IMS Letters
分子研と研究者をつなぐ

分子研レターズ

Institute for Molecular Science
分子科学研究所
VOL. 71
March 2015
ISSN 0385-0560

●巻頭言

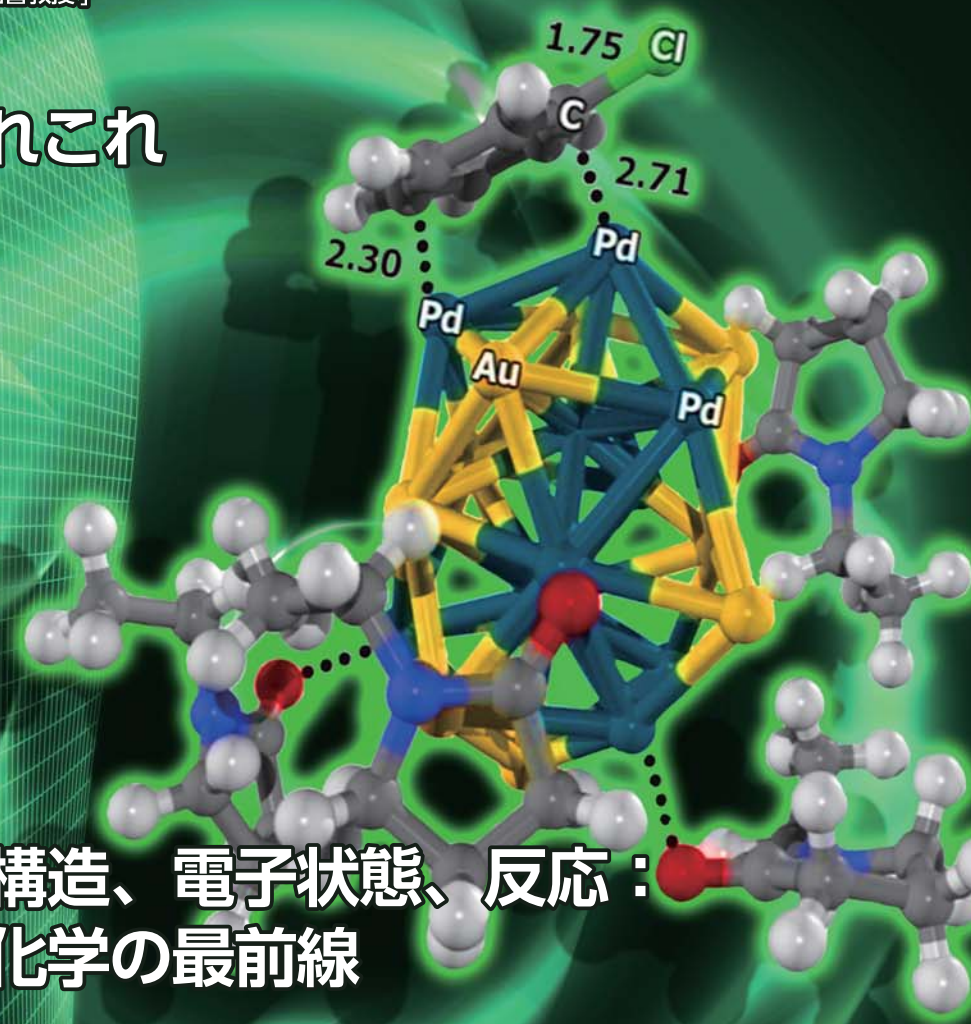
研究不正雑感

西川 惠子［日本学術振興会 監事・千葉大学 名誉教授］

●レターズ

計算科学の昨今あれこれ

岡崎 進［名古屋大学大学院工学研究科 教授］



●分子科学の最先端

金属微粒子触媒の構造、電子状態、反応：複雑・複合系理論化学の最前線

江原 正博［計算科学研究センター 教授］

共同利用研究ハイライト

サブナノ秒レーザーを用いたレーザー点火の基礎特性

赤松 史光［大阪大学大学院工学研究科 教授］
林　潤　［大阪大学大学院工学研究科 講師］

硫化サマリウム(SmS)におけるBlack-Golden相転移の起源に電子構造の直接観測から迫る

伊藤 孝寛［名古屋大学大学院工学研究科 准教授］

金薄膜上に化学吸着させた金属イオン包接クラウンエーテル錯体の表面増強赤外分光

井口 佳哉［広島大学大学院理学研究科 准教授］

IMS Letters
分子研レターズ
CONTENTS

March 2015
VOL. 71

【表紙】分子科学の最先端より周囲の高分子（PVP）の効果（本文P.6）

本誌バックナンバーは、以下のページでご覧いただけます。
https://www.ims.ac.jp/about/publication/bunshi_publication.html

巻頭言
01 **研究不正雑感**
●西川 惠子 [日本学術振興会 監事・千葉大学 名誉教授]

レターズ
02 **計算科学の昨今あれこれ**
●岡崎 進 [名古屋大学大学院工学研究科 教授]

分子科学の最先端
05 **金属微粒子触媒の構造、電子状態、反応：複雑・複合系理論化学の最前線**
●江原 正博 [計算科学研究センター 教授]

訃　報
9 **酒井 楠雄 元技術課長ご逝去**
10 **丸山 有成 名誉教授ご逝去**

IMSニュース
12 所長招聘会議「未来を拓く学術のあり方：教育と研究」
12 アジア連携分子研研究会 日韓生体分子科学セミナー：実験とシミュレーション
13 第3回NINSコロキウム「自然科学の将来像」報告
14 受賞者の声
17 事業報告
22 国際研究協力事業報告

IMSカフェ
23 分子研出身者の今――南部 伸孝、猿倉 信彦、皆川 真規
28 分子研を去るにあたり――大島 康裕
29 新人自己紹介

共同利用・共同研究
31 共同利用研究ハイライト
サブナノ秒レーザーを用いたレーザー点火の基礎特性
赤松 史光 [大阪大学大学院工学研究科 教授]　林　潤 [大阪大学大学院工学研究科　講師]
硫化サマリウム(SmS)におけるBlack-Golden相転移の起源に電子構造の直接観測から迫る
伊藤 孝寛 [名古屋大学大学院工学研究科 准教授]
金薄膜上に化学吸着させた金属イオン包接クラウンエーテル錯体の表面増強赤外分光
井口 佳哉 [広島大学大学院理学研究科 准教授]
「第54回分子科学若手の会 夏の学校 講義内容検討会」の開催報告
福田 将大 [京都大学工学研究科　博士後期課程2年]
38 新装置紹介
42 施設だより
43 共同利用・共同研究に関わる各種お知らせ

分子科学コミュニティだより
44 運営に関わって ―― 加藤 立久、高橋 正彦、兒玉 了祐
47 関連学協会等の動き

49 分子研技術課
分子研における放射線管理

大学院教育
52 コラム
55 イベントレポート
56 受賞者の声
57 修了学生及び学位論文名
58 各種一覧

研究不正雑感

西川 惠子
日本学術振興会 監事
千葉大学 名誉教授

昨年千葉大学を定年退職し、現在、日本学術振興会（学振）でボトム･アップの研究の振興や若手研究者養成事業のお手伝いをしている。オフィスのデスクには、毎日、新聞の切り抜きが届けられ、学術に関する諸々の情報の概観を捉えることができる。この1年､｢研究不正がなんと新聞紙上を賑わせたことか……」が率直な感想である。

研究不正の問題は、研究費配分機関として学振の業務にも影響を与えることが懸念される。そうした立場上、STAP細胞事件は表向きには一段落し、この問題を当初から取材を続けてきた科学担当記者による単行本（須田桃子著「捏造の科学者－STAP細胞事件」）が出たので、早速読んでみた。世界三大研究不正の一つとされているシェーン事件（2000～2002年ベル研を舞台に起こった高温超伝導に関する論文捏造事件）を取り扱った本（村松秀著「論文捏造」）も、並行して読み進めた。10年余の時間の開きがあるが、2つの事件を比較してなんと多くの共通点が有るかというのが、一番の感想である。例えば､①博士号取得直後の経験･実績の浅い研究者が当事者であったこと。②罪悪感をほとんど感じていないこと。まるで夢の世界に生き､こうあって欲しいという「願望」がそのまま「実験結果」になったこと。③その「成果」が社会にとって画期的と期待される内容であったこと。④種々の事情で所属した組織が、華々しい成果とスターの出現を強く求めていたこと。⑤当該分野での第一人者が、指導者または共同執筆者であること（水戸黄門の印籠に相当）。⑥問題になっている論文が最初に掲載されたのが商業誌のNatureやScienceであったこと等々である。

我々の分子科学を中心としたコミュニティでは、こうした研究不正は起こりえないと思ってきた。しかし、上記の2書を読んでいて、まかり間違えば我々もすぐその淵にいると末恐ろしくなった。それは､｢再現性」の問題である。捏造や改竄が疑われると、決まって問題になるのは実験結果の再現性である。我々分子科学を専門とする研究者のメインテーマは、簡単には人が追随できないような発想や方法論の構築、世界唯一の実験装置の製作、それを使っての自然現象の探索と物作りである。我々は、それを研究のオリジナリティと呼び、最も誇りとしている。筆者自身も手作りの装置で、ささやかながら世界中でまだ誰も真似の出来ないデータを出している。こうした、簡単には再現性の得られないデータが発表されても、我々は通常疑問をさしはさまない。何故だろうか？　我々の研究テーマが基礎的・基盤的で、すぐイノベーションという出口と直結していないこともあるであろう。実験条件の設定が厳密に制御しやすく、個々の試料の差であるとは我々は主張しないこともある。何にもまして、研究者間の底流に在る信頼関係と思われる。言い換えれば、性善説を暗黙の基盤としている。研究者が当たり前の倫理意識を持っていることを前提に、研究者間の信頼関係があるからである。分野にも依るが、こうした信頼関係が徐々に崩壊して来ているのが昨今の現状である。

研究不正は勿論であるが、研究費の不正使用も大きな問題になっている。これらは確実に、研究費の削減や、研究の枠組みや規制の強化など負の部分として現れる。皮肉を交えて言うならば、もし今回の事件がプラスに働くことがあるとするならば、余りにも出口指向の研究がもてはやされてきたことへの認識と反省と言うことになろうか？

社会全体の発展が頭打ちとなっている現在では、科学技術振興関係の予算は大枠では減少傾向にあり、分野間の予算取り合いが益々強まっている。特に、すぐに出口に直結するイノベーション創出への傾斜が顕著である。学振では、科研費を主体として、研究者の主体性を尊重したボトム・アップの研究への支援と多様な学術の芽を育てることを第一義とし、そのための方策や活動を活発に行っている。現場の研究者の方々も、是非、ボトム・アップ研究の重要性と必要性について機会あるごとに声を上げていただきたい。

にしかわ　けいこ
日本学術振興会 監事、千葉大学名誉教授・特任研究員、理学博士
1948年静岡県出身。1974年東京大学大学院理学系研究科化学専攻修士課程修了。1981年理学博士。
1974～1991年 学習院大学理学部助手。1991～1996年 横浜国立大学教育学部助教授。
1996～2014年 千葉大学大学院自然科学研究科（改組により後に融合科学研究科）教授。
2014年千葉大学名誉教授。2014～日本学術振興会監事、千葉大学特任研究員を兼務。
日本結晶学会賞(1988)、第18回猿橋賞(1998)、第64回日本化学会賞(2012)、文部科学大臣表彰(2012)、紫綬褒賞(2013)、分子科学会賞(2014)を受賞。

岡崎 進 名古屋大学大学院工学研究科　教授

計算科学の昨今あれこれ

おかざき・すすむ

1982年　京都大学大学院工学研究科工業化学専攻博士課程修了（工学博士）
同　　通産省工業技術院大阪工業技術試験所研究員
1987年　東京工業大学大学院総合理工学研究科電子化学専攻助手
1995年　　同　　助教授
2001年　分子科学研究所教授（現在も兼任）
2008年　名古屋大学大学院工学研究科化学・生物工学専攻教授

早いもので、分子研から名古屋大に移って6年半が過ぎた。分子研でも同じく6年半を計算科学研究センターで過ごし、研究はもちろんのこと、計算機の共同利用やプロジェクトのお世話などもさせていただいていた。そのせいか、計算科学という意味ではずっと分子研のお世話になっており、今でもしばしば岡崎にお邪魔しているところである。

この間、計算科学も大きく変わってきているように思われる。ここでは、純粋学問以外のことも含めて、計算科学の昨今のあれこれについて勝手な私見を述べてみたい。

「京」コンピュータ

分子科学に関わる計算科学には、大きく分けて量子化学計算と分子動力学計算の二つの分野があるが、変化という意味では、これら両方の分野に共通なことも多い。その最たるものが「京」コンピュータ（図1）の登場であり、計算の高速化である。これに伴って研究対象とする系の大規模化、また現象に対する大きな統計量に基づいた議論が可能となっており、分野に飛躍的進展をもたらしている。分子研も茅元所長時代に参画した文科省「グリッドコンピューティングシステムの研究開発」以来、「京」コンピュータのためのアプリケーション開発プロジェクトである「ナノサイエンスグランドチャレンジ研究」を経て、現在の「京」コンピュータの中核プロジェクトである「HPCI戦略プログラム」においても戦略機関のひとつとして参加し、分子科学の分野振興も含めて積極的に推進してきている。

これらの中で、特に対象とする系の大規模化の意味は大きい。大規模計算は世上ではしばしば「頭の悪い計算」と言われ、ある意味揶揄の対象ともなっているが、何といっても計算対象にできなかった系や現象を研究できることは非常に魅力的である。これまで、マクロには観察可能であったがミクロには何が起こっているのか何も分かっていなかった系、あるいはミクロであってもある特定の切り口から部分的にしか見えていなかった現象は、むしろ新しいサイエンスの宝庫であり、計算科学が大いに活躍できる領域である。

「京」コンピュータを用いた最近の研究例として、図2に岡山大の田中グループによるメタンハイドレートの融解に伴う気泡生成のシミュレーション[1]を挙げる。これは、固相と液相、そして気相が混在する非平衡系のシミュレーションであり、大規模計算で初めて可能となる。これら三つの相が同時に関わる非平衡な相変化現象は、準安定状態からの相転移現象に物質移動やエネ

図1　「京」コンピュータ。（理研計算科学研究機構の好意による）

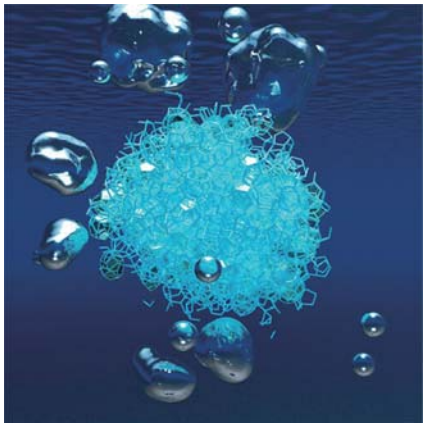


図２　メタンハイドレートの融解と気泡生成の分子動力学計算[1]。気泡は泡状に表現。実際の計算は水も含めた全原子計算。（岡山大田中教授の好意による）

ルギー移動が絡んだ極めて複雑な現象であり、日常的にはごく普通に見られる物質の振る舞いでありながら、これまでその分子論には全く触れられていなかったものである。

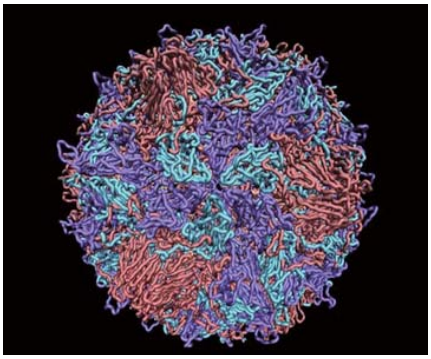
図3には、私どものグループによる小児マヒウイルスカプシドの全原子シミュレーション[2]からのスナップショットを示す。図3(a)は外観、(b)は内部から見た壁面である。いずれも正二十面体回転対称性を反映して、2回、3回、5回回転対称軸の周りなど、美しい絵模様が浮き出ている。作図では水分子は省いているが、計算系は水も含めると約650万原子で構成されている。このような計算から、カプシドの安定性に加えて、熱平衡において水分子はカプシド内外で自発的に交換しカプシドが半透膜として機能すること、またカプシド内部は負圧となっていることなどが見出され、さらにレセプターとウイルスの平均力の計算から、感染初期過程における結合プロセスも明らかになりつつある。

ソフト開発の重要性

しかしながら、このような計算を実現するためには相当な努力が要求される。これは、これまでは計算機のクロック数が大きくなることにより演算性能が向上してきていたものが、「京」を含む近年のスーパーコンピュータでは並列演算により性能向上を目指しているためである。つまり、前者ではプログラムの書き換えは一切不要であったものが、後者で性能を出すためには大変な作業が必要となるということである。低並列であればさして大きな問題とはならないが、例えば「京」コンピュータの場合だと、システムは82,944ノード、663,552コアで構成されており、これらの間で相互にデータを通信しながら効率よく同時に演算を実行させるためには、極めて高度な並列化技術が必要となる。ベクトル計算機の際にもプログラムの修正は必要であったが、並列計算の場合はこれと比較にならないくらいの作業量に加えて、新たなアルゴリズム開発そのものも要求される。以前はほとんど必要のなかったこれらの作業を、研究者が担わなければならないのである。

国からもこの部分は強力に支援されており、前述した「ナノサイエンスグランドチャレンジ研究」もその一環であり、分子研が中心となって量子化学計算や分子動力学計算ソフトなどを「京」コンピュータに必要な主要アプリケーションとして開発を進めた。しかしながら、これには平成18年度から23年度まで6年間にもわたるソフトの開発、高度化が必要であり、この開発期間を見るだけでもいかに大変な作業であったか理解していただけると思う。同様なソフト開発は、CRESTにおいても行われている。そして、これらの成果として、GELLAN、FMO、MODYLASなどの量子化学、分子動力学計算ソフトが現在「京」コンピュータにおいて活躍していることを特に強調しておきたい。例えばMODYLASは[3]、1000万原子系という巨大な分子動力学計算ですら、「京」65,536ノードを用いるとわずか5 msで1ステップ分をすべて計算してしまう。

並列化がいかに大変であっても、や



(a)

(b)

図３　小児マヒウイルスカプシドの分子動力学計算。(a) 外観図、(b) 内部から見た内壁。実際の計算は電解液も含めた全原子計算。色はタンパク質の種類を表す。茶色：VP１、紫色：VP２、水色：VP３、黄色：VP４。名古屋大の計算に基づいて、九州工大入佐准教授作成。

はり開発はしなければならない。なぜなら、この努力を行わないということは、巨大計算機の恩恵を享受できないということを意味しているからである。努力をしている海外の分子科学研究者や他分野の研究者が巨大計算機を思う存分使って大展開を果たしている時に、日本の分子科学だけが旧式の計算機で行き詰っているというわけにはいかないのである。この方向に沿って、共同利用機関の果たすべき役割には重いものがあると理解しており、分子研に対する我々の期待も大きい。また、開発したソフトの普及、展開についても、共同利用の一環としての活動に大きな期待を寄せたい。

ポスト「京」に向けて

現在、国家主要技術として、「京」コンピュータの100倍近い性能を持つポスト「京」コンピュータの開発が進められつつある。そして、この準備としてすでに、ポスト「京」で用いるアプリケーションソフトの開発プロジェクトが始まろうとしている。ポスト「京」を用いて行うべき研究については、文科省の「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会」で議論されたが、委員会答申の形で9課題が提示されている。それらの中で、分子科学に関係した課題としては「革新的創薬基盤」、「エネルギー新規基盤技術」、「新機能デバイス・高性能材料」などがあり、これらの中で「エネルギー新規基盤技術」の確立に関しては、分子研を代表機関とする提案が採択され、現在、新たなプロジェクトがスタートしようとしているところである。

重要なことは、課題名からも分かるように、これらにおいては社会的意義、国家的意義が特に求められていることである。つまり、産業界への貢献である。「京」においても産業界への貢献は重要項目であるが、それがさらに徹底されているように思われる。また、実験研究者との連携も強く要請されており、これは計算科学者による単独研究一般に対するひとつの評価を反映しているものであると理解せざるを得ない。プロジェクトに参加する際には、これらの要請は真摯に受け止めて、まじめに考えていく必要がある。

このような中で、ポスト「京」プロジェクトにどのように向き合っていくか、その方向性が極めて重要となる。特に産業界との連携については、やみくもに反対するのではなく、いい意味でお互いのプラスになるように前向きに進んでいくことができればと願っている。産業界のニーズには共通基盤として学術的に興味深い問題も多いはずで、ニーズからどのように学術的意味を発掘していくか、これについては我々の力量が問われているところである。

以上、昨今の計算科学分野にまつわる種々の状況の中で、特に国の大型プロジェクトがらみのことについて述べてきた。最後に、これらプロジェクトの推進力は、まぎれもなく助教層、ポスドク、大学院生等の若手である。現に「ナノサイエンスグランドチャレンジ研究」、「HPCI戦略プログラム」においては、分子科学分野も若手のがんばりで何とか存在感を示し得て来ているように思われる。その彼らが次のステップでさらに活躍できるように研究環境を整備し、広くチャンスを準備していくのは、我々シニアの役割である。一方で、計算科学分野においても、いわゆるポスドク問題が顕在化しつつある。分子科学研究やソフト開発をさらに大きく発展させるためにも、これらに人生をかけている若い人たちの処遇、ポストの確保については、分野を挙げて考えていかなければならないことである。

参考文献

[1] T. Yagasaki, M. Matsumoto, Y. Andoh, S. Okazaki, H. Tanaka, *J. Phys. Chem.* B **118**, 1900(2014).

[2] Y. Andoh, N. Yoshii, A. Yamada, K. Fujimoto, H. Kojima, K. Mizutani, A. Nakagawa, A. Nomoto, S. Okazaki, *J. Chem. Phys.* **141**, 165101(2014).

[3] Y. Andoh, N. Yoshii, K. Fujimoto, K. Mizutani, H. Kojima, A. Yamada, S. Okazaki, K. Kawaguchi, H. Nagao, K. Iwahashi, F. Mizutani, K. Minami, S. Ichikawa, H. Komatsu, S. Ishizuki, Y. Takeda, M. Fukushima, *J. Chem. Theory Comput.* **9**, 3201(2013).

金属微粒子触媒の構造、電子状態、反応：複雑・複合系理論化学の最前線

江原 正博 計算科学研究センター　教授

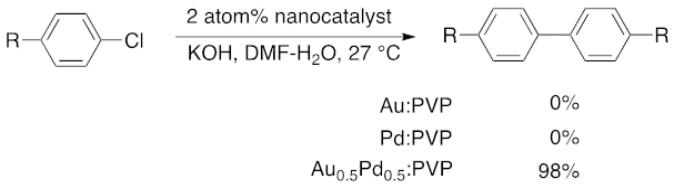
えはら・まさひろ
1965年滋賀県生まれ。1988年京都大学卒業、1993年同大学院博士課程修了、博士（工学）。基礎化学研究所博士研究員、ハイデルベルグ大学博士研究員、1995年京都大学助手、2002年同助教授（准教授）を経て、2008年より分子科学研究所教授。2012年より京都大学触媒・電池元素戦略拠点教授併任。専門は量子化学。

はじめに

金属微粒子触媒は、環境浄化触媒や化成品合成触媒など様々な分野で活用されており、基礎科学的な興味だけでなく、産業における重要性も高い。しかしながら、これらの触媒系は一般に複雑であり、その開発にはこれまで理論化学があまり貢献できていなかった分野でもある。平成24年度より、触媒・電池の元素戦略プロジェクトが開始した。触媒の研究開発では、ターゲットは自動車触媒であり、金属酸化物に担持された金属微粒子触媒が主役である。理論研究においては、担体と微粒子の界面の現象を如何にモデル化するか、強相関系の複雑な電子状態や化学反応をどのように記述するかなどチャレンジングな課題がある。さらに、理論化学の役割は、触媒反応のメカニズムを解明するだけでなく、触媒作用に重要なコンセプトや化学指標を提案して実験にフィードバックし、触媒開発に貢献することにある。本稿では、金属微粒子触媒の研究例として、最近の我々の研究から、高分子や金属酸化物に担持された金属微粒子触媒の触媒作用に関する研究を紹介したい。

高分子で安定化された合金微粒子触媒

金属微粒子を生成する方法として、高分子によって微粒子を安定化させる手法がある[1]。金属微粒子はバルクと異なる特異な反応性を示すが、合金微粒子を用いることによって、より多彩な反応場を設計することができる。最近、金・パラジウム（Au/Pd）合金ナノ粒子が室温で（1）式の反応を示すことを見出した[2]。この反応は合金微粒子でのみで進行し、金やパラジウムの微粒子や、それらの物理的混合では進行しない。また、塩化物では進行するが、臭化物やヨウ化物では収率が減少するか、または反応しない。このように本反応は、安価な基質を利用でき、温和な条件下で進行するなどの長所があり、合金効果の観点からも興味深い。



（1）式

まず金属種の特性を決めている要因を電子状態理論によって検討したところ、塩化ベンゼンの酸化的付加が鍵であることが分かった[2]。Au/Pd合金微粒子では、C-Cl結合活性化がスムースに進行する。一方、Au微粒子では活性化エネルギーが高く、室温における反応は困難であり、Pd微粒子では極めて安定な中間体が生成するなど不利な点がある。

合金微粒子には様々な幾何構造が存在し、それに応じたスピン状態が存在する。Au/Pd合金クラスターの安定な構造とスピン状態を、遺伝的アルゴリズムと密度汎関数理論（DFT）を用いて検討した[3]。$Au_{10}Pd_{10}$のような比較的小さなクラスターにおいても、多くの安定な構造とスピン状態が存在する。また、反応においても様々な状態が近接または交差しており、内部転換や系間交差を経由している可能性が示唆された（図1）。さらに、反応が効率的に進行する経路は必ずしも最安定状態で

はなく、反応に有利な経路がある結果が得られた。このことは、金クラスターによる水素活性化においても見出されている[4]。

実際の反応系では、Au/Pd合金微粒子は高分子（ポリビニルピロリドン、PVPなど）によって安定化されている。その熱力学的な側面も興味深いが、ここでは触媒作用に重要な影響をもつPVPの電子供与の効果についてみてみる。PVP4分子を微粒子に吸着させたモデルを用いた理論計算から、PVPは微粒子に電子を供与し、活性化エネルギーを下げる効果があることが分かる（図2）。実際には、高分子中のPVPのユニットが配位して微粒子を安定化し、空いているサイトやPVPが脱着したサイトに基質が酸化的付加をして反応が進行することになる。

合金微粒子のどのサイトで反応が進行するかは、微粒子触媒で重要な点である。Au/Pd合金微粒子は、実験ではコア・シェル構造も観測されているが、本反応ではAu:Pd=1:1の組成比の場合に活性が高く、この組成比ではAu原子とPd原子がともに表面に存在していることが想定される。図3に示す幾つかのモデルで検討したところ、Auサイトでは活性化エネルギーが高く、PdサイトおよびPd-Pdサイトでは低いことが分かる。また、$Au_{18}Pd_2$ではコア・シェル構造のモデルができるが、Pdコアの効果は十分ではない。これらのことから、本反応ではPdサイトが活性点として重要な役割を担っていると考えられる。

このように、金・パラジウム合金の微粒子触媒では、合金効果、微粒子化の効果、環境場の効果が触媒活性の鍵であり、極めて繊細なエネルギーによって反応が制御されていることが分かる。これらの知見から、高分子担持微粒子

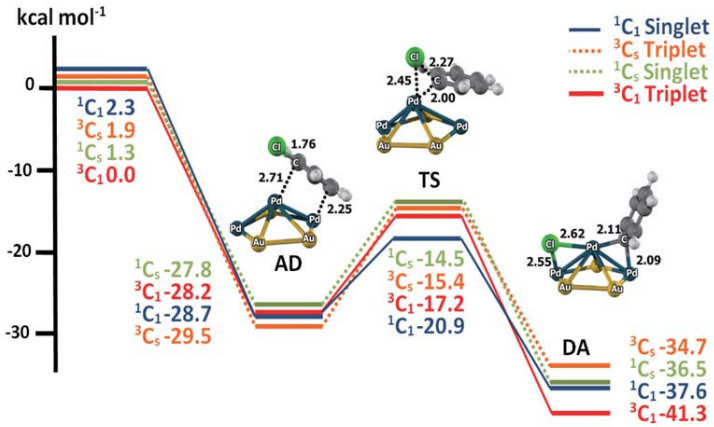
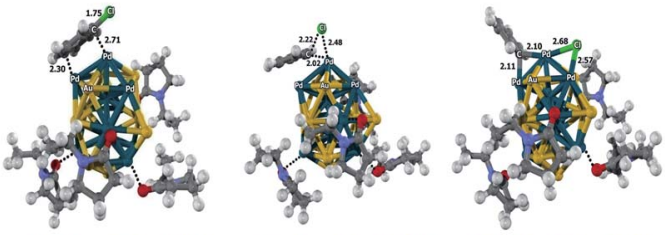


図1 Au/Pdナノ粒子における塩化ベンゼンの酸化的付加のエネルギー図
（ナノ粒子の構造は活性点のみを表示）

モデル	構造	ΔE_{ads}	ΔE_{TS} (E_a)	ΔE_{im}
$Au_{10}Pd_{10}$ (neutral)	$^3C_1$	−28.2	−17.2 (11.0)	−41.3
$Au_{10}Pd_{10}$: 4PVP	$^3C_1$	−25.3	−17.4 (7.9)	−41.0
$Au_{10}Pd_{10}^-$ (anion)	$^2C_1$	−27.0	−19.8 (7.2)	−44.0

(kcal/mol)

E_a: AuPd (anion) < AuPd: 4PVP < AuPd (neutral)



AD $Au_{10}Pd_{10}$ 4PVP　TS $Au_{10}Pd_{10}$ 4PVP　DA $Au_{10}Pd_{10}$ 4PVP

図2 周囲の高分子（PVP）の効果：電子供与によって活性化エネルギーが下がる。

モデル	構造	ΔE_{ads}	ΔE_{TS} (E_a)	ΔE_{im}
$Au_{10}Pd_{10}$ (Pd site)	$^3C_1$	−28.2	−17.2 (11.0)	−41.3
$Au_{10}Pd_{10}$ (Pd-Pd site)	$^3C_1$	−26.5	−18.3 (8.2)	−36.9
$Au_{10}Pd_{10}$ (Au site)	$^3C_1$	−30.4	-2.8 (27.5)	−35.8
$Au_{18}Pd_2$ (Au site)	$^1C_1$	−16.4	15.8 (32.3)	−14.1
Au_{20} (Au edge)	^1T_d	−13.2	27.0 (40.4)	14.2

(kcal/mol)

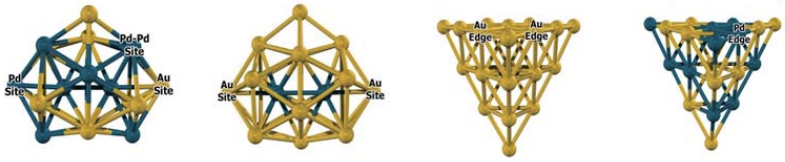


図3 反応のサイト依存性：PdサイトやPd-Pdサイトが活性点となる。

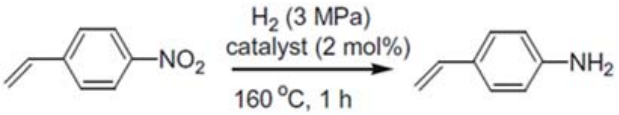
触媒では、合金の種類や組成、粒子径、高分子を改変する事によって、触媒反応の可能性が広がることが期待できる。

アルミナに担持された銀微粒子による水素活性化

金属酸化物に担持した微粒子触媒は広く利用されているが、その触媒活性には、微粒子と表面のヘテロ接合部が重要な役割を持つと考えられる。銀はバルクでは酸化触媒として知られるが、銀がナノ粒子化し、金属酸化物表面と相互作用することによって表面エネルギーが増加し、水素活性化が起こる。最近、銀微粒子をアルミナ表面に担持することによって、(2)式で示されるニトロ基の選択的水素化が進行することが、清水･薩摩らによって見出された[5]。

本反応では、基質にC=C、C=O、C≡N等が含まれていても水素化されず、ニトロ基のみをアミノ基に選択的に水素化する。また銀微粒子のサイズ効果も観測されており、銀微粒子の量子効果、担体・界面の協同作用が重要と考えられる。本反応では水素の同位体効果が観測されており、水素解離が律速段階であることが見出されている。しかし、水素活性化のメカニズムはこれまで理解されていなかった。

そこで、周期的境界条件に基づくDFT法を用いた研究を行った[6]。アルミナに担持した銀微粒子のモデルとして、$Ag_{13}/\theta\text{-}Al_2O_3$を採用した（図4）。このモデルで計算した銀の配位数やAg-Ag距離は、EXAFSで観測された実験値をよく再現した。状態密度の解析から、銀クラスターのdバンドのエネルギーは、銀表面と比較してフェルミレベル側に近づく結果が得られた。これは銀ナノ粒子がアルミナ表面と相互作用することによって触媒活性が高まったことを示している。このように



（2）式

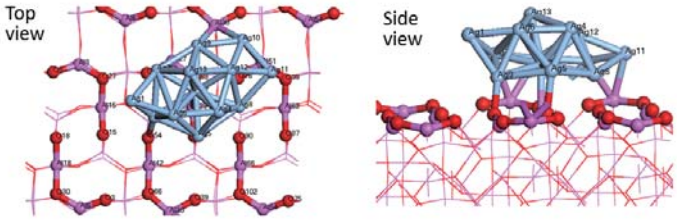


図4 Ag/ θ -Al_2O_3の理論計算モデル

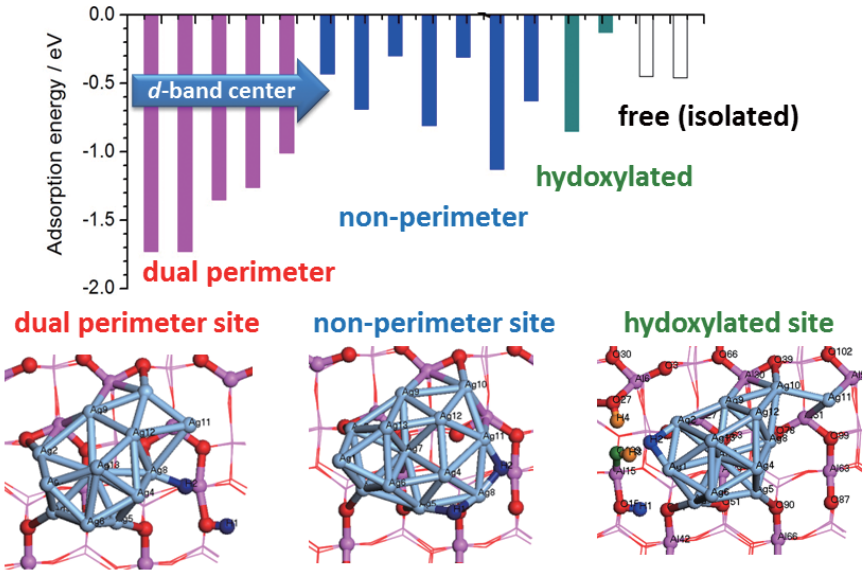


図5 水素の解離吸着エネルギーおよび解離吸着構造

触媒活性には、銀クラスターの粒子サイズとアルミナ表面の効果が重要であると言える。

水素の解離吸着を様々なサイトで検討したところ、解離吸着エネルギーは接合界面（dual perimeterサイト）で大きく、金属微粒子上（non-perimeterサイト）では小さいことが分かった（図5）。また、dual perimeterサイトでは活性化エネルギーは極めて小さく、水素はヘテロリティックに解離（Ag-H$^{\delta-}$、O-H$^{\delta+}$）する結果が得られた。これらの結果から、銀ナノ粒子とルイス酸・塩基ペアサイトの協同作用が重要であることが分かった。さらに、吸着エネルギーとd-バンド中心のエネルギーには相関

がある結果が得られた。

周期境界DFT計算によって、アルミナに担持した銀ナノ粒子の水素活性化のメカニズムを明らかにした。銀微粒子と担体のルイス酸・塩基ペアサイトの協同作用が重要であること、吸着エネルギーとd-バンド中心には相関があること、接合界面（dual perimeter site）において水素はヘテロリティックに解離し、ヒドロキシル化されていない界面が重要であることなどを示すことができた。これらの知見や指標は、担持微粒子触媒の開発に有用であり、より一般的なコンセプトに繋げたいと考えている。

今後の展望

金属微粒子触媒は学術的にも産業的にも重要であり、そこでは複雑・複合系の理論研究が期待されている。触媒システムは大規模系であるが、微細なエネルギーによって制御されており、正確な理論計算プロトコルが求められている。現在、DFT法が多く用いられるが、システムは強相関系であり、大規模系の電子相関理論の開発や方法論の検証[7]も重要である。また、触媒は様々な環境下で動作しており、温度や酸素分圧などを考慮することも重要と考えられる。現在、アンカー効果や合金効果に注目した研究を進めているが、複雑・複合系の理論化学を深化させ、触媒作用のコンセプトや化学指標を提案し、触媒開発に貢献したいと考えている。

ここで紹介した研究は、主に櫻井英博教授（阪大）、清水研一准教授（北大）、森川良忠教授（阪大）との共同研究であり、理論計算はB. Boekfa博士、P. Hirunsit博士が実施してくれた成果である。またここでは紹介できなかったが、我々の研究室の重要な研究として、励起状態理論と内殻電子過程の研究がある。これらの研究では福田良一助教、田代基慶特任助教（現在、計算科学研究機構）が活躍してくれた。その他、多くの共同研究者の方々にこの場をおかりして深く感謝したい。また、これらの研究は、触媒・電池の元素戦略プロジェクト、分子研協力研究、ナノプラットフォーム協力研究などの助成によるものである。

参考文献

[1] H. Tsunoyama, H. Sakurai, Y. Negishi, and T. Tsukuda: *J. Am. Chem. Soc.* **127** (2005) 9374-9375.

[2] R.N. Dhital, C. Kamonsatikul, E. Somsook, K. Bobuatong, M. Ehara, S. Karanjit, and H. Sakurai: *J. Am. Chem. Soc.* **134** (2012) 20250-20253.

[3] B. Boekfa, E. Pahl, N. Gaston, H. Sakurai, J. Limtrakul, and M. Ehara: *J. Phys. Chem. C.* **118** (2014) 22188-22196.

[4] H. Gao, A. Lyalin, S. Maeda, and T. Taketugu: *J. Chem. Theory Comput.* **10** (2014) 1623-1630.

[5] K. Shimizu, Y. Miyamoto, and A. Satuma: *J. Catal.*, **270** (2010) 86-94.

[6] P. Hirunsit, K. Shimizu, R. Fukuda, S. Namuangruk, Y. Morikawa, and M. Ehara: *J. Phys. Chem. C.* **118** (2014) 7996-8006.

[7] J.A. Hansen, M. Ehara, and P. Piecuch: *J. Phys. Chem. A* **117** (2013) 10416-10427.

訃　報

酒井 楠雄 元技術課長ご逝去

分子科学研究所技術課の元課長酒井楠雄氏が11月に亡くなられました。謹んでお悔やみ申し上げます。ここでは、酒井さんのご略歴を紹介しつつ、少し思い出に触れてみたいと思います。

酒井さんは、昭和47年に（株）日本真空技術（現アルバック）から高エネルギー物理学研究所に助手として赴任されました。一方、分子研は昭和50年4月に創設されましたが、装置開発室に採用された若い技官たちは技術的にまだ未熟でした。そこで、指導者的立場に立てる人材を探した結果、昭和54年4月に技術課班長として酒井さんが着任されました。この異動は研究教育職から行政職への転換でしたので、給料が下がったというぼやきは後に度々聞くことになりました。しかし、同様に薄給だと愚痴る若手に「技術者は給料だけで働くんじゃねーんだよ」と、自らも諭すように語る酒井さんのべらんめえ調は、今でも鮮明に思い出されます。

その後、昭和57年4月に新しくUVSOR施設が創設され、酒井さんの仕事もUVSOR中心になったことで、装置開発室の班長からUVSOR施設の班長に移籍されました。酒井さんは、UVSOR施設でも相変わらず若い技官たちに「（なにいっ）てやんでい、俺についてこい」と親分的存在を発揮しながら、以降10数年にわたって活躍されました。そして、平成7年10月に内田技術課長の後任として技術課長に就任され、分子研が法人化される直前の平成15年度末まで、約40名の技官組織の長として分子科学研究の技術支援にご尽力されました。

私事ですが、酒井さんとは仕事以外の事でも長くご一緒させてもらったので、思い出やエピソードは語り出したら尽きません。分子研を退職されてから10年、寿命にしてはまだ早いのではと思います。心よりご冥福をお祈りします。

（鈴井 光一　記）

2003年要覧より　技術課集合写真（技術課長として最終年度）

訃 報

丸山 有成 名誉教授ご逝去

先生が56歳の頃のお写真

略歴

昭和10年1月28日出生
昭和34年　東京大学理学部化学科卒業
昭和36年　東京大学大学院理学系研究科修士課程修了
昭和36年　東京大学物性研究所　教務員
昭和37年　東京大学物性研究所　文部技官
昭和38年　東京大学物性研究所　助手
昭和42年　理学博士（東京大学）
昭和47年　お茶の水女子大学理学部化学科　助教授
昭和55年　お茶の水女子大学理学部化学科　教授
昭和59年　分子科学研究所分子集団研究系　教授
平成 7年　分子科学研究所　名誉教授
　　総合研究大学院大学　名誉教授
平成 7年　法政大学工学部物質化学科　教授
平成17年　法政大学　定年退職
平成17年　法政大学マイクロ・ナノテクノロジー研究センター
　　客員教授
平成26年10月30日 永眠 享年79、瑞宝中綬章受賞

丸山 有成先生を偲んで　緒方 啓典（法政大学生命科学部 教授）

丸山有成先生と私の出会いは、私が大学院修士課程を修了し、総合研究大学院大学の学生として丸山先生の指導を受けた時から始まります。当時の私は、物理的概念に基づき新たな物質を設計し、その機能を制御できる可能性をもった化学の分野に大きな魅力を感じ、当時錯体化学実験施設にいらした池田龍一先生を頼って分子科学研究所を訪問し、いくつかの研究室を見学させて頂きました。その際に、初めてお会いした丸山先生は、現在進歩が著しい有機エレクトロニクス分野の基礎となる有機半導体に関する多くの先駆的な研究を井口洋夫先生とともに行うなど、当時から大変著名な先生でしたが、有機物に限らず特異な電子物性を示す様々な固体や、超薄膜化による物性制御など、新しい研究に積極的に取り組まれており、全くの門外漢であった私の意見に熱心に耳を傾け、様々な貴重な助言を頂きました。その後、私を総合研究大学院大学博士課程学生として温かく迎えて頂き、自由に研究をする機会を与えて下さいました。当時の丸山研究室は、助手の稲辺保先生、技官の星肇さん、数名の総研大生をはじめ、国内外の多数の研究者が頻繁に研究室を出入りしており、大変活発で明るい雰囲気の研究室でした。丸山先生は、研究所運営や、諸外国との研究交流の促進等で、超多忙な仕事をこなしつつも、周りの研究者やその家族への心遣いも常に忘れられず、研究者や学生が安心して研究できる環境を提供できる様、常に配慮されていました。また、超多忙のスケジュールの合間を縫って、早朝や深夜にご自身で手を動かし実験を行うなど、現役研究者としての姿勢も示されていました。私は大学院修了後、分子集団動力学研究部門に赴任された宮島清一助教授の元で助手として採用され、丸山研究室の隣に居を移しました。その後、丸山先生は平成7年に分子研を定年退官され、法政大学に移られましたが、私も縁あって平成13年度より法政大学に採用され、再び丸山研究室の近くに自分の研究室を構えることとなりました。法政大学での丸山先生は、多くの雑事の合間を縫って、連日大学の門が閉まる夜の11時過ぎまで、様々なタイプの学生を相手に分け隔てなくマンツーマンで粘り強く教育および研究指導を行い、多くの学生を育てて来られました。また、生死にかかわるいくつかの重い病気と戦いながらも、人に対しては常に穏やかな姿勢で接せられており、丸山先生の驚異的な精神力の強さに驚かされることが度々ありました。平成17年の法政大学定年退職時の最終講義では、法政大学での10年間に行った研究のみに話を絞り、ご体調が優れない中、全力で講義をされていたことが深く印象に残っています。丸山先生は一貫して、どのような状況にあっても平常心を保ち、静かで根気強く、かつ強い熱意で研究に取り組まれており、丸山先生の研究に対する真摯な姿勢に私はいつも励まされてきました。

丸山有成先生のご冥福を心よりお祈りいたします。

分子研に丸山研ができたころ　稲辺 保（北海道大学大学院理学研究院 教授）

私が丸山研の助手に着任したのは1984年の8月でした。丸山先生が分子研に転任されたのはその年の2月で、お茶大から2名の美人女子学生を引き連れて来られたので、当時の分子研の若手男性にとってはセンセーショナルな出来事だったようです（その内の1名は、現在東大物性研で活躍されている森初果教授です）。丸山先生は分子集団研究系（分子研発足時の研究系の一つ）の第一期計画の最後の部門である「分子集団動力学研究部門」に着任し、1995年3月までの約11年間、初代教授を務められました。単身赴任は本望ではなかったと思いますが、スバルのバンでの週末の東京往復ドライブを楽しんでいるようにも見えました。このバンを我々は「すし号」と呼んでいましたが（寿司屋の出前の車に似ていた）、荷物を運ぶときの威力は素晴らしく、私が赴任したときの大量の段ボール箱（アメリカからの引っ越し）を公務員宿舎まで運んでもらった時（その上、重い段ボール箱を、階段を上って運ぶのを手伝ってもらった時）、教授の先生にこんなことやってもらっていいんだろうかと、非常に恐縮したことを覚えています。その後、若手スタッフや学生が困っているときにも、気軽に何でも引き受けてくださる様子を見て、相手の身分・立場によって対応を分け隔てることがまったくない心優しい人なんだなと、感心していました。また、遊び心も旺盛で、部門の英語名が「Molecular Assemblies Dynamics」だったことから、略称の「MAD」をこよなく愛していた点も印象深いです。野球も大好きで、走るのは遅かったですがバッティングのセンスは光るものがあり、野球大会での野次られながらも奮闘する姿は愛すべき存在でした。

丸山先生は、「仕事の鬼」というイメージではなく、楽しく研究をやっていたいという雰囲気でした。しかし、分子研発足からまだ日が浅かったため、実績を上げるために様々な用務に駆り出されていた点は、傍から見ていても気の毒で、本来の希望であった研究三昧の生活にはなかなか入り込めなかった感じです。他の教授の先生方も大変な毎日を過ごされていたことは重々承知していますが、分子集団研究系のボス（というより分子研設立の立役者）で、1987年に所長になられた故井口洋夫先生の片腕という存在だった丸山先生には、特に難題が降ってくる頻度が高かったような気がします。私も本来、研究室の助手として丸山先生をサポートすべき立場だったのですが、先生の抱える難題は私のような学生に毛が生えた程度の未熟者には近寄ることもできませんでした。その分、研究面でサポートをしっかりしていたかと言われると、（自分が主体的に関与するテーマに関しては研究成果をあげようと努力はしていましたが）丸山先生の大切にしている高価な実験装置を使いこなせるまでのレベルに達することができなかった点はちょっと心残りです。また、分子研の使命である海外の研究機関・研究者との緊密なコネクション作りに丸山先生が奮闘していたときにも、あまり手助けできなかった点は申し訳なかったと感じています。丸山先生は、長良川の鵜飼いに外国からのお客さんをよく連れていっていました。

そんなわけで休日も休む暇なく活動し、平日は分子研の将来のために骨身を削っていた丸山先生の健康状態は、周りの人間にとって常に心配の種でした。幸い分子研在任中は入院するほどの大事はなかったですが（ただし、健康診断の結果は要注意マークがいっぱい付いていたようです）、退職後に何度か病院のお世話になっているとの情報は入ってきました。それでも法政大学のハードな勤務をしっかり勤めあげている様子を耳にして、弱音を吐くことがあっても、根は丈夫なんだなと思っていました。そんな風に思っていたので、今回の訃報はある意味衝撃でした。いくつもの障害を乗り越えてきた丸山先生でしたが、やはり天命があることを再認識しました。

最後に、思い出に残っている写真を披露します。何年かは忘れてしまったのですが、井口先生の号令で分子集団研究系の懇親会を職員会館の二階の和室（今では和室の存在はほとんど忘れ去られていると思いますが）を借りきって行ったときの集合写真です。前列中央にどっしりと構えている井口先生とは対照的に、丸山先生は最後列右端に遠慮がちに写っています。これから分子研を益々もり立てようと全員意気盛んだった頃の懐かしい写真です。

所長招聘会議「未来を拓く学術のあり方：教育と研究」

平成26年8月29日午後に標記所長招聘会議が開催されました。日本学術会議・化学委員会（委員長：栗原和枝 東北大教授）、日本化学会（筆頭副会長：中條善樹 京大教授）、分子科学研究所（研究力強化戦略室長：筆者）の企画によるものです。分子研研究会に収まりきらないため、昨年度までは所長招聘研究会として開催してきましたが、内容的には研究力強化が中心議題の会議でしたので、今年度から研究大学強化促進事業として位置付けることにしました。当日は、各講演者の講演時間オーバーにより全体的に遅れ気味になりましたが、いつものように放談会的になって大幅に遅れるほどではありませんでした。なお、いつもの野依先生のご講演がSTAP問題で直前になってキャンセルされたり、岡崎コンファレンスセンターのいつもの会議室が確保できなかったり、主要メンバーがお忙しい時期でかなり欠席されたり、と今回はいろいろありました。

詳細な報告は、日本化学会の「化学と工業」誌第67巻12月号（2014） p.p.1076-1079に掲載されていますので、ここでは印象に残った点をいくつか記すだけにします。第1部のテーマは「学生を含めた若い人にいかに化学に夢を持ってもらうか」などで、企業が求める人材という切り口での講演もありました。昨今、強調されがちな大学を職業訓練校のように捉える考えから高い専門性での課題解決能力を学生に求めるばかりでなく、専門に囚われない潜在能力の方を重視する企業もあり、大学・大学院の役割を改めて考える機会になりました。第2部のテーマは「これからの学術の在り方」で、研究大学関連の講演もありました。我が国の学術研究は「挑戦性、総合性、融合性、国際性」が脆弱である、文系・理系の縦割りや高い専門性によって視野が狭く型にはまった人材ばかりが増えている、などの指摘がありました。また、多様な分野が自然発生的に生まれてくる場であった大学は過去のものとなり、今や学長の任期中の短期決戦的選択・集中施策によって特定分野が強化され、潜在能力を引き出す学術基盤が崩れつつある現状を、改めて認識する機会になりました。大学の若手を分子研で育てて大学に戻すという分子研の特徴も、相手を人単位ではなく大学単位で見直さないといけない状況なのかも知れません。

（小杉 信博　記）

アジア連携分子研研究会 日韓生体分子科学セミナー：実験とシミュレーション

平成20年に開始して以来、毎年恒例となっている日韓生体分子科学セミナー：実験とシミュレーションは、今回で第7回目を迎えた。このセミナーは、分子科学研究所ならびに韓国のKorea Institute for Advanced Study (KIAS)、Korea Advanced Institute of Science and Technology (KAIST) に所属するメンバーが中心となり、日本と韓国で交互に開催されている。今回のセミナーは、2014年11月26－28日の日程で、Jooyoung Lee博士が主オーガナイザーとなって7年ぶりにソウルのKIASで開催された。韓国からは17人、日本からは窓口役をつとめる青野重利教授と私をはじめ、15人の研究者が参加した。

前回に引き続き、新学術領域研究「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」が共催しており、生体分子の構造・反応・相互作用の研究を基盤としつつ、さらにそれを分子システムの機能的ダイナミクスへと展開することを目指した実験および理論の研究成果が数多く発表された。例えば、1分子計測によるモータータンパク質の動態やDNA構造転移のダイナミクスの解析、小胞体内腔において酸化的フォールディングにかかわる一群の酵素の分子ネットワーク形成および糖タンパク質の品質管理メカニズムの構造基盤の

解明、生きた細胞内におけるタンパク質立体構造の安定性のNMR解析、RNAポリメラーゼの細胞内分子数の揺らぎと遺伝子発現能の揺らぎの定量的相関解析など。さらに、カーボンナノチューブを利用した1分子DNAシークエンサーの開発、光応答性オリゴヌクレオチドを利用した遺伝子発現の制御、DNA複製と脂質分解反応を組み込んだジャイアントベシクルによる人工細胞分裂システムの創成などの話題提供がなされ、活発な議論を喚起した。本会の発起人の1人である桑島邦博先生（総研大／KIAS）も、両国からの参加者の懸け橋として、深夜に至るまで活躍された。

次回の日韓生体分子科学セミナーは、分子研側がホストとなって2015年度に開催される予定である。

（加藤 晃一　記）

第3回NINSコロキウム「自然科学の将来像」報告

自然科学研究機構（NINS）の佐藤勝彦機構長・岡田清孝理事を中心とするワーキングループで企画されるNINSコロキウムも本年度で3回目を迎え、第1回コロキウム同様に、富士山を望む芦ノ湖のほとりに佇むザ・プリンス箱根において、12月1日～3日の日程で開催されました。

このコロキウムの開催趣旨は、講演者の研究成果発表を目的とする通常の研究会とは異なり、自然科学研究機構に属する5研究所を中心に様々な分野の研究者が集い、設定されたテーマに沿って、自然科学の現状と将来について様々な観点から議論を行うことで、（1）機構内外の研究者の交流を促進すること、（2）multidisciplinaryな視点で自然科学の将来に向けた新たな方策を模索・提言することで更なる発展への寄与を目指すこと、の2点にあります。今回は「科学的論理展開の在り方ー物理学と生物学は分かり合えるかー」「光でひも解く自然科学ー光技術のニーズとシーズー」「シミュレーションの正体と招待」という、分子科学研究所にも関係する3つの議論テーマが設定されました。

進行形式は概ね第1回・第2回を踏襲する形で、1日目は全体講演会が催され、各議論テーマに関係した研究者を2名ずつお招きし、研究分野の現状と将来へ向けた課題をご提示して頂きました。2日目は議論テーマごとに分科会に分かれ、自由討論・ブレインストーミングが行われました。3日目は各分科会での議論内容を発表し合い、全体で討論が行われました。全体講演会でご講演下さいました平等拓範先生、分科会発表会でご尽力いただきました鹿野豊先生にこの場を借りてお礼申し上げます。また、アカデミアだけでなく社会をも騒がせた最近の事件を受け、今回は「基礎科学研究者と社会：その社会的責任とは？」と題する特別セッションと、夕食後のリラックスした雰囲気で「似非科学」について議論するナイトタイムトークの時間が設けられました。

運営面では、過去2回のコロキウムでは機構5研究所の各々が一つの議論テーマ・分科会を担当・進行するという形式をとりましたが、今回は各研究所の垣根を取っ払い、一つのテーマ・分科会を複数の研究所で担当することになり、山本浩史先生と石崎は、天文台・核融合研・生理研の先生方と共同で分科会「光でひも解く自然科学ー光技術のニーズとシーズー」を企画・担当いたしました。また新たな試みとして、ワーキングループ会議にJST研究開発戦略センターより講師をお招きしてファシリテーションの進め方についてレクチャーを受けるなど、過去2回の分科会進行の反省（議論が声の大きな人の意見に引き摺られる問題など）を踏まえ参加者が積極的に議論に加わることができる分科会の形式を取りました。multidisciplinaryという意味では本来の機構コロキウムの趣旨に沿った意義深いものになったのではないかと思います。

年に一度、5研究所の様々な分野の研究者が集い自然科学の将来像を模索するNINSコロキウムは、自らの研究分野を「他分野にとってどうでもよい事をチマチマと議論している」と相対化・客観視することで、自然科学研究における自らの立ち位置を広い視野から反省させられる良い機会になっているのではないかと思います。一方で、回を重ねるごとに当初のコロキウム開催趣旨から逸れた（ように感じる）茶番劇場の側面が生じ始めているのも事実かもしれません。それぞれの研究者が各々の分野で確固たる芯やプレゼンスを持つことが先ずは大切で、異分野融合はその先に自発的に生成消滅するのだろうと思います。その意味で、これまでのNINSコロキウムから自然発生的に人材交流・分野連携が幾つか生まれているのは素晴らしいことだと思います。しかし（トップダウン、分野の閉塞感など動機は様々でしょうが）それ自身が目的となるような分野間連携への取り組みはなかなか難しいのではないかな？という思いを強くした第3回NINSコロキウムであったような気がします。とはいえ、次回は何処で開催され、どのような企画がなされるのか、今から楽しみです。

今回のコロキウム詳細は以下のウェブサイトをご覧下さい。

http://www.nins.jp/public_information/colloquium3.php

（石崎 章仁　記）

受賞者の声

奥村久士准教授に平成26年度分子シミュレーション研究会学術賞

倉重佑輝助教に平成26年度分子科学研究奨励森野基金

西山嘉男助教に平成26年度日本分光学会年次講演会若手講演賞

山根宏之助教に第7回分子科学会奨励賞

奥村久士准教授に平成26年度分子シミュレーション研究会学術賞

このたび「生体分子系、液体系における分子動力学シミュレーション手法の開発と応用」に関する研究で、分子シミュレーション研究会学術賞を受賞いたしました。大変光栄に存じます。授賞式および受賞講演は2014年11月13日に行われました。これまでご指導いただいた慶應義塾大学の米沢富美子先生、故能勢修一先生、東京大学の伊藤伸泰先生、名古屋大学の岡本祐幸先生、諸先輩方、共同研究者の方々、および常に興味深い研究成果を出し続けてくれている私の研究室メンバーに深く感謝いたします。また選考に関わってくださった先生方に厚くお礼申し上げます。

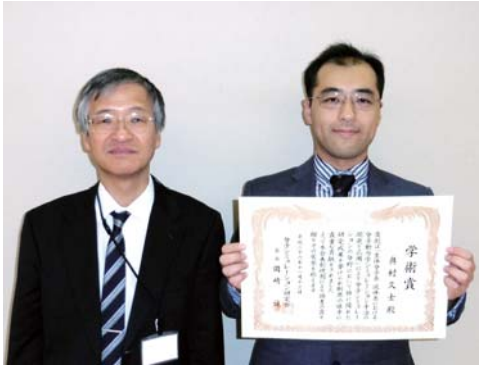
この賞は分子シミュレーションに関する研究において、その業績が顕著であると認められた満40才以下の個人に授与される賞です。今回の受賞は、私が大学院生のころから今まで取り組んできた一連の研究を評価していただいてのことと思っています。その中には分子研で助手を務めていたころに行っ

た、加熱、加圧による物性の変化を正しく調べることができるマルチバーリック・マルチサーマル法の開発や、温度一定の条件下における剛体分子のシンプレクティック分子動力学法の開発、さらに現在取り組んでいるタンパク質の高圧変性やアミロイド線維形成、破壊の分子動力学シミュレーション研究が含まれています。これらの研究で成果を挙げることができたのも分子研の良い研究環境のおかげと感謝しています。

受賞講演では米沢先生の物まねやこれまでお世話になった方々との思い出話など盛り込んで話したところ、大いに受け、笑いを取ることができました。そのおかげか受賞講演後の懇親会では多くの先生や研究者と話をするきっかけがつかみやすく、交流の幅が広がりました。

今回の受賞を励みにこれからも精進を重ね、分子動力学シミュレーションによって分子科学の発展に少しでも貢献できるよう努力してまいりたいと思います。特に、アミロイド線維の核生成、伸長過程という動的な秩序形成過程の全容を明らかにしていきたいと考えています。今後とも皆様のご指導、ご鞭撻を賜りますようよろしくお願いいたします。

（奥村 久士　記）



授賞式にて分子シミュレーション研究会会長の岡崎進名古屋大学教授（左）と。

倉重佑輝助教に平成26年度分子科学研究奨励森野基金

このたび、「密度行列繰込み群に基づく多参照電子状態理論の開発および生体内金属酵素反応への応用」という研究課題にて、平成26年度分子科学研究奨励森野基金の研究助成を頂きました。森野基金は、初めて「分子科学」という領域名を提案され、日本の分子科学の創成期において大きな足跡を残された故森野米三先生の寄付により始められた基金で、そのもっとも重要な活動の一つが分子科学の将来を担う有望な若手研究者への研究助成です。これは、それまでの優れた研究成果に対して一層の発展を期待して助成が行われるというように、賞としての側面があるとのことです。

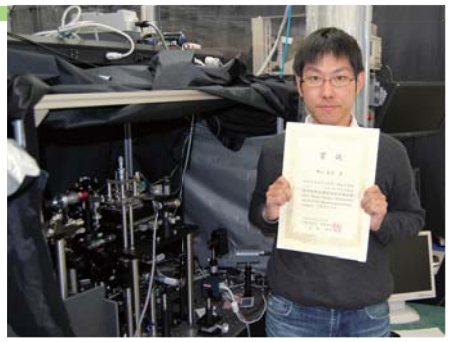
さて題目にある多参照問題とは、強い電子相関のもとで発現する特異な電子状態においては現在の電子論の基礎である分子軌道描像が成り立たなくなるという問題です。いまだ信頼性の高い記述法や基礎概念が十分に確立されておらず、理論化学の残された問題となっています。私は分子研に着任して以来、この問題に対する理論の確立を目指して開発を続けてまいりました。具体的には密度行列繰り込み群という方法を基礎とする多参照電子相関法の開発になりますが、基礎開発を経て最近ようやく実際の化学の問題に応用できるようになってきた所でありまして、所外の研究者との共同研究も含め、本理論を用いた応用研究をすすめております。光合成水分解マンガンクラスターや鉄二核不飽和化酵素など幾つか成果が出てきておりますが、長年残されていた理論的問題だけあって、本理論の適用を待つ系は多く残されているように感じます。

8月29 日に東京大学理学部小柴ホールにて行われた研究助成金贈呈式では、今までに基金を受給された先生方がその後の研究の発展について講演され、また今回から、コメンテータの先生を加えて分子科学の現在・未来についてディスカッションを行うという森野ディスカッションが開催され、非常に有意義かつ貴重な体験をさせて頂きました。基金受給者の名に恥じぬよう、本助成による一層の発展をこの場を借りてお誓いしたいと思います。

（倉重 佑輝　記）

前列右から３番目が筆者。

西山嘉男助教に平成26年度日本分光学会年次講演会若手講演賞



平成26年度日本分光学会年次講演会において、若手講演賞をいただきました。日本分光学会年次講演会は、光源の開発から生細胞のイメージングに至るまでの分光に関する幅広い分野の研究成果を討論する場です。多くの講演の中から受賞できたことを大変光栄に思っております。また同時に、多くの質問・コメントをいただき、研究の進展という点でも有意義な学会となりました。

今回の講演では、分子研に着任以来取り組んできた、貴金属ナノ粒子のプラズモンの時間分解イメージングの内容について発表させていただきました。これは、プラズモンの構造の変化を動画として見る（通常のイメージングはいわゆる静止画の観察）ことでプラズモンの性質（特に動的な性質）を明らかにしようというものですが、研究の肝となるのは、観察するために必要なナノメートルの空間分解能とフェムト秒の時間分解能を同時に備えた超高速近接場顕微鏡の開発です。分子研着任以前は超高速分光の研究をしてきた私にとって、時間と空間の極限に迫るようなこの研究は大変興味深いものでした。ただやはり、近接場顕微鏡の経験が全くなかった私がいざ取り組んでみると、想像し得なかった難しさがあり、装置を作っては壊すことの繰り返しでした。そんな中、研究室の方々からの貴重な支援・アドバイスをいただきながら問題を一つずつ克服していくことで、最近になってようやく成果を得られる段階まで来ることができました。

結果が出始めた矢先に講演賞という形で評価していただいたことは、今後の研究に向けて大きな励みになっています。今回の研究で開発した方法は、プラズモンの性質を制御できる可能性を持っており、その実現を目指して今後の研究に取り組んでいきたいと考えています。

今回の研究に対してご指導いただきました岡本裕巳教授に、この場を借りて感謝を申し上げます。また、多くの実験面で助けていただいた成島助教をはじめ、研究室の皆様にも感謝の意を申し上げます。

（西山 嘉男　記）

山根宏之助教に第7回分子科学会奨励賞

写真提供：分子科学会

このたび、「放射光を用いた精密電子分光による有機薄膜・界面の構造と電子状態の相関の系統的解明」という題目で第7回分子科学会奨励賞を受賞いたしました。この賞は、分子科学研究分野において質の高い研究成果を挙げ、分子科学の発展に寄与した40歳以下の若手研究者に対して授与されるものです。海外出張と重った2012年を除いて、学生時代（2001年）から参加し続けてきた最も重要な学会の奨励賞を頂き、大変光栄に思います。

私は分子研着任後、極端紫外光研究施設（UVSOR）における分子系に最適化した角度分解光電子分光（ARPES）装置の開発を行い、機能性有機分子（有機半導体）の電気伝導に関連した薄膜・界面電子状態と分子の集合状態との相関を研究してきました。一般的な放射光ユーザーは多くても年間4-5週程度のマシンタイムしか確保できず、系統的な研究を短期間で行うことはほぼ不可能です。私は所内ビームライン担当という恵まれた環境で研究を進めることで、弱い分子間相互作用を精密評価する方法論を確立し、従来は議論が困難だった分子性薄膜の結晶構造と電子状態の相関を元素・官能基レベルで評価することに成功しました（詳細はプレスリリース記事@2013年9月／www.ims.ac.jp/news/2013/09/02_1252.html）。今回の受賞はこれらの研究内容を評価して頂けたものであり、研究活動を支えて下さった小杉先生とUVSORスタッフの皆さんに感謝いたします。

現在は上述した一連の研究で発見した新奇な電子状態の解明に取り組んでいるところです。今回の受賞を励みに、分子科学の発展と自身のステップアップに向けて精進したいと考えています。

（山根 宏之　記）

01　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 Catalysis and Battery (ESICB)

平成24年度に開始した「元素戦略プロジェクト＜研究拠点形成型＞」は今年度で3年目を迎え、いよいよ研究活動も本格化し、顕著な成果も出始めている。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、その中で触媒・電池材料領域は京都大学に研究拠点を置いており、分子科学研究所は電子論グループの連携機関として参画している。本プロジェクトのミッションは、汎用元素を利用した高性能な触媒と二次電池の開発であり、具体的には、自動車排ガス浄化触媒とナトリウムイオン電池の開発である。

ここでは、1年半前の分子研レターズ68号に報告して以降の研究拠点の活動を概括する。「公開シンポジウム」は年2回開催が定例化され、本年も3月19日に第4回が東大本郷キャンパスにて、10月14日に第5回が京大桂キャンパスにて開催され、それぞれ100名程度の参加者を得ている。公開シンポジウムでは3件の招待講演に加えて、触媒、電池、電子論各グループからの研究報告が行われている。また、本プロジェクトで活動している博士研究員の講演を中心にした「次世代ESICBセミナー」も、本年10月で4回を数えている。さらに、年2回のペースで内部的な研究交流会として「触媒・電子論合同検討会」および「電池・電子論合同検討会」を開催し、実験と理論研究の交流を促進しながら、研究開発を推進している。これらの合同検討会では、実験・理論双方から、研究の進展の報告が行われ、ポスター発表による議論がなされている。またこれ以外にも「電子論検討会」や「電子論分科会」を開催しており、理論研究独自の方法論開発や触媒・電池研究への応用に関係する共通の話題について議論を行っている。さらに、昨年度からESICBコロキウムとして、この分野における国内外の著名な研究者を招へいした講演会も随時開催しており、現在まで8回目を迎えている。

このようにプロジェクト内外の研究交流を積極的に行っており、実験と理論の相互理解も発足時点と比較すると

格段に進展したという実感がある。実際、幾つかのグループで、実験と理論の共著の論文も成果として出てきている。また、触媒・電池の複雑・複合系を取り扱うことのできる理論開発も進展しており、今後、触媒・電池の革新的な材料の開発に繋がることが期待される。

（江原 正博　記）

02　文部科学省「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）の構築」ＨＰＣＩ戦略分野２「新物質・エネルギー創成」計算物質科学イニシアティブ（ＣＭＳＩ）計算分子科学研究拠点（ＴＣＣＩ）第５回研究会

平成21年度の実施可能性調査から始まったHPCI戦略分野プロジェクトも6年目となった。平成26年10月17日(金)，18日（土）に、岡崎コンファレンスセンター(OCC)にて、計算分子科学研究拠点（TCCI）の研究会（全体シンポジウム）を開催した。今年度は予算削減の影響で、毎年開催してきた「TCCI実験化学との交流シンポジウム」も兼ねて、本研究会を開催することになった。このため、実験研究者5名を含む招待講演6件と、TCCIメンバーからの成果報告など（口頭9件、ポスター30件）が行われた。参加者数は69名（民間企業から3名を含む）であった。今回の企画は、斉藤真司教授（分子研）と佐藤啓文教授（京大院工）が担当した。

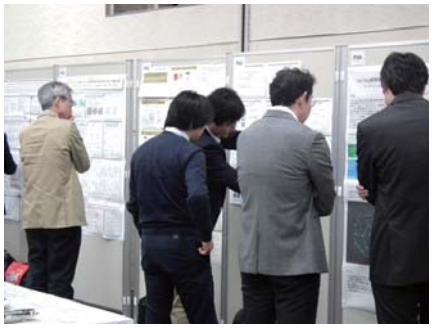
冒頭、拠点長の高塚和夫（東大院総合文化／分子研）が開会の辞を兼ねた拠点報告を行い、文部科学省の川口悦生計算科学技術推進室長よりご挨拶を頂いた。開発の始まった「京」の次のスーパーコンピュータについて、理研AICSエクサスケールコンピューティン

グ開発プロジェクトの石川裕プロジェクトリーダーから「ポスト京コンピュータ開発概要」と題して、検討中の内容についてご紹介を頂いた。TCCI側からは、安藤嘉倫特任講師（名大）、石村和也特任研究員（分子研）がそれぞれ開発を担当しているアプリケーションソフトのポスト京に向けた方針と課題について報告した。

理研放射光科学総合研究センターXFEL研究開発部門の矢橋牧名ビームライン研究開発グループディレクターからは「X線自由電子レーザーSACLAの現状と展望」と題して世界の最先端のSACLAの状況と今後の予定について、公益財団法人地球環境産業技術研究機構（RITE）化学研究グループの中尾真一グループリーダーからは「二酸化炭素分離回収技術の現状」と題してCO_2分離回収技術の開発状況と特に回収コスト低減を含めた今後の研究開発の取組みについて、京大の阿部竜教授からは「太陽光水素製造を目指した可視光応答型光触媒系の開発」と題して人工光合成に繋がる光触媒の研究開発状況について実験の様子も含めて、分子研の正岡重行准教授からは「金属錯体を利用した多電子酸化還元触媒の開発」と題してやはり人工光合成を目指した触媒開発の状況について、同じく分子研の飯野亮太教授から「生体分子モーターダイナミクスの1分子計測：構造解析と理論予測との協奏を目指して」と題して分子モーターに関する研究についてご講演を頂いた。

例年の「TCCI実験化学との交流シンポジウム」と同様、TCCIメンバーからの報告は実験研究者の講演テーマに近い内容を同じセッションで発表するようにアレンジされていることに加えて、ポスト「京」コンピュータで重点的に取り組むべき社会的・科学的課題の一つとして「エネルギー問題」が選定されていることから、「実験でできること」「計算でできること」を中心に活発な質疑が行われ盛会となった。なお、HPCI戦略分野プロジェクトは、平成27年度が最終年度となる予定である。

（高塚 和夫　記）



03　ナノテクノロジープラットフォーム

ナノテクノロジープラットフォーム（以下、ナノプラット）は開始から3年目を迎えました。ナノプラットは文部科学省の委託事業であり、大学や研究機関が所有する装置や研究のノウハウを、公平に民間企業や非営利団体、大学の方々に利用してもらい、科学技術の発展に貢献することを目的とした共用事業です。10年間続きます。微細加工、微細構造解析、分子・物質合成の3つのプラットフォームとセンター機関から成り、分子研は11機関から成る分子・物質合成プラットフォームの代表機関並びに実施機関として活動しています。ナノプラット室には、代表機関運営責任者・実施機関実施責任者である横山教授、分子・物質合成プラットフォーム全体を担当している金子運営マネージャーの他、数名のメンバーがいます（筆者は分子研部分を担当しています）。

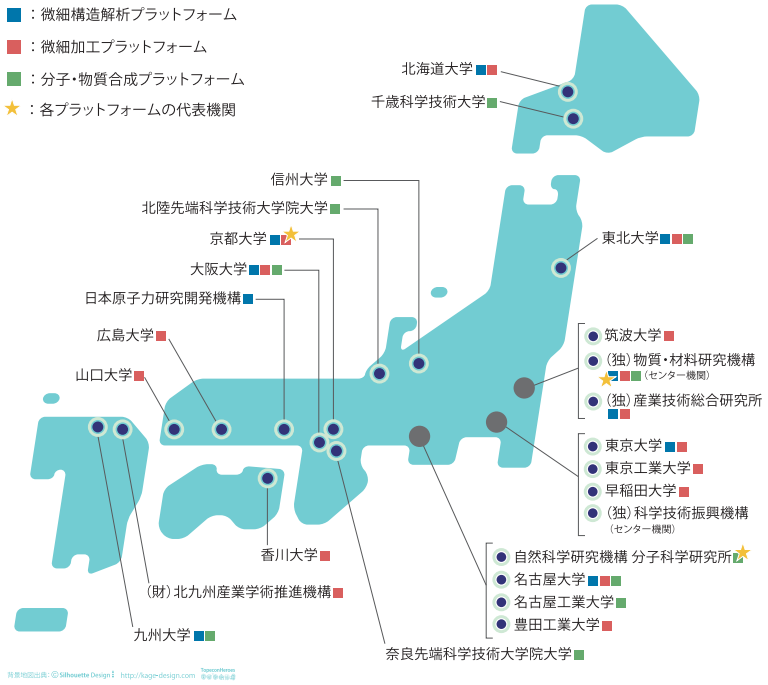
分子研の中の方にとっては、これまでの業務と特に変わらないことが多く、ナノプラットを意識することは少ないと思いますが、ナノプラットが始まったことにより今まで分子研の存在さえ知らなかった人に利用していただく機会を多く作ることに成功しています。また、民間企業の方も利用料を支払えば分子研の装置を利用できるよう

になっています。とはいっても、この2年半の実施課題数329件（公開・非公開利用の合計。ナノプラットは通年で1件として数える）のうち民間利用は46件しかなく、他の実施機関に比べると民間の利用件数は少ない状況です。それでもそこそこの収入になっていますので、共同利用の強化に使える予算がナノプラットを通して増えたと考えていただければと思います。もちろん、社会貢献が重要なのですが。

具体的な分子研の支援として、UVSORからは、我が国唯一の共用装置である走査型軟X線透過顕微鏡装置と世界的にも共用設備の少ない超高真空高磁場極低温軟X線磁気円二色性測定装置を公開しており、海外を含めて多くの利用者を迎え数々の成果を挙げています。920 MHz NMRを用いた超高速試料回転固体NMRの開発（平成24年度、東京農工大）は、もともと物質・材料研究機構（NIMS）の超高磁場NMRを利用して開発を予定した研究でしたが、東日本大震災でNIMSのNMRが大きな被害を受けたための復興特別支援となりました。また、高磁場ESRを利用した成果として、内包フラーレン分子錯体の特徴的分子磁性（平成25年度、京大、筑波大、JST）があり、He原子を内包したフラーレン合成により世界で初めてHe原子のX線回折を捉えた研究が非常に注目を集めています。合成支援においては、有機FET作成支援に基づく「分子性ディラック電子系における量子輸送現象」（平成24-25年度、東邦大、阪大、理研）、有機合成支援に基づく「Pd/USYゼオライトを触媒とした高選択的かつ高効率的C-C結合生成反応の開発」（平成24年度、鳥取大）などで成果が挙がっています。また、平成26年度には、このところ大きな社会問題となっている危険ドラッグに関連した支援（科警研）を行っています。

事業の補正予算として、機能性材料バンド構造顕微システム、低真空電界放射分析走査型電子顕微鏡、X線溶液散乱計測システム（機器センター）、マイクロストラクチャー作製・評価装置（装置開発室）を導入し、本年度より運用開始致しました。前身のナノテクノロジーネットワークプロジェクトのときには分子スケールナノサイエンスセンターに事務室があったのですが、分子スケールナノサイエンスセンターが廃止になってからは事務室が見えなくなってしまいました。しかし、来年からようやく機器センターが受け皿になって事務室も一本化できることになりました。ナノテクプラットフォームは異分野融合を推進しています。機器センターをコアとして関連する施設と協力し、事業の発展だけでなく、分子研の発展にも貢献できれば幸いです。

（井上 三佳　記）



文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム実施機関一覧。
■の機関が分子・物質合成プラットフォームの実施機関。

ナノプラットは所内の融合交流にも貢献しています！
（忘年会@日間賀島　2014年12月）

04　大学連携研究設備ネットワークの現状

大学連携研究設備ネットワークは、全国の国立大学の有する研究設備を相互に利用することで設備の有効活用をはかり、同時に研究者の利便性向上に寄与することを目的として、全国の国立大学法人と自然科学研究機構（分子科学研究所）が連携して推進しているプロジェクトです。前身は2007年度から開始された「化学系研究設備有効活用ネットワーク」で、他大学の装置を利用するという形態になじみやすい化学系の分野でまず相互利用のシステムを構築しようと、化学系の教員・各大学の機器分析センター等が中心となってプロジェクトがスタートしました。その後3年経過した2010年度より(1) 対象分野を化学系に限定しない、(2) 公私立大学・企業等からの利用も可能とする、などの変更を加え、名称も大学連携研究設備ネットワークと改称して現在に至っています。分子科学研究所が行っていた従来の施設利用を包含しています。

他大学の装置を予約して利用する為に、インターネットを利用した予約システムを構築しました。ユーザーはwebブラウザを使ってこのシステムにアクセスします(URL: http://chem-eqnet.ims.ac.jp/)。

システムには各大学で相互利用に供する設備とその管理者を登録してあり、登録ユーザーは全国の大学の装置を予約することができます。測定を自分で行う（マシンタイムを確保する）タイプの予約（相互利用）と、サンプルを送付して管理者に測定してもらうタイプの予約（依頼測定）2つの利用形態が用意されています。

設備の利用料金は四半期毎に大学単位で相殺処理を行います。参加している72の国立大学は12の地域に分けられ、地域毎に拠点校を設定していますが、相殺処理は各大学が使用した料金（支払い）と提供した設備の料金（収入）の差額のみを拠点校との間でやり取りし、相殺処理後、各大学内で予算の振替等によって設備を利用した研究室から料金を徴収し、設備を提供した部署へ料金が配分されます。

2007年5月に、登録機器119台、登録ユーザー4700名で、予約システムが稼働開始しましたが、2014年12月現在では、登録機器676台、登録ユーザーは1万名、登録研究室数は2300を越えています（表1、図1,2）。各種統計データを表1、2、図1～5にまとめてありますが、それぞれの数値で順調な成長を示しています。

以下、化学系研究設備有効活用ネットワーク、大学連携研究設備ネットワーク（以下、「設備ネットワーク」と略記）の出来事を順に記します。

スタート当初、大学間での利用を想定していたため、各大学の状況は他大学に公開できる数台の設備だけ当ネットワークの予約システムを使い、その他の多数の設備は従来の予約システムを使用するという変則的な状況になっていたかと思われます。利用者からすれば似たような設備なのに予約システムが違うという不便な状況になっていたと推測されました。この状況を改善するため、当予約システムを学内向けの設備でも使えるように、システムの改良をしました。“学内専用”と設定された設備は同じ大学のユーザーからしか予約ができず、設備の存在自体も他大学からは見えないようになっています。2009年12月に改良を行い、2010年度になってから実際の登録がされ始めましたが、利用件数のグラフ（図5）より、この頃を境に利用件数が急激に増えていることがわかります。

表1 大学連携研究設備ネットワーク登録者数

	2007年5月	2014年12月
全ユーザー	4729名	10002名
設備管理者	101名	376名
研究室責任者（＝研究室数）	792名	2385名

表2 登録機関数（2014年12月現在）

国立大学	73
公立大学	9
私立大学	26
公的研究機関	7
民間・企業	37
その他	2
計	154

表3 登録の多い設備（2014年12月現在）

カテゴリ	学内設備	公開設備	計
NMR(溶液／固体)	24	77	101
質量分析装置(MS)	27	62	89
X線回折装置（薄膜・単結晶）	12	54	66
電子顕微鏡(SEM, TEM)	22	35	57

表4 生物関連機器の登録台数（2014年12月現在）

カテゴリ	学内設備	公開設備	計
DNAシークエンサー	12	10	22
PCR装置	5	8	13
プロテインシークエンサー		4	4
セルソーター、フローサイトメーター、マルチプレックスアッセイ	12	2	14
マイクロプレートリーダー、イメージングサイトメーター	1	2	3
蛍光顕微鏡	4	1	5
バイオアナライザー	1	1	2
パラフィンブロック/切片 作装置	2		2
ペプチド合成機	1		1
レーザーマイクロダイセクション	1		1

72機関の国立大学と分子研で構成されていた当プロジェクトですが、2010年度より公私立大・民間企業等の参加も受け入れるようになりました。これは、予約システムへの登録を可能とし、利用者側としてのみ参加できるという扱いで、既存の国立大学とは異なり、以下のような規定がされています。

・公私立大・民間企業等の設備を設備ネットワークに登録・提供することはできない。

・従来からの設備提供機関は各機関の判断で公私立大・民間企業等への利用提供に対応してよい。義務ではない。

・料金の相殺処理は行わず、直接2機関の間で料金の授受を行う。

設備ネットワークは、予約システムの利用を解放するだけで相殺処理も行わないので、設備提供大学は個々に利用機関に対して料金請求の事務を行うことになります。また設備の提供は義務ではなく、「公私立大は利用可、企業の利用は不可」等といった個々の大学独自のルールでの運用が可能です。登録に際し、企業や大学の規模が大きく動きがとりづらい場合には、学部単位や研究所単位などでも登録を受け付けています。

2014年12月現在の登録機関数を表2に、国立大学以外の登録機関数の推移を図4に示します。ホームページ上の私立大学等登録手順の記載を見やすく改修した効果か、2013年4月から機関の登録数が伸びています。各大学の事情をうかがうと、設備ネットワークに登録されている機関であると大学の事務方での通りがよく、事務処理がスムーズに運ぶという話も聞かれます。

2011年度より文部科学省の設備サポートセンター事業が開始されました。これは、毎年数校の大学を選定し、学内の設備を有効利用する体制を整えるもので、3年間予算措置があります。設備ネットワークとは直接の関係はないものの、学内設備を全学的に利用できる体制を整えるにあたり、当設備ネットワークの予約システムを利用される例が多く、この事業の開始とともに設備の登録台数も増加しています（図3）。

登録数の多い設備は、表3に示す通り化学系のものが多いですが、最近では生物・農学・医学等の分野からも登録があります。表4に生物系で登録されている設備の例を示します。また、変わった所ではファイトトロン（植物を育成する温室）などの登録もあり、数ヶ月単位での利用に合わせてシステムの改修も行いました。

設備ネットワークでは、第1期中期計画期間中は特別経費等の配分が文科省からあったおかげで登録設備に対する予算措置を行うことができ、2008-2009年の2年間で45台の設備の復活再生（修理、オプションの追加・交換によるグレードアップ等）を行いました。また、2009年度補正予算により、36台の設備が新規に購入され設備ネット

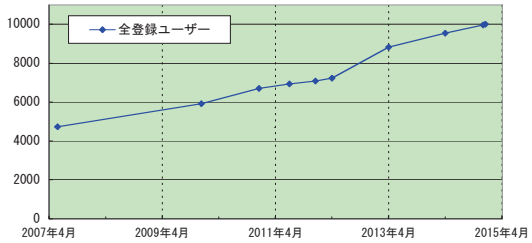


図１ 登録ユーザー数の推移

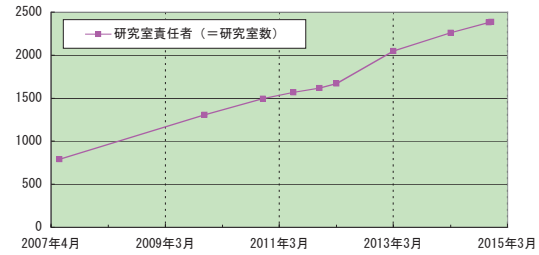


図２ 研究室責任者数（＝研究室数）の推移

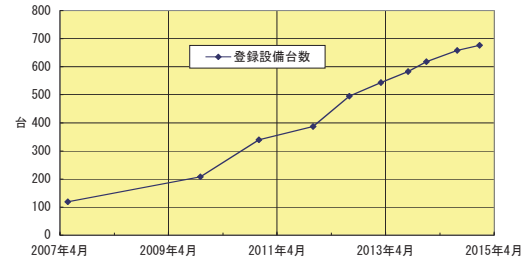


図３ 設備登録台数の推移

図４ 公私立大・企業の登録数推移

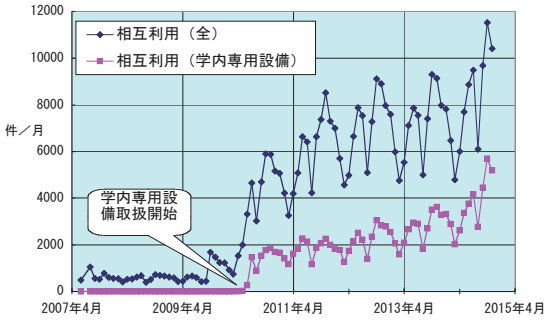


図５ 相互利用（分子研では施設利用に相当）件数

ワークに登録されています。第2期中期計画期間（2010年～2016年）でも概算要求獲得の努力はしましたが、結果的には特別経費等の予算措置がなくなりました。しかし、分子科学研究所として内部的に機関間の共同研究に対する補助に限って予算を確保し、新規に導入された36台の設備の利用を軸として、装置利用料や旅費等の補助や設備の利用講習会等の補助を続けています。

設備ネットワークでは、参画国立大学に対して予約システムのソースの配布を行っています。各機関で利用しやすいようにシムテムを改良し、学内用のシステム等として利用することができます。第3期中期計画期間（2016年～2022年）の予算は厳しいと聞いていますが、少なくとも設備ネットワークの維持と各機関での予約システム構築への協力は継続しますので、引き続きご活用いただければ幸いです。

（岡野 芳則　記）

国際研究協力事業報告

01　アジア冬の学校

2015年1月13日（火）から16日（金）にかけて、日中韓台の4カ国で毎年順番に開催している「アジアコア冬の学校」が岡崎コンファレンスセンターにて開催されました。今回は「総研大アジア冬の学校」との共催により、例年に比べて規模も大きくなり（講師19名、その他参加者93名）、中国、台湾、韓国、タイ、ベトナムといった多くの国々から参加がありました。

プログラムは、「実験と理論計算」、「新材料のデザインと合成」、「物質科学」、「光分子科学」、「生命科学」の5つのセッションで構成され（詳細はhttp://www.ims.ac.jp/aws14/program.htmlを参照）、台湾で開催された昨年度のスタイルに近いものでした。前半は学生からの質問が少なかったのですが、座長や教員から繰り返し促すことで、中盤から後半にかけて徐々に積極的に手が挙がるようになりました。幅広い分野から参加者が集う学校ですので、学校としてのテーマ設定だけでなく、講師陣の話題提供内容や方法など、改善に向けて検討すべき点が見受けられました。

開催にあたり、講師の先生方、所内の担当委員の先生方、秘書、総研大生の多くの方々に協力を頂きました。この場をお借りし、お礼申し上げます。

なお、次回の「アジアコア冬の学校」は、中国がホストとなる予定で、開催地は北京周辺、時期は2016年1月の第2～3週あたりが候補となっています。

（秋山 修志　記）

私の葛藤

南部 伸孝
（上智大学理工学部物質生命理工学科　教授）

なんぶ・しんこう／
略歴
1994年に慶應義塾大学大学院にて博士号を取得。1992年より分子科学研究所助手，2005年から九州大学情報基盤センター准教授を経て，2009年より上智大学理工学部物質生命理工学科教授として従事し，現在に至る。専門は量子化学・化学反応動力学・計算科学
近況
50歳になりました。そこで頭に浮かんだのは岩田先生のことです。53歳頃に慶應義塾大学より定年の短い分子研への異動を決断されたご意志と使命感に驚きを覚えます。65歳定年延長の議論がされている中，60歳定年を主張されたとも伺っています。岩田先生は60歳で定年退職された分子研では最後の教授になりました。その一方，現在はどうでしょうか？研究に活発なのは，どうも一度退職されて雑用もなくなった先生方です。我々の世代は国立大学のみならず，少子化問題対策が深刻な私立大学においても大学組織改革等が続き，大学の研究力強化と言いながらも研究に費やす時間が益々少なくなっています。大学の教育力強化も迷走中です。研究・教育を犠牲にしてまで改革することに時間を割いても，その結果，全体の底上げにもなっておりませんし，また，優れた研究者，優れた教育者を生み出すシステムにもなっていません。どこかおかしな世の中です。

慶應義塾大学大学院博士課程を1992年中途退学後、分子研では12年と9か月間お世話になりました。今の時代とは異なり、指導教官である岩田末廣先生から、分子研の計算機センター助手（前任者：長嶋雲兵先生の異動後）の人事へ応募してみてはどうかとお話を頂き、応募しました。面接を経て合格し、すぐ着任するよう分子研から連絡を受け、7月1日付けで着任しました。理由は、その当時大きな社会問題であったスーパーコンピュータの導入が関係していたためです。今思うに、1983年の3年生の学生実験にて、OSとしてUNIX環境を使った学生（理論化学）の一人であり、岩田先生と若き博士・修士課程の学生数名が立ち上げた研究室は、様々な分野にとっても画期的な事柄であったように思われます。

兎も角、その後は分子研にてスーパーコンピュータの調達・管理、および研究の両立を目指しました。幸いだったのは、自分のポストは単独助手のポストであったため昇進はないのですが、業務もあるのだから任期もないとされていました。ただし、後半の数年は他の方々からいろいろ言われ、あまりいい思い出が残っていないのも事実です。特に、お前はまだ「三原子分子」の研究かと言われたことには、怒りを覚えました。しかしその後、三原子分子の研究のおかげで、電子移動反応理論によりノーベル化学賞を受賞されたRudolph "Rudy" Arthur Marcusと仕事をすることとなります（また、新潟大の徳江郁雄先生、九大の田中圭一先生、原田賢介先生、分子研の中村宏樹先生からは励まされ、感謝しています）。次世代スーパーコンピュータ関連の国際会議が2008年ごろ開催され、お台場にてMarcusを呼んで講演会が行われた時、初めて彼と直にお会いすることができました。実は、彼は私の同位体分別に関連する研究をとても気に入っており、2005年ごろからRudyという名前で沢山のメッセージをくださっていたのですが、Marcusとは全く分からず、共同研究を断っていました。しかし、これを機会に「誰かが分かり」、共同研究へ進みました。ただし、三原子分子は次世代スーパーコンピュータとは全くなじまず、このような基礎研究は端へ追いやられるのみです。Marcusは、凄いコンピュータがあるのに何故できないのか嘆いていましたが、私も同感です。彼は学問の垣根を越えて研究をされる方です。研究者までが縦割り行政と化している日本のような現状を鑑みると、現在92歳の彼の研究活動を見てはどうかと思うばかりです。

2005年からは、九州大学情報基盤センターへ助教授として異動することができました。青柳睦先生が先に異動されており、彼が私の現状を認識していたためか、まさに感謝あるのみです。かなり自由に研究をさせていただきました。しかし、別な教授から早く出るようにと言われておりましたので、長くはいられないと認識していました。その一方、自分の中では変化が始まっていました。きっかけは、分子研の中村宏樹先生と特別推進研究を行い、機能分子デザインを始めたところにあります。具体的には、古典分子動力学および統計論の勉強と生理活性分子探索、そして蛍光タグ分子の理論的デザインを始めました（2014年には、細胞実験まで成功[J. Photochem. Photobio. A: Chem. 289, 39-46 (2014)]）。

九大で4年が過ぎ、ここも長いかと思っていた矢先に、2009年からは上智

大学へ異動することになりました。面接がとても変わっていて、全教員が参加され質問を受けた記憶があります。70名近くの異分野の方もいる中で話したのは初めての機会でした。後で分かったのですが、学科が再編され、2008年度より人事が始まったため、このようなこととなったようです。それまでは講座制がしっかり残った学科だったのですが、再編後は全員が単独の研究室を持ち、すべての教員に教授までの昇進の機会がある学科へと変わったようです。一方、私は、異動した直後からほぼすべての学事を引き受けることになりました。さらに、授業の数はやはり多く、特に、担当する1年生の実験が春学期水曜から金曜まで午後1時半から4時45分まであり、大分慣れましたが、初めは大変でした。

異動から2年後には、文科省のグローバル30が始まりました。上智大学は初めは特に希望しなかったようですが、文科省から連絡があり、外国人のための英語コースを始めます。早下隆士 理工学部長（現学長）から英語で講義のできる講師はいないかと頼まれ、急遽東工大からDanielache博士を呼ぶこととなりました。実は彼とは、また三原子分子の研究で共同研究を行い、彼の博士論文副査を行っていました。ただし、博士号取得後は彼とは全く研究をしていません。従って、どのくらい成長しているか楽しみでした。英語コースには、初年度5名の学生（日本人2名を含む）しか入学がありませんでしたが、来年度は20名近くの学生が（定員30名）入学予定です。本学は全体で約1000名の外国人学生がいるのですが、半分が欧米から、残りがアジアからとなります。また、一期生の外国人になぜ理工の英語コースを選んだのかを聞くと、「日本の企業に就職したい」などがあり、決して英語を学びたいとはなっていません。特に、その学生は日本語も話せるのですが、日本人の受ける試験はレベルがかなり高いので、英語コースを選んだそうです。我々も英語コースを日本人の学生向けへは開いていません。しかし、今年度から始まったスーパーグローバル30では、日本語コースの授業の25%を英語化することが求められています。従って、英語化が進むことと思われます。そこで注意しないといけないことは、我々は優れたインタープリターを養成するのではなく、外国が求める日本の学術・技術力を教える機会を増やすことであると思います。私の英語はひどいのですが、Marcusは私を探し当てて来ました。面白い研究は必然的に残ると思われます。

最後に、分子研時代に嫁さんがいつも「あなたの研究は、分子研以外の人から共同研究の申し出を受け、いつも分子研以外の方が聞きに来ていたので、次の職場が見つからないで分子研を追い出されることはないわよ。」と言って励ましてくれました。彼女にとても感謝しております。

岡崎の思い出。その２、 多くの人の通過点の視点で。

猿倉 信彦
（大阪大学レーザーエネルギー学研究センター　教授）

さるくら・のぶひこ／東京大学大学院物理工学専攻修了工学博士、NTT基礎研究所、理化学研究所、分子科学研究所助教授を経て現職。
趣味は飛行機にのること。海外の美術館、博物館めぐりと子供とあそぶこと。

私は、1996年2月から2005年12月のおよそ10年間を助教授として分子科学研究所で過ごさせていただいた。32歳から42歳の、まあそれなりに元気に自分でプレーする年齢のタイミングであった。大阪大学へ移って既に9年になるので、時のたつのは早いもの。私にとっての分子研時代はどんな時間であったのか？　この手のことを考えるいい機会である。分子研の助教授、プレーイングマネージャーができるのは、確かにとても楽しかった気がする。プレーヤーとマネージャーの好い所取り、分子研や学生時代を過ごした東大物性研、研究員をしていた理研などでは、プレーイングマネージャーはある意味当然だけど、多くの大学において、助教授・准教授がもはやプレーヤーで

はない日本の現状を考えると、幸せだったのだと思う。分子研、総研大には感謝したい。

前に一度、岡崎を卒業した後の雑感を分子研レターズに書かせてもらったので、その時とのダブリがないように。当時4歳の息子も今や中1君。彼は岡崎のことを忘れているわけではないのだけど？　変に前向きなやつなので、引っ越ししたら前のことはできるだけ振り返らないようにしているのだそうだ。学習塾の都合で5年生の時に西宮に引っ越し、前の茨木の小学校のことは忘れる。中学は私立に行っているので公立の時のお友達も振り返らない。そんなに乾燥した考え方でいいのかはやや疑問だが、ベタベタしているよりはいいのではないだろうか？　親父はおっさんなので、そんなに割り切りがいいわけではない。職業研究職なのだから、ある程度いい論文をそこそこの数書くのは当たり前。ERATO兼務時のボス、細野秀雄先生がおっしゃっていた言葉、“装置の価値は持って5年、論文10年、人は30年、人を造りましょう”。もちろん人を偉くするにはいい論文が必要だし、論文を書くには装置も必要。

ここで、岡崎のころに関わっていた人たちで、それなりにうまくいっているのではないかとこちらが勝手に思っている人たちを中心に列挙してみよう。総研大生もIMSフェローも随分と沢山いたように思う。私は、極めて平凡な大学教員なので、すべての人を幸せにできたとは思ってはいない。関わった人の７割が、10－20年後に感謝してくれたらOKと思うことにしている。100点は無理だし狙わない。自分がお世話になった人にどの程度感謝しているか？していたかを考えると、直接の関係が切れて20年後に感謝してもらえる人が７割なら、かなりいいスコアではないだろうか？　そして、こうでありたいと思っている。こちらの意識では、つい最近まで博士課程の学生やポスドクだった人が、こちらの期待以上に偉くなっていくプロセスを見るのは大変うれしいことである。劉振林君、理研でのスタッフ、総研大生そして細野ERATOのポスドクとして1994年から2001年まで8年間、かなり無茶を言ったけど一生懸命頑張ってくれた。いま米国IMRAのファイバーレーザー開発で活躍中。1994年に彼に初めてたこ焼きを食べさせてあげたこと、1995年の冬、彼と深夜実験をしていた時、宅配ピザを取った際“このおいしい未知の食べ物はなんですか？”と聞かれたことはとても印象に残っている。彼にとって、中国の張春から世界に羽ばたくいいステップになったのでは？　小野晋吾君、彼は1997年に理科大からの受託学生で4年から岡崎に来てくれた。学振をなんとか取ってもらったし、博士の早期取得もして、当方の助手さんにもなってくれた。2006年10月に32歳で名古屋工業大学の助教授さんに栄転してくれた。総研大生で入学してきた鈴木祐仁君は、学位取得後、防衛省の研究所に採用され福島での計測とか＃＃＃（伏字）とかで大活躍のようだ。高橋啓司君は総研大で2年で学位をとり、電通大の助手さんに採用され、その後、米国の研究機関で活躍中。ベトナムからの国費留学生、ミン・パム君。彼はベトナム科学アカデミーの研究所の副所長になっている。何回か客員とかポスドクで招聘しているのだけど、昨年ハノイで、彼の研究所とうちの研究センターの共同研究契約を大使館関係者同席のもと調印した。フィリピン大学からのマリル・カダタルさん。彼女は総研大で学位をとり、現在ニュージーランドの大学でパーマネントの講師として仕事をしている。最優秀講師賞も昨年度受賞した。彼女も客員とかで大阪によく来てくれる。同じ国から来たカルリト・ポンセカ君も、当方で学位をとったあと、神

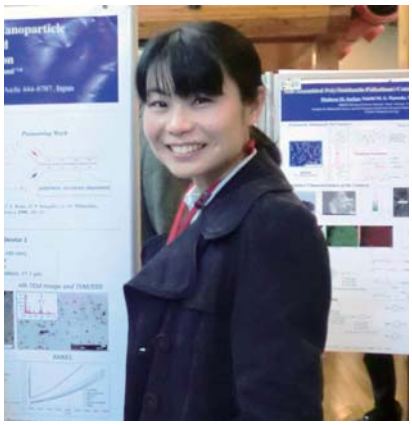
戸大の富永先生のところでのポスドク、その後、スウェーデンのルンド大学でポスドクとして活躍中。またIMSフェローだった、フィリピン大学出身のエルマー・エスタシオ君は助教授に4年前に昇進して活躍中。ほかのIMSフェローさん、弘前大学の准教授になっている小豆畑敬君、福井大学の教育学部で准教授になった栗原君。

ここに名前を挙げた人たちが、分子研に在籍したことを現時点でどの程度感謝しているかは、本当のところはよくわからないけど、あと10年ぐらいしたら感謝されたいものである。

分子研を去ってから現在まで

皆川 真規
（日本大学文理学部化学科　助手A）

みなかわ・まき／2006年3月、総合研究大学院大学　物理科学研究科　博士課程後期修了、博士（理学）、2006年４月、分子科学研究所、博士研究員、2006年10月，The Scripps Research Institute、Research Associate、2008年9月、理化学研究所、特別研究員を経て2013年4月より現職。



分子研には、2003年4月から2006年の3月まで総研大生として，さらに同年4月から9月まで博士研究員として、合計3年半ほど在籍しました。時の経つのは早いもので、私が分子研・魚住研究室にお世話になり始めてから10年以上の月日が流れたわけです。思い切りよく分野を変えて飛び込んでいった私を受け入れ、思い切り勉強・研究する環境と時間を与えて下さった魚住教授には、非常に感謝しております。 今回は、魚住研の大迫助教から依頼を受けまして、錚々たるメンバーがひしめく中、私が何を書けばいいのだろうと思ったのですが、分子研での思い出や近況含め、分子研を出てからのその後をいろいろと思い出して書いてみようと思います。

分子研では、自分専用の広い実験台とドラフト、そして勉強机があったことを考えると、あれから現在に至るまで、あんなにも広々としたスペースを自分のものにできたのは分子研時代だけです。また、何か機器や装置を使うときに、待ち時間などほとんどなかったこともよかったなあとしみじみ思い出します。最新の機器類をほとんど待ち時間なく使うことができる、本当にいい環境でした。分子研では、『イミン配位ピンサー型パラジウム錯体』についての実験を行っていました。単結晶ができやすく、適度な配位能力を有するイミンピンサー型パラジウム錯体のユニークな挙動のおかげで、私は学位を取得することができました。

分子研で学位を取得後、2006年10月から2008年8月まで、カルフォルニアのスクリプス研究所でポスドクとして働きました。2年間ほど、当時バルバス研のアソシエートプロフェッサーだった田中先生の獲得したグラントで雇っていただきました。そこでは、『金属を使わないタンパク質の選択的ラベル化』を目指した研究を行いました。これまた勢いで違う世界に飛び込んでいったわけですが、忙しくも日本とは違う環境を楽しみながら海外ポスドク生活を送ることができたのは幸運だったと思います。しかしながら、今年の6月末にバルバス教授の訃報に接し、とても驚きました。2010年のハワイでの環太平洋国際化学会議で、元バルバス研の集まりに同行させていただき、食事をご一緒したのが最後になってしまいました。彼はまだ若かったですし、ハワイでお会いした時は、とてもお元気そうでしたので突然の訃報は本当に衝撃的でした。自分が化学の世界で頑張っていれば、またどこかでお会いできる機会もあるだろうと思っていたので本当に残念です。

2008年9月から2013年3月まで、魚住研究室の分家である理化学研究所・グリーンナノ触媒チームで特別研究員としてお世話になりました。その間、何度か分子研にも足を運ぶ機会がありました。学生だったときの忙しく余裕のなかった時代にはあまり気付かなかったのですが、

あらためてみる岡崎は、緑豊かなきれいな町でした。理研では、山田副チームリーダーの下で『マイクロリアクターを用いた触媒反応』に関する研究を行いました。スクリプス研究所で金属を使わない反応に着手していた経験から、金属を使わないマイクロリアクターの触媒反応への展開、具体的には固体酸に着目した研究を行いました。いろいろと自由にやらせていただいた事を感謝しております。

そんなこんなで博士過程時代からずっと研究所育ちだった私が、2013年4月に日本大学文理学部・化学科の川面研究室に赴任して、本日に至ってます。久しぶりの大学という環境は、何かとカルチャーショックの連続でした。しかしながら、後戻りはできないし、与えられたカードで勝負していくしかありません。ほとんど自分のことだけやっていればよかった学生時代やポスドク時代と比べると、今は自分の時間でないものも割とあります。はじめは、現代の若者という生き物に、ある種、脅威を感じたりもしましたが、着任2年目に至り、少しはいろいろ慣れてきた気もします。彼らが変わってくれることはあまりないので、自分の方針や対応を変えながら試行錯誤している今日この頃です。研究としては、学生時代からポスドク時代にかけて、知見を広げるために違う分野で学んできたものを自分なりに生かしていければと思っています。

学位取得後から今日まで、ずっと任期のある職なので、それは焦ることも不安な部分も多々あります。それでも何とか繋がってきた研究者生活を、これからもできるだけ長く続けられるよう、前を向いて行こうと思っています。何が起ころうと飄々として生きていくのが理想です。生活パターンとしては、分子研時代からスクリプス、理研時代と、あまり変わらない生活を送っていますが、最近は分子研にいた20代の頃のようには無理がきかなくなってきた気がします。なんだかんだと体が資本なので、健康には気をつけたいと思っています。また分子研にも遊びにいきたいです。その時はどうぞよろしくお願い致します。

分子研を去るにあたり

大島 康裕 東京工業大学大学院理工学研究科化学専攻　教授
（前　光分子科学研究領域　教授）

10年ひと昔

おおしま・やすひろ
1984年東京大学理学部化学科卒業、1988年東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程退学（博士（理学））、東京大学教養学部基礎科学科第一助手、京都大学大学院理学研究科化学専攻助教授を経て、2004年9月分子科学研究所電子構造研究系教授（2007年、組織変更により光分子科学研究領域教授）、2014年9月より現職。

着任してからまさに満10年目となった2014年の9月をもって、分子研から転出しました。着任の際にお世話になった（ご迷惑を掛けた）茅元所長、力強いサポートを頂いた中村元所長ならびに大峯所長、さらに、様々な面で大変にお世話になった研究所の皆さんに、心より御礼を申し上げたいと思います。本当にありがとうございました。

時の経つのは早いというか、研究のスピードがのろいというべきでしょうか、採用時の面接の際に述べた研究計画が、ようやく実現されつつあるという状況です。「これから」という時に分子研を離れるのは、若干（だけですが）忸怩たる思いです。「これから」だからこそ、新しい場所で研究を展開していきたいという気持ちでもあります。そもそも、分子研以前には、特段、自分ならではの「芸」がある研究者とは言えなかったものを、10年後にして何とか、オリジナリティのある研究を進めていけるようになりました。これは、ひとえに「分野を先導するオリジナリティの追及」を最重要視する分子研の「文化（カルチャー）」のおかげです。物心ともに恵まれた環境（大峯所長おっしゃる所の「パラダイス」）で伸び伸びと研究三昧の生活を送ることを通じて、研究者として育てて頂いたと思っています。しかし、私にとっては「楽園」を離れる時期(とき)がきたようです。

久しぶりに大学に戻りましたが、まだ授業も受け持ってはおらず、研究室には私だけですので、今のところ学生さんたちと接する機会はあまり多くはありません。しかし、専攻・学科内での話題が「いかに多くの（優秀な）学生を集めるか」「学生の学習意欲を高めるにはどのように授業を進めるべきか」等々に集中することに接しますと、やはり大学の主役は「学生」であり、我々スタッフの本分は（研究）教育であると自覚する次第です。「分子科学を担う次世代を育てたい」と考えたからこそ大学に戻った訳ですが、分子研で身についた「文化（カルチャー）」を後進にどのように伝えていくべきか、試行錯誤が続くだろうと自戒しています。まあ、まず何よりも、場所は変われど今後もscienceを楽しみたいと思っています。願わくば、その姿が若者たちをencourageするものでありますことを！

NEW STAFF
新人自己紹介

2014年6月9日着任

KOOMBIL KUMMAYA, Praneeth V.

生命・錯体分子科学研究領域
錯体物性研究部門　研究員

I obtained my Ph.D in bioinorganic chemistry from the University of Kiel, Germany in 2008. Then I worked as a research associate under the guidance of Prof. Lawrence Que (Minnesota, USA) and Prof. Thomas Ward (Basel, Switzerland). My past research focused on biomimetic chemistry, metal catalysis and artificial metalloenzymes. I joined IMS in June 2014 as a postdoctoral fellow in the group of Prof. Shigeyuki Masaoka. My present research concerns design and use of multi-metal cluster complexes in the field of multi-electron transformation catalysis, such as H_2O oxidation and CO_2 reduction. In addition, it is exciting to learn Japanese culture and I am enjoying my time in this beautiful country.

2014年6月16日着任

長　尾　春　代
ながお・はるよ

技術課（機器利用班）
技術支援員

2014年6月16日より機器センターで技術支援員としてお世話になっております。担当装置はNMRと熱分析装置です。どの装置もまだまだ勉強中で、周りの方々に助けていただいております。

子供三人を子育て中のため、短時間勤務とさせていただいております。少しでも皆様のお役に立てるよう努めてまいりますので、どうぞ宜しくお願いいたします。

2014年7月1日着任

ZHENG, Lihe
鄭麗和

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

I received Ph.D from Shanghai Institute of Ceramics, Chinese Academy of Sciences, where I worked on rare-earth ions doped laser materials for Femtosecond Laser. Supported by Research in Paris program, I worked on Blue Laser System in Chimie ParisTech. Now I am working on Microchip UV Laser for Mass Spectrometry under the supervision of Prof. Takunori Taira. どうぞよろしくお願いします。

2014年7月1日着任

石　井　健太郎
いしい・けんたろう

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　研究員

大阪大学で学位取得後、名古屋大学遺伝子実験施設技術補佐員を経て、2014年7月より岡崎統合バイオサイエンスセンターの研究員として着任いたしました。超分子質量分析装置を用いてプロテアソームの複合体形成を研究しています。プロテアソーム以外にも共同研究で様々な超分子の質量分析を行っています。超分子の質量分析にご興味のある方は是非ご連絡下さい。宜しくお願いします。

2014年10月1日着任

BUSSOLOTTI, Fabio

光分子科学研究領域
光分子科学第三研究部門　特任研究員

After completing my Ph.D. at University of Modena (2006) I moved to the Japan Institute of Science and Technology (JAIST) where I worked as JSPS research fellow from 2007 to 2009. From 2009 to 2014 I was GCOE researcher at the Department of Nanomaterial Science in Chiba University. From October 2014 I joined the group of Prof. Kera in IMS. My research interests are related to the electronic and structural properties of organic thin films and single crystals, as mainly investigated by photoemission spectroscopy and electron diffraction.

2014年10月1日着任

古　賀　理　恵
こが・りえ

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
特別協力研究員

2014年10月より、協奏分子システム研究センター古賀グループの特別協力研究員として研究をスタートさせました。計算と実験両方を用いてタンパク質をデザインすることにより、タンパク質のより深い理解を目指します。

よろしくお願いいたします。

NEW STAFF
新人自己紹介

2014年10月1日着任

後　藤　振一郎
ごとう・しんいちろう

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
特別協力研究員および技術支援員

2014年10月1日付で分子研鹿野グループに着任しました。分子科学と間接的に関連する非線形物理学で名古屋大学から学位を取得後、統計力学の基礎論を京都大学、レーザー光の応用のための理論的研究をNTTの基礎研究所、電磁場の理論的研究を英国のランカスター大学で行い、日本に戻って来ました。現在は新たな研究に取り組んでいます。どうぞ宜しくお願いします。

2014年10月1日着任

SHENG, Li

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　研究員

I received my doctoral degree (Ph. D) from Tokyo Institute of Technology in September 2013, and then joined as a postdoctor fellow in the same university until September 2014. My past research focused on the synthesis of the proton exchange membranes and the well-ordered nitrogen-doped mesoporous carbon, which used as the fuel cell membrane and catalyst in fuel cell, respectively. From October 2014, I joined as a postdoctor fellow in Okazaki Institute for Integrative Bioscience and focused on the construct a primitive cell from simple molecules in the Kurihara Kensuke lab.

2014年11月1日着任

住　田　明日香
すみた・あすか

生命・錯体分子科学研究領域
生体分子情報研究部門　技術支援員

11月1日より古谷先生の研究室でお世話になっている住田と申します。

これまでは、名古屋市内の大学にてがんと老化に関する研究補助の仕事をしておりました。環境が変わって、まだ慣れないことも多いですが、人にも仕事にも誠実に向き合っていきたいと思います。先生方のお手伝いを通して、少しでも社会貢献させていただくことができれば幸いです。どうぞよろしくお願い申し上げます。

2015年2月2日着任

内　藤　寛　恵
ないとう・ひろえ

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

2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。前職は国際線にて客室乗務員の仕事をしておりました。私にとって新しい分野でのお仕事なので緊張や不安もありますが、楽しく取り組んでいけたらと思っております。

まだまだ力不足ですが、早く研究者の方々のお役に立てればと思っております。

どうぞ宜しくお願い致します。

共同利用研究ハイライト

サブナノ秒レーザーを用いたレーザー点火の基礎特性

赤松 史光　大阪大学大学院工学研究科　教授　林　潤　大阪大学大学院工学研究科　講師

2014年現在であっても、世界のエネルギー需要の8割以上は化石燃料の燃焼によって賄われている。多量の化石燃料の使用および燃焼に伴う二酸化炭素の排出量増加は世界的な問題として認識されており、今後の燃焼機関には、高い熱効率を達成しつつ二酸化炭素排出を抑えた燃焼方法が求められる。熱効率向上を目的として、希薄化や高圧縮条件となる燃焼法が検討されているが、これらの燃焼法は燃焼および点火の不安定性が問題となる。この燃焼および点火の不安定性を克服することを目的として、先進的な点火手法に注目が集まっている。レーザー点火は、可燃性混合気中においてブレイクダウンによるプラズマを形成して点火を実現する先進的な点火手法の一つである。著者らは可燃性混合気の物理条件（例えば、初期圧力や温度、燃料と空気の混合比）に対するレーザー点火の基礎特性に対して、これまで研究を行ってきた[1, 2]。図1は8 nsのレーザーの時間プロファイルの半値幅（以下、パルス幅とする）、発振波長532 nmのレーザーを用いて得られた、初期圧力に対するレーザー点火に必要な最小の入射光エネルギー（以後、最小点火エネルギーとする）の関係を示している。凡例は、空気過剰率（燃料を過不足なく燃焼させるために必要な空気量に対する供給した空気量の比）である。図1は、空気過剰率1.9の条件でも点火が可能であることを示している。この空気過剰率の条件は、同一実験装置における従来の点火装置では点火が不可能な条件であり、レーザー点火によって従来よりも燃料希薄な条件において点火が可能となる事を示している。

レーザー点火では、レーザーを用いて可燃性混合気中にプラズマを形成することで点火を行うため、可燃性混合気の物理条件だけでなく、点火源となるレーザーの光学的パラメータが影響を及ぼす。気相のブレイクダウンには、集光位置付近に存在する気体分子あるいは原子（以下、中性粒子とする）が同時に数個の光子を吸収することで多光子解離により電子を形成する「多光子吸収過程」と、電子が逆制動輻射によりレーザエネルギーを吸収して加速されて周囲の中性粒子やイオンに衝突を繰り返すことによって電子が急増する「カスケード過程」の2つの過程が存在する[3]。上記の多光子吸収過程とカスケード過程は、psからnsの時間で生じることが知られている（図2）。したがって、レーザーの時間プロファイルの半値幅（以下、パルス幅とする）は、ブレイクダウンに影響を与えることが考えられる。貴研究所の平等准教授は、サブナノ秒のパルス幅可変（35 ps、50 ps、100 ps、200 ps）、波長532 nmのNd: YAGレーザーを使用して空気のブレイクダウン閾値の測定を行い、パルス幅の増加に伴ってブレイクダウン閾値が減少することを報告している[4]。

本協力研究では、平等准教授とともに、レーザーのサブナノ秒のパルス幅が点火に及ぼす影響を明らかにすることを目的として、貴研究所所有のパルス幅可変レーザーを用いてメタン－空気予混合気に対する点火試験を行った。図3に示した初期圧力と点火に必要な最小の入射光エネルギーの関係から、レーザーのパルス幅が200 ps以下の条件では、パルス幅は最小点火エネルギーには大きな影響を及ぼさないことがわかる。ここで、パルス幅の減少はレーザー強度の増加に結びつく。本協力研究の条件である200 psと35 psのパル

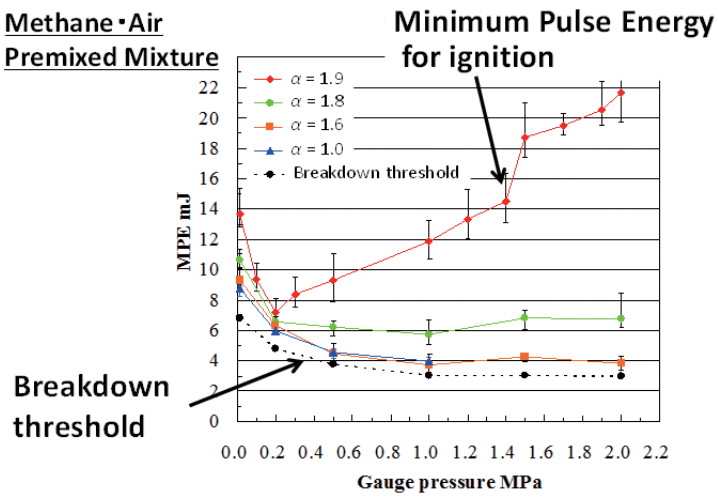


図1 Minimum pulse energy for ignition as a function of initial pressure
(Methane/air premixed mixture, Nd:YAG, Wave length; 532 nm, Pulse Duration; 8 ns)

ス幅では、レーザー強度に5.7倍の相違が生じる。このように、レーザー強度に相違があるにも関わらず最小点火エネルギーが減少しないことから、点火を成功させるためにはレーザー強度だけでなく、火炎核が形成される時間までプラズマを持続させる必要があることが明らかとなった。

貴研究所の協力研究は募集時期の自由度が高く、分子科学研究所における機器利用を含む実験および直接的なディスカッションによる研究推進が可能である。協力研究の範囲で、実験を遂行できる日数を増やすことにより、加速的な研究の遂行が可能になると考えられる。

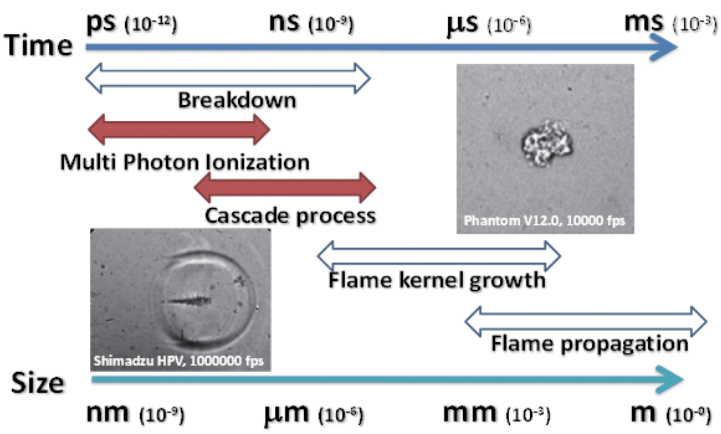


図2 Time and size scale of the laser induced breakdown and ignition

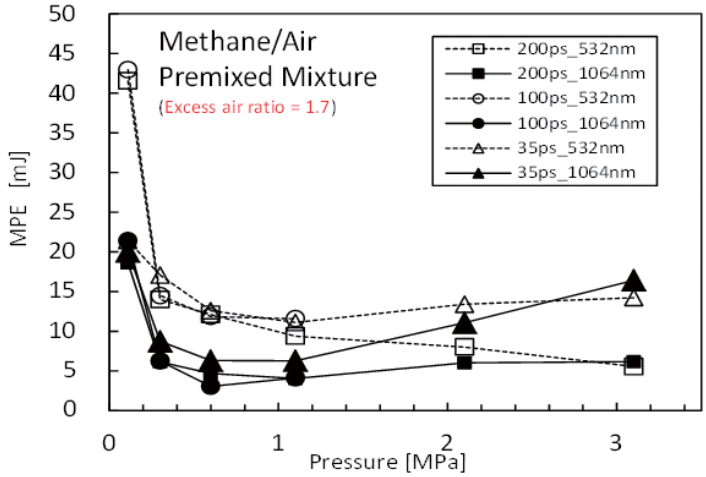


図3 Minimum pulse energy for ignition as a function of initial pressure (Methane/air premixed mixture, Excess air ratio; 1.7)

あかまつ・ふみてる
1991年 大阪大学大学院工学研究科　助手、1996年博士（工学）取得。1997年より1年間カリフォルニア大学アーバイン校客員研究員、2000年大阪大学大学院工学研究科講師、2003年同助教授、2008年より現職。専門は燃焼流に対する光学計測および数値解析、バイオマス燃焼など。

はやし・じゅん
2009年博士（工学）取得、同年 大阪大学大学院工学研究科　助教。2014年より現職。2014年9月より1年間Ecole Centrale Parisに招聘教授として滞在中。専門は混相燃焼場におけるすす計測およびプラズマ支援点火・燃焼など。

参考文献

[1] Atsushi Nishiyama, Ahsa Moon, Yuji Ikeda, Jun Hayashi and Fumiteru Akamatsu, Ignition characteristics of methane/air premixed mixture by microwave-enhanced laser-induced breakdown plasma, Optical Express, 21-S6(2013), A1094-1101.

[2] 古井憲治，林　潤，岡田朝貴，中塚記章，平等拓範，堀　輝成，赤松史光，メタン－空気予混合気に対するピコ秒レーザーのレーザー着火特性，日本機械学会論文集B編，79-795(2012), 2004-2014.

[3] T. X. Phuoc, Laser-induced spark ignition fundamental and applications, Optics and Laser in Engineering, 44(2006), 351-397.

[4] 平等拓範, 高輝度マイクロチップレーザとエンジン点火, レーザー研究, 38(2010), 576-584.

共同利用研究ハイライト

硫化サマリウム(SmS)におけるBlack-Golden相転移の起源に電子構造の直接観測から迫る

伊藤 孝寛　名古屋大学大学院工学研究科　准教授

1．はじめに

硫化サマリウム (SmS) は、650MPa以上の圧力をかけるとその色が黒色から金色へと変化し、伝導特性が絶縁体から金属へと変化する化合物であり、2価と3価の Sm が交じり合った価数揺動系の典型例として知られています。このような、特異な絶縁体ー金属相転移は「Black ー Golden相転移」とも呼ばれ、その起源に Sm 4*f* 電子がどのように関わっているのかに興味が持たれて来ました。

この相転移において Sm 4*f* 電子が「遍歴的」な電子として伝導に直接関与している場合は、Sm 4*f* 電子が結晶中で周期性をもちフェルミ面を形成するようなバンドを形成するのに対して、「局在的」な電子として伝導に寄与しない場合は、フェルミ準位から離れて局在した状態を形成すると考えられます。そのため、Sm 4*f* の電子状態、すなわちバンド構造の情報を得ることが Black ー Golden 相転移の起源を明らかにする上で最も直接的な方法と言えます。しかしながら、実験的にバンド構造を決定する上で最も強力な手法である角度分解光電子分光法（ARPES）は圧力下で行うことが困難であることなどがこの問題の解決においてネックとなっていました。

そこで我々は、結晶における化学圧力を変化させた硫化サマリウムーイットリウム置換系 ($Sm_{1-x}Y_xS$) に注目して、電子状態の系統的な研究を行なってきました。この系は、図1に示すように、イットリウム置換に伴い、2価の Black 絶縁体相 SmS から Black 金属相 (x < 0.17) を経て Golden金属相 (x > 0.17)、3価局在参照系 YS (x = 0) へと推移します。さらに、Black ー Golden 相転移境界では SmS と類似した格子収縮が観測されることから、Black ー Golden 相転移と電子状態の関係を ARPES を用いて研究する上で理想的な系と考えられます [1]。本稿では、私が分子研時代に力を注いで整備した、思い入れのあるUVSORのBL5U（今は現スタッフが全面的に再構築中）におけるARPES装置を共同利用して得られた $Sm_{1-x}Y_xS$ の電子構造の系統的な変化から明らかになった、この系における Black ー Golden相転移の起源について紹介させていただきます。

2．硫化サマリウムーイットリウム置換系における電子状態の Black ー Golden 相転移 [2]

SmS は NaCl 型構造をもち、電子状態の化学圧力（元素置換）依存性を直接比較するためには、格子定数の異なるそれぞれの置換量 (x) における電子状態を、3次元的なブリルアンゾーン中の特定の対称点において抜き出す必要があります。具体的には、試料表面から光電効果で放出される光電子の運動エネルギーを、放出角度および放射光励起エネルギーの関係でプロットすることにより、固体中における電子の結合エネルギーと試料表面水平方向および垂直方向の波数の分散関係 (バンド構造) を得ることで、このようなピンポイント解析が可能になります。このような手法は、3次元角度分解光電子分光法 (3D-ARPES) と呼ばれ、ブリルアンゾーン中における電子状態のピンポイント解析のみならず、高温超伝導体に代表される強相関電子系の機能性発現メカニズムの解明において重要な、電子ー軌道ースピン間の相互作用の詳細

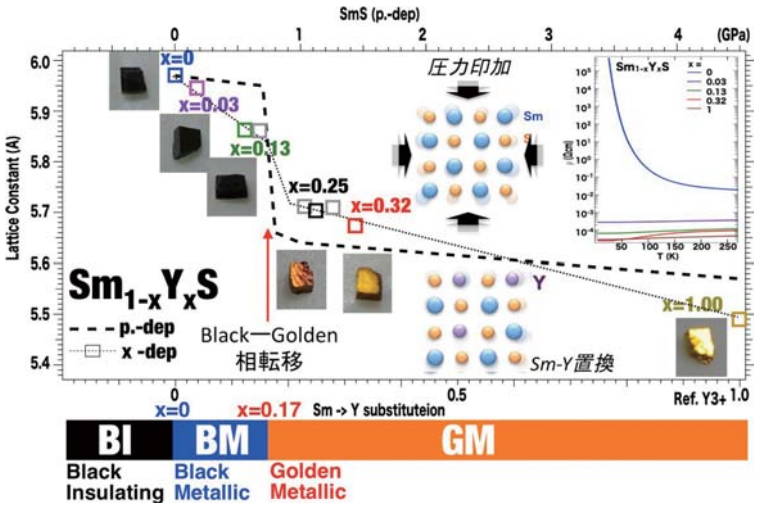


図1 $Sm_{1-x}Y_xS$（SmS）における格子定数の置換量 x（圧力）依存性（細点線（太点線））。x = 0.17 近傍でSmS のBlack ー Golden 相転移と同様に、格子収縮を伴い試料表面の色が黒色から金色へと変化していることが分かる。（挿入図）$Sm_{1-x}Y_xS$ における電気抵抗の置換量 x 依存性。

解析においても威力を発揮します。

図2に、3D-ARPES により得られた $Sm_{1-x}Y_xS$ の X 点近傍におけるフェルミ準位 (E_F) 近傍のバンド構造を示します。$Sm_{1-x}Y_xS$ の E_F 近傍の電子状態は、Sm^{2+} 4*f* 多重項構造と金属相において X 点に現れる Sm (Y) *d* 電子に起因する電子ポケットにより形成されていることが分かります。ここで、置換量 x が増加するに従って Sm^{2+} 4*f* 多重項構造は低結合エネルギー側へと連続的にシフトしています。さらに、Black 相においては多重項構造が有限のエネルギー分散を示すのに対して、Golden 相においてはそのような分散が観測されないことが明らかになりました。電子ポケットが E_F を切る点に注目すると、Black 金属相においては E_F 直下において急激にバンド幅が狭くなる様子が観測されるのに対して、Golden 金属相においては、自由電子的な放物線状の分散を示していることが分かります。ここで前者は、重い電子系化合物おいて観測例が報告されている伝導電子と空間的に局在した 4*f* 電子による混成バンドに帰結されるものと理解できます。一方、後者については、3価局在系参照物質である YS におけるものと類似した分散形状をもつと考えることができます。以上の結果に高結合エネルギー側で大きな分散を示す S 3*p* バンドの混成効果を合わせて得られた、$Sm_{1-x}Y_xS$ の各相における電子状態の模式図を図3に示します。これらの結果は、$Sm_{1-x}Y_xS$ における Black ― Golden 相転移が、Sm 4*f* 電子の性質の「遍歴」から「局在」への急激な変化に起因することを示したものであると期待しています。

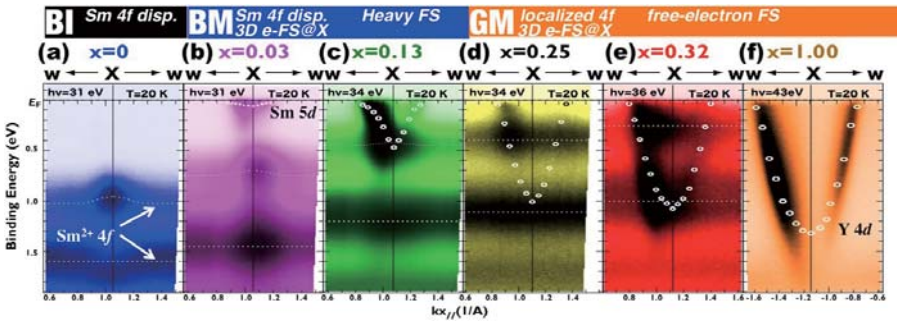


図2 3D-ARPESによるピンポイント観測で得られた、$Sm_{1-x}Y_xS$ の X 点近傍におけるバンド構造の置換量 *x* 依存性 (Black絶縁体相：*x* = 0 (a)、Black金属相：*x* = 0.03 (b)、*x* = 0.13、Golden金属相：*x* = 0.25 (d)、*x* = 0.32、局在３価参照系：x = 1.0 (e))。濃い部分がエネルギーバンドに対応する。点線および○で Sm^{2+} 4*f* 多重項構造およびSm 5*d* 電子ポケットをそれぞれ示してある。

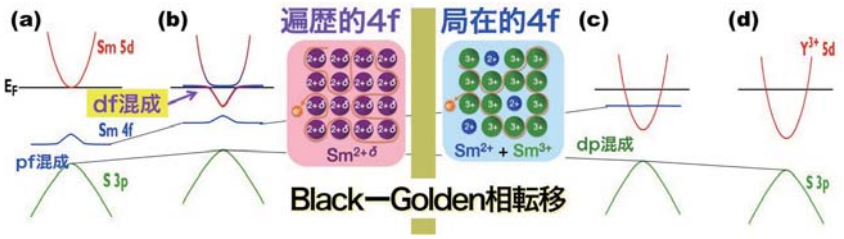


図3 $Sm_{1-x}Y_xS$ のBlack ― Golden 相転移に伴う電子状態の変化の模式図 (Black絶縁体相 (a)、Black金属相 (b)、Golden金属相 (d)、局在３価参照系 (e))。

3．おわりに

本研究は、固体中の電子の性質が急激に変化することで引き起こされる相転移のメカニズムに、電子構造の直接観測から迫ることに成功した例として紹介させていただきました。近々公開される新BL5Uの装置では、放射光のエネルギー連続性を利用したピンポイント観測のみならず、偏光依存性を利用した電子軌道対称性の分離からスピン分解、時間分解、マイクロイメージングまで、多様なARPES研究が実現できると期待しています。今後、多様なARPES研究を強相関電子系からエレクトロニクス、スピントロニクス材料など様々な機能性材料に対して進めることで、機能性の発現メカニズムに電子構造の立場からさらに迫っていきたいと考えています。

いとう・たかひろ
1975年秋田生まれ。1997年3月東北大学理学部卒、2002年3月東北大学大学院理学研究科物理学専攻博士課程修了（博士（理学））。理化学研究所播磨研究所連携研究員、2003年4月より分子科学研究所極端紫外光研究施設助教(助手)を経て、2009年4月より現職。同じく、名古屋大学シンクロトロン光研究センター准教授（兼任）。
専門：光物性科学、シンクロトロン光応用工学。
趣味：読書、ジャズ鑑賞、演奏。

参考文献

[1] K. Imura, T. Hajiri, M. Matsunami, S. Kimura, M. Kaneko, T. Ito, Y. Nishi, N. K. Sato, H. S. Suzuki, J. Korean, *Phys. Soc.* **62**, 2028 (2013).

[2] M. Kaneko, M. Saito, T. Ito, K. Imura, T. Hajiri, M. Matsunami, S. Kimura, H. S. Suzuki, N. K. Sato, *JPS Conference Proceedings* **3**, 011080 (2014).

共同利用研究ハイライト

金薄膜上に化学吸着させた金属イオン包接クラウンエーテル錯体の表面増強赤外分光

井口 佳哉　広島大学大学院理学研究科　准教授

クラウンエーテルは、溶液中で他の分子やイオンを選択的に取り込む。例えば、18-crown-6（18C6）はアルカリ金属イオンのうちK^+に選択性を示す。有機化学の教科書では、このイオン選択性はキャビティとイオンの大きさの一致によるとされているが[1]、物事はそう単純ではない。気相中の18C6－アルカリ金属イオンの結合エネルギーは小さなイオンほど大きく、この結果は溶液中のイオン選択性に対する溶媒分子の関与を示唆している。我々はこの問題に対し、極低温イオントラップを用いた極低温気相分光により、アルカリ金属イオン―ベンゾクラウンエーテル錯体について研究を行い、微視的溶媒和がイオンの包接に与える影響を明らかにしてきた[2]。一方で我々は、より直接的に、凝縮相で溶媒効果の研究を行いたいと考えていた。そんな折、ある研究会で分子研の古谷祐詞准教授が金薄膜状に膜タンパク質を吸着させ、その赤外スペクトルを表面増強赤外分光で測定された結果を見て[3]、この手法は我々の系にも適用できるのでは、と考えたのが本共同利用研究を申請したきっかけであった。

実験にあたり、我々はまず広島大学にて、クラウンエーテルのチオール誘導体を合成した。そのサンプルを古谷グループに持参し、金薄膜上への化学吸着、アルカリ金属イオンの包接、およびその表面増強赤外分光による検出を試みた。実験の詳細については発表した論文を参照されたい[4]。図1に金薄膜上のクラウンエーテルの模式図を示す。キャビティの大きさ、鎖の長さの異なる3種類のサンプルを作成した。クラウンエーテルは金―硫黄結合で吸着しているため、溶媒で洗浄することにより再利用できる。よって、様々な溶媒、イオンを用いての測定を迅速に（関与するクラウンエーテルの個数を一定に保ったまま）進めることができる。

図2に、得られた赤外差スペクトルを示す。塩の水溶液は10^{-6}M ～ 1 Mの濃度で変化させた。Li^+では目立った信号は観測されないが、Na^+になると正負にシグナルが観測され、K^+ではさらに顕著となる。K^+のスペクトル中1100 cm^{-1}付近のバンドはC–O伸縮振動と帰属されるが、このバンド形状より、K^+イオンを包接することで低波数シフトすることがわかる。

さらに、このバンド強度の濃度依存性より、錯形成の平衡定数を得た。図2cの~1100 cm^{-1}のバンド強度をK^+濃度に対してプロットしたものを図3aに、またこのプロットにより決定した各アルカリ金属イオンの錯形成の平衡定数を図3bに示す。18C6_C6ではK^+で、15C5_C6ではNa^+において極大を示している。一方、鎖の短い18C6_C1では18C6_C6ほどK^+選択性が顕著に現れておらず、金薄膜上でのイオン包接には「足」の長さも関与していることがわかる。

この方法は、溶媒、イオンの種類に対する包接現象の影響の研究を迅速に、包括的に進めるのに最適な系といえる。一方で、ゲスト包接現象に鎖の長さが関与していることから、その結果の解釈には注意が必要である。今後は、シクロデキストリンやカリックスアレンなど、数あるホスト分子についてこの実験を進め、ゲスト包接、選択性などに対する溶媒効果について統一的な理解をめざしたい。

本共同利用研究では、まだ何も結果がないアイディ

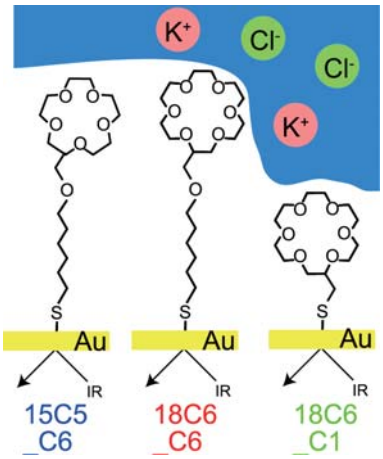


図1 金薄膜上に作成したサンプルの模式図

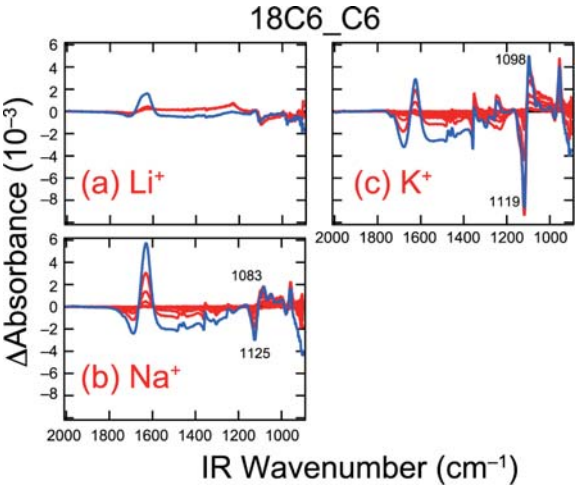


図2 赤外差スペクトル

アのみの段階でのサポートを決断して頂き、大変感謝しております。これを足がかりに、大きく研究を発展させたいと考えております。実際の測定では分子研の古谷祐詞准教授、木村哲就博士、Hao Guo博士に大変お世話になりました。また、サンプル合成をご指導頂いた、広島大学の灰野岳晴教授、池田俊明博士にお礼申し上げます。最後に、本研究において物心両面でサポート頂きました、広島大学の江幡孝之教授に感謝いたします。

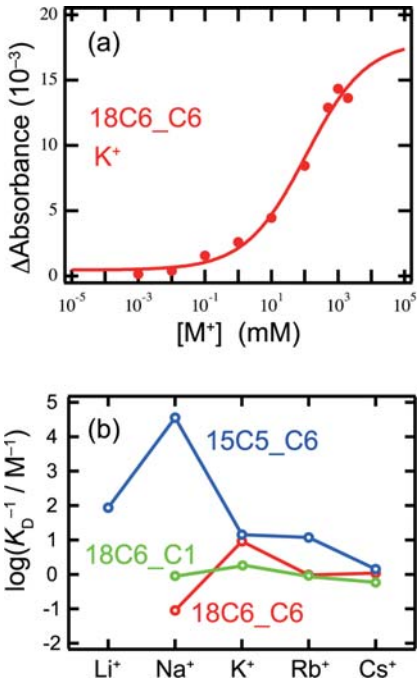


図3 赤外吸収強度の濃度変化と、錯形成の平衡定数

いのくち・よしや
1993年東北大学理学部化学科卒業、1998年九州大学大学院理学研究科化学専攻修了、1998年分子科学研究所助手、2004年東京大学大学院総合文化研究科助手、2006年より広島大学大学院理学研究科准教授。2010年、2012～2014年スイス連邦工科大学ローザンヌ校客員研究員。専門は物理化学、分子分光学。趣味は音楽（ジャズ）。

参考文献

[1] マクマリー有機化学　第7版

[2] Inokuchi et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **2014**, *136*, 1815; Inokuchi et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **2011**, *133*, 12256.

[3] Guo et al., *Chem. Phys.*, **2013**, *419*, 8.

[4] Inokuchi et al., *Chem. Phys. Lett.*, **2014**, *592*, 90.

共同利用研究ハイライト

「第54回分子科学若手の会 夏の学校 講義内容検討会」の開催報告

福田 将大　京都大学工学研究科　博士後期課程2年

1. はじめに

「分子科学若手の会」は、実験・理論を問わず分子科学に関心を持つ若手研究者の交流の機会を設け、分子科学全体の研究活動の推進と発展に寄与することを目的として活動する団体であり、毎年、分子科学若手の会 夏の学校（以下、夏の学校）の運営を行ってきた。1961年から続き、今年で54回目を迎える夏の学校は、先駆的な研究を推進されている研究者を講師として招き、全国から分子科学に関心を持つ学生が集まり、最先端の研究課題について基礎から応用までの幅広い知識を体系的に学び、互いの研究分野について議論・意見交換を行い、理解を深めることを目的とする場である。

2014年度も、分子科学研究所（分子研）の平成26年度共同利用研究（前期）「若手研究会等」の支援のもと、「第54回分子科学若手の会 夏の学校 講義内容検討会」を行い、そこでの議論・意見交換の成果を反映して「第54回分子科学若手の会 夏の学校」を開催した。

本稿では、「第54回分子科学若手の会 夏の学校 講義内容検討会」と「第54回分子科学若手の会 夏の学校」についての活動を報告する。

2. 第54回分子科学若手の会夏の学校講義内容検討会

夏の学校に先駆けて分子研の場で行われた「第54回分子科学若手の会 夏の学校 講義内容検討会」では、5つのテーマに関して先鋭的な研究を行っている講師の方々と学生により、夏の学校で行われる講義内容の検討し、夏の学校で使用するテキスト内容の詳細を議論し、意見交換を行った。また、分

子科学若手の会の役員会を同時に開催し、夏の学校当日のスケジュール打ち合わせ、若手の会の現在の運営状況や今後の方針についての議論を行った。

3. 第54回分子科学若手の会夏の学校

2014年8月18日～22日に「いこいの村能登半島」で行われた「第54回分子科学若手の会 夏の学校」には、75名の参加があった。

［分科会・全体講演］

夏の学校では、5つの分科会に分かれて、以下に示すテーマで各講師の先生方による講義が行われ、さらに、各分科会講師の5名の先生方が取り組まれている先端研究について全体講演をしていただいた。

1. 井田 朋智　准教授（金沢大学理工学域物質化学類）
「電子相関入門 ―第二量子化による多体問題の取り扱い―」
2. 中山 哲　准教授（北海道大学 触媒化学研究センター 触媒理論化学研究部門）
「複雑分子系に対しての量子シミュレーション」
3. 迫田 憲治　助教（九州大学 大学院理学研究院 化学部門）
「気相クラスター科学の基礎と応用―分光法の基礎から生体分子への応用まで―」
4. 髙屋 智久　助教（学習院大学 自然科学研究科 化学専攻）
「液相中の高速現象：基礎理論と分光実験によるアプローチ」
5. 石川 春人 講師（大阪大学 大学院理学研究科 化学専攻）
「生命科学研究における分子科学の役割」

［ポスター発表］

参加学生によるポスターセッションでは、2日にわたり48件の発表が行われた。全国から集まったさまざまな分野の学生による活発な議論が行われ、理論・実験の垣根を越えた学術交流の場となった。

4. まとめ

本稿では「第54回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」及び「第54回分子科学若手の会 夏の学校」の活動報告を行った。来年度の夏の学校については、京都大学理学研究科化学専攻分子分光学研究室（松本研究室）の学生（若手の会事務局代表：博士後期課程1年　田中 駿介）を中心に鋭意準備を進めている。「第55回分子科学若手の会 夏の学校　講義内容検討会」の開催についても分子研及び諸先生方のご支援をよろしくお願いします。

写真1　分科会の様子（第1分科会）

写真2　分科会の様子（第3分科会）

写真3　ポスターセッションの様子

写真4　全体講演の様子
（第4分科会：髙屋 智久 先生）

写真5　全体集合写真

新装置紹介

低真空対応分析走査電子顕微鏡

物質分子科学研究領域　中尾 聡、極端紫外光研究施設　酒井 雅弘

走査電子顕微鏡（SEM、Scanning Electron Microscope）は、光学顕微鏡では解像できない小さな表面構造を観察する手段として広く利用されており、上位クラスの機種では分解能は1 nm以下に達している。分子研においても、平成14年度に最高分解能1 nmの電界放射型SEM（FE-SEM、Field Emission SEM）である日本電子（株）製JSM-6700Fを導入し、共同利用機器として公開してきた。これに加えて、平成25年度、文部科学省ナノテクノロジープラットフォームプログラムの平成24年度補正予算で「低真空対応分析走査電子顕微鏡」を導入し、平成26年度から公開を始めている。本装置は、低真空SEMの（株）日立ハイテクノロジーズ製SU6600に、エネルギー分散X線スペクトル（EDSまたはEDX、Energy Dispersive X-ray Spectroscopy）測定分析装置であるブルカー・エイエックスエス（株）製QUANTAXシステムを組み込んだ機器である（図1）。

SU6600はW/Zrショットキーエミッション形の電子銃を有し、加速電圧は0.5 ～ 30 kVを0.1 kV刻みで設定可能である。ステージは、xyz方向の移動、回転、傾斜の5軸をモーターで駆動し、対応可能な試料サイズは最大150 mmϕ、高さ40 mm、重量は試料台を含めて300 gである。ただし、現時点で用意している試料台は10、25、150 mmϕで後者2つの中間がない。150 mmϕの試料台を使用すると、乗せられる試料は高さ約6 mm、重さ約50 gまでになり、更に一部機能が使用不可になるので、大きめの試料については注意が必要である。

SU6600は低真空SEMと称する通り、試料室を低真空と高真空に切り替えて観察できることが特徴である。一般に高分解能観察を目的とするFE-SEMでは、入射電子線の散乱を避けたり低エネルギーの2次電子を効率よく検出したりするために試料室を高真空にするが、帯電しやすい絶縁試料を導電処理なしで観察することは困難であるし、ガスや水分などを放出するような高真空中で維持できない試料は測定室に導入できない。測定室を低真空対応にすることで、高真空対応SEMに比べて分解能などは悪くなるものの、絶縁体試料の観察がある程度まで可能となる。SU6600の低真空は10 ～ 300 Paを10 Pa刻みで設定可能であり、外から気体を導入して設定値に制御される。高真空では気体を導入せず10^{-3} Pa以下となる。導入する気体については、特に雰囲気に制約がない場合は部屋の空気を取り込むが、今回導入の機体は必要に応じて高純度窒素に切り替えられるようにしてある。なお、近年では観察対象を更に広げるため測定室が大気圧でもSEM観察可能な機種が市販され始めていて、これらは大気圧SEM（ASEM、Atmospheric SEM）、環境SEM（ESEM、Environmental SEM）などと称されている。本機は大気圧には対応していないので、どの程度の試料までなら対応可能かは事前の確認が必要である。

搭載される検出器の選択により、高真空では2次電子像、反射電子像、明視野透過電子像、一方、低真空では2次電子像、反射電子像に対応している。主として用いられる2次電子像の仕様

図1 低真空対応分析走査電子顕微鏡の外観。低真空対応SEMの（株）日立ハイテクノロジーズ製SU6600とエネルギー分散X線スペクトル測定装置であるブルカー・エイエックスエス（株）製QUANTAXシステムを組み込んだ機器である。

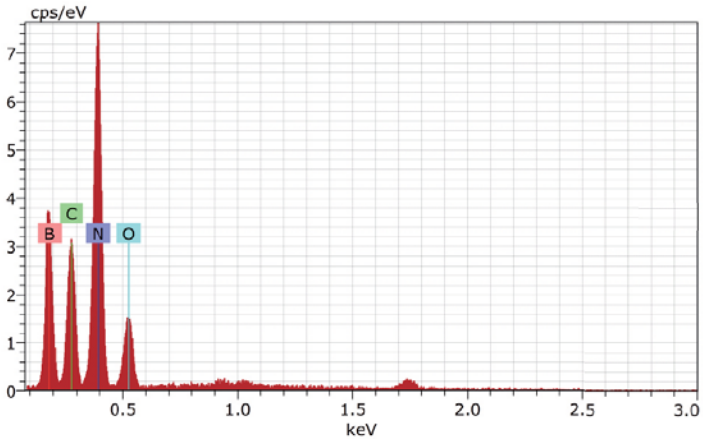


図2 SU6600＋Xflash6|10により取得したBNのX線スペクトル(EDS)。横軸はX線エネルギー (eV)、縦軸は計数率(cps/eV)。

分解能は、高真空で1.2 nm、60 Paの低真空で3.0 nm（ともに加速電圧は30 kV）となっている。なお、低真空で2次電子像を観察する場合、導入気体として空気を用いた方が信号強度が高くなり観察し易い。

SU6600は、対物レンズ光学系として、試料がレンズ磁場の外側にあるアウトレンズ系を採用している。そのため、鉄などのバルク磁性材料もSEM観察可能である。試料表面で電子線を収束させる観点では試料がレンズ磁場の中にあるインレンズ系の方が有利なため、高分解能を目的とした装置にはインレンズ系を採用している機種も多いが、バルク磁性材料などはレンズ磁場に影響を与えるため観察が困難になる。従前のJSM-6700Fはセミインレンズ系を採用しているため、試料の種類やサイズ、作動距離によって対応できないこともあったが、SU6600では使用方法を守る限り問題にならない。SU6600が導入されたことで、測定対象試料が大幅に広がったと言える。ただし、非磁性導電性試料を高分解能で観察しようとする場合はJSM-6700Fの方が良い像を得られることもあるので、用途に応じて使い分けるべきである。

次にQUANTAXシステムによるEDS測定分析について紹介する。本機には2種類のシリコンドリフト検出器（SDD、Silicon Drift Detector）タイプのEDS検出器XFlash6|10とXFlash5060FQを搭載しており、用途に応じて選択して使用する。JSM-6700F導入時にはSi(Li)半導体検出器が主流であったが、エネルギー分解能を落とさずに高計数率のX線を計測できること、熱ノイズが少なく動作温度を高くできる（Si(Li)検出器が液体窒素冷却で動作させていたのに対し、SDDはペルチェ冷却で動作させる）こと、価格やサイズが同程度に落ち着いたことにより、現在は業界全体でSDDタイプに一変している。

XFlash6|10は筒型の形状、斜め上方配置の一般的な検出器で、検出可能元素は$_{4}$Be ～ $_{95}$Amである。保証エネルギー分解能が121 eV (Mn-Kα線)であり、市販品としては最高性能であるため、近接する特性X線ピークの分離能に優れ、定量分析や未知試料における元素の同定に向いている。XFlash6|10は素子面積が10mm^{2}と小さく、SEM側の照射電流を上げるなどして発生するX線強度を高める必要がある。SU6600は低真空に対応するため照射電流を大きめに取れるようになっており、試料が壊れない限り大きな問題にはならない。図2に、カーボンテープ上に固定したBN粒子に対して、高真空で加速電圧5 kVの電子線を入射して測定したX線スペクトル(EDS)を示す。B、C、N、Oの各ピークが重畳せず分離されているのが分かる。

他方、XFlash5060FQは、形状や配置が通常とは異なる。検出部が板状で、反射電子検出器のようにレンズ光学系と試料の間に挿入して使用する。検出部には電子線の通路を取り囲むように15 mm^{2}の素子4個が並べられ、それらが試料表面に接近して配置されることで最大1 str以上の立体角を達成し、非常に高感度な検出器として使用することが可能である。ただし、保証エネルギー分解能は133 eVでXFlash6|10よりやや低い。またX線に加えて反射電子線も直接受けるため、加速電圧を高くする時は素子が損傷しないよう保護フィルターをつける必要があり、フィルターの厚みに応じて低エネルギー領域のみ検出感度が落ちたりゴーストが重畳したりする。そのため、低加速電子線入射による低エネルギーX線検出、高加速電子線入射による高エネルギーX線検出というように分けて使用することになる。使用法がやや限定されるものの、一般的な検出器にない測定が可能となる。現在のところ最も頻度の高い利用法は、6 kV以下の低加速電子線入射による高速元素マッピングである。入射した電子線が低加速であれば、試料内を広がる範囲は狭く浅くなり、特性X線が発生する領域も同じように

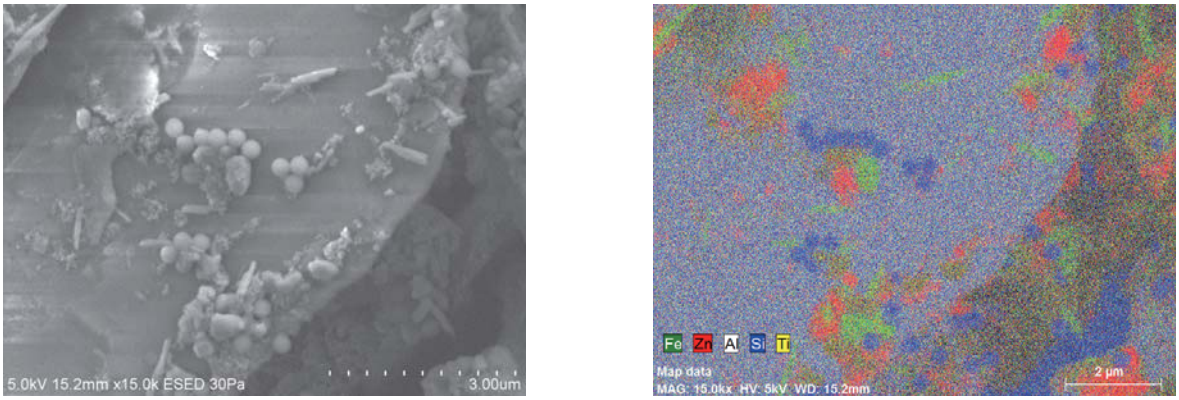


図3 SU6600＋Xflash5060により取得した酸化物微粒子分散試料の低真空SEM像(a)とEDS元素マッピング(b)。

狭く浅くなる。横方向の広がりが狭くなることでマッピングの空間分解能は上がり、縦方向に浅くなることで表面の構造や組成を強く反映することになる。元素マッピングはX線信号を画素毎に分けて積算するため、元素分布を判別するのに十分な信号量を得るまでに必要な測定時間が長くなりがちであったが、SU6600とXFlash5060FQの組み合わせでは、最高1024×768の分割に対して、数分から10分程度の積算で十分なコントラストを得ることもできる。また、仕様によれば、XFlash5060FQは、高純度窒素雰囲気30 Paまでなら低真空で動作可能であるため、SU6600との組み合わせでは低真空での高速元素マッピングも可能になる。図3に、種々の酸化物微粒子を分散させた試料に対し、30 Paの低真空で、加速電圧5 kVの電子線を入射して取得した2次電子像と元素マッピングを示す。元素マッピングは1024×768分割、積算時間は全体で900秒とした。球状のSiO_2、棒状及び球状の酸化鉄類(前者はFe_2O_3や$FeOOH$で、後者はFe_3O_4)、微粒子の凝集体であるZnOやTiO_2などが、大きなAl_2O_3粒子の上に分散していることが、元素マッピングから判別できる。また、試料の真上に検出器が配置されることで、Al_2O_3粒子の段差による影ができにくい利点もある。

観察対象の広いSEMであるSU6600に、これほどエネルギー分解能の高い検出器と高感度検出器を搭載したQUANTAXシステムの組み合わせは、現時点では国内にほとんどなく、一般に公開されている例は他に見当たらない。これから所内外の多くの方々に利用頂きたい。本装置の仕様や利用申請等は、http://nanoims.ims.ac.jp/ims/を参照されたい。

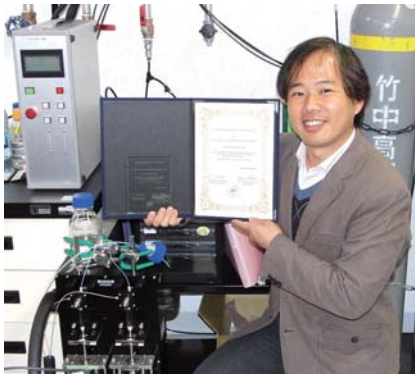
新装置紹介

急速溶液交換装置の紹介

生命・錯体分子科学研究領域　古谷 祐詞

イオンや低分子との結合に伴う膜タンパク質の構造変化を、全反射型赤外分光装置によって解析する手法が広く使われています。私は、これまでナトリウムイオンポンプであるV型ATPase、カリウムイオンチャネルであるKcsAなどに全反射型赤外分光法を適用してきました[1, 2]。また、広島大学の井口佳哉准教授と共同研究を行い、表面増強赤外分光法を併用することで、金薄膜表面に修飾したイオノフォアの構造解析を行いました（共同利用研究ハイライト）[3]。このように溶液中での赤外分光計測を可能とする全反射赤外分光法は、分子間や分子-イオン間の相互作用を研究するのに適した手法です。一方、ペリスタポンプやシリンジポンプなどモーターを利用する溶液交換では時間を要するため、時間分解計測について改善の余地があります。そこで、私はシリンジを圧縮空気で動作させる方式により、溶液を急速に交換する手法の開発を行いました。今回、日本生物物理学会の欧文誌であるBIOPHYSICSに発表した論文[4]が第1回BIOPHYSICS Editors' Choice Awardに選ばれたこともあり、新装置紹介の機会を頂きました。

受賞対象論文は、膜タンパク質とイオンや低分子の結合に伴う構造変化を、ミリ秒程度の時間分解赤外分光計測で追跡することを可能とする急速溶液交換システム（図参照）の開発に関するものです。本システムは、ストップトフロー法で用いられる圧縮空気作動型シリンジポンプにより、ATR結晶上の溶液を急速に置換します。基板に吸着した膜タンパク質を浸している緩衝液を、イオンや低分子を含む緩衝液に急速に置換することで、膜タンパク質との結合反応を開始させることが可能になります。実際に、全反射赤外分光計測用のATR結晶上に膜タンパク質を吸着させることで、膜タンパク質がイオンや低分子を結合した際に起こす構造変化をミリ秒程度の時間分解赤外分光計測で追跡することが可能であることを示しました。論文の詳細については、生物物理学会誌の総説にも記載しております[5]。



第1回BIOPHYSICS Editors' Choice Awardの賞状と盾

急速緩衝液置換システムの開発では、私と当時助教であった木村哲就博士とで、システム全体の動作方式や時間分解赤外分光計測に必要となる制御部分の基本設計を行い、（株）ユニソク

の岡本基土さんが実際に動作する装置の開発を行いました。また、ATR結晶上のチャンバーについては、装置開発室の青山正樹さんと高田紀子さんに作製頂きました。スムーズな緩衝液の交換を実現するには、チャンバーの形状が重要であることが分かり、10種類程度の流路形状を試作頂きました（詳細については装置開発室のAnnual Report 2014に記載）。この場を借りて御礼申し上げます。

また、最近、分子研の藤准教授のグループにて、チャープパルス上方変換を用いた全反射赤外分光計測にも本手法を適用して頂き（図参照）、アセトンと水の交換過程をミリ秒の時間分解能で追跡した結果をOpt. Express誌に報告しました[6]。

現在、本手法のさらなる発展を目指して、研究を継続しています。また、本手法を用いた共同研究の提案を随時募集しておりますので、ご興味のある方は古谷までお問い合わせください。

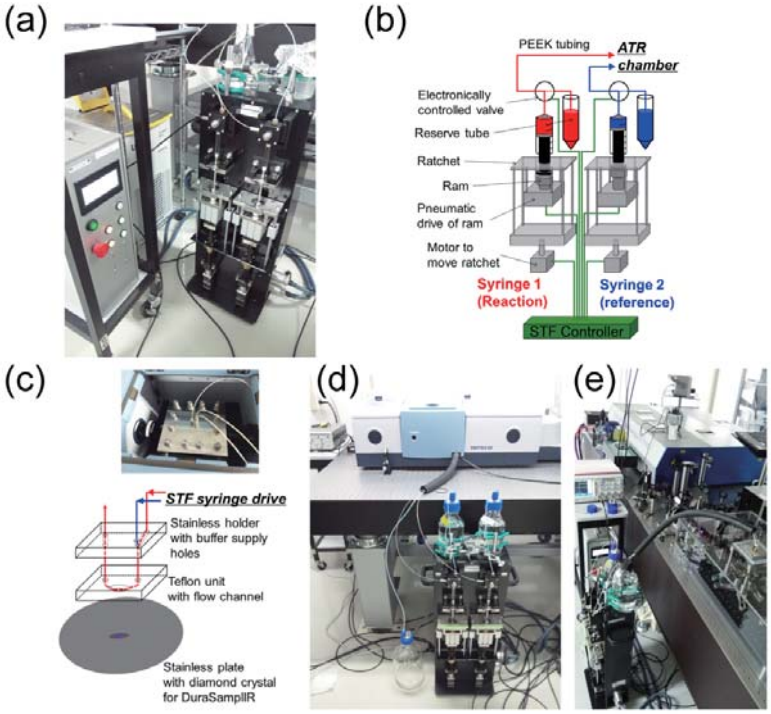


図　新規装置の図
(a) 急速溶液交換装置 (b) 装置の模式図 (c) ATR部分 (d) FTIRとの接続
(e) 藤グループの装置との接続（(b), (c)模式図については論文4より転載）

参考文献

[1] Y. Furutani, T. Murata, and H. Kandori, “Sodium or Lithium Ion-Binding-Induced Structural Changes in the K-ring of V-ATPase from *Enterococcus hirae* Revealed by ATR-FTIR Spectroscopy”, *J. Am. Chem. Soc.* 133 (9), 2860-3, 2011.

[2] Y. Furutani, H. Shimizu, Y. Asai, T. Fukuda, S. Oiki and H. Kandori, “ATR-FTIR Spectroscopy Revealed the Different Vibrational Modes of the Selectivity Filter Interacting with K^+ and Na^+ in the Open and Collapsed Conformations of the KcsA Potassium Channel”, *J. Phys. Chem. Lett.* 3, 3806-10, 2012.

[3] Y. Inokuchi, T. Mizuuchi, T. Ebata, T. Ikeda, T. Haino, T. Kimura, H. Guo, Y. Furutani, “Formation of Host-Guest Complexes on Gold Surface Investigated by Surface-Enhanced IR Absorption Spectroscopy”, *Chem. Phys. Lett.* 592, 90-5, 2014.

[4] Y. Furutani, T. Kimura, and K. Okamoto, “Development of a rapid Buffer-exchange system for time-resolved ATR-FTIR spectroscopy with the step-scan mode”, *BIOPHYSICS* 9, 123–9, 2013.

[5] 古谷祐詞、木村哲就、岡本基土「急速緩衝液交換法による時間分解全反射赤外分光法の開発」, 生物物理 54 (5), 272-5, 2014

[6] H. Shirai, C. Duchesne, Y. Furutani, and T. Fuji, “Attenuated total reflectance spectroscopy with chirped-pulse upconversion”, *Opt. Express* 22 (24), 29611-16, 2014

施設だより

高性能分子シミュレータの演算サーバ更新（2014年12月）

計算科学研究センター長　斉藤 真司

2013年3月から運用を開始した高性能分子シミュレータ（通称、汎用コン）の演算サーバ部を2014年12月に更新し、運用を開始した。今回導入したシステムは、富士通製PRIMERGY CX2550（260ノード、7280コア）である。この更新により、CPUがSandy Bridge系からHaswell系になり1ノードのコア数が16個から28個となった（ノードあたりのコア数は増大したがノードあたりのメインメモリーは同じなので、コアあたりのメインメモリーの容量は8 GBから4.5 GB程度に縮小した）。

計算科学研究センターには汎用コン以外に2012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）がある。こちらは引き続き運用されており、富士通製PRIMERGY RX300 S7（130 TFlops、350ノード、5472コア）、富士通製PRIMEHPC FX10（20 TFlops、1536コア）、SGI製UV2000（20 TFlops、1024コア）が利用可能である。UV2000は1つのジョブで最大で512コア、4TBの大規模メモリーが利用であり、FX10は「京コンピュータ」のためのチューニング・テスト計算機として使うことができる。RX300 S7および今回導入したCX2550はいわゆるPCクラスターと呼ばれるものである。CX2550は1つのジョブに使えるコア数の点でRX300 S7とUV2000の中間に位置するものと捉えることができる。今回の更新により、汎用コンの総演算性能が136 TFlopsから302 TFlopsに増強され、スパコンと汎用コンを合わせると、総合性能として約470TFlopsのシステムとなった。各ユーザーの研究課題に合わせ、これらの演算サーバを有効に使っていただければ幸いです。

このような計算資源の強化と並行し、計算センターではシステムの省エネルギー化にも努めている。2014年3月からカーテンの設置により（図2）計算機室の空気の流れをコントロールし、さらに2014年8月からは室外機に水を噴射することにより（図3、図4）、空調設備の冷却効率の改善を図ってきた。その結果、昨年度よりも1割程度の電力削減を達成している。さらに、古く消費電力の大きなスパコン用空調設備をこの3月に更新する予定である。消費電力の削減は地球人として対応すべき課題であり、まわりまわって計算機資源の増強にも繋がるものである。計算科学研究センターでは、今後も様々な工夫・努力を通して、分子科学を中心とする研究分野に大規模計算環境を提供していきます。

図1 新しく導入されたPRIMERGY CX2550

図2 計算科学研究センター旧棟のスパコンに設置されたカーテン。

図3 水噴射設備

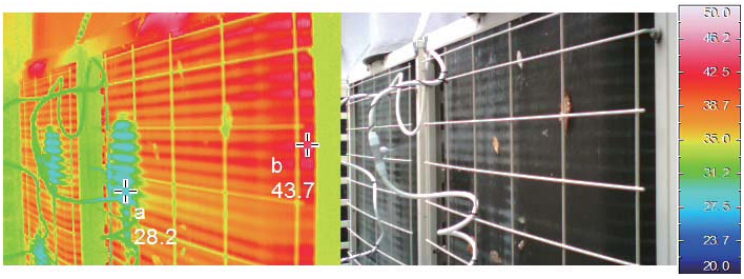


図4 室外機のサーモグラフィ写真。水の噴霧により室外機の温度が約15度低下していることが分かる。

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/guide/）を参照いただきたいと思います。

共同研究の現状について、平成20年度から平成26年度後期分（平成26年11月20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。分子科学研究所は、文部科学省「ナノテクノロジープラットフォーム」事業における「分子・物質合成プラットフォーム」の実施機関となっており、通常の協力研究に加え、本事業における協力研究も実施しています。これも含めたトータルの件数でみれば、共同利用研究の件数は年間約130件程度で推移しています。

以前の共同研究専門委員会において、現状の「課題研究」は、その位置づけがやや不明確なところもあるのではないかとの意見を受け、課題研究の見直しを行いました。その結果、平成27年度前期の公募から、課題研究の目的を明確化し活性化するため、課題研究を二つのカテゴリー（課題研究「一般」と課題研究「新分野形成支援」）に分けて公募することにしました。課題研究「一般」は、従来からの課題研究です。これに対して、課題研究「新分野形成支援」は、あらかじめ、いくつかの課題を設定しておき、設定課題に対して申請してもらうタイプの課題研究です。課題設定にあたっては、所内外の意見を参考にしつつ、新しい研究分野開拓のために分子研が取組むべき研究の方向性も見据えた上で、平成27年度は下に示す四つの課題を設定しました。

（1）理論と実験の融合による水溶液の特異性と生体分子の機能発現の解明
（2）乱雑量子系における多体相互作用の研究
（3）分子性物質の機能性科学
（4）新しい駆動原理に立脚する分子変換・エネルギー変換

課題研究「新分野形成支援」の設定課題については、来年度以降、また新たな課題を設定する予定ですので、よいアイデアがありましたら、是非、所内教員あるいは共同研究専門委員会委員長（aono@ims.ac.jp）まで、ご提案いただきたく思います。

共同利用研究の実施状況（採択件数）について

種　別	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	平成26年度（11月14日現在）
課題研究	2	1	0	1	1	2	1
協力研究	90	119	122	108	123	64	60
協力研究（ナノプラット）	—	—	—	—	—	51	37
分子研研究会	4	5	6	4	10	10	3
若手研究会等	1	1	1	1	1	1	2
岡崎コンファレンス	—	—	—	—	1	1	1
計	97	126	129	114	136	129	104

分子研研究会

開催日時	研究会名	提案代表者	参加人数
平成 26 年 9 月 27 日	細胞核内反応の分子科学	樋口秀男（東京大学大学院理学系研究科） 宇理須恒雄（名古屋大学革新ナノバイオデバイス研究センター）	45 名
平成 26 年 11 月 21 日～ 22 日	「先端放射光源に関する研究会―　第 3 世代放射光リング／SASE-FEL を越えて日本が選択すべき放射光源ロードマップに向けて（1）」	加藤政博（分子科学研究所）	64 名
平成 26 年 12 月 20 日	分子システム研究における溶液散乱	秋山修志（分子科学研究所）	44 名

若手研究会等

開催日時	研究会名	提案代表者	参加人数
平成 26 年 6 月 15 日	第 54 回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会	福田将大（京都大学大学院工学研究科）	18 名
平成 26 年 7 月 21 日～ 23 日	第 12 回 ESR 夏の学校	田中彩香（大阪市立大学大学院理学研究科）	31 名

運営に関わって

加藤 立久

京都大学国際高等教育院・教授

かとう・たつひさ／1979 - 1984分子研文部技官、1984 - 1992 京都大学理学部助手、1992 – 2004 分子研助教授、2004 -2010 城西大理学部教授、2010 – 京都大学高等教育研究開発推進機構教授を経て、現職。専門は磁気共鳴測定による分子磁性研究。

平成24年度に設置された「分子科学研究所機器センター運営委員会」に運営委員として参加し「運営に関わって」来た印象を寄稿せよということで、「分子研レターズ」に文章を寄せることになった。最新刊の「分子研レターズ」が第70巻であったので、年2回の発刊で35年間続いているわけである。ちょうど私が初めて分子科学研究所に技官として赴任したときと、創刊がほぼ同じである。思うに35年間の間に、「新人自己紹介」と「分子研を去るにあたり」を複数回（技官、助教授、客員教授）、加えて「研究報告」「分子研のOBが語る」……など数回、覚えているだけで6回以上は「分子研レターズ」へ寄稿している。それだけ、私の研究生活と分子科学研究所の間に深い繋がりがあったということだろう。

全国共同利用施設である「機器センター」の運営委員会に出席することで、若い研究者の「孵卵器」という役割を担う分子研とは異なる顔を見た気がする。共同研究と施設利用への全国からの申請に対する認可事務、ナノテクノロジープラットフォーム事業の事務処理、それに加えて海外を含めた共同研究事業の企画など、一つ一つ真面目に議論する姿に、共同利用施設という重要な役割を担うとは言え「御苦労様」と声を掛けたくなった。私自身も、高磁場パルスESR装置の施設利用では大変に御世話になっているから、公共施設としての分子研の研究施設が、より使い易くなることは誠に結構なことと思う。しかし、分子研の研究者諸氏が全国共同利用の業務を担う姿には、頭が下がると共に違和感を感じる。トーナメントプロゴルファーが公共のゴルフ場を管理・運営しているようなものであろうか。公共施設の運営業務の中に、トーナメントプロとして世界を相手にする研究活動に少しでもプラスになる要素があれば、と願ってしまう。

研究のプロ集団である分子研が主催する共同研究・施設利用だからこそ、という特徴を出しては如何だろうか？全国から集まる共同研究・共同施設利用者ネットワーク構築を目指し、ワークショップの頻繁な開催を提案する。また施設利用者国内ネットワークの延長として、国際的共同研究・施設利用ネットワーク構築と国際共同研究プロジェクトを目指すことも可能であろう。2013年の10月28日に開催された「ESR国際連携検討会」（ベルリン自由大学Bittl教授を囲んでのESRワークショップ）などは、既に試みられている一つの例だろう。分子研・ベルリン自由大学間交換プロジェクトを引き金に、世界的ESR研究者であるBittl教授をお迎えして、分子研の高磁場パルスESR装置利用者が全国から集まり、国際共同ESR研究の可能性を討論するワークショップだった。このようなかたちの全国大学間共同利用業務ならば、研究のトーナメントプロたる分子研・研究者の研究活動に少しでもプラスになるのではないだろうか。

運営に関わって

高橋 正彦

東北大学多元物質科学研究所・教授

たかはし・まさひこ／博士（理学）。1985年京大理学部卒業。1986年京大大学院理化修士課程中退。分子研文部技官、東北大科測研助手、文部省長期在外若手研究員（英国・Oxford大学）、分子研流動部門助教授、東北大多元研准教授などを経て、2008年東北大多元研教授。レーザー共鳴多光子イオン化光電子分光、光電子・光イオン同時計測分光、(e,2e)電子運動量分光などに従事。

2011年度からの4年間、分子研装置開発室運営委員会の外部運営委員を務めました。愚直な若者を分子研は文部技官として拾って育ててくれたこと、東北大に移って以降も一貫して分子研装置開発室からの強力な技術支援を頂戴してきていること、大学では困難であった研究課題に挑戦する機会を分子研が与えてくれて研究に活路を見いだせたこと等の個人的経緯もあり、運営委員の役目を躊躇なく引き受けました。

装置開発室運営委員会に初めて参加したのは、2011年9月28日でした。名鉄東岡崎駅からの緩やかな坂道を登って仰ぎ見る構内には、期待と不安を胸に分子研に飛び込んだ過ぎし日の面影がまだ色濃く残っています。思い返せば、1980年代半ばに研究者の道を志した若者は、まばゆいばかりのエネルギーと躍動感で満ち溢れていた分子研で原体験を積み重ねました。職種や階層を超えて語り明かしたラウンジでの懇親会、研究室の垣根を超えて集まり議論した毎週の自主ゼミ、なかでも特に目を見張ったものは数多くの研究グループと唇歯の関係を築いていた装置開発室でした。発展を続ける分子科学の世界最先端研究の開拓には新しい実験技術の開発を伴うことが多いことを、分子研で初めて学びました。

そうした分子研も、創設以来40年の年月を経ようとしています。人でいえば「不惑」の節目ですし、また科学・技術の進歩や社会的ニーズの多様化など環境の変化もありますので、分子研も新しい時代に入っていかざるを得ないと愚考します。今、分子研の皆さんは、諸先輩方がリスクを取って種々に挑戦されたことをあらためて銘記する一方で、「ゆく河の流れは絶えずして、しかももとの水にあらず」の如く、分子科学研究の深化と展開に関して自らの学術的および社会的な機能と役割を再議論し、その体現に取り組まれていることと拝察します。そして、ここに装置開発室の将来計画が含まれているだろうことは言を俟ちません。

運営委員会に都合4回参加して、装置開発室は以前にもまして精力的に活動されておられることを知りました。所内グループの独創的な研究を支える様々な実験装置の開発は言うに及ばず、運営委員による審査を経た所外利用者の製作依頼への協力、他機関との連携等を通じて装置開発室自身の技術力向上を目指す「将来技術開発プロジェクト」、中高生の職場体験等のアウトリーチ活動など、その活動範囲は大きく広がっているようです。所外運営委員として敬意を表すると共に、分子研ＯＢとしてまことに誇らしく喜ばしい限りです。しかしながら、一点、思い置くことがあります。それは、上述の装置開発室の将来計画が見えにくかったことです。

将来計画は、先の見える合理的な「予定」とは異なり、将来に対する意志ですので、現状から量子跳躍したものであってもかまいません。斬新で深い魅力にあふれた将来ビジョンの策定は、そこに協働する人々に朽ちることのない希望を植え付けます。また、「人類最速の男」ウサイン・ボルト選手の活躍に対する熱狂しかり、全体知をもって我が国における普遍的国際人の先駆者となった空海に対する畏敬の念しかり、いつの世も変わらず、私達人間は誰しも限界を突破したいというモチベーションを持ち、果敢に挑戦する人々とその試みに強く共鳴するようです。

僭越ですが、装置開発室の将来計画の一つとして、研究者と技術者が腰を据えて緊密に連携する「装置・技術開発に礎を置く所内重点研究プロジェクト」を発足させては如何でしょうか。ここで問うべきは、スモール・サイエンスかビッグ・サイエンスか等の戦略選択的視点からではなく、その研究が分子科学の限界の突破に挑む超弩級の性質のものであるかどうかです。真の革新は、未知未踏の領域にのみしか存在しないように思います。また、研究・教育および社会に対するアカウンタビリティーを両立するための別次元での妙手になる可能性を秘めているようにも思います。国内外の分子科学研究を先導してきた分子研が、創設当初の矜持と謙虚さを堅持しつつ大いなる勇気をもって、今後とも分子科学の新たな水平線を切り開かれんことを心より期待しています。

運営に関わって

兒玉 了祐

大阪大学大学院工学研究科　教授

こだま・りょうすけ／1990年大阪大学工学研究科博士課程修了、日本学術振興会海外特別研究員、オックスフォード大学客員研究員、大阪大学レーザー核融合研究センター助手、同助教授を経て2005年より現職。2008年文科省光拠点事業関西拠点長、2009年同大学光科学センター長、2013年同大学未来戦略機構光量子科学研究部門長を兼任。専門は光科学、プラズマ科学をベースにした高エネルギー密度科学。

2013年度より2年間、分子制御レーザー開発研究センター運営委員会委員をさせていただきました。私の研究分野は、パワーレーザーとその応用であり、光科学やプラズマ科学をベースとしたものです。もともと分子科学研究所の活動あるいはその出口において、私の研究分野はあまり接点がないように思っておりました。これは私の狭い視野によるものであったと、今更ながら恥ずかしい思いをしております。宇宙から生命まで扱う自然科学分野で学術の発展を担う自然科学研究機構の1つである分子科学研究所と、大学で学術研究を行うもの同士、関係がないということは無いのですが、どうしても従来分野の枠を当たり前のように受け入れておりました。

そんな中で、2008年に文部科学省「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」が始まりました。この事業では関西と関東の2拠点が採択され、関西拠点におきましては、自然科学研究機構分子科学研究所、大阪大学、京都大学、原子力研究開発機構関西研究所の4機関を中心に、3つのミッション（光源開発と応用、装置供用、人材育成）を行う拠点活動を展開することとなりました。関西の拠点は、国立大学法人、大学共同利用機関法人、独立行政法人という法人が連携するものです。一方で、光科学という大きな枠の中で基礎物理学と応用展開を目指した工学に携わる研究者の連携を行うということで、開始当初は色々な方からご心配をいただいたりもしました。同じ光科学とは言え、異なる文化、異なる言語にほぼ全員が戸惑いを示しながら、共通の教育、共通の光科学技術をベースに7年を経過すると、連携してこその成果だけでなく、当初予想していなかったもの、考えられなかった連携が生まれてきております。

この拠点活動におきまして、分子制御レーザー開発研究センター（レーザーセンター）は、分子科学研究所における中核となるセンターとしてご活躍いただいております。（1）先端光源の開発、（2）レーザーを用いた量子制御法の開発、（3）高分解能光イメージングと分光法の開発などにおいて、関西拠点でも重要な技術開発をしていただいております。レーザーセンターの設立趣旨は、光分子科学研究領域との連携のもとに、分子科学の新分野を切り拓くための装置、方法論の開発研究を行なう施設ですが、拠点の中ではより広い光科学という枠組みの中で、基礎科学と応用を展開する重要な組織としてご貢献いただいております。その表れの1つとして、新たに2014年度より内閣府ImPACT事業（革新的研究開発推進プログラム「ユビキタス・パワーレーザーによる安全・安心・長寿社会の実現」）で、貴センターのマイクロ固体フォトニクスと大阪大学や原子力機構関西研のパワーフォトニクス、プラズマフォトニクスとなどが連携し、ユビキタス・パワーレーザー開発を開始しております。

このように私にとって、分子科学研究所は新たな連携を展開させていただけた組織という思いで、感謝しております。一方で、今更ながら、センター運営に関して多少なりともお役に立てたのかという思いです。そのような思いから、この場をお借りして恐縮ですが、センターへの期待を一言記させていただきます。それは、大学共同利用機関法人自然科学研究機構という大きな枠組みを積極的に生かした、攻めの連携の要となってほしいということです。機構として、研究所として、センターとして、それぞれのミッションはあるかと思います。一方で、大学などを巻き込んだ新たなサイエンスイノベーションが期待されているかと思います。例えば、分子研の量子制御技術は、X線レーザーなど新しい技術と結びつくことで、超高精度量子制御技術やさらには分子コヒーレント励起に類似する核コヒーレント励起など、分子という枠に限らない広い展開の可能性があります。また、一昔前まではパワーレーザー応用といえばレーザー加工をはじめプラズマ応用など、物質構造が

バラバラになる世界だと思われていました。ところが今は、1000万気圧でも結晶構造を保つ状態を実現できています。予想できない化学反応による新物質創成も期待されています。これは1つの例ですが、その他にも新たな技術を基にした学術シーズが様々な分野に眠っています。大学共同利用機関法人自然科学研究機構の組織として、ぜひ光科学など学際的な共通基盤をもとにして、これら大学や研究法人に眠るシーズを掘り起し、発展させ、我が国におけるサイエンスイノベーションの牽引となっていただけることを期待いたしております。

関連学協会等の動き

ナノメディシン分子科学について

宇理須 恒雄 名古屋大学革新ナノバイオデバイス研究センター　特任教授
樋口 秀男 東京大学大学院理学系研究科　教授

「ナノメディシン分子科学」は新学術領域（代表；石原一彦東京大学教授、H23-27年度）の領域名ですが、ここでは新学術領域に限らないで、ナノメディシンという学際領域について、分子科学の視点からの最近の動向と将来の展望について紹介させていただこうと思います。ナノメディシンという言葉は、ナノサイエンス・テクノロジーの医学・医療応用という意味で最初にNIHにより提案され、すでに一般に用いられていますが、新学術領域研究ではこれに（広い意味での医学・医療との接点を意識して）ナノバイオロジーが加わっています。新学術領域以外にも、ナノメディシンに関係する組織として、ナノ学会にナノバイオメデイシン部会があります。さらにナノメディシンという言葉でネット検索すると、これら以外にも非常に多くの団体や活動があることが分かります。非常に多岐にわたり浸透している学術領域ではありますが、いいかえれば、定義がややあいまいな学術ともいえます。分子科学に関連した研究活動にかぎって最近の研究動向を整理してみますと、

1. イメージングの新プローブの開発と特性解析：量子ドット、分子（RNA、DNA、タンパク質）などのプローブ、またこれによる細胞内化学反応の解析など
2. ドラッグデリバリーのナノキャリアーの開発と応用：ナノキャリアーの表面分子構造と細胞表面や細胞内分子器官との相互作用など
3. 細胞内局所化学反応や細胞内物質輸送の研究：抗原抗体染色とイメージング技術の組み合わせなど
4. トップダウンナノテクノロジーの応用：一分子、ベシクル、一細胞のレーザーマニピュレーション、ナノ構造表面による細胞や生体物質の運動や機能制御、AFMなどナノ構造チップによる生体物質の構造・機能計測など
5. 核酸や上記1、2に関連した分子の合成

などきわめて広い研究分野に関係しているといえます。それだけナノテクノロジーの出現が産業革命にも匹敵する技術革新であったといえるのだと思います。

また、つい先日開催されたナノメディシン国際シンポジウム（松山市愛媛大学、12月4-6日）での発表で見られた、上記以外の新しい動向として、

6. レーザーの細胞内微小領域への集光機能と分光機能（ラマン散乱分光など）を結び付けた新しい解析技術の開発、医療への応用
7. 農業分野でのナノバイオロジー、ナノメディシンの展開

などがあげられると思います。このように、ナノメディシンには分子科学が深く入り込んでおります。しかし、これまでの多くの分子科学と異なるのは、当然ですが相手が細胞やヒトである点です。医学を意識した分子科学はまだまだ発展途上にあるわけですので、今後、分子科学と医学との関連分野が大きく発展すると大いに期待されます。

ナノメディシンの立場からも、核内はタンパク質の発現の司令塔であり大変重要な部位にもかかわらず、未知な部分が多く残されています。そこで最新の核内研究の情報を交換し議論する

ために、分子研研究会「細胞核内反応の分子科学」（9月27日、ナノ学会及び新学術領域の共催）が開催されました。この発表の中から最近の新しい動向を知ることができました。ナノメディシンの新しい動向に関わりそうな発表をまとめますと、

8. 細胞核内のゲノムイメージング、RNAイメージング

9. クロマチンダイナミックスのシミュレーション、超解像顕微鏡による可視化

10. siRNA合成、piRNA生合成機構

などとなります。これらはナノメディシンという観点からはまだ未熟な学問、言い方をかえると、研究を進めること自体がいまだ非常に困難で、まさに分子科学の未開の領域の様に感じます。この細胞核内分子反応の領域を別の視点から見てみますと、面白いことに気づきます。図1は、その発見により治療にブレークスルーをもたらした病原体、あるいは疾患の原因物質について、それが発見された時期とその寸法との関係を示します。この図からは、歴史とともに対象とするサイズが減少し、現在では未知の疾患原因の対象が数nmか1 nm前後のサイズのもの、即ち、タンパク質、核酸やncRNAなどと同様の大きさのものとなっています。現在難病とされ、原因も治療法も不明の疾患の原因が、細胞核内の物質や反応にあるのではないかと考えられていることと奇妙な一致が見られます。図1は半導体分野のムーアの法則と似たところがあり、理論的バックグラウンドの無い経験則に過ぎませんが、興味深い傾向ではあります。この極めて微小で極めて複雑な反応領域である細胞核内について、分子科学としての新しい研究手法を開発することは、難病の原因解明に極めて重要で、夢のある課題ではないかと考えます。分子研研究会の発表において、この微小領域についてのAFM技術や軟X線顕微鏡技術の開発などの研究があり、すでにその動きが始まっていることも付け加えさせていただきます。

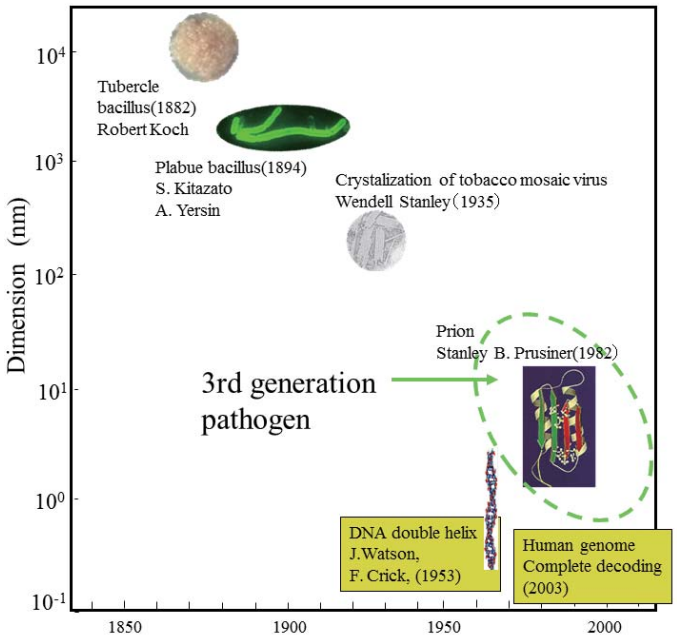


図1 疾患の原因解明や治療にブレークスルーをもたらした病原体の発見の時期とその寸法との関係。経験則ではあるが、半導体分野のムーアの法則（集積度と開発に必要な年数の関係の予測）と似ている。

分子研における放射線管理

光技術班
安全衛生管理室（放射線作業主任）　酒井 雅弘

香川大学教育学部卒、豊橋技術科学大学大学院工学研究科電気・電子工学専攻修了。同大研究生を経て1990年11月入所。機器センター･分子物質開発研究センター･分子スケールナノサイエンスセンターにて物性測定装置（Faraday型磁化測定装置、ESR、SQUID、SEM､ESCAなど）の維持･管理に従事。2005年極端紫外光研究施設（UVSOR）に異動し、ビームラインの維持･管理に従事。2010年より放射線取扱主任者に選任され、現在に至る。

1. はじめに

分子研は、「放射性同位元素等による放射線障害の防止に関する法律」（以下、「放射線障害防止法」）で規制される加速器と、「電離放射線障害防止規則」で規制される工業用エックス線装置を有している。分子研では、この両規則で規制される設備・装置を利用する者をまとめて「放射線業務従事者（業務従事者）」として登録している。またこれら設備・装置ごとに「放射線管理責任者」が置かれ、それらを取りまとめる形で「放射線取扱主任者（取扱主任者）」と組織として「放射線安全委員会」が置かれている（図1参照）。

筆者は入所時に、共同利用装置である粉末X線回折装置を担当することとなり、初めは業務従事者として管理される立場であった。2006年に第１種放射線取扱主任者免状を取得し、2010年に取扱主任者に選任され、この時から管理する側に回ることになった。

本紙面では、日常の放射線管理業務の紹介というよりも、選任後に工夫した点、より強化した点を紹介したいと思う。

2. 安全衛生管理室放射線部門Webページ の開設

「グループ秘書さんでも放射線に関する手続き等がわかるように可視化してほしい」との声が多数あるとのことで、所内ポータルサイトに安全衛生管理室放射線部門のWebページ（http://info.ims.ac.jp/safety/ray/）を開設し（図2）、随時更新している。業務従事者登録の手続き・外部施設（SPring-8、KEK など）へ提出する承認書の発行手続き・電離放射線特殊健康診断の検査内容などの業務従事者に有用な情報だけでなく、民家から放射性物質が見つかったことを受け、「管理下にないRIを見つけた時は」というページを設け、業務従事者以外の方でも閲覧できるようした。

まだまだ進化途中のWebページであるため、「可視化がまだ不十分だ」などのご意見・コメントがある方は、放射線部門：ray@ims.ac.jp までご連絡頂きたい。

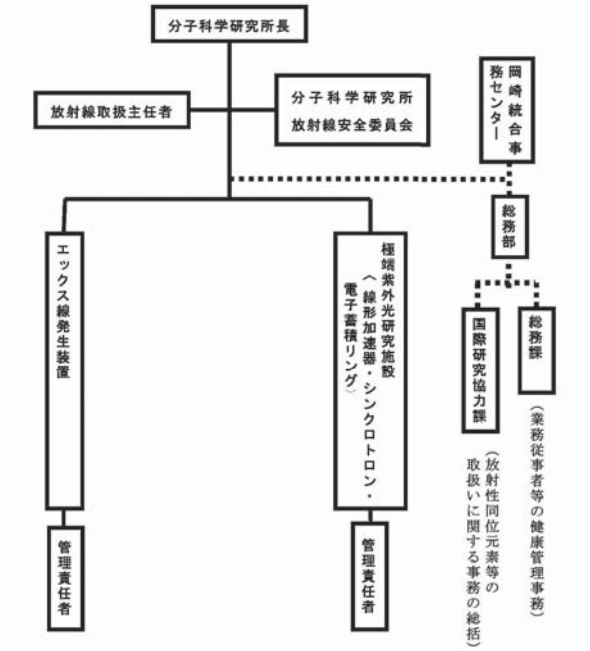


図1　分子科学研究所における放射線安全管理体制

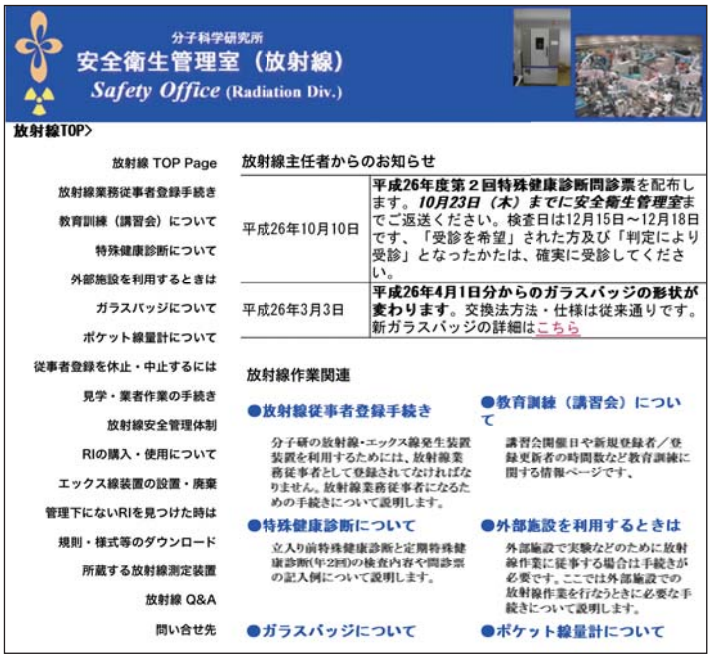


図2　安全衛生管理室放射線部門のトップページ

3. 放射線講習会（教育訓練）と特別講演

例年4月中旬に開催する放射線講習会では、都合で当日受講できない方や、年度途中で入所・業務従事者登録される方が受講できるように、ビデオ録画を行っている。従来は、スクリーン全体を撮影するカメラを1台設置して録音・録画を行っていたが、スクリーンが暗くなるとフォーカスが外れるようで、すこしピンボケ気味に録画される。そのため、後日受講される方は見づらい画像を見ることになり、教育訓練の効果が低減していたと思われる。2011年度より、総研大のe-Learning 録画システム（小杉教授自ら構築したもの）を用いて録画することにした。このシステムでは、講演者のPC からプロジェクタに送られる映像信号を分岐して録画用PC に取り込むため、講演者のプレゼンテーション画面がピンボケなく録画される。2014年より、システムの準備、及び録音・録画操作については、研究力強化戦略室に支援していただいている。

前任の取扱主任者・林憲志氏の頃スタートした、外部から講師を招聘して講演を行ってもらう「特別講演」を継続している。筆者が選任されてからの特別講演の題目と講演者を表1に示す。従来、講師は前年度の方から紹介していただく形を取っていたが、「身近にある放射線」や「放射線を使った応用」など、すこし一般向けの講演の方がいいかなと考え、2011年度の講演者からは筆者（取扱主任者）チョイスにした。筆者が放射線取扱主任者部会（現：放射線取扱安全部会）や大学等放射線施設協議会などの研修会で実際に聴講した講演や、各支部の研修会の開催案内の中で、トピック的なもの（＋取扱主任者自身が興味を持っていること？）から選んでいる。2010年は、NBCR災害（N：核 Nuclear、B：生物 Biological、C：化学 Chemical、R：放射性Radiological 兵器による災害）への対応について、関西の自治体を中心に議論及び訓練が盛んに行われていた。これを受け、岡崎市のNBCR災害への対応と、東南海地震が発生した場合に我々はどのように行動すべきかを、2011年の特別講演として岡崎中消防署に依頼した。実際の講演では、直前に発生した東日本大震災で派遣されていた亘理町の被災状況の紹介に時間が割かれ、こちらの意図とは異なっていたが、講演者が防火服で登場するというサプライズもあり、かなり評判の高い特別講演となった。とかく受講者からは「講習会は苦行だ」との声も聞こえる。この声を極力減らすべく、受講者が退屈せず、正確かつ最新の放射線に関する知識を得られるテーマをチョイスしていきたいと思う。

なお、特別講演の講師の方には、「その年度だけ、講習用として画像・資料を使用する」ということで撮影許可をいただいている。過去の特別講演の視聴を希望されても実現できない場合があるのでご了解いただきたい。

表1　特別講演の講演題目と講演者（敬称略）

年度	講　演　題　目	講　演　者
2010	計算化学的手法を用いた DNA 分子の損傷モデルの構築と修復酵素の構造解析	藤本　浩文 国立感染症研究所
2011	防災講習	中根　豪 岡崎中消防署
2012	大地からのメッセージ　～地震前のラドン変動～	安岡　由美 神戸薬科大学
2013	航空機・ヘリコプターを用いた放射線マップの作成	鳥居　建男 原子力研究開発機構
2014	原発事故と水産物　～水産物の汚染状況と今後～	森田　貴己 (独)水産総合研究センター

表2　放射線業務従事者登録者に対する外国人研究者の割合（*2014年度は12月5日時点での数値）

年度	所内			所外（共同利用研究者）		
	登録者数(人)	外国人(人)	外国人の割合	登録者数(人)	海外機関所属者(人)	外国人の割合
2008	124	9	7.3%	299	16	5.4%
2009	126	11	8.7%	332	14	4.2%
2010	139	25	18.0%	325	24	7.4&
2011	140	25	17.9%	327	32	9.8%
2012	143	24	16.8%	347	35	10.1%
2013	137	35	25.5%	326	45	13.8%
2014*	146	38	26.0%	346	33	9.5%

4. 書類などの英語化

表2に、業務従事者に対する外国人研究者の割合を示す。海外研究機関からの特別共同利用研究員（受託院生に相当）への応募が可能となったこともあり、業務従事者登録をする外国人研究者が増えている。国際的に競争力のある施設を目指しビームライン建設を行った効果もあいまってか、UVSOR利用者のみの数値であるが、共同利用研究者数も外国人研究者が増加している。半期ごとに実施される電離放射線特殊健康診断など頻度が高く、問診票のように記入を要するものは、英語による

説明・記入例が作成されていたが、前述した外国人特別共同利用研究員を業務従事者として受け入れるための承認書の英語化は各々の部署で行うことになっていたため、作成して放射線安全委員会で書式の了承を得た。最近、グローバル化対応への指導もあって、機構全体での英語化が推進されることになった。現時点で英語化されていない放射線に関する様式は、この流れに沿って日本語・英語両併記または英語単独の書式に変更していく。

講習会においては、市販の英語版法令 DVDや、大学等放射線施設協議会が監修する「英語による教育訓練テキスト」を活用している。この英語テキストは、アイソトープ利用者に主眼がおかれているので、放射光施設利用者向けに一部アレンジし、日英両併記でのプロジェクタ投影にできる限り努めている（図3）。また、UVSOR利用者（共同利用研究者）控室やエックス線使用室での注意事項の掲示物なども、日英両併記に努めている。

5. 良好な安全文化の醸成を目指して

原子力規制委員会設置法に基づき、2013年4月1日に文部科学省科学技術・学術政策局放射線規制室が所管する事務（放射線障害防止法などに関わる事務）が原子力規制委員会に移管された。同年5月にJ-PARC放射性同位元素漏洩事故（J-PARC事故）が発生し、文部科学省より自然科学機構長宛に「加速器に係る安全管理体制等の再確認について」の調査依頼があり、加速器を所有する分子研が回答することになった。この頃から「安全文化の醸成」という言葉が、放射線安全管理部会での原子力規制委員会担当者の講演を始めとして、他でも見聞きするようになった。元々はチェルノブイリ事故以降、わが国で発生したJCO臨界事故（1999年）、及び美浜3号機事故（2004年）を受けての「原子力施設の安全文化の醸成」[1]の意味合いが強かったが、原子力規制委員会への事務移管、J-PARC事故を契機として、放射線施設へも「安全文化の醸成」が適応されることになったと筆者は考えている。組織安全の研究者 J. リーズンは、安全文化については、「情報に立脚した文化」でもあり、それを創るためには「報告する文化」、「正義・公正の文化」、「学習する文化」が必要と言及している。マネージメントする側だけでなく、利用する側にも課せられる課題である。今後とも、放射線のみならず安全文化の継続・発展にご協力をお願いしたい。

参考文献

[1] 平成21年版原子力安全白書　第3編原子力安全確保のための諸活動　第4章安全文化の醸成と定着
http://www.nsr.go.jp/archive/nsc/hakusyo/hakusyo21/pdf/03hen_syou4.pdf

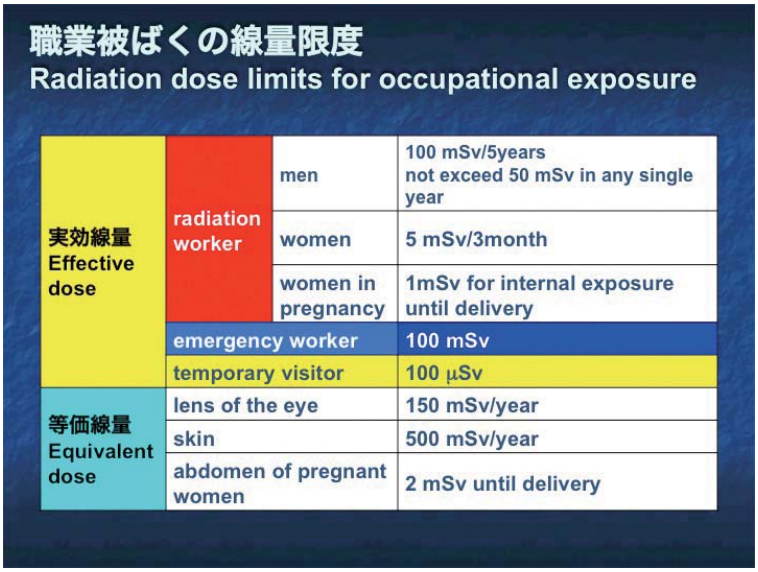


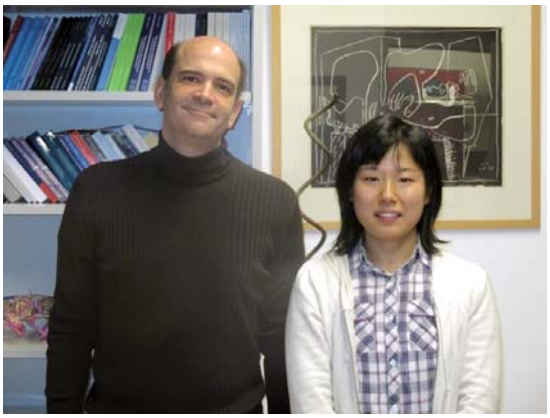
図3　講習会で使用した（プロジェクタ投影した）資料の例

COLUMN

先端研究指向コースを利用した海外研究留学

櫻井 扶美恵
総合研究大学院大学物理科学研究科機能分子科学専攻
5年一貫制博士課程5年

さくらい・ふみえ
名古屋市立大学大学院薬学研究科博士前期課程を修了後、平成23年4月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に博士課程3年次編入学、現在に至る。生命・錯体分子科学研究領域魚住グループにて、自己組織化ナノ構造体を利用した水中触媒システムの開発に取り組んでいる。


Carreira教授（左）と筆者（右）。

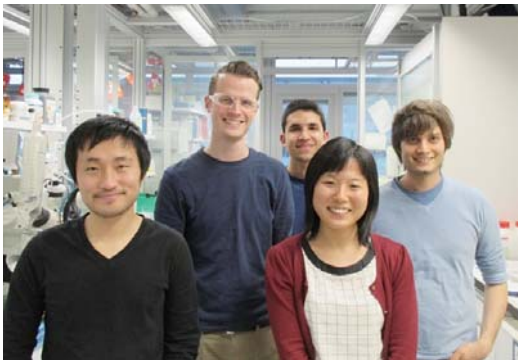
2014年8月末から約3か月間、スイス連邦工科大学チューリッヒ校（ETH Zürich）のErick. M. Carreira教授の研究室に滞在し、研究に携わってまいりました。

総研大ではコース別大学院教育プログラムというカリキュラムが設けられており、その中で先端研究指向コースを選択すると海外での研究留学が必修となります。私は元々海外留学に興味があり、また海外の研究室に触れる良いチャンスだと思いましたので、迷うことなく本コースを選択しました。しかしながら、実際に留学に行くまでには長い時間がかかり苦労もありました。本コースの修了要件として学術論文（2報以上）の発表と国際学会発表1件が課されており、自分の博士論文研究に関して、留学前にある程度、その要件を満たせる状態にしなければなりませんでした。なかなか思うように研究が進まず不安になることもありましたが、やっとその目処が立ち、留学の段階まで漕ぎ着けることができました。

留学の準備にあたり、まず留学先を決めることから始めました。魚住先生からは「短期留学だから、まず自分がどの国に行きたいかを決めるとよい」という助言を頂き、行き先については自由に選ぶことができました。興味のある研究室はいくつかありましたが、ヨーロッパに行きたいという思いと、有機化学の分野において第一線で活躍する研究グループの雰囲気を感じ取ってみたいという思いから、ETH ZürichのCarreira教授の研究グループに滞在しようと決めました。次に、留学の詳細な日程や現地滞在で必要な手続き等について、Carreira教授や先方の秘書の方と自分で連絡を取り準備を進めましたが、この過程で最も苦労した点は住居探しでした。チューリッヒでは物価全般がとても高く家賃も高い上に、学生が住めるようなアパートの数が元々少ないため、留学生にとって住居を探すことは一般的に非常に難しいのだそうです。さらにアパートを探すタイミングも悪く先方の秘書さんが長期休暇を取る直前であったため、Carreira研のメンバーの方々にも協力して頂き、幸いにも出発前までに短期滞在者向けのアパートを確保することができました。

滞在先の研究室に向かうまでは「英語も流暢に話せないのに3か月間1人で上手くやっていけるだろうか……」ととても不安に思いましたが、Carreira教授はとても優しく大らかな先生であり、緊張している私をとても温かく迎えて下さいました。Carreira研はメンバーが40人程いる大きな研究室で、生理活性物質の全合成研究や不斉触媒反応の開発を中心に研究を進めています。その中で、今回私はある標的化合物の合成に携わりました。分子研に居る時にセミナー等で日頃から英語と向き合っていたこともあり、実験のディスカッションをする時や機器の取り扱い方などを聞く時にはそれほど困らなかったのですが、昼食等での会話において皆の喋る速度がとても速く、しかも時々公用語であるドイツ語が混ざるのでとても苦労しました。留学に来て間もない頃は昼食での会話にほとんどついていけない時もあり、ある学生から「大丈夫？会話についていけてる？」と心配して聞かれたことがありました。「気にしないでね。少しずつ練習して上手くなろう。」と励まされたのですが、自分が如何に英語を話せないかを痛感し悔しく思いました。そこで、「たった3か月の滞在だけど少しでも上手くなって日本に帰りたい」「短い期間だからこそ一日一日を大事にしたい」と思い、研究とは関係のないほんの些細な事でもとにかく話すよう努力しました。話題がなくても「最近実験どう？」「今週末は何するの？」と尋ねたり、観光に行く前には「○○まで行きたいけどどの交通手段が一番安いと思う？」「お勧めの観光地は何処？」などと聞いて情報を集めていました。難しい事はなかなか喋れないものの、一度話し出すと夢中になり気づけば30分以上経っていること

もありました。また、この留学期間中にちょうど博士論文を書いていたので、自分が書いた論文の英語を時々見てもらい、それがきっかけで自分の研究や相手の研究について話し合うこともできました。1か月ほど経つと研究室の生活にも慣れ、研究も順調に進んでいましたが、ある時1つの合成反応が何度試しても全く進まないことがありました。同じ研究を進めている学生・ポスドクに相談しながら2週間ほど試行錯誤を重ねたものの上手くいかず、彼らも途方に暮れていました。私はある考えが浮かんだものの、自分の拙い英語でその考えを上手く相手に伝えられるか自信がありませんでした。しかし、構造式を描きながら英語でゆっくり伝えると、何とか理解してもらえたようで「それは可能性があるからやってみよう」という事になり、実際にその考えに基づいて実験を行ったところ、それまで全く進まなかった反応がようやく進みました。「その考えは思いつかなかったよ」と彼らに言われ、勇気を出して考えを伝えて良かったと思いました。英語が彼らのように流暢に話せなくても、科学は世界共通なのだという事をこの時初めて実感しました。留学最終日にCarreira教授と研究室のメンバーに挨拶し握手した時、「来た時よりも英語上手くなったね」「また機会があったらおいで」と言われました。社交辞令だったかもしれませんが嬉しく思い、大変なこともありましたが留学に行って本当に良かったと心から思いました。



Carreira研究室のメンバーとの集合写真
（筆者：右から2人目）。

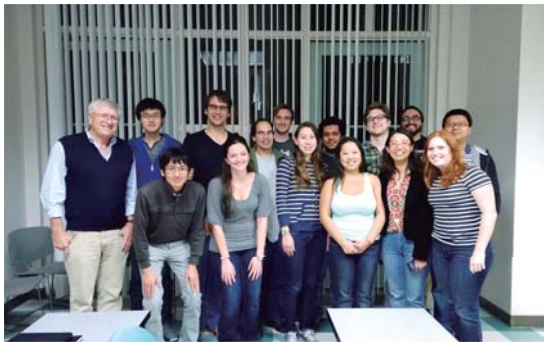
たった3か月の留学でしたが、毎日とても充実しており私にとって非常に良い経験となりました。先端研究指向コースは他コースに比べて修了要件が厳しく留学の準備も大変ですが、苦労した分得られるものはすごく大きいので積極的に挑戦することをお勧めします。最後に、今回の短期留学で大変お世話になりましたCarreira教授を始めCarreira研究室の皆様、大学院係の方、魚住先生、そして私の家族にこの場を借りて深くお礼申し上げます。

COLUMN

先端研究指向コースを活用した海外短期留学

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5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、総研大に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。



University of California, Santa BarbaraのFord研究室。
前列左端が筆者。後列左端がFord教授。

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5年の中村と申します。本コラムでは、アメリカのカリフォルニア州サンタバーバラで、2013年11月から2014年3月にかけて過ごした研究生活について記したいと思います。遡ること2013年3月、4年次に進級する際に先端研究指向コースを選択しました。国際学会はおろか海外旅行すら経験に乏しかったので、始めは不安や緊張も正直ありましたが、学生の間に一度は海外留学をしてみたかったので、絶好の機会であったと思います。総研大にはこのコース選択の他に、海外学会等派遣事業もあることから、留学してみたい学生にとって恵まれた環境であるとつくづく感じます。

私はこれまで、水の酸化や二酸化炭素還元といった小分子の活性化を目標とし、反応活性サイトを有するルテニウム錯体の設計を行い、その電気化学的特性について研究を進めてきました。錯体の構成部位としてリン原子を含むホスフィン化合物を使うと、二酸化炭素捕捉に関して、ホスフィン部位が優位にはたらくことが明らかになりました。そこで、これまで創製した錯体が、

他の小分子に対してどのような影響を及ぼすのか調べたいと考え、University of California, Santa Barbara (UCSB)のPeter C. Ford教授のグループを留学先として選びました。Ford先生は光反応化学研究の第一人者であり、一酸化窒素（NO）といった生体調節因子の光化学的制御や、二酸化窒素（NO_2）配位子の還元反応機構の解明に着手しています。今回の留学では、NOやNO_2といった窒素酸化物を含むルテニウム錯体の電子的性質や光化学反応に対するホスフィンの効果について調査致しました。

滞在先のサンタバーバラは、ロサンゼルスから車で3時間、飛行機で1時間の距離に位置し、西海岸を代表するリゾート地で、サーファーにも人気の場所です。気候は年中暖かく、真冬でも日中は半袖で過ごせるくらいです。町並みはスペイン風で、図書館や劇場はもちろん、マクドナルドやスターバックスまでベージュ基調に統一されています。UCSBも例外ではなく、どの学部を見ても印象的でかつ綺麗な建築物が立ち並び、南は海、北は山と美しい景色にも囲まれ、就業環境としては「最高」と言って間違いないと思います。また、今年のノーベル物理学賞を受賞した中村修二先生も、このUCSBで教鞭を執られています。

一般的にアメリカにはパスポートとESTAさえあれば入国できますが、3ヶ月を越える旅程には渡航ビザが必須です。研究を目的としたビザの取得には必要な書類が多く、思いのほか時間がかかってしまいました。日頃の研究の合間を縫って留学の準備をしている内に、気がつけば出発の11月になりましたが、事前に住む場所が決められませんでした。というのもUCSBの11月はセメスターの途中で、留学生寮はおろか、シェアハウスすら全く空いていなかったからです。不安を抱えながらの出発でしたが、現地に行ってしまえばどうにかなるもので、数日間大学が運営するホテルに泊まった後、研究室の学生からホームステイ先として、インドネシアからの移民であるTumble一家を紹介して頂きました。4人家族でいつも皆明るく、毎晩色々な話題で盛り上がり、英語を学ぶという点でも大変充実しました。休日も一緒に外食に誘ってもらったり、ボウリングに行ったりと、いつも暖かく接して頂きました。

アメリカで研究生活を始めて印象に残ったことが数多くあります。まず、実験を始める前には薬品の取扱や消火方法についてのテストをいくつも受けなければならず、事故防止や安全管理に厳しかったと思います。また、学生の研究活動時間は、おおよそ朝9時～夕方5時で、日が沈む頃にはほとんどのメンバーが帰っていました。最初はなかなか夕方に研究の区切りをつけて終えることに慣れなかったのですが、実際に試してみると、朝早くから実験やデスクワークが捗り、夜遅く残るよりも能率が良かったことから、健全な生活を保つことも研究に必要であると改めて感じました。他には、毎週水曜日の午後3時から学部全体でブレイクタイムがあり、学生や先生が一斉にエントランス付近でティータイムを楽しみます。単に休憩という意味だけでなく、他の研究室と交流を深められる素晴らしい催しであると思いました。クリスマスにはFord先生宅のパーティに招かれ、グループの皆で奥様による本場のターキーを含む様々な料理や、ホワイト・エレファントというプレゼント交換ゲームも楽しみ、アメリカのクリスマスを満喫しました。

この留学を通して、幾つものかけがえのない知識や経験が得られたことを大変嬉しく思います。修了まで残り少なくなりましたが、コースの教育体制にも掲げられている「先端研究分野を徹底的に探求」を達成すべく、今後も邁進していく所存でございます。最後になりましたが、この場を借りて、Ford先生、正岡先生、分子研大学院係や総研大学務課の皆様に心より厚く御礼申し上げます。以上、思いつくままに綴りましたが、これにて筆を擱かせていただきます。ありがとうございました。

第１１回夏の体験入学

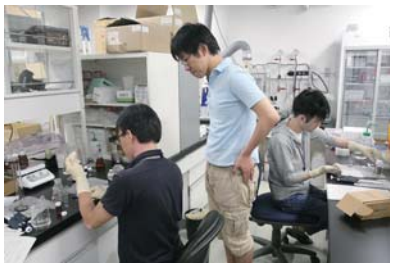
担当教員

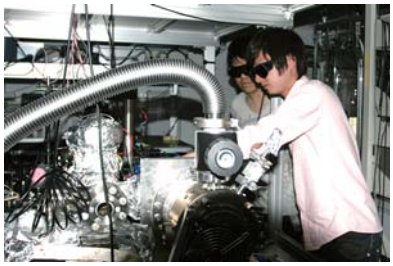
2014年度担当教員　総研大物理科学研究科構造分子科学専攻　准教授　江 東林

2014年8月4日（月）から7日（木）までの4日間、分子科学研究所（分子研）において、第11回総合研究大学院大学（総研大）夏の体験入学が開催された。本体験入学は、他大学の学部学生・大学院生を対象とするもので、各研究室での体験学習を通じて、特に、最先端の研究に触れることで、分子研（総研大物理科学研究科構造分子科学専攻・機能分子科学専攻）における研究環境や設備、大学院教育、研究者養成、共同利用研究などの活動を知ってもらい、分子研や総研大への理解を広げてもらうことを目的としている。

本年度も定員を超える応募を受け、選考の結果、26名の学生（学部学生20名、大学院修士課程学生6名）が参加することとなった。初日には、午後から明大寺地区でオリエンテーションを開催した。総研大・分子研の紹介に続き、各実施グループに体験プログラムの紹介を行った。その後、UVSORと計算科学研究センターにおいて施設見学を行った。5日、6日の2日間は、各グループにおける体験プログラムの実施に割り当てられた。最終日の7日には、2日間の体験プログラムの結果を個別に発表してもらった。多くの質疑応答があり、充実した体験プログラムであったことが伺えた。実施したアンケートでは、研究体験が有意義であったとの回答が多かった。また、大学と比較して、学生１人あたりの教員や研究設備が充実しており、研究環境として魅力を感じるという回答が多数であった。一方、専門的な知識などの事前準備が足りなかった、体験プログラムの内容が難しかった、などのコメントもあった。進路について、総研大を選択肢として考えている学生が複数いた。

本事業にご協力いただきました全ての先生方、関係者の皆様方にこの場を借りて厚く御礼申し上げる。





EVENT REPORT

総研大アジア冬の学校

教員報告

2014年度担当教員　総研大物理科学研究科機能分子科学専攻　准教授　柳井 毅

総研大アジア冬の学校が平成27年1月13日（火）から17日（金）にかけて、岡崎コンファレンスセンターにおいて開催されました。分子研および総研大 機能・構造分子科学専攻の研究･教育活動を、アジア諸国の大学生･大学院生および若手研究者の育成に広く供することを目的として平成16年度に始まり、今回で11回目になります。本年は、アジアコア事業との共同主催となり、例年より大規模な冬の学校となりました。アジア諸国から定員を超える応募があり、書類選考を経て15名を受け入れました。国籍別の内訳はタイ13名、中国1名、ベトナム1名でした。また、IMS国際インターンシッププログラムの留学生6名やアジアコア事業の参加者30名、日本国内からの参加者42名で、講師を除く参加者は合計93名でした。

今回は、所内の斉藤先生、椴山先生、大森先生、古賀先生、加藤先生に加え、アジアコア事業参加国（中国、台湾、韓国）の研究者14名を招待講師としてお迎えしました。テーマとして「Research and Its Challenges in Molecular Science: Fundamentals and State-of-the-Art」を掲げ、分子科学の基礎から最先端にわたる講義を行って頂きました（プログラムは、国際研究協力事業報告「アジアコア冬の学校」を参照）。また、参加者によるポスター発表、参加学生の内10名によるSelf-appeal Flash Talkも行われ、充実した4日間となりました。

今回は、アジアコアとの共催により多様な学術性と国際性をカバーしており、基礎から最新の研究成果まで学び知ることができたと思います。講師の先生方に深く感謝を申し上げます。なお、本学校を開催するにあたり、所内の担当委員の先生方、秘書、総研大生の多くの方々の協力を頂きました。

受賞者の声

Zhu Tong（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）

第87回日本生化学会大会若手優秀発表賞

この度、10月15-18日に国立京都国際会館で開催された第87回日本生化学会大会で、若手優秀発表賞を受賞しました。若手優秀発表賞（第84回大会から創設された鈴木紘一先生メモリアル賞）は、学生及び学位取得後5年未満の若手研究者による発表の中から、特に優れた発表に授与されます。

今回受賞対象となった私の発表のタイトルは「The ER folding sensor enzyme UDP-glucose:glycoprotein glucosyltransferase possesses three-tandem thioredoxin-like domains」で、細胞内の糖タンパク質の品質管理機構において鍵となるUDP-グルコース：糖タンパク質グルコース転移酵素（UGGT）の立体構造解析に関する研究についてです。UGGTは立体構造形成が不完全な糖タンパク質を認識し、フォールディングを助ける分子シャペロンが結合するための目印をつけます。しかし、その興味深い作動機構の詳細はまだ明らかにされていません。本研究では、UGGTの基質認識機構を解明する為に、X線結晶構造解析法を用いて、基質認識に関わる部位の立体構造を解き明かしました。この知見を基に、今後UGGTの作動機構を解明し、糖タンパク質品質管理に関する生命分子科学研究の推進に役立てたいと思います。

私は、子供の頃から生命科学に深い

興味があり、学部時代は薬学部を選びました。その後、修士課程では分子生物学を専攻し、総研大博士課程では加藤晃一先生の構造生物学を主体とする研究室の門を叩きました。ずっと違う分野を選択し、色々な経験をすることで、様々な立場から神秘的な生命現象の分子基盤を解読することが出来るようになってきました。それは幸運以外の何者でもないと思っています。これからも、自分が面白いと思う研究を楽しみたいです。

この度は、伝統ある日本生化学会で賞を頂き、光栄で大変うれしく思っています。この賞を頂けたのは、日頃研究を支えて頂いている加藤晃一教授、山口拓実助教、矢木真穂特任助教をはじめ研究室のメンバー、名市大・佐藤匡史准教授、矢木宏和講師ら共同研究者の皆様のおかげです。心から感謝を申し上げます。

右から２番目が筆者

伊東 貴宏（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）

錯体化学会第64回討論会でポスター賞及びCrystEngComm Poster Prize

2014年9月18日~20日の3日間にわたって開催された錯体化学会第64回討論会において、「ディスクリートなRh(II)二核錯体ユニットの集積化による配位不飽和サイト内在チャネルの構築と構造制御」という題目で発表を行い、ポスター賞及びCrystEngComm Poster Prizeを受賞いたしました。本研究は総研大入学当時から継続して行ってきたテーマであり、その成果が今回、受賞という形で認められたことを大変嬉しく思っております。また、私が分子研に来て初めて論文を投稿した雑誌がCrystEngComm誌ということもあり、本受賞には縁のようなものを感じております。

分子性の多孔性材料は、ゼオライトなどの無機材料には無いその構造の柔軟性から注目を集めている化合物群です。MOFやPCPといった配位高分子はその代表例ですが、配位結合によって無限構造を構築するこの手法は置換“活性”な錯体にしか応用できないという欠点があります。置換“不活性”な錯体には一般的に触媒活性の高いものが多く、それをユニットとして超分子構造を構築できれば、これまでにない反応場の構築が期待できます。今回の研究ではロジウムの二核錯体をユニットに用い、配位結合に頼らず分子間相互作用によって集積化させることで反応サイトを残したまま超分子構造を構築することに成功いたしました。今後は孔のサイズが異なる反応場の構築や、得られた反応場の有用性の評価を行っていきたいと考えております。

今回の受賞は偏に正岡重行准教授、近藤美欧助教をはじめとした研究室の皆様方のご支援のおかげと深く感謝しております。この受賞を励みに今後も研究に邁進していきたいと思います。

平成２６年度９月総合研究大学院大学修了学生及び学位論文名

専　攻	氏　名	博　士　論　文　名	付記する専攻分野	授与年月日
機能分子科学	Tran Nguyen Lan	Studies on molecular magnetic properties using *ab initio* quantum chemical methods	理　学	H26. 9.29
	久保　雅之	*pn*-Homojunction Organic Solar Cells	理　学（学位授与論文博士）	H26. 9.29

総合研究大学院大学平成２６年度（１０月入学）新入生紹介

専　攻	氏　名	所　属	研究テーマ
構造分子科学	白石　龍	光分子科学研究領域	基板上に整列した機能性分子における電子構造の精密解析
	TAO Shanshan	物質分子科学研究領域	Design and Functions of π-electronic Porous Polymers
	WANG Ping	物質分子科学研究領域	Design and Functions of Crystalline Porous Polymers
	ZHAI Lipeng	物質分子科学研究領域	Design and Functions of Porous Organic Polymers
	CHINAPANG Pondchanok	生命・錯体分子科学研究領域	Construction of photoreactive non-covalent metal-organic frameworks (MOF)

■分子科学フォーラム

回	開催日時	講演題目	講演者
第 103 回	平成 26 年 11 月 21 日	分子とつくる未来	山本 浩史（分子科学研究所 教授） 飯野 亮太（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）
第 104 回	平成 27 年 3 月 18 日	総力と本気で地震を克服する	福和 伸夫（名古屋大学減災連携研究センター長・教授）

■分子研コロキウム

回	開催日時	講演題目	講演者
第 862 回	平成 26 年 9 月 26 日	有機発光材料の新展開－高効率遅延蛍光材料の登場－ Development of novel organic light emitting materials-high efficiency delayed fluorescence-	安達千波矢　教授（九州大学大学院工学府応用化学部門 教授　最先端有機光エレクトロニクス研究センター　センター長）
第 863 回	平成 26 年 9 月 30 日	Electronic structure in highly excited optical lattices	Prof. Dieter Jaksch (Clarendon Laboratory, Oxford Univ.)
第 864 回	平成 26 年 11 月 17 日	Single Molecule Spectroscopy using STM	川合眞紀 教授（東京大学大学院新領域創成科学研究科・教授、理化学研究所・理事）
第 865 回	平成 27 年 10 月 16 日	エレクトライドの物質科学と応用展開	細野 秀雄　教授 (東京工業大学　フロンティア研究機構＆応用セラミックス研究所)

■人事異動（平成26年6月2日～平成26年11月1日）

異動年月日	氏名	区分	異動後の所属・職名	現（旧）の所属・職名	備考
26. 6. 9	KOOMBIL KUMMAYA, Praneeth V.	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		
26. 6.10	YANG, Tao	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		
26. 6.16	郡司康弘	採用	極端紫外光研究施設光源加速器開発研究部門　技術支援員		
26. 6.16	長尾春代	採用	技術課（機器利用班）　技術支援員		
26. 6.24	DANG, Jingshuang	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		
26. 6.30	CHEN, Xiong	退職		物質分子科学研究領域分子機能研究部門　研究員	
26. 7. 1	内山功一	配置換	技術課学術支援班　学術支援二係　主任	技術課電子機器開発技術班　電子機器開発技術係　主任	
26. 7. 1	中野路子	配置換	技術課機器開発技術班　機器開発技術二係　係員	技術課機器利用技術班　機器利用技術二係　係員	
26. 7. 1	ZHENG, Lihe	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		
26. 7. 1	石井健太郎	採用	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　研究員		
26. 7.15	ZHANG, Ying	辞職		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　特任研究員	
26. 7.31	和田照美	辞職		技術課（装置開発室）　技術支援員	
26. 7.31	岡本泰典	退職	バーゼル大学　博士研究員	岡崎統合バイオサイエンスセンターバイオセンシング研究領域　研究員	
26. 8.31	大島康裕	辞職	東京工業大学大学院理工学研究科教授	光分子科学研究領域光分子科学第一研究部門　教授	
26. 8.31	大島康裕	併任終了	（光分子科学研究領域光分子科学第一研究部門　教授）	機器センター長	
26. 9. 1	横山利彦	併任	機器センター長	（物質分子科学研究領域電子構造研究部門　教授）	
26. 9. 1	大島康裕	兼任委嘱	光分子科学研究領域光分子科学第一研究部門　教授 (兼任）	（東京工業大学大学院理工学研究科教授）	
26. 9.30	櫻井英博	兼任終了	（大阪大学大学院工学研究科　教授）	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（兼任）	
26. 9.30	藤原邦代	辞職		生命・錯体分子科学研究領域生体分子情報研究部門　技術支援員	

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
26. 9.30	DANG,, Jingshuang	退　職		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	
26.10. 1	内　山　功　一	昇　任	技術課学術支援班　学術支援二係長	技術課学術支援班　学術支援二係主任	
26.10. 1	BUSSOLOTTI, Fabio	採　用	光分子科学研究領域光分子科学第三研究部門　特任研究員	千葉大学　ポスドク	
26.10. 1	RUIZ BARRAGAN, Sergio	採　用	理論・計算分子科学研究領域（日本原子力研究開発機構システム計算科学センター勤務）特任研究員	大学院生	
26.10. 1	後　藤　振一郎	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　技術支援員		
26.10. 1	SHENG, Li	採　用	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　研究員		
26.11. 1	住　田　明日香	採　用	生命・錯体分子科学研究領域生体分子情報研究部門　技術支援員		
26.10.31	南　野　　智	辞　職	技術課　技術支援員	技術課学術支援班　学術支援一係係員	
26.11. 1	南　野　　智	採　用	技術課　技術支援員		

編 集 後 記

今号の記事を眺めながら、広報活動の大切さについて思い直しています。

独自性や完成度の高い研究（者）には、研究者コミュニティやメディアを通じて自然と注目が集まります。最近は、研究活動を継続・拡充するためにも、研究者自らプレス発表や記者会見を行い、世間に向けて情報発信する必要があります。

STAP細胞に関する会見映像はまだ記憶に新しいところですが、「広く世に知らしめる」という行為そのものが諸刃の剣であることを示しています。新規性をアピールしつつも、研究者がごく普通に持ち合わせている倫理観をもとに適切な節度をもって情報発信することが大切だと思います。

大島教授の転出にともない後任の広報担当となりましたが、なかなか一筋縄では参りません。自然科学研究機構として「研究力強化に関する基本方針」が定められ、広報活動についても、機構と各基盤機関の協力体制や立場の違いについて、日々、議論が繰り返されています。今号もそうですが、分子研レターズには研究者間の信頼に基づいた研究や論評など高品質の記事が多く見受けられますので、この資産をうまく活用した広報活動を分子研の一つの特徴としていければと思っております。

編集担当　秋山修志

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
https://www.ims.ac.jp/

IMS Letters
分子研と研究者をつなぐ　VOL. 71
分子研レターズ

発行日　平成27年3月（年2回発行）
発行　大学共同利用機関法人　自然科学研究機構
分子科学研究所
分子研レターズ編集委員会
〒444-8585
愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38

編集　小杉信博（委員長）
秋山修志（編集担当）
大迫隆男
加藤晃一
斉藤真司
繁政英治
江東林
西村勝之
平等拓範
古谷祐詞
柳井毅
山本浩史
原田美幸（以下広報室）
鈴木さとみ
中村理枝

デザイン　原田美幸
印刷　株式会社コームラ

本誌記載記事の無断転載を禁じます

分子研レターズ VOL. 71
発行月／2015年3月　編集発行／分子研レターズ71号編集委員会
〒444-8585　愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地　E-mail：letters@ims.ac.jp　URL：www.ims.ac.jp
分子科学研究所