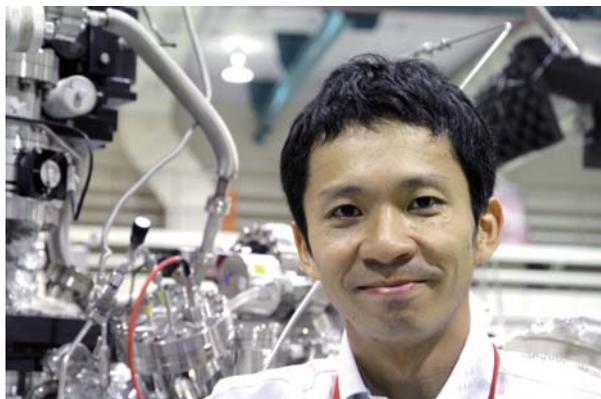


機能性分子を自在に 操る時代を目指して

けら・さとし

1996年千葉大学工学部卒、1998年日本学術振興会特別研究員、2001年千葉大学大学院自然科学研究科修士(博士(理学)取得)、2001年千葉大学大学院助手、2003年ブルツブルグ大学ポスドク研究員、2007年千葉大学大学院融合科学研究科准教授。2014年4月より現職。2014年より蘇州大学(中国)客員教授および千葉大学連携客員教授(兼任)。



平成26年4月1日付で、千葉大学より分子科学研究所へ着任いたしました。分子研とは放射光施設 UVSOR のユーザーとして、10年来の付き合いがあります。実験では毎回、学生数名を引き連れ、年に2~4回×2週間程度滞在していました。他の放射光施設とは異なり、分子研は市街地に位置しており利便性に恵まれているものの、実験が夜遅くまで続いたときなど、大概是飲み屋さんしか選択肢が無くなります。それでも東岡崎駅前には多数散在しており、選択には事欠かなかったですし、今ではその探索もずいぶん熟した感があります。その他に短期間ですが流動部門助手、客員准教授として分子研の組織運営にも関わりを持ちました。実はその助手時代の貴重な滞在時間のほとんどをドイツでの研究に使わせていただいたのですが、それを機に築いたドイツ人若手を中心とした国際ネットワークが現在も私の貴重な財産となっています。当時のドイツの物理屋で、有機物を精力的に研究していたグループは多くなく、ブルツブルグ大学のウムバッハ教授(現、KIT 所長)の門をたたきました。セミナーの途中に先生が、「今から俺は悪魔になる。日本式で無い、ドイツ流の厳しさを教えてやる」と言われ、容赦な

い突っ込みを受けたことを覚えています。

私の世代はいわゆる団塊ジュニアで人口が多く、バブル経済の恩恵も得られず(笑)、死ぬまで競争、我慢の世代と言われて(思っ)ているのですが、競争原理から必然的に優秀な人材が周りに多く、相乗効果として良い刺激になっているように思います。私は新潟の田舎から都会に出たい一心で、千葉大学の門戸を叩き(旧帝に入るだけの努力ができなかった)、幾多の幸運に恵まれ今に至りますが、千葉大レベルですと(確率的に)如何に良い研究室に配属されるかが、その後の人生に大きく影響を与えてしまう感は拭えず、私も「あの時、〇〇〇で負けていたら今の自分は無いかもしれない」と思ったこともあり。幸いに私の配属された研究室は、東大教養学部をご退職後に着任された原田義也教授と上野信雄助教授(現、千葉大学特別教授)という極めて強力なタッグであり、当時から国際人たるにはどうあるべきかを念頭に、研究以外にも非常に多岐に渡るご指導をいただきました。両先生の研究に対する姿勢はもちろん、周辺の教育的・政治的活動とその行動指針は今の私の基盤となるものであり、多く

の貴重な経験をさせていただいたことに非常に感謝しています。地方大学は、今は踏ん張り時で、将来を鑑みると部局によってはかなり危機的状況にあるかもしれませんが、是非とも千葉大学には頑張っていたいただきたいですし、外部の立場から何がしかの恩返しがあればと考えております。

現在、主として取り組んでいる研究テーマは、私が博士課程学生当時に見出した一本のスペクトルが発端となっています。その実験は別の固体表面の事象を研究していた時のもので、狙いの現象をどうにかして見出すために装置改良を試行錯誤で行っていた過程で突如として現れたスペクトルでした。実験データを見た上野先生に「君、このスペクトルは本当か?」と言われ、装置パラメータを改めて探査したことを覚えています。何しろ無我夢中で実験していましたし、当時の私にはその先に潜んでいるであろうサイエンスは茫洋としておりました。その後、装置性能が劇的に向上し、また実験ノウハウの積み重ねによって、図に示すようなデータ取得が可能となり、実際に多くの可能性が現実的になったわけですが、上野先生の先見性に変え感謝しています。

さて、昨今の情報化社会の発展、エネルギー・環境問題から、電子デバイスの軽量化・フレキシブル化など、既存の無機材料技術では困難な要求が人類に突きつけられています。これに応えるべく、有機半導体材料に代表される機能性分子群の特性を利用した様々なソフトデバイスの研究が賑わいを見せ、多彩な構造の分子材料が日夜合成され、製品設計・開発される時代になりました。特に有機半導体という名称で括られるこの分野は、化学、物理、工学の垣根を越えて周辺分野を巻き込みつつ、日々急速な勢いで進展し、これまで接点のなかった異分野が協力し合い研究することが日常茶飯事となりました。しかし、有機合成研究者がこれまでこの世に見出した分子は、我が国の人口弱ほどありますが、依然として個々の分子の特徴（個性）を理解した上で適切に区別し、要望される機能性材料として自在に活用できているとは言えません。これは本来の特性として絶縁物たる分子群が、例えば「有機半導体」として材料機能を示す理由とその真の特徴を認識できていないことに帰着します。具体的には、電子デバイスなどにおける無機物（金属電極）との界面における分子の変性はもちろんのこと、構造異方性の高い異分子間界面の原子レベルでの相互作用についての理解が全く不十分であるということです。また物性の発現機構や原理、その制御のための量子論的な中身が全く明確でなく、基幹学理としての適切なガイドラインが構築されぬまま、手探り状態の（力技での）応用研究が続けられていることを意味します。

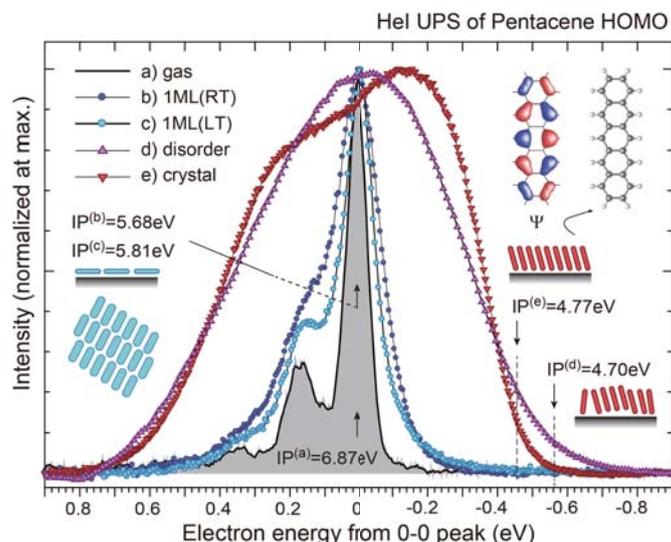
私はこれまで、主としてパイ電子共役を持つ大型の有機分子群が多彩な機能性を示す理由について、様々な表面分析法を駆使して研究を進めてきまし

た。特に光電子分光法による電子状態評価は、「分子の中の電子の姿」を量子論的に明らかにする上で極めて有効です。しかし、分子材料に対する実験的な難しさ（試料作製法、光損傷や帯電回避など測定技術問題）などから、電気伝導特性の中身とリンクさせることが容易ではありませんでした。前述のように、最近になってようやく技術が浸透し、高感度紫外光電子分光法の実現により研究成果が積み重ねられ、特に有機分子の半導体特性の本質の特徴が理解されつつあります。分子固体は、その集合構造に応じて分子間相互作用が異なり、電子の波動性が前面に現れたり、粒子性が強調されたりします。特に重要と思われる性質は、分子の低い対称性に帰着します。つまり波動関数は空間的に凸凹であり集合構造に敏感でかつ非連続系です。そのため分子の個性だけで固体物性は決まらず、集合体における僅かな変調により生じた“新たな個性”の二面性を併せ持ちます。また分子は柔らかく、弱い外的摂動で

容易に変化することなどが最たる特徴です。こうした分子が持つ本質的な特徴が明らかになるにつれ、有機半導体特性のみならず、まだまだ有益な機能性を人類は見出し、有効に活用できていないという考えが強くなっています。

今後は、分子膜における強い電子・振動結合状態の効果や、波動関数の局在性により誘起される新たな電子相関など、分子軌道の“局在性の度合い”に依存した物理現象に着目し、機能性分子の最たる特徴である「弱い相互作用による電子状態変化」についての研究を深めていきます。放射光施設を利用した最先端の分析法を駆使しながら、重要な話題を提供しつつ、人類が機能性分子を自在に操れる時代の実現に貢献していきたいと考えています。

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



高分解能光電子分光測定による、ペンタセン分子の集合状態に依存した最高占有準位 HOMO の状態変化、分子の中の電子の姿は分子の並び方（集合状態）によって大きく異なる。

イメージングと 分子機械に魅せられて

いいの・りょうた

1995年京都大学工学部卒、1997年京都大学大学院工学研究科修士課程修了、2000年名古屋大学大学院理学研究科博士課程単位取得退学、2003年博士(理学)。2000-2005年JST-ERATO研究員、2005-2011年大阪大学産業科学研究所特任助手、助手、助教、2011-2014年東京大学大学院工学研究科講師、准教授。2014年6月より現職。

2014年6月1日付で岡崎統合バイオサイエンスセンター／分子科学研究所に着任しました。着任に際して大峯所長をはじめ皆様から多大なるサポートとアドバイスを頂きました。心より感謝申し上げます。研究室は山手地区2号館4階東です。予想以上に広いスペースを頂き、驚くと共にワクワクしております。改修の完了は8月末の予定で、現在は山手2号館2階東奥の仮居室で研究室立ち上げのための諸々の作業を行っております。研究室紹介とのことでご依頼を頂きましたが、着任から1ヶ月あまりで立ち上げの最中ですので、私のこれまでの研究経歴とこれからの抱負についてご紹介します。

私の現在の専門は生物物理学、特に光学顕微鏡を用いた生体1分子計測ですが、もともとは京都大学工学部高分子化学科を卒業しており、学問的なバックグラウンドは化学です。改組により修士課程から工学研究科合成・生物化学専攻に所属が変わりましたが、学部4年から修士までは砂本順三教授(故人)の研究室で研究を行いました。砂本研を選んだ理由は明確で、高分子化学科の中で最も生物よりの研究を行っていたからです。高校で生物学を学ばな

かった私ですが、学部時代に読んだいくつかの書物をきっかけに生き物への興味が強くなっていました。

砂本研では当時、人工リン脂質を合成していました。そしてこの人工リン脂質は、脂質二重膜形成能を持つだけでなく、細胞からの膜タンパク質の抽出に有用であることを示していました。私に与えられた課題は、この人工リン脂質を用い、ある種の細菌が持つ“氷核タンパク質”を、活性を保持した状態で抽出する事でした。氷核タンパク質はその名のとおり、氷の核形成を助け水の過冷却を抑制します。そこで、抽出した氷核タンパク質の活性を評価するため、多数の水滴を冷却しながらビデオカメラで記録して凍結温度を計測する装置を作製しました。顕微鏡ではないですが、私が初めて作ったイメージング装置です。砂本教授は放任で、氷核タンパク質のテーマは私だけで行ったので苦労しましたが、自ら実験を考え実行してまとめるという研究の基本が身に付きました。尚、氷核タンパク質ははまだ立体構造が解かれておらず、水の過冷却を抑制する仕組みは明らかになっていません。今でも面白いテーマです。



私が1分子計測を始めたきっかけは時代です。学部・修士を過ごした1990年代半ばは生体1分子計測の勃興期でした。ミオシンなどの分子モーターの作動機構を調べるために、世界の研究者が1分子計測法の開発に取り組み始めていました。日本のグループの活躍も目覚ましく、柳田敏雄教授や木下一彦教授らが初めて、室温、水溶液中での蛍光色素1分子のリアルタイムイメージングに成功しました。顕微鏡に触ったこともなく、蛍光はキュベットに入れ分光器で測定するものという知識しかなかった私はこの話を聞き衝撃を受けました。私も1分子イメージングをやりたい!しかし、いきなり分子モーターの世界に飛び込むのは躊躇がありました。そこで、膜タンパク質の1分子イメージングに取り組んでいた名古屋大学の楠見明弘教授(現京都大学)の研究室に博士課程から加わりました。

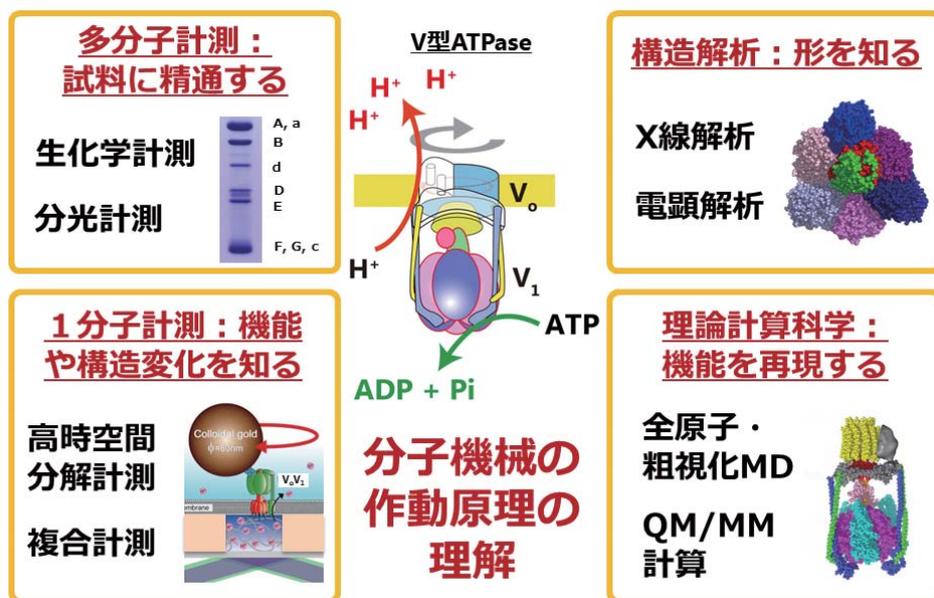
楠見研では当時、金ナノ粒子をプローブに用い細胞表面の膜タンパク質の1分子運動計測を行っていました。生きた細胞で1分子計測を行うのが売りでした。金ナノ粒子は信号強度が高く高速計測に適しているのですが、サイズが比較的大きく細胞内のタンパク質に

は適用できません。そこで、蛍光を用いた生細胞1分子イメージング法の開発に取り組みました。タンパク質を標識する蛍光色素には、当時使われ始めていた緑色蛍光タンパク質（GFP）を選びました。標的タンパク質と遺伝子レベルで融合できるGFPの1分子イメージングが可能になれば、どんなタンパク質の1分子計測も可能になると考えたからです。実験を始める前には、自家蛍光が高い細胞でGFP1分子を観察するのは無理との意見を頂きました。しかし自作の顕微鏡で実際に観てみると、初めてのトライで成功してしまいました。細胞膜上を多数の輝点が動き回っていました。成功したポイントの一つは、GFPの発現量が非常に低い細胞を丁寧にスクリーニングしたことでした。あの時の感動以来、イメージングに魅了され現在も続けています。イメージングの醍醐味は、誰も観たことのない映像を初めて目の当たりにするチャンスを得られることだと思います。

ポスドク時代は、東京工業大学の吉田賢右教授（現京都産業大学）の研究室で回転分子モーター F_1 -ATPaseの1分子計測を行い、活性制御（ブレーキ）の機構を明らかにしました。大きさ10 nm程度の F_1 -ATPaseが自分よりも数10倍大きなポリスチレンビーズを水中でブンブン回す姿は圧巻で、それ以来、分子モーターにもすっかり魅せられました。ポスドク後は、吉田教授の教え子で F_1 -ATPaseが回転モーターであることを実証した大阪大学の野地博行教授（現東京大学）の研究室にスタッフとして加わり、 F_1 -ATPaseやFoF₁-ATP合成酵素の化学・力学共役機構の解明、光学顕微鏡とマイクロデバイスを融合した生体分子の超高感度計測法の開発、人工分子機械の1分子計測法の開発に取り組みました。

これからの抱負ですが、新しい分子モーターを中心として分子機械の作動原理の解明に取り組みます。分子機械は高い基質選択性、反応特異性、エネ

ルギー変換効率、可逆性など、人間が作った機械に負けない、またはそれ以上の高度な性能を発揮します。分子機械を構成する複数のサブユニット（部品）がどのように協調して高度な機能を発現するのかを明らかにします。このため、高い時間・空間分解能で分子機械の動きや構造変化を捉える新しい1分子計測法を開発します。さらに、構造解析による原子レベルの構造情報の取得や、理論計算による構造変化や化学反応の再現・予測等、異分野の研究者と共通の分子機械を対象にした共同研究を推進し、多面的アプローチで作動原理を理解します（図）。また、天然に存在しない新しい分子機械を創ることで設計原理をボトムアップで理解します。これらの取り組みにより、欲しい機能を持つ分子機械を自在にデザインする「分子機械設計学」の確立を目指します。さらには、創った分子機械を生き物に戻すことでその性質を制御する「生体制御学」を目指します。



多面的アプローチで分子機械の作動原理の理解を目指します。

これまでの日々感謝して 岡崎での再出発

もみやま・のりえ

2000年名古屋大学工学部化学・生物工学科卒、2005年シカゴ大学大学院化学科博士課程修了、Ph.D.取得。米国ハーバード大学博士研究員(Damon Runyon Cancer Research Foundation Post Doctoral Research Fellow)、東北大学大学院理学研究科化学専攻助手、助教を経て2014年6月より現職。



サッカーの本場ブラジルでのワールドカップに盛り上がる2014年6月、分子科学研究所、生命・錯体分子科学研究領域錯体触媒研究部門に着任いたしました。私にとりまして縁の深い岡崎の地で研究室を主宰する機会をいただきましたことは、言葉では言い尽くせない程、この上ない喜びです。このたびの着任に際し、多大なるご支援をいただきました分子科学研究所大峯所長、生命・錯体分子科学研究領域主幹の魚住先生、また、これまでお世話になりました多くの皆様に、心から感謝し御礼申し上げます。

私は、愛知県の東部、豊川で育ち、豊橋の高校を卒業後、大手予備校豊橋校での浪人生活を経て、名古屋大学工学部に入学しました。建築家を志して社会環境工学科を第一志望とするも合格することができず、滑り止めとして記入した第二志望の化学・生物工学科に入学しました。学部時代の私は、単位を落とさない程度に勉強し、体育会剣道部で汗を流す毎日過ごしました。

そんな私の転機は、名大剣道部恒例行事OB・OG稽古会後の懇親会での大先輩のお言葉でした。名大工学部で非常勤講師、そして日本油化学協会副会

長を勤められたその大先輩との会話を今でも鮮明に覚えています。「君、学部と学科は?」「工学部の化学・生物工学科です」「教授の先生は誰?」「〇〇先生と□□先生と……山本尚先生です」「君、修士課程に進んで研究したいのなら、山本尚君がいいよ。彼は、世界の山本だから。せっかく大学に行かせてもらったのだから少しは真面目に勉強(研究)しなければとの思いと、“世界の山本だから”というフレーズが忘れられず、学部4年時の研究室配属で山本尚先生の研究室を志望しました。大学入学当時を振り返ってみると“化学”や“科学”にほとんど興味がなかった私が現在の職に就くことになるとは、思いもよらないことでした。

「剣道」によって導かれた「研究への道」、1999年に名古屋大学山本尚研に配属されてから、今年で15年になります。この間、山本尚先生の定年退職を前にしたシカゴ大学への予期せぬ異動。日韓共催ワールドカップで日本中が大変な盛り上がりを見せていた2002年6月終わり、私は名古屋大学を休学し、太平洋を渡ってシカゴ大学の学生となりました。その後2006年には、東北大学で助教として研究する機会をいただくことになり、

奨学金により3年間確約されていたポストドク期間を1年弱に短縮し帰国。そして、2014年分子研への異動。思い返すと私の引越(異動)は、いつもサッカーワールドカップイヤーのようです。

「化学者」「科学者」への憧れや素地があって大学に入学し、現在に至っている研究者の方々と異なり、私は図らずも現在に至った新参者です。しかしながら、そんな私を現在へと駆り立てたものは、“予期せぬ実験結果”に遭遇し、自然科学の奥深さと凄みに魅了されてしまったからに他なりません。

私の学位研究となったニトロソベンゼンとエノラートとの反応は、まさしくその原点です。当時、オキシ化体が得られる可能性を全く予測できませんでした。今では、カルボニル化合物の高エナンチオ選択的な α 位オキシ化反応としてさりげなく使われるようになり、いろいろあったこの反応の過去を懐かしく振り返ることができるようになりました。この経験は、東北大学での不斉1,3-アルキル移動反応の開発、1,3-転位反応の発見、位置選択性の制御を伴う高立体選択的な反応の開発に繋がっています。

普段は目にすることが出来ない化合物の構造を、分子レベル、原子レベルで

目の当たりにしたことも、現在に至ったきっかけのひとつです。名古屋大学で学部4年、修士1年の時に直接ご指導いただいた柳澤先生（現、千葉大学教授）と柳澤グループの先輩方が見出された銀・(R)-BINAP 錯体の構造（図1）や、東北大学で学生と一緒に開発に取り組んだビスリン酸触媒の構造（図2）が、X線結晶構造解析により明らかになった瞬間の歓喜は忘れられません。「分子のなかの原子は様々な結合を介してこんなに綺麗に繋がっているんだ」と純粋に感動したものです。

いずれも、研究をご指導いただいた先生方、諸先輩方、共同研究者の皆様、一緒に研究を進めてくださった学生の皆さんとともに“予期せぬ結果”に遭遇し、その驚きや喜びを分かち合えたことは、何事にも代え難い経験でした。

分子は、共有結合に加え、原子間さらに分子間の様々な相互作用によって、私たちの想像を超えて繋がりが組み上がっています。私がこれまで研究をさせていただいてきた不斉（キラリティ）は、その代表例であり、分子にとどまらず地球に存在する生命を特徴付ける属性のひとつとされています。共有結合に加え従来十分に活用されてこなかった水素結合やハロゲン結合といった相互作用を分子デザインに駆使し、新たなキラル分子の設計・合成を進めていきます。不斉分子触媒としての活用にとどまらず、これまでにない機能性物質の開発へと繋げていきたいと考えています。独自のキラル分子の設計技術を確立しつつ、工学、薬学、医学からのニーズを意識し、将来的にはそのニーズにも応えられるよう、研究を推進していきたいと思っております。

私は、九州熊本出身の父が愛知県に

就職し、岡崎のとある学校で母と知り合ったことで、この世に生をうけました。父の影響で始めた剣道を続けるなかで多くの方々にお世話になり、今の自分があります。私が現在借りている東岡崎駅そばの住まいから徒歩数分のところに、父の下宿があったことを知ったのは、つい先日のことです。豊川稲荷から東岡崎を名鉄で行き来し、大学生活を明大寺で過ごした母が、懐かしそうに教えてくれました。

“予期せぬ”シカゴ大学への異動から12年。“予期せぬ”展開に導かれ愛知県民として復帰した今、10年程前はご

く普通に使っていたであろう“三河弁”に懐かしささえ感じながら、岡崎での生活を享受しています。有機分子の“建築家”として、新たなキラル分子の設計技術を確立し新たな機能を開拓すべく、日々精進してまいります。

最後になりましたが、2011年3月11日の震災をともに経験し、ことばに形容しがたい日々をともに過ごし、東北大学での7年半の間、一緒に研究を推進してくれた15名の学生の皆さん、本当にありがとうございました。心から感謝申し上げます。

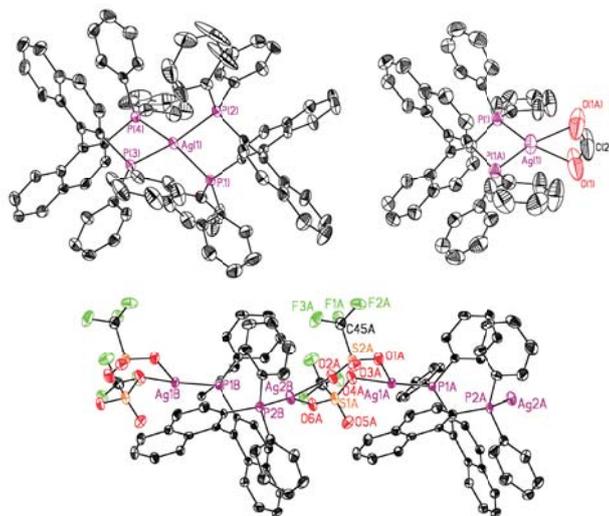
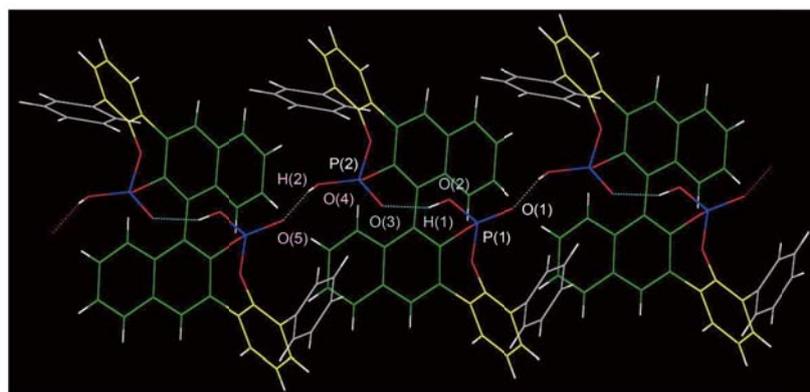


図1 銀・(R)-BINAP 錯体の3つの構造



Intermolecular H-Bonding O(5)⋯O(4) = 2.503 Å
Intramolecular H-Bonding O(3)⋯O(2) = 2.400 Å

図2 ビスリン酸の水素結合ネットワーク

固体中の電子状態を直接見る

たなか・きよひさ

2005年 東京大学大学院理学系研究科物理学専攻 博士後期課程終了、理学博士（物理）。
米国スタンフォード大学及びローレンスバークレー国立研究所 博士研究員、大阪大学理学
研究科物理学専攻助教、大阪大学リーディング大学院特任准教授を経て、2014年4月より
分子科学研究所・極端紫外光研究施設准教授。光電子分光を用いた強相関電子系の電子状態
の研究がグループの主な研究テーマ。



2014年4月1日付で大阪大学大学院理学研究科から分子科学研究所に着任いたしました。もともと中学高校時代を名古屋で過ごした私としては、久しぶりに故郷に帰ってきたような気がいたします。4月からは分子研UVSORのBL5Uに新しいビームラインを立ち上げるべく全力を注いでいます。助教の松波雅治さん、日本学術振興会特別研究員の羽尻哲也さんに協力していただき、なんとか装置の立ち上げをする環境が整ってきたところです。研究室紹介の記事ということで執筆を依頼されましたが、立ち上げをはじめたばかりであり、紹介できるようなことはまだほとんどありません。そこで、これまでの研究経歴と今後の抱負について書かせていただきます。

私の専門は固体物理です。“固体中の電子状態を直接観測できる”という研究室の紹介を魅力的に感じ、光電子分光法を実験手法としていた東京大学理学部物理学科の藤森淳助教授の研究室に入りました。光電子分光法というのは、固体に仕事関数より大きいエネルギーの光が照射された際に、電子が固体表面から飛び出してくるいわゆる光電効果を利用した実験手法です。出て

きた電子を分光し、そのエネルギーと光電子の数をカウントすることで固体中の電子の状態密度にあたる情報が得られます。一般の人に紹介する時には「アインシュタインの発見した」と付け加えると、なんだかすごいことをしていると思ってくれるので、この業界の人は説明の時によく使います。光電子分光法の発展型として、固体表面から出てきた電子のエネルギーだけでなく、その方向（角度）まで同時に観測する、角度分解光電子分光法（ARPES）があります。この場合、固体中の電子のバンド分散を得ることができます。運動量空間で分解して物性の情報を得ることができる実験手法は限られており、その中でも直接電子状態の情報を得られるARPESは、この20年の間にそのエネルギーと運動量空間の分解能が飛躍的に上昇したこともあり、近年の物性研究において必須のものとなってきました。

藤森研究室では銅酸化物高温超伝導体の研究を行いました。銅酸化物高温超伝導体では超伝導の舞台となるCuO₂面と呼ばれる2次元面にキャリアをドーピングすることで、系が絶縁体から超伝導に変化します。藤森研では絶縁体の領

域に着目し、超伝導の発現のバックグラウンドとなっていると考えられる絶縁体領域の電子状態を明らかにすることを研究テーマとしました。この領域は、試料の合成自体が難しく、ほとんど研究されていなかったのですが、早稲田大学の寺崎一郎先生、藤井武則さんから良質な試料をいただきはじめて研究が可能となりました（この業界では試料提供者には頭が上がりません）。超伝導転移温度（T_c）の異なる銅酸化物高温超伝導体を比較することで、CuO₂面での次最近接のサイトへのホッピングパラメーターに顕著な差があることがわかり、これがT_cの大きさに深く関与していることを明らかにすることができました^[1]。

学生時代は高温超伝導体の研究といながらも、超伝導にならない絶縁体領域の研究ばかりしていたため、超伝導状態を直接見たいという強い欲求がありました。当時、高温超伝導を担っていると考えられていたのは運動量空間でアンチノードと呼ばれる領域だったのですが、超伝導と絶縁体の境界領域でさえ超伝導の兆候さえ見られず、本当にアンチノードが超伝導発現をコントロールしているのか不思議に思っ

ていました。そこで、運動量空間のどの電子が超伝導発現に寄与しているかをはっきりとさせるためには、超伝導が発現する境界近傍での超伝導状態の電子状態の詳細を観測すればよいと考え、博士号を取得後、当時、高温超伝導体のARPESの研究で最も成果をあげていた米国スタンフォード大学のShen教授のもとにポスドクとしていました。

幸運なことに米国での最初の実験で運動量空間のノード近傍の電子状態が超伝導の発現に直接寄与している証拠を新たに発見することができ、*Science*誌で論文を発表することができました^[2]。また米国滞在中は、放射光施設Advanced Light Sourceのビームラインの管理をする機会にも恵まれ、ユーザーを含めて世界の多くの研究者と知り合うことができたことは私の大きな財産となっています。その後、光電子分光以外の実験手法を身につけたいと考え、大阪大学の田島節子教授のもとで助教（その後、特任准教授）としてテラヘルツ時間領域分光装置の開発、試料合成に携わったのち、分子研にまいりました。

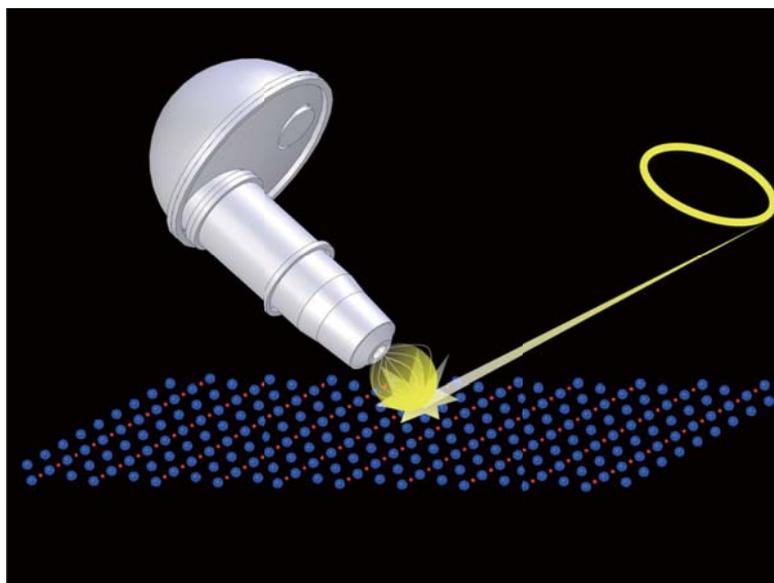
さて今後ですが、当グループでは現在、スピンの情報を得ることができる新しいスピン角度分解光電子分光装置の立ち上げを行っています。近年、電子の電荷のみを用いた従来の半導体エレクトロニクスに対して、電子の持つ“スピン”の自由度も活用したスピントロニクスが次世代の省電力スピンドバイス技術として期待されており、スピンの大きさが注目されています。最近では量子スピンホール効果を示すトポロジカル絶縁体の発見など、基礎電子物性としても非常に面白い現象が報告さ

れています。

これまでのスピン角度分解光電子分光ではその検出効率が桁違いに低く、一般的に難しい実験とされてきましたが、近年O/Fe(001)を用いた極低エネルギー電子回折(VLEED)検出器の開発によりその検出効率が従来の100倍程度まで飛躍的に向上しました。しかし、単一エネルギー・単一角度の光電子をシングルチャンネルで観測する方法が取られており、測定効率は未だに十分高いとはいえません。そこで、角度方向を一度に測定できるマルチチャンネルスピン検出器をスウェーデンのMB Scientific社と共に共同開発を行っています。この開発が成功すると、現

在世界に存在するどのスピン角度分解光電子分光装置よりも、はるかに高い検出効率、高エネルギー・高運動量分解能でスピンの状態の測定が可能となり、業界にブレイクスルーを起こせるのではないかと期待しています。将来的にはトポロジカル絶縁体などの新規物質のスピン・電子状態を明らかにしたいと考えています。

最後になりましたが、新しい研究グループの立ち上げにあたり、大峯巖所長、小杉信博先生をはじめ所内の先生方や、UVSORの技術職員の皆様より多大なご支援・ご協力を頂きました。この場をお借りして御礼申し上げます。



- [1] K. Tanaka, T. Yoshida, A. Fujimori, D.H. Lu, Z.-X. Shen, X.-J. Zhou, H. Eisaki, Z. Hussain, S. Uchida, Y. Aiura, K. Ono, T. Sugaya, T. Mizuno, and I. Terasaki, Effects of next-nearest-neighbor hopping t' on the electronic structure of cuprates. *Physical Review B*, **70**, 092503-1-092503-4, 2004.
- [2] K. Tanaka, W.S. Lee, D.H. Lu, A. Fujimori, T. Fujii, Risdiana, I. Terasaki, D.J. Scalapino, T.P. Devereaux, Z. Hussain, Z.-X. Shen, Distinct Fermi-momentum-dependent energy gaps in deeply underdoped Bi2212. *Science*, **314**, 1910-1913, 2006.

創ることの楽しみ

こが・のぶやす

2006年、神戸大学自然科学研究科にて博士号(理学)取得。同年、神戸大学理学部特別研究員。2007年、京都大学理学研究科特別研究員。2007年7月より、ワシントン大学生化学科日本学術振興会海外特別研究員。2009年7月よりワシントン大学生化学科特別研究員を経て、2014年4月より現職。また2014年4月より科学技術振興機構さきがけ「細胞機能の構成的な理解と制御」研究者兼任。



2014年4月1日付けで、アメリカ・シアトルにあるワシントン大学生化学科から分子科学研究所、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に着任しました。この文章を書いているのは7月ですが、思えば今年の1月はアメリカにいて、生まれたばかりの娘をあやしながら、寝不足の状態ですらともに研究を行っていました。その時は分子研の採用面接さえも受けていない状態であったことを考えると、怒涛のような半年間でした。本当にたくさんの人に助けられ、アメリカから日本へと移動することができました。ありがとうございました。現在は、分子研から頂いた200m²という広大なスペースを基に(これまた多くの人に助けられながら)ラボ作りを進めており、どのような研究室ができるのか、わくわくしながら日々を過ごしています。私の研究室では、計算機シミュレーションと生化学実験両方を用い、タンパク質分子をデザインすることで、タンパク質分子の動作原理を理解し、その知見を応用して望みの機能を発現するタンパク質分子をデザインするための理論と技術を確認することを目指しています。

これまでに私は、学部生および博士課程を通じて、神戸大学自然科学研究科・高田彰二准教授(現、京都大学理学部教授)の下で、タンパク質の折りたたみ機構と、分子モータータンパク質の機能発現メカニズムについて、分子動力学シミュレーションを用いて研究を行ってきました。分子動力学シミュレーションというと、一般的には全原子モデルと呼ばれるタンパク質の原子を全てあらわに表現したものが用いられますが、私の場合はアミノ酸残基を1つの球で表現した粗視化モデルを用いて研究を行っていました。もちろん、そのような粗視化モデルを扱えるプログラムは、どこからか手に入れることが出来るわけではなく、自分で一から作成する必要がありました。そのような手間暇をかけてまで、なぜ粗視化モデルを研究のツールとして選んだのかを考えてみると、複雑なタンパク質分子を複雑なままに扱っても、私の頭では決して理解できないだろうという考えからでした。タンパク質の分子構造を表現するシンプルなモデルから研究を始めて、少しずつ理解を積み重ね、必要に応じてモデルを複雑にしていけば良いだろうと、高田先生とディ

スカッションした記憶があります。「まずシンプルなものから始める」この考え方は私が仕事をするときの重要な指針となっています。この時に私が構築したプログラムは、検崎博生博士を中心とする高田研究室のメンバーにより整理・拡張され、現在ではスーパーコンピュータ「京」の重要なアプリケーションとなっています。

さて博士課程では、計算機シミュレーションという道具を用いて研究を行ってきましたが、一つの不満がありました。それは自分の計算は常に実験の後追いになってしまっているという事でした。そのため博士号取得後は、計算機と実験両方を組み合わせた研究をしたいと考えるようになりました。そこで、ワシントン大学Baker研究室で、ポスドクとしてタンパク質分子のデザイン研究を始めました。まず計算機シミュレーションによりタンパク質分子をデザインし、次に生化学実験によりデザインしたタンパク質がどのように振る舞うのかを調べる、というスタイルで研究を行いました。ご存知のように、タンパク質はそのアミノ酸配列に従って特異的な立体構造に折りたたむことが知られています。「タンバ

ク質のアミノ酸配列がどのような原理により特異的な三次元立体構造を決定しているのか?」という折りたたみ問題が解明されれば、アミノ酸配列に基づいて折りたたむ立体構造を予測することも、またその逆に望みの立体構造に折りたたむアミノ酸配列を自在にデザインすることも可能となります。しかし自然界のタンパク質は、機能を発現することに最適化して進化してきたため、非常に複雑な構造をしています。そこで、機能をひとまず忘れて、折りたたみのみに最適化したシンプルなタンパク質構造をゼロから作ることで、この問題に取り組みました。しかし、どうやればそのような構造を作ることができるのか、最初は皆目検討が付きませんでした。そのため、計算機シミュレーションで構造を作っては、それと似た形の自然界のタンパク質と比較する、ということを来る日も来る日も繰り返しました。そうすると不思議なことに、複雑な自然界のタンパク質構造の中に埋め込まれた、タンパク質が安定な構造を形成するための様々な“工夫”が見え始めました。教科書では、タンパク質の構造は、規則的な構造を持つ α ヘリックスと β ストランドの二次構造と、規則的な構造を持た

ないループから構成されていると学びました。しかし、二次構造の長さには規則性があり、加えてループ構造は完全に不規則なのではなく規則的な部分があることに気が付きました。そして、これらを考慮に入れてタンパク質構造を作ると、計算機上で高い確率でその構造に折りたたむことのできるアミノ酸配列をデザインすることができたのです。必ず実験でもうまく折りたたむに違いない。確信のようなものがありました。実験方法をテクニシャンから習い、デザインしたタンパク質を大腸菌に組み込み発現・精製し、折りたたみ能を生化学実験で調べました。実験結果を待っている間は本当にじれったく感じられ、科学をやっているのに、まるで入試の合格発表を待っているような気持ちでした。そして、デザイン配列の折りたたみ能を初めて実験的に確認できた時の喜びは忘れることができせん。実験をやってみて思い知らされたのは、(当然のことですが)実験結果は事実であるということです。計算機上で折りたたむと予測されたものでも、駄目なものはダメだと残酷にも実験結果は私達に教えてくれるのです。何ヶ月もかけてデザインしたタンパク質が、全て失敗であると分かった時は、

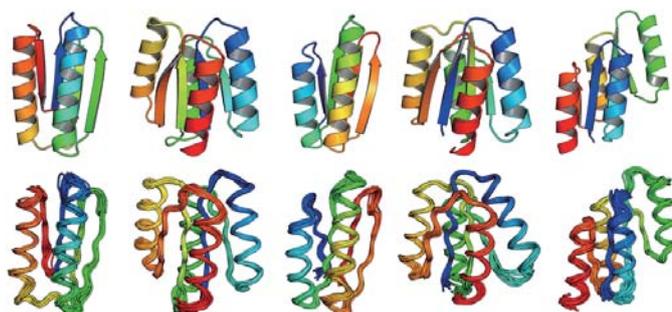
ショックで落ち込み、自分のデザイン(仮説)の何が間違っていたのだろうか悶々と悩む日々が続きました。ただ、こういう局面を打開するのに強力だったのは、妻と二人で研究をしていることでした。お互いに全く違った視点を持っているため、常に新しいアイデアを持って再チャレンジすることができたのです。このようにして、発見した法則と、それを用いてデザインしたタンパク質分子に関して一本の論文にまとめることができ(5年もかかりましたが!)、幸運なことに分子科学研究所にラボを持つことができました。

さて、これまでに様々なトポロジーのタンパク質のデザインに成功しましたが、タンパク質分子のほんの一部を解明したに過ぎません。機能を発現するために複雑な形をしている自然界のタンパク質分子構造を眺めるたびに、自分達の理解がまだまだであることを思い知らされ、途方に暮れてしまいます。しかしそれと同時に、これらを理解し自然がやっているように自由自在にタンパク質分子を創りたい、という野望が芽生えてきます。この野望と伴に歩いてくれる方、一緒にタンパク質分子を創りませんか?

ラボの研究スキーム



ゼロから創ったタンパク質分子



上段: 計算機構造 下段: NMR構造