

分子研レターズ

VOL. **67**
MARCH 2013
ISSN 0385-0560

●巻頭言

Let's make some noise!

柳田 敏雄 [大阪大学・特任教授/分子科学研究所 研究顧問]

●レターズ

グローバル化時代における 分子科学とは—一分子研への期待—

菅原 正 [神奈川大学理学部・特任教授]

●分子科学の最先端

NMRによる 膜タンパク質の解析

西村 勝之 [物質分子科学研究領域・准教授]

最小レポータータンパク質の構築を目指した
組換えガウシアルシフェラーゼの解析と改変

黒田 裕 [東京農工大学工学部生命工学科・准教授]
Wu Nan [東京農工大学工学部生命工学専攻]

発光性配位高分子の複合化

柘植 清志 [富山大学大学院理工科学研究部・教授]

磁場で固まり方を制御する：フェロセン系イオン液体の磁場応答

持田 智行 [神戸大学大学院理学研究科・教授]

新しい自由エネルギー計算手法の開発

森下 徹也 [産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門]

「第1回分子科学若手シンポジウム」及び
「第52回分子科学若手の会夏の学校講義内容検討会」の開催報告

山崎 馨 [東北大学大学院理学研究科化学専攻]

巻頭言

01 Let's make some noise!

● 柳田 敏雄 [大阪大学大学院生命機能研究科 特任教授・分子科学研究所 研究顧問]

レターズ

02 グローバル化時代における分子科学とは
—分子研への期待— ● 菅原 正 [神奈川大学理学部化学科 特任教授]

分子科学の最先端

04 NMRによる膜タンパク質の解析

● 西村 勝之 [物質分子科学研究領域 准教授]

IMSニュース

08 分子研シンポジウム “Molecular Functional Dynamics: Fundamental to Life Activity”

09 第72回岡崎コンファレンス “Ultimate control of coherence”

10 受賞者の声

12 国際研究協力事業報告

IMSカフェ

13 行事報告 —— 分子科学研究所一般公開2012

15 分子研出身者の今 —— 長尾 宏隆 / 山門 英雄 / 小松崎 民樹

19 分子研出身者の今 受賞者紹介・受賞者の声

22 分子研を去るにあたり

23 外国人研究者の印象記

24 新人自己紹介

共同利用・共同研究

26 共同利用研究ハイライト

最小レポータータンパク質の構築を目指した組換えガウシアルシフェラーゼの解析と改変

黒田 裕 [東京農工大学工学部生命工学科 准教授] Wu Nan [東京農工大学工学部生命工学専攻 博士課程]

発光性配位高分子の複合化 柘植 清志 [富山大学大学院理工科学研究部 教授]

磁場で固まり方を制御する：フェロセン系イオン液体の磁場応答 持田 智行 [神戸大学大学院理学研究科 教授]

新しい自由エネルギー計算手法の開発 森下 徹也 [産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門]

第1回分子科学若手シンポジウム]及び
「第52回分子科学若手の会夏の学校講義内容検討会」の開催報告

山崎 馨 [東北大学大学院理学研究科 博士課程後期1年]

35 施設だより

37 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

38 運営に関わって —— 沖田 喜一 [国立天文台岡山天体物理観測所 主任研究技師]

39 関連学協会等との連携 —— 計算分子科学研究拠点 (TCCI) 活動報告
インドとの国際連携に向けて

分子研技術課

41 新しい加工技術への取り組み～フォトリソグラフィー～ 高田 紀子 [機器開発技術班]

大学院教育

43 コラム —— ケンブリッジ滞在記 望月 建爾 [総合研究大学院大学 機能分子科学専攻]

44 イベントレポート

46 受賞者の声

47 修了学生及び学位論文名

48 各種一覧

Let's make some noise!

分子研の顧問になってほしいと、2年ほど前に茅先生からお話を頂いた。私にとって分子研と言えば、長倉先生、井口先生ら巨人の名前が頭に浮かび噂を聞いていただけてお会いした訳でもないのですが、直立不動最敬礼！という感じです。そのような研究所の顧問に私のような品のない生物物理で育った人間がなれる訳が無いと思いました。それでも、親しくして頂いている茅先生から大丈夫、あんたのようなええ加減なところも、堅いイメージの分子研には必要だからと説得され分不相応を承知の上でお引き受けしました。所長が研究会などでお話する機会があり、あまりお堅い方ではないように見えた(間違っていたらお許してください)大峯先生であったことも理由でした。

分子研も21世紀に入ってご多分に漏れず新しい研究方向を模索するフェーズにあるようです。20世紀は量子科学、シリコン(計算)サイエンス、そして遺伝子工学などの進展により科学技術は飛躍的に進みました。このように、大成功を納めた後、これから21世紀はどうしたらいいのかと言う事でしょう。大成功の後にはそれを引きずる傾向にあるというか、それから脱却するのは勇気がいります。20世紀に急成長して来たソニー、パナソニック、シャープなど電機メーカーがそれを引きずり、21世紀になって将来像を持てず苦しんでいます。ステイブ ジョブズのような普通でない人物が必要なかもしれません。

科学分野でもステイブ ジョブズのような人物が多く現れる環境を創る事が必要かもしれません。普通の状態が極めて安定ならば、おそらく、普通の人物しか生まれない。普通の状態が少し不安定でゆらいでいて、たまたま普通から飛び出る人物が

現れて大きな変化をもたらすのではないのでしょうか。最近亡くなられた森光子さんが、“私の人生はつらい事が多かった。それが役者には良かったと思う。幸せいっぱい役者の演技なんかおもしろくもなんでもないでしょ”と言っておられた。納得。普通の状態にある人が普通でない事はできないと言う事でしょう。そういえば、小説家の寂聴や吉本ばなな、そして第三代市川猿之助も、家庭をすてて非日常的な環境に自らをおいて、身を奮い立たせています。先日東南アジアからきた大学院生と、日本の若者は元気もおもしろさも無いと言う話しになって、彼の意見はそれで当然と言う事でした。なぜなら、彼の国では働かなければ死を意味するけど、日本では職がない、パーマメントでないと文句言っても何とかなる、ユートピアみたいな(超安定な)ところだからと言っていました。僕でも日本人ならのんびりすると。

では、分子研はどうしたら大きな変革が生まれるのでしょうか？ 一応安定な日本の社会で安定でない環境を如何に創るかです。研究者個人に皆家庭を捨てて非日常的な生活を強いるなどと言う大きな変化は無理です。生物の戦略にヒントがあるかもしれません。生物は、分子レベルでは熱ノイズを、細胞や個体のレベルになるとわざわざゆらぎ(ノイズ)をエネルギーを使って生み出し、システムを揺さぶって少し不安定な状態もつくって、突然の変化や予期しない変化にも柔軟に対応しています。分子研に閾値以下の皆がなんとなく感じる程度のゆらぎで日常的にざわざわとした環境をつくることならいろいろできそうです。私もノイズくらいなら入れることができるかもしれません。

Let's make some noise!

柳田 敏雄

大阪大学大学院生命機能研究科 特任教授
分子科学研究所 研究顧問



やなぎだ・としお

大阪大学基礎工学部生物工学科教授、同大学医学部第一生理学教授、同大学院生命機能研究科研究科長、同大学院生命機能研究科教授を経て、現在同大学院生命機能研究科特任教授。2011年～理化学研究所 生命システム研究センター長、同HPCI計算生命科学推進プログラム ディレクター、大阪大学/情報通信研究機構 脳情報通信融合研究センター長を兼務。

新技術事業団柳田身体運動子プロジェクト総括責任者、新技術事業団1分子過程プロジェクト総括責任者、戦略創造「ソフトナノマシプロジェクト」研究代表者、戦略創造「生命現象の解明と応用に資する新しい計測・分析・基盤技術」研究総括などを歴任。

専門分野は生物物理学。主な研究テーマは生体分子の1分子計測・生体分子機械の動作原理・脳記憶のダイナミズムに関する研究など。

1989年第7回大阪科学賞、1990年塚原仲見記念賞、1992年 Matsubara Lecture Award、1994年第25回内藤記念科学振興賞、1998年日本学士院賞恩賜賞、1999年朝日賞、2010年 The US Genomic Awardなどを受賞。

菅原 正 神奈川大学理学部化学科 特任教授

グローバル化時代における 分子科学とは —分子研への期待—

すがわら・ただし

1974年東京大学大学院 理学系研究科 博士課程修了、1978年分子科学研究所助手、1986年東京大学教養学部 助教授、1991年 東京大学教授を経て、2010年複雑系生命システム研究センター特任研究員、現在に至る。



我が国の分子科学が、先輩方の努力により世界のトップレベルにあることは疑う余地もない。そして、今、我が国は、独創性・先見性のある研究分野を創出し、世界をリードする役割を担う立場にある。しかしこの間、グローバル化の流れ、世界的な経済の危機、原子力発電の是非、日本の産業構造の変革といった、我々の足元を揺るがすような難問が山積した。分子科学者は、これらの動きに危機感を抱きつつも、分子科学を一層推進する中で懸案を解決していく責務がある。グローバル化した現代において、分子科学が何を考えなら進むべきかについて私見を述べたい。

グローバル化で大事なこと

近年グローバル化の重要性が至るところで喧伝されている。世界各国が一体となり、現代社会が抱えている懸案を互いに協力しつつ解決すること、そのために重要な情報を共有することなど良い点は多々あるが、行き過ぎると弊害も生まれてくる。いわば世界が連結管で繋がれたことで、アツという間に世界の水準の均一化が図られ、悪く言えば最低の水準で平均化されかねない。グローバル化とは一体何であろうか。グローバル化とは、すべての国の思想や、言語や、文化や価値

観が同じになることではない。むしろ各国が、—究極的には各個人が—自己を確立し、個性を磨くことを前提としており、それがあって初めて各国が門戸を開いて、他の国の人々を受け入れ、彼らの個性を尊重し、その長所を学べることに意義があるのであろう。明治維新により日本の文化が世界の眼に曝された時、驚きをもって迎えられたのは、葛飾北斎の富嶽三十六景や、尾形光琳の紅白梅図屏風であり、能、狂言、歌舞伎であったのは何故だったかを再考する必要がある。

では学問の世界におけるグローバル化とは、どのようなものであろうか。2013年の初頭に当たり日本が発信源となる学問のグローバル化の夢を語ろうではないか。現代の分子科学として何を日本から発信すべきかを熟慮した時、それぞれの立場や考え方は異なっていたとしても、期せずして方向性や価値観を同じくする研究者が現れることは、むしろ自然な流れと言える。さらに日本発の流れに、海外の研究者が国境を越え自から集結するとき、学問のグローバル化が達成したといえよう。そこで本当に求められるのは、個々の研究者の個性である。先進的分野で、オリジナリティのある成果を示すことこそが、真のグローバル化された学問の中での研究者のあり方である。

このような仕組みを実現するには、分子研のような影響力のある研究機関が、将来性のある研究集団と緩やかな連携を推し進め、新しい研究の流れをつくる触媒の役を果たすことが不可欠だろう。

分子科学の拓く道

それでは、これからの分子科学はどのような方向に進むのだろうか？ 孤立分子から始まり、原子・分子クラスター、分子性結晶などを対象に発展してきた分子科学は、計測方法（フェムト秒レーザー、放射光、原子・分子線など）や理論計算（量子力学、統計熱力学、高度シミュレーションなど）の著しい進歩と相まって著しい発展を遂げ、いまや生体高分子を対象とするほどに進化している。最近では、ナノ粒子、界面やコロイドなど、メゾスコピック領域での原子・分子の集団挙動が新しい分野として発展した。さらに、これまで分子科学の対象とされることの少なかった新しい領域に、果敢に踏み出していくことも重要であろう。

これまでの化学では、ダイナミクスに階層性がある場合でも、議論がそれぞれの階層内で閉じており、階層間を繋ぐ議論がなかった。生命現象に代表される自然界のダイナミクスを理解するには、階層性をもつダイナミクスの階層間の伝達

の仕組みを、分子科学として解明することが重要である。一方、今や自然界のダイナミクスを、従来型の物理・化学だけで理解するのは困難となりつつある。非平衡・開放系の物理・化学あるいは**複雑系の理論**の適用が不可欠である。可塑的パターン形成、自律運動性、階層間の刺激（情報）伝達、フィードバックの仕組みなどを創発していく非平衡・開放系に対して、分子科学として真正面から向き合っていく必要があるだろう。

私の歩んできた道—分子から分子集合体そして分子システムへ—

一般論のみを語っているのでは、このコラムの責任を果たしていないくらいがあるので、あえて私が何を目指してきたかを少し紹介させていただく。大学を卒業後、アメリカでの2年半のポストドクを終え、研究棟が出来たばかりの岡崎の分子研に始めて着任した。その始まりの朝、玄関にある所員の名札の横に「分子集団研究系」や「分子集団動力学部門」などといった名前を見たときの驚きは今も忘れない。当時、アメリカも含め大学や研究所で、このような講座の名前は見たことも聞いたこともなかった。そのとき脳裏には、芋虫の集団が一斉にもぞもぞと蠢いている風景が思い浮かび、「えらいところに来てしまった」との思いを抱いたことを、昨日のこのように覚えている。このとき受けた強烈な体験が、有機化学者であった筆者を、機能性分子の化学、分子集合体の化学、そして分子システム化学へと、駆り立てて行った原動力だった気がしている。

分子は、それ単独でも多様な性質を示すが、それらが集まって一つのシステムを形作ることで、想像も出来ない複雑な表情を見せるようになる。筆者は、「制御された分子配列をもつ集合体において、要素間の協同効果により巨視的な物性現象や、生命現象をも彷彿させるダイナミクスが生じるシステム」を、分子システ

ムとして定義し、分子より階層の上だったソフトマター（高分子、微粒子、膜など）を利用して、可塑性、回帰性、自己生産、自律運動といった、生命現象にも通じる階層の高い現象を実現してきた（*Mol. Sci.* 4 A0033 (14 pages)「分子科学の挑戦—可塑的応答・自律運動・自己生産する超分子システム—」参考）。

このような研究を進めていくには、専門分野を超えた学際的連携が不可欠である。分子研の後に着任した東京大学の総合文化研究科・教養学部においては、数理、物理、化学、生物、認知科学の研究者が一堂に会し、垣根を越えて生命システムを研究する「複雑系生命科学研究センター」の設置に携わった。私がセンターのモデルとしたのは設立時の分子研であり、分野間の壁が低く学際的研究が進めやすい環境がある駒場ならそれが可能だと思ったからである。

ここで、分子科学の若い研究者の方々に、私の体験を通じて分子科学における学際研究とは何かについてコメントしたい。学際研究というのは、決して学問分野の際（きわ）を研究するものではない。分子科学の分野で高い専門性をもつ研究者が、未開拓分野に飛び込み、自らの専門を活かして、分野を切り開く知的ダイナミズムそのものをいうのだと思う。

イノベーションという言葉で思うこと—基礎科学から応用科学への連環の仕組み—

最後に、最近良く耳にする「イノベーション」という考え方について私見を述べたい。この言葉を聞いた当初、私はイノベーションとは、字義通り画期的研究を立ち上げることであったと思っていた。しかしその後、世に言う「イノベーション」とは、大学の研究室が企業に替わって製品化に直結しうる研究をせよ、ということらしいことに気づいた。思えば、かつて隆盛を誇った化学系の企業の基礎研究所が、バブル崩壊以降次々と閉鎖されるのと時を同じくして、巷間で「イノ

ベーション」という言葉が使われ始めた。もちろん、基礎研究といえども遠い将来人間社会に貢献することが前提になっている。しかし、応用研究を越えて製品化に繋がるような研究をするには無理があり、研究スタイルにひずみが生じかねない。ひいては学生の教育にも影響が及ぶことになろう。

そこで、この「イノベーション」とつきあっていくために、二つのことを提起したい。第一は、研究者の基礎研究に対する一層の覚悟である。「基礎」のお題目の下に、自分の興味（趣味）の赴くままに行う研究に埋没するのではなく、将来の最先端の研究の基盤確立を常に意識すべきである。何も無い土壌の上に新しい分野を作り上げてこそ、本当の基礎と言えよう。成果が挙がるまでは、周囲の無関心や、研究費の確保に苦勞するかもしれない。しかしそれを乗り越えたところに真の研究者の喜びがある。と同時に、安易なイノベーションより遥かに高い達成感が得られるだろう。

第二は、基礎研究者も応用研究に対して応分の意識をもち、基礎研究、応用研究、製品開発研究に亘る双方向的な情報の流れを構築することである。液晶を見つけたライニッツァーやレーマンが、そのとき自分の目の前のあった物質が後に人類の歴史を変える素材になると、気がついていただろうか？ 広い人的な情報ネットワークを張ることで、基礎研究者も過度の負担を負うことなく、開発研究の効率化や産業創出に貢献できるのではなかろうか。研究している本人が意識しないところで発芽しつつあるブレイクスルーの芽に、花を咲かせることが出来るかも知れない。少なくとも、日本の分子科学にはその位の底力があると信じている。

将来日本の分子科学が一層発展をとげ、分子研の主導のもと世界をリードし続けていくことを願いつつこの稿を終えたい。拙稿が前書きに述べた課題を考える上での一助になれば幸いである。

NMRによる 膜タンパク質 の解析

西村 勝之

物質分子科学研究領域

分子機能研究部門 准教授



にしむら・かつゆき

1993年兵庫県立姫路工業大学 理学部(現・兵庫県立大学) 卒業、1999年同大学大学院 理学研究科博士課程終了・理学博士。米国立高磁場研究所、フロリダ州立大学博士研究員、横浜国立大学工学研究院助手を経て、2006年4月より現職。

はじめに

NMRは、核のまわりの局所構造や運動性に関する情報を、原子分解能で非破壊的に得ることができる分光法である。特に固体NMRが対象とする試料では、溶液状態では消失して観測できない特定の異方的内部相互作用を観測することにより、分子の配向や精密原子間距離情報を得られる特徴がある。我々は固体NMRを研究手段として、有機低分子、無機材料などの分子材料から、膜タンパク質などの生体高分子を研究対象とし、その解析に有用な測定法、ハードウェアの開発、および分子のキャラクタリゼーションを試みてきた。今回は主に生体中で脂質膜と相互作用して機能を発現する膜タンパク質を対象とした研究について紹介する。

生理的条件下の膜貫通型タンパク質の構造解析

現在の溶液NMRでは、高磁場化と緩和時間の遅い成分を観測する手法の開発により、膜タンパク質をミセルで可溶化した疑似脂質膜試料の取り扱いが可能である。しかし、ミセルは脂質二重膜ではなく、脂質膜の疎水的環境を近似しているに過ぎない。固体NMRでは試料の回転相関時間の上限は存在せず、膜貫通型タンパク質の構造解析では、その機能が発現するベシクルなどの脂質二重膜中に膜タンパク質が再構成された試料を用いる。非配向試料では図1に示すように、一般に脂質二重膜が層状に組み込まれたマルチラメラベシクルを遠心沈降させたペレット試料を用いる(図1(a))。一方、配向試

料は主に2種類存在する:(1) 薄いガラス片上に上述のマルチラメラベシクルを添加して、構成脂質の液晶ゲル相転移点以上の温度でインキュベートするなどの方法により、ガラス平面上に幾重にも脂質膜層が積み重なった配向試料を調製する方法(図1(b))、および(2) 特定の飽和長鎖脂質と短鎖脂質を適切な割合で混合して水和し、磁場中で長鎖脂質の液晶ゲル相転移点以上の温度にすることにより生じるディスク状の自発磁場配向膜Bicelleを用いる方法である(図1(c))。後者の場合、良好な配向が得られる測定温度範囲は、一般に脂質の相転移温度から上約10℃という制限が付く。

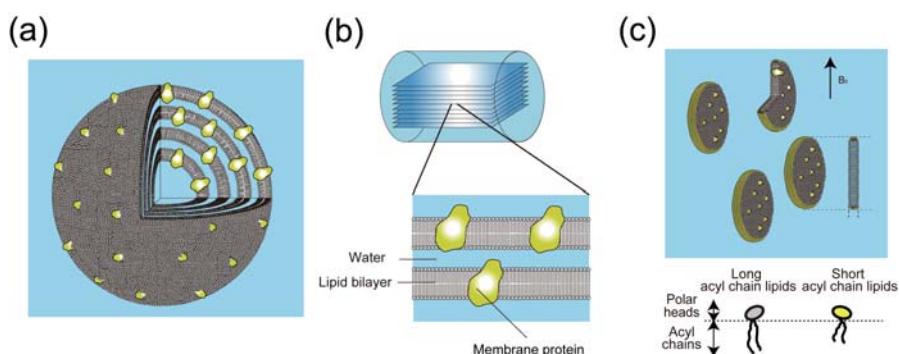


図1 脂質膜試料の模式図。(a) マルチラメラベシクルに再構成された非配向膜タンパク質試料。(b) ガラス薄片上に形成された脂質膜層に再構成された配向膜タンパク質試料。(c) 自発磁場配向膜であるBicelle膜中に再構成された配向膜タンパク質試料。黄緑色：膜貫通型タンパク質。灰色：長鎖リン脂質。黄色：短鎖リン脂質。

配向試料が調製可能な場合、効率的な解析法が確立されている。特に主鎖が α ヘリックス構造を取る場合、タンパク質主鎖のアミド窒素を ^{15}N 標識した試料を用いて、 ^{15}N 化学シフト異方性、および直接化学結合した ^1H との異種核間磁気双極子相互作用を2次元NMRで観測する双極子磁場分離法を適用する。この測定で得られるスペクトルは、PISA wheel^[1]と呼ばれるヘリックスのらせん構造を反映した特徴的な円形の信号パターンを示す。このスペクトルの解析により、信号帰属と同時にタンパク質主鎖のヘリックス長軸の脂質膜法線軸方向に対する傾斜角、およびその軸の周りの各残基の位置を示す回転角を決定することが可能である。この双極子磁場分離法には多様な測定法が存在するが、一般的に ^1H と ^{15}N 核の双方に連続的なラジオ波を照射する測定法を用いるため、ラジオ波による試料発熱の問題が報告されるようになった。著者はこの試料発熱を著しく減少させつつ、性能は保持する新規測定法の開発なども行ってきた^[2,3]。

ところで、一般に少数回膜貫通型タンパク質では会合体を形成し、複数回

膜貫通タンパク質でも多量体を形成することが多い。このような場合での立体構造解析には、配向試料で得られる主鎖の配向情報だけでは不十分で、ヘリックスなどの二次構造主鎖間の距離情報が必要となる。筆者はインフルエンザAウイルス由来M2 H⁺チャンネルの解析において、チャンネルの内側を向いているTrpおよびHis側鎖の各々を ^{13}C 、 ^{15}N 安定同位体標識した試料を調製し、 ^{13}C - ^{15}N 磁気双極子相互作用の選択的観測^[4]を行った。分子の脂質二重膜中での回転拡散に起因する同相互作用の変調効果を取り入れた解析を行うことにより、核間距離に加え、 ^{13}C - ^{15}N 核対ベクトルと膜法線軸の間の角度依存性を新たな構造情報として取得することに成功した。この解析により、図2に示すように初めて実験的にM2 H⁺チャンネルの4量体ヘリックスバンドル構造を決定した^[5]。また、この構造を基にM2 H⁺チャンネルの作用機構について解析を行った^[6]。

上述の配向試料を用いた膜タンパク質のPISA wheel解析法はデファクトスタンダードな解析手法として定着し、特に少数回膜貫通型タンパク質や、膜

貫挿入型ペプチドなどの構造解析研究で高い使用実績を示した。たが、複数回膜貫通型タンパク質では、各構成要素の α ヘリックスが同様な傾斜角を持つ場合、信号が重なり解析が難しくなる問題がある。この問題は α ヘリックス毎の選択的同位体標識技術により解決が可能であるが、高度な試料調製技術が要求される。

生理的条件下の生体分子の構造解析—膜表在性タンパク質の場合

膜表在性タンパク質は脂質膜表面に結合して機能を発現するタンパク質である。脂質二重膜を形成するベシクルに膜表在性タンパク質が結合すると、試料の相関時間が長くなるため、溶液NMRではタンパク質の信号が消失して観測できなくなる。このため水溶液中で水溶性リガンドとの結合状態、または単独の状態の解析には溶液NMR、脂質膜表面に結合した状態の解析には固体NMRの測定が各々必要となる。我々は膜表在性タンパク質フォスホリパーゼC(PLC)- $\delta 1$ の脂質結合ドメインであるプレクストリンホモロジー(PH)ドメインの構造機能相関の研究を行っ

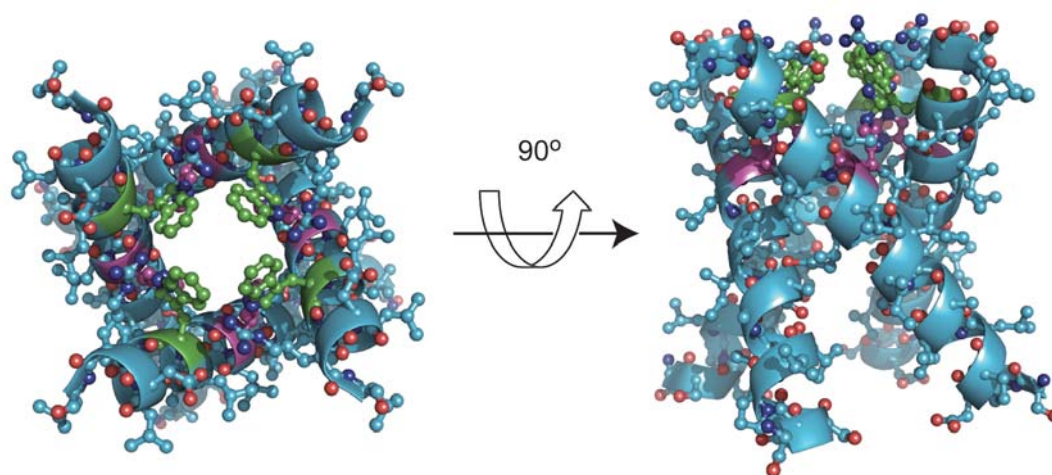


図2 固体NMR解析によって決定したインフルエンザウイルス由来M2 H⁺チャンネル膜貫通ドメインの生理活性のある水和脂質二重膜中での立体構造。

ている。PLC- $\delta 1$ は、図3に示すように細胞膜表面に多く存在する脂質群フォスファイノシチドの一つ、フォスファチジルイノシトール4,5ニリン酸(PIP₂)に特異的に結合・加水分解し、セカンドメッセンジャーとしてイノシトール3リン酸(IP₃)、およびジアシルグリセロール(DAG)を放出する。同タンパク質のIP₃への結合状態の立体構造が、X線結晶解析により報告されているが、水溶液中での構造解析報告は存在せず、その機能発現の分子機構について詳細は未だに不明である。

我々はまず、rat由来のPHドメイン(ratPH)が、PIP₂を含有したミセル、小ユニラメラベシクル、マルチラメラベシクルに結合する際、脂質膜表面の曲率変化に敏感に反応して、その立体構造を変化させることを固体¹³C-MAS NMRを用いた解析により見出した^[7]。その後ヒト由来のPLC- $\delta 1$ のPHドメイン(hPH)に研究対象を移し、水相でのIP₃結合前後での構造変化について、Lys残基の主鎖アミド基を選択的¹⁵N同

位体標識した試料を用いて、溶液NMRによりリガンド結合前後の信号シフト解析を行った。その結果、リガンド結合に伴う二次構造変化がリガンド結合部位だけでなく、分子内の遠位の残基まで伝達されるアロステリック効果を持つことを明らかにした^[8]。また、新たに開発したnativeゲル電気泳動法を用いた同タンパク質の熱安定性評価法の解析を行った。その結果、これまで脂質表面に結合する際、非特異的な疎水性相互作用で脂質膜表面にアンカリングすると考えられて来た $\alpha 2$ ヘリックス部位がIP₃結合時に分子の安定化に寄与することを明らかにした^[9]。これらの結果は、同タンパク質が脂質表面のPIP₂よりIP₃の方に高い結合活性を示す事実を説明し、 $\alpha 2$ ヘリックス部位が脂質結合の際に親和性低下に寄与するという新しい作用機構の提案に至った^[8,9]。

一方、hPHの¹³C固体NMR解析では、脂質結合時に信号が消失する現象が観測された。現段階では、脂質結合状態

では、hPHが¹Hのデカップリングとの干渉を生じる 10^4 - 10^5 Hz程度の運動性を持つか、脂質膜との強い結合に起因する不均一な構造への転移、および脂質内部への挿入が考えられる。これは、生化学的実験により報告されている膜挿入仮説と一致する。残念ながら同現象は試料調製直後から始まると考えられ、NMRの信号積算のタイムスケールより速く状態変化を生じるため、時間分解測定を行うことはできない。現在、本結果が単独ドメイン解析によるアーティファクトであるか否かを確認するため、隣接ドメインを共発現したマルチドメインタンパク質での解析準備を進めている。

脂質膜結合状態の膜表在性タンパク質の固体NMRの実験では、以下に示すように試料調製、および測定において実に多くの解決すべき問題が存在する。まず、感度の低い固体NMRで有効な信号を得るため、溶液NMRより単位体積当たりのタンパク質量が高い試料が必要であるが、タンパク質水溶液は濃

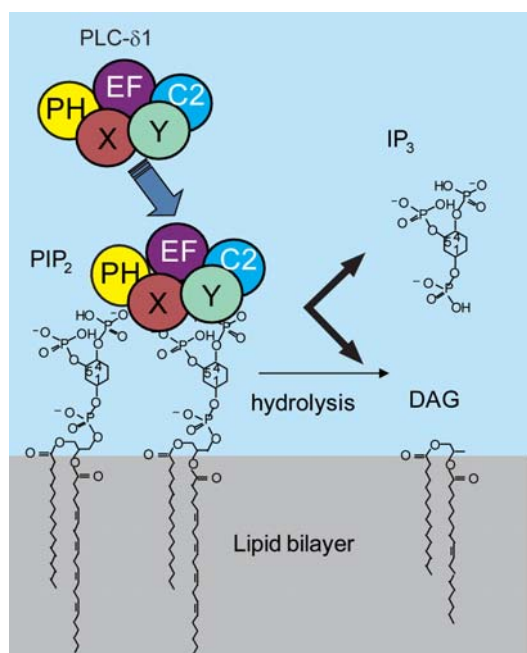


図3 PLC- $\delta 1$ の作用模式図。

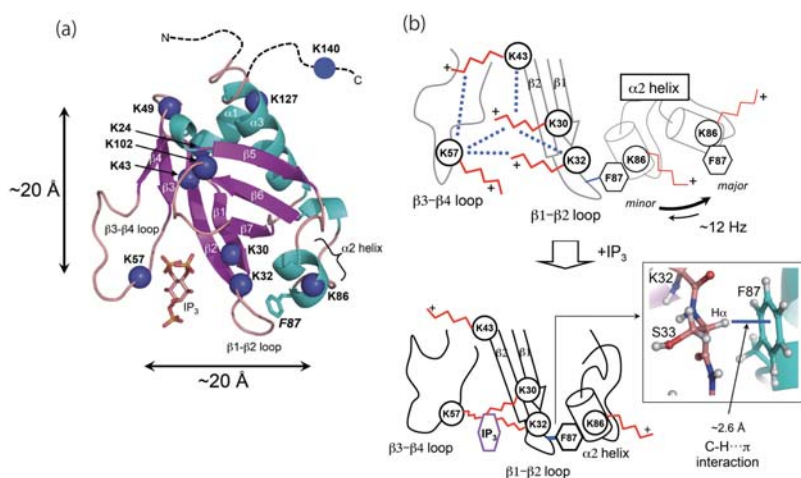


図4 PLC- $\delta 1$ PHドメインの立体構造とIP₃結合に伴うPLC- $\delta 1$ PHドメインの分子内アロステリック効果の模式図。

縮し過ぎると凝集をおこすことが多い。また、膜表面性タンパク質はベシクルの最表面に結合させる必要があり、膜貫通型タンパク質のようにベシクル内部に組み込むことはできない。これは、本タンパク質の直径がマルチラメラベシクル中の水層の厚みと同程度であるため、その水層中で接触を起して人工的な構造変化を生じる可能性があるためである。この様な問題から、膜表面性タンパク質の解析では、試料のほとんどを水と脂質膜が占める極めて低感度な試料を扱わなければならない。スペクトル高感度化のためには高磁場の利用が有用であり、著者は図5に示すような920MHz超高磁場NMR用固体温度可変MASプローブの開発なども独自に行ってきた。また、ベシクルより単位体積当たりのタンパク質量の増加が可能な、長時間安定的に室温付近で自発磁場配向するBicelleの開発も行った^[10]。しかし、この様な地道な改善を行っても、現状では多次元NMR測定をするに十分な検出感度は得られていない。

今後の展望について

タンパク質の立体構造の決定のみを目的としてきた構造生物学は終焉を迎



図5 独自に開発した920MHz超高磁場NMR用温度可変MASプローブ、および920MHz超高磁場NMR用超電導マグネット全景。

え、NMRは機能性分子としてのタンパク質の本質の解析に迫る新たなステージに立っている。これまで紹介したように、膜タンパク質の構造解析の成功には試料調製の寄与が大きい。多くの測定法や解析法が提案されながらも、過去10年間固体NMRによる膜タンパク質の解析数が飛躍的に増加していないのは、試料調製の問題が大きな因子の一つと言える。現在NMRの弱点である低感度を改善するための様々な測定法の開発を行っている。今後これらの

温めてきた技術を実用化し、誰もが有用性を認めうる方法論の開発を推し進めていきたいと考えている。以上で紹介した研究は、当グループのメンバーに加え、多くの共同研究者との共同研究で得られた成果であり、全ての共同研究者に感謝の意を表したい。

参考文献

- [1] J. Wang, et.al. *J. Magn. Reson.* **144** (2000) 162-167.
- [2] K. Nishimura, and A. Naito, *Chem. Phys. Lett.* **402** (2005) 245-250.
- [3] K. Nishimura, and A. Naito, *Chem. Phys. Lett.* **419**, (2006)120-124.
- [4] K. Nishimura, and A. Naito “REDOR in Multiple spin System” *Modern Magnetic Resonance*, Springer, The Netherlands (2006)
- [5] K. Nishimura, et.al *Biochemistry.* **41** (2002) 13170-13177.
- [6] J. Hu, et al, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **103** (2006) 6865-6870.
- [7] N. Uekama, et. al *Biochim. Biophys. Acta.* **1788** (2009) 2575-2583.
- [8] M. Tanio and K. Nishimura, (2013) *Biochim. Biophys. Acta.* (2013) DOI 10.1016/j.bbapap.2013.01.034
- [9] M. Tanio and K. Nishimura, *Anal. Biochem.* **431** (2012) 106-114.
- [10] 西村 勝之、上釜 奈緒子 特願 2009-245245

分子研シンポジウム

“Molecular Functional Dynamics: Fundamental to Life Activity”

10月中旬に、分子研研究顧問のGraham Fleming教授（米国カリフォルニア大学バークレー校）が評価のために研究所を訪問された。この訪問を契機に、同じく分子研研究顧問の柳田敏雄教授（大阪大学・理研）をもお招きし、10月26日に研究会を開催した。

今年度は、溶液・固体、生体分子系のような多体分子科学系における構造形成、エネルギー移動や生体分子や生体分子システムとしての機能発現における揺らぎ・緩和などの分子ダイナミクスの観点から“Molecular Functional Dynamics: Fundamental to Life Activity”とい表題に設定した。これは、現在、研究所が進めようとしている協奏的分子系に関する研究とも関連するものである。さらに、自然科学研究機構のプロジェクト「シミュレーションによる「自然科学における階層と全体」に関する新たな学術分野の開拓」における、分子科学における階層構造の解明および分野の開拓、国際的学術拠点形成の活動の一環でもあり、昨年度の10月に開催したシンポジウム“Recent Developments of Spectroscopy and Spatial and Temporal Hierarchical Structures in Molecular Science”の第二弾でもある。

研究会では、Fleming教授および柳田教授に加え、所外からBiman Bagchi教授（Indian Institute of Science、本年度客員教授）、笹井理生教授（名大）、皆川純教授（基生研）、また所内から秋山修志および大森賢治教授による合計7件の講演が行われた。Bagchi教授や笹井教授は、高分子の折れ畳み、酵素反応やタンパク質の折れ畳みの理論研究、自由エネルギーの構造と構造形

成の関係などに関して発表された。秋山教授はシアノバクテリアにおけるKaiCを中心とするタンパク質の概日リズムの分子機構解明に向けた研究紹介を、大森教授は固体バラ水素の励起子のコヒーレンスや光格子中の冷却分子等に関する研究紹介をされた。また、Fleming教授および皆川教授は光合成系におけるエネルギー移動や分子系の構造変化を伴うフィードバック機構に関して、柳田教授は、一分子計測の話から始まり、生体さらには認識に至る揺らぎに関する研究紹介をされた。

私自身いずれの講演もとても楽しく聞かせていただいた。しかし、楽しんでいたのは私だけではなかったようで、研究会後の懇親会においてワインを楽しんでおられたFleming教授から、「シンジ。今回の研究会もとっても面白かった。だけど、大変だよ。次の研究会のレベルのハードルを上げてしまったのだから。」と次回への有難い注文を頂いてしまった。さらに、Bagchi教授からも、「最近はどこでも似たような研究会が開かれているが、今回はとても楽しませてもらった」とのお言葉も頂いた。

十分な準備期間もない状況で早く発表に応じて頂き、さらにワークショップに興味深いものに仕上げて頂いた講演者の方々に改めてお礼を申し上げます。また、今回の研究会開催日が分子研での科研費申請書類の提出締切日であり、参加者の皆さんにはご迷惑をおかけしました。来年も研究会を行う予定です。ハードルを越えるために、今後も皆さんから様々な多くのアイデア・提案をいただけたら幸いです。

（斉藤 真司 記）



Graham Fleming教授



柳田 敏雄教授



Biman Bagchi教授



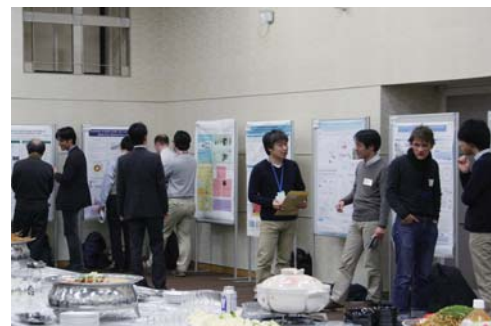
笹井 理生教授

第72回岡崎コンファレンス “Ultimate control of coherence”

ミクロなシステムの量子状態を観測・制御する研究は、近年まさに爆発的に進展している。例えば、10の18乗分の1の精度で冷却原子系の光学遷移周波数が決定されようとしている。この精度は、地上での10 cmの高度差に対応する重力の違いを相対論的效果として観測することを可能とする。さらに、原子は何個だと「たくさん」とみなすことができるか（つまり、巨視的統計性を示すようになるか）の答えが、 μm サイズの光トラップに原子を1個、2個、……、と詰めていくことで明らかにされつつある。また、低温に冷却されたナノワイヤーでは、超伝導の担い手であるクーパー対の生成や分裂を巨視的電流として観測することができる。一方、孤立原子や分子内での電子ダイナミクスをアト秒スケールで追跡することが既に可能となっているが、ナノスケールの金属チップにおいても電子波のアト秒制御が実現できる。生体分

子のような複雑なシステムにおいても、ピコ秒に迫る時間スケールまで電子的なコヒーレンスが持続することが見出され、分子の機能との相関が議論されている。

このような現状を俯瞰し今後の展開を議論する目的で、年明け早々の2013年1月8日（火）から10日（木）にかけて、第72回岡崎コンファレンス “Ultimate control of coherence” 「コヒーレンスの極限制御」を開催した。国内15名（内1名は急病にて残念ながらキャンセル）・国外5名の招待講演者による口頭講演と、23件のポスター発表を実施し、総計59名の参加者が討論を行った。今回の岡崎コンファレンスの最大の特徴は、若手（全て30歳台）ながら突出した研究業績を挙げている研究者を海外から招聘したことである。彼らの講演はどれも極めて聞きごたえのある内容であり、このような研究者を積極的にサポートす



る海外の体制は日本でも参考になるであろう。国内招待講演者としては、まさに分野を先導する壮年研究者から新進気鋭の若手までと年齢的にバラエティーに富んだメンバーをお呼びした。議論の対象も極めて多岐に亘っており、上に記載した研究内容は、実は当コンファレンスで紹介されたもののごく一部である。このような多様な領域における第一線の研究を一堂に集めて、コヒーレンスの生成・観測・制御に関する一般原理について集中的に議論する研究会は極めて珍しく、分野を超えた認識を共有できるようになったことは

大変に有意義であったとの感想が、海外からの参加者も含めて多数寄せられた。懇親会等の場では、様々な分野間での新しい人的交流が新しい研究を生み出す大きな原動力となるであろうとの発言が多々あり、本岡崎コンファレンスとその契機となることを確信している。最後に、本コンファレンスの実務を一手に引き受けて頂いた稲垣いつ子さん、ならびに会の運営に協力頂いた大島グループのメンバーに感謝申し上げる。

（世話人 大島 康裕、
大森 賢治）



古谷祐詞准教授に平成24年度分子科学研究奨励森野基金

古川貢助教に電子スピンスイェンス学会奨励賞

浜坂剛助教に石田賞

古谷祐詞准教授に平成24年度分子科学研究奨励森野基金

このたび、分子科学研究奨励森野基金の平成24年度研究助成に採択頂きました。研究題目は、「赤外分光法による膜タンパク質の情報伝達・エネルギー変換およびタンパク質機能を模倣した特異的ナノ反応場の分子機構研究」です。『分子科学』を創成された森野米三先生の基金設立の趣旨は、分子科学分野の若手研究者を鼓舞激励することで分子科学の一層の発展を期待することと知りました。その期待に背くことのないよう、日々の研究により一層邁進したいと考えております。

私は、博士課程、学術振興会特別研究員と、赤外分光法を用いて光受容タンパク質ロドプシンの分子機構を明らかにするという研究を行ってきました。ロドプシンは、我々の視覚に代表されるように、光情報伝達の役割を担ったり、ある種の微生物ではプロトンや塩化物イオンを輸送することで光エネルギーを生体エネルギーに変換するという役割を果たしています。赤外分光法で得られる赤外吸収スペクトル（分子からの手紙）からタンパク質の機能発現の分子機構を明らかにすることに興味を持って研究を行ってきました。

その後、名古屋工業大学の助手・助教に着任し、興味深い分子特性を示す「特異的ナノ反応場」である、超分子錯体（東京大学・藤田誠教授）やモンモリロナイト粘土鉱物（早稲田大学・小川誠教授）などの研究も行いました。また、ナトリウムイオンポンプV



手前右から3人目が筆者

型ATPaseやカリウムイオンチャンネルKcsAという光に関係しないイオンポンプやイオンチャンネルの研究にも展開致しました。

2009年3月より分子科学研究所の准教授に採用され、イオンチャンネル、輸送体、受容体などの膜タンパク質の赤外分光研究をさらに発展させるべく、新規計測系の開発に取り組んでいます。また、2011年10月からは、さきがけ研究（「光エネルギーと物質変換」領域）として、様々な光エネルギー変換系における水分子の構造変化解析に取り組んでいます。

私の好きな著書の一つに「回想の水島研究室」があります。森野先生は「研究室の在り方についての断章」という記事を執筆されています。その中に以下のような文章を記されています。「研

究生活の目標としては、現在の目標に対して良き結果を得ることに努力することは、当然のことであろうが、同時に、それは次世代の若い研究者を養成する根源とならねばならないものと確信する。そこには、自由な発想を許し、自由な発想の発展を助長する寛容さもなければならぬものと信ずる。」とあります。私は直接の研究指導の多くを神取秀樹先生（現、名古屋工業大学教授）に受けましたが、まさに森野先生が記したような態度で私に接していただいたので、今日の私がいるものと思っています。最後に、この場を借りて改めて感謝致します。

（古谷 祐詞 記）

古川貢助教に電子スピンスイエンズ学会奨励賞

2012年11月2日に、「有機固体のアドバンスドESRによる機能性解明の研究」というタイトルで、電子スピンスイエンズ学会 奨励賞をいただきました。この学会は、化学、物理、生物、医学といった、様々分野で、電子スピンに関わる研究をされている方々が集まる学会で、この賞は、その分野で功績を認められた若手研究者に与えられる賞です。このような荣誉ある賞をいただき、とても嬉しい思いでいっぱいです。

私が学生の時に、初めて口頭発表をしたのが、この学会でした。当時、参加されている先生方の議論は、私にとってはとても難しく、聞きなれないキーワードが私の頭の上を飛び交っていたのを記憶しております。そのため、先生方は、雲の上のような人達だと思っていました。しかし、私にとってはとてもよい勉強の機会を与えてくれる学

会で、その先生方と「会話」するために勉強していました。そのような学会で、私の研究を評価していただき、私にとってはとても感慨深く思っています。

また、分子科学研究所に着任後には、日本で最初に導入された多周波パルスESR装置を使って研究を行うことができたことも今回の受賞の大きな要因です。着任直後には、ノウハウがなかったこともあり、戸惑ったりもしましたが、技術職員の方達の力を借りながら、少しずつ前進してきました。ですから、よい結果がでたときの感動はやはり忘れがたいものです。この賞は、私一人の力でとることができたものではありません。指導していただきたい先生方、試料やそれに対する多くの知見を惜しみなく提供してく



れた共同研究者、特異の技術で研究を支えていただいた技術職員など多くの方々の力添えの賜と思っています。私の研究に関わっていただいたすべての方に、感謝を示したいと思います。また、この賞を励みに、電子スピンドイナミクスという観点から、分子性デバイス開発を見据え、機能性有機固体の機能性メカニズムの解明研究を展開し、次のステップへと邁進したいと思います。

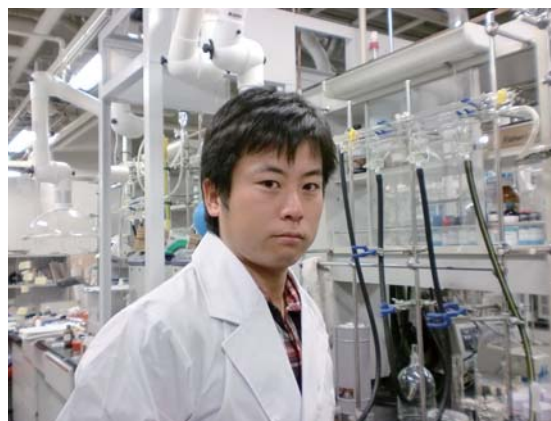
(古川 貢 記)

浜坂剛助教に石田賞

この度、名古屋大学石田賞（自然科学分野）を受賞致しました（研究名：「反応環境制御に基づく新しい触媒システムの開発」）。名古屋大学石田賞は、石田財団から名古屋大学へのご寄付の意志に基づき、東海三県（愛知、三重、岐阜）内の研究機関で研究する若手研究者で、一定の成果を上げ、将来の発展が期待できる優れた研究能力を有する者を顕彰し、その研究意欲を高め、研究の発展を支援するために制定されたもので、平成24年度が第一回目となります。このような、新たに制定された賞を受賞するのは大変光栄に存じます。また、第一回目の受賞者ということで、名古屋大学石田賞の名を汚さぬよう、今後、

しっかりと成果を出していかなばならぬと、身の引き締まる思いです。今回の受賞は、私がこれまで行って参りました、有機分子変換を行うための反応場の構築と触媒反応への応用に関する研究が評価されたものです。

これまでの有機分子変換反応における触媒開発の主流は、金属中心周りを配位子の塩基性や立体効果によって修飾することで反応性や選択性を制御するものでした。この手法によって、高効率・高選択的分子変換が可能となるなど大きな成果を上げています。しか



しながら、有機溶媒の使用や高温・高圧が必要であるなど、まだまだ解決すべき問題は多いのが現状です。一方、生体内反応においては、反応活性中心だけではなく、反応が行われる環境（蛋白質の高次構造や脂質2分子膜内など）を活用することで高効率・高選択的な

反応を水中・常温・常圧下といった非常に温和な条件で実現しています。そこで、もし、自在に反応環境を制御する手法が確立できれば、生体内反応を凌駕する触媒システムの開発が可能となりうると考え研究を推進して参りました。

した。幸運にも、開発した触媒システムを用いることで、いくつかの有機反応で水中・大気下・室温という穏和な条件下で高効率な分子変換に成功しました。

これまでご指導いただきました諸先

生方（特に分子科学研究所・魚住泰広教授、北海道大学・澤村正也教授）、並びに共同研究者の皆様に、心より感謝申し上げます。今回の受賞を糧に、さらに研究に邁進致します。

（浜坂 剛 記）

国際研究協力事業報告

EXODASS general meeting and mini-symposium

報告：物質分子科学研究領域 准教授 櫻井 英博

20年度後期より4期にわたって実施された、JSPS事業「若手研究者交流支援事業～東アジア首脳会議参加国からの招へい～」(JENESYSプログラム)の後継プログラムとして、分子研独自予算によるEXODASS (EXchange prOgram for the Development of Asian Scientific Society) プログラムが昨年より発足しており、今年度は10月より第2回目の招聘が開始された。

本事業は、現代自然科学が解決すべき問題のひとつである環境・エネルギー問題を中心とした分子科学の諸問題に対して、東アジア諸国における自国での研究開発を可能にするための基礎研究基盤の確立を協力に支援すべく、主として学位取得前後の若手研究

者を招聘し、また本交流事業後のフォローアップとしての共同研究体制を確立し、自国における基礎研究の継続を力強くサポートすることで、基礎科学の定着を推進することを目的としている。完全な分子研独自プログラムとなった今回から変更になった最も重要な点は、これまでのプログラムは招聘対象国がASEAN+3 (インド、オーストラリア、ニュージーランド) に限定されていたのを、既に分子研と深く関わりのある極東3カ国 (中国、韓国、台湾) も対象国として拡張した点にある。特にJENESYSプログラムで問題となっていた国籍問題 (例えばシンガポールの大学に所属していても、中国国籍の研究員は招聘不可) からも解放される

ため、より自由で公平な審査が可能となった。

今回は5月から7月にかけて募集及び候補者選考が行われ、その結果9名の招聘を内定した。従来通りのASEAN各国からは、タイ2名、ベトナム1名、シンガポー

ル1名、マレーシア1名、インドネシア1名を招聘し、これに加え新たな対象国からは、台湾2名、韓国1名の参加を得た。

招聘は2012年10～2013年1月にかけて実施され、各研究者に応じて、22～90日の期間での研究プログラムが組まれた。また11月30日に、全員の招聘者を一同に会し、全体会議とミニシンポジウムを開催した。本プログラムの大きな目的のひとつとして、将来にわたるアジア分子科学ネットワークの形成があり、各国の同世代の若手研究者の横のつながりを形成する上でこの全体会議の役割は非常に大きい。今回も、分子研に在籍している多くの留学生も参加し、大いに盛り上がった。

本JENESYS/EXODASSプログラムを継続的に開催している効果が顕著に現れ始めている。昨年開催されたアジア化学会議 (14-ACC) では、数多くのプログラム卒業生が参加し、そのプレゼンスを示していた。また、第2回JENESYSプログラム参加者主宰の研究室の大学院生が今回のプログラムに参加し、本プログラムの趣旨であるネットワーク形成が着実に進んでいることを伺わせている。



分子科学研究所 一般公開2012



去る2012年10月20日（土）に、分子科学研究所の一般公開が開催された。今回は「行こう！分子探しの旅へ」をメインテーマに掲げ、国民的人気を誇る某マンガにあやかって、若き海賊たちが「分子」という宝ものを探しに勇躍大海へ乗り出す姿をポスターとした（ちなみに、このポスターは一般の方々にも広く認知されたようだが、「分子研」のものとは思わなかったとの声もちらほらあったようである。少し、ギャップが大きすぎたと反省している）。

当日は、初秋の穏やかな日差しのもと、ポスターのキャラクターを配した大きな「タテカン」が来場者の皆さんをお迎えた。



今回の一般公開では、所内をあらゆるこちら歩き回らずとも済むように、会場を「計算機センター1階」「実験棟」「UVSOR」「岡崎コンファレンスセンター」の4ヶ所に集約した。特に、実験棟4階の計10スパンのスペース（研究グループの入れ替え等により現在たまたま空いていたもの）ならびにコンファレンスセンターの中会議室とホワイエに、

総計29の展示を集中して配置した。そのうちの半数近くが見学者の方々が実験したり物を作ったりパソコンを操作したりできる体験型のものであり、多数の市民の方々が熱心に参加されていた。また、スパコン、UVSOR、極短パルスレーザー、NMR等の研究施設の見学も、大変に人気があった。さらに、市民公開講座分子科学フォーラム特別版と銘打って、所内3名の研究者が各自の研究を分かり易く解説する講演を行った。こちらには、分子科学フォーラムのリピーターの方々がお越しになり、熱心に聴講されていたようである。

一般公開とのコラボレーション企画として、「ひらめき☆ときめきサイエンス～ようこそ大学の研究室へ～」ならびに「女性科学者とおしゃべりしよう！資生堂サイエンスカフェ in 分子研」も同時開催した。前者では、事前に申し込み頂いた中学生ならびに高校生の皆さんに液体窒素を使った実験などを体験して頂いた。後者では、資生堂女性研究者サイエンスグラントを受賞した分子研の2名の若手研究者が、研究の道へ進んだきっかけなどについてガールズトークを繰り広げ、女子高校生を中心とした参加者の方々に大好評であった。

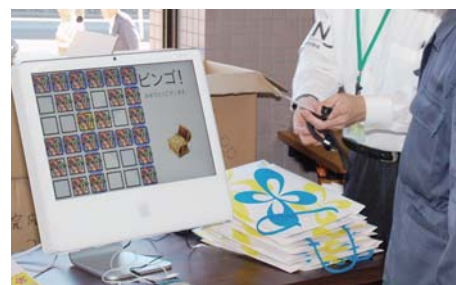
今回の一般公開での新しい取り組みとして、磁気カードを用いたタッチラリーを実施した。各展示に設けられたポイントでカードをかざすとチャイムの音とともにパソコンの画面上にピンゴが表示されるように設定されており、

多数の展示を回って1列そろえると「ピンゴ！」として景品の「一家に一枚周期表」を差し上げた。これも、特に小さなお子さんに大人気で、走り回るようにポイント間を行き来するチビツ子の姿が多数見かけられた。

今回の総来場者数であるが、1100名強と前回までよりもかなり少な目であった。その理由を現時点では明確にできていないが、市民の皆様方への周知の方法について再検討が必要であろうと考えており、次回への課題である。ただし、その分、各展示は適度な込み具合であり、時間をかけて1つ1つゆっくりとご覧になっている方が多かったように見受けられたのは、ケガの光明とでもいうべきか。

総括すれば、ご来場頂いた多くの方々に「サイエンス」を楽しんでお帰り頂いたものと確信している。これもひとえに、事前の準備および当日の運営に対する、所内ならびに事務センターの皆さんの多大のご尽力のお蔭である。ここに厚く御礼申し上げる。皆さんのおもてなしの心は、確かに市民の方々へ伝わりました。

（大島 康裕 記）



アンケートから見る一般公開

一般公開その他の広報活動の質的向上のため、一般公開来場者にアンケート調査を実施した。アンケートの回答率は入場者1126人に対して566件（回収率50.3%）であった。アンケート回答者の居住地の分布（図1）から来場者の中心は岡崎市民であった。研究所の活動が近隣住民に認知されていることがうかがえる。男女比（図2）はほぼ均等であった。年齢分布（図3）は、20代の割合が低い傾向にあり、この傾向は3年前の調査でも同様であった。また、大学・大学院・短大・高専の学生の割合も少ない（図4）。一般公開は大学生・院生向けのオープンキャンパスとは趣旨が異なるが、この年齢層の来場者数の向上は今後の課題である。来場者のグループ構成（図5）の45.1%は親子であった。来場の動機（図6）に於いても「子供に科学を親しむ体験をさせたい」という回答は比較的多かった。また、来場の動機として最も多かった回答は「科学全般への興味」であり、「分子科学研究所に興味」と答えた人も比較的多かったことから、多くの人々が科学への高い意識を持って一般公開を見学したことが分かる。さらに一般的な意識調査として、「日本の『科学技術の水準』」に関する評価を尋ねたが日本国民一般の意識（『日本人の国民性調査2008』（統計数理研究所））と差がなかった（表1）。一方で、「科学が日常生活に役立っている」と答えた来場者は68.6%であり、日本国民の平均値39.1%と比較して高く（表2）、今回の所内の展示によって所内の成果・研究活動が好意的に受け入れられたと言える。展示の人気投票のベスト10は、「DNAを取り出してみよう」「最先端のスパコンを見てみよう」「UVSORの施設見学」「金属のやじろべえを作ろう」「（おわん分子で）サッカーボールを……」「空気がないとどうなる？真空で遊…」「光のスピードを測る」「雨露をつたう光」「光を分解してみよう！分光器作り」「蛋白質のかたちづくり」であった。ベスト10のうち、9個は体験型あるいは参加型の展示であった。「雨露をつたう光」は、体験型や参加型でないにもかかわらずベスト10入りし、かつ初来場者に好まれる傾向があった。この展示では「展示とポスターの内容を平易なものに留めたお陰で、わかり易くて安心するという意見を頂いた」（担当野村助教）ということである。各来場者に配布された磁気カードを用いたタッチラリーは、オンライン管理され、来場者の行動追跡にも用いられた。アンケートとの相関も取られ、次回の一般公開に役立てられる。アンケートの調査内容の設計およびデータ解析には、情報・システム研究機構統計数理研究所の加藤直子さんの学術な協力を頂いた。

（柳井 毅 記）

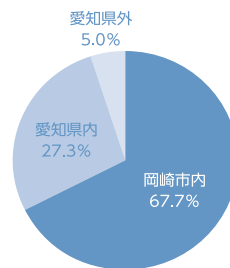


図1 居住地

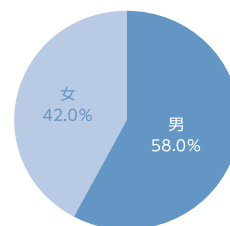


図2 男女比

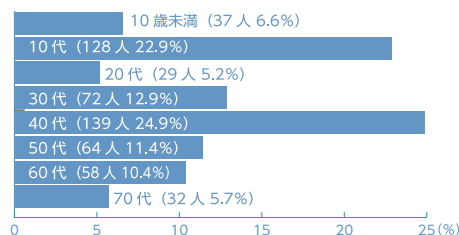


図3 年齢分布

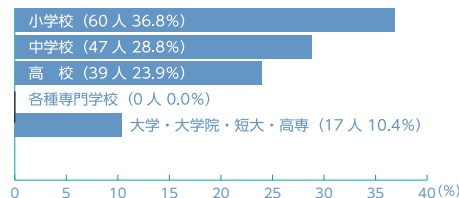


図4 学生の在学数

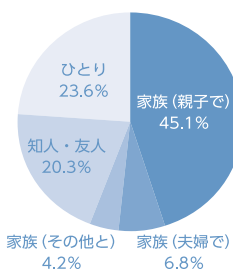


図5 来場者のグループ構成

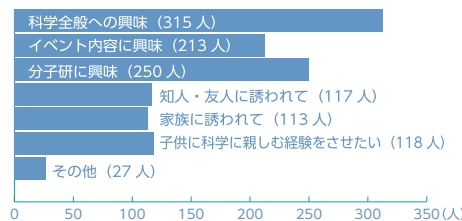


図6 来場の動機

表1 日本の「科学技術の水準」は？

	非常によい	ややよい	ややわるい	非常にわるい	わからない
分子研来場者	36.6	47.6	9.3	0.3	6.5
日本国民	35.5	51.0	6.4	0.7	6.4

表2 科学は日常生活に役立つか？

	役立っている	少しは役立っている	役立っていない	わからない
分子研来場者	68.6	25.1	1.4	4.8
日本国民	39.1	47.4	8.3	5.2

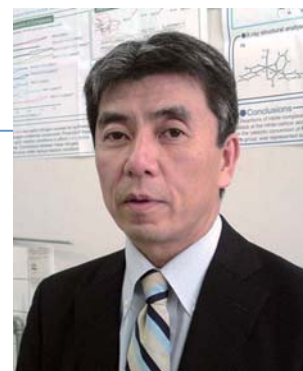


環境の激変を越えて

長尾 宏隆

(上智大学 理工学部 物質生命理工学科 教授)

ながお・ひろたか / 1987年上智大学大学院理工学研究科化学専攻博士前期課程修了。1990年上智大学大学院理工学研究科化学専攻博士後期課程修了。分子科学研究所助手、上智大学助手、講師、助教授、准教授を経て、2010年より現職。



貧乏私立大学から岡崎へ移動したのは1990年の7月で、すでに20年以上も昔の話になります。同じ年の3月に学位を取得し、日本学術振興会の特別研究員として研究のかたわらで、幾つかのアカデミック機関の公募に応募していました。岡崎で、さらにその後もお世話になっている田中晃二先生からご連絡を頂き、5月のある日に面接に向きました。自身は中部地方の出身でありながらも、岡崎を初めて訪れたのはこの面接でした。東岡崎駅からの坂を上り、国立の研究所への敷居の高さを感じながら挑んだことが思い出されます。さまざまな幸運が重なって、岡崎国立共同研究機構・分子科学研究所・錯体化学実験施設・錯体物性研究部門(何と長い所属と思いました)の助手として採用され、面接から1ヶ月で早々に赴任することになり、岡崎での生活が始まりました。

分子研での生活は当初から驚くべきことがあまりにも多すぎて、ここで一つ一つ書き綴るのは無駄なので心にとめておきます。最初のカルチャーショックをひとつだけ書くと、本や学会などで遠くから眺めていた著名な先生方が次々と現れることです。赴任初日には当時所長であった井口洋夫先生から辞令を頂き、施設長の大瀧仁志先生をはじめとする大教授の先生方に挨拶にまわりました。こんなところで、はたして勤まるのかと思う間もなく、すぐさま研究生生活に突入しました。当時、明

大寺地区の南実験棟は真新しく、錯体化学実験施設、関連領域と理論科学領域が各階に分かれて研究を行っていました。E地区(現山手地区)では時折ソフトボールなどの大会が開かれているような状況でした。分子研では私生活と研究が近接しているため、規則的な生活を送っていました。研究生生活も日常生活も激変し、待った無しでどんどん加速して時が過ぎていきました。結局、4年と9ヶ月を田中晃二先生のご指導のもと分子研で二酸化炭素の変換反応について研究を行い、この間に6名の大学院生と研究を行い、母校である上智大学へ戻りました。

上智大学では講座制により一つの講座に4名の教員が所属していましたが、現在では学部を改組し個人研究室となり、毎年10名弱の学生・大学院生と共に研究を行っています。女子学生の割合が比較的多い学科のため、半数以上が女子学生である年も少なくありません。東京の真ん中で、非常に狭隘な研究室で学生に紛れて研究を行っています。卒業研究以来の錯体化学を中心とする研究は、予算的にはかなり厳しい貧乏な私学でもなんとか細々と続けることができている。忘れ去られないように、学会には参加し、できるだけ多くの研

究発表を行えるように学生諸君には頑張ってもらっています。この夏には4名の大学院生と一緒にスペインまで錯体化学国際会議に出かけ、観光を楽しみつつ、研究発表を行ってくれました。一人で研究室を切り回すのは、多くの雑用のなかで十分でない部分も多々ありますが、できるだけ学生とコミュニケーションをとることを大切にしています。あまり多くない学生数なので、毎日必ず全ての学生と一言でも良いので会話を(学生は面倒くさいと思っているかもしれませんが……)、意思の疎通を絶やさぬようにしています。研究生生活は“楽しく”“前向き”時には“厳しく”自分のベストを尽くして悔いの残らぬように学生共々悪戦苦闘する毎日です。

分子研での二酸化炭素変換反応から窒素化合物変換反応へと研究の中心を移して窒素サイクルの構築を目指しています。研究費、スペース共に激変した環境の中でも、自分なりにできることを探してきました。小さな学科であ



ることや都心にあることで学科内や近くの知り合いの先生との共同研究には適した環境にあることを生かして、自分の能力を越える部分では多くの共同研究者にお助けをお願いしています。最近ではイオン液体化学や生物化学分野の研究室との共同研究を行って、学生は錯体化学のみではなく、いろいろな分野の研究についても良い経験ができてきていると思います。図々しくも、できるだけ多くの知り合いの力を頼りにして、より良い人間関係を先生や学生

と作ることを念頭に研究を楽しんでいます。分子研を去って17年が経過し、研究テーマも年々変化していくなか、最近になり二酸化炭素の変換反応も一つの大きなテーマとなって戻ってきました。自分の論文をあらためて読み返しながら、奮闘しているのは不思議なものです。

最後に、この頃強く感じることは、いろいろなところで分子研出身者に会うことには驚かされます。現在、同時期に分子研で助手をしていた教員が

私を含めて3人（鈴木教之さん、南部伸孝さん）が同じ学科にいます。勿論、学会や研究でお世話になっているのは分子研ファミリーの方々です。つくづく分子研関係者のご活躍を感じずにはおられません。私もこれらの方々に負けないように、益々努力すべしと痛感している今日この頃です。今後も分子研ファミリーの皆様のご指導、ご鞭撻をお願いして、終わりにします。



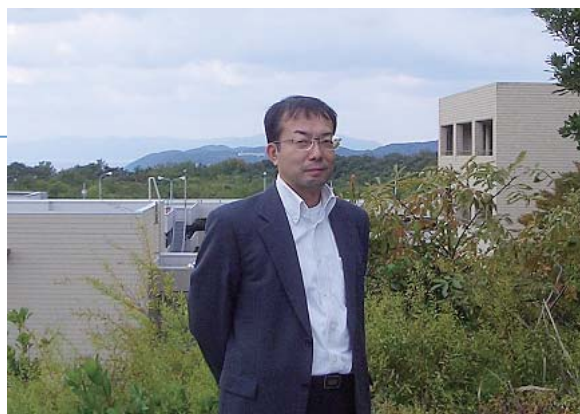
和歌山大学にて

山門 英雄

(和歌山大学 システム工学部 精密物質学科 准教授)

やまかど・ひでお / 1987年東京大学理学部化学科卒業、1992年総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程修了、博士(理学)。東京大学助手、東北大学大学院理学研究科助手を経て、1997年より和歌山大学システム工学部精密物質学科助教授、2004年より現職。

和歌山大学にて(紀淡海峡を背景に)



皆様、ご無沙汰いたしております。あるいは初めまして。私は今を去ること24年前の1989年(平成元年)に総合研究大学院大学に第一期生として入学し、数物科学研究科構造分子科学専攻博士課程を修了した山門と申します。分子科学研究所に在籍中は、指導教授の薬師久彌先生をはじめとして、多くの皆様にお世話になりありがとうございます。

当時私は、卒研・修士時代(指導教授:黒田晴雄先生)から引き続き、フタロシアニンを用いた導電性の部分酸化塩を作成しその構造と物性を調べる研究を行っておりました。分子科学研究所では、同期の学生の絶対数は多くはありませんが、なかなか個性的な面々が多く、例えば分子研レターズVol.64で

記事を書かれている高橋聡さん(東北大学教授)や、Vol.63で書かれている水谷泰久さん(阪大教授)は総研大での同期生です。

当時の学生の間では、察があればとか、生協が欲しいという声も有ったように思いますが、今振り返ってみますに、総合研究大学院大学として、種々の機会を当時の学生に与えて下さったことに感謝いたしております。例えば、4月に学生会館で開かれた入学式では福井謙一先生の記念講演を聞かせて頂いたことが今でも特に印象に残っております。また総研大について、当時雑誌(中央公論)で報じられ、長倉先生と入学生が分子研の玄関前で話しをする様子の写真等が、総研大の設立の理念などとともに掲載されたことを記憶してお

ります。またその年の9月には、全国の総研大生を箱根に一堂に集めてのサマースクールが2泊3日で開かれ、その中では複数のグループに分かれて先生方から、飲食をともにしながら深く味わいのある話を聞かせて頂いたことを思い出します(例えば私の入ったグループには、国立民俗学博物館から小山修三先生が入っておられ、最近、新聞のコラムを連載で書かれているのを拝見し、懐かしく感じた次第です)。

また、当時、分子科学研究所では若手の方々を中心としてスポーツなども盛んに行われており、例えば分子研創立記念杯ソフトボール大会では、学生である私も「分子集団は爆発だ!!ず」という名前のチームに入れて頂いて参加し、当時のメモ書きを参照しますに、

優勝 (or それに伴い飲める「多量のビール」) を目指していたことが記録に残っておりまして。また、下手ではあるものの、テニスにお誘い頂いたり、種々の季節の行事にも参加させて頂き、研究上のいろいろな経験とともに、とても意義深い日々でした。

その後私は、博士課程を修了し、東京大学教養学部で大野公一教授の下、助手として採用され、その後東北大学大学院理学研究科を経て、和歌山大学システム工学部に着任し現在に至っています。大野先生の下では、ペニングイオン化電子分光の実験を中心に、また和歌山大学に移ってからは、大学院時代に行ってきた導電性有機錯体結晶の研究を研究室の学生とともに行ってきました。その後 (ここからが「出身者の今」になるのですが)、2004年に大野先生、前田理博士 (現北海道

大学大学院理学研究院) が開発された「超球面探索法」を、“結晶構造の多形を含めた予測” に適用することについて、2009年頃から共同で研究をはじめています。

「超球面探索法」の詳細については、開発者らによる解説 (例えば、*Molecular Science* 5, A0042 (2011)) を参照して頂くのが良いと存知ますが、簡単に言えば、ポテンシャル曲面上で反応経路を探索する際、ポテンシャルの非調和歪みに着目する方法で、これは既に、分子の反応経路や異性体を探索することに非常に効果的であることが確かめられてきています。そこで、この探索方法を、原子・分子配列のみならず、固体結晶の格子ベクトルにも適用しようというのが本研究のポイントで、これまでに分子科学研究所の計算機 (自然科学研究機構岡崎共通研究

施設計算科学研究センター) の力もお借りして研究を始めています。将来の夢は、分子性結晶も含めた固体一般について、実際に結晶を作成してみる前に、非経験的に多形も含めて組成や結晶構造を予測できるようにすることです。

和歌山大学は、大都市からはかなり離れた場所に有りますが、大学には四季折々の自然も多く、春先には学内で鶯のさえずりが聞こえ、時にはイノシシや狸を見かけることもあります。また2012年の4月からは、従来大学のそばを素通りしていた南海線に、新設の和歌山大学前駅が出来、かなり通学・通勤が便利になりました (関西空港からでしたら、1時間強程度で大学に着くことができるものと思います)。一寸足を伸ばせば温泉や観光地もございますので、皆様是非一度遊びにお越し下さい。



生命動態システムのなかに生き残る 分子の個性を聴きたい

小松崎 民樹

(北海道大学 電子科学研究所 生命科学院 数学連携研究センター 教授)

こまつざき・たみき / 1987年日大理工卒 (特待)、横浜国大院工修了、総研大数物修了。博士 (理学)。(財) 基礎化学研究所 (現京大福井謙一記念研究センター) 研究員、日本学術振興会特別研究員、シカゴ大化学リサーチアソシエイト、神戸大理工助教授などを経て、2007年から現職。この間、分子研理論系第四客員助教授 (2005)、滋賀大教育 (2001)、東大教養・院総合文化 (2003)、茨城大院理工 (2004)、広大理 (2006) 非常勤講師など。

「専門は物理ですか? 数学ですか?」とよく質問されます。そんなとき「分子科学出身の自然科学者です」と答えるようにしています。今回は総研大生出身者=分子研出身者と位置づけているから、と寄稿する機会を頂きましたので、自分の分子研との関係を述べつつ、最近の関心事を書いてみたいと思います。

自分が研究者を志向したきっかけは、学部生のときに見つけた、日大農獣

医学部で教えていた父の書斎にあったウェルナー・ハイゼンベルグの「部分と全体」(みすず書房) という本でした。量子力学と (言語、哲学も含む) その他の学問領域との関係について深い思想が書かれていて、研究の奥深さに圧倒されました。そのなかで、化学結合についての、球と棒による比喩的な記述に対して (当時高校生だった) 筆者が抱いた懐疑心を述懐し、筆者の化学結合概念が述べられていました。私は、

化学を適当に学んでいた浅はかさを反省し、量子力学を独学し、フローティング軌道を導入した分子軌道計算プログラムを自作し、化学結合が生成する過程で電子雲が収縮する現象を模倣したりして遊びました。

その後、修士課程では、分子の存在を実感したいと思い、合成・測定・計算を全て行う物理有機化学を学びました。在籍していた研究室の助手に勧められましたが、合成・測定は自分には



向いていないと悟り、総研大二期生として分子研理論研究系の大峯巖先生の下で学ぶことを決意しました（結局、1990年4月から院生として4年間在籍し、2005年度の理論研究系客員助教授を加えて、計5年、分子研を肌で感じる幸運に恵まれました）。

当時、大峯先生からは、手取り足取りの指導を受けた記憶はなく、一人の研究者として初めから扱っていただき、研究テーマの選択、立案から自分自身で行うよう命じられて、自ら研究提案するという期間が最初の一年目でした。最初、「こんな流行の、誰でも思いつくようなテーマしか選べないのであれば私の研究室に居る必要がない」、と一蹴される期間が半年以上続いたかと記憶しています。その間、非平衡統計力学、ソリトン、カオスなど勉強しました（振り返ってみると、あのときの勉強が今にとっても活かされています）。最終的に研究テーマとして認められたのが「水中のプロトン輸送のダイナミクス」で、結局、本来目指したゴールからは程遠い出来でしたが、多体化学ダイナミクスにおける問題の本質を理解できたことはその後の研究に大いに役立ちまし

た。

博士号取得後、内定をいただいていた東京の某私大助手のパーマネントポストをお断りして、基礎化研、シカゴ大でのポスドク、リサーチアソシエイトを経て、1999年に神戸大理学部地球惑星科学科に助教授に就きました。基礎化研・シカゴ大時代には、半古典量子論でよく知られているVan Vleck摂動理論の古典版に相当する標準形理論を用いて、化学反応が必ず生じる相空間上の反応座標を定式化し、遷移状態の厳密解に関する研究をしました（現在も研究室で脈々と続けています。PRL 2006,2007,2010,2011, JCP 2005, 2008-2011, PCCP 2012）。しかし、神戸大の学科では学生に物理化学も解析力学も教えていませんでした。研究の不出来を環境のせいには絶対したくなかったので、物理化学や解析力学のバックグラウンドがない学生たちも面白がって研究できるテーマを探すことから始めました。

当時は、生命システムにおける分子個々の動態を観測する1分子測定技術が飛躍的に進展していたのに対し、Szabo (NIH)、Silbey (MIT)、Cao (MIT)

らを除いて、ほとんどの理論研究者は1分子計測を研究対象として見ていませんでした。その理由は、理論研究の多くは、系を記述する方程式・モデルを予め規定する（できる）ところから出発するのに対し、生命システムでは、その前提自体が非自明であるためです。

私は、最初に指導した学部生と一緒に、非線形時系列解析の書籍を輪読しながら、実際に観測さ

れる1次元の時系列データから、背後に存在する多次元空間上の動態構造を彫り起こす研究を暗中模索しながら開始しました。この研究はJST/CREST、Human Frontier Science Programなどの（国際）共同研究に発展し、現在、1分子時系列データそのものから、分子の“状態”、“状態間の遷移ネットワーク”、“エネルギー地形”、“運動方程式”を彫り出し、新しい動態概念を構築する実践型分子理論の体系ができあがりつつあります（PNAS 2006, 2007, 2007, 2008, PCCP 2012, JACS 2012, ACS Nano 2012 <ハイライト記事に選出>）。

今尚、システムバイオロジーの研究では、細胞内の各化学成分の濃度を変数とする連立微分方程式に基づく理論研究が主流です。そこでは、分子の“個性”（＝分子の構造や動態の多様性）がどのように細胞システムのなかで生き残っているか、は完全に見落とされています。元来、濃度は統計性が保証されるマクロレベルにおいて成立する概念であり、1細胞内で分子の個性を濃度として単純化できる保証はありません。実際、近年、単一生細胞に内在するmRNA・タンパク質分子数の時間的・集団的ゆらぎが明らかにされ、平均10個程度しか存在しないタンパク質もあることなどが分かってきました（谷口ら Science 2010）。これは「平均化の原理」から、分子個性を無視できるとは限らないことを示唆しています。

今後、実験家と理論家の双方向的な協働を通じて、ひとつひとつの分子たちの“声”を実際に聴きながら、細胞などの高次生命システムにおいて、分子の個性がどのように生き残り、生命システムの頑健性および可塑性に如何に寄与しているかを見極めたいと思っています。



2011年初め プリンストン大学でのHuman Frontier Science Program ミーティング。プリンストン大学Haw Yangさん、ミュンスター大学 Henning Mootzさんらと。一番右が筆者。



諸熊奎治先生 文化功労者に



諸熊奎治先生（現 京大福井謙一記念研究センター シニアリサーチフェロー、分子研名誉教授）におかれましては、この度、平成24年度文化功労者の栄誉を受けられました。

諸熊先生は、昭和32年京都大学工学部工業化学科をご卒業後、同37年京都大学大学院工学研究科燃料化学専攻博士課程を単位修得退学し、同37年同大学工学部燃料化学科福井謙一先生の研究室に助手として採用され、同38年に京都大学より工学博士の学位を授与されました。昭和39年米国コロンビア大学客員助教授、博士研究員に採用され、米国ハーバード大学博士研究員、米国ロチェスター大学助教授、准教授を経て、昭和46年から同大学教授に昇進されました。その後、同51年分子科学研究所教授に着任されましたが、先生は強力な研究グループを直ちに立ち上げられると共に、同研究所計算センター長を兼務され、我国の理論化学・計算化学の発展に多大な功績を残されました。平成5年より米国エモリー大学教授に転じられ、化学科教授、チェリー・エマーソン科学計算センター長としてご活躍の後、平成18年には京都大学福井謙一記念研究センターにリサーチリーダーとして着任され、本年度から

はシニアリサーチフェローとして、現在も若者顔負けの研究活動を展開しておられます。また、平成12年より国際量子分子科学アカデミー会長を二期六年間に渡って務められ、文字通り世界レベルで量子化学、理論・計算化学の発展に大きな足跡を残してこられました。

今回の文化功労者のご顕彰は、諸熊先生の永年にわたる「複雑分子系の理論研究の発展に対する多大な貢献」に対するもので、量子化学に基き統計性も考慮した理論化学・計算化学における世界的な業績が認められたものです。先生は独創的な考えにより、新しい理論的方法を開発・提案され、それに基づいて理論化学・計算化学を力強く推進され、分子の構造・機能、化学反応過程の微視的理解と予測を達成されました。例えば、相互作用エネルギー分割法やオニウム法の開発、エネルギー勾配法の革新的な展開を通して、複雑な分子の構造と機能、反応過程を解明し、分子設計に結び付けられました。最近では、電子状態理論と分子動力学理論を融合させた方法により、フラーレンやカーボンナノチューブなどの炭素ナノ構造体の生成機構を提案されました。いずれも、複雑な化学事象を明快に解き明かし、予測につなげる輝かしい業績として、世界的な注目を集めております。

これらのご研究に対し、平成4年日本化学会賞、平成5年世界理論有機化学会のシュレーディングメダル、平成17年アジア・太平洋理論および計算化学会の福井メダル、平成20年恩賜賞・日本学士院賞、平成22年瑞宝中綬章のご受章に続く、今回の文化功労者

のご栄誉は、私ども分子科学分野の研究者にとりましても、大変喜ばしいこととあります。先生は今回のご顕彰にあたり、「このたび、文化功労者に選ばれましたことは、大変名誉なこととあります。今までご支援いただきました国内外の多くの方々から感謝申し上げます。50年間励んできた理論化学・計算化学という基礎研究の分野が、多くの研究者の努力によって、化学結合の本質を明らかにするにとどまらず、化学の幅広い問題の解決に役立つとともに、科学技術にも大きな寄与をするようになったことは、大変喜ばしいこととあります。これからも研究者として、基礎研究を通じて社会のために尽くしたいと思っております」と語っていらっしゃいます。先生の一層のご発展を祈念しております。

（京都大学福井謙一記念研究センター
リサーチリーダー 榎 茂好 記）



宮崎秀俊助教に第9回日本熱電学会学術講演会若手講演奨励賞

この度、「ハーフホイスラー型ZrNiSnの電子構造に関する研究」に対して、第9回日本熱電学会学術講演会若手講演奨励賞を受賞しました。私は2年前まで、分子科学研究所極端紫外光研究施設(UVSOR)の木村グループに所属していました。今回、受賞した内容は、分子研を巣立ち、名古屋工業大学に着任してから開始した内容になりますが、分子研時代に培ってきた知識、そしてUVSORを利用して得られました実験結果が、今回の受賞に結び付いたため、受賞した内容を報告させて頂きたいと思えます。

現在、地球環境の悪化から次世代グリーン発電の高効率化が急務となっています。グリーン発電としては、太陽光、風力、バイオマス等が有名ですが、私が研究しているグリーン発電方法は熱電変換発電になります。熱電変換発電とは、n型およびp型の熱電材料の両端に温度差を与えた際に、ゼーベック効果により電圧差が生じることを利用したもので、温度差だけがあれば発電できるため、機械的な仕掛けが必要なく、メンテナンスフリーな極めてグリーンな発電方法として、古くから研究が

なされてきました。しかしながら、高い性能を有する熱電変換材料の多くはレアメタルを含み、またBiやTeといった毒性が強い元素を含んでいるのが問題となっています。そこで、私はレアメタルフリーで環境に優しい元素のみで構成することが可能な次世代熱電変換材料を探索する研究に従事しています。現在、私が注目している材料として、ハーフホイスラー型ZrNiSn化合物があります。この材料は主に600°C以上の高温環境下で優れたn型熱電特性を示す材料として知られていますが、優れたp型熱電材料が得られていないことが実用化に向けた課題となっています。熱電変換発電は、温度差による固体内の電子の流れがその起源となっていますので、物質内の電子の状態を理解することが熱電特性向上のカギになるのではないか、ということで、これまでの経験を活かしUVSORを用いて電子状態の直接観測を試みました。その結果、従来の予想では半導体と予測されていた電子構造が、実は擬ギャップという特殊な電子構造を形成していることを見出しました。また、電子状態計算を活用することにより、この擬ギャップ



宮崎 秀俊 (みやざき・ひでとし)

元 分子科学研究所IMSフェロー

現 名古屋工業大学

若手研究イノベータ養成センター

テニユア・トラック助教

miyazaki@nitech.ac.jp

の起源を明らかにすることができたことが、高く評価され、今回の受賞に致しました。この擬ギャップを利用すれば更なる性能を持つ材料ができると考えており、現在、実際に擬ギャップをコントロールしたp型熱電材料の開発に取り組んでいます。今後も、UVSORを利用することにより、更なる熱電変換材料の研究を進めていきたいと考えています。今後ともよろしくお願い致します。



山本貴助教に第7回日本物理学会若手奨励賞

この度、第7回（2013年）日本物理学会若手奨励賞を受賞することになりました。受賞対象になった研究題目は、「分子性導体の電荷整列と電荷揺らぎに関する研究」です。

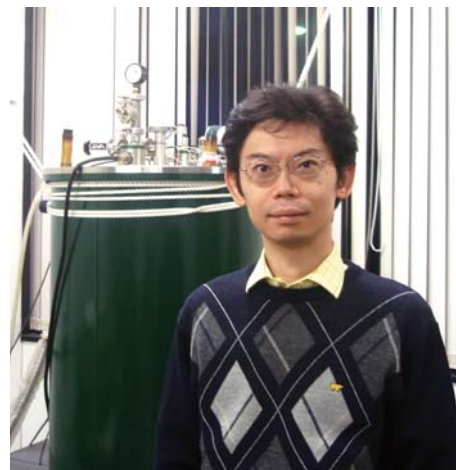
電荷整列状態とは、最近接クーロン力によりイオンの分子が中性分子を挟むことで整列し、絶縁化する現象です。分子性導体を手がける多くの研究者が興味を持っており、実験（構造解析・磁気共鳴・外場下輸送現象）および理論の立場から研究が進められています。

ところで、分子性導体には、温度に依存しない高い伝導性を示す場合や、絶縁体から超伝導に転移する場合があります。この挙動を理解することで、分子性導体の伝導原理や合成指針を提案できればと考え、電荷整列に関連した研究を始めました。私は、「電荷揺らぎ」という概念に着目しました。これは、複数の電荷整列状態（電荷の配列パターン）が拮抗（フラストレーション）すると言う概念です。そのためには、各分子の時間平均電荷量を求め、より中性的な分子とよりイオニックな分子の所在を知り、分子間相互作用（最近接クーロン力や移動積分）を議論する必

要があります。松崎晋先生の論文を読んで、赤外・ラマンスペクトルがこの研究にうまく利用できることに着想しました。着想時は東大物性研の学生でしたが、適切な測定装置が無かったため、分子研の薬師久彌先生の下で実験を行いました。

院生からIMSフェローにかけては金属-絶縁体転移を研究し、IMSフェロー時代には測定・解析の完成度を高め、IMSフェローから理研時代に超伝導体の研究をしました。その結果、超伝導体は電荷が揺らぐための一定の条件を満たすことを突き止め、超伝導と分子の並び方の関連性も見出しました。ET塩やDCNQI塩以外の研究にも着手し、とりわけ、 $X[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ 塩という物質群の中から見出した新しい電子状態は、最近の重要な成果です。一連の成果から超伝導機構の解明に貢献できればと期待しています。ごく最近、我々の成果に即した理論が提案されました。

研究開始から5年間ぐらいは、振動分光学的手法が低く評価され、この業界からの離別も検討していました。しかし、薬師久彌先生・売市幹大博士・山本薫博士・オルガドロズドバ博士を



山本 貴（やまもと・たかし）

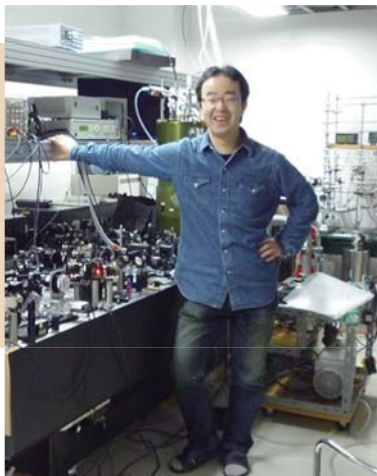
元 分子科学研究所IMSフェロー
現 大阪大学 理学研究科 化学専攻 助教

はじめとした分子研関係者、および、加藤礼三先生・田村雅史先生・中澤康浩先生のご支援や、川本正博士や石川忠彦博士をはじめとする、多くの共同研究者のおかげで、研究を継続することができました。この紙面を借りて御礼申し上げます。

ET = bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene
DCNQI = 2,5-dimethyl-N,N'-dicyanoquinonediimine
dmit = 1,3-dithiole-2-thione-4,5-dithiolate

分子研出身者の受賞（広報室で把握しているもの）

長谷川 宗良 東大准教授（元分子研 助教）に平成24年度分子科学研究奨励森野基金
新倉 弘倫 早大准教授（元総研大研究生）に平成24年度日本学術振興会賞



香月 浩之

奈良先端科学技術大学院大学 物質創成科学研究科 准教授
(前 光分子科学研究領域第二部門 助教)

感謝の辞

かつき・ひろゆき / 1997年京都大学理学部卒、2002年京都大学大学院理学研究科博士課程修了(博士(理学))、同年チューリヒ大博士研究員、2004年から分子科学研究所電子構造研究系助手、2007年改編により光分子科学研究領域助教。2012年6月より現職。

8年と2ヶ月半。

これが、私が分子研で過ごした期間である。助教の平均在任期間がどのくらいなのか知らないが、おそらく平均より少し長かったかと思う。いろいろとオトナの事情もあったけれども、一番の理由はやはり居心地が良かったということに尽きる。金銭、時間、設備のすべての面で研究に専念させてもらえる環境が整っている、そんな所で過ごしたこの8年間は私の研究者人生の中でも充実した期間として記憶されるであろうと思っている。

昨今、大学レベルでも大規模な装置が手に入るようになり、「分子研でなければできない」というような装置的なアドバンテージがなくなりつつあることは、多くの研究者が認めていることである。そういった意味で、共同利用機関としての分子研のプレゼンスが低下するのは、もはや仕方のないこと

だと私は思う。むしろ、分子研のウリはその「それほど大きくないけれどもそれなりの規模」と「東京からそこそこ離れていること」を生かしつつ、よりアグレッシブに新しいことに挑戦していく、そんな雰囲気や常を保持して所内外の若手研究者を鼓舞、啓発していくような、日本の基礎科学研究における駆け込み寺的な立ち位置ではないかと考えている。そういった精神で行われた研究ならば、たとえそれが失敗に終わったとしても、そこから学び、経験したことを無駄にせず、分子研を出た後もそういう精神を持ち続けて、新たな研究に挑む研究者が創られていくのではないだろうか(無論、私自身もそうでありたいと思う)。以上、ちょっとまじめな話をしてみました。まあ中年の戯れ言です。

あと世界中のいろいろな大学のキャンパスと比較して思うことは、もう少

し分子研にも安らげる環境があってもよいのではないだろうか。実験棟屋上にカフェテリアを開設するとか、中庭でウサギとリスの放し飼いをやってみるとか、正面の池で超高級錦鯉を飼ってみるとか、いかがだろうか。まあ中年の戯れ言です。

今後もちょうくちよく分子研にお邪魔する予定があるので、また所内でお目にかかることもあるでしょう。そんな時は物珍しそうにチラ見するか、気軽に声をかけてくれたらと思います。最後になりましたが、分子研所属時にお世話になったたくさんの方々に改めて感謝したいと思います。中でも特に着任当初からのメンバーであった大森教授、技官の千葉さん、秘書の稲垣さんにはこの場を借りて、お礼を申し上げます。これは中年の戯れ言、ではなくて、心からの感謝の意をこめて。

外国人研究者の 印象記

Dr. Rakesh Bhandari

Laser Research Center



Hello everyone! I am using this opportunity to express my impressions on working at IMS for the last two years. Before joining IMS, I have worked for more than 13 years in the R&D of a leading Japanese company. So, this provides me a good position to share my impressions.

I feel that IMS provides a unique environment for research. It is situated in the historical city of Okazaki, which is not crowded, but still has all modern facilities. IMS is located in a very green patch on the top of a low hill that provides some aloofness, which is desirable for concentrated research.

The facilities at IMS compare with the best not only in Japan, but also in the world. It has a beautiful library and a computational center equipped with super computer systems. Besides different laboratories conducting leading-edge research, it has a very professional Equipment Development Center, which supports the technical design and fabrication needs of the researchers.

Besides the facilities, I believe that it is the professional, though relaxed, environment that differentiates IMS from the R&D centers of leading Japanese companies, or even the other national research institutes.

There is a good balance between freedom in research and maintaining confidentiality in sponsored projects. This has enabled me to not only enjoy my work, but also achieve results that have been appreciated at leading international conferences.

Under Prof. Taira's guidance, I have been working in the extremely interesting field of nonlinear optics using microchip lasers. We have been able to demonstrate new phenomenon using the sub-nanosecond pulse-width range, which was not earlier explored by other researchers.

I wish that IMS continues its unique culture in research and also collaborates with other international research institutes to spread its philosophy and good work. I hope to assist IMS in this field.



須田 理行

すだ・まさゆき

物質分子科学研究領域
電子物性研究部門 助教



慶應義塾大学にて学位を取得後、学振特別研究員 (PD)、理研の特別研究員、基礎科学特別研究員を経て、本年9月より分子研に着任いたしました。現在は、強相関電子系物質を利用した新奇な分子性デバイスの開発に関する研究を行っています。

今後ともよろしくお願い致します。

向山 厚

むかはやま・あつし

生命・錯体分子科学研究領域
生体分子情報研究部門 助教



大阪大学で学位取得後、分子科学研究所IMSフェロー、名古屋大学を経て、9月より分子科学研究所の助教に着任いたしました。

専門はタンパク質の機能解析で、様々な方法を駆使することで面白いタンパク質研究を発信できればと考えております。

約3年ぶりとなる分子科学研究所での生活ですが、新たな気持ちで研究に邁進したいと思いますので、皆様どうぞよろしく願います。

新谷 敦子

しんたに・あつこ

生命・錯体分子科学研究領域
生体分子情報研究部門 技術支援員



2012年9月16日より、生命・錯体分子科学研究領域、生体分子情報研究部門の秋山修志先生のもとで、技術支援員としてお世話になっております。これまでは生理学研究所と基礎生物学研究所でマウスを相手に仕事をしてきました。今は、新しい技術を教えていただきながら、楽しく実験をしています。お役に立てるよう励みますので、どうぞよろしく願います。

山本 浩二

やまもと・こうじ

生命・錯体分子科学研究領域
錯体物性研究部門 助教



大阪大学および同大学院（その間、学振DC1）を経て、2012年10月より、分子研錯体物性研究部門村橋グループの助教として着任いたしました。金属クラスター錯体の合成とその反応性の研究を行っています。これまで学んできた知見や技術を活かして新しいことに果敢に挑戦していきたいと考えています。

何卒よろしくお願い申し上げます。

XU, Yanhong

物質分子科学研究領域
分子機能研究部門 研究員



2005 Graduated from Chemistry Education, Harbin Normal University (China). 2009 Completed the master course at Northeast Normal University. 2012 Completed the doctoral course at The Graduate University for Advanced Studies [SOKENDAI], Ph.D, under the guidance of Prof. Donglin Jiang, focusing on the synthesis and function exploration of novel conjugated microporous polymers (CMPs). Oct. 2012, postdoctoral, IMS. Now, I am working on exploring novel function CMPs.

小野 純一

おの・じゅんいち

理論・計算分子科学研究領域
計算分子科学研究部門 IMSフェロー



2012年12月1日付で計算分子科学研究部門の斎藤研究室にIMSフェローとして採用された小野純一と申します。京都大学理学研究科化学専攻の量子化学分科（谷村研）の出身で、MDシミュレーションを用いた水のダイナミクスの解析で学位を取得しました。今後はこれまで学んできた物理化学の視点から生体分子系における生命現象に迫りたいと考えています。

よろしく願います。

北 辻 千 展

きたつじ・ちひろ

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



京都大学で学位取得後、北海道大学を経て、2012年12月より特任研究員として着任いたしました。現在は、ヘム代謝関連分子について構造や機能を解明する研究を行っています。これまでに培ったタンパク質の機能解析実験のスキルを十分に発揮して活躍していきたいと考えています。

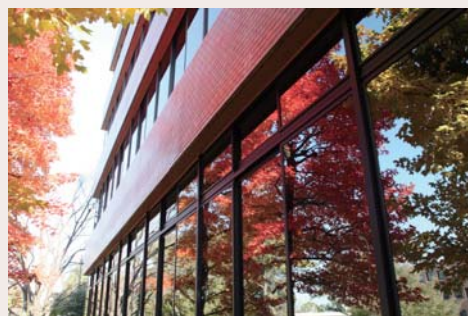
宜しくお願いいたします。



研究棟と南実験棟の間の中庭
今年も黄色の絨毯が引きつめられた



実験棟前の紅葉
実験棟の窓ガラスには紅葉が綺麗に映し出される（下写真）



紅葉@分子研



実験棟とUVSOR棟の間の中庭
見事な赤と緑の共演である



共同利用研究ハイライト

最小レポータータンパク質の構築を目指した組換えガウシアルシフェラーゼの解析と改変

黒田 裕 東京農工大学工学部生命工学科 准教授 Wu Nan 東京農工大学工学府生命工学専攻

生物発光を触媒するルシフェラーゼがバイオイメージングに於いて必須なツールとなっているなか^[1]、ガウシア（海洋カイアシ類 *Gaussia princeps*; 海洋性プランクトンの一種）由来のルシフェラーゼ（以下、GLuc; 169残基）は最も小さなレポータータンパク質として注目を集めている。GLucは、蛍ルシフェラーゼ（550残基）より安定性・活性・汎用性の面で優れたレポータータンパク質となる可能性を秘めているが、その配列が解明されたのは比較的新しい^[2]。10個のシステインがSS結合を形成する組換えGLucを汎用的な大腸菌で発現するのは難しいため、殆どの場合、GLucは高価な動物や昆虫細胞から精製されている。そのため、GLucを改良する研究は少なく、その応用範囲も未だ限られている。本稿では、大腸菌を宿主とした組換えGLucの発現・精製法の開発と、組換えGLucの活性

及び構造安定性における初めての生物物理学的な解析に関して述べ、現在進行中の発光活性改変実験についても紹介する。

大腸菌で組換えタンパク質を発現すると非天然型SS結合を形成することが非常に多い（図1）。変性状態ではGLucの10個のシステインが酸化されると、天然型SS結合を形成する確率は1/945とゼロに近い。そのため、大腸菌で発現したGLucの10個のシステインが天然型SS結合を形成するには、天然構造に近い状態で、SS結合を形成させる必要がある。よって、我々は、発現温度を37℃から25℃に下げ、可溶性画分で発現したGLucのみを収集するという工夫を行った^[4]。さらに、GLucのC末端に、12残基の溶解性向上ペプチド系タグ（C9Dタグ）^[5]を付加することによって、変性状態でもGLucが凝集し難いGLuc-C9D変異体を作製した。溶解性が高いGLuc-C9Dは、天然状態に折り畳まることが出来るため、天然型SS結合を形成し易くなる。以上の考えに基づき、大腸菌を宿主として用いて25℃で培養し、可溶性画分に発現したGLuc-C9DをHisアフィニティーカラム、逆相HPLCカラムによって精製した。その後、GLucの両端に融合するHisタグとC9DタグをFactor Xaによ

るプロテアーゼ処理で切断した後、再度逆相HPLC精製した結果、培養液1L当たり2 mgの天然型SS結合を形成する組換えGLucを得ることが出来た（図1B）。

高純度に精製された組換えGLucを用いることで、詳細な物理化学的な解析が可能となった。GLucの発光活性は今まで考えられていたよりはるかに強く、蛍ルシフェラーゼの10倍（同酵素濃度比較）以上であることを解明した。また、円偏光二色分光法から測定したGLucの変性温度が60℃であり、GLucが広い温度範囲で利用可能であることを示した。さらに、NMR測定によって、組換えGLucが単量体で天然状態にフォールドしていることが強く示唆された（図2）。現在までの解析で、GLucの結晶化が困難であることを確認しているため、今後もNMRを用いてGLucの構造解析を進めることも必要であると考えている。

最後に、現在進めているGLucの改変実験に関して少し述べる。GLucの発光色を改変する動機として、1回の実験で複数の反応を同時に測定することが可能になるため、バイオイメージングにおけるGLucの応用範囲が格段に広がるという利点が挙げられる。我々は、GLuc配列中の親水性領域の4残

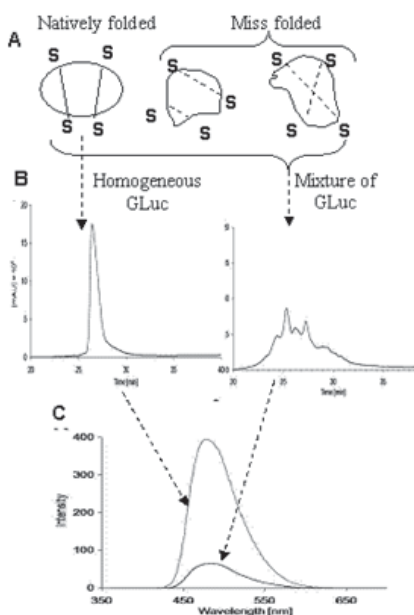


図1 大腸菌で発現した組換えGLucにおけるSS結合形成の問題。(A) 配列中に10個のシステインを有するGLucを、従来の手法で発現すると非天然型SS結合を形成する不活性GLucが多く混合する。本研究では天然GLucのみを大腸菌から精製する方法を開発した。(B) 大腸菌で発現したGLucの逆相HPLC。(左) 本手法で発現したGLucでは一本のHPLCピークが観測される。(右) 従来の発現方法では、非天然型SS結合を有するGLucが混合しているため、多数のプロードなピークがHPLCで観測される。(C) 組換えGLucの発光スペクトル。今回開発した手法で発現したGLucの発光活性が強いことから、天然型SS結合を形成する天然GLucの精製に成功したことが、強く示唆される。

基をランダム変異させ、pET21-GLuc-C9-Random プラスミドを作製し、それを大腸菌に形質転換した。ランダム変異を導入したGLucを発現した後、大腸菌を24時間さらに培養し、独自に開発中の大腸菌の自己溶菌効果を応用したスクリーニング法([5]、Kamioka T, Submitted)を用いて、未精製状態でGLucの発光活性を測定した。その結果、

約100個のクローンから発光極大波長が最大で9 nmシフトしている変異体を同定した(図3)。今後は、発光極大波長をさらにシフトさせGLucの発光色を変えたいと考えている。それまでにGLucの構造が決定できれば、活性部位周辺に変異を導入することでGLucを迅速に改変する事が可能となる。

最後に、本研究を進めるにあたり、長

きに渡って活発な議論と温かいご支援をいただいた桑島邦博教授及び桑島研究室の皆様にご心からお礼を申し上げます。さらに、500Mhz、920MhzのNMR測定を可能にくださった分子科学研究所に感謝の意を表す。

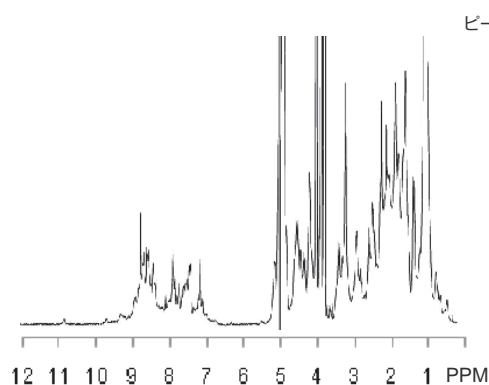


図2a 組換えGLucの一次元NMR

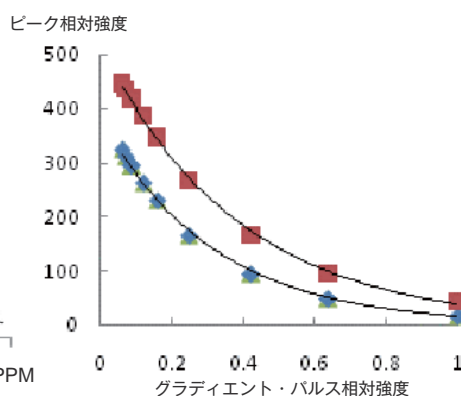


図2b PFG法による分子量の測定

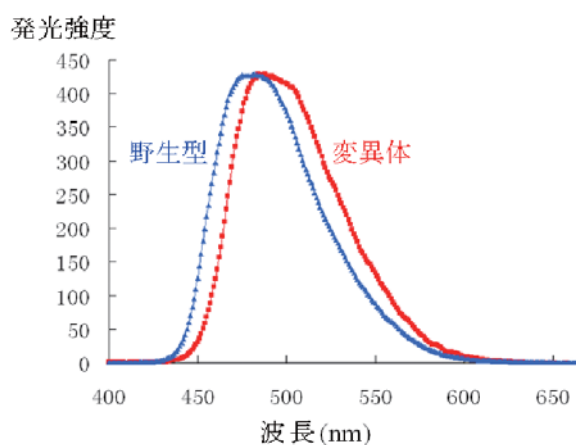


図3 野生型GLuc (赤) とランダム変異を含むGLuc (青) の発光スペクトル



くろだ・ゆたか
スイス・チューリッヒ連邦工科大学(ETH Zurich) 物理学科卒業、東京大学大学院理学系研究科物理学専攻終了(理博)、2004年より東京農工大学工学部生命工学科准教授
研究内容：生物物理学、タンパク質科学、構造バイオインフォマティクス
<http://www.tuat.ac.jp/~ykuroda>



Wu Nan
現在、東京農工大学工学部生命工学専攻博士課程、中国福建省国立華僑大学バイオテクノロジー学科卒業(2009年)。
研究内容：ランダム変異及びタンパク質工学的的手法によるガウシアルシフェラーゼの改良。

参考文献

- [1] O. Shimomura, *Bioluminescence: Chemical Principles and Methods*, World Scientific, Hackensack, N.J., 2006.
- [2] M. Verhaegent, T.K. Christopoulos, Recombinant Gaussia luciferase. Overexpression, purification, and analytical application of a bioluminescent reporter for DNA hybridization, *Anal Chem* 74 (2002) 4378-4385.
- [3] T. Rathnayaka, M. Tawa, T. Nakamura, S. Sohya, K. Kuwajima, M. Yohda, Y. Kuroda, Solubilization and folding of a fully active recombinant Gaussia luciferase with native disulfide bonds by using a SEP-Tag, *Biochim Biophys Acta. Proteins and Proteomics*, 1814(12):1775-1778 (2011).
- [4] A. Kato, K. Maki, T. Ebina, K. Kuwajima, K. Soda, and Y. Kuroda, Mutational analysis of protein solubility enhancement using short peptide tags, *Biopolymers*, 85:12-18. (2007).
- [5] 黒田裕、上岡哲也、惣谷志保里、VanXの溶菌活性の解明と菌体内生産物の精製工程の簡略化, *未来材料*, 11(7)32-36,(2011年8月号).

共同利用研究ハイライト

発光性配位高分子の複合化

柘植 清志 富山大学大学院理工学研究部 教授

近年、光の利用に関連して発光性物質の研究が盛んに行われている。発光性の化合物としては、共役系を持つ有機物、酸化物・硫化物などの無機物、ランタノイド化合物などが挙げられるが、筆者の研究しているd遷移金属錯体の分野でも、発光性の化合物が数多く合成・研究されるようになってきた。発光性金属錯体として、トリス(2,2'-ピピリジン)ルテニウム(II)錯体や、ターピリジン白金(II)錯体のようなd⁶, d⁸金属錯体は以前から広く研究されている。これに対して、d¹⁰の金属中心を持つ化合物も発光性を示すものがあり、銅(I)や銀(I)を中心金属とする発光性の錯体について研究が発展してきている^[1-3]。我々は強発光性を示す一連の錯体[M^I₂X₂(PPh₃)₂(L)_n] (M: Cu, Ag; X: Cl, Br, I)に注目し、種々のN-ヘテロ芳香族配位子Lを用いた系統的な合成により、発光性に対するX⁻やLの影響について検討を行ってきた^[4]。最近、これらの化合物が配位高分子である事を利用し、混晶化により異なる発光ユニットを組み合わせた化合物の合成を行っている。

これらの化合物[M₂X₂(PPh₃)₂(L)]は、{M₂X₂}骨格にPPh₃とLが配位した構造をもつ。このため、Lとして架橋配位子を用いると{M₂X₂(PPh₃)₂}ユニットが架橋配位子Lによって連結された一次元鎖状構造を持つ配位高分子となる。このような配位高分子では、例えばMに二種類の金属を用いることができる、一つの鎖上に異なる発光性ユニットを持つ化合物を合成することができる(図1)。

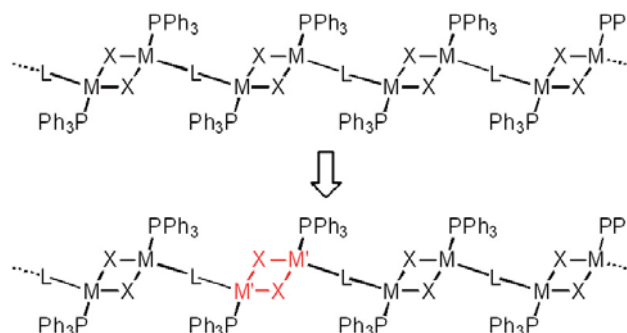


図1 配位高分子[M₂X₂(PPh₃)₂(L)]の模式図および混合配位高分子化。

このような混合型の配位高分子では、発光ユニット間の相互作用による新たな発光性の発現やヘテロ発光ユニット間のエネルギー移動など、単一錯体とは異なる性質を期待することができる。幸いにもこれらの配位高分子[M₂X₂(PPh₃)₂(L)]の多くは、同じLを用いた場合に、M, Xによらず同形構造をとった。これを利用して、銅-銀混合金属錯体[(Cu_xAg_(1-x))₂-I₂(PPh₃)₂(bpy)₂] (bpy: 2,2'-ピピリジン)を合成したところ、銀(I)発光ユニットから銅(I)発光ユニットへ非常に高効率のエネルギー移動が進行することが分かった。また、混合ハロゲノ銀(I)錯体[Ag₂(X_xX'_(1-x))₂(PPh₃)₂(bpy)₂] (X: Cl, Br, I)の合成により、混合ハロゲノ配位高分子中で非常に速やかなエネルギー移動が進行していることが分かった^[5]。このようにして、同じLを持つ際に[M₂X₂(PPh₃)₂(L)]が同形結晶を生成すると、銅-銀混合金属錯体や混合ハロゲノ錯体が合成可能であることがわかってきた。今回の協力研究では、これらの研究をさらに進め、架橋配位子Lを混合した錯体[M₂X₂(PPh₃)₂(L_xL'_(1-x))]の合成につい

て研究を行った。

まず、構造および性質の類似した配位子として、ピラジンとアミノピラジンを選択した。ピラジンとアミノピラジンはサイズが異なるが、この系では同形結晶を生成する。また、ピラジン錯体もアミノピラジン錯体も{Cu₂X₂}単位から配位子Lのπ*軌道への電荷移動励起状態由来の発光を示し、ピラジン錯体は赤色、アミノピラジン錯体は、π*軌道がピラジンに比べて高エネルギーシフトするため黄色に発光する。ピラジンとアミノピラジンの混合比率を変えて合成を行った所、任意の比率で単結晶として化合物が得られることがわかった(図2)。単結晶X線構造解析の結果、結晶内では架橋配位子部分にアミノピラジンとピラジンがディスオーダーして存在し、ピラジンとアミノピラジンの両方を連結配位子とした配位高分子が生成していることが明らかになった。写真に示したように、ピラジン-アミノピラジン混合配位子錯体では、反応当量比を変えることにより、黄色から赤色まで、連続的に結晶の色と発光色が変化し、二つの化合物の性質を併せ持つことが分かった。次

に、ピラジンに構造が類似しているという観点から、脂肪族のピペラジンを混合した化合物の合成も行った。ピペラジンは、ピラジンに比べ塩基性が高く、ピペラジン単一錯体は、 $\{Cu_2X_2\}$ 骨格由来とされる非常に弱い青色の発光を450 nm付近に示す。ピラジン-ピペラジン混合系でも、任意のピペラジンとピラジンの反応比率で単結晶として化合物が得られた。単結晶構造解析により、この場合にもピペラジンとピラジンの両方を含む配位高分子が生成していることが明らかとなった。この化合物の場合にはピペラジンとピラジンの反応当量比が9:1の場合でもほぼピラジン化合物と同様の発光がみられ(図3)、発光性についてはピラジン配位子の方が支配的なることが分かった。

今回紹介した例は同形結晶の混合化であり、生成物は同形構造をとり発光性は連続的な変化がみられることが多い。一方で、同じLを用いた場合でも、ハロゲン配位子によって結晶形が異なる場合がある。このような化合物の混合化についても検討し、親構造が異なる場合にはある混合比率を境に親構造のどちらかをとり例が多いことがわかってきた。またこの場合には、構造変化に伴い発光性も不連続に変化し、発光に構造も重要な影響を与えることもわかってきた。今後は、発光寿命や発光量子収率の測定により、これらの混合配位子型の錯体の励起状態の詳細

やエネルギー移動の解明を進めていきたい。

混合するという手法は、無機化合物のドーピングや、有機高分子の共重合などに見られるように、化合物の特徴を組み合わせることで新たな能力を引き出す一般的な方法の一つであると考えられる。今はまだ、手持ちの化合物を起点に、どのような組み合わせが可能かを検討しているが、将来的には発光ユニット間の相互作用の発現や、単独ではその構造を作らないユニットをドーパントとして導入し、新たな機能性の賦与へと展開したい。

最後になりますが、これらの研究を進めるにあたっては、効率良く単結晶構造解析を進める必要があり、分子研の単結晶X線構造解析装置を利用して多くの結晶構造を決定させて頂きました。地方大学にはまだまだ不足した装置があり、分子研に共同利用できる装置があるのは非常にありがたいことだと考えています。単結晶X線構造解析装置をいつでも利用しやすい環境に整えて頂いた岡野氏をはじめとする技術職員の皆様に感謝いたします。また、協力研究では、研究室学生ともども分子研に行くことが可能であり、ディスカッションや装置利用など、各所で“分子研らしい”刺激を私も学生も得ることができました。今回の協力研究に対応頂いた永田先生とそのグループの皆様にも感謝いたします。

参考文献

- [1] A. Barbieri, G. Accorsi, N. Armaroli, *Chem. Commun.*, 2185 (2008)
- [2] 坪村太郎, 佃俊明, 松本健司, *Bull. Jpn. Soc. Coord. Chem.*, **52**, 29 (2008).
- [3] 柘植 清志, *Bull. Jpn. Soc. Coord. Chem.*, **56**, 24 (2010).
- [4] H. Araki, K. Tsuge, Y. Sasaki, S. Ishizaka and N. Kitamura, *Inorg. Chem.*, **44**, 9667 (2005)
- [5] 柘植 清志, 「混合化による銅(I)および銀(I)配位高分子の発光性制御」日本化学会第92春季年会, 1S7-11 (2012)



図2 アミノピラジン-ピラジン混合配位高分子。左から、反応比率10:0, 9:1, 7:3, 3:7, 1:9, 0:10で合成した試料。上: 蛍光灯下、下: 紫外線照射下。



図3 ピペラジン-ピラジン混合配位高分子。左から、反応比率10:0, 9:1, 7:3, 3:7, 1:9, 0:10で合成した試料。上: 蛍光灯下、下: 紫外線照射下。



つげ きよし

1995年 東京大学大学院理学研究科博士課程修了、博士(理学)。1995-2000年 分子科学研究所錯体化学実験施設助手、2000-2008年 北海道大学大学院理学研究科助手、2008-2010年 大阪大学大学院理学研究科准教授、2010年より現職。専門は錯体化学で、発光性 d^{10} 金属錯体の開発、酸化還元活性な金属錯体の合成、錯体の動的挙動に関する研究を行っている。

共同利用研究ハイライト

磁場で固まり方を制御する： フェロセン系イオン液体の磁場応答

持田 智行 神戸大学大学院理学研究科化学専攻 教授

1. はじめに

フェロセン系錯体からなる電荷移動塩は、従来、固体物性の面から興味を持たれてきた物質群である。これらの塩は通常高融点であるが、私たちは最近、フェロセン系錯体の塩を「液化」することに成功した。これらは「金属を含む新しい機能性液体」であり、通常の液体・溶液では実現不可能な優れた機能性を発現する。本稿では、物質分子科学研究領域・中村グループとの共同研究として行われた、フェロセン系イオン液体の磁場応答性の研究について紹介する。

2. フェロセン系イオン液体の開発

まず研究の経緯について触れる。イオン液体は100℃以下の融点を持つ「塩」であり、多彩な物性・機能性を示すことで注目されているが、多くがイミダゾリウム塩などのオニウム塩である。筆者はもともと、フェロセン系錯体からなる電荷移動塩の物性を研究

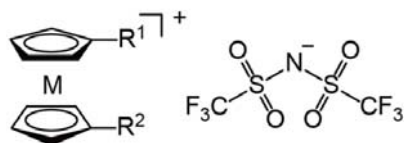


図1 フェロセン系イオン液体 (M=Fe) およびコバルトセン系イオン液体 (M=Co) の写真 (R¹ = R² = Et)。下に化学式 (一般式) を示した (アニオンはTf₂N⁻)。

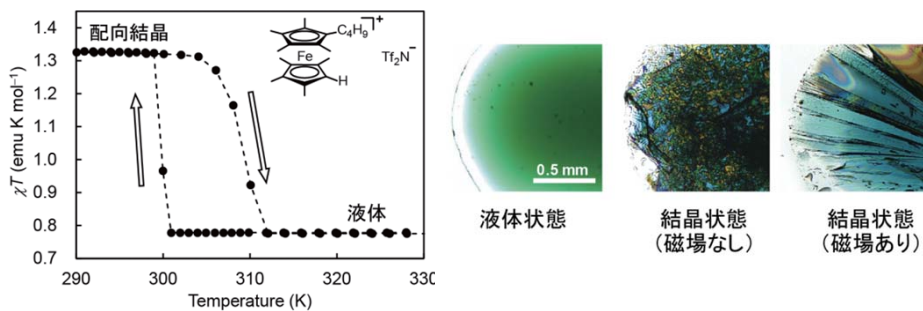


図2 (左) [(C₄H₉)Me₈Fc][Tf₂N]の磁化率の温度依存性 (磁場0.5 T)。冷却過程と昇温過程を示した。(右) 左から、液体状態、磁場なしで結晶化させた場合、および磁場中で結晶化させた場合の偏光顕微鏡写真。磁場中では、磁場(図中では上下方向に印加)に対して垂直に結晶成長が起こる。

していたが、これらの錯体を液化できれば、特異な常磁性液体が実現すると考えた。様々な試行錯誤の末、フェロセンのアルキル誘導体に対してフッ素系アニオンを組み合わせた一連の塩が、いずれも室温でイオン液体となることを見出した^[1]。

これらのフェロセン系イオン液体は濃青色の常磁性液体であり (図1左)、無溶媒反応によってアルキルフェロセンから高効率で合成できる。中心金属をコバルトに変えると、オレンジ色の非磁性液体となる (図1右)。これらはイオン電導性を有する不揮発性液体である。フェロセン系イオン液体の多くは空気中で不安定であり、評価に手間取ったが、環をメチル化することで、十分な耐酸素性を持つ緑色液体が生成した。この物質の磁気物性について次節に述べる。

3. フェロセン系イオン液体の磁場応答

フェロセン系イオン液体は、カチオン中の鉄イオンがスピンを担う常磁性液体である。このカチオンは一軸磁気異方性を持ち、分子の5回軸が磁場方向を向きやすいという特徴がある。以

下、室温付近に融点を持つ、図2(挿入図)の物質の磁性について述べる^[2]。この物質を磁場中 (0.5 T) で結晶化・融解させると、室温付近でヒステリシスを伴う顕著な磁化率変化を示した (図2)。すなわち、この液体を磁場中で凍らせると磁化率が上昇し、再び融解させると元の磁化率に戻る。この磁性変化は上述の磁気異方性に基づく現象であり、磁場に沿って分子あるいは結晶が配向しつつ結晶化が起こったことに起因する。印加磁場を強めると配向度が上がり、結晶相の磁化率がさらに増加した (2 Tでほぼ飽和)。この磁場配向は、偏光顕微鏡観察でも確認できた (図2右)。すなわちこのフェロセン系イオン液体は、磁場によって固まり方を制御できる特異な磁性流体である。

ところで液体の凝固に対する磁場効果に関しては、古くから酸化物や有機物を対象とした研究例が多数あり、それ自体は決して珍しい現象ではない。しかしながら、このように弱磁場下、室温付近で容易に磁場配向が実現するような系はきわめて稀である。本系では磁化率 (配向度) を室温付近で再現性良く磁場制御できることから、磁気

記憶の新しい原理ともなりうる。以上の現象は、室温付近に融点を持つイオン液体と、磁気異方性を持つフェロセンの組み合わせによって初めて実現したものである。

4. おわりに

私たちは現在、「金属錯体を液化する」という概念に基づき、新しい機能性液体化学の開拓を進めている。上述

のフェロセン錯体に加え、アレーン錯体、ハーフメタロセン錯体^[1,3]を順次液化し、さらに一連のキレート錯体^[4]を液化した。これらは特異な外場応答性、気体吸着能、化学反応性などを示す斬新な液体材料である。

本稿の結果は、舟浴佑典氏、稲垣堯氏（神戸大・大学院生）、および古川貢助教、中村敏和准教授（分子研）との共同研究によるものである。分野を

超えた挑戦であり、かつ液体を扱う難度の高い実験であったにもかかわらず、心よりご支援頂いた分子研スタッフに重ねて感謝を申し上げたい。このほか、電荷移動錯体の研究^[5]でも共同利用研究を実施させて頂いている。

参考文献

- [1] (a) T. Inagaki, T. Mochida, M. Takahashi, C. Kanadani, T. Saito, D. Kuwahara, *Chem. Eur. J.* **2012**, *18*, 6795; (b) T. Inagaki, T. Mochida, *Chem. Lett.* **2010**, *39*, 572.
[2] Y. Funasako, T. Mochida, T. Inagaki, T. Sakurai, H. Ohta, K. Furukawa, T. Nakamura, *Chem. Commun.* **2011**, *47*, 4475
[3] T. Inagaki, T. Mochida, *Chem. Eur. J.* **2012**, *18*, 8070.
[4] Y. Funasako, T. Mochida, K. Takahashi, T. Sakurai, H. Ohta, *Chem. Eur. J.*, **2012**, *18*, 11929.
[5] (a) A. Funabiki, T. Mochida, K. Takahashi, H. Mori, T. Sakurai, H. Ohta, M. Uruichi, *J. Mater. Chem.*, **2012**, *22*, 8361; (b) A. Funabiki, H. Sugiyama, T. Mochida, K. Ichimura, T. Okubo, K. Furukawa, T. Nakamura, *RSC Adv.*, **2012**, *2*, 1055.



もちだ・ともゆき

1994年 東京大学大学院総合文化研究科・博士課程中退。同年、分子研助手（宮島グループ所属）。1997年 東邦大学理学部講師、2003年 同 助教授。この間、1997～2000年 JST さきがけ 兼務。2007年より現職。博士（学術）。専門は物性化学。

共同利用研究ハイライト

新しい自由エネルギー計算手法の開発

森下 徹也 産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門

1. はじめに

自由エネルギーは系の熱力学的安定性の評価に重要な量であり、それ故分子シミュレーションにおいて効率良く自由エネルギーを計算できることが望まれている。熱力学的積分法は自由エネルギーの計算によく用いられているが、後処理として数値積分が必要であり、またエルゴード性の破れが問題になることもある。そこで最近になって、反応座標を自由エネルギー面上の力学変数として扱う手法が導入され [mean force dynamics (MFD)]、より効率の

高い自由エネルギー計算が試みられている^[1-3]。私は最近、分子研の奥村准教授と伊藤助教の協力を得て、MFDの枠組みに立脚した新しいMFD法を提案した^[4]。従来のMFD法では、自由エネルギー障壁を乗り越えて効率良くエネルギー面をサンプルするために、人為的なポテンシャルエネルギーの付加や (metadynamics^[1])、非物理的な高温 dynamics (AFED^[2] or TAMd^[3]) が導入されている。我々の新しい手法は従来法とは異なり、元のエネルギープロファイルを人為的に変換する機構を

取り入れている。さらに（原理的には）“on the fly”で自由エネルギーが得られる (metadynamics では、全座標空間を十分サンプルしなければ局所的な自由エネルギー差も得られない)。本稿では、MFDをベースにする我々の新しい自由エネルギー計算手法^[4]—LogMFD法—を簡単に紹介する。

2. Logarithmic Mean-Force Dynamics (LogMFD)

$\mathbf{X} (= \{X_1, X_2, \dots, X_n\})$ を反応座標とする自由エネルギープロファイル $F(\mathbf{X})$

の構築を考える。 X_i は多くの場合分子の位置座標の関数であるが(例えば二面角など)、ここでは仮想的な力学変数として扱い、その時間発展は以下の運動方程式に従うとする。

$$m_i \ddot{X}_i = -\frac{1}{(\alpha F + 1)} \frac{\partial F}{\partial X_i} - m_i \dot{X}_i \dot{\eta} \quad (1)$$

m_i は X_i に対する仮想質量で、 α は任意パラメータである。 X_i にかかる力はポテンシャルエネルギーを F ではなく

$$F \rightarrow \frac{1}{\alpha} \log(\alpha F + 1), \quad (2)$$

とした場合の力に相当する。 α を適切な値に設定すれば、 F におけるエネルギー障壁を低くすることができ、 F 面上の効率よいサンプリングが可能となる。

(1)式右辺の第2項は熱浴に関するもので、 η を能勢-Hoover熱浴の変数とすると以下の保存量が存在する。

$$\tilde{H} = \sum_i \frac{1}{2} m_i \dot{X}_i^2 + \frac{1}{\alpha} \log(\alpha F + 1) + \frac{1}{2} Q \dot{\eta}^2 + gkT\eta \quad (3)$$

$-\partial F / \partial X_i$ はいわゆる平均力であり、通常のMFDと同様に、 \mathbf{X} を固定した時にかかる瞬間力のカノニカル平均から求める。仮想質量は、metadynamicsやAFEDと同様に断熱的に \mathbf{X} が時間発展できるように、粒子系の質量より数オーダー大きくする。(1)式の力の項には求めるべき F が含まれているが、断熱性が高く $\partial F / \partial X_i$ が正しく評価されていれば \tilde{H} が保存されるので、(3)式を F について解けば各時刻での F が“on the fly”で求まる(さらに(3)式に従って \mathbf{X} を時間発展させることができる)。実際には通常のMD計算ほど \tilde{H} の保存性は良くないが、複数の \mathbf{X} の軌跡による結果を平均することで、reasonableな F を与えることが期待される。

3. シミュレーション結果

図1に本手法を真空中のグリシンジペプチド分子に適用した結果を示す

(実線: log-MFD)。計算したのは、上図にある分子モデルにおいて二面角 ϕ を80度に固定した際の、 ψ に関する自由エネルギープロファイルである。 ϕ と ψ の二面角を制御するために、 $k[X - \psi(r)]^2/2$ のばねポテンシャルを追加して、 ψ の代わりに X を力学変数として扱った。 X に働く平均力は、recursive 能勢-Hoover熱浴^[5]を用いた短いMD計算から求めた(CHARMM力場を使用)。比較のために熱力学的積分法による結果(●)も示しており、両者は良く一致している。同精度の結果が熱力学的積分法の約13%の計算量で得られており、本手法の効率が良いことがわかる。図中の点線は実線の $F(\psi)$ を(2)式に代入して得られるエネルギープロファイルで、LogMFD計算ではこのエネルギー面上を、力学変数である X (or ψ)が動いている。元々の自由エネルギー障壁は約10 kcal/molであり室温より遥かに高いエネルギー値であるが、(2)式によりlogarithmic形式に変換された後ではせいぜい1 kcal/molほどの障壁となり、エネルギー面を一様に効率よくサンプリングできることがわかる。

多次元の自由エネルギープロファイルも同様にして求めることが可能である。二面角 ϕ を ψ と同様に自由エネルギー面上を動かすことができるようにして、図2のラマチャンドラプロットが得られた。元の分子形状から180度の回転対称性を示す筈であるが、得られた結果は確かにその対称性を良く再現できている。

4. 今後の課題

LogMFD法は、mean force さえ精度

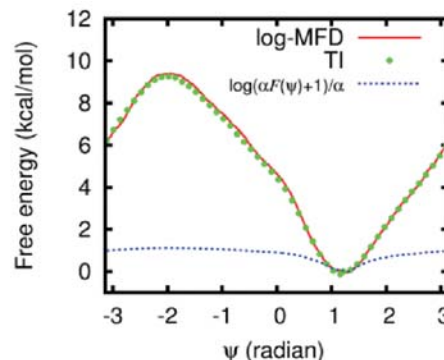
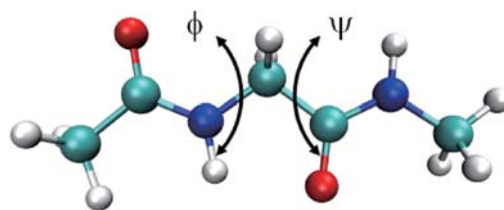


図1 ψ に関する自由エネルギープロファイル (縦軸は自由エネルギーで単位はkcal/mol)

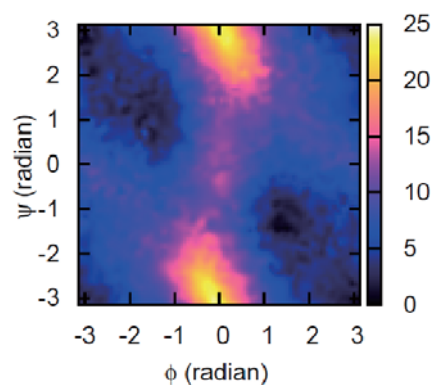


図2 グリシンジペプチド分子のラマチャンドラプロット (単位はkcal/mol)

良く得ることができれば、自由エネルギーを“on the fly”で求めることができる。そのため、効率の良い自由エネルギー計算が期待される。まだ適用例は少ないものの、今後様々な系に適用して、本手法の適用性をさらに検証していきたい。現在は第一原理計算への適用も進めており、preliminaryな結果を得ている。

本研究の実施にあたり、伊藤助教(分子研)、奥村准教授(分子研)並びに三上教授(筑波大学)の各氏と議論させていただいた。

参考文献

- [1] A. Laio and M. Parrinello, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **99**, 12562 (2002).
[2] L. Rosso et al., *J. Chem. Phys.* **116**, 4389 (2002).
[3] L. Maragliano and E. Vanden-Eijnden, *Chem. Phys. Lett.* **426**, 168 (2006).
[4] T. Morishita, S. G. Itoh, H. Okumura, and M. Mikami, *Phys. Rev. E* **85**, 066702 (2012).
[5] T. Morishita, *Mol. Phys.* **102**, 1337 (2010).



もりした・てつや

2000年慶応義塾大学大学院理工学研究科博士課程修了。同年、理化学研究所 基礎科学特別研究員。日本学術振興会 特別研究員を経て、2003年より産業技術総合研究所 研究員（現職）。2009-2010年にメルボルン王立工科大学の客員研究員。2012年から分子研客員准教授。専門は化学物理、物性理論。特に、第一原理分子動力学計算による非秩序相やナノスケール物質の物性解明、並びにMD計算手法開発に力を入れている。

共同利用研究ハイライト

第1回分子科学若手シンポジウム」及び「第52回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」の開催報告

山崎 馨 東北大学大学院理学研究科化学専攻 博士課程後期1年

1. はじめに

「分子科学若手の会」（若手の会）は、分子科学を専攻する大学院生などの若手研究者が所属・運営する研究者団体であり、1961年から続く「分子科学若手の会夏の学校」（夏の学校）を中心に、分子科学を専攻する若手研究者の交流と最先端知識の習得による相互研鑽の機会を提供してきた。2012年度も、分子科学研究所（分子研）の平成24年度共同利用研究（前期）「若手研究会等」の支援のもと、「第1回分子科学若手シンポジウム」及び「第52回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」を開催した。本稿では、これら2つの研究会及びその成果を踏まえて開催した「第52回分子科学若手の会夏の学校」の様子について報告する。

2. 第1回分子科学若手シンポジウム

今回は、若手の会会員及び分子研

所属の大学院生等の若手研究者による専門を超えた相互理解を深めるために、「第1回分子科学若手シンポジウム」を開催した。本シンポジウムは分子研からの参加者4人を含む19名が参加し、16件のポスター発表が行われた。分子科学討論会等と比較すると小規模な開催であったため、1件ずつ丁寧に発表を聴いて回ることが可能であった。このため、専門の違いを超えた非常に濃密な議論が行われ、大変充実した時間を過ごすことができた。

3. 第52回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会

分子科学若手シンポジウム開催後に、講師の先生方と分科会担当の学生を中心として夏の学校の講義内容検討会を開催した。ここでは、講師の先生方が執筆したテキスト及び講義資料を基



第1回分子科学若手シンポジウムの集合写真

に、講義の進行計画について詳細に議論した。これらの議論により若手の会役員・分科会担当者・講師の先生方間で顔合わせと運営方針の統一を図ることができた。

また、分子科学若手の会役員会も同時に開催し、より充実した夏の学校をより効率的に2013年度以降運営するための組織改革について議論した。その結果、幹事研究室に集中していた会場準備や広報等の業務を分割して、幹事研究室以外の研究室に所属する学生

をそれぞれの業務ごとに担当者として配置することにした。

4. 第52回分子科学若手の会夏の学校

講義内容検討会の結果を踏まえて、2012年8月20-24日に東京大学本郷キャンパスを会場として第52回分子科学夏の学校を開催した。参加者総数は過去5年間で最多の103人を数える大盛況であった。また、参加者の所属も北は北海道大学から南は九州大学まで、分子研を含む22大学51研究室に上った。この為、非常に多様なバックグラウンドを持った若手研究者が一堂に会して分子科学の最前線について討議する非常に有意義な会となった。

4.1 分科会

本年度は、5つの分科会に分かれて次の様な講義を行った。

第1分科会：

「化学のための密度汎関数理論 (DFT)」
講師：常田 貴夫 氏 (山梨大学)

第2分科会：

「分子シミュレーションの基礎」
講師：志賀 基之 氏 (日本原子力研究開発機構)

第3分科会：

「気相レーザー分光の変遷—微量分子検出の半世紀—」
講師：松本 剛昭 氏 (兵庫県立大学)

第4分科会：

「時間分解赤外・テラヘルツ分光で捉える強相関電子系の超高速ダイナミクス」
講師：岩井 伸一郎 氏 (東北大学)

第5分科会：

「表面・界面の二次非線形分光の信号表式の導出」
講師：山口 祥一 氏 (理化学研究所)

どの分科会も、演習・論文輪読・参加者の研究発表などを有効に取り入れて、参加者と講師の先生方の間に双方



分科会の様子 (第3分科会)

向のコミュニケーションが成り立つように工夫されていた。今回開催した分科会のテキストの一部は、分子科学会のご厚意で「分子科学アーカイブス」に収録される予定である。読者の諸兄の積極的なご活用をお願いしたい。

4.2 全体講演・特別講演

分科会での講義に加えて講師の先生方には、ご自身の最近の研究をその背景も含めて全体講演として紹介していただいた。さらに今回は、特別講演(新企画)として名古屋大学の吉井 範行氏により、「超並列計算による大規模分子集合体の分子動力学シミュレーション」と題して、アジア最速のスーパーコンピュータ「京」による分子シミュレーションの現状と、その背景にある超並列シミュレーション向けアルゴリズム

について、平易に説明していただいた。これらの講演は、他領域のトピックを基礎から最前線まで効率良く吸収できる良い機会となった。

4.3 ポスターセッション

ポスターセッションでは63件の発表があり、領域の垣根を越えた熱い議論が夜遅くまで繰り広げられた。2013年度は本ポスターセッションを「第2回分子科学若手シンポジウム」として執り行う予定である。

5. まとめ

本稿では「第1回分子科学若手シンポジウム」及び「第52回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」、そして第52回分子科学若手の会夏の学校の活動報告を行った。来年度は夏の学校の53年の歴史の中で初の分子研開催を計画しており、上智大学理工学部南部研究室の学生(若手の会事務局代表: 博士課程後期1年 村上 龍大)を中心に鋭意準備を進めている。分子研及び諸先生方におかれましては、講義室及び宿泊先の確保などに関して、更なるご理解とご協力をよろしくお願い申し上げます。



全体集合写真, 東大安田講堂前にて

極端紫外光研究施設 (UVSOR) は 1983年の稼働開始から今日まで、真空紫外から軟X線領域に至る低エネルギー領域を主として担うシンクロトロン光源として順調に稼働を続けてきました。シンクロトロン光源は、素粒子実験用加速器に寄生する形でシンクロトロン光の利用が行われた第1世代、有用性が広く認められ専用の加速器として建設されるようになった第2世代、そして、より高輝度のシンクロトロン光発生に特化された第3世代へと進化を続けてきました。UVSORは第2世代光源として建設されましたが、2000年代前半になり、施設の老朽化が深刻となり、その一方、国内外で第3世代放射光源の建設が相次ぎ、競争力の低下が顕著となりました。また、大学でもシンクロトロン光施設が建設されるようになり、全国共同利用施設としての存在意義も問われる状況となりました。このため光源性能の大幅な向上を目指す高度化計画を立案しました。幸いこの計画はまもなく予算化され、2003年に大幅な改造が行われました。光源装置の呼称もUVSOR-IIと改めました。それまでの偏向磁石からの白色放射光の利用から、アンジュレータからの高輝度準単色の光の利用に大きく重心を移し、第3世代光源に比肩する性能を獲得しました。

それからさらに10年近くが経過しましたが、放射光の利用の拡大、技術の進歩、国内外での最新施設の建設は続いています。国内においては、X線領域の高輝度光源としてはSPRING-8がありますが、真空紫外・軟X線領域の高輝度光源と言えるのはUVSOR-IIが唯一である状況が続いています。最新の光源技術・利用技術を積極的に取り入

れ、世界水準の低エネルギー放射光利用研究が行える施設であり続けることを目指して、更なる高度化計画を立案しました。放射光の輝度を一段と高めるための電子蓄積リングの改造、放射光強度の安定性を飛躍的に高めるトップアップ運転の導入、装置の高輝度特性を活かしたアンジュレータの増設と顕微分光ビームラインの建設がその柱です。これにより、ナノメートルの空間分解能を持つ軟X線走査型顕微鏡が国内で初めて実現されます。本計画は、幸いにも2010年度の補正予算により予算化され、2011年度末までに装置の製作が完了しました。2012年4月より約3か月間共同利用を停止し、加速器の改造、新ビームラインの建設を行いました。

加速器装置やシンクロトロン光ビームラインというのは様々な機器の複合体で、カタログ製品として買えるものではありません。施設の研究者や技術職員が協力して基本設計を行い、それをもとにメーカーが製作を行います。装置の組み付けは、メーカーが実施する部分があれば施設職員が実施する部分もあります。共同利用への影響を最小限にするために限られた期間で作業を完了する必要があります。複数の作業が同時進行しますので、改造期間中は技術職員を中心に毎朝打合せを行い、各部の進捗状況を確認します。こういった取り組みにもかかわらず、思わぬトラブルも発生します。今回の改造でも、超高真空槽内部に設置されたパルス電磁石が短絡するというトラブルがありました。およそ30年前に製作された装置でしたが、幸い、設計資料も見つかり、また、当時製作に関わった方々からの助言も得ることができて、何とか施設

の技術職員の手で修理を実施することができました。しかし、このために改造作業に2週間程度の遅れが生じ、その後の加速器の立ち上げ調整に十分な時間を確保することができませんでした。

7月末からの共同利用再開に向けて週末返上で加速器調整、真空調整、ビームライン調整を進め、7月31日には何とか運転を再開することができましたが、改造前と比べて、光源加速器の安定性に欠ける状況が続きました。改造により加速器の運転条件が大きく変わりましたが、限られた調整期間で十分な最適化が行えませんでした。共同利用運転期間中も毎週月曜日は加速器グループの研究開発のビームタイムに割り当てられていますが、10月上旬までは研究をあきらめ、共同利用のための運転の安定化に向けた調整にビームタイムを100%振り向けました。その結果、徐々に調整も進み、安定性も向上してきました。ユーザー運転と並行して、今後もさらに調整を進めていきます。

一方、今回の改造の目玉である軟X線走査型顕微鏡装置ですが、加速器の立ち上げ調整と並行して整備を進めてきましたが、新規に導入したアンジュレータ装置からのシンクロトロン光導入も無事完了し、来年度からの供用を目指して、調整と性能評価試験が続いています。施設の助教1名と博士研究員1名が技術職員の協力のもと作業に専念しています。このビームラインは、所の方針によりナノテクノロジープラットフォーム事業に組み込まれ、これまで以上に幅広いユーザー層に利用される予定です。どのような利用環境を提供することが求められるのか、あるいは、できるのか、施設としても慎

重に取り組んでいきたいと思っております。

UVSOR光源加速器は、今回の高度化を節目として、UVSOR-IIからUVSOR-IIIへと呼称を改めました。今後、光源系では世界最高水準の光源性能を100%引き出すための高い安定性の実現を目指してさらに技術開発を進めます。また、利用系では新しい技術の導入などビームラインの整備を進め、

また、利用環境の整備を進めます。共同利用実験の遂行と並行して施設の整備を進めるには施設のマンパワーは十分ではありません。このために長期利用課題という新しい試み始めることにしました。特定のユーザーグループに、3年間、優先的にビームタイムを配分する代わりに利用装置の整備に積極的に関わってもらうというものです。詳細は共同利用の要項をご覧ください

たいと思います。利用者の皆様の積極的な応募を期待しております。

今年2013年は施設稼働後30周年にあたり秋には記念行事も予定しております。施設職員一同、今後も長く、分子科学研究をはじめとする基礎学術研究の発展に貢献していきたいと考えております。



図 UVSOR-III光源加速器の機器配置。周長50mの電子蓄積リングに6台のアンジュレータ装置が装着された。

共同利用・共同研究に関わる各種お知らせ

共同研究専門委員会よりお知らせ

共同研究専門委員会では、分子科学研究所が公募している課題研究、協力研究、分子研研究会、若手研究会、および岡崎コンファレンスの申請課題の審査を行っています。それぞれの公募の詳細については分子研ホームページ (<http://www.ims.ac.jp/use/>) を参照いただきたいと思います。共同研究の現状について、平成18年度から平成24年度（平成25年1月17日現在）までの採択数の推移をまとめたものを下記に示しました。平成24年度は、分子研研究会の数が増加しましたが、それ以外は、ほぼ定常的な件数で推移しています。現在、平成25年度前期分の共同利用研究の審査が行われています。今回の申請から大きく変わった点として、分子研が提供する共同利用研究の申請が、Webシステムを利用した電子申請に全面的に移行したことがあります。これまでに、電子申請を利用して申請を行った方から、下記に示すようなコメントを頂いています。

(1) Web画面で研究目的、研究計画を入力する際、所定の文字数が埋まらないと次のステップに進むことができないのは不便である。これでは、Webシステムを利用した申請の利点を十分に生かしきれていない。

(2) 現在のシステムでは、提出された申請書を所内対応者が確認することができない。本来、所内対応者と申請者が、事前に十分打ち合わせたうえで申請しているはずではあるが、申請終了後に所内対応者が最終的な申請書を確認できるようなシステムになっていることが望ましい。

ここでご指摘頂いた問題点に関しては、改善する方向で対応策を検討中です。皆様からのご意見をもとに、電子申請システムをより使い勝手のよいものに改善して行きたいと考えておりますので、電子申請について改善が必要と思われる点、要望等がございましたら、是非それらのご意見を共同研究専門委員会委員長（青野重利 aono@ims.ac.jp）までご連絡下さい。

共同利用研究の実施状況（採択件数）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 (1月17日現在)
課題研究	1	2	2	1	0	1	1
協力研究	84	91	90	119	122	108	122
分子研研究会	13	9	4	5	6	4	10
若手研究会等	—	—	1	1	1	1	1
岡崎コンファレンス	—	—	—	—	—	—	1
計	98	102	97	126	129	114	135

若手研究会等

開催日時	研究会名	提案代表者	参加人数
平成24年6月16日～17日	「第52回分子科学若手の会夏の学校講義内容検討会」 及び「第1回分子科学若手シンポジウム」	山崎 馨（東北大学大学院理学研究科）	25名

岡崎コンファレンス

開催日時	研究会名	提案代表者	参加人数
平成25年1月7日～10日	量子コヒーレンスの極限制御	大島 康裕（分子科学研究所）	61名

分子研研究会

※1月17日時点で実施済研究会

開催日時	研究会名	提案代表者	参加人数
平成24年6月1日～2日	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	西山 桂（島根大学教育学部）	31名
平成24年7月30日～31日	レーザー分光および磁気測定による分子構造探求の新展開	馬場 正昭（京都大学大学院理学研究科）	33名
平成24年10月11日～12日	新しい光の創成と物質科学—精密計測と操作への展開	芦田 昌明（大阪大学大学院基礎工学研究科）	49名
平成24年11月24日～26日	Workshop of Quantum Dynamics and Quantum Walks	鹿野 豊（分子科学研究所）	55名
平成25年1月10日～11日	生物物質科学の展望	加藤 礼三（理化学研究所基幹研究所）	44名
平成25年1月11日～12日	生体配位化学の最前線と展望	伊東 忍（大阪大学大学院工学研究科）	32名
平成25年1月17日～19日	無機化学の現状と未来	北川 進（京都大学物質・細胞統合システム拠点）	38名

運営に関わって

沖田 喜一

国立天文台岡山天体物理観測所・主任研究技師

おきた・きいち／1967年東京大学東京天文台岡山天体物理観測所に入台。観測所共同利用業務を遂行しながら、各種の観測装置開発に従事。1989年から13年間すばる望遠鏡建設に従事。2002年岡山天体物理観測所に戻り、観測所運用に従事しながら、京都大学3.8m新技術望遠鏡の建設に参加中。2010年岡山天体物理観測所の50周年記念事業を副所長として完遂。2004年度から4期8年国立天文台技術検討委員会委員、2006年度から2011年度までの4年間国立天文台幹事会議委員。



2010年度から3年間、分子科学研究所装置開発室の外部運営委員をさせていただきました。研究分野が大きく違う研究所の運営に関して、まったく分野外の自分が、このような役目を引き受けてよいものかと悩みましたが、まあ技術関連のことなら何とかできるかと思っただのは事実です。2004年度からの法人化に伴い、分子研を含む岡崎3研究所と核融合研、国立天文台の5研究所が突然親戚関係になりました。まったく分野違いなので、「研究者の共同研究は難しいが、そこで働く技術者間では何かしら共通点があるのではないか」、「皆さんどんな業務をしているのか」という思いからお互いの交流を図るため、機構技術研究会を2006年に立ち上げました。そんな背景から、何となく「親戚のお役にたつのでは」という思いもあり引き受けました。法人化後国立天文台はプロジェクト制を採用していることもあり、プロジェクトの大枠の中で協議・運営を行うスタイルを採っています。従って、この規模（失礼）で外部の委員を含めた委員会で運営を議論することに、すごいなーと新鮮に感じました。最初は議論の背景がよく解らず的外れの意見を述べたのではないかと反省しています。装置開発室は、施設利用の支援、中高生の職場体験、イベントへの参加等多岐にわたって活動している様子を知り、頑張っておられることを感じました。しかし、2010年の

Annual Reportの序文に宇理須先生が述べられているように問題もあると感じます。言われたものを言われるままに製作することは金さえあれば全て外注できます。研究所の技術職員は、研究に一番近いところで、「何が必要か」という分析と「どうすればそれを実現できるか」という現場にいるわけで、そのことについての「ひらめき」が重要だといつも感じています。技術と一言で言ってもかなり広い意味があります。最先端の技術を真に開発するのは、柔軟な組織・潤沢な経費が必要なのは言うまでもありませんが、我々の現場ではなかなかそうはいきません。言うまでもなく「より安価で効率的な方法」を探る必要があります。そのような状況を作るためにも、構成員全体で、開発されたものをうまく運用する基盤の技術を忘れてはならないと思います。ちゃんとした基盤技術に支えられて初めて先端技術が花開くと思います。共同利用機関としての装置開発室の意義はその辺りを十分意識して運用することが肝要です。ともすれば、「装置開発」という心地よい言葉だけが先行し、全員がそれに向かってしまうと、通常の共同利用に支障が出てくることもあります。この辺りのバランスは必要です。開発業務の形態はともすれば研究者と1対1の関係が出てくるように感じます。開発室のメンバー複数の人がそれに携わる形も必要ではないでしょうか。国立天文台でも東京

天文台時代に行われていた講座制の名残もあり、先生が退職されると担当技術職員はその後何をすれば良いのか路頭に迷う(?)状況もありました。そのようなことを避けるとともに、今後の必要技術と位置付け及び技術職員の働き方を委員会等で議論検討してきました。その中で、プロジェクトのメンバーが「グループとして業務にあたる」ことが重要だと認識し、そのような業務形態に移行しつつあります。分子研でも開発室のメンバーが、専門性の部分は保持しながら、他の技術にも基盤的には共有するレベルを維持することが肝要かと思います。開発室全体として関わっている（専門技術分野の人のみという意味ではなく）という意識が、開発室全体のモチベーション向上になるのではないかと考えます。もちろん超専門性の部分はアウトソーシングに委ねることはしかたありません。全体のスキルアップを図り、そのうえで優秀な職員はそれなりの評価を行うことはもちろん重要です。運営委員会でも、装置開発室が如何に在るべきかを真剣に議論されていると感じます。所属されている技術職員のモチベーションを上げていくにはどのような形態が良いのかなど「将来技術開発プロジェクト」と位置付け推進しようとしていることは重要であると思います。今後、装置開発室が「期待される場所」として大いに発展することを祈っています。

文部科学省「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)の構築」
HPCI戦略分野2「新物質・エネルギー創成」 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

計算分子科学研究拠点(TCCI)活動報告

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

「京」を戦略的課題研究に利用するHPCI戦略分野2の戦略機関としての活動も2年目に入った。CMSIは、分子科学、物性科学、材料科学分野の理論計算科学に関する全国的な組織であり、適宜、情報交換し「京」の有効活用、分野振興のための公開シンポジウムや研究会を開催している。TCCIでは、今年度も以下のように分野振興のための活動を行っており、今後も継続していく所存である。

1) 計算分子科学と2020年に向けたサイエンスロードマップ

汎用計算機として世界最高速のスーパーコンピュータ「京」は、2012年9月28日に共用が開始されたばかりであるが、文部科学省では、次々世代スパコン開発を目指した「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」というプロジェクトを開始した。これは、昨年度、京に関係する有志で次々世代スパコン設計に向けてまとめた計算科学ロードマップ白書(サイエンスロードマップ)が評価され、文部科学省の正式調査研究として始まったものである。この調査研究にTCCIからも参加し、2020年頃までを見通した分子科学の将来像についてまとめを行っている。このまとめた結果をコミュニティの皆様にご披露すべく、日本化学会第93春季年会特別企画として「超巨大計算機時代の化学」を、3月25日(月)立命館大学びわこ・くさつキャンパスにて開催する。文部科学省では、本調査研究の結果に

基づき、次々世代のスーパーコンピュータの開発を開始する計画である。

2) 新・元素戦略プロジェクトへの支援

昨年度、その準備段階として、TCCIで研究会等を企画したが、今年度正式なプロジェクトとして公募が行われ、その結果、採択された機関で、今後10年に亘る研究が開始された。いずれの研究課題も、計算科学が欠かせないのであるため、CMSI/TCCIでは今後も支援を行っていく予定である。

3) TCCI研究会(全体シンポジウム)

10月9日、10日に、TCCIの全体シンポジウムである第3回研究会を岡崎コンファレンスセンターにて開催した。80名を超える研究者(民間研究者4名)が集まった。今年度は、TCCIに所属するCMSI研究員全員に講演をお願いし、若手の成長を確認するよい機会となった。また、上記、「HPCIシステムのあり方」やサイエンスロードマップについては、招待講演の他、全員で議論も行い、実り多い研究会となった。今後も、毎年1回は、公開の全体シンポジウムを開催していく予定なので、「京」に関心のある方々の参加を是非お願いしたい。

4) 実験化学との交流シンポジウム

11月16、17日に、昨年と同様、京大福井謙一記念研究センター(京都市)において、TCCIの関わる有機化学、物理解化学、生命科学について、実験サイ

ドから、計算科学への期待・要望等に関して情報交換を行う第2回目の交流シンポジウムを開催した。85名程度(5名が民間)の参加があった。今年も最先端の研究を推進されている実験研究者の方々にお集まり頂くことができ、有意義な議論を行うことができた。今後も毎年1回程度は公開シンポジウムを開催予定しており、実験研究者の方々には、継続して参加をお願いしたい。

5) 産学連携シンポジウム

1月24日に大阪大学中之島センター(大阪)において、企業における計算科学の利用と学術研究への期待、TCCIにおける研究状況等の紹介・意見交換を通じた産学連携を目的に、第2回産学連携シンポジウムを開催した。今年度は、京の産業利用に関する招待講演と併せて、卒業生4名に「大学の何が役に立ったか? 卒業生に聞く」と題して、講演をお願いした。今回の企画が、人材育成における産学のギャップを埋めることに少しでも役立てば幸いである。

6) 夏の学校、TCCIウインターカレッジなど

大学院生レベルの教育をかねて、夏の学校やTCCIウインターカレッジを企画した。夏の学校としては、第16回分子シミュレーション夏の学校を共催で企画協力した。第52回分子科学若手の会夏の学校についても、特別企画を中心に支援を行った。また、分子研

とTCCIの主催として、分子シミュレーションおよび量子化学分野のTCCIウィナーカレッジを、12月11日～14日および12月17、18日に岡崎コンファレンスセンターで開催した。参加者はそれぞれ約90名、約50名であった。

7) 超並列化技術国際ワークショップ

米国の若手研究者を招聘し、超並列

計算に関する日米の最新状況に関して情報交換を行う国際ワークショップを1月28日に早稲田大学で開催した。今後も、年1回開催していくので、超並列計算に興味のある方はご参加頂きたい。

8) その他

CMSIは、分子科学、物性科学、材料科学分野の積極的な連携で、今後も

分野振興に努めていく。特にTCCIでは、産学連携について、学生のキャリアパス拡大に向けて、シンポジウムでの新規課題の発掘・相談、社会人の再教育の場の提供など、産業に対する一貫性のある対応システムの確立を目指していく。

インドとの国際連携に向けて

齊藤 真司 理論・計算分子科学研究領域 教授

11月20、21日に富永圭介教授（神戸大学）代表による日印共同セミナー「分子分光と顕微分光の最先端：基礎から物質および生物への応用」がハイデラバード大学（インド側代表はSamanta教授（Hyderabad大学））で開催された。セミナーでは、表題に関する研究、とくにタンパク質の構造変化、構造形成などを中心に、日本からは富永教授を始めとする8名（分子研からは、奥村准教授と私）、インドから13名による講演が行われた。

この日印共同セミナーは、富永教授がインドの研究者と連絡を取り推進された学振の課題で全て富永教授のご尽力によるものであり、分子研の事業ではない。しかし、現在、分子研では小杉研究総主幹のもと、従来の韓国との連携に加えイスラエル（Weizmann研究所）などとの国際連携を強化しようと動いているところであり、インドとの連携も模索している。そこで、インド各地から研究者が出席する今回の日印共同セミナーにおいて、分子研のグループの紹介とともに、国際連携の一環として考えられている外国人学生の受け入れ（IMS International

Internship Program（仮称））について、私の発表時間の最後にゲリラ的に紹介させていただいた。突然の紹介にも関わらず、Indian Association for the Cultivation of Science (IACS) のKankan Bhattacharyya教授からは、分子研の広範で深い研究はIACSにとっても有益である、と早速に対応して頂き、教授の属している物理化学科以外に有機化学科、無機化学科、生物化学科も含めたMOU締結等進めていこうということになった（ちなみに、IACSは、分子科学分野のみならず重要な分光学的解析手法の一つであるラマン散乱の発見者であるRaman博士が居られた研究所である）。

なお、ハイデラバードでの日印共同セミナーの後、バンガロールにしばらく滞在し、本年度客員教授として分子研に滞在されたBagchi教授（Indian Institute of Science, IISc）との共同研究等の続きを進めた

（IIScは先に紹介したラマンが研究所長を務めた研究所であるとともに、生体分子の二次構造の解析で欠かせないRamachandranプロットとして知られるRamachandran博士が居た研究所であり、この研究所も既に創立100年を越している）。

長倉先生を始めとする多くの先生方のご尽力のお蔭でインドにおける分子研の知名度は非常に高い。今後、IACSとの実質的な人的交流・共同研究が始まり、さらに、インドの他の研究機関とも連携が広がっていくことを期待します。

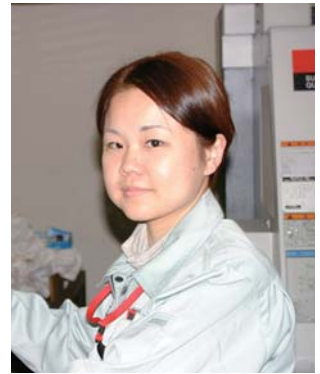


Indian Institute of Scienceの象徴的建物であるTower Building

新しい加工技術への取り組み ～フォトリソグラフィー～

機器開発技術班 高田 紀子

2004年 東京農工大学大学院 農学研究科 応用生命化学専攻を修了後、民間企業でカーボンナノチューブの表面処理や分析業務を担当。2009年2月より現職。青森県出身。
好きなこと：読書（印象的な本は、「秘密」、「悪意」（東野圭吾）、「遭難」（松本清張）、「博士の愛した数式」（小川洋子））、また最近ゴルフを始めました。
座右の銘：「期待するから腹がたつ」（「もう期待しない」という意味ではなく、「腹がたつくらい望んでいるなら自分でやってみよう」と前向きな気持ちになれるので）



私は、分子研技術課 機器開発技術班に配属し、装置開発室の機械グループで働いています。機械グループは、技術職員5名、技術支援員2名で構成されていて、実験機器について、主に加工の面から研究者をサポートする仕事をしています。機械グループだけでも、年間およそ300件近くの製作依頼を受け対応を行っています。依頼内容の幅は広く、追加工など短期間で終わるものもあれば、研究者の要望を聞き、設計の段階から時間をかけて行うケースもあります。また、所内だけでなく所外の研究者の方でも、審査はありますが、「施設利用」という形で申請して利用することができます。施設利用に関しては、加工の依頼というよりも長期的で開発的なものを受けるケースが多く、年間10件前後の研究課題に対して、設計、製作、評価など多方面から取り組み、自分達の知識や技術の向上にもつなげるように取り組んでいます。

主な所有設備としては、CAD（2D、3D）、工作機械（旋盤、フライス盤、ボール盤、NCフライス盤、ワイヤ放電加工機、型彫放電加工機など）、測定器（光学顕微鏡、SEM、マイクロスコープ、非接触三次元測定装置など）があります。

また最近では、フォトリソグラフィー関連の設備とAFMを退官された先生から譲渡いただき、一つの部屋にまとめてクリーンルームのようにしています（写真1）。他大学の施設と比較する

と小さく設備も少ないですが、基板の切り出しから、洗浄、コンタクト露光、現像に至るレジストパターンの製作と、PDMS樹脂による成型、ガラスとの接着などを行うことができます。私は主にフォトリソグラフィーを担当しているので、ここではそれについて紹介させていただきます。

フォトリソグラフィーとは、半導体デバイスの製造プロセスとして発展してきた技術の一つです。一つの平面に対しては比較的簡単にマイクロ・ナノレベルの微細構造を製作できることから、現在では様々な分野で利用されています。装置開発室でも3年程前からこの技術を使って、神経細胞パターンニング用の格子パターン（最小幅4 μm 、深さ10 μm ）やタンパク質の構造変化解析用のマイクロ流路ミキサー（最小幅5 μm 、深さ50 μm ）の製作に取り組んできました。（写真2）。深さにもよりますが、マイクロレベルのレジストパターンでしたら装置開発室の設備だけでもそれほど難しくありません。ただ原版となるフォトマスクは描画装置がなくできませんので、外注（3インチ×3インチ、¥100,000/枚）をお願いしています。フォトマスクは基本的に、落として割りでもしない限り何回でも使用できますので、ある程度パターンが決まっている場合には便利によく使用されます。

最近、この技術に関する新しい相談、依頼も少しずつ出てきました。これらに

対応するには、成膜、エッチング、描画の技術が新たに重要で、これらができるようになると、被加工物の材質や形状の幅が大きく広がります。装置開発室には残念ながらこれらの設備はないのですが、ナノプラットフォームと同様、他大学（例えば、北海道大学、東北大学、京都大学、北陸先端科学技術大学院大学など）の所有する共用設備を安価で利用できることが分かってきました。また、共用設備はありませんが、名古屋大学や東京工業大学に自分と似たような仕事をしている技術職員がいることも分かり、技術研究会や技術課セミナーを通して情報交換を行っています。日頃の業務の中でも、分からないことがあればメールや電話で聞くことができるので助かっています。さらに今年は、所長奨励研究費を利用して、フォトリソグラフィーをはじめ微細加工に関する勉強会を行い、他大学の技術職員、また研究者の方にもご参加いただき大変勉強になりました。これも、技術課、装置開発室の上司や先輩方が積極的に機会を与えてくれ、助言や後押しをしてくれるおかげです。

以前働いていた職場での経験も、分野は異なりますが役立っていると感じます。以前は、カーボンナノチューブの表面処理、分析、納品などの仕事をしていました。最適な処理条件があるわけではなく条件検討も必要だったので、納期との兼ね合いが難しかったです。雇用形態は嘱託でしたが、一社員

と分け隔てなく新人研修も受けましたし、自分できちんと考えず怒られることも度々ありました。逆にいつまでも考え、「遅い」と言われることもありましたが、選択肢が減るから遅いのはだめだと教わりました。他にもたくさんありますが、それらを実感したのが仕事を変える時です。仕事の引き継ぎや引越しをはじめ期限までにやるのが山のようにあったので、必死に頭を整理して優先順位を決め、段取りを考えなくてはなりません。優先順位を決めるには目的を知る必要が出てきて、目的は何かと考えると、いくつかは単なる自分のこだわりや見栄であることが分かりました。他人からこう思われたらどうしようという雑念が減り、言いにくいことが言えたり、フットワークも軽くなったと思います。極端に自己中心的にならない限り、やはり必死さは大切だと思います。どうしても楽な方に流れてしまうのでなにももって必死になるかは難しいですが、仕事でもなんでもがんばって達成できたら、少しずつ自信をつけることができそうです。特に私は慎重で気も小さい方なので、ちょっとしたことでものすごく大きな壁に感じるがよくあります。それでもいざ決死の覚悟でやってみると、「思っていたよりは大丈夫だった」と思うことが多いことが分かってきました。

分子研で働き始めてもうすぐ4年が経ちます。加工も設計も経験がなく、「旋盤」の意味すら分からず採用が決まり、私も、おそらく装置開発室の人達もとまどいが強かったのではないかと思います。ただ、周囲の人達は「失敗してもいい」という姿勢でマイペースにやらせてくれたので、なんとかここまでやってこられたと思います。はじめは、一人の先生の研究を中心に色々な加工や実験を経験しました。装置開発室の

人達からは、製図と工作を一から教わりました。たくさんの経験をさせていただき、その中で一番自分にもできておもしろそう、と思ったのがフォトリソグラフィーで、ちょうどその頃生体分子情報部門の木村助教がマイクロ流路ミキサーの話を持って来てくださり今に至ります。まさか自分が愛知県でこのような仕事をする事になるとは思っておらず、なにがあるかは分からないと感じています。

先日装置開発室で忘年会があり、装置開発室長の加藤教授から、「子供の頃の夢は研究者だった」と伺いました。私はパン屋さんとかケーキ屋さんでしたが、小学校の頃の文集に「機械関係のものを作る仕事」と書いてあるのを母親がを見つけ、教えてくれました。たしかに子供の頃から手を動かすことは大好きで、小学生の頃は切り絵クラブに入り、もくもくと切り絵に励んでいました。「機械関係のもの」と書いた理

由はよく覚えていないのですが、社会科の教科書に自動車工場の写真が載っているのを見て衝撃を受けたり、クリスマスに「磁石」をリクエストしていた子供の頃を考えると、理系の道に来たのは間違いなかったと思います。

装置開発室では、工作は技術支援員の2名が主に担当していますが、基本的には、一つの依頼に対して一人が担当する場合があります。依頼内容によっては設計から携わり、四苦八苦しなから時間をかけてものを作っていくので、だんだんと愛着がわいてきます。開発の要素が大きいものについても、やはり初めは研究者の方々のお話がきっかけですし、最後までできたら使ってもらいたいので、研究者との協力は欠かせません。一緒に考えながら仕事ができる点がおそらく分子研 装置開発室のいい点だと思います。そうできるだけの知識と経験を私もどんどん積んでいきたいと考えています。



写真1 クリーンブースの設備
(化学試料棟208)

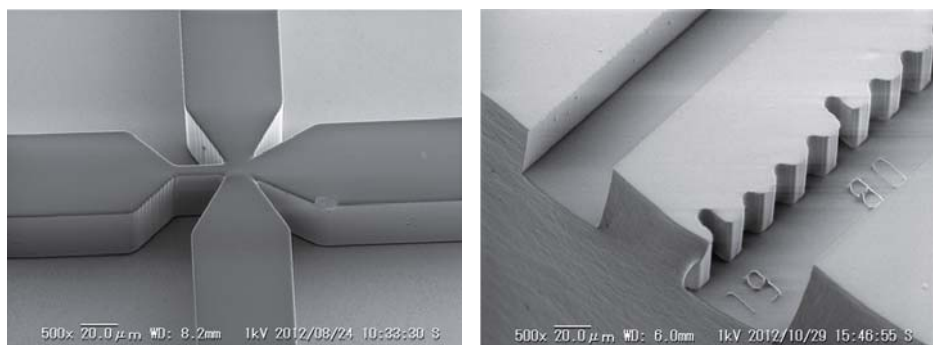


写真2 マイクロ流路ミキサーのSEM画像。最小幅5μm、深さ50μm。
(左) レジストパターン、(右) PDMSパターン。

COLUMN

ケンブリッジ滞在記

望月 建爾

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

もちづき・けんじ

2008年名古屋大学理学研究科修士、2008-2009年同博士課程、日本学術振興会特別研究員(DC1)、2009-2011年旭硝子株式会社、2011年から総研大物理科学研究科。専門は、相転移・溶液・生体系の計算機科学。

2012年の5月に、13時間のフライトと、3時間の高速バスの移動を終え、半年間滞在するケンブリッジにたどり着いた。目の前には、Parker's Pieceと呼ばれる、象徴的な巨大広場。天気は、予想通りの小雨。『遥かなるケンブリッジ』(藤原正彦)の雰囲気が、そのまま広がっており、知らない街に来た感覚がしなかった。藤原氏の本を読んだ一年ほど前は、自分がこの場所に研究に来るとは、想像していなかったはずなのに。

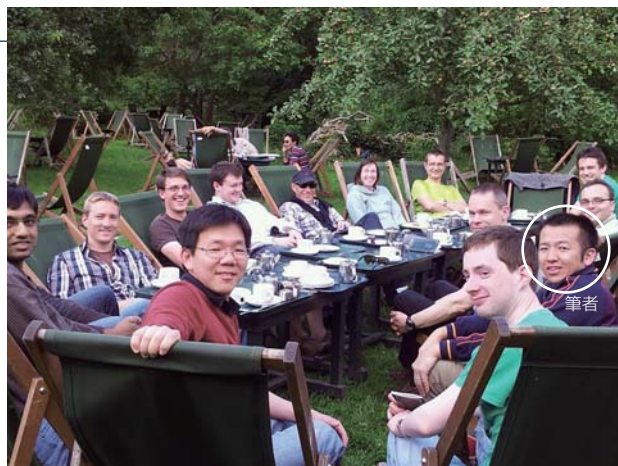
岡崎では、氷の融解ダイナミクスや水溶液の分子構造など、水を主役にした研究を続けている。総研大海外派遣制度に応募する時、水関連の研究室に行く事が頭によぎったが、それでは自分のフィールドが広がらない。興味はあるが、経験した事がない、生体高分子の構造変化関連の研究ができるグループに行こうと考えた。資金は日本から持っていくのだから、実績がない私でも受け入れてくれるだろう、と希望を持って。快く受け入れてくれたのは、英ケンブリッジ大学化学科のDavid Wales教授だった(<http://www-wales.ch.cam.ac.uk/>)。彼は、エネルギーランドスケープの視点から、クラスターの構造変化や生体高分子の反応機構を分子レベルで捉える研究の大家である。生体高分子に限らず、あらゆる

分子のダイナミクスは、エネルギーランドスケープを感じて起こっている。その為、Davidグループで研究を行い、技術と視野を広げる事は、岡崎での水の研究やUVSORで行われている二成分系液体の局所構造研究にも役に立つ事が期待できた。

研究室は、十数人のメンバーで構成されており、日本の理論系グループと同じように、それぞれ独自の生活リズムで活動し、研究室に居る時間もバラバラだった。中には、ロンドンの自宅から週に一度だけケンブリッジを訪れるポスドクもいたが、問題なく研究は進んでいるようだった。印象的だったのは、毎日朝と昼に二回のコーヒータムが研究棟内の喫茶店で開かれる事だった。強制的ではないが、リフレッシュと情報交換の場として、一日のリズムに組み込んでいる人が多かった。話題は、イギリス人が大好きな天気の話から始まり、週末に行った小旅行や最近話題のニュースなど身近で取り留めのない話から、行き詰まっている研究についての真剣な話など、多岐にわたっていた。私も毎日参加し、多人数での英会話に苦戦しながら、楽しんでいた。

ケンブリッジで取り組んだ課題は、「生体高分子のリガンド結合自由エネルギー計算方法の新規開発」。生体高

グループメンバーと大学近くの野外カフェにて



分子の機能発現メカニズムの解明や創薬のスクリーニング法に繋がる基本的で重要な課題である。課題はすぐに決まったものの、生体高分子を扱った経験が無い私が、高速スタートをきれるはずがない。当初、グループメンバーは、「研究」ではなく「勉強」をしに来た客として、私を見ていたのではないだろうか。英語が堪能ではない私が、それを払拭するには、言葉ではなく目に見える結果を出し、周りの人間を巻き込むしか無かった。それは、つまり、論文になる可能性を示し、共同研究者としてのメリットを提供する事であった。一つのテーマを数人で共有し、各人が数個のテーマを並行して進めるグループにとって、テーマが完成する可能性をシビアに判断し、優先順位を付け、費やす時間を決める事は、必然であった。研究を始めて1ヶ月が経ち、運良く結果が出始めると、毎週開かれるグループミーティングで話題にあがる時間も長くなり、自分のテーマの優先順位が上がるのを感じた。成果がでない時期は、当然その逆の状況に陥る。そのようなアップダウンを繰り返しながら、世界中からポスドクが集まる研究機関の厳しさと、ハイレベルで切磋琢磨する楽しさを味わいつつ、ケンブリッジでの研究生活が過ぎていった。最終的に、多くのサポートを受けながら、

研究をまとめ論文を投稿することができたので、研究をする為に滞在した事を少しは示せたのかもしれない。

研究以外の生活環境も、非常に快適であった。街はコンパクトにまとまっており、生活に必要な物は全て徒歩圏内に位置し、便利であった。私が関わった街の人たちは、短期滞在の研究者に慣れているのか、そもその気質なのか、優しく親切な人が多かった。治安の面も問題なく、研究を終え夜中に帰る時も危険を感じる事は無かった。ただ、物価が高いことと、冬の日照時間の短さは難点だった。帰国時の11月

には、サマータイムが終わり、午後3時半には外が暗くなってしまった。北欧に鬱な人が多いという噂は本当かもしれない。イギリスは夏に行くべきだ。食事に関して、渡航前に、イギリスへ滞在することを告げた知人には、“料理が不味いらしい”と必ず言われた。しかし、フィッシュ & チップスは気に入ったし、日本料理も含め各国のレストランが並んでおり、食事に不自由することは無かった。

今回のケンブリッジ滞在では、今までとは少し異なる研究課題に取り組み、知識と技術を増やす事ができたと感じ

ている。さらに、様々なバックボーンを持つポストドクと話をすることで刺激を受け、上記のメインの研究課題以外にもポリマーなど幾つか計算を始める事ができた。また、少しは人脈を作れた事で、情報交換だけでなく、将来的に再度共同研究をする可能性もあると考えている。

最後になりますが、このような機会を与えて下さった大峯所長や小杉教授、滞在のサポートをして頂いた分子研大学院系の皆様や総研大学務課の我謝様に心より御礼申し上げます。

E V E N T R E P O R T

教員報告 総研大アジア冬の学校2012

2012年度担当教員 分子制御レーザー開発研究センター 准教授 藤 貴夫

総研大アジア冬の学校が平成25年1月14日(月・祝)から17日(木)にかけて岡崎コンファレンスセンターで開催されました。分子研で行っている研究・教育活動をアジア諸国の大学生・大学院生および若手研究者の育成に広く供することを目的として平成16年度に始まり、今回で9回目になります。海外からの参加者は27名でその国籍別の内訳はタイ16人、中国7人、インドネシア1人、マレーシア1人、台湾1人、韓国1人でした。そのほかに総研大生、分子研の若手研究者など、日本国内からの参加者が20人であり、参加者の合計47人でした。

今回は、テーマを「Frontiers in Photo-Molecular Science」としました。分子研の永田先生、岡本先生、平等先生に加えまして、海外から招待したBaltuska先生と、若手独立フェローの石崎先生にもご講演いただき、

分子研で講義する機会のない先生方にもご講演いただくことで、分子研内の学生の人たちにとっても、新鮮な内容になるようにしました。

特に今年度は櫻井先生から応募期間中にタイのほうで強力にご宣伝いただいたことによって、海外からの応募者の人数は、前年度の4倍程度とな

る108人となりました。30名以下まで絞り込む選考はかなり苦勞をしましたが、昨年と比べてまじめな学生が多く、講義中やその後での質問なども多くあったと思います。有意義なイベントとするためには、今後も、しっかり宣伝していくことが重要であることがわかりました。



担当教員 総研大夏の体験入学2012

2012年度担当教員 総研大物理科学研究科構造分子科学専攻 准教授 唯 美津木

2012年8月6日(月)から9日(木)までの4日間、分子科学研究所において、第9回総研大夏の体験入学が開催された。本事業は、他大学の学部学生・大学院生に対して、実際の研究室での体験学習を通じて、分子科学研究所(総研大物理科学研究科構造分子科学専攻・機能分子科学専攻)における研究環境や設備、大学院教育、研究者養成、共同利用研究などの活動を知ってもらい、分子研や総研大への理解を深めて頂くことを目的としている。本年度は、定員を大幅に超える応募を受け、選考の結果、32名の学生(学部学生25名、大学院修士課程学生4名、専門学校生3名)に参加頂いた。

6日14:00から明大寺地区でオリエンテーションを開催し、総研大・分子研の紹介の後、各実施グループの体験プログラムの紹介を行い、UVSORと計算科学研究センターの施設見学を実施した。夕方からは、職員会館において歓迎会を開催し、全参加学生に自己

紹介を兼ねて、体験入学の抱負を語ってもらった。所内からも非常に多くの方に参加頂き、100名を超える盛況であった。7日、8日の2日間は、終日、各グループにおいて体験プログラムを実施した。最終日の9日には、2日間で実施した体験プログラムの結果を個別に発表してもらい、多くの質疑応答があり、充実した体験プログラムであったことが伺えた。

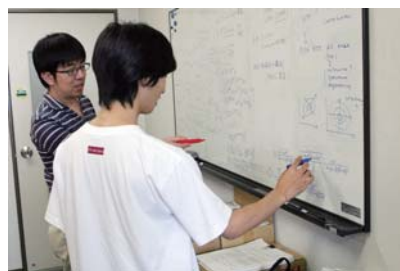
終了後に実施したアンケート結果では、実験系・理論系ともに研究体験が有意義であったとの回答が多数を占めた。また、大学と比較して、学生あたりの教員や研究設備が充実しており、研究環境として魅力を感じるという回答が多かった。一方、2日間の日程では、専門的な知識や準備の不足、初めての実験内容で、体験プログラムが難しかったという意見もあった。総研大への入学を進路の選択肢として考えている方も複数参加しており、来年は総研大生として本事業に協力したいとい

う方もおられた。

最後に、本事業にご協力頂きました全ての先生方、皆様方にこの場を借りて厚く御礼申し上げる次第です。



各グループでの体験プログラムの様子



オリエンテーションの様子



玄関前での集合写真

受賞者の声

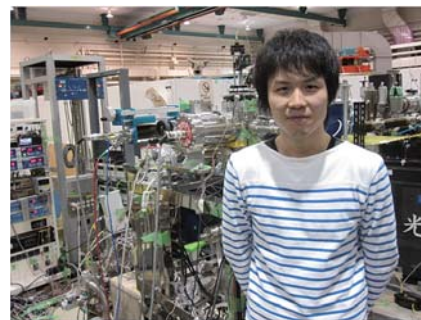
丹羽 貴弘 (特別共同利用研究員)
第9回日本加速器学会年会賞

このたび、「透過光型スピン偏極電子源のための電子ビームバンチ長測定システムの開発」という題目にて、第9回日本加速器学会年会において年会賞を受賞しました。

私は名古屋大学と分子科学研究所のUVSOR施設において負の電子親和性を持ったGaAs型半導体(NEA-GaAs)を用いた電子源の開発に携わっており、この電子源はスピン偏極電子ビーム生成能力から、次世代電子陽電子加速器(ILC)において最も有望な電子源の一つとなっています。またスピン分解逆光電子分光への応用も期待されています。近年では従来型電子源の高輝度化をめざし、励起レーザーをビームが生成するのと反対側から入射する背面透過光型電子源が開発され、偏極度、量子効率としても従来型と遜色のない性

能を達成できることが確認されています。

この新たな電子源を次世代電子陽電子加速器(ILC)の電子源に用いるにはピコ秒スケールのパルス性能を達成する必要があります。しかし、パルス性能は未だ評価されていません。そのため、私は測定システムを開発することにしました。システムはRFを空洞で共振させ、空洞内に誘起した磁場により、電子ビームを横方向に蹴り、そのプロファイルを下流モニターで測定することでパルス性能を求めるといいます。このシステムを構築するため、まずRF偏向空洞の設計を行いました。偏向空洞は直方体でビーム繰り返しの整数倍周波数でビーム軌道上に磁場を誘起し、空洞内でビームが受ける力が最大になるよう設計を行いました。詳細な設計は計算



ソフトを用いて行い、十分な横方向磁場を発生することが確認できました。現在では、設計をもとに空洞を製作し、空洞評価の結果、設計通りであることが確認できています。今後はこの偏向空洞を用いてパルス性能評価を行っていく予定になっています。

これらの成果に対して今回このような栄誉ある賞を受賞することができ大変嬉しく思っています。本研究に対し、御指導頂きました名大山本尚人助教をはじめ多くの先生方に深く感謝いたします。

肥田 洋平 (特別共同利用研究員)
第9回日本加速器学会年会賞

この度、“UVSORにおけるパルス六極電磁石を用いた入射システムの研究”において、日本加速器学会年会賞を受賞いたしました。このような賞をとることができ、非常に光栄であり、この研究に携われたことに感謝したいと思います。

今回、受賞いたしました研究課題は分子科学研究所のシンクロトロン光施設(UVSOR)における、ストレージリングへのビーム入射方法についての研究です。シンクロトロン光施設におけるビーム入射の際には、入射ビームの軌道を中心軌道に近づける操作が必要になります。現在一般的に行なわれている方法は、複数台のダイポールキッカー電磁石をもちいる方法です。この方法では、中心軌道を通る、蓄積ビームを動かしバンパ軌道を形成すること

で入射ビームを蓄積ビームに近づけるやり方です。しかしながら、この方法では、完全に閉じたバンパ軌道を作ることが難しい、バンパ軌道形成時、シンクロトロン光が失われるといった問題点があります。

こうした問題を解決するために、我々はパルス6極電磁石(PSM)を用いた入射を研究し、UVSOR(周長53.2 m)に導入することを検討しました。このPSMをストレージリング上に設置し入射時に励磁することで、磁場中心から外れた位置にいる入射ビームには中心軌道に近づけるように磁場の影響を与え、磁場中心にいる蓄積ビームにはキックを与えることなく、入射が可能になります。この入射方法に必要な電磁石は1台のみなので、機材を設置するための物理的空間が広く



取れるといったメリットもあります。

現在は電磁石も完成し、この入射方法の実現に向けて入射実験を行っています。まだまだ道半ばですが、早期の実現に向けてこれからより一層頑張っていきたいと思います。

最後になりましたが、この研究を支えてくださった分子科学研究所加藤政博教授、名古屋大学高嶋圭史教授をはじめ、UVSORマシングループ、名大高嶋研究室のみなさんに感謝の意をさせていただきます。

受賞者の声

平 義隆 (特別共同利用研究員 (現在産業技術総合研究所 研究員))

第9回日本加速器学会年会賞 第7回日本物理学会若手奨励賞

2012年8月に開催された第9回日本加速器学会年会において、「超短パルスガンマ線を用いた光子誘起陽電子消滅寿命測定法の開発」という題目で年会賞(口頭発表部門)を受賞し、博士論文「90度衝突レーザーコンプトン散乱を用いた超短パルスガンマ線発生とその応用に関する研究」で第7回日本物理学会若手奨励賞(ビーム物理領域)を受賞致しました。分子研UVSORで行った研究に関して立て続けに賞を頂くことができ、嬉しく思うとともに身の引き締まる思いです。

私は、名古屋大学大学院工学研究科の博士課程に在籍し、2009年5月から2011年3月まで特別共同利用研究員としてUVSORで研究を行いました。博士論文の題目にあるように、

レーザーコンプトン散乱と呼ばれる手法を用いて新規光源である超短パルスガンマ線源を開発しました。UVSOR電子蓄積リングを周回する電子ビームが、垂直方向に非常に薄い扁平な形状をしていることに着目し、垂直90度方向からフェムト秒レーザーを衝突することによって超短パルスガンマ線を発生できます。世界でもUVSORでのみフェムト秒からピコ秒の超短パルスガンマ線の発生が可能です。研究の序盤は、超短パルスガンマ線のエネルギー可変性や単色性、偏極性など理論的に予測される基本性能を実験的に評価することを行いました。終盤には、ガンマ線の短パルス性を活かす応用技術として、陽電子消滅寿命測定による材料欠陥評価への応用可能性を実験的に示

すことに成功しました。

最後に、この研究を指導して頂き日本物理学会若手奨励賞に推薦して下さいました分子研の加藤政博教授、名大の曾田一雄教授を始めとする共同研究者の方々に厚く御礼申し上げます。

(Ref.)

Y. Taira, et al., *Nucl. Instr. and Meth. A*, **637** (2011) S116-S119.

Y. Taira, et al., *Nucl. Instr. and Meth. A*, **652** (2011) 696-700.

Y. Taira, et al., *Nucl. Instr. and Meth. A*, **695** (2012) 233-237.



平成24年度9月総合研究大学院大学修了学生及び学位論文名

専攻	氏名	博士論文名	付記する専攻分野	授与年月日
構造分子科学	Xu Yanhong	Design, Synthesis, and Functions of Novel Conjugated Microporous Polymers	理学	H24. 9.28
	Ding Xuesong	Design and Synthesis of Functional π -Electronic Two-Dimensional Covalent Organic Frameworks	理学	H24. 9.28
	Wu, Huijun	Excited-state Dynamics of Metal Nanostructures Studied by Ultrafast Near-field Spectroscopy	理学	H24. 9.28
	宇野 秀隆	神経細胞ネットワーク機能解析応用を目的とした培養型プレーナーパッチクランプイオンチャンネルバイオセンサの開発	理学	H24. 9.28
機能分子科学	Wang Chunlan	Synthesis and Reactivity of Iodosylarene Adducts of a Chiral Manganese Salen Complex	理学	H24. 9.28
	Dhital Raghu Nath	Gold and Gold-based Bimetallic Catalysis for Carbon-Carbon Bond Formation	理学	H24. 9.28

総合研究大学院大学平成24年度(10月入学) 新入生紹介

専攻	氏名	所属	研究テーマ
構造分子科学	Wu, Yang	物質分子科学研究領域	二次元高体及び有機骨格構造の分子設計と機能開拓
	Huang, Ning	物質分子科学研究領域	Synthesis of Fluorine Substituted Two-Dimensional Polymers and Frameworks
機能分子科学	齋藤 雅明	理論・計算分子科学研究領域	密度行列繰り込み群及び内部縮約表現に基づく高精度分子理論の確立
	Zhu, Tong	岡崎統合バイオサイエンスセンター	Elucidation of functional mechanisms mediated by sugar-protein interactions
	Ngamsomprasert, Niti	分子スケールナノサイエンスセンター	Synthesis derivatives of bowl-shape aromatic compound (Sumanene, buckybow)

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95回	平成24年10月20日	分子科学フォーラム特別版 平等 拓範准教授「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」 秋山 修志教授 「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?～」 正岡 重行准教授「植物から学べ! 人工光合成」	
第96回	平成25年2月8日	現代の食品工業における技術革新	宮島 清一(宮島醤油(株)代表取締役社長)

■分子研コロキウム

回	開催日時	講演題目	講演者
第840回	平成24年9月25日	Ultrafast Chemical Dynamics from Raman Spectroscopy	Siva Umamathy (Indian Institute of Science 教授)
第841回	平成24年9月27日	What do we learn about photosynthetic light harvesting from long-lived electronic coherence?	石崎 章仁(分子科学研究所 若手独立フェロー)
第842回	平成24年11月16日	Structural basis for light-gated cation conductance by channelrhodopsin	濡木 理(東京大学大学院理学系研究科 教授)
第843回	平成25年1月18日	Structural Science of Nanocarbon Molecules: A Synthetic Approach from Organic Chemistry	磯部 寛之(東北大学大学院理学研究科 教授)

■人事異動(平成24年6月2日～平成24年11月1日)

異動年月日	氏名	区分	異動後の所属・職名	現(旧)の所属・職名	備考
24.6.15	香月 浩之	辞職	奈良先端科学技術大学院大学 物質創成科学研究科 准教授	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門 助教	
24.7.1	河津 励	勤命	理論・計算分子科学研究領域(金沢大学理工研究域勤務) 特任研究員	理論・計算分子科学研究領域(京都大学 福井兼一記念研究センター勤務) 特任研究員	
24.7.31	藤澤 敏孝	辞職	総合研究大学院大学 特任教授	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門 専門研究職員	
24.8.20	Haifeng Zhou	辞職		生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門 研究員	
24.9.1	須田 理行	採用	物質分子科学研究領域 電子物性研究部門 助教		
24.9.1	向山 厚	採用	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門 助教		
24.9.16	KITYAKARN, Sutasinee	採用	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 研究員		
24.9.16	新谷 敦子	採用	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門 技術支援員	基礎生物学研究所 時空間制御研究室 技術支援員	
24.9.30	見附 孝一郎	兼任	(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 教授(兼任)	
24.9.30	浅利 智恵	退職		光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門 技術支援員	
24.10.1	山本 浩二	採用	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 助教		
24.10.2	XU, Yanhong	採用	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 研究員		
24.10.12	Wu, Huijun	辞職		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	
24.10.15	櫻井 理恵	辞職	株式会社サムスン 横浜研究所 研究員	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 研究員(IMSフェロー)	
24.10.31	中川 剛志	辞職	九州大学 大学院総合理工学研究院 准教授	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 助教	
24.10.31	田中 誠一	辞職	東京工業大学 博士研究員	極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門 研究員	

編集後記

分子研レターズ67号も、数多くの受賞、研究会活動、共同研究ハイライト、海外との交流の報告など充実した内容で、分子研のアクティビティの高さをお伝えすることができたかと思えます。また、一般公開の手応えなど、社会と分子研とのかわりを考えるうえで興味深い記事もお楽しみいただけものと思います。ご多忙な時間を割いて、ご寄稿いただいた執筆者の皆様に心よりお礼申し上げます。

67号は明大寺キャンパスの紅葉の美しさを印象づけます。そういえば、紅葉を前に写真を撮っているときに、大峯所長に「植物は何のために紅葉するのだけ？」と突然尋ねられて返事に窮してしまいました。あらためてインターネットで調べましたところ、植物が自身にとって直接役に立たないアントシアンのような色素を十分に合成できる余裕があるということは耐性（免疫学的余裕）のデモンストレーションとなり、そのため色を識別できる害虫はより鮮やかな紅葉を示す植物には寄生するのを避けるのだという説があるそうです。なにやら示唆に富む話です。

ともあれ、この67号が皆様の手元に届く頃には、寒かった冬が過ぎて、そろそろ岡崎の桜も春の彩に向けて準備を整えていることでしょう。

編集担当 加藤 晃一

分子研レターズ編集委員会よりお願い

■ご意見・ご感想

本誌についてのご意見、ご感想をお待ちしております。また、投稿記事も歓迎します。下記編集委員会あるいは各編集委員あてにお送りください。

■住所変更・送付希望・送付停止を希望される方

ご希望の内容について下記編集委員会あてにお知らせ下さい。

分子研レターズ編集委員会

FAX : 0564-55-7262

E-mail : letters@ims.ac.jp

<http://www.ims.ac.jp/know/publication.html>

I M S Letters

分子研と研究者をつなぐ

VOL. 67

分子研レターズ

発行日 平成25年3月（年2回発行）
発行 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構
分子科学研究所
分子研レターズ編集委員会
〒444-8585
愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38
編集 小 杉 信 博（委員長）
加 藤 晃 一（編集担当）
大 迫 隆 男
木 村 真 一
斉 藤 真 司
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 株式会社コームラ

本誌記載記事の無断転載を禁じます

分子研レターズ vol. 67

発行月／2013年3月 編集発行／分子研レターズ67号編集委員会
〒444-8585 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地 E-mail : letters@ims.ac.jp URL : www.ims.ac.jp

 分子科学研究所