



永瀬 茂

京都大学福井謙一記念研究センター シニアフェロー
(前 理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 教授)

分子研の思い出と軟着陸

ながせ・しげる / 1969年大阪大学基礎工学部卒業、1975年同大学院博士課程修了、ロチェスター大学およびオハイオ州立大学博士研究員、分子科学研究所技官を経て、1980年横浜国立大学助教授、1991年同教授、1995年東京都立大学教授、2001年分子科学研究所教授、2012年より現職。

2001年に着任して以来、11年間も分子研で過ごさせて頂きました。横浜国大から都立大へ、都立大から分子研へと教育・研究環境を変えるときには、いつも非常に躊躇しましたが、結果的にはチェンジするたびに新しいことが経験でき、大きくリフレッシュして、進展できたので非常に良かったと思っています。着任したときには、IMSフェロー1名、学振特別研究員1名、学振外国人特別研究員1名、受託院生3名の、合計7名で研究を開始しました。「望む構造、物性、機能をもつ分子を自在に組み立てて反応をさせる」ための分子理論と計算およびコンピュータシミュレーションに興味をもって研究を行いました。このために、(1) 量子化学計算の高速化と高精度化、(2) 元素の特性を利用した新規分子の設計と反応、(3) 分子のサイズと形状が生み出す機能性ナノ分子の開拓を研究の3本の柱にしました。内外の非常に数多くの実験グループと共同研究を行い、実験とのインタープレイにより数多くの刺激、興奮、感激を得たこと、素晴らしい友人や先輩に囲まれたこと、研究グループを盛り上げてくれた数多くのメンバーには非常に感謝しています。また、

基礎的な研究の重要性を痛感しました。分子研では、基礎的な研究が、自然と重要な応用研究に繋がるので、これまでになく重要視されることを望んでいます。

退職後は研究から離れることを考えていましたが、なかなか一気に止められるものではありません。軟着陸が重要なことを実感しました。幸いにも、京都大学福井謙一記念研究センターで研究を続ける機会を得ましたので、博士研究員2名と研究に励んでいます。ここでは、雑用は一切ないので、朝早くから夜遅くまで充実した毎日を送っています。昼には、古くからの親友の榊茂好さんおよびこの春に奈良教育大を退職した山辺信一さんと食事に行き、あれやこれやと雑談を楽しんでいます。ここへ来てまだ3ヶ月ですが、国際会議の招待講演の準備も共同研究の論文も幾つか仕上げることができました。また、忙しくて長年の間単著の論文を書くことがなかったですが、これも仕上げることができました。これから数年は、軟着陸を目指して量子化学の基礎分野の発展のために頑張っていきたいと思っています。また、暇を見つけて京都の散策を楽しみたいと思って

います。最後になってしまいましたが、分子研でお世話になった皆様に感謝すると同時にますますの発展を願っています。有り難うございました。

平田 文男 立命館大学 生命科学部 客員教授
(前 理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第二研究部門 教授)

分子研を去るにあたり

ひらた・ふみお / 1969年北海道大学理学部卒業、1974年北海道大学大学院理学研究科博士課程退学、日本学術振興会奨励研究員、米国ニューヨーク州立大学博士研究員、米国テキサス大学博士研究員、米国ラトガーズ大学助教授、京都大学理学部助教授を経て1995年より分子科学研究所教授、2012年より現職。



私が赴任して間もない頃だったが、分子研は創設以来の大事業を行った。統合バイオサイエンスセンターの設立である。当時の伊藤所長および執行部の諸先生達の高い見識と先験性に拍手を送りたい。しかし、その設立は最初からシャンシャンと進んだわけではない。分子研は歴史的に「アンチバイオ」の雰囲気が強く、所内の意見は「賛成論」と「反対論」に大きく二分されていた。その反対論の中心は、いわゆる「ミイラ取り論」、すなわち「分子科学の方法論は生物には歯がたたない。生物科学を分子科学に取り込もうとして、逆に、生物科学に飲み込まれてしまう」という議論である。私は「統合バイオ」の設立に賛成する立場からそれに対する反論を行った。「真に新しい方法論は未知の対象に切り込むことによって生まれる。生命現象こそ、そうした未知の問題の宝庫である」と。そして、その命題を証明する「宿題」を自分自身に課した。その後RISM理論を蛋白質やDNAに展開し、生命現象の重要な素過程である「分子認識」を記述する新しい方法論を創り出したことがその宿題に対する私の解答である。

ある時、私は「特別研究費のヒアリ

ング」でUVSOR関係のグループリーダーに「何故、溶液や生体分子をやらないのか？」とナイーブな質問をしたことがある。その質問は「無いものねだり」と一蹴された。確かに、「その時点での光源性能の適用範囲内で」という意味では、無理だったのかも知れない。その後、世界的な動向に触発されて、UVSOR光源の2桁以上の高輝度化を実現することで、水溶液や生体分子への挑戦を行っていることを多とするものであるが、できれば分子研から世界に発信して欲しかったと思う。

従来の伝統的な計算分子科学分野(量子化学および分子シミュレーション)では"expensive calculation"という言い方が普通に使われており、「高い」計算であればあるほど「偉い」とされる。それは理論や方法論の発展を計算機の性能や計算アルゴリズムの優劣に解消するものであり、K-コンピュータやANTONの根底にある思想である。しかし、そうした発想は、早晩、破綻せざるを得ない。それは、ハード(半導体加工技術や消費電力)の発展が大きな壁にぶつかっているからだけではない。より本質的な問題は、そうした「方法論」が、現代の最も重要なター

ゲットである溶液内化学反応や生命現象に対して、ほとんど無力だからである。"expensive calculation"="cheap research"という図式に陥らないようお願いしたいものである。

以上、「方法論開発」という視点で、いくつかの問題提起をさせていただいた。分子研の今後の発展にとって、何かの参考になれば幸甚である。



田中 晃二

京都大学 物質—細胞統合システム拠点 特任教授
(前 生命・錯体分子科学研究領域錯体物性研究部門 教授)

分子研での思い出と期待

たなか・こうじ / 1969年大阪大学卒、1971年大阪大学大学院工学研究科修士課程修了、大阪大学工学部助手、米国ジョージア大学博士研究員、大阪大学工学部助教授を経て1990年分子科学研究所教授、2012年より現職。

分子研での研究生生活を終えるにあたり、自分の研究の原点を振り返ってみました。小学5年生の頃の理科の授業で1グラムの水を1℃上げるのには1カロリーの熱が必要だと教わった時に、食物の栄養価はカロリーで人間は酸素を吸って炭酸ガスを出しているの、お腹の中で食物が燃えているのかと不思議でなりません。周りの人々に、その理由を聞いても誰も答えてくれませんでした。その時に思った不思議さが私の研究の原点にあるようです。大阪大学工学部応用化学専攻で修士課程終了後に助手として採用され、恩師の故・田中敏夫先生から“10年かけて一生打ち込める研究課題を見つけなさい”と言われたことを昨日のように覚えております。助手になりたての頃は研究課題を見いだせず、大阪大学理学部 中村晃先生のグループで行われていた生物無機化学の後を追う形でMo酵素モデル、FeS蛋白モデルおよびFeMoS蛋白モデルの研究を行いました。ある時、酵素モデルに光増感機能を付与することを考えてRu(bpy)₂骨格を配位子とする金属錯体を合成している際に、水性移動反応 ($\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$) が起こっていることを見だし、全ての反応中間体の単離を行いました。水性ガスシフトで発生する水素分子をプロトンと電子 (H_2

$= 2\text{H}^+ + 2\text{e}^-$) に置き換えるとCO₂還元反応と水性ガス移動反応は、単に逆反応であることに気づき始めて統一的なCO₂還元反応機構を見いだしました。また、FeSおよびFeMoS蛋白モデル錯体を触媒として炭素—炭素結合生成を伴う幾つかのCO₂固定反応を見だしており、いつの間にか私はCO₂の化学を主に行うようになっておりました。結局、田中敏夫先生の定年退職の年には18年の助手生活を送っておりましたが、幸いなことに私は分子研に採用されました。

大学では学部、大学院学生が多数在籍しておりますのでRough Imaginationの段階で研究をスタートさせることが出来ましたが、分子研着任後は能力的に二つの化学を続けることが難しくなりRuの化学のみに集中するようになりました。特に、助教の方々は6年以内に成果を出して転出することが要求されますので、ご本人に過剰な負担とならないテーマの選択に心がけました。一方、私の年齢が50近くなったころから、還元反応だけを追い求めている自分の未熟さを痛感し、エネルギー変換反応としての化学エネルギーと電気エネルギーの相互変換の重要性を強く認識するようになりました。たとえば、水を水素源として二酸化炭素から有機物生成および、その逆反応とも多段階の素反

応が必要であり、各過程で化学結合の生成・切断には2電子が必要である。しかしながら、分子間電子移動は1電子過程であり、強引に反応を進行させるために過剰のエネルギーを注入しても副反応のみを引き起こすだけの結果となっている。人工光合成は、正にこの問題に対する解答をだすことであり、物理化学、有機化学、錯体化学を縫合した分子科学の中心課題になりうる研究課題だと信じております。志し半ばで岡崎を去ることになり、つくづく自分の未熟さを実感しております。

最後に、Innovationとは発明・発見を通して、社会に大きな変化をもたらす成果と解釈すると、前者は分子研の少数グループでも可能ですが、誰かが自分の成果を理解し世に広めてくれると思うのは余りにも人任せの感が拭えません。後者を行うには、ある程度研究グループの大きさが必須だと思います。分子研が我が国のLeading Instituteでありつづけるためには、主幹の先生が中心となって研究所の研究方向を示すべきだと思いますが、現実には主幹の先生は所内外で多くの用件を抱えているため研究室のスタッフとの話ができない程忙しいことが多々あることを危惧しております。是非、すばらしいInnovationが分子研から生み出されることを祈っております。

米満 賢治 中央大学理工学部物理学科 教授
(前 理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 准教授)

岡崎での生活を振り返ってみると



よねみつ・けんじ / 1985年東京大学理学部物理学科卒、1990年東京大学大学院理学系研究科物理学専攻博士課程修了、同年ロスアラモス国立研究所(米国)博士研究員、1993年国際理論物理学センター(イタリア)博士研究員、1994年ジョージア大学(米国)博士研究員、同年東北大学大学院情報科学研究科助手、1995年東北大学工学部応用物理学科助教授、1996年分子科学研究所助教授(准教授)、2012年4月より現職。

1996年2月に着任当時は理論研究系に谷村さん(現・京大)、岡本さん(現・名大)、平田先生(現・立命館大)が来て2年未満で、各研究室のメンバーも少なく、セミナーもスポーツも食事もなく一緒にしました。これはとても刺激的で、そこで新たに興味を持った分野から拝借したアイデアを物性理論に応用したこともあり、大きな影響を受けたことは間違いありません。また当時はテニス、スキーなどそれぞれでうまい人が数人いたので、一緒にいるとうまくなった気がしたものでした。そのころから理論系のソフトボールチームが強くなり、岡本さんのHPにあるような輝かしい戦績を残しています。理論だけでなく、実験グループからも、夜中に突然に若手研究者が居室に来て、議論が始まったこともあり、いまとっては懐かしい思い出です。

ただ、それぞれの研究室のメンバーが増えて、研究室間よりも研究室内での活動が主になってきて、雰囲気が変わったのも事実です。それと関係あるわけではありませんが、(通常、物性理論で扱う)分子間の性質と、(物理化学では当たり前の)分子内の性質が、刺激を受けるとどう絡み合うかをいま研

究しています。分子内の性質がそれぞれで閉じずに、どう分子間に波及するかというのは、何か“人間味”を感じさせるテーマです。うまく絡み合うと、変化が巨大になり、全体の性質がガラッと変わるとというのが示唆的です。もちろん、分子内の性質を使うのがミソです。

所外とは特定領域研究、NEDO、新学術領域研究などで共同研究をさせていただきました。すべて分子研OBが代表となって立ち上がったものです。集積型金属錯体の研究のきっかけも、光誘起相転移の研究を始めたのも、OBとのやりとりからです。ここ5年は毎年度、異なるグループの実験研究者と共著になっていますが、所外から来て実験した人まで含めると、そのほぼ全員が分子研関係者ということになります。いまの職場でも周りにOBが数人いて、頼りになります。名前を挙げるとすぐにページがあふれるので控えさせていただきますが、このように私の周辺(物質系)に限ってみても、分子研の影響力の大きさを改めて感じます。

いまは私にとって幸いなことに、理学的な雰囲気の強いところにいますので、基本に戻って現実系が非平衡でどう展開するかを見ていこうと思いま

す。最近は短い光パルスや強い電場を使って、電子相を制御するテーマがホットで、いろんなプロジェクトや会合が欧米で新しく立ち上がってきています。光誘起相転移は日本が発祥の地であり、これからも実験研究者との連携を大事にして、貢献したいと思います。長い間にわたって多くの先生方、職員、若手メンバーのお世話になりました。どうも有難うございました。



吉田 紀生

九州大学 大学院理学研究院 准教授
(前 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)

分子研での思い出と期待

よしだ・のりお / 1973年群馬県生まれ。2003年3月京都大学大学院理学研究科博士課程修了、博士(理学)。(株)富士総合研究所研究員、分子科学研究所博士研究員、2007年7月より同助教(平田グループ)を経て、2012年2月より現職。

2004年4月に博士研究員として採用して頂いて依頼、約8年間にわたり分子研にお世話になりました。その間、平田先生をはじめ多くの分子研の皆様大変お世話になりました。この場を借りてお礼を申し上げたいと思います。本当にありがとうございました。

例えば分子研は学生時代から憧れの場所でした。私の恩師・加藤重樹先生をはじめとして、大峯先生(現所長)、諸熊先生、永瀬先生などのそうそうたるメンバーが若かりし頃に所属しておられ(その当時のことは“話”としてしか知りませんが)、言わば“理論化学における梁山泊”のようなイメージを持っていました。その憧れの研究所で8年もの間、研究生活を送れたこと、多くの素晴らしい友人に巡り逢えたことは本当に幸せでした。

さて、岡崎での生活を総括するにあたって、私の大学院の出身研究室の先輩であり、岡崎での平田グループの先輩でもある佐藤啓文先生(現・京都大学)にならって、岡崎で得たもの、失ったものを挙げたいと思います。

【岡崎で得たもの1：健康な体】

佐藤先生は岡崎で失ったものに健康

な体を挙げておられましたが、私は逆に健康になりました。と、いうのも岡崎にいる間に実に**25kg**ものダイエットに成功したからです。健康体のリミットの**3倍**もあった **γ -GTP**は**1/4**ほどに下がり、体脂肪率は**30%**から**18%**になりました。肝臓が健康になったからか、お酒も美味しくなり晩酌の習慣も得ることになりました。

現任地の福岡は食べ物が美味しい食の都ですので、いつまでのこの体をキープできるのか、多少不安であります。

【岡崎で得たもの2：実験家の友人】

大学院までは全くといっていいほど実験家の方との交流がなかったのですが、分子研ではいくつかのプロジェクトを通じて多くの若手実験家の方々と知り合うことができました。今後も共同研究や飲み会などON-OFF問わずよろしく願います。

【岡崎で失ったもの：毛】

まあ、これは経年劣化変化ということとで。

と、いうわけで基本的には得るものばかりの充実した分子研生活でした。

最後になりましたが、分子研のますますのご発展をお祈りいたします。今後ともよろしく願います。

眞壁 幸樹 山形大学 大学院理工学研究科 准教授
(前 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 助教)

岡崎の思い出

まかべ・こうき／山形大学大学院理工学研究科システム創成工学科・バイオ化学工学専攻 准教授。2005年東北大学大学院工学研究科バイオ工学専攻博士課程修了（博士（工学））。2008年までシカゴ大学博士研究員。2012年まで分子科学研究所・岡崎統合バイオサイエンスセンター助教。2012年4月より現職。



分子研での研究生活を終えて、今年の4月から山形大学に異動しました。分子研に在任中は多くの先生方にお世話になりました。厚くお礼申し上げます。

私は分子研に着任する前は国外で博士研究員をしまして、そこでの研究が一段落つきそうだったので、日本での研究職を探し始めました。その時に分子研岡崎統合バイオサイエンスセンター桑島グループ助教の公募がありました。桑島教授は蛋白質の構造形成に関する研究でとても著名な先生であり、そこで蛋白質巻き戻り反応の最先端の研究を学びたいと思って応募しました。桑島先生とはそれまでほとんど面識がありませんでしたが（以前のProtein society meetingでの昼食時に同席させて頂いたことがありましたが、先生の海原雄山のような雰囲気に臆してその時はお話しできませんでした。着任後に分かりましたが、実際の桑島先生はとてもフランクな先生でした）、採用して頂きました。そして2008年の春に日本に帰国しました。このときに見た山手キャンパスの満開の桜はあまりにもきれいで、日本に帰ってきたと感激したのを今でも覚えています。

それから4年間、桑島先生からみつ

ちりと研究を指導して頂きました。先生の研究に対する態度はいつもびっくりするほど真剣で生物物理研究の迫力を垣間見たようでした。また、分子研に着任するまでは、実験の測定は主に市販の実験装置をそのまま用いて行っていました。桑島グループでは先生が設計された実験装置を日々改良して測定していました。私も部分的に装置の設計を手伝わせて頂く機会を頂き、市販品ではない装置を作製して測定する楽しさに触れることが出来ました。分子研で学ぶことが出来た技術は現在、研究を進展していく上で大きな力になっています。

最後になりましたが、滞在中にお世話になりっぱなしだった桑島先生と桑島グループメンバーの皆様、どうもありがとうございました。これからのますますのご発展を祈念いたします。