

# 分子研レターズ

●巻頭言

## 物性, 材料, 分子研

常行 真司 [東京大学大学院理学系研究科 教授]

●レターズ

## 私が分子研で研究を始めた頃

松本 吉泰 [京都大学大学院理学研究科 教授]

●分子科学の最先端

## 膜タンパク質分子からの手紙を 赤外分光計測で読み解く

吉谷 祐詞 [生命・錯体分子科学研究領域 准教授]

共同利用研究ハイライト

実験と理論の共同研究による桂皮酸メチル誘導体の光誘起異性化の解明

江幡 孝之 [広島大学大学院理学研究科 教授]

準安定多価分子イオンの生成機構——OCSの場合——

副島 浩一 [新潟大学理学部 教授]

幾何学的フラストレーションを有する磁性体のESRによる研究

太田 仁 [神戸大学分子フォトサイエンスセンター 教授]

櫻井 敬博 [神戸大学研究基盤センター 助教]

## 巻頭言

## 01 物性, 材料, 分子研

- 常行 真司 [東京大学大学院理学系研究科 教授]

## レターズ

## 02 私が分子研で研究を始めた頃

- 松本 吉泰 [京都大学大学院理学研究科 教授]

## 分子科学の最先端

05 膜タンパク質分子からの手紙を  
赤外分光計測で読み解く

- 古谷 祐詞 [生命・錯体分子科学研究領域 准教授]

## 訃報

10 花崎 一郎 名誉教授ご逝去

12 青柳 睦 教授ご逝去

## IMSニュース

14 所長招聘研究会「分子導体研究の展開(昔、今、これから)」

15 第74回岡崎コンファレンス“Frontier of X-ray Absorption Spectroscopy and Molecular Science”

16 受賞者の声

20 国際研究協力事業報告

## IMSカフェ

26 分子研出身者の今——米満 賢治、和田 亨、新倉 弘倫

31 分子研出身者の今 受賞報告——細野秀雄、森健彦

33 分子研を去るにあたり——水瀬 賢太、許斐 太郎、嘉治 寿彦

35 外国人研究者の紹介

36 新人自己紹介

40 コラム 自然科学研究機構憲章と第3期中期計画

## 共同利用・共同研究

42 共同利用研究ハイライト

## 実験と理論の共同研究による桂皮酸メチル誘導体の光誘起異性化の解明

江幡 孝之 [広島大学大学院理学研究科 教授]

## 準安定多価分子イオンの生成機構——OCSの場合——

副島 浩一 [新潟大学理学部 教授]

## 幾何学的フラストレーションを有する磁性体のESRによる研究

太田 仁 [神戸大学分子フォトサイエンスセンター 教授] 櫻井 敬博 [神戸大学研究基盤センター 助教]

49 新装置紹介

50 施設だより

51 共同利用・共同研究に関わる各種お知らせ

## 52 分子研技術課

帰郷 中村 永研 [光技術班 班長]

## 大学院教育

53 総研大ニュース

54 コラム

56 イベントレポート

57 受賞者の声

58 修了学生及び学位論文名

59 各種一覧

# 物性，材料，分子研

常行 真司

東京大学大学院理学系研究科 教授

分子研には昔から何かと縁が深い。私の大学院での恩師も、お世話になった研究室助手の先生も分子研OBだったし、学生時代に分子軌道法の手ほどきをして下さった師匠は、分子研の（実験系の）現役教授である。以来、分子研の研究会には、それこそ数えきれないほど出席させていただいた。

とくに足しげく岡崎に通うようになったのは、スーパーコンピュータ「京」の開発が始まってからである。「京」のアプリ開発を行う文科省プロジェクト「グランドチャレンジアプリケーションの開発」の中で、分子研を代表機関とする「次世代ナノ統合拠点」（平成18~23年）がナノサイエンス分野のアプリ開発を担当した。私はこの大所帯の拠点に参加して、たくさんの分子科学研究者と知り合い、それに触発されて新しい研究を開始することができた。

平成22年、「京」による成果創出とハイパフォーマンスコンピューティングの分野振興を目指す「HPCI戦略プログラム」が始まってからは、物性研（代表）、分子研、東北大金研を中心に、「計算物質科学イニシアティブ（CMSI）」というネットワーク型組織を作って活動してきた。CMSIは参加研究者約170名（学生除く）、コミュニティ会員約1,100名を擁し、「京」を使った研究推進に加え、研究会、講習会、若手合宿など年間70件以上のイベントを主催・共催し、計算科学技術に関する配信講義等も行っている。また計算物質科学

のポータルサイト MateriApps を立ち上げ、アカデミアで開発されたフリーウェアを中心に様々なアプリを紹介しており、ユーザが増加中である（詳しくは「CMSI」、「MateriApps」でwebを検索）。

CMSIは物性、分子、材料という近くて遠い三分野の寄り合い所帯なので、さぞ運営が大変でしょうと言われることが多い。実際、組織立ち上げ当時の企画立案・資源配分に関する会議では、司会進行をしても肌を刺すような張り詰めた空気を感じられ、決して定時に終わらない会議が終了すると新たな問題山積で、脱力感に襲われたものである。今でも緊張感がなくなったわけではないが、会議参加者が言いたいことを言い合っただけで前向きな結論が出せるようになったのだから、当初の苦労は無駄ではなかったように思う。もっと良かったのは、CMSIに参加する若手研究者が、分野の壁を越えて気軽に会話するようになったことだ。次の世代の計算物質科学が、そういった会話から生まれることを大いに期待したい。

HPCI戦略プログラムは今年度末で終了する。CMSIが行ってきた活動の多くは、ポスト「京」プロジェクトや、金研を代表機関として今年度採択された「科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業」など、形を変えながら継続されるだろう。しかし結局のところ、分野振興活動を支えるのは参加研究者のやる気、かけられる時間と手間、少額であれ使いやすい運用経費、事務の



方々の協力、機関の執行部や身近な研究者の理解と協力といった、有形無形の「自主財源」であり、コミュニティのためにそれが提供できる機関は限られていると思う。分子研には、分子科学分野の拠点としてのみならず、分子、物性、材料、そして生命科学をつなぐ計算科学のハブ拠点として、引き続きご支援をお願いする次第である。

つねゆき しんじ

1986年東京大学大学院理学系研究科修士課程修了。東京大学理学部物理学科・助手、物性研究所・助教授を経て、2002年東京大学大学院理学系研究科助教授、2007年同教授（物性研究所・教授を兼務）。HPCI戦略プログラム分野2「新物質・エネルギー創成」戦略機関統括責任者、物性研究所・計算物質科学研究センター長、ポスト「京」重点課題（7）課題責任者。2001年日本IBM科学賞。

**松本 吉泰** 京都大学大学院理学研究科 教授

## 私が分子研で研究を始めた頃



まつもと・よしやす

1975年 京都大学工学部卒業  
 1977年 京都大学大学院工学研究科修士課程修了  
 1981年 東京大学大学院工学系研究科博士課程修了（工学博士）  
 1981年 米国ピッツバーグ大学博士研究員  
 1985年 理化学研究所研究員  
 1990年 分子科学研究所助教授  
 1997年 総合研究大学院大学教授  
 2003年 分子科学研究所教授  
 2007年 京都大学大学院理学研究科教授

私が1990年に分子科学研究所に助教授として着任してからもう25年余りになる。着任の頃をふりかえり、私が分子研で研究を始めて以来かかわっている表面科学のことについて少し述べたい。分子研に着任した頃には、まだ第一世代の教授や助教授の方々がたくさんおられ、私のような第二世代の研究者との世代交代の最中だった。私は、米国では超音速ジェット中の有機分子における分子内電子緩和を分光学的に研究し、前任地であった理研では、同じく超音速ジェット中のファンデルワールス錯体の高分解能赤外分光の研究を行っていた。どちらも気相中に孤立した分子や分子錯体の分光研究であり、分子研における人事選考時のインタビューでも、それをもとにした内容の話をさせてもらった。

### 研究分野の選択

今でもそうではないかと想像するが、当時の分子研では、着任してから

3年ぐらいの間に新しい研究の形をつくっていけばよいという雰囲気があった。与えられた実験室は、初めて研究室を立ち上げる若手の研究者には十分すぎるほどのスペースがあったし、前任者の装置の残骸が少しあったものの、基本的にはがらんとした何もない空間であった。この何もない、そして周りからの何のバイアスもないというのは得難いもので、自分に真摯に向きあい、自分が本当に何をやりたいのかを自問する最高の環境である。通常は、着任前の経験を活かしてそれまでの研究分野を拡張、あるいは深掘りしていくのが順当なやり方だろうが、今後のために研究分野を変更するのならこれ程最適なチャンスはないと私には思えた。そこで、約半年ばかりは毎日、この先どのような研究をしていくべきかを考える日々が続いた。着任前にやっていた気相分子の分光とダイナミクスについて再考し、この分野をさらに追求していくべきか、あるいはもっと違う

ことに着手すべきか、といろいろと考えをめぐらせるのは楽しい時間であった。しかし、それと同時に、まだ自分には見えてこないものに対して何か手応えのある、あるいは自分で納得できるものを探し出すのは苦しい作業でもあった。

この自問自答の中で、私は米国でやっていた孤立分子の電子緩和の研究を下敷にして、孤立系としての分子の電子緩和ではなく、分子が周りのものと相互作用している場合での電子状態とそのダイナミクスを真面目に考えてみようという気になった。もっとも、ファンデルワールス錯体をはじめとした超音速ジェット中のさまざまな錯体における分光と電子状態の研究は国内外で錚々たる分光学者がすでに着手していた。そこで、発想を逆転させて、バルキーな物質と相互作用している分子に着目した。溶液中の分子もこの範疇にあるが、これはお隣の吉原経太郎先生の守備範囲である。そこで、固体表面に吸

着した分子にたどりついた。空間に局在化した電子系である分子と非局在化した固体との相互作用は分子間のものとは大きく異なり、このような系の電子状態、その緩和過程、また光化学がどうなるかは、その当時まだ開拓されていない領域であった。

私が着任したときの所長は井口洋夫先生であった。新任者としての予算申請も控えていたある日、所長室にて私の新しい研究構想を話した。井口先生は静かに聴いておられ、できるだけ支援しようと言ってくくださった。ただ、やはり表面科学にはまったく実績のない私のことが心配だったのだろう。当時、北大から分子研に来ておられた松島龍夫先生など数名の先生方の前で研究計画を披露し、意見をいただく会を井口先生が手配された。超高真空装置とレーザーとを組み合わせるといふ私の提案は多額の初期投資が必要であり、標準的な新任助教授の予算規模を多分かなり越えたものだったのだろう。研究の方向性がよいかどうかについての専門家の意見を聴きたいということであった。所長としては当然のことである。

### 私の表面科学事始め

どうにか最低限の超高真空装置と光源を揃えて実験を開始したが、まったくの素人の私が表面科学の研究を始めるといふことに対しては、いろんな反響があった。当然、危ぶむ声もあったが、当時物性研で表面科学のグループを率いておられた村田好正先生や田中虔一先生が共に私の取り組みを歓迎して勇気づけてくださったのはたいへん心強かった。装置や超高真空技術について、いろいろとこれらの先生方からアドバイスをいただき、単結晶の研磨

方法を松島先生に直接指導していただくなどして、やっと私の表面科学の研究が始まった。やってみると、私にとってはすべてが新しいし、まったく知らないことを学ぶというのは実に楽しいことだった。何よりも面白かったのは、実験がたいへん私達の予測を裏切るものだったことだ。気相の実験をやっていた頃には大まかな結果はある程度予想できたし、まったくその通りとはいかないまでもほぼ思っていたようなことが起きるといふことが多かった。しかし、表面科学の実験では思いもよらないことがよく起きた。今でもその典型的な一例として学生に話すのは、白金や銅表面に物理吸着したメタンの光解離の実験である。真空紫外にしか吸収がないメタンが、金属表面に弱く吸着するだけなので、これを光解離するにはやはり真空紫外光が必要だと思っていたら、紫外光照射で簡単にメチル基と水素原子に解離することがわかったので、これにはたいへん驚いた。この発見は偶然で、いわゆるセレンディピティーということになるのだが、表面での研究ではこの偶然に遭遇する機会が多い気がする。これは、私達がおさえているパラメータの数が気相に比べて少なく、また不完全であるため予測を誤ってしまうのだろう。もっとも、予想通りのことばかりを確かめていても何も面白いことはないし、新たな知見を得ることはできないので、このことはたいへん歓迎すべきことだった。

### 分子研以降の研究

分子研で始めた表面科学の研究は、現在、超短パルスレーザーとの組み合わせにより、金属表面での電子-格子相互作用にもとづく光誘起超高速表面

過程、和周波発生分光による金属表面での氷薄膜におけるプロトン配向の研究などへと発展している。また、研究対象は金属表面から光触媒作用を示す金属酸化物表面、単結晶表面からナノ粒子表面に、また超高真空条件下から水蒸気圧存在下、そして水中での実験へと観測系の環境も広がっている。さらに、表面・界面のみならず、金属酸化物粒子における電荷移動、顕微分光による電荷マッピング、有機半導体・無機絶縁体界面における正孔の電子状態、有機半導体内での励起ダイナミクスなどが、京都大学に異動してからの新しい研究の柱として加わった。

### 表面・界面研究への期待

前述のように予期せぬことがよく起きる表面・界面であるが、分子と固体表面とが織り成す世界は多彩であり、基礎科学と実用面に強いつながりがあるのも特徴である。表面・界面とはエネルギー、電荷、物質の出入口であり、ここでの電子状態がこれらの移動過程を制御している。また、不均一触媒反応に見られるように、多くの有用な化学反応がここで進行する。したがって、分子と固体が出会う場所としてたいへん面白い物理と化学がある研究対象である。

表面科学の目標の一つには不均一触媒反応の分子論的理解がある。しかし、この目標の達成にはまだまだ長い道程がある。むしろ表面科学が分野として成熟していくと共に、触媒研究との間の距離がますます開いた感もある。したがって、この二つの分野のギャップを埋めて新たな研究分野を開拓する必要があり、実際に超高真空と単結晶を用いた表面科学的手法からより実用

触媒に近い条件下、またナノ粒子を用いたその場観察へと研究手法は大きくシフトしつつある。この方向に表面科学、および触媒反応研究の将来があるし、困難ではあるが大きく進展する機運がある分野と思う。

### 分子研への期待

分子研に着任した際にそのまま気相の分光研究を行なっていれば、現在、ずいぶん違った状況にいたであろう。人生は一度きりで比較はできないため、どちらがよかったかはもちろんわからない。しかし、あのときの選択が少なくとも間違っていたとは思えない。表面というやっかいな研究対象はやはり複雑で、ともすると得られた実験事実は何らかの真実を伝えているのだが、再現できない結果に悩まされることも

ある。しかし、ハーバーの行なったアンモニア合成のための触媒研究、ラングミュアの行なった白熱電球の長寿命化の過程で生まれた固体表面での吸着脱離に関する研究からもわかるように、大きな科学の芽は実用的な問題の中に含まれている。現在でも、太陽光発電、燃料電池、人工光合成など、表面・界面が主たる役割を果す現象が山のようにある。実験家としての私は、やはり実際に起きている有用な自然現象の中から科学の新たな芽を切り取り育てるということに魅力を感じる。

私が分子研に着任してから表面科学を新たな研究分野として選択ができたのも、百パーセントの研究の自由を与え、それを支援できる研究環境が分子研にあったからこそである。分子研が世界をリードする研究成果を挙げ、ま

た、多くの研究者を大学に輩出したことは周知の事実である。その大きな原因の一つにはこのような研究環境を挙げることができる。したがって、今後もこのような研究環境が維持され、さらに多くの若手研究者が巣立っていける研究所であることを期待したい。

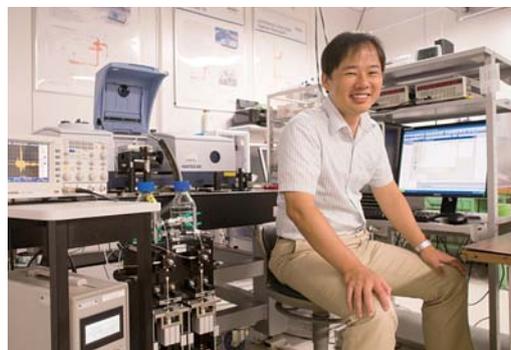


# 膜タンパク質分子からの手紙を赤外分光計測で読み解く

**古谷 祐詞** 生命・錯体分子科学研究領域 准教授

ふるたに・ゆうじ

1999年京都大学理学部卒、2001年同大学大学院理学研究科博士前期課程修了、2004年同博士後期課程修了・博士（理学）、2004年日本学術振興会特別研究員、2006年名古屋工業大学助手・助教を経て、2009年3月より現職、2011年10月～2015年3月までJST さきがけ研究員「光エネルギーと物質変換」領域



## はじめに

膜タンパク質は、脂質二重層からなる細胞膜に存在し、細胞内外の物質や情報のやり取りを行っている（図1）。イオンポンプと呼ばれる膜タンパク質のはたらきにより、細胞内外でのイオン濃度差が形成される。その濃度差による電気化学ポテンシャルを利用して、ATP合成酵素は生物のエネルギー通貨と呼ばれるアデノシン三リン酸（ATP）を合成する。また、イオンチャネルは過渡的にナトリウムイオンやカリウムイオンを透過させ、生体電気信号を発生する。その他にも外部からの刺激を受容し、細胞内に情報を伝達する受容体などもある。このように膜タンパク質は様々な生命活動を実現する基本素子としてはたらいっている。

タンパク質は20種類のアミノ酸がベ

プチド結合により重合した高分子の一種であるが、特定の立体構造へと折り畳まれることにより、活性を持った状態になることが一般的である。タンパク質の立体構造を原子レベルで解明することは、その機能発現の分子機構を理解するのに重要である。タンパク質の立体構造解析では、X線結晶構造解析やNMRを用いた手法が広く使われているが、最近では電子顕微鏡による単粒子解析でも原子レベルでの構造解析がなされるなど、最先端の技術も開発されている。さらに、タンパク質の機能発現の分子機構を深く理解するためには、タンパク質が動作する過程での構造変化など、動的な側面に注目した研究が重要である。

赤外分光法は分子の振動準位エネルギー

に相当する赤外線を用いる分光法の一種である。その手法自体で原子レベルでの構造解析を行うことは不可能であるが、様々な刺激の前後での差スペクトルを計測することで、タンパク質内部に存在する特定のアミノ酸残基1個や水分子1個の変化を明らかにすることが可能である（図2）<sup>[1-5]</sup>。特に、タンパク質内部に埋もれた化学結合や水素結合のわずかな変化を分子振動の変化として鋭敏に捉えることが可能なため、上手く活用できれば、タンパク質の機能発現に伴う微細ではあるが重要な構造変化を見いだすことができる。

## 微生物型ロドプシンの時間分解赤外分光計測による光誘起構造変化解析

最近、動物の行動を光で制御する光遺伝学（オプトジェネティクス）と呼ばれる研究手法に注目があつまっている<sup>[2,3]</sup>。光開閉イオンチャネルとして機能するチャネルロドプシンにより、神経細胞を興奮させることで、動物の行動が制御できることが示された。また、ハロロドプシンやバクテリオロドプシンでは、逆に鎮静させる作用がある。このような生理作用を実現するチャ

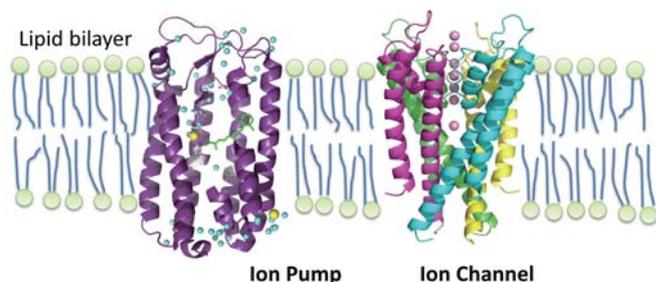


図1 膜タンパク質の結晶構造の一例（左：ハロロドプシン、右：カリウムチャネルKcsA）

ネルロドプシンやハロロドプシンのイオン透過やイオン輸送の分子機構にも注目が集まっている。

ハロロドプシンは、微生物型ロドプシンの一種であり、光駆動型塩化物イオンポンプとしてはたらく。X線結晶構造解析により、タンパク質内部に水分子が存在することが示されていたが、その役割はよく分かっていなかった。水分子は水素結合強度の違いに応じてO-H基の伸縮振動が変化する(図2)。光誘起の赤外差スペクトルを時分割計測し、 $3600\text{ cm}^{-1}$ 以上の高波数領域において、水のO-H伸縮振動の各中間体形成時における変化を捉えた。そのO-H伸縮振動の振動数や強度の変化から、塩化物イオンの取込みと放出の際に、水素結合の相手がいないO-H基を持つ水分子が増えることを明らかにした(図3)<sup>[6]</sup>。負電荷を持ったイオンがタンパク質内部で安定化される際に水分子が積極的に関与していることを示唆する結果である。

チャンネルロドプシンは、光開閉カチオンチャンネルとしてはたらく。チャンネルロドプシン1および2(以降、ChR1およびChR2)と2種類存在するが、オプトジェネティクスではChR2がよく使われている。X線結晶構造解析により、ChR1とChR2のキメラタンパク質の構造が解かれ、ChR2における機能改変変異体の設計などに活用されてきた。我々は、このキメラタンパク質の光誘起構造変化を詳細に解析することで、ChR2とキメラタンパク質とは、構造変化が大きく異なっていることを明らかにした<sup>[7]</sup>。また、イオン選択やイオン透過に重要と考えられているGlu129(ChR2ではGlu90)のプロトン化状態についても、ChR2との差異を明らかにした。ChR2の立体構造は未解明であるが、我々の結果はキメ

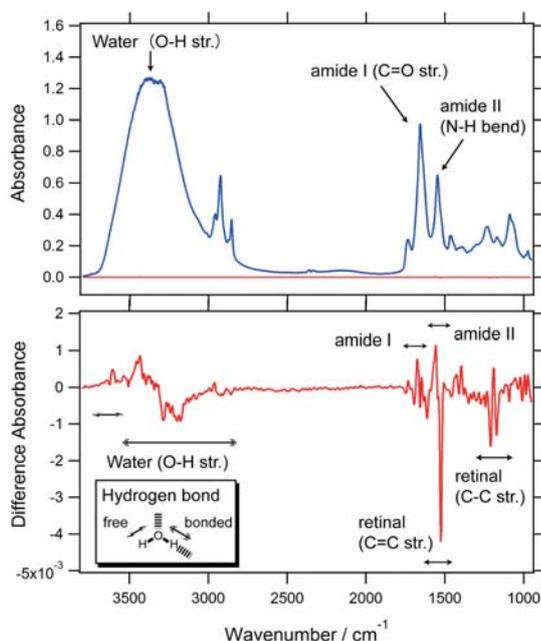


図2 膜タンパク質の赤外吸収スペクトル(青)と光誘起差スペクトル(赤)

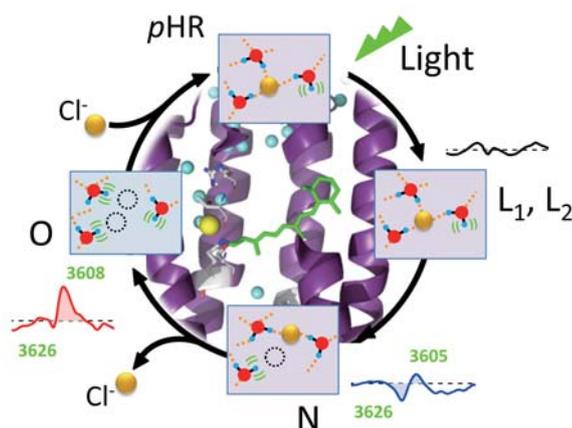


図3 ハロロドプシンの光反応中に変化する水分子

ラタンパク質のものとは異なっていることを示唆している。

チャンネルロドプシンやハロロドプシン以外にも様々な微生物型ロドプシンが見つかってきている。一般的に微生物型ロドプシンは7回膜貫通型ヘリックスからなり、通常、all-trans型レチナールを発色団として結合する。trans-cis異性化によって引き起こされるタンパク質の構造変化によって、イオンポンプ、イオンチャンネル、光センサーと様々な機能を発現することが知られている。須藤雄気博士(岡山大学・教授)のグ

ループは11-cis型レチナールを結合することが可能なMiddle rhodopsin (MR)を発見した。脂質膜再構成試料ではall-trans型レチナールを結合したMRが大勢を占めるが、それについて解析を行った。その結果、これまでに見られたことのないβシートに由来すると思われるamideバンドの変化を観測することに成功した<sup>[8]</sup>。all-transレチナールが13-cisへと光異性化した後、細胞外側領域に存在すると推定されるβシートにまで構造変化が伝播している可能性を示唆する結果である。残念ながらMR

の機能は未知であるが、このような特異な構造変化は11-*cis*型レチナルを許容するMRの特異な分子特性を反映したものではないかと考えている。

## カリウムチャンネルKcsAのイオン選択フィルターの赤外分光計測

イオンチャンネルは、生体電気信号の源であり、様々な細胞とりわけ神経細胞が機能するために重要な役割を果たす膜タンパク質である。カリウムチャンネルはカリウムイオン ( $K^+$ ) を選択的に透過するが、それはイオン選択フィルターと呼ばれる領域において、主鎖のカルボニル基が  $K^+$  を配位するのに適した構造を構築しているためと考えられている。そこで、 $K^+$  もしくはナトリウムイオン ( $Na^+$ ) を結合した際の微細な構造の違いを明らかにするために、全反射赤外分光装置を用いて、イオン交換誘起の赤外差分分光計測を行った。その結果、イオン選択フィルター近傍の主鎖に由来する *amide I* バンドの計測に成功した (図4)。  $K^+$  を配位した方が *amide I* バンドの振動数が高く、 $K^+$  を8個のカルボニル基で配位した構造であると考えると矛盾しないことが分かった。  $K^+$  濃度を変化させることで、

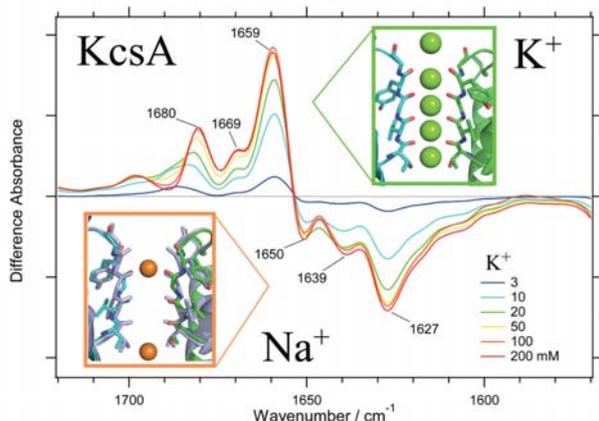


図4 カリウムチャンネルKcsAのカリウムイオンとナトリウムイオンとの相互作用に伴う赤外吸収スペクトル変化

$K^+$  の親和性の指標となる解離定数は約10 mM程度であることもわかった。また、低  $K^+$  濃度ではフィルター構造に変化が生じていることも見いだした<sup>[9]</sup>。さらに各種アルカリ金属イオンとの赤外差スペクトルを計測することにより、KcsAはリチウムイオン ( $Li^+$ ) と  $Na^+$  とで似たような相互作用をし、 $K^+$ 、ルビジウムイオン ( $Rb^+$ )、セシウムイオン ( $Cs^+$ ) とも似たような相互作用をするが、両グループ間では異なる相互作用であることを明らかにした<sup>[10]</sup>。現在、さらに研究を進展させるために、ほ乳動物由来のカリウムチャンネルにも本手法を適用し、カリウムイオン選択機構について研究を進めている。

## タンパク質やイオノフォア有機分子の表面増強赤外分光計測

数ナノメートル程度の金薄膜を全反射赤外分光用のプリズム表面に作製することで、金薄膜に吸着した分子種の赤外吸収強度を増強することが可能である。このような表面増強赤外分光計測を膜タンパク質に適用するため、金

薄膜の厚みの違いによる赤外吸収への影響を調べた。対象にはハロロドプシン試料を選び、タンパク質骨格の吸収を反映する *amide I* および *amide II* を観測した。その結果、厚みが3~7 nm程度では通常の吸収スペクトルが観測され、9-11 nmではスペクトルに歪みが現れ、~20 nmにおいては正負が逆転したスペクトルを観測した。偏光子を用いた計測により、スペクトル形状の変化はs偏光による影響であることを明らかにした<sup>[11]</sup>。

膜タンパク質のカリウムチャンネルのモデル系として、本手法を  $K^+$  を選択的に吸着するイオノフォア有機分子であるクラウンエーテルに適用し、各種アルカリ金属イオンを含む緩衝液と含まない緩衝液との赤外吸収差スペクトルを計測した (図5)。その結果、 $K^+$ 、 $Rb^+$ 、 $Cs^+$  では似たような差スペクトルが得られたが、 $Li^+$ 、 $Na^+$  では異なる形状の差スペクトルが得られ、イオン吸着に伴う構造変化に差異があることが示唆された。本研究は、広島大学の井口佳哉博士 (広島大学・准教授) が主

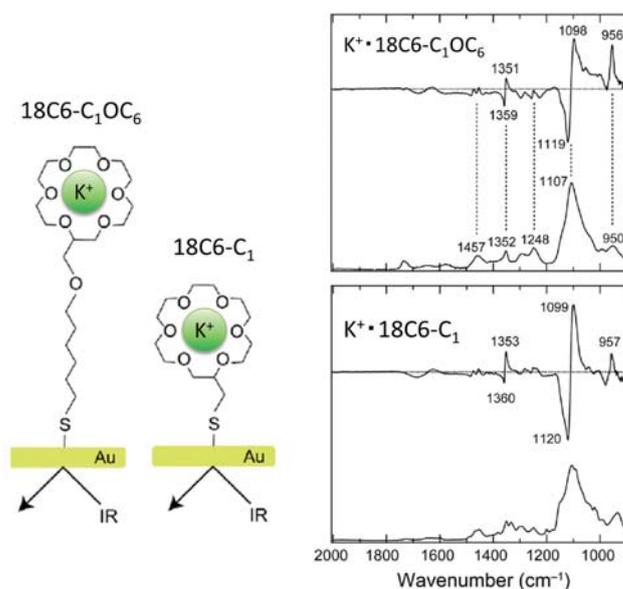


図5 クラウンエーテル (左) とカリウムイオンとの相互作用に伴う赤外吸収スペクトル変化 (右)

導する共同研究として行われた<sup>[12,13]</sup>。

### 急速溶液交換装置による膜タンパク質の時間分解赤外分光計測系の開発

膜タンパク質の機能発現機構を解明するためには、生体分子やイオンの結合・解離に伴う構造変化を時分割で解析する手法が必要である。

全反射赤外分光装置と圧縮空気作動型ポンプを組み合わせ、膜タンパク質試料を浸している緩衝液を急速に置換する手法を開発した。塩化物イオンや硝酸イオンを結合するハロロドプシンに対して本手法を適用し、そのイオン結合に伴う赤外吸収スペクトル変化の時分割計測に成功した<sup>[14, 15]</sup>。ステップスキャン法を用いることで、2.5 msでの時分割計測を行い、緩衝液交換が25 ms程度で終了していることを硝酸イオンのNO伸縮振動より確認した(図6)。さらに、ハロロドプシンのイオン取込み反応をレチナルのC=C伸縮振動により追跡した。

また、藤貴夫准教授のグループが開発したチャープパルス上方変換による全反射赤外分光装置と組み合わせた実験も行った。全反射プリズム上の水とアセトンが置き換わる様子を1ミリ秒の時間分解能で計測することに成功した。その結果、溶液交換が約10ミリ秒で完結していることを確認した<sup>[16]</sup>。溶液交換速度の違いは流路の形状や全反射プリズムのサイズなどに依存するが、概ね10ミリ秒程度が本手法での時間分解能の下限であると思われる。

このように本手法は、表面積の小さい全反射プリズムを用いた全反射赤外分光法と組み合わせることで、ごく少量(数μg程度)の膜タンパク質試料でのイオンや基質との相互作用に関する時間分解計測を可能にする手法である。今後は、様々なイオンチャンネル、トラ

ンスポーター、イオンポンプ、受容体等に適用されることを期待している。

### 今後の展望

赤外分光法やラマン分光法などで得られる振動スペクトルは、「分子からの手紙」とも呼ばれている<sup>[17]</sup>。膜タンパク質のような巨大分子においても、様々な刺激の前後での差スペクトルを計測することで、特定のアミノ酸残基や水分子の構造情報や、その時間変化に関する情報を得ることが可能である。そのため、このような赤外差スペクトルは暗号化された断片的な手紙とも言える。膜タンパク質のような巨大分子からの手紙を読み解く作業は、生体分子系の赤外分光研究の難しさでもあり、醍醐味でもある。今後も赤外分光法はタンパク質の分子機構研究において、重要な役割を果たしていくものと考えている。現在、膜タンパク質に掛かる膜電位の効果を明らかにするため、新

規計測系の構築を含め、研究を進めているところである。将来的には、膜タンパク質がより生理的環境に近い状況下でどのように動作するのかを明らかにしたいと考えている。

本稿で紹介した研究では、共同研究者の方々の他に、古谷グループのメンバー(木村哲就博士、塚本寿夫博士、稲熊あすみ博士、藤原邦代博士、Hao Guo博士)がそれぞれ中心的な役割を果たしました。また、科学研究費助成事業(課題番号:26640047, 26708002, 24650203, 22770159, 22018030, 22247024)、さががけ研究(「光エネルギーと物質変換」領域)、森野基金等の支援を受けました。ここに感謝致します。

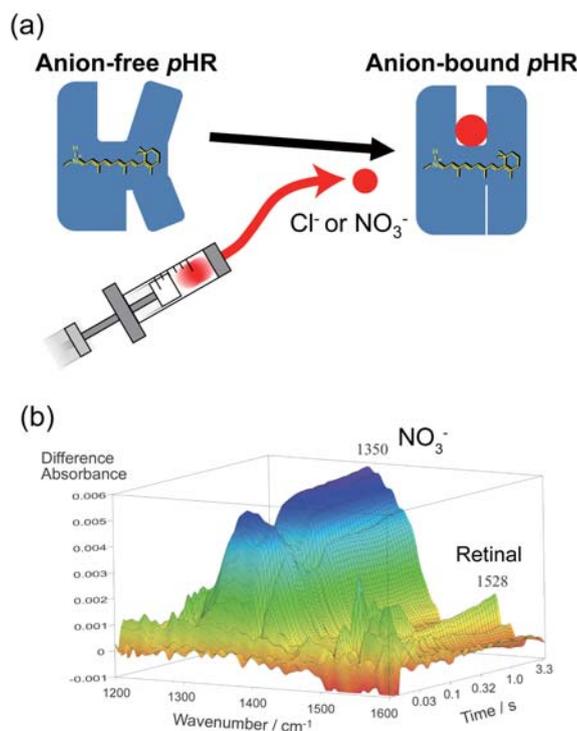


図6 急速溶液交換法によるハロロドプシンのイオン結合に伴う赤外吸収スペクトル変化

## 参考文献

- [1] 古谷祐詞「赤外分光法による膜タンパク質の分子機構研究」, *Molecular Science* 8, A0067, 2014
- [2] 古谷祐詞「微生物型ロドプシンの光誘起イオン輸送メカニズムの解明」, オプトジェネティクス－光工学と遺伝学による行動制御技術の最前線－ (NTS), 69-78, 2013
- [3] Y. Furutani, Chapter 5 “Molecular Mechanisms for Ion Transportation of Microbial Rhodopsins Studied by Light-Induced Difference FTIR Spectroscopy”, *Optogenetics -Light-Sensing Proteins and Their Applications-* (Eds.: H. Yawo, H. Kandori, A. Koizumi), Springer, 2015
- [4] Y. Furutani and H. Kandori, “Hydrogen-Bonding Changes of Internal Water Molecules upon the Actions of Microbial Rhodopsins Studied by FTIR Spectroscopy”, *Biochim. Biophys. Acta* 1837 (5), 598-605, 2014
- [5] H. Kandori, Y. Furutani and T. Murata, “Infrared Spectroscopic Studies on the V-ATPase”, *Biochim. Biophys. Acta* 1847 (1), 134-141, 2015
- [6] Y. Furutani, K. Fujiwara, T. Kimura, T. Kikukawa, M. Demura and H. Kandori, “Dynamics of Dangling Bonds of Water Molecules in *pharaonis* Halorhodopsin during Chloride Ion Transportation”, *J. Phys. Chem. Lett.* 3, 2964-2969, 2012
- [7] A. Inaguma, H. Tsukamoto, H. E. Kato, T. Kimura, T. Ishizuka, S. Oishi, H. Yawo, O. Nureki and Y. Furutani, “Chimeras of Channelrhodopsin-1 and -2 from *Chlamydomonas reinhardtii* Exhibit Distinctive Light-Induced Structural Changes from Channelrhodopsin-2”, *J. Biol. Chem.* 290 (18), 11623-11634, 2015
- [8] Y. Furutani, T. Okitsu, L. Reissig, M. Mizuno, M. Homma, A. Wada, Y. Mizutani, and Y. Sudo, “Large Spectral Change Due to Amide Modes of a  $\beta$ -Sheet upon the Formation of an Early Photointermediate of Middle Rhodopsin”, *J. Phys. Chem. B*, 117 (13), 3449-3458, 2013
- [9] 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, 3806-3810, 2012
- [10] Y. Furutani, H. Shimizu, Y. Asai, S. Oiki and H. Kandori, “Specific Interactions between Alkali Metal Cations and the KcsA Channel Studied Using ATR-FTIR Spectroscopy”, *Biophys. Physicobiol.* 12, 37-45, 2015.
- [11] H. Guo, T. Kimura, Y. Furutani, “Distortion of the Amide-I and -II Bands of an  $\alpha$ -helical Membrane Protein, *pharaonis* Halorhodopsin, Depends on Thickness of Gold Films Utilized for Surface-Enhanced Infrared Absorption Spectroscopy”, *Chem. Phys.* 419, 8-16, 2013
- [12] 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, 90-95, 2014
- [13] Y. Inokuchi, T. Ebata, T. Ikeda, T. Haino, T. Kimura, H. Guo, and Y. Furutani, “New Insights into Metal Ion-Crown Ether Complexes Revealed by SEIRA Spectroscopy”, *New J. Chem.* in press (DOI:10.1039/C5NJ01787D).
- [14] 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, 123-129, 2013
- [15] 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), 272-275, 2014
- [16] H. Shirai, C. Duchesne, Y. Furutani, and T. Fuji, “Attenuated Total Reflectance Spectroscopy with Chirped-Pulse Upconversion”, *Opt. Express* 22 (24), 29611-29616, 2014
- [17] 瀧口宏夫「分子科学の「ときめき度」」, *分子研レターズ* 65, 1, 2012

## 花崎 一郎 名誉教授ご逝去



平成元年3月撮影

### 略歴

昭和11年7月19日生まれ  
 昭和35年 東京大学工学部応用科学科 卒業  
 昭和37年 東京大学大学院工学系研究科修士課程 修了  
 昭和40年 東京大学大学院理学系研究科博士課程(物性研) 退学  
 昭和40年 理化学研究所 研究員  
 昭和41年 理学博士(東京大学)  
 昭和47年 大阪大学理学部化学科 助教授  
 昭和53年 分子科学研究所電子構造研究系 教授  
 昭和61年~平成3年 機器センター長  
 平成9年 分子科学研究所 名誉教授  
 平成9年 広島大学理学部化学科 教授  
 平成12年 広島大学 定年退職  
 平成27年3月11日 逝去 享年78

### 花崎先生の教え 馬場 正昭 (京都大学大学院理学研究科 教授)

分子研の電子状態動力学部門で技官を探しているとのことで研究室のドアを叩いたのが花崎一郎先生との初めての出会いでした。どういう研究をしたいのですかと尋ねられ、一時間ほどだったでしょうか。面接という設定だったので、アピールまみれの話は私は熱っぽく語ったのですが、花崎先生は笑みを浮かべながら冷静に、青二才のたわごとなどどこ吹く風といった様子で議論をしてくれました。ものすごく切れる人だなと直感し、一緒に研究できたらいいなと心から思いました。縁があってそれから5年、花崎先生の懐の深さのおかげで私は充実した研究生活を満喫できました。研究には厳しく、私事では優しく、研究者志望の若い駆け出しにとって花崎先生は理想的な師でありました。

当時の花崎グループでは、赤外多光子解離を中心に研究が進められていたのですが、先生の粋な計らいで、私は新たに超音速ジェット分子分光を始めました。まったく経験がないくせに実験装置をゼロから作り、レーザーも一筋縄ではいなくて、なかなか結果が出なかったのですが、先生は私を少しも責めることなく、次はこうしたらどうだとか、こういう可能性もあるかもしれないとか、まるで自分で実験をしながら楽しんでおられるように見守ってくれました。一年経ってやっとスペクトルが取れたのですが、有頂天になった私は夜が明けてすぐに先生のご自宅に実験室から電話をかけ、「うまくいったので見に来てください」とお願いをしてしまいました。やがて先生が現れ、「そうですか、取れましたか。」とまた笑みを浮かべながら、一時間ほど議論をしたでしょうか。ねぎらいの言葉とかはなかったのですが、チャートを見ながら何だかんだと。今も鮮明に記憶に残っている、私にとっては至福のひと時でした。

私はそのとき研究室の秘書と婚約しており、その面倒を見てくれたのも、おしどり夫婦の花崎ご夫妻でした。結婚のときには仲人をお願いしたのですが、ご夫妻の仲むつまじさは人もうらやむほどでした。先生が退官されてからも時折ご挨拶には伺っていたのですが、3月に急に亡くなられたのを知らされたのは、ひと月以上も経った忌明け直前のことでした。夫婦ともどもご自宅の鎌倉までお参りに行き、奥様とともにご霊前で掌を合わせていたら、このような昔のことが走馬灯のように心をめぐり、感謝の気持ちと涙があふれました。

私は今も、先生がセンター長を務められていた機器センターで共同研究を続けています。花崎先生と一緒に仕事しているという気持ちを忘れず、これからも実験を楽しみたいと思っています。

## 花崎先生の思い出 高柳 正夫 (東京農工大学大学院連合農学研究科 教授)

私は、昭和61年10月から8年半、電構造研究系電子状態動力学部門の花崎グループで助手を務めさせていただきました。分子研花崎グループとしては、二代目の助手となります。在任期間中、先生には非常に恵まれた研究環境を整えていただき、多くの興味深い研究に関わらせていただきました。超音速分子線やパルスレーザーを用いた実験が一般的になって少したった頃で、私達もそのような研究を行っていました。先生ご自身も多くの研究課題をお考えになっていましたが、グループのメンバー（スタッフや学生）の提案にも積極的に耳を傾けられました。そして私が在籍していた期間に、振動励起したファンデルワールス分子のダイナミクス、ファンデルワールス錯体を用いた半衝突の研究、アセトアルデヒドの光励起ダイナミクス、メチル基などの大振幅振動のポテンシャル解析と分子間相互作用によるポテンシャルの変化など、多くの研究が行なわれ、それぞれ成果を挙げることができました。少ないメンバーで良くこれだけできたと思います。実は当時グループ内では、このような気相の分子や分子会合体の研究だけではなく、溶液中の振動反応などの非線形現象の研究も行われていました。先生のご関心の広さと実行力は驚異的だったと思います。そんな当時（平成6年4月）のグループメンバーの写真が残っていましたので、掲載します。

分子研在籍中には先生と奥様に、個人的にもお世話になりました。一人暮らしをしていたときには、よくご自宅に食事にお招きいただきました。結婚前後には、励ましやアドバイスをいただき、また宿舎に入れるようにという働きかけまでしていただきました。追悼ページ冒頭の写真は、私の結婚披露宴でスピーチいただいたときの先生のお写真です。



最近は何かとあわただしく、ずいぶん長いことご無沙汰しておりました。急逝の報せを受け、ありきたりながら「もっとお会いしておけばよかった。」と悔やんでおります。ご冥福をお祈りします。

## 花崎先生と非線形現象の研究 森 義仁 (お茶の水女子大学理学部化学科 教授)

花崎教授は、1989年4月には非線形平衡系現象に関する研究に本格的に着手をし、これに際し、インドから研究員として P. K. Srivastava、国内から流動技官として森義仁が参加した。花崎教授指導のもと、光化学反応と流体の協同現象や非線形平衡系現象として知られる化学振動反応における振動復活現象の実験に並行して、関心事の一つである化学振動反応における光照射効果の研究動向の調査を進めた。その中で、化学振動反応を光照射で制御する試みは報告されているものの、その初期過程が明らかにされていなかったことが分かった。そこで、いくつかの光照射効果が見出されている反応系について作用スペクトルを求めることにより、初期過程を議論する研究の枠組みを作り、その枠組みの中で、まだ光照射効果が知られていない反応系にも応用し、その有効性を確かめた。この初期過程を明らかにすることで初めて光照射が化学振動反応を制御する仕組みを定量的に説明することが可能となり、化学振動反応の光応答研究が大いに広がった。

この非線形非平衡現象の研究には、総研大生として岡崎紀明、関口哲生が、技官として神長暁子が順次参加し、グループの活動も活発になり、その存在を知られるようになると、国内からの共同研究者も増えていき、宿泊施設などの要因も加わって国外からの共同研究者の滞在も相次いだ。ポーランドの Gorecki 博士、チェコスロバキアの Marek 博士、ロシア Agladze 博士や Vanak 博士、ハンガリーの Rabai 博士などである。加えて、研究会やシンポジウムも開催するようになり、国内での研究拠点の役割を果たし、特に、化学、数学、物理学、生物学、医学と多様な分野に渡る非線形非平衡系現象の実験を中心とした、国内にはなかった研究会を開始した。花崎教授引退後もこの研究会は継続しており、今年で24回目を迎える。



日本-ハンガリー  
二国間非線形科学シンポジウムでの集合写真

## 青柳 睦 教授ご逝去



平成15年撮影

アリゾナ州フェニックスでのNAREGIプロジェクトにて。

### 略歴

昭和60年 慶応義塾大学工学研究科計測工学専攻修士課程修了  
 昭和62年 名古屋大学理学研究科化学専攻博士課程単位取得退学  
 昭和62年 分子科学研究所 理論系研究 技官  
 昭和63年 米アルゴンヌ国立研究所 博士研究員  
 平成2年 工業技術院化学技術研究所 研究員、のち主任研究員  
 平成5年 分子科学研究所 電子計算機センター 助教授  
 平成14年 九州大学情報基盤センター 教授  
 平成20年-平成26年3月 九州大学 情報基盤研究開発センター長  
 平成26年12月18日 逝去 享年55

### 青柳睦君 慶応・理工・化学専攻マイナス一期生 岩田 末廣 (分子科学研究所 名誉教授)

青柳さんたちを、私たちは、慶応大理工学部化学科・化学専攻のマイナス一期生と呼んでいる。茅分子研元所長、私、富宅神戸大名誉教授と大峯分子研現所長は、1981年4月に新設された化学科に着任して、物理化学研究室を立ち上げた。電気工学科の学生実験予備室が4人の居室で、茅さんたちは実験装置を組み立てる別室も借りていたが、私と大峯さんは一年以上ここで過ごすことになった。新設の化学科と物理学科の研究と教育体制を速やかに立ち上げるために、旧工学部の先生方は、電気工学科、計測工学科、応用化学科の四年生の希望者を、物理学科と化学科で卒業研究、引き続き修士研究への継続を可能とする措置をとった。青柳さんはその中の一人であった。現京大教授（前分子研助教授）の谷村さんは物理学科の久保亮五研究室に、現九大先導研の友岡克彦教授は、化学科土橋研に参加した。私のところには青柳さんを含めて三人、茅研にも二人の卒研生が参加してきた。青柳さんの学務上の指導教員は、学部時代は計測工学科の渡辺彰教授、修士時代は計測工学専攻の福地充教授であったと記憶している。彼らは、茅研では分子線・レーザー分光装置の立ち上げ、私たちのグループではVAX11/750-UNIX BSD3.2システムの導入の中心になり、二つの研究グループのその後の発展の礎を作った。

青柳さんは、大峯さんの指導で、ポリエンの $\pi$ 電子状態の研究で卒業論文を書き、大峯さんの分子研助教授着任後は、後任の助手の長村さんの指導で、ブタジエンの励起状態の研究で修士論文を書き上げている。この頃から、分子研の計算機を活用している。その後、彼は、博士課程進学のため、名古屋大学の平尾公彦さんの研究室に移って行った。多分、分子研研究技官時代だと思うが、平尾さんが仲人をした彼の結婚式の祝宴は記憶に残っている。加藤重樹さん、大峯さん、高塚さん、北浦さんなど、その後日本の理論化学をしょって立つ方々がお祝いに集まっていた。青柳さん独特の人徳である。

青柳さんと一緒に「仕事」が再開されたのは、1994年始めに私が分子研に移り、計算機センター長になってからである。青柳さんはその前年からセンター助教授として業務全般を取り仕切ってくれていた。計算機が問題なく運転し続けるための管理業務はもとより、事務局との連携や計算機納入業者との交渉・情報交換を巧みに進めていた。計算機センターの一大業務は、定期的に行わなければならない計算機の入替えである。予算の獲得も大変であるが、「機種選定」も多くの困難がある。当時は、「日米摩擦」による制限もあり、業者間の「駆け引き」を把握しておくことも彼の仕事の一部であった。

分子研レターズ57のIMS caféに青柳さんが書いた「計算化学から計算科学へ」からは、彼が、時代の先端の計算技術を駆使する研究へ強い意欲で研究グループを率いていたことが読み取れる。早すぎた死を悼む。合掌。

### 青柳さんと焼酎のお湯割り 南部 伸孝 (上智大学物質生命理工学科 教授)

青柳さんが1988年に渡米する直前に、出身の岩田研究室（私は学部4年）へ立ち寄られたのが最初の出会いです。一緒にあった奥様の印象がとても強く、青柳さんの影は薄かったのですが、とても優しいお顔で微笑むので、気持ちの優しい

方ではないかと勝手に思っておりました。まさかその後、分子研にて11年間、さらに九州大学にて4年間の合計15年間、職場の上司および同僚として言葉では言い表せないほど、公私共々お世話になるとは思いもしませんでした。そして、苦難・喜びの時をともに過ごせたことをうれしく思っております。

再会は1993年のことで、私が分子研電算センターに就職した半年後、私の直属の上司となられました。青柳さんは「同じ職場の准教授と助手になるけど、一緒に研究をする必要はないよ。」と、私が独立助手であることを気遣ってくれました。しかし、私は以下のように青柳さんに感銘を受け、一緒に研究することに決めました。当時、毎月、コンピュータ導入会社と「御前会議」があり、管理棟三階の大会議室の丸テーブルに座り、重役の方々の説明を聞いた後、我々の要求を突き付ける、ちょっと傲慢な会議がありました。のちに青柳さんが「もうこの堅苦しい会議は止めよう。」と提案され、重要な時以外はやらなくなったその会議に青柳さんが初めて登場されたとき、お前ら良く聞け！風な勢いで、「そんな提案では何がUNIXだ。あり得ない！」と会社の説明を一蹴します。青柳さんは時代の先を米国で体感し、あるべき姿を示したのだと感動しました。以降、青柳さんはかなり急進的な思想でUNIX化を押し進め、センターの運営を主導していきました。助手の私や高見利也さんはひたすら付いていきました。当時、所長の特別研究費ヒアリングで「特別研究費ではなく特別研究時間が欲しい」と要望したという逸話があります。実際、研究どころではありませんでした。センターの拡大を図って分子研所属から岡崎共通研究施設への移籍も推進されました。

1994年に岩田先生が着任されましたが、青柳さんは「惑星直列だ！」「どうなっているの？」「岩田先生とは共同研究は止めよう。」と言われました。私も当時の助手陣から、岩田先生と共同研究するなと釘を刺されました。分子研は助手も教授や准教授と対等に激しい競争で成り立っていることを実感したものです。1997年によく The Journal of Chemical Physicsへ初めての青柳さんとの共著論文を出せたときは感無量でした。論文受理の手紙が届き、青柳さんに電話をして二人でとても喜びました。あの時の喜びは今も忘れません。その後も青柳さんと論文を出すために奮闘しましたが、なかなか出来ず、申し訳なかったと今も思っております。不甲斐ない研究者であった私をよく諦めずに指導してくれました。

私にとって青柳さんとの研究室が理想でした。今も当時を思い出しながら、学生に対応するようにしています。焼酎のお湯割りを教えてくれたのも青柳さんです。

ご冥福をお祈りいたします。



分子研電子計算機センター時代の青柳さん

## 追悼／青柳先生 高見 利也（九州大学情報基盤研究開発センター 准教授）

青柳先生が分子研から九州大学に移られたのは、ちょうどグリッドプロジェクトNAREGIが動き始めた頃で、青柳先生は異なるタイプの計算をつなぐmediatorというソフトウェアを使った連成計算を研究されていました。この内容については、2008年5月発行の分子研レターズで、青柳先生ご自身の解説「計算化学から計算科学へ」がありますので、ご参照ください。このプロジェクト参加者の多くは計算機科学の方でしたので、分子科学にとどまらず、さまざまな科学分野における青柳先生の幅広い人脈と数値計算法に関する知識は魅力的に映ったようです。実際、このプロジェクトをきっかけに青柳先生は、計算機科学と計算科学諸分野間の調整役、まさに、分野間のmediatorとして活躍されることとなりました。

では、学生にとっては、どんな先生だったのでしょうか。九州大学情報基盤研究開発センターに来る学生は、特定の科学分野を身につけているわけでもなく、中には計算機の基本的な知識さえ持っていない学生もいて、青柳先生も面食らっておられたようです。学生の指導法には、教員自らが指導して「育てる」タイプと、学生が自分で「育つ」のを見守るタイプがありますが、出張で留守がちな青柳先生は後者でした。これは悪く言えば放任主義ですが、じっと待つことほど大変なことはなく、なかなか育ってくれない学生に対して小言の一つも言いたくなるのが普通です。しかし、青柳先生の口から学生に関する愚痴さえ聞いたことがなかったのは、意識的に学生を信頼しあたたかく見守って来られたからだと思えます。そうやって育った学生の多くは、社会に出て様々な分野で活躍していますが、病魔が襲わなければ、もっと多くの学生の育っていく姿を見ることができたと思うと、早すぎるご逝去が残念でなりません。

## 所長招聘研究会「分子導体研究の展開(昔、今、これから)」

分子科学研究所は2015年4月22日に40周年を迎えましたが、40周年記念の事業は開催しませんでした。その代わりというわけでもないのですが、分子科学研究所の創設期からの大きな柱である「分子導体研究」に多大な貢献があった分子集団研究系物性化学研究部門初代教授の井口洋夫先生、分子集団動力学研究部門初代教授の丸山有成先生が昨年、惜しくもご逝去されたこともあり、改めて分子科学研究所の創設期当時を振り返りつつ、分子導体研究のこれからについて関係者に語っていただく標記研究会を2015年4月11日(土)午後より4月12日(日)昼まで開催することにしました。

分子研レターズの送付先などで所属等住所の確認ができる、両先生の現役時代に在籍されていたグループリーダーの方々、分子集団研究系の方々、技官・事務官の方々を中心に研究会のご案内をするとともに、ホームページ上でも公募した結果、所外から50名ほどの参加申し込みがありました。久々に分子研に来られた方のために、研究会が始まる前の午前中に明大寺地区での見学会も開催しました。見学場所は、UVSOR施設、装置開発室、協奏分子システム研究センター、大森研究室、解良研究室でした。

1日目は岡崎コンファレンスセンターで、井口先生や丸山先生の現役時代(今から20年~40年前)に深い関わりのあった方々に「昔」に関わるご講演を頂き、夕方には井口先生、丸山先生を偲んで懇親会を開催しました。井口先

生が分子研にいろいろな仕掛け(カルチャー)を仕込んでおいて下さったことが、この40年間、国際的にも類い稀な分子研の実績とその高い評価につながっていることを改めて認識することができました。今後も大事に育てていきたいものです。

2日目は場所を研究棟201号室に移して、井口先生が始められた分子導体研究が大きく花開き、更に飛躍しようとしている「今、これから」についての講演を現役の皆さんにいただき、最後は榎先生に締めて頂きました。

プログラムの概要は以下の通りです。当日の記録(プレゼン資料、スナップ

写真等)はWeb上で関係者のみに限定公開しております。都合によりご参加いただけなかった関係者でご覧になりたい場合は、小杉までお問い合わせ下さい。

なお、現在、所内の准教授以上で、分子研での井口先生、丸山先生と重なりがあるのは大峯所長と私だけでしたので、所外から榎先生にも研究会の世話人になって頂きました。また、当日は土日にもかかわらず、技術職員、事務支援員の方々にご協力頂きました。この場をお借りしてお礼申し上げます。

(小杉 信博 記)

### テーマと講演者名(分子研における所属)

- |          |                                    |
|----------|------------------------------------|
| 分子研創設の頃  | : 吉原経太郎(元電子構造)、木村啓作(元分子集団)         |
| 放射光利用研究  | : Ian Munro(元極端紫外光・客員)、渡邊誠(元UVSOR) |
| 分子導体研究   | : 齋藤軍治(元分子集団)、森健彦(元分子集団)           |
| 分子磁性体研究  | : 阿波賀邦夫(元極低温セ)                     |
| 光電子分光研究  | : 石井久夫(元極端紫外光・流動)、解良聡(光分子科学)       |
| 分子デバイス展開 | : 平本昌宏(物質分子科学)、山本浩史(協奏分子)          |
| 物性物理との連携 | : 鹿野田一司(元分子集団)、榎敏明(元極低温セ)          |



所長招聘研究会『分子導体研究の展開』

— 井口洋夫先生、丸山有成先生を偲んで 平成27年4月11日~12日 岡崎コンファレンスセンター

## 第74回岡崎コンファレンス

### “Frontier of X-ray Absorption Spectroscopy and Molecular Science”

去る2015年2月3日～5日に、岡崎コンファレンスセンターにおいて、標記国際会議が開催されました。岡崎コンファレンスは、分子科学ならびに関連分野における中心的課題を集中して議論する場として分子研が主催するもので、研究所創設以来約40年の歴史を有しています。今回は北海道大学触媒化学研究センター長・朝倉清高教授と分子研・横山が組織委員となり、X線吸収分光の新展開を中心とした討論を目的としました。参加者は、外国人招待講演者5名、日本人招待講演者16名を含めてちょうど50名でした。

現代の分子・物質・材料科学に求められることは、人類のさらなる文化的発展に資する調和のとれた物質・材料の開発であり、とりわけ、直面する地球環境・エネルギー問題の解決、さらには、よりいっそうの安全安心社会の構築のために、高機能、省エネルギー、省資源、再生可能、環境保全、耐久性、免震などのさまざまな観点から、真に有用な新しい分子・物質・材料を創成することでしょう。X線吸収分光法は、1980年代以降のシンクロトロン放射光施設の建設・発展の恩恵により、分子・物質・材料科学、環境・生命科学など極めて幅広い分野にわたって不可欠の観測手法に成長し、確立した手法として広く定着するようになっています。しかし、その間の放射光源技術の革新は目覚ましく、超高輝度回折限界放射光源が現実味を帯びる現在において、X線吸収分光でどのような新たなサイエンスが展開で

きるかを、もう一度考える必要があるでしょう。X線吸収分光の最大の特徴は元素選択的な化学状態・定量的局所構造解析にあり、硬X線を用いれば様々な困難な環境下でのその場観察が可能であることが、極めて広い分野に応用されている理由になっています。現状最先端光源を利用した放射光X線吸収分光の特徴を挙げると、(i) 触媒・電池などの化学反応過程で1 ms程度の単発現象の追跡ができる、(ii) 半導体・環境科学などで特に重要な1 ppm以下の希薄濃度での測定が可能である、(iii) 100 nm以下のナノビームによる空間分解計測が可能で、触媒・電池などの空間的不均一性を観測できる、(iv) トモグラフを利用して空間分解能1  $\mu\text{m}$ 程度の3次元可視化が可能である、(v) 繰り返し観測可能な事象について数10 psの時間分解計測が可能である、などです。一方、将来の回折限界新光源（電子ビームエミッタンス1~0.1 nrad以下）によれば、輝度1000倍 ( $>10^{16}$  photons/s / 0.1%b.w.) が期待でき、X線吸収分光において、10 nm以下（1 nm程度まで）の空間分解計測、3次元トモグラフの大幅高速化・高空間分解能化、10  $\mu\text{s}$ 以下の時間分解単発現象追跡、10 ppb以下の

希薄試料計測などが可能となります。

本岡崎コンファレンスでは、各国の先端X線吸収分光に携わる数名の研究者を招き、様々な角度からの見識を聞きながら新展開を模索しました。上記に想定される条件のもと、あるいは新たに光源性能自体を提案することも含めて、近い将来の先端X線吸収分光の青写真を語りました。現状光源では測定できない対象として想定される研究提案も既に数多くあります。たとえば、現状のHDDは既に磁石1個が~20 nm、近い将来は数nmに達し、現状最下限のビームサイズより1桁以上も小さいものです。ひとつひとつのナノ粒子が物性的に全く等価であれば個別に観測する必要は必ずしもないでしょうが、ナノ粒子が小さくなればなるほど、わずかな原子数や構造の違いによってその物性が大きく変化し、同一の挙動をとらなくなるものですから、個々の粒子の計測が不可欠となります。また、触媒や電池の化学反応は不可避免的に空間的不均一性を伴って進行する傾向があります。このような機能性材料・素子における空間的に不均一な現象の根源的な動作機構を理解するために空間分解X線吸収分光測定は必須の要請であり、かつ、

経時変化の追跡も必要となるため、広視野時間分解イメージング測定も要求されます。高空間分解・広視野・時間追跡を複合した計測の発展が期待されるところです。これらの機能材料・素子の空間的に不均一な動作メカニズムを解明することが、新奇物質・材料開発のブレークスルーにつながるかと期待されます。先端X線



Lin X. CHEN教授（アルゴンヌ国立研究所、ノースウエストスタン大）の講演。右端は司会の高橋嘉夫教授（東大院理）。

吸収分光によって、これらの起源を解明していくことを提言できると期待します。

外国人招待講演者は以下の通りでした。  
Tsun-Kong SHAM (University of Western Ontario & Soochow-Western Centre for Synchrotron Radiation Research, Canada)

Andrei ROGALEV (European Synchrotron Radiation Facility, France)

Peter FISCHER (Lawrence Berkeley National Laboratory & University of California Santa Cruz, U. S. A.)

Lin X. CHEN (Argonne National Laboratory & Northwestern University)

Stephen P. CRAMER (University of California Davis & Advanced Light Source, U. S. A.)

いずれも放射光を用いたX線吸収分光において第一線で活躍中の研究者で、特に、空間分解・時間分解・新しい偏

光計測・新しい方法論開発など、先端的な放射光X線吸収分光利用の成果に加え、近い将来の回折限界光源に関する展望を語っていただきました。

また、日本人招待講演者は以下の通りでした。

高草木達（北海道大）、宮永崇史（弘前大）、大柳宏之（産総研）、阿部仁（高エネ・物構研）、足立伸一（高エネ・物構研）、増田卓也（物材機構）、高橋嘉夫（東大）、宇尾 基弘（東京医科歯科大）、唯美津木（名大）、片山哲夫（JASRI/SPring-8）、宇留賀朋哉（JASRI/SPring-8）、石松直樹（広島大）、大東琢治（分子研）、長坂将成（分子研）、高木康多（分子研）、上村洋平（分子研）

同じく、空間分解・時間分解・新しい方法論開発などの先端的な放射光X線吸収分光利用の成果を語っていただ



いきました。

最後に、多忙な時期に日程を合わせて来てくださり最新の研究成果と貴重な助言等をいただいた外国人講演者、日本人講演者の皆様、また、全参加者の皆様に謝辞を記すとともに、近い将来、先端X線吸収分光によって、機能材料・素子の空間的に不均一な動作機構などの起源が解明され、新奇物質・材料開発のブレークスルーにつながることを期待します。

(横山 利彦 記)

## 受賞者の声

藤貴夫准教授に平成27年度業績賞（進歩賞）

檜山 儀恵准教授に第17回守田科学研究奨励賞および有機合成化学協会セントラル硝子研究企画賞

倉重佑輝助教に平成26年度日本化学会進歩賞

大迫隆男助教に第4回自然科学研究機構若手研究者賞

Gu Cheng 研究員にMOF2014 Kobe Poster Award

## 藤貴夫准教授に平成27年度業績賞（進歩賞）

このたび、レーザー学会第460回研究会での研究会報告「キャリア・エンベロープ位相も測定できる超短光パルス評価法」で、平成27年度・第37回業績賞（進歩賞）を受賞することになりました。この賞は、過去2年間のレーザー学会関連論文発表および研究会報告などにおける、レーザーに関する研

究および製品の開発に関し顕著な成果を示した研究の連名者全員に対して授与されるものです。

今回、受賞対象となったのは、光電場の新しい計測手法の確立です。光電場は、1,2フェムト秒（10のマイナス15乗秒）といった周期で振動しており、それを直接観測することは、十年ほど

前では、夢のような話でした。わたしが大学院生の頃から、いつかはやってみたいと考えていた研究でした。

2010年に分子研に着任してから、まず、新しい赤外光パルス発生法の研究を進めていたのですが、そのパルス幅を測定する方法を考えているときに、パルス幅だけでなく、光電場の振動す

の様子まで測定できる方法を思いつきました。

原理証明実験まで行ってから、論文を投稿しましたが、最初は計測原理を理解してもらえず、リジェクトされました。さらなるデータの向上と理論の確立を、助教の野村君とIMSフェロー（現在特任助教）の白井君とともに必死で進め、最初の投稿から1年半後に、*Nature Communications* に受理されることになりました[Nat. Commun. 4 2820 (2013)]。学生時代からやりたかった研究を研究室主宰者としてで

きたことは、研究者冥利に尽きると思います。この成果は高く評価され、国内外の会議でいくつも招待講演の依頼があり、そして、このレーザー学会業績賞をいただくことになりました。あきらめずに一緒にがんばってくれた野村君と白井君とともに受賞できたことは、大変うれしく思っています。

本研究は、主に科学技術振興機構の先端計測・機器開発プログラム、日本学術振興会科学研究費補助金（研究課題番号 26600120）、エクストリー



授賞式にて。左から白井、藤、野村。

ムフォトニクス事業、融合光新創生ネットワーク事業から支援をうけました。

（藤 貴夫 記）

## 榎山儀恵准教授に第17回守田科学研究奨励賞および有機合成化学協会セントラル硝子研究企画賞

前列右から3番目が筆者。

この度、「不斉分子触媒ならびに不斉反応の開発に基づくキラル小分子合成」に関する研究で大学女性協会第17回守田科学研究奨励賞を、「ハロゲン結合供与体触媒の設計・合成・機能創出」に関する研究企画（＝プロポーザル）で有機合成化学協会セントラル硝子研究企画賞を頂きました。これまでご指導いただきました山本尚先生をはじめ、多くの共同研究者の皆様、守田科学研究奨励賞の応募に際してはご推薦いただきました大峯所長ならびに魚住主幹に心から御礼申し上げます。

守田科学研究奨励賞は、化学教育者・故守田純子氏から遺贈された資金をもとにして、自然科学を専門とする女性科学者の研究を奨励し、科学の発展に貢献する人材を育成することを目的に、1998年に設けられたものです。自然科学分野において優れた研究成果をあげ科学の発展に貢献することが期待される40歳未満の女性科学者に贈られる賞です。一方、研究企画賞は、これまでの成果に対する評価ではなく、独創的な萌芽的研究に対して研究助成が行わ

れ、満30歳以上、満40歳未満の研究者を対象としています。助成金は賛同企業の寄付によるものです。

今回の受賞は、名古屋大学およびシカゴ大学に大学院生として在籍していた頃の研究、前所属である東北大学に助教として在職時に行っていた研究、そして分子科学研究所にて大きな支援を戴き、現在進めている、さらには今後大きく展開する研究に対するものです。ちょうど1年前に研究室を立ち上げたばかりの私にとっては、どちらの賞も受賞の歓びとともに、私のグループに対する激励として感じられ、私自身、今回の受賞を励みにさらに精進していきたいと思っています。

名古屋大学4年時に研究室に配属され研究を開始して以来、15年余。多くの大変貴重な経験をさせていただきました。日常において過去を振り返ることは滅多にありませんが、選考結果の報告を受けた際は、さすがに感慨深いものがありました。シカゴ大学への編入と太平洋を渡っての研究室



の引越越し、異分野研究室でのポストドク経験、化学棟の改修に関わる研究室整備、震災、研究室・実験室の復旧、免震棟新棟の研究室設計、分子研での研究室立ち上げ……。受賞講演のスライドを作成するため、シカゴ大のディフェンス（学位審査）時の公開発表パワーポイントを開きました。謝辞（Acknowledgements）に「My Family」の文字。シカゴ大学では、研究室、学科内のポストドクや学生、教員に加え、家族を前にして公開発表をすることが一般的なスタイルでした。父の前でプレゼンした経験は、今となっては、よい思い出です。あれから10年。守田研究奨励賞の受賞講演もまた、大変貴重

な経験で、協会関係者に加え、慣例により恩師や家族を招待しての講演でした(あいにく山本先生は海外出張のためご不在)。写真は、授賞式にて、協会関係者の方が撮影してくださったもの。前列右から3番目が私、その右が母、

一番右が父に間違えられた4歳年下の弟です(笑)。

最後になりましたが、名古屋大学、シカゴ大学、ハーバード大学、東北大学にてお世話になりました皆様、一緒に研究を進めてくれた学生の皆さん、

分子科学研究所の関係者、グループメンバーの皆さんに、厚く御礼申し上げます。分子科学研究所の貴重な研究環境に感謝しつつ、皆様に恩返しできる様、日々、研究に邁進して参ります。

(椋山 儀恵 記)

## 倉重佑輝助教に平成26年度日本化学会進歩賞

このたび、公益社団法人日本化学会第64回(平成26年度)進歩賞を受賞いたしました。同賞は、同会会員で化学の基礎または応用に関する優秀な研究業績をあげた37歳未満の研究者に贈られる賞であり、“多参照電子状態理論の基礎開発および多核金属酵素への応用”の研究が評価され、このたびの受賞となりました。本賞は日本化学会第95春季年会(日本大学理工学部船橋キャンパス)の日程の中で日本化学会各賞と共に表彰式がとりおこなわれ、それにあわせてわたくしも受賞記念の講演を行う機会をいただきました。記

念講演の中では、分子科学研究所に着任以来とり組んでまいりました密度行列繰り込み群法を基盤とする多参照電子状態理論の開発や現在までの応用研究の展開、とくに金属酵素活性中心にある多核金属錯体を介した触媒反応の電子状態解析についての学術的な話と共に、初めてこの多参照電子状態の問題に出会った学部生時代の卒業研究の懐かしい思い出話を交えながら、非常に楽しく話をさせていただきました。いまだゴールからはほど遠く、進めば進むほど難題が立ちふさがるといった研究ではございますが、



今回の受賞を励みに、これから少しでも多くの恩返しが出来るよう、さらなる精進をお誓い申し上げたいと思います。

(倉重 佑輝 記)

## 大迫隆男助教に第4回自然科学研究機構若手研究者賞

この度、分子研の若手研究者の代表として第4回自然科学研究機構若手研究者賞を頂きました。6月14日に東京お台場にある日本科学未来館で開催された、「宇宙・生命・脳・物質・エネルギー 若手研究者による Rising Sun IV」と題した授賞式及び記念講演にて、一般の方、特に高校生に向けた受賞記念講演を行って参りました。

受賞記念講演では、国立天文台の青木先生の宇宙の初代星に関する研究の話から始まり、核融合研究所の長坂先生の核融合装置を入れる材料開発研究、基礎生物学研究所の原先生(現:東北大学准教授)の精子を生み出す幹細胞に

関する研究、生理学研究所の岡本先生のしなやかに変化する脳神経活動に関する研究の講演と続き、そして私が最後に、環境に優しい遷移金属触媒反応の開発に関する研究について講演させて頂きました。本講演トピックスは、何億光年という大きさの宇宙から、ナノサイズの分子まで及んでおり、自然科学研究機構で行われているサイエンスの重厚感に、講演者である私も改めて感銘を受けました。また、講演毎の質疑応答では、高校生からの積極的な質問があり、時には専門的で非常に鋭い質問が飛び交い、参加されている一般の方々の科学に対する意識の高さに

感心させられました。

講演会に続き、「ミート・ザ・レクチャラーズ」という講演者と直接話ろうという会が設けられており、講演に参加された多くの方々と直接お話しをすることができました。普段、高校生と話す機会がない私にとって、とても刺激的で楽しい時を過ごすことができました。私の母校である大阪府立高津高校の先生と生徒さんにも会に参加させていただき、短い時間でしたが後輩たちと交流できたことを大変嬉しく思っております。わざわざ遠くからありがとうございました。

今回の講演会では、高校生にもわか

りやすく講演するというミッションが課されており、自分の研究をわかりやすく説明することに大変、苦労いたしました。講演準備の段階では、大峯所長に、ご多忙の中、何度もプレゼンテーションに関する厳しいご指導、ご助言を頂きました。研究の核心部を端折らず、簡単な言葉で説明することの難しさを感じつつも、改めて自分の研究を見つめ直すことができたように思えます。

最後に、講演会の開催にご尽力頂きました佐藤機構長、大峯所長、研究力強化推進本部の小泉先生、事務の奈良

様をはじめ、関係者の皆様には、改めて御礼申し上げます。また、受賞対象となりました研究は、すべて魚住研究室にて行ったものであります。日々、ご指導して頂いております魚住泰広教授をはじめ、あらゆる部分で協力頂きました魚住研究室の皆様にご心より感謝申し上げます。

(大迫 隆男 記)



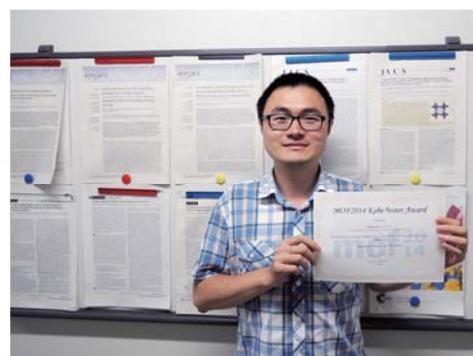
前列一番右が筆者。

## Gu Cheng 研究員に MOF2014 Kobe Poster Award

In September 2014, I attended the MOF2014 Kobe (4th International Conference on Metal-Organic Frameworks and Open Framework Compounds) and presented a poster entitled “A General Strategy for Designing Porous Organic Polymer Thin Films”. At the end of the conference, I was honored with “Poster Awards”, which was established for rewarding outstanding posters. When I heard it, I felt very excited and greatly honored because only ten persons were selected as “Poster Awards” from more than three hundred poster presentations. First of all, I would like to express my most sincere gratitude to my collaborative supervisor, Prof. Donglin Jiang, for his kind guidance to my work and life, which significantly promotes my improvement. I also would like to thank all of our group members for their collaboration and help. I could not complete this work and achieve this award without their assistance.

The topic of my poster presentation is about the electrochemical approach to synthesis porous organic polymer

(POP) films. POPs have emerged as a new platform for constructing next-generation functional porous materials and have shown a number of exciting properties and potential applications. However, POPs are usually obtained as powders, they are insoluble in any solvents, and they are difficult to form thin films. To develop methodology for the synthesis of thin films with retained porosity is highly desired for the further advancement but remains a substantial challenge. Recently, we developed a controlled electropolymerization for producing POP films at the interface of electrode and solution. The POP films are synthetically controllable over their thickness and can be obtained on substrates or as freestanding films. The films are porous, possess extended  $\pi$  conjugation, and enable high-rate electron transfer. By virtue of these features, we developed the POP films as versatile platforms for chemo- and biosensings. Given the structural diversity and design flexibility of POPs, we anticipate the emergence of an exciting



field in designing POP films, which would significantly expand the potential of POPs for applications.

I became interested to chemistry at the high school, and then I chose chemistry as the major subject in the university. I devoted myself to study of electrochemistry and conductive polymers in my Ph.D period. I felt very lucky that I could develop this synthetic approach for POP films. I am stimulated by this award, and will make further progress in the future research.

(Gu Cheng 記)

## 01 東南アジア関連国際協力事業報告

### 【0】はじめに

櫻井准教授（現・大阪大学教授）から東南アジア関係の引き継ぎをしたい、と打診を受けたのは、確か2014年の2月ごろ、岡崎の伝馬通の先の方にある水炊きの店ではなかったかと思う。有機合成ではどうしても研究の推進に人数が必要なため、櫻井さんはタイ・マレーシア・シンガポールで人脈を開拓され、留学生を呼び込む仕組み作りを進めておられた。2010年にはタイのチュラロンコン大学理学部と学術交流協定および学生交流のMOU（覚書き）を締結され、2013年までにはナンヤン工科大学（シンガポール）・マラヤ大学（マレーシア）・マヒドン大学（タイ）・カセサート大学（タイ）とのMOU締結が完了していた。さらに2014年2月～3月にはチュラロンコン大学化学科・ナンヤン工科大学化学科からスタッフを呼んできて分子研とのミニシンポジウムを開催するなど、精力的に提携を進めておられたが、同年4月から大阪大学に移ることになり、急遽引き継ぎ先として大学院時代の後輩である筆者に白羽の矢を立てられたようである。本稿では東南アジア関連事業の担当になっておよそ1年経過し、色々なことに気付いてきたので、最近の活動を紹介しつつ、今後のためのメモをいくつか記しておきたいと思う。

まず、私が担当になった東南アジア関連の活動を挙げてみよう。

#### (1) インターンシップ (IMS-IIPA)

元は第一次安倍内閣の際に、東南アジア重視政策の一環として公募されたJENESYSプログラムに分子研として応募したのが始まりである。JENESYSではASEANの国々から学生・あるいは若

手スタッフを2～3ヶ月招聘し、分子研での研究を体験してもらった。その後、JENESYS予算が打ち切りとなり（といっても、現在JENESYS2.0という事業はあるのだが、少し趣旨が違うので、分子研では利用していない）、日本学生支援機構JASSOの短期招聘予算と分子研の独自予算を組み合わせたEXODASSプログラムが実施された。現在は、分子研全体の国際インターンシッププログラム(IMS-IIP)に組み込む形でアジア版IMS-IIPAと名前を変え、事業を継続している。EXODASSからの大きな変更点としては、滞在期間が3ヶ月以内から6ヶ月以内に延びたこと（若手教員は1～2ヶ月）、募集をMOU提携校に絞ったこと（MOU提携校以外からも受入れは可能であるが、わざわざ宣伝はしていない）、そして実施時期に大きな制約のあるJASSOの短期受入れ制度は利用しなくなったこと、であろうか。分子研独自のインターンシップ制度となったことで自由度が大きくなり、より戦略的な運用が出来るようになった。なお、IMS-IIP全体像については、本誌70号の小杉教授による紹介記事を参照されたい。

#### (2) アジア冬の学校

この企画が始まった経緯は定かでないが、2004年から続いている総研大の事業である。総研大の学融合事業から予算を受け、毎年10名前後の学生を招聘して1週間の講義を行っている。昨年度はアジアコア事業と合同で行ったため、出席者は多かったが、基本的な基調としては総研大の予算縮小とともに招聘できる学生の数も減りつつある。今年度はさらに予算が減ったため、他専攻との合同開催を検討しているところである。アジアの学生のレベルアッ

プ、あるいは総研大の知名度アップに貢献していることは間違いないが、冬の学校参加者が総研大に入学した例はこれまでに1件のみであり、入学希望者の増加を目指している総研大としては、その開催方法に工夫の余地があると思われる。なお、昨年度はHPをオープンしただけでは希望者がほとんど集まらず、MOU提携校のスタッフに依頼をかけたところ、40名を超える応募があった。アジアの中での日本の相対位置が変化するなかで優秀な参加者を集めるには、周知の方法についても工夫が必要であろう。なお、昨年度開催分については、本誌71号の柳井准教授による紹介記事を参照されたい。

#### (3) アジア科学セミナー

詳細は斉藤教授による今号解説記事に譲るが、インドのコルカタで2015年3月に開催された。大峯所長がco-chair、実務を斉藤教授と筆者が担当した。アジアからの講師・学生の参加が開催要件となっており、今回の講師はMOU提携校のスタッフに依頼、学生の参加者も、IMS-IIPAや冬の学校に応募してきたメンバーに周知することで集めることができた。期間中は、1週間ほどずっと参加者と一緒に過ごすので、チュラロンコン大学のDr. Sumrit Wacharasindhu（化学科）およびDr. Thanyada Rungrotmongkol（生物化学科）とはたっぴりMOU関連事業について相談する時間を確保することができた。特にSumritとはデュアル・ディグリープログラム（これはチュラロンコン側の制度名。分子研の制度としてまだ正式名称は無いが、中期計画などでは複数学位という呼称を使っている。）の進め方について議論し、解決しなく

てはいけない問題が非常に明快になったし、ThanyadaとはIMS-IIPAについて議論し、生物化学科でも今年から始めてみようという合意が得られた点が、セミナーの開催そのものとは関係ないものの、予期していなかった大きな収穫である。また、何人かの日本人講演者には、インドの学生から大学院進学の見込みが打診があったようである。

このように、一見相互に無関係の内容に見える個別事業も、人と人との繋がりとという視点から見ると、連携して動かし方が、はるかに効果的に進むというのが実感である。投入できる資金・時間・エフォートに限られるなか、満遍なく投資をするのではなく、対象を絞って関係構築をしていくのが良いと思われる。なお、アジア関連ではこのほかに、アジアコア・日中・日韓などの交流事業があるようであるが、これは筆者の担当外なのでここでは記述しない。さて、それではさっそく昨年度から今年度にかけて実施しているIMS-IIPAとMOU提携事業の活動内容を紹介しよう。

### 【1】PACCON2015/CU-IMSミニワークショップ/MOU延長セレモニー開催

チュラロンコン大学理学部化学科との共同事業として、教員間の交流を深めるためにミニワークショップをバンコクで開催した。時期としては、タイの大学が持ち回りで開催している国際会議：PACCONに合わせることにし、分子研からは加藤（晃）教授、村橋教授、飯野教授、正岡准教授そして筆者が参加、PACCONで招待講演を行うとともに、ミニワー

クショップで研究紹介をした。出発直前に先方から、MOUの期限が切れるので延長のセレモニーをしないかとの打診があり、急遽物理科学研究科内での了解を取った上で用紙に文書を印刷して持って行った。PACCON2016は創立100周年を迎えるチュラロンコン大学がホスト校を勤めるので、また来年も招待して頂けるとのことである。

EXODASS卒業生の同窓会も兼ねたシンポジウムを企画しようかという話にもなっている。協定延長手続きのセレモニーは、学部長がわざわざサインをしに来てくださったし、デュアル・ディグリー制度については、化学科長のProf. Warinthorn Chavasiriと有益な情報交換ができた。またミニワークショップ後は近隣の高層ビルで会食をセッティングして頂き、バンコクの夜景を眺めながらタイ料理を満喫し、参加者も皆満足していたのではないと思う。

### 【2】アジア・インターンシップ事業(IMS-IIPA2015)

2014年度は7月に櫻井教授（分子研併任）と5つの提携校を回って応募者の面接を行い、5名の学生と1名の教員を招聘した。参加者には冬の学校でポスター発表をしてもらったほか、修了後は「修了証」を発行して、Facebookの「JENESYS/EXODASS alumni」グ

ループにもなるべく参加してもらおうようにしている。これは、後々の人脈のネットワーク化を目指したものであり、新しく事業を始める時はこのようなルートにも情報を流すようにしている。ちなみに2014年の参加者のうち、2名は既に総研大の後期3年に入学を希望しており、うち1名はデュアル・ディグリープログラムの学生である。

2015年度からは、分野のバランスや後々の引き継ぎの可能性も考えて、飯野教授に加わって頂いた。プログラムの名称をIMS-IIPA (IMS-International Internship Program in Asia) とすることを決め、HPを戦略室の原田さん、申込みサイトを計算機センターの長屋さんに作って頂いた。募集時期については、大学院の入試時期なども考えて少し前倒しし、国費での留学を希望するような学生が居た場合にも対応できるように4月募集・5月面接としてあるほか、現地のコーディネーターに一次審査を依頼して、あらかじめ面接対象者の質をある程度確保してもらった。これは将来、面接するためにわざわざ毎回現地まで行かなくても良いようにするための布石ではあるが、現地スタッフとのFace-to-faceのコミュニケーションが応募してくる学生の質に反映されることもまた事実なので、労力のかけ方についてはバランスが必要である。



学部長のProf. Supot Hannongbuaと調印式。ちなみに奥方のProf. Supa Hannongbuaはカセサート大学の理学部長。



ミニワークショップ後の双方スタッフによるディナー。前学科長のProf. Vudhichai Parasuk (右から7番目)は奥方(右から6番目)カセサート大学理学部化学科・学科長も同伴されてきた。

今回は5月中旬に、東南アジアMOU提携校を訪問してきた。昨年の面接旅行もハードであったが、今回も6日間で6大学7学科を回って、応募者の面接・現地コーディネーターとの意見交換・スタッフとの会食を繰り返すという強行軍で、初めて会う人ばかりだった飯野さんにとってはだいぶ振り回された感じがあるかもしれない。新しい試みとしては、EXODASS卒業生のDr. Thanyada Rungrotmongkolの紹介で、生物化学科でも募集と説明会を行ったほか、シンガポールでは飯野さんのついででシンガポール国立大のメカノバイオロジー研究所とも意見交換をしてきた。ThanyadaはEXODASSや共同研究で何度も分子研を訪れており、今回も5年一貫の入学希望者を紹介してくれたほか、自身が指導する学生をデュアル・ディグリーで分子研に派遣したいとの希望を伝えてきてくれた。

また、チュラロンコン大学の理学部長(Prof. Supot Hannongbua: Thanyadaの元指導教員)からは、夜の会食にも誘って頂いて色々話をしてきた。そのなかで、先方としては、ぜひ日本からもタイの大学に学生さんを送って欲しいとのことである。確かに、MOU自体は「学生の交換」を合意しているわけだから、至極まっとうな話である。ぜひ総研大生の皆さんの中で、タイへの

短中期留学を希望される方は名乗りを挙げて頂きたい。タイの人はみな親切で、合成関係の分析装置などもJICAの支援によってだいぶ装備されているため、テーマさえきちんと設定すれば充実した数ヶ月間を送れることであろう。

### [3] まとめ

上で見てきたように、これまでの先達のお陰で、東南アジアには強いネットワークが形成されてきている。しかし、事業同士のシナジー効果についてはまだ改善の余地があるように感じられるので、より効率的な運用を模索していくのが良いのではないかな。少なくとも各事業間で申請者名簿の共有や、現地コーディネーターとの関係共有をしていった方が良いように思われる。昨年度はたまたま、筆者が当該3事業の担当者に同時になっていたため、そのようなシナジー効果を実感したが、今後はこうした人脈がうまく引き継がれるようにしていかななくてはならない。

また、これらのアジア関連事業の目的のひとつとして、総研大の学生確保があることは明らかであろう。そうしたことを考える際には、以下の点を強調しておきたい。

(1) 優秀な学生は欧米との取り合いであり、少なくとも経済的サポートは必須であること。優秀な学生を確保す

るには、現在のRA制度だけではどうしても不十分である。

(2) 最初から優秀な学生だけ採用するというのは無理なので、まずは少し門戸を広げて実績作りから始め、徐々にレベルを上げていくような戦略が必要である。すでに、応募者のレベルが上がる兆候は見えているので、この機会を逃さないようにしたい。

(3) 現地スタッフの協力は不可欠なので、若手スタッフをIMS-IIPAなどで招聘して分子研のことをよく知ってもらうことは重要である。また、現地スタッフが学生を取られたと思わないように、デュアル・ディグリープログラムなどの工夫をしていく必要がある。

実際、SumritやThanyadaはEXODASSの卒業生であるし、マラヤ大学でもそうした卒業生が現地で宣伝をしてくれている。2014年に2名、2015年にも(少なくとも)2名の大学院進学希望者が出ていることを考えると、IMS-IIPAはすでに冬の学校の実績を超えており、国際連携という意味でも、分子研の活性化という意味でも、学生の確保という意味でも、これからより発展・継続していくべき事業であろう。2015年度も、学生6名・若手スタッフ3名をIMS-IIPAで採択することができた。彼らの活躍を期待したい。



チュラロンコン大学理学部生物化学科で分子研の説明をする筆者。



アジア科学セミナー2015に参加していたチュラロンコン大学の学生と再会。バンコク市内を案内してもらった。IMS-IIPAに友人が応募しているらしく、今年は誰がインターンシップに行けるのかその結果に興味津々であった。

## 02 アジア学術セミナーの報告

3月6日から10日の5日間の日程で、日本学術振興会とインド科学技術庁の支援によるアジア学術セミナー「分子および固体における動的構造変化と機能」をインドのコルカタで開催した。本セミナーはアジア諸国の若手研究者の養成を目的とし、分子科学分野にとどまらず数学、天文学、生物などの分野でも開催されている。分子科学分野では、1994年にバンガロールでMolecular Science and Molecular Materialsの主題で第1回が、その後、2007年にMolecular and Supramolecular Materials with Designed Functionsを主題とした第2回セミナーがプナにおいて開催され、今回が第3回となる。

今回のセミナーの開催は、2014年3月にハイデラバードで開催されたJSPS-DST日印合同評議会におけるセミナーの提案に遡る。その後、榎教授（東工大）から大峯所長にセミナーへの協力依頼があり、榎教授、岩澤教授（電通大）をアドバイザーボード、大峯所長を組織委員長とし、腰原伸也（東工大）、山本浩史、斉藤を委員とする組織委員会が日本側に設置された。

セミナーでは、アジア各国からの博士課程学生や若手研究者を募る必要があった。分子研では冬の学校などを通してアジア各国の多くの大学と交流活動を行っているため、山本さんの名案で、それらの大学などにポスター発表の募集をかけ提出された要旨により若手

受講者の選別を行った。また、日印二国間の共同研究の契機になることを強く意識し、日本側からは大学院生に加え、博士研究員、助教、教授にもポスター発表による参加を呼びかけた。以上の結果、日本側からは、日本はもとより、韓国、マレーシア、インドネシア、バングラデシュ、米国、フランスから、講師15名（うち外国人4名）、受講者26名（うち外国人15名）が参加することとなった。また、インド側は、R. N. Mukherjee (IISER Kolkata所長)を組織委員長とし、開催準備が進められた。セミナー開催に向けてMukherjeeさんと何度もTV会議による打合せを行ったが、無事に開催できるのか会場に到着するまで不安でいっぱいだった。

セミナーでは33件の講義が披露され、講義終了後には受講者によるポスター発表も行われた。4日目の講演終了後に、コルカタ市内のバスツアーが催され、聖ポール大聖堂、ピクトリア記念堂などコルカタ市内の名所旧跡をバス

で巡り、ガンジス川の船上で夕食をとった。とくに、各国代表者による歌の披露などにより大いに盛り上がった。日本とインド両国、そしてアジアに優秀な若手研究者がいること、そして共同研究のパートナーとなりえることを多くの参加者が感じたことは、セミナーの大きな収穫であった。さらに、今回のセミナーを契機に、インドの大学・研究機関と分子研との間で研究者や大学院生の人材交流・共同研究に向けたMOU締結の動きも複数始まった。日本側から参加した学生・若手研究者に対する宿泊施設については改善の必要があるが、今後もこのような活動を定期的に行うことは、日印の研究者に多くの恩恵をもたらすことであろう。

最後に、本学術セミナー「分子および固体における動的構造変化と機能」への日本学術振興会からの多大な支援に心よりお礼申し上げます。

(斉藤 真司 記)



## 03 ミニ国際シンポジウム「Workshop on Hierarchy of Quantum Mechanics」

2015年2月21日(土)～23日(月)に、岡崎コンファレンスセンター大会議室で「Workshop on Hierarchy of Quantum Mechanics」を開催した。分子振動のマイクロなスケールを出発点にスケールアップしていき、マイクログラムスケール程度の薄膜の振動やミリグラムスケールの懸架鏡の振動に至るまで、スケールフリーの理論体系である量子力学で予言される振動基底状態が実現している、または実現しそうである技術的状況下において、今後、どのような問題、切り口が重要になっていくのかを議論する意見交換の場として、東京大学先端科学技術研究センターの山崎歴舟助教と共に開催を提案した。

日本でも注目されつつある研究分野である「量子オプトメカニクス」を会議のコアとして、本分野を理論的に先導しているカリフォルニア工科大学のYanbei Chen教授により、量子現象を捉えられるスケールが大きくなりつつある中でどのようなサイエンスが出来るのか？ 特に重力理論と量子論の融合の観点からこれまでの包括的な理解に関してレビューを行った。目で見え

る程度の大きさである薄膜や懸架鏡のように質量のスケールが大きくなると重力の効果量子論に加えなければならず、その「正しい」理論の記述を巡って議論が激しく対立している。ハンガリーにあるウィグナー研究所のLajos Diosi教授による講演とウィーン大学のCaslav Brukner教授による講演は理論的な予言が異なっており、どのように検証されるべきかについても見解が異なっていた。そのため、純粋な理論的な提案にはとどまらず、実験技術を進展させるための理論についても議論があった。また、一方で量子情報科学により進展が加速された量子現象だけを浮かび上がらせるために振動基底状態まで冷却する技術に関しては、様々なスケールに関して進展が目覚ましく、光で「モノ」の振動を制御できる段階にきていると感じさせた。その上で奈良先端科学技術大学院大学の香月浩之准教授の講演にあったコヒーレント制御を自由自在に実現させることが次の技術的課題であろう。日本でも、神岡鉱山内に建設されている光干渉計型重力波検出器(KAGRA)で用いられてい

る技術がテーブルトップで行われている技術にも応用されており、その逆の場合もある。そのため、本会議の参加者は、分子研が得意としてきた分子振動分光の分野から同じ自然科学研究機構内の国立天文台も推進している重力波検出の分野まで多岐にわたり、分野としても勃興したばかりであることから、若い研究者を中心とした会議となった。

日本国内の研究者には好まれない時期の開催であったが、このような分野横断的な国際会議を開催したことにより、それぞれの分野に対するフィードバックがあったと期待する。そして、本会議を開催するに当たり、分子科学研究所、自然科学研究機構分野間若手連携プロジェクト、総合研究大学院大学学融合研究公募事業、大幸財団、科学研究費助成事業の財政的支援と、近藤直子氏、加茂恭子氏、加藤真悠子氏他の事務的支援に、この場を借りて深く感謝する。

(鹿野 豊 記)



## 04 アジア連携分子研研究会

## 「Supramolecular Dynamics at the Interface of Chemistry and Biology」

2015年6月12～13日に山手地区でアジア連携分子研研究会“Supramolecular Dynamics at the Interface of Chemistry and Biology”を開催しました。本研究会のキーワードは「超分子複合体の構造、機能、ダイナミクス、創造」です。タンパク質やDNAといった生体高分子、金属有機構造体、有機合成超分子、人工高分子ハイドロゲルやそれらのハイブリッド複合体の研究を推進している新進気鋭の若手が集まり講演と議論を行いました。アジアからは中国1名、韓国1名、台湾2名の計4名（当初予定は中国から2名の計5名でしたが、ビザが取れず直前に1名キャンセル）、日本国内からは15名の研究者を講演者として招き、議論と交流を深めました。講演者を含め、所内外から38名の方々にご参加頂きました。

本研究会では、超分子複合体を対象とする多彩な研究者を結集することに尽力しました。講演者の専門分野はタンパク質工学、合成化学、錯体化学、生物無機化学、生物物理学、計算科学、進化分子工学と多岐にわたり、研究対

象とする超分子複合体は天然分子から人工分子まで様々でした。また開発・利用している計測・解析手法もネイティブ質量分析、NMR、光学顕微鏡1分子観察・操作、高速AFM、分子動力学計算、非天然アミノ酸合成・導入、ファージディスプレイ、ナノマイクロ加工とバラエティに富んだ刺激的な研究会となりました。

二日間にわたるセッションでは、異分野の研究者間の密度の高い質疑応答が行われました。特に外国人招待講演者とは、将来的な国際共同研究やより発展的な国際交流を見据えた活発な議論が行われました（写真1）。内容の濃さだけでなく、異国の研究者が一堂に会したことによる独特の緊張感もあり、白熱しました。コーヒープレーク中も議論が続いていたのが印象的でした。さらに、オブザーバーとしてご参加頂いた増原宏先生（台湾国立交通大）、桑島邦博先生（東大）、菅原正先生（神奈川大）、加藤晃一先生（分子研）からも質問を多数いただき、研究会を大いに盛り上げて頂きました。

また、外国人招待講演者の方々に研究の議論だけでなく日本文化を楽しんで頂くため、一日目夜の懇親会は岡崎の老舗日本料理屋の座敷で行いました。後半は席に入り乱れて盛り上がり、外国人招待講演者だけでなく国内招待講演者、参加者の皆さんにも喜んで頂けたと自負しています（写真2）。二日目の研究会終了後は、外国人招待講演者の皆さんとオーガナイザー数名で打ち上げの夕食に行きました。打ち上げは人数が少なかったこともあり、ラボの学生が外国人招待講演者と積極的に議論していて感銘を受けました。今後もこのような国際交流の機会を積極的に設けていきたいと思えます。

最後になりますが、本研究会には新学術領域研究「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」からも協賛を頂きました。この場を借りてご支援にお礼申し上げます。

（飯野 亮太 記）



写真1 Seok-Cheol Hong 教授（高麗大学、韓国）による講演。



写真2 懇親会終了後の集合写真。



## 大きな卵と呼ばれていたドームの隣で



### 米満 賢治

(中央大学理工学部 教授)

よねみつ・けんじ / 1990年、東京大学大学院理学系研究科物理学専攻博士課程修了。同年、ロスアラモス国立研究所(米国)博士研究員。1993年、国際理論物理学センター(イタリア)博士研究員。1994年、ジョージア大学(米国)博士研究員。同年、東北大学大学院情報科学研究科助手。1995年、東北大学工学部助教授。1996年、分子科学研究所助教授(准教授)。2012年より中央大学理工学部教授。職場は東京駅から20分ほどの後樂園キャンパス。

今回の執筆依頼がきっかけで、分子研にいたことを思い出しました、というのは冗談ですが、そう思いたくなるほど当時とかけ離れた生活をしています。ほとんどすべての学年の異なる科目を担当していて、演習では多数の学生を相手に家庭教師状態なので、学生とのつながりは実に密です。物理学の基礎科目すべて、専門科目も数学も英語も質問を受けつけているので、たぶん頭がいつでも“使える”(ただし、研究とは関係ない)状態になっています。卒業研究生の配属決定前でなくても、期末試験や大学院入試の前に限らなくても、1日に5~6人来ることも珍しくありません。進路を含め、人生相談みたいなこともやっています。院試前の時期は、他大の(東大、東工大、筑波大などは毎年)過去問を解かされるので、まだまだ修士課程に入学できそうです。そういえば、まだ総研大の過去問をもってきた学生はいません。昨年は研究室配属の4年生のうち、東大に行った3名、京大に行った1名を含めて5名が進学、1名が教員採用試験に合格するなどして、全員外に出ました。当学科から他大への進学者はほとんど何らかの形で面倒をみたこととなります。このように質問に来てくれる学生はまだよくて(初年度は8年生まで、1回2~3時間と

いうこともありました)、あまり来ない学生にも気を使わなければなりません。学部生、卒業生、大学院生らの親との面談も、平均すると毎月のようにやっている勘定になります。岡崎ではほぼ毎週やっていたスポーツも、いまはまったく時間がとれず(研究室の若手はよくテニスをしています)、明らかに筋肉が落ちて、体重も減りました。

物理学科には独立した研究室が12室、つまり教授と准教授が12名おり、そのうち学部長、在外の人が抜けると、だいたい10名くらいでいろいろな仕事をまわしているの、係の回転が速いです。状況もよくわからないまま、2年目には副主任、3年目には広報委員として対外的に学部全体の説明をする羽目になり、4年目の今年は国際会議も国内の学会もフルに参加できず、いつも弾丸トラベル状態です。秘書は、知っている限り、学部長にしかついていないので、事務的なことも自分でこなします。通常、専攻長とか学科長あるいは教室主任と呼ばれる役になっても事情は変わらず、学部長と学科教員の間あるいは学科間の橋渡し役なので、連絡委員と呼ばれています。間違っただけはいけな緊張を強いられる作業は、もっぱら週末にやっています。などと、現実を再認識するようでは精神的によくない

ので、分子研出身で何が良かったか考えてみます。周りに化学や生命科学との境界領域の研究室があり、修士論文の審査会や発表会で、興味をもって聴くことができます。分子研出身者がほかにも物理学科、応用化学科、電気電子情報通信工学科にいて、それぞれ存在感があります。

大学院には学部から3分の1くらいが進学しています。学部生の必修科目としての数々の演習の採点や実験の補助、また、教員だけでこなせない業務などに大学院生の手が必要なので、持ちつ持たれつ?で、協力してやっています。着任前に私が想像していた研究テーマとは違うことをやっていますが、よいこともあります。実験などで学生や博士研究員が常識外れの行動をしたのがきっかけで大きな発見につながった、ということをとまどき耳にしますが、それに似たことも起きます。通常とは異なる状況とは認識せずに計算を行ってしまったためですが、それをうまく発展させられたら、大学にいて初めてできる良い体験ということになりそうです。

理工学部は後樂園キャンパスにあって、物理学会などが開かれた多摩キャンパスと違い、とてもロケーションがよいです。東大本郷キャンパスの近く

なので、各種の研究会、セミナー、国際会議に歩いて参加できます。また、東京駅から短時間で到達できるため、中大理工を訪問してくださる研究者がけっこういて、ほんとに助かっています。50年を越す古い建物で、夏の前に急に暑くなると部屋の扉があきにくくなるので、建物のひずみを実感できます。東京ドームのすぐ近くなので、人気アーティストのコンサートなどがあると、(穏やかな表現をすると) にぎやかです。計算機部屋の空調設備の整備などは、2年がかりの作業でした。受託研究による博士研究員というポジションがなかったのが、学内で新たにそのポジションを作りました。IMSフェロー

だった人を雇用し一緒に研究するにあたって、共同研究している先生方の強いサポートがあり、どうにか研究を続ける環境を維持できた、というのが実情です。運営費交付金やそれに該当するものがそもそも存在しないので、なんとかやりくりしていますが、いまのところ順調にやっている方だと思います。

実験研究者との共同研究を行っていますが、それには共同研究がやりやすかった分子研時代に構築したいろんなつながりが財産になっています。学外の用事も増えますが、研究者としてはプラスになっていると思います。分子研時代に始めた光誘起相転移に関連す

る研究が、国内外でかなり進んで、現在は新しい段階にきています。強い光で初めて起きる現象が次々に見つかり、分子研時代よりもさらに共同研究関係のメールや電話が多くなっています。ということは、研究もうまくいっているのかもしれませんが。そのきっかけとなった理論研究は、中大理工に来てからの博士研究員の仕事が起点となり、大学院生とのやりとりで発展し、この予算で購入した計算機で行ったことがメインです。もちろん、分子研時代に作った基盤があるからこそ、なのですが。はたしてこれらがもっと発展するか、(そもそも研究者として生き残れるか?) 見守っていただけたら幸いです。



## 人との出会いが財産



### 和田 亨

(立教大学理学部化学科 准教授)

わだ とおる / 1998年 学習院大学大学院自然科学研究科化学専攻博士前期課程修了。2001年 総合研究大学院大学大学院数物科学研究科構造分子科学専攻博士後期課程修了。博士(理学)。2001年分子科学研究所錯体化学実験施設錯体物性研究部門助手。総合研究大学院大学大学院物理科学研究科助手(併任)。2007年分子科学研究所生命・錯体分子科学研究領域錯体物性研究部門助教。2010年立教大学理学部化学科准教授(現職)。

私は1998年4月に総研大の博士後期課程に進学し、分子科学研究所での研究を開始しました。都内の私学で博士前期課程を過ごしたので、近くの国立大学へ進学するという選択肢もあったのですが、田中晃二先生(現:京都大学iCeMS特任教授)の「誰もやっていないことに挑戦する」という言葉に魅かれ、総研大へ進学することに迷いはありませんでした。

当時、田中グループには助手の柘

植清志さん(現:富山大学教授)やボスドクの杉本秀樹さん(現:大阪大学准教授)が在籍され、共同研究として永田央先生(現:名城大教授)も同じ研究室で実験されていました。博士前期まで有機化学を専門にしていた私に、文字通り一から丁寧に錯体化学をご指導いただきました。酸化還元活性なキノン配位子を有する二核ルテニウム錯体による電気化学的な酸化反応について研究を行っていましたが、試行

錯誤の末に何とか目的とする錯体の合成に成功しました。ところが、目指していた水中での有機基質の電解酸化反応はほとんど進行せず、酸素ばかりが発生してしまいます。落胆しつつ田中先生に「酸素しか出ません(涙)」と報告すると「やったやないか!!」(注:関西弁です)と、喜んでいらっしゃいます。正直なところ「?」だったのですが、よくよく勉強してみると水の四電子酸化による酸素発生は、エネルギー変換

において非常に重要で、当時はこれを触媒する錯体は二つくらいしかなかったのです。現在でもこの研究が私のメインテーマになっています。田中先生とのディスカッションはいつも刺激的で、研究の種を惜しみなく我々に授けていただきました。今も田中先生の教えは私の支えとなっています。時には、当時の私の理解力を超えることもありましたが、そんなときは理論派の柘植さんに解説していただき納得したものです。

当時の錯体化学実験施設には田中先生の他に、塩谷光彦先生（現：東京大学教授）、藤田誠先生（現：東京大学教授）の研究室があり、研究室の垣根を越えて交流（飲み会）していました。学生は日本全国から集まってきており、よく地方ネタで盛り上がったものです。ソフトボール大会では先生方もご一緒にチームを組んで参加しました。「キャプテン翼」世代の我々学生よりも、「王・長嶋」「巨人の星」世代の先生の方がお上手でした。

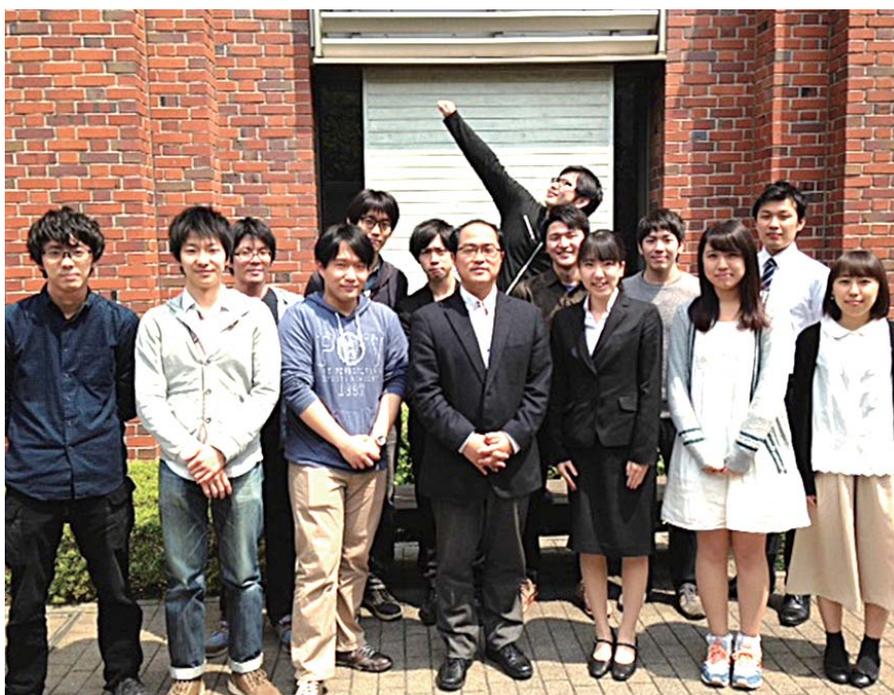
2001年に21世紀最初のドクターとして博士後期課程修了後、幸運にも助教にご採用いただき、分子研で研究を続けさせていただきました。一時期、田中グループには私と同年代のポストドクが6名ほど在籍していて、良いライバル意識をもって充実した研究が出来ました。それぞれが得意とすることが異なり、一つの研究室にしながら「こういう研究の進め方もあるのか」と刺激に満ちた毎日でした。途中、山手地区への引っ越しも経験し、研究室の設計や引っ越しの段取りなど良い経験をしました。疲労も相当なもので、私はアルコール耐性が強い方なのですが、魚住先生の研究室で引越祝いの飲み会をしたときに、人生ではじめて記憶を無くしました。

また田中先生が錯体化学会の事務局長、会長を歴任されたこともあり、分子研には錯体化学関係の先生が多数お見えになりました。その際に私の存在も認識していただいたことは、大変に幸運なことでした。

12年にわたる分子研生活を終え、2010年に立教大学に赴任しました。私自身が私立大学出身なので、私大の学生の気質は分かっていたつもりだったのですが、当初のイメージとは異なることも多かったです。池袋キャンパスはお洒落な学生さんが沢山いる華やかな印象です。しかし研究に関しては、まじめで地味、コツコツと実験する方が性に合う学生が多いようです。その反面、失敗を恐れ、「答え」を求める傾向が強いように感じています。もしかしたら、うちの大学だけではなく、最近の学生さんに共通する性質なのかもしれません。失敗を恐れずにチャレンジすること、その失敗から情報を得るために全力で観察することを指導しています。研究だけに没頭できた分子研時代と環境はがらりと変わり、研究・

教育以外の仕事にも忙殺されることが多いのですが、学生の成長を目の当たりに出来ることは何よりも幸せです。また、私の出身の学習院大学は歩いていける距離にあり、恩師の持田邦夫先生との共同研究も開始しました。分子研田中グループで一緒だった宮里裕二さん（東京電機大学）とも研究を進めています。近隣には分子研時代にお世話になった錯体化学の先生も多数おられ、ときおり交流（飲み会）をさせていただいています。ここでも、分子研での出会いが自分を支えてくれていることを実感します。

今回分子研レターズへの寄稿をご依頼いただき、あらためて振り返ると、博士後期課程に分子研（総研大）に進学できたこと、これが私の人生のターニングポイントであったと言っても過言ではありません。いまは、学生の成長を楽しみながら、「立教大学ならではの研究ができるように精進しています。私学だからこそ出来る、思い切ったことにチャレンジしていきたいと思っています。





## アト秒科学の発展と今後の展開



### 新倉 弘倫

(早稲田大学先進理工学部 教授)

にいくら・ひろみち／

2000年 総合研究大学院大学 数物科学研究科 構造分子科学専攻修了 博士(理学)

2000年~2009年 カナダ国立研究機構 博士研究員・JST さきがけ研究員等

2010年 早稲田大学先進理工学部 准教授

2015年 同 教授 現在に至る

現在、都内の大学でアト秒時間領域の実験的研究を行っています。分子研では、総研大生として極端紫外光科学研究系で「UVSOR アンジュレーター光とレーザー光を併用した」原子分子のイオン化についての研究を行いました。光イオン化や光解離過程は、数十フェムト秒からアト秒時間領域で生じるのですが、その過程においてどのように電子状態が変化していくのか。それを測定するための一歩ではあったと思いますが、ともあれ異なるタイプの光源を組み合わせ、限られたマシンタイムの中でこのような研究を行うのは、なかなか困難でした。

そんな折、たまたま分子研で行われたセミナーでカナダ国立研究機構(National Research Council, NRC)の研究者の講演を聞き、さらに「世の中には高次高調波というレーザーで極端紫外光を発生できるシロモノがある」と知り、なるほどこれやと思いました。そこで学位を取得する時期の少し前から、今まで会ったこともない海外のレーザー系の研究者に直接手紙を書き、ポストドクとして雇ってもらえないかを伺いました。そのとき返ってきた返事のひとつがNRCのPaul Corkum先生のところでした。

そして2月のまだ寒い中、面接のた

めにまだ凍てつくオタワまで出かけました。夜中の12時頃にまっくらな街にたどりついたことを覚えています。運よく採用していただけることになり、7月ごろからオタワに出かけました。冬の間は全面凍っていた川幅500mのオタワ川が満々と水をたたえていたのが印象的でした。

オタワの研究室は、当時は実験系のポストドクが私とインド人(すこし遅れてほかの日本人の方が加わりました)だけでしたが、実験室には大きな光学台がならび、スタッフもPaulだけでなくDavid Villeneuve先生やほかに数名の方がおられ、ゆとりがあったように思います。

2000年当時はまだ、アト秒という時代ではなく「アト秒領域にも入れるという予測があるが、いつごろになるのか」と他のポストドクと話していたのを覚えています。そうこうするうちに、EUでアト秒パルス列のパルス幅の測定に成功したとの報が入ってきました(2001年)。そして、そのときにちょうど私が行っていました実験が「EUとは別の方法論を用いた」アト秒測定につながるものであるとわかり、2002年にNature誌に論文を発表しました。簡単には「高強度のレーザーパルス原子や分子に照射すると、トンネルイオ

ン化過程によりアト秒のパルス幅を持つ電子パルスが生じる。その電子パルスと元の分子との再衝突により、励起や高次高調波発生過程などがおこるが、その過程を調べることで、アト秒の時間分解能でもとの分子の振動や電子状態ダイナミクスがわかる」という原理です。この原理を用いてさっそく、2003年には、重水素分子の振動波束運動をアト秒の時間精度で測定することに成功しました。これらの初期研究は、フェムト秒からアト秒時代への扉をひらいたものとして(EUなどの研究とともに)認識されています。

当時、アト秒ダイナミクス以外にも高強度の数フェムト秒レーザーパルスを複数用いた、ポンププローブと制御の実験も行っていました。そこである原理を見出したので、それを発展させたらどうかとPaulに話したところ、「まだ原子や分子内のアト秒電子運動を測定するための方法論がはっきりしない。それを考えたらどうか」とのこと。そこで、量子力学的計算を用いているところへ行ったら、「原子分子から発生した高次高調波のスペクトル強度(位相・偏光)に、アト秒時間精度で電子波束運動が記載される」という原理を見つけました(2004、2005)。これは電子波束だけではなく、振動運動など双極

子モーメントの変化を伴う過程にも適用できます。この原理を用いた研究は、高次高調波スペクトルから分子軌道が再構成できるという方法（2004）とともに「High-harmonic spectroscopy（高次高調波分光）」としてアト秒領域の研究の一分野を築いており、化学反応動力学の研究などにも用いられています。

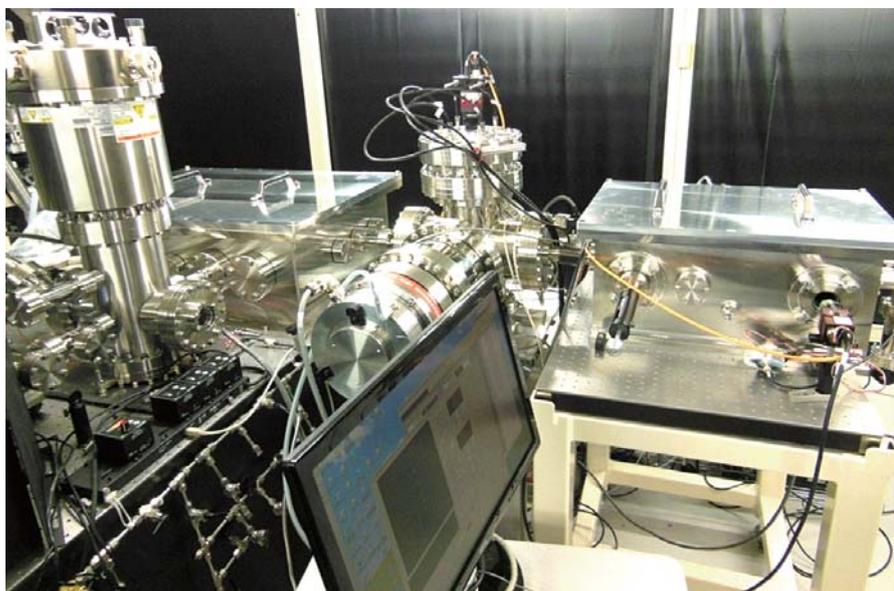
NRCに行きました当初は、カナダ政府からお金をいただいていたが、数年後から科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業さきがけのお世話になりました。実は「さきがけ」なるものがあるということは、以前所内におられたS先生に教えていただいたものです。

その後、高強度で赤外光のキャリアエンベロープ位相（CEP）を安定化させて極端紫外領域の単一アト秒パルスを発生すること（これは初め、まったく安定化せずに苦労しました）や、アト秒精度で再衝突電子の動きを制御し、発生した高次高調波の偏光分布から分子軌道の対称性（2010）や、アト秒での分子内電子運動が同定できる（2011）ということを見出しました。現在では、

6mJ/pulse程度のCEP安定化レーザーを用いて極端紫外領域のアト秒単一パルスやパルス列を発生し、それと高精度・高安定で赤外パルスなどを組み合わせ光電子運動量分布を測定するなど（とても興味深い結果を得ました）、アト秒関連の実験を引き続き行っています。今後の目標として、アト秒高次高調波やアト秒再衝突電子法などを発展させ、化学反応途中における分子軌道（電子波動関数）の空間分布・位相分布の変化を直接測定することや、In vivoでのバイオイメーjing法などへの適用を考えています。

21世紀初頭に始まったアト秒科学の発展を間近で見えてきましたが、重要なことは「いまだ明らかになっていない（まだ見えない）物理的なモデルや描像を見えるものに確立していく」という能力と方法論だと思います。実際、アト秒科学も実験結果そのものよりも、そこから「どのような新規な情報を得るための方法論を見出すのか」ということの方が重要に思えます。その点、カナダやEUの研究者は優れているように思います。従来の測定方法や、

誰かが提唱した「データから情報を引き出すためのモデル・方法」をそのまま使っていたのでは新しいことは生まれず、いわば「川下」に位置するサイエンスになってしまいます。アト秒科学は現在、原子分子光学の基礎的な原理の開発を基にしながら（むしろそれと直結して）、今後のハイテク産業の基盤技術として、幅広くマテリアルやバイオ系にも大きく発展しつつあります。カナダやEUはそのことに前から気づいて重点的な投資を行っていましたが、最近では新興国にも大きく広がっているようです。どのように新しいサイエンスを行っていくのかという「考え方・ものの見方の転換」については、私個人的には、NRCなど海外の優れた研究者に学ぶところがまだまだ多いように思います。すでにzepto秒という単位まで、実験の論文には出てくるようになっており、今後とも頑張らなければと思っております。よろしく願い申し上げます。



アト秒高次高調波光学系と測定系



## 細野秀雄教授の恩賜賞・学士院賞受賞を祝して

東京工業大学の細野秀雄先生が学士院賞ならび恩賜賞を受賞されました。細野先生は1995年から1997年までの2年間、分子科学研究所に助教授として在籍されていました。現在、JSTさがけ「新物質科学と元素戦略」の研究総括も勤めており、私の研究のアドバイザーの一人であります。さがけ細野領域の門下生の一人として、先生の受賞を大変うれしく思います。

今回の受賞題目は「無機電子機能物質の創製と応用に関する研究」であり、細野先生がこれまでに取り組んでこられた透明酸化物半導体の分野開拓、鉄系高温超伝導体の発見、安定な無機電子化物の創製に関する研究が評価されての受賞とのことでした。これまでの常識を覆したこれらの研究成果が学術的に極めて優れているのはもちろんのことですが、同時に全ての成果を基礎から応用へと発展させ、実用化や新たな研究分野の創成に繋がられたことは何よりも特筆すべきことだと思います。実際に、先生が開発された透明酸化物半導体はディスプレイ用のTFTに用い

られ、巨大な市場を生み出しています。

細野先生は我々若手研究者と研究の話をするのがお好きで、研究着想の経緯や新物質や新物性発見の際のエピソードを話してくれます。その中でも特に私の印象に残っているのは、細野先生が透明アモルファス酸化物半導体を初めてアモルファス半導体の国際会議（1995年8月神戸）で発表された時のお話です。当時はアモルファスシリコンが半導体研究の対象として全盛だったこともあり、数ある講演の中でアモルファス酸化物に関する講演は細野先生の1件だけだったそうです。とあるアモルファスシリコンの専門家からは「ガラス屋の来る所ではない」との指摘を受け、悔しい思いをされたとおっしゃっていました。その後、奮起されて実際にアモルファスシリコンTFTの10倍以上の電子移動度が得られる透明アモルファス酸化物TFTを生み出し、今では酸化物半導体が主流になっています。私は半導体の常識を覆したという事実以上に、誰



今年の6月にアメリカのキーストンで行われた20<sup>th</sup> International Conference on Solid State Ionicsにて。

からも興味を持たれなかった段階から酸化物半導体の可能性を信じ、分野を切り開いていかれたことに、細野先生の強い精神力とオリジナリティに対する堅い信念を感じました。誰しも多かれ少なかれ注目されている旬の研究には興味が湧くものですが、敢えて分野の境界や端に着眼してオリジナリティを確立していく先生の研究姿勢こそが革新的な研究成果を生み出す原動力になっているのではないかと思います。

細野先生のご研究の益々のご発展を弟子として願っております。

(小林 玄器 記)



## 森健彦教授に第32回日本化学会学術賞

このたび「有機伝導体の電子状態の系統性の研究とその特異な物性の開拓」という研究題目で、日本化学会から第32回学術賞を受賞致しました。「電子状態の系統性の研究」は何やら理論っぽい香りがしますが、「特異な物性の開拓」に関する実験的研究は、かなりの部分が1984年から1994年までの分子

研時代に起源をもつものです。お世話になりました方々に心からお礼を申し上げます。

当時の分子研には全国の大学から来た学生が居ましたし、理論物理から実験物理、スペクトロスコピーはもちろん物性化学から構造化学、錯体化学や合成化学まで、幅広い人間が研究して



いた印象があります。私自身もそうした人達との交流を通して、随分自分の研究の幅を広げられたように思います。そのすぐ前の時代には、実験設備の面でなかなか日本全体が世界レベルになれなかった時代もあったように思いますが、分子研のような先端的研究所の貢献もあって、私たちの世代は確かに世界のトップレベルとは何かということを実感することができました。大きな発展はたいてい分野間の融合によって起こると誰もが思っていたが、そうした意味でも狭い学科の枠に閉じこもってはダメで、研究所の果た

した役割は大きかったと思います。

日本の科学が成熟期を迎えた今となっては、やや逆説的ですが「いい研究をするのに必ずしもトップレベルの実験装置がなくてもできる」という発想があってもいいように思いますし、「世界の趨勢を追わなくてもローカルに徹することで独創的な研究をする」というアプローチがあってもいいような気が致します。通常のレベルの装置はどこにでもありますし、世界の趨勢は誰もが追っていますので。

気が付いてみたら私自身は「化学」の外で活動する部分がかかなり大きく

なっていましたし、周りにも「化学」の人はあまり居ません。しかし、例えば有機エレクトロニクス分野では、化学出身者が非常に多数活躍しているのも事実です。そうした人間をたくさん育ててくれたという面でも分子研の役割は大きかったという点を指摘して、皆様に感謝の念をお伝えしたいと思います。

森 健彦 (もり・たけひこ)

1982年東京大学大学院修士課程修了、分子科学研究所助手、東京工業大学助教授を経て、東京工業大学教授。

## アウトリーチ活動

### 第104回、第105回分子科学フォーラムを終えて

2015年3月18日、第104回フォーラムの講師として福和伸夫先生（名古屋大学）をお迎えし、「総力と本気で地震を克服する」というタイトルでご講演頂きました。福和先生は会場である岡崎コンファレンスセンター内を直前に見てまわられたようで（主催者側の全く把握していないところで…）、地震による転倒対策を再考すべき箇所を写真付きで紹介されるなど、先生のお人柄が表れた素晴らしいご講演でした。「地名」がその場所における生活、地勢、そして歴史を反映しており、そこから地盤の性質を見定めることができるというお話しへと展開され、住環境についても改めて考えさせられる機会となりました。

2015年5月14日、第105回のフォーラムでは、吉田淳一先生（千歳科学技術大学）に「野菜がおいしくビタミンも増加 — LEDが拓く近未来の植物工場」というタイトルでご講演頂きました。LED照明を用いた植物の育成は、栄養素の含量が増す傾向にあること、白色光に比べてエネルギー消費量が抑えられる可能性があること、また天候不順による影響を最小限に抑えることができるという点で魅力的に感じました。吉田先生は今後の課題として、LED照明で栽培できる野菜の種類が限られている点、品質（健全かつ美味しく）とコストのバランスをとるのが難しい点などを挙げておられました。



LED照明で栽培された野菜を提供するレストランも徐々に増えつつあるようですので、私たちの口に入る日もそう遠くないのではないのでしょうか（すでに入っている？）。

第104回、第105回どちらのフォーラムも大変盛況で、講演終了後には会場から質問やコメントが多数寄せられました。第106回、第107回のフォーラムは分子研一般公開（2015年10月17日開催予定）の特別講演として企画しており、JAXAの國中先生、UVSORの繁政先生にご講演をお願いしております。皆さまのご来場をお待ちしています。

(秋山 修志 記)

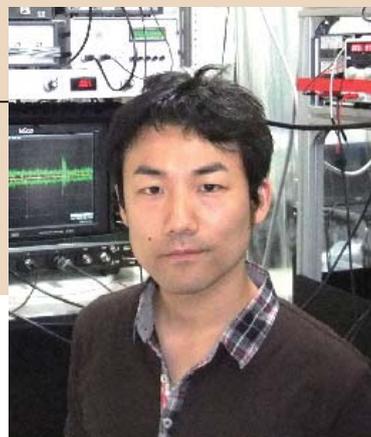


## 分子研を去るにあたり

**水瀬 賢太** 東京工業大学大学院 理工学研究科化学専攻 助教  
(前 光分子科学研究領域 助教)

## 「出所」にあたり

みずせ・けんた / 2006年東北大学理学部化学科卒、2011年東北大学大学院理学研究科博士課程修了、博士(理学)。2011年4月分子科学研究所 光分子科学研究領域大島G助教、2015年3月より現職。



2011年4月、日本中が震災でバタついているなか、分子研に着任し、以来3年11か月の間、楽しく苦しい分子研生活を満喫しました。光分子科学の皆さん、秘書の稲垣さん、装置を融通いただいたUVSORの皆様、転出の日まで無理を聞いてくださった装置開発室の皆様をはじめ、お世話になったすべての皆様に感謝いたします。

さて、「楽しく苦しい」と表現した分子研での生活を包み隠さず振り返ってみますと、私の着任時点で、前任者の退職後の数か月間放置され、動作が不穏になった装置群や、教授の着任時に大量購入した装置のメンテナンス警告やエラーの嵐を前に、分子研の研究者の流動性の弱点や、2代目以降の助教の苦勞を痛感したものです。そのような苦勞(今思えば些細な苦勞)や、春には多くの節足動物が出入りし、梅雨時期には湿度90%を超えた地下実験室環境との格闘、「分子研は潤沢な資金があるのだから結果出せ」との他方からの世論も、研究者としての成長の糧にできたと考えております。

私にとって幸いだったことは、分子研には実験系研究者にとって最大の武器である装置開発室があったことです。

私の出身大学には分子研出身者や装置開発室のヘビーユーザーが多かったため、噂には聞いていましたが、実際に分子研に着任し、困った装置のトラブルシューティングから、思い描いた装置の設計製作、研究室の愚痴まで引き受けていただけるような厚いサポートのおかげで、どうにか研究を進めることができましたと思っています。水谷さんに「こんな部品思いつきました！できますか？」と相談にあがり、室員の方の時間とモチベーションが合えば、素晴らしいクオリティの製作品が1日かそこらで入手できます。分子研で発表したすべての論文・学会発表は、すべてMade in 分子研の装置で行い、装置設計を出しただけで招待講演の依頼をいただくこともあったことは、私にとって一つの誇りになっています。

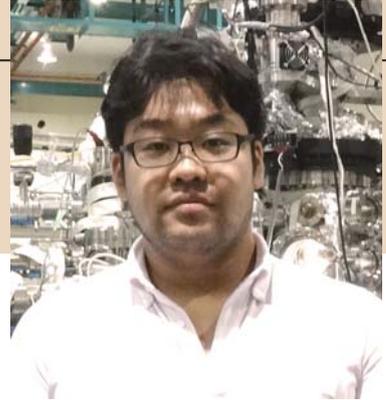
現在、東工大という、どうしても愚痴が出ざるをえない職場にありますが、優秀な学生がいることも事実であり、上司ともども、学生の力をのばせる授業を目指して準備に励んでおります。研究面では、分子研在任時に揃えた装置を大学の限られたスペースに配置するため、実験室設計からはじめる必要がありましたが、今、夏休み前の

時点で卒論学生用の1セットが立ち上がったところ(あと2.5セット)。今後は、異動前に間に合わせて作っていただいた装置の数々も用いて、これまでの分子研での研究を真の意味で発展(≠ただの延長)させ、分子科学に寄与していきます(公約)。今後ともよろしく願いいたします。

追記：分子研からの引越についての苦勞話は資源研の酒井准教授が執筆されていまして、我々の引越風景を大島研HPに掲載するにとどめました。ご興味ありましたら検索ください。

**許斐 太郎** 高エネルギー加速器研究機構 加速器施設 第6系 特別助教  
(前 極端紫外光研究施設 助教)

## 分子研を去るにあたり



このみ・たろう／

2009年 名古屋大学 理学部 物理学科 卒業

2012年 総合研究大学院大学 高エネルギー加速器科学研究科 卒業 博士(理学)

2012年4月より分子科学研究所助教

2015年4月より現職

3年間の分子科学研究所UVSORでの研究生生活を終え、本年4月より高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設に異動しました。分子研在任中は加藤政博教授をはじめ、UVSORの皆様、装置開発室の皆様、機器センターの皆様大変お世話になりました。この場をお借りしてお礼を申し上げます。

今年の3月から高エネルギー加速器研究機構で実験を開始したため、あわ

ただしい異動となり、関係者の皆様には大変ご迷惑をおかけしてしまい申し訳ありませんでした。7月に実験棟の装置類の引っ越しを行い、ようやく一段落つきました。UVSORの素晴らしさは、研究分野の異なる人が大勢集まる施設であり、他の研究を知ることのできる良い場所であることに尽きます。UVSOR恒例の施設前でのバーベキューパーティは、施設から研究系まで、そ

の時節に応じた諸外国の研究者から学生まで、幅広い人々の社交場となっており、UVSORならではの素晴らしい文化だと思います。

高エネ研ではエネルギー回収型次世代放射光源の研究開発をメインテーマとして行っています。この加速器開発ではUVSORで経験したことを大きな糧にしていきます。

**嘉治 寿彦** 東京農工大学大学院工学研究院先端物理工学研究部門 准教授  
(前 物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 助教)

## 分子研を去るにあたり



かじ・としひこ／2002年東京大学理学部卒、2007年東京大学理学系研究科博士課程修了(博士(理学))、東北大学金属材料研究所産学官連携研究員を経て2008年9月より分子科学研究所助教、2014年12月より現職

分子研には、2008年9月の赴任以来、6年3ヵ月の間お世話になりました。思い返すとその間、平本先生をはじめ、分子研の方々、今は他所で活躍されているの方々、本当に多くの方々にお世話になりました。分子研を去るにあたり、決定から1か月と少しで異動したため、多くの方にご挨拶できなかったのが心残りです。改めて深く御礼申し上げます。

岡崎では公私ともに様々なことがありました。分子研に赴任したのは大雨の直後で、本当に引っ越せるのか東北大の人達から心配されたのを覚えています。大雨以外は、大学の同期の長坂君がいて、学部生の時に学生実験でお世話になった横山先生もいらっしゃるから不安は少なかったように思います。

最初は一人暮らしでしたが、その分研究時間はふんだんにあり、また、山手のハッピーアワーやUVSORのバーベキュー、様々な交流会に誘っていただき、研究所内外で多くの人達と飲み歩いたのを懐かしく思います。そのうち私も結婚し2人の子宝に恵まれ、同年代の人達も結婚したり、子供ができたりして、飲み会への参加自体は減っ

ていきましたけれども、今度はまた別の、家庭という共通の話題もできました。

研究においてはやはり、学部生時代から将来研究しようと心に決めていた有機薄膜太陽電池の研究を、そのパイオニアである平本先生のもとでできたこと、また、総研大のご支援により、もう一人のパイオニアであるC. W. Tang先生のもとへ派遣いただいたことは、どちらも他に代えることのできない大切な経験です。

現在、東京農工大学の物理システム工学科で、テニュアトラックの准教授

として研究室を立ち上げ中です。異動が決まってから、異動先の農工大の小金井キャンパスが、高校1年生の夏休みに体験入学で初めて大学の研究に接した場所であることを思い出し、不思議な縁を感じました。

時が経つのは早く、研究室の立ち上げに、初めての授業に、と取り組むうちに、4年生が4人配属され、週一コマ授業もするようになり、昨年11月に岡崎を離れた時にはまだ歩き始めたばかりだった1歳の息子も、もう、うさいくらいに走り回るようになり、言葉

も覚え、3歳の娘はもう私や妻の冗談をたしなめる程になりました。

そんな、どんどん過ぎる時に置いていかれぬよう、自らを省みる毎日ですが、学生が自分を踏み越えて大きく巣立っていきけるような、それでいてより大きな研究成果を得られるような研究室を作っていきたいと思います。その中で分子研や、分子研で出会った人達とまた、関わらせていただくことができたら本当に嬉しいです。今後ともどうぞよろしく願いいたします。



## 外国人研究者の紹介

### Prof. Hyung J. Kim from Korea

この分子研レターズが出るころには、Carnegie Mellon 大学化学科のHyung J. Kim教授が今年度2人目の客員教授として理論・計算領域に滞在予定である。Kim教授は韓国で修士課程を修了した後、液体論で著名なStony Brook大学のFriedman教授の下で学位をとり、Colorado大学のHynes教授のグループでのポスドクを経て、1992年からCarnegie Mellon 大学で研究を進めている。

Kim教授は、均一および不均一環境での溶媒和ダイナミクスや誘電緩和など化学反応や、それに関連する現象の理論研究を行っている。理論モデルとab initio計算、およびシミュレーションを用い、極性溶媒やイオン液体中の反応過程の自由エネルギーやダイナミクスの解析を行っており、イオン液体における超高速溶媒和ダイナミクスや誘電性質の温度依存性などについて研究を進めている。これら以外にも、界面、

制限空間、バルクの異なる環境下のイオン液体での化学反応、緩和過程、輸送現象などの現象の理論研究を行っている。さらに、イオン液体の応用としてのエネルギー貯蔵・変換などに関する研究も行っている。これらの研究により、2013年には韓国科学技術学術会議のFrontier Research Scientistにも選出されている。

Kim教授は家族思いの良い父親であり、旅行を趣味としているとのこと。分子研滞在中にはご夫妻で日本各地を訪問し、日本の様々な文化にも触れたいとのことである。Kim教授をお見かけすることがあれば、気軽に声をかけてあげてください。

(斉藤 真司 記)





NEW STAFF

## 新人自己紹介

2015年1月1日着任

## 中村 彰彦

なかむら・あきひこ

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 助教

東京大学農学生命科学研究科で学位を取得し、2015年1月1日付けて着任しました。一分子観察技術と生化学解析及びX線・中性子結晶構造解析を組み合わせ、酵素の反応、動作メカニズムの解明を行います。

よろしくお願ひ致します。

2015年1月1日着任

## YANG, Tao

理論・計算分子科学研究領域  
計算分子科学研究部門 IMSフェロー

I received my PhD degree from Xi'an Jiaotong University under the supervision of Prof. Xiang Zhao in 2014, where I studied on physical and chemical properties of carbon nanomaterials including fullerenes and carbon nanotubes with quantum chemical methods. After completing my PhD, I joined IMS as a postdoctoral fellow in the group of Prof. Masahiro Ehara. My present research concerns on the reaction mechanisms and regioselectivities of homogeneously and heterogeneously metal-catalyzed reactions.

2015年3月1日着任

## 本村 寛恵

もとむら・ひろえ

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

2015年3月より古谷研究室に勤務しております。一般公開で度々訪れていた研究室に、ご縁があって勤務することになりました。新しい分野の仕事で難しいことも多いですが、先生方と研究室の方々のお力添えに感謝して、日々、努力していけたらと思います。

どうぞよろしくお願ひ致します。

2015年4月1日着任

## 井村 考平

いむら・こうへい

光分子科学研究領域  
光分子科学第四部門 客員教授

本年4月より光分子科学研究領域の客員教授を拝命しました。分子研には、2001年から8年間、岡本裕巳先生のグループで助手・助教としてお世話になりました。その後、早稲田大学化学・生命化学科に異動し、ナノ分光顕微鏡の開発と素励起の動的制御に関する研究を行っています。分子研には恵まれた研究環境があります。岡崎は東京から日帰り圏内です。この機会に分子研の先生方また職員の方々と連携を深めて光分子科学研究の発展に繋がりたいと思います。よろしくお願ひいたします。

2015年4月1日着任

## 山田 豊和

やまだ・とよかず

光分子科学研究領域  
光分子科学第四研究部門 客員准教授

本年4月に着任いたしました。オランダ・ラドボウド大学でのPh.D学生時代よりSTMを用いて1個の分子・原子を相手に格闘してきました。学習院、ドイツと渡り歩き2010年より千葉大に研究室を構えております。有機分子2次元ネットワーク上の新たな磁性配列の電子スピン構造に興味があります。光電子分光とSTMを融合させて研究を展開していきたいと考えております。

よろしくお願ひします。

2015年4月1日着任

## 平原 徹

ひらはら・とおる

光分子科学研究領域  
光分子科学第四研究部門 客員准教授

2015年4月より、客員准教授を務めさせていただいております。2006年12月に東京大学の博士課程を中退し2007年1月に東京大学の助教になり、2014年6月より東京工業大学に在籍しております。専門は表面物理学、新奇薄膜・ナノ物質作成で、分子研には助教時代よりUVSORのユーザーとしてお世話になっております。UVSORの発展に微力ながら尽力いたしますのでよろしくお願ひします。

2015年4月1日着任

## 上羽 貴大

うえば・たかひろ

光分子科学研究領域  
光分子科学第三研究部門 助教



大阪大学で学位取得ののち、2015年4月1日より解良グループに着任しました。これまでは、フェムト秒レーザーによる光電子分光を用いて、有機半導体と無機基板の界面における電子状態と電子励起過程を研究してきました。放射光とレーザーを駆使して面白い研究に取り組みたいと考えています。趣味はウクレレです。

2015年4月1日着任

## 泉 関 督 人

いずみせき・あつと

生命・錯体分子科学研究領域  
錯体触媒研究部門 助教



千葉大学にて学位取得後、名古屋大学博士研究員、中部大学博士研究員、中部大学助教を経て、2015年4月より榎山グループの助教に着任いたしました。新規機能性有機触媒の開発および反応開発に取り組んでいきます。

よろしくお願いたします。

2015年4月1日着任

## 古池 美彦

ふるいけ・よしひこ

協奏分子システム研究センター  
階層分子システム解析研究部門 助教



大阪市立大学後期博士課程（単位取得退学）および学術振興会特別研究員DC2を経て、2015年4月1日付けで協奏分子システム研究センター秋山グループの助教に着任いたしました。これまでタンパク質結晶相における酵素反応の動的可視化の研究に従事しておりました。現在は時計タンパク質 Kai システムの機構解明に挑戦しております。多くの皆様方に支えられて研究ができるということを忘れずに日々努めて参ります。どうぞよろしくお願いたします。

2015年4月1日着任

## 出田 真一郎

いでた・しんいちろう

極端紫外光研究施設  
光物性測定器開発研究部門 助教



東京大学にて学位取得後、日本学術振興会特別研究員、及びマックスプランク研究所（ドイツ・ハンブルク）客員研究員、東京理科大学助教を経て、2015年4月より現職に着任いたしました。強相関電子系物質の機構解明をテーマに、スピン・角度分解光電子分光や時間分解電子線回折などを駆使して、超伝導やトポロジカル絶縁体などの魅力的な物性の機構解明に挑戦いたします。

宜しくお願いたします。

2015年4月1日着任

## WANG, Weiwei

理論・計算分子科学研究領域  
計算分子科学研究部門 研究員



I received my Ph.D from Xi'an Jiaotong University in China (2012), where I worked on physicochemical characteristics of nanocarbon materials. Then I worked as a researcher in Fukui Institute of Fundamental Chemistry of Kyoto University from 2013 to 2015. From April 2015 I joined the group of Prof. Ehara in IMS. Now I am working on reaction mechanisms of photooxidation reactions on metal oxides nanoclusters.

2015年4月1日着任

## 甲 田 信 一

こうだ・しんいち

理論・計算分子科学研究領域  
理論分子科学第一研究部門 研究員



2015年3月に東京大学で学位を取得した後、4月より齊藤グループに博士研究員として着任いたしました。これまで分子のダイナミクスに関する各種の階層をつなぐ理論的枠組みの開発を進めてきました。今後は生体分子の機能発現における構造揺らぎの役割を明らかにしていきたいと考えています。どうぞよろしくお願いたします。



NEW STAFF

## 新人自己紹介

2015年4月1日着任

## 平田 修一

ひらた・しゅういち

生命・錯体分子科学研究領域  
錯体触媒研究部門 研究員

大阪大学で学位取得後、同大学産業科学研究所にて博士研究員を経て、2015年4月より魚住グループの研究員としてお世話になっております。これまでは、有機分子触媒用いるドミノ型反応の開発研究に従事しておりました。現在は、ナノ金属触媒に関する研究に取り組んでいます。

どうぞよろしくお願いたします。

2015年4月1日着任

## 黒井 邦巧

くろい・くにさと

理生命・錯体分子科学研究領域  
生体分子情報研究部門 IMSフェロー

2015年3月に京都大学で学位を取得した後、分子研古谷グループに研究員として着任いたしました。これまでは過渡回折格子法と圧力条件を組み合わせ、光受容タンパク質の構造揺らぎを時間分解検出する研究を行ってきました。現在は少しテーマを変えて、ロドプシンなどの膜タンパク質の時間分解赤外分光計測を温度や圧力条件を変えながら行っています。どうぞ宜しくお願いいたします。

2015年4月1日着任

## YAHIA, Vincent

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 my Ph.D. degree in 2014 from Ecole Polytechnique, France. My research was focused on laser-plasma interaction for laser-driven fusion. After having worked as a laser user, I moved to the perspective of laser developers by joining Professor Taira's group at IMS last april. My task is to develop energetic tunable microchip lasers in a compact design, offering various application possibilities ranging from basic science with THz-wave generation to applied studies such as laser peening.

2015年4月1日着任

## 中村 永研

なかむら・えいけん

技術課 光技術班 班長  
極端紫外光研究施設 技術職員

本年4月より、再び分子研にお世話になっております。心機一転、新人として（少し歳を重ねていますが）、少しでも皆様のお役に立てるよう、ご教示賜りながら、努めてまいります。

どうぞよろしくお願いたします。

2015年4月16日着任

## 山本 真由子

やまもと・まゆこ

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

2015年4月16日から飯野先生のもとで、技術支援員としてお世話になっております。以前も分子生物学の分野でテクニシャンをしており、出産後、1年ぶりの社会復帰です。まだまだ、不慣れでご指導を乞うばかりの日々ですが、少しでも早く皆様のお役に立てるよう努めて参ります。

どうぞ、宜しくお願い致します。

2015年5月1日着任

## 藤波 武

ふじなみ・たけし

生命・錯体分子科学研究領域  
錯体触媒研究部門 研究員

熊本大学大学院自然科学研究科で学位取得後、同大学で日本学術振興会特別研究員を経て、2015年5月1日付で榎山グループの博士研究員として着任いたしました。これまで、スピנקロスオーバー錯体や単分子磁石といった分子磁性体に関する研究を行っていました。現在は不斉分子触媒の開発を行っています。

どうぞ宜しくお願い申し上げます。

2015年5月1日着任

## ROY, David

生命・錯体分子科学研究領域  
錯体触媒研究部門 特任研究員



I received in 2012 my PhD on the direct arylation of heteroaromatics with aryl chlorides using ferrocenic-based polyphosphine ligands. I then joined the laboratory of Prof. Takai in Okayama University as a postdoctoral fellow to carry out the synthesis of [n]phenacene. Since last May I joined the Institut for Molecular Science for another postdoctoral position in the group of Prof. Uozumi to work on the ppm to ppb level of catalyst loading in various cross-coupling reactions.

2015年6月1日着任

## 奥下 慶子

おくした・けいこ

物質分子科学研究領域  
分子機能研究部門 特任助教



東京農工大学で学位取得後、分子研機器センター博士研究員を経て、6月1日付で西村グループの特任助教として着任致しました。これまで天然由来材料高分子を中心に、固体NMRによる構造解析を行ってきました。今後は日本最高クラスの磁場を持つ920 MHz NMRを用いた固体NMR研究を推進していく予定です。

不勉強な所が多々あると思しますので色々とおアドバイスをいただけると嬉しいです。よろしくお願い致します。

2015年6月1日着任

## 小杉 貴洋

こすぎ・たかひろ

協奏分子システム研究センター  
階層分子システム解析研究部門 助教



京都大学で学位取得後、米国ワシントン大学での博士研究員を経て、2015年6月に着任いたしました。これまで、理論計算と蛋白質設計を通して、蛋白質機能の理解を目指し研究を行ってきました。分子研では、これまで培ってきた理論化学、生化学実験、人工進化などの知識や経験を生かし、より複雑な蛋白質を設計する中で複雑な蛋白質機能の理解に取り組んでいきます。

よろしくお願い致します。

2015年6月1日着任

## 中村 高大

なかむら・たかひろ

物質分子科学研究領域  
電子構造研究部門 特任研究員



前職では有機単分子膜修飾電極や不働態膜、燃料電池の電解質膜などの電気化学的物性に関する研究、二次電池の活物質材料の開発などを行ってきました。こちらでも燃料電池の研究を行うことになっていますが、光電子分光という今まで扱ったことがない本格的な物理的手法が主となるということで、一生懸命勉強しております。

このあたりは個性的な電車がが多いので撮影のしがいがあります。

2015年7月1日着任

## 谷中 冴子

やなか・さえこ

生命・錯体分子科学研究領域  
生体分子機能研究部門 特任助教



2013年3月に東京大学で学位取得後、(公財)サントリー生命科学財団及び、京都大学で日本学術振興会特別研究員をしておりました。これまで熱量測定やNMRを用い、蛋白質の相互作用解析、動的構造解析を行ってきました。これまでの専門を活かした研究を進めながら、生命の動秩序形成のメカニズムに迫りたいと思います。もうすぐ3歳の子供の育児に奮闘中です。

どうぞよろしくお願い致します。

## 自然科学研究機構憲章 と第3期中期計画

平成28年度から第3期中期計画の6年間の間が始まる。現在、自然科学研究機構の中期計画素案作りが一段落したところである。平成16年からの第1期、平成22年からの第2期と続いてきたが、私が関与するのは今回が最後になる。

思い返すと、平成12年5月（伊藤機構長、茅所長のとき）の国立大学長・大学共同利用機関長等会議に代理出席したときが始めだった。そこで中曽根弘文文部大臣と佐藤禎一文部事務次官による、国立大学の法人化とともに大学共同利用機関も国立大学に準じた形で法人化するという、事実上の決定を直接聞いた。それ以降、自然科学研究機構がスタートするまでの4年間、法人化に関わるいろいろな会議に出席して諸問題に取り組むことになった。

岡崎国立共同研究機構では所長の任命権者は文部大臣であったが、法人化後の所長の任命権者は機構長（法人の長）になった。また、各所長が持っていたリーダーシップ経費はすべて機構長の裁量経費になった。さらに、この平成27年度からは、各機関の予算の5%が機構長の裁量経費になる（ただし、特別分を除く）。このような法人化の方針では、文科省が相手にするのは機構長だけになってしまう。

初代機構長の選考や機構長と所長の位置付け・役割については、大学共同利用機関法人化準備委員会・自然科学研究機構検討委員会で議論し、岡崎国立共同研究機構の精神を活かす方向で検討を進めた。委員長は井口洋夫先生で、委員は5機

関各1名と外部10名で構成された。分子研からは私が参加した。自然科学研究機構の精神は自然科学研究機構憲章に反映されている。憲章は5機関の代表が集まる会議（分子研からは茅所長、中村教授、私が参加）において海部宣男国立天文台長の発案で策定した。「自然科学研究機構憲章」で検索すれば簡単に見つかる。「本機構は研究者の自由な発想と自律性を必須の基盤とする」というのは大学等を含めた学術研究の基本である。その上で、「本機構は5機関の連合体」、「本機構の活動は5機関の創造的学術研究が基本」、「5機関は互いの研究を尊重」、「5機関は対等の立場で機構運営に参画」などとし、岡崎国立共同研究機構型のゆるい連合体を意図した。

上記の井口委員会では、憲章の精神論だけでは足りないと考え、法律上の議決機関である役員会とは別に、5機関の所長全員を副機構長として参加させる機構会議を設置し、機構会議を連合体の実質的な運営組織とした。もちろん、各機関の機動的運営を確保した上での機構の運営である。また、新しい組織で憲章の精神が守られているかの検証が必要であるとの井口先生のお考えから、委員会は機構長1期目4年の中間評価をすることを提言した。2年後の中間評価結果は良好なものであったが、「経費負担が伴わないところでリーダーシップを発揮することを機構長に期待する」、「連携を意識しすぎると却って各機関の特徴や方向性が失われかねない」など、昔話にはならないような重要なコメントが残されている。わずか9年前の話である。

明治時代に分科大学の連合体の形で帝国大学が構成され、その後、分科大学は学部となったが、学部教授会は議決機関であり、「大学の自治」「学問の自由」の象徴であった。しかし、今年度より、学長主導の大学改革やトップダウン型統治（ガバナンス）強化を目的とした学校教育法及び国立大学法人法の一部改正によって、学部教授会は学長の諮問機関で

しかなかった。文科省の方針で、完全にトップダウン型統治に変わってしまった。もともと基盤機関をベースに構築されてきた総合研究大学院大学も、創設25年を過ぎた今、新しい学長によるトップダウン型統治に移行した。

歴史は浅いが、自然科学研究機構でも似たような経緯を辿っている。例えば、第1期では、各機関の概算要求は機構で束ねるだけであった。しかし、第2期になると、役員会で実効的な順位が付けられるようになった。ただし、各機関はそれぞれの概算要求をまとめる過程で文科省と折衝するので、その結果が順位に反映されるなどの調整があった。さらに、次の第3期では、各機関別の概算要求ができなくなる。文科省の方針によると、まずは機構の機能を明確化した上で目指すべき方向性を定め、その方向性に合致した機構の概算要求のみを機構長主導で文科省と折衝するようになる。各機関固有の特徴ある計画を実現するには、少なくとも機構としてその内容を機構の機能と機構共通の目指すべき方向性に盛り込まねばならない。しかし、個別計画をそのまま盛り込むのは難しいため、複数機関が関わることのできる部分（岡崎3研究所関係では、例えばバイオサイエンス）をクローズアップして概算要求する方向になる。しかも、新組織を概算要求する場合、機関の中に作るのではなく機構直属にせざるを得ない。言い換えれば、機構直属の新組織のみが概算要求できることになる。文科省の方針は、機構長によるトップダウン型統治である。5機関の連合体の精神からはほど遠い。

文科省がこのような方針を中期計画策定のタイミングで出すのは、国立大学法人法の規定に従っているからである（第31条の4）。要約すると「国立大学法人評価委員会が国立大学法人・大学共同利用機関法人の業務実績評価を行ったときは、文科大臣は、中期計画6年間の終了時まで、当該法人の組織の在り方や業務継続の

必要性などの組織及び業務全般にわたる検討を、評価委員会の意見を聴いた上で行う。さらに、その結果に基づいて当該法人が策定した中期計画に対し、文科大臣は所要の措置を講ずる。」となる。第2期6年目の今年、6月8日に文科大臣決定の通知を受けて、各法人は第3期中期計画に見直し内容を反映させることになった。ただし、約2年前に、文科省から「国立大学改革プラン」、約1年前に、国立大学法人評価委員会から「国立大学法人の組織及び業務全般の見直しに関する視点」が出されている。最近、話題になっている人文社会科学系等に関する学部廃止や社会的要請の高い分野への転換も、すでに評価委員会で「視点」として公表されていた。法人の長を中心とするトップダウン型統治機能強化や大学共同利用機関法人としての一体的運営強化などの指摘も、今に始まったことではない。

評価委員会には経済界や産業界からの委員も含まれているため、大学を会社のように経営するものと捉え、成長戦略のひとつとして社会に役立つ経済産業活動の観点で議論することがあるのだろう。国際競争に勝つために新たな産業を生み出して国益に寄与するイノベーション（技術革新）人材を養成する大学改革は優先されても、すぐには役立つ教育研究分野（特に、競争的資金などの外部資金獲得も難しく、業績評価も難しい人文社会科学系等）は後回しにされる。しかし、課題解決のための即戦力に偏重しすぎると、逆に柔軟性を欠き、次第に役立たなくなり中長期的には困るのではないか。大学が大衆化し、手に職を付けさせるための教育が必要になったとしても、多様性・柔軟性を持った地力を付ける人材養成という観点は大学という場には欠かせない。

もともと自主性が高まるとの期待のもとに法人化に踏み切ったはずである。確かに渡しきりの交付金（運営費交付金）

によって自由度は増した。内部組織の改編手続きも簡単になった。しかし、そもそも法人化は行政改革から生まれたもので、膨らむ大学予算を削減するための効率化を狙ったものである。運営費交付金も毎年減るようでは自由に使える余裕もなくなる。評価結果への対応が不十分であるという指摘が繰り返されれば、それは強制力のある指示になる。これは、法人化で期待されていた自主性どころではない。統制である。評価委員会や文科省から次々と型にはめようとする改革要請・選択要請が出てくるのでは、組織自体が多臓器不全を起こしかねない。

文科省や評価委員会からは、第3期中期計画においては、6年間で実施したいことをできるだけ具体的に、わかりやすく書くようにとの指示が出ている。評価委員会の評価結果に基づく指摘に十分対応できていないとの理由で、今回はさらに、組織改革（機関内組織ではなく機構組織）や達成度評価のための数値指標を盛り込むようにとの強い指示がある。下手をすると憲章の精神から逸脱しかねない機構長主導や機構一元化等の計画も具体的に書き込まねばならない。それぞれ独自に活動している5機関を束ねるだけではなく、機構で一元化して統一しようとすれば、二重構造になり余計な手間や予算が掛かり改悪である。

第1期、第2期中期計画をまとめる際には、概算要求も認められていないような将来を規定する具体的な計画は書かないようにとの指示が文科省からあった。課題解決型ではない学術研究に数値指標は相応しくないので記載しなかった。基本的には5機関の計画を束ね、共通部分を機構のものとしてまとめておけば、中期計画のほとんどは済んだ。しかし、第3期はまるで違う。

自然科学研究機構の機構長は2期6年を務めるサイクルなので、新たな中期計画が始まるタイミングで新しい機構長が着

任することになる。つまり、新しい機構長は自分が達成しなければならない中期計画の立案自体には関わらない。現機構長も自分が責任を持つわけではない次期中期計画策定に深く関わることはしない（できない、すべきではない）。本来、5機関の連合体として、5機関が中期計画立案に責任を持てば問題はないはずである。しかもこれまでは、内容的に所長が深く関わる必要もなく、5機関から参加する委員で十分であった。しかし、概算要求の方法も変わり、概算要求と中期計画が直結してトップダウン型統治が強まった今回の中期計画では、機構長主導、機構主導でやることを誰かが具体的に書く必要がある。5機関の委員には手に届かない部分もあり、全体の読み合わせもしていないので内容に責任が持てず消化不良状態である。第1期、第2期中期計画は十分に咀嚼でき、責任が持てたのとまるで違う。今後、トップダウン型統治にならざるを得ないことを考えれば、井口委員会でも検討されたように、憲章の精神に従って5機関の連合体としての機構運営を所長主導で行うことが不可欠であろう。

ただし、他4機関と違って分子研の所長の任期は機構長と同じタイミングになっている。中期計画の策定に、新しい所長は関わらないし、現所長も深く関わることはしない（できない、すべきではない）。以前、機構側の所長選考委員会でそのことが問題になったときには、分子研はボトムアップ的に所内が責任を持って計画を立てるし、所長が関わらなくても問題ないと答えてきた。しかし、トップダウン型統治の視点で書かねば概算要求もできなくなる第3期中期計画に所長抜きでボトムアップ的に6年間に対する所内の強い思いが盛り込めたかどうか、疑問が残る。今後、機構運営の在り方を考慮した上でボトムアップとトップダウンのつなぎをしっかりと行うことが必要になろう。

（小杉 信博 記）

共同利用研究ハイライト

# 実験と理論の共同研究による桂皮酸メチル誘導体の光誘起異性化の解明

江幡 孝之 広島大学大学院理学研究科 教授

## 1. はじめに

近年の実験技術の進化や計算手法の開発、コンピュータの計算能力の著しい向上、ソフトウェア開発のおかげで、簡単な分子から複雑な生体分子にわたり、構造や反応に関する研究が格段の進歩を遂げている。実験研究者は、スペクトルや信号の時間変化といった実験だけではなく、自ら理論計算を行い実験結果の解析や、構造をvisual化することが当たり前になってきている。しかしながら、電子励起状態の構造変化や反応については、まだまだ実験、理論ともにそれぞれの領域で困難が伴い、全体を理解するには実験化学者と理論化学者のエキスパートの協力が不可欠である。本研究で対象としている桂皮酸メチル誘導体は、紅色光合成細菌中に存在する走光性の光受容蛋白質 photoactive yellow protein (PYP) の発

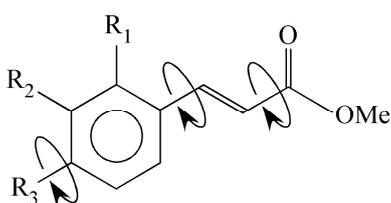
色団であるクマル酸のモデル分子として、また様々な置換基を付けた分子は日焼け止めなどの化粧品の候補として、研究がされてきた。この分子は、電子基底状態ではトランス体が安定であるが、光励起するとプロペニル基のC=C二重結合回りの回転でシス体へと異性化し、その後いくつかの中間状態を経た後、分子は最終的にトランス体基底状態に戻る。PYPでは、クマル酸の光異性化が紅色光合成細菌の負の走光性の引き金になっている。

光誘起初期過程や異性化がどの状態で進むかについては不明な点が多い。電子励起状態の光異性化はスチルベンやアゾベンゼンについてこれまでよく研究されているが、今回対象とした分子はカルボニル基を持つため、 $S_1(\pi\pi^*)$ 状態に近接する $^1n\pi^*$ 電子状態との相互作用や、水素結合などの環境の効果を考慮する必要

があるためにより複雑である。この協力研究は計算科学研究センターの江原教授と行っており、平成24年に広島大学で江原先生が集中講義をされたときの全体講演で、ちょうど私が始めようと準備をしていた桂皮酸メチル誘導体の異性化過程の理論計算結果を紹介され、是非共同研究をやりましょうということが始まりだった。

## 2. 協力研究の内容

実験は広島大学において、超音速分子線と波長可変レーザーを組み合わせ、気相極低温条件分子に対してレーザー誘起蛍光法や共鳴イオン化法による電子状態分光、ピコ秒レーザーによるポンププローブ法による $S_1(\pi\pi^*)$ 電子状態の寿命測定を中心に行った。また、水1分子を付けた水素結合錯体についても同様の研究を行い、水素結合が無輻射過程に及ぼす効果を調べた。計算は、電子基底状態については、PBE0/cc-pVDZレベルの密度汎関数法、電子励起状態は、 $S_1(\pi\pi^*) \rightarrow ^1n\pi^*$ 電子状態の交叉についてはTD-PBE0/cc-pVDZを用い、 $S_1(\pi\pi^*)$ 状態内でのトランス→シス異性化の初期過程についてはCIS(D)/aug-cc-pVDZで計算を行った。超音速分子線による気相極低温分子生成の利点は、極低温になることでスペクトルがシャープになるとともにコンフォーマーを選別して個別に研究できることにある。図1に示すようにpMMC(para-Methoxy Methyl Cinnamate)では、トランス体だけでも4つのコンフォーマーが存在可能である。更に、表1に示すようにoMMCやmMMCではそれぞれ



	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>
pMMC(OMpCA)	H	H	OMe (OH)
mMMC(OMmCA)	H	OMe (OH)	H
oMMC(OMoCA)	OMe (OH)	H	H

表1 *o*-, *m*-, *p*-MMC(ortho-, meta-, para-Methoxy Methyl Cinnamate) および OM*o*-, *m*-, *p*-CA(Methyl ortho-, meta-, para-hydroxyl Cinnamate).

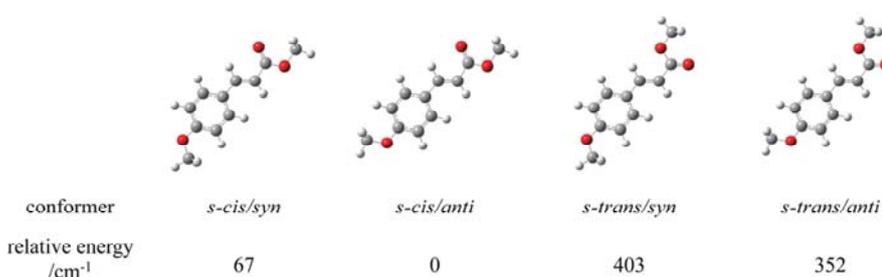


図1 トランス *p*-MMCの4つのコンフォメーション

8つのコンフォーマーが存在可能である。*p*MMCでは実際に3つのコンフォーマーが観測された。

まず置換基の位置に対する効果を調べたところ、*o*MMCや*m*MMCではともに $S_1(\pi\pi^*)$ ゼロ点準位から $1000\text{ cm}^{-1}$ ぐらいまでは、 $S_1(\pi\pi^*)$ 電子励起状態は27~7 nsの寿命を示し、コンフォーマーの違いや励起エネルギー依存はあまりみられない。一方、*p*MMCでは*s-cis/syn*, *s-trans/syn*, *s-cis/anti*の各 $S_1$ ゼロ点準位の寿命が、それぞれ280 ps, 108 ps, 80 psとコンフォーマーによって異なることと、さらに励起エネルギー増大に従い著しく短くなることが明らかになった(図2)。励起状態寿命がコンフォーマーによって大きく異なることは、我々にとって意外な結果で、対象とする分子の励起状態無輻射過程研究の難しさが分かる。また、*p*MMCのカルボニル基に水分子が付いた*p*MMC-H<sub>2</sub>Oは、 $S_1$ ゼロ点準位の寿命が21 psと*p*MMC単体に比べ短くなるという結果を得た。

これらの実験結果に対して、電子励起状態のエネルギー計算を行った結果

を図3、図4に示す。図3は*p*MMC および*p*MMC-H<sub>2</sub>O水素結合体における $S_1(\pi\pi^*) \rightarrow {}^1n\pi^*$ 電子状態間の無輻射緩和、図4は、 $S_1(\pi\pi^*)$ 状態でトランス→シス異性化反応座標に沿ったポテンシャルエネルギー曲線である。両者の過程で大きく異なるのは、 $S_1(\pi\pi^*) \rightarrow {}^1n\pi^*$ の無輻射緩和では、*p*MMC-H<sub>2</sub>O水素結合体では*p*MMC単体よりも交叉のエネルギー障壁が大きくなっている。これは、non-bonding軌道が水素結合により安定化し、結果として ${}^1n\pi^*$ のエネルギーが上がるためである。異性化に沿った反応座標では、比較的初期の部分(二面角 $150^\circ$ の辺り)において障壁が現れており、その障壁の大きさが*p*MMC-H<sub>2</sub>O水素結合体の方が単体よりも低くなっている。

実験結果は、*p*MMC-H<sub>2</sub>Oの方が*p*MMCと比べて無輻射過程へのエネルギー障壁が小さくなることを示唆しており、これら実験と理論計算の結果を総合して、我々は*p*MMCの電子励起状態は、トランス→シス異性化座標に沿って無輻射緩和が進むと結論した。この

結果は最終結論ではなく、まだ実験的には異性化途中の中間体、特にシス体の捕捉が不可欠である。また、異性化座標に沿ったポテンシャルエネルギー曲線の全貌や ${}^1n\pi^*$ 電子状態との交叉が及ぼす効果等、まだまだ解明しなくてはならない問題点が多いチャレンジングな系である。実際、アムステルダム大学のBuma等は、 $S_1(\pi\pi^*) \rightarrow {}^1n\pi^*$ 内部転換が、 $S_1$ 状態の主な緩和経路であると主張しており、このことから電子励起状態反応の研究が単純でないことが分かる。光異性化を含めた無輻射過程の完全な理解に向け、今後とも江原先生のグループと協力研究を続けていきたいと考えている。最後に、この研究は私の研究室の博士課程3年の宮崎康典君の多大な努力によるところが大きいことを述べておきたい。

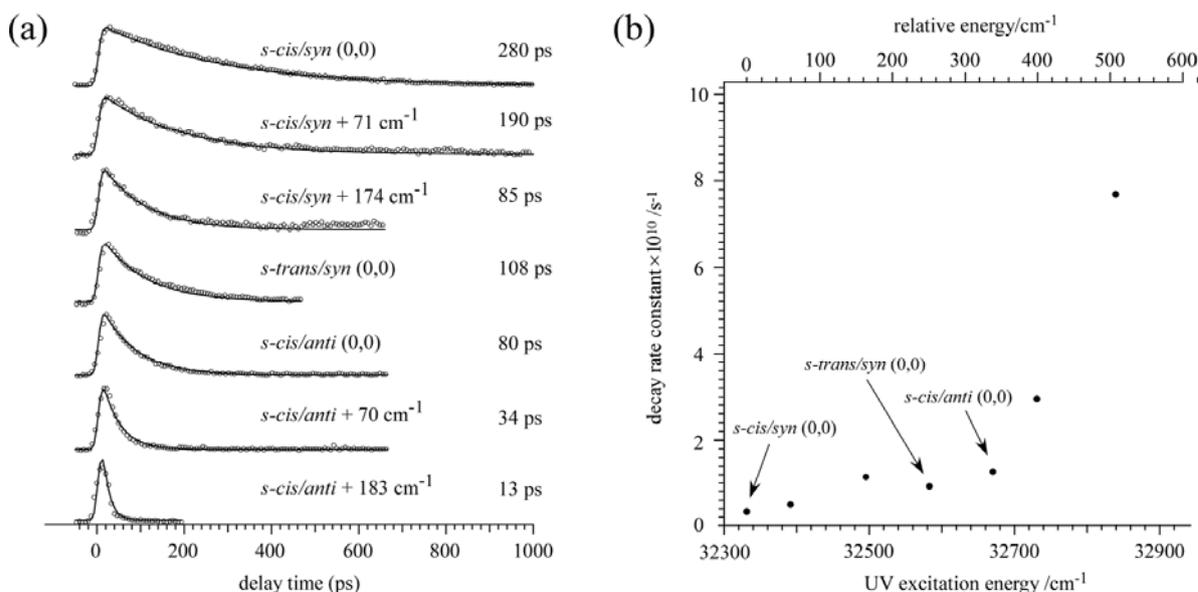


図2 (左) *p*-MMCの各コンフォーマーの $S_1$ 状態の時間減衰の様子(それぞれ、一次の指数関数で減衰している)  
(右) *p*-MMCの $S_1$ 状態の減衰定数の励起エネルギー依存

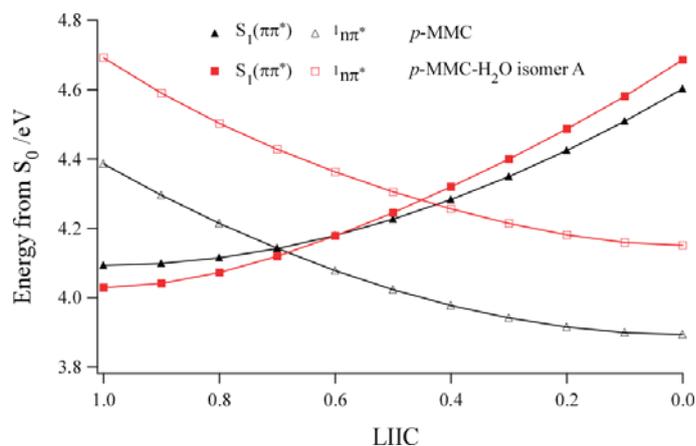


図3 pMMC (黒) および pMMC-H<sub>2</sub>O (赤) における S<sub>1</sub>(ππ\*) と <sup>1</sup>nπ\* 状態の交叉

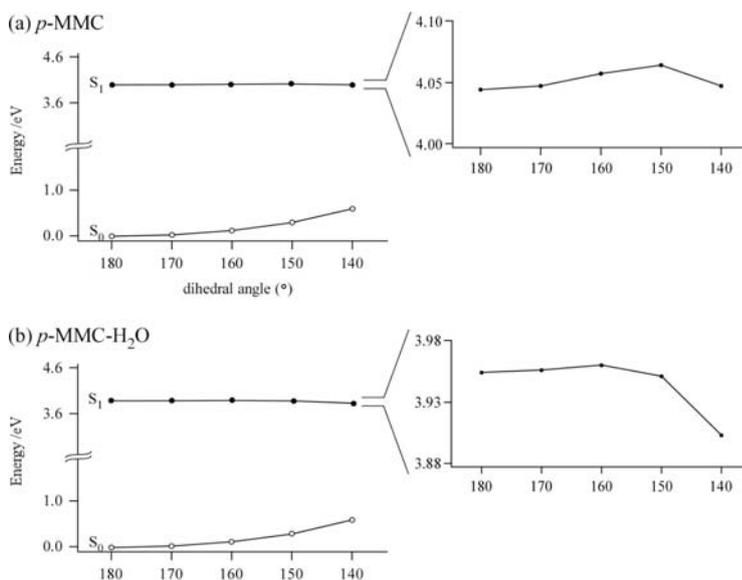


図4 pMMC (上) および pMMC-H<sub>2</sub>O (下) の S<sub>1</sub>(ππ\*) 状態のトランス→シス異性化初期部分のポテンシャルエネルギー曲線



えばた・たかゆき

1981年東京工業大学大学院理工学研究科化学専攻博士(理学)取得、同年東北大学理学部化学科助手、1993年東北大学理学部化学科助教授、1996年東北大学大学院理学研究科化学専攻助教授、2004年より現職。  
 専門：物理化学、機能性分子のレーザー分光  
 趣味：テニス(学生時代から約40年、今でも楽しんでいます)

参考文献

- [1] D. Shimada, R. Kusaka, Y. Inokuchi, M. Ehara, T. Ebata, "Nonradiative decay dynamics of methyl-4-hydroxycinnamate and its hydrated complex revealed by picosecond pump-probe spectroscopy", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 14, 8999 (2012)
- [2] Y. Miyazaki, K. Yamamoto, J. Aoki, T. Ikeda, Y. Inokuchi, M. Ehara, T. Ebata, "Experimental and theoretical study on the excited-state dynamics of *ortho*-, *meta*-, and *para*-methoxy methylcinnamate", *J. Chem. Phys.*, 141, 244313 (2014)
- [3] E. M. M. Tan, S. Amirjalayer, B. H. Bakker, W. J. Buma, "Excited State Dynamics of Photoactive Yellow Protein Chromophores Elucidated by High-Resolution Spectroscopy and Ab Initio Calculations". *Faraday Discuss.* 163, 321(2013)

# 準安定多価分子イオンの生成機構 ——OCSの場合——

副島 浩一 新潟大学理学部 教授

## 1. はじめに

我々のグループでは、主に軽元素で構成される3原子分子を対象にして、内殻光電離後の分子解離過程を調べている。大きな内部エネルギーを持つ内殻空孔状態の分子は、光もしくは電子を放出してエネルギー緩和をするが、軽元素で構成された分子の場合は電子放出過程、すなわちオージェ過程が主要な緩和機構となる。つまり、光電離後の分子の中間状態として、光電子および複数のオージェ電子が抜けた多価イオン状態が形成される。ほとんどの多価分子イオンは、核間に働くクーロン反発力によって、その後速やかに解離するが、多価分子イオンの電子状態によっては準安定な状態を維持する場合がある。どのような電子緩和過程の時に準安定な多価分子イオンが生成されるのであろうか？ 幾つかの基本的な二原子分子を除き、それら準安定な二

価分子イオン生成のメカニズムの詳細は未だ不明である。OCSは準安定な2価分子イオン； $OCS^{2+}$ を形成することが知られており、この疑問に答える実験対象として最適な分子であると言える。ここでは、S2p, C1s, O1sの内殻光電離過程： $OCS + h\nu \rightarrow (OCS)^{2+} + e_{photo} + e_{Auger}$ における準安定な $OCS^{2+}$ の生成機構を、オージェ電子・光イオン同時計測（AEPICO）実験によって解明した研究について以下に簡単に紹介する。

## 2. オージェ電子・光イオン同時計測実験

実験は、BL4B及びBL6Uにおいて、図1に模式的に示した繁政グループが開発した電子-イオン多重同時計測装置を使用しておこなった。この装置は、広い検出立体角と高いエネルギー分解能を両立させたダブルトロイダル型電子エネルギー分析器（DTA）と飛行時

間型イオン運動量分析器（i-TOF）を組み合わせることによって、AEPICO実験が高効率で実施できる特徴を有している。AEPICO実験法を使えば、内殻光電離後に生成されたイオン群のそれぞれのイオン種に対して、どのような電子緩和機構によってそれらが生成されたのか、二価分子イオンの電子状態とイオン種とを関連付けることが可能となる。

OCS分子の基底状態における価電子軌道の電子配置は、 $(6\sigma)^2(7\sigma)^2(8\sigma)^2(9\sigma)^2(2\pi)^4(3\pi)^4$ である。i-TOFで得られたS2p, C1s, O1s内殻光電離過程で生成されるイオン群の飛行時間（TOF）スペクトルを、それぞれ図2(a)、(b)、(c)に示す。3200ns付近にあるピークが $OCS^{2+}$ に対応し、その両脇にある $OC^+$ と $S^+$ は、 $OCS^{2+}$ が2体解離して生成したイオンである。それ以外にも、 $OCS^{2+}$ が3体解離して生成した $C^+$ や

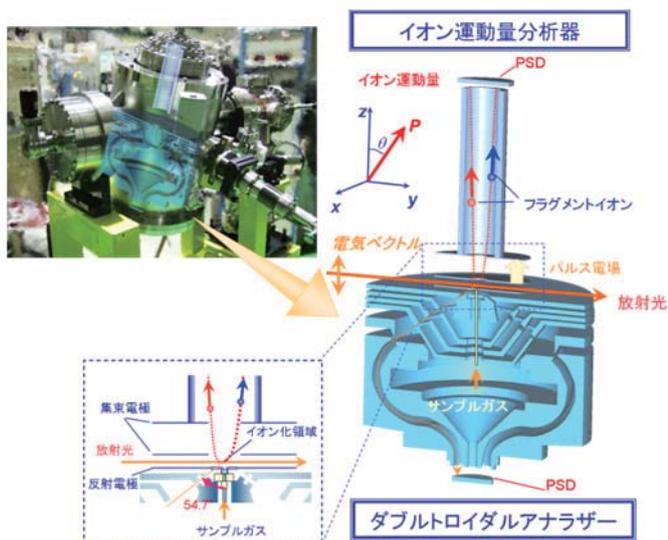


図1

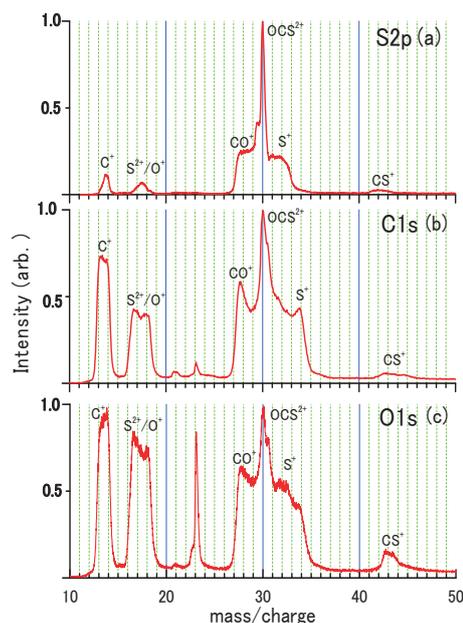


図2

O<sup>+</sup>が観測されている。(a)～(c)のTOFスペクトル中のOCS<sup>2+</sup>とOC<sup>+</sup>のピーク強度比を比較すると、明らかに(a)で大きくなっていることがわかる。すなわち、S2p内殻光電離過程では、準安定なOCS<sup>2+</sup>が効率よく生成されていることになる。なぜ、S2p内殻光電離過程だけが、効率よく準安定OCS<sup>2+</sup>を生成するのだろうか？ その答えは、図3に示したAEPICO実験で得られた同時計測オージェスペクトルから読み解くことができる。図3(a)、(b)、(c)に、それぞれS-LVV, C-KVV, O-KVVオージェスペクトルを示す。図中赤線で示してあるスペクトルは、同時計測処理していない通常のオージェスペクトルを、青線で示してあるのがOCS<sup>2+</sup>と同時計測処理したオージェスペクトルを示している。図3の横軸はオージェ終状態の内部エネルギーで、内殻電子のイオン化ポテンシャルと実験的に得られるオージェ電子の運動エネルギーの差で求められる。これはまた、オージェ終状態として生成される、価電子軌道に2つの空孔が存在する二価分子イオンの束縛エネルギーに相当する。例えば、図3(a)の30～35eVにある幅の広いバンドピークは、OCSの最外殻の価電子軌道である3πから電子が2つ抜けた状態；(3π)<sup>-2</sup>に対応している。図3(a)の赤線と青線を比較すると、オージェ終状態が(3π)<sup>-2</sup>の時、OCS<sup>2+</sup>が準安定な状態を維持できることがわかる。理論計算によるOCS<sup>2+</sup> (3π<sup>-2</sup>)状態のポテンシャル曲線は、フランク-コンドン領域に深いポテンシャル極小を有する擬束縛状態であり、その厚いポテンシャル障壁のためにトンネリング確率が非常に小さくなることを考えると、この状態が準安定

であるという今回の実験結果は、極めて妥当であると言える。しかし、なぜS2p内殻電離過程の時だけ(3π)<sup>-2</sup>オージェ終状態が効率的に生成されるのかという疑問が残る。この疑問に答えるためには、3π分子軌道の波動関数の空間分布を知る必要がある。理論計算によれば、3π分子軌道の波動関数は、S原子近傍で大きな振幅を持ち、S2p内殻軌道との重なりが極端に大きい。電子間のクーロン相互作用の大きさに比例するオージェ遷移確率は、波動関数の重なりでその大小が決まるため、S2p内殻イオン化後のオージェ遷移過程において、OCS<sup>2+</sup> (3π<sup>-2</sup>)状態の顕著な生成が起こると考えられる。内殻空孔状態の電子緩和過程が、原子近傍で局所的に進行するなら、図3の同時計測オージェスペクトル(青線)は3π分子軌道の原子サイト分布を直接反映するものとして捉えることもできる。今後はOCSで明らかになった局所的な電子緩和過程が一般的であるか、対象の

分子種を広げて研究を進める予定である。

### 3. おわりに

大学教員(特に地方大学教員)が自由に使える校費が大幅に削られている最近の動きを見ると、近い将来、大学では実験装置を動かすことすらまもなくなくなる時が来ると予想される。その時、UVSORのような全国共同利用施設の役割が、我々地方大学教員にとって今にも増して重要になってくる。現在のUVSORの運営状況やサポート体制には非常に満足しており、是非この状態を将来にわたって続けていただきたいと切に願う。もちろん、UVSORで得た実験データを世に出し、施設のアクティビティを世間に対してアピールする協力は惜しまない覚悟である。

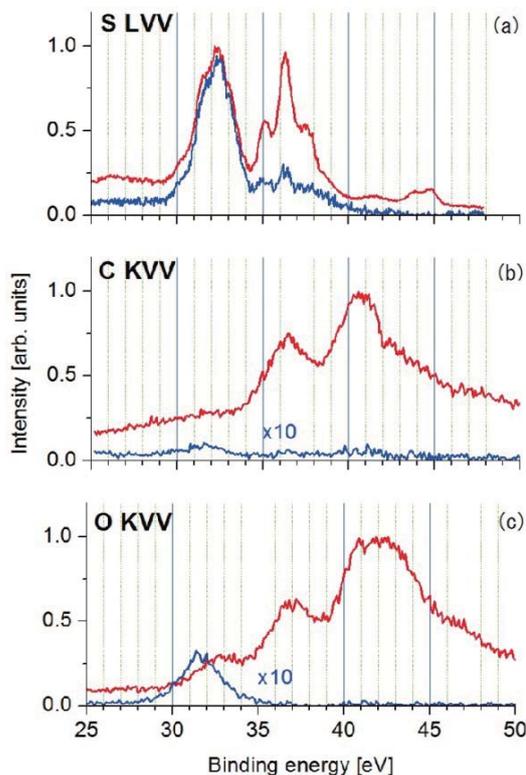


図3



そえじま・こういち  
1993年3月東京都立大学理学研究科物理学専攻博士課程修了(博士(理学)取得)。学振特別研究員等を経て、1996年8月新潟大学自然科学研究科助手、2001年12月同理学部助教授、2015年4月より現職。  
専門：原子分子物理学、多価イオン科学  
趣味：山歩き

# 幾何学的フラストレーションを有する磁性体のESRによる研究

太田 仁 神戸大学分子フォトサイエンスセンター 教授

櫻井 敬博 神戸大学研究基盤センター 助教

## 1. はじめに

近年、量子効果が顕著な形で現れる磁性体やその現象の探索、研究が盛んに行われています。その対象の一つが、スピン間に幾何学的なフラストレーションを有するいわゆるフラストレーション系と呼ばれる磁性体です。本研究は、典型的なフラストレーションを有する格子であるカゴメ格子の、特に  $S = 1/2$  の Heisenberg 型反強磁性体のモデル化合物に関するものです。

$S = 1/2$  Heisenberg 型カゴメ格子反強磁性体は、実験、理論両面から未だその基底状態が完全には明らかにされていない系です。スピンをベクトルとして取り扱えば基底状態としてはエネルギーを最低にするスピン配置での秩序状態が期待されますが、理論的には量子効果により更にエネルギーの低い状態が存在することが示唆されています<sup>[1]</sup>。一方、現実のモデル化合物では、格子に歪みがある等の理由により、理論が予測する様な顕著な量子効果を見出すには至っていません<sup>[2-4]</sup>。そこで、

本研究では新しいカゴメ格子のモデル化合物  $[\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{bpe})_3] \cdot 2\text{ClO}_4$ <sup>[5]</sup> を取り上げて、ESR によりその性質を探る事としました。

我々は、神戸大学で 50 T を越える強磁場と広い周波数範囲 (0.1 ~ 7 THz) に亘る多周波数での ESR 測定を行っています。しかし物質によっては低周波数領域、即ち X (10 GHz)、Q (35 GHz) band での ESR 測定がどうしても必要になる場合があります。その様な場合、我々は、これらの ESR 装置が大変良く整備された分子研の共同利用を利用します。そして本物質はこの X-band での ESR 測定が系の基底状態を理解する上で非常に重要でした。

## 2. カゴメ格子化合物 $[\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{bpe})_3] \cdot 2\text{ClO}_4$ の ESR 測定

図 1 に  $[\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{bpe})_3] \cdot 2\text{ClO}_4$  の ab 面内及び bc 面内の結晶構造を示します。磁性イオンである  $\text{Cu}^{2+}$  ( $S = 1/2$ ) が ab 面内でカゴメ格子を形成し、面間

化合物で隔てられています。この構造から本系は二次元性が高く、理想的なカゴメ格子のモデル物質になっているのではないかと考えられました。しかし実際には 7 K 程度で秩序化することが NMR 測定から示唆されています<sup>[6]</sup>。ただその秩序状態の詳細ははっきりしていませんでした。今回我々は、本系の粉末試料を用い、強磁場 ESR 測定及び X-band ESR 測定を行って、常磁性状態においては特徴的な ESR スペクトル、低温では秩序状態を示唆する集団励起モードを観測しました。

図 2 は 210 GHz での常磁性状態における ESR スペクトルです。スペクトルは低磁場側のピークと高磁場側の肩からなる、一見すると典型的な一軸異方性を有する粉末パターンを示しています。スペクトルの形状から、磁性イオン  $\text{Cu}^{2+}$  のホール軌道は  $3z^2-r^2$  軌道を基底状態とすることを想起させます。しかし点電荷モデルによる結晶場計算を行った結果、当初の予想に反してホール軌道は  $x^2-y^2$ ,  $yz$  及び  $3z^2-r^2$  軌道の

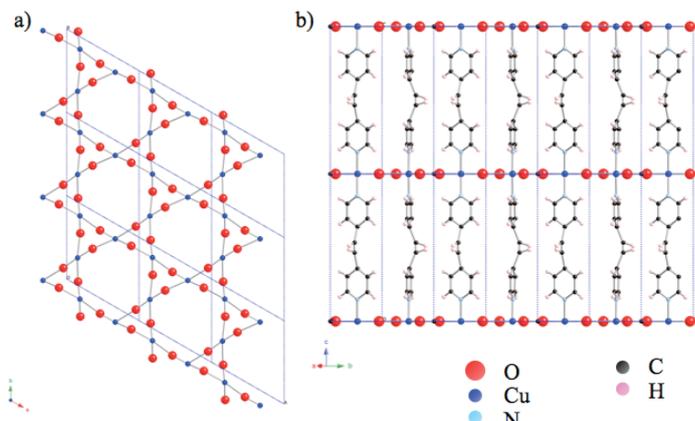


図 1  $[\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{bpe})_3] \cdot 2\text{ClO}_4$  の ab 面 (a) 及び bc 面内 (b) の結晶構造

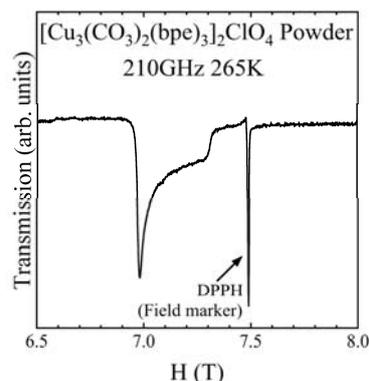


図 2 210 GHz、265 K における ESR スペクトル

混成軌道からなり、中でも $x^2-y^2$ 軌道の重みが最も大きいことが分かりました。そして $\text{Cu}^{2+}$ サイトの交換相互作用による平均化の結果、 $ab$ 面内で $g$ 値が等方的かつ垂直方向に比べ大きくなり、面に垂直な方向の $g$ 値がより2に近づいているということが分かりました。この様にスペクトルの粉末パターンと構造との対応が明らかになりました。

一方、転移温度以下4.2 Kでは、常磁性状態とは明らかに異なる振る舞いが観測されました。図3は $g$ 値の周波数依存性を示したもので、周波数の低下に伴って $g$ 値の差が大きくなっています。特にX-bandにおいて二つの $g$ 値の差が大変大きくなっている様子が明らかです。常磁性状態であれば $g$ 値は周波数に依存しないはずなので、この振る舞いは、観測された共鳴が秩序状態における集団励起由来であることを示しています。反強磁性状態、強磁性状態のESRモードを実験値と比較し、

他の報告されている実験事実等も考慮して検討を行った結果、強磁性状態であると考えるのが最も妥当であるとの結論に至りました。図の実線は強磁性共鳴モードによるフィッティングの結果を示しており、比較的良く実験を再現しています。この様に、X-bandを含む広い周波数範囲でのESRモードの観測により、本系の基底状態が強磁性状態であることが明らかになりました。

### 3. おわりに

カゴメ格子化合物 $[\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{bpe})_3] \cdot 2\text{ClO}_4$ は、残念ながらフラストレーション由来のエキゾチックな量子効果を示す物質ではありませんでしたが、ESRによってその常磁性状態や秩序状態を詳細に明らかにすることができました。ESRがスピン系の研究で非常に強力な武器になる事がお分かり頂けたのではないかと思います。同時に本系に関しては低周波数領域のESR測定が非常

に威力を発揮した例となりました。本系については今後Q-bandのESR測定を分子研の共同利用により行い、図3のフィッティングをより確かなものに行いたいと考えています。最後に、分子研の共同利用でいつもお世話になっている中村敏和准教授をはじめ関係者の方々に、紙面を借りて篤くお礼申し上げます。



おおた・ひとし

1982年東京大学理学部卒業。1986年東京理科大学大学院博士課程中退。1987年神戸大学理学部助手、1994年同大学理学部助教授、2001年同大学分子フォトサイエンス研究センター教授、2007年同大学自然科学系先端融合研究環分子フォトサイエンス研究センター教授、現在に至る。神戸大学において、一貫して強磁場ESR測定装置の開発と量子スピン系をはじめとしたその物性研究への応用に従事。



さくらい・たかひろ

1992年大阪大学理学部卒業。1994年大阪大学大学院理学研究科高分子学専攻修了。同年カネボウエヌエスシー（株）、2003年神戸大学自然科学研究科構造科学専攻修了、博士（理学）取得。同年神戸大学研究基盤センター助手、2007年同助教、現在に至る。特に圧力下ESR装置の開発と応用に従事。

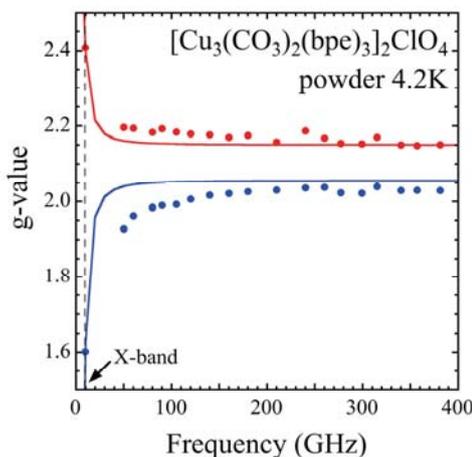


図3 4.2 Kにおける $g$ 値の周波数依存性。  
点線はX-bandの周波数を示す

### 参考文献

- [1] Ch. Waldtmann *et al.*, *Eur. Phys. J. B* **2** (1998) 501.
- [2] Z. Hiroi *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **70** (2001) 3377.
- [3] M. P. Shores *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **127** (2005) 13462.
- [4] Y. Okamoto *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78** (2009) 033701.
- [5] P. Kanoo *et al.*, *Dalton Trans.* **26** (2009) 5037.
- [6] H. Kikuchi *et al.*, *J. Phys. Soc. Conf. Proc.* **1** (2014) 012019.

## 新装置紹介

# 超分子質量分析装置

岡崎統合バイオサイエンスセンター

石井 健太郎 (研究員)、加藤晃一 (教授、分子研兼務)、内山 進 (客員准教授)

平成26年度に岡崎統合バイオサイエンスセンターのバイオネクストプロジェクトにより超分子質量分析装置 SYNAPT G2-Si HDMS (Waters社) が導入されました (図1)。超分子質量分析装置は、タンパク質複合体のように非共有結合で形成された複合体の質量を測定できる装置です。原理は、高電圧によりイオン化させた試料を飛行時間型質量分析計で分析するというものです (ESI TOF-MS、図2)。通常の質量分析装置と違うのは、試料を穏やかに脱溶媒和する点です。装置内部の真空度が段階的に高くなっているため、試料がまとった溶媒分子は少しずつ剥ぎ取られていきます (図2)。これにより水素結合や疎水性相互作用などの弱い相互作用を保ったまま質量分析をすることが可能になっています。測定可能な質量範囲は50 Daから約1 MDaです。測定例として、核内受容体PPAR $\gamma$ と内分泌攪乱物質である有機スズ化合物との複合体のマススペクトルを示しました (図3、Harada *et al.* 2015)。ギ酸を加えてタンパク質を変性させることによって、有機スズ化合物の解離が観測されています。

この装置の優れた点は、迅速に複合体質量が分かることであり、試料の性質が良ければ30分以内に結果が得られます。測定に必要な試料の濃度は高いほど良く、複合体濃度で10  $\mu$ M以上、体積は20  $\mu$ l ~100  $\mu$ lが必要です。欠点は、良いスペクトルが得られるか否かが試料の性質と純度に強く依存する点です。また不揮発性の塩、イオン化を阻害するもの、凝集したタンパク質などを多く含むと測定できません。そして揮発性の緩衝液しか使えません (通

常は酢酸アンモニウム)。また様々な複合体が多数混在する「ヘテロな系」は解析が難しくなります。

実際に超分子質量分析装置を使用する場合は、バイオネクストプロジェクトの申請をしていただくことになります。しかし、データが得られるか否かは試料の性質に大きく依存するため、正式な申請を行う前に予備検討をお勧めしています。昨年度は正式採択と予備検討を合わせて17件の共同研究を行

い、今年度は12件の共同研究を進めています。専任の研究員を置き、機構内外の研究グループとの共同研究を推進しています。装置は岡崎統合バイオサイエンスセンターの山手5号館2階に設置されており、見学は随時受付けています。ご興味のある方は、加藤晃一または内山進までお問い合わせ下さい。



図1 超分子質量分析装置 (SYNAPT G2-Si HDMS)

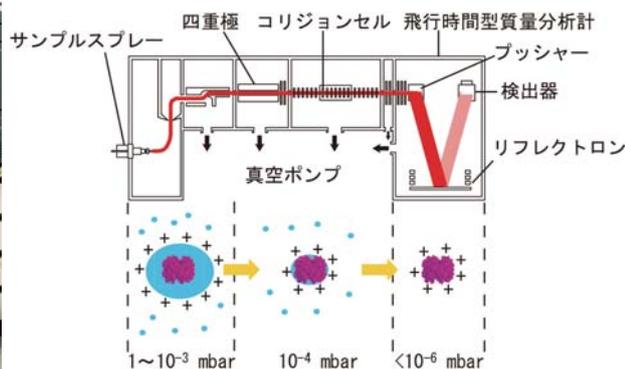


図2 装置構成と脱溶媒和過程

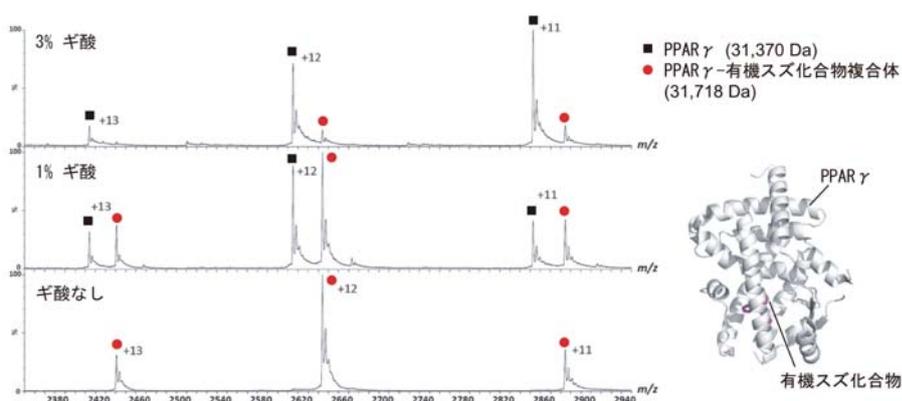


図3 核内受容体PPAR $\gamma$ と有機スズ化合物の複合体のマススペクトル (Harada *et al.* 2015より)

## 参考文献

- [1] Noda, M. *et al.* (2011) *Biochem. J.* **436**, 101-112.
- [2] Robinson, C.V. *et al.* (2014) *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **53**, 14002-14015.
- [3] Harada, S. *et al.* (2015) *Sci. Rep.* **5**, 8520.

施設だより

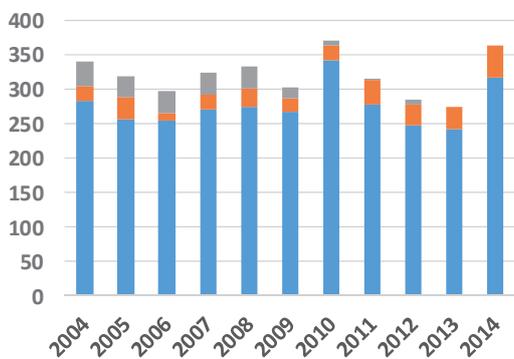
## 装置開発室 居室改装

装置開発室長 山本 浩史

装置開発室は、分子科学の研究に必要な実験機器の設計・製作を研究者と協力しながら行っています。製作依頼の受付は、所内の研究グループの他、2005年度後期からは所外研究者による依頼にも審査を経た上で対応するようになりました。また、2013年度からはナノテクノロジープラットフォームを窓口として、協力研究やリソグラフィ技術によるマイクロストラクチャーの製作依頼にも対応し、大学共同利用機関として全国の研究機関への技術支援を行っています。2014年度までの所内外の製作依頼件数の推移を図に示します。昨年度の製作依頼の総数は、386件（所内：362件、所外：24件）であり過去最高の受付件数となりました。

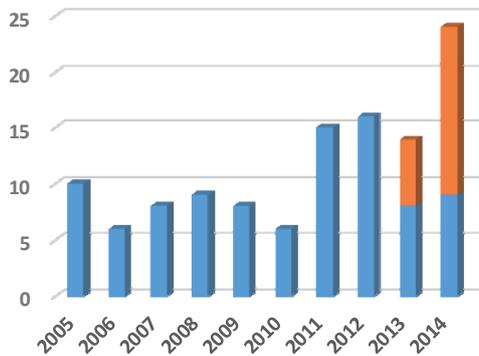
昨年度の活動報告として、居室の改装工事について紹介します。分子研の創設時から40年近く職員の事務室になっている装置開発棟204号室は、職員の増加に伴って回路グループや技術支援員が他室に移り、機械系スタッフの居室として長らく利用してきましたが、昨年度7月の技術職員の異動でこの居室も手狭になってしまいました。そのため、ユーザーフレンドリーな姿勢を強化すべく、装置開発棟全体で抜本的に部屋の見直しを行いました。改装工事は、廊下を挟んで西側にある210号室（製図室）、211号室（回路職員居室）、213号室（技術支援員居室）の壁を全て取り去り、風通しよく一つの大きな部屋に改装するもので、そこが全

職員の居住空間となります。部屋の入口には大きなガラス扉を設置し、室内に置く什器類も背の低いものを選ぶことで明るく開放的な空間になりました。特に、技術相談等で装置開発室を訪れるユーザにとっては、スタッフの在・不在が廊下からでも一目で分かり、よりアクセスしやすい環境になったと思います。入口には機械関係と回路関係共通の受付カウンターを設置してあります。カウンターにさえ来ていただければ、誰に相談していいかわからなくても、また、目的の職員が不在であっても、各種相談や工作依頼の受付、スタッフへの連絡等を行いますので、お気軽にお立ち寄りください。



■ 機械 ■ 回路 ■ ガラス

所内依頼件数の推移



■ 施設利用 ■ ナノプラット

所外依頼件数の推移



装置開発棟2F配置図



改装工事後の210～213号室の風景

## 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21年度から平成27年度前期分（平成27年6月22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（通常の協力研究や施設利用の一部を事業扱いにしている）。また、下表にある「特別協力研究」とは、分子研の共同利用研究のための予算に頼らず、研究者自身の予算を使用して実施された共同研究です。萌芽的な段階における共同研究や来所を伴わない共同研究なども含まれています。「特別協力研究」により共同研究の芽を見出すことができた際には、是非、積極的に「協力研究」や「課題研究」に応募いただきたいと思います。

昨年度に課題研究の見直しを行い、平成27年度前期の公募から、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、従来通りの課題研究です。これに対して、課題研究「新分野形成支援」では、今年度、下に示す四つの課題を設定し、公募を行いました。

- (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

その結果、設定課題(3)、(4)について、それぞれ1件の申請を採択するに至りました。課題研究「新分野形成支援」では、新しい研究分野形成のために所内外の研究者が連携するための支援（大型外部資金獲得のための準備支援なども含む）を主な目的としています。その設定課題については、毎年度、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](mailto:aono@ims.ac.jp)）まで、ご提案頂きたいと思っております。

### 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	平成27年度 (6月22日現在)
課題研究	1	0	1	1	2	1	2
協力研究	119	122	108	123	64	64	30
特別協力研究*					167	224	—
協力研究（ナノプラット）	—	—	—	—	51	63	20
分子研研究会	5	6	4	10	10	6	4
若手研究会等	1	1	1	1	1	2	1
岡崎コンファレンス	—	—	—	1	1	1	0
計	126	129	114	136	296	361	57

\*平成24年度以前は集計せず。平成25年度以降は毎年度末に集計。表の数値は国内分のみ。海外との共同研究は、平成25年度77件、平成26年度150件。

### 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27年1月6日～7日	生物無機化学の最先端と今後の展望：金属と生体分子の作用機序解明とモデル化および応用への展開	林 高史（大阪大学大学院工学研究科）	58名
平成27年3月15日～16日	金属イオンを用いた超構造体の構築と機能——錯体化学における境界領域研究の現状と展望——	二瓶雅之（筑波大学数理物質系化学域）	36名
平成27年4月20日～21日	膜タンパク質内部のプロトン透過を考える	神取秀樹（名古屋工業大学大学院工学研究科）	114名
平成27年6月12日～13日	Supramolecular Dynamics at the Interface of Chemistry and Biology	上野隆史（東京工業大学大学院生命理工学研究科）	38名
平成27年6月27日～28日	キラル磁性×光学物性研究会	井上克也（広島大学大学院理学研究科）	43名

### 岡崎コンファレンス

開催日時	研究会名	提案代表者	参加人数
平成27年2月3日～5日	Frontier of X-ray Absorption Spectroscopy and Molecular Science	横山利彦（分子科学研究所）	50名



## 帰郷

光技術班 班長 中村 永研

1984年 分子研技術課入所  
1997年 JAIST 異動  
1999年 分子研異動  
2012年 名古屋大学異動  
2015年 分子研へ 現在に至る

思い起こせば3年前の桜の季節。新しい施設の立ち上げに参加するため、人生の半分を過ごした古巣を飛び出しました。お世話になった方にも相談せずに面接を受け、採用が決まってから報告するなど、仁義も何も考えずの行動でした。

新しい施設とは、愛知県の所有する放射光施設「あいちシンクロトロン光センター（あいちSRセンター）」です。異動当時は、まだ名称が決まっておらず、「中部シンクロトロン光利用施設(仮称)」でした。この施設は、次世代のものづくりに不可欠なナノレベルの先端計測分析施設として誕生し、公益財団法人科学技術交流財団が管理運営しています。私は、名古屋大学全学技術センターに採用していただき、名古屋大学シンクロトロン光研究センターに所属し、科学技術交流財団へ兼務職員として勤めました。

3年前は、施設建設がほぼ終了し、加速器の立ち上げを始めたばかりの頃。まだ建設部隊が日中に作業をするため、加速器の調整運転は夜間に行われていました。施設は愛・地球博の駐車場跡地にあり、最寄り駅はリニモ（愛知高速交通東部丘陵線）の陶磁資料館南駅です。加速器の調整運転が進むにつれ、最終電車間に合わないこともしばしば。始発まで調整できる！と、奮闘していました。奮闘の甲斐あって、ふた月足らずで蓄積リングでの電子蓄積が観測されました。新設リングでの初蓄積に立ち会えたことの喜びは格別なものでした。何十年に一度

のこのタイミングに自分が存在している！と。ひとつの願望が叶いました。

次は本来のお役目のビームラインの立ち上げに集中することになりました。この施設は、X線から軟X線までの光を企業に提供することが目的でした。当初、6本のビームラインが建設され、現在は8本のビームラインが共同利用されています。具体的な私の担当は、30eV～850eVを2枚の回折格子でカバーする軟X線・真空紫外分光ビームラインでした。真空度の向上から始まり、基準高さの再調整、分光素子の再アライメントとつづき、光学素子の炭素汚染との格闘。気づけば1年半が過ぎ、いつの間にか異動から2度目の桜の季節を迎えていました。ビームラインの性能向上に向けた調整期間に突入り、ようやく最大パフォーマンス取得への足がかり、確実な手ごたえを得る事が出来、これでお役目にも一息つけたと、安堵しました。UVSORで軟X線分光器や真空紫外分光器をいろいろ立ち上げてきた経験を十分活かすことができましたが、今回は今までになく部品テストの段階で苦労しました。出来たばかりの施設ですから、テストに使用する機器の不足や、調整のための部品製作と材料の入手などなど。また、実験や装置製作について、古巣の分子研UVSORはもちろん装置開発室にもご相談に乗っていただきました。“困ったときの分子研”とでも言いましょうか、知識と経験に基づく適切なアドバイスと技術提供を

していただきました。何かを実行に移すときの、そのサポート体制が優れた環境にあることを改めて認識することができました。

あいちSRセンターでは、技術職員がビームライン責任者を担当するビームラインもあります。ゆりかごから墓場までのように、研究相談からデータ取得と解析まで支援することもあります。技術的要素はもちろん研究内容に理解を示し、双方に対応していく事が、技術職員に本来望まれる方向性の一つであると痛感しました。私の担当した軟X線・真空紫外分光ビームラインでは、分光器に角度分解光電子分光（ARPES）の装置が接続されましたので、標準的な軟X線吸収端分光（NEXAFS）に加えて光電子分光に関する知識が必要になりました。このような環境に身をおくことができ、あいちSRセンター竹田美和所長に感謝申し上げます。また、財団ならびに大学の事務方には、各方面で融通を利かせていただき沢山の願いを通してもらいました。この場を借りてお礼申し上げます。

共同利用に忙殺されて迎えた夏の頃、分子研への異動について正式なお誘いを頂きました。“はい。ありがとうございます。”と言えたかどうか覚えていませんが、感謝の気持ちで一杯であった事は言うまでもありません。分子研を、岡崎を、故郷のように思っている自分に出会えました。さくら、藤棚、阜に菖蒲。ホタル、花火に石祭り。故郷はいいですね。

## 分子研のRA制度と新たに導入したSRA制度の紹介

分子科学研究所は、総合研究大学院大学の基盤機関として総研大生への経済支援を目的に、「リサーチアシスタント（RA）制度」を充実させています。RA制度は文部科学省が定めた制度であり、大学院生が教員の研究補助者として雇用され、給与が支給される制度です。大学院教育を受けながら給与を受給できるというRA制度の利点から、構造分子科学専攻・機能分子科学専攻に所属する総研大生の多くがこの制度を利用しています。総研大1・2年次には年額およそ85万円以上、3～5年次には99万円以上が給与として支給されており、さらに各研究部門の裁量により増額することも可能です。日本学術振興会特別研究員や外国人国費留学生などの公的で額の大きい経済支援を受けている大学院生を除くすべての総研大生に、RA制度を利用する資格があります。一方、特別共同利用研究員（いわゆる受託院生）として在籍している総研大以外の大学院生については、修士課程で年額およそ50万円以上、博士課程ではおよそ60万円以上が支給されており、やはり、各研究部門の裁量により増額することも可能です。こちらも、日本学術振興会特別研究員などの公的な経済支援を受けていない場合にRA制度を利用する資格があります。

さて、このRA制度に加え、昨年度まで「分子科学研究所特別奨学生（IMS Scholarship Student）」制度がありました。これは、中村前所長の発案で始めた、寄付金を活用した制度で、給与ではなく奨学金として給付されてきました。しかし、寄付金を継続的に集めることが困難なことから財源が少なく

なったため、今年度からこの奨学生制度にかえて、新たな経済支援制度として「分子科学研究所SRA支援制度（SRA Support）」をスタートさせました。これまでの特別奨学生制度は、博士後期課程の総研大生のみを対象としていたのに対し、SRA制度では5年一貫制1年次から受給を可能とすることで、優れた総研大生に対して、より充実した経済的な支援を推進できる制度となっています。1・2年次には年額約170万円、3～5年次には約230万円が給与として支払われることになっています。

SRA支援制度は、岡崎3機関所長会議で、特別時間給を支給することで年間給与を支払額を増加することが認められたため、実施が可能となりました。RA雇用とともに運用されることとなりますが、総研大に入学あるいは在籍する学生の中でも特に優れた研究能力および将来において研究者となる意欲を有する学生に対し特別時間給を支給することと定められています。そのため、構造・機能分子科学専攻合同専攻委員会において、SRA採用審査基準について議論がなされ、平成27年度からその規定に従って運用が始まることとなりました。1・2年次の総研大生については、5年一貫制入学試験の成績がその判定基準となり、入学試験時には特に別途SRA申請等をする必要がありません。1・2年次のSRA採用期間は2年の在学期間になります。一方、3～5年次の総研大生については、以前の特別奨学生の選考手順に従って採否が判定されます。そのため、入学試験受験者であっても別途SRA申請をする必要があり、SRA採用期間は3～5年次在学時の最

大3年間ということになります。詳細は、下記分子研公式ホームページURLを参照してください。

SRA支援制度は今年度から始まったばかりの制度であり、これからさらに詳細な検討が必要であることが既に指摘されていますし、また、実際の運用経過から改善すべき点も明らかになってくると思います。今後、より良いものにしていく所存です。通常のRA制度を含めて、気になる問題点があれば大学院委員長・横山宛お寄せください。これからも、分子科学研究所・総合研究大学院大学が目指す広い視野と高い専門性を兼ね備えた大学院生教育・若手研究者育成のため、総研大生ならびに特別共同利用研究員の経済支援制度について、ご理解・ご支援・ご助言を賜れば幸いです。

（横山利彦、福富幸代 記）

### ■RA制度問合せ

〒444-8585

愛知県岡崎市明大寺町西郷中38番地  
自然科学研究機構 岡崎統合事務センター  
総務部国際研究協力課 大学院係

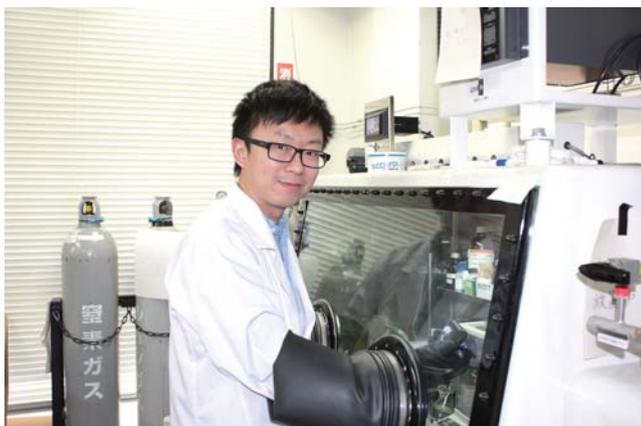
電話：0564-55-7139

E-mail：r7139@orion.ac.jp

### ■詳細 下記URLより

分子科学研究所SRA支援制度の概要：  
<http://www.ims.ac.jp/education/sra.html>

## COLUMN



## Memorable internship experience at IMS

Louis Lee Sze Koon,  
University of Malaya, Malaysia

A great opportunity came to me in October 2014. Prof. Yamamoto and Prof. Sakurai had given me a chance to participate in the IMS International Internship Program (IMS-IIP) for 6 months. Japan is a beautiful country that I always wanted to visit, and it was my first time to visit Japan. Indeed, the winter and spring scenery in Japan is altogether fascinating! I would like to express my gratitude to my supervisor Prof. Masaoka and Assistant Prof. Dr. Kondo, whose expertise, understanding, and patience, added considerably to my internship experience. Furthermore, I could not have completed my work without the help from Dr. Praneeth, Dr. Nakamura, lab mates, and lab assistants. Masaoka group's members are friendly, energetic, and extremely helpful, and we had wonderful memories during working and partying hours. My internship project was focused on the electrocatalytic reduction of CO<sub>2</sub> using ruthenium polypyridine complex. Great experience during the internship brought my decision to pursue PhD study under the supervision of Prof. Masaoka.

Basically, the internship program has provided almost everything

for international student; financial support by JASSO scholarship, comfortable accommodation, and Japanese language lesson, which enable international student to adapt to Japanese life and culture easily. In addition, the participation in SOKENDAI Asian Winter School Conference was a very rewarding experience being able to interact with researchers from other countries and absorb new knowledge.

IMS is an excellent institute for conducting high impact research, with a number of internationally reputed research groups, advanced instruments, and supportive administration staffs. It is situated in Okazaki city, a peaceful city endowed with rich history, well-preserved historical landmarks, and contemporary residential architectures. Moreover, the location of IMS is very strategic being near to Higashi-Okazaki train station and shopping malls, and it takes only approximately 30 minutes to Nagoya city by train.

Last but not least, I would like to thank the IMS-IIP committee members. "Travel and change of place impart new vigor to the mind"—Seneca. I believe that the IMS-IIP will continue to enrich the exposure of

foreign researchers, and foster quality collaboration with universities around the world.

## IMS International Internship Program

Louis GOUILLART,  
**Chimie ParisTech, France**



As part of the education for scientists, the internship at a research institute is crucial for personal development, experience of the research world and scientific knowledge. I am fully convinced my internship in IMS is currently providing me all of these essential features.

I am a French Master's student from "Chimie ParisTech", one of the major schools of Chemical Science and Engineering in France. A 5-year partnership was recently renewed between IMS and Chimie ParisTech, giving French students the opportunity to complete research internships in IMS. Thanks to this collaboration, I was accepted for a five month internship from 2015 April, 23rd to August, 21st in Prof. Akiyama group, division of Trans-Hierarchical Molecular Systems, CIMoS. As part of this research group working on the molecular mechanisms of the cyanobacterial circadian clock, I was able to learn a lot about Biochemistry and I discovered many new experimental techniques at the lab.

Before my arrival in IMS, I did not know what to expect of Japan and

of my internship. It was somehow unsettling as almost everything was new to me here in Japan. However everyone I encountered in IMS was very friendly, helping me and providing all the necessary information. On top of that, I quickly found myself taking part in various events held at IMS: symposiums, welcome parties and so on. Thanks to this I had the opportunity to meet new people and discover more of Japanese culture. My five months stay at IMS also allowed me to discover Japan's cultural heritage and to visit multiple areas and city of Japan, from Nagoya to Kyoto and Osaka, as well as Tokyo's huge metropolis.

I am very grateful to everyone that worked toward making my internship a reality. I would like to warmly thank Prof. Ohmine, Director General of IMS and Prof. Akiyama for giving me the opportunity to complete this internship, Dr. Mukaiyama as well as everyone from Prof. Akiyama group who helped me and trained me during my internship, the Foreign Affairs Division of IMS for organizing and planning my stay in Japan and Prof. Aka from Chimie ParisTech. Many

thanks to all for bringing me this amazing experience.

E V E N T R E P O R T

## 分子研シンポジウム2015

**担当教員**

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 教授 飯野 亮太

2015年5月29日に岡崎コンファレンスセンターで「分子研シンポジウム2015」を行いました。分子研シンポジウムでは、分子研や総研大にゆかりのある先生方を講師としてお招きし、分子研時代の思い出と共に最新の研究成果をご紹介頂いています。今年は、唯美津木先生（名大教授）、森健彦先生（東工大教授）、加藤毅先生（東大准教授）、高田彰二先生（京大教授）、井村考平先生（早大教授）の5名の先生方にご講演頂きました。講師の先生方は、最新の研究内容だけでなく、ご自身にとって分子研は「どのような存在か」「どのような影響を与えたか」について生き生きと語って下さいまし

た。総研大への進学を考慮している参加者にとって非常に有意義であったと、担当者として確信しています。また個人的には、高田先生がご紹介された総研大1-3期生の方々の写真が最も印象的でした（写真）。尚、分子研シンポジウムは例年、分子研オープンキャンパスとカップルしてシンポジウムが一日半、オープンキャンパスは半日の日程で行われていました。今回は新しい試みとして二日目は全日オープンキャンパスとし、午前中に分子研の研究室主催者7名による研究紹介を行いました。分子研や総研大のOB、OGによる講演だけでなく、分子研に現役で所属している研究者による研究紹介は参

高田彰二先生（京大）による講演



加者にとって非常に有益だったようですので、次回に引き継ぎたいと思います。皆様のご協力、よろしくお願いいたします。

## 分子研オープンキャンパス2015

**担当教員**

2015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 正岡 重行

2015年5月30日（土）、岡崎コンファレンスセンターにおいて、分子研オープンキャンパス2015が開催された。本事業は、他大学の学部学生・大学院生及び若手研究者等に対して、分子研における研究環境や設備、大学院教育、研究者養成などの活動を知ってもらい、分子研や総研大への理解を深めてもらうことを目的としている。9時30分より、大峯所長による分子研の概要説明、横山教授による総研大の概要説明がそれぞれ行われた後、7名の分子研PI（正岡、柳井、古谷、榎山、古賀、山本、飯野（発表順、敬称略））から各グループの研究紹介が行われた（榎山Gの紹介は泉奨助教が代理発表）。

昼食の後、オープンキャンパスの概要説明を筆者が行い、16時までの間、明大寺・山手の両地区の各グループの研究室を自由に見学してもらった。

本年度の参加者は64名であり、その内訳は、学部学生35名、修士課程学生19名、教員等の大学関係者6名、民間企業からの参加が4名であった。昨年度の参加者数は42名だったので、今年度は大幅に増加したことになる。今年度より分子研PIによる研究紹介の時間を設けるなど、プログラムに大きな変更を加えたが、それらの取り組みの効果が参加者数の増加に表れたの



であれば幸いである。最後に、本事業にご協力いただきました全ての先生方、関係者の皆様に、この場を借りて厚く御礼申し上げます。

## 受賞者の声

橋谷 俊 (物理科学研究科 構造分子科学専攻 5年一貫性博士課程4年)

### 日本化学会第95春季年会 (2015) 学生講演賞

2015年3月26 - 29日に日本大学で開催された日本化学会第95春季年会にて口頭B講演を行い、学生講演賞を受賞しました。受賞対象となった研究『アキラな光と金ナノ構造体を用いた生体分子のキラリティセンシング』では、キラリティを有しない長方形金ナノ構造体と直線偏光を上手く組み合わせることにより、ナノ構造近傍に円偏光よりも強くねじれた光を発生させ、それを使ってキラな超分子であるササゲーモザイクウイルスのキラリティを検出することに挑戦しました。

私は2014年9 - 12月の間、総研大物理科学研究科のコース別教育プログラムを利用してスコットランド

のGlasgow大学に留学し、Kadodwala博士の研究室で本研究を実施してきましたが、本研究は、Kadodwala博士らのキラ検出限界をプラズモンにより向上させる研究と、私たちがこれまで実施してきた金ナノ構造体における局所キラリティの研究を融合させたものです。色々アクシデントもあった3ヶ月弱の留学でしたが、しっかりと成果を出すことができ、しかもその成果で日本の化学分野で最も大きな学会である日本化学会から賞を頂けたということで、実りの多いものとなりました。

今回の受賞は、ひとえに研究およ

一番右が筆者



び研究発表をご指導いただきましたKadodwala博士と岡本裕巳教授をはじめとする両研究室の皆さまのおかげです。また、本研究を遂行するにあたり、総研大と分子研からも資金面で多大なるご支援をいただきました。この場を借りて御礼申し上げます。

Arunima Sikdar (物理科学研究科 機能分子科学専攻 5年一貫制博士課程4年)

### 総研大アジア冬の学校 優秀ポスター賞/ 第25回大幸財団留学育英奨学生

The Winter School of SOKENDAI /Asian CORE Program "Research and Its Challenges in Molecular Science: Fundamentals and State-of-the-Art" was held in Okazaki, Japan, dated from 13th January to 15th January 2015. This Asian school focused on innovations and challenges in molecular science, from basics to cutting-edge researches. All programs were intended for graduate students and young researchers in Asian countries. There were a total of 10 oral and 56 poster presentations from young researchers and 19 excellent talks from professors.

In this school, I had an oral presentation self-appeal Flash Talk for 5 minutes titled as "Structural insight into functional role of archaeal homolog of proteasome assembly chaperone PbaA". The living systems generally are composed of many biomolecules which are often assembled and disassembled to maintain cellular integrity and hence forms complicated biomolecular mechanisms. Although the organization mechanisms of

these biomolecules in the living system remain unclear. To address such issue, I focused on the proteasome assembly which is one of those complicated biomolecular mechanisms. I have chosen archaeal homolog of proteasome assembly chaperone PbaA as a model to study. I have successfully determined the 2.25-Å resolution 3D structure of a PbaA pentamer by X-ray crystallography experiments. My crystallographic data revealed the distinct structural features of potential C-terminal proteasome activating segments among archaeal Pba proteins. These findings not only offer insights into the molecular evolution relationships between the proteasome-assembly chaperones and the proteasome activators but also provide clues as to how scaffolds are designed to create distinct homooligomeric structures with homologous protomers.

Through these presentations and interactions with other young participants, I got deep understanding about various aspects of molecular science. I was amazed by nice



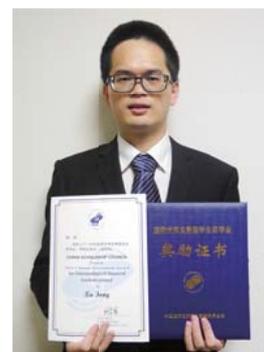
talks from renowned professors from all over Asia and I learned various ways of making good presentations.

Finally the organizers announced that I was one of the best presenters in the poster session among the other participants. I was so excited to get that award. I would like to convey thanks to the Winter School committee for giving me such platform to present my research. In addition to this poster award I got scholarship from Daiko Foundation. I would like to use this scholarship for my future research.

My sincere gratitude goes to Prof. Koichi Kato, Dr. Tadashi Satoh, Dr. Hirokazu Yagi, Dr. Maho Yagi-Utsumi and Dr. Takumi Yamaguchi. I would like to thank all my lab members for their kind help.

**Xu Hong** (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)

**2014 Chinese Government Award for outstanding self-financed student abroad**



On 24th April 2015, I received the 2014 Chinese Government Award for Outstanding Self-financed Student Abroad at The Embassy of People's Republic of China in Japan. This award is given to 500 doctor students worldwide (about 30 in Japan) each year based on their outstanding doctoral research work.

Last year, I applied this award with my research work on "Catalytic covalent organic frameworks via pore surface engineering", which developed a general strategy for the design and synthesis of chiral covalent organic frameworks and demonstrated their functions as heterogeneous asymmetric

organocatalysts. This new concept provides an efficient method for the construction of crystalline porous catalysts with enhanced activity, high enantioselectivity, excellent stability, cycle performance and environmental benignity.

By taking this chance, I would like to express my gratitude to my supervisor, Prof. Donglin Jiang for his advice, encouragement and help through all these years. This award together with these research works would not have been possible without the help of many IMS staff members whose contributions are gratefully acknowledged.

Finally, for these 3 years in Okazaki, I

would like to thank my lab mates and friends who supported me in the researches and daily life. This award encourages and pushes me to do better in my future research work.

平成26年度3月総合研究大学院大学修了学生及び学位論文名

専攻	氏名	博士論文名	付記する専攻分野	授与年月日
構造分子科学	中村 豪	Synthesis and Redox Reactivity of Phosphine-Substituted Ruthenium(II) Polypyridine Complexes	理学	H27. 3.24
	Hong XU (徐 宏)	Design and Functions of Imine-Linked Covalent Organic Frameworks	理学	H27. 3.24
機能分子科学	平井 義則	Development of novel amphiphilic polymer-supported palladium complexes and their application to C-X bond-forming cross-coupling reactions in water	理学 (学位授与論文博士)	H27. 3.24
	新村 祐介	Effects of Doping in Photovoltaic Organic Semiconductor Films	理学 (学位授与論文博士)	H27. 3.24

総合研究大学院大学平成27年度(4月入学) 新入生紹介

専攻	氏名	所属	研究テーマ
構造分子科学	佐久間 航也	協奏分子システム研究センター	タンパク質の理論的デザイン
	XU, Qing	物質分子科学研究領域	Covalent Organic Frameworks and Conjugated Porous Polymer.
	牛島 陸	生命・錯体分子科学研究領域	PCET 機能を付与した金属錯体の多電子移動反応と配列制御
	金澤 悠紀	理論・計算分子科学研究領域	電子状態理論による励起状態と不均一触媒に関する研究
	木村 賢太郎	光分子科学研究領域	有機・無機半導体界面の運動量依存エネルギー準位接合
機能分子科学	新宅 直人	物質分子科学研究領域	インピーダンス分光による共蒸着膜太陽電池のキャリア移動度、寿命、キャリア濃度の決定
	石渡 大貴	生命・錯体分子科学研究領域	1分子機能計測による生体分子モーターのエネルギー変換機構の解明
	市位 駿	生命・錯体分子科学研究領域	超高活性ピンサー型錯体触媒の開発
	溝口 道栄	光分子科学研究領域	強相関極低温リユードベリ気体を用いた量子多体ダイナミクスの研究

各種一覧

■分子科学フォーラム

回	開催日時	講演題目	講演者
第105回	平成27年5月14日	野菜がおいしくビタミンも増加ーLEDが拓く近未来の植物工場	吉田 淳一 (千歳科学技術大学・特任教授)

■分子研コロキウム

回	開催日時	講演題目	講演者
第866回	平成27年2月20日	磁場・電場・電磁場による有機化合物の空間操作と捕捉：低温分子科学の新展開	百瀬 孝昌 (ブリティッシュコロンビア大学、カナダ・教授)
第867回	平成27年2月24日	Towards scalable quantum memories	Ian Walmsley (オックスフォード大学・教授)
第868回	平成27年4月1日	Biosensing with a Twist: Detection and Characterization of Biomaterials with Sculpted EM Fields	Prof. Malcolm Kadodwala (School of Chemistry, Glasgow University)
第869回	平成27年4月8日	Combining ultrafast optical and core-level spectroscopies for the study of chemical dynamics	Prof. Majed Chergui (Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne)
第870回	平成27年5月25日	Mapping Atomic Motions with Ultrabright Electrons : The Chemists' Gedanken Experiment Enters the Lab Frame	Prof. R. J. Dwayne Miller (Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter / University of Toronto)
第871回	平成27年6月19日	機能性分子を自在に操る時代を目指して：局在電子系の物理	解良 聡 (分子科学研究所・教授)

■人事異動 (平成26年11月2日～平成27年6月1日)

異動年月日	氏名	区分	異動後の所属・職名	現(旧)の所属・職名	備考
26.11.30	嘉治 寿彦	辞職	東京農工大学大学院工学研究院先端物理工学部門 准教授 (テニュアトラック)	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 助教	
26.11.28	阿部 仁美	辞職		物質分子科学研究領域電子物性研究部門 事務支援員	
26.12.16	山崎 由実	職名変更	物質分子科学研究領域電子物性研究部門 事務支援員	物質分子科学研究領域電子物性研究部門 技術支援員	
26.12.31	CHALUPSKY, Jakub	辞職	Institute of Organic Chemistry and Biochemistry AS CR, v.v.i. Researcher	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学研究第一研究部門 研究員 (IMS フェロー)	
26.12.31	BOEKFA, Bundet	退職	Kasetsart University Kamphaeng Saen Campus, Faculty of Liberal Arts and Science, Chemistry Department, Asst. Prof. Dr.	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	
26.12.31	BOBUATONG, Karan	辞職	Rajamangala University of Technology Thanyaburi, Faculty of Science and Technology, Thailand, Lecturer	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	
26.12.31	小若 泰之	辞職		光分子科学研究領域光分子科学研究第一研究部門 研究員	
26.12.31	永園 尚代	辞職	研究力強化戦略室 特任専門員	研究力強化戦略室 事務支援員	
27. 1. 1	中村 彰彦	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 助教	東京大学大学院 農学生命科学研究科学術振興会 特別研究員 P D	
27. 1. 1	中村 彰彦	命ずる	生命・錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 助教	(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 助教)	
27. 1. 1	永園 尚代	採用	研究力強化戦略室 特任専門員	研究力強化戦略室 事務支援員	
27. 1. 1	YANG, Tao	名称付与	理論・計算分子科学研究領域計算分子科学研究部門 研究員 (IMS フェロー)	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	
27. 2. 1	内藤 寛恵	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 技術支援員		
27. 2.28	水瀬 賢太	辞職	東京工業大学大学院理工学研究科 助教	光分子科学研究領域光分子科学研究第一研究部門 助教	
27. 2.28	WANG, Heng	辞職	関西学院大学理工学部 博士研究員	物質分子科学研究領域 特任研究員	
27. 3. 1	本村 寛恵	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		
27. 3.13	ARZAKANTSYAN, Mikayel	辞職		分子制御レーザー開発研究センター先端レーザー開発研究部門 研究員 (IMS フェロー)	
27. 3.31	村橋 哲郎	辞職	東京工業大学院理工学研究科 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	
27. 3.31	許 斐太郎	辞職	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設加速器第六研究系 特別助教	極端紫外光研究施設電子ビーム制御研究部門 助教	

各種一覽

異動年月日	氏名	区分	異動後の所属・職名	現(旧)の所属・職名	備考
27. 3.31	堀 米 利 夫	定 年 退 職	研究力強化戦略室 特任専門員	技術課光技術班 班長	
27. 3.31	藤 原 正 規	辞 職		光分子科学研究領域光分子科学第一研究部門 特任助教(分子科学研究所特別研究員)	
27. 3.31	BUSSOLOTTI, Fabio	退 職	光分子科学研究領域光分子科学第三研究部門 技術支援員	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	
27. 3.31	三 宅 伸一郎	退 職		光分子科学研究領域光分子科学第一研究部門 研究員	
27. 3.31	DALAPATI, Sasanka	退 職	JSPS 外国人特別研究員	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 研究員(IMS フェロー)	
27. 3.31	PAN, Shiguang	退 職	JSPS 外国人特別研究員分子研 錯体触媒研究部門	生命・錯体分子科学研究領域錯体触媒研究部門 研究員	
27. 3.31	白 井 英 登	退 職	分子科学研究所分子制御レーザー開発研究センター先端レーザー開発研究部門 特任助教	分子制御レーザー開発研究センター先端レーザー開発研究部門 研究員(IMS フェロー)	
27. 3.31	堀 内 新之介	退 職	長崎大学大学院工学研究科物質・工学コース 助教	協奏分子システム研究センター機能分子システム創成研究部門 研究員(IMS フェロー)	
27. 3.31	郡 司 康 弘	退 職		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	
27. 3.31	北 辻 千 展	退 職		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	
27. 3.31	谷 澤 三佐子	退 職		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 事務支援員	
27. 3.31	安 西 高 廣	退 職	国立がん研究センター東病院臨床開発センター 特任研究員	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	
27. 3.31	池 田 由佳子	退 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 技術支援員	
27. 3.31	初 井 宇 記	客 員 終 了	(理化学研究所播磨研究所 放射光科学総合研究センター XFEL 研究開発部門 チームリーダー)	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員准教授	
27. 3.31	野 田 進	客 員 終 了	(京都大学 大学院工学研究科 教授)	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員教授	
27. 3.31	伊 藤 敦	客 員 終 了	(東海大学 工学部原子力工学科 教授)	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員教授	
27. 4. 1	古 池 美 彦	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 助教		
27. 4. 1	泉 関 督 人	採 用	生命・錯体分子科学研究領域錯体触媒研究部門 助教	中部大学総合工学研究所 助教	
27. 4. 1	上 羽 貴 大	採 用	光分子科学研究領域光分子科学第三研究部門 助教		
27. 4. 1	出 田 真一郎	採 用	極端紫外光研究施設光物性測定器開発研究部門 助教	東京理科大学理工学部物理学科 助教	
27. 4. 1	中 村 永 研	採 用	技術課光技術班 班長	名古屋大学全学技術センター技術専門職員	
27. 4. 1	林 憲 志	昇 任	技術課光技術班 極端紫外光技術一係長	技術課光技術班 極端紫外光技術二係 主任	
27. 4. 1	岩 橋 建 輔	昇 任	技術課計算科学技術班 計算科学技術一係長	技術課計算科学技術班 計算科学技術二係 主任	
27. 4. 1	藤 原 基 靖	昇 任	技術課機器利用技術班 機器利用技術一係 主任	技術課機器利用技術班 機器利用技術一係 係員	
27. 4. 1	岡 野 泰 彬	昇 任	技術課光技術班 光計測技術係 主任	技術課光技術班 光計測技術係 係員	
27. 4. 1	蓮 本 正 美	配 置 換	技術課光技術班 極端紫外光技術二係長	技術課光技術班 極端紫外光技術一係長	
27. 4. 1	山 崎 潤一郎	配 置 換	技術課光技術班 極端紫外光技術三係長	技術課光技術班 極端紫外光技術二係長	
27. 4. 1	酒 井 雅 弘	配 置 換	技術課光技術班 極端紫外光技術二係 主任	技術課光技術班 極端紫外光技術三係 主任	
27. 4. 1	近 藤 直 範	配 置 換	技術課光技術班 極端紫外光技術二係 主任	技術課光技術班 極端紫外光技術一係 主任	
27. 4. 1	手 島 史 綱	配 置 換	技術課光技術班 極端紫外光技術二係 主任	技術課光技術班 極端紫外光技術一係 主任	
27. 4. 1	松 尾 純 一	配 置 換	技術課計算科学技術班 計算科学技術一係 係員	技術課計算科学技術班 計算科学技術二係 係員	

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
27. 4. 1	長屋 貴量	配置換	技術課計算科学技術班 計算科学技術二係 係員	技術課計算科学技術班 計算科学技術一係 係員	
27. 4. 1	井村 考平	客員 嘱	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員教授	(早稲田大学先進理工学部 化学・生命化学科教授)	
27. 4. 1	山田 豊和	客員 嘱	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員准教授	(千葉大学大学院融合科学研究科准教授)	
27. 4. 1	平原 徹	客員 嘱	光分子科学研究領域 光分子科学第四研究部門 客員准教授	(東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻准教授)	
27. 4. 1	村橋 哲郎	兼委 任嘱	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)	(東京工業大学院理工学研究科 教授)	
27. 4. 1	白井 英登	採用	分子制御レーザー開発研究センター先端レーザー開発研究部門 特任助教(分子科学研究所特別研究員)	分子制御レーザー開発研究センター先端レーザー開発研究部門 研究員(IMSフェロー)	
27. 4. 1	河津 励	採用	理論・計算分子科学研究領域(横浜市立大学生命ナノシステム科学研究科勤務) 特任研究員	東京大学大学院総合文化研究科 特任研究員	
27. 4. 1	井上 三佳	採用	機器センター 特任研究員		
27. 4. 1	堀米 利夫	採用	研究力強化戦略室 特任専門員	技術課光技術班 班長	
27. 4. 1	神谷 美穂	採用	研究力強化戦略室 特任専門員		
27. 4. 1	黒井 邦巧	採用	生命・錯体分子科学研究領域生体分子情報研究部門 研究員(IMSフェロー)		
27. 4. 1	WANG, Weiwei	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	京都大学 福井謙一記念研究センター Postdoctoral research	
27. 4. 1	奥下 慶子	採用	機器センター 研究員	東京農工大学工学部生命工学科 特任助教	
27. 4. 1	甲田 信一	採用	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 研究員		
27. 4. 1	平田 修一	採用	生命・錯体分子科学研究領域錯体触媒研究部門 研究員	大阪大学産業科学研究所 特任研究員	
27. 4. 1	YAHIA, Vincent	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	エコール・ポリテクニク(フランス理工科学校) 博士研究員	
27. 4. 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 技術支援員	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	
27. 4. 1	矢崎 稔子	所変 属更	研究力強化戦略室 技術支援員	生命・錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 技術支援員	
27. 4. 1	伊木 志成子	所変 属更	機器センター 技術支援員	岡崎統合バイオサイエンスセンター生命時空間設計研究領域 技術支援員	
27. 4. 1	横田 光代	所変 属更	機器センター 事務支援員	物質分子科学研究領域電子構造研究部門 事務支援員	
27. 4. 1	清水 厚子	所変 属更	光分子科学研究領域光分子科学第三研究部門 事務支援員	生命・錯体分子科学研究領域生体分子情報研究部門 事務支援員	
27. 4. 1	杉山 加余子	所変 属更	研究力強化戦略室 事務支援員	技術課 事務支援員	
27. 4. 1	大原 恭子	所変 属更	研究力強化戦略室 事務支援員	技術課 事務支援員	
27. 4. 1	中根 香織	所変 属更	岡崎統合バイオサイエンスセンター事務支援員	物質分子科学研究領域電子構造研究部門 事務支援員	
27. 4. 1	SECHRIST, Jeremiah S	所変 属更	分子科学研究所 研究支援員	基礎生物学研究所 研究支援員	
27. 4. 8	XU, Hong	採用	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 研究員		
27. 4.16	山本 真由子	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 技術支援員		
27. 4.16	東海林 麻美	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 技術支援員		
27. 4.30	檜山 卓也	辞職		協奏分子システム研究センター階層分子システム解析研究部門 研究員	
27. 5. 1	ROY, David	採用	生命・錯体分子科学研究領域錯体触媒研究部門 特任研究員		
27. 5. 1	藤波 武	採用	生命・錯体分子科学研究領域錯体触媒研究部門 研究員	日本学術振興会特別研究員(PD)	

各種一覧

異動年月日	氏名	区分	異動後の所属・職名	現(旧)の所属・職名	備考
27. 5.31	松波雅治	辞職	豊田工業大学 准教授	極端紫外光研究施設光物性測定器開発研究部門 助教	
27. 5.31	常包正樹	辞職		分子制御レーザー開発研究センター先端レーザー開発研究部門 特任研究員	
27. 5.31	奥下慶子	辞職	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 特任助教 (分子科学研究所特別研究員)	機器センター 研究員	
27. 6. 1	小杉貴洋	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 助教		
27. 6. 1	奥下慶子	採用	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 特任助教 (分子科学研究所特別研究員)	機器センター 研究員	
27. 6. 1	中村高大	採用	物質分子科学研究領域電子構造研究部門 特任研究員		
27. 6. 1	古賀理恵	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 特任研究員		

## 編集後記

前号出版後、分子科学研究所は40周年の節目を迎えました。長い歴史を経ながら、数多くの人々が累積して当研究所に関わってきたわけですが、同時に当冊子の読者も分子科学コミュニティの成長と歩調を合わせて幅広い規模になっていると思います。本冊子は、分子研の最近の研究活動や動向を発信する広報の媒体ですが、一方で、コミュニティ内の意見・情報発信のチャンネルとしての役割も担っていることも面白いユニークな点だと思います。分子科学コミュニティの読者の声を拾っていくには、編集委員と読者のネットワークを利用しますが、最近のレターズ編集会議では、“昔”のネットワークを掘り起こせる編集委員が年長の委員長以外いないというケースが多々あります。本号の出版にあたり、ご多忙中にもかかわらずご執筆をお引き受け頂いた著者の皆様に深く感謝申し上げます。

編集担当 柳井 毅

## 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/>

I M S Letters

分子研と研究者をつなぐ

VOL. 72

# 分子研レターズ

発行日 平成27年9月（年2回発行）

発行 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構

分子科学研究所

分子研レターズ編集委員会

〒444-8585

愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38

編集 小杉 信博（委員長）

柳井 毅（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

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 株式会社コムラ

本誌記載記事の無断転載を禁じます

