

# 分子研レターズ

VOL. **66**  
SEPTEMBER 2012  
ISSN 0385-0560

●巻頭言

## 天体化学 Astrochemistry

岡 武史 [シカゴ大学・名誉教授]

●レターズ

## 溶解度と過飽和に基づく 蛋白質凝集の理解

後藤 祐児 [大阪大学蛋白質研究所・教授]

●分子科学の最先端

## 凝縮系のダイナミクス： 揺らぎ・緩和、不均一性

齊藤 真司 [理論・計算分子科学研究領域・教授]

コヒーレントシンクロトロン放射光のテラヘルツ電場検出

片山 郁文 [横浜国立大学工学研究院・准教授] 芦田 昌明 [大阪大学大学院基礎工学研究科・教授]

希土類発光ソフトマテリアルを用いた可視域カラーチューニング材料の開発

西山 桂 [島根大学教育学部・准教授]

近接場光照射によるナノスケールでのポリジアセチレン薄膜の生成

坂本 章 [埼玉大学大学院理工学研究科・准教授]

直鎖ポリスチレン・金属ナノ粒子複合体の簡便な調製法

大高 敦 [大阪工業大学工学部応用化学科・講師]

共同利用研究ハイライト



## 巻頭言

- 01 天体化学 Astrochemistry ●岡 武史 [シカゴ大学・名誉教授]

## レターズ

- 02 溶解度と過飽和に基づく蛋白質凝集の理解

●後藤 祐児 [大阪大学蛋白質研究所・教授]

## 分子科学の最先端

- 07 凝縮系のダイナミクス：揺らぎ・緩和、不均一性

●斉藤 真司 [理論・計算分子科学研究領域・教授]

## IMSニュース

- 10 永瀬教授・平田教授・田中教授退職記念の会  
 11 所長招聘研究会「未来を拓く学術のあり方：化学が率いる持続社会」  
 12 第7回自然科学研究機構技術研究会  
 14 第93回分子科学フォーラム 鈴木章先生をお迎えして  
 16 受賞者の声

## IMSカフェ

- 22 New Lab ———— 山本 浩史／秋山 修志／村橋 哲郎／石崎 章仁／鹿野 豊  
 33 分子研出身者の今 ———— 小澤 岳昌／高田 彰二  
 36 分子研出身者の今 受賞者の声  
 40 分子研を去るにあたり  
 46 外国人研究者の紹介  
 47 外国人研究者の印象記  
 48 新人自己紹介

## 共同利用・共同研究

- 55 共同利用研究ハイライト  
 コヒーレントシンクロトロン放射光のテラヘルツ電場検出  
 片山 郁文 [横浜国立大学工学研究院・准教授] 芦田 昌明 [大阪大学大学院基礎工学研究科・教授]  
 希土類発光ソフトマテリアルを用いた可視域カラーチューニング材料の開発  
 西山 桂 [島根大学教育学部・准教授]  
 近接場光照射によるナノスケールでのポリジアセチレン薄膜の生成 坂本 章 [埼玉大学大学院理工学研究科・准教授]  
 直鎖ポリスチレン・金属ナノ粒子複合体の簡便な調製法 大高 敦 [大阪工業大学工学部応用化学科・講師]

- 63 施設だより  
 66 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

- 68 運営に関わって —— 江幡 孝之 [広島大学大学院理学研究科・教授] 吉田 朋子 [名古屋大学エコトピア科学研究所・准教授]  
 北尾 彰朗 [東京大学分子細胞生物学研究所・准教授]  
 72 関連学協会等との連携—連携事業：名古屋大学「博士課程教育リーディングプログラム」

## 分子研技術課

- 73 人と人を結ぶ架け橋 岩橋 建輔 [計算科学技術班]

## 大学院教育

- 76 コラム —— 分子科学研究所若手育成基金について（現状報告）  
 分子科学研究所若手育成基金 特別奨学生の声  
 79 イベントレポート  
 82 受賞者の声  
 82 修了学生及び学位論文名  
 83 各種一覧

# 天体化学 Astrochemistry

岡 武史

シカゴ大学 名誉教授

自然科学の分野、天文、物理、化学、生物は、始めは独立した知識の集積でありましたが、理解が深まるにつれて、隣りあった分野が結びつきました。僕達の時代は、一つおいた隣、天文—化学、物理—生物が結びつく時代です。分子科学は物理と化学の学問ですが、僕達の興味が、ある程度完成された物理、化学から、未知である天文と生物に向かうのは、全く自然な流れです。

天文学は、科学的思考の源であり、最も歳経た学問ですが、又最も若い学問でもあります。僕が今教える物理と化学は、大昔僕が習ったものと本質的に変わりません。しかし天文学は基礎から変わってしまいました。宇宙の神秘は物理、化学と桁違いの豊かさで、天文学は永遠に若い学問であると思われれます。

原子、分子、物質の学問である化学と、星、銀河、宇宙の学問である天文学は本質的に繋がっています。先ず C, N, O 等化学を豊かにする原子の原子核は高温、高压の星の中で、核融合反応により生成します。原子の存在比は星の進化の結果であり、天体核物理で説明されます。逆に星は分子雲の重力凝縮から生まれ、その際分子が熱廃棄の役割を果たします。星がなければ分子がなく、分子がなければ星がない。星と分子は鶏と卵のような密接な関係にあります。

天体化学には物理、化学の基礎が遍く関連します。来年 *Chemical Review* と *Journal of Physical Chemistry* の両方で、

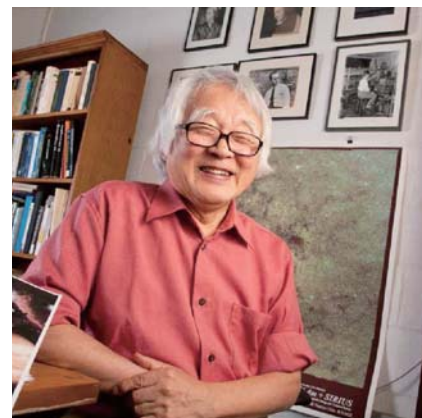
*Astrochemistry* の特集号が出ますので、ご覧ください。宇宙にある物質を調べるには、ラジオ波から X 線、 $\gamma$  線に至る光の観測が唯一の手段です。一昨年惜しくも亡くなられた加藤重樹さんは「正攻法のみが後世まで残る」と言われたそうですが、観測された光を虚心に解析するのが天体化学の正攻法です。

天体観測の魅力は度肝を抜かれるような結果が得られることです。僕の最初の仕事は  $\text{HC}_5\text{N}$  でした。これは数年失意が続き、溺れるものは藁をもつかむといった有様でやった仕事でしたが、遙か銀河中心から、強いマイクロ波発光が届いたのには魂消ました。 $\text{HC}_7\text{N}$ 、 $\text{HC}_9\text{N}$  と驚きは続き、この時協同観測者であった Kroto さんが  $\text{C}_{60}$  を発見したのは、この驚きの、延長でした。

結果を狙って時間をかけて進める研究もまた天体観測の醍醐味です。僕の  $\text{H}_3^+$  の仕事はそれでした。正三角形の  $\text{H}_3^+$  には回転スペクトルがないので、まず赤外線イオン分光の技法を、実験室と、観測所の両方で確立する必要があり、観測まで、夫々、5年と16年かかりました。これは、謂わばごり押しですが、面白いことに一旦観測が可能になると、道は一気に拓け、思いも及ばなかった天文学的結果が続々と得られました。特にここ数年の銀河中心に多量に存在する  $\text{H}_3^+$  の仕事は、今が関ヶ原です。

天体化学についてもっと知りたい方は、下記の拙文をお読みください。

2012年6月16日



おか・たけし  
シカゴ大学、化学教室、天体物理学教室、Enrico Fermi 研究所名誉教授。1960年東大理学部、霜田研究室、森野研究室で  $\text{H}_2\text{CO}$  のマイクロ波分光により理学博士。1963年、National Research Council of Canada 純粋物理部門博士研究員、1965年同研究員、1975年 Herzberg 天体物理学研究所研究員、1980年実験室で  $\text{H}_3^+$  の赤外線スペクトルを観測。1981年シカゴ大学化学教室、天体物理学教室教授。1993年 Enrico Fermi 研究所教授。1996年星間  $\text{H}_3^+$  の発見（第一回分子科学フォーラム）。永年実験室のイオン分光と、天体観測の二刀使いでしたが、2003年停年退職後は天体観測に専念、目下は銀河中心の  $\text{H}_3^+$  の研究に熱中しています。僕は、研究者としての60年間素晴らしい先達、友人、学生に恵まれました。中でも、大学院学生の時、霜田光一先生から教わったことが、その後の研究の支柱です。精神面では、実験・観測に没頭するさまを、目の当たりに示され、技術面では分光学、特に Order of magnitude の思想を教わりました。

岡武史「天文学と化学、上、下」現代化学 2007年1月号, 2月号  
<http://ci.nii.ac.jp/naid/40015219129> <http://ci.nii.ac.jp/naid/40015255683>  
 T. Oka, Spectroscopy and astronomy:  $\text{H}_3^+$  from the laboratory to the Galactic center, *Faraday Discuss.* 150, 9-22 (2011) DOI: 10.1039/c1fd00092f

後藤 祐児 大阪大学蛋白質研究所 教授

# 溶解度と過飽和に基づく 蛋白質凝集の理解



ごとう・ゆうじ

1982年大阪大学大学院博士課程修了（理学博士）、1982年徳島大学医学部助手、1984年大阪大学理学部助手、1989年同助教授、1998年大阪大学蛋白質研究所教授

筆者は1970年代後半から、蛋白質研究に関わってきた。当時、蛋白質の凝集は、蛋白質研究の障害と見なされた。その後、蛋白質凝集がさまざまな病気に関わることがわかり、凝集を避けることはできなくなった。アミロイド線維を中心とする蛋白質異常凝集の研究が進むと、「溶解度」や「過飽和」、「結晶化」といった視点から研究を進めることの重要性が明らかになってきた。これらの研究は、正に分子科学の得意とするものである。分子科学と蛋白質科学が協力することによって、蛋白質異常凝集の新たな地平を切り開くことができる。分子科学に期待するところ大である。

## 1. 分子研との関わりと共同利用

古い記録を探すと、1985年12月頃、分子研をはじめて訪問した。当時、大阪大学理学部において、抗体やそれに結合する Secretory Component という蛋白質の構造物性を研究していた。同物理学科の櫛田孝司研究室の、木下修一さん、栗田厚さんなどにお願

いして、分子研の極端紫外光研究施設（UVSOR）で、蛍光寿命や蛍光偏光解消を測定してもらうことになった。UVSORの稼動は1983年なので、共同利用がはじまって間もないころに訪問したことになる。実験ホールに入ったとき、最先設備を駆使した実験施設において、全国的な共同利用が行われていることに、大いに感動したことを思い出す。残念ながら筆者のもちこんだ試料については、論文を発表するまでには至らなかった。

筆者の在籍している大阪大学、蛋白質研究所では、1958年の設立以来、共同利用・共同研究を活動の基盤としている。時代の変遷と共に、共同利用の在り方は変化した。現在では、スプリング8蛋白質ビームラインや950 MHz 超高磁場NMR装置などの大型機器の共同利用、世界蛋白質立体構造データベース（wwPDB）の世界3拠点の一つとしての活動に力を入れている。他方、設立当初から変わらない活動に、蛋白研セミナーがある。毎年十数件の蛋白研セミナーが開催され、各セミナーに

は数十から百名程度が参加している。関連分野、あるいは分野を超えて、焦点を絞った研究会は、その研究領域の交流と活性化に重要な役割を果たしている。

今日、研究機器や設備の充実、ネットワークの普及によって、我々は、直接、顔を合わせなくても、多くのことを済ますことができる。しかし、できないことも多い。蛋白研セミナーなどで、対面して他を知り、仲間を作るとは、研究の進展に必須であると共に、喜びである。

国際交流においても全く同じである。世界のグローバル化により、欧米に長期滞在しなくても、あるいは国外の学会に参加しなくても、インターネットによって、極めて質の高い研究情報を得ることができる。しかし、人と人の交流の重要性は、変わらない。従って、交流は、国内だけでなく、世界に向かうべきである。幸いなことに我々は、アジアに多くの仲間をもつ。蛋白質科学の領域では、Asia Pacific Protein Associationという新しい連合組織が



発足した (<http://www.pssj.jp/APPA/>)。現在、アジア・太平洋地域の13カ国が参加しており、同地域の勢いを反映している。このような流れを認識し、さまざまな集会を企画して、人の交流を推進することが、共同利用・共同研究の拠点として重要である。分子科学研究所と蛋白質研究所に共通した課題と考える。

## 2. 蛋白質凝集の回避

筆者自身の研究を振り返ったとき、凝集に対する意識の変化に感慨を覚える。1986年頃、UC Santa CruzのFink教授の研究室において、 $\beta$ ラクタマーゼの「モルテン・グロビュール状態」と呼ばれる中間の状態の構造や安定性を研究していた<sup>[1]</sup>。動的光散乱によって何とかそのサイズを測定しようとした。ところが光散乱によって、 $\beta$ ラクタマーゼは大きな凝集体を形成していることが明らかとなった。「他の蛋白質ではモルテン・グロビュール状態のサイズが報告されているのに、 $\beta$ ラクタマーゼは濁ってしまい測定できない。ああ、何と残念なことだろう。」と嘆いた。

昔も今も、蛋白質研究と言えば、濁っていない溶液を対象として研究することが中心である。ここで、「蛋白質とは何か?」と問われたとき、皆さんは、何と答えるだろうか。「生体の機能物質」、「アミノ酸がペプチド結合でつながった鎖状高分子」等々、さまざまな回答が考えられる。しかし、歴史的には、『蛋白質とは、(熱や酸によって)変性して、凝集する生体物質』であった。今でも日常の食品としての蛋白質においては、凝集が蛋白質の本質的な特徴であることを日々、実感する。

蛋白質が科学の研究対象となったとき、研究手法のほとんどが溶液を必

要としたため、凝集や濁りは研究から排除された。これによって蛋白質研究が大きく進展したことは疑いもないが、本来、蛋白質のもつ本質的な特徴は無視された。遂には、濁りは実験条件が悪いためとさえ、考えられるようになった。本末転倒であるが、筆者の嘆いたモルテン・グロビュールの凝集などは、正にそのような状況にあった。

## 3. 蛋白質凝集研究の進展

凝集を理解しようとする研究が大きく進展したのは、1990年に入ってからであった。医学の重要なテーマであったアミロイドーシスやその原因物質であるアミロイド線維に、注目が集まった。決定的であったのは、1995年頃に社会問題となったBSE(ウシ海綿状脳症)である。蛋白質の異常凝集体が、BSEをはじめとするプリオン病の感染原因物質であることが示唆された。異常凝集やミスフォールディングが、プリオン病、アルツハイマー病をはじめとするさまざまなアミロイドーシス、あるいはセルピン病などの原因となっていることが提案された。フォールディング病、コンフォメーション病、蛋白質異常凝集などの用語が現われ、関連

する分野が台頭した。

特にアミロイド線維を対象とした研究が進展するにつれて、ユニークな特徴が目されることになった。第一に、アミロイド線維の形成は、一定のラグ時間の後に突然起きる。また、一旦できあがった線維(シード)をモノマー溶液に加えることによって、ラグ時間をなくすることができる。これらは全て、物質の結晶生成の特徴と同じである。つまり、アミロイド線維は、原因蛋白質の過飽和溶液が解消されたときに析出する構造形態であることが明らかである。プリオン病は蛋白質によって伝播する。不思議な現象と考えられているが、結晶成長と同じと考えると、かなりの部分は理解できる。

2000年以降、アミロイド構造生物学という領域が台頭した。アミロイド線維やその前駆体、あるいはオリゴマーを構造生物学的に研究することによって、凝集の分子機構を理解しようとする研究が盛んである(図1)。そのような研究が重要であることは、もちろん言うまでもないが、これとは別の視点からの研究も重要であると考えている。

筆者らは、超音波を用いることによって、モノマーであったアミロイド原因

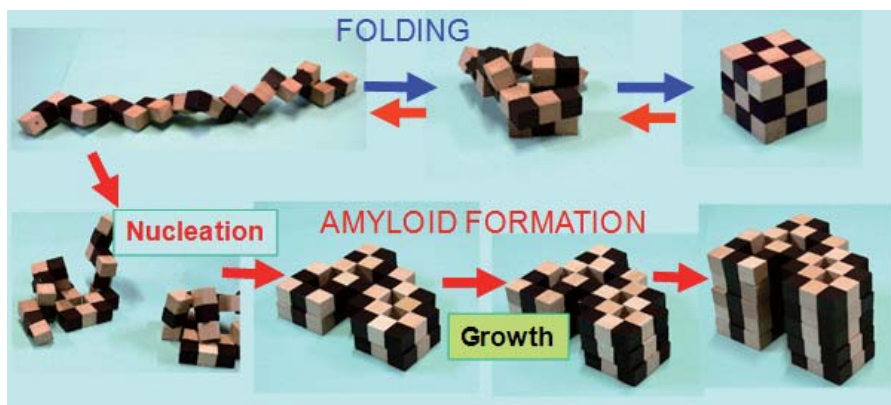


図1 積み木パズルを用いた蛋白質のフォールディング(上)とアミロイド線維形成(下)のイメージ。

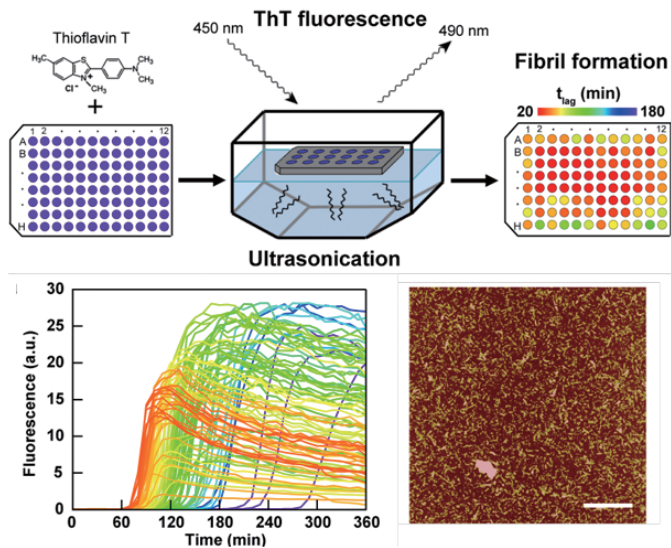


図2 超音波による $\beta$ 2ミクログロブリンのアミロイド線維形成。文献[3]を改変。96穴プレートに蛋白質溶液とチオフラビンTを加え、超音波を照射する。チオフラビンTの蛍光強度を観測することによってアミロイド線維の形成を検出する(下左)。赤い穴が、より速くアミロイド線維を形成した。右下は生成したアミロイド線維の原子間力顕微鏡画像。破碎効果も加わり、短い線維がたくさんできている。

蛋白質に効率よくアミロイド線維を誘導できることを見出した(図2) [2-4]。従来、超音波は、でき上がった線維を砕き、アミロイドのシードを作ることに使われてきた。超音波によるアミロイド線維形成は、原因蛋白質の過飽和状態が解消することによって、アミロイド線維が形成したことを示す。つまり、アミロイド線維は、原因蛋白質の濃度が溶解度を越えたときに析出する構造状態である。

#### 4. 酢酸ナトリウムの過飽和溶液

過飽和とは、平衡論的な溶解度以上に溶質が、溶解した状態である。準安定状態であるが、核形成が起きると結晶が析出して、平衡状態に至る。また既にできた結晶のかけらをシードとして加えると、結晶は析出する。過飽和といえば、「冷凍室の中の水」、「低温室にいた高濃度の緩衝液」のように、極めて不安定な状態であり、それ自体は、ささいなことにすぎないと思っていた。

筆者の考えを一変させたのが「エコカイロ」である(図3)。既にご存知の方も多と思うが、これに感動した経

験を振り返ってみたい。インターネットの検索は、こちらが思いもなしのことを回答する。あるとき、「過飽和」で検索すると、「エコカイロ」が返ってきた。酢酸ナトリウムの過飽和溶液を利用したハンディヒーターが、エコカイロである。約8Mの酢酸ナトリウム過飽和溶液は、室温でも安定であり、多少のことでは、過飽和は解消されない。過飽和溶液中には金属片が入れてあり、これをクリックして衝撃を与えると、過飽和は解消して結晶の析出が始まる。約50ミリリットルの酢酸ナトリウム溶液の一カ所に生じた結晶は、数秒の内に伝播して、全体が固体になる。この



図3 固体(下部)に変わっていく途中のエコカイロ。

とき凝固熱が発生して、暖をとる。カチカチに固まったエコカイロは沸騰水でしばらく煮ると、溶解する。これを冷やすと、再び、はじめの過飽和溶液にもどる。

酢酸ナトリウムはさまざまな化合物の中でも特に過飽和を形成しやすい物質であり、理科の教材にもよく使われるらしい。そこで、中学や高校の授業などで、あるいは目にしたことがあったかもしれない。記憶にないのは、興味がなかったからであろう。早速、購入して実際に体験した。

『蛋白質異常凝集を解く鍵は、過飽和にあり』と確信した。エコカイロを静置しておく限り、おそらく永久に過飽和は解消されない。過飽和は極めて頑強である。それがクリックによって数秒で固化する。あるいは、酢酸ナトリウムのひとかけらを加えた時、それをシードとして酢酸ナトリウムは結晶化を開始する。過飽和は決してささいなことではない。

#### 5. 過飽和とは何か?

過飽和とは何であろうか。過飽和についてたずねると、「非平衡」、「準安

定状態」などの用語と共に、核形成反応の難しさが説明される。核形成をもたらす相互作用は、エネルギー的には好ましいが、いくつもの分子を集合させることは、エントロピー的に困難であり、極めて稀にしか起きない。一旦、核が形成されると、その後の成長は容易であり、核は一気に成長して平衡状態にいたる。

このような説明は、蛋白質を含む一般の物質の結晶化だけでなく、アミロイド形成についてもしばしば用いられる。だが、どうもわかった気にならない。特にエコカイロの強靱な過飽和を見ると、どうしてそんなに核形成が難しいか、別の説明がほしくなる。酢酸ナトリウムは、何故、強固な過飽和溶液を作ってしまうのか、その仕組みは、どのくらい理解されているのであろうか。筆者は、未だ満足のできる答えを見つけない。

過飽和の代表的な例は、水の過冷却であろう。水が氷になる仕組みは、分子研・名古屋大において、大峯巖グループによって精力的な研究がなされてきた。「水の過冷却とは何か」という興味を抱いて、2002年Natureに発表された論文を読んだ<sup>[5]</sup>。詳細についてわからない点があるが、氷の核形成の実体が、いくつかの氷型の水素結合ネットワークが同時に形成された状態であることを、コンピューター上で再現することに成功した論文であると理解した。氷の核形成が難しいのはよくわかる。大きな進歩であるが、筆者にはやはり腑に落ちないところがあった。

大峯グループの研究を検索していると、松本正和さん（岡山大学）らが、「過冷却水の構造」という立場で研究を進めていることを知った<sup>[6]</sup>。これまた、わからない点があるが、「過冷却水には、

より構造化した水の構造があり、これが過冷却水の特異な物性をもたらしている」と読んだ。つまり、過冷却水の構造自体が、バルク水と異なっており、これが過冷却、あるいは過飽和をもたらしている。

都合のいいように解釈して、過飽和の実体を以下のように考えてみた。過飽和は、結晶析出の自由エネルギー障壁が高いことによって生じる準安定状態である。溶質にとって「自由エネルギー障壁が高いこと」は相対的な問題である。第一の可能性は、これまでの説明通り、結晶析出の自由エネルギー障壁が高いことである。他方、結晶析出をもたらす因子は、同時にさまざまな構造転移を誘導する可能性がある。これが、結晶析出と競合する反応であるならば、それらは溶液状態の自由エネルギーを下げ、ひいては相対的に溶質の析出を妨げる。つまり、過飽和をもたらす。別の言い方をすると、デッドエンドプロダクトの安定化である。このようなデッドエンドプロダクトとしては、溶質分子内での溶解度を高めるような構造変化の他、分子間での準安定な相互作用などが考えられる。先に紹介した過冷却水の構造化した水<sup>[6]</sup>は、正にこのような状態に見える。さらに想像をたくましくすると、蛋白質のフォールディングは、不溶性の変性蛋白質が溶解性をあげて過飽和になることを追求したために生じたデッドエンドプロダクトにさえ、見えてしまう。

## 6. 研究の新たな地平

以上の蛋白質や物質の過飽和現象に注目すると、研究の新たな地平が見えてくる。雨や雪、氷に限らず、結晶と名のつくものの中には、必ず過飽和がある。自然界で一般的な過飽和は、生

命現象にさまざまに入りこみ、蛋白質だけでなく、生命全体に大きな影響を及ぼしている可能性がある。もし、それが有利であるとしたら、生命は過飽和を活用したであろうし、不利であるならばできるだけそれを回避する形で生命は進化したであろう。

先に述べたアミロイド線維形成などは、生命が過飽和を利用した代表的な例とみなすことができる。過飽和がなければ、溶解度を越えた蛋白質やペプチドは、ただちに析出する。ところが過飽和によって、溶液状態は維持される。急激な環境変化に対して緩衝作用をもたらす、分子シャペロンの働きに似ている。興味深いことに、超音波処理によって蛋白質の過飽和は、容易に解消することができる<sup>[3]</sup>。生体には超音波はないが、それに相当する制御因子の存在する可能性がある。

この他、生体で蛋白質の関わる過飽和現象として、アクチン、微小管など、繊維状の高次構造体の形成反応などが考えられる。これらには、さまざまな調節蛋白質が関与し、その形成や分解を制御している。過飽和現象を生体がうまく利用した例ではないだろうか。過飽和現象の特徴は、大きな協同性である。エコカイロからもわかるように、白黒が極めてはっきりとしており、生体のスイッチとして最適である。

過飽和を理解するには、ガラス転移も同時に考えることも重要である<sup>[4]</sup>。結晶化の力があまりに強いと、過飽和を維持することができずガラス状態に至る。ガラス状態は、相互作用が無秩序に起きる為に全体が不規則に固定化された状態である。アミロイド線維形成の阻害剤の多くは疎水性物質である。強い疎水性によって、アミロイド性蛋白質に結合し、それらを不定形凝集として沈殿させるこ



とが提案されている<sup>[7]</sup>。このような考えは、石英（二酸化ケイ素、 $\text{SiO}_2$ ）に、酸化ナトリウム（ $\text{Na}_2\text{O}$ ）、酸化マグネシウム（ $\text{MgO}$ ）などの副成分を加えることによって、ガラス転移温度を上げ、いわゆる窓ガラスを作製するのと似ている。蛋白質の凝集においても結晶化のようなアミロイド線維形成と、ガラス転移に似た不定形凝集を区別することが重要である<sup>[4]</sup>。

## 7. おわりに

何とんでも、本当に知りたいことは、過飽和の実体である。水の過冷

却をもう一度引き合いに出すと、過冷却現象には、核形成の困難さだけでなく、氷と競争するような水の構造化が起きている可能性がある。エコカイロには、酢酸ナトリウムの結晶化と競争するような構造化した酢酸ナトリウムの水溶液構造が存在しないだろうか。ネイティブなニワトリ卵白リゾチームの過飽和溶液には、結晶化と競合するような溶液構造がないだろうか。アミロイド性蛋白質やペプチドの過飽和溶液には、アミロイド析出と競争する、溶液構造がないだろうか。

過飽和の実体を明らかにすることは、

蛋白質異常凝集の本質を理解することであり、ひいては蛋白質の構造をその物性に立って理解することである。そして、これは物理や化学の研究であり、分子科学の重要なテーマである。生命科学と物質科学が連携して、蛋白質異常凝集の理解の新たな地平の切り開かれることを願う。

最後に、本記事では、専門分野を越える話題に対しても、大胆に想像を膨らませた。誤りや誤解があるかもしれないが、ご教示、議論いただけたら、幸いである。

謝辞 本稿に対して、貴重なコメントお寄せいただきました松本正和さん（岡山大学）に感謝します。

## 参考文献

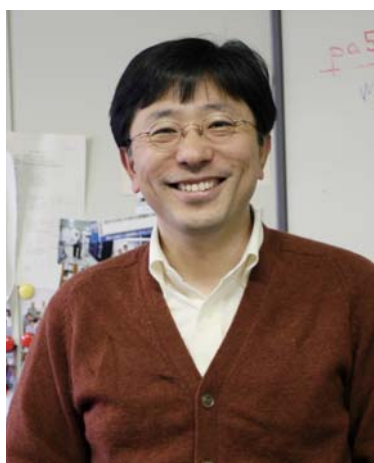
- [1] Goto, Y., and Fink, A. L. (1989) *Biochemistry* **28**, 945-952
- [2] Ohhashi, Y., Kihara, M., Naiki, H., and Goto, Y. (2005) *J Biol Chem* **280**, 32843-32848
- [3] So, M., Yagi, H., Sakurai, K., Ogi, H., Naiki, H., and Goto, Y. (2011) *J Mol Biol* **412**, 568-577
- [4] Yoshimura, Y., Lin, Y., Yagi, H., Lee, Y.-H., Kitayama, H., Sakurai, K., So, M., Ogi, H., Naiki, H., and Goto, Y. *Proc Natl Acad Sci U S A online*
- [5] Matsumoto, M., Saito, S., and Ohmine, I. (2002) *Nature* **416**, 409-413
- [6] 松本正和, and 田中秀樹. (2011) *化学* **66**, 36-38
- [7] Lamberto, G. R., Binolfi, A., Orcellet, M. L., Bertoncini, C. W., Zweckstetter, M., Griesinger, C., and Fernandez, C. O. (2009) *Proc Natl Acad Sci U S A* **106**, 21057-21062



# 凝縮系のダイナミクス: 揺らぎ・緩和、不均一性

齊藤 真司

理論・計算分子科学研究領域  
計算分子科学研究部門 教授



さいとう・しんじ

1988年慶應義塾大学工学部卒、1990年京都大学大学院工学研究科修士課程修了、1995年博士(理学)(総研大)。1990年分子科学研究所技官、1994年名古屋大学理学部助手、1998年助教授を経て2005年10月より現職。

## はじめに

凝縮系では、熱揺らぎや外場による電子や振動状態の変化が、様々な時間・空間スケールでの構造変化や反応を誘起し、その結果として物性や機能が生み出されている。我々は、その物性や機能を生み出す反応や変化における分子論的機構や動的構造に興味を持ち、シミュレーションを利用した高次非線形分光法や多時間相関関数などの解析を通じて、凝縮系のダイナミクスの解明を進めている。

## 1. 溶液中の高速反応ダイナミクスに伴う振動励起と緩和

レーザーの進展により、10 fs 程度のパルスを利用した時間分解分光が可能となり、溶液内や生体分子の反応および緩和ダイナミクスに関する様々な実験が進められている。我々は、生体分子など凝縮系の電子励起状態の電子・振動ダイナミクスの解明のための効率良い計算手法の開発、その応用解析を進めており、その一例として、溶液内の10-hydroxybenzo[h]quinoline (10-HBQ) の励起状態プロトン移動にともなう構造変化・緩和ダイナミクスを解析した<sup>[1]</sup>。

この分子は電子基底状態ではエノール型をとる。電子基底状態で平衡にある10-HBQを励起すると、約30 fsの時間定数でプロトン移動が起こりケトン型へと変化する(図1a)と同時に、分子振動の励起、周りの溶媒分子の配置・配向変

化が引き起こされ、分子構造の変化により励起された振動エネルギーは分子内で緩和するとともに溶媒へと散逸する。分子振動の時間変化は、ポンププローブ分光法を用いた実験により調べられており、実験に対応するシクロヘキサン中の10-HBQの電子励起後の振動モードの時間変化の計算結果を図1bに示す。励起振動モードのキャラクタを解析するとともに、真空中での振動モードの時間変化(図1c)との比較から、振動モードによっては、溶液内での面外変角モードの抑制による緩和の長寿命化や溶媒の運動へのエネルギー緩和による短寿命化など、振動緩和における溶媒の影響も明らかになった。現在、この計算・解析手法の生体系への展開を進めている。

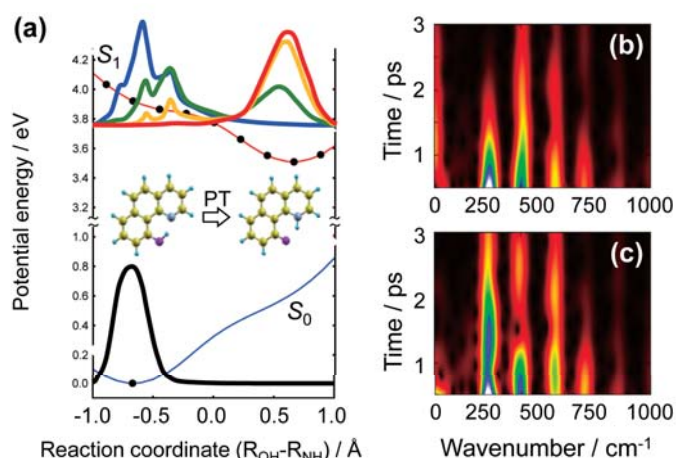


図1 (a) 計算による10-HBQの基底および電子励起状態のポテンシャルエネルギー面および反応座標に沿った状態分布の時間変化。黒は基底状態での分布、青、緑、橙、赤は電子励起後、10、30、50、70 fs後の分布を表す。(b) シクロヘキサン中および(c) 真空中の10-HBQの電子励起に伴う励起された振動成分の強度の時間変化。



寿命を定量化できるようになった。また、動的不均一性の寿命の温度依存性を解析から、温度低下とともに、動的不均一性の寿命は密度の二点相関関数で決定される $\alpha$ 緩和時間よりも急激に遅くなることを明らかにした(図3)。このように、新しく導入した多時間相関関数に基づく解析により、通常の解析では捉えきれない隠れたダイナミクスを明らかにした。

#### 4. 過冷却水における熱力学的性質の分子論的起源

2に示した水のエネルギー緩和において、緩和の最終段階である水素結合の構造変化過程は温度低下とともに急激に遅くなる。このようなダイナミクスの遅延化に加え、過冷却水では熱力学的性質の特異性が増すことが知られている。そのような特異性の一つとして、等積比熱には見られない等圧比熱の特異的な温度依存性がある。比熱がエネルギー揺らぎで表されることは大学でも習うが、特異的な温度依存性を示すエネルギー揺らぎは、どのような分子論的運動に由来しているのでしょうか？

静的揺らぎ(例えば、誘電率)は動的揺らぎ(例えば、時々刻々の分極揺らぎ)の結果であり、動的揺らぎの解析から、どのような運動がどの程度静的揺らぎに寄与しているかを知ることができる。

ここでは、東博士、矢ヶ崎博士(現在、岡山大学)、金助教が行った研究の一部を紹介した。紙面の関係上、小林博士(現在、理化学研究所)、炭竈博士(現在、福井大学)、井本君達の研究については紹介できなかったが、全ての共同研究者に感謝する。また、これらの成果は、おもに科学研究費補助金と計算センターの利用によって得られたものである。

#### 参考文献

- [1] M. Higashi and S. Saito, *J. Phys. Chem. Lett.* **2**, 2366-2371 (2011).  
 [2] T. Yagasaki and S. Saito, *Acc. Chem. Res.* **42**, 1250-1258 (2009), *Annu. Rev. Phys. Chem.* (submitted) など.  
 [3] K. Kim and S. Saito, *Phys. Rev. E* **79**, 060501(R) (4 pages) (2009), *J. Chem. Phys.* **133**, 044511 (10 pages) (2010) など.  
 [4] S. Saito, I. Ohmine, and B. Bagchi, submitted (2012).

我々は、複素比熱(比熱に関する複素感受率)を求め、等圧比熱、等積比熱に寄与する揺らぎの時間・空間スケールを解析し、これらの比熱の温度依存性の違いを明らかにした。さらに、比熱や圧縮率の温度変化と過冷却液体の水素結合のネットワーク構造との係わりなどについても明らかにした<sup>[4]</sup>。

#### 今後の展開

近年の様々な実験により、生体分子を含め、電子励起状態の関わる詳細なダイナミクスが明らかにされるようになった。これらの系において、電子状態、振動状態がどのようにカップルし、反応や機能に繋がっているのかに興味を持たれる。

また、時間的・空間的不均一なダイナミクスの起源も非常に興味深い問題である。関連する問題として、最近の実験研究の進展により、生体分子の機能発現にコンフォメーションの多様性の関与・重要性も見出されており、これらは物理化学に留まらない重要な問題である。

実験データ、統計力学や分光法のアイデアを利用した理論・計算科学研究を通して、速く局所的な運動から熱力学的性質や機能にいたる不均一で階層的な構造変化ダイナミクスを明らかにしていきたい。

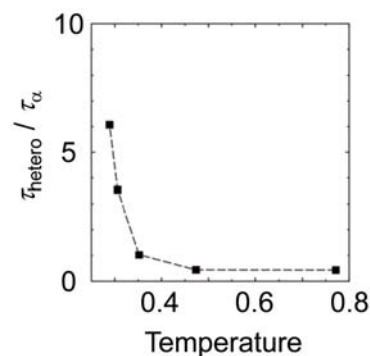


図3 モデル液体における不均一ダイナミクスの寿命と $\alpha$ 緩和時間の比の温度変化。この系でのガラス転移温度は0.265。

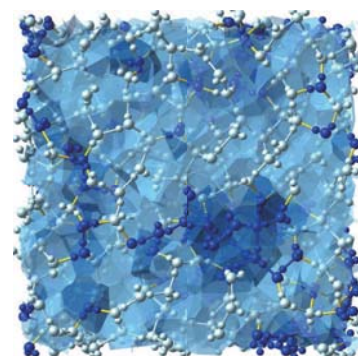


図4 過冷却水における空間的密度揺らぎ。濃い(薄い)青で示した領域は局所的密度の高い(低い)領域を表す。ここに見られる密度揺らぎは時間的にも揺らいでおり、その結果として、水の特異的な熱力学的性質が生まれる。



## 永瀬教授・平田教授・田中教授退職記念の会



永瀬教授



平田教授



田中教授

理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 教授の永瀬茂先生、理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 教授の平田文男先生、生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 教授の田中晃二先生が、平成24年3月をもって分子科学研究所を定年退職されました。

永瀬先生は、昭和54年に分子科学研究所技術課に着任されました。昭和55年横浜国立大学教育学部助教授に赴任され、同大学教授に昇任、東京都立大学教授として異動された後、平成13年に理論研究系の教授に着任されました。分子研におかれましては、理論・計算分子科学研究領域主幹、計算科学研究センター長、総研大物理科学研究科構造分子科学専攻長、大学院委員会委員長などを歴任されました。

平田先生は、平成7年に京都大学から理論研究系の教授として着任され、理論・計算分子科学研究領域主幹、計算科学研究センター長を歴任されるとともに、「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト」および「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア」の研究開発プロジェクト拠点長をお勤めになられました。

田中先生は、平成2年に大阪大学から錯体化学実験施設錯体物性研究部門の教授として着任されました。分子研在職中は、学術審議会専門委員、錯体化学実験施設長、総研大物理化学研究科構造分子科学専攻長、生命・錯体分子科学研究領域主幹を歴任されました。

定年退職にあたり、平成24年3月14日午後より岡崎コンファレンスセンター大会議室において退職記念の会を開催しました。記念事業として、大峯

巖所長のお祝いの言葉の後、永瀬教授による最終講義「実験とのインタープレイを楽しんで」、平田教授による最終講義「液体中の化学、化学における液体論」、田中教授による最終講義「化学エネルギー変換を目指した金属錯体」が行われ、各先生がこれまで進めてこられた化学結合論、液体論、錯体触媒の合成と反応設計に関して、研究を始められた頃から現在に至るまでのお話を伺うことができました。

最終講義の後、岡崎コンファレンスセンター中会議室において祝賀会を開催しました。研究所内、所外合わせて175名（所外100名、所内75名）の方がたのご出席を賜りました。祝賀会は、大峯巖所長のご挨拶、理化学研究所計算科学研究機構長の平尾公彦先生、名城大学農学部教授の大場正春先生、東京大学大学院工学系研究科教授の藤田誠先生にご祝辞を頂き、小杉信博研究総主幹の乾杯で始まりました。また、京都大学福井謙一記念研究センターリサーチリーダーの榎茂好先生、京都大学化学研究所教授の中原勝先生、京都大学大学院理学研究科教授の北川宏先生にもご祝辞を頂きました。

最後に記念品、花束の贈呈の後、三先生のご挨拶を頂き、盛会のうちに無事祝賀会を終えることができました。年度末のお忙しい中、ご出席いただいた175名の皆様、お祝いをお送りくださった95名の皆様、そしてこの記念事業のために様々なご支援をいただいた分子研の皆様に対して心よりお礼申し上げます。

(斉藤 真司 記)

## 所長招聘研究会「未来を拓く学術のあり方：化学が率いる持続社会」

平成24年8月8日午後恒例の所長招聘研究会第9回が開催された（参加者約70名）。企画の中心は日本学術会議・化学委員会と日本化学会である。最近、日本学術会議、日本化学会から通常の分子研研究会（学協会連携枠）の申請を受け入れるようになったが、この会は、次ページに示した講演者、講演タイトルからもわかるように分子研研究会に収まりきらない内容である。実施にあたっては、技術職員、事務職員から支援を受けている。

企画側の挨拶、恒例の野依先生の講演に引き続き、今回は、大学院を中心とした高度人材育成について、国内、ヨーロッパの現状と将来動向の議論があり、次に、科学技術行政を含めた議論があった。後半になるにつれて、いつもどおり放談会の様相を帯びてきて、1時間以上予定をオーバーした。熱い議論は研究会後の交流会にも引き継がれた。ここでは、会の雰囲気を知ってもらうために、あえて誤解を恐れず意見交換の一端を紹介したい。なお、近く日本化学会の「化学と工業」誌にも当研究会の報告が掲載されることになっている。

3.11後は物理の時代から化学の時代になった。化学が社会の理解と支援を得るチャンスが巡ってきたにも関わらず、自分だけの世界に逃げ込んでしまっただけではダメである。

事業仕分けで浮き彫りになった科学と政治との対話不足の問題を放置したことが3.11後の科学不信の一因になっている。

日本の社会にはそもそも科学が根付

いていない。日本学術会議は、自ら科学を社会に根付かせる活動をすべき。

我が国の国立大学、日本学術会議、日本化学会は政治批判をする前に、自らの現状を直視・反省して、自律的に改革しなければならない。日本学術会議は、このような会議を漫然と毎年開くのではなく、目的を明確にして建設的に行動すべき。

アカデミアは、次の世代、次の次の世代が生きていくために貢献しないとイケない。生存権に関して国家間の政治的なコンフリクトが生じる前に中立的、自律的に活動しないとイケない。しかし、今、その準備が全く出来ていない。

公的機関のスポンサーである社会に対して科学者が自らの研究の重要性を説き、支援を求めればかりでなく、実社会の諸問題にもっと真摯に目を向け、その解決に強い意志を持って自らの経験と能力を振り向けることが重要。そのような背景で課題解決型、グランドチャレンジ型が重視されるようになった。たとえば、水の研究だけしていればいいということではない。水問題を解決しなければならない。

日本独自制度として高く評価されてきた工学部が今は理学部化してしまい、社会貢献度が低下していることが、大学全体のバランスを欠くことになっている。学術論文以外の評価軸を自ら作るべき（文科省が評価軸を作っているわけではない）。

今の大学教育は基礎力を分厚く身につけさせることには力を入れていないのではないかと。地力があってチャレンジする人がオリンピックでメダルを



獲っている。基礎力を身につけた上で新しいことにチャレンジできる人を生み出すことが大学の使命。

大学院博士課程は中世モデルの遺物である。細分化された専門分野に閉じた徒弟制度によってクローン製造を続けているのは質の劣化はあきらめ。抜本的改革なくば、閉鎖すべき。

プロジェクト予算で大学院生補助、ポスドク雇用を始めてしまうと、次の予算獲得の動機が研究テーマではなく、囲い込みのための雇用対策になってしまう。サステナブルな人材育成には時限付きのプログラムはそぐわない。

アメリカの院生・ポスドクはいろんな研究室を経験することによってコミュニケーション能力を身に付けていく。コミュニケーション能力不足が問題になっている日本でも見習うべき。

定員割れにならない日本のトップ大学だけでも大学入試問題を見直したらどうか。大学入試で理系には歴史や哲学を、文系には数学や物理、化学を含め、また、スキルを問う問題ではなく、考えさせる問題を出す。大学入学後に分野横断・文理融合に取り組むより、はるかに効果的。長期的には科学行政や文化政策に関わる人たちに良い影響を与える。

化学産業は、日本において自動車産業以上に重要で成長しており、日本の産業構造の鍵を握っていることが統計データ（付加価値生産性）からも示されている。化学技術は電力不足問題や素材の低コスト化を解決するイノベーションの核である。

イギリスでは有機合成化学の研究室の閉鎖が始まっている。アメリカでも似たような状況になっており、合成を海外に発注するなどのシフトが起きている。しかし、基準がアメリカのようなfairな国からunfairな国に移るのはかなり危機。

寿司職人になるには下積み10年と言われているが、アメリカでは10時間

で職人になっている。これは大衆化には大いに貢献しているが、最終的には、やはり本物（日本）の寿司が好まれている。日本の合成化学もそうあるべきではないか。

化学分野において京大や東大が世界的に高く評価されているが、それはスケールメリットのせい（研究者数がアメリカのメジャーな大学の10倍くらい）。アメリカには一握りのエリートがいれば充分と考える傾向がある。スケールばかりではなく、同時にエリートを常に生み出していくシステム構築も必要ではないか。

我が国が世界をリードしている分子科学をベースに多分野融合を図って

分子技術を推進すべき。分子技術とは、創ることのできる分子を創るのではなく、目的を持って創るべき分子を創るという一般概念。次々連続して新たな分子技術を生み出していくことが今後の日本の国際競争力となる。

イノベーションは若い力で実現する。教授が君臨するボス社会はやめるべき。

既存のしがらみを維持することはいい加減にして、根本から妥当な予算配分先、妥当な研究者数、妥当な大学数などを見直す必要がある。自ら身を削って断行しないと共倒れになる。

（小杉 信博 記）

## 分子科学研究所所長招聘研究会 「未来を拓く学術のあり方：化学が率いる持続社会」

挨拶 大峯 巖（分子研所長）、玉尾皓平（日本化学会会長）  
趣旨説明 栗原和枝（日本学術会議化学委員会委員長）

課題1 未来を拓く学術のあり方 野依良治（理研理事長） 化学界は社会と再契約を

課題2 高度人材育成 加藤昌子（北大） 報告『大学院における高度人材育成に向けて—化学系大学院を中心として』より  
阿波賀邦夫（名大） グリーン自然科学国際教育研究プログラムより見る高度人材育成  
山内 薫（東大） フォトンサイエンス・リーディング大学院より見る高度人材育成  
リチャード・ケルナー（駐日欧州連合代表部） 欧州連合における大学院教育プログラム Erasmus Mundus

課題3 化学が率いる持続社会 大竹 暁（文科省審議官） 未来を拓く学術のあり方：課題と期待  
山本 尚（中部大） 分子技術は我が国のNational Prideになるか？  
中山智弘（JST研究開発戦略セ） 我が国の科学技術の現状分析と材料科学研究戦略  
中川健朗（内閣府参事官） 科学技術イノベーション実現に向けての国家戦略の動向  
伊丹敬之（東理大） 化学技術の未来、そして社会からの期待

自由討論 話題提供：有本建男（JST研究開発戦略セ）

## 第7回自然科学研究機構技術研究会

分子研には現在36名の技術職員が在籍しています。また、自然科学研究機構全体では、岡崎の基礎生物学研究所、生理学研究所、土岐の核融合科学研究所、三鷹を拠点としたハワイやチリな

どの国立天文台の観測所に勤務する「技術」に携わる職員が約200名います。この自然科学研究機構の技術系職員の業務にも連携や共同開発などを目指し、さらには職員の技術向上にも役立つ

目的で研究会を行っています。機構の5つの研究機関が交代で世話役を担当して回を重ね、今回の第7回を分子研が担当し、平成24年5月23日（水）、24日（木）の2日間にわたって岡崎コンファ



レンスセンターで開催しました。岡崎キャンパスでの開催は3研究所の技術職の構成員が多いこともあり、天文台や核融合研も併せて参加した機構の技術系職員は102名と盛況な技術研究会でした。

この研究会は、前述したように機構の技術者間の連携や研究支援のための共同開発をも目指していますが、発足当初からその困難さは多く議論されていました。専門技術に関して共通する技術者らが集まる研究会ではないため、まずは機構内の他分野の研究や技術を技術者間で相互理解する情報交換の場および勉強会の場という位置づけで始めています。しかし、今まで研究会を計画する度に、異分野の技術に携わる参加者にとって有意義かつ連携という大儀を目指すような研究会開催のために、世話人らは毎回頭を悩ませている状況があります。そんな中で、大峯所長の代理としてご出席いただいた小杉研究総主幹が研究会の開催に先立って挨拶されたのですが、その内容は研究会世話人が考えている堅苦しい気負いを和らげるものでした。とにかく現在

の自然科学研究機構の中で、そう簡単には連携や協力関係の構築は困難であり、そう言ったことを研究会の意義として掲げてもなかなかうまく行くものではない、無理がある。むしろ、せっかく機構として一緒になったのだから「ご近所づきあい」という意識で進めた方が何か生まれやすいのでは、という内容でした。これでかなりリラックスした雰囲気の研究会となったことは言うまでもありませんが、当日の懇親会の会場でもこの考え方に同意の方が多く、この緩やかな意識を保ちつつ次回の研究会の企画がどうなるか楽しみでもあります。

研究会2日間の日程の最初に、各研究機関の研究を話題とする恒例の特別講演を行いました。今回は4月に分子研に着任されたばかりの秋山修志教授に講演をお願いしました。タイトルは「生物の時間をはかるタンパク質時計～分子の概日運動をとらえるための工夫～」として、先生の研究対象であるシアノバクテリアの時計タンパク質がどのようにして時間を刻むかを物理化学の立場から解き明かす研究の内容でし

た。この講演は基生研や生理研の生命科学の分野の技術者にもなじみ深い内容で、且つ自然科学研究機構の共通的な面も多く非常に良い講演であったと参加者からは好評でした。

その他、各機関の技術者からの報告は、それぞれ取り組んでいる日常の技術業務の紹介が20件ほどあり、それぞれの研究機関における技術職員個々の話題が主な内容でしたが、1件だけ分子研と天文台が協力して開発を行っている課題の報告がありました。UVSOR施設で使うMgF<sub>2</sub>結晶の非球面レンズ開発の事例紹介でした。分子研と天文台のそれぞれの技術者が得意な部分で協力しあい双方の設備を利用しながら光学要素部品を開発するという連携の一端です。この共同開発は今までの技術研究会が発端となっている訳ではありませんでしたが、当初の目論見どおり同じ様な事例がこの機構技術研究会を端緒として生まれて来ることを今後も期待しています。

(鈴木 光一 記)



## 第93回分子科学フォーラム 鈴木章先生をお迎えして

2012年5月11日、一昨年のノーベル化学賞をご受賞された鈴木章先生（北海道大学名誉教授）を分子研フォーラムにお迎えした。まず紙面をお借りし、多忙を極める中、岡崎にお越し下さった鈴木先生に篤く御礼を申し上げたく存じます。

「ノーベル化学賞を受賞して」と題するフォーラムでのご講演には、分子研をはじめとする岡崎3研究所の職員、研究員、大学院生はもとより、一般の市民の皆様（高校生も！）を含め300人を越す聴衆が岡崎コンファレンスセンターの大会議室を満席状態とした。ご講演では、今回のノーベル賞の根幹となった「鈴木カップリング（Suzuki Coupling）」と呼ばれる新反応を見いだすまでの研究の軌跡を、学生～若手研究者として有機合成化学を目指した経緯、そして米国パデュー大学のブラウン教授（1979年ノーベル化学賞受賞者）の研究室への留学まで遡って語られた。

中でも鈴木先生が古い2冊の書籍の写真を示され語られたエピソードは、筆者の心に強い印象を残した。その1冊は鈴木先生が有機化学を学ばれたフィーザー教授著の教科書である。当時は1ドル360円時代。高価な洋書であるフィーザーの教科書を鈴木先生は「最低でも33回は通読した。最初の頃は読むたびに『正』の字を裏表紙に書入れていたので間違いない。そのあとも何回も読んだ。」とのこと。ネット時代にあり、なんでも手許のパソコンで、場合によってはウィキペディアなどで化学を勉強(?)する大学院生には昔語りとしか聞こえないのか、それとも何かを感じることができたのか……。このエピソードが研究を志す者にとって良い刺激

になることを信じて聞き入った。また1冊はブラウン教授の著作であり、その著書との出会いがパデュー大学への留学の端緒となり、その留学がノーベル賞へと繋がっていく。偶然でもあり必然でもある運命的な書物と

の出会いに「書」が持つ力の大きさをあらためて感じるお話であった。鈴木先生がそれら書籍を札幌丸善で、なければ、札幌出身の筆者には昔の札幌丸善の洋書フロアの独特の静謐な空気が懐かしく思い出された（真面目な本しか置かず、学生が1時間くらい立ち読みをしていると椅子を出してくれるようなフロアでした）。

さて、私事ながら筆者は鈴木先生と同じ北海道大学にて学部は異なれども同じ専門領域を学び、院生時代から助手にいたるまで鈴木先生には学内の講演会などを通じてご鞭撻を受け、また先生の蔵書（専門書）をちょくちょくお借りするなど、お世話になってきたこともあり、今回の鈴木先生のフォーラムご登壇にあたっては、光栄なことに筆者が招聘の前線に立たせていただいた。その中で先生のお人柄を感じさせる幾つかの出来事（裏話?）があった。その一端を紹介させていただきたい。

フォーラムの前日、先生を空港までお迎えに上がった。到着された先生とともに車に乗り込み、ホテルを目指し移動を始めた途端であった。

「明日、フォーラムの前に“若手研究



者との懇談”ってあるよね?」

「はい。2時間程度、大学院生、ポスドク、助教などの若手と懇談していただければ。」

「いや。その時間で学術的な講演してもいいかい?」

「えっ? ですが……。」

「いや、フォーラムは一般的なお話で、化学の話じゃないから。せっかくだから化学の話しようと思ってスライドも持って来てるんだよ。」

「でも、そうすると1日で2度のご登壇はかなりきついのでは?」

「いやあ、大丈夫だよ。よろしく頼むよ!」

筆者の経験では立て続けに1時間以上の講演を2演題というのは、現役世代にとってもかなりきつい仕事だ。もちろん我々から先生にそんな無理なお願いなど出来ようはずも無い。それを自ら提案し、若手相手に化学の話をし



ていただけると言う。下世話な話だが、フォーラム1演題のつもりで企画されているので、若手相手の学術講演は、いわば“ただ働き”である。鈴木先生は、そんなことはおかまい無しだ。招待を受けた段階で分子研だから専門的な話ができると思って期待してたんだ、一般的な話題での登壇ももちろん嬉しいけど、化学の話もさせてよ、と。

そこから慌てて筆者の研究室に連絡を取り、関係各位に事情説明して翌日のスケジュール変更、講演会場の場所取り、などなど。若手懇談が主眼でのスケジュールリングであったので、その講演の座長は筆者研究室の新人助教に担当してもらった。

おそらく日本国内でノーベル賞受賞者が、全く公式の記録に残らない学術講演を「もぐり」で行ったというのは前代未聞ではなからうか？ ノーベル賞のご受賞後は北大は鈴木先生の全講演記録を採っているはずだが何と報告するべきか？ もちろん鈴木先生はそんなことは全くおかまい無し。先生にとって化学の、研究の前では、特に若い研究者にその楽しみを伝えるためな

ら、お役所的な手続きなど二の次、三の次。どうだっていいのだ。

フォーラム前日のそんなやり取りから始まった今回の招聘であったが、フォーラム翌日の土曜朝、次の予定への移動のため新幹線まで先生をお送りする際にも再三「もうここでいいよ」「荷物は自分で持つよ」とおっしゃられ、最後には新幹線の窓から手を振られつつ遠ざかって行かれた。そんな鈴木先生の私利も私心もない、常に現場の研究者と同じ目線で、ただただ学問を楽しまれている姿に、筆者自身心が暖まりながらも身の引き締まる数日であった。

末筆ながら、先生の益々のご健勝を心より祈念いたします。

※本フォーラムでは北海道大学広報課、分子研広報室、岡崎統合事務センター総務部、分子研の村橋・櫻井両先生に大変お世話になりました。記して御礼とさせていただきます。

(魚住 泰広 記)



### 第94回分子科学フォーラム (2012年7月11日開催)

「宇宙に終わりはあるか」

村山 斉 (東京大学 国際高等研究所 カブリ数物連携宇宙研究機構 機構長)

小学生から高校生まで鋭い質問が飛び交いました。

講演後、村山先生はサイン攻めにあっておられました。

大ホールの会場は超満員となり、分子研内の方は中ホールでの映像視聴に移ってもらいました。



### 今後の分子科学フォーラムのご案内

分子科学フォーラム特別版

開催日：2012年10月20日(土) ※一般公開と同日に開催します。

「マイクロレーザーが拓く、次世代火力発電・自動車エンジン」 平等 拓範准教授

「タンパク質の奏でる生体リズム～生物はどのようにして時間をはかるのか?～」 秋山 修志教授

「植物から学べ! 人工光合成」 正岡 重行准教授



大森賢治教授にフンボルト賞

平等拓範准教授に国際光工学会（SPIE）フェロー授与

岡本裕巳教授に平成23年度日本化学会学術賞

青山正樹技術職員に平成23年度日本化学会化学技術有功賞

近藤美欧助教が第5回資生堂女性研究者サイエンスグラント

澤井仁美特任助教に第5回資生堂女性研究者サイエンスグラントおよび日本化学会第92春季年会の優秀講演賞（学術）

山口拓実助教に日本化学会第92春季年会の優秀講演賞（学術）

嘉治寿彦助教に第31回応用物理学会講演奨励賞受賞

倉重佑輝助教に自然科学研究機構若手研究者賞

## 大森賢治教授にフンボルト賞

フンボルト賞（Humboldt Research Award）は、ドイツ政府が全額出資するアレキサンダー・フォン・フンボルト財団によって1972年に創設されました。自然科学から人文・社会科学に至る幅広い研究分野において、基本的な発見もしくは新しい理論や洞察によって分野を超えて多大なインパクトを与え、今後も最先端の学術的な成果を出し続けると期待される国際的に著名な研究者に対して授与されます。ドイツの最も栄誉ある学術賞であり、これまでに42名のフンボルト賞受賞者が後にノーベル賞を受賞しているそうです。

このたび、この栄誉ある賞をいただくことになり、去る6月にベルリンのシャルロッテンブルグ宮殿で行われた授賞式に出席してきました。式典は、ベルリン国立歌劇場管弦楽団の首席チェロ奏者ら世界的な演奏家によるコンサートと賞状の授与を絶妙に組み合わせた荘厳かつ実に華やかなものでした。自然とスタンディングオベーションが起こる極上のエンターテインメントに仕上げられており、科学が知的娯楽として成立するヨーロッパの懐の深さと底力を垣間みる思いでした。また、ベルヴェー宮殿においてはドイツ連邦共和国元首であるヨアヒム・ガウク大統領に謁見する機会を得ることができました。写真はその際の様子です。こ

れらの式典に出席し、この賞の重みを改めて実感することになりました。

今回の授賞の対象となった「アト秒時空量子エンジニアリング」の概要について、財団の公式アナウンスメントの一部を引用すると以下ようになります。

”Professor Ohmori is a world-renowned for his research on molecular coherent control using femtosecond laser pulses and on attosecond spatio-temporal engineering of molecular wave-packets. He has, since recently, directed his research interests towards fundamental questions of quantum mechanics, resulting in a series of experiments on quantum carpets and quantum information processing with molecular wave packets.”

フンボルト賞の受賞者は、ドイツの研究者と緊密な共同研究を推進することが強く期待されています。今後は、ハイデルベルグ大学を拠点にして、同大学のMatthias Weidemüller教授らと共に、アト秒時空量子エンジニアリングの更なる深化に向けた研究を推進していきます。特に、古典計算機では原理的に解くことのできない量子多体問題を解くことのできる新しいタイプの量子シミュレーターの開発に全力を



シャルロッテンブルグ宮殿での表彰式にて。アレキサンダー・フォン・フンボルト財団のプレジデントであるヘルムート・シュワルツ教授（左側）とともに賞状を掲げる筆者。



ベルヴェー宮殿での大統領主催のレセプションにて。ドイツ連邦共和国の国家元首ヨアヒム・ガウク大統領と握手する筆者。

注いでいきたいと考えています。

最後に、このリスクの高い野心的な研究を共に立ち上げ牽引してくれた香月浩之君（現奈良先端科学技術大学院大学准教授）、千葉寿君（現岩手大学技術職員）、武井宣幸君（分子研助教）を始め、分子研大森グループのみなさんに感謝します。（大森 賢治 記）

## 平等拓範准教授に国際光工学会 (SPIE) フェロー授与

このたび、2012年1月23日に、サンフランシスコで開催されたPhotronics West 2012 (参加者：約19,000人)にて“significant achievement in the field of solid-state lasers and nonlinear optics. (固体レーザー及び非線形光学分野に関する顕著な業績)”が評価され、国際光工学会 (SPIE) からフェローの称号を授与頂きました (詳しくは<http://spie.org/x32.xml>をご覧ください)。本表彰は、2名以上のSPIEフェローを含む最低3名の会員からの推薦を受け、フェロー選考委員会、評議会による厳正な選考を経て選ばれるもので1955年から900名程度にしか授与されていない栄誉です。SPIEは世界150カ国で225,600人の会員から構成される国際的な光学分野の学術団体で、“the international society advancing an interdisciplinary approach to the science and application of light”とし

て1955年より光の科学と応用に関する学際的な取り組みを進めています。

私はこれまで光と物質との相互作用、特にジャイアントな光の発生とその展開として、物質・材料の微細な秩序領域であるマイクロドメインを構造制御する手法の探索と、

これにより発現される光機能を追求するマイクロ固体フォトニクスなる分野を提案、推進してきました。当初は単にレーザーの小型化、高性能化を狙っていたのですが、特に分子研において恵まれた環境と優秀な人材に助けられ、マイクロチップレーザー、Ybレーザー、さらにはセラミックレーザーやバルク擬似位相整合波長変換素子などマイクロドメインを介した光と物質の相互作用に立ち返った新たな展開を得ることができました。



Photonic Westでのフェロー表彰式にて。SPIE会長のProf. Eustace L. Dereniak (左側)、前会長のDr. Katarina Svanberg (右側)。

まだまだ多くのご批判も頂いておりますが、これらの固体レーザーと非線形光学分野における貢献が2010年の米国光学会 (The Optical Society, OSA) フェロー表彰に引き続き、国際的にも認められつつあるものと嬉しく思っております。この場をお借りして、御世話になりました諸先生、スタッフなど関係者の皆様にお礼申し上げます。

(平等 拓範 記)

## 岡本裕巳教授に平成23年度日本化学会学術賞

去る3月の日本化学会第92春季年会 (横浜)において、日本化学会学術賞を受賞し、受賞講演を行いました。本賞は化学関連分野において、先導的・開拓的な研究業績を挙げた者に対して授与されるものとのことで、今回私は「ナノ光学の手法による貴金属ナノ構造の物理化学的特性の研究」の業績に対して受賞させて頂きました。私は分子研着任前は振動分光法や高速分光法を主に行ってきましたが、着任を機会に、近接場光学顕微鏡 (回折限界を超える空間分解能を光で実現する手法) を用いたナノ物質の研究に大きく方向を変更しました。それまで顕微鏡、特にブ

ローブ顕微鏡の経験は全くなく、うまく装置ができるのか、できたとしてよい成果が出せるのか、かなりの不安の中で、スタッフを巻き添えにして研究室をスタートさせることになりました。幸いにして分子研の優れた研究環境と、少数ながら優秀な人材に恵まれたこともあり、数年後にはユニークな装置が完成し、更に金属ナノ構造のプラズモンに関して面白い結果が出始めました。一つ述べておきたいのは、無論研究計画は色々と考えて進めてきましたが、その後の大きな展開の契機となったのは、



ある時「偶然」に得られた金ナノロッドのイメージ観察結果だったことです (よくあるセレンディピティかも知れませんが)。その偶然を捕まえて体系化し、相当の労力と時間を傾注したことで、だんだん多くの人に興味を持ってもらえるものになって来たのだと思いま

す。今回の受賞は全て分子研に着任してから立ち上げた研究に関するものですので、当初の正体不明な研究計画にGoサインを出して採用して頂いた、分子研とコミュニティには感謝すること

しきりです。これで少々は借りを返せて一安心と言ったところですが、貴金属ナノ構造とプラズモンは最近大きく注目を集めるようになり、その研究も急速に展開しています。近接場光学につ

いても同様と思います。私の研究グループも、いくつかの方向で次の展開への一手を考えているところです。引き続きよろしくお願い致します。

(岡本 裕巳 記)

## 青山正樹技術職員に平成23年度日本化学会化学技術有功賞

このたび、「分子科学研究のための先端加工技術による実験機器の製作」という題目にて、平成23年度日本化学会化学技術有功賞を頂きました。多くのサポートしていただいた方々のおかげと心から感謝しております。

装置開発室では7年ほど前から、ガラスマイクロチップやタンパク質パターンニングに使用されるPDMSマイクロ流路鋳型など、微細な溝構造を持つ研究機器の製作依頼を受け「マイクロ加工」への取り組みを始めました。当初は、既存の設備の加工限界を見極めながら、可能な範囲での製作対応を行っていましたが、さらに微細な構造や高い精度を必要とする研究機器の製作要求が増え、他の研究機関や企業と協同で先端的な加工技術を取り入れ、製作技術のレベルアップを図ってきました。

細胞のイオン電流計測装置に使われるPMMA基板の製作では、熱ナノイン

プリント技術を適用して基板に必要とされる10 $\mu$ mの薄膜部の成型に成功しました。また、成型に必要とされる金型にはナノレベルの高精度な平滑性が要求されるため、超精密切削加工技術を適用して、面精度20nm以下となるよう加工を行いました。

この超精密加工技術は、高精度ミラーや特殊レンズの加工など所内からのニーズに応えられる技術であり、今後も装置開発室の重要な加工技術としてさらに推進していきたいと考えています。

これまでの取り組みの成果は、より高度な研究支援が行えるよう装置開発室全員で、先端加工技術に取り組んできた結果だと思っています。このような栄誉ある賞を受賞出来たことを大変うれしく思いますが、それにもまして、装置開発室でお祝いの会を設けていただきメンバー全員から祝福していただいたことが何よ



りもうれしく、また感謝の気持ちでいっぱいです。装置開発室では、これからも研究者からの無理難題に応えられるよう、常に腕を磨き続けていきますので、今後も装置開発室へのご支援ご鞭撻の程よろしく願いいたします。

最後に、このような先端的な加工技術に取り組む機会を与えていただいた当時の装置開発室長の宇理須恒雄教授、また、受賞に際し推薦していただいた化学会の関係の先生方および大峯巖分子研所長にも深く感謝いたします。

(青山 正樹 記)

## 近藤美欧助教が第5回資生堂女性研究者サイエンスグラント

このたび、「界面電子移動プログラミングによる水の完全光分解系の構築」の研究において、第5回「資生堂 女性研究者サイエンスグラント」を受賞いたしました。このサイエンスグラントは指導的研究者をめざす女性を支援する目的で設立された研究助成であり、自然科学分野の幅広い研究テーマを対象に、毎年10名の女性研究者へ助成を

行っています。

本サイエンスグラントは、私にとって昨年度の8月に分子科学研究所に錯体物性研究部門正岡グループの助教として着任して以来最初に受賞が決定した研究資金であり、これからの研究活動を展開する上で非常に励みになる印象深いものとなりました。また、授賞式においては、国内の多くの女性研究

者と研究のみならずワークライフバランス等、女性研究者が抱える問題に関しても話し合う機会を得ることができ大変意義深いものでした。

本グラントにおいて私が提案させていただきました研究の目的は、高効率触媒反応を達成するための基幹技術の確立を目指すことであります。人工光合成反応は全て「光」と「水」が関与



する反応であり、「光エネルギーを用いた水の完全分解」が永続的に進行することが、人工光合成反応系を達成するための鍵であると言えます。しかしながら、水から酸素と水素を化学両論比で発生させる「完全分解系」を達成した例非常に少なく、本技術の実用化に当たって大きな障害となっております。本研究では、このような問題を解決すべく、遷移金属錯体を用いた水の酸化・還元触媒の開発において新たな方法論の展開を目指したいと考えております。

私自身にとっては、錯体触媒という新たな分野での研究をさせてからの日が浅いこともあって、日々手探りで研究を進めている状況であり、実験は試行錯誤の連続であります。そのような中で自らが考案したプロジェクトにより本グラントを受賞できたことは、今

後研究を遂行していく上での自信につながりそう言った意味でも本当にうれしく思っています。

今後ともこの受賞を励みに、日々精

進し、多くの研究成果を残せるように、また分子科学の発展に貢献できるよう一層努力して参ります。

(近藤 美欧 記)



受賞者（赤リボンバラ）10名他。前列左から2人目澤井、3人目近藤。

## 澤井仁美特任助教に第5回資生堂女性研究者サイエンスグラントおよび日本化学会第92春季年会の優秀講演賞（学術）

研究課題『細胞内ヘム濃度の恒常性維持に関わる分子機構の解明』にて第5回資生堂女性研究者サイエンスグラント、講演題目『新規な転写調節因子HesRのヘムによる機能制御の分子機構』で日本化学会第92春季年会の優秀講演賞（学術）を受賞いたしました。大変光栄に思います。

資生堂女性研究者サイエンスグラントは、自然科学分野において指導的役割を担う女性研究者の育成に貢献することを目的として、2007年に設立されました。日本は『科学技術創造立国』を掲げる一方、『理系離れ』が深刻化しています。さらに、女性の社会進出が当たり前になった今日でも、日本の全研究者に占める女性の割合は13%に留まっており、先進諸国の中で最下位です（対して米国は34%）。資生堂はこ

うした状況を克服するために、年齢制限を設けず、研究分野も自然科学全般とし、さらに研究助成金を研究補助員の雇用にも充当可能にすることで、多様な女性研究者の活動支援を行っています。6月初旬、銀座資生堂パーラーと資生堂リサーチセンターで開催された授賞式と研究報告会に、受賞者として招待していただきました。これらの式典には、資生堂の社員のみならずグラント審査員の先生方やマスコミ関係者も多数出席されており、激励のお言葉をたくさんいただきました。この機会を通して、日々の研究生活に対する元気と勇気を与えていただくとともに、女性研究者としてだけでなく1人の科学者としての使命を再確認できました。各自の研究分野で成果をあげることは大前提であり、最も精進すべき点では



(株)資生堂 代表取締役社長 末川久幸氏より受賞杯をいただきました

あります。しかし、それだけに留まらず、科学に興味を持つ子供達が夢を持って研究者になりたいと思える国にするには「今、私達は何を伝えるべきか？」を考えて、今後は自然科学の素晴らしさを伝えるためのアウトリーチ活動も行っていきたいです。

日本化学会優秀講演賞の受賞は、十分な研究環境を与えて下さる青野重利教授および共同研究者の方々のご理解とご協力で成し得たものです。大変感

謝しております。

これらの受賞を励みに、“女性科学者の良きロールモデル”そして“生物無機化学の伝道者”として成長できるよ

うに、研究を楽しみつつ日々努力を続けます。

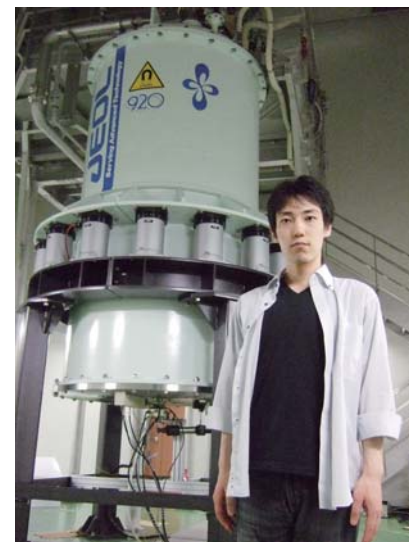
(澤井 仁美 記)

## 山口拓実助教に日本化学会第92春季年会の優秀講演賞（学術）

3月末に開催された日本化学会第92春季年会において、優秀講演賞を受賞致しました。もともと私は有機化学や錯体化学を研究してきましたが、分子研に着任してからは心機一転、加藤晃一教授の研究室で糖鎖を中心とした構造生物学研究に取り組んでいます。本発表では「常磁性効果を応用した糖鎖のNMR立体構造解析法の開発」について、報告・議論をさせていただきました。前述の通り、私の研究背景は糖鎖化学の研究領域からは大きく異なっていましたので、今回の受賞は諸先輩方から仲間として認められたようでもあり、喜びも一入です。実際、まとまった研究成果発表を行えたことだけではなく、多くの先生方とディスカッションできたことを、嬉しく思いました。発表後にも質問やコメントをいただき、大変有意義な学会となりました。結果としてこのような賞をいただいたことは、激励のメッセージであると受け止めています。

糖鎖というものは生物学的にもまだまだ未知の部分が多く、化学の視点からも、なかなか難物そうな顔をしています。私も度々尻込みをしながらも、その都度多くの方に背中を押してもらい、ときに手を引いていただきながら研究を行っています。特に、特別共同利用研究員や総研大の学生さんと研究を行う機会に恵まれたことは、なによりも力になりました。あらためてお礼を申し上げます。

生命分子の生物機能に関する理解を深めるためには、その立体構造やダイナミクスを明らかにすることが重要となります。しかしながら、糖鎖に関しては、官能基の乏しさや運動性の高さなどが、分子科学的なアプローチを困難にしています。分子研が誇る920MHzNMR装置は、実に強力な研究手段ではありますが、これだけでは問題は解決できません。本研究では、化学的なアプローチによって糖鎖へ新規なプローブ分子を導入することで、こ



れまでには得られなかった詳細な構造情報を得ることができるようになりました。これにより、糖鎖の実体へと迫る、その入り口に立つことができたのではないかと考えています。今後も、幅広い領域へインパクトを与えられるような、糖鎖の分子科学研究を目指していきたいと思えます。

(山口 拓実 記)

## 嘉治寿彦助教に第31回応用物理学会講演奨励賞受賞

このたび、「有機太陽電池のドナー：アクセプター混合層の共蒸発分子誘起結晶化」と題した応用物理学会学術講演会における講演に対して第31回応用物理学会講演奨励賞受賞をいただきました。本賞は、応用物理学の視点から極めて価値のある一般講演論文を発表した若手会員に授与し、これを称える

ことを目的としています。学生とファカルティの区別なく若手研究者が一律に評価される裾野の広い賞ですが、その分、研究内容と発表、質疑応答の三拍子が発表時に揃ってないと評価されないシビアな面もあります。

修士の学生の頃から何度も挑戦した賞であり、今回、分子研に着任してから始

めた本研究で本賞をいただけたのは感慨深いものがあります。今後とも、学生のころからの夢と好奇心・挑戦心を胸に抱き続けて研究に励みたいと思えます。

さて、受賞対象の研究は、有機薄膜太陽電池の心臓部である2種類の有機半導体の混合膜を結晶化して太陽電池の光電流を向上させた研究です。有

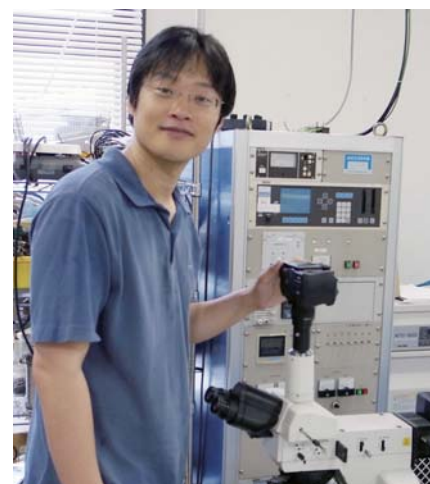


機薄膜の真空蒸着中に高沸点の液体分子を導入して薄膜の結晶化を促進する方法を考案するとともに、実際に太陽電池の性能向上を示しました。この方法は、他の様々な有機薄膜素子においても、結晶性や構造の制御範囲を大幅に拡張する画期的な作製法と考えています。詳しくは昨年の分子研のプレスリリース (<http://www.ims.ac.jp/topics/2011/110615.html>) にも記しましたので、ご興味のある方はご覧いただければ幸いです。

受賞に際し、平本昌宏教授をはじめ、平本グループの皆様、共同研究先の米国

ロチェスター大学の Ching W. Tang 教授とそのグループメンバーに心から感謝いたします。また、この共同研究のきっかけは2009年11月から2010年2月にかけての総合研究大学院大学海外先進教育研究実践支援制度によるロチェスター大学への派遣です。現地での交流や活発な議論とともに、日常の研究や業務から離れて一人でじっくり考える時間を持てたことも、今回の受賞につながったと考えています。分子研・事務センター・総研大の関係者の方々にもここで併せてお礼させていただきます。

(嘉治 寿彦 記)



## 倉重佑輝助教に自然科学研究機構若手研究者賞

この度、“密度行列繰り込み群を基礎とする分子電子状態理論の開発と生体内金属錯体への応用”という題目にて、第一回自然科学研究機構若手研究者賞を受賞いたしました。本賞は、新しい自然科学分野の創成に熱心に取り組み、成果をあげた優秀な若手研究者を表彰することを目的としたもので、エイベックス・エンタテインメント株式会社から、天皇家御即位20周年を祝う奉祝曲「太陽の国」(歌唱: EXILE) の収益の一部について自然科学研究機構が寄付を受けたことで今年度より創設されたものです。誠に残念ながら授賞式にてEXILEの皆様へのお目通りは叶いませんでしたが、高校生や一般の方々に向けた記念講演を行う機会をもうけて頂き、非常に貴重な経験をさせていただきました。

私が分子研に着任してから取り組んでいる金属錯体の電子状態、特に多核金属錯体の電子状態は最先端の理論を以てしても解くことが困難な量子化学の未解決問題として残されています。一般的には金属上スピンの交換相互作用

用Jを通して相互作用する定性的なモデルを用いて理解されていますが、実際の化学反応の過程においては異なる酸化状態を持つ電子状態の接近・交差が起こるため、金属上スピンのエンタングルメントのみならず、占有電子数のエンタングルメントを考慮する必要があることからハミルトニアン次元が膨大になり、正攻法では太刀打ちできません。今回の受賞は、密度行列繰り込み群を前述の問題に応用し、光合成系II酸素発生中心のMn<sub>4</sub>Caクラス

ターをはじめとするいくつかの多核金属錯体の電子状態予測に成功したことを評価して頂いたものですが、依然として理論の完成からはほど遠く悪戦苦闘の日々を過ごしております。ようやく光明が見え始めたところではございますが、この研究がいずれ種々の多核金属触媒反応機構の理論的解明に寄与することを信じて、今回の受賞を励みにさらなる精進をお誓い申し上げたいと存じます。

(倉重 佑輝 記)



一列目右から二番目が筆者



## 分子エレクトロニクス の新展開を目指して



やまもと・ひろし

1993年東京大学理学部化学科卒、1998年同大学院理学系研究科化学専攻博士課程修了、博士（理学）取得。1998年学習院大学理学部物理学科助手、1999年理化学研究所基礎科学特別研究員、2000年同研究員、2007年同専任研究員、2012年4月より現職。2009年よりJSTさきがけ研究員（兼任）、2012年より理化学研究所客員主幹研究員（兼任）および東京工業大学連携教授（兼任）。

平成24年4月1日付で、理化学研究所から分子科学研究所に着任しました。分子研にはこれまで研究会で来る以外、あまり立ち寄る機会がなかったのですが、岡崎は住んでみるとなかなか良いところで、研究所全体の雰囲気ともども大変気に入っています。これまで物性研→（学習院）→理研→分子研と、3つの研究所を渡ってきましたが、研究所ではどこも物理・化学・工学の垣根がほとんどなく自由に学際的なことが出来るので、今回分子研に自分の研究室を持つことが出来ることになったのも、3つの分野を行き来しながら研究を進める私にとってとても幸いなことだと思っています。

私が科学者を志すようになったのは高校生のころですが、当時は物理と電気工作・コンピューターに興味があったように思います。秋葉原というAKB48とメイドカフェが有名な昨今ですが、その当時は言わずと知れた世界一の（？）電気街で、週末になるとパーツ屋に行っては怖い店員さんの顔を窺いながら買い物をしたものです。しかし大学に入ると教養学部の小川桂一郎助手（現、東大教授）・吉村伸助手（現、

東大特任教授）の影響を受けたこともあり、化学の実験や計算も面白そうだということに気がしました。そこで理学部化学科に進学し、学部～修士課程の間は奈良坂紘一教授（現、南洋工科大学教授）の指導のもとに有機合成化学の素反応開発に挑戦しました。しかし実際にやってみると分野的に少し肌に合わないところがあり、悩んだ末に修士1年の時にはもうアカデミックは止めて就職しようと思っておりました。そんな時に博士課程行きを強く勧めて下さったのが同じ研究室の岩澤伸治助教授（現、東工大教授）です。分野を変えても良いんだから、ぜひ進学してはどうですか、というあの時のアドバイスには今でも感謝しています。

この時は進学先を探していくつかの研究室を回りましたが、最終的に当時世界初の有機強磁性体を発見された物性研の木下實教授（現、東大名誉教授）のところに進学したい旨を相談しに行きました。ところが先生はもうすぐ退官で研究室はなくなるとのこと、「代わりに加藤君のところはどうかね」と勧められたのが、分子性伝導体の分野に入るようになった経緯です。加藤礼

三助教授（現、理研主任研究員）の研究室では博士課程の3年間、新しい分子性伝導体の物質開発に取り組みました。最初の2年ほどはほとんど何の結果もありませんでしたが、非常に自由にやらせてもらえておりましたので、夜の六本木を散策しながら次の実験のことを考えつつ、なんて自分は幸せなんだろうと思ったことを覚えています。幸いにしてドクター3年目から結果が出始めまして、この時のテーマが形を変えながらずっと今につながっているように思います。当時研究室ではハロゲン結合を使った新しい伝導性分子を作るという研究がされていたのですが、私は伝導性分子ではなく、絶縁性の部分にハロゲン結合を導入するという実験をしてみました。最初は試薬屋で売っている分子を混ぜて電気分解するだけのお試し実験だったのですが、これが意外とうまく行ったので、自分で色々な分子を合成して組み合わせてみました。結晶構造が解けてみると、絶縁分子が作るネットワーク（超分子集積構造）は実に面白く、しかも絶縁分子の存在が伝導性部分の物性もきちんと制御していることが分かりました。中で

も1次元の伝導性ワイヤーを絶縁分子が被覆した構造(図1)は、構造的にも機能的にも興味深く、これからもこの系は拡張していきたいと思っています。

ドクター取得後およそ1年間、学習院大学理学部物理学の高橋利宏教授の元で結晶成長の修業をして、翌1999年には理研に移っておられた加藤先生に再び呼んで頂きました。ほどなくして非常に近い分野で、有名なベル研による捏造事件が勃発。当時はすごい勢いで出てくるベル研の結果に、ただ圧倒されていました。同時に電界効果トランジスタ(FET)の持つ大きな可能性を認識するきっかけになりました。数年してベル研の話は誰も追試が出来ないことがだんだん分かってくると同時に、調査委員会なども立ち上がりました。自分も含めて皆騙されていたんだ、とがっかりすると共に、ベル研のデバイスでは電界誘起超伝導は無理だったけど、自分達がよく扱っている有機モット絶縁体なら同じことが出来るのではないか?という疑問が残りました。同様の観点で当時実験されていたのが、産総研の長谷川達夫博士らのグループだと思いますが、長谷川グループのデバイスの作り方や物質の選択に

は化学屋の目から見てまだ改良の余地があるように思えましたので、いつかは同じような実験をしてみようと思っていたのが2003年頃です。別のところ(Molecular Science vol.4, A0032)で書きましたので詳しいことは述べませんが、結局そうした有機モットFETの研究をする機会が、超分子ナノワイヤーの研究を通して偶然やってきました。私はその頃から合成室を出てクリーンルームでナノワイヤー微結晶作製のための微細加工を始めていたのです。やっている当時はなかなかゴールが見えなくて、何度も止めようかと思いましたが結局、この研究からいわゆるゲート基板上で分子性導体の結晶を扱う方法が分かってきました。また、サンプルを低温に下げると、有機サンプルと無機基板の熱収縮率が異なることから、通常バルク結晶と基板上の微結晶は異なる振る舞いをすることも分かりました。この辺が見えてくると、後は比較的戦略が立てやすくなります。当時いいタイミングで東邦大学から川根義高君(現、阪大助手)が外研で来てくれて大いに有機モットFETの研究が進み、超伝導にこそなりませんでしたが、トランジスタ界面で電子系の相転

移を引き起こすことができました。特にホール効果の測定によって、モットFETのON/OFFの本質は「キャリア密度ではなくキャリア移動度が変化する」ことである、と結論できたことは大きいと思っています。

以上、意図していたわけではないのですが、長い紆余曲折を経てみると結果的に、固体物理や電子デバイスという高校時代に興味を持っていたところに戻ってきたのは、何とも不思議なものだと感じる今日このごろです。今後分子研では有機超伝導トランジスタの実現とその光誘起現象への展開や、超分子ナノワイヤーの高度化に加えて、もうひとつぐらい新しいテーマを始めたいと思っています。最近の物性物理の進歩はとても速く、新しい現象や新しいデバイス作製技術が次々と出てきていますので、そうした流れをうまく利用しつつ、分子ならではの特徴あるエレクトロニクスを打ち出していきたいと思っています。

最後になりましたが、分子研着任にあたり、大峯巖所長、小杉信博先生、横山利彦先生をはじめ、所内外の多くの方々にお世話になりました。この場を借りて、篤く御礼申し上げます。

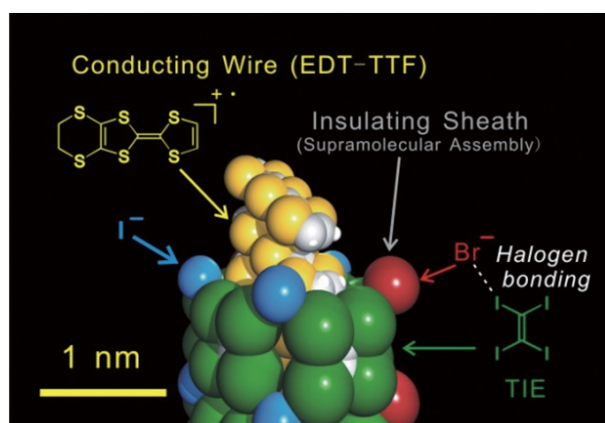
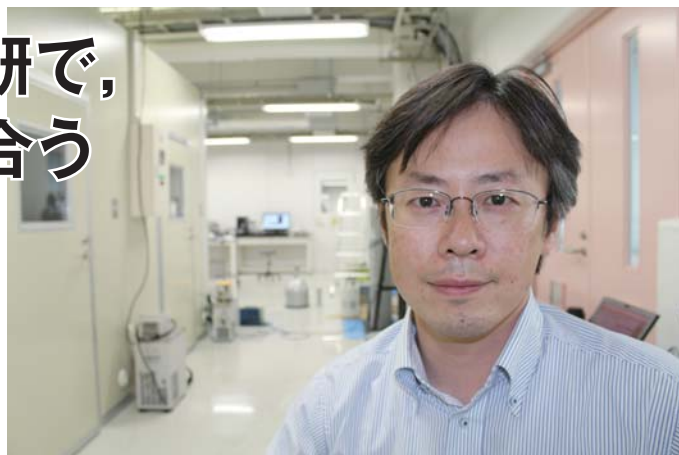


図1 超分子ナノワイヤーの結晶構造。真ん中の黄色いところが伝導分子のワイヤーで、周囲の緑色の部分が絶縁被覆になっている。

# 素晴らしい時間を分子研で、 Kai タンパク質や気の合う 仲間とともに……



あきやま・しゅうじ

1997年京都大学工学部卒、1999年同大学大学院工学研究科修士、2002年同大学院工学研究科分子工学専攻博士課程修了、博士（工学）。日本学術振興会特別研究員、理化学研究所基礎科学特別研究員、科学技術振興機構さきがけ「生命現象と計測分析」研究員（専任）、名古屋大学大学院理学研究科講師／准教授を経て2012年4月より現職。

2012年4月1日付けで分子科学研究所に着任しました。これまでに幾つかの研究室に所属してきましたが、思い返してみますと、いつもユニークで魅力ある研究環境に恵まれていた気がします。それらを順にたどることで、私の研究経歴の紹介に代えたいと思います。

学部4年生であった私は、京都大学工学研究科分子工学専攻・森島績研究室に籍を置き、ヘモグロビンやミオグロビンを題材にタンパク質科学や分光光学実験の基礎を学びました。博士課程からは高橋聡博士（現東北大学教授）の指導のもと、高速液体混合技術をベースとした新しい実験装置を開発し、タンパク質の折り畳み運動をマイクロ秒の時間分解能で観察しました。苦しい局面もありましたが、オリジナリティの高い実験装置で生命科学の未開領域を拓く楽しさはそれを十分に上回るものでした。京都大学時代の経験は今でも私の研究スタイルに大きな影響を与えています。

学位取得後、前田雄一郎博士（現、名古屋大学特任教授）が主宰しておられた理化学研究所・播磨研究所の研究

室に基礎科学特別研究員として籍を置く機会を得ました。私はSPring-8でX線小角散乱と呼ばれる非晶質の構造解析法を習得し、折り畳み反応の研究を進める一方、新しい展開を求めて積極的に他の生命科学分野との共同研究に取り組みました。

そのころ、名古屋大学の近藤孝男教授らは、3つ時計タンパク質（KaiA、KaiB、KaiC）を試験管内で混合すると、KaiCのリン酸化・脱リン酸化反応が24時間周期で発振することを発見しました（図1）。「タンパク質だけでリズム

を奏でる」という事実に多くの研究者が衝撃を受けました。私はその驚くべき生命現象に魅了されると同時に、これまでに培ってきた生物物理学や構造生物学が、タンパク質時計の機能解明に役立てられるという確信を持ちました。

Kaiタンパク質の研究に着手する時点で、各々のKaiタンパク質（KaiA、KaiB、KaiC）についてX線結晶構造が解明されていました。しかし、静的な単独構造（時計を作る個々の歯車）を丁寧に調べても、概日振動を生み出す

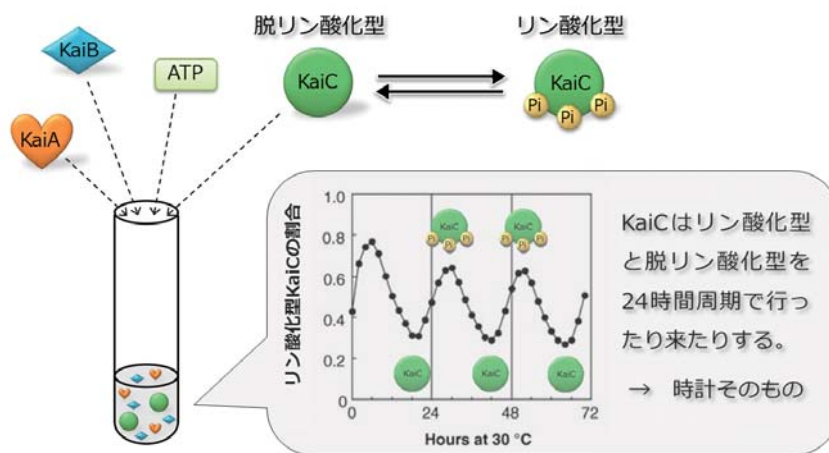


図1 試験管内で時を刻む Kai タンパク質時計



動的メカニズムを理解することはできません。自律的振動の発現にはKaiタンパク質複合体（歯車の噛み合わせ）の形成が重要であると予測されていましたが、時間依存的な離合集散により複合体の量や組成が変動するため、X線結晶構造解析が容易でないのは明らかでした。「歯車の構造は既知」、「歯車の噛み合わせは未知」、「ダイナミクス」……、X線小角散乱を使わない手はありませんでした。X線小角散乱を用いてKaiタンパク質が離合集散する様子をリアルタイム計測し、その振動過程に蓄積する時計タンパク質複合体の低分解能構造を決定しました。自分の中でも大きかったことは、研究資金の準備から誌上発表までの過程をこなし、「研究者として自立していく」ことの一部を経験することができた点です。

分子間相互作用についての研究が一段落し、後に名古屋大学で教員としての職を得るまでの間、私はこれらかの研究の方向性を自問する日々でした。マイクロ秒という速いタイムスケールで起こる折り畳みダイナミクスに魅せられて研究の世界に身を投じた私ですが、ふと気がつく、24時間という極めて遅くかつ秩序あるダイナミクスに辿りついていました。Kaiタンパク質がいかに非凡とはいえ、所詮はアミノ酸をベースとした高分子ですから、タンパク質分子としての一般的な性質はKaiCにも該当するはずで。例えば、タンパク質の構造変化はより大規模であるほど時間を要する傾向にあります（図2）。しかし、Kaiタンパク質が溶液中を拡散するダイナミクスはせいぜい $10^{-2}$  ~  $10^1$ 秒のオーダーでしょうし、KaiCの分子鼓動も24時間を要するほど劇的かつ複雑な構造変化ではありません。

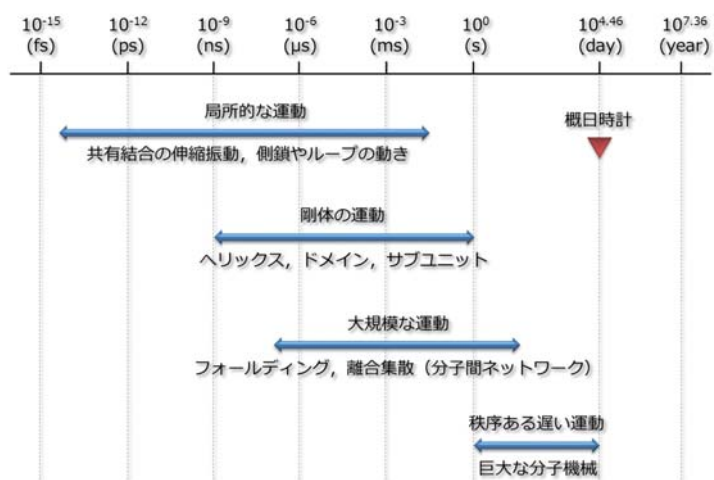


図2 タンパク質構造ダイナミクスの階層性

これまでの知見の積み上げでは「何が24時間を決めているのか」という単純明快な問いに回答できないと考えるようになりました。Kaiタンパク質時計は生物物理学や計算科学が未だ深く切り込めていない未開領域であり、私はここにかけようことに決めました。

もう一つの謎が周期の温度補償性です。これは24時間周期で発振する生物時計にほぼ共通して見いだされる性質で、時計の発振周期が温度の影響をほとんど受けません。遅い反応（長い周期）は効率の悪い化学反応で説明できるように一見思われます。しかし、そのような反応系は大きな活性化エネルギーを有するでしょうし、温度の上昇に従って著しく加速されると予測されます。生物時計のからくりを迫るためには、「遅いダイナミクス」と「温度補償性」という一見排他的な2つの性質を同時に説明しなければならないのです。

試験管内で再構成できるKaiタンパク質時計は、24時間周期や温度補償性を分子科学的に解明する絶好の研究対象だと思います。私たちの研究グルー

プでは、Kaiタンパク質時計の生化学的な活性測定はもとより、X線結晶構造解析やX線溶液散乱を相補的に利用した動的構造解析、赤外や蛍光等による分子動態計測、計算機を用いた実験データのシミュレーションなどを行うことで、分子時計の実態解明に取り組んでいます。生物時計の研究を支える特殊な実験装置や解析ソフトウェアについては、多くの場合、独自開発もしくは既製品の改造が必要になってきます。Kaiタンパク質時計の発する24時間周期の信号を正確にキャッチするためには、試料周辺だけでなく計測機器や実験室全体の日周環境変化を極限まで抑え込む工夫が必要となります。このような研究活動を通して、多くの皆さんに生物、化学、物理、制御工学、計算科学を巻き込んだタンパク質時計研究のフロンティアを体験して頂きたいと考えています。

最後になりましたが、新しい研究グループの立ち上げにあたり、大峯所長をはじめ所内の先生方や職員の皆様よりご支援・ご協力を頂きました。この場をお借りして御礼申し上げます。

## ゆめの続き

むらはし・てつろう

1995年大阪大学工学部応用精密化学科卒、1997年同大学院工学研究科分子化学専攻博士前期課程修了、1999年同大学院博士後期課程修了（工学博士）。1999年大阪大学大学院工学研究科助手、2007年同准教授を経て、2012年4月より現職。この間、2003年～2005年日本学術振興会海外特別研究員（米国MIT化学科）、2005年～2009年科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業さきがけ「構造制御と機能」領域研究者、2010年～同「光エネルギーと物質変換」領域研究者。2007年日本化学会進歩賞、錯体化学会研究奨励賞、2008年文部科学大臣表彰若手科学者賞、有機合成化学協会研究企画賞、2010年英国化学会Dalton Lectureship Award。



2012年4月に、大阪大学大学院工学研究科応用化学専攻から分子科学研究所、生命・錯体分子科学研究領域錯体物性研究部門に着任しました。山手地区3号館4F東に研究室を構えています。大阪から岡崎へ移ることになったこの春は、私にとって大きな節目となりました。力みなぎる気持ちで、毎日をご過ごしているところです。

まず、分子研着任が決まってからの数ヶ月を振り返ってみますと、やはり特別な日々であったと実感します。準備（梱包）、物品移設、引越、種々の手続き、研究室設計、工事、実験設備セットアップ……。これらを同時並行で短期間のうちに終了させることは、厳しい上り坂を登るようなものでしたが、ここまで順調に進んでいます。これは私一人の力ではできないものではなく、多くの方々のご協力があったからこそです。大きなご支援をいただきました大峯所長に改めて紙面を借りて御礼申し上げます。小杉総主幹、魚住主幹にも多大なご助力をいただき、ありがとうございました。そして、学生の高瀬君（3月で修士課程修了し就職）、立花君（現在M2、分子研特別共同利用研究員）、木村君（現在M1、分子研共同利用研究

員）に感謝したいと思います。彼らは進んで私とともに作業にとりかかってくれ、胸が熱くなる思いです。立花君と木村君は、4月以降も私と一緒に分子科学研究所に来て、研究室立ち上げに貢献してくれています。この経験を通じて、我々は個人としてもチームとしても逞しくなりました。少しづつではありますが落ち着きを取り戻し、サイエンスに戻れるようになってきました。

さて、私は、大阪大学工学部を卒業し、そのまま博士課程に進学して博士を取得後、大阪大学大学院工学研究科応用化学専攻で助手（助教）、准教授をつとめ、分子科学研究所に着任しました。この間、新しいタイプの遷移金属錯体を創出しその性状や反応性を探求する研究を続けてきました。この研究は、やっつけて「おもしろい」の一言に尽きます。予想を超える展開に何度も遭遇し、自然科学の奥深さとモノを創り出す化学の凄みを教えられ続けています。

私が遷移金属錯体の研究に出会ったのは、大阪大学の学部4年生のときに黒澤英夫教授（現名誉教授）の研究室に配属されたときです。私の恩師であ

る黒澤英夫教授は、1970年代に渡加・渡米されてオレフィン $\pi$ -錯体の反応機構研究に従事され、帰国後も有機遷移金属錯体の構造や反応機構を探求されました。速度論的手法や立体化学的手法を有機遷移金属錯体の反応に適用して反応機構を鮮やかに解明する研究は、1950年代以降に著しく進展しましたが、黒澤教授もそこに大きく貢献されたお一人です。黒澤教授のもとで、有機遷移金属錯体の構造研究や反応機構研究を学ばせていただいたことが、私の研究者としての基礎となっています。黒澤研で博士を取得後、同研究室で助手として採用していただき、研究者としてのスタートを切りました。私が目指したのは、「新たな有機遷移金属錯体群を創出する」ことでした。化学研究全般がどのように発展してきたかを私なりにとらえたとき、新しい物質群の登場が発展のサイクルを呼び起こす鍵になっているように思えたこと、そして特に、有機遷移金属錯体化学の分野においては、今後、新しい物質群を出していくことがより一層必要になるのではないかと感じていたからです。この思いは、助手時代にMITのKit Cummins教授のもとに留学して強くな

りました。Cummins教授は、均一系遷移金属錯体を用いて常温での $N_2$ 分子切断を実現したことで著名な米国を代表する金属錯体化学者ですが、この発見も、新しい構造を持つ反応活性金属錯体を創出しその反応性を探求する過程で見出されたものです。

このような考えのもとに進めてきた私の研究を簡単に紹介いたします。私は、実験中に偶然つかった結果から発想のきっかけを得て、「多数の金属原子を挟み込んだサンドイッチ化合物を合成しその存在を実証する」ことを目指して研究を開始しました。サンドイッチ化合物は、1952年に発見され、ノーベル化学賞（1973年）の対象にもなった有機遷移金属錯体の一群です。私が研究を開始した当時、既にサンドイッチ化合物は一般教科書にも広く掲載されており、その化学構造の概念は確立されたと考えられていました。それもそのはず、サンドイッチ化合物は、20世紀後半の遷移金属錯体化学・有機金属化学を牽引したG. WilkinsonとE. O. Fischerが1950年代から60年代にかけて20年もの間、鎚を削って研究した題材であり、次の世代の研究者たちがそのあとに続いて徹底的に研究してきた経緯があります。従来のサンドイッチ化合物の構造原理は、フェロセンの分子構造に代表されるように、2つの不飽和炭化水素類の間に金属原子がひとつ挟み込まれたときに安定構造が生じるというものです。しかし、私はここに素朴な疑問を感じました。金属原子は金属-金属結合を形成しながら集合し金属クラスターを形成する性質もつことを考えると、もっと多くの金属原子を挟み込んだ場合でも安定なサンドイッチ分子が形成されるのではないか

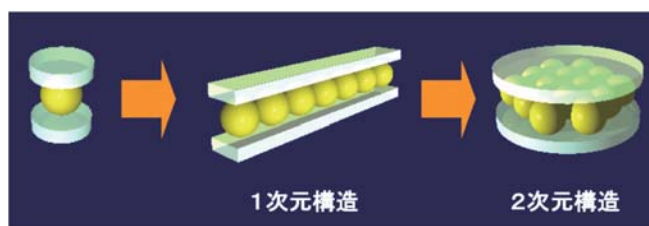


図1 多核サンドイッチ化合物の構造モデル

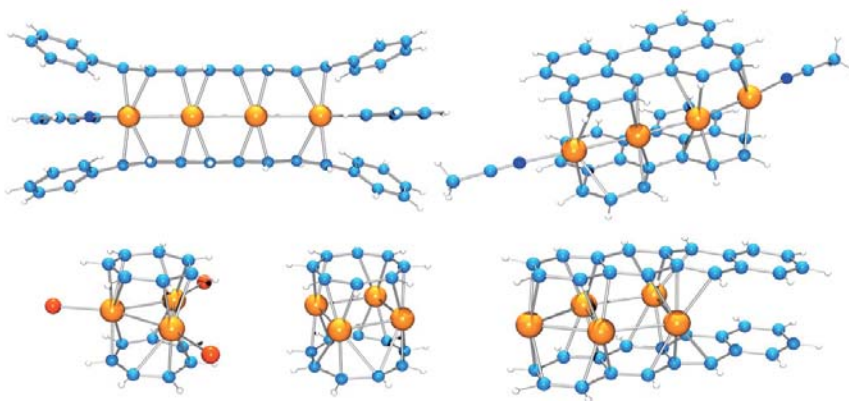


図2 多核サンドイッチ化合物の構造例  
(カウンターイオンおよび一部の配位子を省略)

と考えたのです。たとえば、1次元金属鎖や2次元金属シートを挟み込んだサンドイッチ化合物が安定に得られるかもしれません（図1）。当時、このような仮説に基づく研究をおこなっていた研究者は、国内外で見あたりませんが、この構造を思いついたとき、是非とも自分の手で創出してみたいと思い、躊躇せずに研究に取りかかりました。それほど、この構造は私にとって魅力的でしたし、「この化合物群を手にすることができれば、そこから有機遷移金属錯体の化学が新しい展開をみせるかもしれない」という予感が、私の意欲を駆り立てました。

これまで、偶然の産物としてさえ得られていなかった未知の化合物を合成研究の標的にしますから、まだ使われたことのない金属錯体合成法を開発することを視野に入れて反応設計を練る

必要があります。用いる金属錯体原料も今回の目的に合うものを自ら開発しながら研究を進めていき、まず1次元金属鎖を持つサンドイッチ化合物を合成できることがわかってきました。連続的な $\pi$ -配位結合で1本の金属鎖が支えられている結合構造は、一見すると弱いように思われますが、得られた金属鎖サンドイッチ化合物は、空気中でも取り扱うことが可能な安定化合物であることがわかり、大きな驚きでした。さらに研究を進めていくと、2次元金属シートを持つサンドイッチ化合物が安定に存在し合成可能であることも判明しました。Science誌に発表したこの成果は、当時大きな驚きをもって迎えられました。その後も研究を進め、様々な環状不飽和炭化水素類を用いて1次元金属鎖や2次元金属シートを持つサンドイッチ錯体を合成できることがわ



かってきており、多核サンドイッチ化合物は、広く存在し得る化合物群であると考えられます。

こうして、サンドイッチ構造内に固定できる金属原子数の制限（これまでは1つか2つ）が取り払われました。今後、周期表の金属元素全体に展開できれば、現在よりもずっとバラエティに富んだ化合物群になっていくと期待されます。また、合成研究が進めば、物性や反応性を解明するステージへと進むことができます。例えば、拡張 $\pi$ -共役系不飽和炭化水素の平面間に広がる特異な空間内で多数の金属原子の集合体がどのような物理的・化学的性質を示すのかに大きな興味を持たれます。実際に、私のグループでは、金属鎖を持つサンドイッチ化合物がこれまでにない新しい分子挙動を示すことを明らかにしてきています。たとえば、金属鎖上で共役ポリエン配位子が光照射により面反転を起こしたり、レドックスに応答して金属が可逆的に離散・集合する挙動（図3）を示すことがわかっています。今後、物性解明や反応性解明

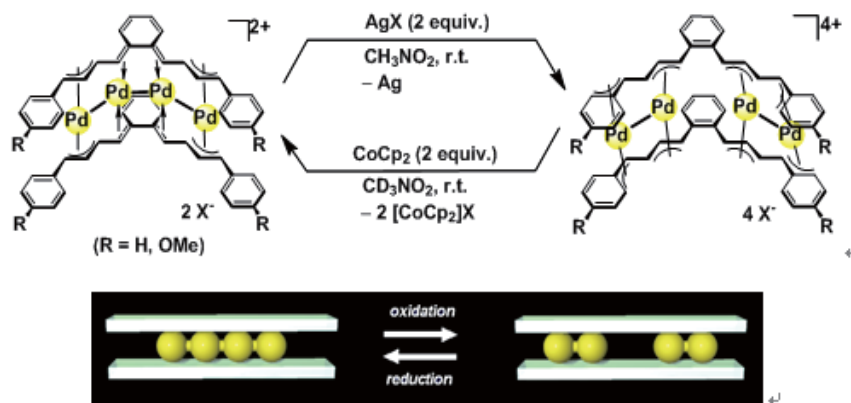


図3 レドックスに応答してサンドイッチ構造内の金属原子が可逆的に離散・集合する

の過程でさらに新しい現象が見つかる可能性も感じられ、私自身大いに期待しているところです。

“自分がこれから何を指すべきか”。いつの時代も、すべての若手研究者はこの問いを自らに投げかけるはずです。そして分厚い壁と向かい合いながら何らかの答えを出し、取り組んでいきます。その答えが研究者それぞれの持つ独特の感性を色濃く反映したものであれば、それだけ研究に多様性が生まれ、

サイエンスの発展の芽も沢山生まれると思います。私もまだまだ若い気持ちで、自分らしい取り組みを続けていければと考えています。化学の道を志し、これまで幸いにも第一線で研究する機会を得てきました。分子科学研究所で新たなスタートを切り、私の「ゆめ」は続いています。

# さまようこと、ふりかえること、たどりつくこと

いしざき・あきひと

2008年3月京都大学博士（理学）。専門は物理化学の理論。2008年4月カリフォルニア大学バークレー校化学科にて日本学術振興会海外特別研究員、2010年4月ローレンス・バークレー国立研究所物理生物科学部門博士研究員を経て、2012年3月より現職。



2012年3月1日付で理論・計算分子科学研究領域に着任いたしました。一部雑然とした雰囲気も漂うバークレーの街並みとは異なり、岡崎は閑静な住宅街とでもいうのでしょうか深夜にも身の危険を感じることなく帰宅できる生活環境の恩恵を享受しています。

2008年3月に京都大学谷村吉隆教授のグループで量子動力学・非線形振動分光の理論研究で博士号を取得後、カリフォルニア大学バークレー校グラハム・フレミング教授の実験グループに加わり光合成光捕獲系における電子エネルギー移動の理論研究に取り組んできました。太陽光の強度が弱い場合、光捕獲タンパク質によって捕獲された太陽光エネルギーは色素分子の電子励起エネルギーとなりほぼ100%の量子収率で反応中心へ輸送され電気化学エネルギーに変換されます。絶え間ない分子運動と乱雑なゆらぎの中にありながら、色素の電子励起エネルギーはどのようにして反応中心へ確実に辿り着けるのでしょうか？天然の光合成光捕獲の驚異的な量子収率の本質的な分子的起源の解明には未だ道遠くと言わざるを得ないのが現状のようです。一方で2007年4月に発表されたフレミング教授らの論文では、光合成細菌中に

存在する色素タンパク質複合体の中に温度 77 K において 660 fs 以上にも及ぶ電子励起状態間の量子コヒーレンスの存在の実験証拠が示されていました。量子的な重ね合わせはわずかな刺激が加わっただけで崩れてしまい外界から隔絶された系でないと見られないというのが常識であったわけですが、タンパク質のような擾乱だらけの環境の中で重ね合わせ状態が長時間保たれることは当時の自分には驚きでした。

何かある——動物的嗅覚だけでこの問題に飛びつき日本学術振興会海外特別研究員制度の援助のもとフレミング教授のグループに加わりました。今でこそ「生物系における量子効果」なる学際分野は世界的潮流となりソルベー会議など開催されるようになりましたが、2008年当時はフレミンググループの実験結果があるだけで日本では当然のこと欧米においても他の実験データや理論解析は皆無でした。そのような状況で、最初の研究打合せでフレミング教授が言い放った短い言葉が今でも耳に残っています——Do whatever you like. この一見気楽なアドバイスが悶絶生活の始まりでした。自分が何も知らない光合成光捕獲に関して、蓄積された膨大な知識・情報の前で途方に

暮れるばかり。関係がありそうな文献を集めて勉強するのですが知識が増えれば増えるだけ頭の中でdephaseしてしまう。悶々とした生活も5ヶ月が過ぎようとしていた土曜日の昼下がりに、ペンネを茹でる鍋の湯とマイクロ波オープンで温まったソースが別々に沸き立つのを見て「光合成エネルギー励起でもこっこのタンパク質環境の歪みが生み出すエネルギー井戸で揺らぎが沸々して、あっちの井戸でも独立に沸々して……」と思い描いた時「それなら時間順序演算子を付け足せばいいのかも。そうすれば自分が知っている数学的技術を使える。それなら昔の溶媒とダイナミクスの実験に対応づけることができる」とdephaseしたままの雑多な現象・理論・実験の知識が美しくrephaseした瞬間でした。詳しく計算してみると、たしかに量子コヒーレンスの実験結果を説明しているばかりが従来の光合成エネルギー移動の理論研究が立ち往生していたパラメータ領域まで説明できている！

これら一連の成果は学際分野の萌芽期であったことが幸いし光合成系の物理化学や量子情報物理など関連コミュニティで注目して頂くことができました。有り難い話なのですが、当の本人

は自身の仕事に満足していない。光捕獲系において電子エネルギーが「ほぼ100%の量子収率」で反応中心へ輸送される「本質的な物理化学」を明らかにしていないという忸怩たる思いがありました。また、光合成光捕獲系の機能は電子エネルギーを反応中心へ送り届けることだけではありません。強光下に曝された場合には自らの損傷を防御するために過剰摂取した光エネルギーを熱として散逸させるという調整機構が作動することが知られています。外界変動からのフィードバック制御を含む種々の制御回路が働いていることも実験的に明らかとなりつつありますが、その詳細な分子機構についてはコンセンサスが得られておらず今なお活発な議論が続いています。今後の研究テーマの柱の一つとして、光捕獲系における驚異的なエネルギー変換効率とその調整機構といった選択的・特異的挙動の理解を踏み台にして、一般的に

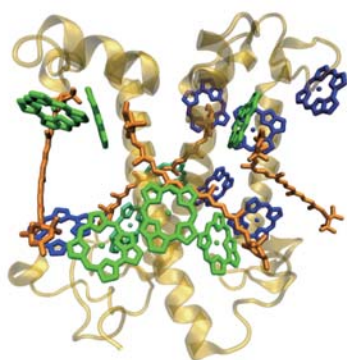
も分子系が示し得る指向性・応答性・自律性に関する新しい物理化学、いきものをものから隔てる分子の科学を展開できればと考えています。

学位取得直後のエネルギーと不安に満ちた瑞々しい時期の米国生活が一つの学際分野が形成されていく過渡期に共鳴し、また自らもその渦に巻き込まれたことは掛け替えの無い貴重な経験でした。そこでは我々無名の若輩と錚々たる有名教授がほぼ対等に競い合い、時には露骨に足を引っ張られては捻り潰されそうになり、時に共に興奮し合う人間ドラマを目の当たりにし、アカデミアの在り方や自身の居場所・方向性を否応なく考えさせられた刺激的な日々でした。米国に留まろうか日本に帰ろうかと懊悩煩悶があったのも正直なところです。我々若い世代がvisibilityや競争力を獲得・維持するのが極めて難しい日本のアカデミアとは異なり、当然のキャリアパスとして数年のポス

ドク・トレーニングを終えた駆け出し研究者がassistant professorとして独立し個を主張する米国流の在り方は私には非常に魅力的でした。その一方で日本の魅力は、外部資金獲得に関して過度なストレス無く質実剛健な研究ができる学問風土でしょう。昨年度より試行された若手独立フェロー制度は、若手研究者が米国スタイルで日本クオリティの研究を遂行できる革新的な制度であると胸を躍らせ帰国を決意いたしました。心機一転、精一杯精進したく思います。

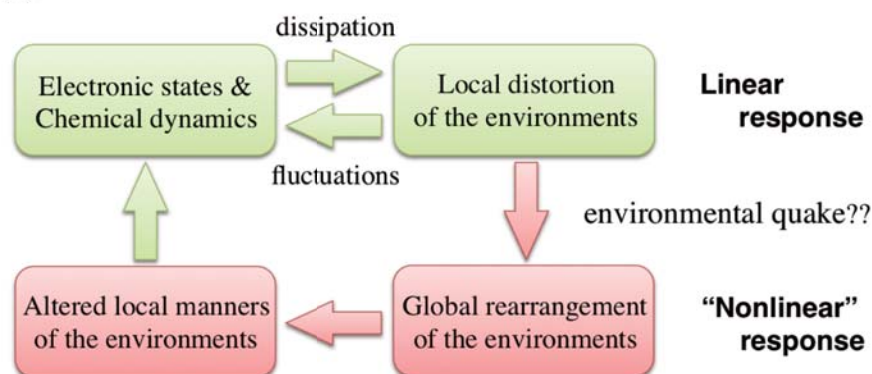
最後になりましたが、日本的・人間的なしがらみにまみれることなく気ままに研究できる機会を与えて下さいました大峯巖所長ならびに齊藤真司主幹教授、また所内外の多くの方々のご支援・激励に厚くお礼申し上げます。どうぞよろしくお願いいたします。

(a)



(a) 植物の光合成系に見られる光捕獲タンパク質LHCIIの単量体。14個のクロロフィル（緑と青）と4個のカロテノイド（橙）からなり、外界変動に応じてエネルギー輸送の担い手としても阻止装置としても働きうると考えられています。

(b)



(b) 光捕獲系の機能研究を通して従来の線形応答論の枠組を超えた化学動力学と環境の間のフィードバックループを理解し、より一般に分子系が示し得る指向性・応答性・自律性に関する物理化学を議論したいと考えています。



## 分子科学への船出

しかの・ゆたか

2007年東京工業大学理学部卒、2009年同大学院理工学研究科修士、2011年博士課程修了、理学博士。内、マサチューセッツ工科大学機械工学科にて客員学生。日本学術振興会特別研究員（PD）を経て、2012年2月より現職。2011年よりチャップマン大学客員助教。



2012年2月16日付で東京工業大学大学院理工学研究科から分子科学研究所に着任致しました。もともとのバックグラウンドは理論物理で、主に量子情報理論とか量子論の基礎論の研究を行っていました。私の所属していた研究室は宇宙物理学理論研究室というところで、素粒子理論と原子核理論の3研究室が合同で運営されているため、色々な物理の話をご日常から触れていました。私の指導教員の細谷暁夫さんがとても度量の大きい方で、そのもとの自由で研究をさせていただき、セミナーでは宇宙物理の観測に関することから量子コンピュータの原理まで幅広く聞いていました。それでも、正直、私が分子科学の道に足を踏み入れるとは想定してなく、私自身（おそらく周囲の人々も）驚いています。

着任する前までの研究内容は、学部生の時に出会った量子力学の世界観に引き込まれ、量子力学の基礎論と呼ばれる分野で研究していました。学部4年生の時に数理物理的な本を輪読していたのですが、その中の記述で不十分だと思うことを見つけ自分自身の頭の中で考えた問題が「量子力学の時間は測定可能量か？」という問題でした（今でも私の心の中に

隠している解き明かしたい問題の一つです）。これではとても歯が立たず、細谷さんにもう少し問題を簡単にしてもらい量子測定理論に関する数理物理の論文を初めて執筆しました<sup>[1]</sup>。その際、国語も英語も出来ない私にほぼ毎日つきあっていただき、細谷さんに論文推敲の指導を受けながら3ヶ月ほどかけて論文を執筆しました。論文を投稿した際に「これで大学院教育のほぼすべてが終わりましたので、あとはお互いに一緒にやりたい時に研究をしましょう。」と言われ、細谷さんとは一緒にやりたい仕事だけに特化し、自分自身で新しい問題を考えながら猛ダッシュで今まで駆け抜けてきたように思えます。本当に恵まれた環境でした。そして、研究をしていく中で、国内外を問わず様々な会議に参加したおかげで色々な方と知り合うことが出来、今ではそれが私の財産となっています。特に、博士課程の頃に日本学術振興会からの経済的サポートによりマサチューセッツ工科大学機械工学科に留学し、分野を問わず様々な人と議論できたことが私の研究の幅を広げてくれています。私自身の研究の内容としては、量子測定理論を深める意味でアハラノフが提唱した「弱値」という概念をより深め、量子ダイナ

ミクスのトイモデルである離散時間量子ウォークに関する研究を行ってきました。本質的にはどちらも「量子力学の時間とは何ぞや？」という最初に考えたかった問題に近いところにある問題で、本質を突き詰められるとは思っていませんが、2011年9月にこれら2つの研究を纏め学位を取得し<sup>[2]</sup>、日本学術振興会特別研究員（PD）を経て、分子研に着任しました。

分子研では若手独立フェローという新しい制度で雇用され、何から何まで新しいことだらけで所内でも色々な方々にご迷惑をおかけしています。まず、この制度で最初に私が驚いたのは私が特任准教授だということでした。ある日、大峯所長から私の携帯に電話をかけてくださり「独立するっていうことは、准教授以上っていうことだ。」と言われ、自分自身で研究室をもつという自覚をもって行動しなければならなかったのと同時に、もう一度やりたいことを見つめ直そうと思うようになりました。後にいくつか現在行っているプロジェクトを紹介しますが、それ以上に「何を理解したいのか？」「どのようなことで我々は自然現象を理解したと言えるのか？」といった疑問

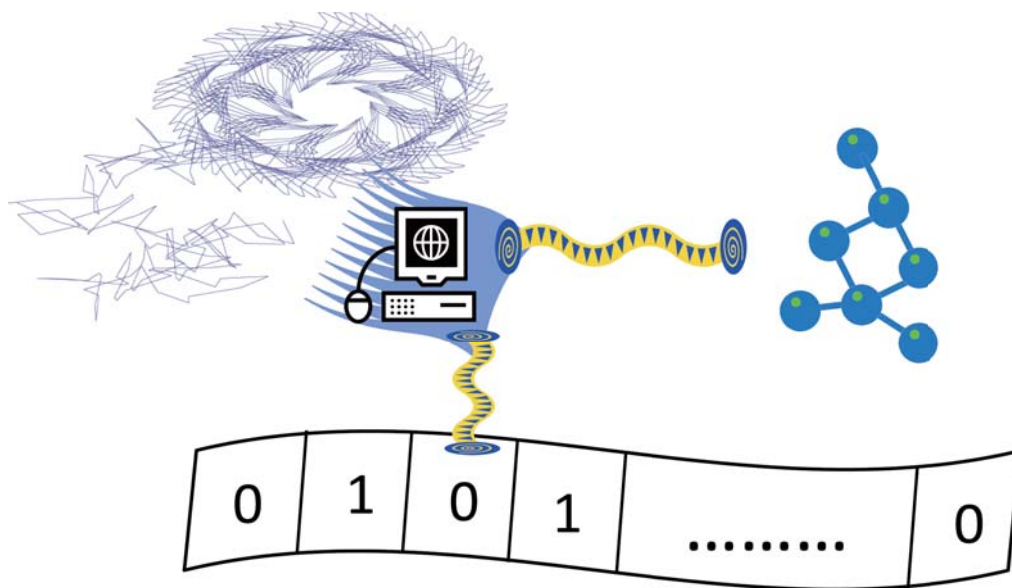
に日々ぶつかるようになりました。更に、今まではコンピュータを使った計算というのをほとんどしてこなかったため、分子研の周囲の方がよくやられているような巨大な計算機による結果やインターネット上に広がる膨大なデータベースを見ていると「解析解がどれだけの意味があるのか？」といった疑問に答えなければならないと思うようになりました。これらの疑問に答えを探しつつ、眼前にたてたプロジェクトを日々遂行しています。

分子研に着任してから、多体系の量子測定理論をどのように定式化すればよいのかという問題と非平衡現象をどのように定式化すれば良いかという問題を

始めました。前者に関しては、分子を観るということに着眼し、何をもって分子を観たと言えるのか？ 一見すると哲学的な問いとも捉えかねないような問題について研究しています。後者に関しては、それぞれ全く異なる3つのアプローチから探索しています。まず、光固体物性の実験屋と共同して平衡状態の記述では説明できない現象を定性的にも定量的にも説明できるようにすることでその一般論を展開出来ないかと考えています。また、情報科学の視点を用いて記述し直すことにより<sup>[3]</sup>、平衡状態に対する見方が変わるだけでなく、その他の現象についての記述に関しても可能か否かを研究しています。最後に、相互作用のある系にお

ける平衡状態の記述の仕方を確率過程の見方から再定式化したいと考えています。これらを通して、我々が測定できるダイナミクスとは何か？という問題に対してアプローチできると考えています。ここに掲げた問題だけに関わらず、自然の中に潜んでいるストーリー豊かな問題を定式し、理解できればと思っています。

最後に、分子研内外を問わず多くの方に支えられ研究室が楽しく運営でき、この場を借りて感謝の意を申し上げます。この支えを力に変えて、若手独立フェローの目標である「新しい分子科学」の創出の一助が出来ればと考えています。今後ともよろしくお願い致します。



情報科学の視点を用いた非平衡ダイナミクスの概念図

ブリルアンの考えである「すべての物理過程を情報処理過程として捉える」というものの概念図。すべてはモデル化でき計算できるものはすべてチューリングマシンで実装できるというアイデアの元、テープとコンピュータのセットにより、非平衡状態を定義できないのかという概念図。

#### 参考文献

- [1] Y. Shikano and A. Hosoya, *J. Math. Phys.* **49**, 052104 (2008).
- [2] Y. Shikano, “Time in Weak Value and Discrete Time Quantum Walk – From Quantum Measurement to Quantum Dynamics -” (LAP Lambert, Germany, 2012).
- [3] A. Hosoya, K. Maruyama, and Y. Shikano, *Phys. Rev. E* **84**, 061117 (2011).

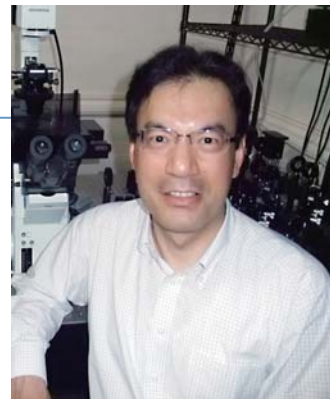


## 時代の流れ

## 小澤 岳昌

(東京大学 大学院理学系研究科 化学専攻 教授)

おざわ・たけあき/1993年東京大学理学部化学科卒業、1998年東京大学大学院理学系研究科で博士取得。東京大学大学院理学系研究科化学専攻の助手、講師を経て、2005年より分子科学研究所助教授。2007年10月より現職。



岡崎から東京に戻り、早5年が経過しようとしています。大学の日々の忙しい生活に、岡崎での記憶が遠い過去のように感じられます。分子研のよき思い出を振り返るとともに、分子研ラムナイの一員として現況を報告する良い機会と思い、寄稿させていただきました。

岡崎での研究生活で得たことは多々ありましたが、中でも准教授として独立した自由な環境の中で、様々な人的交流ができたことは非常に大きな収穫でした。分子研のみならず、基礎生物学研究所や生理学研究所の方々とは、分野間連携を通じて共同研究が発展し、最終的には論文に成果を纏めることができました。研究に没頭し熟考できる十分な時間と、自由な発想で試行できた特別な環境が、現在の研究の土台となり展開につながっています。緑豊かな明大寺の落ち着いた環境は、都会の大学とは対照的であり、サイエンスの新たな芽を育む貴重な環境であると今になって感じています。

さて約3年の岡崎生活から東大に戻り、先ず始めの大仕事は、理学系研究科長補佐として広報委員長を2年間勤めることでした。理学系研究科では、サイ

エンスコミュニケーションを専門とする横山広美准教授を中心として、東大本部広報に引けを取らないイベント企画や出版物・グッズ作製を行っています。対象は中高生、東大内部学生、一般向けなど細分化し、数十名を対象とした講座やサイエンスカフェ、また千人近くの市民を対象とする公開講演会など様々な催しを開いています。講師は研究科の先生だけでなく、アウトリーチ活動に積極的な学生団体にも協力して頂いています。理学系研究科の運営について学ぶとともに、理学に携わる様々な分野の先生と対話する機会をいただき貴重な経験となりました。また研究科ホームページも広報室業務の一つであり、私が着任してすぐに刷新いたしました。見栄えのある解りやすいホームページに仕上がっていると自負しております。大学に来て講義を受けたり実験したりする中高生の目は本当

に輝いています。こうした地道な取り組みを研究・教育機関で行うことにより、将来サイエンスに夢を抱く若者がより一層増えることを期待しています。

また昨年の震災以降は、理学系研究科の震災対応が濃密に議論され、その発信手段としての広報の役割は極めて重要となりました。東京大学も少なからず被害を受け、また留学生が一時帰国するなど不安要素が絶えなかったため、震災直後は学内向けのメッセージに特化し情報発信に努めました。そして、学内が落ち着きを取り戻してから、近隣の小中学校の先生を対象に、正しい放射線や地震に関する勉強会を数回にわたり開催しました。この企画は大変に好評で、関東近縁の幼稚園から高校の先生など多数の申し込みがあり、毎回闊達な議論が交わされました。そして1年が経過した今、一般の方を対象とした震災関連の講演会を開催する予定となっ

ています。理学系だけでなく、工学系や医学系など全学の協力を得ながら進めています。

昨年11月には、東京大学理学部化学教室の発祥150周年記念式典を開催しました。私はその幹事を任され、式典準備の1年間は慌ただしい





日々を過ごしてきました。化学教室出身者の名簿収集に始まり、開催案内状の作製、当日のプログラム構成や企画、150年の歴史を記したDVD作製、記念品の準備等々、周囲の方々に多大なる協力をいただきながら無事に挙行することができました。また、準備期間には東京大学理学部化学科の過去の資料を自ら閲覧する機会があり、歴代の諸先輩の教育と研究の功績を改めて重く受け止めた次第です。当日は300名以上の同窓生が集まり、和やかな雰囲気のもとで盛大に開催するに至りました。

一方で研究室は、留学生やポスドクを合わせ30名以上のメンバーが在籍する大きなラボになりました。研究室内は若さ故に活気にあふれ、それに煽ら

れ私自信も若返った錯覚をおこします。研究室内では学生が英語を日常的に使う機会が増え、化学専攻として英語教育に力を入れていることから、学生の英語力は一昔前にくらべ格段に上達しています。さらに、海外短期留学やインターンシップ制度などを設けており、博士課程の学生は大変に恵まれた環境の中で、研究生活を充実させています。一方で学生がtwitterやfacebookなどネット経由の情報に翻弄されていることも事実です。欲しい情報を瞬時に獲得できる一方で、溢れる情報に流されることなく、正確な情報の真贋を自ら見極めることが必須とされています。不特定多数の相手と平易な文で情報交換をする習慣が日常化する一方で、

サイエンスでは顔をつきあわせて深くディスカッションすることが必須不可欠です。私自身も時代の流れを敏感に感じ取って、学生とのディスカッションを大切にしながら、教育にエネルギーを注いでいます。

最後に、サイエンスに限らず時の流れは年々加速しており、数年前に思いもつかない革新的な発見や事象が日々溢れ出てきます。大学は事を一つ決断するにも時間と労力が必須ですが、岡崎の研究所は小さな所帯である故に、フットワーク軽く舵取りできることは、非常に大きな特権であると感じています。岡崎の良き伝統を継承しつつ、岡崎の更なる革新的な飛躍を期待しています。



## 分子研の時限爆弾

### 高田 彰二

(京大大学院理学研究科生物学専攻 准教授)

たかだ・しょうじ/1988年京大理卒、1990年同化学専攻修士修了、1991年～1995年岡崎国立共同研究機構技官(分子研)、総合研究大学院大学博士(理学)。1995年～1998年学振研究員(イリノイ大学化学科)、1998年～2001年神戸大理・化学講師、助教授を経て、2007年より京大理・生物物理教室准教授。



分子研に滞在したのは20年近く前の話ですから今頃このような記事を書く機会をいただこうとは思いませんでした。分子研では中村宏樹先生のもとで5年間、化学反応の量子力学の理論研究を行い、博士号を取得しました。その後あれこれ悩んだあげく、生物に関わる研究がしたいと考え、まったく違う分野に転向しました。分野を変えてポスドクとしてアメリカに行く

時、これまでの研究はゼロクリアして一から出直そう、というような決意をしたのを思い出します。実際、アメリカでの3年、その後神戸大に職を得てからも、分子研時代の研究とは直接関連のない生物物理の研究領域で研究を続けてきました。かなり生物的な研究に舵を切って行き、自然と分子研時代の研究者との交流も徐々に少なくなってしまいました。ついには5年前京大

の生物学専攻に移ることになり、分子研時代の知見は葬り去られたように思えました。生物学専攻になると、当然のことですが周りは本当の生物学者ですし、研究室にやってくる学生さんも、蛋白質のなかの原子の動きよりは細胞システムの振舞いに興味をもっていたりします。

ところが不思議なものです。そんな私の研究室で、1年前から量子化学の計

算がスタートし、いまちょうどその結果が出始めて、量子化学計算の論文を書いています（あくまで研究室のテーマのなかで傍流ではありますが）。なぜそうなったか、にはいろいろな経緯があります。近くに林重彦さんがいて彼の研究に刺激を受けたのは大きな要因でしょう。私に興味をもって研究してきた生体分子モーターを林さんも研究しており、彼の研究で量子化学計算が本質的に面白い知見を与えることを見せつけられたのです。生体分子モーターというのは、いろいろありますが例えば、ATPの加水分解反応の際に解放される自由エネルギーを利用して力学運動を起こす蛋白質機械です。化学反応が中心的な役割を占めます。が、それまでの私は生体分子モーターで量子化学計算をやることは念頭にありませんでした。考えてみれば、20年近く前に私が量子化学計算を少しかじったときには、簡単に計算できたのは孤立系の小さい有機分子がせいぜいでした。分子の問題では密度汎関数法もまだほとんど使われていませんでした。とにかく生物を研究しようと思った時には、量子化学計算は別世界のものと割り切っていました。それがいまでは水溶液中の蛋白質の化学反応を計算できるというのです。時代は変わりました。毎日研究室でもがいているなかでは感じにくくても、10年単位でみると研究とい

うのは本当に進んでいるものですね……。

さて、研究室で量子化学計算を始めるにあたり、最新の論文を眺めてみると“浦島太郎”で、意味がよくわかりません。それでアマゾンで量子化学の教科書を検索し（教科書自体もまったく知らないものばかりでした）手にとってにわか勉強を始めると、そこには懐かしい式が並んでおり、スーと頭の中に入ってきました。意味がわからなかった点はとくに密度汎関数のところで、それは私には新しい勉強でした。が、それでも全体として理論は20年前とそんなに変わっていませんね、ホッとしました。実際、この勉強が速やかに出来なければ量子化学計算をする計画は実現しなかったかもしれません。もちろんソフトウェアも充実していますから、ユーザーに徹して応用計算をするのであれば、思いのほか参入障壁は低いものでした。ただし、実際に計算をしているのは研究室の若い人であって、私自身が量子化学計算を回しているわけではないことは白状しておきます……。研究室のポストドクが生体分子モーターなどの蛋白質の量子化学計算を始めると、出来ることがいろいろありそうで、



どんどん興味が広がっていきました。

何年前かに、高校の恩師が書かれた、教育と言うのは生徒の中に時限爆弾をしかけるようなものだという記事を思い出します。高校で植えた種が数十年たって大きく花開くのをみるのが教師の喜びなのだというような趣旨の話だったと思います。いまになって量子化学計算をかじっている私にも、時限爆弾が仕込まれていたのかもしれない。数ある研究テーマの選択肢の中でテーマを選ぶとき、結局研究者は過去のさまざまな経験をもとにするしかないわけで、自覚の有無に関わらず、時限爆弾はたくさん仕込まれているのかもしれない。異種類の時限爆弾が同期して爆発すると素晴らしいアイデアになるのかもしれない。取りとめの話になってしまいましたので、これで終わりにします。



## 橋本和仁教授に第64回日本化学会賞

このたび「光化学を基礎とする環境・エネルギー化学技術の研究」という題で第64回日本化学会賞を授与されました。これまで常々化学の劣等生と内心思っていた私が、日本の化学会において最も名誉ある本賞を戴けたことは、これまでご指導くださった数多くの先生、諸先輩、そして一緒に研究を進めてくれた共同研究者および研究室のスタッフ、学生諸君のおかげです。心より感謝申し上げます。

現在、分子研に在籍されている皆様の中には、私のことをあまり身近に感じられない方も多いのではないかと思います。私は1980年4月から1989年8月までの9年強の期間、電子構造研究系の坂田忠良助教授（当時、現在東工大名誉教授）の下で、技官、助手として過ごしておりました。昼はテニス、夜は岡崎のネオン街へと繰り出し、とても学問を志す真面目な若者とは認められていませんでした。しかし、その当時一緒に遊び学んだ分子研の仲間や、全国の大学から共同研究や施設利

用で来ていた研究者との親密な人間関係は、現在の私にとって宝であり、色々な活動の源泉となっています。学会はもとより、様々な会議においても、必ずと言って良いぐらい、当時の友人に出会います。我々は「机の下で心が通い合う」という感覚を共有しており、無意識のうちに助け合っているように思います。永年、分子研にいたおかげです。

さて、現在、私は微力ながらも科学技術政策策定の一部に関わる機会が多くなっております。様々な批判や不満はあるかと思いますが、残念ながら、今の我が国財政においては、科学技術関係予算を増やすことは難しく、何とか現状維持を、下手をすると削減の方向に行かざるを得ないと感じております。このような状況下で、研究力を高めていくためには、研究資源の有効利用と、異分野の融合を強力に進めていく新たな施策が必要です。小生が強く主張しているのは研究組織の拠点化です。本稿でこの内容を説明することは



橋本和仁（はしもと・かずひと）

元 分子科学研究所 技官、助手  
現 東京大学大学院工学系研究科 教授

困難ですが、これは小生が在籍していた当時の分子研がモデルになっています。ぜひ、分子研に、今後の日本の科学技術推進モデルになってもらいたいと期待しています。



## 阿波賀邦夫教授に第29回日本化学会学術賞

このたび、「強相関有機ラジカルの新奇物性開拓と有機エレクトロニクスへの展開」に関する研究成果に対しまして、第29回日本化学会学術賞を受賞しましたのでご報告申し上げます。有機ラジカルの物性研究は、ずいぶん古い話になりますが、私が学生時代そして分子研助手時代を通じてずっと続けています。当時は有機強磁性体の開発が研究目的でしたから、結合をつくって反磁性に落ち込みがちな有機ラジカ

ルの相互作用をいかに弱めるかが課題でした。一方、今回の研究は、有機ラジカルという点では共通ですが、高い相互作用の次元性と強い分子間相互作用をもつチアジルラジカルに関する研究で、強相関がもたらす物性開拓と、その有機エレクトロニクスへの展開を目指したものです。弱めるのと強めるのはどちらが難しいかという問題はさておき、強める方が青天井の発展を意識できるだけ精神的には気楽でした。

実際、チアジルラジカルから出てきた物性は、双安定性、光誘起相転移、磁氣的秩序状態、電荷移動相転移、非線形電気伝導、光電流など、極めて多彩で、面白い現象に巡り合いその理解を進めることで研究者としても成長できるという物質科学の醍醐味を味わうことができました。得られた現象のいくつかは、有機エレクトロニクスに十分取り込むことができそうで、この方法論についても学ぶ機会を得ることもできま



した。このように、多様性と出口志向が横糸と縦糸になった研究を楽しみました。忘れてはいけないことは、得られた研究成果が研究室の共同研究者や学生の不断の努力に負うことはもちろんですが、分子研時代にできた人的ネットワークを活用した多くの共同研究の上に成立していることです。これは、分子研出身者の最大のメリットと言えるかもしれません。

さて私は最近、分子研の客員教授(20-21年度)となる機会を与えていただきました。このときの研究テーマは、チアジラジカルとは全く異なるもので、分子クラスター電池の研究です。2次電池研究は、固体、溶液、物

性、反応などの多くの要素が含まれた総合科学で、応用が重要であることはもちろんですが、基礎科学としても興味は尽きません。有機エレクトロニクス研究と同様に、電極やその界面が重要で、反応の香りがする物性科学とも言えそうです。固体と液体の複合化による新物性、反応の香りがする物性科学、基礎の応用の直結などをキーワードにして、さらに新しい物性研究を追求できればと考えております。引き続き分子研ネットワークからのご支援と、また忌憚のないご批判をお願いします。



阿波賀邦夫 (あがわ・くにお)

1988年 東京大学大学院理学系研究科化学専門課程博士課程単位取得退学(理学博士)  
1988年 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所助手  
1992年 東京大学教養学部基礎科学科助教授  
2001年 名古屋大学理学研究科教授  
2005年 名古屋大学物質科学国際研究センター教授(現在に至る)



## 田原太平主任研究員に第29回日本化学会学術賞

この度、日本化学会の学術賞をいただきました。約10年前に分子研を卒業して間もない頃にも幾つか賞をいただく機会がありましたが、それらは分子研の助教授時代に行った研究、あるいはその続きに対していただいたものでした。今回は理研で始めた研究が主たる対象ですので、「卒業生」として胸をはって報告をすることができます。私が分子研から理研に異動した2001年頃は、21世紀に入ったこともあって分子科学の将来についての議論が盛んに行われ、ともすれば分野の危機感や閉塞感が強調される傾向があったように思います。分子研でも「2010年の分子科学を語る」といった研究会が開かれたのを記憶しています(もう2010年になってしまっている!)。私はそのような時期に自然科学のるつぼである理

研に移りましたので、分子科学について随分思い悩みました。もともとあまり頭が良い方ではないので、考えてうなっているだけで良い考えなど浮かぶはずもないのですが、それでも、一生は一度しかないの、人がどう言おうが、とにかく自分がやりたいこと、やるべきだと思うことをやろうということだけは決めました。難しそうに見える(見せる)ことに酔わず、正直に自分が面白いと思うことをやろうと思えました。そうして新しい研究を幾つか始めたのですが、今思うと、えいっとそう踏ん切ったのは良かったと思います。「基礎的な学術研究が出来るなどそれだけで恵まれたことなので、それに感謝して可能なうちに出来るだけ前に進む」、「誰もやっておらず、自分が価値あると思ひ、おもしろいと感じるこ



田原太平 (たはら・たへい)

1989年 東京大学大学院博士課程修了(理学)  
1989年 東京大学理学部化学科助手  
1990年 神奈川科学技術アカデミー研究員  
1995年 分子科学研究所助教授  
2001年 理化学研究所主任研究員

とを、ただ真っ直ぐやる」。振り返ると、そんな単純なことを確信するのに随分時間がかかったものだと思います。新

しいことがすんなりうまく行くことなどは絶対無く、大変苦しいこともあったのですが、思えば、もっともっと気楽にやれば良かったと思います。賞がいただけるということはあくまで結果にすぎませんが、決心して踏み出した研究が、客観的にも意味があると言っただけだ訳で、それは私にとって大変うれしいことでした。これも一緒に研究をやってくれた共同研究者の皆様のおかげだと思っています。

奇しくも今回の学術賞は何人か分子研に関係する方々と一緒に受賞することができました。中でも分子研の岡本さんとは、今はお互い全く違った研

究をしています。大学時代に同じ研究室で隣の机に座った仲で以来とても仲“悪く”させてもらっていますし、東北大の森田さんも昔から知っていますが、特に最近、界面の研究でがっぷり共同研究をしています。お互い硬派なのでかなりハードな議論をする機会があるのですが、理論家の森田さんは頭が良い上に頑固なものですから、僕の方が正しいことを言っていることもあるとは思いますが、議論ではいつも押し込まれて参ります。このような方たちと一緒に学術賞が受賞できたのは望外の喜びでしたが、10年前の議論を受けてそれぞれがどうか答えを出そうと

した結果なのかもしれません（あの頃は気分が減入ってしかたがありませんでした）。

基礎研究では個人の視点、価値観、美意識が本質的に重要だと思います。私にとってそれを考える時、分子研で過ごした6年間は大きな意味を持っています。懐かしく思い出すとともに、改めて深く感謝いたします。まだまだ道半ばですので、これからもっと新しく、もっとおもしろいことをやりたいと思っています。今後ともよろしくお願ひします。



## 森田明弘教授に第29回日本化学会学術賞

このたび第29回の日本化学会学術賞を受賞させていただきました。このような伝統ある賞をいただけるとは大変に光栄なことと存じます。今回受賞となった研究課題は、「界面和周波発生分光の理論の開発と液体界面への応用」であり、これは私が分子研でお世話になっていた時代の研究が発展したものです。分子研に着任する以前から萌芽的な研究は行っていたものの、私にとっては分子研の豊かな計算資源を活用した分子シミュレーションによって初めて発展することができた研究であり、このような形で実を結んだことに対して、分子研には大変に感謝しております。

液体界面の不均質現象は我々の身近にも多くみられ、解明すべきことは沢山ありますが、多くの問題は理論計算だけで全貌を解明できるものでなく、実験と理論の協力が不可欠と思います。

今回の受賞対象となった研究は、溶液界面を観測する最も有力な手法の一つである和周波発生分光の実験と理論計算との協力を国際的に初めて可能にした成果に対して与えられたと思っております。この機会に、実験の共同研究者の方々や研究室のメンバーなど、私を支えて応援してくださった方々に感謝申し上げます。

それとともに、とりわけお世話になった故加藤重樹先生の墓前にご報告申し上げます。以前に分子研レターズ(62号)で加藤先生の追悼記事を書く機会をいただきましたが、私にとって加藤先生から受けたご恩と影響ははかり知れず、今の自分を形作っております。今回の受賞を加藤先生が最も喜んでくれるのではないかと考えています。

このような賞はこれまでの業績の評



森田明弘 (もりた・あきひろ)

1992年11月に京都大学大学院理学研究科博士課程中退、その後京都大学理学部助手、岡崎国立共同研究機構計算科学研究センター助教授を経て、2007年4月より東北大学大学院理学研究科化学専攻教授。専門は理論化学、計算化学。

価だけでなく、これからの期待を含んでいるものと理解しています。分子研レターズ64号にもOBとして少し近況

を書かせていただいたように、まだ東北大学に移ってからは日が浅く、これから分子科学の拠点を築いていかなければならないと思っています。分子科

学の存在感を増していくことができるよう尽力するつもりで、今後ともどうぞよろしくお願いいたします。



## 井村考平准教授に平成24年度文部科学大臣表彰若手科学者賞

このたび、「動的光イメージングによるナノ物質の研究」に対して、平成24年度文部科学大臣表彰若手科学者賞を受賞しました。この研究は、私が分子研に着任してはじめて着手したもので、当時右も左も分からずに苦労しながら進めてきた研究がこのような形で実を結んだことを大変嬉しく思います。本賞を頂けましたのは、岡本裕巳先生をはじめ、三澤弘明先生、北島正弘先生、また多くの共同研究者の先生方のご指導とご協力の賜物です。この場を借りて深くお礼申し上げます。

私は、2001年から約8年間岡本グループの助手・助教として分子研に在籍し、それ以来、ナノ物質の光学特性の研究に従事しています。ナノ物質の中でも特に私が興味を持っているのは、クラスターよりも少しサイズが大きい貴金属ナノ物質です。この物質は、光と強く相互作用するため、通常のバルクの固体とは大きく異なる光学特性を示します。光学特性を解明するための鍵となるのは、物質内部に励起される空間モードです。これを可視化することができれば、ナノ物質の理解が深ま

ります。これは、分子の波動関数から分子の諸特性の理解が深まるのと同じです。私は、ナノメートルの空間分解能を実現する顕微分光手法を駆使してナノ物質を研究し、「ナノ物質の波動関数の可視化」「増強分光法のメカニズムの解明」「異常透過光現象の発見」に関して研究成果を得ました。それらが高く評価され、今回の受賞に繋がったのだと思います。

さて、折角の機会ですので私の近況をご報告したいと思います。早いもので分子研を去ってから3年が経ちました。現在、早稲田大学で学生とともに楽しい研究生活を送っています。分子研在任時は研究に没頭する毎日でしたが、こちらでは研究に加えて教育活動も行っています。研究スタイルは少し変わりましたが、引き続きナノ物質の光学特性に関する研究を進めています。特に、JST さきがけ研究者（光の利用と物質材料・生命機能）に採択頂いただいたのを契機に、最近ではこれまでの研究をさらに一歩進めて物質の機能（モード）を能動的に制御する研究に取り組んでいます。さきがけ研究統括の



井村 考平（いむら・こうへい）

1995年大阪大学理学部卒業、2000年同大学院博士課程修了、博士（理学）同年東北大学大学院理学研究科博士研究員を経て、2001年7月より分子研助手（助教）、2009年4月より早稲田大学大学院先進理工学研究科化学・生命化学専攻准教授

増原宏先生をはじめ、多くの先生方のご支援とご協力によりこちらの研究環境も充実し、興味深い研究成果が得られはじめています。それらが今後、新しい分子科学研究へと発展するものと期待しています。

### 分子研出身者の受賞（広報室で把握しているもの）

谷村吉隆京大教授（元分子研 助教授）にフンボルト賞

新倉弘倫早大准教授（元総研大院生）に文部科学大臣表彰科学技術賞（研究部門）





## 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)<sub>2</sub>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 (CO + H<sub>2</sub>O → CO<sub>2</sub> + H<sub>2</sub>) 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<sub>2</sub>

= 2H<sup>+</sup> + 2e<sup>-</sup>) に置き換えるとCO<sub>2</sub>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CO<sub>2</sub>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CO<sub>2</sub>固定反応を見だしており、いつの間にか私はCO<sub>2</sub>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でもよく一緒にしました。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ましたが、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 $\gamma$ -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。

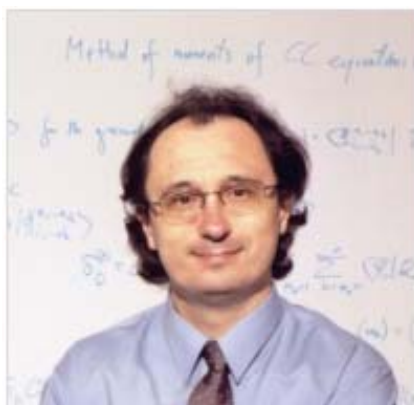
最後になりましたが、滞在中にお世話になりっぱなしだった桑島先生と桑島グループメンバーの皆様、どうもありがとうございました。これからのますますのご発展を祈念いたします。





## Prof. PIECUCH Piotr

from U.S.A



Piecuch 教授は、平成24年7月13日～8月16日および平成25年2月～3月の合計約三ヶ月間、理論・計算分子科学研究領域系に招へい外国人研究職員として滞在される予定です。Piecuch 教授はポーランド出身で、現在、ミシガン州立大学の University Distinguished Professor であり、2011年には American Association for the Advancement of Science のフェローに選出されている研究者です。研究のご専門は電子状態理論です。

P. Piecuch 教授は、多体問題、電子状態理論、原子核理論の研究分野において国際的に活躍されている研究者で、結合クラスター法 (Coupled Cluster, CC) に基づく理論、新しい計算アルゴリズム、精密なポテンシャル曲面などの最先端の研究を行っておられます。1980年代には Coupled Cluster の創始者でもある J. Paldus 教授や L. Adamowicz 教授らと多配置クラスター展開法 (Multi-Reference Coupled Cluster, MRCC) の研究をされました。その後異動したトロント大学ではノーベル賞学者の J. Polanyi 教授と研究を

されています。1998年に現在のミシガン州立大学に異動され、独自の理論の開発を中心に研究を展開されています。

近年の代表的な研究は、CR (Complete Renormalized) CC 法や Active-space CC 法の開発です。CCSD(T) 法は結合解離領域でポテンシャル曲線が間違っただるまいを与えるのに対し、Piecuch 教授の CR-CCSD(T) 法は正しく記述することができます。また、Active-space CC 法は、多電子過程で記述される励起状態のポテンシャル曲面を極めて高精度に記述します。これらの方法は、世界的にも有用であることが認識されており、そのプログラムは量子化学プログラムパッケージ GAMESS に実装されています。GAMESS の Coupled Cluster 部分の高速なプログラムはそのほとんどが Piecuch 教授のグループによって開発されたものです。さらに最近では、MM (Method-of-Moment) CC 法や CC(P,Q) 法の定式化によって、高次の演算子を階層的に含めていく、効率的で高精度な方法を開発しています。また、大規模系の Coupled Cluster 法の開発も行っておられ、電子相関の局所性を利用した CIM (Cluster-in-Molecule) CCSD 法やその一般化があります。大規模な生体分子系にこれらの CC 理論を適用するなど、大規模系における高精度計算を実現されています。このように、Piecuch 教授は Coupled Cluster に基づく理論開発において世界をリードする研究者の一人と言えます。

Piecuch 教授は、これまで何度か日本を訪れられておられ、JSPS 外国人研

究者招へい事業で京都大学に滞在されたこともあります。Piecuch 教授は日本国内の研究者とも研究交流を行っておられ、所内外の研究交流の活性化にも貢献していただけたと思います。分子研に滞在される期間に、是非、議論をしていただき、研究交流をしていただけますと幸いです。

(江原 正博 記)

# 外国人研究者の 印象記

## Japan Diary

Biman Bagchi

Professor, Indian Institute of Science



常滑にて

Between late spring and mid-summer of 2012, I spent three months at the Institute of Molecular Science as a visiting professor to the famed Institute of Japan. This was really my second visit to IMS. The earlier one was for about a month in 1994 but that had faded completely from my memory, except the memory of my two hosts, Professor Iwao Ohmine, now the Director General and Prof. Shinji Saito, then a student and now a well-known Professor and Chairman of a department and Director of computer center.

I am not new to Japan and Japan is not new to me. But I still feel very warm towards this country may be because of many friends I have, their sincerity and affection and also of many fond memories that this country holds for me. As a non-vegetarian Indian (who also drinks) food and culture have never posed any difficulty to me.

Like previous years, this year also I visited many places, including Nara and Kyoto. My hosts were extremely kind to take the whole family to several

interesting and beautiful places, as shown in the attached pictures

Science was also great – we could do a lot of work, as the hosts, especially Prof. Saito could spend a lot of time working with me. Prof. Ohmine, although ever busy, often dropped in to discuss problems. Our secretary Kondo san (Ms. Nao Kondo) was ever helpful.

One can really enjoy working in the quiet and congenial atmosphere of IMS. Okazaki is a perfect place for an Institute of this type and one must congratulate the founding fathers for their foresight. Okazaki also has a lot of old history and nice temples which we enjoyed. Both my wife and my son really liked their visit. We shall remember this trip for many days to come.



胸ヶ岳にて



桑谷山にて



## 相澤 雅子

あいざわ・まさこ

理論・計算分子科学研究領域  
計算分子科学研究部門 事務支援員



昨年12月より、計算分子科学研究拠点にて事務支援員として勤務しております。非力ですが、僅かでも研究に貢献できるように最善を尽くしたいと思います。

昨春より愛知県に転居してきたので、仕事だけでなく岡崎についても知らないことばかりです。日々新鮮な気持ちで業務に取り組んでおります。

今秋の研究会に向けて何かとお世話になるかと思いますが、よろしく願いいたします。

## Nie Qing-Miao

理論・計算分子科学研究領域  
計算分子科学研究部門（名古屋大学大学院  
工学研究科） 特任研究員



From Oct. 2011 to Jan. 2012, I was a Foreign Visiting Scholar at Nagoya University to conduct a cooperative research with Professor Masaki Sasai. In Jan.2012, I was appointed as a full-time researcher (CMSI researcher) at Institute for Molecular Science and as an Invited Researcher at Nagoya University.

Now I am developing highly parallelized computational codes to simulate the biological motor systems by using the K-computer system in Riken.

## 鹿野 豊

しかの・ゆたか

理論・計算分子科学研究領域  
理論・計算分子科学研究部門  
特任准教授（若手独立フェロー）



2012年2月に若手独立フェローという分子研の新しい制度で着任しました。今までの研究分野は量子基礎論という「もの」も「分子」も出てこない抽象的な世界であったため、分子科学に関しては門外漢です。これから今まで培ってきた道具立てを駆使し、不退転の決意でやってきた分子科学の研究の神髄に少しでも迫れたらと思っています。どうぞよろしくお願い致します。

## 石崎 章仁

いしざき・あきひと

理論・計算分子科学研究領域  
理論・計算分子科学研究部門  
特任准教授（若手独立フェロー）



京都大学大学院理学研究科にて博士号取得後、カリフォルニア大学バークレー校／ローレンス・バークレー国立研究所にて日本学術振興会 海外特別研究員／博士研究員を経て、2012年3月1日付けで着任いたしました。光合成光捕獲系の機能解明を目指した理論研究を通して、指向性・応答性・自律性の分子科学（のようなもの）を拓きたいと夢見ています。よろしくお願い致します。

## 山本 浩史

やまもと・ひろし

物質分子科学研究領域  
電子物性研究部門 教授



13年間勤めた理化学研究所を退職し、2012年4月1日付で分子研に着任しました。専門は電気を流す分子性物質の研究で、現在明大寺の実験棟5階で実験室の整備を進めています。研究場所が変わりましたので、色々と新しいことを吸収しつつ研究やマネジメントの幅を広げていきたいと思っています。どうぞよろしくお願い致します。

## 秋山 修志

あきやま・しゅうじ

生命・錯体分子科学研究領域  
生体分子情報研究部門 教授



京都大学にて学位取得後、理化学研究所播磨研究所、名古屋大学を経て、4月より分子科学研究所の教授に着任致しました。所内外との共同研究を通して、タンパク質時計研究のフロンティアを開拓していきたいと考えています。どうぞよろしくお願い致します。



## 村橋 哲郎

むらはし・てつろう

生命・錯体分子科学研究領域  
錯体物性研究部門 教授



2012年4月1日付で分子科学研究所に教授として着任しました。目前の課題、遠い課題のそれぞれを見据えながら、自分らしいアプローチで研究を進めていきたいと思っています。分子科学研究所の村橋をどうぞ宜しくお願いいたします。

## 許 斐 太郎

このみ・たろう

極端紫外光研究施設  
電子ビーム制御研究部門 助教



総合研究大学院大学・加速器科学専攻で学位取得後、2012年4月に分子研UVSORに着任いたしました。博士課程までは高エネルギー実験のための加速器コンポーネントの開発研究を行っていました。分子研では分野の異なる方々と交流でき多くの刺激を得ています。UVSORでは放射光源加速器について学び、良い加速器・放射光源を作っていきたいと考えています。

どうぞよろしくお願いいたします。

## 湯澤 勇人

ゆざわ・はやと

光分子科学研究領域  
光分子科学第三研究部門 IMSフェロー



名古屋大学で学位を取得後、4月より分子研小杉グループのIMSフェローとして着任いたしました。これまでは光触媒を用いた有機合成反応に関する研究を行ってきました。当研究室で取り扱う軟X線分光に関しては初心者なので、まだ分からないことが多いですが、本手法を触媒反応の機構解明に応用することを目指し努力していきたいと思っております。

よろしくお願い致します。

## 柳 浩太郎

やなぎ・こうたろう

岡崎統合バイオサイエンスセンター  
生命環境研究領域 IMSフェロー



平成24年3月に大阪大学で学位取得後、同4月1日より岡崎統合バイオ加藤グループにIMSフェローとして着任しました。学生時代はアルツハイマー病やII型糖尿病の原因となるアミロイド線維を対象に、溶液NMRを用いて線維形成反応を研究していました。現在は超高磁場NMR装置を活用し、タンパク質や糖鎖の運動性解析を行っています。

よろしくお願い致します。

## 小若 泰之

こわか・やすゆき

光分子科学研究領域  
光分子科学第一研究部門 研究員



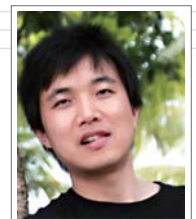
京都大学にて学位を取得後、2012年4月1日より岡本グループの博士研究員として着任いたしました。これまでは、孤立分子の励起状態ダイナミクスの研究を行ってきました。今後、電子ビームリソグラフィ法を用いて作成したサンプルを、近接場光学顕微鏡を用い、測定と解析を通じて、プラズモン間の相互作用の解明を目指して研究を進めたいと思っております。

よろしくお願い致します。

## 呉 慧 軍

Wu, Hui Jun

光分子科学研究領域  
光分子科学第一研究部門 技術支援員



平成24年4月より、総合研究大学院大学物理科学研究科で博士後期課程を修了後、岡本グループで技術支援員として、お世話になっております。これまで超高速近接場分光法による金属ナノ構造の励起ダイナミクスの研究を行ってきました。

どうぞよろしくお願い致します。



NEW STAFF

## 新人自己紹介

## 長谷川 淳也

はせがわ・じゅんや

理論・計算分子科学研究領域

理論・計算分子科学研究部門 客員准教授



京都大学福井謙一記念研究センターに研究室があります。京都大学工学研究科合成・生物化学専攻で学位を取得し、 Lund 大学で博士研究員を、出身の専攻で助教、講師を勤め現職に至ります。

電子状態理論に軸足を置いて、光機能性蛋白質の励起状態について研究しています。「なるほど！」という感動が研究動機です。

## 安藤 耕司

あんどう・こうじ

理論・計算分子科学研究領域

理論・計算分子科学研究部門 客員准教授



東京大学理学系研究科で学位取得（途中、京都大学で受託学生と学振DC・PD）、米国コロラド大学と理研で博士研究員、筑波大学物質工学系と英国パーミンガム大学で専任講師、京都大学理学研究科助教・准教授、と略歴だけで自己紹介欄が圧迫されますが、研究は凝縮系の電子移動とプロトン移動を中心に、励起移動とスピン遷移も視野に入れた分子理論と計算です。よろしくお願い致します。

## 森下 徹也

もりした・てつや

理論・計算分子科学研究領域

理論・計算分子科学研究部門 客員准教授



慶應義塾大学で学位取得後、理研、学振（東大）を経て、現在は産総研に所属しています。専門は第一原理及び古典分子動力学計算による液体・ガラス物性の解明と、分子シミュレーションの新技术開発です。学位取得後一貫して分子シミュレーション関連の研究に携わっている関係で、分子研の計算機センターには長年お世話になっています。客員准教授として、分子研の計算科学分野の発展に貢献できればと思っています。

## 野田 進

のだ・すすむ

光分子科学研究領域

光分子科学第四研究部門 客員教授



2012年4月より、客員教授を務めさせていただいております。本務は、京都大学工学研究科です。フォトリック結晶を用いた光の自在な制御に取り組んでおります。大森先生や、大島先生、平等先生などと、協力して、フォトリック結晶と分子研の光研究を融合させていければと考えております。よろしくお願い致します。

## 伊藤 敦

いとう・あつし

光分子科学研究領域

光分子科学第四研究部門 客員教授



東京大学理学系大学院で学位取得後、米国アルゴンヌ国立研究所、東京都臨床医学総合研究所を経て、現在東海大学工学部原子力工学科教授です。専門は、生体試料の軟X線イメージングで、UVSORに走査型軟X線顕微鏡（STXM）が導入されるに伴い、主にその利用面での協力のために着任しました。STXMはX線顕微鏡の利用分野における強力な装置として国内の他施設にない特徴を出すことができると思います。今後ともよろしくお願いいたします。

## 坪内 雅明

つぼうち・まさあき

光分子科学研究領域

光分子科学第四研究部門 客員准教授



2003年まで総研大の学生として在籍して以来9年ぶりに客員准教授としてお世話になることになりました。鈴木俊法助教（現京大教授）指導の下で学位を取得し、その後理研、プリティッシュコロンビア大学を経て現在日本原子力研究開発機構でテラヘルツ光の発生とその分子科学的応用に関する研究を行っています。分子研では大島教授との協力研究をさせて頂いております。よろしくお願いいたします。

## 朝倉哲郎

あらくら・てつお

物質分子科学研究領域  
物質分子科学研究部門 客員教授



2012年4月1日付で客員教授となりました。東京工業大学で高分子のNMR構造解析で博士号を取得後、東京農工大学の蚕糸学科(当時)に奉職、現在、工学研究院生命工学専攻で、教育・研究にあたっています。奉職後、32年になります。分子研の超高磁場NMR装置に超高速固体NMRマイクロプローブを導入、絹の分子間構造を解明、その知見を基盤に絹を用いた再生医療材料の開発を図ろうとしています。

どうぞよろしくお願いいたします。

## 笹井宏明

ささい・ひろあき

生命・錯体分子科学研究領域  
生命・錯体分子科学研究部門 客員教授



4月1日付で客員教授となりました。1985年に慶應義塾大学工学部で学位取得後、相模中央化学研究所、北海道大学薬学部、東京大学大学院薬学系研究科を経て、大阪大学産業科学研究所に赴任し15年になります。多機能な不斉触媒の開発や新規反応の開発が主な研究テーマです。研究の他に研究所の運営などでも協力できればと存じます。

よろしくお祈いします。

## 植村卓史

うえむら・たかし

生命・錯体分子科学研究領域  
生命・錯体分子科学研究部門 客員准教授



2012年4月1日より分子研の客員准教授として着任いたしました。現在の研究は、京都大学工学研究科にて、サブナノサイズの規則性細孔を有する多孔性金属錯体を用いることで、高分子材料を巧みに制御する研究を行っています。特に、このような空間を自在に設計することで、高分子の精密合成や拘束高分子の特異物性の解明を行っております。微力ではありますが、錯体化学のメッカである分子科学研究所に少しでも貢献できればと思っております。

## 須藤雄気

すどう・ゆうき

生命・錯体分子科学研究領域  
生命・錯体分子科学研究部門 客員准教授



北海道大学薬学部を卒業後、奈良先端科学技術大学院大学、名古屋工業大学、テキサス大学、名古屋大学、JSTさきがけを経て、名古屋大学理学研究科で活動しています。生物物理学的に、光受容タンパク質が関わる生命現象を研究する日本酒好きの人間です。これまで多くの分子研関係者と関わりを持ってきましたが、今回、自分自身が関わることになり、大きな責任と喜びを感じております。

## 飯田健二

いいだ・けんじ

理論・計算分子科学研究領域  
理論分子科学第一研究部門 IMSフェロー



京都大学工学研究科分子工学専攻にて学位取得後、4月より信定研にてIMSフェローとしてお世話になっています。前研究室では、化学反応や固液界面に関して溶媒和に焦点を当て研究を行っておりました。今後は、密度汎関数法を用いてナノ粒子や固体の表面・界面における化学現象の解明に取り組みたいと考えております。

どうぞよろしくお願いいたします。

## 石村和也

いしむら・かずや

理論・計算分子科学研究領域  
計算分子科学研究部門 特任研究員



2012年4月に神戸大学システム情報学研究科から計算分子科学研究拠点(TCCI)へ移りました。分子研勤務は4年ぶり、岡崎の生活にはすぐに慣れました。京コンピュータ利用のための大規模量子化学計算手法とプログラム開発を行っていく予定です。

よろしくお祈いします。





NEW STAFF

## 新人自己紹介

## 西澤 宏 晃

にしざわ・ひろあき

理論・計算分子科学研究領域  
計算分子科学研究部門（早稲田大学理工学術院）  
特任研究員

早稲田大学大学院先進理工学研究科にて学位を取得し、4月より特任研究員として着任いたしました。学生時代から量子化学を専攻し、非断熱効果を取り扱う理論開発に取り組んできました。現在は大規模系分子動力学法に関する理論開発という異なる研究を行っていますが、これまでの経験を生かして研究を進めています。

よろしくお願いいたします。

## 水口 朋 子

みずぐち・ともこ

理論・計算分子科学研究領域  
計算分子科学研究部門（京都大学化学研究所）  
特任研究員

九州大学にて学位取得後、フランスのリール第一大学を経て、今年の4月に分子研の特任研究員として着任いたしました。これまでは、分子動力学シミュレーションを用いてガス転移の研究を行ってきました。今後は、シミュレーションで膜タンパク質の自由エネルギー解析を行い、安定性を調べます。

よろしくお願いいたします。

## 新井 秀 実

あらい・ひでみ

極端紫外光研究施設  
光源加速器開発研究部門 研究員

東京大学大学院新領域創成科学研究科にて学位取得後、2012年4月1日付で分子研UVSORの博士研究員に着任致しました。学生時代は溶液化学を専門とした実験的研究を行ってきました。これからは、X線顕微分光を利用した研究を進めて行く予定です。今までとは異なる領域での研究となり、勉強しなければならないことは多いですが、どうぞよろしくお願いいたします。

## 脇 稔

わき・みのる

物質分子科学研究領域  
電子構造研究部門 特任研究員

富山大学薬学部を卒業して薬剤師免許および同大学大学院にて博士号を取得、その後、豊田中央研究所での客員研究員を経て、2012年の4月より、分子研の唯研究室に特任研究員として着任いたしました。これまでに学んできた分子認識化学や材料化学の知見を活かした新規固体触媒系の構築を目指し、研究を推進していきたいと思っております。

どうぞよろしくお願いいたします。

## 櫻井 理 恵

さくらい・りえ

分子スケールナノサイエンスセンター  
ナノ分子科学研究部門 研究員

2012年3月に北海道大学理学院化学専攻錯体化学研究室で学位取得後、2012年4月1日より分子研永田グループの博士研究員として着任いたしました。学生時代も金属錯体の研究をして参りましたが、現在は合成中心の研究となっており、新しい刺激を受けています。どうぞよろしくお願いいたします。

## 永長 誠

ながおさ・まこと

生命・錯体分子科学研究領域  
錯体触媒研究部門 研究員

京都大学で学位を取得し、今年4月から分子研魚住Gの研究員となりました。金属触媒を用いた不斉反応の開発を主なテーマとして研究を行っています。

まだまだ未熟者ではありますが、よろしくお願いいたします。

## 三浦 崇宏

みうら・たかひろ

分子スケールナノサイエンスセンター  
ナノ分子科学研究部門 技術支援員



今年3月まで総研大の大学院生として分子研に通っていましたが、4月より技術支援員という形で勤務させていただくことになりました。岡崎の暑い夏に負けず頑張っていきたいと思っておりますのでよろしくお願いいたします。

## 稲垣 恵子

いながき・けいこ

理論・計算分子科学研究領域  
計算分子科学研究部門 事務支援員



4月より計算分子科学研究拠点の事務支援員としてお世話になっております。子育て真っ最中ですが、「仕事と育児の両立」を目指し、日々奮闘中です。前職とは全く違う仕事に戸惑うこともあります。周りの方々の親切なサポートにより徐々に仕事にも慣れてきました。

少しでもお役に立てるよう努力していきたいと思っておりますので、よろしくお願いいたします。

## 山崎 由実

やまさき・ゆみ

光分子科学研究領域  
光分子科学第一研究部門 事務支援員



平成24年4月16日より総合研究大学院大学・物理科学研究科長、岡本裕巳先生のもと事務支援員としてお世話になっております。分子研での仕事は約5年ぶり、岡本Gメンバーや顔なじみの方々からの温かいサポートに感謝しながら、初めての職務に不安と緊張、そして新鮮な気持ちで取り組んでおります。微力ながらも「広い視野を備えた物理科学研究者の育成」のお手伝いができればと思います。

今後ともよろしくお願いいたします。

## CHALUPSKY, Jakub

理論・計算分子科学研究領域  
理論分子科学第一研究部門 IMSフェロー



In June of 2011 I received my Ph.D. at Charles University in Prague under Dr. Zdeněk Havlas, studying electronic states and their properties of organic and bioinorganic molecules. From April 2012, I work as a postdoc in group of Professor Yanai, concentrating on applications of DMRG calculations and program development.

## 森 義治

もり・よしはる

理論・計算分子科学研究領域  
計算分子科学研究部門 特任助教



名古屋大学にて学位を取得後、日本学術振興会特別研究員を経て2012年5月1日付けで分子研奥村グループの特任助教に着任致しました。これまで生体分子系の分子シミュレーションを中心に研究を進めて参りました。

分子科学研究所の充実した設備を生かし、分子シミュレーションによる生体分子機能の解明に貢献したいと思います。

どうぞよろしくお願いいたします。

## 藤原 正規

ふじわら・まさのり

光分子科学研究領域  
光分子科学第一研究部門 特任助教



2012年に東京工業大学で学位取得後、5月1日に分子研光分子科学研究領域の特任助教として着任しました。これまでは温度数Kで一個のタンパク質の発光を分光し、分子集団では見えないタンパク質のダイナミクスを観測してきました。分子研では逆に、物質の物性や反応性を理解する上で重要な低分子を対象に、光による分子集団の運動制御に取り組みたいと考えています。

よろしくお願いいたします。

**浜坂 剛**

はまさか・ごう

生命・錯体分子科学研究領域  
錯体触媒研究部門 助教

2008年4月より生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門の博士研究員としてお世話になり、2012年5月1日付けで同部門の助教に着任いたしました。分子研での研究生活は5年目になります。

新人と呼べるか否かわかりませんが、新人のつもりで、気を引き締め、さらに研究に進進していきたいと考えております。よろしくお願い致します。

**金子 靖**

かねこ・やすし

分子スケールナノサイエンスセンター  
ナノプラット室 特任専門員

これまで名古屋大学、名古屋工業大学で産学官連携活動に携わり、この7月から、分子研が代表機関を務める文部科学省事業の分子・物質合成プラットフォームの運営マネージャーを務めることになりました。

この事業では外部の方に研究設備をご利用いただくため、所内の先生方や職員の方にこれからお世話になると思いますが、今後ともよろしくお願い致します。

**早出 彩**

そうで・あや

物質分子科学研究領域  
電子構造研究部門 特任研究員

カナダのuniversity of British Columbiaで学位取得、ドイツのRuhr Universität BochumでPost-doctoral fellowを経て、2012年の5月に分子研に異動して参りました。燃料電池に使われる白金触媒の動きをX線で精査し、少しでも自然エネルギー開発に貢献できればと思っております。よろしくお願い致します。

**WANG, Heng**物質分子科学研究領域  
電子構造研究部門 特任研究員

Hello! I will introduce myself briefly.

I got my master degree from Zhejiang University, which located in the garden city of Hangzhou, about 200 km south of Shanghai. In 2008, the Global-COE program in Chemistry at Nagoya University launched a doctoral program for international students. This program provides intensive opportunities of study and research. So I joined Awaga Lab at Nagoya University to study the new rechargeable lithium batteries. I obtained my doctoral degree at physical chemistry in 2011. After that I became a postdoctoral fellow at Department of Chemistry, Nagoya University.

From this May, I joined Yokoyama Lab to study the new fuel cells. I am very pleased and honored to join the IMS, where not only provide me with a growth exercise, but also give me the chance to meet more new colleagues, new friends.

**安井 裕子**

やすい・ゆうこ

物質分子科学研究領域  
電子構造研究部門 事務支援員

2012年6月1日より、物質分子科学研究領域電子構造部門の横山利彦先生の下で、総研大担当の事務支援員としてお世話になっております。分子研にて勤めさせていただくことを大変光栄に感じております。

至らぬ点が多々あるかと存じますが、精一杯努めてまいりますので、何卒よろしくお願い申し上げます。



共同利用研究ハイライト

# コヒーレントシンクロトロン放射光の テラヘルツ電場検出

片山 郁文 横浜国立大学工学研究院 准教授、 芦田 昌明 大阪大学大学院基礎工学研究科 教授

テラヘルツ（遠赤外）領域には、強誘電体のソフトモードや磁性体のマグノン、超伝導ギャップなど、物性を特徴づける素励起が多数存在している。また、たんぱく質など巨大分子の振動モードや水和水の応答が観測されるなど生命活動とも密接にかかわっており、生物・化学の分野でも重要な周波数領域である。近年その新しい分光法として、超短パルスレーザーを用いてコヒーレントなテラヘルツ波を簡便に発生・検出する手法が開発され、盛んに研究が行われるようになった<sup>[1]</sup>。この手法は電磁波の強度を測定する場合とは異なり、電磁波の強度と位相が同時に測定できるため、物質の屈折率の実部と虚部を一挙に決めることができるという利点がある。最近では6 fs以下という非常に短いパルス幅のレーザーを用いることで、このような時間領域の分光が170 THzという近赤外領域までも可能であることが示されている<sup>[2,3]</sup>。また、これらのテラヘルツ波はパルス状の電磁波であることから、光励起後の物質の変化を時間分解しながら観測する<sup>[4]</sup>、高い電場強度を利用して非線形性を探るなど<sup>[5]</sup>、これまでの光源では行うことが難しかった分光が可能となってきた。例えば我々のグループでは、チタン酸ストロンチウムという誘電体で強誘電相転移にかかわるソフトモードを高強度のテラヘルツ波で励起すると、その振動が強誘電相転移に匹敵する大振幅にまで励振され吸収スペクトルが高周波シフトすることを見出した<sup>[5]</sup>。これは高強度のテラヘルツ波によって物質に大きな変化を引き

起こすことが可能であることを意味しており、新しい物性発現、反応制御への応用などが期待できることを示している。

そのような中でシンクロトロンペースの発生手法は高強度化が期待できる光源の一つとして注目される。特に分子研のUVSORで行われているレーザーバンチスライシング（LBS）法は、レーザーパルス波形整形して狭帯域・

高強度テラヘルツ波を発生することができ<sup>[6]</sup>、X線から赤外まで非常に広いスペクトルを持った放射光と組み合わせた実験も可能であるなど、興味深い特性を備えている。しかしながら、これまでの研究はポロメータなどの強度検出器を用いたものがほとんどであり、コヒーレントな電磁波を発生させることで電場検出が可能になるという利点を活かしきれていなかった。そこで本

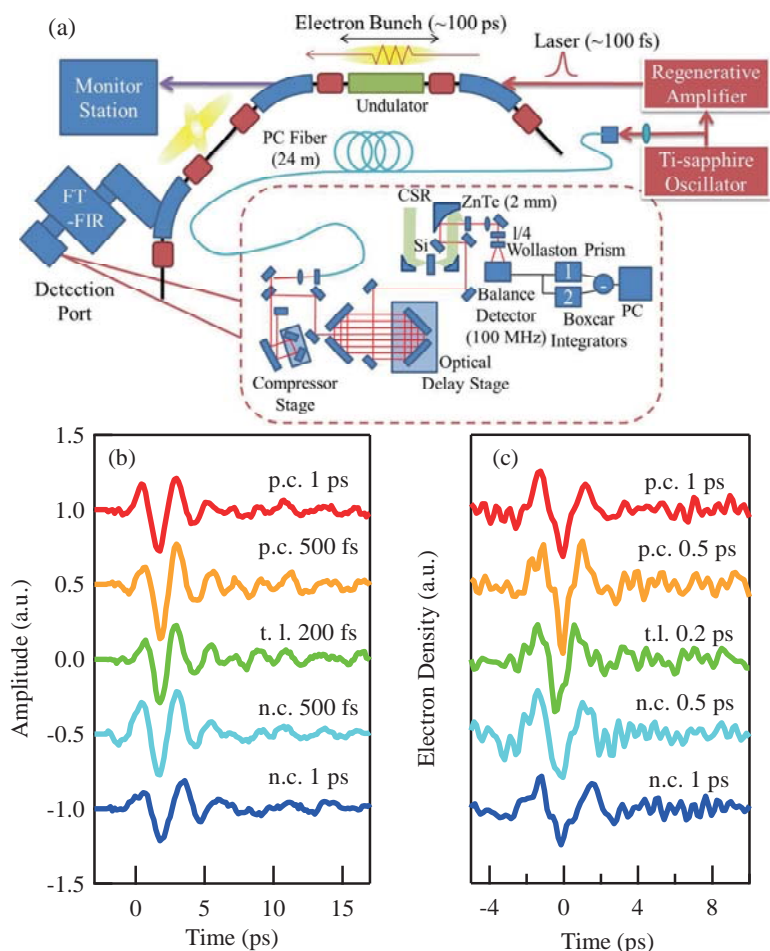


図 (a)CSRの電場検出実験装置図。(b)得られた電場波形とそのパルス幅に対する依存性。正チャープ(p.c.)、負チャープ(n.c.)、及び最短パルス(t.l.)の場合の結果を示した。(c)電場波形から逆算した電子バンチの密度分布。

研究では、超短パルスレーザーをベースにした電場検出手法をコヒーレントシンクロトロン放射光 (CSR) に適用し、その電場検出を行うことを目的とした<sup>[7]</sup>。

実験ではLBS法に用いている再生増幅レーザーのシード光を電場検出のプロブとして用いた (図(a)参照)。これはシード光が高い安定性を持っており、ファイバを用いて伝送が可能であること、また適切に分散補償を行うと短いパルス幅を実現できることなどからである。CSRとプローブ光を電気光学結晶 (ZnTe) に集光し、CSR電場によって誘起された屈折率変化をプローブ光の偏光回転として検出した。

図(b)は測定で得られた電場波形である。これをフーリエ変換して得たスペクトルは、ポロメータを用いて遠赤外領域のフーリエ変換干渉分光計 (FT-FIR) を用いて測定したスペクトルと良い一

致を示した。このことはCSRが実際にコヒーレントな光源であり、同じ波形の電磁波が再現性良く繰り返し発生されていることを示している。

また、CSRの電場波形はバンチの電子密度分布を反映している。図(c)はこのことを利用してCSRの電場波形に透過光学系の補正を行った上で、電子バンチの形状を逆算したものがある。図をみると、LBS法によって、電子バンチにディップができていたことがわかる。また、そのディップの幅は励起レーザーのパルス幅を広げるとそれに合わせて広がることもわかった。

このように、CSRの電場波形が検出できるということは、この手法が電子バンチにおけるピコ秒オーダーの微細構造をモニターする新しい手法として応用できるということを示している。さらに、今後CSRの強い電場強度を利用して、非線形のテラヘルツ分光法

や、テラヘルツポンプ、放射光プローブ、放射光ポンプ、テラヘルツプローブなどの新しい応用を試みる際にも電場検出法は重要となるであろう。また、今回用いたファイバによる短パルスレーザーの伝送手法は、他のポートで超短パルス光を用いた実験を行いたい場合にも非常に有用である。今後はこのように放射光と同期したレーザー光源が多数のポートで利用され、レーザーと放射光を組み合わせたより高度な超高速分光実験などに活用されることを期待している。

本研究は分子研UVSORの阿達正浩氏、木村真一准教授、加藤政博教授、KEKの島田美帆氏、京都大学の全炳俊氏、名古屋大学の山本尚人氏、保坂将人准教授らと共同で行いました。ここに感謝の意を表します。

## 参考文献

- [1] M. Tonouchi, *Nature Photon.* **1** (2007) 97.
- [2] I. Katayama et al., *Appl. Phys. Lett.* **97** (2010) 021105.
- [3] E. Matsubara et al., *Appl. Phys. Lett.* **101** (2012) 011105.
- [4] R. Huber et al., *Nature*, **414** (2001) 286.
- [5] I. Katayama et al., *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 097401.
- [6] S. Bielawski et al., *Nature Phys.* **4** (2008) 390.
- [7] I. Katayama et al., *Appl. Phys. Lett.* **100** (2012) 111112.



片山 郁文 (かたやま・いくふみ)  
兵庫県生まれ。2006年京都大学大学院理学研究科博士後期課程修了。博士 (理学)。  
大阪大学基礎工学研究科21世紀COE特任助教、横浜国立大学学際プロジェクト研究センター特任教員 (助教) を経て、2012年から横浜国立大学工学研究科准教授。専門は光物性物理学。超短パルスレーザーを用いた新しい分光法の開発や、超高速ダイナミクスの研究を行っている。最近はさまざまな物質のテラヘルツ応答や、コヒーレントフォノンに興味を持って研究を進めている。



芦田 昌明 (あしだ・まさあき)  
京都市生まれ。1991年京都大学大学院理学研究科博士後期課程中退。理学博士 (京都大学)。  
京都大学理学部助手、科学技術振興事業団五神協同励起プロジェクト研究員、通信総合研究所関西先端研究センター研究員、2003年大阪大学大学院基礎工学研究科助教授 (2007年より准教授) を経て、2010年から大阪大学大学院基礎工学研究科教授。専門は光物性物理学。ナノ構造物質や強相関電子系に興味を持って研究を進めている。広帯域・高強度テラヘルツ時間領域分光法の開発とその応用に力を入れている。

# 希土類発光ソフトマテリアルを用いた 可視域カラーチューニング材料の開発

西山 桂 島根大学教育学部 准教授

## 1. はじめに

私たちは、「紫外線で励起すると、得たい波長でカラフルに発光するソフトマテリアルの開発」を目指している。具体的には、希土類-有機錯体をオルガノゲル中に高濃度で分散させることにより実現する。今回の材料合成過程では、有機分子1個1個が自己組織化によりゲルを形成し、やがて錯体を巻き込んで「発光カラーチューニング」という機能を獲得している。本研究は、このような化学プロセスに関与する分子の統計力学や量子化学を整理して「ものづくり」に役立てようとしており、分子科学基礎論と深く結びついたテーマでもある。

## 2. オルガノゲルを活用した発光ソフトマテリアル

### 2-1. 発光体宿主材料としてのオルガノゲル

まず我々は、希土類錯体(図1)を合成した。紫外線で有機配位子を励起すると、色純度の高い希土類由来の発光線を得た。希土類を、既中使用したTb, Euに加え、Ce, Dy, Smなどに変化させることによって、青色~緑色~橙色

~赤色と可視光全域にわたる発光線が得られると期待される。

さて、希土類錯体を発光デバイスとして用いる場合、その発光強度を高めるためには、「発光体を高濃度で媒体中に分散させる」ことが重要である。しかし従来は、分散媒体として溶液やシリカガラスを使用したので、次の問題点があった。

#### ●希土類錯体と分散媒体との相互作用が強すぎる

溶液中に分散させた場合、溶媒分子が錯体に影響を与える。結果として発光強度が弱くなるとともに、発光挙動の予測が困難。

#### ●ガラス生成時の酸・塩基反応による発光体の破壊

錯体はケイ素材料とともに、強酸や強塩基を使ってガラス化させるので、反応中に容易に破壊される。

そこで本研究では、以下の解決方法を見出した。

#### (1) 分散媒体として、オルガノゲルを使用(図2)

錯体を高濃度で配列でき、しかも成

型が容易なソフトマテリアル分散媒体を使用。このゲルは、小さな有機分子が有機溶媒中で自己組織化した材料である。

#### (2) 発光体の有機配位子の最適化

錯体をゲル中に配列させた場合でも、有機配位子が効率的に紫外励起光を集光できるアンテナとして働き、かつ、励起状態でゲルと相互作用しないように設計。

#### (3) 発光体と分散媒体との間の相互作用を極小化

色純度の高い、シャープな色合いの発光体を開発。結果として、従来の無機材料では対応していない発光カラーチューニングを実現。

以上の手法によって、従来の技術的課題を解決できる。しかも、希土類錯体をオルガノゲルの中に実装するとき、自己組織化によって自発的にゲル化するので、穏和な条件下で合成プロセスが制御できることも特徴である。

#### 2-2. 発光カラーチューニング

図3に、希土類錯体をオルガノゲル中に実装した様子を示す。*m*-キシレン

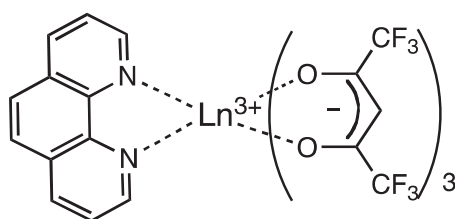


図1 希土類錯体発光体。Ln=Tb, Eu など。

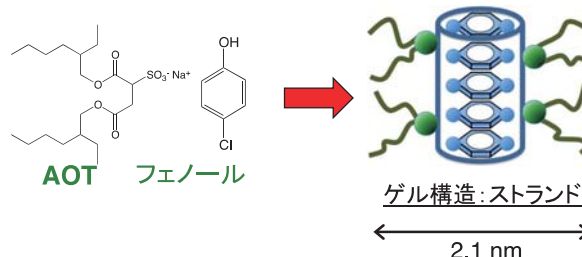


図2 オルガノゲル構造の模式図。実際には、ストランド構造がさらに集合したファイバー束構造(直径: 数100 nm)を用いる。



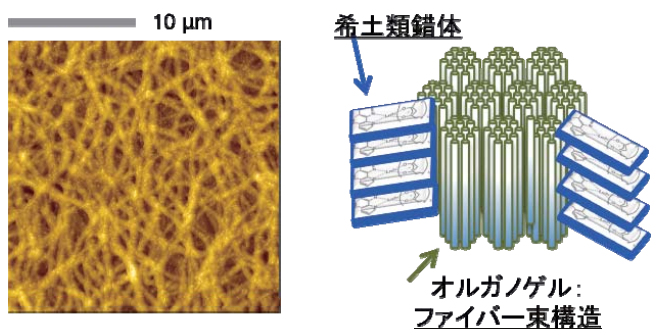


図3 (左) オルガノゲルのSPM像。(右) ファイバー束構造に、発光体を実装する模式図。ゲル構造の外側に実装されている。

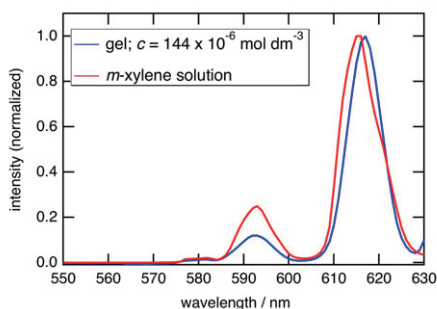


図4 (左) 希土類錯体をオルガノゲル中に実装して得られた、発光カラーチューニング。(右) 発光スペクトル。

を溶媒とするオルガノゲルに、Tb, Eu 錯体を埋め込んだところ、SPM像で見えているファイバー束構造の最外部に配列していることが分かった。しかもゲル中では、従来の溶液中と比べて発光強度が10倍以上強くなることも明らかになった。その理由は、ゲルは発光体を高濃度で分散できるからである。

一方、図4にTb(緑色)とEu(橙色)発光体を混合して、中間色(黄色)を得たカラーチューニングの様子を示す。発光スペクトルを解析した結果、ゲル中に実装された希土類錯体は、励起状態でエキシマーを形成するなどの相互作用をせず、それぞれ独立して発光することが分かった。すなわち、錯体とゲルとの間の相互作用を極小化しているので、色純度の高い素子を活用したカラーチューニングに最適であることという特徴を持つ。またゲル中では、溶液中と比べ、発光スペクトルの半値幅

が10%以上狭く、色純度が高い。このことも、オルガノゲルを分散媒体として使用する利点である。今後は、ゲル中での発光メカニズムの詳細を明らかにするとともに、可視域フルカラーチューニングの実現を目指した研究を展開したい。

### 3. 分子研と共同利用研究を行って

以上は、嘉治寿彦助教、平本昌宏教授と行った分子研協力研究、及びナノネット事業の成果の一部である。また筆者は平成23年度までの協力研究で、吉田紀生助教(現・九州大学准教授)、平田文男教授(現・立命館大学)とともに、統計力学-量子化学(RISM-SCF)理論を用いた発光スペクトル予測を実施しており、本研究の立案に活かされている。さらに平成24年6月には、アジア連携分子研研究会「溶液・ソフトマターの新局面：実験及び理論研究手

法の開拓と新規物性探索への展開」を開催した。一方、筆者が主宰する研究室の学生は将来、小中学校の理科教師を目指しており、学生に分子研での最先端研究を垣間見させる教育効果も計り知れない。以上のように、私も分子研の様々な共同利用制度の恩恵を十二分に受けており、心から御礼申し上げたい。また本成果は、当研究室の原田聖特任講師との共同研究によるものである。



にしやま・かつら  
大阪大学大学院基礎工学研究科退学後、平成8年阪大VBL助手、平成9年博士(理学)取得、平成16年島根大学教育学部講師、平成21年同准教授(現在に至る)。この間、分子研客員准教授(平成22年)。現在の研究テーマは、発光希土類ソフトマテリアルの新規合成、希土類ナノ構造体のモルフロジー制御、及び統計力学(RISM)理論を用いたソフトマターの物性解析。

### 参考文献

- [1] K. Nishiyama, T. Hanamoto, H. Shigematsu, K. Kitada, K. Iketaki, T. Kaji and M. Hiramoto, *Chem. Lett.* **39**, (2010) pp. 974-975.
- [2] K. Nishiyama, K. Takata, K. Watanabe and H. Shigematsu, *Chem. Phys. Lett.*, **529**, (2012) pp. 39-44.

# 近接場光照射によるナノスケールでのポリジアセチレン薄膜の生成

坂本 章 埼玉大学大学院理工学研究科物質科学部門 准教授

様々なタイプのジアセチレン誘導体 ( $R_1-C\equiv C-C\equiv C-R_2$ ) は、紫外光照射や $\gamma$ 線照射により光重合反応を起こし、共役 $\pi$ 電子系をもつ高分子 (ポリジアセチレン) を形成する (図1)。ポリジアセチレン (PDA) は、導電性や非線形光学効果を有するため、有機電子デバイスや非線形光学デバイスなどへの応用が提案されている。したがって、ポリジアセチレンへの光重合反応をナノスケールで実行・制御できれば、ナノスケールでの電子デバイスや光導波路の作製に応用できる可能性がある。

岡本グループが装置開発とそれを用いた先端的な研究を行っている近接場光学顕微鏡 (SNOM) は、光の回折限界を超える空間分解能で試料の光学的なイメージを測定しながら、同時に試料表面の形状像についての情報も得られるユニークな装置である。また、近接場光を用いることにより、光の回折限界を超える空間分解、すなわちナノスケールで光加工 (光重合反応やCVD、光化学エッチングなど) を実行することも可能となる。

我々は、長鎖付きジアセチレン化合物のLB膜に対してSNOMを用いて近接場光を照射することにより、ナノスケールで光重合反応を誘起することを計画した。そして、近接場光ファイバースコープの開口からフェムト秒近赤外パルス光を照射しながら、プローブを単量体LB膜すなわち長鎖ジアセチレン誘導体 (10,12-ペンタコサジン酸カドミウム塩、CdPA) のLB膜表面上を走査すると、二光子誘起光重合反応が進行することを見出した (図2、J.

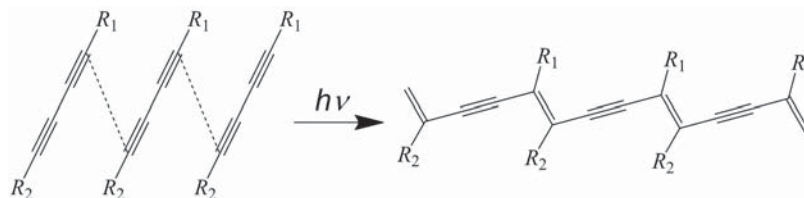


図1 ジアセチレン誘導体の光重合反応 (模式図)

*Phys. Chem. C*, **115**, 6190 (2011)). 本稿では、主にこの研究成果について述べる。CdPAの単量体LB膜を石英基板上に作成し、アニーリング処理を施したものを試料とした。開口型SNOMを用いて、光ファイバースコープの開口部から単量体LB膜にフェムト秒近赤外パルス光を照射し、二光子誘起光重合反応を励起した。

アニーリング処理を行ったCdPA LB膜の形状像を図3(a)に示す。高いドメインと低いドメインが観測され、その高低差は約5 nm (CdPA2層分に対応)であった。CdPA LB膜に、780 nmのフェムト秒パルス光を、近接場光ファイバースコープの開口から照射しながら試料を走査して得た発光像を図3(b)に示す。発光は、CdPA LB膜が存在する高いドメインからのみ観測された。

その励起光強度依存性から、発光は近赤外パルスの二光子によって誘起されたものであることがわかった。また、観測された発光スペクトル (図4(a)) は、過去に報告されたPDA単分子膜の蛍光スペク

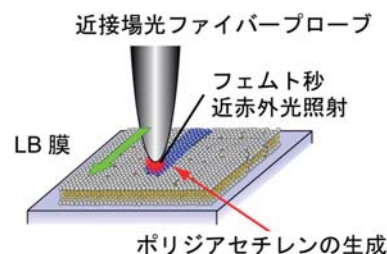


図2 フェムト秒近赤外パルス光の近接場照射によるポリジアセチレンの生成 (模式図)

トルと良く一致する。

次に、二光子誘起発光が観測された膜について633 nm (CW) 励起で測定した発光スペクトルを図4(b)に示す。~640 nmに極大をもつブロードな発光 (PDA膜からの蛍光) に加え、青矢印でマークしたシャープな発光ピーク (696 nmと728 nm) が観測された。これらの励起光からの波数シフトは、そ

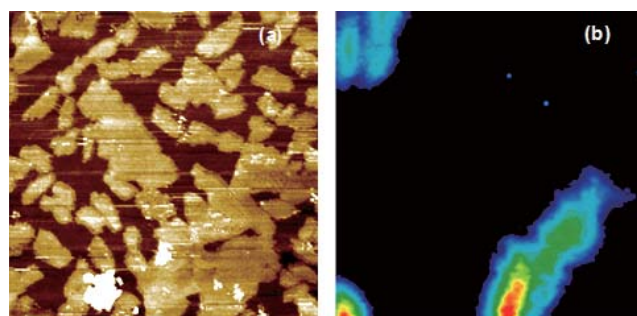


図3 CdPA LB膜の(a)形状像と(b)二光子誘起発光像 (780 nm励起) [10  $\mu$ m  $\times$  10  $\mu$ m]

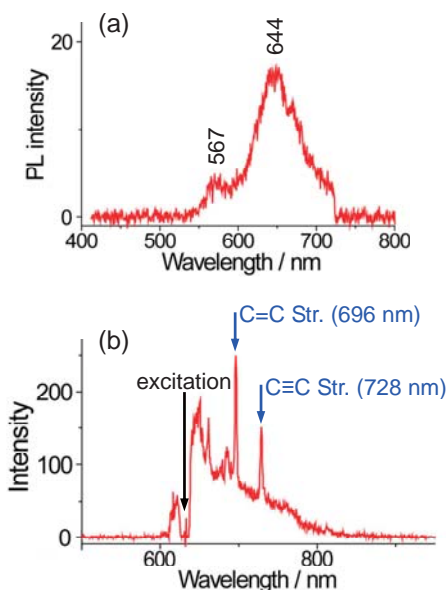


図4 PDA膜の(a)二光子誘起発光スペクトル(780 nm励起)と(b)発光スペクトル(633 nm励起)

それぞれ  $1430\text{ cm}^{-1}$  と  $2060\text{ cm}^{-1}$  であり、PDA骨格のC=C伸縮振動とC≡C伸縮振動によるラマン散乱に帰属される。PDAに特徴的な蛍光とラマンバンドが観測されたことから、CdPA LB膜にフェムト秒近赤外パルス光を近接場光として照射することによって、PDA膜を生

成することができたといえる。

重合に関与する光子の数を見積もったところ、Cd PAからPDAへの重合は、近赤外光による二光子励起を経て引き起されていること(すなわち二光子重合であること)がわかった。また、CW近赤外光を近接場照射する実験ではPDAは生成しなかった。したがって、CdPA LB膜のPDA膜への重合は、近赤外光照射による熱によって引き起されたのではない。

本稿で紹介した研究成果は、単量体LB膜にフェムト秒近赤外パルス光を近接場照射することで、任意の位置にPDA膜をナノスケールで生成できることを意味する。現在は、この二光子誘起光重合反応を利用して、ナノスケール光導波路の作製を目指した協力研究に取り組んでいる。

最後に、分子科学研究所の共同利用(協力研究)について少しだけ述べる。私のグループの場合、教員は私1人なので、研究室の大学院生は、普段の研究活動の中でほとんど私以外の研

究者と議論する機会がない。したがって、協力研究に対しては、先端的な装置を使わせていただけるという研究的な面からも感謝しているが、大学院生が分子研の先生方やポスドクの方々と接し、研究について議論する機会を与えていただけるという教育的な面からも、とても感謝している。



さかもと・あきら

1994年 東京大学大学院理学系研究科博士課程化学専攻修了、博士(理学)。東京大学大学院理学系研究科 助手、埼玉大学理学部 助手、講師、助教授を経て、2006年より現職。専門は、物理化学、分子分光学、構造化学。最近、年に1回くらい、研究室のメンバー全員で浦和レッズ観戦[@埼玉スタジアム2002]に行く。

## 共同利用研究ハイライト

# 直鎖ポリスチレン - 金属ナノ粒子複合体の簡便な調製法

大高 敦 大阪工業大学工学部応用化学科 講師

### 1. はじめに

これまでに金属触媒を用いた数多くの触媒反応系の開発により、多種多様な化合物を狙い通りに合成することが可能となっている。これらの反応は、反応系が均一系となる有機溶媒中で行うのが一般的であり、多くの有用な反応がそのような条件で開発されてきた。しかし近年、グリーンケミストリーの観点から可燃性や揮発性が有り人体にも悪影響を及ぼす有機溶媒に代えて、水を媒体とする反応が注目されている<sup>[1]</sup>。また触媒反応に

用いる金属は枯渇性資源であるため高価なものも多く、さらに生成物への金属種の混入は特に医薬品合成の分野で問題であるため、金属触媒の回収および再利用も重要な検討課題とされている。

1980年代初頭に金属ナノ粒子の有用性が明らかになって以来、金属ナノ粒子の実用化も加速度的に進んでいる。このような金属ナノ粒子は、原子、分子およびバルク材料とは異なる機能発現の最小単位をもっている点が強長であり、最大のセールスポイントといえることができる。

しかし、ナノ粒子の状態はもともと準安定相であり、自発的にはナノ粒子の凝集により安定化に向かう。したがって、何らかの自由エネルギーバリアを用意しなければ、たちまちのうちに凝集が進み、長期間継続して金属ナノ粒子を利用することはできない。金属ナノ粒子の安定化を目指してすでに多くの手法が開発されているが、その際、ナノ粒子の機能を最大限利用するためには、トポロジー(粒子形と粒子径)を均一に制御することが必要であり、その実現には安定化に



用いる材料や物質の構造に規則性を備えていることがきわめて重要である。これまでに dendrimer、界面活性剤、ミセル、マイクロエマルジョン、および固相担体などで安定化された金属ナノ粒子が報告されており、これらの安定化剤はそれぞれの次元で規則性をもっているものの、安定化剤の合成や触媒の調製に手間がかかる。さらに、これらの安定化した金属ナノ粒子を触媒として利用した場合、担体からの金属ナノ粒子の脱落および Ostwald Ripening による粒子径の増加により、多くの場合、触媒の再利用に伴って反応活性が低下する。

我々の研究グループでは、触媒として再利用可能な金属ナノ粒子の開発とともに、それらの簡便な調製法についても種々検討を行っている。研究を遂行する上で、調製した金属ナノ粒子の粒子径を確認することは不可欠であり、我々は分子科学研究所の透過型電子顕微鏡 (JEM 2100F) を使わせていただき、粒子径の確認を行っている。本稿では、その成果の一部を紹介させていただきます。

## 2. 直鎖ポリスチレン-PdO ナノ粒子複合体の調製

高分子合成における分散重合法<sup>[2]</sup>や Pd ナノ粒子が疎水性粒子表面に沈着しやすいこと<sup>[3]</sup>に着目し、疎水性高分子存在下、水溶性の前駆体から金属ナノ粒子を発生させると、金属ナノ粒子がポリマーマトリクス内に瞬時に保持さ

れ、粒径の揃った高分子-金属ナノ粒子複合体が得られると考えた。また芳香環のπ電子雲によって金属ナノ粒子が安定化できること<sup>[4]</sup>、種々の分子量の単分散な直鎖ポリスチレンが入手可能であることに加え、合成も容易であることから、安定化剤として直鎖ポリスチレンを選んだ。さらに疎水性のポリスチレンは水中では凝縮状態をとるため、水中での反応においては金属ナノ粒子の脱落および粒子径の増加が抑えられるとともに、架橋されていないため疎水性基質のポリマーマトリクス内への浸入が容易であると期待できる。

種々検討を行った結果、酢酸パラジウムおよび直鎖ポリスチレン ( $M_n = 6.0 \times 10^3$ ) を  $1.5 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3}$  の炭酸カリウム水溶液中に添加し、 $90 \text{ }^\circ\text{C}$  で 1 h 攪拌するのみで、直鎖ポリスチレン上に固定化されたパラジウムナノ粒子の調製に成功した<sup>[5]</sup>。ICP-AES 測定により、ポリスチレンに対する Pd の固定量を測定したところ、 $2.5 \text{ mmol} \cdot \text{g}^{-1}$  であることが分かった。また XRD 測定によりナノ粒子の組成が PdO であることを確認し、さらに TEM 観察より、粒子径が  $2.3 \pm 0.3 \text{ nm}$  であることを確認した。

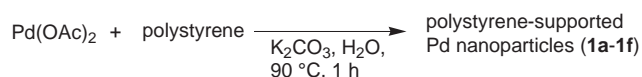
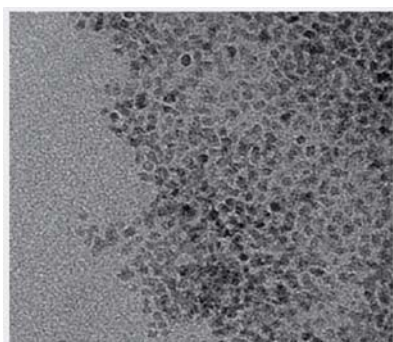
ポリスチレンの分子量や架橋部位が PdO ナノ粒子の固定化へどのような影響を及ぼすのかについて検討を行ったところ、直鎖ポリスチレンの分子量の増大に伴ってパラジウム固定量は減少し、架橋ポリスチレンを用いると、パラジウム

固定量はさらに低下した。一方、PdO ナノ粒子の粒子径はポリスチレンの分子量や架橋部分の存在に関係なく、ほぼ同様の値であることが TEM 観察により明らかとなった。

一般に高分子に安定化された金属ナノ粒子の調製には、①高分子の合成、②配位子部位の導入、③金属種を高分子に配位させた後還元、などの操作が必要であるが、本手法はこれらの操作がすべて不要である非常に簡便な調製法といえることができる。

## 3. 触媒反応への応用

上記のように直鎖ポリスチレン存在下、酢酸パラジウムを水中で熱分解するだけで、直鎖ポリスチレン-PdO ナノ粒子複合体 (PS-PdONPs) が容易に調製できることが明らかとなったので、次に調製した PS-PdONPs の触媒としての有用性について検討を行った。PS-PdONPs (Pd 量:  $1.0 \text{ mol}\%$ ) 存在下、プロモベンゼンと *p*-メチルフェニルボロン酸との鈴木カップリング反応を水酸化カリウム水溶液中  $80 \text{ }^\circ\text{C}$  で行ったところ、わずか 1 h 後にカップリング生成物が定量的に得られた。また反応終了後に反応溶液を熱するだけで触媒は回収でき、さらにカップリング生成物も、ろ液を冷却すると結晶として析出してくるので、容易に単離できる。つまり、この反応系は反応および処理に全く有機溶媒を用いない環境負荷が小さい有機反応である。また、



polystyrene	PS-PdNPs	loading of Pd <sup>a</sup> /mmol·g <sup>-1</sup>	size of Pd <sup>b</sup> /nm
linear ( $M_n = 6.0 \times 10^3$ )	<b>1a</b>	2.5	$2.3 \pm 0.3$
linear ( $M_n = 1.8 \times 10^4$ )	<b>1b</b>	1.8	$2.2 \pm 0.3$
linear ( $M_n = 3.8 \times 10^4$ )	<b>1c</b>	1.5	$2.2 \pm 0.3$
linear ( $M_n = 9.6 \times 10^4$ )	<b>1d</b>	1.0	$2.1 \pm 0.2$
linear ( $M_n = 4.3 \times 10^5$ )	<b>1e</b>	0.4	$2.2 \pm 0.2$
cross-linked (2% DVB)	<b>1f</b>	0.3	$2.4 \pm 0.2$

図 直鎖ポリスチレン-PdO ナノ粒子複合体の TEM 画像および鎖長・架橋の影響

反応溶液中へのPdの溶出が起こっていないこと、およびPdが定量的に回収できていることをICP-AESにより確認した。さらに、触媒の再利用性についても検討を行ったところ、10回の反応まで活性の低下は全く認められなかった。回収した触媒のTEM観察を行ったところ、反応前と比べ粒子径の変化も見られなかった。以上のことから、簡便な方法により調製した直鎖ポリスチレン-PdOナノ粒子複合体は、水中での鈴木カップリング反応に高い触媒活性を示し、さらに再利用性も高いことが示唆された。

なお、PS-PdONPsは鈴木カップリング反応のみならず、Heck反応、菌頭カップリング反応、ベンゾフラン合成においても高い触媒活性と再利用性を有することを確認している<sup>[6]-[8]</sup>。

#### 4. ポリスチレン-Ptナノ粒子複合体の調製と触媒活性評価

直鎖ポリスチレン存在下、水酸化カリウム水溶液中、フェニルボロン酸を用いて塩化白金酸カリウムを還元すると、直鎖ポリスチレン-Ptナノ粒子複合体(PS-PtNPs)が得られる<sup>[9]</sup>。得られた固体のXRDパターンは、ポリスチレンおよびPtによる回折パターンと一致した。またTEM観察やICP-AES測定により、粒子径が $2.3 \pm 0.4$  nm

であること、およびPt含有量が $2.7 \text{ mmol} \cdot \text{g}^{-1}$ であることを確認した。さらにXPS測定により、得られた固体中にはホウ素化合物が含まれていないことも確認した。このように上記の手法は他の金属種においても有用であるといえる。

調製したPS-PtNPsの触媒としての有用性を確認するため、PS-PtNPs (Pt量: 2.0 mol%) 存在下、4-メチルベンジルアルコールを基質とする水中でのアルコール酸化反応を室温、中性条件下で行ったところ、10 h後に生成物である4-メチルベンズアルデヒドと4-メチル安息香酸がそれぞれ80%、16%の収率で得られた。また基質の適応範囲を確認した結果、1級アルコールだけではなく、反応が進行しにくい2級アルコールを用いた場合においても、炭酸ナトリウムを添加し、80 °Cで20 h反応を行うことによって高収率で生成物を得ることができた。さらに基質にベンズインを用い、PS-PtNPsの再利用性について検討を行ったところ、80 °C、20 hという反応条件下で4回再利用を行っても活性の低下は全く確認されず、また回収した触媒のTEM観察においてもPtナノ粒子の凝集は確認されなかった。このことは、PS-PtNPsが水中でのアルコール酸化反応に高い触

媒活性と再利用性を有することを示唆している。

またPS-PtNPsは、水中での2-プロパノールを水素源とする水素移動型還元反応においても高い触媒活性を有し、これまでにオレフィン、ニトロ基およびカルボニル基の還元が可能であることを確認している。

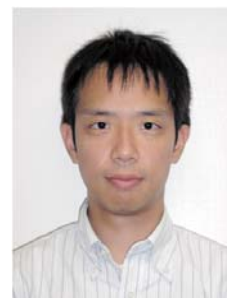
#### 5. おわりに

2-4で示したように、入手(合成)容易な直鎖ポリスチレンは金属ナノ粒子の安定化剤として有用であり、直鎖ポリスチレン-金属ナノ粒子複合体は水溶性の金属前駆体と直鎖ポリスチレンにより容易に調製可能である。また調製した直鎖ポリスチレン-金属ナノ粒子複合体は水中での種々の触媒反応に高い触媒活性と再利用性を有する。今回我々が行った触媒反応系は、これからの合成化学を支える反応系に必要と考えられる、低コスト・高リサイクル性を兼ね備えた非常に利用しやすい系であるといえる。

最後に本研究を遂行するにあたり、設備・機器を使用させて頂くと共に、活発な議論をしていただきました魚住泰広教授ならびに研究室の方々には厚く御礼申し上げます。

#### 参考文献

- [1] Grieco, P. A.; *Organic Synthesis in Water*; Blackie Academic & Professional: London, 1998.
- [2] Song, J.-S.; Tronc, F.; Winnik, M. A. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 6562.
- [3] Mayer, A. B. R.; Mark, J. E. *Angew. Makromol. Chem.* **1999**, *268*, 52.
- [4] Hagio, H.; Sugiura, M.; Kobayashi, S. *Org. Lett.* **2006**, *8*, 375.
- [5] Ohtaka, A.; Teratani, T.; Fujii, R.; Ikeshita, K.; Shimomura, O.; Nomura, R. *Chem. Commun.* **2009**, 7188.
- [6] Ohtaka, A.; Yamaguchi, T.; Teratani, T.; Shimomura, O.; Nomura, R. *Molecules* **2011**, *16*, 9067.
- [7] Teratani, T.; Ohtaka, A.; Kawashima, T.; Shimomura, O.; Nomura, R. *Synlett* **2010**, 2271.
- [8] Ohtaka, A.; Teratani, T.; Fujii, R.; Ikeshita, K.; Kawashima, T.; Tatsumi, K.; Shimomura, O.; Nomura, R. *J. Org. Chem.* **2011**, *76*, 4052.
- [9] Ohtaka, A.; Kono, Y.; Inui, S.; Yamamoto, S.; Ushiyama, T.; Shimomura, O.; Nomura, R. *J. Mol. Catal. A: Chem.* **2012**, *360*, 48.



おおたか・あつし

1975年生。2003年大阪大学大学院工学研究科分子化学専攻博士課程修了、工学博士。国立循環器病センター研究所生体工学部 流動研究員、科学技術振興機構(CREST) 博士研究員を経て、2006年より現職。専門は触媒化学。特に水中での反応に興味を持っている。

超高速分子シミュレータ（通称、スパコン）を5年半ぶりに更新し、今年2月より新しいスパコンの運用を開始した。今回導入したシステムは、高速I/O演算サーバ（SGI製UV1000 576コア、2013年4月からは1024コア）、クラスタ演算サーバ（富士通製Primergy RX300S7 342ノード5472コア）、「京」用開発サーバ（富士通製PRIMEHPC FX10 96ノード1536コア）、外部磁気ディスク（Panasas製ActiveStor 実効容量1PB）からなる。

近年、センターでは、新規マシンの導入により増加する消費電力、電気料金に頭を痛めてきた。世に出てある程度の期間の経過したCPUは単体当たりの演算は遅いが、価格が安く予算の点からは大量のCPUを導入可能であるが、驚くべき消費電力となる。一方、電気消費量を減らそうとすると、ユーザが期待しているような演算性能を持ったマシンを購入することはできない。今回の調達においては、増加分の電気料を勘案し、調達予算からその分を差し引いた金額でマシンを賄うことを考えた。しかも、電気料の増加をできるだ

け減らすために、演算性能あたりの消費発熱量の少ないCPUの導入を目指しCPU開発状況を調査・検討し、当初予定の2011年7月運用開始のスケジュールを半年遅らせることとした。

また、今回の調達の仕様策定委員会では、これまでの共同利用機の利用実績を踏まえ、高価な大規模共有メモリ演算サーバの導入台数を抑え、コストパフォーマンスのより良いクラスタ演算サーバをできるだけ多く導入する方針を取った。この方針の裏にはvSMPというソフトウェアの導入がある。vSMPにより、複数のクラスタ演算サーバをFirmwareレベルでCPUやメモリなどのリソースを一つに束ねて仮想的に一台のサーバとして扱えるようになる。これにより、中規模な共有メモリを必要とするGaussianなどのジョブをクラスタ演算サーバで処理できるようになり、共有メモリ演算サーバの導入台数を抑えることにした。

さらに、分子科学研究所が「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム」の分野2「新物質・エネルギー創成」の研究ネットワーク拠点である「計算物

質科学イニシアティブ」の一翼を担っており、京コンピュータで効率よく動くプログラム作成支援の点から、「京」用開発サーバを全国に先駆けて導入した。

CPU性能が向上すると必然的に生成されるデータ量が増える。そこで、容量が大きいというだけではなく、今回導入した外部磁気ディスクではpNFSというプロトコルを採用し、ネットワーク越しのディスクアクセス速度の大幅な向上を図った。導入当初にはトラブルが発生し、利用者にご迷惑をおかけすることとなったが、現在ではそれも沈静化したようである。

上記以外の新機軸として、GPGPUをクラスタ演算サーバの一部のノードに搭載した。センターのアプリケーションライブラリに登録されている分子動力学計算用アプリケーション（Amber、Namd、Gromacs）が既に対応しており、ご利用いただきたい。

キューイングシステムの運用も変更した。これまでは、システムごとに優先度や最大実行時間の異なる三つのキュークラスを設けていたが、今回か



図1 UV1000



図2 Primergy RX300S7



図3 PRIMEHPC FX10



ら全利用者の優先度を平等にした。また、長時間ジョブを実行したいとの希望に応え、最長1か月のジョブの実行を可能にした。

導入当初は空いているノードも見られたが、月を追うごとに利用率が上がり、CPUの空き待ちとなることも多くなってきた。使いやすく演算性能の高いシステムであり、計算が必要な際には是非ご利用頂きたい。

超高速分子シミュレータの更新を終えたばかりだが、既に来年3月には高

性能分子シミュレータ(通称、汎用コン)も更新され、センターの演算性能は現在の約2倍になる。また、これらのハードの導入以外にも、ライブラリ整備についても準備を進めているところである。

ご存知のように、神戸では世界屈指の超並列マシンが本格稼働を控えている。総演算性能ではそのようなマシンに敵うはずもないが、計算センターでは使いやすい環境の導入・提供、そして円滑かつユーザの求める運用に苦心

に苦心を重ねている。自由な発想でこれらのマシンを十二分に利用し、分子科学分野の新しい研究成果の創出に役立てていただければ幸いである。

施設だより

## ナノテクノロジープラットフォーム事業始動

分子スケールナノサイエンスセンター長 横山 利彦

平成24年7月2日、文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム事業が10年間の予定で始動しました。本事業は、ナノテクノロジーに関する最先端の研究設備とその活用のノウハウを有する機関が緊密に連携して全国的な設備の共用体制を共同で構築し、本事業を通じて産学官の多様な利用者による設備の共同利用を促進し、産業界や研究現場が有する技術的課題の解決へのアプローチを提供するとともに産学官連携や異分野融合を推進するものです。本事業では、ナノテクノロジー関連科学技術において基本となる微細構造解析、微細加工、分子・物質合成の3つの全国規模のプラットフォームが構築され、分子研は、分子・物質合成プラットフォームの代表機関と実施機関を担うことになりました。分子・物質合成プラットフォームの実施機関は11機関で、北から、千歳科学技術大学、東北大学、物質・材料研究機構、信州大学、分子科学研究所、名古屋大学、名古屋工業大学、北陸先端科学技術大学院大学、奈良先端科学技術大学院大学、大阪大学、九州大学で構成されていま

す。本事業は昨年度まで実施されていたナノテクノロジーネットワーク事業の後継プログラムですが、地区ごとに拠点を形成(分子研は中部地区中核機関)していたナノネット事業から大きく様変わりしました。代表機関窓口には、運営マネージャーが設置され、名工大の産学連携准教授であった金子靖氏が特任専門員として着任しました。

ナノテクノロジープラットフォームは全国規模の共同利用組織であり、可能な限り一体化した運用を行う必要があります。利用形態は、支援要素に応じて、共同研究(分子研の共同研究の協力研究に相当)、設備利用(施設利用に相当)、技術代行(依頼分析など)があり、民間に対しては成果非公開利用に加えて成果公開型利用も実施します。なお、成果公開であっても民間からは利用料を徴収することが義務付けられました。分子研での運営母体は、当面、分子スケールナノサイエンスセンターが担い、ナノセンター運営委員会の下部組織としてナノプラットフォーム委員会(委員は担当責任者全員、委員長は横山)を設け、課題申請の審査を行います。

また、ナノセンターのナノネット室はそのままナノプラット室と改名し事務処理を担当することになりました。平成24年度は始まったばかりであり、利用者の利便性(ナノネットからの継続利用を重視)を考慮した暫定的な運用を行い、25年度以降は新たな運営体制を構築する予定です。平成24年度は、民間企業の成果公開型利用も無料です。表には分子研の支援を一覧にまとめました(次ページ参照)。また、詳細は下記URLにアクセスの上ご参照ください。

ナノテクノロジープラットフォーム事業全体 <https://nanonet.nims.go.jp/>  
 プラットフォーム代表機関 <http://nanoims.ims.ac.jp/>  
 分子研支援 <http://nanoims.ims.ac.jp/ims/>

まだ始まったばかりのため体制が全くできていない点で大変ご迷惑をおかけすることかと思いますが、皆様のご協力ご支援をよろしくお願いいたします。

表 ナノプラット事業分子研支援要素と担当者一覧

業務・支援要素		担当責任者		担当者	開始年度
代表機関プラットフォーム 運営業務		運営責任者 横山利彦 運営マネージャー 金子靖		船木弓子 遠山 遊	H24
実施機関運営業務		実施責任者 横山利彦			H24
電子顕微鏡支援	高分解能透過分析 電子顕微鏡	機器センター長 大島康裕		齋藤 碧	H24
	集束イオンビーム加工と走査 電子顕微鏡			中尾 聡	H24
放射光利用支援	軟X線透過顕微鏡	UVSOR施設長 加藤政博	小杉信博	大東琢治	H25
	X線磁気円二色性		横山利彦	中川剛志 高木康多	H25
分子物性支援	X線光電子分光	機器センター長 大島康裕	小杉信博	酒井雅弘	H24
	電子スピン共鳴		中村敏和	古川 貢 藤原基靖	一部 H24 ~
	SQUID磁化測定		大島康裕	藤原基靖	H25
	顕微ラマン分光		山本浩史	山本 薫 賣市幹大	H24
	FT遠赤外分光		山本浩史	山本 薫 賣市幹大	H24
超高磁場NMR支援	920MHz 溶液	機器センター長 大島康裕	加藤晃一	山口拓実 中野路子	H24
	920MHz 固体		西村勝之	中野路子	H24
機能性分子材料素子創製 支援	有機薄膜太陽電池の 作製評価	分子スケールナノサイエンス センター長 横山利彦	平本昌宏	嘉治寿彦	H24
	分子性伝導体・有機 トランジスタ作製評価		山本浩史	山本 薫 賣市幹大	H24
	分子触媒		唯 美津木		H24
	有機合成		櫻井英博		H24
	錯体合成		永田 央		H24
	大規模量子計算		江原正博		H24

## 機器センター 施設利用者控室のご案内

平成23年度までの実験棟改修工事に伴い、明大寺地区における機器センターの設備の部屋割りの見直しが行われ、分光の関係設備を南実験棟1階に集中して配置しました。そこで当センターでは、以前からあった極低温棟の施設利用者控室（2階202室）に加え、今回新たに南実験棟の一室を改修して控室を設けました（1階113室）。測定の合間の休息にご利用ください。個人用のデスクもいくつか用意しておりますのでデータの解析などにもご利用頂けると思います。また、会議用机やホワイトボードも設置しました。当センターの施設利用者の方であれば、どなたでもご利用頂けますが、利用の際は、設備担当者、あるいは事務室（南実験棟1階111室）まで声をかけてください。

お気軽に、ご利用くださいませ。



## 共同利用・共同研究に関わる各種お知らせ

## 運営会議よりお知らせ

分子科学研究所は広く分子科学分野コミュニティに開かれた運営を行うために、所内11名、所外10名のメンバーからなる運営会議を所長の下に設置しています。法人化前の運営協議委員会と同様に、研究教育職員の人事、共同利用・共同研究等の研究所を運営する上で重要な事項について審議します。人事選考部会と共同研究専門委員会が運営会議の下に置かれています。また、運営会議は自然科学研究機構・機関長選考委員会（所長選考委員会）からの依頼を受けて、所長候補者の選考も行います。所外10名の候補は、関連学会（最近、従来の分子科学会、日本化学会、日本物理学会、錯体化学会、日本放射光学会の5学会に日本生物物理学会が加わりました）から推薦を受けたメンバーが参加する学会等連絡会議において選考されます。所外の方には1期2年の任期で原則2期4年をお願いすることになっており、本年度、以下のとおり半数が交代になりました。分子研レターズにはすでに3名の方からご意見等を頂いております。\*印は人事選考部会のメンバー（運営会議の中から所内5名、所外5名）です。人事選考部会で審議決定したことは運営会議で改めて審議する必要がないことになっています。一方、共同研究専門委員会（運営会議メンバー以外も委員となる）で審議したことは運営会議でさらに審議することになっています。運営会議長、人事選考部会長、共同研究専門委員長は、所内教授の小杉（継続）、大森、青野（継続）がそれぞれ務めます。また、所外の神取教授には運営会議副議長をお願いすることになりました。

## 平成24年度～平成27年度運営会議所外メンバー（新規）\*印は人事選考部会のメンバー（以下同様）

- 朝倉 清高 北海道大学触媒化学研究センター教授  
 \*神取 秀樹 名古屋工業大学大学院工学研究科教授（分子研レターズ64号）  
 河野 裕彦 東北大学大学院理学研究科教授（分子研レターズ64号）  
 \*寺崎 亨 九州大学大学院理学研究院教授  
 \*水谷 泰久 大阪大学大学院理学研究科教授（分子研レターズ63号）

以下は今年度より2期目を務められる方々です。

## 平成22年度～平成25年度運営会議所外メンバー（継続）

- 上村 大輔 神奈川大学理学部教授  
 \*佃 達哉 東京大学大学院理学系研究科教授（分子研レターズ62号）  
 \*森 健彦 東京工業大学大学院理工学研究科教授  
 山縣 ゆり子 熊本大学大学院生命科学研究部教授  
 山内 薫 東京大学大学院理学系研究科教授

なお、以下は退任された運営会議所外メンバーの方々です。全員から分子研レターズにご意見等を頂いております。これまでの多大なご支援、ご協力をありがとうございました。今後ともよろしく願いいたします。

## 平成20年度～平成23年度運営会議所外メンバー（退任）

- \*江幡 孝之 広島大学大学院理学研究科教授（分子研レターズ66号）（本号）  
 篠原 久典 名古屋大学大学院理学研究科教授（分子研レターズ65号）  
 \*富宅喜代一 神戸大学名誉教授（分子研レターズ62号）  
 \*山下 正廣 東北大学大学院理学研究科教授（分子研レターズ60号）  
 渡辺 芳人 名古屋大学理事・副総長（分子研レターズ61号）



## 共同研究専門委員会よりお知らせ

共同研究専門委員会では、分子科学研究所が公募している課題研究、協力研究、分子研研究会、および若手研究会の申請課題の審査を行っています。平成24年度からは、岡崎コンファレンスについても他の共同利用研究と同時に公募を行い、共同研究専門委員会において審査を行うことになりました。また、協力研究については、これまでは研究期間を半年として（前期、後期に分けて）申請を受付けていましたが、平成24年度からは、これらに加えて研究期間を1年間とする通年申請の枠を新たに設けました。それぞれの公募の詳細については分子研ホームページ（<http://www.ims.ac.jp/use/>）を参照いただきたいと思います。共同研究の現状について、平成18年度から今年度前期（7月10日現在）までの申請数の推移をまとめたものを下記に示しました。ここ数年は、ほぼ定常的な件数で推移しています。

現在、分子科学研究所では、共同利用研究の全面的な電子申請化の準備を進めています。UVSOR、電子計算機施設、機器センター施設利用等を含む、分子研が提供するすべての共同利用研究の申請が、すべてWeb画面上で行えるようなシステムの構築が進められています。申請用システムはほぼ完成し、所内でテストを行い、問題点がないかどうかチェックを行っている状況です。来年度の共同利用研究申請からは、従来の紙ベースでの申請に換わり、Webシステムを利用した電子申請へと全面的に移行する予定です。

分子科学研究所では通常の共同利用研究とは別枠で、東日本大震災により被災し、研究活動に支障を生じている研究者の支援プロジェクト（岡崎3機関「共同利用研究特別プロジェクト」<http://www.ims.ac.jp/whatsnew/2010/110317.html>）を平成23年3月17日に立ち上げ、これまでに合計13件の支援を実施してきました。本支援プロジェクトは、現在も引き続き実施しています。研究支援の内容については、可能な限り柔軟に対応していますので、要望等がある場合には所内対応者、あるいは共同研究専門委員会委員長にご相談下さい。

### 共同利用研究の実施状況（件数）について

種 別	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	平成24年度 (7月10日現在)
課題研究	1	2	2	1	0	1	1
協力研究	84	91	90	119	122	108	49
分子研研究会	13	9	4	5	6	4	1
若手研究会等	—	—	1	1	1	1	1
岡崎コンファレンス	—	—	—	—	—	—	1
施設利用I	47	58	72	60	65	94	47
電子計算機利用(施設利用II)	142	144	147	171	170	179	165
UVSOR研究会	3	2	2	2	1	2	2
UVSOR施設利用	113	146	156	147	140	136	56
計	403	452	474	506	505	525	323

施設利用Iについて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24年3月13日	innovationを目指す若手錯体化学者シンポジウム	水田 勉（広島大学大学院理学研究科）	33名
平成24年3月15日～16日	次世代分子科学に向けた複合研究討論会	松本 剛昭（兵庫県立大学大学院物質理学研究科）	29名

## 運営に関わって

## 江幡 孝之

広島大学大学院理学研究科化学専攻・教授

えばた・たかゆき／理学博士。1981年東京工業大学大学院理工学研究科化学専攻博士課程修了後、東北大学理学部化学科助手。1984年から2年間米国スタンフォード大学化学科博士研究員。1993年東北大学理学部化学科助教授、1996年同大学大学院理学研究科化学専攻助教授。2004年広島大学大学院理学研究科化学専攻教授現在に至る。2008年4月～2012年3月まで分子科学研究所運営会議委員、人事選考部会委員。専門は物理化学・レーザー分子分光。



広島大学に教授として赴任して5年目の平成20年から平成24年の4年間、分子研の運営会議委員を務めさせていただきました。当初依頼があったときには、理学研究科の副研究科長も務めていたので両立が難しいと思い躊躇したのですが、中村所長の熱心なお誘いもあり微力ながら引き受けさせていただくことにしました。分子研にはこれまで共同研究や岡崎コンファレンスをはじめとする数々のシンポジウムでたくさんお世話になってきました。運営会議委員として協力させていただくのも当たり前のことでしょう。

分子研では、運営会議委員と人事選考部会の委員を務めました。平成16年に国立大学が法人化され、中期目標の作成や達成度の評価等、私達のおかれた状況は毎年厳しくなっていますが、中でも定常的な人員削減により研究グループ体制の維持が困難な状況であることはどの国立大学においても深刻な問題です。分子研はまだそれほど定員削減の問題は深刻ではないかもしれませんが、将来を決定することになる人事選考は重要なミッションであり、在任期間のなかで教授、准教授、助教人事、そして所長人事に真剣に取り組ませていただきました。分子研の人事はなかなか大変な作業で、多忙な委員間の日程調整の難しさや、候補者の論文の査読、面接はなかなか勉強になりました。

運営会議は通常平日開催ですが、人

事選考部会は、土日に開催されます。人事選考部会は研究棟2階会議室で開催されますが、多くの方が言われるように、昔は共同研究や研究集会で分子研を訪れると、「平日でも土日でも研究棟の1階には顔なじみの分子研研究者の誰かと必ず顔を合わせたものであるが、現在では土日はひっそりしており人と会う機会が少なくなった」というのは私も同意見です。このような分子研の活気の低下が言われて久しいですが、その一つに岡崎コンファレンスセンターの存在があるのではないのでしょうか。自分を例に挙げますと、コンファレンスセンターができてから、東岡崎の駅から分子研に立ち寄ることなく直接コンファレンスセンターに行きシンポジウムに出席し、終了後に直接帰ることが多くなりました。このように、私達が分子研のそばまで来ておきながら分子研に寄る機会が少なくなったことも、分子研の活気低迷の一因ではないのでしょうか。分子研の研究者にとっても、コンファレンスセンターでシンポジウムが開催される現在では、距離的な面でふらっと覗いてみることもできず、出席する意欲や精神的余裕が減ってきている感じがしないではありません。研究棟2階の会議室は狭いですが、もっと研究会に活用したらいかでしょうか。

分子研が現在の状況を打開し、世界の分子科学研究の拠点として今後どの

ように展開していくかについては、これまで多くの意見が述べられており、分子研スタッフも十分に考えておられるはずなので、私が今更付け加えることはしません。ただ、現在の研究グループの規模について再考が必要ではないでしょうか。分子研は、大別して教授が率いる研究グループと准教授が率いるグループから構成されます。内部でのプロモーションを原則禁止していることもあり、准教授はこれまで分子研ですばらしい研究成果を挙げて大学や他の研究機関に教授として赴任してきました。分子研はこれまで優れた教授陣を他教育研究機関に輩出してきたと言えます。一方、教授が率いるグループはどうでしょうか。現在、分子研は比較的若い教授を採用しています。彼らは約20年間の長期的なスパンで分子科学を世界的にリードし、分子研を世界拠点にする責務を持っています。冒頭でも述べたように、法人化以降の定常的な人員削減で研究者数が減少し、さらに助手から助教というポジションへの移行に伴い助教が独立して研究を進めることが出来るようになり、私達教授の負担は著しく増えました。また、低い博士後期課程学生の定員充足率により今や我々の研究を支えているのは、博士前期課程学生であると言っても過言ではないでしょう。予算の潤沢な研究グループは博士研究員を雇うことは出来るでしょうが、彼らも自分の将来

を見据えるとそれほど長く博士研究員を続けることは出来ません。特に分子研は博士後前期課程学生が少なく、今後とも増やすことは難しいと推察します。マンパワーは絶対条件です。そこで、他の運営会議委員も分子研レターズで提案されていましたが、分子研は大学

等では作ることの出来ない大きな研究グループをつくるべきです。研究グループの総数すなわち教授の数を減らし優秀な複数スタッフによるサポート体制を備えた大きな研究グループを作れば、魅力的な教授ポジションですし卓越した教授候補者が現れるはずです。折し

もこの1、2年で教授陣の大幅な若返りを迎えています。このチャンスを逃すことはありません。是非、大峯所長にはこの英断を下していただきたいと思

## 運営に関わって

# 吉田 朋子

名古屋大学エコトピア科学研究所・准教授

よしだ・ともこ／(学歴) 1991年京都大学工学部石油化学科卒業、1996年京都大学大学院工学研究科分子工学専攻博士後期課程単位取得退学、1996年京都大学大学院工学研究科工学博士。(職歴) 1996年日本学術振興会特別研究員、その後、名古屋大学工学部助手・名古屋大学大学院工学研究科助教授を経て現職。



2008年4月から2012年3月の4年間、自然科学研究機構・分子科学研究所・極端紫外光研究施設(UVSOR)の運営委員会委員を務めさせていただきました。何とか任期を終了することができましたが、運営委員の一人として何らかのご助力ができたかどうかはこころもとありません。実は、UVSORは私にとって放射光分光研究を始めた思い出深い場所であります。京都大学在学中の修士1年時に、固体触媒のX線吸収スペクトル(XAFS)を測定するべく恩師と学生3名でUVSORを訪れましたが、初めての測定であったにも関わらず、学生に測定手順を一通り簡単に教えた後、恩師はさっさと立ち去ってしまいました。残された学生達は施設内の教官や技官の方々に心苦しいほどサポートして頂きながらどうにか測定をしているうちに、測定原理・技術だけでなく、専門書からは得られないノウハウまで叩き込んで頂いたことを鮮明に覚えています。施設の方々には多大なご迷惑をお掛けしましたが、世

界最高水準の研究環境とスタッフに恵まれて私の放射光分光研究はスタートしたのであり、恩師の荒療治とも言える最高の教育に今も感謝しています。

このようにUVSORは、当時から現在まで一貫して、大学共同利用研究機関として我々研究者に最高の支援を行っていることは間違いなく、施設内の先生方もユーザーコミュニティとの密接な協力関係を構築すると共に、積極的に国内外から共同研究者や学生を受け入れ、研究を展開しておられます。しかしその一方で、施設内の先生方は、分子科学研究の拠点として多くの事業やプロジェクトの推進を抱えておられるばかりでなく、所内外の関連した委員会への出席などに日々忙殺されていると伺いました。私が学生時代にUVSORを訪れた時に感じた「教官も技官も学生も同じ釜の飯を食う」ような、世間から離れて研究に没頭できた時間が少しずつ失われてきているような気がします。また、人手が少ないために、所内にある多くの実験装置が

十分に利用されていない状況も寂しく残念であります。これらの解決策として、プロジェクト推進に関わる専門の教員や、定常的な研究員・技術職員の充実と分業、UVSORと大学との運営面における連携をどれだけ図ってゆくかが今後重要になるのではないかと思います。

UVSOR運営委員会では、共同利用研究機関の拠点だからこそ実現可能なユニークな研究内容を期待する分、申請書に書かれた提案内容に迫力がなく、マンネリになっている印象を持ちました。これはユーザーである私自身も反省しなければならない点でした。現在、審査委員会では、申請書の採択・不採択だけでなく、採択課題の中でも特に優先度の高い優れた提案からS・A・B・C・Dと5段階のランク付けを行い、評価が低い課題には具体的な評価が提案代表者に届くなど年々厳密になっています。しかし、優れた研究提案をすることによって競争の中からチームタイムを勝ち取るという気概までには、ま



だまだ至っておりません。これは、新規ユーザーグループや海外研究者の参入などユーザーの多少の入れ替わりはあるものの、旧来のユーザーにはマシンタイムが取れなくなるという危機感をあたえる程ではなく、一種の安心感や慣れがあるためのような気がいたします。更に、ビームラインによっては、経験豊富なユーザーグループで常に配分ビームタイムが埋まってしまい、一見、新規ユーザーが参入する余地がないような所もあります。また、現状では、申請課題が有効である1年間では到底終わらない数年間の準備・調整期間が必要な課題はなかなか提案できません。このような現状に対して、例えば、新規ユーザーを対象として実験支援を行うテストビームタイム(研究課題)や長期利用が可能な課題申請を別枠で設けるなどをして、新規のユーザーや課題の開拓の試みも今後必要ではないで

しょうか? また贅沢な話かもしれませんが、UVSORでの実験の幅を更に拡げるためにはビームライン末端の各種実験設備(分光器・検出器・加熱冷却装置 etc.)の更なる充実も必要ではないでしょうか? これら設備の充実には、ユーザー同士の連携による情報交換や資金獲得もさることながら、最先端実験機器・設備に偏らない国や分子研からUVSORへの強力な財政的サポートがやはり必要だと思います。

その他、運営委員会では、近年進められてきたUVSOR高度化と今後の展望計画を目の当たりにする機会に恵まれました。光源性能の革新によるトップアップ運転の実現や自由電子レーザーの開発に加え、極端紫外光源の特徴を活かした世界最先端の分光実験計画などが着々と進められています。運営委員には大学教員だけでなくUVSOR以外の放射光施設代表者が含

まれているため、UVSORの将来計画について具体的な技術情報提供があり、建設的に議論が進められてゆくことを大変頼もしく拝見いたしました。その一方で、世界各国において次々と放射光施設が建設されている中、UVSORの独自性を活かした特徴的な研究が今後益々問われることを知り、身の引き締まる思いをいたしました。このようなUVSORで展開する特徴的な研究には、長期で研究の方向性を決定できる教員の配置が必要であると思います。今年4月から運営委員ではなくなりましたが、私にとってUVSORは研究の出発点であり、学生時代から現在までお世話になっている大切な放射光施設です。微力ではありますが、運営に関わった経験を活かし、これからも一人のユーザーとしてUVSORの発展に貢献できたら幸いです。

## 運営に関わって

### 北尾 彰朗

東京大学分子細胞生物学研究所・准教授

きたお・あきお / (学歴) 1989年京都大学理学部学士試験合格、1991年同大学院理学研究科化学専攻修士課程修了、1993年同博士後期課程中途退学、1994年京都大学博士(理学)。(職歴) 1993年京都大学理学部化学科助手、2002年日本原子力研究所計算科学技術推進センター研究員、2003年東京大学分子細胞生物学研究所助教授、2007年同准教授。スカッシュというスポーツで弾性体の軌道が壁面や床面で変化する過程を検証しています。ヒューマンエラーのため、なかなか頭の中のシミュレーション通りにいきません。

微力ながら2010年4月から2012年3月まで計算科学研究センター運営委員を務めた。センターには大学院生時代から長年お世話になっており、その運営に関わらせて頂いたことは貴重な経験であった。センターが厳正かつ研究者のニーズに柔軟に対応しうるよう運営されていることに感銘を受け、また運営に関わってこられた方々への感謝

の念を新たにした。一つだけ気になったのは、「量子化学」と「その他」で同じ数の審査委員で審査体制が構成されている点である。より広い分野をカバーする「その他」の審査委員がすべての課題をカバーしきれているのか、やや不安を覚えた。

計算機はその誕生以来、常に急速に進歩している。私は2002年に日本

原子力研究所のスーパーコンピュータPrimePower(1331GFlops)を使う機会を得た。主にこの計算機を3年間使うことで約240万原子からなる細菌べん毛繊維の分子動力学計算を行うことができた。8年後の2010年に発売されたGPGPU Tesla C2050/C2070の性能は、1030GFlops(単精度)・515GFlops(倍精度)であり、個人



で使うなら当時のPrimePowerとCPUスペックで遜色がない。院生が試したところ、430万原子までなら、既存のMDプログラムをそのまま用いるだけでPrimePowerと同程度の時間で分子動力学計算が実行できる。この例で見られるような急速な変化の中で、将来の計算機の動向やユーザーのニーズを予測しながら効率的な運営を行うことは容易ではなく、センターの方々には頭が下がる思いである。

センターの今後を考えるうえで、まずこれまでのセンター利用状況の変化と現状を分析してみたい。図はセンターレポート (No.11) の23, 24ページのデータの一部をプロットしたものである。プロジェクト数・利用者数(機構外)・利用者数(合計)は1978年から順調に増加を続け、1991, 1992年頃に最初のピークをむかえる。その後2003年頃に一旦極小に達するが、その後再び増加基調にある。さらに、手元の資料によると、近年MO計算においては圧倒的にGAUSSIANが使われている。MD計算と比較して、CPU時間に対するジョブ件数が圧倒的に多いことから、MO計算の実行時間は短く比較的並列性の低い計算が多いと予測される。逆に、MD計算は並列性が高

いと言える。またMD計算では、メジャーなAMBER、NAMD、GROMACSだけでなく、各研究室で開発されたコードもかなり使われている。

このセンターでは、比較的少数の利用者がかなり大規模な計算を行っている。ここ数年、センターの運営は大規模超並列計算をサポートする体制が試みられており、これが成果を挙げつつある。一方、手元に資料がある2008年度以降に関しては、センターのプロジェクトの約半数がCPU時間・ディスク容量が標準値の施設利用Aである。施設利用Aの利用者数はそれ以外の利用者の3分の1程度であることから、施設利用Aの利用者は、主に比較的小さい研究グループや研究室の一部のメンバーが計算を行っている研究グループからなると予測される。

最後にセンターの利用について意見を述べたい。「京」コンピュータではCPU間的高速通信機器に投資した故に、CPU間の通信を軽減したレプリカ交換法や我々が開発している完全に独立に実行した多数のシミュレーション結果を統合するような手法は適さないとの意見がある。高速通信が可能な計算機で低並列の計算が多数流れることは非効率だと考えるなら、今後センターで

は例えば、CPU能力は同程度で、通信が高速で超並列計算向きの計算機とともに通信能力を落とした計算機を分けて運用することを考えてもよいのではないだろうか。後者では、通信機器にかかるコストをより多くのCPU数に割り当てればよい。そこでは比較的並列度の低い多数のジョブや通信の少ない超並列計算が可能であり、決して少数ではない小口利用者の計算にも適している。ただし、近年問題になっている電力使用量の問題は残る。

ハイエンドは広い裾野に支えられる。GPCPUマシンが50万で買えるのだから、小口の計算は研究室でやればよいというのも1つの考えではある。しかし、利用者の中には、50万円の予算は使うのは容易ではない、あるいは計算機を使いたいけど計算機利用環境を自前で整えるのは技術的に敷居が高いという研究者も少なくないと思う。ハイエンドの計算は今後しばらく「京」や専用計算機で行われると思うので、今後も計算科学研究センターにはミドルレンジから裾野までを支えていただけたらと考える。そのためには、これまでも増して効率的な運営方針を出していく必要があるのかもしれない。

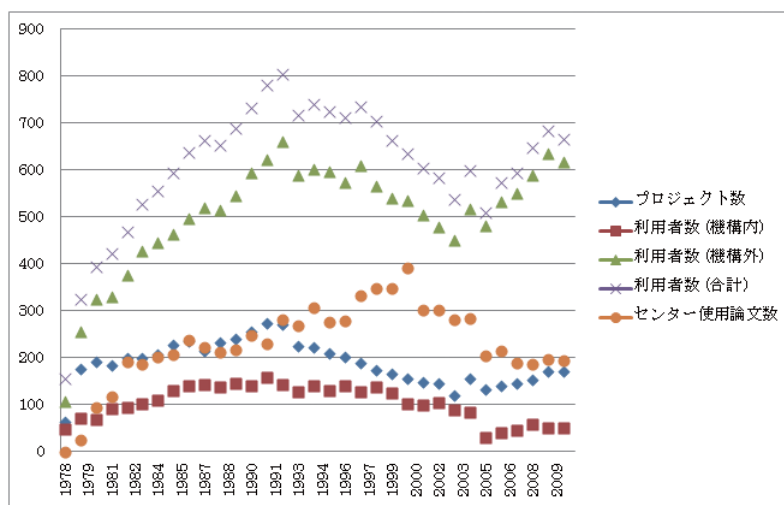


図 センター利用状況

## 関連学協会等との連携

### 連携事業：

# 名古屋大学「博士課程教育リーディングプログラム」

阿波賀 邦夫 名古屋大学 教授 ・ 横山 利彦 分子科学研究所 教授

昨年度、日本学術振興会「博士課程教育リーディングプログラム」の第一回公募がありました。名古屋大学の物質ならびに生命系の大学院専攻が中心となり、また分子科学研究所や基礎生物学研究所などが連携する「グリーン自然科学国際教育研究プログラム」が採択されました。複合領域型（環境）というカテゴリーの申請でしたが、応募20件中4件採用という狭き門でした。この事業では、優秀な学生を俯瞰力と独創力を備え広く産学官にわたりグローバルに活躍するリーダーへと導くため、専門分野の枠を超えて博士課程前期・後期一貫した世界に通用する質の保証された学位プログラムの創設が求められています。名大のプログラムは、最先端基礎自然科学研究の実践と

それを可能にする十分なコースワーク履修、そしてこれらと平行して実行される大学院リテラシー教育（英語研修や海外留学、スキルセミナーなど）から形成されます。大学院研究教育活動を可能な限り公表し、連携研究所や企業研究者との交流によって可視化された大学院教育を実現して、これにより学位の質を保証しようというものです。

分子研の役割は、プログラム担当者2名（横山利彦、唯美津木）を派遣して名大の教育研究に参画するとともに、共同研究推進のために名大生や博士研究員を受け入れ、また分子研での短期研修（リトリート研究所研修）を受け入れます。写真は、2012年3月3日に初めて実行されたリトリート研究所研修「錯体化学と物性科学の新しい接点



を見つめて」の一コマで、名大から11名、分子研から15名の参加があり、ミニ研究会と見学会を実施しました。参加した名大生のなかには、分子研に来たのは初めてという学生から、関連研究室に共同研究を申し込む積極性を示すものまであり、いつもとは違う研究所の雰囲気に、大変満足したようでした。

このプログラムは、基生研との連携も進めており、リトリート研究所研修を発展させ、講義までを取り込んで100名規模で名大生が参加する企画や、基生研の研究室に名大生が進学するシステムも立ち上がりつつあります。分子研の場合、どのような連携が可能かはさらに検討の余地がありますが、リーダー人材のキャリアパスにおいて、名大の教育から分子研の研究へというおおまかな道筋が確立すれば、両機関にとってWin-Winの連携が構築できるものと思われます。







## 人と人を結ぶ架け橋

計算科学技術班 岩橋 建輔

2002年名古屋大学大学院理学研究科博士課程後期課程満了、博士（理学）。  
分子科学研究所研究員を経て、2006年2月より現職。

自然科学研究機構岡崎共通研究施設の計算科学研究センターは、共同利用として全国の大学や研究機関の数百名規模のユーザーによって利用されています。本センターを利用することができる研究分野は、分子科学、基礎生物学および生理学に限定されていますが、分子科学分野が大半を占めています。分子科学分野の研究では電子状態計算、分子動力学計算、第一原理計算などの様々な種類があります。

これらの研究に使うコンピューターですが、最近の変遷は目覚ましいものがあり、私が着任した2006年以降だけでも計算科学研究センターで存在したコンピューターは富士通のVPPやNECのSX-5というベクトル機からSGIのAltixや日立のSRなどの共有メモリー並列機、そして、いわゆるPCクラスターの分散メモリー並列機へと移り変わり、最近ではGPUアクセラレーター搭載機や「京コンピューター」互換機も導入されています。

一方、ソフトウェアもハードウェアの変遷とともに変化してきました。ベクトル機全盛の時代には高ベクトル化効率を向上させるプログラミングが中心でしたが、スカラー並列機が全盛を迎えるようになってくるとソフトウェアを取り巻く環境は一変しました。並列数が少ない頃は単にMPI並列を中心にプログラミングしていればよかったのですが、同一ノード内に複数コアがあるのが普通の時代になると全て

をMPIで並列化するFlat MPIでは通信がボトルネックになるようになり並列化効率が劣化するので、ノード内はOpenMPで並列化するのが最近の傾向です。また、GPUアクセラレーターを使うにはCUDAというライブラリーを使うか、通常のFortranやCのループの前にプリAGMAを加える必要があります。「京コンピューター」互換機を真に使いこなすにはMPI並列やOpenMP並列だけでなくハードウェアのネットワークポロジリーを意識してプログラミングしていく必要があります。

ところで、分子科学研究所の他の共同利用とは異なり、計算科学研究センターの共同利用では利用者の方は岡崎まで来所せずにインターネット経由で利用することができます。そのため、利用者の方々とセンターの技術職員が顔を合わせる機会はほとんどありません。共同利用とインターネットは密接な関係があり、計算科学研究センターの技術職員も高度なネットワークの知識が要求されています。

ここまで書いたように、計算科学研究センターの共同利用と関係が深いものは、研究および計算、ハードウェア、ソフトウェア、ネットワークなどがあり、それ以外に利用申請と利用報告などの事務处理的なものがあります。それぞれのエキスパートは、研究系職員であったり、各メーカーのSE、CEの方々であったり、秘書の方であったりしますが、実際的にはそれぞれの複

合領域が重要であり、いろんな人との間に立って「橋渡しする」のが計算科学研究センターの技術職員の役割だと思っています。全分野を覆るだけの技術力を持つことは、簡単に成し遂げられるものではないですが、広く深い知識を得られるよう日々精進しています。

私が今の職との出会いは偶然でもあり、運命であったと感じています。当時、計算科学研究センターのポスドクであった私に対し、計算科学研究センター長でもあった所属研究室の教授の岡崎先生（現名古屋大学）が着任予定の斉藤教授（現計算科学研究センター長）を山手地区の計算科学研究センターまで車で送ってほしいと頼んだことがきっかけでした。山手地区のセンターを案内している途中、「今度、ライブラリーを担当できるポスドク級の技術職員を採ろうとしています」という話を耳にしました。これが人生の分岐点となる瞬間でした。当時、人生に対し先が見えない時代を過ごしていた私にとっては大海で小舟を見つけたようなもので、最終的には応募して採用されました。

ここまでの内容では、計算科学系のプログラムだけは強いと思われるかもしれませんが、学部4年生の頃からシステム管理者見習いとして研究室で管理業務の一部を受け持っていました。この頃の知識は現在の礎となっていて、今となれば飯の種を手に入れたのでした。システム管理者として共同利

# 分子研技術課

用への貢献はいくつかありますが、今回は **jobinfo** コマンドを紹介したいと思います。古くから分子研の共同利用を使っている方は **jstat** コマンドというのをご存知かと思いますが、**jstat** コマンドは各システムのキューイングシステムの状態を見るコマンドをほぼそのまま出力するものであり、システムごとに異なる書式であることだけでなく利用者に必要な情報が欠落しているものになっていました。そこで、元利用者としての感覚を最大限生かし、各システム共通のインターフェースを持つ **jobinfo** コマンドを作成しました。この **jobinfo** コマンドは内部的にはジョブの情報を得るためのAPIを使っているので、システム管理者は類似コマンドを容易に作成できるようになっています。現在は、過去のジョブに対しても同じAPIが使うように拡張されているので、このAPIを使ったプログラムで、前システムの **Altix4700** と **Prime Quest** が運用時に並列化効率が悪いジョブに関して注意メールを自動送信する仕組みを作成しました。また、利用者の方からのジョブの問い合わせでシステム管

理者はどの演算ノードで実行されていたかを確認する必要がありますが、これも容易にわかるようになっています。このAPIを使った究極のプログラムは、ある時点での実行中のジョブの可視化(図1)です。ウェブブラウザでジョブの実行状況の概観、演算ノードの利用状況、ジョブの一覧を数種類の解析方法で表示させることができ、システム管理者はしばしばこれをモニターしています。

これ以外にUNIXのGUIのプログラミングにも興味があり、X Windowの前の時代のSun Viewの時代からイベント駆動型のプログラムに触れていました。時代はX Windowに移行したのですが、**Xlib** や **Xaw** が主流の時代の開発は原始的なライブラリーであることと開発者向け文章が少なく開発者にとって苦痛な時代でした。その後、**XForms** ライブラリーに出会い、同級生の馬場昭典博士(現、理化学研究所研究員)と協力して、分子動力学計算のトラジェクトリービューアーの**MDView**を開発してきました。その後、**XForms** ライブラリーが廃れていったため、**GTK+**

というGUI開発キットを使用するようになりました。現在でも二大GUI開発キットのうちの一つを若い学生時代に修得したこともまた私の財産です。**NAREGI**プロジェクト・次世代スパコンのプロジェクトの予算を使って開発された**Nano-Ignition**という入力支援プログラム(図2)も**GTK+**を使って開発されており、開発予算が無い現在は一技術職員が細々と開発を続けることが可能になっています。

自分の持っている研究の知識、ハードウェアの知識、ソフトウェア開発の知識を総動員して、分子科学研究所の2009年の一般公開用展示物を2つ作成しました。1つ目は、二次元格子モデルのタンパク質折り畳みに関するもので、見学者がコンピューター上で実際にタンパク質モデルを折り畳んでいる間に、コンピューターが最善となるタンパク質構造を求めるといもの(図3)です。人間が手で折り畳むと難しいのですが、コンピューターが解いた模範解答の構造の美しさを知ってもらえたと思います。こちらは計算科学研究センターのホームページからダウンロードするこ



図1 Primergy RX300の利用状況モニター

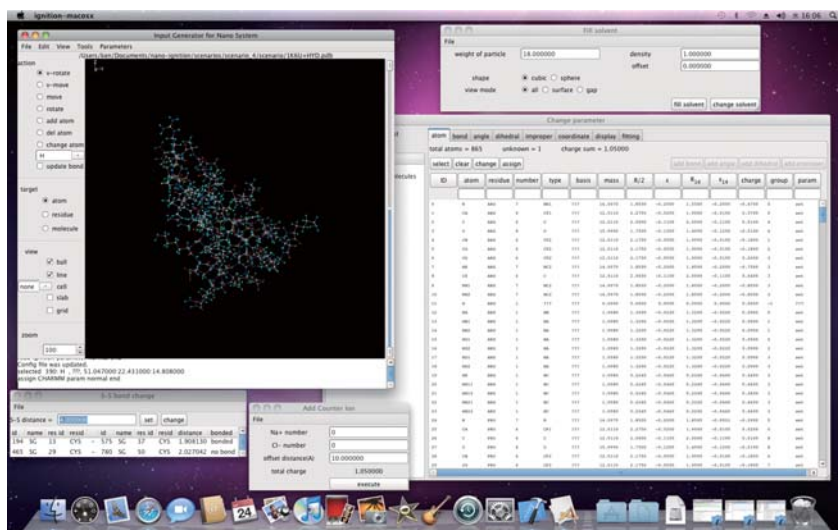


図2 Nano-Ignitionのスクリーンショット

とができます。2つ目は、分子動力学計算で水分子100個のクラスターの系をリアルタイムで計算および三次元立体表示をさせ、外部からの要因として見学者にWiiリモコンを使って別の水分子を動いているクラスターに「投げて」もらうもの(図4)です。その後の分子の動きを見てもらい、コンピューターを使う計算科学の一端を知ってもらうものです。特に後者の展示物は、分子動力学計算、OpenMP、スレッドプログラミング、OpenGL、GTK+といったこれまでに得ていた知識を融合しただけでなく、2台のプロジェクターから

左目用と右目用の出力、偏光を使った立体表示システムの構築、Wiiリモコンからの信号を処理するプログラミングなどの未経験の技術を駆使したものでした。

人と人を結ぶ架け橋になるのにはいろいろなレベルがありますが、技術者が研究者との間で研究に関する架け橋になるのが一番難しいと言えます。研究以外の知識は技術職員になってからでも十分身に付きますが、研究の知識は若い頃に研究者の下で長い時間学んでいないと身に付きにくいものです。研究の知識の有無が顕著に現れる例を

挙げると、計算科学の分野ではプログラムがとりあえず完成し正しい計算結果が得られた後に、プログラム的高速化という段階があります。このとき単にコンピューターやプログラムが得意な人は、研究者が書いたプログラムを局所的に見て高速化を行います。研究の知識がある人が行う場合、アルゴリズムレベルからでも高速化が行えます。前者は「木を見て森を見ず」という状態です。「木も森も見える」技術職員を如何に増やしていくかが技術課の課題です。

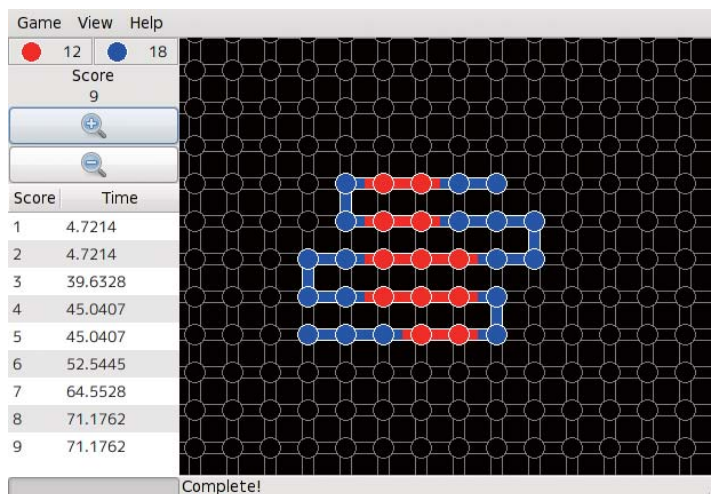


図3 二次元格子タンパク質の折り畳みソフトウェアで最善の折り畳み結果の表示



図4-1 偏光式三次元立体表示システム

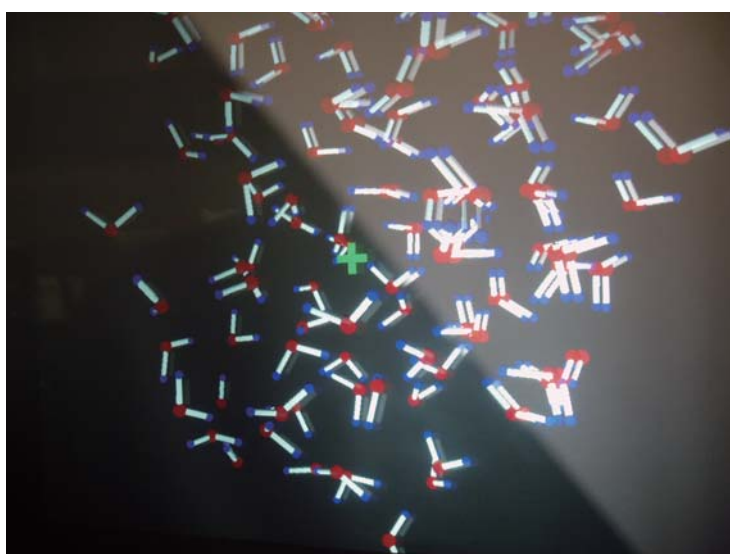


図4-2 実際の三次元立体表示。左斜め下半分は偏光フィルムを通して撮影



## 分子科学研究所若手育成基金について（現状報告）

平成20年に「分子科学研究所若手育成基金」が創設されて、既に約4年が経過した。中村宏樹（前）所長の下で、田中晃二名誉教授（当時分子研大学院委員長）が中心となって船出した本基金は、現在の大峯巖所長にバトンが渡り筆者が微力ながらお手伝いさせていただき体制で運用されている。その間、基金を発足しその足場を固める時期を経て、現在はその基金の「みのり」を育む段階に入った所である。すなわち「みのり」とは、同基金による実際の若手支援育成である。詳細厳密な金額の数値は、正式な収支決算書を待つこととし、本稿では、その概要と実質的な支援育成の内容について紹介したい。

現段階で、本基金には分子研の研究教育活動にご理解・ご賛同いただいた個人篤志や企業法人等から現時点で3300万円ほどの寄付が寄せられており、その中から、3名の大学院生「分子研特別奨学生」に奨学金が給付されている（現時点での総支出額は約500万円程度）。3名の大学院生は5年一貫制博士課程5年次、4年次、3年次（一般の他大学大学院博士後期課程3、2、1年次に相当）各1名であり、研究面では理論・計算系1名、実験系2名となっている。

この「分子研特別奨学生」の選考は、応募者（新入学出願者および在学大学院生から応募を受けている）に英語によるプレゼンテーションを課し、14名の面接審査委員に各応募者に対しオブザーバーとして数名の専門領域教員を加え、1名あたり1時間程度の面接質疑を実施する本格的な審査を経て決定されている。合否に関わる採点法詳細は記さな

いが、実質的には「ほぼ満点」でなければ合格することはできない狭き門である。これまでに4回（平成20～23年度；毎年1回）の選抜が実施され、応募者総計22名中4名が合格し3名が受給している。応募者は応募段階で指導教員と十分な連絡を取り、指導教員は一定レベルの実力を持つ大学院生にのみ応募を促すよう申し合わせがあるため、応募者のレベルは決して低くない。それゆえ、応募者数は限定され、さらにその中でもほんの一握りの者のみが合格となる、真に狭き門である。例えば現在4年次の受給者も3年次段階では不合格とされ（同年合格者ゼロ）、次年度4年次に実力に磨きを掛けて再挑戦し合格に到達しており、その審査の厳格さがご理解いただけると思う。

厳しい選考を経た合格者は本基金からの奨学金と、平素の研究室業務におけるRA経費受給を合わせ年間250万円程度の「分子研特別奨学金」給与を受け取ることができる。すなわち授業料と生活費を概ねカバーできるだけの奨学金と考えることができる。この各受給者は研究・学習への注力・集中が奨学金の受給に相応しいか否か、毎月指導教員の定期的な認定を受ける必要があり、合格者といえども安穩としていることはできない。

先進諸外国に比較して、今なお日本の高度教育環境は豊かではなく、どんなに優秀であろうとも扶養者（ご両親など）に頼らなければ修学できない実情がある。特に分子研大学院（総合研究大学院大学・大学院物理科学研究科・構造分子科学および機能分子科学専攻）には他大学の修士（博士前期）課程を修了したのち編入する者が多く、日本

学術振興会特別研究員DCという奨学制度を、優秀な個人であっても制度上の日程都合により、実質上応募できないケースが殆どである。本基金は、我が国の高度教育の経済的問題をカバーし、また他大学からの編入というハードルを乗り越えんとする大学院生を支える極めて重要な役割を担っている。

高度教育を望み、研究を志し、厳しい選考をくぐり抜けた本育成基金の受給者もその最高学年は5年次に達しており、順調であればいよいよ来年3月には分子研特別奨学生から第一号の「博士」が誕生する時期となる。「分子研特別奨学生」の博士研究の到達点はどの程度なのか？ 一体彼らは分子研大学院を出た後、どのような道を行くのか？ 本当の「みのり」の時期はすぐそこにきているようだ。

分子研大学院教育に携わる教員一同、本基金にご協力いただいた個人・法人各位に豊かな「みのり」が報告できるよう大学院教育に益々注力していく所存である。またその豊かな「みのり」こそがご協力いただいた皆様への最高の「事業報告」となるはずである。

未筆ながら、本基金にご賛同・ご協力下さいました皆様に紙面を借りて衷心より感謝申し上げます。また今後ますますのご支援を賜りますようお願い申し上げます。

（魚住 泰広 記）

## 分子科学研究所 若手育成基金 特別奨学生の声

### 櫻井 扶美恵

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

私は昨年度の10月に分子科学研究所特別奨学生に採用されました。現在、機能分子科学専攻の博士課程4年生として錯体触媒研究部門・魚住グループに所属しており、博士課程3年次に本奨学生の採用試験を受験しました。

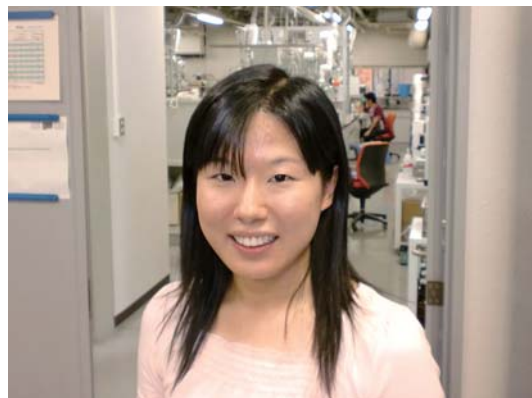
分子研特別奨学生として採用されると、年額最高250万円が最長3年間支給され、支給された奨学金の返還義務はありません。しかし、その分受験生にとってはなかなか大変な試験内容となっており、これまで行ってきた研究とこれから進める研究について約30分間英語でプレゼンテーションを行わなければなりません。また、質疑応答・基礎学力に関する口頭試問も30分程行われます。特別奨学生の採用試験は毎年8月末に行われ、総研大3年次編入希望者の場合は奨学金採用試験と大学院入試を兼ねることができます。私が本採用試験を受験したのは実は2度目であり、総研大の入学試験の時（当時の学年は修士課程2年）に一度挑戦したことがあったのですが、その時は残念ながら不採用でした（もちろん入試には合格しました）。簡単な試験ではないということを理解していたものの、「自分には何が足りなかったのか」「博士課程に進学したらどのような目標をもって過ごすべきか」などいろいろ考えるようになりました。そして1年後には必ずまた挑戦しようと思い、昨年の8月に再び採用試験を受けました。

試験の準備で苦労した点はいくつか

ありますが、やはり一番大変だったのは英語の発表原稿を作成することでした。しかし魚住研究室に所属して以降、セミナーや日常会話などにおいて積極的に英語と向き合っ

ていたこともあり、初めて受験した時に比べて慌てずに準備することができました。また、発表後の質疑応答に備え、どのような質問が出てくるのかある程度予想を立てて、それに対する自分なりの答えを用意し試験に臨みましたが、1年前に受けた試験の反省点をきちんと踏まえて準備を進めていた甲斐もあって、2度目の試験で無事に合格することができました。本試験を通じて学んだことはたくさんありますが、諦めないで挑戦し続けることの大切さを改めて感じることができました。英語でのプレゼンテーションや30分間の口頭試問という試験内容はなかなか大変なものです。このような機会はあまり多くないと思うので、分子研に所属する学生の方はもちろんのこと、今後総研大へ入学希望される方も是非とも積極的にチャレンジしていくべきだと思います。

特別奨学生として採用されてから、より自分に自信をもって日々の研究生生活を送れるようになり、少し難しそうに思える事でもどんどん積極的に挑戦していきたいと思うようになりました。将来は製薬企業で新薬の研究・開発に



携わりたいと考えており、修士課程まで名古屋市立大学薬学研究科にて有機化学を専攻していました。修士課程修了後、3年次編入学で分子研に来たのですが、分子研は設備が非常に充実している、これまで自分で扱ったことのないような機器（TEMやESI-MSなど）を自分の手で操作する事ができるようになりました。さらに、他大学に比べて教員やスタッフの方々により多くディスカッションができる環境にあるため、様々な知識をたくさん吸収する事ができ、また研究の進め方も着実に身に付きつつあります。自分の将来の夢を実現するためにも、今後も実験のスキルをより一層磨き、様々な分野の研究者とのコミュニケーションを大切にしていきたいと思っています。また、自分の研究生生活に対する意識が変わっただけでなく、経済的な面においても良い変化がありました。分子研では全学年次の大学院生に対してリサーチアシスタントなどによる支援を行っていますが、今回特別奨学金をいただけるようになったことによって、経済的な面での心配をすることなく、その分より集中して研究に取り組めるようになったと思います。しかしながら、そ

れと同時に“特別奨学生”というプレッシャーも感じています。上記で述べたように、分子研特別奨学金は返還義務のない奨学金であるため、毎月支給される度に「今の自分は特別奨学生として相応しいだろうか」「この奨学金をいただけるだけの事をしているだろうか」と自分に問いかけるようになりました。現在私は分子研で日々楽しく研究生活を送っていますが、たまには研究等に

おいて上手くいかない事があったり少し苦しいなと思う事もあったりします。しかしこの“特別奨学生”というプレッシャーを感じるにより「これくらいでへこんでいてはいけない！」と自分を奮起させて、今日もこつこつと研究に取り組んでいます。このように、特別奨学生は私にとってプレッシャーだけでなく励みにもなっています。

分子研に来てから既に1年と4か月(特

別奨学生として採用されてから10か月)が経ち、総研大に入学してから現在までの研究生活を振り返るとあっという間ですが、本当に多くの事を学び充実した研究生活を送っていると思います。これからも特別奨学生として日々精進し、研究を楽しみながらどんどん自分を高めていきたいと思っておりますので宜しくお願いいたします。

## 辻 裕章

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

総合研究大学院大学5年制博士一貫制課程3年の辻裕章です。本年度から分子科学研究所特別奨学生として生命・錯体分子科学領域・魚住グループに所属しています。本コラムでは、分子研特別奨学生という制度を知ったきっかけと分子研特別奨学生に応募した理由、採択後にどのような目標を掲げ、それを実現するために何をするかについて以下に述べたいと思います。

私が以前在籍していた鳥取大学の学部四年生の3月だったと思います。同大学大学院進学を決め、来月には後輩たちが研究室に配属される頃「6月の分子研オープンキャンパスにいかない?」「でっかいNMRとか見た事ない実験機器が見れるよ。行ってきたら。」と先生や先輩方から勧められました。よくよく話を聞くと、交通費や宿泊施設も提供してもらえるということでしたので、小旅行気分で研究室の同期とともに参加する事にしました。そして、この分子研オープンキャンパスの中で特別奨学生制度の説明を受け、初めてその制度を知る事になったのです。

しばらくたち、研究室の同期は就職

活動を始め、私も就職するのかそれとも進学するのか、自分の進路について考える時期を迎えました。私の気持ちとしては、博士後期課程に進学してもっと勉強や研究をしてみたいという意志がありましたが、進学後の学費や生活費をどうするかが悩みの種でした。そんな時に分子研特別奨学生制度の事を思い出し、募集要項を調べてみると「年間250万円もの支給があり、返還する必要がない」というすばらしいものだと思ったのですが、試験内容が自分の研究内容と進学後の研究内容について「英語」で30分口頭発表し、質疑応答(これは日本語でも可)と基礎的な質問を10分間というものでした……(研究室の先生や同期に伝えたら、「英語」で発表することに驚いてました)。それまで英語はおろか日本語での口頭発表の経験もなかったので、応募するかどうか迷いましたが、この奨学金を獲得すれば経済的な援助を受けながらも勉強や研究ができるし、「英語」の発表にも挑戦してみたいという気持ちがあって分子研特



別奨学生に応募することに決めました。

試験本番までに口頭発表の練習を100回行って望んだ結果、幸いにも分子研特別奨学生に採択され、実際にその通知を受け取ったときは、嬉しい気持ちと不安な気持ちの入り乱れた状態だったことを覚えています。そのような気持ちを整理するために、私は採択後の目標を掲げそれをどうやって実現していくかを考える事にしました。

私は、現状に満足せず、常に向上心をもって新しい事に挑戦できるのが優秀な研究者だと考えています。なぜなら、研究者には自分に与えられた仕事をこなすだけではなく、独創的な展開をする能力や自分の研究を客観的に見る能力も必要だからです。私は分子研特別奨学生に採用されましたが、これは優秀な研究者になるための一つの通過点だと考えております。まずは研究



室のスタッフや分子研の皆さん、さらに分子研以外の研究者から「分子研特別奨学生としてふさわしい人物」と思われる様に努力することが第一の目標です。そのために、分子研特別奨学生は分子研の学生の中から選ばれた代表であるという自負のもとに研究を行い、国内外を問わず学会に積極的に参加することで、研究成果の発表や研究者との交流を行っていきたくです。そして、将来的には日本に限らず世界の研究者達から「優秀な研究者」だと認められ

ることを目標にして精進していきたくと思ひます。

私の所属している魚住グループでは毎週土曜日に行われるセミナーの中で、最新の論文を紹介し、議論を行っています。言語は英語であり、スタッフの皆さんの議論も難しいので、付いていくので精一杯ですが、私はこのセミナーを通して自分の研究分野に関する基礎知識の無さを感じると共に、このままでは目標の達成にはほど遠いと感ひました。このことから、基礎知識を習得

するために勉強に励み、自分が行っている研究の背景、世界的な位置付けや意義を理解して、それを第三者に対して分かりやすく説明する事を常に考えていることが、分子研特別奨学生として、さらに優秀な研究者として認められることへの近道ではないかと考えています。

最後に、私を評価し分子研特別奨学生に採択して頂いたことに感謝するとともに、その期待に答える活躍をしていきたくと思ひます。

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

### 教員報告 2011年度 総研大物理科学研究科セミナー

2012年度担当教員 理論・計算分子科学研究領域 准教授 柳井 毅

2012年2月9日～10日にわたり総研大物理科学研究科セミナー（大学院教育改革推進プログラム「研究力と適性を磨くコース別教育プログラム」の一環）が、静岡県浜松市ホテルコンコルド浜松にて開催されました。物理科学研究科の5専攻（宇宙、天文、核融合、構造・機能分子科学専攻）あわせて64名の参加者があり、構造・機能分子科学専攻からは学生7名、教員18名が参加しました。この学生セミナーは、当研究科の学生の企画・運営力の育成と5専攻間の交流の促進を主な目

的としており、各専攻から数名の学生が実行委員として企画・運営を行いました。開催プログラムの概要は、以下に掲載します。

企画1では、専攻をまたがるグループをつくり、LEGO MINDSTORMという電子ロボットの教材を用いた小規模な課題に協力して取り組み、目的達成度をグループ間で競い合いました。企画2では、博士取得後のキャリアに関して見聞を広げることを目的として、

上記3名の招待講演者から現職と博士研究との関係や就職などに関するお話を聴講し、博士取得者の多様なキャリアパスを考えるパネルディスカッションを行いました。企画3では、専攻混合の4～5人のグループ間で、各種テーマに関してディベート大会を行いました。このセミナーの開催のために、各専攻の学生委員が複数回の準備会議を重ね、手の込んだ企画が計画されました。その甲斐あり、高い団結力のもとで完成度の高いセミナーが実施されました。

#### 開催プログラムの概略

2月9日 企画1「プロジェクトを通じた相互理解」

企画2「博士号取得後のキャリアパス」

招待講演

・坂中靖志（総務省情報流通行政局衛星地域放送課 技術企画官）

・高山英男（NHK製作局 科学環境番組部 ディレクター）

・佐藤健太郎（東京大学大学院理学系研究科広報担当 特任助教）

2月10日 企画3「ロジカルシンキングの実践的トレーニング」



E V E N T R E P O R T

学生報告 平成24年度前期学生セミナー

物理科学研究科構造分子科学専攻 5年一貫制博士課程1年 橋谷 俊

4月12日と13日の2日間、総合研究大学院大学葉山キャンパスにて入学式及び学生セミナーが開催された。今年度の学生セミナーは「つながる」をテーマとして、昨年度の新入生から構成される学生セミナー実行委員によって3つのユニークなセッションが用意されていた。

最初のセッションでは「地域とつ

ながる」ために、葉山をモデルとしたゆるキャラづくりが実施された。ゆるキャラづくりは専攻が異なる8名程度のグループで行われ、それぞれの専攻の色がミックスした独創的なゆるキャラが出来上がったと思う。次のセッションでは「人（異分野の研究者）とつながる」ために、『農村の発展』を議題として自由に意見を交わした。こ

のセッションは夕食も兼ねており、お酒も入れたためか、会場が騒がしくなるほど活発に議論が行われていた。他専攻の学生の意見がどれも自分にとって新鮮であったり、各々の分野についての話に脱線すると自分の分野

について強く意識させられたり、と異分野との交流によって様々な発見があることを体験できたのは本セミナーで特に印象に残ったことである。最後のセッションは講演と研究者の考える美意識に焦点を当てたエッセイ集から「社会とつながる」ことについて学んだ。本セミナーによって、特に岡崎三機関の学生と「つながる」ことができた。ここ岡崎を中心としてこれからも「つながる」活動を続けていきたい。

Shun Hashiyada

防衛大学校理工学専攻応用物理学科を卒業後、平成24年に総合研究大学院大学物理科学研究科構造分子科学専攻へ入学。光子科学研究領域岡本グループにて、貴金属微粒子の表面プラズモンに関する研究を近接場光学顕微鏡を使って取り組んでいる。



教員報告 分子研オープンキャンパス2012

2012年度担当教員 極端紫外光研究施設 准教授 木村 真一

2012年6月2日(土)に分子研オープンキャンパスを分子科学研究所において開催した。オープンキャンパスの参加者構成は、北海道から沖縄まで、学部学生26名、修士課程29名、博士課程2名、ポスドク以上の大学関係者6名、民間2名であり、合計65名(このほか分子研シンポのみの参加者が5名)で昨年度より大幅に増加した。当日は13:15より岡崎コンフェレンスセンター中会議室で、大峯所長、横山教授、青野教授、筆者の順番で分子研、総研大、共同利用、およびオープンキャンパスの説明を行い、明大寺・山手の両地区を14:00から17:00まで

各グループの実験室や研究室を自由に見学してもらった。天気には恵まれすぎて暑い一日であったが、見学には支障がなくて幸いであった。アンケートの回収率は昨年より悪く28%であった。参加情報の入手先は先生からの紹介67%、ポスター22%、ホームページ28%となっており、これまでと同様に、大学におけるOB等の分子研に縁のある先生方に支えられた形で成立していることを表していると思われる。実際、分子研OB・OGの教授が多くの指導学生を引き連れて見学していたのは印象的であった。また、大学共同利用機関のことを知っているのは

33%、総研大をよく知っていたのは11%と低く、知名度の向上がまず必要であると感じた。最後に、今回のオープンキャンパスの開催にあたりご協力頂いた皆様に、この場を借りて厚く御礼申し上げます。



**教員報告** 分子研シンポジウム2012

2012年度担当教員 理論・計算分子科学研究領域 准教授 柳井 毅

分子研シンポジウムが平成24年6月1日(金)午後から2日(土)午前にかけて岡崎コンファレンスセンター中会議室で開催されました。このシンポジウムは土曜日のオープンキャンパスに連動する企画として、平成19年から始まり今年が6回目になります。所内4研究領域から推薦を受け、分子研に縁のある6名の先生方に講演をお願いしました。お話をいただいた講師と講演題目は以下のとおりです(講演順に記載)。

**多田 博一** (大阪大学)

「単一分子エレクトロニクス：ようやくここまで」

**速水 真也** (熊本大学)

「分子間相互作用に基づいた金属錯体の機能探索～光スイッチング、液晶およびグラフェン材料の開発～」

**高口 博志** (広島大学)

「イオン化学の反応ダイナミクス研究」

**廣田 俊** (奈良先端科学技術大)

「タンパク質から成る超分子」

**杉田 有治** (理化学研究所)

「細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション」

**彦坂 泰正** (新潟大学)

「短波長自由電子レーザーによる原子分子科学の新展開」

全国の修士課程の学生を主な対象として、各講演者の研究分野を紹介する話、最新の研究の様子、将来展望などをお話しいただきました。参加登録者は所外56名で、所内参加者や当日に所外から来た人たちを含めると70名以上の聴衆が集まりました。所外の参加登録者の内訳は、学部生24名、修士課程19名、博士課程3名、大学の職員4名、その他6名でした。総研大への進学や共同研究の提案・申請を促すことを意図して、各講師の先生には分子研との関わりや接点について触

れて頂きました。各講師のお話には随所で分子研や総研大への愛着が感じ取られ、我々にとっても大いに励まされるものでした。また、高度な研究内容が分かり易く講義され、参加学生からは積極的な質問もありました。初日の夕方には、所内外の学生、研究者の交流を深めるための懇親会が行われました。参加者の皆さんには分子科学の多様性ととも、その基礎を支えている分子研の存在意義を感じ取って頂けたものと思います。これも周到な準備をされた講師の先生方のご尽力の賜物と思います。お忙しい中、ご協力いただいた講師の先生方にこの場をお借りして厚くお礼申し上げます。





受賞者の声

**Ying Zhang** (総合研究大学院大学物理科学研究科機能分子科学専攻)  
平成24年度(第3回)学長賞

Sokendai President's Award, started from 2009, is a research grant to those whose research for a doctoral degree is well planned or already being conducted and reflects Sokendai's philosophy of "high expertise and broad perspective" in research and education.

I was happy to be selected as a candidate of the award after submission of the application materials in the early March. For the final selection, I made an oral and a poster presentation on 11 April.

On that day, all the candidates gathered at Hayama campus. My presentation title was "NMR studies of structures, dynamics and interactions of oligosaccharides." Oligosaccharides play a variety of physiological and pathological roles in living systems. For better understanding the molecular basis of the mechanisms underlying oligosaccharide functions, detailed information is quite desirable on conformational dynamics of oligosaccharides and their interactions with

other biological macromolecules. However, strategies for conformational characterization of oligosaccharides remain to be established. In view of this situation, I have been developing novel methods to address this issue by applying nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy in conjunction with organic chemistry, theoretical science and molecular biology techniques.

After the oral presentation, we started the poster show. The president Prof. Takahata and professors asked us several questions and gave many useful advices. I was exciting when the president told me that my work is quite meaningful and suggested to extent the methodology to biological applications. The award ceremony was held in the next afternoon. The most excited thing was that all the nine candidates were offered the president award. The president gave the certification to us one by one and encouraged everyone to broaden the perspectives and aim for more



achievements in the future.

Finally, I extremely want to express my gratitude to Prof. Kato, Dr. Yamaguchi and all members in our group for their immense help and also to SOKENDAI, who offers students the honor and this kind of invaluable opportunity. Especially, I could benefit a lot from the selection process on how to prepare and design a project. Another point is that I can acquaint myself with more friends, which is one of the favorite.

平成24年度3月総合研究大学院大学修了学生及び学位論文名

専攻	氏名	博士論文名	付記する専攻分野	授与年月日
構造分子科学	稲熊 あすみ	内在性 mRNA を可視化する蛍光プローブの開発とβアクチン mRNA の細胞内局在解析	理学	H24. 3.23
	飯塚 拓也	強相関電子系の多重極限下電子構造	理学	H24. 3.23
機能分子科学	武藤 翼	両親媒性ピンサー型パラジウム錯体から成るベシクル触媒の創製と水中有機分子変換反応への応用	理学	H24. 3.23

総合研究大学院大学平成24年度(4月入学)新入生紹介

専攻	氏名	所属	研究テーマ
構造分子科学	中村 豪	生命・錯体分子科学研究領域	金属錯体のπ軌道制御に基づく光物質変換反応の設計
	徐 宏 (Xu Hong)	物質分子科学研究領域	Design and Functions of π-Electronic 2D Polymers
	伊東 貴宏	生命・錯体分子科学研究領域	錯体触媒ユニットを用いた新規物質変換反応場の開拓
	橋谷田 俊	光分子科学研究領域	新しい光学顕微鏡によるナノ物質の励起状態の探求
機能分子科学	伊藤 賢一	生命・錯体分子科学研究領域	クリック反応による高エナンチオ選択的反応の開発
	辻 裕章	生命・錯体分子科学研究領域	新規不斉有機分子触媒の開発と不斉反応への展開
	PATCHARIN KAEWMATI	分子スケールナノサイエンスセンター	Synthesis and studying application of triazasumanene compound
	岡部 佑紀	分子スケールナノサイエンスセンター	バッキーボウルの材料科学への展開
	梶原 朋子	岡崎統合バイオサイエンスセンター	アミロイドβの重合開始機構の構造生物学的基盤の解明

各種一覧

■分子科学フォーラム

回	開催日時	講演題目	講演者
第93回	平成24年5月11日	ノーベル化学賞を受賞して	鈴木 章 (北海道大学名誉教授)
第94回	平成24年7月11日	宇宙に終わりはあるか	村山 斉 (東京大学 国際高等研究所 カブリ数物連携宇宙研究機構 機構長)

■分子研コロキウム

回	開催日時	講演題目	講演者
第834回	平成24年3月22日	固体系量子情報の非局所化	樽茶 清悟 (東京大学大学院工学系研究科 教授)
第835回	平成24年5月18日	柔らかい多孔性配位高分子結晶 (PCP/MOF) の化学	北川 進 (京都大学大学院工学研究科 教授)
第836回	平成24年5月31日	Coupling Chemical Landscapes to the Vacuum Electromagnetic Field	Thomas W. Ebbesen (ISIS, University of Strasbourg and CNRS)
第837回	平成24年6月15日	Water in Chemistry and Biology : Unique Features of H <sub>2</sub> O	Biman Bagchi (Indian Institute of Science)
第838回	平成24年6月22日	Lessons from Nature about solar light harvesting	Gregory D. Scholes (University of Toronto)
第839回	平成24年7月20日	統計力学と熱力学の関係性 ~情報科学の視点を入れて~	鹿野 豊 (分子科学研究所 若手独立フェロー (特任准教授))

■人事異動 (平成23年11月2日~平成24年6月1日)

異動年月日	氏名	区分	異動後の所属・職名	現(旧)の所属・職名	備考
23.12.1	相澤 雅子	採用	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 事務支援員		
23.12.31	井村 敬一郎	辞職	名古屋大学 大学院理学研究科 助教	極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門 研究員	
23.12.31	神谷 由紀子	辞職	名古屋大学 大学院工学研究科 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 (分子科学研究所特別研究員/特任助教)	
24.1.1	SOMMER, Christian	採用	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門 研究員	ドイツ Max Planck Institute of Quantum Optics, Postdoctoral Researcher	
24.1.1	船木 雪乃	採用	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 技術支援員		
24.1.4	KAUSAS, Arvydas	採用	分子制御レーザー開発研究センター 先端レーザー開発研究部門 研究員	リトアニア EKSPLA Ltd. エンジニア	
24.1.16	NIE, Qingmiao	採用	理論・計算分子科学研究領域 (名古屋大学大学院工学研究科) 専門研究職員	名古屋大学 大学院工学研究科 外国人共同研究者	
24.1.26	LIU, Xiaoming	辞職	中国 Jilin 大学 Teacher	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 研究員 (IMS フェロー)	
24.2.1	GUO, Zhaoqi	名称付与	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 研究員 (IMS フェロー)	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 研究員	
24.2.15	吉田 紀生	辞職	九州大学 大学院理学研究院 准教授	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	
24.2.16	鹿野 豊	採用	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 特任准教授 (若手独立フェロー)	日本学術振興会 特別研究員 (PD)	
24.2.18	LIN, Jianbin	採用	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 研究員		
24.2.29	上野 隆史	客員除	(京都大学 物質-細胞統合システム拠点 准教授)	生命・錯体分子科学研究領域 生命・錯体分子科学研究部門 客員准教授	
24.2.29	PADHI, Sumanta Kumar	辞職	韓国 Ewha Womans University, Department of chemistry and Nano Sciences, Center for Biomimetic Systems Postdoctoral fellow	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 研究員	
24.2.29	山中 優	辞職	奈良先端科学技術大学院大学 特任助教	岡崎統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域 研究員	
24.3.1	石崎 章仁	採用	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 特任准教授 (若手独立フェロー)	米国 University of California, Berkeley, Department of Chemistry, Computational Biologist Postdoctoral Fellow	
24.3.31	永瀬 茂	定年退職	京都大学 福井謙一記念研究センター シニアフェロー	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 教授	
24.3.31	平田 文男	定年退職	立命館大学 生命科学部 客員教授	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	
24.3.31	田中 晃二	定年退職	京都大学 特任教授	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 教授	

各種一覽

異動年月日	氏名	区分	異動後の所属・職名	現(旧)の所属・職名	備考
24. 3. 31	吉澤一成	客員了	(九州大学 先導物質化学研究所 教授)	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 客員教授	
24. 3. 31	杉田有治	客員了	(理化学研究所 基幹研究所 准主任研究員)	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 客員教授	
24. 3. 31	兒玉了祐	客員了	(大阪大学 大学院工学研究科 教授)	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員教授	
24. 3. 31	高橋俊晴	客員了	(京都大学 原子炉実験所 准教授)	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員准教授	
24. 3. 31	上野貢生	客員了	(北海道大学 電子科学研究所 附属ナノテクノロジー研究センター 准教授)	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員准教授	
24. 3. 31	太田信廣	客員了	(北海道大学 電子科学研究所 教授)	物質分子科学研究領域 物質分子科学研究部門 客員教授	
24. 3. 31	西原寛	客員了	(東京大学 大学院理学系研究科 教授)	生命・錯体分子科学研究領域 生命・錯体分子科学研究部門 客員教授	
24. 3. 31	大山大	客員了	(福島大学 共生システム理工学類 准教授)	生命・錯体分子科学研究領域 生命・錯体分子科学研究部門 客員准教授	
24. 3. 31	見附孝一郎	辞職	城西大学 理学部 教授	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門 准教授	
24. 3. 31	米満賢治	辞職	中央大学 理工学部 教授	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	
24. 3. 31	大津英揮	辞職	京都大学 特定助教	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 助教	
24. 3. 31	中村永研	辞職	名古屋大学 全学技術センター 技術専門職員	技術課 光技術班 極端紫外光技術三係長	
24. 3. 31	寺内かえで	辞職		技術課 学術支援班 学術支援係員	
24. 3. 31	SUBRAMANIAN, Karthikeyan	退職		理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 専門研究職員	
24. 3. 31	ZHOU, Xin	退職	中国 Harbin Institute of Technology, Associate Professor	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	
24. 3. 31	丸山豊	退職	韓国 Sookmyung Women's University, Research Professor	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 専門研究職員	
24. 3. 31	PHONGPHANPHANEE, Saree	退職		理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 専門研究職員	
24. 3. 31	梅田宏明	退職	筑波大学 計算科学研究センター 研究員	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 専門研究職員	
24. 3. 31	小林正人	退職	早稲田大学 高等研究所 助教	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 専門研究職員	
24. 3. 31	SINDHIKARA, Daniel Jon	退職	立命館大学 生命科学部 博士研究員	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 専門研究職員	
24. 3. 31	櫻庭俊	退職	日本原子力開発機構	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 専門研究職員	
24. 3. 31	榊茂好	退職	京都大学 福井謙一記念研究センター リサーチリーダー	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 研究員	
24. 3. 31	GUO, Jingdong	退職	京都大学 福井謙一記念研究センター 特定研究員	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 研究員	
24. 3. 31	矢ヶ崎琢磨	退職	岡山大学 大学院自然科学研究科 特任助教	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 研究員	
24. 3. 31	中根大輔	退職	名古屋工業大学 研究員	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 研究員	
24. 3. 31	今宏樹	退職		分子スケールナノサイエンスセンター ナノ分子科学研究部門 研究員	
24. 3. 31	LUO, Guangfu	退職	米国 University of Wisconsin-Madison, Postdoc 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 研究員(IMS フェロー)	
24. 3. 31	西岡圭太	退職	中央大学 理工学部 研究員	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 研究員(IMS フェロー)	
24. 3. 31	GUO, Zhaoqi	退職	大阪大学 大学院基礎工学研究科 研究員	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 研究員(IMS フェロー)	
24. 3. 31	河尾真宏	退職		分子スケールナノサイエンスセンターナノ分子科学研究部門 研究員(IMS フェロー)	
24. 3. 31	小林克彰	退職	京都大学 物質-細胞統合システム拠点 特定助教	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 専門研究職員(分子科学研究所特別研究員/特任助教)	



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
24. 3. 31	鳥居世菜	退職		生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 技術支援員	
24. 3. 31	宮下治美	退職		技術課 技術支援員	
24. 3. 31	木村克美	退職		史料編纂室 事務支援員	
24. 3. 31	末武康美	退職		理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 事務支援員	
24. 3. 31	嶋田ゆう	退職		理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 事務支援員	
24. 3. 31	山口ゆみ子	退職		生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 事務支援員	
24. 3.31	眞壁幸樹	辞職	山形大学 大学院理工学研究科 准教授	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	
24. 3.31	大舘彰道	退職	京都大学 化学研究所 博士研究員	岡崎統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域 研究員	
24. 3.31	BOBUATONG, Karan	退職	タイ Kasetsart University, Faculty of Science, Department of Chemistry	計算科学研究センター 研究員	
24. 4. 1	山本浩史	採用	物質分子科学研究領域 電子物性研究部門 教授	理化学研究所 専任研究員	
24. 4. 1	秋山修志	採用	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門 教授	名古屋大学 大学院理学研究科 准教授	
24. 4. 1	村橋哲郎	採用	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 教授	大阪大学 大学院工学研究科 准教授	
24. 4. 1	許斐太郎	採用	極端紫外光研究施設 電子ビーム制御研究部門 助教		
24. 4. 1	永瀬茂	称号付与	分子科学研究所 名誉教授		
24. 4. 1	平田文男	称号付与	分子科学研究所 名誉教授		
24. 4. 1	田中晃二	称号付与	分子科学研究所 名誉教授		
24. 4. 1	齊藤真司	併任	理論・計算分子科学研究領域 研究主幹	(理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 教授)	
24. 4. 1	見附孝一郎	兼委任嘱	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門 教授(兼任)	城西大学 理学部 教授	
24. 4. 1	長谷川淳也	客員嘱	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 客員准教授	京都大学 福井謙一記念研究センター 准教授	
24. 4. 1	安藤耕司	客員嘱	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 客員准教授	京都大学 大学院理学研究科 准教授	
24. 4. 1	森下徹也	客員嘱	理論・計算分子科学研究領域 理論・計算分子科学研究部門 客員准教授	独立行政法人 産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門 研究員	
24. 4. 1	野田進	客員嘱	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員教授	京都大学 大学院工学研究科 教授	
24. 4. 1	伊藤敦	客員嘱	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員教授	東海大学 工学部原子力工学科 教授	
24. 4. 1	坪内雅明	客員嘱	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員准教授	日本原子力研究開発機構 研究副主幹	
24. 4. 1	朝倉哲郎	客員嘱	物質分子科学研究領域 物質分子科学研究部門 客員教授	東京農工大学 工学部 教授	
24. 4. 1	笹井宏明	客員嘱	生命・錯体分子科学研究領域 生命・錯体分子科学研究部門 客員教授	大阪大学 産業科学研究所 教授	
24. 4. 1	植村卓史	客員嘱	生命・錯体分子科学研究領域 生命・錯体分子科学研究部門 客員准教授	京都大学 大学院工学研究科 准教授	
24. 4. 1	須藤雄気	客員嘱	生命・錯体分子科学研究領域 生命・錯体分子科学研究部門 客員准教授	名古屋大学 大学院理学研究科 准教授	
24. 4. 1	田代基慶	採用	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 特任助教(分子科学研究所特別研究員)	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 専門研究職員(分子科学研究所特別研究員/特任助教)	
24. 4. 1	西山嘉男	採用	光分子科学研究領域 光分子科学第一研究部門 特任助教(分子科学研究所特別研究員)	光分子科学研究領域 光分子科学第一研究部門 専門研究職員(分子科学研究所特別研究員/特任助教)	
24. 4. 1	谷生道一	採用	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 特任助教(分子科学研究所特別研究員)	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 専門研究職員(分子科学研究所特別研究員/特任助教)	
24. 4. 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 特任助教(分子科学研究所特別研究員)	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門 専門研究職員(分子科学研究所特別研究員/特任助教)	

各種一覽

異動年月日	氏名	区分	異動後の所属・職名	現(旧)の所属・職名	備考
24. 4. 1	野田 真史	採用	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 特任研究員	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 専門研究職員	
24. 4. 1	石村 和也	採用	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 特任研究員	神戸大学 大学院システム情報学研究科 助教	
24. 4. 1	西澤 宏晃	採用	理論・計算分子科学研究領域(早稲田大学理工学術院勤務) 特任研究員		
24. 4. 1	水口 朋子	採用	理論・計算分子科学研究領域(京都大学化学研究所勤務) 特任研究員	日本学術振興会 特別研究員	
24. 4. 1	榮 慶丈	採用	理論・計算分子科学研究領域(名古屋大学大学院理学研究科勤務) 特任研究員	理論・計算分子科学研究領域(名古屋大学大学院理学研究科勤務) 専門研究職員	
24. 4. 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) 特任研究員	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	
24. 4. 1	Nie, Qingmiao	採用	理論・計算分子科学研究領域(名古屋大学大学院工学研究科) 特任研究員	理論・計算分子科学研究領域(名古屋大学大学院工学研究科) 専門研究職員	
24. 4. 1	脇 稔	採用	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 特任研究員	株式会社 豊田中央研究所 客員研究員	
24. 4. 1	才田 隆広	採用	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 特任研究員	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 研究員	
24. 4. 1	浜坂 剛	採用	生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門 特任研究員	生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門 専門研究職員	
24. 4. 1	常包 正樹	採用	分子制御レーザー開発研究センター先端レーザー開発研究部門 特任研究員	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	
24. 4. 1	佐藤 庸一	採用	分子制御レーザー開発研究センター先端レーザー開発研究部門 特任研究員	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	
24. 4. 1	BHANDARI, Rakesh	採用	分子制御レーザー開発研究センター先端レーザー開発研究部門 特任研究員	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	
24. 4. 1	飯田 健二	採用	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 研究員(IMS フェロー)		
24. 4. 1	湯澤 勇人	採用	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門 研究員(IMS フェロー)		
24. 4. 1	櫻井 理恵	採用	分子スケールナノサイエンスセンターナノ分子科学研究部門 研究員(IMS フェロー)		
24. 4. 1	小若 泰之	採用	光分子科学研究領域 光分子科学第一研究部門 研究員		
24. 4. 1	永長 誠	採用	生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門 研究員		
24. 4. 1	稲熊 あすみ	採用	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門 研究員		
24. 4. 1	新井 秀実	採用	極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門 研究員		
24. 4. 1	杉石 露佳	採用	分子スケールナノサイエンスセンターナノ分子科学研究部門 研究員		
24. 4. 1	黒田 康弘	採用	分子スケールナノサイエンスセンターナノ分子科学研究部門 研究員		
24. 4. 1	Wu, Huijun	採用	光分子科学研究領域 光分子科学第一研究部門 技術支援員		
24. 4. 1	LIU, Ke	採用	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 技術支援員		
24. 4. 1	金池 真理	採用	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 技術支援員		
24. 4. 1	若林 かおり	採用	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 技術支援員		
24. 4. 1	三浦 崇宏	採用	分子スケールナノサイエンスセンターナノ分子科学研究部門 技術支援員		
24. 4. 1	LIN, Jianbin	称号 付与	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 研究員(IMS フェロー)	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 研究員	
24. 4. 1	SECHRIST, Jeremiah S	所属換	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 研究支援員	基礎生物学研究所 生殖細胞研究部門 研究支援員	
24. 4. 1	杉戸 正治	職名 変更	技術課 技術支援員	技術課 特定技術職員	
24. 4. 1	清水 厚子	所属換	物質分子科学研究領域 電子物性研究部門 事務支援員	光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門 事務支援員	

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
24. 4. 1	中村 敬	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 特任助教(分子科学研究所特別研究員)	岡崎統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域 専門研究職員(分子科学研究所特別研究員/特任助教)	
24. 4. 1	澤井 仁美	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 特任助教(分子科学研究所特別研究員)	岡崎統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域 専門研究職員(分子科学研究所特別研究員/特任助教)	
24. 4. 1	竹中 健朗	採用	岡崎統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域 特任研究員	岡崎統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域 専門研究職員	
24. 4. 1	石谷 隆広	採用	計算科学研究センター 特任専門員	計算科学研究センター専門研究職員	
24. 4. 1	柳 浩太郎	採用	岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 研究員(IMS フェロー)		
24. 4.16	稲垣 恵子	採用	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 事務支援員		
24. 4.16	山崎 由実	採用	光分子科学研究領域 光分子科学第一研究部門 事務支援員		
24. 4.16	CONG, Zhiqi	称号変更	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	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(IMS フェロー)	
24. 4.26	CHALUPSKY, Jakub	採用	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 研究員(IMS フェロー)		
24. 5. 1	浜坂 剛	採用	生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門 助教	生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門 特任研究員	
24. 5. 1	藤原 正規	採用	光分子科学研究領域 特任助教		
24. 5. 1	森 義治	採用	理論・計算分子科学研究領域 特任助教	日本学術振興会 特別研究員(名古屋大学 大学院理学研究科)	
24. 5. 1	飯塚 拓也	採用	極端紫外光研究施設 光物性測定器開発研究部門 研究員		
24. 5. 1	金子 靖	採用	分子スケールナノサイエンスセンター 研究員		
24. 5. 1	陌間 梢	採用	分子スケールナノサイエンスセンター ナノ分子科学研究部門 事務支援員		
24. 5. 1	谷分 麻由子	所属換	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 事務支援員	分子スケールナノサイエンスセンター ナノ分子科学研究部門 事務支援員	
24. 5.16	早出 彩	採用	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 特任研究員	ドイツ Ruhr Iniversitat Bochum 化学部 ポスドク研究員	
24. 5.16	WANG, Heng	採用	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 特任研究員		
24. 5.16	阿部 仁美	所属換	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門 事務支援員	物質分子科学研究領域 電子物性研究部門 事務支援員	
24. 5.31	西條 純一	辞職	明星大学 理工学部 准教授	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 助教	
24. 5.31	飯塚 拓也	退職	分子科学研究所 特別協力研究員	極端紫外光研究施設 光物性測定器開発研究部門 研究員	
24. 6. 1	安井 裕子	採用	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 事務支援員		
24. 6. 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 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(特任助教)	



## 編集後記

今回のレターズは、とても盛りだくさんです。

まず、所内外の多くの我々の仲間への受賞がありました（もれているものがあるかも知れませんが、ご一報いただけると幸いです）。友人、知人として嬉しく、心よりお喜び申し上げます。受賞や研究成果に関して、分子研ホームページの「分子研アクティビティ」にも多くの情報が掲載されています。お時間があれば、そちらもご覧ください。

また、多くの異動もありました。永瀬教授、平田教授、田中教授が定年退職されました。一方、石崎博士、鹿野博士が特任准教授（若手独立フェロー）として、さらに新年度になって、山本教授、秋山教授、村橋教授をはじめとする多くの新しいメンバーが分子研に加わりました。分子研に着任以来、居室の外の桜の花が春の訪れを教えてくれていましたが、今年は人の異動が新しい春の訪れを教えてくれたような気がしました。新しい人との出会いは嬉しくかつ刺激的であり、さらに、自分をも若返らせてくれるのではないかと錯覚させてくれます。この錯覚がつづきますように。

編集担当 齊藤 真司

## 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. 66

## 分子研レターズ

発行日 平成24年9月（年2回発行）

発行 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構  
分子科学研究所  
分子研レターズ編集委員会  
〒444-8585  
愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38

編集 小 杉 信 博（委員長）  
齊 藤 真 司（編集担当）  
大 迫 隆 男  
加 藤 晃 一  
木 村 真 一  
江 東 林  
西 村 勝 之  
藤 貴 夫  
古 谷 祐 詞  
柳 井 毅  
原 田 美 幸（以下広報室）  
鈴 木 さとみ  
中 村 理 枝

デザイン 原 田 美 幸

印刷 株式会社コムラ

