
- [8] K. Kobayashi *et al.*, *Astrobiology: from Simple Molecules to Primitive Life*, ed. by V. Basiuk, American Scientific Publishers, Valencia, CA (2010), pp. 175-186.



こばやし・けんせい

1954年岡崎生まれ。1982年東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程修了、理学博士。1982-86年、米国メリーランド大学化学進化研究所研究員。横浜国立大学工学部講師などを経て、2003年より現職。専門は分析化学とアストロバイオロジーで、現在の研究テーマは生体関連有機物の前生物合成や極限環境の生命検出法など。著書は「アストロバイオロジー 宇宙が語る生命の起源」（岩波書店）など。

太陽光発電を初めとした新エネルギー源の開発は、エネルギー資源の乏しい日本のエネルギー安定供給の確保に加え、地球温暖化と関係するとされる二酸化炭素ガス排出量の削減、新たな雇用の創出など、いろいろな側面で大きな意義を持っている。日本では、2020年度における太陽光発電によるエネルギー供給量を、2002年度の約50倍である2,300-3,500万kWに増加させることを目標とし、積極的な研究開発を推進している。すでに、Si系太陽電池が普及し、その一翼を担ってきたが、近年、Cu(InGa)Se<sub>2</sub>(CIGS)系太陽電池が実用化され、最大変換効率は20%を超えている。一方、有機半導体から構成される有機太陽電池は、1992年にHiramotoらによって考案されたBulk-hetero構造 (Appl. Phys. Lett., 72(1992), 3781) が、それまでlayer-by-layer構造に替わる主要構造となつて以降、着実に変換効率は向上し、近年は10%を超え、SiやCIGS系などの無機系太陽電池に比肩しうるレベルに到達しつつある。

一方、有機半導体と無機半導体から構成されるヘテロ界面では、有機半導体/有機半導体ヘテロ界面よりも大きな内蔵電界、無機半導体の大きな誘電率から形成される効果などへの期待から、ハイブリッド型ダイオードならびに太陽電池に関する研究が活発になっている。有機太陽電池の外部透明電極には、酸化物系無機半導体層が一般的に用いられていることから、有機太陽電池においても有機半導体と無機半導体とのヘテロ界面が存在している。無機半導体では、その原子配列が

電氣的・光学的性質と密接に関係するが、ハイブリッド太陽電池などの有機半導体/無機半導体ヘテロ界面の性質も、界面での配列と関係すると考えるのは妥当であろう。有機太陽電池の構成層として用いられているフラーレンやフタロシアニンなどは、製膜条件や基板の条件を制御した環境下で、結晶性分子膜として得られることが報告され、製膜条件などによって配向も変化することが予想できる。

本稿では、有機半導体としてフラーレン、無機半導体としてバンドギャップ2.1eVのp型半導体亜酸化銅 (Cu<sub>2</sub>O) を用いて構成されたハイブリッドダイオードの形成ならびにその電氣的性質と構造の相関に関して、分子科学研究所教授平本昌宏先生と行った「高効率有機・無機ハイブリッド太陽電池に関する研究」を通して得られた最近の結果を概説する。Cu<sub>2</sub>O層は、(111)配向Au層をスパッタリング法により形成したSiウエファ基板上に電気化学的に形成し、(111)配向を有し、ホール効果測定により測定した移動度は $21\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ である。フラーレン層は、抵抗加熱式真空蒸着装置によりCu<sub>2</sub>O層上に堆積させることによって、形成した。

製膜速度が $0.25\text{-}1.0\text{ \AA/s}$ では、フラーレン分子が面心立方配列した結晶層が得られ、格子定数は $14.19\text{ \AA}$ であった。製膜速度 $1.0\text{ \AA/s}$ ではほぼランダム配向であったが、製膜速度が小さくなるに伴い(111)配向が強くなった。このような分子配列の変化は、光吸収特性や抵抗率などの光学的・電氣的性質に対しても影響をおよぼしていた。図1に、形成したBCP/

フラーレン/Cu<sub>2</sub>O/Au/Si積層体の断面SEM像と原子・分子配列の模式図を示す。Cu<sub>2</sub>OとAuの間には(1x1)(111)[110]Cu<sub>2</sub>O/(1x1)(111)[110]Auの関係があるが、さらに、製膜速度が小さい場合には、fcc-フラーレン分子層の(111)面が平行となる。Cu<sub>2</sub>OやAuなどのfcc配列する無機材料では、(111)面の表面エネルギーが最も小さいことから、(111)配向膜は平衡に近い環境下で観測でき、平衡からずれることによって他の結晶面の成長が促進されランダム化する。製膜速度の低下に伴うfcc-フラーレン層の(111)配向化の傾向は、Cu<sub>2</sub>OやAuなどの立方晶構造を有する基板のみでなく、非晶質構造を有するガラス基板上においても観察できたが、製膜速度の増加に伴いランダム配向化し、さらにはfcc配列に基づく回折線の消失などの傾向も同様に観察された。形成したBCP/フラーレン/Cu<sub>2</sub>O/Au積層体は、いずれも整流性を示したが、理想係数や順方向電流密度の大きさなどのダイオード特性は、大きく変化した。Cu<sub>2</sub>Oの形成条件や性能、ダイオードの構造などは一定とし、フラーレンの製膜条件のみを変化させていることからダイオードの電氣的性質の変化はフラーレン層の配列の変化によるものである。理想係数は、理想的な拡散電流が主たる電流成分であれば1、再結合電流が主であれば2となり、両性分によって1と2の間の値をとる。理想係数は、フラーレンの製膜速度、すなわちfcc-フラーレンの分子配列によって大きく変化するが、最も小さい製膜速度において約1の理想係数を示

した。この値の持つ物理的な意味については、さらに考察を重ねる必要があるが、(111)配向-fcc-フラーレン層によって得られたこと、そしてランダム配向化に伴い理想係数は増加し、2を大きく超えたことは注目すべきことである。また、本共同研究を通じて、無機半導体/有機半導体ヘテロ接合体の整流性や太陽電池特性が、i層として働く半導体層を導入することによって大きく変化することも明らかになっている。

本研究を遂行するに辺り、設備を使用させて頂くと共に、活発な討論をして頂きました平本昌宏先生ならびに研究室の方々に厚く御礼申し上げます。

文献：M. Izaki, T. Saito, T. Ohata, K. Murata, B. M. Fariza, J. Sasano, S. Watase, M. Hiramoto, Hybrid Cu<sub>2</sub>O diode with orientation-controlled C<sub>60</sub> polycrystal, *Chem. Mater.*, submitted.

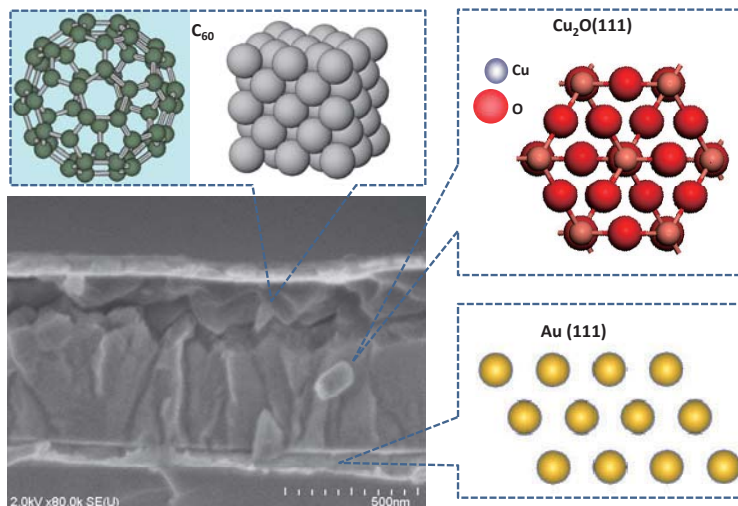


図1



いざき・まさのぶ  
2008年10月より現職。研究テーマは、ソフト溶液プロセスによる半導体・強磁性体酸化物膜の形成と太陽電池などの半導体素子への展開。

## 共同利用研究ハイライト

# 若手研究会等 「分子科学夏の学校の講義内容検討会」報告

赤瀬 大 広島大学大学院理学研究科化学専攻 博士課程後期2年

平成23年度共同利用研究（前期）「若手研究会等」の支援を受け、「分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」を開催させていただきました。ここでは、検討会について報告するとともに、それに関連する分子科学若手の会夏の学校の様子や分子科学若手の会の近況について紹介させていただきます。

分子科学若手の会は、分子科学の全分野から広く若手が集まった分子科学の分野では唯一の若手の会です。若手の会は大学院生が主体となって運営し、毎年8月に分子科学若手の会夏の学校（以下、夏の学校）を開催しています。

夏の学校は、各分野を専門とする講師

の先生から直接その分野の基礎から最先端の研究まで講義形式で学ぶことができる分科会をメインに、講師の先生による全体講演、参加者が自身の研究内容を発表するポスターセッションなどをプログラムしています。分子科学若手の会は公に特定の学会、研究機関に属しているわけではありませんが、1961年から続いているこの夏の学校の開催にはこれまでも分子研からの援助および分子研関係者の方々からも講師を引き受けていただくなどのご協力をいただけてきました。また、分子科学会の若手支援事業からも、事業が始まった2009年度より支援をいただいています。本年度も、分子研の共

同研究プログラムに採択されたおかげで、第51回目の夏の学校を開催することができました。

7月9日に「分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」を開催しました。参加者は分科会の講師の先生方、分科会の担当者である学生、および他の若手の会の学生ら計13名となりました。本年度は、都合により分科会の数が減少したために例年より参加者が減少しました。検討会では、講師の先生が書かれたテキストの内容についての議論がおこなわれ、また、夏の学校での講義の形式や進め方などの詳細が詰められました。検討会自体が大変充実した



ものになったばかりでなり、続く夏の学校を円滑に進めるためにも有意義な検討会になりました。また、広い分子科学の分野でなかなか交流できない学生が分子研で集まったことで良い刺激を受けました。今回の検討会は日帰りということもあり3時間あまりで終了しましたが、数少ない機会なのでもう少しプログラムがあっても良いと感じました。来年度以降の課題にしたいと思います。

夏の学校は、8月22日から26日にわたって京都府立ゼミナールハウスで開催されました。分科会の数の減少により参加人数の減少が懸念されましたが、前年度(57名)を上回る61名の参加者を集めました。

分科会では、京都大学の安藤耕司先生に「分子多体系における量子移動過程の理論とシミュレーション」(第一分科会)、京都大学の加藤立久先生と分子研の古川貢先生に「高スピンを観る」(第二分科会)、名古屋大学の山本史典先生に「振動解析再入門」(第三分科会)というタイトルでそれぞれ講義をしていただきました。さらに、講師の先生方

には全体講演で自身の研究内容についての講演もしていただき大変盛況でした。ポスターセッションでは学生から37件の発表があり、本年度は1件あたり2回の発表の機会を設けたことで活発な議論がおこなわれ、学生間の交流を深めることができました。

分子科学若手の会では、残念ながら久しく夏の学校が唯一の定常的な活動となっています。これは、昨年の分子研レターズ63の36ページの共同利用研究ハイライトでも少し触れられているように事務局を担当している学生が年度ごとに全員入れ替わってしまうことが一つの大きな要因でした。そのため、昨年度から事務局のメンバーが2年目も新しい事務局のメンバーの補佐をする体制に変更しています。これにより新体制への引継ぎが円滑に進むとともに、若手の会として新たな活動を始めやすくなりました。

一つの試みとして今回の夏の学校では、参加者に若手の会企画の研究会の開催についてアンケートを取りました。アンケートの結果、4分の3の学生が「研究会があれば参加したい」と思っている



ことがわかりました。分子科学若手の会では現在、研究会の開催を前向きに検討しているところです。研究会を開催するとしたら「若手研究会等」に申請して分子研で開催できればと考えていますので、今後も引き続き分子研および皆さまのご理解とご支援をよろしくお願いします。

また、夏の学校の50年を記念して、過去の夏の学校に学生として、また講師として参加された方々からの寄稿をいただき、「分子科学若手の会夏の学校50周年記念文集」の制作を行なっています。この文集の制作にも分子研のご協力をいただけることになり、非常に感謝しております。今年度内の完成を予定しておりますので、機会があればご覧いただけると幸いです。



集合写真

## 施設だより

## UVSOR 第二期高度化計画の進捗状況(2011年度)

UVSOR 施設長 加藤 政博

極端紫外光研究施設 (UVSOR) の光源加速器やビームラインは、1983年の稼働開始以降も断続的に高度化を続けてきました。特に2000年代前半には施設の老朽化の進行、国内外での最新装置の建設ラッシュに対応して、大幅な高度化を実施しました。このときの高度化を節目として、施設の呼称をUVSOR-IIと改めました。光源性能の観点からこの改造の狙いを一言でいえば、「高輝度放射光の発生」、ということになります。それまでの偏向磁石からの白色放射光の利用から、アンジュレータからの高輝度準単色光の利用に大きく重心を移しました。

それから既に10年近くが経過しましたが、放射光の利用の拡大、技術の進歩、国内外での最新施設の建設は続いています。最先端の放射光利用研究が可能な施設であり続けるために、更なる高度化計画を立案しました。放射光強度の安定性を飛躍的に高めるトップアップ運転法の導入、アンジュレータ増設のための新たな直線部の創出、放射光の輝度を一段と高めるための電子蓄積リングの増強、光源の高輝度特性を活かした軟X線アン

ジュレータの増設と顕微分光ビームラインの建設がその柱です。これにより、ナノメートルの空間分解能を持つ軟X線走査型顕微鏡が国内で初めて実現されることとなります。

この高度化計画のうち、トップアップ運転は自助努力で既に実現され、昨年度よりユーザー利用運転に導入されています。一方、新たな直線部の創出は文部科学省の量子ビーム基盤技術開発プログラムの中で実現されることになりました。また、それ以外の部分も平成22年度の補正予算により実現されることになりました。

以下では今年度(2011年度)に行われた改造作業について報告します。昨年度に入射路を移設することで創出された新しい直線部には2台のアンジュレータが設置されました(図1)。これらはレーザーを用いたコヒーレント放射光発生に用いられます。また、直線部下流ではコヒーレント放射光取り出し用のビームラインの建設が進んでいます。このために既設の2本のビームライン(旧BL1A、BL1B)は他の場所へ移設されBL2A、BL3Bと改名

されました。BL2Aについては既に供用が再開されました。BL3Bについては、ビームライン全体をリニューアルし、この秋から供用が開始されました。

一方、来年春の改造に必要な機器の製作も進行しています。電子ビームを高輝度化するための複合機能型偏向磁石、より安定なトップアップ運転実現のためのパルス六極磁石、軟X線顕微鏡実現のための真空封止型軟X線アンジュレータ、顕微分光ビームライン各コンポーネントの製作が順調に進んでいます。来年4月より再び約3か月間運転を停止し、加速器の改造、新ビームラインの建設を行います。運転停止により、利用者の皆様にはご迷惑をおかけいたしますが、施設の更なる飛躍のための助走期間ということで、ご理解いただければ幸いです。これらの高度化を節目として、UVSOR-IIからUVSOR-IIIへと呼称を改めます。2013年には施設稼働後30周年を迎えますが、世界最高性能の低エネルギー放射光源として、今後も長く、我が国の基礎学術研究に貢献していきたいと考えております。

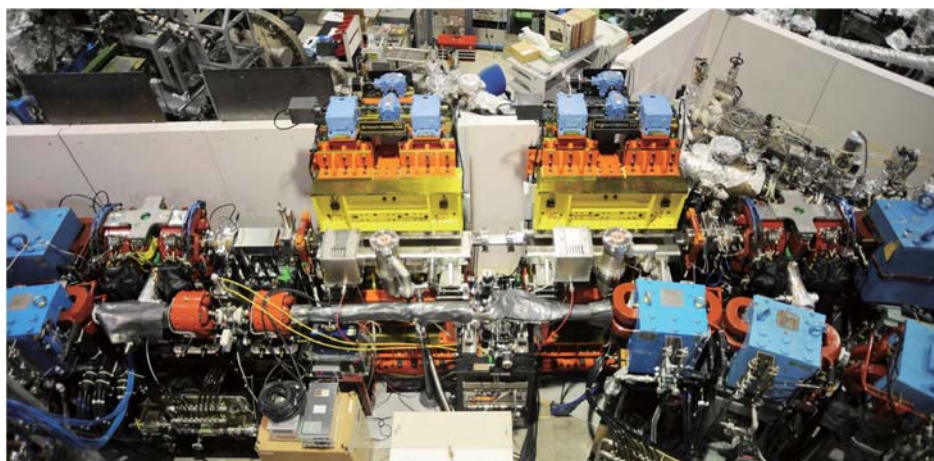


図1 2011年に新たに設置されたコヒーレント放射光発生専用アンジュレータ。



## 共同利用・共同研究に関わる各種お知らせ

### 装置開発室よりお知らせ

前室長の宇理須恒雄教授が退職され名古屋大学へ移られた後、2011年度から、私、加藤政博が室長を引き継ぐことになりました。これまで装置開発室の運営に深く関わる機会はありませんでしたので、今後いろいろと勉強しながら務めてまいりたいと思います。不慣れでご迷惑をおかけするようなこともあるかと思えます。ご指導のほどよろしくお願い申し上げます。

さて、装置開発室では、毎年一回、所内外の委員の先生方にお集まりいただき、運営委員会を開催しております。今年は、9月28日に、代理も含め14名の委員の先生方、また、小杉研究総主幹、装置開発室技術職員、事務センター担当職員など8名の参加を得て、開催いたしました。定例の状況報告、予算の審議などに引き続き、施設長が交代したこともあり、装置開発室の役割の再確認、運営体制の見直しについてご議論をお願いしましたが、様々な視点からの有益なご意見を頂戴することができました。

装置開発室の業務の基盤である依頼業務、すなわち、分子研内外からの装置の製作や開発の依頼に応える業務に加えて、装置開発室職員が技術力向上を目指して自主的に研究計画を立案し遂行するような研究開発を「将来技術開発プロジェクト」と位置付けて、今後、展開していきたい、ということを施設側から提案いたしました。これに対して、趣旨についてはご理解・ご賛同だけいただきました。その進め方について、「装置開発室で保有する技術をさらに伸ばしていく方向で考えていくべき」、「研究者との連携を重視し、研究ニーズに合ったものとするべき」などのご意見をいただきました。これらの意見を参考にしながら、技術職員の自主的な技術開発・技術力向上への意欲を後押しするための仕組みとして発展させていきたいと考えています。

分子研外部からの製作・開発依頼を受け入れる「施設利用」を平成17年度より分子研の共同利用の一環として開始しております。その目的は、装置開発室の技術力向上と共同利用機関として外部からの依頼に対応することでした。これまで年間10件弱程度を受け入れており、施設の活動の一部として定着して来てきました。今後も発展的に継続してゆきたいと考えておりますが、受け入れに際しての審査の在り方など、少し整理が必要な部分もありました。そこで、施設利用の在り方、受入れ方法などについてご議論をお願いいたしました。その結果、受入れの判断基準として、分子科学の発展への寄与、装置開発室の技術力向上への寄与、装置開発室の保有する技術の特徴を活かせること、の3点を考慮し、受入れに関する審査を行うこととなりました。

運営委員会は、所内外の装置開発室に対するご意見を頂戴する貴重な機会となっております。今後とも忌憚のないご意見を願います。

(装置開発室長 加藤 政博)

### 機器センターよりお知らせ

分子研の明大寺地区では、昨年度に実験棟の改修という大事業が行われました。その後、その他の建物も含めて部屋割りの見直しが行われ、より効率的な利用が行われるようになっています。機器センターでも、部屋割りと装置の配置を抜本的に見直しました。具体的には、1) 寒剤供給と物性計測関連設備 (ESR, SQUID) は極低温棟、2) ナノ秒レーザー関連はレーザーセンター棟1階、3) ピコ秒レーザーシステムは実験棟地下、4) X線回折や分光計測関連装置は南実験棟、という集約化を図りました。特に、南実験棟S101号室は、機器センター技術職員手作りのパーティションに区切られて、高感度蛍光分光光度計、可視紫外分光光度計、顕微ラマン分光装置、蛍光X線分析装置を整然と配置することができましたので、施設利用で訪れる所外の研究者の方々にも快適にご利用頂けるものと思います。今後、さらに南実験棟には所外利用者のための待合スペースも整備し、測定の合間の解析（ならびにしばしの休憩）等にご活用頂けるようにしたいと計画しています。機器センター所有の各設備に関しては、ホームページにて説明を行っております (<http://ic.ims.ac.jp/kiki.html>)。また、昨年末に発行した「機器センターだより」第4号にも、利用方法や設備紹介をまとめて記載してありますので、ご参考の上、有効にご利用頂ければと思います。

(機器センター長 大島 康裕)



高感度蛍光分光光度計



各装置はパーティションで区切られています。



共同利用研究の実施状況について

| 種 別            | 平成17年度 | 平成18年度 | 平成19年度 | 平成20年度 | 平成21年度 | 平成22年度 | 平成23年度<br>(12/1現在) |
|----------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------------------|
| 課題研究           | 1      | 1      | 2      | 2      | 1      | 0      | 1                  |
| 協力研究           | 96     | 84     | 91     | 90     | 119    | 122    | 107                |
| 分子研研究会         | 11     | 13     | 9      | 4      | 5      | 6      | 3                  |
| 若手研究会等         | —      | —      | —      | 1      | 1      | 1      | 1                  |
| 施設利用Ⅰ          | 43     | 41     | 59     | 72     | 60     | 66     | 90                 |
| 電子計算機利用(施設利用Ⅱ) | 132    | 142    | 144    | 147    | 171    | 170    | 179                |
| UVSOR 研究会      | 1      | 3      | 2      | 2      | 2      | 1      | 9                  |
| UVSOR 施設利用     | 126    | 113    | 146    | 156    | 147    | 140    | 135                |
| 計              | 420    | 403    | 452    | 474    | 506    | 506    | 525                |

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。

分子研研究会の実施状況について

| 開 催 日 時        | 研 究 会 名                      | 提 案 代 表 者    | 参加人数 |
|----------------|------------------------------|--------------|------|
| 平成23年6月28日～29日 | 第5回分子科学会シンポジウム               | 中井 浩巳（早稲田大学） | 73名  |
| 平成23年11月1日     | 実験と理論による高次分子システムの機能発現の分子論的理解 | 関谷 博（九州大学）   | 47名  |

若手研究会等の実施状況について

| 開 催 日 時   | 研 究 会 名              | 提 案 代 表 者  | 参加人数 |
|-----------|----------------------|------------|------|
| 平成23年7月9日 | 分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会 | 赤瀬 大（広島大学） | 13名  |

## 関連学協会等の動き

## 特定領域研究「高次系分子科学」の終了に向けて

藤井 正明 東京工業大学資源化学研究所

平成19年より23年度まで「分子高次機能解明のための分子科学—先端計測法の開拓による素過程的理解」(略称: 高次系分子科学)と題する科学研究費補助金・特定領域研究を、九州大学・関谷博先生、理化学研究所・田原太平先生、大阪大学・水谷泰久先生と共に推進しております。今年度いっぱいでは終了ですが、次年度には成果報告シンポジウムや終了評価が待っておりますので、まだ振り返る余裕はありません。残る力を振り絞ってゴールめがけて走っているという感覚です。ここまで無事に走り続けてこられたのは上記のコアメンバーの先生方を始めとする領域メンバーの皆様、そして国内外の評価委員の先生方(茅幸二先生、北川禎三先生、中村宏樹先生、浜口宏夫先生、増原宏先生、吉原経太郎先生)のご指導のおかげと深く感謝申し上げます。

名称に分子科学と題する特定領域を分子研の機関誌に紹介するのはおこがましい気も致しますが、私、田原先生、水谷先生は元分子研、そして関谷先生も運営協議員などで深く分子研と拘ってられておりますし、メンバーにも評価委員の先生方も多くの分子研関係者がおられますので、ある意味ではこの特定領域は分子研の産物と言っても良いかと思います。もちろん、同窓会の為に特定領域を行っている訳ではありません。この領域を立ち上げる時、コアメンバーが共有していたのは次世代の分子科学の方向性を拓きたい、という願いであり、また、分子科学の現状に対するうっすらとした閉塞感が

底辺に有ったと思います。分子科学の閉塞感は昨年の分子研レターズ62に田原先生が分析されておられますが、この世の中の大部分が分子であり、生物の様に極めて複雑な対象でも分子レベルでの議論が可能になって来ている状況を考えると、従来の枠から一步踏み出して行けばこんな閉塞感など一気に吹き飛ばす様な未来が拓けるはず、という田原理論は全くその通りだと思います。

もちろん、どのような方向に展開するか、が重要なのですが、我々は複雑系、それも巧妙に連動して機能する分子システムをターゲットとして想定しました。私たちが育って来た20世紀では直接複雑な系を取り扱う事が難しいので、まず理想的な状態、単純な状態の分子を主に研究して来たと思います。気相分光や超音速ジェット分光はその極限の一つで、生体の様な複雑な不均一系とは全く逆の極限だと思います。もちろん、これにより極低温孤立分子状態の様な、分子分光にとって理想的な状態での研究が可能になり、ベンゼン以上の化学的に興味ある分子に対して励起電子状態を含めて構造や反応を研究できる様になったのは極めて大きな進歩だと思います。一方、それだけシンプルな系に関して多くの知識を蓄積できるようになったのですから、今こそ元々知りたかった複雑な系に向かう時に思えたのです。特に最近では超分子や自己組織化といった、分子同士が自律的に組み上がって高度な機能を発揮する例が数多く報告されてきておりますし、生体を構成する分子はアロステリッ

ク効果の様に、複数の分子が巧妙に連動して極限的な機能を発揮していることが明らかになってきております。一方、複数の分子が上手に連動する現象が存在する事は明らかですが、なぜ、分子がそのような機能を発揮できるのか、という点について、納得のいくメカニズムを分子レベルで行った例はそれほど無い様に思えます。この様な複数の分子が関与する分子システムの理解こそ、分子科学の次に向かうべき重要な方向の一つと考えたのです。すなわち、分子を理解する分子科学を基盤として、分子の理解から分子システムの理解へとステップアップする事が重要と思い、これを「高次系」分子科学と称して特定領域を立ち上げた次第です。

高度に制御された分子システムを研究するにあたり、分野の細分化も問題ではないかと考えました。特に気相、凝縮相、生体、といったキーワードでくくられると、分子科学討論会の様にこの分野の多くの方が参加する学会であっても講演会場が異なりお互いに議論するチャンスが少なくなっております。複雑な系をターゲットにする場合、様々な方法や概念を持ち寄って議論することが必要と考え、領域推進ではこの点も解消するべくかなり努力をして参りました。本特定領域も気相分子クラスターの研究者を中心とする分子高次系班(関谷博班長)、超高速分光や界面の研究を推進している複合高次系班(田原太平班長)、典型的な高次系分子システムである生体分子や生細

胞を研究する生体高次系班（水谷泰久班長）という研究分野に沿って3つの班を組織したのですが、個別の班会議を原則的には行わず、全員が参加する合同班会議を6回実施しました。合同班会議ではゴードンコンファレンス風に夕食後、ポスターセッションを深夜まで行って従来の研究分野を排して議論できる場としたのです。その中で広い分野のメンバーが興味を持つトピックスが出て来るとそれをミニ公開シンポジウムと称してそのトピックスを集中的に議論できる場を設けてサポートしました。たとえば、イオンチャネル、プロトンポンプ、生体分子の蒸発

法、界面、といったトピックスを掲げて討論するのですが、この企画はなかなかの人気の、今年度末までの開催件数は16回に達しています。こういったトピックスで討論を重ねて行った結果、共同研究もずいぶん広がり、大変嬉しい事に班を横断した共同研究の例もいくつも現れる様になってきました。ナノマテリアルを利用した生体分子の気相分光、光受容タンパク質に対する超高速分光や気相分光を凝縮相に応用した測定など従来の枠組みを超えて様々な試みが行われて来ております。

私自身は気相分光の研究者ですが、以前であれば分子科学討論会の気相

セッションで生体分子の話をするとは色眼鏡で見られている感覚がありましたが、今ではごく自然に受け入れてもらっている様に感じ、「高次系」の方向性が徐々に浸透していていると感じております。特定領域は新たな分野を拓く事が目的ですが、領域メンバーとご指導下さった評価委員の先生方、そしてご支援下さった関係者の皆様のおかげで何とか「高次系分子科学」もその一歩を踏み出せたのではないかと感謝しております。分子科学の未来に向けた可能性の一つとして今後いっそう発展できることを願っております。

## 大学等との連携

# 名工大一分子研の連携に向けて

横山 利彦 分子科学研究所

国立大学法人・名古屋工業大学と分子科学研究所の研究連携を目的として、基本協定が締結されることになった。基礎生物学研究所と生理学研究所も同様の協定を結ぶ予定になっており、2月に正式に調印される。まずは相互理解を深めるため、2011年10月3日（月）に名工大で分子研・名工大合同講演会を行い、2012年1月27日（金）には岡崎コンファレンスセンター（OCC）で岡崎3研究所・名工大合同講演会を実施した。この連携は名工大の増田秀樹副学長が主だった対応をして下さっている。

2011年10月3日の名工大での講演会の参加者は、名工大教職員の方々27名、学生さん54名、分子研16名であった。会は名工大の川崎晋司教授を中心にお世話いただいた。懇親会に

は高橋実名工大学長もご参加くださり、大峯所長ともお話しできる機会があった。講演会では、増田副学長の開会の辞の後、分子研・平本昌宏教授の「有機薄膜太陽電池の開発」、名工大・樋口真弘教授の「自己組織化によるナノ微粒子の空間配列制御」、分子研・木村真一准教授の「固体の機能性を生み出す電子構造の分光研究」、名工大・小幡亜希子助教の「硬組織再建用バイオマテリアルの開発」、分子研・魚住泰広教授の「水中での触媒的有機変換：新しい反応駆動システム」、名工大・小澤智宏准教授の「低環境負荷型触媒の開発：ニトリル水和酵素の反応機構とその応用」、分子研・青野重利教授の「ヘムが関与する生体機能制御の分子機構」の計7件の講演があり、最後に大峯所長が閉会の辞で締めくくった。講演の

内容はデバイス・材料関係から、生体機能・材料など生命科学に関するもの、さらにはそうした材料の電子構造の最新の分析技術などきわめて幅のあるもので、そのように幅広い内容であるにも関わらず大変活発な議論が行われたのは、いずれの研究も分子レベルの精密な制御を必要とする科学であるという共通項があったことに加え、何よりすべての講演内容が素晴らしくハイレベルで魅力的であったからだと思える。講演者から「異なる立ち位置の研究者から意外な視点のコメントをもらって驚いたが今後の研究の一つの方向として考えたい」という感想もいただけた。

2012年1月27日のOCCでの講演会の参加者は合計233名（名工大100名、分子研39名、基生研14名、生理研74名、事務センター等6名、いずれ



も記帳者のみ)で、大変な盛会であった。小杉信博・研究総主幹の開会の辞の後、分子研・加藤晃一教授の「糖鎖の生命分子科学」、名工大・日原岳彦准教授の「気相法による合金クラスターの生成と組成制御・機能評価」、分子研・正岡重行「人工光合成を志向した金属錯体化学」、名工大・川崎晋司教授の「機能化ナノカーボンのエネルギーデバイスへの応用」、名工大・船瀬新王助教の「Brain Computer Interfaceの構築のための脳波解析」、生理研・山中章弘准教授の「オプトジェネティクス(光遺伝学)を用いたマウス行動制御」、名工大・梅崎太造教授の「人の静的及び動的な特徴計測技術と検知限についてー音声・画像処理技術と人工神経回路網設計技

術の応用ー」、生理研・柿木隆介教授の「様々な神経イメージング手法を用いたヒトの顔認知機構の解明」、名工大・猪股智彦助教の「人工シデロフォア~微生物による鉄摂取機構の解析から微生物センシングへの応用まで~」、基生研・椎名伸之准教授の「神経突起 mRNA 輸送を担う RNA 結合タンパク質」、名工大・松本健郎教授の「生体組織の力学的適応反応解明のための機械工学的アプローチ」、基生研・川口正代司教授の「植物のメリステム形成と反応拡散モデル」(基生研)の12講演があり、最後に増田秀樹・名工大副学長が閉会の辞で締めくくった。10月の講演会に比べて、参加者の分野がさらに広範囲にわたったため講演者の方は苦労されたと

思うが、大変わかりやすく話され質問も非常に多かった。小杉総主幹の開会の辞では、これまでの共同利用研を大学の研究者個人が利用するという形態から、大学と共同利用研が組織的に連携することを含めた変わり目という観点が示された。また、増田副学長の閉会の辞では、異分野間の連携から分野融合を促進し新たな学術領域を創成するため、組織的なプロジェクトなどを通して相補的共同研究を推進したいと話された。懇親会は葵丘倶楽部で開催され教職員のみで50人以上の参加者があり、こちらも盛会であった。

今後の実りある研究連携に向けてまずはいいスタートが切れたと感じている。



2012年1月27日開催の講演会風景。



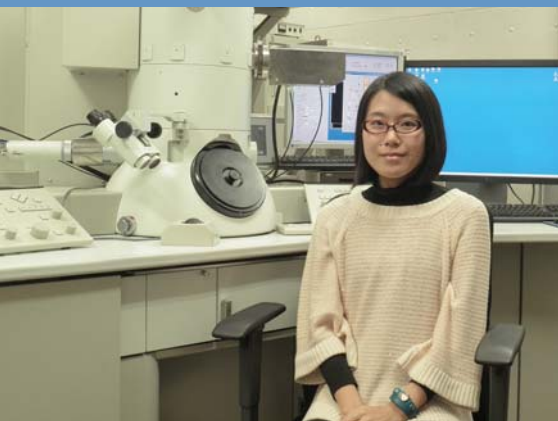
開会の辞を述べる小杉総主幹。



閉会の辞を述べる増田秀樹・名工大副学長幹。



200名以上の参加者で会場が埋め尽くされた。



## 研究支援よもやま話

機器利用技術班 齊藤 碧

立命館大学大学院理工学博士前期課程修了後、2008年4月より現職。  
趣味は美術館・博物館・科学館巡りと称した旅行。今気になっているのは、徳島県の大塚国際美術館と、青森県の十和田市現代美術館。旅のお供はデジカメと電子辞書と本。

機器センターでは、研究所内外の共同利用を通じた研究支援と、大学連携研究設備ネットワークの実務を行っています。研究支援としては、全国の大学・研究機関の研究者の方々が分子研の機器を利用して研究を進めて頂けるように、汎用機器の保守管理・維持や測定時のサポートを行っています。この「施設利用」に対して、ESRやNMR、レーザーシステムなど、磁気・物性測定や化学分析、分子分光測定などに必要な測定機器を計26台提供しています。昨年度は全国25機関から前期27件、後期33件、計60件の研究課題を受け付け、のべ287回にわたって機器の利用がされています。また、液体窒素および液体ヘリウムの供給と、液化機装置の保守管理も行っています。

このように、研究所内外の研究者の研究をサポートしている機器センターの中で私は、顕微ラマン分光装置と蛍光X線分析装置を担当しています。ここで、宣伝も兼ねて少しだけ機器の紹介をしたいと思います。

顕微ラマン分光装置（inVia Reflex/RENISHAW製）は平成21年度に機器センターに導入されました。本装置は488 nm、532 nm、633 nmおよび785 nmの計4本のレーザーを搭載していますが、フルオートとなっているため、これら励起レーザーの切り替えや光学構成変更、光学系のアライメントの最適化はマウスをクリックするだけで可能となっています。加えて通常の

測定作業も簡素化されており、大変使いやすいくなっています。またクライオスタットを備えており、液体ヘリウム温度から500 Kまでのサンプルの温度依存性を測定することもできます。

蛍光X線分析装置（JSX-3400R II / JEOL製）は平成20年度に導入された装置です。エネルギー分散型の装置で、検出元素範囲はNa~U、コリメータはφ1 mm、3 mm、7 mmとなっています。CCDカメラがついているので、サンプルの観察をしながら分析位置を調整できます。またRoHS指令などの有害物質規制に対応しており、分析結果報告書作成ソフトによって報告書が容易に作成できます。

さらに来年度からはフーリエ変換赤外分光装置（IFS66v/S/Bruker製）も担当する予定ですので、これについても少し説明しましょう。これは昨年末に分子研を退職された、前機器センター長でもある薬師久彌先生のグループから移管された装置です。中赤外と遠赤外線領域において、顕微ラマン分光装置と同様にサンプルの温度依存性を測定することができます。

各機器において動作確認等の維持管理作業のほかに、機器や利用に関する問い合わせやサンプル準備に関する助言、トラブル対応や必要であれば測定補助も行います。また、初めて機器をご利用される際には使用方法や注意事項の説明も行いますので「今まで使ったことはなかったけど、ちょっと使っ

てみたいな」と思われた際にはお気軽にご相談ください。

以上の機器センターの業務の他に、分子スケールナノサイエンスセンターの保有する高分解能透過分析電子顕微鏡の維持管理および運用にも参加しています。この装置は文部科学省のプロジェクト「ナノテクノロジー・ネットワーク」によって全国共同利用装置として大学や民間企業に広く公開されており、運用方法・サポート体制が機器センターの機器とは異なります。装置の操作、サンプルの観察・分析は私が行いますが、測定形態としては、利用者の方に結果を見ていただきながら進める立ち会い測定と、サンプルをお預かりし測定データだけをお渡しする依頼測定があります。立ち会い測定の際にはその場で利用者の方々と議論をしたりデータの解析に対する助言を行ったりすることができますが、依頼測定の場合はそれが容易ではありませんので、気がついたことなどをまとめてデータと共にお渡ししています。もちろんその後生じた質問等にも対応しますのでご安心ください。利用者の方にとって測定中の時間は、「特に何かをするわけでもなく、暗い部屋の中に座っている」という覚悟が必要な時間になってしまうかもしれませんが、私にとっては最先端の研究に触れられる時間です。後ろで先生と学生さんが議論されていると、満足していただける測定結果を出さなくてはと密かに使命感に駆



られますし、ぼそっと呟かれた先生の一言がとても気になって後でこっそりググってしまうこともあります。手はきちんと動かしますので、測定中、せっかくの時間ですので研究に関係することはもちろん、その他どんなことでも気軽に声をかけていただけると嬉しいです。

さて、こうして担当装置を並べてみますと（こういう分類があるのかどうかは知りませんが）、すっかり分光屋さんのように見えますが、もともとの私はツクリ屋さんです。学生時代は電子顕微鏡を用いてナノ粒子の研究を行いました。具体的にはガス中蒸発法と呼ばれる手法を用いて、ガスから直接ナノ粒子を作製し、電子顕微鏡による形態観察や構造解析を行ってきました。ガスから固体ができるこの過程が、宇宙空間に存在する宇宙じん（塵）と呼ばれる固体微粒子の生成過程に対応しているため、私はこれを模擬物質とし、赤外分光分析などの結果と合わせて宇宙じんの生成・変成過程の解明に実験的なアプローチをしてきました。自分の手で操作をしていた機器を現在も機器センターで担当しているので、その知識はもちろんですが、研究生活で得た様々な知識が今の私を支えています。私個人は宇宙じんの研究をしていましたが、学生が約10名、院生も約10名という大所帯の研究室のメンバーはそれぞれ異なった研究テーマを持っていました。その時耳にしていたカーボンナノチューブやグラフェン、光触媒、燃料電池、準結晶などの基本的な知識が今、研究者の皆さんとのコミュニケーションにとっても役立っています。これが大所帯の良い面の一つなのかもしれません。

あらゆる先端科学の基礎となる分野である分子科学の最先端の研究に多数

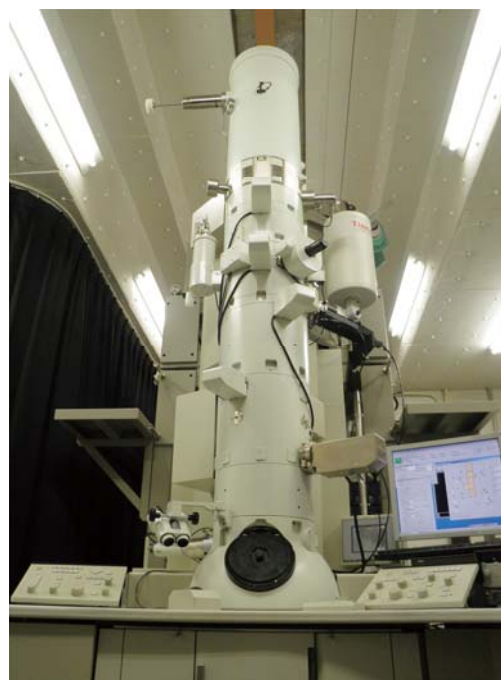
触れられることは非常に貴重な経験で、毎日好奇心をくすぐられながら業務を行っています。色々な場面で質問を受けたり、アドバイスをお願いされたりするなかで、私たち技術職員は「専門家」として見られることが多いように感じます。まだまだそれにはおよびませんが、「専門家」に近づくため、機器の管理や運用に関する専門知識を培う毎日です。そして日々進歩している科学に遅れをとらないようにアンテナを張り続け、利用者みなさんに、機器センターに、そして分子研に貢献できる力をつけられればと考えています。世間一般で言われる「女子力」とは大きくかけ離れた力が身につく感じがして少し危機感を持ちましたが、調べてみると「女子力」に明確な定義はなく、外見以外にもスキル、キャリア、ライフスタイルなどあらゆる場面において実は試されている力のようなのです。『女子力=自分の生き方を演出する力』と解釈して、しりごみすることなく、みなさんの研究をしっかりサポートできるよう努力していきたいと思いますので、ご指導ご鞭撻のほどよろしくお願い致します。

最後になりましたが、平成23年3月11日に発生した東北地方太平洋沖地震により被害を受けられた方々に心よりお見舞い申し上げます。私は10月に宮城県と福島県を訪れました。宮城県気仙沼市では津波によって陸上にあがってしまった大きなタンカー、骨組みだけになってしまった旅館、基礎しか残っていない住宅跡などを見て、地震から半年以上経ってなお残る大津波の爪痕、その深さを実感

し言葉を失いました。大島では快水浴場百選・特選に選ばれていた小田の浜を取り戻そうと、浜辺の片づけを行っているたくさんのボランティアの姿に人の温かさを感じました。また、仙台市の中心部では、現地の人々の素敵な笑顔とエネルギーなYOSAKOI踊りを、福島県いわき市のスパリゾートハワイアンズ（10月1日より営業再開）では、復興のシンボルとなったフラガールたちの艶やかで力強い踊りを見て、「前に進んでいこう」とされている姿に感動しました。一日も早く復旧・復興されることをお祈り申し上げます。



顕微ラマン分光装置



高分解能透過分析電子顕微鏡



## COLUMN

## 先端研究指向コースを活用した海外短期留学

井本 翔

総合研究大学院大学物理科学研究科機能分子科学専攻 5年一貫制博士課程4年

いもと・しょう

名古屋大学理学部化学科修士課程修了後、平成22年度に総研大3年次編入。

理論・計算分子科学研究領域・斉藤グループにて凝縮相中における分子のダイナミクスについて研究を行っている。



2011年の夏にMITのTokmakoff教授、また秋にアメリカエネルギー省管轄Pacific Northwest国立研究所のXantheas教授のグループにそれぞれ40日間ほど滞在し共同研究してきましたので、その報告をさせていただきます。事の始まりは2010年の秋頃に私の指導教官である斉藤先生（理論計算分子科学研究領域）から「総研大のコース選択で先端研究指向コースを選択すると海外で数ヶ月研究するための資金援助をしてくれます。せっかくの機会なので、それを活用して海外を経験してみては？」と言われたことでした。その時点ではまだまだ先のことのように感じ、「へー、そうなんですか。」程度で聞いていました。

それ以降、このことは完全に忘れていたのですが、年末にふと思い出して実際に滞在する期間とそのための準備期間などを逆算していくと、コース選択が正式に決定する2011年4月になってから準備するのでは遅い事に気づきました。そして斉藤先生や大学院係の方と相談して、正式決定の前から少しずつ準備していくことになりました。

それからは論文を読む際にも滞在先を探すために「この研究室に滞在したら、どのようなことが学べるだろうか？」などと考えるようになりました。斉藤先生からは「せっかくのチャンスだから、既に井本君がコネクションを持ってるグループに滞在するので

はなく、新しいコネクションを作るつもりで行ってきたら？」できればアメリカに行って、アメリカの研究の雰囲気とかを感じてきたら？」とだけ言われたため、行き先はかなり自由に選ばせて頂きました。興味のあるグループが複数あったために色々迷いましたが、最終的には分光実験を専門としているMITのTokmakoff教授のグループに滞在することに決めました。斉藤先生とTokmakoff教授が友人なので話が通り易いだろうという理由もありましたが、Tokmakoff教授を選んだ一番の理由は実験グループの雰囲気を少しでも味わってみたかったからです。

またMIT滞在を決めた同時期に日本学術振興会の関係で来日していたXantheas教授が分子研を訪問され、そのホストを斉藤先生がしていた関係もあり、Xantheas先生がPacific Northwest国立研究所に来てみないかと誘って下さいました。私とXantheas教授の研究分野は近いためPacific Northwest国立研究所滞在は興味があったのですが、Google Mapに表示されるPacific Northwest国立研究所が信じられないくらい田舎にあるため長期滞在は少し躊躇してしまいました。しかし、オークリッジ国立研究所やローレンス・バークレー国立研究所と同じアメリカエネルギー省管轄の研究所に行ける機会などそうそう無いため、覚悟を決めて行くことにしました。

このMIT滞在が初めての一人の海外長期滞在だったため出発前は不安な気持ちでいっぱいでしたが、出発前に斉藤先生に「Tokmakoff教授はすごく親切だから、何も心配することはない。」と励まされました。そして実際にTokmakoff教授に会ってみると想像以上に親切な先生で、Tokmakoffグループの学生・ポスドクの方達もすごく親切で普段の生活の様々なことを助けていただきました。研究面に関してもあえて実験系のグループに滞在したことで予想以上の刺激を受けられました。理論計算が専門の私は実験の論文を読んでも実際に何が行われているのか全く理解できないのですが、実験装置を目の前にしてその詳細を解説してもらうと理解が進みました。また、MITの建物の廊下には様々な研究を紹介したポスターが掲示されていました。それらの多くは初めて見る研究内容であり廊下のポスターを見ているだけでも有意義な時間が過ごせました。研究に関してもさることながら、MITでの一番の思い出は分子研に来て以来初めて大勢の学生と毎日一緒に昼食を食べたことです。彼らが何の話題で盛り上がっているかはほとんど分かりませんでした。それでも同年代と一緒に行動するのはとても楽しかったです。

一方、Pacific Northwest国立研究所ではアメリカの研究環境の規模を実感させられました。研究所は砂漠の中

に建設されており、研究所の敷地にのみ緑の木々と芝生が生い茂る光景だけでも圧巻なのですが、それ以上にスーパーコンピューターの規模の大きさと使いやすさに驚かされました。Pacific Northwest国立研究所で私が使わせて頂いたマシンは2011年のスーパーコンピューターランキングにおいてTop10に入る最新型であるにも関わらず多くの研究者がそれを用いて大規模計算を行っており、私も申請すれば数日で利用出来るようになりました。誰もが簡単に最新型を利用出来るという点で、アメリカのスーパーコンピューター事情は日本よりも進んでいると思いました。また、Pacific Northwest国立研究

所の理論系の研究部門は各グループの規模が小さく教授だけのグループも存在しましたが、教授自身が積極的に研究されていました。さらに二週間に一度くらいの頻度でセミナーが行われており、毎回教授陣たちが白熱した議論を繰り広げるのが印象的でした。私も帰国直前にセミナーを行いすごい勢いで質問攻めに合いましたが、セミナー終了後には色々な先生から誉めて頂きとても嬉しかったです。

同じアメリカでも雰囲気が全く異なるMITとPacific Northwest国立研究所にて研究できたことは、私にとって大きな経験となりました。これからコース選択を行う総研大の学生の方も積極

的にこのシステムを活用することをお勧めします。最後に今回の滞在でお世話になったMITのTokmakoff教授とKrupaさんを始めとするTokmakoffグループのみなさま、Pacific Northwest国立研究所のXantheas教授、大学院係の方と齊藤先生にこの場を借りてお礼を申し上げます。

## 総研大ニュース

# 「統合生命科学を推進する先端的教育研究拠点の構築」事業について

総研大では文部科学省・特別経費の支援によって、2011年より4年間の予定で表記事業を開始し、「統合生命科学教育プログラム」の授業を10月より開始しています。本事業の目的と全体計画は以下の通りです。

「目的」生命科学では様々な生物のゲノム情報が現在でも蓄積されつつあり、さらにポストゲノム研究としてプロテオミクスを初めとする「-omics」が大量のデータを産生しています。今世紀の生命科学はこれらの大容量データをプロセスし細胞、組織あるいは生物丸ごと理解するというのが主流になると思われます。そのためには生物科学のみならず、物理科学、数理学、情報科学などに通じる学際的かつ統合的な生命観を持つ研究者の育成が急務です。本プログラムでは、国内最先端の研究機関において幅広い分野の大学院教育が行われているという総研大の特色を最大限生かし、統合生命科学の新

しいカリキュラムを作成・実施します。

「全体計画」異なる研究科と専攻を横断する統合生命科学教育プログラムを実施するため遠隔地講義配信システムを利用して、現地、遠隔地専攻に差がなく受講できるようにしています。科目には専攻担当教育科目、専攻間あるいは専攻を超えた融合教育科目があります（具体的な科目は以下のURL: <http://ibep.ims.ac.jp/> をご覧下さい）。講義以外にも各専攻最先端的教育研究の場で集中的に演習・実習などを受けるシステム、大学院生が自ら提案し実施する分野横断型共同研究への支援も準備しています。さらに、統合生命科学を広く普及させるため、国内外の大学院生と若手研究者を対象とし、年ごとにテーマを決めた特別講義とセミナーを行う「統合生命科学サ

マースクール」を年に1回実施します。

分子研の先生方にも、大学院生にとっても新たな授業への負担が増えることで恐縮ですが、本願成就のためご協力いただければ幸いです。

（統合生命科学教育プログラムプログラム長 藤澤 敏孝\* 記）

\*新人紹介30ページ参照



統合生命科学教育プログラムホームページ  
<http://ibep.ims.ac.jp/>

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

## 教員報告 分子研夏の体験入学2011

2011年度担当教員 物質分子科学研究領域 准教授 西村 勝之

2011年8月8日(月)から11(木)の期間、分子科学研究所において第8回夏の体験入学が開催された。本事業は分子科学研究所における大学院教育、研究者養成、共同利用研究などの特徴ある活動が分子科学の発展に大きく貢献していることを知って頂くことを目的としている。参加者構成は学部学生39名、修士課程3名、その他1名の合計43名(期間外参加者4名を含む)となり、例年とは異なり学部生が大多数を占め近年では最も多い参加者数となった。

8日14:00より明大寺地区で総研大の説明、体験内容紹介後、施設見学を行った。さらに懇親会を開催し、全参加学生に自己紹介を兼ね抱負を語ってもらった。9、10日の2日間、各グループで体験実験をしてもらい、11日は例年より早い9:00から発表会を開始した。発表者数が多くタイトなスケジュールであったが、休憩時間を短縮して予定の12:00に無事終了することができた。各グループでの発表後の感想を述べる場では、“来年も参加したい”や“総研大の学生になりたい”

というような意見が多数を占め、充実した体験入学であったことが伺えた。

アンケート結果では参加情報の入手先は“友人から”が最も多く34%、次いでポスター22%、分子研ホームページ20%が大きな割合を占めた。また総研大および分子研に関しては、学習および研究の場として魅力的であるにも関わらず宣伝が不十分であるという意見が多数聞かれた。

最後に、本事業にご協力頂いた皆様方にこの場を借りて厚く御礼申し上げます。



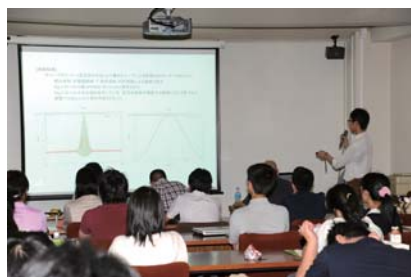
玄関前で集合写真



オリエンテーション



実験風景



発表会



懇親会



## 教員報告 総研大アジア冬の学校2011

2011年度担当教員 理論・計算分子科学研究領域 奥村 久士

総研大アジア冬の学校が平成24年1月10日（火）から13日（金）にかけて岡崎コンファレンスセンターで開催されました。分子研で行っている研究・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ることを目的として平成16年度に始まり、今回で8回目になります。海外からの参加者は20名でその国籍別の内訳はインド6人、タイ5人、韓国3人、イラン2人、中国2人、台湾1人、モンゴル1人でした。そのほかに分子研の若手研究者など日本国内からの参加者が11名（国籍は日本、中国、台湾、タイ）、合計31名でした。

今回は基礎から最先端までじっくり講義していただくことを目的として、テーマを“Basics and Frontiers in Molecular Science”と設定しま

した。これまでの冬の学校よりも1講義当たりの時間を長く（90－180分）取って、以下の先生方にご講義いただきました（講義順）。

正岡重行先生（分子研）

“Coordination Chemistry and its Application toward Artificial Photosynthesis”

大島康裕先生（分子研）

“Molecules in Motion: From Probe to Control by Light”

西村勝之先生（分子研）

“Principles of Solid State NMR and its Application for the Characterization of Biomolecules”

大石雅寿先生（国立天文台）  
“Towards Life in the Universe”

桑島邦博先生（分子研）  
“Molecular Mechanism of Protein Folding”

平田文男先生（分子研）  
“From Statistical Mechanics of Liquids to Biomolecular Science”

なんとか無事に冬の学校を開催できたのも周到な講義を準備された先生方、もう一人の世話人の藤貴夫先生、常に気を配ってくださった秘書の川口さん、川合さんのおかげです。深く感謝いたします。



## 受賞者紹介

江口 敬太郎 (総合研究大学院大学物理科学研究科機能分子科学専攻 5年一貫制博士課程3年)

## 第14回XAFS討論会 学生奨励賞

2011年9月9-11日に開催された第14回XAFS討論会において、「 $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{Si}(111)-(8 \times 8)$ 基板上における鉄ナノ粒子の形成と磁気特性」と題して研究発表を行い、学生奨励賞を受賞しました (<http://www.ims.ac.jp/topics/2011/110920.html>)。今回発表させていただきました研究は、総合研究大学院大学に入学後、新しく取り組んだ研究であり、その研究成果および研究発表について評価していただけたことについて大変喜ばしく感じております。

この受賞を励みに、今後も日々精進し、博士後期課程を修了するまで全力で走り抜けたと思います。今後は、基板表面に蒸着した分子の研究を行う予定です。また、口頭発表を行うのは今回で4回目でしたが、大変緊張しました。なかなか口頭発表に慣れることはできませんが、落ち着いた緊張感をもって発表が行えるように(落ち着いて話すことができるように)、ますます発表練習についても励みたいと思います。最後になりましたが、本研究に対してご指導



いただきました横山利彦教授をはじめ、横山グループのみなさま、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。

石黒 志 (分子科学研究所特別共同利用研究員)

## 第14回XAFS討論会 学生奨励賞

この度、9月9-11日に岡崎コンファレンスセンターで行われました第14回XAFS討論会におきまして、「In-situ 時間分解 XAFS 法を用いた Pt/C および Pt-Co/C 燃料電池カソード触媒の触媒構造反応機構解析」という口頭発表に対して、学生奨励賞を頂きました。本学会はXAFS法という測定手法を用いた研究開発を発表・議論する場で、本賞受賞者の多くは現在でもXAFSを使った研究の最前線を走っている方々なので、受賞出来て光栄に思っております。

燃料電池は水素と酸素から水への化学変化から電力を取り出す装置で、自動車用などのクリーンな動力源として、実用化が期待されています。しかし、現時点では酸素分子の分解と水の生成を担うカソード触媒は高価なPtを大量に使用しており、触媒の劣化にも問題があります。そのため実用化にはPtの有効利用と耐久性の向上が欠かせず、世界中の研究者がより高性能

な触媒の開発を行っています。しかし一方で、この触媒が燃料電池の実際に動作している中で、「どのような振る舞いをしているのか」、「どのように劣化するのか」といった問題は、有用な測定法に乏しく、深く理解はされていませんでした。

XAFS法は反応が行われているその時に触媒がどのような構造変化を起こすかを観測するのに有効な手段です。今回、私達のグループはSPRING-8の放射光を使用して時間分解XAFS法という手法を用いて、燃料電池が実際に動作している中で、通常使われているPt/C触媒と、PtをCoと合金化して性能・耐久性を高めたPt-Co/C触媒とでは、各々の構造変化こういった違いがあるのかをリアルタイムに計測し、燃料電池電圧変化による電流の変化、触媒上のPtの酸化、還元と結合の生成/解離といった複数の過程の反応速度を捉えることに成功しました。また、その全ての過程において、Pt-Co/C触



媒の反応速度がPt/C触媒よりも大きいということを初めて解明でき、性能や耐久性の向上の要因の一つを見出せたと考えております。燃料電池の反応メカニズムや触媒劣化機構を更に解明していくことにより、今後の触媒開発に有用な設計指針を与えられるものと考えております。最後に、この研究を指導し支えて頂いた才田隆広研究員、唯 美津木准教授を始め、共同研究者の方々に深くお礼を申し上げます。

## 受賞者紹介

### Raghu Nath Dhital (総合研究大学院大学物理科学研究科機能分子科学専攻 5年一貫制博士課程5年) International Conference on Advanced Materials and Nanotechnology (ネパール化学会) Young Scientist Award

I had a golden opportunity to participate in the **Advanced Material and Nanotechnology Symposium (ICAMN 2011)** held from 21<sup>st</sup> to 23<sup>rd</sup> October 2011 in Kathmandu (Nepal). In this symposium my abstract was selected for an oral presentation. In order to motivate young scientists, the organizing committee allocates a special oral presentation session for young researchers. Accordingly, the committee selects the best oral presenter from the pool of oral presentations presented by young researchers around the globe, and awards the **Young Scientist Award** with a token of appreciation.

The ceremony started with a warm welcome speech by Prof. Rajaram Pradhananga (Tribhuvan University). Many participating researchers got an opportunity to get introduced with the Nepalese Science and in addition, the Nepalese culture and dishes. The competition for young scientist award was held on the second day. I was scheduled to be the first

speaker in this competition. With a great enthusiasm, I gave a talk entitled as **“The Anomalous Efficacy of Bimetallic Gold–Palladium Nanoclusters in Catalyzed Coupling of 4-Chlorobenzoic Acid with Phenylboronic Acid at Room Temperature in Water: Is it Likely a New Mechanism?”**. After finishing my oral presentation, the floor was opened for a five minutes question answer session. The response I received during this session was inspirational for me. My presentation was followed by the presentation from other young scientists who hailed from various countries including Japan, Thailand, Korea, India, Austria and other Asian countries. All these talks were beneficial for me to get acquainted with the interdisciplinary nature of research activities.

On the last day of the symposium, I attended a talk given by Professor Dr. Hidehiro Sakurai. Immediately after this I had to return back to my hotel because I had a return



flight to Japan on that evening. Shortly after returning to the hotel I got a phone call from the symposium organizers telling me that I am going to be awarded with **Young Scientist Award**. I was overjoyed to discover that, in his capacity as my supervisor, Professor Sakurai is going to receive the prize on my behalf.

It is the first time for me to receive the award in an International symposium. I owe my sincere appreciation to all of my supervisors at the Institute for Molecular sciences, SOKENDAI and Tribhuvan University.

### 山本 さよこ (分子科学研究所特別共同利用研究員)

#### 第50回NMR討論会 記念国際シンポジウム 若手ポスター賞

日本核磁気共鳴学会によるNMR討論会の第50回目の開催を記念した国際シンポジウム The International Symposium on Nuclear Magnetic Resonance 2011 (ISNMR 2011)にて、“Application of Paramagnetic NMR to analyses of conformations and dynamics of oligosaccharides”という演題で若手ポスター賞を受賞致しました。

私は、名古屋市立大学薬学研究科の博士前期課程に在籍しており、特別共同利用研究員として分子研で研究を行っています。生体内において重要な機能を担っている糖鎖の立体構造を明

らかにするために、常磁性NMRを応用した新規解析法の開発を試みています。ランタニドプローブを糖鎖へ導入することにより、糖鎖に由来するNMR信号の擬コンタクトシフトを観測し、そして、そのNMRデータと分子動力学計算を用いた統合的な解析を行うことにより、糖鎖の動的な立体構造を明らかにすることを可能にしました。NMR討論会の節目となる記念すべきシンポジウムで、私たちの研究成果を評価していただけたことを大変嬉しく思います。これまでお世話になった諸先生方にこの場を借りて深く御礼申し上げます。





## 受賞者紹介

**王 春蘭 (Wang Chunlan)** (総合研究大学院大学物理科学研究科機能分子科学専攻 5年一貫制博士課程5年)  
**第44回酸化反応討論会 優秀ポスター賞**

2011年11月4～5日に大阪大学で開催されました第44回酸化反応討論会において優秀ポスター賞を受賞いたしました。

私は、総合研究大学院大学に入学し生物無機化学を専門とする藤井先生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。今回の酸化反応討論会では、多くの研究者のレベルの高い講演を聴くことができました。私のポスター発表では、多くの研究者の方々に研究成果を聞いていただくことができ、また質問、助言など大変貴重な意見も頂きました。今後の研究に活かしていきたいと思っています。非常によい経験となりました。

私は、高原子価サレンマンガン錯体の電子構造と不斉酸化反応性の研究を行っています。キラルなサレン

マンガン錯体は、最も優れた不斉酸化触媒の一つとしてよく知られています。不斉酸化を担う活性種としてさまざまな高原子価マンガン錯体が提案されてきましたが、それらを合成した例はなく不斉選択性の機構は未解明のままです。私は、この問題を解決するため研究を行い、マンガン4価ヨードソベンゼン付加錯体の合成に成功しました。さらにこの錯体の構造解析にも成功しました。この錯体は、活性部位に大きな不斉が誘起されていました。この活性種使ってエポキシ化反応を行うと高い不斉選択性が観測され、不斉選択性の機構を解明する重要な手がかりを見いだすことができました。今後は、カウンターアニオンや酸化剤の種類により選択性がどのように変化するかを研究していきたいと考えています。



今回、私の研究成果を評価していただけたことを大変喜ばしく感じております。さらに研究を進める上での大きな励みとなり、今後も意欲的に研究に取り組んでいきたいと思っています。

## 総合研究大学院大学平成23年度(10月入学)新入生紹介

| 専攻     | 氏名                    | 所属                | 研究テーマ                                                                                      |
|--------|-----------------------|-------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------|
| 機能分子科学 | 望月 建爾                 | 光分子科学研究領域         | 氷の融解過程と内殻分光に関する理論研究                                                                        |
|        | TRAN NGUYEN LAN       | 理論・計算分子科学研究領域     | Theory for calculating molecular magnetic property with ab initio quantum chemical method. |
|        | SETSIRI HAESUWANNAKIJ | 分子スケールナノサイエンスセンター | Polymers stabilized gold nanocluster: preparation and catalytic studies.                   |

## 各種一覧

### ■開催一覧

#### 分子科学フォーラム

| 回    | 開催日時        | 講演題目                          | 講演者               |
|------|-------------|-------------------------------|-------------------|
| 第91回 | 平成23年11月28日 | 粘菌の賢さを探る                      | 中垣 俊之（公立はこだて未来大学） |
| 第92回 | 平成24年 2月 3日 | エネルギー問題の解決は科学者の使命一次世代の太陽電池の話ー | 平本 昌宏（分子科学研究所）    |

#### 分子研コロキウム

| 回     | 開催日時        | 講演題目                                                                | 講演者                                             |
|-------|-------------|---------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------|
| 第831回 | 平成23年10月24日 | フォトリック・ナノ構造による光制御の現状ー基礎から、大面積レーザー・太陽光発電への展開までー                      | 野田 進（京都大学）                                      |
| 第832回 | 平成24年 1月16日 | Direct observation of glassy dynamics with sub-nanometer resolution | Martin Gruebele (U. Illinois, Urbana-Champaign) |
| 第833回 | 平成24年 2月 8日 | Real Complexity: Dynamics and Kinetics in Ever So Many Dimensions   | R. Stephen Berry (The University of Chicago)    |

### ■人事異動（平成23年6月2日～平成23年11月1日）

| 異動年月日    | 氏名                 | 区分      | 異動後の所属・職名                                                 | 現（旧）の所属・職名                                                 | 備考 |
|----------|--------------------|---------|-----------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------|----|
| 23. 6.17 | 北 原 宏 朗            | 辞 職     |                                                           | 分子スケールナノサイエンスセンター<br>ナノ分子科学研究部門 研究員                        |    |
| 23. 6.30 | 大 塚 勇 起            | 辞 職     | 神戸大学 大学院システム情報学研究科 特命講師                                   | 理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 助教                              |    |
| 23. 6.30 | 全 炳 俊              | 辞 職     | 京都大学 エネルギー理工学研究所 助教                                       | 極端紫外光研究施設 電子ビーム制御研究部門 助教                                   |    |
| 23. 7. 1 | 塚 本 寿 夫            | 採 用     | 生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門 専門研究職員（分子科学研究所特別研究員／特任助教）        | 日本学術振興会 海外特別研究員（アメリカ Oregon Health and Science University） |    |
| 23. 7.31 | GUO, Jingdong      | 辞 職     | 理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 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. 7.31 | 矢 木 真 穂            | 辞 職     | 岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 専門研究職員                          | 岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 研究員                              |    |
| 23. 8. 1 | 近 藤 美 欧            | 採 用     | 生命・錯体分子科学研究部門 錯体物性研究部門 助教                                 | 科学技術振興機構 北川統合細孔プロジェクト 研究員                                  |    |
| 23. 8. 1 | 大 東 琢 治            | 採 用     | 極端紫外光研究施設 電子ビーム制御研究部門 助教                                  | 立命館大学 総合理工学研究機構<br>ポストドクトラルフェロー                            |    |
| 23. 8.1  | GUO, Jingdong      | 採 用     | 理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 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. 8. 1 | 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 専門研究職員                          | 岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 研究員                              |    |
| 23. 8.31 | 甲 斐 憲 子            | 辞 職     | テラベース株式会社                                                 | 分子スケールナノサイエンスセンター<br>ナノ分子科学研究部門 技術支援員                      |    |
| 23. 9. 1 | 藤 澤 敏 孝            | 採 用     | 生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門 専門研究職員                           | 基礎生物学研究所 特別協力研究員                                           |    |
| 23. 9.20 | 秋 山 順              | 辞 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（分子科学研究所特別研究員／特任助教）    |    |
| 23. 9.30 | GHOSH, Manik Kumer | 退 職     | 韓国 Kyungpook National University, Postdoctoral Researcher | 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. 9.30 | 河東田 道 夫            | 辞 職     | 理化学研究所 計算科学研究機構                                           | 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. 9.30 | 松 田 成 信            | 辞 職     |                                                           | 計算科学研究センター 専門研究職員                                          |    |
| 23.10. 1 | ZHOU, Xin          | 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                         | 中国 Harbin Institute of Technology, Associate Professor     |    |
| 23.10. 1 | 河 津 励              | 採 用     | 理論・計算分子科学研究領域（京都大学福井謙一記念研究センター勤務） 専門研究職員                  | 京都大学 大学院工学研究科 特定研究員                                        |    |
| 23.10. 1 | 矢 崎 稔 子            | 採 用     | 生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門 技術支援員                            |                                                            |    |
| 23.10. 1 | 矢 木 真 穂            | 名 称 付 与 | 岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 専門研究職員（特任助教）                    | 岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 専門研究職員                           |    |
| 23.10.15 | 竹 中 健 朗            | 辞 職     | 岡崎統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域 専門研究職員                        | 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                            |    |
| 23.10.16 | 竹 中 健 朗            | 採 用     | 岡崎統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域 専門研究職員                        | 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                            |    |
| 23.10.31 | 岩 田 由 実            | 辞 職     |                                                           | 分子スケールナノサイエンスセンター<br>事務支援員                                 |    |

## 編集後記

分子研レターズ65号をお届けします。年末年始のご多忙な時期にもかかわらず、快く執筆を引き受けて頂きました皆様には、御礼申し上げます。

さて、私の部屋には、黒い表紙だった20世紀の終わり頃の分子研レターズがあります。久しぶりに表紙を開いてみたら、今では日本の科学の代表的な研究者の方々の駆け出しや中堅の頃の写真を多数発見しました。多くの方が、分子研を踏み台にしてビッグになっていったことを、あらためて感じました。この65号も10年後や20年後に開いたときに、日本の科学の中心人物の若かりし頃の写真や記事が載っているかもしれません。

編集担当 木村 真一

## 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.

65

分子研レターズ

発行日 平成24年3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）  
木 村 真 一（編集担当）

大 迫 隆 男

加 藤 晃 一

斉 藤 真 司

江 東 林

西 村 勝 之

藤 貴 夫

古 谷 祐 詞

見 附 孝一郎

柳 井 毅

原 田 美 幸（以下広報室）

寺 内 かえで

中 村 理 枝

鈴 木 さとみ

デザイン 原 田 美 幸

印刷 株式会社コムラ

本誌記載記事の無断転載を禁じます



