

分子研レターズ

VOL. **68**
SEPTEMBER 2013
ISSN 0385-0560

●巻頭言

人工光合成への期待 ——“知の顕微鏡”と“知の望遠鏡”——

井上 晴夫 [首都大学東京・人工光合成研究センター長]

●レターズ

分子研に関連して思うこと

太田 信廣 [北海道大学電子科学研究所・特任教授]

●分子科学の最先端

密度行列繰り込み群に基づく 量子化学の最前線：理論と応用

柳井 毅 [理論・計算分子科学研究領域・准教授]

共同利用研究ハイライト

減衰全反射遠紫外分光法と量子化学計算による凝縮層における
有機化合物の電子状態の研究

尾崎 幸洋 [関西学院大学理工学部化学科・教授]

正方形の古細菌が持つ光受容タンパク質の特徴的な構造変化

須藤 雄気 [名古屋大学大学院理学研究科・准教授]

巻頭言

01 人工光合成への期待——“知の顕微鏡”と“知の望遠鏡”——

● 井上 晴夫 [首都大学東京 人工光合成研究センター長]

レターズ

02 分子研に関連して思うこと

● 太田 信廣 [北海道大学電子科学研究所 特任教授]

分子科学の最先端

05 密度行列繰り込み群に基づく量子化学の最前線：理論と応用

● 柳井 毅 [理論・計算分子科学研究領域 准教授]

IMSニュース

- 10 協奏分子システム研究センターが発足
 11 ベルリン自由大学と国際連携協定締結
 12 桑島邦博教授退職記念の会
 13 第14回自然科学研究機構シンポジウム「分子が拓くグリーン未来」報告
 14 第1回NINS Colloquium「自然科学の将来像」報告
 15 受賞者の声
 18 事業報告
 21 国際研究協力事業報告

IMSカフェ

- 23 分子研出身者の今——井上 克也
 24 分子研出身者の今 受賞報告——永瀬 茂、鈴木 俊法、水谷 泰久
 27 分子研を去るにあたり——桑島 邦博、見附 孝一郎、唯 美津木、永田 央、田中 康寛、安池 智一、金 鋼、邨次 智
 中川 剛志、古川 貢、山本 薫、飯島 隆広、阿達 正浩
 38 外国人運営顧問の紹介——Ian A. Walmsley、Thomas V. O'Halloran
 39 外国人研究者の紹介——Adam P. HITCHCOCK
 41 新人自己紹介

共同利用・共同研究

- 46 共同利用研究ハイライト
 減衰全反射遠紫外分光法と量子化学計算による
 凝縮層における有機化合物の電子状態の研究 尾崎 幸洋 [関西学院大学理工学部化学科 教授]

正方形の古細菌が持つ光受容タンパク質の特徴的な構造変化 須藤 雄気 [名古屋大学大学院理学研究科 准教授]

- 50 施設だより
 52 次世代バイオサイエンスに対する岡崎統合バイオサイエンスセンターの取り組み
 54 共同利用・共同研究に関わる各種お知らせ

大学院教育

- 55 コラム——「おかしん先端科学奨学金制度」について 中村 豪 [総合研究大学院大学 構造分子科学専攻]
 56 イベントレポート
 58 受賞者の声
 60 修了学生及び学位論文名
 61 各種一覧

人工光合成への期待 ——“知の顕微鏡”と“知の望遠鏡”——

井上 晴夫

首都大学東京
人工光合成研究センター長

植物が地表に花開くとき、実は地中では根を十分に張っている。

科学技術の進展や成果の一部を社会が知るときには、あらわには見えなくても地中の根のように既に膨大な基礎研究の実績がある。一般に、社会は新聞、テレビなどの報道、インターネットや、評判、噂など、情報の確かさ、質についてはいわば凹凸のない雑多で玉石混濁の状態を受け取っている。研究最前線で研究者が一喜一憂しながら熱中している状況の一次情報（最新の学会発表や原著論文）からは何段階も拡散したいわばn次情報と言える。社会は日常のニュース、n次情報、を何とか最先端研究の一次情報に掘り下げて“感覚的”にでも理解しようとするが、この時にはあたかも目には見えない極微の世界を見るがごとく“知の顕微鏡”とも呼ぶべき助けがあれば大いに理解が進む。それには専門家による「翻訳」が果たす役割が極めて重要になる。逆に、研究最前線では基礎研究者は自身の研究が展開する方向や、やがて地表に出て社会での実生活にどのように役立つだろうかをあたかも将来を見通すがごとく“知の望遠鏡”を各人が持っているはずだ。

人工光合成の歴史、現状、将来への展望を想う時、“知の顕微鏡”と“知の望遠鏡”の調和とその確かさが非常に気になる。人類の将来をかけた次世代エネルギーシステムとしての人工光合成は、もはや人類の夢ではなく、必ず実現しなくてはならない課題となった。極めて社会的要請の強い課題となったのだ。社会は常に貪欲であり、結果を今か今かと待ち望む。大きい期待と容

赦ない現実的評価はこれまでも多くの課題についても繰り返されてきた。基礎研究者はそのような社会の姿勢を「科学への理解が浅い」と嘆じ、直截的な非難や言い訳をしがちではあるが、実は社会のダイナミズムはそれほど単純でもないし、基礎研究者に許された自由時間も実はそれほど長くはないのである。

確かな“知の顕微鏡”と“知の望遠鏡”の両方が備わった社会では、いわゆるサイエンスコミュニケーションが健全に機能する社会として、基礎研究から応用実用までの道筋が漠然と見える場合があるに違いない。我が国は、そのようなサイエンスコミュニケーションが成り立つ可能性を秘めた数少ない社会と筆者は感じている。科学技術政策こそが、このような社会の仕組みを先導するものであってほしいのだが……。

1) 自然に学び、理解し、2) 触発されて、3) 機能として、やがて自然を超えるというアプローチで、人工光合成研究は急速に進んでいる。わが国は、上記のどの段階でも先頭を走っている。しかし、一朝一夕にはいかない。著者は約30年計画と考えている。頂上をめざす“駅伝”に例えよう。熾烈な区間競争の結果、複数のノーベル賞も生まれよう。しかし、登頂、完走には、足の引っ張り合いではなく他者の研究成果を尊重する強力な多種類の異分野連携による切磋琢磨が不可欠である。

地上で最も速く走る動物はチーターらしいが、人工物の自動車はごく普通のものでもアクセルさえ踏めば動物のスピードは軽く凌駕する。同じニュートン力学に依りながら、速度のみに注目



すれば人工物の自動車は自然を超えているようにみえる。

天然の光合成は30億年近い進化を経ている。人工光合成はその後をあくまでも急迫するのか、自然の不思議を理解し、触発されながら全く異なるシステムで自然を超える機能を実現するのか、科学的アプローチにおいてもMultiple-Cross-Fertilizationの言葉をかみしめたい。

分子研には、若手の優れた先端研究者達が人工光合成の実現に向けて正面から取り組んでいる。Leading Instituteへの期待は極めて大きい。

いのうえ・はるお

1969年東京大学工学部卒、修士課程を経て1972年東京都立大学工学部助手、講師、助教授を経て1991年同教授、2005年首都大学東京都市環境学部教授、同学部長、研究科長、国際センター長など。日本化学会筆頭副会長(2005)、光化学協会会長(2006-2007)、Asian and Oceanian Photochemistry Association会長(2008-2009)、日本化学連合副会長(2012-)、科学技術振興機構さきがけ研究「光エネルギーと物質変換」領域研究総括(2009-)、科研費新学術領域研究「人工光合成」代表者(2012-2017)。

太田 信廣 北海道大学電子科学研究所 特任教授

分子研に関連して思うこと

おおた・のぶひろ

昭和 47 年 東北大学理学部化学科卒、昭和 52 年 東北大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了(理学博士)、昭和 52 年 マーケット大学博士研究員、昭和 53 年 北海道大学応用電気研究所助手、平成 4 年 北海道大学工学部助教授、平成 8 年 マックスプランク研究所招聘研究員、平成 10 年 北海道大学電子科学研究所教授、平成 25 年 北海道大学電子科学研究所特任教授

分子研との主な関わり

平成 13 年～ 16 年 分子科学研究所運営協議員、平成 16 年～ 18 年 分子科学研究所運営会議委員、平成 13 年～ 18 年 分子科学研究所人事選考委員、平成 14 年～ 19 年 分子科学研究所学会等連絡会議構成員、平成 22 年～ 24 年 分子科学研究所客員教授



分子研にはこれまでいろいろとお世話になった。1980年代には機器センターでの共同実験で何度もお邪魔したり、その後は運営委員会や人事選考委員会に参加させて頂いた。昨年までの2年間は客員教授として、また協力研究等でもお世話になった。このように分子研の比較的初期の頃から最近まで関係することが多かったことから、今回分子研レターズへの寄稿依頼を頂いたことと思う。

共同利用について

分子研は国内外の研究者に広く開かれた研究施設としてこの間ずっと機能し、分子科学研究の発展に多大なる役割を果たしてこられたことは疑うべくもない。ただ、初期の頃は外部からの多くの人で賑わっているのが印象的だったが、だんだんその数が減って、最近では、会議やセミナーの会場、あるいは食堂へでも行かないと人に会うこともないような状況にあるのは気になっている。かつては分子研に限られていた高価な装置が各大学にいきわたり、分子研に赴くことなしに実験ができる、ということもあるのかもしれない。だからといって分子研の重要性が薄れたとは思わない。選択と集中とい

うことで、ある目的に沿った研究に多くのお金が出る傾向にあるようだが、お金が集まりにくい領域の研究に興味を示す人も多いはずだ。研究資金が足りなければ、共通の装置を利用しながら研究を進める以外にない。個々の研究者のニーズを叶えてやるのが財政的に許されないとすれば、共同研究や機器のシェアリングがより重要となる。何より私自身、最近でも分子研の装置を利用して頂いて大変助かっている。分子研には、これまでと同様のシステムがベストかどうかは別として、共同利用や共同研究を通して、外部の人間が研究を行うことが可能なシステムを継続して欲しいと切に願っている。

研究室サイズについて

共同利用への対応ということもあり、分子研で研究室を運営する方々の雑用は相変わらず多そうに見えるにもかかわらず、そして個々の研究成果は非常に顕著であるにもかかわらず、各研究グループの構成員の数が比較的少ないのは、何とかならないものかと外部の人間ながら気になる。大学に属していればどの研究室にも多くの学生が配属されるということでは勿論ないが、分子研の各研究室と大学に属する多く

の研究室との大きな違いは学生の数が圧倒的に違うことではないか。分子研の各研究室には総研大の大学院生が参加していると思うが、学部を持たない大学院大学への希望者は限られており、教員は学生集めに苦勞されているのではないか。研究所は学生を当てにしてはいけないという意見もあるとは思いますが、研究と教育が共に進められるのであればそれにこしたことはない。

博士課程について

この15年間で博士課程修了者は2.6倍に増えているというが、博士課程進学者が多いという実感は少なくとも私にはない。文部科学省は、若手や女性研究者の比率と共に、人口あたりの博士号取得者も海外に比べて少ない、という分析を盛り込んだ「科学技術の振興に関する年次報告」(科学技術白書)を閣議に報告したという記事を最近目にした。2002年には修士課程の学生の14.1%だった進学者が2012年度には9.6%まで下がって来ているという。博士課程を修了しても安定した職になかなかつけないという実態があり、会社もなかなか採用したまらない状況の中で、研究室の修士課程の学生に博士課程への進学のことを積極的にはすすめ

にくい。学位を取得することに、世間的には一定の敬意を表するという面はあっても、就職活動においてインセンティブがなく、私の周囲でも優秀な学生はむしろ修士課程を終えると会社に就職する傾向にある。博士課程の学生を増やそうということであれば（単に増えればいいということでもないと思うが）、学位取得がプラスになるような方策が必要だ。

院生の流動性について

分子研や大学付属の研究所の学生が少ない原因の一つとして、学生の流動性の問題もある。「欧米の学生は学部卒業してから大学院に進学する際に、大学を移る場合が多い。教育環境、研究環境を変えることは若い学生の教育上、極めて重要である」ということで、日本においてもそうあるべきである、という議論が非常に活発にされていたのはついこの前だったと記憶している。あれはどうなったのか。最近この種の議論をメディアで目にもすることもない。私が所属する北大を例にとると、理学部および工学部を卒業するのは毎年200名および700名前後、どちらも約8割強が大学院進学となっている。その中で、他大学への進学率を見てみると、理学部は8%前後、工学部は3%前後と1割にも満たない。また海外の大学の大学院に入学した学生は少なくともここ数年間はいないようだ。極めて閉鎖的であり、学生の流動性が以前に比べて大きくなったということでは全くないようだ。

大学間の移動が少ないだけでなく、所属する学部に通じる大学院ではなく、学内の他の大学院の修士課程へ進学する学生も少ない。修士課程から博

士課程に進学する場合も同じ研究室で、という場合が多い。結果として、学部教育に関わることのない研究室への入学希望者は残念ながら非常に少ない。複数の研究科（学院）から学生が配属できるようなシステムがあれば、学生にとっても選択肢が広がることになると思うのだが、北大の場合はなぜかそうはなっていない。

留学生について

附置研究所に属する私の研究室では、北大の学生からの入学希望者が少ないということもあって、バングラデシュ、インド、台湾からの留学生をできるだけ受け入れることを試みてきた。ただ、経済支援ができるかどうかは深刻な問題である。経済支援がお願いできるのであれば留学生を増やすことは可能だと思っている。分子研では、学生の確保にどう対応されておられるかは知らないが、外国の特定の大学の特定の学部や専攻と人事交流も含めて、といったことも考えられてはどうかだろうか。優秀なのに、その意欲を満たす環境にない学生であれば、優れた環境を希望するに違いない。となれば、まだこれからという地域を念頭に検討するのが筋かもしれない。学生を集めようということであれば、アジアやアフリカといった地域に目を向けるべきなのかもしれない。少なくとも私は、アジアの留学生が研究室に来てくれたことで多に助かった。人種によっての優劣にそれほどの差があるわけではないとすれば、優秀な学生の数は人口に比例することになる。研究は個々の力とはいっても、同じ研究室内で議論する人数が有る程度多い方が活性化されるように思うのだが。

馬場先生と分子科学

この原稿を準備していた6月26日、かつて約10年間助手として一緒に過ごした馬場宏明先生が90才でご逝去された。その通夜、告別式が6月28、29日に東京で、長倉三郎先生ご夫妻、田中郁三先生ご夫妻、伊藤光男先生、土屋荘次先生、坪井正道先生、山崎巖先生等、分子研に非常に縁の深い方々でご参列されるなかで執り行なわれた。先生は北大をご退官されてから3年後の昭和65年に坪井先生、田隅先生とご一緒に「回想の水島研究室—科学昭和史の一断面—」を編集され、日本の分子科学の創成に関わられた数多くの門下生の方々による水島先生とその研究室をめぐる回想文集を出版されている。馬場先生の稿を改めて拝見すると、渡辺格先生の「これからは技術と倫理が重要である」というお言葉を強調されていると共に、「状況に応じてどのような装置でも手作りする精神、必要ならば専門を外れた物理学にも生物医学にも踏み込むような無限界主義、流行の研究を追うことはしないという独歩の精神」を水島研究室において感得されたこと、そして北大の象徴でもあるクラーク博士が残したとされている「少年よ大志を抱け」を想起されて科学界・教育界における「高遠なる大志」の思想の実現の大切さを述べられている。研究の再現性や厳密性、論文の書き方や発表の仕方に関しては殊の外厳しい先生であったが、分子科学研究の今後を考える上で実に貴重な考えが述べられていると感じる。ちなみに、昭和62年に北大をご退官された先生は北海道大学ができた頃の初期の事情を述べた「大志の系譜」という著書を上梓されている。私が所属する研究所の前身である応

用電気研究所に在職された先生は、新たな研究を行うには市販の装置ではなく、新たな装置を自ら構築することでなければ真に新しい研究は難しいというお考えであった。技術支援の重要性を認識され、装置の作成等で大きな力を発揮する機械工作、ガラス細工、電子回路に関係する技術者を大事にされた。所長として部局の運営にあたっては、これらの技術者は一朝一夕に育つものではないというお考えのもと、退職される方がいる場合にはその何年前にも新しい人を導入することを決めて育成にご尽力されたのを身近に拝見した。これは、現在の分子科学研究所がまさに技術支援に携わる技術者の育成や技術力の維持に務められていることと同様と思う。大学や研究所における人員削減がこれら技術者をターゲットとして行われる昨今の風潮を考えると大変困難なことだと思うが、分子研においては継続して大事にして欲しいと思う。技術支援は、新しい研究を始める、といった場合にはなくてはならないものの一つであることはまち

がない。研究のためのインフラが整っていないと十分な研究が遂行できるとは思えない。馬場先生が在籍された旧応用電気研究所時代から、私達の研究所は、分子・物質、光、生命、そして数理と、化学と物理と生物と数学の非常に複合的な分野の集まりを特徴としてきたが、上記無限界主義に通じるものだと思うし、分子研においても、生命科学に強く関係する分野等にも力を入れられており、共通する点も多いと感じる。研究を進める際に、必要なものはどれをも取り入れて考えるという懐の深さが必要であり、狭い領域に閉じこもる時代ではないことは確かである。馬場先生は分子研においては所長が赤松先生の時には運営協議員、長倉先生、井口先生の時には評議員、伊藤先生の時には研究顧問を勤められたと聞いており、分子研の運営にも多大な貢献をされたのではないだろうか。また、平成12年の分子研レターズ42の巻頭言として「実験科学の原点」をお書きになられている。そのなかで、水島先生の絶筆となった文章「ひ

と桁の実験」を例にひかれて、単に実験の精度や時間分解能や波長分解能を高めるだけではない「物質の示す全く新しい現象や機能を探り出すような実験、すなわちひと桁の実験」が重要とお考えを述べられている。これは何も、高精度、高分解能の実験を否定しているわけではなく、新しい分子構造論、構造化学を創始することに繋がった水島先生のご研究を念頭におかれて、人々に新たな概念を持たせることになったり、従来の概念を変える必要性を示したり、新たな研究分野の開拓に繋がったりといった大きな視野から研究を進めて欲しいということを描かれているのだと私は理解している。いずれにしても、馬場先生が残された言葉をかみしめて研究の姿勢や方向を再確認することは、分子科学を専攻する者ばかりではなく科学者一般に大切ではないか。ここに馬場先生の分子科学における多大なる貢献に思いを馳せると共に、ご冥福を心よりお祈り申し上げます。



馬場先生の思い出（Kasha則で知られるM. Kasha教授が日本で最初に馬場研究室を訪れた際の写真。馬場先生は右から2人目）。



馬場先生が北大を退官された後で発行された書物。

密度行列繰り込み群に基づく量子化学の最前線：理論と応用

柳井 毅

理論・計算分子科学研究領域
理論分子科学第一研究部門
准教授



やない・たけし
1997年東京大学工学部応用化学科卒
1999年同大学院工学系研究科修士、
2001年博士（工学）2001年学術振興会
博士研究員 2002年米国Pacific Northwest
国立研究所、同年Oak Ridge 国立研究所
博士研究員、2005年Cornell 大学博士
研究員を経て2007年1月より現職。

はじめに

一電子描像は、化学結合や反応を解釈する上で簡便で強力な概念であり、またそれに基づく分子軌道理論や配位子場理論は分子科学者の常備ツールである。今、理論化学の最前線では、一電子描像を超越する化学の電子状態をどう記述しどう理解するかという問題が先端的な課題として取り組まれ、そして、その理論の開発に新しい進展が見られる。一電子的記述は、実際が多電子描像を平均化した表現であり、電子状態を単一の電子配置によって近似的に捉えることに等しい。一方で、一電子描像を超える電子状態では、複数の電子配置による量子的重ね合わせ（多参照）状態を考慮する必要があり、自明でない複雑さを伴う。本研究グループでは、発足以来、密度行列繰り込み群（DMRG）を用いた量子化学計算法の開発を進め、大次元の多参照電子状態の高速計算を実現してきた。この量子シミュレーション技術を用いて、従来適応不可能とされたチャレンジングな分子系に対する電子状態計算を行い、有機分子のポリラジカル状態、磁性状態、電子励起状態、光合成を司る錯体分子の混合原子価状態、量子スピン状態などを記述することができた。本稿は理論と応用について紹介する。

多電子理論とその量子化学

電子状態を、一電子が感じる平均相互作用およびその運動Fと二電子間クーロン反発相互作用Vによるハミルトニアン $H=F+V$ により特徴づけよう。F>V（弱電子相関）の場合、一電子描像が支配的で、HOMO-LUMOエネルギー差は

大きく、電子をHOMOまで詰める「単一」の電子配置によって電子状態を把握できる。密度汎関数理論（DFT）などはこのような弱相関関係を精度良く簡便に扱える理論である。一方、F<V（強電子相関）の場合、HOMO-LUMOエネ

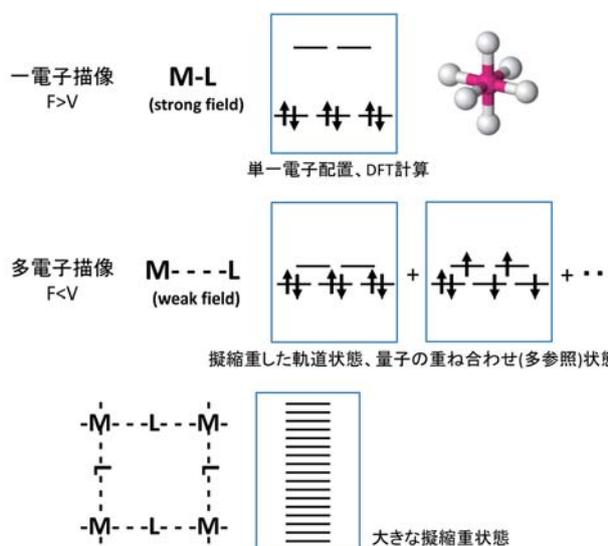


図1 分子軌道が擬縮重する系では、一電子描像（単一配置理論）を超えて多電子描像（多参照理論）に基づき、化学結合、原子価結合の組換え、スピンや電荷の組換えを量子的重ね合わせ状態として考慮する必要がある。擬縮重軌道の増加に従って、重ね合わせの電子配置は急激に増大する。

ルギーは擬縮重し、その為HOMOだけでなくLUMOへの電子占有も許す電子配置を「複数」考慮しなければ正確な電子状態を記述することができない(図1)。このような強相関系は、一電子描像のDFTの欠点が現れる系で、多体問題として取り扱う必要がある。そのモデリングは、電子配置の重ね合わせとして定式化できる(多参照法)が、その自由度はネズミ算式複雑さを持つ(図2)。例えば、擬縮重した軌道状態を持つ原子が複数個結合することにより、より大きな擬縮重性が現れ、その記述に必要な重ね合わせの自由度は指数関数的に増大し、既存の理論手法では適用限界に容易に達する。こうした問題は、固体物理の強相関現象(超伝導など)の理論研究にも見られる一大チャレンジであり、また最近では分野融合による活発な取り組みも見られる。

量子化学計算で扱う化合物において強相関現象とはなんだろうか? バルクのようなマクロ電子系でなく、分子の電子系において、強い電子相関がどんな興味深い化学に参与しているのだろうか? 一例としては、カロテノイドの

π - π^* 励起状態の許容状態と禁制状態が挙げられる。許容状態は一電子励起的な電子状態として、また、禁制状態は二電子励起やそれ以上の励起キャラクターを持つ強相関な電子状態として知られる^[1]。興味深いことに、エネルギー順位に関して、一電子励起の許容状態より、二電子励起の禁制状態の方が順位が低い(図3)。そのため、この禁制状態は、光合成などにおけるエネルギー移動を理解する上で重要な電子状態であると知られる。なぜ一電子余分に励起させる禁制状態の方がエネルギーは低いのだろうか? これは一電子描像を超える禁制状態が持つ強い電子相関に起因する。この例のように、強相関がからむ電子系では人間の直感に従わない量子多体現象、“more is different”な創発性が出現することがある。我々の最近の研究(後述)では、光合成水分解中心の多核マンガンクラスターやグラフェンナノリボンも一電子的理解が通じない系であることを示した^[2,3]。このような現象の背後には、指数関数的に複雑化する電子の物理があり、これを記述するには人間はもちろんコンピュータでも容易

に理解の限界に達する。

密度行列繰り込み群に基づく電子状態理論の開発

当研究グループでは、上述の境界の打開に向け、密度行列繰り込み群(DMRG)^[4]と呼ばれる量子アルゴリズムを量子化学計算に取り入れる新しい手法開発を行っている。DMRGは、Wilsonの数値繰り込み群から発展し、強相関系の量子格子模型を効率よく厳密対角化する物理手法として開発され、今では物性物理の標準的手法として用いられている。DMRG法では、格子サイト(量子化学では分子軌道に相当)間の電子相関をブロック化し、各ブロックでの電子状態を逐次求めながら、全系に対する多体波動関数を再帰的(繰り込み群的)に組み立てていくアルゴリズムである(図4)。繰り込み過程において、多電子の振る舞いに関する膨大な情報をコンパクトな有効表現へと圧縮することで、大自由度の量子的重ね合わせ(エンタングルメント)状態を多項式時間で高速処理することができる。そういった点でDMRG法は量

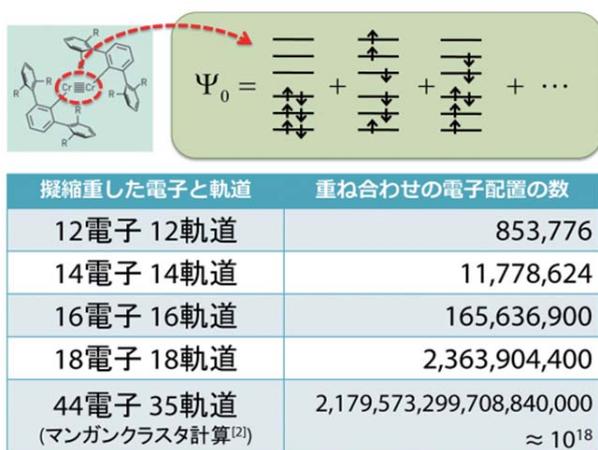


図2 重ね合わせ状態の自由度は電子と軌道の数に対して指数関数的に(組み合わせ論的に)増大する。既存法では、16電子16軌道系が扱えるサイズの限界(「指数関数の壁」)である。マンガンクラスターのDMRG計算では10¹⁸次元の配置空間を扱った^[2]。

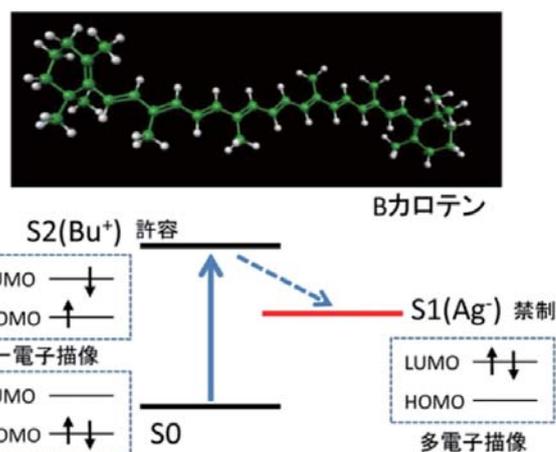


図3 カロテノイドの π - π^* 励起状態のS2許容状態(一電子性)とS1禁制状態(多電子性)のエネルギーダイアグラム。 β カロテンの励起状態はDMRG-CASSCF計算によっても研究された^[5]。

子情報理論とも深い関係があることも知られている。DMRGを用いた量子化学計算法の開発は全世界的に取り組まれており、系を限れば、百電子百軌道系またそれ以上サイズの多参照系を扱うことも可能であり、その適応範囲は従来法を遥かに超えることが示されている。

我々は、これまで、DMRG法に基づく化学の電子状態理論を展開し、最先端の計算技術を駆使した方法論・ソフトウェア開発を行ってきた^[5-10]。DMRG法を量子化学計算へ実装する際の特徴的な工夫は、活性空間 (active space) 法と呼ばれる Hilbert空間のモデル化を用いる点にある (図5)。活性空間法では、系の全電子と分子軌道のうち、擬縮重状態に起因するものそれぞれ以外に分割し、活性空間に限定してDMRG計算を行うことで効率よく多参照状態を記述する。以下、我々が開発してきた理論手法 (非経験的DMRG法) を簡単に紹介する。

(1) DMRG-CASSCF法^[5]: DMRGの多電子描像の基礎となる一電子波動関数 (分子軌道) の最適な形を求める。活性空間法では、活性軌道の選択に任意性があり、特に金属系などではその選択が難しいが、本手法で最適な軌道を決定し整合性の高い記述が

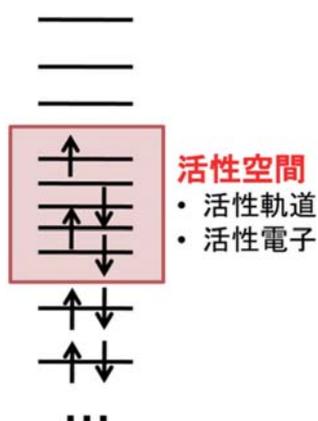


図5 活性軌道・電子とそれ以外に分割する活性空間法の概略図。

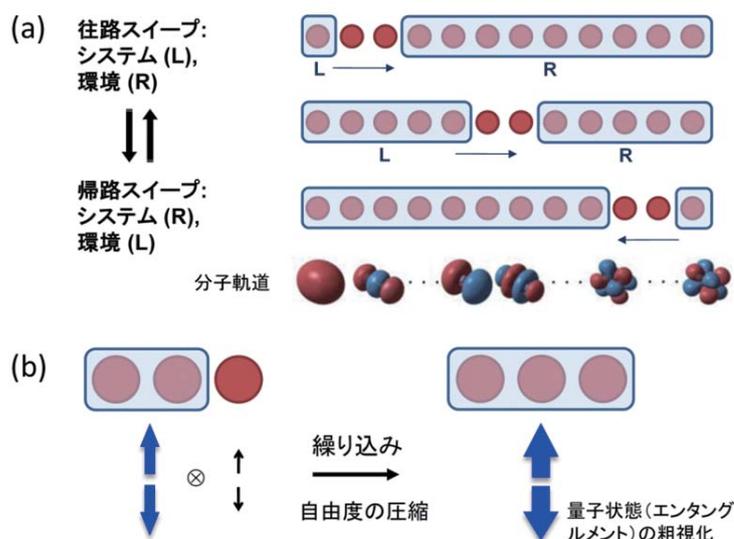


図4 (a) DMRGのスワイプアルゴリズムの概念図。分子軌道を一次元サイト (●) に割り当て、右(L)と左(R)にブロック化を行う。ブロック長は逐次伸縮し繰り返し波動関数を求め、最適な多体基底を組み立てる。(b) 繰り込みの概念図。

得られる。

- (2) DMRG-CASPT2法^[7]: DMRG法で活性空間に限定した多参照状態を求めたのち、活性空間とその補空間との間における相互作用 (動的電子相関と呼ばれる) を二次の摂動論により補正する。動的電子相関の考慮は、エネルギー等の定量的な議論に欠かせないと知られる。
- (3) DMRG-CT法^[8]およびDMRG-MRCI法^[9]: 動的電子相関をクラスター展開 ($e^{-A} H e^A$) および配置間相互作用法により高次相関まで取り込む。
- (4) F12-DMRG法^[10]: 天能 (神戸大) が近年提唱したF12相関因子を用いて、露わな二電子間の相互作用を予め解析的に取り入れ、電子相関の収束性を飛躍的に改善する。
- 以上の他にも、エネルギー核座標微分 (フォース)、状態間のスピン軌道相互作用、EPRパラメータなどの物性値をDMRG計算から算出する手法開発も行っている。

我々は、この最新鋭の計算技術を挑戦的な分子の電子状態解析に実践投入

し、一電子描像を超えて、これまで誰もが見たことのない計算レベルで化学の電子状態の世界を探求している。以降その応用研究を示す。

光合成系IIマンガングラスタへの応用研究

我々は、DMRG法により、光合成酸素発生反応中心であるマンガングラスタの電子状態をほぼ完全解の精度で数値シミュレーションすることに成功した^[2]。水分解酸素発生の反応メカニズムは、光合成の最大の謎の一つとして知られている。謎解きの鍵となるのは活性中心とされるマンガングラスタの働きである。2011年に日本の研究グループによりその鮮明なX線結晶構造が明らかにされたことから、反応機構の解明に向けて急速な進展をみせている。

今回の計算では、多核金属グラスタの波動関数を量子の重ね合わせ状態 (10^{18} 次元という膨大な自由度) として求めた。その記述から各マンガニオンの酸化状態など電子の様子に関する基礎的知見を高い信頼性で明らかに

した。各マンガンイオンの酸化状態は、水2分子から4個の電子を引き抜いて酸素を発生する能力と密接な関係にあり、酸化状態の特定は反応機構の解明に有力な情報を与える。その酸化数に関して、X線結晶構造を入力として得られた我々の計算値は、これまでにEPR分光やX線吸収分光により確定されてきた酸化数とは異なるものであった。この酸化数の不一致は、最新のX線結晶構造に修正の必要性があることを示唆する。同時にこれは、X線ダメージによりマンガングラスタが構造変化を起こしているという最近の仮説を支持するものである。

またマンガンイオン酸化数の異なる2つの状態のエネルギーポテンシャル曲線を計算し2つの状態が交差する点を発見した(図7の青線と赤線の交点)。金属錯体の高い触媒能を支える特徴の一つとして、反応障壁を回避しながら効率的な反応経路をたどるために、状態交差点でポテンシャル曲面を巧みに乗り換える現象が知られる。一般には、その状態交差は項間交差で起こると考えられてきたが、今回発見した状態交差は、スピン状態を変えることなく交差(円錐交差)する極めて特殊なケースである。項間交差と比べ円錐交差での状態の乗り移りは格段に効率がよいことから、マンガングラスタの持つ高い触媒能を解き明かす上で特に重要な知見である。また本研究では、EPR分光法から得られる磁気的相互作用パラメータをDMRG計算から求めた。酸化数と比較してより微細な電子的物性量(観測可能)を用いて、結合長や結合角などの分子構造に関して妥当性を一段と詳細なレベルで検証できることを示した。

これらの成果は、光合成酸素発生反応のメカニズム解明に重要な知見をも

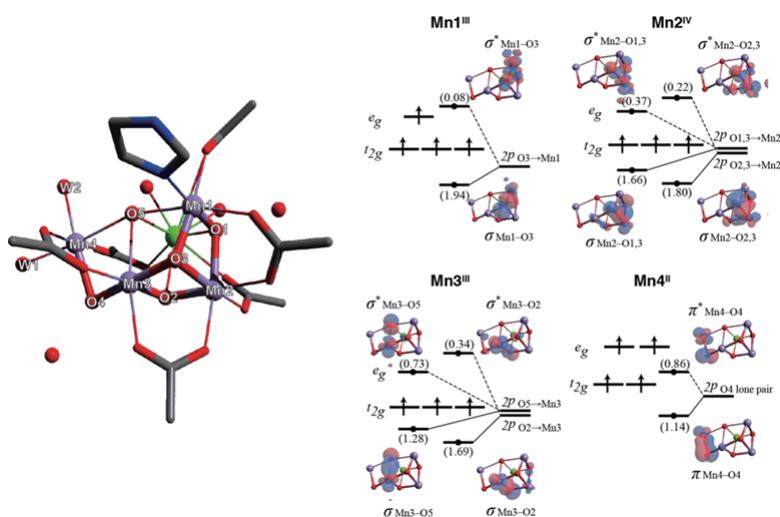


図6 (左) 光合成系II酸素発生中心マンガングラスタのX線結晶構造。(右) 各マンガンイオン酸化状態を表す自然軌道電子占有数の解析。非整数の電子占有数は重ね合わせ状態に由来する。

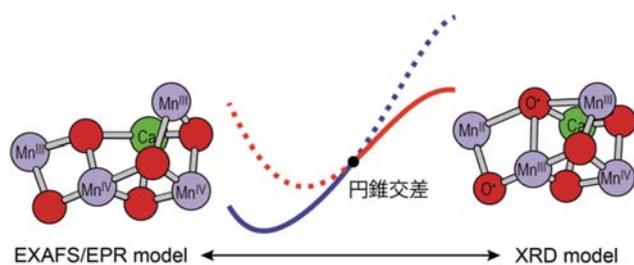


図7 構造変化に沿ったエネルギーポテンシャルの模式図(縦軸:エネルギー、横軸:構造変化)。EXAFS/EPR構造モデル(左)とXRD構造モデル(右)の基底状態は異なるマンガンイオン酸化状態にあり中央の円錐交差点で交差している。

たらずのみならず、本計算手法が、生体中の金属酵素の触媒作用を飛躍的な計算精度で解釈、予測するための強力な基盤技術であることを示すものである。最近では単核・多核鉄のヘム、非ヘム系への電子状態計算にも挑戦しており、近々結果を報告できると思う。

グラフェンナノリボンのラジカル状態への応用研究

グラフェンはその重要な性質の一つに驚異的な電荷移動度を持つことが知られるが、そのままでは金属的であるため、末端したグラフェンナノリボン(GNR)が次世代有機半導体のナノ材料として期待されている。現在ペンタセンが有機半導体として用いられている

が、より高い電荷移動度をもたせるためにグラフェンを模倣するように長鎖GNRの合成に注目が集まっている。ノナセンやテランセンなどは最近単離に成功しているが、さらに長いGNRを合成することは大きな挑戦である。GNRの合成の難しさに、ジグザクエッジに創出するラジカルの存在がある。

我々化学者はベンゼンやナフタレンが閉殻非ラジカル種であることは知っているが、もう一方の極限では、無限長のGNRは無限個のラジカルをもつことが簡単な数理モデルから示される。ベンゼンはGNRの基本単位であるが、どうしてそれらが長いGNRを構成するとラジカルを創出するのだろうか? 我々はこのラジカルの創発現象

の解明に向け、DMRG計算によりラジカル構造のサイズ依存性に関する定量的な解析を行った。

本研究では、GNRの全 π 電子 π 軌道からなる活性空間を用いて、これまで計算が難しかった長鎖GNRの多参照波動関数を求めた^[3]。モデルとするGNRは幅一定（ベンゼン3個分）としてエッジ長を大きくしサイズ効果をシミュ

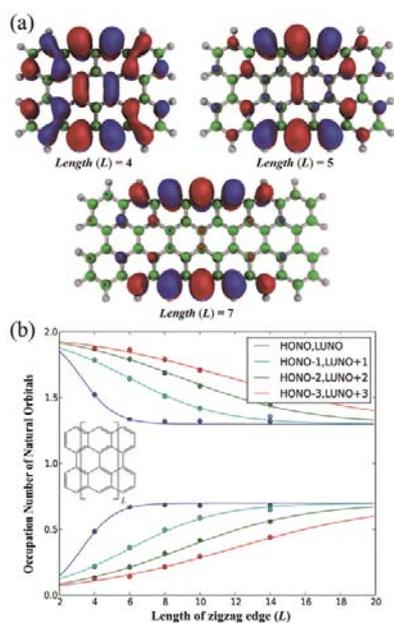


図8 (a) グラフェンナノリボンのエッジ軌道のサイズ依存性。 (b) 自然軌道の占有数のサイズ依存性。2=二重占有、0=非占有であり、それからのずれとして開殻やラジカル (1=unpaired) は記述される。

レートした。多電子波動関数から電子占有数を求め、開殻・ラジカル性を定量化した。計算の結果として (i) リボン長に従いエッジ局在化するラジカル軌道の様子 (ii) ラジカル電子数の増加の様子 (iii) アセン系との比較による幅効果などを明らかにした (図8)。ジラジカルはDFTのスピンの極モデルで記述されるが、GNRで出現するポリラジカル状態はスピン揺らぎが大きく多参照理論による取扱いが重要になる。本研究は分子とバルクGNRのラジカル性を橋渡しする記述を与えた。

まとめと今後の展開

多電子理論は福井理論のような人に分かり易い理論を提供しないのか？と指摘されることがあるが、多体現象は一電子描像のような単純さや規則性がないが故に思いもよらない現象・機能を生むのだと筆者は感じることもある。そこでは計算が理解の本質を導いてくれる (もちろん人間はコンピュータより賢いはずだが)。本研究グループでは、非経験的DMRG法の計算ソフトウェアの整備を進めており、多参照性が表れる錯体化学や光化学などに対する量子化学計算に広く役立てばと期待している。電子の振る舞いを正しく予測する

事が出来れば、時々刻々と進む化学反応の詳細な情報を直接取り出せる。理論計算のそのような強みを生かしたい。本稿では我々自身の手による実践的なチャレンジな系への応用計算を示すことができたと思うが、その他にも、我々のソフトウェアを通じた共同研究も現在進んでいる。我々の基礎的な開発が、既存の限界や概念を打ち破る新しい理論化学へと展開していくことを期待する。

以上で紹介した非経験的DMRG法の開発およびマンガクラスタの研究は倉重佑輝助教が主に行ったものであり、GNRの研究および関連した開発は水上渉博士 (元総研大生) が主に行ったものである。その他現在進行の研究も含め、グループメンバーおよび共同研究者全員に感謝の意を表したい。

略語: DFT (density functional theory); DMRG (density matrix renormalization group); CASSCF (complete active space self-consistent field); CASPT2 (complete active space second-order perturbation theory); MRCI (multireference configuration interaction); GNR (graphene nanoribbon)

参考文献

- [1] I. Ohmine, M. Karplus, and K. Schulten, *J. Chem. Phys.* **68**, 2298 (1978); G. Cerullo, D. Polli, G. Lanzani, S. De Silvestri, H. Hashimoto, R. J. Cogdell, *Science* **298**, 2395 (2002).
- [2] Y. Kurashige, G. K-L. Chan, and T. Yanai, *Nature Chem.* **5**, 660 (2013).
- [3] W. Mizukami, Y. Kurashige, T. Yanai, *J. Chem. Theo. Comp.* **9**, 401-407 (2012).
- [4] S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).
- [5] D. Ghosh, J. Hachmann, T. Yanai and G. K-L. Chan, *J. Chem. Phys.* **128**, 144117 (2008); T. Yanai, Y. Kurashige, D. Ghosh, G. K-L. Chan, *Int. J. Quantum Chem.* **109**, 2178-2190 (2009).
- [6] Y. Kurashige and T. Yanai, *J. Chem. Phys.* **130**, 234114 (2009).
- [7] Y. Kurashige and T. Yanai, *J. Chem. Phys.* **135**, 094104 (2011).
- [8] T. Yanai, Y. Kurashige, E. Neuscammann, G. K-L. Chan, *J. Chem. Phys.* **132**, 024105 (2010).
- [9] M. Saitow, Y. Kurashige, and T. Yanai, *J. Chem. Phys.* **139**, 044118 (2013).
- [10] T. Yanai and T. Shiozaki, *J. Chem. Phys.* **136**, 084107 (2012).

協奏分子システム研究センターが発足

協奏分子システム研究センターは2013年4月に発足し、分子科学研究所がこれまでに培ってきたナノサイエンスに関する研究資産をベースに、「分子それぞれの性質が高次構造を持つ分子集団系の卓越した機能発現にどう結びつくのか」という学問横断的な重要課題に挑戦します。

ポイントは多重の階層を越えて機能している分子システムの知恵に学ぶことです。システムの構成要素である分子について理解を深めるのに加えて、それぞれの分子がどのようなネットワークや制御を介して混然一体となり、階層構造へと繋がっていくのかを解明する必要があります。分子に秘められた固有の機能を、システムはときには数ケタもことなる時空間スケールへと

押し上げて突如発現させ、またときにはマスクするように作用します。このような制御を自律的にかつ僅かなエネルギーで行う系を協奏分子システムと命名し、センターではその解析や創成に取り組みます。協奏分子システムの原理が解明されれば、新規システムを創成して生命機能や分子機能を発現させることも夢ではなくなります。

ミッション達成に向けて、各階層を究めた研究者を微細なナノスケールの分子科学からタンパク質や細胞のようなマクロで不均一な分子科学まで幅広く募り、「解析」、「創成」、「システム研究」をミッションとする3つの研究部門に配置しています。未踏の領域に切り込む若手独立フェローから、分野をリードするシニア研究者まで、異なる学問

領域の研究者が集う、幅広くも層の厚いメンバー構成です。キックオフ・ミーティングを4月2日にかけてメンバー間の交流を深めました。

研究活動や研究成果については、ウェブサイト (<http://cimos.ims.ac.jp/>) からの情報発信、ワークショップ、セミナー等の開催を通じて広く社会に発信していきます。また、国内外の主要な研究拠点との連携を深め、協奏分子システム研究の国際的拠点となれるよう努力していきたいと思えます。当センターの活動に対する、ご協力とご支援をお願いいたします。

(秋山 修志 記)



センターメンバーの集合写真

ウェブサイト
<http://cimos.ims.ac.jp/>



ベルリン自由大学と国際連携協定締結

2013年6月に分子科学研究所はベルリン自由大学（FUB）と分子科学分野での国際連携協定を締結しました。個人ベースの交流を進展させ、今後は組織ベースになります。具体的な連携相手はDepartment of PhysicsとDepartment of Biology, Chemistry, and Pharmacyに属する研究者、学生です。後者にはInstitute of Chemistry and Biochemistry, Institute of Biology, Institute of Pharmacyが属しています。Departmentは日本の学部相当で、学科相当はInstituteと呼ぶようです。連携相手が大学になった背景として、(1)複数の学部が含まれること、(2)大学として国際連携に力を入れていること、(3)大学としての協定の方が継続して対応できる（Deanが交代しても）ことなどがあります。学長と所長がMOUに署名する前に、国際連携部DeanのElke Löschorhさんの部屋で、関係者と懇談しながら筆頭副学長のMonika Schäfer-Korting教授と私で内容確認をし（下記写真左参照）、学長にも挨拶をしてきました。

ドイツでは2006年より国として研

究大学強化事業（Excellence Initiative）が始まり、6年おきに140大学からトップ11大学を選抜するようになりました。2012年の2回目の評価で5大学の入れ替えが起きましたが、FUBはトップ11大学を堅持した6大学のひとつで、そのキャッチフレーズはInternational Network Universityです。FUBは、ドイツが東西に分断されたときに、ソ連占領地区（東ベルリン）に属することになったフンボルト大学からの離反者が1948年に英米仏の占領地域（西ベルリン）に創設した総合大学です。西ベルリンは西ドイツ領ではなく英米仏3カ国の統治領でしたので、西側の支援の下に大学が作られ、創設時から国際大学の役割を果たしてきました。現在、学長の下に大学全体の国際関係を統括する国際連携部が置かれています。

ドイツでは大学の制度改革が進み、大学教授資格（Habilitation）取得の必要性から教授（任期なし）着任の年齢層が高くなっていた、つまり研究者としての自立が遅くなっていた状況を抜本的に是正するために、2002年よりHabilitationなしで30歳前半から独立し

た大学教授に採用するJunior Professor制度が始まりました。任期のあるJunior Professorにはドイツ特有の教授（昔はC2～C4、今はW1～W3のレベルあり）の内部昇格禁止ルールが適用されませんので、Habilitationがなくなったものの、Junior Professorを経ないと教授（任期なし）になれないシステム設計になっています。FUBでもこの新制度を積極的に取り入れており、同時に女性の雇用も増やしているようです。分子研独自の若手独立フェローと非常に似通った制度ですので、若手同士で直接、研究交流や交流人事ができそうです。こちらでは博士号取得後、他大学での2年以上の研究歴があること、かつ、博士号取得後、6年を超えないこと（育児期間等は除く）が採用条件であり、採用されても研究費は自分で稼ぐ必要があるなどの厳しさがあります。

ベルリン自由大学は以上のような大学です。是非、国際連携協定締結を機会に研究交流を進めて下さい。研究所外の方もご参加いただけると幸いです。

（小杉 信博 記）



国際連携部で筆頭副学長とMOUの確認中



学長室、国際連携部のある大学本部建物前。正面には核分裂発見者のOtto HahnとLise Meitnerの記念館が見える。

桑島邦博教授退職記念の会

分子科学研究所 生命・錯体分子科学研究領域、岡崎統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域教授の桑島邦博先生が、平成25年3月をもって定年退職されました。桑島教授は、昭和46年に北海道大学理学部高分子学科を卒業されました。蛋白質の非天然状態に関する研究によって博士号を取得され、北海道大学理学部教務職員、スタンフォード大学博士研究員、北海道大学理学部助手、東京大学大学院理学系研究科物理学専攻助教授、同教授を経て、平成19年1月に分子科学研究所・岡崎統合バイオサイエンスセンター教授として着任され、研究と教育に従事されてきました。

桑島先生の定年退職にあたり、平成25年3月6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、英国ケンブリッジ大学のChristopher M. Dobson 教授、韓国KIAS (Korea Institute for Advanced Study) のJooyoung Lee 教授のお二方を講師とし、記念講演会を開催しました。記念講演会では、Dobson 教授による「New Approaches to Understanding and Preventing Neurodegenerative Diseases」、Lee 教

授による「Global Optimization by Conformational Space Annealing and its Application

to Biological Systems」と題した講演が行われました。記念講演会で講演をお願いしたお二人の先生方は、いずれも桑島先生と同じ研究分野において研究を進めており、桑島先生とも長く親交を深めてこられたこともあり、随所に桑島先生とのエピソードを含めて講演していただきました。

記念講演会に引き続いて、桑島教授による最終講義「My Studies on Protein Folding— In commemoration of the retirement in 2013」が行われました。桑島邦博教授は、生物物理学・蛋白質科学の分野、特に、蛋白質のフォールディング機構の研究において、モルテン・グロビュール状態と呼ばれる非天然状態を発見し、それが蛋白質のフォールディング反応の中間体であることを証明され、世界にその名を轟かせるとともに、世界の蛋白質科学研究における一時代を築かれました。最終講義においては、大学院生として研究を始められた頃から現在に至るまでの研究の歩みを、その時々の写真も交えながら、約1時間にわたってお話していただきました。

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記念祝賀会



を開催し、研究所内、所外合わせて98名（所外56名、所内42名）の方々のご出席を賜りました。記念祝賀会は、大峯巖所長のご挨拶、ケンブリッジ大学のChristopher M. Dobson 教授、KIAS (Korea Institute for Advanced Study) のJooyoung Lee 教授、名古屋大学大学院理学研究科の岡本祐幸教授、東京大学大学院新領域創成科学研究科の能瀬聡直教授にご祝辞を頂き、岡崎統合バイオサイエンスセンター長である高田慎治教授による乾杯で始まりしました。

歓談の後、最後に桑島先生よりご挨拶を頂き、記念品ならびに花束の贈呈を行い、盛会のうちに無事記念祝賀会を終えることができました。年度末のお忙しい中、退職記念の会にご出席いただいた皆様、ならびにこの記念事業のために様々なご支援をいただいた分子研の皆様に対して心より御礼申し上げます。

(青野 重利 記)



第14回自然科学研究機構シンポジウム「分子が拓くグリーン未来」報告

平成25年3月20日、東京千代田区の学術総合センター一橋講堂において第14回自然科学研究機構シンポジウムが開催された。概ね年2回のペースで開催されてきた本シンポジウムであるが、今回は分子科学研究所がホスト機関としての役割を担い「分子が拓くグリーン未来」と題して環境やエネルギーに関わる幾つかのトピックスを紹介した。シンポジウム冒頭、佐藤勝彦機構長のご挨拶、大峯巖分子研所長からのシンポジウム趣旨説明につづき、最初の講演者である大阪大学の福住俊一教授には基調講演として光合成の分子科学的研究の概要と先端をご紹介いただいた。

分子研、京都大学、東京大学、トヨタ自動車から人工光合成、先端的ナノ材料、太陽電池研究、空中窒素資源の有効利用、新しい電池技術、環境調和型化学合成などの未来型技術革新を予感させる魅力的な研究成果が次々と紹介された。講演会の最終登壇者としてノーベル化学賞受賞者であられる米国パーデュー大学の根岸英一教授がノーベル賞受賞研究の立脚点でもあるdブロック遷移金属の特性を紹介され、さ

らにはそれら金属元素の特性を利用した全く新しい化学合成手法を示された。講演会終了後にはシンポジウムのコーディネーターでもあられる立花隆氏と根岸教授との対談が催され、根岸教授が先導される国家的研究プロジェクトACT-Cに関する展望・期待、そして二酸化炭素の有効利用への夢などシンポジウムを総括するような意見交換がなされた。

講演会に加え、別室では自然科学研究機構に属する5研究所からの展示発表もあり、休憩時には多くの聴衆が研究機器のデモ操作や研究内容紹介に参加した。

シンポジウムは分子科学研究所（岡崎コンファレンスセンター）にもリモート中継され、東京会場とあわせておよそ500名近い聴衆を得、成功裏に閉会した。

さて、余談では有るが筆者は根岸・立花両先生、大峯研究所長、大島教授（広報委員長）と共に前日夜にシンポジウム（特に両先生の対談）の打合せを持ち、美味なる北海の海の幸と少々アルコールのせいもあり、延々4時間



近い懇談（放談）を大いに楽しむことができた。またシンポジウム後には立食にて軽い食事を取りながらシンポジウムにご参加いただいた先生方（特に登壇者の方々）と懇親と意見交換をし、これまた楽しいひと時を過ごす事ができた。

さらに本シンポジウムの内容について、立花隆氏が文藝春秋2013年5月号の巻頭コラムにて「有機合成新時代」と題して大きく取り上げてくださったことは望外の幸せであった（下記参照）。

最後にシンポジウム内容の立案・運営に微力ながらも参加した者として、ご登壇いただいた先生方、またシンポジウムを運営・サポート下さった分子研の皆様、機構本部の方々にこの場を借りて厚く御礼申し上げます。

（魚住 泰広 記）

文藝春秋2013年5月号 『有機合成新時代』立花隆（一部引用）

人工光合成の研究者、正岡重行・分子科学研究所准教授は、人工光合成が実現するには、まだまだ時間がかかるが、これが実現したら、生物進化史上画期的進化とみなせるといふ。「これまでの生物界では、太陽エネルギーを直接捕集して、食物に変えられるのは、植物だけでした。動物はそれを食べてエネルギーを得るだけの一方的消費者でした。しかし、人工光合成ができれば、人間は独立の食物エネルギー生産者になるのです。これは動物で最初のことで、進化史を塗りかえる出来事になります」といふ。

生物学の用語で、従属栄養生物、独立栄養生物という言葉がある。人工光合成が可能になったら、人間は人類全体として従属栄養生物から独立栄養生物に転換が成るのだ。これは、数億年に一回あるかないのか大進化といっていいだろう。そしてその暁には、食物、エネルギーのみならず、人間が必要とするほとんどあらゆる物質を有機合成で太陽エネルギーから作り出せる時代になるわけで、文明の様相は一変するだろう。

第1回NINS Colloquium「自然科学の将来像」報告

佐藤勝彦機構長のリーダーシップ、岡田清孝担当理事による取り纏め、自然科学研究機構（NINS）5機関の世話人各1名による検討、事務局企画連携課の方々の支援などにより、昨年度末の2013年2月5日～7日の3日間、芦ノ湖畔のザ・プリンス箱根に缶詰状態で上記研究会が開催されました。参加者は5機関からの推薦（非公募）で各15名前後になるように調整され、主に中堅・若手研究者（助教以上）を中心に機構内ばかりでなく外部も含めて選ばれました。

このColloquiumの目的は、個別テーマについての単なる研究会ではなく、自然科学の各分野を先導している5機関が協力して、将来に向けた新たな横断的な科学研究テーマを提言する、ということにあります。それを実現するため、「哲学及び社会科学」の観点から全体講演2件と「物質」「生命」「宇宙」「エネルギー」の4分野から全体講演各2件の中で「自然科学の将来像」に触れていただいた後、5機関関係者が適度に混ざる形で「生命システム」「時間」「多様性」「新物質と新機能」「地球環境の近未来」の5分科会に分かれて、参加者全員でブレーストーミングを行い、最終日にその内容をそれぞれ発表し、全体討論を行うという形式を選択しました。分子研にも各分科会から最低1名の参加要請があったため、議論がかみ合いそうにない「時間（時間概念も含む）」、「地球環境の近未来（宇宙現象も含む）」にも無理強いをお願いしました（参加して下さった方に感謝します）。全体講演に分子研からお願いした講師は若手独立フェローの石崎さん、准教授の正岡さんで、趣旨に添ったす

ばらしい講演をして下さいました。講演後、それぞれ「生命システム」、「新物質と新機能」の分科会での活発な議論に参加いただきました。また、分子研が世話役だった「新物質と新機能」分科でのブレーストーミングは、分子研教授の山本さんに取り纏めをお願いしました。具体的なターゲットとなる新たな物質や機能を定めるような議論は所詮、無理な話でしたが、ターゲットを決める際に必要になる基本的な考え方についてはうまくまとめて下さったと思います。

なによりよかったのは、人里離れたところに強制的に押し込められて、寝食をともにしつつ、ゆったりと過ごせたところです。議論がかみ合わなくとも、分野入り乱れて、丸テーブルで一緒に夕食やアルコールを楽しみながら議論したりすることで、自然科学研究機構としての一体感を感じることができましたし、そのことによって自然発生的な研究連携がいろいろありそうだという気配を感じることもできました。分子研内の研究者同士でも、何が研究上問題になっていて、お互い何が共同研究として期待されているかなどの議

論が必要であることが浮き彫りになりました。今後の課題だと思います。平均しておとなしい分子科学の研究者には、全体講演や全体討論での歯に衣着せぬ質疑応答なども刺激的だったと思います。佐藤機構長のお考えでは、将来的には国際会議にしていく方向性もあるのですが、議論した内容から国際会議に耐える具体的な提言にまとめあげるには、もう少し時間が必要な気がしました。佐藤機構長も1回だけでは難しいと判断され、第2回目もほぼ同じ形式で開催することが決まりました（静岡県掛川ヤマハリゾート「つま恋」で2013年12月16日～18日）。分子研の世話役は継続性を考えて山本教授にバトンタッチしました。放送大学准教授の安池智一さんにも協力をお願いしております。詳細は以下のページをご覧ください。

所外の方：http://www.nins.jp/public_information/colloquium.php

所内の方：http://www.nins.ac.jp/staffonly/index/08_kikakurenkei/colloquium/colloquium.html

（小杉 信博 記）



夕食会・懇親会の様子（大峯所長のスピーチ）

唯美津木准教授に第1回女性化学者奨励賞

山根宏之助教に第2回自然科学研究機構若手研究者賞

石月秀貴助教にレーザー学会平成25年度第37回業績賞（進歩賞）

東林助教に第31回有機合成化学奨励賞、住友化学研究企画賞

大迫隆男助教に有機合成化学協会 研究企画賞

唯美津木准教授（現名古屋大学教授）に第1回女性化学者奨励賞

2013年3月に開催された日本化学会春季年会において、「固体表面での分子レベル触媒構造の構築とその機能の可視化」の研究で第1回女性化学者奨励賞を頂きました。これまでお世話になった先生方、一緒に研究をしてくれたスタッフ、学生の方々、SPring-8やPFの共同研究者の方々にこの場を借りて深く御礼申し上げます。

金属錯体の固定化や固体表面での固定化金属錯体の構造変換を通じて、様々な金属活性構造を固体表面上に構築する研究に取り組んできました。担体となる酸化物表面の水酸基と金属錯体のアルキル基等と反応し、化学結合を形成するので、特定の金属錯体を固体表面に選択的に固定化することができます。新しい配位構造を作り出すことで、固体表面との化学結合が金属活性サイトの触媒作用にどのように関わるのか、その構造を明らかにしてきました。

また、分子研に移ってから、SPring-8のX線マイクロビームを用いた顕微XAFS分光法やX線ラミノグラフィーXAFS法を触媒材料の構造解析に展開し、固体触媒材料のナノ構造を2次元、3次元的にイメージングすることに取り組みました。2012年には、SPring-8と共同で、世界で初めてX線ラミノグラフィー法とXAFS分光法を合わせたX線ラミノグラフィーXAFSの測定を成功させ、固体高分子形燃料電池膜電極接合体内部の電極触媒の分布や化学状態を3次元的に可視化しました。これらの研究を評価して頂いたことを大変嬉しく思っています。

女性研究者の数はまだ少なく、女性化学者を増やすために様々な活動が行われています。学生の男女比は化学の分野ではだいぶ改善してきましたが、研究者として続けていくには女性固有の様々な問題が存在することも事実で



す。一方で、女性研究者の数が少ないために、研究以外の業務負担が一部の女性研究者に集中しがちなおかしな状況も発生しています。これらのアンバランスが是正され、よりよい環境を作っていくことに少しでも貢献できればと思っております。

（唯 美津木 記）

山根宏之助教に第2回自然科学研究機構若手研究者賞

この度、「シンクロトロン光を用いた有機ナノ集合体の系統的電子状態研究」という題目で、第2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、天皇陛下御即位二十年を祝う奉祝曲「太陽の国」（歌唱：EXILE）の収益の一部について、エイベックス・

エンタテインメント株式会社から自然科学研究機構が寄付を受け、若手研究者支援・奨励のために創設されたものです。

受賞理由となった私の研究内容は、表面科学的アプローチによる有機薄膜・界面の構造制御とシンクロトロン

光（UVSOR施設）の偏向特性・波長可変性を駆使した光電子分光測定により、従来は議論が困難だった有機半導体の薄膜・界面の構造と電子状態の相関を元素・官能基レベルで解明しようとするものです。今回の受賞に際し、佐藤勝彦機構長や各研究所長を前にした本

研究内容のヒアリング、日本科学未来館の科学コミュニケーター松山桃世博士との打ち合わせ、そして高校生や一般の方々を対象とした受賞記念講演など、多くの貴重な経験を積む機会を頂きました。6月16日に日本科学未来館のみらいCANホールで開催された受賞記念講演会では、機構5研究所から選出された各受賞者の出身高校生・先生、東京近郊のスーパーサイエンスハイスクール指定校生徒、一般参加者など多くの方に参加して頂きました。講演の後、ミート・ザ・レクチャーズという一般参加者と受賞者が直接対話できる機会が設けられました。私には、有機・バイオ・グリーンエレクトロニクス、エネルギーバンド理論、UVSORやSPring-8などのシンクロトロン光施

設とCERNなどの大型ハドロン衝突型加速器との違いなど、非常に高度な内容の質問を受けました。近年は理系離れが深刻化しているという話を聞きますが、理系に興味を持っている生徒たちは寧ろ先鋭化しているのではないかという印象を持ちました。また、「分子

研で働きたくなかったのですが、どうすれば良いのですか？」という嬉しい質問も頂きました。初めての経験でしたが、今回の受賞記念講演会のミッションはなんとか達成できたのではないかと考えています。

(山根 宏之 記)



受賞者記念写真（前列の一番右が筆者）

石月秀貴助教にレーザー学会平成25年度第37回業績賞（進歩賞）

このたび、レーザー学会第427回研究会での研究会報告「10mm厚PPMgLNデバイスによる0.5J級光パラメトリック発振」で、平成25年度・第37回業績賞（進歩賞）を受賞することができました。この賞は、過去2年間のレーザー学会関連論文発表および研究会報告などにおける、レーザーに関する研究および製品の開発に関し顕著な成果を示した研究の連名者全員に対して授与されるものです。

今回受賞した研究は、分光や分析、加工や通信など、種々の利用が期待できる中赤外光を非線形光学波長変換により発生するための周期分極反転（PPMgLN）素子を、従来に比べ大口径化することで、高効率かつ高エネルギーの波長変換を実現したものです。この研究は、平等准教授が分子研に着任以来、（当時の）栗村助手、および庄司博士らと共に進めてきたものです。研究開始当時の分極反転素子は、波長

変換効率は高いものの素子開口が小さいため高エネルギーパルスレーザー光の取扱いには不向きであり、ナノ秒パルス動作で数ミリジュール程度の光パラメトリック発振出力が限界でした。これが現在では2桁程度向上し、本研究では0.5ジュールを超える赤外光出力を実現することができました。

このような大口径PPMgLN素子は、単純に波長変換レーザー出力の向上のみならず、取り扱う波長変換パルスのスペクトル帯域拡大にも有効です。現在では国内外の共同研究にこのPPMgLN素子を提供することで、種々のレーザー光発生に利用されるに至っており、今後もさらにこの研究を進めていく予定です。



受賞者記念写真（前列の右から2番目が筆者）

最後に、本研究を進めるにあたり御指導・御支援いただきました、物質・材料研究機構の栗村直博士、東京工業大学の藤井正明教授、中央大学の庄司一郎教授、島津製作所の齊川次郎博士など共同研究者の皆様、分極反転装置の作製に御協力いただいた分子研装置開発室の皆様、および所内および研究室の皆様へ深く感謝します。

(石月 秀貴 記)

東林助教に第31回有機合成化学奨励賞および住友化学研究企画賞

このたび、「おわん型 π 共役分子バツキーボウルの合成」の研究において、有機合成化学協会の第31回有機合成化学奨励賞、研究課題「三次元 π 共役ヘテロ環化合物の開拓」によって、同協会住友化学研究企画賞の表彰を受けました。有機合成化学協会は「有機合成化学と工業の発展」を掲げて1942年に発足して以来71年の歴史を有し、理学、工学、薬学、農学、生化学、医化学の学際を超え、産官学の研究者が集う伝統ある団体です。奨励賞は有機合成化学または関連産業に貢献する研究をなした40歳以下の研究者に送られる若手の賞です。また、研究企画賞は独創的な萌芽的研究に対して賛同企業の寄付によって助成金を贈呈する賞です。奨励賞はフラーレンの部分構造に相当するバツキーボールと呼ばれるお椀型 π 共役炭化水素化合物において、不斉（キラリティ）を持つキラルバツキー

ボウル、窒素原子を含むキラルアザバツキーボウルの合成法を開発、またこれらの性質・物性を明らかとしたことが主な対象となりました。近年、おわん型に限らず、従来の平面型 π 電子系化合物、あるいは非有機合成的な手法で合成されるフラーレンやカーボンナノチューブとは異なり、有機合成的な手法を用いて三次元の非平面型 π 電子系の物質科学を開拓する研究が進展してきています。今回

の受賞は共に今後の研究の発展を奨励するものであり、今回の受賞を励みにさらに精進していきたくと思っています。最後に今回受賞の対象となりました研究は決して私のみの力で成し遂げられたものではなく、このような研究の機会を頂きました櫻井英博准教授を始めとして、共同研究者の方々にこの場を借りて深く感謝致します。

(東林 修平 記)



有機合成化学協会授賞式（後列左）

大迫隆男助教に有機合成化学協会 塩野義製薬研究企画賞

この度、有機合成化学協会 研究企画賞（塩野義製薬 研究企画賞）を頂きました。櫻井グループの東林修平助教も本賞（住友化学 研究企画賞）を受賞されており（奨励賞を合わせ同時受賞!）、今年度、分子研からは、2名の受賞者を輩出いたしました。本研究企画賞は、これまでの成果に対する評価ではなく、所属先や名前など特定できないよう匿名で研究プロポーザルが審査に付され、優れた萌芽的研究企画に対して、各冠企業から賞が与えられるものであり、まさに研究企画力を試すという若手有機合成化学者における登竜門であります。

今回、私は、「高分子担持不斉銅触媒によるフロー系有機分子変換工程の開発」についての研究企画に関して、塩

野義製薬様から本賞を頂きました。カートリッジ化した触媒を予め組み込んだ反応流路に、反応基質溶液を流し込むだけで、反応を完結させるフロー有機分子変換反応システムは、従来のフラスコ反応よりも、簡便かつ高効率に反応を完結させることができる次世代型有機分子変換反応システムとして、最近、注目を集めております。しかしながら、フローシステムに適応できる効率的な担持不斉遷移金属触媒は、未だ数が限られており、その開発が期待されております。そこで、私は、高分子担持不斉銅触媒の創製およびフロー工程への展開に関する研究を展開することで、高効率・高不斉選択的有機分子変換が達成できるフロー反応工程の実



現を目指していきたくと考えております。今回は、『企画』での受賞報告でしたが、次回は、その『成果』での受賞報告となるよう、最善を尽くし、研究に取り組む所存であります。

(大迫 隆男 記)

01 文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム 分子・物質合成プラットフォーム 平成24年度成果報告会

報告：物質分子科学研究領域 教授 横山 利彦

平成25年3月13日（水）、14日（木）の2日間にわたって、文部科学省ナノテクノロジープラットフォームの分子・物質合成プラットフォーム平成24年度成果報告会が岡崎コンファレンスセンターで開催された。ナノテクノロジー

プラットフォームプログラムはナノテクノロジー関係先端設備などの共同利用を促進するための事業で、平成24年度より10年の予定で始まったものであり、分子科学研究所は、3つのプラットフォームのひとつである分子・物質合成プラ

ットフォームの代表機関（参画実施機関数11）と実施機関を担うこととなった。代表機関の運営責任者は横山利彦、運営マネージャーは金子靖が務めており、分子研実施機関の責任者も横山である。24年度は初年度であり、分子研が成果報告会をとり行った。出席者は107名、成果報告34件（口頭13、ポスター21）で大変盛会であった。機関紹介（各実施機関）を行った他、文部科学省からのご挨拶、ナノテクノロジープラットフォームセンター機関から事業全体説明をいただいた。また、招待講演として、名城大学の飯島澄男先生から「ナノカーボン材料の



科学と応用」、東北大学・下村政嗣先生から「ナノテクノロジーが支えるバイオミメティクス」、不二製油(株)中村彰宏先生から「食品のおいしさを支える多糖類の構造と機能」をお話しいただいた。初年度にもかかわらず、多くのハイレベルの成果が報告され、次年度以降のさらなる発展が期待された。

文部科学省 ナノテクノロジープラットフォーム
分子・物質合成プラットフォーム
平成24年度成果報告会

日時：平成25年3月13日(水) 13:00 - 17:30
3月14日(木) 10:00 - 17:30

場所：岡崎コンファレンスセンター (愛知県岡崎市明大寺町字匠馬8-1)
参加費：無料 (意見交換会 500円)

招待講演：

ナノカーボン材料の科学と応用
飯島 澄男 氏
(名城大学 理工学部 教授、産総研ナノチューブ応用研究センター長)

ナノテクノロジーが支えるバイオミメティクス
下村 政嗣 氏
(東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 教授)

食品のおいしさを支える多糖類の構造と機能
中村 彰宏 氏
(不二製油株式会社 研究開発本部 フードサイエンス研究所)

プログラム：

3月13日(水) 13:00 - 17:30	3月14日(木) 10:00 - 17:30
12:30 受付開始	9:30 受付開始
13:00 - 13:05 開会挨拶	10:00 - 10:05 開会挨拶
13:05 - 13:20 文部科学省 挨拶	10:05 - 10:50 機関紹介
13:20 - 13:35 センター機関	10:55 - 11:40 招待講演 飯島 澄男 教授(名城大学)
13:35 - 14:55 機関紹介	11:40 - 13:00 ポスター発表
(休憩 20分)	13:05 - 13:20 センター機関
15:15 - 16:00 機関紹介	13:20 - 14:05 招待講演 下村 政嗣 教授(東北大学)
16:00 - 17:15 成果発表	14:10 - 14:55 招待講演 中村 彰宏 氏(不二製油(株))
17:15 - 17:30 (株)島津製作所による装置紹介-原子間力顕微鏡-	(休憩 15分)
17:30 - 閉会挨拶	15:10 - 17:10 成果発表
17:45 - 19:00 意見交換会 中会議室	17:10 - 17:25 (株)島津製作所の産学連携の取組み
	17:25 - 17:30 閉会挨拶

ポスター展示：(株)島津製作所による分析・評価機器紹介
主催：分子・物質合成プラットフォーム 参画11機関
千歳科学技術大学、東北大学、物質・材料研究機構、京都大学、北陸先端科学技術大学院大学、名古屋大学、名古屋工業大学、自然科学研究機構分子科学研究所、奈良先端科学技術大学院大学、大阪大学、九州大学

02 実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点 Elements Strategy Initiative for Catalysts and Batteries (ESICB)

報告：計算科学研究センター 教授 江原 正博

平成24年より文部科学省国家課題対応型研究開発推進事業における「元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>が開始しました。本プロジェクトは、磁石材料、触媒・電池材料、電子材料、構造材料の4領域から構成されま

す。その一つである触媒・電池の元素戦略プロジェクトは、京都大学に研究拠点を置き、材料創製、解析評価、電子論の各グループを配置し、連携機関として東京大学および分子科学研究所が参画しています。分子研では電子論グループを構成し、触媒・電池の界面現象を解析するための方法論の開発を行い、最適材料の理論予測を行います。

現在、エネルギー問題・資源問題は社会的に解決しなくてはならない喫緊の課題としてその重要性が高まりつつ

あります。本プロジェクトのミッションは明確であり、希少元素フリーの高性能な触媒と二次電池を開発することにあります。触媒・電池の分野は近年大きく進展しましたが、貴金属や希少元素を使用することによって高性能化してきた歴史があります。例えば、自動車排ガス浄化触媒では白金、ロジウム、パラジウムが使用され、二次電池

では、量産化や大型化によりコバルトやリチウム原料の枯渇の可能性が急激に高まっています。地球上の限られた資源を有効に利用し、持続的社會を実現するためには、汎用元素の利用による触媒や電池の高性能化、触媒・電池の元素戦略研究の進展が今まさに求められています。このような社会的な要請に対して、本プロジェクトでは、触媒の開発では自動車排ガス浄化触媒および化成品合成触媒に焦点を絞り、二次電池の開発ではナトリウム電池に焦点を絞った研究開発を推進します。

本プロジェクトの特徴は、触媒・電池という明確な材料開発の目標が設定

されており、実験と理論・計算化学のインタープレイによって新規材料を開発することにあります。そこでは複雑な複合材料である触媒および電池の微視的過程を解明し、複雑・複合系の化学を深化させ、新しい基礎概念や法則性を提案することも重要な課題となっています。この研究開発を通じて、理論化学に新たな課題が提供され、基礎科学としての深化も期待されています。電子論グループには分子科学と物性科学の研究者が参加し、各分野の最先端の理論によって複雑・複合系の科学に挑戦しています。独自の理論によって理論先導の材料開発を行うことが求め

られています。そして、この研究開発を通じて、優秀な若手人材を育成し次世代につないでゆくことも重要な課題です。

昨年7月に発足して以降、これまでに2回の公開シンポジウム、次世代ESICBセミナーなどを開催しました。また、数回の触媒検討会・電池検討会を実施し、実験と理論の交流を行いつつ、研究開発を推進しています。今後、3つのグループがより緊密な交流を行い、触媒・電池の革新的な材料開発が実現することを期待しています。

03 最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム(文部科学省)

報告：光分子科学研究領域 教授 大森 賢治

文部科学省は、平成20年度より新たな拠点形成事業として、「最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム」(以下、光拠点事業)を開始した。本事業は「ナノテクノロジー・材料、ライフサイエンス等の重点科学技術分野を先導し、イノベーション創出に不可欠なキーテクノロジーである光科学技術の中で、特に、今後求められる新たな発想による最先端の光源や計測手法等の研究開発を進めると同時に、このような最先端の研究開発の実施やその利用を行い得る若手人材等の育成を図ることを目的として(文科省ホームページより抜粋：http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/20/07/08072808.htm)」実施される。具体的には、光科学や光技術開発を推進する複数の研究機関が相補的に連結されたネットワーク研究拠点を構築し、この拠点を中心にして(1)光源・計測法の開発；(2)若手人材育

成；(3)ユーザー研究者の開拓・養成を3本柱とする事業を展開する。

この光拠点事業の公募に対して、分子科学研究所は、大阪大学、京都大学、日本原子力研究開発機構とともに、「融合光新創生ネットワーク」と題したネットワーク拠点を申請し、採択された(http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/20/07/08072808/003.htm)。本年度で5年目を迎えるが、これまでにこの拠点を舞台に、世界の光科学を牽引する多くの素晴らしい研究成果や人材が生み出されてきた。なお、この他にもう1件、東京大学、理化学研究所、電気通信大学、慶応義塾大学、東京工業大学によって構成される「先端光量子アライアンス」と題されたネットワーク拠点が採択されており、これら二つの異なる拠点間の交流による新たな展開も進みつつある。

平成24年度の分子科学研究所における活動内容を以下にまとめる。

(A) 光源要素技術の開発

マイクロドメイン制御に基づく超小型高輝度高品位レーザーの開発において、世界最大OPO出力540mJの10mm厚PPMgLNの作製に成功他、原研とQUADRAに用いる次世代レーザーモジュールの共同開発を推進した。

深紫外や中赤外領域における新しい超短光パルス発生技術の開発において、QUADRA-IR開発のための要素技術として、赤外コヒーレント光源を改良し、新しい評価方法を開発した。全帯域でほぼ位相が揃っている、パルス幅6.9fsのパルス発生と、電場の直接測定に成功した。

超高精度量子制御技術のうち、コヒーレント制御技術を分子集合体や凝縮相に適用するための研究開発では、CREST研究として進めている超高速量子シミュレーターの開発に必要な光格子ポテンシャルの作成、およびさきかけ研究として進めている固体バラ水素結晶中での時

空間コヒーレント制御において、京都大学の野田進教授のフォトニック結晶レーザーが有効であることが期待される。今年度も昨年度に引き続き、野田グループとの研究交流を通じて、フォトニック結晶レーザーの将来的な導入に向けた準備を進めた。また、極低温リユードベリ原子を用いた超高速量子シミュレーターの開発において、極低温リユードベリ原子研究のパイオニアであるHeidelberg大学物理研究所長のMatthias Weidemueller教授との研究交流を進めた。また、コヒーレント制御技術を孤立分子や分子クラスターに適用するための研究開発では、10 mJクラスの出力を有し、周波数チャープを能動的に制御可能な、新規コヒーレントナノ秒

パルス光源の開発に成功した。この光源は、今後、孤立分子や分子クラスターのポピュレーション移動を制御する上で重要な基盤装置となることが期待される。

時空間分解顕微分光技術の開発では、超高速近接場光学測定系の更なる最適化を進め、より装置の安定性、特性、柔軟性を向上させた。特に、分散補償光学系の調整と可変形鏡の最適化により、15fsのパルス幅を近接場プローブ先端で実現した。これを用いて、金ナノロッドの位相緩和を時間領域で直接観測し、その空間分解計測を行ったところ、ナノロッド上の位置によって位相緩和速度に差があることが観察された。

(B) 人材育成・施設共用

人材育成では、上述の光源要素技術

の開発業務への参加を通じて、他機関の若手研究者や学生の教育を行った他、大森教授が名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻および独フライブルグ大学物理学科で講義を行った。

施設共用では、ナノ秒コヒーレント光源、超高精度光干渉計、走査型近接場光学顕微鏡を拠点内の先端的な共同研究の資源として提供するための準備を進めた。

さらに、本ネットワークにおける供用研究の推進への寄与を目的として、最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラムワークショップ「ジャイアントマイクロフォトリクスを目指して」を開催した。

04 光・量子科学研究拠点形成に向けた基盤技術開発「量子ビーム基盤技術開発プログラム」(文部科学省)「リング型光源とレーザーを用いた光発生とその応用」

報告：極端紫外光研究施設 教授 加藤 政博

量子ビーム技術は、ビーム発生・制御技術の高度化に伴って近年大きく発展してきており、基礎から応用に至るまでの幅広い分野で活用されてきている。量子ビームの研究開発を戦略的・積極的に推進するとともに、次世代の量子ビーム技術を担う若手研究者の育成を図ることを目的として、2008年度より「量子ビーム基盤技術開発プログラム」が開始された。本事業では、基盤技術としての量子ビーム技術の発展と普及に資するべく、汎用性・革新性と応用性が広い研究テーマについて、ネットワーク研究体制を構築しながら研究開発を行うことを目的としている。

本研究所からは、極端紫外光研究施設(UVSOR)を利用した「リング型光源とレーザーを用いた光発生とその応用」という課題名で提案を行い、採択された。本研究所を中核とし、名古屋

大学、京都大学の参画を得て、5年計画で実施してきた。UVSOR-II電子蓄積リングの改造、ビームラインの建設などを含む計画であり、レーザーを用いることで特色あるシンクロトロン光を作り出し、その利用法の開拓を行おうとするものであった。具体的には、コヒーレントシンクロトロン放射と呼ばれる機構を利用した大強度テラヘルツパルス光の発生、コヒーレント高調波発生と呼ばれる機構を利用した大強度極紫外線パルス光の発生、また、これらの実用化及び利用法の開拓である。

本研究開発の基礎となる電子ビームとレーザーを組み合わせた光発生技術は、UVSORにおいて世界に先駆けて開発された独自のものであり、これを実用的な段階へ引き上げることが本研究開発の主題であった。2013年3月の研究期間終了までに、コヒーレント放射

光の発生とその利用のための装置群の構築と立上調整を完了した(図1)。蓄積リングの一部を改造し、専用のスペースを新たに創出し、そこに、レーザー装置、アンジュレータ装置、専用ビームラインを建設した。こうすることで、既存放射光利用装置はそのまま活かしながら、コヒーレント光発生・利用という新しい機能をUVSORに付加することができた。これら新たに開発した装置群の試験運転を行うとともに、試験的な利用実験を実施した。UVSORの独自技術を基礎にしたこれら装置群は、今後さらに実用へ向けて調整を進め、共同利用への展開を目指す。

なお、本研究開発プログラムには合計5名の博士研究員と総研大や参画機関である名古屋大学の大学院生・学部学生6名が参加した。特に博士課程の大学院生2名は関連研究テーマで学位

を取得するとともに、量子ビーム関連研究機関で研究活動を継続しており、本研究の目的の一つである、当該分野の若手研究者の育成、ということにも十分貢献できたと考えている。

本研究は加速器技術とレーザー技術の融合という側面を有しており、本研究の遂行には、分子制御レーザー開発研究センターの協力が不可欠であった。今後も、放射光技術とレーザー技術の融合に積極的に取り組み、特徴ある光発生技術、利用技術の開発を推進していきたいと考えている。

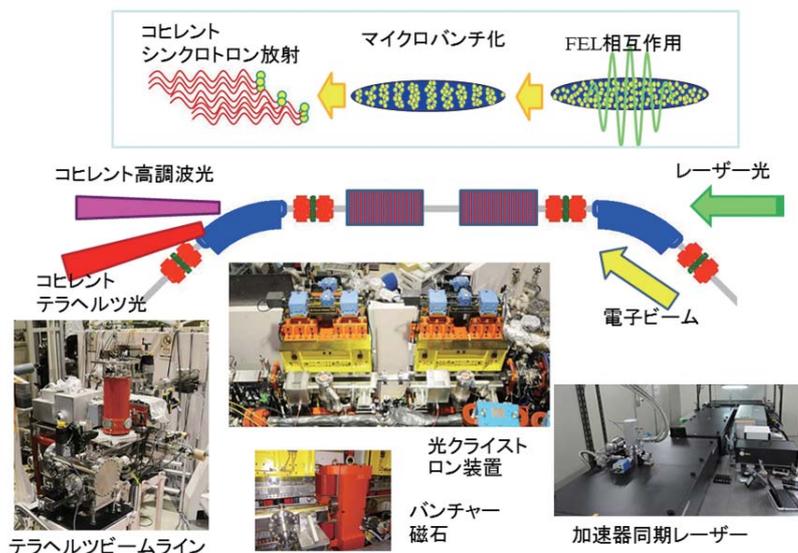


図1 完成したコヒーレント放射光発生装置

国際研究協力事業報告

IMS アジアコア冬の学校

報告：生命・錯体分子科学研究部門 教授 魚住 泰広

本年度のアジアコア Winter Schoolは韓国・釜山にて日本、韓国、中国、台湾から約70名（内、日本から20名）の大学院生を中心とした参加を得て上記日程の通り開催された。18件のレクチャーに加え、学生からの発表を中心とした49件のポスター、さらには幾人かのグループでのディスカッション、情報交換も盛んであった。

懇親の場も設けられ、日本、韓国、中国、台湾の参加者が相互に親交を深めた。世話人会議では来年の台湾での

開催が確認された。

講演は理論、光、マテリアル、触媒、合成、生化学など多岐にわたる領域を横断する内容であり、とくに既存の1分野にとどまらない学際的なアプローチも多く大変レベルの高いものであった。これらは一見には教育的な「school」には不向きな高度先端的な内容に見えるものの、講演自体は決して専門の「蛸壺」的なものではなく、学際領域研究への挑戦を通じて、幅広い学問領域での基礎的な学力、周辺領域を見渡す広

い視野、などなどが先端の研究推進に必須であることを強く感じさせるものであり大学院生を中心とする若手参加者へのメッセージが込められたものが多かった。東アジア地区での連携・親交がより深まった。また、世話人会議では各コア研究所を中心として他大学の学生や講演者を積極的に参加させる可能性、香港など近隣の地区からの参加可能性についても前向きな意見交換がなされた。



2013 Asian Core Winter School Program

1 st Day: Jan 27 (Mon)	
Arrival and Check-in	
18:10	Korean participants: meeting at the lobby and moving to the reception place
18:30	ICCAS's participants: meeting at the lobby and moving to the reception place
18:50	IMS's participants: meeting at the lobby and moving to the reception place
19:00-21:00	Welcome Dinner (Ocean de Lamer)
2 nd Day: Jan 28 (Mon)	
09:00-09:25	Registration
09:25-09:40	Opening Remarks
Session 1	Chairman: Satoshi Muratsugu (IMS)
09:40-10:20	Taek Dong Chung (SNU, CMD) Dynamic Electrochemistry in Electrified Nanopores
10:20-10:40	Coffee Break
Session 2	Chairman: Takumi Yamaguchi (IMS)
10:40-11:20	Yutaka Shikano (IMS) Introduction to quantum optics: From single photon to coherent laser
11:20-12:00	Hiroshi Iwayama (IMS) Molecules Irradiated by Soft X-rays and Clusters Irradiated by Intense EUV-FEL Pulses
12:00-13:00	Lunch
13:00-15:00	Poster session
Session 3	Chairman: Haeshin Lee (KAIST)
15:10-15:50	Zhibo Li (ICCAS) Thermal responsive Polypeptide materials
15:50-16:30	Takumi Yamaguchi (IMS) NMR approaches to the molecular basis of oligosaccharide functions
16:30-16:50	Coffee Break
Session 4	Chairman: Kuei-Hsien Chen (IAMS)
16:50-17:30	Zhaohui Wang (ICCAS) High-performance n-Type Organic Semiconductor Based on Rylene Array
17:30-18:10	Weiguo Song (ICCAS) One-Dimensional Organic Nanocrystals: Controlled Synthesis and Applications in integrated nanophotonics
18:10-18:30	Woo Youn Kim (KAIST) Molecular simulation on quantum transport
18:30-20:00	Dinner

3 rd Day: Jan 29 (Tue)	
Session 1	Chairman: Lain-Jong Li (IAMS)
09:00-09:40	Dong Wang (ICCAS) Surface chirality: origin, propagation, and amplification
09:40-10:20	Joon Kyung Jang (PNU) Nanometer-wide Self-Assembled Monolayer of Alkanethiol
10:20-10:30	Coffee Break
Session 2	Chairman: Sang Woo Han (KAIST)
10:30-11:10	In Su Lee (POSTECH) Fabrication of Hollow Nanoparticles with Functionalized Interior Surface for the Nanoreactor Application
11:10-11:50	Yong Sheng Zhao (ICCAS) Diffusion control of the catalytic reactions using nanostructured mesoporous catalysts
Lunch	
11:50-13:20	Representative meeting for the next winter school (Sang Kyu Kim, Insung S. Choi, Sang Woo Han, Woo Youn Kim, Kuei-Hsien Chen, Lain-Jong Li, Yasuhiro Uozumi, Yong Sheng Zhao)
Session 3	Chairman: Dong Wang (ICCAS)
13:20-14:00	Kuei-Hsien Chen (IAMS) CVD Growth of CNTs and Graphenes and their Energy Applications
14:00-14:40	Lain-Jong Li (IAMS) Synthesis and applications of two-dimensional MoS ₂ layers
14:40-15:00	Coffee Break
Session 4	Chairman: Yong Sheng Zhao (ICCAS)
15:00-15:40	Satoshi Muratsugu (IMS) Design and Heterogeneous Catalytic Performances of Oxide-Supported Transition Metal Complex Catalysts
15:40-16:20	Yasuhiro Uozumi (IMS) Molecular Architecture-Based Administration of Catalysis in Water via Self-Assembly of Amphiphilic Pincer Complexes
16:20-16:40	Coffee Break
Session 5	Chairman: Insung S. Choi (KAIST)
16:40-17:20	Haeshin Lee (KAIST, MIRC) Bio-inspired Adhesives for Energy Storage and Nanobio Technologies
17:20-18:00	Myung-Han Yoon (GIST) Vertically-Aligned Silicon Nanowire Arrays for Cellular Interfaces
18:15-18:40	Meeting at the Lobby and moving to the dining place by walk
19:00-21:00	Banquet (on a ship)
4 th Day: Jan 30 (Wed)	
08:50	Meeting at the Lobby
09:00	Departure for Gyeongju
10:40-18:00	Tour
18:00-19:30	Dinner
~21:00	Arrival at Hotel
5 th Day: Jan 31 (Thu)	
09:00-	Check-out and Departure

国際研究協力事業

『IMS アジアコア冬の学校』印象記

もはや恒例の「IMS アジアコア冬の学校」。今年はKAISTがホストとなり釜山での開催となった。

開催初日1月27日には、筆者は共同研究で訪れていたソウルから、またあるものは浦項から、そして多くのものは岡崎から着々と釜山へと移動した。ああ、♪とらわよ～ぶさんはんへ～♪ そんなメロディーが頭の中に響き渡る。♪逢いたいあ～な～た～♪ そう、今回逢いたいのは、まずはメインホストで日本語もペラペラの崔教授、そして実行部隊金教授、大御所金教授。あ、やっぱり「金」ばかりだから苗字表記には限界あるなあ。

ま、そんなわけで（どんなわけだ？）東アジアの分子科学研究教育拠点に繋がるアジアコアプログラム。JSPSアジアコアの終了後はIMSアジアコアとして日本、中国、韓国、台湾の学術交流を継続している。その中心的なアクティビティである「アジア冬の学校」が本年1月27-31日、KAISTのお世話で釜山にて開催されたのである。

硬めの報告はどこかの報告書を探してください。ここはあくまでレターズ記事。とはいっても概要を示しますと、日本、韓国、中国、台湾から約70名（内、日本から20名）の大学院生を中心とした参加。18件のレクチャーに加え、学生からの発表を中心とした49件のポスター、さらには幾人かのグループでのディスカッション、情報交換も盛んであった、となります。

さてさて学術交流の硬い部分は別掲されてるプログラムを見ていただくとして、やはり重要な文化交流は非公式外交ですね。分子研から参加の院生、PDも数年前火災事故で一躍有名になった釜山の実弾射撃に挑戦したり、はたまた筆者はこっそりとSang Kyu Kim教授にコブチャン（日本で言えばいわゆるホルモンですが、質が全く違う。韓国では精肉よりも高価なんじゃないかと思うくらいの贅沢食材）をオネダリしたり、はたまた先年の本プログラムで北京の裏路地で一緒に「立ち○○○」して深い深い親交を温めた崔（Choi）教授と深夜2時からゴンタンを食べに行ったり、いやあ楽しくも真面目に過ごしました。

なかでも公式の夕食会は船に乗ってのクルーズディナー！ いやあ、美しかったです、夜景。そして船内では今や韓国の枠を越え、アジアが誇る世界的大ヒット「江南スタイル」にあわせてPsyの「乗馬ダンス」で大騒ぎ！（まあ大騒ぎしたのは筆者と「裸の大将」鹿野氏。巻き込まれた山口氏もワケがわからぬまま踊りまくってたけど）。

どうです、前回参加しなかった人も、次回こそこの有意義なセミナーに出たくなつたでしょ？ 次回は大森先生が大好きな台湾がホストで～す。



分子研がもたらしたもの

井上 克也

(広島大学 大学院理学研究科 化学専攻 教授)

いのうえ・かつや / 1993年東京大学理学系研究科博士課程修了。博士(理学)。
日本学術振興会特別研究員(1993-1994)、北里大学理学部専任講師(1994-1995)、
分子研相關領域研究系助教(1996-2004)、その後現職。

2004年に出所してから9年が経ちました。緊張の課題をかかえて出張中に、分子研時代から苦手な先生から、分子研出身者の今という記事を書けとのメールをいただき、いつもならなんとかして先延ばしするところが、緊張と苦手でもって、書きますと折り返しメールをしてしまった。メールで返事をしたもののすっかり忘れてしまって、最終期限過ぎて、催促のメールをもらってはじめて思い出した。こういう時はだいたいこんなもので、この催促メールと同時に他に2つ、もっと重い(失礼!)催促メールが5分も違わず届いた。分子研で学んだことの第一は、安請け合いするな、ということだったのに、反省!したがって制限時間3時間で書く羽目になってしまった。

分子研時代を思い起こしてみると、天国だった、というのが第一印象で、なぜかと考えてみると、研究費もあり自由に研究できた、周りに分野の違う研究者の方々が大勢いた、などが思いつく。雑用も多かったような気がするけれども、分子研での雑用は研究に絡んだものが多いのに対して、今の雑用は質的に違って、研究に何の関係もない雑用が多い。数字合わせの学科予算・決算書の作成とか、日常ですら必要がないほどの特殊で完璧な日本語の勉強とか、挙げるだけでもいろいろするようなものが多い。周りに分野の違う研究者の方々が大勢いるところは今も分子研も同じだけれど、いらだっ

た研究者がいるのと暇そうな研究者がいるのでは、まるで違う。

分子研を出る1年ほど前(2003年)のある深夜に、東岡崎の安居酒屋で長年の飲み友達であった岸根順一郎氏(当時理論部門助手、2003-2011九工大、現在放送大学教授)と、はじめて研究に関して語り合った。明け方まで飲んだと記憶しているが、分子研に戻って数時間後、さっきのキラル磁性の研究の話詳しく聞かせると、再び岸根氏が血相を変えてやってきて、議論をして共同研究が始まった。皮肉なもので、分子研を去る直前になって始まったので、遠距離恋愛的共同研究になってしまった。最初は二人でのた打ち回ったけれど、ここ10年で少しずつではあるが謎が解けてきて、着実に進展してきている。今では、10人を超える複数大学にまたがるグループでの共同研究と



して進めている。このキラル磁性研究グループの中で分子研出身者は、岸根と井上の2名であるが、明らかに分子研的雰囲気を引きずって、キラル哲学を真面目な顔で議論するなど、楽しく研究を進めている。

さて広島大学では、無機化学の担当(!)で、現在の研究室メンバーはスタッフ3人(本人と准教授1、ロシア人女性助教1)と博士後期課程学生3、前期課程(修士)学生7、学部4年生6研究生1の総勢20人である。キラル磁性体の合成、物性、分子磁性、スピラダー化合物、強誘電体の研究を進めている。マテリアル作成では有機合成から金属間化合物(合金!)作製まで、手法では装置製作まで、手広くやっている。研究室の雰囲気は、女性の比率が高いせいか、明るくて和気藹々とした雰囲気ながら、深夜まで誰か実験をしてい



ることが多く、意欲的に研究を進めている。

分子研を出所して数年経つと、分子研出身者は皆さん分子研の雰囲気にもう一度浸りたいと思うらしく、無計画・場当たりの“分子研出身者の会”みたいなのが散発的にあちこちで開かれ

ていて、皆さん分子研時代そのままに楽しんでいるようで、ある種の夢を見ているような状況になっている。分子研の雰囲気というものの、なにか偉大な特殊性があるんだろうなあ、と感じる。ある出身者なんかは、分子研OBで“新分子科学研究会”を作ろうと画策

しているようで、何をたわけたことを、と思うけれども、本人はいたって真面目のようなので……。なんかとりとめない話になってしまいましたが、分子研の雰囲気、バンザイということで。

分子研出身者の今 ■ 受賞報告



永瀬茂名誉教授に第65回日本化学会賞

このたび、「高周期元素とナノ構造の特性を利用した分子構築の理論と計算」という研究題目で、第65回日本化学会賞を受賞しました。このような賞を頂けたことは、素晴らしい先生、先輩、友人に囲まれたこと、研究を強力に進めてくれたスタッフ、博士研究員、学生が研究室にいたこと、国内外の素晴らしい理論・計算グループと巡り会えたこと、数多くの実験グループと強力な共同研究ができたことで、非常に有り難く思っています。

これまで、(1) 高周期元素を骨格にもつ新規分子の設計、(2) 機能性ナノ分子の開拓、(3) 量子化学計算の高速化と高精度化を大きな3本の柱にして研究を行ってきました。(1) では、理論計算した多環状分子、多面体分子、多重結合分子、芳香族分子等の数多くが興味ある実験標的となり見事に合成・単離されたことや予測した特性が実験で実証されたことをいまでは懐かしく思い出します。(2) では、たとえば金属内包フラーレンの電子状態と構造の解明は当時の重要課題でしたが、実験との長期間の執念のインタープレイによってこれらを解明したことを鮮明に

回顧します。理論・計算と実験とのインタープレイによる研究推進はいまでは当たり前ですが、この先駆的な役割を元素化学とナノカーボン化学の黎明期から果たしたと自負しています。

昨年の3月に分子研を退職する前は、研究から離れることも考えていましたが、京都大学福井謙一記念研究センターでシニアリサーチフェローとして研究を行える機会を得ました。この機会の話があった頃に、アジア太平洋理論・計算化学者学会 (APATCC) から福井メダル受賞の知らせがありました。この受賞と福井センターへの移動とはなにも関係しませんが、なにか大きな因縁のようなものを感じました。福井センターでは、大御所の諸熊先生および同世代の親友の榊さんと山辺さんらが相変わらず活発に研究に没頭されています。このことに大きな刺激を受けて、博士研究員と分子研時代の研究を継続すると同時に新しい研究を模索する毎日を楽しんでいます。最後に、分子研でお世話になった皆様に感謝すると同時に分子研のますますの発展を心より願っています。



永瀬 茂 (ながせ・しげる)

1975年大阪大学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年京都大学福井謙一記念研究センターシニアリサーチフェロー。



鈴木俊法教授に第30回日本化学会学術賞

このたび「気相・液相分子の超高速光電子分光の開拓」という題で、日本化学会から第30回学術賞を受賞致しました。私は1988年に学位を取得後直ちに、分子研分子構造研究系の廣田榮治教授（当時）の技官に採用され89年に助手に昇任しました。廣田先生が総研大の副学長に転出されたのを機会に、90年に分子研を辞し米国に転出しましたが、その後92年に再び電子構造研究系に助教として採用され、2001年に理化学研究所に転出するまで、合計10年以上岡崎で育てて頂きました。ですから、今回の受賞を御報告することは心からの喜びです。

助手時代、私は高分解能赤外分光を化学反応の研究に応用すべく、メタンとオゾンの混合気体に紫外光を照射して、酸素の準安定状態 $O(^1D)$ とメタンの反応で生成する CH_3 ラジカルの振動回転分布を測定しました。しかし、私は反応機構を解明するためには、 CH_3 ラジカルの量子状態毎にその散乱分布を測定する必要があると確信し、米国コーネル大学とカリフォルニア大学バークレー校で交差分子線法や画像観測法の研究を行いました。92年に再び分子研に採用される幸運に恵まれ、（資金集めも含めて）装置開発に取り組みましたが、本当に $O(^1D)$ とメタンの反応について思い描いた実験が実現されたのは、実に2008年頃、理化学研究所に転出してからです。未だ交差分子線装置の建設に努力している1990年代半ばに、私は画像観測法をフェムト秒レーザーを用いたpump-probe法と組み合わせれば、光電子の速度・角度分布をフェムト秒の時間分解能で可視化でき、きっと面白いだろうと考えました。しかし、

分子研に提案した交差分子線装置の建設すら終わっていない私が、あれもこれも研究に手を出すのは無責任かと逡巡しました。その時、廣田先生が用事で分子研を訪ねられ、私の打ち明け話を聞かれると、「鈴木君は、組織や分野のことに気を遣わず、面白いと思うことだけを遠慮せずにやれば良い。それが本当に面白い仕事なら皆ついてくるよ。」と言われました。1998年の春に英国王立化学会のFaraday会議から招待状が届いたため、この機会に是非とも超高速光電子イメージングを実現してFaraday会議に示したいと思い、休みなく実験に取り組み、何とか成功にこぎ着けました。しかし、同時に私は、超高速光電子分光こそ静電的相互作用の大きな水溶液中の化学反応の研究に適用されなければならないと新しい目標を決めていました。

この新しい目標で、1999年にJSTのさきがけ研究に採択されましたが、実際に成功したのは2010年です。さきがけ研究が3年で終了した時に、総括の国府田隆夫先生が「鈴木さんは3年ではできそうもない目標を掲げていたから、もう少し頑張りなさい」と期間延長をしてくださったのですが、その間にも目標には到達しませんでした。何とか突破口が開けたのは、もういい加減やめないと駄目かなと思った頃でした。

私は、私のような歩みの鈍い研究者をも大事に育成している分子科学研究所への愛着と、分子研の若手研究者の挑戦に対する期待を岡崎に向けております。最後に、私と同じ夢を見て努力した共同研究者や学生の方々、応援して頂いた方々に心から感謝します。



鈴木 俊法（すずき・としのり）

1988年 東北大学大学院博士課程修了。
分子研技官、助手。コーネル大学、UC Berkeley
博士研究員。分子研助教、理化学研究所主任
研究員を経て、京都大学大学院教授。



水谷泰久教授に第30回日本化学会学術賞

このたび、「時間分解共鳴ラマン分光法によるタンパク質ダイナミクスに関する研究」の成果に対して、日本化学会第30回学術賞をいただきました。これは研究室のスタッフ、学生、多くの共同研究者に恵まれた結果であり、お世話になりましたみなさんに深く感謝いたします。今回評価していただいた研究成果は、分子研での研究が種になってはいるものの、主要な部分は分子研を出てから前任地の神戸大学、現任地の大阪大学で得られたものです。それゆえ今回の受賞は、分子研を出てからの約10年を振り返る大変良い機会になり、その意味でも私にとって大変ありがたいことでした。

オリバー・ストーン作品に「Any Given Sunday」という、アメリカンフットボールのプロチームを舞台にした映画があります。この中で、アル・パチーノ演じるヘッドコーチが、「昔を振り返り思い出すことは、トロフィーでも栄光でもなく、試合中ハドルを組んだときに見た仲間の顔だ」という友人の言葉を紹介するシーンがあります。賞をいただいて少し時間がたった今はまさにそんな気持ちです。

この受賞はもちろんうれしいことでしたが、横軸に時間を、縦軸に喜び値をプロットすると、受賞そのものの喜びはデルタ関数のようなものです。ピー

クの値は大きいのですが、時間幅はそれほど広くはありません。それに比べて、日々の研究と教育の喜びは、値そのものは受賞の知らせほど大きくないものの、毎日のように新たなものが生まれずっと継続しています。カーブを積分した面積で幸せを評価すると、その値は後者の方がはるかに大きいことをわかっていただけるでしょう。研究のアイデアを考え、うまくいかない実験に学生とともに試行錯誤し、その結果に一喜一憂する、またおもしろい実験データをもってきた学生を頼もしく（そして少し羨ましく）感じる、そんな日々が送れることは大学教員としてとても幸せなことです。

それから今回の受賞は、小江誠司さん（九大）、鈴木俊法さん（京大）と一緒にでした。同じ時期に分子研で一緒でしたおふたりと受賞できたこともとてもうれしいことでした。思えば30代前半を分子研で過ごすことができたことは幸せだったと思います。昨年度から分子研の運営会議委員を務めておりますが、外部の視点から分子研の発展に少しでも貢献し、微力ながらご恩返しをしたいと思っています。

美術館を出るとき、ライブ会場を後にするとき、「ああ、僕もいい研究をしたい！」と心の底から思い、そしてサイエンスは芸術なのだと思ふに実



水谷 泰久（みずたに・やすひさ）

1987年京都大学工学部工業化学科卒業、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）。日本学術振興会特別研究員、分子科学研究所助手、神戸大学分子フォトサイエンス研究センター助教授を経て、2006年4月より大阪大学大学院理学研究科教授。

感します。分子のもつ面白さを表現できる研究成果を、少しでも多くあげられるよう、これからも研究と教育にがんばろうと思います。今後ともどうぞよろしくお願いいたします。

分子研出身者の受賞（広報室で把握しているもの）

藤田 誠教授（東大）（元分子研 助教授）に第65回日本化学会賞

細野秀雄教授（東工大）（元分子研 助教授）に第65回日本化学会賞

小江誠司教授（九大）（元分子研 助手）に第30回日本化学会学術賞および

平成25年度科学技術分野の文部科学大臣表彰受賞



分子研を去るにあたり



桑島 邦博 総合研究大学院大学 学融合推進センター 特任教授
(前 岡崎統合バイオサイエンスセンター 教授)

分子研を去るにあたり

くわじま・くにひろ / 1971年北海道大学理学部卒業、1975年5月同大学院博士課程中退、1975年6月北海道大学理学部教務職員、1979年3月北海道大学・理学博士、米国NIH奨励研究員（スタンフォード大学生化学科、Robert L. Baldwin教授）、北海道大学理学部助手を経て、1992年東京大学理学部（1993年より同大学院理学系研究科）助教授、1999年同教授、2007年自然科学研究機構・岡崎統合バイオサイエンスセンター教授（分子科学研究所兼務）、2013年より現職。

分子研には、2007年1月の赴任以来6年3ヶ月の間お世話になりました。赴任してまもなく、当時の中村宏樹所長から総合研究大学院大学（総研大）・物理科学研究科の副研究科長を依頼され、その2年後には研究科長をしなければならいのだろうと思っていました。しかし、全く予期しなかったことに、1年も経たないうちに、物理科学研究科の研究科長代理を務めることとなり、その年4月から2年間研究科長を拝命することとなりました。丁度、中期目標期間に係る2007年度まで4年間の業務実績評価に向けて、現況調査表の取りまとめの最中で、全く準備も経験もないため、いろいろ皆様にご迷惑をおかけしたと思います。2年間の間に、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」を実現できたことは、多少とも研究科のお役に立てたかと思えます。また、2011年度からは特別経費の支援により「統合生命科学教育プログラム」を、総研大の他の研究科や専攻と一緒に、実現できたことも大変印象に残っています。これらのプログラムが途切れることなく継続することを切に願っています。

研究面では、分子研に来て大変良かったことを、一点だけ紹介させていただきます。それは、920 MHz超高磁場NMR装置を使用する機会を十分に得たため、それまでは想像も出来なかった、新しい研究の展開を実現することが出来たことです。阪大蛋白研・後藤祐児教授との共同研究により、透析アミロイド症に関わる β_2 ミクログロブリンの、アミロイド形成に関与する微量成分を検出し、その存在を初めて明確に示すことが出来ました（*J. Mol. Biol.* **425**, 257-272 (2013)）。癌細胞を選択的に細胞死に導き乳児癌の進行を抑制することで知られる、 α ラクトアルブミン-オレイン酸複合体の構造解析を行い、オレイン酸結合部位を初めて同定することが出来ました（*J. Biol. Chem.* **288**, 14408-14416 (2013)）。また、加藤晃一教授グループとの共同で、大腸菌の分子シャペロンの一つ、シャペロニンGroES複合体の構造揺らぎを水素重水素交換法で特徴付け、その機能との関係を明らかにすることもできました（*J. Mol. Biol.* **425**, 2541-2560 (2013)）。

現在は、総研大・学融合推進センター・特任教授として週三日勤務し、

総合教育プログラムに関わる業務に従事しています。総研大の大学院教育に関しては、今後とも分子研の皆さんにお世話になりますので、宜しくお願い致します。7月末から2ヶ月間は、韓国のKorea Institute for Advanced Study (KIAS)にKIAS Scholarとして滞在し、蛋白質のフォールディング速度の統計解析に関する研究に従事する予定です。関連したテーマで、本年度より科研費の支援も頂いており、研究も引き続き進めてゆく予定です。

それでは、在職中は大変お世話になり、どうも有り難うございました。皆様の研究のご発展お祈り致します。



見附 孝一郎 城西大学 理学部 化学科 教授
(前 光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門 准教授)

分子研から城西大に移って

みつげ・こういちろう／東京大学大学院 理学系研究科 博士課程修了。
東京大学 教養学部 自然科学科 助手、分子科学研究所 光分子科学研究領域 准教授を経て平成24年から現職。
専門は物理化学。

此の頃よく聞かれるのが、「国の研究所から私立大学に移って大きく環境が変わったと思いますがこの1年間どうでしたか？」という質問です。私は「はい。長かったけれどとても濃い日々でした！」と答えることに決めています。少し安易に表現すれば、研究者の都合で組織が回っている分子研に対し、私立大学ではあらゆることが学生を中心に動いていると言ってよいでしょう。城西大学の化学科の学生数は1学年90人程度ですから、4年生まで合わせて約360人が在籍しています。毎年90以上という入学者数を確保し、在学生に化学の知識や勉強方法をしっかりマスターさせ、その稔りとしての卒業生を毎年90人近く社会に送り出していく、以上3つが化学科教員の第一義的な職務となります。

私が分子研にいたときは、教育と言えば大学院学生への研究指導と、1クラス10人弱の大学院学生に向けた講義だけでした。彼らは分子研に来る前に日本または海外の大学で既に4年間勉強してきているので、基礎知識や実験技術は身に付いていました。つまり彼らは勉強方法をすでに修得したうえで、学問を続けたいという強い意欲を持って分子研にやって来ていた訳です。それに対して、城西大化学科に入学したと言っても、大学で培う化学の実力を生かして、将来、企業の開発部門や研

究所で働きたいと志している人は一握りです。対照的に中学校・高等学校の理科教諭や化学系企業の営業担当を指している学生は相当数いて、その中には学習意欲が高く勤勉で成績がよい人が随分含まれます。その反面、どんな企業にでもいいから就職したいと考えているだけの人達も少なくありません。悩ましいのは、他人と競争したり会社組織に組み込まれることに気が進まずに、気楽な今のパートのアルバイトを続けて行ければ十分だと変に達観してしまっている者もいるという実情です。

各学生に対してきちんと教育を施すことが教員に期待される当然の役割とはいえ、個々の意識とスタンスがこれだけ異なっていると、ベテランの先生方でもとても大変に見えます。常にカリキュラムを見直しして必要十分な(しかし最近の学生の嗜好にも合った)科目を割り当てたり、念入りに下準備をして講義や高校訪問やオープンキャンパスに臨んだり、登校拒否学生をなだめたり励ましたりして授業に向かわせたり等々など、沢山の教育義務が存在します。これらに加えて独創的な仕事を行って研究業績を上げることも求められる訳ですから、大学教員とはこれまで私が想像していた以上に大変な職業であることがこの1年間で次第に実感できるようになりました。

個人的に、昔に比べて学生の気質が大きく変化したと思えるのは、何をしたいと大学に進学したのか、あまりはつきりとした目標を持っていない人が増えていることです。私が学生だった頃、もう30年も昔になりますが、当時は多くの大学生が問題意識を持って勉強に励んでいましたし、授業や卒業研究に熱心に取り組んでいたように覚えています。今の大学生が真剣に学問に向き合わないのは色々な事情があるのでしょう。例えば課外活動やアルバイトやスマートフォンやSNSなど、一見魅力的で目移りしてしまう誘惑が沢山あるのも理由でしょう。もしかすると教授が一方向的に喋る授業や、ゼミの先生がほとんどお膳立てしてくれる卒業研究にあまり魅力を感じられないのかもしれないかもしれません。あるいは、いくら頑張っても、企業が採用の際に大学の成績を評価してくれない風潮に問題の根っこがあるのかもしれない。学生達のそういった気持ちは分からないでもありませんが、だからと言って勉強や卒業研究をおろそかにしていると、授業やゼミの充実度は低下していくし、世間の大学教育への信頼度も低下していく、といった慢性的な悪循環に陥ることになります。詳細には立ち入りませんが、日本の大学教育が今後きちんと機能するか否かは、学生と教員と企業の3者間の信頼関係が確立できるか

どうかにかかっていると思っています。今の状態は学生と教員と企業のそれぞれが、残りの2つに対して幻滅感と諦め感を抱いてしまっているようにすら感じられます。最後の意見は極論ですが、

ここまで読んで頂いた方に、私が大学に移ったことを後悔しているのでは?といった誤解を与えてしまっているかもしれないので、本音はその逆だと言わせてください。異動後、研究に使える時間が減ったのは紛いもない事実ですが、学生に色々な分野の講義をすることで自分の研究を整理できたり、これまで考えなかったアイデアを思いついたりなど、役に立つことが多々ありました。また、私の研究主題である有機系太陽電池の発電メカニズムと電子移動ダイナミクスの研究には、有機化学、無機化学、理論化学、光物理学などの多岐に渡る分野の研究者に協力していただくことが重要です。その観

点から、城西大化学科の教員構成には潜在的な強みがあり、学科内の教員同士の興味が一致すれば何時からでも共同研究がスタートできるという可能性を秘めています。既にそういった協力関係が芽生え始めています。

以上の二つの恩恵以外に、若い人から躍動力を貰えるという効果があります。これは1年以上前、私が異動の可能性を初めてお伝えした際、大峯所長が予告してくださったことでした。この躍動力の根源が何であるか、私には未だに良く分かりません。しかし、多くの学生から沢山の刺激と仕事のやり甲斐を継続的にもらい続けていることは間違いのないようです。また、この力は作用・反作用の法則に従います。分子研から異動した直後に研究を軌道に乗せるために、卒研生に対して分子研に研修に連れ出したり、器具を梱包させたり、他大学の装置を利用しに行か

せたり、分子科学討論会や化学会年会で発表させたり、今考えてみると骨が折れることばかり要求してきました。それでも皆、精一杯それに答えてくれて、ゼロからスタートした研究室の卒業研究としては十分な成果を出してくれました。学生達当人も、他の研究室に比べて「どうも扱き使われているぞ」とおそらく感付いてはいたのでしょうが、私に色々ひっぱりまわされた1年間を辛かった、無意味だった、と単純に思っただけではなかったようです。

これから暫くは大学教育に本腰を入れていくこととなります。その最初の1年から抽出されたいわば「初心」を書き連ねたのが本稿です。これらの貴重な感覚を忘れることなく着実に前進できればと思います。そして10年経っても冒頭の質問に対して同じ答えができればとも思っています。



唯 美津木 名古屋大学 物質科学国際研究センター 教授
(前 物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 准教授)

分子研を去るにあたり

ただ・みつき / 2004年東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程中退、同年同助手(助教)、2008年同准教授、同年分子科学研究所准教授、2013年4月より現職。

4年半、本当に多くの先生方にお世話になりました。改めて深く御礼申し上げます。2008年10月に分子研に着任した際、実験棟5階の実験室からの岡崎の眺めを見ながら、真空ガラスラインを手分けして作り、少しずつ実験環境を整えて一息ついたころ、実験棟の耐震工事が決まり、目の前が真っ暗になったような気がしました。その後は、耐震工事のため、所内で2回移転して、

やっと落ち着いたはずでしたが、縁あって名古屋大学の方に異動することになりました。

分子研の良いところは、大学のような教育業務負担が比較的少なく、プロフェッショナルな人たちが中心になって、研究活動に専念できることだと思います。ある程度のバックグラウンドを持って、最先端の研究にすぐに取りかかることのできるスタッフやポスト

クがいれば、非常に効率的に成果を挙げることのできる体制が作れます。一方で、ポストは2、3年という限られた時間の中で成果を出し、その成果を基に次のポストを探していかなければならないので、じっくりと取り組む課題やハイリスクハイリターンの研究をするにはそれなりに勇気が必要です。どうしても事前にある程度成功することが見渡せる研究でないと取り組み難

く、それぞれの課題に対してピンポイントに成果を挙げていくことに専念せざるを得ませんでした。4年半それなりに頑張ったつもりですが、毎年限られた体制で成果を挙げることに必死で、5年10年先に花を咲かせるための全く新しい研究の芽を多くは育てられなかったことを今更ながら反省しています。

久々に大学に戻り、活気に圧倒されるとともに色々な制度が走っていて、今は

それを覚えるのに大変ですが、分子研での経験を生かして、スタッフや学生と一緒に、これまではできなかった新しい研究に取り組んでいきたいと思っております。分子研は昇任がありませんので、若い研究者は必ず外に出なければなりません。その多くは大学に戻っていくこととなります。大学の若手教員を見ていると、研究以外の業務で苦勞しているのは事実ですが、毎日の学生との研究や様々な業

務を通じて、自分の興味だけでなく幅広い視点から様々なことを言われ、考え、悩み、研究成果をあげていかなければならない環境にあります。分子研の持つ研究に専念できる環境を生かして、かつ大学で切磋琢磨されて育ってきた同年代の研究者とも競い合って互いを高めていけるような研究者が、これからも分子研から巣立っていくことを願っております。



永田 央

名城大学 理工学部 応用化学科 教授
(前 分子スケールナノサイエンスセンター 准教授)

自由を満喫した15年間

ながた・とおし / 1987年京都大学理学部卒、1990年京都大学大学院理学研究科博士課程中退、博士(理学)。京都大学理学部助手、日本学術振興会海外特別研究員を経て1998年より分子科学研究所准教授、2013年4月より現職。

ベートーヴェンの「歓喜の歌」は「Freude」(喜びよ)という呼びかけで始まるが、本当は「Freiheit」(自由よ)で始まるはずだったところ、自由主義への弾圧が強かった当時の政治体制を意識して自重したと言われている。かくもベートーヴェンは自由を愛し、若き日に師事したハイドンをして「君は自由奔放すぎる」と言わしめたそうだが、ハイドンも人のことは言えず、随分と自由奔放な作品をたくさん残している。この師にしてこの弟子あり、である。

なぜこんな話から始めたかということ、分子研で過ごした15年間は「自由だった」の一言に尽きるからである。研究グループが完全に独立しているだけではなく、「自由に発想することこそが重要だ」という雰囲気が文化として根付いている。自分が育ってきた学問分野からはみ出して、妙な方向に向かっている、止めるどころか面白がって

焚き付けたりする。こういう空気こそ、分子研が未来のために守るべき伝統であろうと思う。

もちろん、自由には責任が伴う。意気込みの割に能力が不足していた私には、2年ごとの外部評価は苦行だった。レポートを受け取る所長やセンター長にはご心配をおかけしたことと思う。それ以上に、一緒に仕事をしてくれた仲間たち(特に助手を務めてくださった伊藤肇さんと長澤賢幸さん)には本当にご迷惑をおかけした。まことに不出来なPIであったが、みなさんがそれぞれの分野で立派に活躍されていることに救われる思いである。

准教授・助教にとって転出が実質的に義務づけられている現行制度は、研究者と組織の活性化に確かにつながっており、これまた分子研が守るべき伝統であると強く思う。一方、自由が奨励されていることは転出にあたって別

の難しさも生み出す。私は縁あって有機化学の教員として現職に採用していただいたが、実は私の業績リストには有機化学の代表誌である J. Org. Chem. の論文が一つもない。よく書面審査が通ったものだと今から思えば冷汗ものである。分子研のグループは規模が小さいため、特定のテーマで突っ走ることになりがちで、「業績リストを整えるためにこまめに論文を出しておく」戦略はなかなかとりづらい。もっとも、こんなハードルは圧倒的に能力のある人なら軽々と越えられるものだし、本来はそういう人だけが分子研に職を得るべきなのだろうけれども。

ともあれ、15年間の自由を満喫させていただいた分子研に心からの感謝を捧げるとともに、今後分子研が良き伝統を守りつつ、ますます新しい発展を遂げることを祈念したいと思います。ご唱和ください。「Freiheit!」



田中 康寛 中央大学 理工学部 物理学科 助教
(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 助教)

分子研を去るにあたり

たなか・やすひろ／2001年3月 東京大学理学部物理学科卒業、2006年3月 東京大学大学院理学系研究科物理学専攻博士課程修了、2006年4月 分子科学研究所博士研究員、2009年11月 分子科学研究所助教、2013年4月から現職。

私が分子研の博士研究員として着任したのは2006年の春で、それから7年間在籍しお世話になりました。分子研で過ごした7年間は、振り返ってみると私にとって初めての出来事や、少し大げさですが人生の節目のような出来事がたくさん起きた、思い出深い時間だったと思います。分子研は、自分が学位を取って初めてのポスドク生活の場でした。博士課程3年でその後の職を探していた時に、当時分子研の助教授だった米満先生に声を掛けて頂いたのがきっかけでした。着任してから、それまで学生だった自分にとって、研究室のほとんどの人がポスドクで自立した研究者ばかりがいる環境がとても新鮮だったのを記憶しています。また、大学時代とは違い、身近に分野外の研究をする人が多くいたことも新しい経

験でした。研究の面でも、学生時代の研究室では誰も取り組んでいなかった非平衡現象が主要なテーマとなっていました。3年ほどポスドクをした後、助教になり、今まで何となく避けて通ってきた計算機の管理もするようになり、ポスドクとはまた少し違った立場で研究することも学んだような気がします。

また、初めて実家を離れて一人暮らしを始めたのも岡崎からだったため、生活面でも大きな変化がありました。私は岡崎高校のすぐ近くに住んでいましたが、車を運転しないので、自炊するための食材を買いにイオンへ歩いていく坂の上り下りがなかなか大変でした。分子研とイオンを往復してくれるバスがあればいいのにと、何度思ったか分かりません。また、2010年の冬には結婚をし、分子研在籍中に子供も

授かりました。ポスドクとして着任した時には任期が2年だったこともあり、岡崎でこんなにも色々な出来事が待っているとは思いませんでした。

また、分子研では季節のイベントも色々楽しみました。春には乙川の桜、夏は花火大会、秋には香蘭溪の紅葉や、機構のソフトボール大会にも毎年参加させて頂きました。研究仲間とホテルを見に行ったこともありました。また、週一回は研究仲間や秘書さん達とテニスをして楽しみました。研究会などでは今後も分子研を訪れる機会があると思いますが、いずれ家族で、これらのイベントを楽しめたらと思っています。7年間、大変お世話になりました。ありがとうございました。



安池 智一 放送大学 教養学部 自然と環境コース 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)

分子研と私

やすいけ・ともかず／2000年3月慶應義塾大学大学院理工学研究科化学専攻後期博士課程修了、博士(理学)。日本学術振興会特別研究員(PD)、東京大学学術研究支援員、京都大学福井謙一記念研究センター博士研究員を経て2005年7月分子科学研究所信定グループ助手、2013年4月より現職。尚、写真のトロフィーは本文中の理論シリウス(三軍)準優勝とは関係なく、別の年に理論プレアデス(一軍)が優勝したときにお借りしたものです。専ら撮るばかりで自分の写真は殆どなく、こんなになってしまいました。悪しからず。

私が分子研に着任したのは2005年7月だが、分子研との繋がりには随分前に遡る。学部の指導教員は前々所長の茅先生であるし、そもそも理論志望の私が実験の研究室でお世話になったのは岩田先生が分子研に転出されたことによる。その後程なくして慶應に来られた大学院の指導教員も分子研諸熊グループの一員だった藪下先生であったし、さらにはPDとして駒場でお世話になった染田先生、分子研で助手として採用して下さった信定先生は共に、分子研で前所長の中村先生の助手をされた経歴の持ち主だ。

この分子研と私の濃密な関係は一体何なのだろうか。そんなことを考えながら、中村先生に辞令を頂いたことを思い出す。分子研に来ることが昔から決まっていたかのような心持ちの反面、困ったことになったなとも思った。何しろ（もちろん、面接でそんなことは言えないが）、自分にはその任に耐える能力があるとは思えない。振り返ってみると、私の人生には時々私を買い被ってくれる人が現れて、本人の能力に見合わぬ高所に連れて行ってくれる。そのたびにいつも大変困惑し、おっかなびっくり一歩を踏み出し、そのうち少しずつ楽しくなってくるのであるが、分子研での生活もまさにそのように推移した。

まず、上司の信定先生から言われたことは「オリジナルなら何をしてもよい。自分自身は開放系に興味があるが、そうでなくとも構わない。ただし、今までやってたことは忘れるように。」であった。アレやれコレやれ言われるのを期待？していた社畜体質の私は、いきなりの大人扱いにワナワナした。かくして半年以上勉強だけをする日々が続くことになる。こんなことは分子研でなければ、そして今や分子研でも一部のPIの下でしか許

されないことであろう。勉強だけしているのは気楽なようであるが、分子研のようなアクティブな環境においては、かなりの焦燥を感じるものである。「分子研の助手は研究だけしてればいいんだからからいいよね」という言葉も大変重かった。研究しかしてないのにソレかよと聞こえるのである（実際そういう意味なのかも知るのだが）。

とは言いながらも（おそらく皆様ご存知の通り）基本的には楽しく過ごしていた。（一応）定職に就いたということで、早速中古のアルファロメオを購入して津々浦々に出かけたし、趣味のパーカッションや写真の機材も着々と増やした。助手仲間には旧知の根岸君（現東理大）や十代君（現日大）が居たことでスムーズに馴染むことができたし、何しろ所内をうろつけば最先端の分子科学のネタがゴロゴロ転がっている。体裁が整った論文を読むより、本人から現在進行形の話聞く方がよっぽど刺激的だ。そして、そんな所内徘徊の中から研究のネタは降ってきた。松本先生（現京大）のグループで行われていた表面光科学の問題が、電子の問題としては開放系として考える方がよく、量子化学として手付かずであることに気が付いたのである。渡邊さん（現京大）の話を知っていると、気相孤立分子の世界から一歩外にでるだけで、分からないことだらけ。量子開放系のある側面が量子散乱問題として記述できることに気が付き、表面吸着系を扱う新しいモデルを提出することができた。丁度その頃に出席した伯林の会議で直接応用可能な系を見つけて、理論の問題としてだけでなく、表面科学的にも意義のある話に発展させることができた。プログラム開発のテスト計算から生まれたプラズモン研究も、林さん（国立台湾大）との議論の

中でプラズモン増強ラマン散乱の理論へと発展した。粘り強く待って下さった信定先生をはじめ、グループの皆さん、領域の皆さん、その他構って頂いた大峯所長以下所内の皆さんには改めて感謝の気持ちで一杯である。

7年9ヶ月も居たので、研究以外の思い出も多い。ソフトボール大会で理論シリウス（三軍）でありながら準優勝したこと、富士山頂で巨神兵となったこと、花火委員長をしたこと、などなど。そしていよいよ転出努力が推奨されまくっていた昨年10月、私事ながら第一子が生まれた。分子研着任の一ヶ月前に結婚しているのだから、こちらの成果も研究さながら時間がかかった。人生の変化とは何やら同時多発的に生じるらしく、程なくして転出が決まった。こうして分子研と私の関係はひとまず幕を閉じた……はずであったが、新任地のたった10人しかない自然科学系スタッフの中に、分子研理論OBの岸根さんがいらしたのには驚いた。この分子研と私の濃密な関係は一体何なのだろうか。再びそんなことを思いながら、一風変わった新しい職場でおっかなびっくり一歩を踏み出したところである。



金 鋼

新潟大学 大学院自然科学研究科 数理物質科学専攻 准教授
(前 理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 助教)

分子研との個人的な縁

きん・こう / 1998年京都大学理学部卒業、2003年京都大学大学院情報学研究科博士後期課程修了、博士(情報学)の学位取得。JST研究員を経て、2006年6月分子科学研究所助手(斉藤グループ)、2007年4月より同助教。2013年4月より現職。

このたび分子研から転出するにあたり荷物を整理していたところ、2002年3月に参加した「岡崎レクチャー アジア冬の学校」で記録したノートを発見しました。そこから、私の個人的な分子研との縁が思い出されます。

私が大学院生のときの指導教員は宗像豊哲先生だったのですが、当時宗像先生が分子研の客員教授をされていたことと、また平田先生との動的密度汎関数法について華麗なる共同研究を目のあたりにしたことが、岡崎にある分子研なるものを知る初めての体験でした。

分子研の名前を知っていた大学院生だった私が、実際に分子研に初めて訪問したのがこのアジア冬の学校でした。当時の谷村吉隆先生が世話人をされ、海外から Peter Wolynes 氏、Charles Brooks 氏が、また木下一彦先生、北川禎三先生、永山國昭先生、岡本祐幸先

生が講演され、タンパク質折れたたみ、ガラス転移、単分子操作、超高速分光について濃密な講義が展開されました。特に私はガラス転移について Wolynes 氏の研究とオーバーラップする研究をしていて、2000年頃から氏が提唱しているランダム一次相転移理論について直接熱い講義を受けることができ、また自分の研究を氏に紹介することもできたことから、大きな衝撃を受けるイベントとなりました。

しばらく時間が経過し、2回目に分子研にやってくるのが4年後の2006年3月にあった助手公募面接でした。2002年の興奮を思い出しながら望んだわけですが、この時点でまさか分子研からご縁をいただけるとは夢にも思っておりませんでした。幸いにも、斉藤先生との議論から共通する問題設定ができ、ガラス転移の動的性質について非

線形分光法から着想を得て多時間相関関数を適用する新しい展開をすることができました。まさに分子科学の知見が不可欠だった研究であり、圧倒的に統計力学に偏るこの業界に対して分子研から発信する研究としてインパクトを与えられたのではないかと自負しております。また、この分野の世界最前線ですでにご活躍をされていた平田グループ元助教の鄭誠虎さんとの交流や、谷村グループ元研究員の宮崎州正さんとの共同研究を通して、先輩研究者方のタフさを感じることができたことも、分子研で得た縁によるものでした。

斉藤先生をはじめ斉藤グループ、理論・計算分子科学領域また計算科学研究センターの皆様、そして分子研の皆様、良きご縁を頂きましてありがとうございました。今後も分子研との縁が続くように精進したいと思っております。



邨次 智

名古屋大学 大学院理学研究科物質理学専攻(化学系)助教
(前 物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 助教)

分子研で得たもの

むらつぐ・さとし / 2004年東京大学理学部化学科卒、2006年東京大学大学院理学系研究科修士課程修了、2009年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了、博士(理学)。同年4月より分子科学研究所物質分子科学研究領域助教、2013年4月より現職。

2009年4月より2013年3月までの4年間、分子研にてお世話になりました。

在任中は唯美津木先生をはじめ、多くの先生方、職員の皆様にお世話になり

ました。この場をお借りして心よりお礼申し上げます。

博士課程を修了してすぐに、唯Gの助教として採用していただきました。着任した当時は、唯先生が分子研に異動されて間もなくで、新しい固体触媒創製及び先端計測を駆使した触媒作用原理解明の研究について本格的に立ち上げる時期でした。着任日は、新しい分野への挑戦という期待と、触媒について全くの未知状態からの出発という不安を抱きつつ分子研の正門を通り来所したのを覚えています。

それから4年間、唯先生には研究について常に厳しく指導していただきました。新しい表面固定化金属錯体触媒を創製するテーマを通して、具体的な実験方法からディスカッション、学会発表や論文執筆、さらには研究に対する考え方まで大いに学ぶことができました。

した。勿論、今後より一層精進しなければなりません。この時期の様々な経験が、現在の研究生生活を行う上で大きな糧となっているのは言うまでもありません。また、グループには国内の学生、博士研究員、技術支援員の方々に加え、外国（多いときで5か国）からのメンバーが半数近くおり、多国籍軍さながらの様子を呈しておりました。それぞれの国の料理を持ち寄った昼食パーティーを催して交流を深めることができたのも良き思い出でした。

分子研では、理論からパイオまで、幅広い分野の先生方と積極的に交流を持つことができました。お邪魔した研究室で、また飲み会の席において、実験のアドバイスや研究のヒントが数多く得られたとともに、科学についての

熱いディスカッションをしていただくことで、多くの刺激を得、視野を格段に広げることができました。また、技術課の方々には日々の実験においてあらゆる面でサポートしていただきました。この4年間を思い返してみますと、名前を挙げるだけで紙面が埋まるほど多くの方々にお世話になりました。私にとって、分子研で得たかけがえのない財産であると思います。厚く感謝致します。

現在は異動した名古屋大学で、分子研で見出した研究の芽をさらに発展させつつ、分子研で培われた開拓精神で新しい研究の芽を見つけ、自分の研究の幹を創るべく日夜取り組んでいます。今後も研究で分子研にお邪魔いたします。どうぞよろしくお願い申し上げます。



中川 剛志 九州大学大学院 総合理工学研究院 准教授
(前 物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 助教)

研究三昧の日々

なかがわ・たけし / 1997年京都大学理学部卒、2002年京都大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程修了、2002年分子科学研究所助手（助教）。2012年11月より現職。

分子研着任初日はダンボールが四、五箱あっただけの、空っぽだけど広大な研究室だった。いまその状況になったら何にもできないなど途方にくれるが、そのときはなんでもできるぞ、と空っぽの研究室で希望に溢れていた。いまも若いつもりだが、さらに若かった。研究費のことなどよくわからないので、どっかから湧いてくるのだろうと深く考えもしなかった。もちろんそんな埋蔵金は湧いてこず、時折、不満が湧いてくることもあった。しかし、グループリーダーの横山先生をはじめ

とする方々のお陰で実験装置が徐々に揃い、実験ができるようになった。

しかし、よくよく考えると良い具体的な研究アイデアが浮かばないし、やりたいことは先を越されている。正直、研究はあまり順調ではなかった。たまごの大学院生を終えたばかりのひよこの助手なので、好きに研究しているよと言われても迷子になってばかりだった（さらに反抗期もあって、分子研の若手研究者はたいへんなのです）。周囲の助手の目醒しい進歩に焦る日々を過ごしていたが、たまたま持ってい

たレーザーの波長で磁性体の電子を励起すると不思議なことが起こり、幸運やセレンディピティのお陰でなんとか研究を進めることができた。

そんなこんなで10年が経ち、空っぽの研究室はいつの間にか実験装置で埋められていた。その間、法人化や改組などあったが、そのことで我々若手の業務が増えることもなく、エフォートをほぼ100%研究に費やせる、楽しい経験をさせてもらった。海外に研究のために短期滞在させて頂いたこともいい経験で、ポスドクと助手のいい部分

だけを味わえた。いまでも滞在先と共同研究を続けることができている、研究の輪が広がるのが実感できた。

分子研から九州大学に異動し、「研究院」、「学府」、「学部」、「専攻」の数々の組織や肩書きに埋もれそうになりながらも、周囲の方々の有り難い援助でようやく実験できる目処がたってきた。九州大学は本部を箱崎地区から伊都地区へ移転中だが、我々の「学府」はそれとは別の筑紫地区にあり、キャンパスは主に大学院と研究所で構成されている。その規模は分子研のある明大寺

地区と同じくらいだろうか。所属する人数に比べ、広大な敷地とグラウンドに恵まれている。研究室の窓から、キャンパスのグラウンドで院生がソフトボールやサッカーをしている姿が毎日見られて、大学は活気があっていいとしみじみ感じる。キャンパスは博多駅から電車で南へ10分くらいと便利な場所、立派な空港も直ぐ側にある。ただ時折、パイロットの気まぐれか、キャンパスの真上をジェット機が低空飛行するので、着任直後は迫り来る飛行機の大きさと音にいちいち驚いていた。

さらに、キャンパスは学問の神様がられる大宰府天満宮の近くにある。早速、研究費の採択通知も届き、天神様のご利益は間違いないようである。これから学問を楽しむには恵まれた場所である。

最後になりましたが、長い間にわたってグループリーダーの横山先生はじめ多くの先生方、職員、若手メンバーの方々どうも有難うございました。これからお世話になると思いますが、宜しくお願いします。



古川 貢 新潟大学 研究推進機構機器分析センター 准教授
(前 物質分子科学研究領域 分子物性研究部門 助教)

岡崎での生活

ふるかわ・こう / 1997年 大阪市立大学理学部卒、2001年 大阪市立大学大学院理学研究科後期博士課程修了(博士(理学))、同年 分子科学研究所分子構造研究系助手、2007年改編により分子科学研究所物質分子科学研究領域助教。2012年12月より現職。

11年8ヶ月、分子研でお世話になりました。自分でも思っていた以上に、長期間お世話になっていました。大学で学位を取得してすぐに、岡崎にやってきましたが、環境、設備、予算とあらゆる環境が、大学とは異なり面食らった記憶があります。とても静かなことには違和感すら覚えました。当時、日本で最初の高周波ESR装置が導入され、それを使って研究が出来ると意気揚々と岡崎にやってきました。日本での1号機ということもあり、誰もよく知っている人が居ない中、トラブルに見舞われることもありましたが、しかし、出てくる結果に関しては、文句のつけようが無いもので、充実した研究生活を送れました。また、この装置を利用した共同研究を展開して行くことで、多

くの人脈を築くことが出来たことが、消えることの無い、大きな無形の財産です。

また、何かを始めようと思ったときに、Heを潤沢に使用することができ、物性測定装置がおおよそそろっており、研究を支援してくれる技官の方々が整っている……とても居心地の良い場所でした。また、プライベートでも、結婚して、子供が生まれ……と、人生の大切な時間を岡崎で過ごしてきたように思います。この頃には、面食らっていた環境が当たり前にもなっていました。

転出した今でも、岡崎で知りあった多くの共同研究者が、自分の研究生活を支えてくれています。ありがたい限りです。現在は、賑やかな大学生生活を

送っているわけですが、閑散とした研究環境に飢えてくることもあるでしょう。そのときには、ユーザーとして分子研を訪問することになりますが、居ることが当たり前のような顔をしながら歩いていると思いますので、気軽に声をかけていただきたいと思います。

最後に、分子研在籍時に私の活動を支えてくれた、中村敏和准教授をはじめ、グループのメンバー、秘書の皆さん、技術課の皆さんに、心から御礼申し上げます。



山本 薫

岡山理科大学 理学部 応用物理学科 准教授
(前 物質分子科学研究領域 電子物性研究部門 助教)

初めて来た分子研の記憶

やまもと・かおる / 1994年 東北大学理学部卒、1999年 東京大学大学院理学系研究科博士課程修了(博士(理学))、1999年から分子科学研究所分子集団研究系助手、2007年改編により物質分子科学研究領域助教。2013年4月より現職。

分子研を離れることになった機会に分子研との関わりの中でなるべく古いものについて思い出してみました。分子研の存在を初めて知ったのは卒研でのセミナーの時であったと記憶しています。指導教官の安積徹先生は、配属になったばかりの我々に特別レクチャーを行ってくださり、そのときに、「研究するなら分子研をどんどん活用しなければいけないよ」と、熱っぽく語られたのです。卒研の内容すらまだ何も知らない我々です。物理化学のメッカが遠くにある、と聞いてもピンとくるはずもなかったのですが、私たちの意欲を鼓舞するためにアカデミズムの先端の話題として語って下さったのだと思います。過日、残念ながら先生は他界されてしまわれましたが、先生の量子化学の講義ノートが公開されているので、このような教育に対する先生の情熱に今でも触れることができるようになってきました。

上のような経験で分子研のイメージが刷り込まれていたもので、初めての岡崎訪問には特別な感慨がありました。その機会が訪れたのは、ある金属錯体についてセミナーをするために小杉研にお邪魔させていただいた時でした。当時、そこには、総研大の学生として初井君が所属していて、いつもの通りニコニコしていました。初井君とはそれ以前から知り合いだったのですが、飲みに出かけたりしたのはこのとき

が初めてでした。それ以来、彼から分子研について教えてもらいました。大学の付置研などとはちょっと違う雰囲気や、若手はここで研究の種を見つけて大学に戻っていくような制度だということなど、いろいろです。

その時には予想もしていませんでしたが、数年後、薬師先生に拾っていただき、助手としてここで活動できるチャンス頂きました。分子研の紹介をしてくれた初井君も、ポスドクの後にはひょっこりと戻ってきて、斜め前の部屋の住人となりました。こういう偶然も、研究者の交差点たる分子研ならではの出来事でしょう。その後、彼の方は、研究の種をせっせと集めとっと分子研を去って行きました。愚鈍な私はその後も長居したのですが、薬師研で研究していた物質中から新しい強誘電体を運良く見つけだし、転出の順番となりました。

大学に来てみると当然のことながら環境の違いを痛感しますが、活動スタイルを適合させながら新たに研究活動を進めていくつもりです。学部頃の私がそうであったように、学生には分子研の名の浸透度が今ひとつのようなので、外部ユーザーとしてお世話になりながら、分子研の存在を紹介していければと考えています。所属大学の立ち位置を考えると、効果はあまり期待できないかもしれませんが、最近の分子研はナノプラットホーム事業のよう

にアカデミックの枠を超えた発展にも努力しているようなので、将来何かのプラスになればと願っています。

最後になりましたが、薬師先生をはじめとして、分子研でお世話になった多くの皆様に改めて深くお礼を申し上げたいと思います。これからも引き続きお世話になるかと思っておりますのでご指導どうぞよろしくお願いします。



飯島 隆広 山形大学 基盤教育院 准教授
(前 物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 助教)

ありがとうございました

いじま・たかひろ / 1997年金沢大学理学部化学科卒、2002年金沢大学大学院自然科学研究科博士課程修了、博士(理学)。同年物質・材料研究機構博士研究員、2005年京都大学大学院理学研究科博士研究員、2007年分子科学研究所助教を経て、2013年4月より現職。

分子研には2007年1月から約6年間在籍させて頂きました。所属グループのリーダーである西村先生をはじめ、前所長の中村先生や現所長の大峯先生、その他たくさんの研究者や事務の方々大変お世話になりました。この場を借りて厚く御礼申し上げます。

まだ分子研を去って3ヶ月弱しか経っておりませんが、分子研時代を振り返ると懐かしく感じられます。分子研では研究時間をふんだんに取ることができ、色々な研究アイデアの考案や、新たな挑戦を行うことができました。もちろんその大部分は、よく考えると間違っていたり、また理論的には正し

くても数値計算してみると実験条件が非現実のため使えなかったり、どうまくいかず、実現できたのはごく一部です。多くの失敗がありましたが、それらは必ず今後の研究に活かされると思えます。このようなことに費やす貴重な時間を頂けたこと大変感謝しています。

私の近況です。新しい所属は基盤教育院という組織で、大学初年次教育が教育の仕事のメインになります。異動初日から4日間、終日大学で新人研修があり、早速教育に向かい合うことになりました。最近の学生の様子などを伺い、本質的な部分は我々の学生時代

と大差ないと思いましたが、実際に授業をしてみると違うのかも知れません。授業は後期から担当することになっており、今は授業の仕方などを勉強中です。また、来年度以降に開講する授業についても構想を練っています。もちろん、研究も行っています。授業がないのは最初の半年だけですので、今のうちでできるだけ……と少々焦りながら仕事をしています。

今後、分子研の装置を使わせて頂くことも考えられますので、その際はまた宜しくお願い致します。



阿達 正浩 高エネルギー加速器研究機構 加速器研究施設 加速器第七研究系 助教
(前 極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門 助教)

岡崎で過ごした5年

あだち・まさひろ / 2001年広島大学 理学部 物理学科卒。2006年広島大学大学院 先端物質科学研究科 博士課程修了(博士(理学))。同年、日本原子力研究開発機構 高崎量子応用研究所 博士研究員。2008年より分子科学研究所 極端紫外光研究施設 助教。2013年4月より現職。

私は5年と1ヶ月を分子研にお世話になりました。大学には学部4年生から6年間在籍しましたが、博士課程の3年間は受託学生としてつくば市の産総研にお世話になりましたので、大学には4年くらいいた印象があります。ポスドクは2年弱でしたので、分子研が

一番長く在籍した所だと感じます。

岡崎で過ごした5年、公私ともに多くの事がありました。分子研に来た最初の年に岡崎花火大会鑑賞会の委員長を引き受け、綺麗な花火を見ながら右往左往しました。三河湾に浮かぶ日間賀島に行き、前任者と学生の3人で自

転車大会に参加してくたくなったこともあり。また、UVSORでは結婚のお祝いパーティーまで開いてもらいました。先輩達と学生にめっちゃ振りをされたこともあり。そして、2歳児になりつつある我が子が生まれた事もこの間でした。

私は学部生から今まで、加速器の研究に携わってきました。学生の頃には、レーザーとプラズマを使った小型加速器の開発に取り組みました。大学ではシミュレーションを、産総研では実験を行い、そんな研究の興奮が冷めやらぬ私は研究者の道へと進みました。その後、クラスターイオンビームという超重粒子を使って研究しているよという話に惹かれて群馬県高崎市へ、そして、レーザーを加速器に組み合わせて研究をしているよという話に惹かれて分子研に移りました。

UVSORを加藤さんに初めて案内して頂いた際、それまで扱ったどの加速

器よりも巨大な装置を前に、その装置を運転するということがどのような事なのかはまだ想像できず、ただただ興奮したのを覚えています。その後、国内外の多くのユーザーのために加速器を動かすという責任の重さと難しさを私なりに理解してからの5年は、大きな重圧を感じた5年でもありました。UVSORの大改造と運転調整を行った分子研での最後の1年は最も大きな重圧を感じつつ多くの知見を得た年でした。また、レーザーと加速器を組み合わせた研究では、国内外の共同研究者や学生に刺激を受け、2つの異なる科学技術を組み合わせて使う事の難しさと面白

さを経験できました。

こんな私がUVSORで感じた驚きは沢山ありました。装置の規模の大きさに比べてコンパクトなグループが持つ柔軟性や、そんなグループが生み出す高いアクティビティーは、今度も見習って行きたい驚きでした。

最後に、UVSORの発展を祈念しつつ、公私ともにお世話になりましたUVSOR関係者の皆様に心から感謝申し上げます。私を採用して指導して頂いた加藤教授に重ねて感謝致します。そして、これからもどうぞよろしくお願い致します。



外国人運営顧問の紹介

Prof. Ian A. Walmsley

オックスフォード大学副学長

Walmsley教授は原子分子光物理学を代表する実験研究者であり、現在Oxford大学の副学長(Pro-Vice-Chancellor)の要職を務めておられます。この度、分子科学研究所の外国人運営顧問に就任されました。Walmsley教授は1995年に、世界に先駆けて分子内の波束運動を可視化したことで知られています。また、1998年には、超短レーザーパルスの位相と振幅を測定する新たな手法としてSPIDER (spectral phase interferometry for direct electric-field reconstruction)を開発されました。この手法は、その後商品化され、今や超短レーザーパルスを評価する上でなくてはならないものとして世界中に普及しています。2000年以降は量子情報処理を目指した研究を展開され、最

近では、室温で巨視的に離れた二つのダイヤモンド結晶の間に量子力学的なもつれ合い状態を形成し、これを観測することに成功されました。この他に、アト秒(アト=10⁻¹⁸)レーザーパルス発生のための研究も進めておられます。このように、Walmsley教授の研究は多岐に渡り、Science誌、Nature Physics誌、Nature Photonics誌、Physical Review Letters誌など世界的な一流科学雑誌に掲載されるだけでなく、その後の研究分野の動向を左右する影響力の強い成果を発信し続けておられます。また、大学運営においては、研究担当の副学長としてOxford大学の研究全般を統括し、優れた行政手腕を振るっておられます。

筆者はここ数年来Walmsley教授と

おつき合いさせていただいておりますが、同教授の卓越した研究能力と優れた行政手腕の両立には常々驚かされるばかりです。また、英国紳士然とした洗練されたジョークとクールな物腰、その裏に隠された温かい人柄は人々を惹きつけて止みません。

研究担当副学長として培われたWalmsley教授の研究全般に対する広い視野と先見性、および際立った行政感覚は、分子科学研究所の運営顧問としても存分に発揮されることでしょう。

(大森 賢治 記)



Prof. Thomas V. O'Halloran

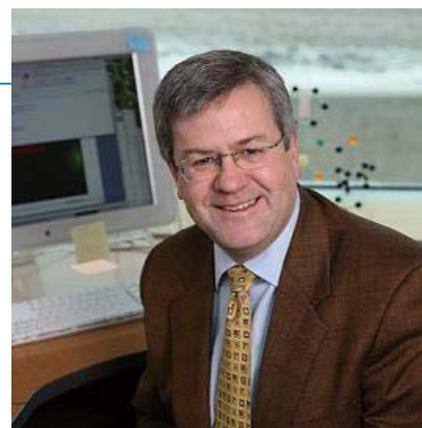
ノースウェスタン大学教授

平成25年度より2年間の予定で、分子研外国人運営顧問を務めて頂きます Thomas V. O'Halloran 教授を紹介させていただきます。O'Halloran 教授は、学部から大学院修士課程までを Missouri 大学化学科で過ごされた後、Columbia 大学で Ph.D. を取得されています。学位取得後、MIT (現 Harvard 大学) の Christopher T. Walsh 教授のもとでのポストドクを経て、1986年に Northwestern 大学に赴任されました。現在は、同大学 Department of Chemistry ならびに Department of Biochemistry, Molecular Biology and Cell Biology で教授を務めるとともに、Northwestern 大学 Chemistry of Life Processes Institute の Director、および The Robert H. Lurie Comprehensive Cancer Center of Northwestern University の Associate Director for Basic Sciences Research も兼務されています。また、バイオテクノロジー分野において、いくつかのベンチャー企業の立ち上げにも参画されるなど、まさに八面六臂の働きをされておられます。

O'Halloran 教授は、ケミカルバイオ

ロジー・生物無機化学の分野では世界的リーダーの一人として研究分野の発展を支えてこれてきました。ご自身の研究においては、生体内において重要な役割を果たしている亜鉛、銅、鉄などの遷移金属イオンの細胞内恒常性維持機構の解明、遷移金属イオンの取込み、輸送、ならびに細胞内でのこれら金属イオンの利用、生理機能発現等における制御機構の解明、金属含有 (As, Mo, Pt 等) 抗がん剤の薬物輸送機構および作用機構の解明等に取組み、顕著な成果を挙げておられます。これらの研究を進めるにあたっては、遺伝子工学、生化学・分子生物学、細胞生物学、構造生物学 (X線および NMR)、多核 NMR (^{195}Pt NMR、 ^{199}Hg NMR) を始めとする各種分光学など、多彩な実験手法が駆使されており、読み応えのある論文を数多く発表されています。

O'Halloran 教授は、1990年に開催された岡崎コンファレンス「生体系金属錯体の構造と動的側面 “Structure and Dynamic Aspects of Metal Complexes in Biological Systems”」(山内脩 (名大)、森島績 (京大)、北川禎三 (分子研) の



3教授が代表者) で初めて来日しておられます。それ以降、度々日本を訪れておられますが、初めての来日は、ご本人にとっても非常に印象深いものであったようで、外国人運営顧問をお引き受け頂いた際の返事の手紙の中に、初めて岡崎に来日したことに対する言及もあったようです。O'Halloran 教授は、日本食、日本酒も大好きで、日本国内に友人も多い親日家でもあります。外国人運営顧問として分子研を訪問された際、オフィシャルな交流のみにとどまらず、お酒を飲みながら……といったフランクな交流も楽しみにされているのではないかと思います。皆様方からも、是非、積極的に交流いただければと思います。

(青野 重利 記)



外国人研究者の紹介

Prof. Adam P. HITCHCOCK

from Canada

Hitchcock 教授はカナダのオンタリオ州ハミルトン (トロントとナイアガラの滝の中間) にあるマックマスター大学の化学科の教授を長年勤められています。昨年から今年にかけてのサバ

ティカル期間中に三度分子研に来られました。通算すると2ヶ月強の滞在になります。分子研では連続して3ヶ月以上滞在可能で教授としてふさわしい外国人であるこ



Ilonaさんと。愛妻家の Hitchcock 教授。

とが認められれば客員教授として雇用できるのですが、Hitchcock教授は世界各地から研究指導要請や講演依頼があるなど忙しい方で、3ヶ月以上のまとまった滞在ができませんでした。そのため、外部資金による国際共同研究者として来ていただきました。

滞在中は、所長の要請に基づき、UVSOR施設の評価、特に各装置の性能と成果について国際的な視点での評価、をしていただきました。その報告書は今年出版された分子研レポートに掲載されています。更に所長には各研究者評価を含む非公開レポートも出していただきました。世界各国のトップクラスの放射光施設は複数の国際評価委員による評価を定期的を受けており、その結果に従い、重点化や将来計画を定めているところです。UVSORも二度の高輝度化後、UVSOR-IIIとして世界トップクラスの国際競争力を持つ施設となり、外国人研究顧問等の先生方からも今後に向けて国際評価・諮問の必要性が指摘されるようになりました。そこで、最初の諮問として、世界各地の高輝度放射光施設やVUV軟X線関連国際学会の国際諮問委員（委員長を含む）を務めておられるHitchcock教授に依頼することになったわけです。

Hitchcock教授は、大学の研究室では30年以上前から高速電子線のエネルギー損失分光で、放射光施設では軟X

線吸収分光で、精力的に研究を進めておられます。内殻励起スペクトルのデータベース化や関連文献のデータベース化にも熱心です。軟X線分光分野の研究者でHitchcock教授のことを知らぬ者はありません。特に、ここ15年ほどは放射光の高輝度化に伴い可能になった走査型透過軟X線顕微分光（STXM）を使った材料科学、環境科学、生

命科学（その場観測可能）等への応用研究に力を入れています。STXM装置は独自開発も可能ですが、開発期間も長くかかり、高性能を得るのが難しいようです。最近、アメリカのバークレイにある高輝度放射光施設ALSでバイオニクス的に開発された装置が市販されるようになりました。Hitchcock教授は利用研究の観点で開発に協力しましたが、製品化には関わっておらず、元研究室メンバーでALSに職を得た研究者が製品開発に関わっています。高価な装置なので手に入れるのが困難です。幸いにもUVSORでは昨年3号機を導入することができました（1号機はスイスの高輝度施設SLS、2号機はベルリンの高輝度施設BESSY-II）。このような背景でHitchcock教授自ら我々のSTXM装置の立ち上げ（責任者は大東琢治UVSOR助教）に協力を申し出て下さいました。



ルスツにて（Hitchcock教授、小杉、大東助教）

利用者として世界各地の高輝度放射光施設で先導的な研究を展開されているHitchcock教授によく使ってもらえる装置がUVSORで動き出したことに感慨深いものがあります。

実は私は、Hitchcock教授とは二十年来の友人です（年齢もほぼ同じ）。現在、一緒に電子分光分野の国際誌の編集長を務めています。伊藤所長に許可をもらって2ヶ月間ほど客員教授としてマツクマスター大学で共同研究したこともあります。時期は冬でしたので、クロスカントリースキーなど冬のスポーツに毎週末、誘われました。そのお返しというわけではないのですが、日本では登山（紅葉時や雪山）やスキーにお誘いしました。今後はUVSORユーザーとして定期的に共同利用実験に来られる予定です。

（小杉 信博 記）



NEW STAFF

新人自己紹介

森川 美枝子

もりかわ・みえこ

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

昨年の11月から計算分子科学拠点でお世話になっております。プロジェクトに関わる先生方に、ご迷惑をお掛けしないよう、また、自分が成長できるよう、私なりに頑張っていきたいと思っております。

よろしくお願いいたします。

Dhital Raghu Nath

協奏分子システム研究センター
機能分子システム創成研究部門 研究員

I received the M. Sc. degree from Tribhuvan University in Kathmandu, Nepal and joined the chemistry graduate program at the Institute for Molecular Science (IMS), SOKENDAI in October 2009. I worked on the carbon-carbon bond construction by using gold-based bimetallic catalysts under the supervision of Professor Hidehiro Sakurai. In 2012, I received the PhD degree and joined as a postdoctoral fellow in Institute for Molecular Science (IMS) and currently doing research on the activation of non-activated bond by using gold-based bimetallic catalysts under the guidance of Professor Hidehiro Sakurai.

阿部 淳

あべ・じゅん

協奏分子システム研究センター
階層分子システム解析研究部門 研究員

東北大学で学位（理学）を取得後、2012年2月1日より研究員として秋山グループに参加いたしました。専門は物理化学で、これまでは電子スピン共鳴法を用いたタンパク質構造解析法の確立と応用研究を行ってきました。今後はメソッドドリブンではなくサイエンススペースで、物理化学的な視点から生体分子、あるいは細胞の動態がおりなす生命現象の解明を目指していきたいと思っております。

皆様どうぞよろしくお願いいたします。

永園 尚代

ながその・ひさよ

所長秘書室
国際共同担当秘書

2013年2月1日からお世話になっております。

岡崎生まれ、岡崎育ちの「おかざきっ子」ですが約10年ぶりに岡崎に戻ってきました。

そして、同じく約10年ぶりにお仕事に復帰させていただくことになり戸惑うことも多々ありますが、周りの皆様に助けていただき、最近では少しずつ慣れてきたと思います。

分子研での仕事を通して、自分が成長できるように頑張っていきたいと思っておりますので今後ともよろしくお願いいたします。

ARZAKANTSYAN, Mikayel

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

In March 2012 I received PhD degree in Ecole Polytechnique, France for the development of novel materials and their application in solid-state lasers. Then I joined Professor Taira Lab as a post-doctoral researcher. I work mainly on the elaboration of anisotropic laser ceramics and their characterization.

DALAPATI, Sasanka

物質分子科学研究領域
分子機能研究部門 IMS フェロー

I received my degree in Master of Science (M. Sc.) in 2008 from University of Calcutta, Kolkata, India. In 2012, I got my doctoral degree (Ph. D.) from the same University, supervised by Prof. Nikhil GUCHHAIT. My past research focussed on design, syntheses of new chemosensors towards environmentally and biologically relevant ions and molecules: A spectroscopic and theoretical investigation. From the latest March, I have been focussed on design, syntheses and functional exploration of Covalent Organic Frameworks (COFs) under Prof. Donglin Jiang guidance. I am pleased to give him my sincere thanks for giving me such compatible opportunity.

Lastly, it's my pleasure to join IMS, especially, I am very happy to stay in beautiful Japan.



初井 宇記

はつい・たかき

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



本年4月より、光分子科学第四研究部門にて客員准教授として着任しました。

X線自由電子レーザーの技術開発研究の経験を活かし、分子科学研究所における軟X線利用技術開発に協力するとともに、今後の放射光科学の進歩によって分子科学としてどんな新しい知見が得られるか、分子科学研究所の研究者というしよに考えてみたいとおもっています。

竹延 大志

たけのぶ・たいし

物質分子科学研究領域
物質分子科学第一研究部門 客員教授



2013年4月より、客員教授を務めさせていただいております。北陸先端大（三谷・岩佐研）にて学位取得後、ソニー株式会社・東北大金研（岩佐研）を経まして、現在は早稲田大学先進理工学研究科に在籍しております。研究分野としては、有機半導体材料やナノカーボン材料の物性研究や半導体応用に取り組んでおりまして、分子研では山本先生と協力し、分子性固体と電気二重層トランジスタを融合させた電子相制御に挑戦したいと考えております。よろしくお願い致します。

鐘本 勝一

かねもと・かついち

物質分子科学研究領域
物質分子科学第一研究部門 客員准教授



京都大学で学位取得後、学振研究員として1年間分子研の加藤立久先生のグループでお世話になりました。以後、大阪市大の物理学科助手に着任し、現在は同准教授として勤務しております。現在、有機半導体のデバイス物性を、ESRや分光手法で評価する研究に力を入れています。こちらでは、ESR設備を使った実験をメインに行う計画ですが、いろいろな分野の方々と共同研究を含めた交流をもつことを切に願っております。

三宅 伸一郎

みやけ・しんいちろう

光分子科学研究領域
光分子科学第一研究部門 研究員



総研大で学位取得のあと、大島グループにて2013年4月より博士研究員としてお世話になっております。

これまでは主に光源開発を行ってきたので、こころをあらたに分子の研究をしていこうと思っています。

今後ともお引き立てくださいますよう、よろしくお願い致します。

GU, Cheng

物質分子科学研究領域
分子機能研究部門 IMS フェロー



2007 Graduated from College of Chemistry, Jilin University (China). 2012 Completed the doctoral course in the State Key Laboratory of Supramolecular Structure and Materials, Jilin University, Ph.D, under the guidance of Prof. Yuguang Ma, focusing on the electrochemical polymerization to prepare highly-luminescent cross-linked conjugated polymer films for organic electronics. Apr. 2013, IMS Fellow in Prof. Donglin Jiang's group, to explore electrochemical synthesis of conjugated microporous polymer films and their applications.

菊地 満

きくち・みつる

物質分子科学研究領域
分子機能研究部門 研究員



愛媛大学大学院を卒業後、2013年4月より分子研、平本グループで派遣研究員としてお世話になっております。学生時代は有機合成の研究を行ってききましたが、現在は有機太陽電池の研究をしており、新たな刺激を受けつつ、研究に邁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致します。

山品 洋平

やましな・ようへい

物質分子科学研究領域
分子機能研究部門 研究員



和歌山大学システム工学研究科で修士号を取得後、4月1日付で平本グループの派遣研究員として着任致しました。これまでは導電性有機物質について研究していました。現在は有機薄膜太陽電池について研究しています。学生時代とは研究分野が異なるので色々和不慣れな点がありますが、少しでも一人前に近づけるよう、精一杯努力する所存です。何卒よろしくお願いいたします。

濱田 雅子

はまだ・まさこ

物質分子科学研究領域
分子機能研究部門 事務支援員



2013年4月より分子機能研究部門江グループの事務支援員として着任しました。研究所での勤務は初めてですので、研究者の方が熱心の実験する姿や最先端の研究現場に触れることが大変興味深く、新鮮に感じています。日々多忙な研究者の皆さんが、研究に集中できるようにグループをサポートするとともに、国際色豊かなメンバーとの交流を楽しみながら仕事に取り組んでいきたいと思っております。

吉田 将己

よしだ・まさき

生命・錯体分子科学研究領域
錯体物性研究部門 研究員



平成25年3月に九州大学で学位を取得後、特別共同利用研究員としてお世話になっていた分子研正岡グループに博士研究員として4月1日から着任いたしました。これまで金属錯体を酸素発生触媒として用いる研究を行ってききましたが、これからは心機一転、酸化反応以外の新しい研究にも積極的に挑戦していきたいと考えています。

未熟者ではありますが、どうぞよろしくお願いいたします。

堀内 新之介

ほりうち・しんのすけ

生命・錯体分子科学研究領域
錯体物性研究部門 IMSフェロー



昨年度に東京大学で学位を取得後、2013年4月1日より分子研村橋グループにてIMSフェローとしてお世話になることになりました。学生時代は超分子化学、ホストゲスト化学を基礎とした物性制御、反応開発を行っておりました。これまで学んできたことをうまく活かしながら、これからの研究に邁進していこうと思います。

今後ともどうぞよろしくお願いいたします。

PANDIT, Palash

協奏分子システム研究センター
機能分子システム創成研究部門 研究員



Hi, I'm Palash Pandit, have received my Ph. D. degree from the department of Chemistry, University of Calcutta, India, in Chemistry in July' 2011, under supervision of Prof. Dilip K. Maiti. My specialization was synthetic organic chemistry. Then I spend six months at National Cheng Kung University, Taiwan as a Postdoctoral Fellow. Then I moved to Tokyo where I joined Prof. Takahiko Sasaki's group, department of complexity science, Graduate school of frontier science, University of Tokyo, Japan as a Postdoctoral Fellow till March 31st 2013.

From this April, I joined Prof. Hidehiro Sakurai's Group to study the synthetic strategies and applications of bowl shaped π -conjugated molecules with Prof. Shuhei Higashibayashi. I am very pleased and grateful to join IMS, from where I can not only get the growth exercise, but also give me the chance for good exchange of knowledge and meet more new colleagues, new friends.

白井 英登

しらい・ひでと

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 IMSフェロー



香川大学工学研究科材料創造工学専攻にて学位取得後、2013年4月より分子研レーザーセンターの藤グループのIMSフェローとして着任いたしました。前研究室では、テラヘルツ波と呼ばれる遠赤外の電磁波を用いた研究に従事してきました。今後は遠赤外だけでなく中赤外を含む光源を利用して、液相試料における分子振動および分子間の結合エネルギーの相関関係の解明など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。

**BOBUATONG, Karan**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

I received B. Sc., M. Sc., and Ph. D. in 2001, 2003, and 2010, respectively from Physical chemistry division, Department of Chemistry, Kasetsart University, Thailand. I was a postdoc of Prof. Masahiro Ehara group at IMS during 2011-2012 followed by a postdoc in Prof. Jumras Limtrakul group in Thailand (2012-2013). I'm currently a postdoc of Prof. Masahiro Ehara group with the responsibility of theoretical study of the reaction mechanisms occurred on gold, gold/palladium bimetallic alloy, and transition metal complexes.

杉本 緑

すぎもと・ゆかり

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

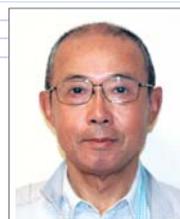
平成25年5月1日より、江原正博先生のもと元素戦略プロジェクト担当の事務支援員としてお世話になっております。周りの皆さまにいろいろご指導いただきながら、楽しくお仕事をさせて頂いております。ご迷惑をおかけすることもあるかと思いますが、お役に立てるよう努力してまいります。どうぞ、よろしくお願いたします。

MAITY, Prasenjit協奏分子システム研究センター
機能分子システム創成研究部門 研究員

I am Prasenjit Maity, an Indian citizen, recently joined as a postdoctoral researcher at IMS in the research group of Professor Hidehiro Sakurai from May-2013. I received my PhD degree in Chemistry from IIT- Mumbai, India, in 2008, under the guidance of Professor Goutam Kumar Lahiri. After finishing PhD, I joined the research group of Professor Michele Maggini, at The University of Padova, Italy as a postdoctoral researcher. From December 2010, I joined the research group of Professor Tatsuya Tsukuda at Hokkaido University and later transferred to The University of Tokyo. My research work is mainly focused on synthesis and characterization of stabilized and protected metal clusters / nanoparticles and their catalytic application for selective chemical transformation under aqueous-organic biphasic medium.

林 健一

はやし・けんいち

極端紫外光研究施設
技術支援員

UVSORにてシンクロトロン室、ストレージリング室の冷却水点検、冷却水装置送排風機点検等を行っています。よろしくお願いたします。

水口 あき

みなくち・あき

極端紫外光研究施設
技術支援員

5月16日より極端紫外光研究施設で技術支援員としてお世話になっております。子育てのためブランクはありますが、前職は地質調査会社に勤務しておりました。

未知の分野に悪戦苦闘しておりますが、周りの皆様の支えで少しずつですが仕事を覚えていくことに面白さを感じています。

至らぬ点もあるかと思いますが、どうぞよろしくお願いたします。

檜山 卓也

ひやま・たくや

協奏分子システム研究センター
階層分子システム解析研究部門 研究員

東大理学系研究科で学位取得後、理研を経て6月から着任いたしました。X線結晶構造解析の手法を用いて時計タンパク質のメカニズムに迫ります。京都・奈良のことは詳しいです。分子研では様々な研究分野の方がいらっしゃるのだからたくさんお話できるのを楽しみにしております。どうぞよろしくお願いたします。

BOEKFA, Bundet

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



My name is Bundet Boekfa. I received the Ph.D. in Chemistry from Kasetsart University, Thailand in 2009 under supervision of Professor Jumras Limtrakul. I am currently on leave from a faculty member at Kasetsart University, Kamphaeng Saen Campus and am a postdoc with Professor Masahiro Ehara. My research involves the reaction mechanism on catalysts with computational calculation.

岡田 知

おかだ・とも

岡崎統合バイオサイエンスセンター
生命動秩序形成研究領域 技術支援員



6月より岡崎統合バイオサイエンスセンター、加藤晃一教授のグループに勤務しております。

新しい環境・業務に少しでも早く慣れて、研究活動の支援がスムーズにできるよう、努力していきたいです。

仕事と小学生2人の子育てに奮闘する毎日ですが、新しいスキル、新しい出会いに刺激を受けつつ、がんばります。

どうぞ、よろしくお願いいたします。

共同利用研究ハイライト

減衰全反射遠紫外分光法と量子化学計算による凝縮層における有機化合物の電子状態の研究

尾崎 幸洋 関西学院大学理工学部化学科 教授

筆者らは約10年前から遠紫外 (FUV) 分光法の研究を始めた。最初は遠紫外といっても水の第一吸収帯の長波長側の裾を利用するというものであった。その後減衰全反射 (ATR) 法をFUV領域に適用することに成功し、140-200 nmの領域のATR-FUV分光法を確立することができた。この領域には様々な電子遷移によるバンドが観測されることが予測されるが、これまでFUV領域における液体、固体試料のスペクトル測定は、非常に強いバンドを観測できる装置がなかったため極めて限られていた。筆者らはATR-FUV分光法を用いてこれまでに水やアルコールといった分子の第一吸収帯の観測を行い、電子状態の変化に関する興味深い知見を得た。その後、比較的構造の単純な液体アルカンやケトンの炭素数や構造依存性によるスペクトル変化の研究を行い、FUV領域で観測される σ 電子の関与する様々な電子状態に関する知見を得

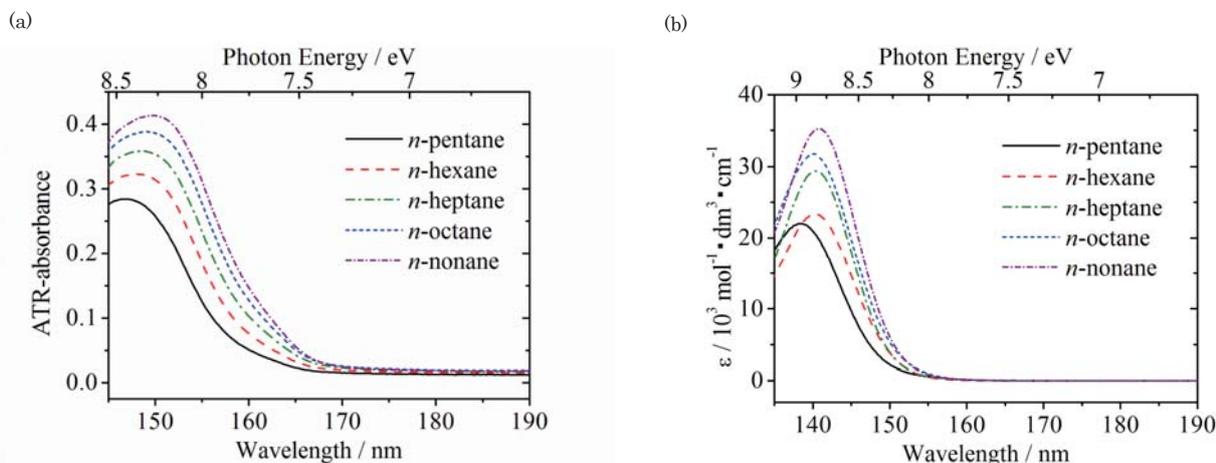
た。FUV領域に観測されるスペクトルがRydberg状態に強く寄与することや、分子構造、特に炭素の分岐によって特徴的な変化を示すことを明らかにした。

その後、FUV域に観測されるバンドの帰属や電子遷移の研究を深めるために量子化学計算を用いた研究を始めたが、量子化学計算による研究をさらに発展させるためにはやはり量子化学の専門家と共同研究することがぜひとも必要と考え、分子研の江原教授に共同研究を申し入れた。この共同研究には森澤勇介博士研究員(現近畿大学理工学部講師)が中心的な役割を果たし、現在も分子研-関学-近大という共同研究体制で研究を進めている。また多くの学生がこの共同研究に参画している。これまでに得られた共同研究の成果は以下の通りである。

図1に液体 n -アルカン (C_nH_{2n+2} ; $n=5-9$) の 8.55-6.53 eV (145-190 nm) の領域のATR-FUVスペクトルと

TD-CAM-B3LYPの結果を比較する。測定した全ての液体アルカンが8.3 eV付近にブロードな吸収を示し、それがアルキル鎖が長くなるとともに強度増大を伴いながら、低エネルギー(長波長)側にシフトしていることが分かる。理論の結果はこの傾向を再現していることが分かる。SAC-CI法で計算した n -ペンタンおよび n -ヘキサンの理論スペクトルから吸収は、HOMO-2 ~ HOMOからRydberg 3s, 3p状態への遷移が混合したバンドに帰属することができた。これらの遷移で重要な分子軌道を図2に示す。

分枝アルカン研究では8.3 eV付近のバンドは n -アルカンのそれに比較して低エネルギー側にシフトし、しかも7.7 eV付近のバンドの強度が強くなることが分かった。また分枝が増えるほど、8.3 eVのバンドは低エネルギー側にシフトしている。7.7 eVのバンドはRydberg 3sへの遷移に帰属したが、禁

図1 n -アルカン (C_nH_{2n+2} ; $n=5-9$) のATR-FUVスペクトルおよび理論の比較

制遷移である3s遷移がn-アルカンから分枝アルカンになるに従って対称性が低くなり、強度が強くなったと考えられる。

さらに、アルカンの液体から固体への相転移を追跡した低温温度変化実験では、液体で観測された153 nmの吸収が減少し、200, 230, 260 nmに3本の吸収が現れた。この実験結果を2分子の距離を変化させたアルカンクラスターの計算結果と比較すると、アルカンクラスターにおいても分子間距離が短くなると、実験で見られたような大きな長波長シフトが計算された。このシフトは、十分距離を置いたクラスターにおいてはHOMO-2であった準位が、アルカン距離の短縮によって、大きな高エネルギーシフトを起こした結果、遷移エネルギーが低エネルギーへシフトすることが原因であることが分かった。

また、炭素鎖を主体とする骨格だけでなく極性基が骨格となるものとしてアミド、ナイロンについても研究を行った。各種アミドと炭素鎖の異なる各種

ナイロンについて、ATR-FUVスペクトル測定を行った。また、計算としてはアミドと長鎖アルキル鎖を持つアミドの計算を行った。ナイロンのスペクトル測定において、炭素鎖の異なるアミド間で、 $\pi\pi^*$ 遷移とその短波長側に現れる遷移の比が異なることが解った。計算からその原因は、短波長に現れる遷移が炭素鎖に局在する電子状態によるものであり、 $\pi\pi^*$ 遷移がアミド基に局在する電子状態によるものであるからであることがわかった。

このように筆者らと江原教授らは共同研究により、ATR-FUV法と量子化学計算法を合わせ用いて液相における有機化合物のFUV域における電子遷移を研究する方法を確立した。今後この方法を用いてさらにさまざまな有機化合物の電子状態、電子遷移の研究を進めるとともに固体の有機化合物、高分子さらにはそれらの超薄膜の研究などにも発展させたいと考えている。



おざき・ゆきひろ

1978年大阪大学大学院理学研究科博士課程修了、1978年9月カナダ国立研究所(NRC) 研究員(Research Associate)、1981年4月東京慈恵会医科大学 助手、1988年4月東京慈恵会医科大学 講師、1989年4月関西学院大学 助教授(理学部)、1993年4月関西学院大学 教授(理学部)、2001年4月学部改変により関西学院大学教授(理工学部)。
〔専門〕分子分光学(特に振動分光学と遠紫外分光学)
ozaki@kwansei.ac.jp
<http://sci-tech.ksc.kwansei.ac.jp/~ozaki/>

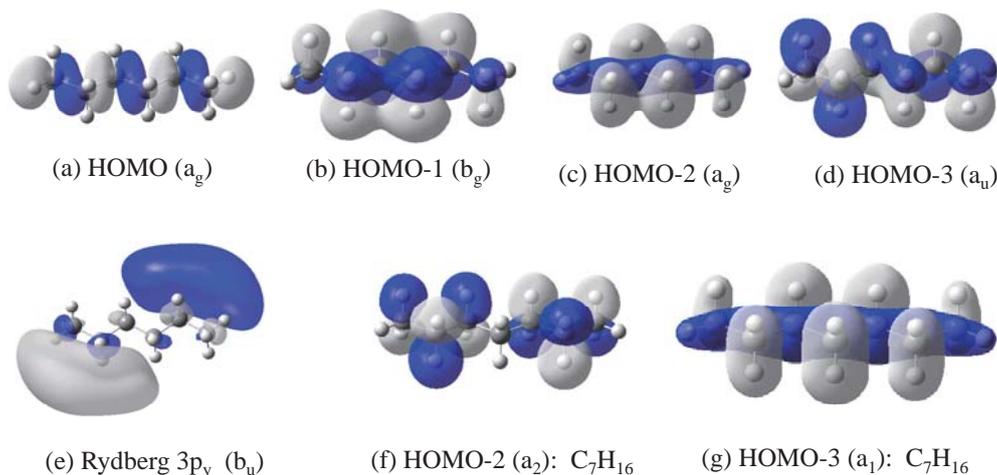


図2 アルカンの電子遷移に関連する重要な分子軌道

参考文献

- [1] Y. Morisawa, S. Tachibana, M. Ehara, Y. Ozaki, "Elucidating Electronic Transitions from σ Orbitals of Liquid n- and Branched Alkanes by Far-ultraviolet Spectroscopy and Quantum Chemical Calculations", *J. Phys. Chem. A* **116**, 11957-11964 (2012).

共同利用研究ハイライト

正方形の古細菌が持つ光受容タンパク質の 特徴的な構造変化

須藤 雄気 名古屋大学大学院理学研究科 准教授

1. はじめに

可視光は、生物にとって第一義的に重要なエネルギー源であり情報源である。生物は、その光を有効に利用するため、様々な可視光受容タンパク質分子を発達させてきた。ビタミンAのアルデヒド型であるレチナルを発色団とする7回膜貫通型光受容タンパク質は、総称してレチナルタンパク質と呼ばれる。10年ほど前までは、比較的限られた生物種のみが持つ稀なタンパク質であると考えられてきたが、現在では生物の三大ドメイン（古細菌、真正細菌、真核生物）に万を超える分子の存在が確認されている^[1]。

これらレチナルタンパク質の光反応は、約100フェムト秒で起こるレチナルのトランス \leftrightarrow シス異性化という“共通のイベント”により開始される。一方、最終的な生理機能は“多様”であり、イオン輸送体としてエネルギー産生に関わるだけでなく、光センサーとして情報伝達を司る^[2]。私達は、様々なテクニックを駆使して、微生物型レチナルタンパク質の単離・同定と機能発現機構の理解を目指した研究を行っており^[1,2]、最近では、分子科学に立脚した光操作ツール開発も行っている^[3]。本稿では、その過程で発見した新規分子・ミドルロドプシン（MR）の構造変化を、時間分解赤外分光法により明らかにした結果について述べる^[4]。

2. ミドルロドプシン（MR）

我々は、「多種多様なロドプシン分子がどのように生まれて（進化して）きたのか？」について興味を持っている。も

し、2つのレチナルタンパク質に進化的な関係があれば、変異導入により互いの機能変換が可能なのではないかと考え、機能が異なる2つの分子、バクテリオロドプシン（BR：光駆動プロトンポンプ）とセンサーロドプシンII（SRII：青色光センサー）に着目した。高感度pH電極による測定の結果、SRIIには弱いながらもBRと同様のプロトン輸送能が備わっていること、BRからSRII様センサーへの変換は、3つのアミノ酸の置換により実現できること^[6]がわかった。この研究により、両者の進化的関連性が示唆され、わずか3箇所のアミノ酸置換で機能変換が可能であることが明らかとなった。一方で、両者で変化した性質は実質的に機能のみであり、他の異なる性質（光反応、吸収極大波長など）は、変化しな

かった。そのため、機能以外の性質がどのように変化していったのかは不明であった。

そこで、次にBRとSRIIの分子系統樹で中間に位置する分子（ミドルロドプシン、MRと命名）に着目した（図1A）。この分子の遺伝子を正方形をした古細菌・*H. walsbyi*から単離し、大腸菌での組み換え体として発現させ、その性質を主に分光学的に検討した^[7]。その結果、MRの光反応はBR型、吸収波長（色）はSRII型であることがわかり（図1B）、BR \rightarrow SRIIへの分子進化の過程で、まず色が大きく変わり、その後センサー能を獲得するとともに光反応（特にその速度）が大きく変化したことを考察した^[7]。

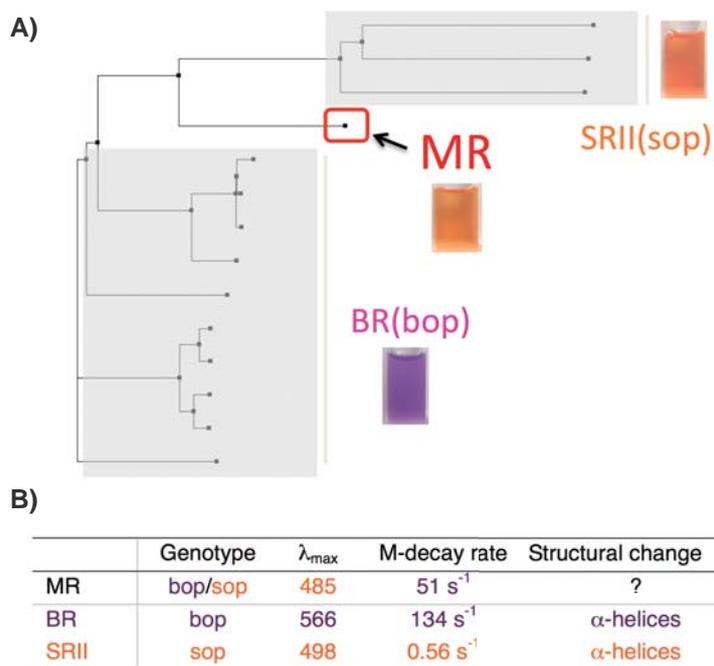


図1 A) BR, SRIIとMRの分子系統樹。B)分光学的性質の比較。

3. 時間分解赤外分光法による構造変化解析

生命・錯体分子科学研究領域・古谷祐詞准教授と我々は、これまでにBRとSRIIの光誘起差赤外スペクトルを取得することに成功しており、両者で特徴的な分子構造の変化をアミノ酸側鎖レベルで明らかにしてきた^[8-10]。本研究ではこれまで培ってきた手法をMRに適用し、構造変化はBR型なのか、あるいはSRII型なのかを検討した。BRにおいては、天然膜に高度に濃縮発現している特性から、時間分解分光解析が精力的に行われ、タンパク質内部の水

分子を含めた微細構造が明らかになっている。一方、他の微生物型ロドプシンでは赤外差スペクトルが微弱であること、試料調製の難しさなどから解析が進んでいない。我々は、MRの界面活性剤中での精製条件、及び脂質への再構成条件を詳細に検討するとともに、古谷グループの持つ高精度の赤外分光装置と計測法により、高いS/N比での測定に成功した(図2)。得られた振動モードの帰属は、タンパク質部分やレチナル発色団に¹³C安定同位体を導入し、そのスペクトルとの比較から慎重に行った。その結果、光励起後95 μ s

で、 β シートに(レチナルの変化と比較して)大きな構造変化が起こることを見出した(図2)。この変化は、BRやSRIIではどの時間領域でもみられないMRに特徴的なものであった。これまで構造が明らかになっているレチナルタンパク質の構造は、互によく似ており、共通して細胞外に β シートを持つ。そのため、レチナルと大きく離れたこの部位が、早い時間領域で大きく構造変化を起こすと推察した(図2)。

4. おわりに

このように、MRの構造変化は、当初、BRとSRIIのどちらかに類似したものとして予想していたが、そのいずれでもない特徴的なものであることが明らかとなった。MRは、既存のレチナルタンパク質の機能(イオン輸送能^[3]、光センサー能^[6]、転写調節能^[11])を示さないため、全く新しい生理機能を持つと考えられる。今回見出した変化は、その独特の機能と関係しているのかもしれない。最後に、本研究にご協力頂きました神戸薬科大学・和田昭盛博士、沖津貴志博士、大阪大学・水谷泰久博士、水野操博士に心から感謝いたします。

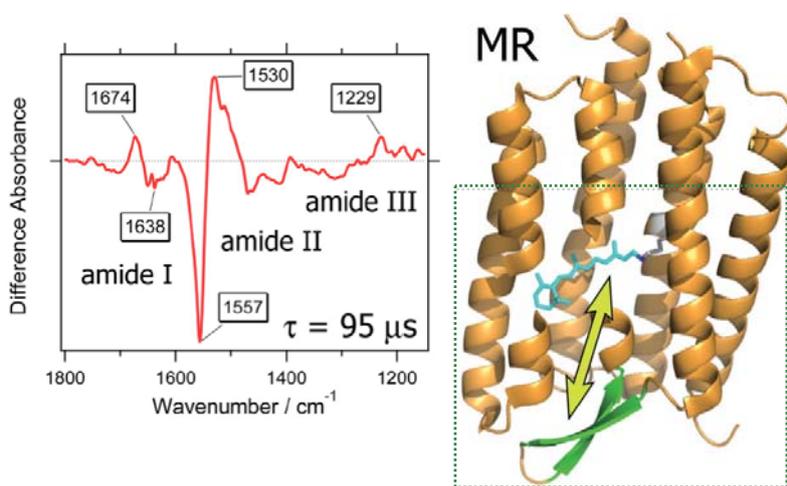


図2 MRに特徴的な β シートの構造変化。 β シートの振動数に対応するアミドI、アミドII、アミドIIIの変化が観測された(左)。この変化は、BRの結晶構造をもとに、細胞外側の β シートの構造変化によるものと推察した(右)。

参考文献

- [1] Y. Sudo, *CRC Handbook of Org. Photochem. Photobiol.* **2011**, pp1173.
- [2] Y. Sudo, M. Homma, *薬学雑誌*, **2012**, 132, 407.
- [3] Y. Sudo, A. Okazaki, H. Ono, J. Yagasaki, S. Sugo, M. Kamiya, L. Reissig, K. Inoue, K. Ihara, H. Kandori, S. Takagi, S. Hayashi, *J. Biol. Chem.*, **2013**, 288, 20624.
- [4] Y. Furutani, T. Okitsu, L. Reissig, M. Mizuno, M. Homma, A. Wada, Y. Mizutani, Y. Sudo, *J. Phys. Chem. B*, **2013**, 117, 3449.
- [5] Y. Sudo, M. Iwamoto, K. Shimono, M. Sumi, N. Kamo, *Biophys. J.*, **2001** 80, 916-922.
- [6] Y. Sudo, J.L. Spudich, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **2006**, 103, 16129.
- [7] Y. Sudo, K. Ihara, S. Kobayashi, D. Suzuki, H. Irieda, T. Kikukawa, H. Kandori, M. Homma, *J. Biol. Chem.*, **2011**, 286, 5967.
- [8] Y. Furutani, M. Shibata, H. Kandori, *Photochem. Photobiol. Sci.*, **2005**, 4, 661.
- [9] Y. Sudo, Y. Furutani, A. Wada, M. Ito, N. Kamo, H. Kandori, *J. Am. Chem. Soc.*, **2005**, 127, 16036.
- [10] Y. Sudo, Y. Furutani, J.L. Spudich, H. Kandori, *J. Biol. Chem.*, **2007**, 282, 15550.
- [11] H. Irieda, T. Morita, K. Maki, M. Homma, H. Aiba, Y. Sudo, *J. Biol. Chem.*, **2012**, 287, 32485.



すどう・ゆうき

1977年神奈川県生まれ。2000年北海道大学薬学部卒業。2005年同博士課程修了(うち2年間は奈良先端大特別研究学生)。2005年名古屋工業大学・ポスドク、2005-2007年テキサス大学ヒューストン校・ポスドクを経て、2007年名古屋大学大学院理学研究科・助教。2009年より現職。2008-2012年JSTさきがけ研究員兼任。専門は生物物理学、光生物学。

施設だより

計算科学研究センター 高性能分子シミュレータの更新 (2013年2月)

計算科学研究センター長 齊藤 真司

5年ぶりに高性能分子シミュレータ(通称、汎用コン)を更新し、今年3月から運用を開始した。今回導入したシステムは、演算サーバ(富士通製PRIMERGY CX250 S1 5888コア)、外部磁気ディスク(富士通製ETERNUS DX80 S2 実効容量1.8PB)、運用管理クラスタ(富士通製PRIMERGY RX200 S7 16ノード)などから構成されている。外部磁気ディスクは、ホームディレクトリーだけでなく、短期保存ディスク等にも運用されている。ファイルシステムは「京コンピュータ」にも使われているものであるが、計算科学研究センターの運用ではファイルアクセスが遅いことが顕在化しており、現在、その対策を行っている。運用管理クラスタは仮想化のホストサーバで、計算科学研究センターのウェブサーバなどのセンター用途のサーバだけでなく、共同利用申請システムや研究会ユーザー登録システムなど分子科学研究所向けのサービスを行うためのサーバも稼働させている。

また、今回の調達では、耐用年数が

過ぎていた冷却設備の更新と汎用コンシステムの更新が同時期であったため、計算性能だけでなく冷却設備や電気料金も含めたものが最適となるように調達を行った。その結果、空調パッケージの台数を減らすことも可能となった。

さらに、昨年2月に更新した超高速分子シミュレータ(通称、スパコン)の一部更新も行った。高速I/O演算サーバをUV1000からUV2000というモデルに更新し、CPUがSandy Bridge系への更新を行うとともに、コア数も576から1024に増強した。また、クラスタ演算サーバは、全てのノードを8GB/コアへと搭載メモリーの増強を行った。汎用コンとスパコンのクラスタマシンはCPUが同一で速度差がないために、全体として11360コアの大きなシステムとして同一キューによるシームレスな運用を行っている。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・同時利用者数が上がり、CPU待ちの状態のジョブも多くなってきた。比較的使いやすく演算性能の高いシステム(クラスタだけでも0.26

Peta flops、全体では0.33 Peta Flops)である。CPUが必要な際には是非ご利用頂きたい。

なお、ユーザーの計算処理に対する欲求はとどまるところを知らない。最高速の計算機でも4年5年も経てば、研究室にある普通のマシンよりも遅くなりユーザー離れが見られる。そこで、2014年9月には、演算サーバのCPUの更新を行い、処理能力のさらなる向上を進める予定である。



Primergy CX250



UV2000

分子科学の発展・深化を使命とする研究拠点である分子研の役割を体現する上で、先端的研究施設群を整備して広く国内研究者との（今後は国外とも）協力・連携を強力に推進することは不可欠である。比較的汎用性の高い装置群の管理は、機器センターが集中的かつ経常的に担当することとなった。現在、JEOL JNM-ECA920型超高磁場NMRやBruker E680型ESRを始めとする磁気共鳴装置群の充実に力を注いでいる。その取り組みの一環として、理化学研究所と協定を結んで、同研究所横浜キャンパスに設置されていた高磁場NMR装置2台を本年度より分子研に移設して、共同利用に供することとした。以下に本装置の概要を説明する。

このたび山手4号館1階102室に設置されたBruker AVANCE800型NMR装置は、18.79 Tのシールド型マグネットに、 ^1H - ^{13}C - ^{15}N 三重共鳴インバースプローブであるTCI型クライオプローブを実装している。これにより、 ^1H の共鳴周波数800 MHzでの超高感度溶液NMR計測を行うことができる。

超伝導コイルの周囲は、液体ヘリウムを真空ポンプで減圧することで約2 Kに保たれている。通常運転時および液体ヘリウム充填時に生じるヘリウムガスは回収ラインを通して回収される。また、液体窒素は再凝縮装置により維持される。

TCI型クライオプローブは低温下に保たれた ^1H および ^{13}C プリアンプを搭載し、 ^1H 、 ^{13}C の高感度測定に最適化されている。実測した感度(S/N)は、それぞれおよそ8,800 (^1H , 0.1%エチルベンゼン) および1,900 (^{13}C , ASTM) であり、特に ^1H の感度は通常プローブを使用した場合(2,100)と比較して4

倍以上向上した。そのため、分子研の従来設備では計測困難であった低溶解性の生体分子複合体をはじめ、不安定化合物あるいは貴重な微量試料に対しても高分解能測定を実現することが期待できる。測定には一般的な直径5 mmのサンプルチューブを使用する。また、測定温度は 5°C ~ 75°C の範囲で制御可能である。ソフトウェアはTopSpin2.1である。



クライオプローブを実装した
Bruker AVANCE 800型NMR装置

一方、明大寺実験棟1階119室に設置されたBruker AVANCE 600型NMR装置は、14.1 Tのシールド型マグネットを有し、周辺機器の切り替えにより、 ^1H 共鳴周波数600 MHzでの溶液・固体NMRの双方の測定が可能である。溶液NMRでは試料管外径5 mmの ^1H - ^{13}C - ^{15}N の三重共鳴インバースプローブ、一方、固体NMRでは試料管外径2.5 mmの ^1H - ^{13}C - ^{15}N 三重共鳴 magic angle spinning (MAS) プローブを、各々実装している。また、800 MHz NMR同様、通常運転時、および液体ヘリウム充填時に生じるヘリウムガスは回収ラインを通して回収され、液体窒素は再凝縮

装置により維持される。また、溶液および固体NMRでの測定温度は、各々、 -50°C ~ 80°C 、および -30°C ~ 80°C の範囲で制御可能である。ソフトウェアは、800 MHz NMR同様にTopSpin2.1である。

特に本固体NMRプローブでは、小径コイルを採用しているため、各核種で高出力ラジオ波照射が可能である。また、15 μl 程度の少ない試料で、35 kHzまでの高速試料回転が可能である。このため、分子研の従来設備では不可能であった高速試料回転、高出力ラジオ波照射を必須とする先端的な固体NMR実験が可能となり、高感度、高分解能の計測を実現できると期待される。



Bruker AVANCE 600型溶液・固体NMR装置

上記の2つのNMR装置は、ナノテクノロジープラットフォーム事業の一環として、施設利用または共同研究に供される予定である（詳細はホームページ<http://nanoims.ims.ac.jp/ims/>に記載予定）。多くの所外研究者の方々にご利用頂き、分子科学の発展・深化に貢献できれば幸いである。

次世代バイオサイエンスに対する岡崎統合バイオサイエンスセンターの取り組み

岡崎統合バイオサイエンスセンター長 池田 一裕

現在、バイオサイエンス(生命科学)は大きなターニングポイントを迎えている。人類は昔から生命とは何か? われわれはどのような仕組みで生きているのか? という疑問をずっと持ち続けてきた(に違いない!)。生物は細胞と言う単位からできており、最小の生命は細胞であることが分かっていても生命の謎は全く解けなかった。まず、細胞がどのような分子からできているのか、を知るのが先決であったが、1900年代半ばまでは蛋白質、核酸という水溶性巨大分子の取り扱いができなかった。そこで、有機溶媒で抽出可能な低分子化合物の構造決定が盛んに行われて、然るべき成果を挙げてきたが、蛋白質、核酸を抜きにして生命の本質に迫ることは不可能であることは皆さんのご存知のとおりである。

しかし、ゲルろ過やDEAEセルロースクロマトグラフィーなどの開発により、われわれは蛋白質を扱えるようになり、またゲル電気泳動法の開発により核酸も扱えるようになった。私も1970年代から80年はじめまで蛋白質を精製していたが、蛋白質を取り扱えるようになったとはいえ、何年間もかけて一つの蛋白質を単一にまで精製するのがやっとであった。しかも、それができるのは細胞内で圧倒的に存在量の多い蛋白質だけである。私は核酸合成系の酵素を精製しようとしていたが、5年かけて、結局部分精製しかできなかった。私は大阪大学蛋白質研究所でこの研究をしていたので、当時最新の機器が

揃っていたのに、である(今でも良い研究所だが、1970年代は蛋白質研究のメッカだった、と思う)。また、精製したとしても大量にないと意味がなかった。というのも蛋白質をペプチドに分解・精製し、それらの構造をエドマン分解でN-端から順番に決めていくのだが、大量の精製品が必要で、いったいどれだけの蛋白質の全構造が決まったのだろうか?

しかし、エドマン分解が開発されたから良かったものの、それ以前は円偏光二色性を利用して、精製蛋白質の α ヘリックス含量は何%という情報それと酸加水分解からのアミノ酸組成比くらいしか引き出せなかった。

1970年代後半からcDNAクローニングとDNA塩基配列の決定法(Sanger法とMaxam Gilbert法)が開発され、蛋白質のアミノ酸配列はDNA配列として決定されるようになり、飛躍的に構造決定が早くなった。さらに、cDNAから組換え蛋白質が作られるようになり、蛋白質の高次構造を決定するための材料取りもかなり容易になった。このような革新的技術の開発を伴って生命科学は大きな転換期を迎えた。この流れの延長で2000年ごろにヒトをはじめ多くの生物の全ゲノム情報解読が行われ、ヒトなどの全遺伝子数が推定された。私はヒト遺伝子数は100万はあると思っていたのに、意外と少なく3-5万程度ということが分かった。遺伝子数がこの程度だと全遺伝子産物を単離・構造決定(1次構造では

なく高次構造)するのが可能ということになり、各国でブルドーザー作戦が展開された。また、遺伝子ノックアウト技術も1990年代から用いられるようになっていたが、全てのマウス遺伝子を一つ一つ潰してやろうという意欲的(何も考えていないが)な試みも開始されて、今も続いている。しかし、この流れで全ての遺伝子の解析が終わった時、果たして生命が理解できるだろうか? これを自動車に例えるなら、自動車の部品をすべて単離して、どのような形をしているのか理解して、それをつぶしたら自動車の動く仕組みが解明できるだろうか? ということになり、「ハンドルを自動車からはずしたら曲がることができなかった」ということを全ての部品で行なっているのが現状である。この流れの研究に意味はあるけれど、生命の本質には迫れないだろう。

ではどうしたら良いか? これが現時点の生命科学のこわいところである。今まで生命科学研究で研究の種のつきることはなかった。しかしこと蛋白質を精製していたころは精製する蛋白質のなくなることがなかった! しかし、今全遺伝子産物の網羅的解析が終わろうとしている!

今まで何度となく革新的技術が現れてきたのに、次の革新的技術が出てきていないのである。これはまるで大航海時代の終焉とよく似ている。沿岸をちよろちよろ航海していたころは世界の大きさは無限にあると思っていたのに違いない。それが

大航海ができるようになり、新大陸を発見したころはどんどん領土を拡大するぞ、と船乗りは大きな夢を抱いていただろう。しかし、世界は地球であって、地球の全ての地図がかかる時代が到来した訳である。

岡崎統合バイオサイエンスセンターもこの現状に危機感を覚えており、設立10周年にあたる2010年から次世代のバイオサイエンスはどのようにあるべきか議論を重ねてきた。3研究所長をはじめ9人の委員で「統合バイオ在り方検討会」を組織し、2年間検討した。統合バイオはもともと分子科学、基礎生物学、生理学などの学際領域にまたがる諸問題に対し、総合的な観点と方法論を適用し、新しいバイオサイエンスを切り開くことを目的として、2000年4月に設立された。当時のバイオサイエンスを先取りして、時系列生命現象、戦略的方法論、生命環境の3つの研究領域から構成された。しかし、この遺伝子の航海時代の終焉に対応するためには大きく研究領域の変換を行う必要があった。前述したように、一つ一つの蛋白質の性質はかなり理解できたので、やはり次はそれらが複合体を作ったどの様に性質（構造や機能）が変化するかを基本において研究を進めるべきだとの基本姿勢で下記の3つの新研究領域が組織された。



いけなか・かずひろ

生理学研究所教授、統合バイオサイエンスセンター センター長、生理学研究所行動・代謝分子解析センター センター長、国立大学法人総合研究大学院大学生命科学研究科生理科学専攻・教授。大阪大学理学部卒、同大学院理学研究科修了、理学博士。大阪大学蛋白質研究所助手、助教授を経て、平成4年11月から生理学研究所教授。

1) 生命動秩序形成研究領域

- ・生命素子が自律的に柔軟かつロバストな高次秩序系を創発する仕組みを理解する。
- ・生命機能分子や細胞などに関して蓄積されつつある一次情報を多階層的に捉えることにより、新たに見えてくる生命システムの非線形性に着目し、生命システムのもつ頑強性や可塑性に対する理解を深める。

2) 生命時空間設計研究領域

- ・分子から個体の集団に渡るさまざまな生命現象において、固有の時間周期の構築や個々の現象の起きるタイミングと速度の規定に関わるメカニズムの解明を目指す。
- ・分子集合から組織、個体に渡るさまざまな階層において、それらの大きさや空間内での位置、空間的パターンを規定するメカニズムの解明を目指す。

3) バイオセンシング研究領域

- ・生物個体の細胞環境刺激センシング機構をセンサー分子に焦点をあて解明する。(センシング情報の統合機構の解析による個体応答の解明までも含める。)
- ・幅広い生物種のセンシング研究、センサーやセンシング機構の進化における変化の解析からセンシング機能の本質の理解を目指す。

この3つの研究領域では「パーツから全体へ」を目指し、できれば革新的な技術を創出しながら、次世代のバイオサイエンスの姿をつかめるように努力する予定である。当然統合バイオ専任の教員だけではこのように壮大な計画は遂行できない(?)ので、分子研をはじめ岡崎3研究所の研究者の協力も頂戴しながら進めていく所存である。

協力をして頂くためには軍資金も必要なので、3研究所および新分野創成センターの研究者に対して公募研究を7月中には開始する。このレターズが刊行されるころには公募研究の選択も終わり、生命解明に向けて多くの力が注がれていることであろう。今われわれは生命科学は永遠に続く学問であると思っている。しかし、ヒト全ゲノム情報が明らかになったように生命の謎も解き明かされる時がきっと近いうちに来るに違いない。その後には何がバイオサイエンスのテーマになるのだろうか? 定年まで20年以上ある人は是非この問題を真摯に考えて欲しい。大航海時代の後は先進国による植民地の場所争いがおきたが、このようなことがバイオサイエンスの将来には起きないことを願うばかりである。

共同利用・共同研究に関わる各種お知らせ

共同研究専門委員会よりお知らせ

共同研究専門委員会では、分子科学研究所が公募している課題研究、協力研究、分子研研究会、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。ここでは分子研研究会に「ミニ国際シンポジウム」の категорияが新たに設けられたことを紹介したいと思います。「ミニ国際シンポジウム」は、「アジア連携分子研研究会」と「岡崎コンファレンス」の中間的な位置づけの研究会です。「アジア連携分子研研究会」では、海外からの参加者についてはアジア地区の研究者に限られていましたが、「ミニ国際シンポジウム」では欧米からの参加者も含めることができます。ただし現時点では、欧米からの参加者については、原則的に国内旅費と滞在費のみの支給となっています。したがって、国内で開催される国際会議に来日している研究者を招へいし、その国際会議とは異なる切り口での研究会を開催する、あるいは他の予算で来日している研究者を招へいするといった状況を想定しています。

共同研究の現状について、平成19年度から平成25年度前期（平成25年6月10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年度の協力研究、分子研研究会の件数は、やや増加傾向にありましたが、平成25年度前期分の協力研究の件数がやや少なめであるのが気になります。協力研究、分子研研究会は随時申請も受け付けておりますので、積極的に申請頂ければ幸いです。

前回の本欄でもお知らせしたように、現在共同利用研究の申請は、すべてWebシステムを利用した電子申請に全面的に移行しています。電子申請システムについて、これまでにいくつかのコメントを頂いていますが、頂いたコメントには可能な限り対応しています。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	平成25年度 (6月10日現在)
課題研究	2	2	1	0	1	1	2
協力研究	91	90	119	122	108	123	32
分子研研究会	9	4	5	6	4	10	4
若手研究会等	—	1	1	1	1	1	1
岡崎コンファレンス	—	—	—	—	—	1	0
計	102	97	126	129	114	136	39

分子研研究会

※6月15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25年1月18日～21日	Japan-China Joint Symposium on Functional Supramolecular Architectures	前田 大光（立命館大学薬学部）	48名
平成25年2月5日～6日	生体配位科学の最前線と展望	伊藤 忍（大阪大学大学院工学研究科）	38名
平成25年2月12日～13日	先端的レーザー分光技術による分子科学の新展開	大島 康裕（分子科学研究所）	40名
平成25年3月13日～14日	金属錯体機能の根源を探る～分子構造とその変化様式の探求最前線	村橋 哲郎（分子科学研究所）	38名
平成25年4月4日～6日	レーザーフィラメンテーション技術の基礎と応用	寺嶋 亨（九州大学大学院理学研究院）	52名
平成25年5月25日～26日	分子ダイナミクスの階層性—超高速分光から—分子測定	齊藤 真司（分子科学研究所）	60名
平成25年6月14日～15日	日中合同若手シンポジウム—革新的配位材料	上野 隆史（東京工業大学大学院生命理工学研究科）	42名

COLUMN

「おかしん先端科学奨学金制度」について

中村 豪

総合研究大学院大学物理科学研究科構造分子科学専攻
5年一貫制博士課程4年

なかむら・ごう

2010年岡山大学理学部化学科卒業、2012年同大学院自然科学研究科博士前期課程修了後、総合研究大学院大学物理科学研究科3年次編入。生命・錯体分子科学研究領域の正岡グループにて、金属錯体による二酸化炭素の多電子還元反応について研究を行っている。



「おかしん先端科学奨学金制度」創設記念式（前列の右端が筆者）

総合研究大学院大学 構造分子科学専攻 5年一貫制博士課程4年の中村と申します。このたび、おかしん先端科学奨学金制度の奨学生に採択して頂きました。本奨学金制度は2012年10月、総研大3年生を対象に自然科学研究機構のうち愛知県岡崎市に所在する3研究所（分子科学研究所・基礎生物学研究所・生理学研究所）で、岡崎信用金庫から受入れる寄附金を原資に設けられました。各研究所から1人、合計3人のおかしん先端科学奨学生には年間110万円が支給されます。

総研大の博士課程に進学するまでは、岡山大学自然科学研究科で研究しておりました。当時私は、修士課程修了後は企業での研究職を志望していましたが、就職活動をしているとき、企業で活躍し、よりよく仕事をこなすためには、独立して研究しながら自ら問題を解決できる能力が必要であると考え、進学することに決めました。3年次編入試験を経て、昨年の4月から、錯体物性研究部門 正岡グループに所属しております。新たな環境に慣れ、研究が進みだした8月末に、岡崎信用金庫による奨学金制度が新設されると伺いました。それまでは日本学生支援機構の奨学金を借りて生活していたため、もし採用されれば経済的な負担がとて軽くなると考え、応募することに致しました。

採用試験では、「P-N型配位子を用いた可視光吸収可能な錯体型還元触媒の構築」というテーマで研究成果および今後の展望について発表しました。現代社会は再利用不可能な化石燃料に依存しており、枯渇の恐れや化石燃料の消費に伴う二酸化炭素発生に由来する地球温暖化が懸念されています。このことから、太陽から半永久的に供給される光エネルギーを利用し、アルコールなどの燃料分子を作り出す人工光合成システムの開発は、地球の環境・エネルギー問題解決のための重要な研究課題です。その鍵となる反応の一つである二酸化炭素の光化学的／電気化学的多電子還元は、一酸化炭素、ギ酸、ホルムアルデヒド、メタノールなどの様々な物質の生成が考えられ、それらの選択的合成は困難とされています。P-N型配位子は反応調節・選択性への優位性に加え、還元触媒能の向上、光反応の効率化に優れていると考えられており、この配位子を用いて錯体型光還元触媒を設計しました。これまでに、目的とする錯体触媒の二種類の構造異性体（cis型・trans型）を反応温度の制御により選択的に合成できることを見出しました。単離した2つの異性体間で酸化還元特性、および分光・電気化学的性質が大きく変化し、その相関の解明に成功しました。両異性体と

もに二酸化炭素の還元能力を有することを確認し、P原子の導入が基質である二酸化炭素の捕捉に対して優位にはたらくことを実証しました。これまでは2電子還元体である一酸化炭素とギ酸しか効率的な生成が達成されていませんが、二酸化炭素補足の優位性を示した本研究成果によって、ホルムアルデヒドやメタノールといった多電子還元体生成の足がかりになると期待しています。そのため今後は、構造制御による触媒機能の調節や、中心金属の選択による触媒機能の調節を行い、二酸化炭素還元反応の効率化や選択性の向上を目指して行きたいと思えます。植物から独立した光エネルギー変換システムである人工光合成実現のための基礎研究として多大な波及効果があると考えられます。

奨学生として採用された後、2013年2月28日に岡崎信用金庫本部で執り行われた奨学金創設記念式典に出席しました。そこでは記者からインタビューを受け、その内容が、東海愛知新聞（3月1日付）、中日新聞（3月6日付）に載りました。記事のコピーを大学院係から頂いたとき、おかしん先端科学奨学生としての責任を強く感じました。特に、中日新聞から「岡崎からノーベル賞を」という見出しで記事になっており、世界を代表する研究者を目指す意気込みが湧きまし

た。これからも、総研大生、分子研研究員、そしておかしん先端科学奨学生として分子科学の発展に貢献できるような研究を続け、研究成果を岡崎の地から世界へ次々に発信できるよう精進していく所存でございます。

実は、応募するまで岡崎については分子研のことしか知らず、岡崎信用金庫が日本で第3位の規模を誇る“メガ信金”であることを後ほど知りました。岡崎のことを全くわかっていないと痛感し、最近は岡崎の活動にできるだけ参加することにしています。そこで、大学生のときに打楽器を演奏した

経験があったので、市民オーケストラである岡崎フィルハーモニー管弦楽団に入団し、月に2回程度、岩津にある公民館で練習しています。毎年2回演奏会を主催しており、今回は2014年1月19日（日）の予定です（会場はお隣幸田町の町民会館です）。研究生活の羽休めにクラシック音楽を楽しんでみるのはいかがでしょうか。また、岡崎や分子研の良さを知っていただくために、昨年度から研究室のメンバーと一緒に研究室Twitter、そしてfacebookページの運営を始めました。オープンキャンパスに来た学生から「Twitterやっ

ています。いつもつぶやきを見ています！」と聞いたときは、学生とのつながりを実感することができ、嬉しく思いました。今年の4月末に、中村敏和先生が中心となって分子科学研究所のfacebookページを立ち上げられ、私も僭越ながらページの管理人として参加しております。日々のプレスリリースをはじめ、分子研の近況について掲載しています。

最後になりましたが、岡崎信用金庫、大学院系の皆様にご場を借りて厚く御礼申し上げます。ありがとうございました。

E V E N T R E P O R T

教員報告 平成25年度前期学生セミナー

物理科学研究科機能分子科学専攻 5年一貫制博士課程2年 岡部 佑紀

2013年度の学生セミナーは4月8、9日の二日間にわたって行われた。この期間中の葉山は風こそ強かったものの晴天に恵まれ、富士山と相模湾が映える絶好のセミナー日和となった。入学式後、休憩も無いままいきなり連れ出され、会場へと案内された新入生達だったが、セッションが進むにつれ学

生間でだいぶ打ち解けていったようだった。それぞれのセッションは、直前の綿密なりハーサルのおかげで思いのほかすんなりと進んでいたと思う。特に「1円玉を様々な視点から捉え、その価値観を共有することで他専攻を知る意味について考える」というコンセプトの1円玉ワークショップでは、新

生同士でしっかりと議論が交わせるかという不安要素があった。しかし私たちの心配をよそに、本番では予想外の盛り上がりを見せ、良い意味で私たちの期待を裏切ってくれた。また、総研大の各専攻の先生方に参加して頂くことで会場がさらに活気づき、良い雰囲気を保つ事ができたため、新入生やセミナー委員にとっても非常に濃密で意味のある時間を過ごす事ができたと思う。1年間という非常に長い準備期間をこの2日間に詰め込み、無我夢中のまま過ぎてしまった学生セミナーだったが、無事に成功で終わる事ができた。最後になりましたが、各基盤機関に籠っていただけなかった仲間達との貴重な経験を与えてくださった学融合推進センターの岩瀬先生、奥本先生をはじめ、学生セミナーに携わった全ての方々に御礼申し上げます。



1円玉ワークショップの様子

生同士でしっかりと議論が交わせるかという不安要素があった。しかし私たちの心配をよそに、本番では予想外の盛り上がりを見せ、良い意味で私たちの期待を裏切ってくれた。また、総研大の各専攻の先生方に参加して頂くことで会場が

Yuki Okabe

東海大学理学部化学科を卒業後、平成24年に総合研究大学院大学物理科学研究科機能分子科学専攻へ入学。協奏分子システム研究センター櫻井グループにて、バッキーボウルを用いた材料科学への展開に取り組んでいる。



担当教員 オープンキャンパス2013

2013年度担当教員 極端紫外光研究施設 准教授 木村 真一

2013年6月1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15名、大学院生29名、ポストドク以上の大学関係者3名、教員・民間等3名であり、合計50名(このほか分子研シンポのみの参加者が4名)で昨年度より若干減少した。当日は12:45より岡崎コンフェレンスセンター中会議室で、著者、横山教授、青野教授、大峯所長の順番でオープンキャンパス、総研大、共同利用、および分子研の説明を行い、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。幸い雨もふらず、天気には恵まれた一日であった。アンケートの回収率は昨年より良く37%であった。参加情報の入手先は先生からの紹介54%、ポスター19%、ホームページ23%となっており、例年と同じく大学における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50%と低かった一方で、総研大をよく知っていたのは昨年度の11%から30%へとジャンプアップしており、徐々にではあるが知名度が向上していると感じた。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。



担当教員 分子研シンポジウム2013

2013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 平等拓範

分子研シンポジウムが平成25年5月31日(金)午後から6月1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7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7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)。

森田 明弘(東北大学)「分子シミュレーションによる溶液界面化学の新展開」

伊藤 肇(北海道大学)「金イソシアニド錯体の結晶構造と発光特性:分子ドミノ」

小江 誠司(九州大学)「水素からの電子抽出」

奥村 剛(お茶の水女子大学)「レーザー多次元分光理論から印象派物理学への道」

菱川 明栄(名古屋大学)「数サイクル強レーザーパルスによる超高速反応イメージング」

西原 康師(岡山大学)「クロスカップリング反応を用いるフェナセン型分子の合成と物性」

松井 敏高(東北大学)「ヘム代謝の多様な戦略」

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の紹介から、最新の研究の様子、さらには将来展望などをお話いただきました。参加登録者は所外54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16名、修士課程29名、博士課程1名、大学の職員4名、その他4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。総研大や分子研で若く多感な時期を過ごされたお話しなど、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、高度な研究内容を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。また初日の夕方には、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、別の角度からの熱い議論が交わされました。参加者の皆さんには分子科学の多様性ととともに、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かと思えます。お忙しい中、ご協力いただきまし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

望月 建爾 (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)
平成25年度総研大学長賞および第7回わかしゃち奨励賞

2013年初旬に行われた、愛知県主催の若手研究者イノベーション創出奨励事業「第7回わかしゃち奨励賞」において、題目『短時間×低予算の創薬を目指す、シミュレーションによる新規自由エネルギー計算方法の開発』の提案を行い、優秀賞を頂きました。わかしゃち奨励賞は、全国の40歳以下の若手研究者から、愛知県内の企業との共同研究や事業化に繋がる可能性がある研究テーマを募集する事業です。私の提案は、2012年に総研大の海外学生派遣制度を利用し、ケンブリッジ大

学化学科へ留学した時から継続している研究「タンパク質の機能発現メカニズムの解明」の一部に基づいています。

また、2013年4月に、総研大主催の平成25年度(第4回)学長賞を頂きました(課題名『氷の融解過程と水溶液の局所構造に関する理論研究』)。本賞の審査では、シミュレーションを用いた「氷の融解ダイナミクスの分子機構の解明」[K.Mochizuki et al., Nature 2013]と分子研放射光施設の軟X線分光実験と共同で行った「メタノール水溶液の局所構造の解明」につ



いて、発表を行いました。

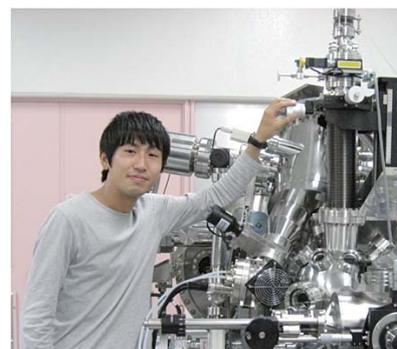
今回、このような栄誉ある賞を頂き、大変光栄に思っております。本研究を支援して下さい、大峯巖所長、小杉信博教授を初め多くの先生方に感謝致します。

江口 敬太郎 (物理科学研究科 機能分子科学専攻 5年一貫制博士課程5年)
平成25年度総研大学長賞

このたび、「表面における磁性ナノ物質の形成および磁気特性に関する研究」に関して平成25年度(第4回)学長賞を頂きました。本賞の審査では、すでに論文として発表している研究[K. Eguchi et al., *Phys. Rev. B* 85, 174415, (2012).]とその後新たに始めました研究について口頭発表・ポスター発表、それから質疑応答を行いました。学長賞は、今回が第4回目ということからも分かりますように、設置から日が浅い賞であり、博士3年と4年の学生のみが応募することができます。2009

年4月に入学した同期の学生が様々な理由で減少していくなか、昨年は同期の学生が受賞しており、今回、私だけでなく他の研究科の同期の学生も受賞されたことは喜ばしく、日本(世界)各地で研究に励んでいる学生と賞を通じて関わることができたことに感謝しています。

今後も、基板表面における磁性ナノ物質の電子状態・スピン状態に関する研究に注力し、受賞の勢いをそのままに学位取得に向けて精進してまいりたいと思います。今回受賞しました研究



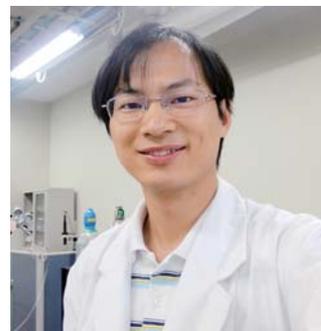
は、横山利彦教授をはじめ、多くの方々にご指導、ご協力いただきました。この場を借りて深く御礼申し上げます。

JIN, Shangbin (物理科学研究科 機能分子科学専攻 5年一貫制博士課程5年)
日本化学会第93回春季年会 学生講演賞

I am proud that I was granted a student presentation award in the 93rd Annual Meeting of the Chemical Society of Japan, held in Ritsumeikan University. Attending the annual meetings is one of my favorite things in my doctorate study, because I can not only get in touch with the frontier area in chemistry but also make new friends.

The title of my presentation was “Construction of Two-Dimensional Donor-Acceptor Covalent Organic Frameworks

and Polymers and Insight into the Electron Transfer Events”. Science on covalent organic frameworks is a new field in chemistry. The topic of my work was the design and synthesis of two-dimensional covalent organic frameworks with new functions. This is a result of the collaboration with other researchers. I feel lucky that I could have a chance to learn such a new area in chemistry because it will give us some new phenomena or



unexpected results. The collaboration is also a process of learning something new, such as new techniques and new knowledge in other areas.

受賞者の声

I was allowed to give a 25 min oral presentation. Even though I gave several presentations before and practiced many times, I still felt a little nervous. Fortunately,

because of the practice before the meeting, I could give my presentation smoothly. I did not think that I could have a chance to get an award after the presentation. After about

two months, I got a mail from the Chemical Society of Japan. When I got the news, I was so excited. This award makes me more confident for the future.

中村 豪 (物理科学研究科 構造分子科学専攻 5年一貫制博士課程4年)

平成25年度総研大学長賞および第2回CSJ化学フェスタ優秀ポスター賞

日本化学会主催の第2回CSJ化学フェスタ(2012年10月14日~17日)において「8-(ジフェニルホスファニル)キノリンを含むルテニウム(II)錯体の合成と酸化還元反応」という題のポスター発表に対して優秀ポスター賞を受賞しました。本フェスタは産学官の交流と化学の社会への発信を目的としており、私の発表においても異なる分野の研究者や企業の方々と議論致しました。専門分野の学会とは違った視点の意見をいただき、大変刺激になったと感じております。企画の一つである「未来を創る最先端研究」セッション

では多彩な触媒技術や太陽光発電について学ぶことができました。また、2013年3月18日に平成25年度(第4回)総合研究大学院大学 学長賞審査発表会があり、「P-N型配位子を用いた錯体型光還元触媒の構築」と題した研究発表について、学長賞を頂きました。審査過程の一つであるポスター発表で、審査していただいた先生のご指摘により、学位研究課題の方向性をより明確にすることができました。2つの名譽ある賞を続けて賜り、大変嬉しく思います。今回の受賞にあたり、研究をご指導いただきました分子研の正岡重行准教授、



近藤美欧助教、岡山大学の鈴木孝義准教授をはじめとする共同研究者の皆様がこの場を借りて厚く御礼申し上げます。今後も研究に一層励んでまいりますので、よろしくお願いします。

岡村 将也 (物理科学研究科 構造分子科学専攻 5年一貫制博士課程3年)

第2回CSJ化学フェスタ優秀ポスター賞

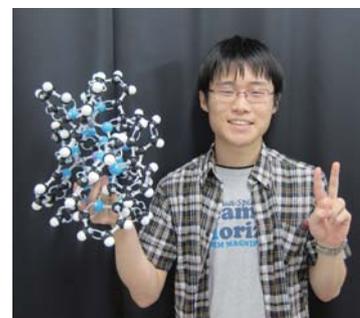
2012年10月に開催された第2回CSJ化学フェスタ2012において、「鉄5核超分子クラスターを用いた革新的な酸素発生触媒の創製」という題目でポスター発表を行い、優秀ポスター賞(2012年11月6日)を受賞いたしました。研究活動において賞を頂いたのは今回が初めてであり、大変嬉しく思います。

酸素発生を促進する触媒の開発は、人工光合成における最重要課題の一つです。しかし、高活性かつ貴金属を使わない分子性触媒の開発は、依然として困難とされています。今回の研究では、安価な鉄を用いた鉄5核錯体を触媒

に用いることにより、酸素発生反応を非常に高い反応速度で実現することに成功しました。人工光合成における大きな前進となることを期待しています。

日本化学会の秋季事業であるCSJ化学フェスタは、他の学会と比べて企業や異分野の方々が多く、様々な分野の方々の発表は、私にとって良い刺激となりました。また、ポスター発表を通して活発な議論を交わすことができ、今後の研究に活かせるものとなりました。

今回の成果は、私一人だけではなく非常に多くの人々に支えられて得られ



たものです。研究や発表方法などの指導して下さった正岡准教授と近藤助教、測定や様々な見識の提供を行なって下さった共同研究者、合成や測定を丁寧に行なって頂いた技術支援員に感謝いたします。これからもこの受賞を励みに、より一層の高みを目指して研究に邁進したいと思います。

村瀬 雅和 (特別共同利用研究員(現在豊田中央研究所研究員))

第2回CSJ化学フェスタ優秀ポスター賞

私は、本学会にて「アルコールを用いた籠型亜鉛錯体による補酵素NAD+モデル還元反応系の構築」というタイトルでポスター発表し、優秀ポスター

賞を頂きました。

本テーマは、近年の厳しいエネルギー事情を打破し、環境と調和した新しいエネルギー源を創造し、重要課題



受賞者の声

の解決の糸口になればという想いのもとスタートしたものです。私の扱う金属錯体は、有機合成化学から錯体化学と幅広い知識と技術が必要なものです。それ故に、乗り越えることが非常に困難な壁もいくつもありました。しかし、だからこそ、失敗を繰り返していくうちに、私は金属錯体にこの重要課題を解決できる可能性を感じていきまし

た。研究を開始してから2年以上経過し、この度、受賞できたことは、諦めずに信じて研究に打ち込んだ成果だと感じています。また、分子科学研究所という優れた人材、設備が整った環境で、先生方、諸先輩のご助言ご協力があったからこそ、今があるものと感じています。

現在は、アカデミックの世界からは

離れ、企業研究所にて、新エネルギー創造のための研究に全力で取り組んでいます。今いる環境は以前と異なっていますが、私の目指すものはいつも一つであり、変わりません。この度の受賞と、それに至るまでの経験を糧として、これからも科学者として、研究活動に邁進していきたいと思っています。

吉田 将己 (特別共同利用研究員)

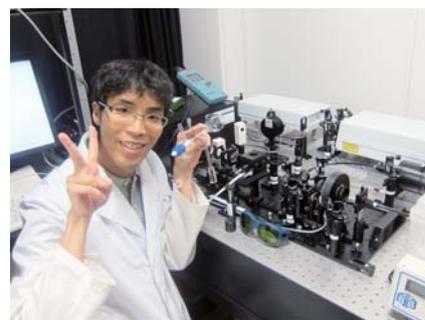
第2回CSJ化学フェスタ優秀ポスター賞

昨年10月14～17日に東京工業大学で行われた第2回CSJ化学フェスタ2012におきまして、「ルテニウム単核錯体を触媒とする水からの酸素発生反応」という題目で優秀ポスター賞をいただきました。

私はこれまで、講演題目にもありますようにルテニウム錯体を用いて水を酸化し、酸素を発生させるという研究を行ってきました。酸素は空気中にたくさん存在するため「なぜ酸素をわざわざ作るのか?」ということはよく聞かれますが、酸素発生は人工光合成を達成し、エネルギー問題を解決するためにとても重要で、かつ難しい反応な

のです。この酸素発生を効率的に行うための触媒を開発し、その反応メカニズムを詳しく解明したのが私の研究です。

この学会が行われた当時、私は博士後期課程3年で、おそらくこれが博士論文提出前の最後の大きな学会になるだろうと予想しました。そこで、この学会で学生生活の集大成としての発表ができるよう心がけました。特に、本学会が産学連携を掲げる学会であったことから、これまで以上に「なぜこのような研究を行うのか?」「短期的・長期的な展望は何か?」という点を重要視しました。その結果、聞きに来て



下さった方々に楽しんでいただき、また賞までいただけたことをとても嬉しく、光栄に思います。

最後になりましたが、この研究を支えてくださった分子研の正岡重行准教授、近藤美欧助教、九州大学の酒井健教授、および後輩の皆様方に深く感謝申し上げます。

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	郭 浩	Investigation of measurement conditions of surface-enhanced infrared absorption spectroscopy and its application to membrane proteins	理 学	H25. 3.27
	三宅 伸一郎	新規高輝度狭帯域レーザーによるコヒーレント分布操作	理 学	H25. 3.27
機能分子科学	石山 仁大	Design of the Energy Structures of Photovoltaic Organic Co-deposited Films by Impurity Doping	理 学	H25. 3.27

総合研究大学院大学平成25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	深津 亜里紗	生命・錯体分子科学研究領域	金属錯体の光励起状態における電気化学的挙動の探究
	深堀 由季乃	生命・錯体分子科学研究領域	窒素を有する金属錯体の酸化還元化学の探究
	劉 柯	生命・錯体分子科学研究領域	多電子移動を触媒する金属クラスターの合成と性能評価
	GAO, Jia	物質分子科学研究領域	二次元高分子の合成と構造物性に関する研究
	正井 航平	協奏分子システム研究センター	不飽和共役ポリエン系不飽和炭化水素類を用いた、パラジウムクラスターの合成と解明
機能分子科学	王 進政	岡崎統合バイオサイエンスセンター	有機合成手法を活用した糖鎖の構造・機能解析

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97回	平成25年5月24日	取材現場から見たサイエンス	尾関章(朝日新聞科学記者) 古田彩(日経サイエンス記者)
第98回	平成25年7月17日	自然界の輝く色の秘密を探る	木下修一(大阪大学大学院生命機能研究科 教授)

■分子研コロキウム

回	開催日時	講演題目	講演者
第844回	平成25年2月15日	Local Coupled-Cluster Methods for Chemical Reaction Pathways Involving Large Molecular Systems	Piotr Piecuch (Michigan State University 教授)
第845回	平成25年4月30日	Interfacing Cold Atoms and Solids	Jozsef Fortagh (University of Tübingen 教授)
第846回	平成25年5月27日	Coherent Multidimensional Spectroscopy of Excitons with Classical and Quantum Light Shaul Mukamel (University of California 教授)	
		Raman Optical Activity of Single Molecules and the Symmetry of "Plasmonic Molecules" Gilad Haran (Weizmann Institute of Science 教授)	
		Making the Molecular Movie": The Chemists' Gedanken Experiment Enters the Lab Frame R. J. Dwayne Miller (University of Hamburg & University of Toronto 教授)	
第847回	平成25年6月21日	Self-Oscillating Polymer Gels as Novel Biomimetic Materials	吉田亮(東京大学大学院工学研究科 教授)
第848回	平成25年7月19日	生体分子システムの階層性：化学反応と運動	高田彰二(京都大学大学院理学研究科 教授)

■人事異動(平成24年11月2日～平成25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
24.11.16	森川美枝子	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		
24.11.16	LIN, Jianbin	辞職		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)	
24.11.15	相澤雅子	辞職		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	
24.11.30	古川貢	辞職	新潟大学 研究推進機構機器分析センター 准教授	物質分子科学研究領域 電子物性研究部門 助教	
24.11.30	石川理沙	辞職	名古屋工業大学 産学官連携センター 特任助教	極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門 研究員	
24.12.1	小野純一	採用	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 研究員(IMS フェロー)		
24.12.1	北辻千展	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	北海道大学大学院 薬学研究院 博士研究員	
24.12.24	DHITAL, Raghu Nath	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		
24.12.31	脇 稔	辞職	岡山大学 助教	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 特任研究員	
24.12.31	竹中健朗	辞職	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 特任研究員	
25.1.17	柳 浩太郎	辞職		岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 研究員	
25.1.31	三浦崇宏	辞職		分子スケールナノサイエンスセンター ナノ分子科学研究部門 技術支援員	
25.2.1	阿部 淳	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		
25.2.1	永園尚代	採用	分子科学研究所 事務支援員		
25.2.20	ARZAKANTSYAN, Mikayel	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		
25.3.1	DALAPATI, Sasanka	採用	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)		

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
25. 3.31	近藤 寛	客員了	(慶應義塾大学 理工学部 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	
25. 3.31	安倍 学	客員了	(広島大学 大学院理学研究科 教授)	物質分子科学研究領域 物質分子科学研究部門 客員教授	
25. 3.31	加藤 立久	客員了	(京都大学 高等教育研究開発推進機構 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	
25. 3.31	桑島 邦博	定年退職	総合研究大学院大学 学融合推進センター 特任教授	岡崎統合バイオサイエンスセンター 教授	
25. 3.31	永田 央	辞職	名城大学 理工学部 教授	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 准教授	
25. 3.31	唯 美津木	辞職	名古屋大学 物質科学国際研究センター 教授	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 准教授	
25. 3.31	金 銅	辞職	新潟大学 理学部 准教授	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 助教	
25. 3.31	飯島 隆広	辞職	山形大学 基盤教育院 准教授	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 助教	
25. 3.31	阿達 正浩	辞職	高エネルギー加速器研究機構 加速器研究施設 助教	極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門 助教	
25. 3.31	邨 次智	辞職	名古屋大学 大学院理学研究科 助教	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 助教	
25. 3.31	山本 薫	辞職	岡山理科大学 理学部 准教授	物質分子科学研究領域 電子物性研究部門 助教	
25. 3.31	木村 哲就	辞職	理化学研究所 放射光科学総合研究センター	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門 助教	
25. 3.31	田中 康寛	辞職	中央大学 理工学部 助教	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門 助教	
25. 3.31	安池 智一	辞職	放送大学 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	
25. 3.31	齊藤 碧	辞職		技術課 機器利用技術班 機器利用技術一係 係員	
25. 3.31	才田 隆広	退職		物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 特任研究員	
25. 3.31	早出 彩	退職		物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 特任研究員	
25. 3.31	SECHRIST, Jeremiah S	退職	生理学研究所 研究支援員	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 研究支援員	
25. 3.31	KITYAKARN, Sutasinee	退職	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門(名古屋大学物質科学国際研究センター勤務) 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	
25. 3.31	LIU, Ke	退職	総合研究大学院大学	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	
25. 3.31	MAITY, Niladri	退職		物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 研究員	
25. 3.31	SOMMER, Christian	退職	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門 特任研究員	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門 研究員	
25. 3.31	ZHANG, Shenghong	退職		物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 研究員	
25. 3.31	安井 裕子	退職		物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 事務支援員	
25. 3.31	新井 秀実	退職		極端紫外光研究施設 光源加速器開発研究部門 研究員	
25. 3.31	森田 悠紀	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	
25. 3.31	石黒 志	退職	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門(名古屋大学物質科学国際研究センター勤務) 特任研究員	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 研究支援員	
25. 3.31	飯田 健二	退職	日本学術振興会特別研究員 PD (分子科学研究所)	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 研究員(IMS フェロー)	
25. 3.31	澤井 仁美	辞職	兵庫県立大学 大学院生命理学研究科 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 特任助教	
25. 3.31	中村 敬	退職		岡崎統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域 特任助教	
25. 3.31	矢木 真穂	退職	岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 特任研究員	岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 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
25. 3.31	CHEN, Jin	退職		岡崎統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域 専門研究職員(特任助教)	
25. 3.31	CONG, Zhiqi	退職	名古屋大学 物質科学国際研究センター 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	
25. 3.31	植 草 義 徳	退職		岡崎統合バイオサイエンスセンター生命環境研究領域 研究員	
25. 3.31	鈴木 万里子	退職		岡崎統合バイオサイエンスセンター生命環境研究領域 技術支援員	
25. 5.31	棚 田 法 男	辞職		岡崎統合バイオサイエンスセンター生命環境研究領域 研究員(IMS フェロー)	
25. 3.31	横 山 利 彦	併任 終了	(物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 教授)	分子科学研究所 分子スケールナノサイエンスセンター長	
25. 4. 1	桑 島 邦 博	称号 付与	分子科学研究所 名誉教授		
25. 4. 1	秋 山 修 志	併任	協奏分子システム研究センター長	(協奏分子システム研究センター 階層分子システム解析研究部門 教授)	
25. 4. 1	齊 藤 真 司	配置換	理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 教授	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 教授	
25. 4. 1	平 本 昌 宏	配置換	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 教授	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 教授	
25. 4. 1	嘉 治 寿 彦	配置換	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 助教	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 助教	
25. 4. 1	秋 山 修 志	配置換	協奏分子システム研究センター 階層分子システム解析研究部門 教授	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門 教授	
25. 4. 1	向 山 厚	配置換	協奏分子システム研究センター 階層分子システム解析研究部門 助教	生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門 助教	
25. 4. 1	山 本 浩 史	配置換	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 教授	物質分子科学研究領域 電子物性研究部門 教授	
25. 4. 1	村 橋 哲 郎	配置換	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 教授	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 教授	
25. 4. 1	鈴木 敏 泰	配置換	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 准教授	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 准教授	
25. 4. 1	櫻 井 英 博	配置換	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 准教授	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 准教授	
25. 4. 1	須 田 理 行	配置換	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 助教	物質分子科学研究領域 電子物性研究部門 助教	
25. 4. 1	山 本 浩 二	配置換	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 助教	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 助教	
25. 4. 1	阪 元 洋 一	配置換	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 助教	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 助教	
25. 4. 1	東 林 修 平	配置換	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 助教	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 助教	
25. 4. 1	田 中 彰 治	配置換	安全衛生管理室 助教	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 助教	
25. 4. 1	唯 美津木	兼任 嘱	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 教授(兼任)	(名古屋大学 物質科学国際センター 教授)	
25. 4. 1	初 井 宇 記	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	(理化学研究所播磨研究所 放射光科学総合研究センター XFEL 研究開発部門 チームリーダー)	
25. 4. 1	鐘 本 勝 一	客員 嘱	物質分子科学研究領域 物質分子科学研究部門 客員准教授	(大阪市立大学 大学院理学研究科 准教授)	
25. 4. 1	竹 延 大 志	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	(早稲田大学 先進理工学部 教授)	
25. 4. 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 特任研究員	光分子科学研究領域 光分子科学第二研究部門 研究員	
25. 4. 1	KITYAKARN、 Sutasinee	採用	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門(名古屋大学物質科学国際研究センター勤務) 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	
25. 4. 1	石 黒 志	採用	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門(名古屋大学物質科学国際研究センター勤務) 特任研究員	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 研究支援員	
25. 4. 1	石 崎 章 仁	配置換	協奏分子システム研究センター 階層分子システム解析研究部門 特任准教授(若手独立フェロー)	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)	
25. 4. 1	鹿 野 豊	配置換	協奏分子システム研究センター 階層分子システム解析研究部門 特任准教授(若手独立フェロー)	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)	

各種一覧

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
25. 4. 1	金子 靖	配置換	機器センター 特任専門員	分子スケールナノサイエンスセンター 特任専門員	
25. 4. 1	KODI RAJAN、 Selvakumar	採用	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 研究員		
25. 4. 1	PANDIT, Palash	採用	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 研究員		
25. 4. 1	吉田 将己	採用	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 研究員		
25. 4. 1	堀内 新之介	採用	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 研究員 (IMS フェロー)		
25. 4. 1	GU, Cheng	採用	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)		
25. 4. 1	白井 英登	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 (IMS フェロー)		
25. 4. 1	三宅 伸一郎	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		
25. 4. 1	濱田 雅子	採用	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 事務支援員		
25. 4. 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 特任研究員	岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 特任助教	
25. 4. 1	棚田 法男	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)		
25. 4. 1	黒田 康弘	所属換	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 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	
25. 4. 1	中尾 聡	所属換	機器センター 研究員	分子スケールナノサイエンスセンター 研究員	
25. 4. 1	阿部 仁美	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	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	
25. 4. 1	鈴木 博子	所属換	協奏分子システム研究センター 階層分子システム解析研究部門 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	
25. 4. 1	陌間 梢	所属換	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 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	
25. 4. 1	渡邊 葉子	所属換	物質分子科学研究領域 電子構造研究部門 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	
25. 4. 1	小野 純一	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 研究員 (IMS フェロー)	理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 研究員 (IMS フェロー)	
25. 4. 1	杉石 露佳	所属換	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 研究員 (IMS フェロー)	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)	
25. 4. 1	DHITAL, Raghu Nath	所属換	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 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	
25. 4. 1	池田 由佳子	所属換	岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 技術支援員	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 技術支援員	
25. 4. 1	水木 寛子	所属換	岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 技術支援員	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 技術支援員	
25. 4. 1	田中 景	所属換	岡崎統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域 事務支援員	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 事務支援員	
25. 4. 2	BOBUATONG、 Karan	採用	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		
25. 5. 1	山中 孝弥	配置換	技術課 学術支援班長	技術課 機器利用技術班長	
25. 5. 1	山中 孝弥	命ずる	技術課 課長補佐	(技術課 学術支援班長)	
25. 5. 1	吉田 久史	配置換	技術課 電子機器開発技術班長	技術課 電子機器・ガラス機器開発技術班長	
25. 5. 1	高山 敬史	配置換	技術課 機器利用技術班長	技術課 低温技術班長	
25. 5. 1	内山 功一	配置換	技術課 電子機器開発技術班 電子機器開発技術係 主任	技術課 電子機器・ガラス機器開発技術班 電子機器開発技術係 主任	
25. 5. 1	手島 史綱	配置換	技術課 光技術班 極端紫外光技術一係 主任	技術課 計算科学技術班 計算科学技術一係 主任	
25. 5. 1	永田 正明	配置換	技術課 学術支援班 学術支援二係長	技術課 電子機器・ガラス機器開発技術班 ガラス機器開発技術係長	

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
25. 5. 1	原田美幸	配置換	技術課 学術支援班 学術支援一係主任	技術課 学術支援班 学術支援係主任	
25. 5. 1	水川哲徳	配置換	技術課 機器利用技術班 機器利用技術二係主任	技術課 低温技術班 低温技術係主任	
25. 5. 1	長屋貴量	配置換	技術課 計算科学技術班 計算科学技術一係係員	技術課 計算科学技術班 計算科学技術二係係員	
25. 5. 1	松尾純一	配置換	技術課 計算科学技術班 計算科学技術二係係員	技術課 計算科学技術班 計算科学技術三係係員	
25. 5. 1	澤昌孝	配置換	技術課 計算科学技術班 計算科学技術三係係員	技術課 計算科学技術班 計算科学技術一係係員	
25. 5. 1	賣市幹大	配置換	技術課 学術支援班 学術支援一係係員	技術課 学術支援班 学術支援係係員	
25. 5. 1	南野智	配置換	技術課 学術支援班 学術支援一係係員	技術課 学術支援班 学術支援係係員	
25. 5.13	MAITY, Prasenjit	採用	協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 研究員		
25. 5.16	和田照美	採用	技術課 (装置開発室) 技術支援員		
25. 5.16	林健一	採用	極端紫外光研究施設 技術支援員		
25. 5.16	水口あき	採用	極端紫外光研究施設 技術支援員		
25. 6. 1	檜山卓也	採用	協奏分子システム研究センター階層分子システム解析研究部門 研究員		

編集後記

分子研レターズ68号をお届けします。2回目は無いと思っていた編集担当を、今回拝命することになりました。本号をまとめるにあたりサポートを頂いた皆様、また、ご多忙の中お時間を割いてご寄稿頂いた執筆者の皆さまに深く感謝を申し上げます。

前回編集担当をさせて頂いた60号当時から4年が経ちました。この間に分子研の構成メンバーも多数入れ替わり、4月から協奏分子システム研究センターも新たに発足しました。今号も受賞報告が多数寄せられており、このような人材の流動が分子研の高いアクティビティの源であることが伝わってきます。

本号が皆さんのお手元に届く頃には、暑さも和らぎ、秋の気配が感じられるようになっていることと思います。

編集担当 西村 勝之

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. 68

分子研レターズ

発行日 平成25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）
西 村 勝 之（編集担当）
大 迫 隆 男
加 藤 晃 一
木 村 真 一
斉 藤 真 司
江 東 林
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

