

# 分子研レターズ

VOL. **74**

September 2016  
ISSN 0385-0560

●巻頭言

## 「分子科学」と「分子技術」

山本 尚 [中部大学 教授]

●レターズ

## 分子研にしかできないこと

水谷 泰久 [大阪大学大学院理学研究科 教授]

●特別寄稿

## 分子科学とは何か—科学史からのアプローチ—

菊池 好行 [東京外国語大学 特別研究員]

●分子科学の最先端

## 水を酸化して酸素をつくる金属錯体触媒

正岡 重行 [生命・錯体分子科学研究領域 准教授]

近接場顕微分光イメージングによる金ナノ微粒子低次元集合構造における電場分布と構造との関係  
島田 透 [弘前大学教育学部理科教育講座 講師]

Pdナノクラスター触媒による耐熱素材「芳香族ポリケトン」の迅速合成  
—ナノクラスター触媒との出会い—

前山 勝也 [山形大学大学院有機材料システム研究科 准教授]

神経変性疾患の病態形成に関わるタンパク質の構造変化

古川 良明 [慶應義塾大学理工学部生命機構化学研究室 准教授]

## 巻頭言

- 01 「分子科学」と「分子技術」 ● 山本 尚 [中部大学・教授]

- 02 川合 眞紀 所長就任

## レターズ

- 03 分子研にしかできないこと ● 水谷 泰久 [大阪大学大学院理学研究科・教授]

## 分子科学の最先端

- 06 水を酸化して酸素をつくる金属錯体触媒

● 正岡 重行 [生命・錯体分子科学研究領域・准教授]

## 特別寄稿

- 10 分子科学とは何か—科学史からのアプローチ— ● 菊池 好行 [東京外国語大学・特別研究員]

## IMSニュース

- 14 大峯 巖 分子科学研究所長への感謝の会 報告
- 15 分子科学研究所所長招聘会議「化学におけるグローバル化」
- 16 受賞者の声——長坂将成、野村雄高、谷中冴子、須田理行
- 19 事業報告
- 20 国際研究協力事業報告

## IMSカフェ

- 22 New Lab——藤田 貴敏、岡崎 圭一
- 26 分子研出身者の今——中林 孝和
- 28 分子研出身者の今 受賞報告——篠原 久典、山田 陽一
- 30 分子研を去るにあたり——倉重 佑輝、福田 良一、西山 嘉男
- 33 新人自己紹介
- 38 アウトリーチ活動

## 共同利用・共同研究

- 39 共同利用研究ハイライト
- 近接場顕微分光イメージングによる金ナノ微粒子低次元集合構造における電場分布と構造との関係  
島田 透 [弘前大学教育学部 講師]
- Pdナノクラスター触媒による耐熱素材「芳香族ポリケトン」の迅速合成—ナノクラスター触媒との出会い—  
前山 勝也 [山形大学大学院有機材料システム研究科 准教授]
- 神経変性疾患の病態形成に関わるタンパク質の構造変化  
古川 良明 [慶應義塾大学理工学部 准教授]

- 45 施設だより
- 47 共同利用・共同研究に関わる各種お知らせ

## 分子科学コミュニティだより

- 49 運営に関わって——朝倉 清高、寺崎 亨
- 51 関連学協会等との連携

## 分子研技術課

- 54 分子研における3Dプリンタの活用 近藤 聖彦 [機器開発技術班]

## 大学院教育

- 56 コラム——先端研究指向コースを活用した海外短期留学
- 57 受賞者の声——榎本 孝文
- 58 イベントレポート
- 59 修了学生及び学位論文名

## 各種一覧

## 連載

- 27 覧古考新04
- 53 覧古考新05



# 「分子科学」と「分子技術」

山本 尚

中部大学 教授  
日本化学会 会長

去る5月13日、川合新所長開催の所長招聘会議で、私は分子科学と分子技術の密接な関係についてお話しした。「分子科学」は反応研究の学問としての化学と、物性研究の学問としての物理学が分子概念を共通にして発生した学問領域と定義されている。分子科学研究所はこの「分子科学」のメッカである。一方、「分子技術」は我が国発の新研究領域の造語であり、化学を基盤とする課題追求型の研究領域を指している。

分子技術とは目的を持って分子を設計・合成し、分子レベルで物質の物理的・化学的・生物学的機能を創出し、従前の科学技術を質的に一変させる一連の技術を指している。一言で言えば、「無限に存在する分子から、最善・最適の分子を、合成と理論と計算科学との協働により、自在に設計・合成する究極の物質合成をすること」と言える。近年、多くの科学技術が分子レベルでの物性制御を必要としており、化学を基盤とする広範囲な学問領域はさらに拡大して、将来は科学技術全てを包含すると思われる。分子科学は化学と物理の接点から生まれたが、分子技術ではこれに加えて、より積極的な人類への福祉（市場）に対する貢献の3者の接点が要

求されているのである。

課題追求型の分子技術ではイノベーションが最重要視される。過去の延長からは、真のイノベーションは生まれない。従って、イノベーションには従来の考えからの思い切った跳躍が要求される。これは、自らマニュアルも教科書もない分野を開拓し、独自のテキストを作ることに繋がる。一方、新しい基礎学理は自らの研究領域より外の研究領域との接点から新たに生まれることが多い。例をあげれば、化学と生物学から、**chemical biology** が誕生したようなものである。化学は人類が作り上げた最も歴史の古い学問であり、化学を出発点として多くの学問が誕生してきたし、これからも誕生することが期待されている。成熟したとはいえ、化学の領域内でテーマを探すことは、さほど難しいことではない。しかし、化学の領域の外にテーマを求めるのは、大きなチャレンジであろう。思い切った船出を決心し、オリジナルな新研究領域を打ち立てることは、若い研究者にとって自らの一生をかける決心が必要であるが、その果実は大きい。野心的で大胆な構想を抱き、新しい研究領域を創成するのに、今ほどふさわしい

時代はないからである。

一方、分子科学は課題追求型というよりは純粋理学の香りがする。基礎から応用に向かって挑戦する分子技術に対して、分子科学は基礎から鳥瞰的に将来を見据えた新しい純正学問の樹立を目指しているようである。しかし、課題目標型の分子技術ばかりでなく、基礎から純正に向かう分子科学でもイノベーションへの道筋は同じではないだろうか。そして両者に共通する目標は、化学の外に問題を見だし、未踏のテキストを作ることからの革新の誕生である。

やまもと ひさし

中部大学教授/分子性触媒研究センター長/研究推進機構長/総合工学研究所長  
シカゴ大学名誉教授  
名古屋大学名誉教授

## 略 歴

1967年 京都大学工学部工業化学科 卒業  
1971年 ハーバード大学化学教室 Ph.D  
1971年 東レ 基礎研究所 研究員  
1972年 京都大学 助手  
1976年 京都大学 講師  
1977年 ハワイ大学 准教授  
1980年 名古屋大学 助教授  
1983年 名古屋大学 教授  
2002年 シカゴ大学 教授  
2011年 中部大学 教授  
2012年からCREST「新機能創出を目指した分子技術の構築」の研究総括・領域アドバイザー  
2016年から日本化学会 会長

# 川合 眞紀 所長就任

(分子研レターズ編集委員会からご挨拶をお願いしました)



分子科学研究所の設立は1975年。分子科学に対する大いなる期待を担い、化学と物理の力を結集して、期待に応えていく方針は、分野融合型研究の走りであり現在でも新鮮です。当時大学院生だった私にとって分子研は理想的な研究所で、ここで働くことは憧れでした。所員としてはご縁がなかったものの、共同利用を通じて計算機やUVSORを使わせていただきました。80年代前半の分子研は国内外から若い研究者が集まり、暑苦しいほどの熱気にあふれていました。主人が当時の電子構造部門で助手を務めていたこともあり、公私ともに皆さんとお付き合いがあったことも、思い出されます。当時の若手は、今や泣く子も黙る大御所であることは、いうまでもありません。分子研の思い出は尽きません。研究者人生の最後の仕事を所長として分子研に勤めることになり、ご縁を感じております。分子科学のフロンティアを牽引し、研究人材交流の要として、そして、大学共同利用機関として大学の分子科学研究を支える存在であり続けるためにみなさまのご支援をお願いします。

設立以来41年、この間に多くの画期的な研究が行われ、日本の分子科学研究を支える数百人もの人材を輩出してきました。有望な若手を育て、教授や准教授として大学へ還流する流動的な人事を続けています。若手育成の考え方は今ではどこの組織でも重点課題と

して実施しており、これも時代を牽引する施策でした。国内で培った若手育成の考え方を諸外国へも展開すると同時に、人材還流の最後のステージへのサポートにも一策を講じたいと考えております。

分子研は、物性物理の分野にも大いに貢献してきました。若い頃に十倉好紀さんや永長直人さんが頻りに分子研に来ていましたし、計算機や放射光などの施設利用に留まらず、物理や化学の壁を越えて分子研らしい広がりのある研究が展開されました。個々の学術分野を超える学際的な研究の核として国内外の研究機関との協働研究を強化していきます。

近年、分子研は生命科学の分野にまでその研究対象を広げてきました。合成生物学という学術分野が認知される時代に、化学に立脚した視点で生命科学の題材にどう取り組むか、分子研で培った理論化学の力、UVSORで完成した顕微鏡測の力、そして分子合成や細胞を構成する要素分子から生命を生み出そうとする研究の成果を結集して、生命科学分野の大命題「生命とは何か？」に一筋の風を吹き込むべき時を迎えています。生命科学分野のビッグデータの解釈にも、これらの知識は有効です。キャンパスを同じくする基礎生物学研究所や生理学研究所との有機的な連携を通じて、新たな一歩を踏み出します。

かわい・まき

1952年東京都出身。

1980年東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程修了。

1980-1985年博士研究員として、理化学研究所、東京大学(学振)、大阪工業試験所(通産省)、大阪ガス(株)総合研究所、で経験を積む。

1985～1988年理化学研究所研究員。

1988～1990年東京工業大学工業材料研究所(現応用セラミックス研究所)TDK寄附研究部門客員教授。

1991～2004年理化学研究所主任研究員(表面化学研究室を主宰)。

2004年～東京大学大学院新領域創成科学研究科教授、理化学研究所主任研究員を兼務(2010年まで)。

2010年～2015年理化学研究所理事(研究担当)、東京大学教授を兼務。

2016年から現職。

第16回猿橋賞(1996)、日本表面科学会賞(2005)、文部科学大臣表彰(2008)、第64回日本化学会賞(2009)、Gerhard Ertl Lecture Award(2015)、Medard W. Welch Award(2016)を受賞。



所長室は研究棟222号室にあります。白を基調としたとても明るいお部屋で、所々にいただいたお土産のオブジェが置いてあります。特に思い出深いお土産をお伺いしたところ、1本足で立っている白熊だそうで、喜びのダンスを表現しているそうです。川合所長の机の上で踊っていますので、所長室をお訪ねの際は是非ご覧ください。(編集委員 記)

水谷 泰久 大阪大学大学院理学研究科 教授

## 分子研にしかできないこと



みずたに・やすひさ

1987年 京都大学工学部工業化学科卒業

1989年 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻修士課程修了

1992年 総合研究大学院大学数物科学研究科機能分子科学専攻博士課程修了  
博士（理学）

1992年 日本学術振興会特別研究員

1994年 分子科学研究所助手

2001年 神戸大学分子フォトサイエンス研究センター助教授

2006年 大阪大学大学院理学研究科教授

分子科学—この四文字から感じるのは、この学問が教えてくれた分子の美しさと私たちがまだ知らない分子の特質に対するワクワク感である。

私は、今年3月まで4年間、分子研の運営会議委員（および人事選考部会委員）を務めた。分子研にはその前に、総研大生として3年間、その後日本学術振興会特別研究員として半年、アメリカでのポストドク生活をはさんで、助手として約7年半、合計11年という長い期間にわたりお世話になっている。そして委員としての4年間を合わせると、15年間分子研にお世話になったことになる。実に長い期間だ。卒業研究を始めた学部4年生から数えると今年で30年が経つから、そのうちの半分である。そう考えてみると、自分にとってサイエンスの中で分子研という存在が占める割合が大きいのもっともだと思う。そんなことを少しセンチメンタルに考えていたとき、分子研レターズへの寄稿依頼をいただいた。大変光

栄なことだと思ったと同時に何を書くべきかとても悩んだ。考えた末、総研大生、分子研教官、運営会議委員を一人で経験した人はあまりいない（今のところ私だけかもしれない）ことに気づき、15年間それぞれの立場で考えたことを率直に書いてみようと考えた。原稿を書いていて書きやすかつ楽しいことは、自分にしか書けないことを書くことだからだ。その内容が分子研レターズにふさわしいかどうか自信はないが、読まれる方にとって分子科学を考える種となることを願って筆を起こそうと思う。

### 学生として

最初に分子研を訪れたのは学部四回生のときだった。私は、中西浩一郎先生（京大工学部工業化学科）の研究室で卒業研究を行っていた。先生は当時理論研究系の客員助教授をしておられ、教授会の機会に私を連れてきてくださった。名古屋へ向かう新幹線の中で、分子研では内部昇進を禁止してい

ること、停年が60歳であること、助手に任期があること、教授、助教授が独立した研究体制をとっていることなどを聞き、研究所の矜持を感じたのを憶えている。その後も、修士論文のための実験を何回か分子研でする機会があり、黙々と研究に打ち込んでいる分子研の人たちは私に強い印象を残した。その印象は、今も研究者のあるべき姿を考える上で一番の土台になっていると思う。

ちょうど修士課程を終えるときに総研大ができ、私は北川禎三先生の研究グループに総研大生として加わった。一期生の仲間には個性的で優秀な人が多かった。そのような切磋琢磨できる仲間と3年間を過ごすことができたことはとても幸せだった。また、優秀であるだけでなく、彼らの研究に対する熱意には学ぶべきところがたくさんあった。なぜなら総研大生はすべてが研究室を変えて入学してきた学生であり、研究者としての将来を考え決断してやってきた学生だからである。新し

い研究テーマを立ち上げた者も多かった（助手の研究テーマを手伝っているような研究はなかったように思う）。今から思えば分子研で何かおもしろい研究をしようと、半ばポストドクのような意識でやっていた者も多かったのではないだろうか。当時、大学と研究所の研究設備の差は大きかったが、それだけでなく人がつくる環境が重要だったと思う。研究に打ち込む分子研の先輩たちの中で、新しい研究がどのように生まれてくるかを僕は自然と学んだ。学位論文の審査には教育的な厳しさがあつたし、実際に同期生の中には審査会で落ちたものもいた。分子研研究会、分子研コロキウム、岡崎コンファレンスなどレベルの高いサイエンスに触れる機会が多い点でも僕は恵まれていた。このように、総研大の一期生として分子研のもつ緊張感の中で得たものは大きかった。

### 教官として

学位を取得したのち、半年間分子研で、その後Robin Hochstrasser教授（米国University of Pennsylvania）の研究室で博士研究員をした。分子研北川グループで助手の公募があることを知り応募したところ、幸いにも採用され分子研で研究する機会を得た。分子研の助手に採用された時、気持ちはやや複雑であった。というのは、学生の頃の分子研から受けた精神的な影響はとても大きく、分子研の研究者として学生の頃の自分があこがれと感じたものをできるだけ体現したいと思う一方で、自分自身が学生時代と同じ研究室の助手になるということは分子研の精神に反する気がして少なからず後ろめたさ

を感じたためだ。そういうこともあって、「振動分光学でしかできないことをやる」という北川グループの“家訓”を守りつつ、博士課程のときとはできるだけ異なった問題にチャレンジしようと考えた。

助手になって二年目に、世界に先駆けてモード同期チタンサファイアレーザーとその再生増幅器をベースとした時間分解共鳴ラマン分光装置を製作した。この成功の鍵は、非線形光学技術を利用した広範囲に波長可変なピコ秒パルス光源の開発にあつた。これには米国でのポストドク時代の経験も役立ったが、装置開発室をはじめとする分子研の支援環境も大変貴重だった。自ら開発した装置で行う実験には他に代え難い楽しさがある。研究所に泊まり込んで、寿命約300時間のフラッシュランプを連続運転で1本使い切る測定を何度もしたのも今となってはよい思い出である。徹夜の測定中、深夜に実験棟の廊下を歩いていると、けっこう人に会った。やっている実験は全く違ってても不思議な連帯感を覚えたものである。それから、同じ研究系にはほぼ同じ年のスタッフが多く、彼らが野心的な研究テーマに取り組んでいたことも大きな刺激であった。存在感のある助教授が多かったこともよい目標になった。教授だけでなく、准教授、助教など若い層が目立っている組織は強い。このように、助手時代は研究好きの人たちに囲まれ、分子研で研究100%の生活を楽しむことができた。今振り返るとすいぶん背伸びをしていたところもあり恥ずかしい思いがするが、最初に考えた自分の研究のイメージがゆっくりとではあるが具体的に形になって

いく過程は実に楽しかった。

### 運営会議委員として

分子研から神戸大学に助教授として転出し、その後大阪大学に教授として異動した。大学に研究環境を換えて10年ほど経ったころ、大峯所長（当時）からの依頼で分子研の運営会議委員と人事選考部会委員を務めることになった。分子研の人事選考部会は所内、所外ほぼ半数ずつの委員で構成されている。この構成比は、分子研は分子科学コミュニティからの意見に耳を傾けることを求められ、かつ分子科学コミュニティは分子研の運営を支えることを期待されていることによるのだと思う。人事選考は分子研の将来を決める。私にとって、人事選考に関するハードな議論は、分子研と分子科学の将来について深く考える機会となった。

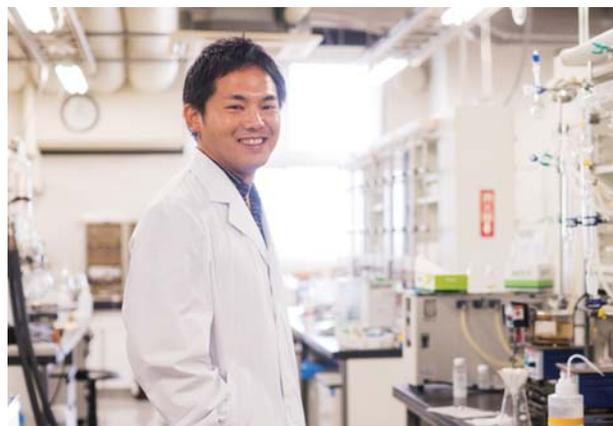
私が分子研に助手でいたころ（1998年だったと記憶している）、「2010年の分子科学を考える」という研究会が開催された。研究所創立のころフロンティアであったものがそうではなくなり、多くの人が閉塞感を感じ始めていたのだと思う。新しいフロンティアとして周辺分野への展開が議論され、その分野のひとつに生体分子の研究があつた。タンパク質をはじめとする生体分子に対して、分子科学としてどのような研究ができるのか、ずっと自問自答してきた私にとって、自分の疑問を最もストレートに表現する質問があつた。それは生体分子の分子科学について論じた講演に対してなされた「生体分子に関する分子科学は生物物理学と何が違うのか？」というものであつた。それ以来、この質問に自分だったらどう答

えるだろうか、どのような研究をしたらこの違いを明快に示せるかをずっと考えてきた。「生命現象を分子科学の言葉で語る」という表現をしばしば耳や目にする。しかし、それは分子科学が生んだ概念を道具として使っているに過ぎず、分子に対する普遍的な理解を深めるものではない。同様に、分光法など分子科学を築いてきた手法であっても生体分子研究に単に道具として使うだけならば、それは応用であって分子科学そのものではない。生体分子を研究して初めてわかる分子の特質を明らかにする、それによって分子に対する普遍的な理解に貢献できてこそ生体分子の分子科学とよべるものであろう。

それは小さな分子についてわかったこととの応用問題では決してなく、生体分子の研究からこそ新しく生まれる分子科学になるはずである。この点は生体分子の分野に限らず、研究会で同様に議論された他の周辺分野にも当てはまることだろう。そこで面接では、候補者に「分子がもつどんな新しい問題を掘り出そうとしているのか?」という問いを素直にぶつけることにした。その人のこれまでを評価することは、たやすくはないものの比較的単純である。しかしこれからを予測することは多面的な議論が必要であり、きわめて難しい。人事選考での議論は自分の科学観を見直す大変よい勉強になった。

人事選考会議のため、しばらく足が遠のいていた分子研研究棟に入って感じたことは、分子研がきれいになりそして明るくなったことだ。そして、そこには大学とは違った空気が醸成されている。分子研でしかできない研究、分子研でしかできない教育、分子研でしか作れない求心力—分子研にしかできないことはたくさんあると思う。分子研に期待するゆえんである。





## 水を酸化して酸素をつくる 金属錯体触媒

正岡 重行 生命・錯体分子科学研究領域  
錯体物性研究部門 准教授

まさおか・しげゆき  
1977年大阪府生まれ。2004年京都大学大学院工学研究科博士後期課程修了、博士（工学）。2004年英国リバプール大学博士研究員。2005年九州大学大学院理学研究院助手。2007年同助教。2011年分子科学研究所准教授。2009年から2013年まで、科学技術振興機構さきがけ研究者兼務。専門は錯体化学。

### はじめに

現在人類が直面しているエネルギー・環境問題を背景に、太陽光のエネルギーを貯蔵可能な化学エネルギーへと変換する人工光合成技術の開発が期待されている。私たちは、人工光合成を実現する上で障害の一つとなっている酸素発生触媒の開発を目指し、生体機能の中心的な役割を果たしている金属錯体に注目した触媒開発研究を推進している。本稿では、私たちが最近報告した鉄五核錯体の酸素発生触媒作用に関する研究<sup>[1]</sup>を紹介したい。

### なぜ酸素発生触媒か？

植物が行う光合成では、二酸化炭素が還元され炭水化物が合成されると同時に、水を酸化して酸素が作られている。後者の「水の酸化による酸素発生」は、炭水化物（化学エネルギー）の生産とあまり関係が無いようである。しかし実際には、この酸素発生反応（ $2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{O}_2 + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^-$ ）により得られる電子（ $\text{e}^-$ ）が二酸化炭素を還元し、炭水化物を生産している。すなわち、酸素発生反応は、光合成の化学エネルギー生産において「電子の供給」という極めて大きな役割を担っている。

この酸素発生反応は、人工光合成の達成にむけても不可欠なプロセスであり、優れた触媒の開発が求められる。しかし、高い活性・耐久性を兼ね備えた酸素発生触媒の開発は現在でも極めて困難であり、人工光合成システムの構築におけるボトルネックであるとされてきた。

### どのような触媒が必要か？

酸素発生反応（ $2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{O}_2 + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^-$ ）は、2種類の大きく異なる反応の連続的な進行によって起きる。それは、4つの電子が移動する「多電子移動反応」と2つの水分子から1分子の酸素分子を発生させる「酸素-酸素結合生成反応」である。酸素発生反応を効率よく進行させるには、これら2つの反応を共に高効率化させる必要がある。

天然の光合成反応では、酸素発生錯体（Oxygen Evolving Complex、OEC）と呼ばれる金属錯体が多電子移動反応と酸素-酸素結合生成反応の効率化に貢献している。2011年に岡山大学の沈 建仁教授、大阪市立大学の神谷 信夫教授らのグループにより明らかにされたOECの詳細な構造

を図1に示す<sup>[2]</sup>。OECは4つのMnイオンと1つのCaイオンが酸素原子で架橋された多核構造を有する。この多核構造が、酸素発生に必要な電荷を蓄積し、スムーズな多電子移動反応に貢献している。そこで我々は、多電子移動反応を促進するための鍵はこの「多核構造」にあると考えた。次に、OECにおける酸素-酸素結合生成反応について考察を行った。OECの酸素-酸素結合生成メカニズムはまだ完全には解明されていないが、近年の研究成果により、Mn3に結合したO5とMn1に配位した水分子との間で酸素-酸素結合生成が起きる可能性が高いとされている<sup>[3,4]</sup>。このとき、結合生成反応を起こす2つの酸素原子は非常に近接した距離に存在し、酸素-酸素結合生成反応を促進している。すなわち、酸素-酸素結合生成反応促進の鍵は「近接した水分子の結合サイト」にあると予想される。

以上の考察に基づき、我々は図2に示す鉄五核錯体（1）を酸素発生触媒として用いることとした。1は5つの鉄イオンと6つの有機配位子ならびに1つの架橋酸素原子からなる「多核構造」を持つ。5つの鉄イオンのうち中央に存在

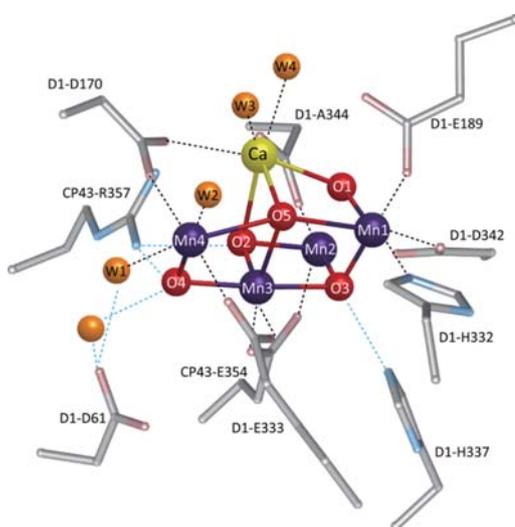


図1. 天然の光合成反応における酸素発生錯体 (OEC) の構造。Wは水分子の酸素原子。

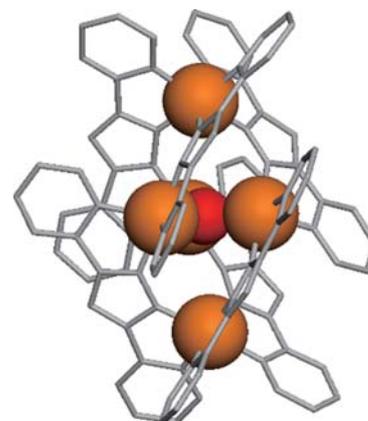


図2. 鉄5核錯体触媒 (1) の分子構造。5つのオレンジ色の球体が鉄イオンであり、周囲に存在する有機配位子 (灰色) により安定化されている。

する3つは、水分子が結合することが可能な配位不飽和構造であり、またこれらの金属イオンは互いに近い距離にある。つまり、「近接した水分子の結合サイト」が存在する。また、金属イオンとして用いられた鉄イオンは、酸素原子との親和性が高く、水分子と迅速に結合すると予想される。鉄は遷移金属の中で最も地殻存在量が多く (5%)<sup>[5]</sup>、価格も安い (1 kg 当り 5 円) ため<sup>[6]</sup>、資源としての利用し易さという観点からも魅力的である。

### 電気化学測定による酸素発生機能評価

1のアセトニトリル中でのサイクリックボルタモグラム (CV) 測定の結果を図3aに示す。還元側に1つ (-0.55 V vs.  $\text{Fc}^+/\text{Fc}$ )、酸化側に4つ (0.13, 0.30, 0.68, 1.08 V) の可逆な酸化還元波が観測され、これらは1に存在する5つの鉄イオンが逐次的にII価からIII価へと酸化される過程に相当する。ここで酸化側の反応に着目すると、 $\text{Fe}^{\text{II}}_4\text{Fe}^{\text{III}}$ 状態 ( $\text{S}_0$ ) から4段階の電子移動反応を経て4電子酸化体 ( $\text{S}_4$ ) が生成する。酸素発生反応は水からの4電子放出に

より起こるため、水から $\text{S}_4$ に4電子を渡すことができれば、酸素発生反応は進行しうる (図3b)。そこで水存在下で1のCV測定を行ったところ、 $\text{S}_4$ の生成に伴って触媒電流と呼ばれる不可逆な大きな電流の立ち上がりが観測された (図3c, 赤線)。触媒電流は、電気化学反応によって生じた酸化種が化学反応により還元種へと変換され、生成した還元種が再び酸化種へと酸化されるサイクルが連続的に起きることによって生じるため、電気化学的な触媒反応の進行を示唆する。

次にこの触媒反応の反応生成物の定量分析を行った。1を含む電解質溶液に触媒反応が十分進行する電圧 (1.42 V vs.  $\text{Fc}^+/\text{Fc}$ ) を印加し、電圧印加中に流れた電流値を観測した (図3d)。その結果、反応終了後の気相から生成物である酸素が検出された。酸素発生反応の電流変換効率が96%と非常に高い値であったことから、1が酸素発生反応を選択的に進行させる触媒であることが確認された。更に、この酸素発生反応の触媒回転頻度 (TOF) を算出したところ、 $\text{TOF} = 1,900 \text{ s}^{-1}$ となった。この値は、既存の鉄錯体触媒と比較して

1,000倍以上大きなものであった<sup>[7-10]</sup>。反応条件が異なるため厳密な比較は難しいものの、植物の光合成における酸素発生反応速度 ( $100\text{-}400 \text{ s}^{-1}$ <sup>[11]</sup>) をも上回っていた。

### 酸素発生反応機構

実験・計算科学的手法を用い、反応機構の解明を目指した。電気化学測定の結果から、1は最安定状態である $\text{S}_0$ 状態から4段階の電気化学反応により $\text{S}_4$ を形成し、 $\text{S}_4$ が形成されて始めて水分子と反応すると考えられる (図3c)。量子化学計算を用いて検討した結果、 $\text{S}_4$ への水侵入反応に必要な活性化エネルギーは15 kcal/mol程度と見積もられ、室温で十分に $\text{S}_4$ と水との反応が起きることを示した (図4)。引き続き反応としては、水配位体 (A) への更なる水分子の配位ならびに脱プロトン反応によるオキシ種の生成が考えられる。オキシ種の最安定な電子状態を求めたところ、反応に伴い分子内電子移動反応が進行し、混合原子価状態を有するオキシ種Bが生成することが示唆された。また、Bからの分子内酸素-酸素結合生成 ( $\text{B} \rightarrow \text{C}$ ) に必要な活性化エネルギー

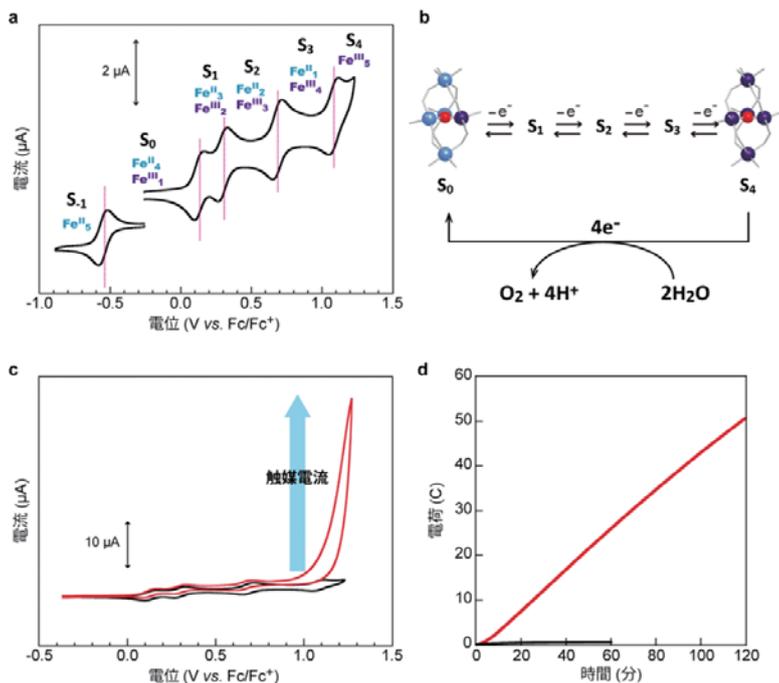


図3. (a) 1のアセトニトリル溶液中におけるサイクリックボルタモグラム。(b) 1の酸化による4電子体の生成と、想定される水との反応。水色の球はFe<sup>II</sup>イオン、紫色の球はFe<sup>III</sup>イオンを表す。(c) 1のアセトニトリル溶液中における5 Mの水添加時(赤線)ならびに水非添加時(黒線、図3aと同一のデータ)のサイクリックボルタモグラム。(d)アセトニトリル/水混合溶媒(10:1)中での定電位電解実験における電荷量の時間変化。赤線は1存在下、黒線は1非存在下でのデータ。文献1より改変。

は、10 kcal/mol未満となり、隣接する水の結合サイト間での迅速な酸素-酸素結合生成反応の進行を強く示唆するものであった。すなわち、1を用いた酸素発生反応においては、「多核構造」と「近接した水分子の結合サイト」が酸素発生速度の向上に大きく寄与していることが実証された。

### まとめと今後の展望

本研究成果は、人工光合成を実現するための障害とされてきた、水の分解による酸素発生反応を高効率で進行させる触媒を人工的に開発することに成功したものであり、人工光合成技術の進展に向けた大きな一歩である。さらに、「多核構造」と「隣接する水の結合サイト」に注目した触媒分子のデザイン戦略は、人工光合成の反応を含めた物質変換反応における触媒開発に重要な指針を与えるものである。今後、触媒分子をさらに最適化することにより、エネルギーや環境問題の解決に貢献する高性能な触媒の開発につながると期待される。

本稿で紹介した研究は、分子科学

研究所の岡村将也特任助教、近藤美助助教、久我 れい子氏、柳井 毅准教授、倉重 佑輝助教(現神戸大学准教授)、Pranneth K. K. Vijayendran博士、吉田将己博士(現北海道大学助教)、熊本大学の速水 真也教授、佐賀大学の米田宏助教、福岡大学の川田 知教授らとの共同研究の成果である。なお本研究はJSTさきがけ「光エネルギーと物質変

換」、ACT-C「低エネルギー、低環境負荷で持続可能なものづくりのための先導的な物質変換技術の創出」、ならびにJSPS 新学術領域研究「人工光合成による太陽光エネルギーの物質変換：実用化に向けての異分野融合」の研究助成を受けて行われた。関係者一同に深く感謝申し上げます。

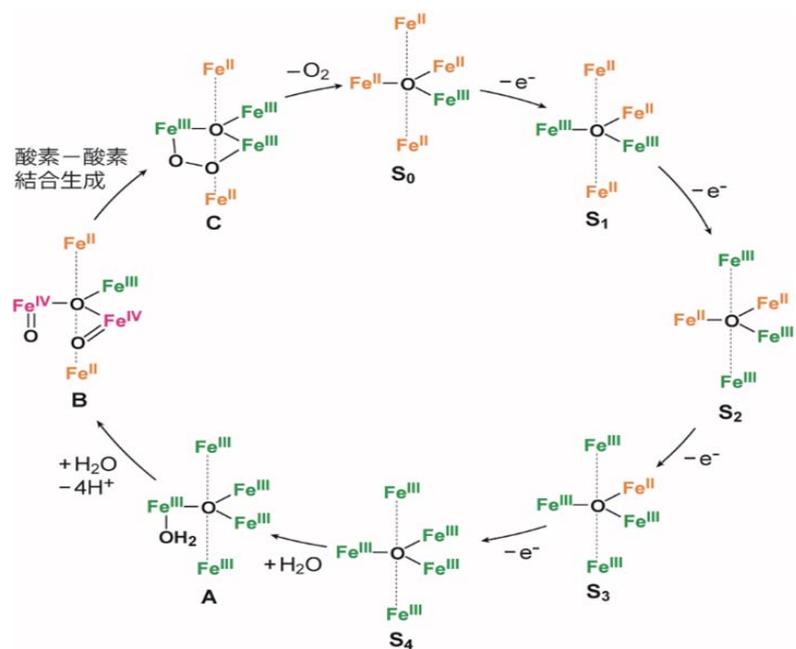
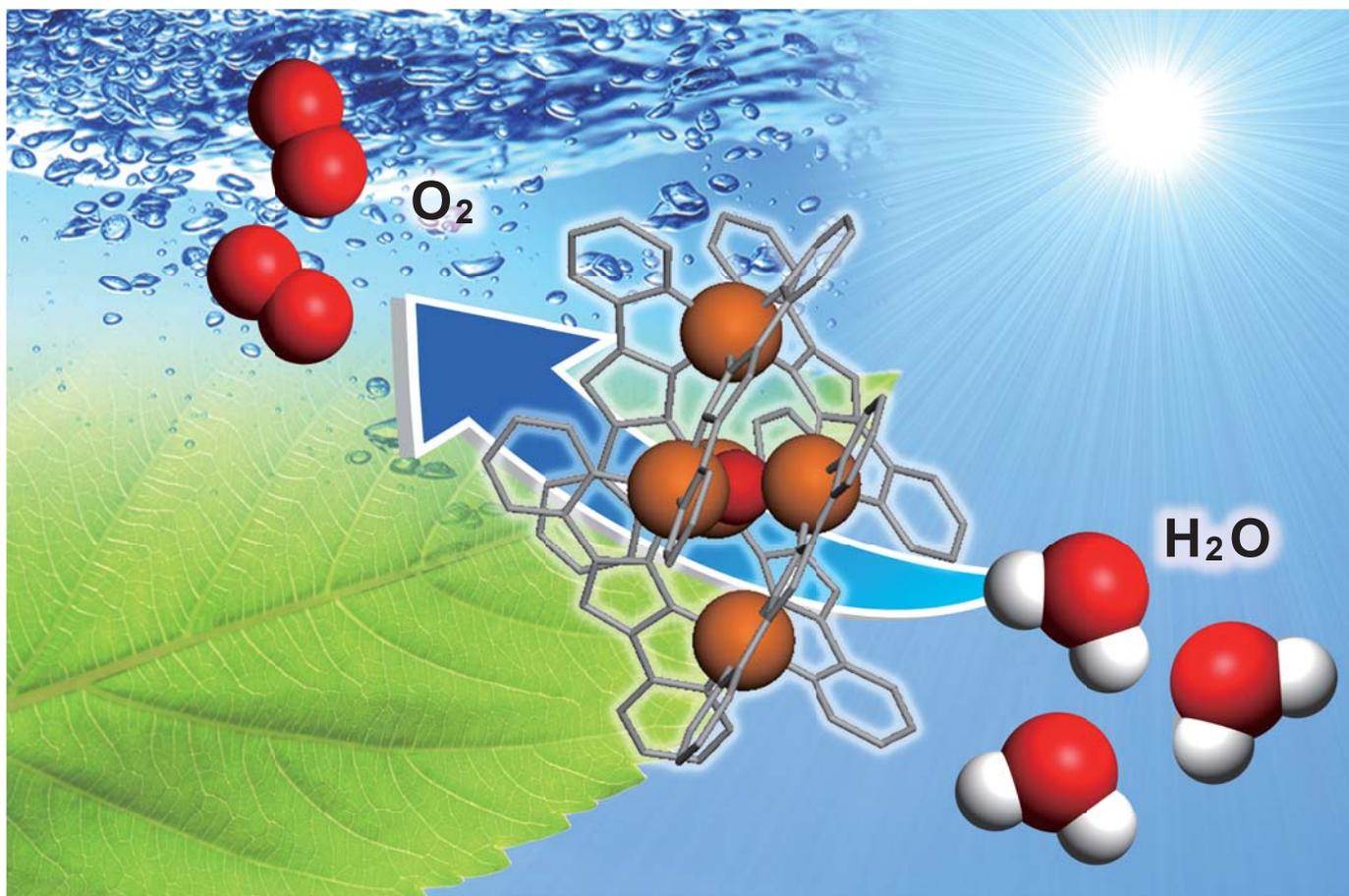


図4. 1により触媒される酸素発生反応の推定反応機構。文献1より改変。

## 参考文献

- [1] M. Okamura, M. Kondo, R. Kuga, Y. Kurashige, T. Yanai, S. Hayami, V. K. K. Praneeth, M. Yoshida, K. Yoneda, S. Kawata, S. Masaoka, *Nature*, **530**, 465 (2016).
- [2] Y. Umena, K. Kawakami, J.-R. Shen, N. Kamiya, *Nature*, **473**, 55 (2011).
- [3] N. Cox, D. A. Pantazis, F. Neese, W. Lubitz, *Acc. Chem. Res.*, **46** (7), 1588 (2013).
- [4] N. Cox, M. Retegan, F. Neese, D. A. Pantazis, A. Boussac, W. Lubitz, *Science*, **345**, 804 (2014).
- [5] F. W. Clarke and H. S. Washington, The composition of the Earth's crust, (1924).
- [6] <http://www.japanmetal.com/iron-steel-price>.
- [7] W. C. Ellis, N. D. McDaniel, S. Bernhard, T. J. Collins, *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 10990 (2010).
- [8] J. L. Follol *et al.*, *Nature Chem.*, **3**, 807 (2011).
- [9] D. Hong, *et al.*, *Inorg. Chem.*, **52**, 9522 (2013).
- [10] M. K. Coggins, M.-T. Zhang, A. K. Vannucci, C. J. Dares, T. J. Meyer, *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 5531 (2014).
- [11] G. C. Dismukes *et al.*, *Acc. Chem. Res.*, **42**, 1935 (2009).



# 分子科学とは何か—科学史からのアプローチ—

菊池 好行

## はじめに

「分子科学 molecular science とは何か？」『分子研レターズ』の読者の方々はこの問いにどのように答えられるだろうか。筆者は実のところ、分子科学研究所（分子研）の関係者ではなく、分子科学者とも言えない。近接領域である物理化学の歴史には長らく関心を寄せていたが、基本は幕末・明治期以降の日本の化学史を専攻する科学史研究者である。それが、あるきっかけで2007年から分子研史料編纂室（現研究力強化戦略室資料室）を何回か訪れるうちに、分子研、分子科学の歴史に興味を持つようになった。1975年、2006年にそれぞれ分子研、分子科学会が日本で設立されたことから察せられるように、第二次世界大戦後の日本の化学（科学）史を記述するうえで「分子科学」が重要なキーワードであることに気づかされたからである。また分子科学の歴史は、単に研究所や学問分野コミュニティの歴史ではなく、「分子科学」をどう定義するかを結節点として、両者が複雑な相互作用を起こす過程であることも私の興味をかき立てる。本稿ではこれらの問題意識をもとに、冒頭の問いに対する一人の科学史研究者からのアプローチの一端を示したい。

## 19世紀での「分子科学」

「…とは何か」という問いに対して歴史研究者がよく用いる方法に、「…」の

用語としての使用法の変遷を調査する手法がある。近年Google、Hathi Trustなどによる書籍電子化プロジェクトの進展により用語の調査は格段に容易になっている。それによると「分子科学 molecular science」は実のところそれほど新しい用語ではない。遅くとも1860年代初めには出版物に登場している<sup>1)</sup>、粒子論に基づく化学と熱学、エーテル的世界観<sup>2)</sup>に基づく電気学と光学などの総称として使われている。また女流サイエンス・ライターの前駆者として知られるサマヴィル（Mary Somerville, 1780-1872）は分子論、顕微鏡の使用に基づく生理学の解説書 *On Molecular and Microscopic Science* を1869年に出版している<sup>3)</sup>。

1870年代になると、電磁気学の基本方程式や「マクスウェルの悪魔」で有名なイギリスの物理学者マクスウェル（James Clerk Maxwell, 1831-1879）が、ドイツのクラウジウス（Rudolf Clausius, 1822-1888）、オランダのファン・デル・ワールス（Johannes Diderik van der Waals, 1837-1923）などの気体分子運動論を指す用語として molecular science を用いるようになっていく<sup>4)</sup>。さらに彼は、今日に至るまで広く読まれている『ブリタニカ百科事典』の第9版（著名な科学者が寄稿していることでとりわけ評価が高い版である）で「原子 atom」の項目を執筆した際にも、同様の意味で molecular science を用い、しかもその生理学への

インパクトについて議論しているのがある<sup>5)</sup>。これらの molecular science の用法が1880年代以降も受け継がれているのは、マクスウェルの項目の影響力によるものと推測できる<sup>6)</sup>。

## 分子研設立と「分子科学」

ただし一世紀を経た1960年代に長倉三郎（1920-）、小谷正雄（1906-1993）、森野米三（1908-1995）、井口洋夫（1927-2014）など後に分子研設立に関与することになる科学者たちが、このような19世紀での用法に気づいていた形跡はない。また長倉は小谷を通じてフォン・ヒッペル（Arthur R von Hippel, 1898-2003）の *Molecular Science and Molecular Engineering*（1959年）<sup>7)</sup> を知ってはいたが、分子性結晶の強誘電性など今日のマテリアル・サイエンス寄りの内容には共鳴しなかった<sup>8)</sup>。

彼らにとっての分子科学の初出とされるのが、1961～1962年度の文部省科学研究費補助金（総合研究）に採択された課題「分子科学—分子の化学物理的研究」（研究代表者：小谷正雄）である。現存する1962年度交付金交付申請書によれば

分子をその電子構造から、個性をもったものとしてその多様性を具体的に把握することを通じて物質の諸性質、現象を研究する。その為に従来連絡が十分であったと

は云えない化学教室出身の研究者と物理教室出身の研究者が密接に協力し得る場を作り、有機化学、固体物理、分子生物学、宇宙科学等の基礎として重要な分子科学の研究分野を開拓する事を目的とする<sup>9)</sup>。

また分子研創設十周年にあたる1985年に、当時所長を務めていた長倉が行った記念の挨拶では

分子研は、分子構造と分光学の基盤となる量子化学をはじめ、わが国の優れた伝統を継承し、化学と物理学にまたがる新しい学問領域『分子科学』を世界に先駆けて確立するために設けられた<sup>10)</sup>。

と述べられている。ここから分子科学を理解するためのキーワードとして「物理学と化学との連携」「化学物理」「電子構造」「量子化学」「分光学」などを抽出することができる。また「優れた伝統」の文言は、分子科学に至る前史が日本のなかにあったことを示唆している。このあたりの雰囲気は、最近の『分子研レターズ』の「覧古考新」のコラムからもうかがうことができよう<sup>11)</sup>。

ただし上の段落で見てきた分子科学の「定義」は、東京帝国大学附置放射線化学研究所(1945年設置)、「電子状態懇談会」(1950年、のち1952年に日本化学会の「 $\pi$ 電子討論会」に発展)<sup>12)</sup>、東京大学附置物性研究所(1957年設置)から分子研設立に至る、いわば「主流派」による分子科学の理解を反映していることに注意が必要である。ここでは「主流派」を広い意味で使っていることに注意されたい。主に小谷、長倉、井口など東大系が中心であるが、福井

謙一(1918-1998)を中心とする京都大学工学部の理論化学グループも $\pi$ 電子討論会に参加し、長倉グループとライバル関係を保ちつつ後に分子研設立運動に加わっている<sup>13)</sup>。理論上の立場の違いはあれ、量子化学研究の振興への利害関心のある程度は共有していたといってよいだろう。

### 「分子科学」コミュニティと多様な「分子科学」の在り方

一方、これらの流れと関連しつつ並行して、分子科学夏の学校(1961年～)、分子構造総合討論会(1963～2006年)、分子科学研究会(1965～2006年)、分子科学若手の会(1965年～)、『分子科学講座』全12巻出版(共立出版、1966～1987年)などディシプリン、コミュニティ形成の指標となる様々な出来事が起きている。そのうち分子構造総合討論会と分子科学研究会は2006年に合体して分子科学会となったが、分子科学若手の会は分子科学夏の学校を主催するようになり、別組織として活動している。その中では上記のキーワードとともに、例えばミクロとマクロの世界をつなぐ統計力学、気・液・固相及び相転移の現象を重視する立場など、多様な分子科学の在り方が議論されている<sup>14)</sup>。

分子科学、分子研の動的な展開と新陳代謝、大学共同利用研究機関としての分子研と分子科学コミュニティとの相互作用を理解するうえでは、このような多様な分子科学の在り方に目配りをする必要がある。分子科学研究会発足にあたって森野が

分子科学とは何を意味し、その境界をどこに考えるかの点については、各人各様の解釈をもちつゝも、上記

の[科研費 - 筆者注]総合研究班の継続期間であった[昭和]36～38年の3年の間には、分子科学の主として基礎となるべき領域の研究者の間に、活発な交流が行なわれ、また夏の学校を中心として若い研究者の結集をはかり、一方では分子科学叢書の企画があり、また分子科学研究所を吾々の研究の中心機関としてもちたいたいの具体的提案となり、吾々の間に分子科学を盛り立てていこうとの意見が自然に結実して来たということができよう<sup>15)</sup>。

と述べているのは、異なった分子科学観を持った研究者が集まって形成されつつあったコミュニティと分子研設立運動との相互作用のダイナミズムに他ならない。

以上の理由から、筆者がオーガナイズした2015年度化学史研究発表会(化学史学会年会、総合研究大学院大学葉山キャンパスにて2015年7月4～5日に開催)のシンポジウム「分子科学への道—物理学と化学の界面」では、分子科学の源流として従来から知られていた1930年代のハイトラー(Walter Heinrich Heitler, 1904-1981)、ロンドン(Fritz Wolfgang London, 1900-1954)、杉浦義勝(1895-1960)による量子化学研究、コールラウシュ(Karl Wilhelm Friedrich Kohlrusch, 1884-1953)、水島三一郎(1899-1983)、森野らによるラマン分光学研究に加えて、1870～1920年代の気体分子運動論・統計力学も取り上げた。そのうえで、これらの諸分野で物理学と化学との間にどのような対立・交流・協働があり、結果として長倉のような人々が分子科学を構想しえたのか、その土台について議論したのである<sup>16)</sup>。上に述べたよ

うな、用語としての *molecular science* の初期の歴史を考慮すれば理にかなった選択だったと考えている。

## 今後の課題

もとよりこれだけで分子科学の多様性が尽くされるわけではない。量子化学、分光学、統計力学に加えて、「分子科学」科研費関連書類で早くから言及されていた有機化学、固体物理、分子生物学、宇宙科学などの検討も不可欠である<sup>17)</sup>。またフォン・ヒッペル流の工学寄りの *molecular science* (*molecular engineering*) への日本での

反応は、1960年代以降どのように変化しているのか。例えば京都大学大学院工学研究科分子工学専攻は、分子研設立運動に加わった福井のノーベル化学賞受賞(1981年)を契機として1983年に創設されているが、その他の分子工学を名乗った研究組織と分子科学コミュニティとはどのような関係があるのか。これらの点を解明するためには、分子研創設に直接かかわった人々のみならず、広く分子科学コミュニティ形成に関与した研究者からの(オーラル・ヒストリーを含めた)資料提供が望まれる。こうして本稿は冒頭の問いかけ

に戻ってくる。分子研、分子科学の歴史に関する、より広範な資料収集に基づく研究が展開する契機となれば幸いである。

## 謝辞

分子科学研究所の木村克美名誉教授、小杉信博教授、鈴木さとみ事務支援員には研究力強化戦略室の資料室(旧史料編纂室)での資料閲覧の便を図っていただき、かつ本稿執筆にあたり有益な助言をいただいた。古川安氏(日本大学生物資源科学部教授)からは福井謙一と「 $\pi$ 電子討論会」との関係に関し

## 文献注

1) Charles Knight, ed., *The English Cyclopaedia. A New Dictionary of Universal Knowledge, Arts and Sciences Volume VIII* (London: Bradbury and Evans, 1861), 121頁に“the molecular sciences of chemistry, light, heat, electricity, &c.”のフレーズがある。また周期律発見との関連でしばしば言及されるデンマーク(現ドイツ)生まれのアメリカの化学者ヒンリックス(Gustavus Detlef Hinrichs, 1836-1923)は型の理論、炭素化合物の原子容など当時の「現代化学」を *molecular science* と呼んでいる。Gustavus Hinrichs, *Contributions to Molecular Science, or Atomechanics* (Iowa-City, 1869)。ヒンリックスと周期律との関係についてはEric R. Scerri(馬淵久夫他訳)『周期表-成り立ちと思索-』(朝倉書店、2009年)100-107頁を参照。

2) 電磁波を伝える媒体エーテルが真空中にも存在するとする世界観のこと。ここではエーテルが原子、分子よりもはるかに微細な粒子からなるとする考え方を指している。エーテルは、アインシュタイン(Albert Einstein, 1879-1955)の相対性理論が受容され始める1910年代前後まで、力学的自然観と電磁気学的自然観を統一する存在として、特にイギリスで盛んに議論されていた。広重徹『物理学史II』(培風館、1968年)36-40頁、ヘリガ・カーオ(有賀暢迪, 稲葉肇他訳)『20世紀物理学史一理論・実験・社会』(全二巻、名古屋大学出版会、2015年)上巻8-20頁を参照。

3) Mary Somerville, *On Molecular and Microscopic Science* (2 vols, London: John Murray, 1869)。

4) J. Clerk-Maxwell, “On the Dynamical Evidence of the Molecular Constitution of Bodies,” *Quarterly Journal of the Chemical Society* 28 (1875): 493-508; 特に498-499頁。ファン・デル・ワールスと *molecular science* についてはA.Ya. Kipnis, B.E. Yavelov, and J.S. Rowlinson, *Van der Waals and Molecular Science* (Oxford: The Clarendon Press, 1996)も参照されたい。

5) J. Clerk Maxwell, “Atom,” in *The Encyclopaedia Britannica: A Dictionary of Arts, Sciences, and General Literature, Ninth Edition, Volume II* (Edinburgh: Adam and Charles Black, 1875), 36-49頁, 特に42頁

6) 例えば“Rudolf Julius Emanuel Clausius,” *Proceedings of the American Academy of Arts and Sciences, New Series*, 16 (1889), 458-465, 特に462-464頁; George T. Ladd, *Elements of Physiological Psychology: A Treatise of the Activities and Nature of the Mind from the Physical and Experimental Point of View* (New York: Charles Scribner's Sons, 1888), 231, 548-550頁; 及び John Gray M' Kendrick, “On the Modern Cell Theory and the Phenomena of Fecundation,” *Proceedings of the Philosophical Society of Glasgow*, 19 (1887-1888): 71-125, 特に123頁を参照。最後のM' Kendrick論文ではマクスウェルの『ブリタニカ百科事典』項目(注5参照)が引用されている。

7) Arthur R. von Hippel, *Molecular Science and Molecular Engineering* (New York: The Technology Press of M.I.T., 1959)。

8) 木村克美「分子研設立の歴史」『共同利用機関の歴史とアーカイブズ2009』(総合研究大学院大学葉山高等研究センター、2010年)243-259頁、

て有益な助言をいただいた。また自然科学研究機構からは2016年1月の筆者の分子科学研究所研究力強化戦略室訪問に際して旅費助成を受けている。記して謝意を表したい。なお本稿は、拙稿「分子科学への道—物理学と化学の界面:序文」『化学史研究』43巻2号(2016年6月)59-61頁に加筆・修正を加えたものである。転載を許可された化学史学会編集委員会に感謝申し上げる。



きくち・よしゆき

東京外国語大学大学院総合国際学研究院  
特別研究員。

1991年 東京大学教養学部教養学科卒、  
2006年 The Open University (英国)  
科学技術医学史科博士課程修了 PhD、  
2009年 マサチューセッツ工科大学  
博士研究員、2011年 ハーバード大学  
博士研究員、2012年 ライデン大学国際  
アジア研究所研究員、2013年 総合研  
究大学院大学学融合推進センター特任  
准教授等を経て現職。

特に247頁。横山利彦「分子科学研究所と岡崎国立共同研究機構の創設」『共同利用機関の歴史とアーカイブズ2004』(総合研究大学院大学葉山高等研究センター、2005年)281-297頁、及び『分子科学研究所創設の歴史と史料編纂室の活動』(自然科学研究機構分子科学研究所、[2009年])も参照した。

9) 昭和37年度科学研究費交付金(総合研究)交付申請書、長倉三郎氏寄贈史料(SN001-1-1)、分子科学研究所研究力強化戦略室資料室蔵。

10) 木村前掲論文「分子研設立の歴史」(注4)255頁。

11) 『分子研レターズ』73巻(2016年3月)5、22、37頁。これらは特定研究分子科学研究所『分子科学によせて』(1971年)からの引用である。

12) 電子状態懇談会と $\pi$ 電子討論会との関係については、長倉三郎『複眼的思考』ノススメー調和が必要な変革の時代を迎えて一(くもん出版、2011年)42~44頁を参照。

13) 福井グループと $\pi$ 電子討論会については古川安「燃料化学から量子化学へ—福井謙一と京都学派のもう一つの展開—」『化学史研究』41巻(2014年)181~231頁、特に208頁を参照。分子研設立の提案が日本学術会議総会で認められ1965年12月に内閣総理大臣に勧告されたことを踏まえ、1966年2月に日本学術会議化学研究連絡委員会(化研連)のもとに設けられた「分子科学研究所小委員会」に福井も加わっていた。木村前掲論文「分子研設立の歴史」(注4)248~249頁、『分子科学サーキュラー』3号、1~2頁も参照。

14) 「夏の学校開催記録」分子科学若手の会編『分子科学若手の会夏の学校50周年記念文集』(自然科学研究機構分子科学研究所、2012年)109-120頁、特に109、110頁。千原秀昭「みんなのための研究を」『分子科学サーキュラー』4号、8-9頁、特に9頁も参照。

15) 森野米三「分子科学研究会設立経過報告」『分子科学サーキュラー』1号、2-3頁、特に2頁。

16) このシンポジウムをもとにした特集は『化学史研究』43巻2号(2016年6月)59-95頁に掲載されている。

17) 例えば、日本における分子科学と物性論、分子生物学との関係については、渡辺格「水島研究室の分子構造研究の底流をなすもの」馬場宏明、坪井正道、田隅三生編『回想の水島研究室—科学昭和史の一断面—』(共立出版、1990年)所収、37-49頁が参考になる。

## 大峯 巖 分子科学研究所長への感謝の会 報告

2期6年に渡って分子科学研究所長を務められた大峯巖所長が、2016年3月31日をもって分子科学研究所を退職されるにあたり、最終講義と感謝の会を3月4日午後岡崎コンファレンスセンターで開催いたしました。

最終講義は岡崎コンファレンスセンター大会議室で行いました。「水からの学び、友との出会い」と題した最終講義では、大峯先生がまだ学生だった頃のお話、とくに、ハーバード大学での恩師であるカープラス教授の生い立ちや研究の流れにまで遡った話から始まり、博士研究員として所属された分子研（諸熊研究室）から、慶應義塾大学（助手）、分子研（助教授）、そして名古屋大学（教授）における多くの友人との出会い、研究に関する話が紹介されました。また、ワインを堪能しているフレミング教授の多くの笑顔も印象的でした。もちろん、この最終講義においても、世界的に有名な水の構造変化（水の凝固および融解）の動画とクラシックの協奏も披露されました。

その後、岡崎コンファレンスセンター中会議室に場所を移して感謝の会を行いました。最初のご挨拶は自然科学研究機構長の佐藤勝彦先生を予定しておりましたが、インフルエンザのために急に辞退されることになりました。そのため、挨拶は次期所長に決定していた東京大学教授の川合真紀先生にお願いしました。川合先生は、大峯先生が在任中に示された分子科学のあるべき姿に触れられ、改めてその重要性を強調されました。なかでも、自然との対話から見出された原理をもとに斬新な分子システムを設計する組織として、協奏分子システム研究センターを設立

された大峯所長のご功績を高く評価されました。川合先生は、次期所長（現所長）として未来の分子科学がどうあるべきかを問いつつ、分子科学研究所の発展に尽くしたいとの抱負も述べられました。

そのあと、元分子研所長の茅幸二先生に乾杯のご発声をお願いしました。茅先生は、慶應義塾大学に理工学部が新設された際、茅・岩田（末廣）研究室を助手の富宅喜代一先生、大峯先生といっしょにスタートされたこと、故近藤保先生を含めた3人はオーディオ仲間として親しい関係であったこと、分子研所長から理研に移られてからは川合先生と和光研究所の運営に携わったことなどのご説明をされているうちに、すっかり乾杯のことをお忘れになってしまいました。一同、大爆笑の中、仕切り直して、茅先生のご発声に従って、大峯先生とご夫人に感謝の意を込めて乾杯を致しました。

乾杯後の歓談を挟んで、大峯所長にゆかりのある3名の先生方より祝辞を頂戴しました。近藤孝男先生（名古屋大学理学研究科特任教授）は大峯先生との出会いに関するエピソードを紹介され、ご自身の研究との接点に触れられつつ、大峯先生とともに名古屋大学の運営業務に携わられた当時の思い出をお話してくださいました。

高塚和夫先生（東京大学総合文化研究科教授）は、大峯先生の諸熊研究室時代の思い出を中心に話しをされました。当時、大峯先生には思考に際して鉛筆を口元に強く押し当てられる

癖があったそうです。「ようやく難題が解けた！」と部屋に入って来られるときは、きまって口元が鉛筆の芯で黒くなっていたのだそうです。大峯先生のお人柄を表すエピソードに、会場は和やかな雰囲気になりました。

神取秀樹先生（名古屋工業大学工学研究科教授）は、ご自身の研究に絡めつつ、大峯所長の学問に対する厳しくも暖かみある姿勢に触られました。「ところで神取先生、プロトンはどうして一方向に流れることができるのでしょうか。この問題はもうおわかりになりましたか？」——大峯先生の核心を突く鋭い質問に、神取先生は「いつか完璧なデータをもってこの人を説得してみせるぞ」と心に誓われたそうです。このエピソードと似た経験をしたことがあるためでしょうか、会場に集まった研究者の誰しもが、拍手と共に所長への感謝の念を新たにしているようでした。

当日は感謝の会参加者約160名、記念品賛同者約300名のご協力の下に大峯先生に盛大なる感謝の意を表すことができました。世話人一同、感謝申し上げます。

（小杉 信博、秋山 修志、齊藤 真司、  
鈴井 光一 記）



## 分子科学研究所所長招聘会議「化学におけるグローバル化」

2016年5月13日（金）の午後に表示所長招聘会議が開催されました。いつものように分子科学研究所、日本学術会議化学委員会、日本化学会戦略企画委員会が連携して行う会議ですが、これまで日本学術会議化学委員会側でこの会議に関わってこられた川合眞紀先生が分子研所長に就任されたこともあり、抜本的に模様替えしました。分子研内部からの積極的な参加を促したこと、文部科学省関係者を積極的に呼ばなかったこと、野依先生のご出席を大前提にせず新年度の早い時期に設定したこと、交流会を岡崎コンファレ

ンスセンターの中庭でのバーベキューパーティーにして所内全職員にも参加・協力（特に技術職員）を促したこと、などが目立ったところです。来年は今回の経験を活かして若干見直す予定になっています。

会議は化学におけるグローバル化の議論に集中しました。右脳的・バビロニア的発想（応用から基礎を考える）か、左脳的・ギリシャ的発想（基礎から応用）か、論文出版か、データ出版か、査読が先か、発表が先か、論破型か、協調型か、大学では英語の聞き取りが先か、話すことが先か、授業

の英語化を全学的に取り組むのがよいのか、一部の学科から始めるのがよいのか、留学生を学部1年から受け入れるのがよいのか、学士編入レベルから受けるのがよいのかなど、なかなか正解が見えない問題や、日本人学生へのインセンティブのつけ方、海外との産学連携を進める際のいろんな困難や障害、欧米の学生・教員・研究者を呼び込む際の工夫などの問題についても議論が行われました。詳しくは前回同様、日本化学会の「化学と工業」に報告されると思いますので、ご覧下さい。

（小杉 信博 記）

### BBQ 懇親会

川合所長の提案により、上記所長招聘会議の後、BBQ形式での懇親会を開催しました。鈴井技術課長と筆者で企画を行うことになり、「多くの来賓をお迎えするのに恥ずかしくないBBQ」と「お客さんが岡崎コンファレンスセンター（OCC）に来て分子研の人に会わないで帰ってしまう、という事態を避ける」というコンセプトを固め、未だかつてやったことのないOCC中庭でのBBQを計画し、分子研の皆さんにアナウンス・積極的な参加を呼びかけました。当初、前例のない火気使用に事務センターも少々及び腰でしたが、OCC防火責任者の生理研井本所長の許可が取れましたので、通常の炭焼きコンロに加えて、ガス式屋外コンロを川合所長のご寄付で購入し、アルコールトーチや音響設備も整えて本格的な屋外パーティーを整えることができました。幸いパーティーは大へん盛況で、チキン丸焼きから焼肉、串焼き、焼きそば、天ぷら、フルーツポンチまで、多くの企画を楽しんでいただけたことと思います。また、所長の発案で小杉教授の化学会賞のお祝いも行いました。多くの方から、大変楽しかったとのコメントを頂きましたが、これは技術職員・事務支援員や

UVSORと筆者のグループメンバーの協力の賜物と思っています。この場を借りて、裏方の皆さんには感謝したいと思います。以下、当日の写真をいくつか掲載しておきます。

（山本 浩史 記）



懇親会での乾杯風景



小杉教授日本化学会賞受賞のお祝い



BBQのひとコマ

長坂将成助教に平成28年度分子科学研究奨励森野基金

野村雄高助教に第5回自然科学研究機構若手研究者賞

谷中冴子助教に第32回井上研究奨励賞

須田理行助教に第10回PCCP prize

## 長坂将成助教に平成28年度分子科学研究奨励森野基金

このたび、「軟X線吸収分光法による分子間相互作用系の局所構造解析の開拓的研究」に関する業績により、平成28年度分子科学研究奨励森野基金の研究助成を頂きました。ご推薦頂いた小杉先生と、共同研究者の皆様には厚く御礼申し上げます。森野基金は故森野米三先生の寄付により始められた基金で、将来性のある分子科学の研究者の発展を期待して、これまで多くの研究者に助成金を交付してきました。

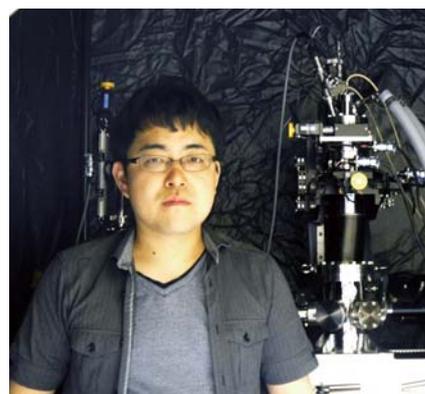
私は分子研に着任後、クラスターや液体などの分子間相互作用の局所構造を元素選択的に観測することを目指して、UVSORの軟X線ビームラインBL3Uで研究を推進してきました。特に、透過法による液体の軟X線吸収分光(XAS)測定の手法開発に力を入れてきました。XASは液体中の水素結合などの相互作用を元素選択的に観測できる手法で、特に軟X線領域はC, N, Oなどの化学的に重要な元素の吸収端が存在します。しかし、溶液においては溶媒の水による軟X線の吸収が大きいため、XAS測定が困難でした。そこで、液体層の厚さを20–2000 nmの範囲で調整可能な液体セルを独自に開発して、

液体の透過法によるXAS測定を可能にしました。そして、塩水溶液やメタノール水溶液などの、様々な溶液の局所構造を明らかにしました。

開発した液体セルでは、大気圧付近のヘリウムガスの圧力調整から、液体層の厚さを制御しています。これは、液体試料がピーカーのような実環境下に存在することになります。これまで、超高真空中でXAS測定することが一般的でしたので、液体試料を実環境下でその場観測できる点が画期的です。そこで、液体セルに電極を備えることで、電気化学反応における硫酸鉄水溶液中の鉄イオンの価数変動を、XAS測定から明らかにしました。また、電位変調XAS法を開発することで、サイクリックボルタンメトリーと同じ電位掃引速度(100 mV/s)で、電気化学反応中の液体試料をXAS測定することにも成功しています。

今後は、これまでの研究を更に発展させて、電気化学反応と光化学反応の反応メカニズムを、XASによる液体試料の局所構造のその場観測から明らかにしていきたいと考えています。

(長坂 将成 記)



## 野村雄高助教に第5回自然科学研究機構若手研究者賞

この度、第5回自然科学研究機構若手研究者賞を受賞致しました。本賞は、自然科学研究機構から、新しい自然科学分野の創成に熱心に取り組み成果をあげた優秀な若手研究者を対象として授与する、ということになっております。ですが、最初に前所長の大峯先生から伝えられたのは、「賞自体はおまけみたいなもので、それよりも重要なのは高校生相手に講演して研究内容を分かりやすく伝えることです」というようなことでした。

実際、自然科学研究機構の各研究所から一人ずつ選ばれた受賞者5名による、高校生を中心とした一般の方々向けの講演会が例年企画されており、今年も日本科学未来館にて開催されるとのことでした。非専門家相手の講演ということで当然普段の学会発表とは勝手が異なり、いかにわかりやすく話をするかということに重点をおいてプレゼンの準備をしました。それでもいざ5名が

集合して練習会をやってみると「その説明では素人にはわからない」「例がマニアックすぎる」など次から次へとダメ出しの嵐。どうすればよりよくなるか、議論すればするほど白熱して収束する兆しも見えず、専門家相手の発表との違いを痛感するはめになりました。

そんなこんなで迎えた講演当日。プレゼンの内容は結局、最初の25分がイントロや基礎知識の説明で、自分の研究内容は最後の5分だけとなり、ちょっとやりすぎかと不安を覚えながら講演に臨みました。それでも実際に講演を終えると、直後の質疑応答の時間だけでなく、その後の企画である「ミートザレクチャラーズ」でもたくさんの高校生が次から次へと質問をしにきてくれたので、少なくとも講演内容に興味をもってもらえたという意味で成功だったのではないかと思います。普段なかなか接点のない高校生たちの発言に時折ハツとさせられることもあり、



私個人としても貴重な経験をさせていただきました。

最後に、講演会の開催にご尽力くださり、講演の内容の指導までして下さった大峯先生、基生研所長の山本先生、研究力強化推進本部の小泉先生、講演会当日に様々な形で激励して下さった現所長の川合先生をはじめ、関係者の皆様に深く御礼申し上げます。

(野村 雄高 記)

## 谷中冴子助教に第32回井上研究奨励賞

光栄な事に、このたび第32回井上研究奨励賞を受賞することができました。この賞は博士取得3年以内の若手研究者を対象に、博士論文の内容に対し与えられる賞であり、私は「動的構造解析を用いたヒト主要組織適合複合体の安定化機構に関する研究」という博士論文に対して賞をいただきました。研究成果を簡単に要約すると、免疫系で抗原提示を行うヒト主要組織適合複合体が、提示抗原によって異なる構造揺らぎを示し、複合体の安定性が構造揺らぎによって決定されるという説を

NMRを用いて証明しました。現在もタンパク質の動的構造が機能に及ぼす影響について研究を続けており、この内容で受賞できたことを嬉しく思っています。

授賞式は第32回井上学位賞、第8回井上リサーチアワードと合わせて行われました。50歳未満の卓越した研究者に送られる井上学位賞受賞者からは各々5分の受賞のスピーチがあり、若い時からの研究エピソードが語られました。特に東京大学大学院農学生命科学研究科の東原和



成先生のスピーチが印象的でした。先生は、学生時代に点数が規程に満たず、希望していた建築学科に進学できなかったそうです。しかし、「空間」に対

する興味を変わず持ち続け、有機化学や分子生物を専門にする中で、動物が空間を認知するしくみの研究に至ったそうです。紆余曲折ありながらも初志貫徹、興味を突き詰めていくことの重要性を考えさせられました。

懇親会では受賞者間で話をする機会に恵まれました。理学、医学、薬学、工学、農学、様々な分野からの受賞者がおり、

それぞれの研究分野について紹介していました。異なる分野同士ではありましたが、意外と研究内容に共通する興味を見ることができ、ディスカッションが盛り上がりました。

総じて、井上研究奨励賞の受賞は貴重な経験でした。これまでの研究活動を支えてくださった方々に感謝するとともに、特に指導教官の津本浩平教授

(東大工)、ポスドク時代の受け入れ教員の菅瀬謙治准教授(京大工)、現在の上司である加藤晃一教授(統合バイオ)に感謝の意を表します。今後とも分子研レターズで報告できる研究成果を挙げられるよう、精進します。

(谷中 冴子 記)

## 須田理行助教に第10回PCCP prize

この度、英国王立化学会から第10回PCCP prizeを受賞いたしました。PCCP prizeは、英国王立化学会が発行する学術誌Physical Chemistry Chemical Physicsがカバーする領域で傑出した研究成果があり、将来の活躍が期待される35歳未満の若手研究者に授与されるものです。このような栄誉ある賞をいただきましたことは身に余る光栄です。

今回受賞対象となった研究は、「Light-induced superconductivity using a photoactive electric double layer (M. Suda et al., Science 2015, 347, 743.)」です。超伝導転移を利用したトランジスタの開発は、既存の電界効果トランジスタの高性能化に留まらず、将来的に量子コンピュータの実現などの革新的なイノベーションに繋がる可能性も指摘されており、物性科学・デバイス科学の分野において最もホットなトピックの一つです。本研究では、スピロピラン誘導体からなる有機単分子膜の光照射に伴う電気的極を「光誘起電気二重層」として利用することにより「光」を駆動力とした超伝導状態のスイッチを初めて実現しました。本研究は、ちょうど2012年に分子研に着任した頃に始めた研究であり、そ

のほとんどを分子研で行った研究です。本研究は、多くの高性能な設備とマシンタイムを必要とする研究であったため、分子研という恵まれた環境に助けられて実現できた研究であったと実感するとともに、より一層の研究の発展に適進したいと決意している次第です。

余談となりますが、本年度のPCCP prizeは東北大学の伊藤良一博士、名古屋大学の邨次智博士と、分子研での研究歴のある3人での同時受賞となりま

した。3月の日本化学会年会内にて行われた授賞式では分子研の話題で盛り上がり、思い出深い授賞式となりました。

最後に、本研究の共同研究者であり、研究に当たりご指導をいただいた山本浩史教授、理化学研究所の加藤礼三主任を始め、研究にご協力いただきました皆様に感謝いたします。

(須田 理行 記)



PCCP prize 授賞式 (前列左から二人目が筆者)

## 計算分子科学統合研究拠点

報告：理論・計算分子科学研究領域 教授 斉藤 真司

現在、計算分子科学に関する3つのプロジェクトが分子科学研究所で展開されています。一つは、平成27年度から始まったポスト京のプロジェクトです。国は、神戸にある京コンピュータの後継として「ポスト京」マシンの作製を進めており、京コンピュータからの発展として世界を先導する成果の創出が期待できる課題として、健康長寿命社会の実現、防災・環境問題、エネルギー問題、産業協力の強化、基礎科学の発展の5つの課題を設定しました。5課題の中のエネルギー問題の一課題として、「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」が進められています。この課題は岡崎進教授（分子研/名大）を代表とし、新エネルギー源の創出・確保 太陽光エネルギー、エネルギーの変換・貯蔵 電気エネルギーおよびエネルギー・資源の有効利用 化学エネルギーの3つのサブ課題から構成され、太陽電池や人工光合成、燃料電池や二次電池、メタンや二酸化炭素の分離回収、貯蔵、高効率触媒に関する計算科学研究が進められています。

二つ目のプロジェクトは平成24年度に開始された文部科学省国家課題対

応型研究開発推進事業における「元素戦略プロジェクト」<研究拠点形成型>です。このプロジェクトは磁石材料、触媒・電池材料、電子材料、構造材料の4領域から構成され、その中で触媒・電池材料領域は京都大学に研究拠点を置き、触媒、電池、理論のグループにより構成されています。理論グループの代表機関は分子研であり、江原教授をグループリーダーとし汎用元素を利用した高性能な触媒と二次電池の開発が推進されています。

三つ目は、平成27年度から始まったJSTの科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業による計算物質科学人材育成コンソーシアムです。このプロジェクトは、これまで次世代スパコンプロジェクト等で共に活動してきた東北大金属材料研究所（代表機関、毛利哲夫教授）、東京大学物性研究所、大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターとの連携により、HPC (high performance computing) 技術を駆使し最先端の物質科学研究を遂行できる次世代研究者および産業界に計算物質科学研究の成果や技術の汎用化を行う人材の育成を目指したものです。とくに、分子研を勤務地とする次世代研究者と

して、岡崎圭一氏および藤田貴敏氏の2名が今年度から若手独立フェロー（特任准教授）として理論・計算分子科学研究領域の新しいメンバーとして加わりました。

このように、分子研では計算分子科学に関連する3つのプロジェクトが推進されています。これらのプロジェクト相互の円滑な連携・運営、理論計算分子科学分野の人材育成、アプリケーションの普及活動などのために計算分子科学統合研究拠点を設置しました。また、以上に掲げた理論計算分子科学分野における分野振興活動には3つのプロジェクトに留まらず、理論・計算分子科学研究領域および計算科学研究センターを含めて推進していくものもあります。今後の活動・展開などに関して、ご支援・ご協力さらにはご提案いただけますようよろしくお願いいたします。

## 01 バンコク訪問

報告：協奏分子システム研究センター 教授 山本 浩史、岡崎統合バイオサイエンスセンター 教授 加藤 晃一

分子研はタイ王国のバンコクに位置する主要な3つの大学（カセサート大学、チュラロンコン大学、マヒドン大学）と研究と教育に関わる様々な協力事業を展開しています。今年に入ってからも、既に分子研メンバーがバンコクを2回訪問してこれらの大学との連携強化をはかってきました。

まず、2月に開催された国際会議 PACCON2016では、分子研とチュラロンコン大学との合同セッションを設け、これまでの学術交流の実績を振り返ると共に、これからの展望を議論しました。本当はもっと掘り下げると、諸熊先生のころから交流はあったようですが、今回は櫻井元准教授（現・大阪大学教授）が始めた JENESYS 事業以降の活動に絞って、双方の関係者が一堂に会して旧交を温めると共に、インターン生の写真なども交えながら研究紹介を行いました。これまでの交流は内閣府による JENESYS 事業、分子研による EXODASS 事業、NINS の国際事業費も使った IMS-IIPA と変遷してきましたが、足かけ10年間、着実に相互交流が進んでいることが確認され、またインターンOB/OGの現在などを垣間見ることが出来て有意義な会でした。ちなみに合同セッションの分子研側参加者は山本のほか、櫻井元准教授、柳井准教授、古谷准教授、石崎特任准教授、平本教授、飯野教授の7名でしたが、それとは別に齊藤教授、奥村准教授、伊藤助教、加藤が別のセッションに参加していたため、だいぶ分子研参加者の多い学会でもありました。また会議の合間には、タイの他の教育研究機関（カセサート大学、マヒドン大学、チェンマイ大学、VISTEC、NANOTEC等）の研究者と意見交換した

り、分子研への留学を希望する学生と受け入れ予定教員との引き合わせを行ったりするなど、様々な活動を同時に行うことが出来ました。山本としては、チェンマイ大学の研究者との共同研究の打合せや、複数学位制度で受入れている学生の指導方針について、送り元研究室の指導教員との意見交換が出来たことも収穫でした。

さらに6月はじめには、筆者ら2人に加えて飯野教授、齊藤教授、奥村准教授がバンコクを訪問しました。この訪問も、総研大を通じての交流協定に基づく活動推進に加えて、3大学からのインターンシッププログラムへの応募者の2次選抜面接、共同研究の打ち合わせ、加藤が代表をつとめる新学術領域「動的秩序と機能」が支援する国際活動など多面的な役割を担ってのものでした。特に、カセサート大学理学部50周年を記念した2日間の国際イベントの一環として、6月3日に第2回 KU-IMS シンポジウムが開催されました。本シンポジウムは Supa Hannongbua 理学部長（次期タイ化学会会長）の肝煎りで企画され、双方の研究者が先端的な

研究動向を紹介するとともに、フリーディスカッションでは今後の連携を深めるための方策について率直に意見交換を行う機会を得ました。これまでの相互理解の段階を経て学術交流の新たなフェーズを迎えるにあたっては、いうまでもなく欧米や日本の追随を越えた創造性を開拓する精神が不可欠であり、そのために何が必要かということ、タイの学生・若手研究者を交えて真摯に議論しました。また、加藤はそれぞれのタイ訪問で、分子研特別共同利用研究員として受け入れたカセサート大学の大学院生の学位論文口頭試問の外部審査員をつとめてきました。

こうした活動の積み重ねが、タイのサイエンスのこれからの担う若い研究者層の涵養に結びつくことを願ってやみません。



PACCON2016での交流風景



カセサート大でのシンポジウム。

参加者の中には、総研大卒業生やインターンシップ経験者も。

## 02 日韓生体分子科学セミナー：実験とシミュレーション

報告：岡崎統合バイオサイエンスセンター 教授 青野重利

2016年2月15日～17日の3日間、岡崎コンファレンスセンターにおいて「日韓生体分子科学セミナー：実験とシミュレーション」と題したアジア連携分子研研究会を、日本学術振興会新学術領域研究「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」（領域代表：加藤晃一教授）との共催により実施した。

タンパク質や糖鎖などの生体分子を対象とした生体分子科学研究は、いまやそれら生体分子の立体構造形成や機能発現機構の解明を目指した、構造生物学、分子生物学、生化学、各種分光学といった実験科学からの取り組みのみに限られる分野ではない。むしろ、分子動力学シミュレーション、量子・統計力学などを始めとする理論・計算機科学的な取り組みや、バイオインフォマティクス、システム生物学などの情報科学を基盤とした新しい研究手法を適用することにより、ポスト・ゲノムサイエンスにおける重要な研究分

野として位置付けられるとともに、新たな研究展開を遂げつつある。本研究会では、分子研において主に実験科学的手法により生体分子科学研究を行っている研究者と、韓国のKorea Institute for Advanced Study (KIAS) ならびにKorea Advanced Institute of Science and Technology (KAIST) において、理論・計算科学・情報科学的な面から研究に取り組んでいる研究者が中心となり研究会を企画・開催し、両国間およびアジアにおける関連分野の研究交流を図ることを目的とした。本研究会においては、以下の研究テーマを中心に、韓国側から16名、日本側から21名の講演者による講演が行われた。

1. 天然変性タンパク質のダイナミクスと分子認識機構
2. タンパク質の構造予測、人工タンパク質設計の現状と将来
3. タンパク質フォールディングの分子機構
4. 構造生物学的手法による糖タンパク

質、金属タンパク質の構造機能相関解明

5. 糖鎖—タンパク質相互作用による生体超分子複合体の形成機構
6. 生体超分子複合体形成を利用した機能性分子の創製
7. 一分子観測を基盤とした生体分子、特にモータータンパク質複合体の機能解明

この際、PIによる講演のみではなく、講演者の研究室に所属する助教、ポスドク等の若手研究者によるショートトーク枠も設定し、若手研究者にも口頭発表の機会を提供した。研究会会場の活発な質疑応答はもちろん、懇親会や夕食時などにも有意義な交流を実施することができた。なお、2017年11月には、同様の研究会を韓国において開催することが予定されている。



## 集合体の分子科学

ふじた・たかとし

2006年神戸大学発達科学部卒業、2008年同大学大学院総合人間科学科修士、2011年同大学大学院人間発達環境学研究科博士課程修了、博士（理学）。  
日本学術振興会特別研究員（PD）、ハーバード大学博士研究員、京都大学博士研究員を経て、2016年4月より現職



2016年4月1日付で京都大学理学研究科から分子科学研究所に着任いたしました。自分の研究室を持つのは初めてのことで、周囲の方にアドバイスを頂きながら試行錯誤を続けています。研究主幹の齊藤真司教授をはじめ、所内の関係者の方々にこの場を借りてお礼申し上げます。わずかではありますが、研究者としてのこれまでを振り返ることで、私の研究経歴の紹介とさせて頂きます。

私は神戸大学の発達科学部の出身です。この学部は元々は教育学部でして、私の所属していた人間環境学科は人間とそれを取り巻く環境をテーマにして、自然環境や生活環境など様々なことを研究の対象にしています。学科の先生方も非常に多彩で、素粒子理論・宇宙物理の先生から地学・生態学の先生までおられまして、一つの分野に収まらない学際的な学科です。学際性・分野横断というのは現在の私の研究のキーワードでもあります。学部時代の私は授業はほどほどに、体育会系合気道部に所属して稽古する日々でした。

学部4年では田中成典教授の研究室を志望しました。田中先生に提案して頂いた研究テーマが生体分子と水につ

いてでした。具体的にはタンパク質や核酸を取り巻いている水の役割を明らかにすることですが、当時の（今でも）私にとっては難しい研究テーマでして、どのように問題設定をしていいかわからない。自分なりに液体論や溶液化学を勉強してみたり、疎水性相互作用を分子動力学シミュレーションで解析してみたりと、試行錯誤の日々でした。勉強しているうちに水そのものに興味を持つようになってきました。4°Cでの密度最大など水は数多くの異常な物性を示すことが知られています。水の研究の歴史は非常に長いのですが、私が博士課程在学中に水の2成分モデルが再考されたりと、古くて新しい研究テーマです。当時の私は大規模電子状態計算手法の一種であるフラグメント分子軌道法を水・水溶液系に応用するための準備を行っている途中でして、残念ながら博士課程在学中には水の研究には切り込めませんでした。機会があればまた挑戦してみたい研究テーマです。

田中研究室で学位を取得後は、ハーバード大学のAlán Aspuru-Guzik教授のグループに博士研究員として着任いたしました。量子化学計算と機械学習

を組み合わせる有機薄膜太陽電池の分子探索を行うHarvard Clean Energy Projectや、量子シミュレーターで量子化学や量子ダイナミクスの問題を解くなど、物理化学の枠に収まらない先鋭的な研究が行われています。秘書の方が“unique roller coaster”と評したような非常にアクティブな研究室でして、人の出入りも激しく、ラボを見渡してみると必ず見知らぬ人（大抵は短期の訪問者）が一人はいるといった感じでした。

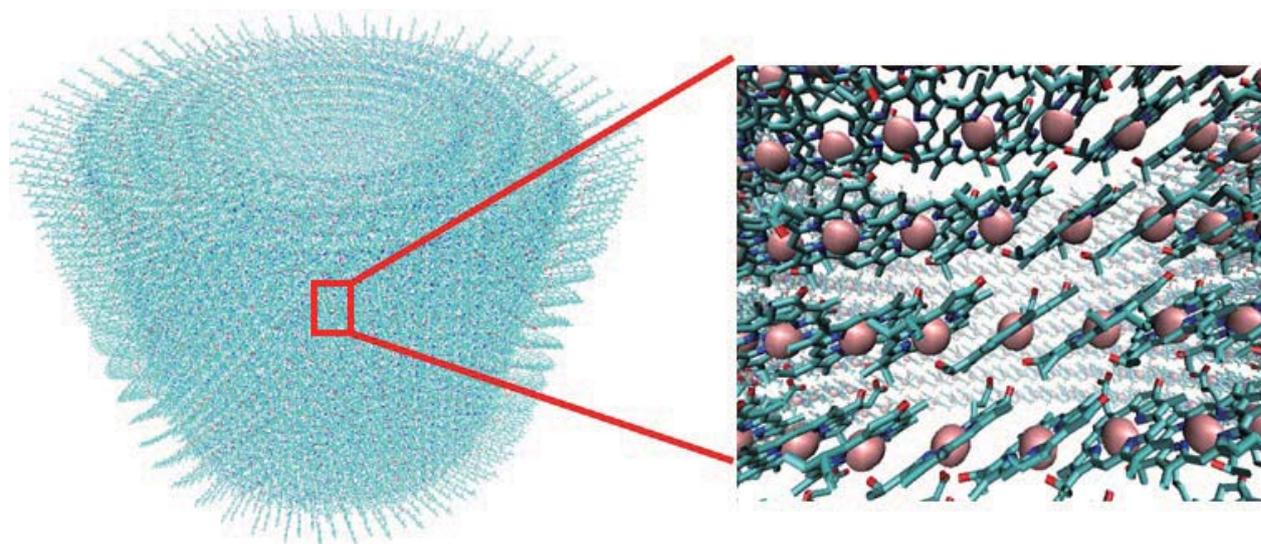
私がAspuru-Guzik研で始めたのが光合成アンテナ系クロロソームの励起エネルギー移動の研究でした。クロロソームは緑色硫黄細菌がもつ光合成集光アンテナでして、光はクロロソームに吸収された後FMOタンパクを通して反応中心にたどり着きます。クロロソームは脂質一重膜の袋の中にバクテリオクロロフィル分子を詰め込んだような物質でして、バクテリオクロロフィル分子は自己会合によって超分子を形成しており、図のような構造モデルが提案されています。色素が多数集積した系の電子励起エネルギー移動という計算科学の対象としては挑戦的な研究テーマでして、分子動力学法・電子状態計算・

量子ダイナミクスなどの手法を組み合わせてアプローチしました。分子集合体・励起子・量子ダイナミクス・自己組織化など、現在の私の研究に直結する見方・考え方はクロロソームの研究を通じて学んだといっても過言ではありません。研究を始めたころの私は光合成系やエネルギー移動理論についての知識はありませんでしたが、田中研時代に勉強していたことがためになったのか、比較的スムーズに研究テーマを変えることができました気がします。学位取得後に研究テーマを変えるのはリスクを伴いますし、全く違った研究分野に飛び込んで成功するのも難しいと思います。しかし研究テーマや所属コミュニティを変えることによって、新しい視点が開け、これまで自分が立っていた場所・行っていた研究をより客観的に見ることができるようになったと思います。

分子科学研究所では、分子集合体の

光電子物性やエネルギー移動・電荷移動ダイナミクスを研究していく予定です。クロロソームのような超分子、並進対称性が保たれている分子結晶、定まった構造・秩序をとらないソフトマターなど、分子が集合した系なら何でも取り扱えるようになるのが目標です。有機薄膜太陽電池や有機LEDなど、有機分子を使った様々な機能性物質が提案されており、応用的な観点からはどのような分子を設計すれば望ましい機能が得られるかを知る必要があります。光電子物性・エネルギー輸送・エネルギー変換などの機能を決めているのが集合体の電子状態として、構造乱れ・熱揺らぎの中での電子状態や励起子・電荷のダイナミクスを理解することが重要です。具体的な研究テーマとして、有機薄膜太陽電池界面の電荷分離機構や、機能性超分子系の電荷輸送に取り組んでいく予定です。いずれも基礎と応用・分子と物性・理論と実験など、様々

な側面から考えることができる研究テーマだと思っており、分子科学をベースにして異分野を結びつけるような研究を行うことが目標です。若手独立フェローとして恵まれた環境で研究できることに感謝しながら、日々精進していきます。今後ともどうぞよろしくお願いいたします。

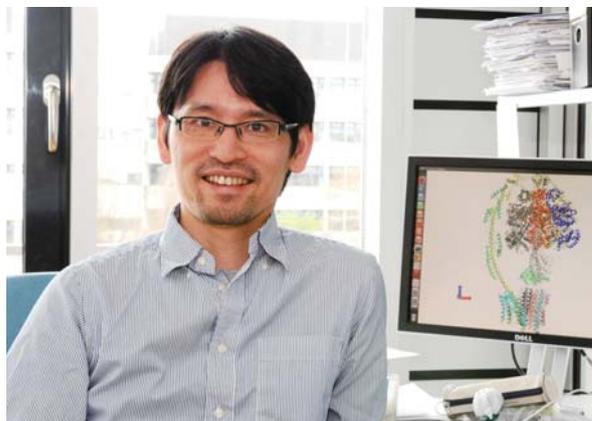


クロロソームの超分子構造 (PNAS 106 (2009) 8525.)

## 生物物理から目指す 分子科学の発展

おかざき けいいち

2009年神戸大学大学院自然科学研究科において博士号（理学）取得。早稲田大学、アメリカ国立衛生研究所（NIH）、マックスプランク生物物理学研究所での博士研究員を経て、2016年6月より現職。2014年日本生物物理学会・若手奨励賞を受賞。



2016年6月に、理論・計算分子科学研究部門の若手独立フェロー（特任准教授）として着任しました。5年間の海外でのポストドク修行の末に掴んだ独立ポジションに、喜びと期待にあふれています。昨年あたりから、日本やアメリカでいろいろアプライした中でも、今自分が手にできるベストなポジションと言える本職につけたのはとても光栄でして、私を信じて採用していただいた先生方に感謝して、これからの5年間でその期待に応えていきたいと思っています。私の専門は、理論生物物理でして、生体分子マシンが生体内で機能を発揮する際の動きを計算機でシミュレーションすることで、自然が作り上げた精巧かつダイナミックな仕組みを明らかにしていきます。前職では、マックスプランク生物物理学研究所という自分の専門分野を冠した研究所にいました。それに比べると分子研はより広い分野の方々がおられますが、この環境を活かしつつ自分の道を突き進んでいきたいと考えております。

私の専門は生物物理学ですが、大学の学部生時代は京都大学理学部化学系で理論化学の故・加藤重樹先生の研究室に配属されていました。その影響

もあり、今の専門に化学の文字は入っていませんが、自分の基礎にあるのは化学だと思っています。しかしながら、量子化学の専門家と議論できるほどの知識は持ち合わせてませんし（未だに勉強中です）、大学院の頃に研究していたタンパク質の粗視化モデルが化学の教授に不評だった（「アミノ酸が1つの球だなんて！」）こともあり、化学者の中では自分は生物物理学者であるということを通して（ある意味、逃げて）きました。分子研は、より化学色が強い研究所だと思いますが、生物物理的な観点から化学分野にも刺激や話題を提供できたらと思っています。

私が生体分子マシンの研究に行き着いたのは、大学院の頃に神戸大学・高田彰二先生（現京都大学教授）の研究室にいた時の影響が強いと思います。その時の先輩だった古賀信康さん（現分子研・協奏分子システム研究センター准教授）が、粗視化モデルを用いて回転分子モーター  $F_1$ -ATPase をぐるぐる回していたのを見て、とても複雑に見える生体分子モーターが意外にもシンプルに理解出来るのだなあという強い印象を受けました。当時の私は、タンパク質の構造変化を記述する粗視化モデル

の開発やアロステリーのメカニズムについての研究をして博士号を取得しましたが、この古賀さんの仕事と日本のグループから次々と出てくる一分子実験によって、生体分子モーターに魅せられていきました。その路線で、博士号取得後は、高田先生とPDBに30個ほど登録されている  $F_1$ -ATPase 構造の系統的な構造比較から中心軸の回転と酵素構造の変化の関係を調べたり、早稲田大学・高野光則先生の研究室で、ミオシン（リニア分子モーター）がアクチンフィラメントに結合する過程のシミュレーションを行いました。

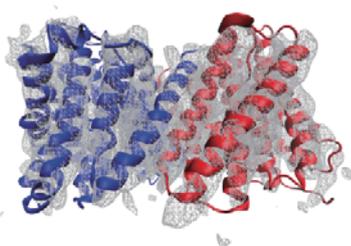
その後、2011年5月から私の5年間に及ぶ海外ポストドク修行が始まりました。ポストである当時アメリカ国立衛生研究所（NIH）のGerhard Hummer博士は、水・カーボンナノチューブ・タンパク質のシミュレーションや非平衡統計の理論などで著名な物理学者です。話しているとどんどん面白いアイデアが出てくるとも頭のいい人だったので、自分の興味である生体分子モーターを対象にして、新しいアイデアをいろいろ取り入れてみようというスタンスで取り組みました。うまくいなくて苦しい時期もありましたが、

F<sub>1</sub>-ATPaseの一分子実験家（東京大学・野地研究室の渡邊力也さん）が示唆していたATP加水分解後のリン酸解離のタイミングに注目して、分子動力学シミュレーションでどのサイトから解離しているかを明らかにすることができました。キーとなったのは、リン酸解離の定数値を計算で見積もって実験値と比べたことで、それには通常の自由エネルギー計算に加えて拡散過程の物理を踏まえたボスのアドバイスがありました。2年間のアメリカ生活の後、ボスがマックスプランク生物物理学研究所・理論生物物理学部門のディレクターとして移ったのについて行って、ドイツ・フランクフルトで3年間過ごしました。

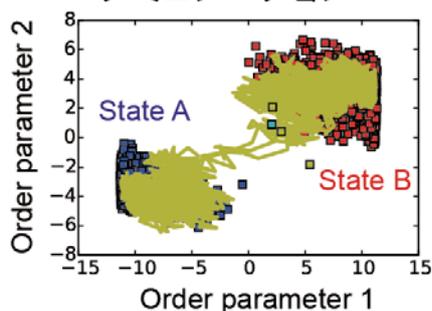
マックスプランク生物物理学研究所で目の当たりにしたのは、クライオ電子顕微鏡法の目覚ましい発展でした。研究所の構造生物学部門で、長らく構造が未知であったATP合成酵素の膜部分F<sub>0</sub>のプロトン通過に関わるa-subunitのヘリックスが膜に対してほぼ水平に傾いているという、従来の考えを覆す大発見がクライオ電子顕微

鏡法でなされました。この仕事をしたPhDの学生マテオくんとはフットサルなどを一緒にする仲間だったので、投稿中の原稿を送ってもらったりしてその興奮を目の当たりにできました。このように、今まで不安定で結晶構造解析では困難であった生体分子マシンの準安定・過渡の状態が低解像度ながら見えるようになってきたのは、大きな進展です。そこで得られた“点”の情報からそれらをつなぐ“線”を明らかにする、つまり全体の機能サイクルで何が起こっているのかを解き明かすのに、計算機シミュレーションが重要な役割を果たせると思っています。私は、クライオ電顕マップの情報を生かした構造モデリング、分子動力学法による機能ダイナミクスシミュレーション、速度論的モデリングを組み合わせることで、生体分子マシンの複雑（に見える）でマルチスケールな機能ダイナミクスを解き明かしたいと思っています。クライオ電子顕微鏡法に限らず、他の実験手法の情報も取り入れられるかもしれません。それでは、よろしくお願いいたします。

### 構造モデリング



### 機能ダイナミクスのシミュレーション



### 速度論的モデリング

$$(d/dt)\vec{p}(t) = K\vec{p}(t)$$

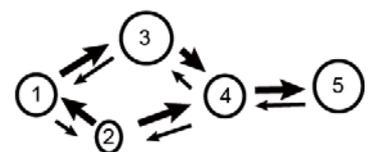


図. クライオ電顕マップの情報を生かした構造モデリング、分子動力学法による機能ダイナミクスのシミュレーション、速度論的モデリングを組み合わせ、生体分子マシンのマルチスケールな機能ダイナミクスを解き明かす



## 助からないと思っても助かっていること



### 中林 孝和

東北大学大学院薬学研究科 教授

なかばやし・たかかず / 1997年東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程中退、1998年東京大学大学院理学系研究科学位取得（博士（理学））。1997年分子科学研究所電子構造研究系助手、2002年北海道大学電子科学研究所助教授・准教授、2014年より現職。

#### 【はじめに】

「助からないと思っても助かっている」は、将棋の大山康晴十五世名人の名言の一つです。研究生生活を振り返る中で、この言葉がふと頭に浮かび、タイトルにつけさせて頂きました。私は1998年の12月から2002年の5月まで、電子構造研究系西信之先生の研究室の助手として分子科学研究所に在籍しました。この期間は私にとって濃密な4年半でした。研究成果は皆に自慢できるという程ではありませんでしたが、「自分で何とかしなければならぬ」、「自分が解決しなければ次に進めない」ということを体に染みつけた4年半でした。このように分子研レターズに再度書く機会を頂くことができたのは、10年以上経っても研究者として未だ続いていることを意味しています。何よりも分子研で培った「自分で解決する」という精神のおかげです。

#### 【分子研】

私が博士3年で中退し分子研に来たときの最初の仕事は、長期間使用されずにいたフェムト秒色素レーザー（コヒーレントのアンタレスとサトリ）の再立ち上げでした。もうご存じの方は少ないかと思いますが、サトリはちょっと大変なレーザーです。もちろん、マ

ニユアルもなければ教えてくれる人もいません。部屋は乱雑で取り散らかされており、はっきりいって放置されていました。まるで戦争の跡かのような実験室で、今だったらTwitterで皆さん悪態をついたであろうその状況で、何とか一人で立ち上げ、修士課程の児玉君と測定を行い、アンタレスでJ. Phys. Chem. Aに論文を出すことができました。頑張ればなんとかなるものだ、と当時は思ったものです。またこの実験室、実は使えるようになったときには、私の家となっていました。当時、私が住んでいたアパートにクーラーが無く、また一階なので窓を全開にして就寝するというわけにもいきません。そこで、夏は布団を実験室にもちこみ、クーラーの効いた部屋ですやすやと寝、朝起きて、邪魔にならないように布団をたたむと、シャワーを浴びるために、いったんアパートに戻り、そしてまた分子研に戻るという生活をおくっていました。これができたのも、分子研にあまり人がいないという環境と西先生に暖かく見守って頂いた賜です（今は無理ですよ）。実験室に住んでいたように、分子研では好き勝手に過ごさせて頂き、西先生、秘書の鈴木さん、そして私と実験をした児玉君と加茂君には迷惑をかけたことと思います。「中林

君とは一緒に働きたくないけど、いると便利」という鈴木さんの意見が当時の私を物語っていると思います。

また、分子研時代に強調しなければならないのは、非常に恵まれた周囲の人間環境です。当時の電子構造研究系の一階は、私と同年代の分光学者の宝庫でした。静かな分子研の中で、一階の電子構造研究系は、なんだかいつも賑やかで研究を含めた様々な話をした思い出があります。比較的近い分野で、さらに異なる研究室（研究室が異なることが重要であると思います）の若手研究者が集まり、互いに影響を受け合いながら、自身の研究を進めていったことは、大変プラスになりました。この協調性のない私が言うほどですから、若手の育成においてとても良い環境であったと思います。

#### 【北大】

2002年に北海道大学電子科学研究所の太田信廣先生の研究室に助教授として異動しました。はじめに溶液試料に高電場を印加する研究をお願いされたのですが、直ぐに高価なセルを壊しました。低温で高電場を印加するシステム開発も行うことになったのですが、のんびりと製作していたところ、一年後に太田研の助教となった飯森俊文先

生（現室工大）が行うことになりました。さて？？ということで、私が以前に行っていたトランススチルベンおよびジメチルアミノニトロスチルベンなどスチルベンにドナー・アクセプターの置換基を導入した誘導体の光学過程について、外部電場効果の測定を行いました。外部電場によってトランス-シスの異性化や光誘起分子内電荷移動速度が変化することを発表することができ、何とか居場所を確保することができました。またこの論文がでたころから、研究室で細胞などを扱うことになり、その立ち上げから、蛍光寿命イメージングなどを用いた細胞測定までを行うようになりました。細胞を育てるのは楽しく、年末年始関係なく実験に没頭したのを覚えています。全く新しいことをするのは楽しいものです。細胞生物学から細胞培養のプロトコルまで

貪欲に知識や技術を吸収し、今では学生に指導できるまでになりました。物理化学の研究者でいながら、細胞を自ら育てそして測定を行ったことが次に繋がったと思います。このような機会を頂いた太田先生には大変感謝しています。

#### 【東北大】

約2年前より現所属の東北大学大学院薬学研究科に異動し、今まで行ってきた物理化学的手法や現象を生体系に応用することを目指しています。細胞とタンパク質を対象に、紫外共鳴・低振動ラマンなどを用いた計測、光化学反応を用いた制御、そしてメカノバイオロジーの一つとして、今まで行ってきた電場効果を生体系に応用すること進めています。「新しい場所に来たら、新しいことを行う」をポリシーに日々

精進しています。私が学生だった頃と比べると分子分光光学を中心にした研究室は漸減していると思います。しかし、この状況がむしろチャンスであり、分光光学の知識・技術・経験を生命科学に展開できることをアピールして行きたいと考えています。今はお金も装置も無く、日々自転車操業で、「助からない」と思うことがしばしばですが、幸いにも学生には恵まれていることから、今回も何とか「助かるのではないかと」頑張っています。西先生が御定年されてから、分子研に行く回数も減ってしまいました。今後も共同利用・共同研究として、立ち上がったばかりの貧乏研究室を助けて頂ければ幸いです。

## 覧古考新04 | 1976年

分子研は独立の研究所である。分子研の場合いわば「寄るべき大樹の陰」をもたないけれども、他方制約をうけることも少なく、何よりも研究者の連帯意識が直接に肌身に感ぜられる。

.....

研究所がその性格に応じて新しい制度を導入するためには、その独立性は大切な条件である。いづれにせよ、共同利用機関とは何かに対するほんとうの答えは、実績を積み重ねた歴史によってなされるであろう。われわれはそのような歴史を創ろうとしている。

分子研は発足して日は未だ浅いのであるが、10年余の準備期間を通じて研究者の間にはその運営に関して、あるコンセンサスが形成されていることも否定できない。分子研は第一に研究所としての意志の独立性を保持することは云うまでもないが、同時に直接これに参加する人、そうでない人の如何にかかわらず、その研究を鼓舞する中核としての役割を果さなければならない。そんなのぞみをかけて、「分子研レターズ」が研究者の語り合う共通の場として役だつことを希望する。

分子研レターズ No.1 「分子研レターズ創刊によせて」(1976年)

赤松秀雄（分子科学研究所長）



## 篠原久典教授に紫綬褒章

今年の5月17日に、春の叙勲で紫綬褒章を頂いた。大変に光栄なことです。受賞理由は『ナノ構造化学』。研究室のスタッフ、大学院生と国内外の共同研究者のお陰です。

すでにいろいろなところで書いたが、私の研究テーマは1990年9月12日(水)を境に大きく転換した。この日、ドイツのコンスタンツで開催されていた『第5回微粒子と無機クラスター国際シンポジウム』でWolfgang Kraetschmer (Max Planck 研究所, ハイデルベルク) が世紀の飛び入り講演を行った。フラーレン $C_{60}$ がグラファイトの抵抗加熱で簡単にしかも多量に合成された。会場は驚きで騒然となり、Kraetschmerの講演が終わった時、多くの聴衆はスタンディング・オベーションを送った。私も最前列の席で講演を聴いていた。この5年前の1985年、 $C_{60}$ はHarry Kroto (Sussex大学) とRick Smalley (Rice大学) らの共同研究で実験的にその存在は知られていたが、Kraetschmerの報告まで世界中の誰一人として多量合成には成功していなかった。

私は直ぐに帰国して三重大学でKraetschmerらの $C_{60}$ 合成の再現実験を三重大学で行った。フラーレン研究は世界中を巻き込んでフィーバーとなり、日にフラーレン関連の論文が30報も各種雑誌に掲載されるという異常事態になっていた。幸い、齋藤弥八先生(当時三重大学、現在名古屋大学)との共同研究で新奇なフラーレン『金属内包フラーレン』の研究で世界をリードすることができた。複核金属内包フラーレンの合成、金属内包フラーレンの精製と単離、あるいはX線構造解析

など世界に先駆けてNature誌を中心に次々と研究を発表した。現在、金属内包フラーレンは基礎研究のみならず応用・実用研究も進んでいる。われわれが始めて合成したガドリニウム内包フラーレン( $Gd@C_{82}$ )は、核磁気共鳴診断(MRI)の造影剤としての応用が急速に進んでいる。また、 $Gd@C_{82}$ は近年、中性子捕捉ガン医療のターゲット分子として大きな注目を浴びている。

金属内包フラーレンはまた、カーボンナノチューブ(CNT)の1次元内部空間に整列することを飯島澄男先生(名城大学、名古屋大学)のグループとの共同研究で発見した。この物質はその形状がさやえんどうに似ているのでピーポッド(peapod)と呼ばれている。興味深いことに、半導体のCNTに金属内包フラーレンを内包させたピーポッドは金属になる。これらの研究はNature, Science, Physical Review Letters誌などに発表され、世界のナノサイエンス・ナノテクノロジー界の注目を浴びた。その後、CNT内部では金属ナノワイヤ、直鎖状炭素分子、ダイヤモンド・ナノワイヤなどが効率良く合成されることも分った。いわば、CNT内部の空間はナノ新奇物質のナノ試験管と言えよう。

金属内包フラーレンやピーポッドは全く新しいナノ構造をもつが、思い起こせば、分子研の西信之研究室の助手時代に超音速クラスター分子線の技術を使った、正12面体のナノ構造をもつ水クラスターの研究は、私の『ナノ構造化学』の原点であった。若き日、研究者として私を鍛えてくれた分子研に感謝します。



篠原 久典 (しのはら・ひさのり)

分子科学研究所助手、三重大学工学部助教授を経て1993年から名古屋大学教授(大学院理学研究科)、現在に至る。この間、理学研究科長・理学部長(2012-2015)、2015年より名古屋大学高等研究院の院長を務めている。また、現在、浙江大学物理学教室(中国杭州市)の併任教授を兼務。研究テーマは一貫して『ナノカーボン』の創製、評価と機能開拓。野球が研究の次に(?)好きで、阪神タイガースファン。



## 山田陽一副チームリーダーに日本薬学会学術振興賞

2003年から2007年に魚住泰広グループで助手/助教をしており、山田陽一です。現在、理化学研究所環境資源科学研究センターで副チームリーダーをしています。ポスは魚住先生です。

本年2016年3月に、「日本薬学会学術振興賞」を受賞致しました。この賞は「満50歳未満で、薬学の基礎および応用に関し、各専門分野で優れた研究業績をあげ、その振興に寄与し、世界的にも注目される発展性のある研究者」に与えられるものです。推薦者の魚住先生、ならびに理研、分子研で共に頑張ってくれた共同研究者のおかげです。この場を借りて御礼申し上げます。

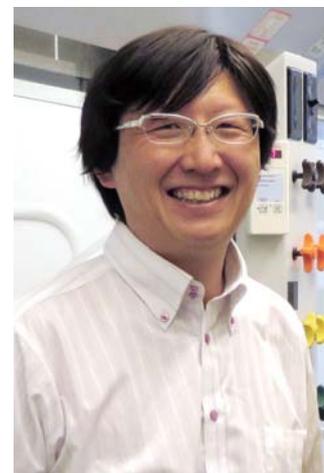
受賞タイトルは「医薬品合成を志向した高活性・高再利用性バッチ・フロー型固定化触媒システムの開発」です。分子研、理研での研究成果が評価され本賞を受賞することができました。高活性固定化触媒膜が導入されたマイクロフロー反応システムの開発を世界に先駆けて実現するとともに、mol ppmレベルの触媒量で機能するバッチ型高活性固定化触媒反応システムを、さらには大面積・高アスペクト比ナノ空間構造体と触媒が融合した固定化触媒を開発しました。その応用として、これらの触媒システムを用いた生理活性物質・医薬品の合成を行いました。

分子研の助手・助教は、自分で実験できるという素晴らしい環境でした。「Y. M. A. Yamada and Y. Uozumi」だけの著者論文が2報あるというのは、今や自慢できることで、それだけ研究に打ち込める環境だったわけです。そんな中、固定化触媒膜が導入されたマイクロフロー反応システムの開発で

は、学生と一緒に顕微鏡をのぞきながら、マイクロリアクターに触媒膜を作っていました。そしてある時、すーっと触媒膜ができたのでした。感動しましたね。学生と盛り上がったのでした。また、そのマイクロフロー反応器を使って、鈴木-宮浦反応を反応時間0.75秒で行いました。そのガスクロマトグラフィーのチャートを見ると、所望の生成物と内部標準物質のピークしかないのです。思わず学生に向かって「おい、生成物と内標のチャート見せられても困るんだよ。反応のチャート持ってきてよ。」と言ったのです。学生は憚然として、「先生、これ、反応のチャートです。」反応時間0.75秒でカップリング生成物が定量的に得られた！！まあビックリでした。

そんな風を楽しみながら研究生活を分子研で送っていました。いいところでした。この成果と理研での成果で受賞できたというのは、嬉しかったですね。皆、頑張ってくれて有難う。

今後とも宜しくお願い致します。



山田 陽一 (やまだ・よういち)

国立研究開発法人理化学研究所 環境資源科学研究センター 副チームリーダー。1994年東大薬学部卒、1999年同大学院了。博士(薬学)。帝京大学、米国スクリプス研究所、分子研勤務を経て、2007年より現職。医薬品、機能性材料合成を志向した固定化触媒開発を実施。趣味はゴルフ(GDO HC 17)、スキー(SAJ 2級)、クラシック鑑賞。ビールは'Sierra Nevada Pale Ale'、日本酒は埼玉の銘酒「花陽浴」が今は好き。

**倉重 佑輝**神戸大学システム情報学研究所 准教授  
(前 理論・計算分子科学研究領域 助教)

## 岡崎の思い出

くらしげ・ゆうき／2008年東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻博士課程 修了、同年4月より分子科学研究所理論・計算分子科学研究領域助教、2016年4月より現職。

ちょうど今朝がた今年が一番ゼミが新居のある六甲山麓に夏の訪れを告げておりました。岡崎を離れてまだ3ヶ月と少し、実感としては「長期滞在が何かで一時的に岡崎を離れているだけ」といったトボけた感じでおりましたが、本稿を書いていて本当に「分子研を去る」のだなという現実が少しずつ胸に沁みて参りました。

分子研には理論第一部門の柳井グループの助教として2008年4月に着任しました。博士課程の研究に目処がついていた（と自分では思っていた）事もあり、前年の秋には明大寺と山手のちょうど中間あたりにあったアパートを1ヶ月間借りて、共同利用研究員として柳井先生との研究をスタートさせました。学生には手痛い出費ではありましたが、新たな電子相関理論の研究を始められるという世界的にも数少ないチャンスを得たとあって、この6年（結局8年）に自分の全てをかけるぞと胸を高ぶらせていたのだと思います。当時の柳井先生も米国での武者修行を終えて研究室を構えたばかりで、これからの新しい量子化学を日本で興そうという気概に満ち満ちており、2人でなんでも出来るそんな雰囲気だったと記憶

しています。

その後も、本稿では全く書ききれませんが周りの方々に恵まれて色々な形でサポート頂き、分子研では本当に充実した研究人生の時を送らせて頂きました。そのまま楽しい楽しいで走り続けていたら、気付けば自分も当時の柳井先生の年齢をついに超え、そろそろ「世から貰う」ばかりでなく「世に返す」ことも考えなければならない時期に来たのだらうと思います。まだ未熟で与えて貰うことの方が多い若輩者ですが、この転出を期に自分なりに何ができる

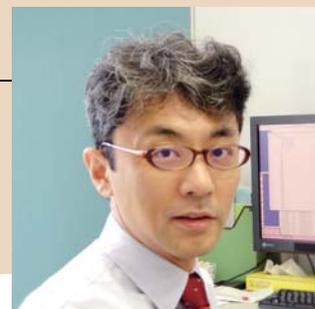
のか考え、出来れば熱い思いをもった若人と一緒にまた分子科学の夢を見たい、見せたいと思っております。

最後になりましたが、在職中にお世話になった方々からの返しよのない多大な御恩にこの場をかりて感謝申し上げます。今後の精進をお誓い申し上げます。本当にありがとうございました。



左から筆者、柳井、水上。プリストルにて。

福田 良一 京都大学 学際融合教育研究推進センター 特定准教授  
(前 理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学部門 助教)



## Acknowledgements

ふくだ・りょういち / 1996年京都大学工学部卒、2003年京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻博士課程修了。京都大学21COEリサーチフェロー、量子化学研究協会研究員を経て、2009年5月より分子科学研究所助教（江原グループ）。2016年5月より現職。

私は分子研でちょうど7年間過ごさせていただきました。その間、江原先生をはじめとした先生方、中村所長、大峯所長、川合所長、技術職員や事務スタッフの皆さま、研究会やワークショップに協力してくださいました諸先生方や学生さん、そのほかにもたくさんの皆さまの支えにより研究者として、また社会人として成長させていただきました。ありがとうございました。

7年前、決して若くはない新人助教として分子研に採用された頃の私は、今思い出しても恥ずかしいほどの世間知らずであり、自身の狭い専門領域に閉じこもり、少なからず勘違いしていたと思います。分子研には理論・計算だけでも多様なバックグラウンドを持った第一人者が揃っており、また、当時進行していたスーパーコンピューターのプロジェクトに関わる所内外の多種多様な研究者との交流から、自身がこれまで生きてきた世界の狭さに気づか

されました。また、科学者として研究を続けてゆくことの厳しさや我が国の科学界の難しい状況を知り、謙虚でありながら自分を信じる事の大切さを知りました。その一方で、多くの先生方、特に実験科学者の方々との共同研究を通じて、自身の研究の科学的な位置づけや今後研究を発展させるべき方向性を教えていただきました。

国際的な共同研究、国際交流の機会を多く得たことは大変ありがたいことでした。特にイタリア、フランス、タイ、インド、アメリカ、中国の先生方との交流、共同研究は、自身の国際的な価値を知る機会となり、人間的に成長させていただくとともに研究者として活動してゆく上での自信となりました。

スーパーコンピューター以外にもいくつかのプロジェクトに参画させていただき、普段は決して交わらないような分野の先生方との交流から、サイエンスに対する夢と人類社会の進歩に

貢献する喜びを教えていただきました。放射光分野、宇宙科学、国立天文台、核融合研の先生方からは、宇宙・生命や進化といった課題に自身も貢献できる可能性があることを教えていただき、科学者としての大きな夢を新たに得ることができたように思います。触媒化学の先生方からは、喫緊の社会問題の解決に科学者として関わる使命と問題解決に貢献する喜びを教えていただき新たな活躍の場を与えていただきました。おかげで、新しい職を得ることもできました。

簡単に振り返っただけでも、本当に多くの方々に育てていただきました。今後とも謙虚さを忘れずもう少し成長してゆきたい、分子科学に貢献したいと思っております。最後になりますが、私と妻との出会いの場を提供いただき、人としてそして親としての喜びを得る機会を作って頂いた方に感謝いたします。

**西山 嘉男**金沢大学大学院自然科学研究科物質化学専攻 助教  
(前 光分子科学研究領域 助教)

## 分子研での5年間

にしやま・よしお／2006年京都大学理学部理学科卒業、2011年京都大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了(博士(理学))、同年分子科学研究所特任助教、2016年3月より現職。

2011年の5月より約5年間、分子研に在籍し、今年の3月に金沢大へと移りました。研究を指導していただいた岡本裕巳教授をはじめ岡本研究室の皆さま、そして光分子科学研究領域の他の研究室の方々には大変お世話になりました。この場をお借りしてお礼申し上げます。

岡本研究室では、自分が希望していた研究テーマをさせていただくことができ、幸いなことに分子研を出るころにはなんとか成果を出すことができました。中でも、大学院を出てすぐの

私にとっては、自分でじっくり考え試行錯誤しながら研究テーマを進めていける環境にいたことは、研究者として本当にいい経験になったと感じています。また、研究に専念できる環境にいたおかげで、自分の専門以外についても勉強でき、今後の研究についてもよく考える時間をもつことができました。こうした分子研で培ったことを、金沢大での研究や学生の指導に生かしていきたいと考えています(とはいえ、現実には授業やなんやで結構あわただしく、分子研での生活を懐かしいなと思う

ことも……。ちなみに、金沢に来て良かったのは、やはり食べ物(特に、お寿司)が旨い、ということです。ぜひ皆さまお越しく下さい。)

最後になりますが、5月の中頃に開催された光マニピュレーションの国際会議で分子研在籍時の研究について発表する機会があり、幸いなことに賞(The OMC Outstanding Award)をいただくことができました。改めて感謝を述べさせていただきます。



2015年12月1日着任

**野田 一平**

のだ・いっぺい

機器センター  
コーディネーター

大阪大学で学位取得後、ハーバード大学での博士研究員を経て、企業で30年以上勤務した後、2015年12月から機器センターで勤務させて頂いています。前職では、ナノテク等の新技術開発及び新商品開発を経て新事業開発推進を行ってきました。今後は、不勉強な所が多々あると思いますので、分子研の先生方また職員の方々から色々とアドバイスを頂いて、少しでも皆様のお役に立てるように努めて参ります。

どうぞよろしくお願い申し上げます。

2016年1月1日着任

**加藤 隆士**

かとう・たかし

理論・計算分子科学研究領域  
理論分子科学第一研究部門 特任専門員

本年1月より理論・計算分子科学研究領域の特任専門員を拝命しました。文部科学省のポスト「京」重点課題アプリケーション開発・研究開発の重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」（課題責任者：岡崎 進・教授）の事務局として対応しております。分子科学研究所の発展に微力ながら尽力いたしますので、宜しくお願いいたします。

2016年3月1日着任

**鈴木 達哉**

すずき・たつや

岡崎統合バイオサイエンスセンター  
生命動秩序形成研究領域 特任研究員

岐阜大学で学位取得後、台湾Academia Sinicaでの一年間の博士研究員を経て、2016年3月に着任いたしました。これまでは糖脂質及びグリコサミノグリカンの化学合成の研究を行ってきておりました。着任先の加藤グループでも自身の専門を活かし、核酸、蛋白質、糖鎖など生体高分子の織り成すダイナミクスを解き明かす、構造・機能解析用プローブ分子の開発に取り組んでいきます。よろしくお願い申し上げます。

2016年4月1日着任

**藤田 貴敏**

ふじた・たかとし

理論・計算分子科学研究領域  
理論・計算分子科学研究部門 特任准教授

神戸大学にて学位取得後、日本学術振興会特別研究員、ハーバード大学博士研究員、京都大学博士研究員を経て、2016年4月1日より現職に着任いたしました。分子集合体の光電子物性や励起子ダイナミクスに関する理論研究に取り組んでいます。

どうぞよろしくお願い申し上げます。

2016年4月1日着任

**伊澤 誠一郎**

いざわ・せいichろう

物質分子科学研究領域  
分子機能研究部門 助教

東京大学で学位を取得後、日本学術振興会特別研究員として理化学研究所、カリフォルニア大学サンタバーバラ校訪問研究員を経て、2016年4月に平本グループの助教に着任いたしました。有機半導体界面など有機膜中のナノ構造と基礎物性との相関を調べて、有機薄膜太陽電池などの有機エレクトロニクスデバイスの実用化に貢献できるような研究をしたいと考えています。よろしくお願い申し上げます。

2016年4月1日着任

**藤本 将輝**

ふじもと・まさき

極端紫外光研究施設  
光源加速器開発部門 助教

大阪大学産業科学研究所にある自由電子レーザーを使って強力なテラヘルツ単色光発生についての研究を行いながら学位取得後、今年度よりUVSOR加藤グループに着任いたしました。荷電粒子の運動が生み出す実自由で多様な電磁場構造に興味があり、UVSORの開発研究を通じて放射光光源の発展に貢献できるよう努力いたします。まずはUVSORに愛着をもって接することから始めたいと思います。どうぞよろしくお願い申し上げます。



NEW STAFF

## 新人自己紹介

2016年4月1日着任

## 浅田 瑞枝

あさだ・みずえ

物質分子科学研究領域  
電子物性研究部門 特任助教

名古屋大学で学位取得後、4月より中村グループの特任助教として着任いたしました。これまで、ESRを用いて生体分子中の金属錯体の磁気構造解析や、スピラベリングによる構造解析を行ってきました。今後は、高周波ESRを用いた研究、固体や生体分子中の電子スピンの性質を明らかにする予定です。

どうぞ、よろしくお願いいたします。

2016年4月1日着任

## 重田 育照

しげた・やすてる

理論・計算分子科学研究領域  
理論・計算分子科学研究部門 客員教授

2000年に大阪大学大学院理学研究科にて博士（理学）取得後、同年日本学術振興会特別研究員（PD）、2003年東京大学大学院工学系研究科助手、2007年筑波大学大学院数理物質科学研究科講師、2008年兵庫県立大学ピコパイオロジー研究所特任准教授、2010年大阪大学大学院基礎工学研究科准教授を歴任し、2014年から筑波大学大学院数理物質科学研究科教授。専門はナノバイオ系の理論化学。

2016年4月1日着任

## 加藤 毅

かとう・つよし

理論・計算分子科学研究領域  
理論・計算分子科学研究部門 客員准教授

本年4月より客員准教授を務めさせて頂いております。東北大学にて学位取得後、分子研では2000年5月から2年半、谷村吉隆先生のグループでIMSフェローとしてお世話になりました。現在は東京大学にて、分子の量子動力学をテーマに研究を行っています。最近は、様々な量子動力学理論同士の関係性にも興味を持ち、その翻訳に取り組んでいます。この機会に分子研の方々と共通の興味対象を見い出したいと考えております。どうぞよろしくお願いいたします。

2016年4月1日着任

## 永田 勇樹

ながた・ゆうき

理論・計算分子科学研究領域  
理論・計算分子科学研究部門 客員准教授

東京大学学士・修士卒業、京都大学博士修了後、ドイツのBASF本社で働く。リーマンショックを機に退社、カリフォルニアでポスドクの後、マックスプランク研究所でグループリーダーに。日本は十年程縁がなかったので、分子研に寄ることができるのは望外の喜びです。外資系企業での勤務と海外でのPIの経歴がユニークなところですので、その辺りのお話も含めて分子研の方々と交流できたらと思っています。

2016年4月1日着任

## 岸本 哲夫

きしもと・てつお

光子科学研究領域  
光子科学第四研究部門 客員准教授

本年4月に着任しました。東京大学で学位取得後、米国JILA研究所と東京大学でポスドクや助教、電気通信大学でテニユアトラックポストを経て、2012年から同大学に准教授として在籍しています。専門は極低温量子気体を用いた新奇物理現象の開拓で、現在ボース凝縮体の連続生成を目指しています。今後、皆様の研究に微力ながら貢献できればと思っています。よろしくお願いいたします。

2016年4月1日着任

## 中村 雅一

なかむら・まさかず

物質分子科学研究領域  
物質分子科学研究部門 客員教授

奈良先端科学技術大学院大学 物質創成科学研究科に所属しており、本年4月に客員教授として着任いたしました。現在の専門は「有機エレクトロニクス全般」ですが、得意とするところは、薄膜成長・表面分析・走査型プローブ顕微鏡などです。分子研は、院生時代にUVSORのユーザーとしてお世話になり、私が研究者を志すきっかけの一つとなった場所です。何らかの形で恩返しできれば幸いです。

2016年4月1日着任

## 田嶋 尚也

たじま・なおや

物質分子科学研究領域  
物質分子科学研究部門 客員准教授



本年4月に客員准教授として着任いたしました。2011年より東邦大学理学部に在籍しています。専門は固体物性で、有機導体の電気伝導性を温度・磁場・圧力をパラメーターに調べています。最近、質量ゼロのディラック電子系を発見し、量子ホール効果観測に成功しました。このディラック電子系をチャンネルとしたトランジスタを作製して新奇物理を展開したいと考えています。よろしくお願いいたします。

2016年4月1日着任

## 吉川 浩史

よしかわ・ひろふみ

物質分子科学領域  
物質分子科学部門 客員准教授



東京大学で学位を取得後、12年間の名古屋大学勤務を経て、平成27年4月より関西学院大学工学部に准教授として着任し、本年4月より分子研客員准教授を拝命しました。名古屋大時代は、施設利用や共同研究で大変お世話になりました。現在の私の研究は、高性能な二次電池用電極材料の創製で、分子科学的視点から研究を行うため、今後も分子研を大いに利用したいと思います。よろしくお願いいたします。

2016年4月1日着任

## 生越 専介

おごし・せんすけ

生命・錯体分子科学研究領域  
生命・錯体分子科学研究部門 客員教授



本年4月より、生命・錯体分子科学研究領域の客員教授として着任いたしました。大阪大学にて博士課程修了後、有機金属化合物を扱う研究室に移り、そのまま2007年4月より教授に昇任しました。専門は、遷移金属錯体化学に基づく新しい触媒反応の開発を行うとともに、最近では有機フッ素化学において有機金属化合物をどのように利用出来るかについても興味を持っています。よろしくお願いいたします。

2016年4月1日着任

## 荘司 長三

しょうじ・おさみ

生命・錯体分子科学研究領域  
生命・錯体分子科学研究部門 客員准教授



本年4月より生命・錯体分子科学研究領域の客員准教授を拝命いたしました。2002年に千葉大学で学位を取得、奈良先端科学技術大学院大学の博士研究員を経て、2008年に名古屋大学大学院理学研究科の助教、2013年より同准教授を拝命し、名古屋大学にて研究と教育の機会を頂いております。現在は、「酵素を誤作動させる分子の開発」と「酵素の誤作動状態での高難度物質変換」に関する研究を進めております。この機会に分子研の先生方との連携を深め、共同研究に展開できればと考えております。どうぞ、よろしくお願い致します。

2016年4月1日着任

## 當舎 武彦

とうしゃ・たけひこ

生命・錯体分子科学研究領域  
生命・錯体分子科学研究部門 客員准教授



本年4月に着任いたしました。京都大学で学位取得後、分子研には、2年半の間、北川禎三先生のグループでお世話になりました。米国での研究経験を経て、2009年より理化学研究所SPRING-8に在籍しております。個々の金属タンパク質の反応機構を解明するとともに、それらのタンパク質が細胞内でどのようにして連携して機能しているのかという点に興味を持って研究を進めております。よろしくお願いいたします。

2016年4月1日着任

## 米澤 恵一郎

よねざわ・けいいちろう

光分子科学研究領域  
光分子科学第三研究部門 特別研究員



2016年3月に千葉大学で学位を取得後、4月1日付けで日本学術振興会特別研究員として解良グループに着任いたしました。ただひたすらに機能性有機分子材料の電子物性解明に諸光電子分光法を用いて取り組んでおります。薩摩隼人魂を胸に様々なことに果敢に取り組んでいきたいと思っております。どうぞよろしくお願いいたします。



NEW STAFF

## 新人自己紹介

2016年4月1日着任

## 福田 真 悟

ふくだ・しんご

生命・錯体分子科学研究領域  
生体分子機能研究部門 研究員

この3月に金沢大学で学位取得後、加藤グループに博士研究員として着任しました。これまで、高速AFMの開発とそれを用いたタンパク質の一分子観察を行ってきました。現在、新学術領域「動的秩序と機能」の国際活動支援をうけてカリフォルニア大学バークレー校で研究をしています。高速AFMや光ピンセットなどの手法を用いて生体分子の構造動態に迫りたいと思います。どうぞよろしくお願いたします。

2016年4月1日着任

## 川口 玄 太

かわぐち・げんた

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

京都大学博士後期課程単位取得退学のものち、2016年4月より協奏分子システム研究センター山本グループの研究員として着任いたしました。これまでは、分子性導体におけるスピント電荷の相互作用について、物性測定を中心に研究を行ってきました。今後は、新たな分子性エレクトロニクスの開拓に向けて、日々努めてまいります。どうぞよろしくお願いたします。

2016年4月1日着任

## 河合 文 啓

かわい・ふみひろ

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

これまでタンパク質のX線構造解析をもちいて、病原性細菌やウイルスのタンパク質の立体構造解析を行ってきました。少し分野を移動し、新しい技術や実験法を身に付けていきたいと思っています。よろしくお願いたします。

2016年4月1日着任

## ZHU, Tong

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

平成26年3月に総合研究大学院大学で博士学位を取得し、4月から統合バイオの栗原研究室に研究員として着任しました。これまではタンパク質結晶化やNMRなど生物物理的な手法を用いたタンパク質や糖鎖などの生命大分子の立体構造を解明する研究をしましたが、現在は新しく構成生物学の知識を取り込んで、人工細胞に関する研究に挑戦して行きたいと思っています。宜しくお願いたします。

2016年4月1日着任

## 遠山 遊

とよやま・ゆう

機器センター  
特任専門員

本年4月より、ナノテクノロジープラットフォームの事務担当としてお世話になっております。以前も同業務で分子研に勤務しておりましたが、この度2年半ぶりに復帰させていただくこととなりました。久しぶりの環境に懐かしさを感じながらも、組織体制をはじめ変わったことも多く、新たな気持ちで日々過ごさせていただいております。一日も早く業務に慣れ、少しでも皆様のお力になれるよう努めてまいりますので、どうぞよろしくお願いたします。

2016年4月1日着任

## 稲垣 裕 一

いながき・ゆういち

技術課  
特任専門員

2012年11月より極端紫外光研究施設ビームラインBL4Uの技術支援員としてお世話になっておりました。本年4月から技術課所属となりました。BL4Uの利用者支援は引き続き担当いたしますが、今後は加速器運転や施設・設備の管理が新たに担当範囲に加わります。既存業務の水準向上と、新規業務へ早く対応できるよう鋭意努力いたします。よろしくお願いたします。

2016年4月1日着任

## 小杉 優太

こすぎ・ゆうた

技術課  
特任専門員



平成28年3月に名城大学大学院理工学研究科博士前期課程を修了し、同年4月より技術課装置開発室の特任専門員としてお世話になっております。大学ではペロブスカイト型色素増感太陽電池の研究をしておりました。機械加工・設計製図に関して素人ではありますが、技術や知識を身に付け、皆様のお役に立てるよう日々努めて参りたいと思っております。よろしくお願いたします。

2016年4月1日着任

## 木村 幸代

きむら・さちよ

技術課  
特任専門員



4月より技術課機器開発技術班でお世話になっております。着任前は民間企業に勤め、樹脂部品設計、CAE強度解析、デジタルエンジニアリング、社内教育等に携わって参りました。親しみやすく頼りがいのある技術者を目指し、研究者の方々のニーズにお応えできるよう尽力して参りたいと思っておりますので、ご指導いただければ幸いです。どうぞよろしくお願いたします。

2016年4月1日着任

## 兵藤 由美子

ひょうどう・ゆみこ

機器センター  
事務支援員



機構が法人化される前の大らかな時代に4年程生理研で教授秘書をしていました。随分と長いブランクを経てですが、この度分子研でお世話になることになりました。以前と変わらぬ緑豊かな環境は素晴らしいですが、いろいろな面で窮屈になったなあと感じています。とはいえ、才能溢れる方々と働けることはとても幸せなことです。一日でも早く仕事を覚えて皆様のお役に立てるように努めてまいります。どうぞよろしくお願いたします。

2016年4月27日着任

## LE, Quang Khai

光分子科学研究領域  
光分子科学第一研究部門 研究員



I was awarded a PhD degree in photonic engineering at Ghent University, Belgium in 2011. My research focuses on design, simulation, fabrication and characterization of functional optical nanomaterials for solar energy harvesting, biosensing and photoluminescence applications. Recently, I have joined in Prof. Okamoto's group at IMS to study excited-state properties of plasmonic nanomaterials and their interaction with molecules by means of near-field optical imaging and relevant techniques. My primary research is to explore chirality of plasmonic nanostructures and optical activity, and its relation to molecular interactions based on near-field and nano-optical methods.

2016年5月1日着任

## 村木 則文

むらき・のりふみ

生命・錯体分子科学研究領域  
生体分子機能研究部門 助教



2013年から3年間の特任助教を経て、今年の5月1日付で助教に着任しました。引きつづき、青野グループで金属が関わるセンサータンパク質の構造と機能に着目した研究に取り組んでまいります。新人とは言えないかもしれませんが、心機一転頑張りますのでよろしくお願致します。

2016年5月1日着任

## WEN, Hsin-I

温欣宜

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



2012年から3年間、名古屋市立大学にて技術支援員として勤務しておりました。今年、5月より統合バイオ栗原グループに研究員として着任致しました。これまで専攻してきた生物を礎に、新しいサイエンス研究を頑張りたいと思っております。子育て中のため、皆様にご迷惑をおかけすることが多いと思っておりますが、どうぞよろしくお願申し上げます。



NEW STAFF

## 新人自己紹介

2016年6月1日着任

## 岡崎 圭一

おかざき・けいいち

理論・計算分子科学研究領域

理論・計算分子科学研究部門 特任准教授



2009年神戸大学大学院自然科学研究科において博士号(理学)取得後、早稲田大学、アメリカ国立衛生研究所(NIH)、マックスプランク生物物理学研究所での博士研究員を経て、2016年6月に着任しました。計算機シミュレーションを用いて、生体分子モーターやトランスポーターなどの機能ダイナミクスに取り組んでいます。所内で共同研究などできたらいいなと思っています。よろしくお願いいたします。

2016年6月1日着任

## Anggi Eka Putra

生命・錯体分子科学研究領域

錯体触媒研究部門 研究員



I received Ph.D. degree from Doshisha University in 2014. Then, I worked as a graduate school assistant, a limited-term faculty position at the same university for last two years. My research was mainly focused on the environmentally friendly catalytic system so-called “borrowing hydrogen” methodology. I joined Prof. Yasuhiro Uozumi group at IMS as a postdoctoral fellow since June 2016. Now I am studying polymer-supported metal catalysis and their applications for ideal organic transformations.

## アウトリーチ活動

## 第108回、第109回分子科学フォーラムを終えて

2016年2月15日、第108回フォーラムの講師として上杉志成先生(京都大学 物質-細胞統合システム拠点・教授)をお迎えし、「生物活性分子の新しい世界」というタイトルでご講演頂きました。生理活性を有する化合物の合成法を確立し、それらを医薬品・農薬だけでなく生物学の研究ツールとして利用することの有用性を説かれました。化合物ライブラリーからヒット化合物を探索し、それを鋳型に大きさ・形・官能基などを改良する過程は「お見事！」の一言で、化合物の新たな可能性や未来にかけ上杉先生の情熱がピシピシと伝わってきました。

2016年6月3日、第109回のフォーラムでは、米田穰先生(東京大学総合研究博物館・教授)に「化学分析で読み解く古代人の食生活」というタイトルでご講演頂きました。遺跡などから出土する人骨の同位体分析から、当事の人々(縄文時代人や弥生時代人など)の食生活だけでなく、健康状態や出身地に関する情報までもが得られることに驚かされました。同位体分析は考古学だけでなく犯罪捜査などにも利用されることがあるそうで、分子や原子に記された指紋情報としての応用可能性に改めて感心させられました。

第108回、第109回どちらのフォーラムも盛況で、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。なお、第110回の分子科学フォーラムでは、Spiber株式会社・取締役兼執行役の菅原潤一氏に「クモ糸から始まる素材革命」というタイトルでご講演をお願いしています(2016年9月9日開催予定)。

(秋山 修志 記)



共同利用研究ハイライト

# 近接場顕微分光イメージングによる金ナノ微粒子低次元集合構造における電場分布と構造との関係

島田 透 弘前大学教育学部理科教育講座 講師

## 1. はじめに

近年、ナノテクノロジーの基本材料の一つとして、金属ナノ微粒子が着目されている。金属ナノ微粒子は、そのサイズゆえバルクとは異なる新しい物性を示すことが多いためである。分光分野においては、金や銀などの貴金属ナノ微粒子集合体に分子の光学応答を増強させる特異な性質があることが知られている。このような性質は、表面増強ラマン散乱 (SERS) などに利用され、単分子計測や超高感度センサーの開発などを旨とした研究が数多く行われている。

ラマン散乱強度の増大の主な起源は、金属ナノ微粒子の自由電子の集団運動 (表面プラズモン) によって局在した増強電場によるものと考えられている。しかしながら、金属ナノ微粒子集合体に分布する増強電場と粒子配列構造との関係については完全には理解されていない。そこで、本研究では、数

多くの金属ナノ微粒子が集まった集合体として、金ナノ微粒子二次元集合体および金ナノ微粒子一次元構造に着目し、これらの集合体における増強電場の空間分布と微粒子構造との関係を明らかにすることを目的に研究を行った。

## 2. 走査近接場光学顕微鏡による増強電場分布の可視化

金属ナノ微粒子集合体における光学応答の分布 (増強電場の空間分布) を観察するためには、光の回折限界を超えた十分な空間分解能が得られる走査近接場光学顕微鏡 (SNOM) を用いる必要がある。本研究を計画した当時、分子科学研究所の岡本グループでは、自作したSNOMを用い、金属ナノ微粒子集合体の基本構造である二量体及び三量体に関し、増強電場が粒子間に局在していることを実験的に明らかにしたところであった<sup>[1,2]</sup>。このことは、それまでの理論による予測が正しい

とした。

## 3. 走査電子顕微鏡によるナノ構造の観察

実際に装置を利用させていただくと、高空間分解な光学像は得られるものの、同時に得られる形態像はファイバースコープの先端形状が積みこまれてしまい、金ナノ微粒子低次元集合体中の個々の微粒子形状をはっきりと得ることが難しいことが分かった。そこで、岡本グループ所有の走査電子顕微鏡 (SEM) も利用させていただき、金ナノ微粒子低次元集合体の詳細な構造観察も行った。SNOMで得た電場の空間分布像と、SEMで得た形態像とを対応させる方法の確立を行うことで、金ナノ微粒子低次元集合体における局在電場とナノ微粒子構造との相関を可視化することに成功した。

## 4. 結果と考察

SNOM像と対応付けるために射影変換を行ったSEM像と、入射光と平行な偏光成分の発光で観察した二光子誘起発光 (TPI-PL) 像とを重ね合わせた結果を図1と図2に示す<sup>[3,4]</sup>。二光子励起確率は、電場の四乗に比例するため、TPI-PL像は電場分布を反映している。図1と図2は、それぞれ金ナノ微粒子二次元集合体および金ナノ微粒子一次元構造に対する結果である。図1から増強電場が配列構造周辺部に分布していることを明らかにすることができた。理論計算により、このような電場分布が双極子-双極子相互作用によりこの装置を利用させていただくこ

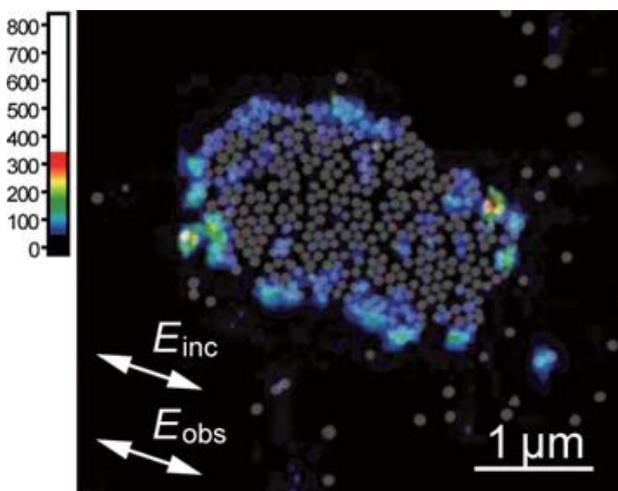


図1 球形の金ナノ粒子 (直径 100 nm) 二次元集合体の走査背電子顕微鏡 (SEM) 像と走査近接場光学顕微鏡 (SNOM) 像を対応付けし、重ね合わせた像。特に強い増強電場は周辺部に分布している。

だ配列構造の結果からは、一次元構造に閉じ込められた増強電場は、一次元構造に均一に分布するのではなく、その両端部に集中することが明らかとなった。さらに理論に基づいた電場分布シミュレーションにより、このような特徴的な光電場の空間構造は、一次元構造を構成するナノ粒子の粒子数と励起する光の波長に依存する可能性があるという結果が得られた<sup>[4]</sup>。今後は、一次元構造を構成するナノ粒子の粒子数と励起する光の波長との依存性についても明らかにしていきたい。

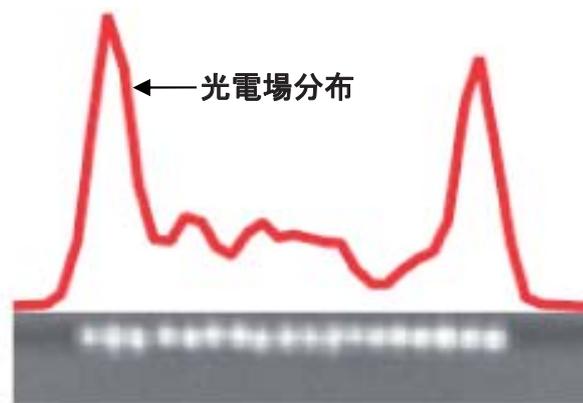


図2 球形の金ナノ粒子（直径 100 nm）が18個並んだ一次元構造の走査電子顕微鏡（SEM）像と、走査近接場顕微鏡（SNOM）で測定した光電場の空間構造。増強電場は、一次元構造に均一に分布するのではなく、両端部に局在する。

## 5. おわりに

本研究は、分子科学研究所の協力研究課題として、岡本裕巳教授、井村孝平助教（現 早稲田大学教授）の御協力のもと行われました。とくに岡本教授には、装置の提供だけでなく、実験結果のモデル化や理論計算に関しても、多大なる御協力をいただきました。この場を借りて厚く御礼申し上げます。

分子科学研究所の共同利用制度は、研究予算が乏しく、最先端装置を所有しない若手研究者にとっては、自身の研究室では実現困難な研究アイデアを、貴研究所内の先生に御協力いただきながら実現させることのできる貴重な制度だと考えております。この制度の継続とさらなる充実をお願いしたいと思います。

## 参考文献

- [1] Kohei Imura, Hiromi Okamoto, Mohammad Kamal Hossain and Masahiro Kitajima, *Chem. Lett.* **35**, 78 (2006).
- [2] Kohei Imura, Hiromi Okamoto, Mohammad Kamal Hossain and Masahiro Kitajima, *Nano Lett.* **6**, 2173 (2006).
- [3] Toru Shimada, Kohei Imura, Mohammad Kamal Hossain, Hiromi Okamoto and Masahiro Kitajima, *J. Phys. Chem. C* **112**, 4033 (2008).
- [4] Toru Shimada, Kohei Imura, Hiromi Okamoto and Masahiro Kitajima, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 4265 (2013).
- [5] Hiromi Okamoto, Kohei Imura, Toru Shimada, Masahiro Kitajima, *J. Photoch. Photobio. A* **221**, 154 (2011).



しまだ・とおる

2001年早稲田大学理工学部化学科卒業。2006年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了、博士（理学）。物質・材料研究機構ナノ計測センター博士研究員、立教大学理学部化学科助教、ベルリン自由大学物理学科博士研究員（アレキサンダー・フォン・フンボルト奨学金）、フリッツ・ハーバー研究所物理化学部門博士研究員を経て、2012年より弘前大学教育学部理科教育講座講師。専門は物理化学、特に分光学と表面科学。

## 1. はじめに

主鎖が芳香環とケトンカルボニル基から構成される「芳香族ポリケトン」は、耐熱性・機械的特性に優れ、ポリエステルなどのように加水分解性基を含まないことから、酸やアルカリ等に侵されにくいという特長を有している。その中で、1978年にICI社（英）により開発されたポリエーテルエーテルケトン（poly (ether ether ketone), 通称PEEK）は、ガラス転移温度（ $T_g$ ）が143 °C、融点（ $T_m$ ）が343 °Cであり、スーパーエンジニアリングプラスチックの一つとして注目され、特に薬品に侵されにくい点を生かし、HPLCなどの配管等ステンレス代替材料として近年使用されるようになってきている。その一方で、有機溶媒に不溶であり、ウエットプロセス（スピンコート法・溶液キャスト法）による成形加工を行うことができない。

芳香族ポリケトン合成にあたり、用いられる重合反応は三通り、すなわち、(1) 芳香族ジフルオリドと芳

香族ジオールを用いる求核芳香族置換反応（PEEKの合成方法）、(2) 電子活性芳香族化合物と芳香族ジカルボン酸（あるいは酸塩化物）を用いる親電子芳香族アシル置換反応（path A）、(3) 芳香族ジハライドの低原子価ニッケル錯体媒介カップリング反応（path B）である。筆者らはこれまで上記芳香族ポリケトンへの溶剤可溶性の付与を目指し、これら三通りの重合反応を用いて種々の溶剤可溶性芳香族ポリケトンの開発を行ってきた。中でも(3)の方法は、出発物質である二官能性芳香族化合物とハロ安息香酸との反応によりハロベンゾイル基を芳香環の適切な位置に導入したモノマーを用いて、高重合反応性を示すニッケル錯体媒介カップリング重合を行うということにより短時間で合成でき、極めて有効な合成ツールであった。

一方、芳香族ハライドと芳香族ホウ酸化合物との鈴木-宮浦クロスカップリング反応も芳香環同士を繋ぐ有力な手法の一つであるが、上記合成ツールに

従って、ハロベンゾイル化したモノマーに対し、芳香族ジホウ酸とのカップリング重合を行っても（path C）、高分子量ポリマーを得ることができなかった。これはケトンカルボニル基の電子求引効果により重合反応性が低下しているためと考えられる。

## 2. 高活性重合触媒との出会い

図1に示す、ビス（ハロベンゾイル）化されたモノマーを用いる鈴木-宮浦カップリング重合に適用可能な高活性Pd触媒の探索を行うこととし、パラジウム触媒および配位子を種々変えて検討を行ったが、一向に重合度の改善は見られなかった（path C）。

貴所櫻井G（現 櫻井英博 大阪大学大学院教授）において、Pdナノクラスター触媒が新たに開発され、ヨードノルボルネンから光学活性syn-ベンゾシクロトリマーが効率よく合成できることが報告された（Higashibayashi, Sakurai, *Chem. Lett.*, 2007, 36, 18.）。炭酸ナトリウム存在下、ジオキサン中で酢酸パラジウム(II)、トリフェニルホスフィン、テトラブチルアンモニウムアセテートをかき混ぜることにより反応系内で、パラジウムナノクラスター錯体が形成され、Mizoroki-Heck反応の高活性触媒として機能しているという研究であった。

そこで、この高活性触媒を用いることで筆者らの芳香族ポリケトン合成にも有効なのではないかと考え、櫻井Gとの共同研究を開始した。櫻井G研究室にてパラジウムナノクラスター触媒の調製方法を実演していただき、筆

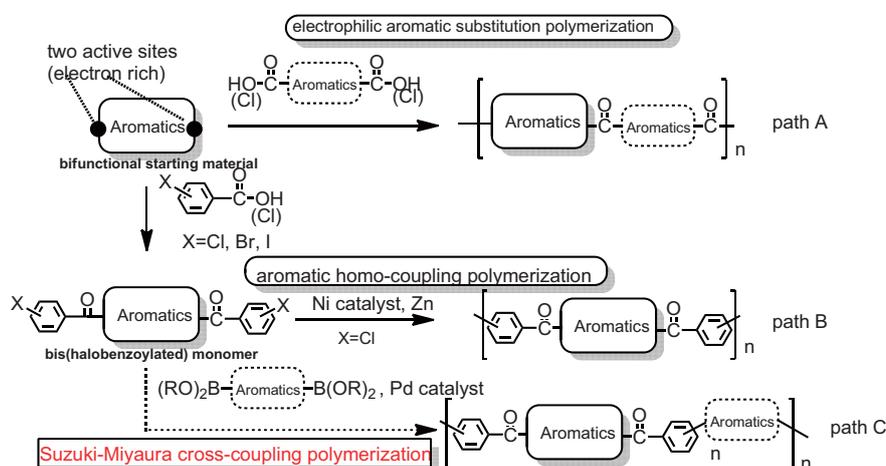


図1 芳香族化合物からの一連の芳香族ポリケトン合成経路。

者も大学院学生を引き連れ、実際に実験をさせていただいた。実際に体験させていただき、ナノクラスター触媒が調製できるとコーヒー牛乳のようになり、徐々に触媒が凝集し失活していくと反応系内が黒く変化していくなど、目でも楽しめる反応であった。大学に戻り、重合度の向上を目指し、ナノクラスター触媒に用いる試薬の再検討を行った。炭酸ナトリウムの代わりに炭酸カリウムを用い、試薬の加え方を工夫することで、反応時間わずか3時間で高重合度のポリケトンを得ることに成功した。得られたポリケトンはガラス転移温度が最大で276 °Cと、芳香族ポリケトンの中では最高水準の高T<sub>g</sub>ポリマーであった<sup>[1a-c]</sup>。

本共同研究によりさらに、 $\pi$ 共役系の拡張されたジヨード体モノマーを用いることで、蛍光量子収率は低いものの青色発光特性を有する高耐熱有機材料が得られること<sup>[1d]</sup>、さらにはジヨード体モノマー1とジビニルベンゼン化合物とのMizoroki-Heck重合同応により優れた耐熱性・溶剤可溶性・青～緑色蛍光特性を有するポリアリーレンビレンケトンを合成できることを明らかにすることができた(図3)<sup>[2]</sup>。

本研究を進めるにあたり、光学活性(CD特性)・蛍光特性をはじめとする多くの分析評価・ディスカッション等において、櫻井Gの櫻井英博先生・東林修平先生をはじめグループのみなさまに大変お世話になりました。ここに感謝いたします。

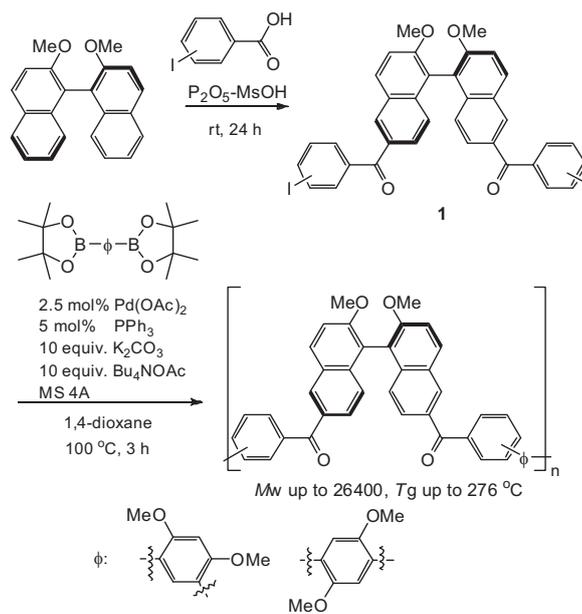


図2 Pdナノクラスター触媒を用いる鈴木-宮浦カップリング重合による溶剤可溶性芳香族ポリケトンの合成。

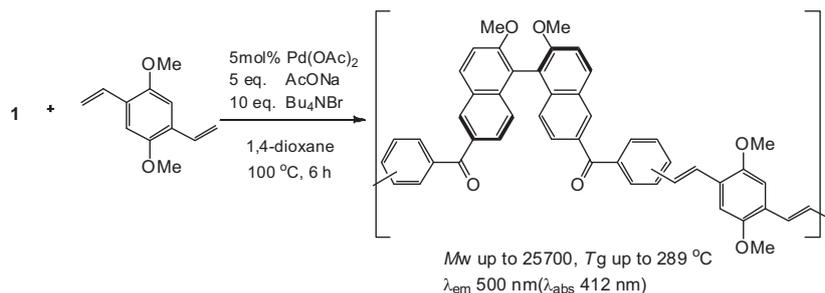


図3 Pdナノクラスター触媒を用いる溝呂木-Heckカップリング重合による溶剤可溶性ポリアリーレンビレンケトン (PAVK) の合成



まえやま・かつや

1994年東京大学理学部卒業。1998年東京大学大学院理学系研究科博士課程中途退学(1999年東京大学より博士(理学)取得)。1998年東京農工大学工学部助手。2005年同・講師。2009年山形大学大学院理工学研究科・准教授。2016年改組により大学院有機材料システム研究科・准教授(現職)。

研究分野：適切な分子設計・反応設計に基づく高性能・高機能性有機材料を開発・高効率アニオン捕集有機高分子ゲルの開発。

### 共同研究に基づく成果報告

- [1] a) K. Maeyama, T. Tsukamoto, M. Suzuki, S. Higashibayashi, H. Sakurai, *Chem. Lett.*, **2011**, 40, 1445-1446; b) K. Maeyama, T. Tsukamoto, M. Suzuki, S. Higashibayashi, H. Sakurai, *Polym. J.*, **2013**, 45, 401-406; c) K. Maeyama, M. Suzuki, T. Tsukamoto, S. Higashibayashi, H. Sakurai, *React. Funct. Polym.*, **2014**, 79, 24-28; d) K. Maeyama, T. Tsukamoto, H. Kumagai, S. Higashibayashi, H. Sakurai, *Polym. Bull.*, **2015**, 72, 2903-2916.
- [2] a) T. Tsukamoto, K. Maeyama, S. Higashibayashi, H. Sakurai, *Chem. Lett.*, **2015**, 44, 1780-1782.; b) T. Tsukamoto, K. Maeyama, S. Higashibayashi, H. Sakurai, *React. Funct. Polym.*, **2016**, 100, 123-129.

# 神経変性疾患の病態形成に関わるタンパク質の構造変化

古川 良明 慶應義塾大学理工学部生命機構化学研究室 准教授

## 1. はじめに

多くのタンパク質は天然構造と呼ばれる個々にユニークな立体構造を構築することで、その生理機能を発揮する。しかし、アミノ酸変異や様々な環境変化が引き金となって、天然構造を構築できずに異常な立体構造を形成することがある。このプロセスは「ミスフォールド」と称され、タンパク質の機能喪失や新たな毒性獲得などを通じて、様々な疾患の発症に関わると考えられている。

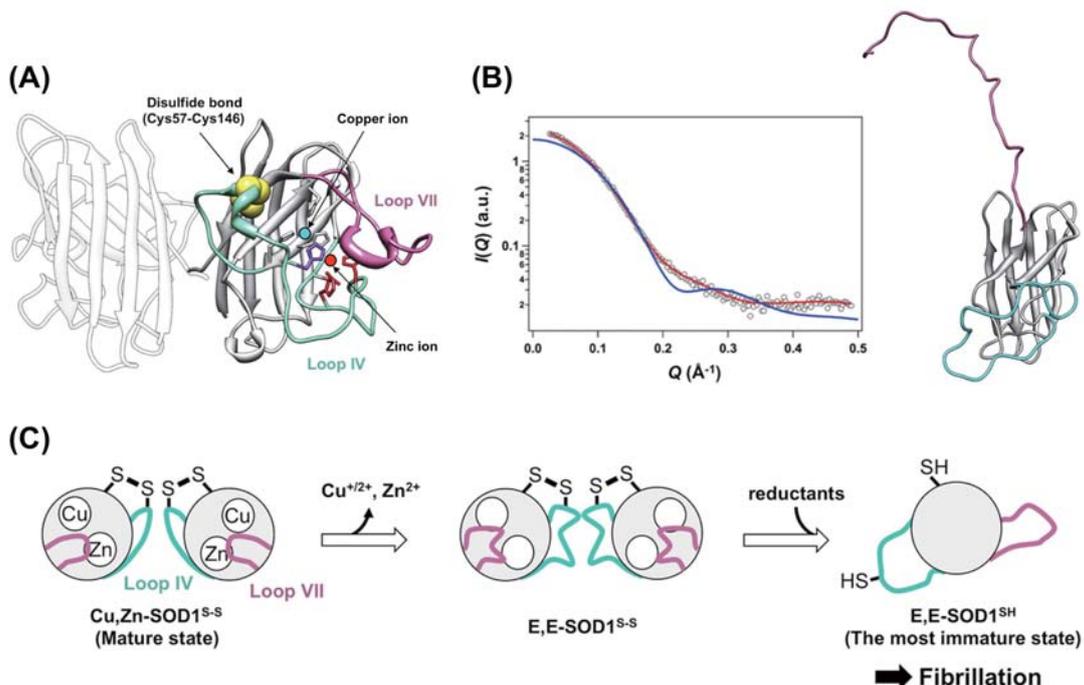
Cu/Zn-superoxide dismutase (SOD1) 遺伝子の優性変異は、神経変性疾患の一種である筋萎縮性側索硬化症(SOD1-ALS)の原因となることが知られており、変異に伴うSOD1タンパク質のミ

スフォールドが疾患発症や病態進行に関与することが提案されている<sup>[1]</sup>。しかし、なぜ・どのようにSOD1がミスフォールドするのかは明らかでなく、SOD1-ALSに対する有効な治療・予防法についても未だ確立していない。

## 2. ミスフォールド型SOD1タンパク質の構造解析

SOD1は分子内にジスルフィド結合を有する金属タンパク質で(図A)、成熟型のSOD1は高い熱安定性( $T_m > 90\text{ }^\circ\text{C}$ )を有していることから、ミスフォールドするとは考えにくい。しかし、金属イオンが解離し、分子内ジスルフィド結合が切断した未成熟型のSOD1は、 $T_m$ が体温( $\sim 37\text{ }^\circ\text{C}$ )近くま

で低下し、天然構造を維持することができずに、線維状に凝集することが知られている<sup>[2]</sup>。そこで我々は、ジスルフィド切断型(SOD1<sup>noCys</sup>)、及び、ジスルフィド結合型のSOD1(SOD1<sup>S-S</sup>)について、円二色性(CD)分光法を利用した二次構造レベルでの評価を行った。その結果、ジスルフィド結合が切断すると、 $\beta$ -strandに特徴的なCDスペクトル(208 nmに負のピーク)から、不規則構造に特徴的なスペクトル(200 nmに負のピーク)へと変化することが分かった<sup>[3]</sup>。また、ジスルフィド結合の切断がSOD1の構造に及ぼす影響を残基レベルで明らかにするために、二次元NMR( $^1\text{H}$ - $^{15}\text{N}$  HSQC)を利用したH/D交換法による検討を進めたところ



(A) SOD1の結晶構造。(B) SAXSで得られたSOD1<sup>noCys</sup>の散乱曲線(○)は、結晶構造から予測される散乱曲線(青色)とは一致しないのに対して、Loop IV/VIIが大きく揺らいだ状態(右図)を考慮することで予測される散乱曲線(赤色)でうまく説明できる。(C) 本研究で提案するSOD1の線維化メカニズム。金属イオンの解離とジスルフィド結合の切断によって、Loop IV/VIIの構造が大きく揺らぎ、通常はタンパク質内部に埋もれている領域が露出する。

る(北海道大学・石森研との共同研究)、SOD1の2つのループ領域(ループIV, VII: 図A)の揺らぎが特に増大することが分かった<sup>[3]</sup>。一方で、SOD1の構造的なコアを構成するβ-barrel領域への揺らぎに対しては、ジスルフィド結合の有無が及ぼす影響は小さいと考えられた。さらに、X線小角散乱(SAXS)を駆逐することで、ジスルフィド結合の切断がSOD1の溶液中での形状に与える影響について検討した<sup>[3]</sup>。散乱曲線のギニエプロットから得られるSOD1<sup>S-S</sup>の回転半径(21.5±0.2Å)は、結晶構造(天然構造)から予測される値(20.9Å)と良く一致し、二量体を形成していることが確認された。一方で、SOD1<sup>noCys</sup>は単量体化し、その回転半径(18.4±0.2Å)は結晶構造から予測される値(15.5Å)よりも大き

いことが分かった。そこで、NMRやSAXSデータに基づく構造モデリングを行うと、ジスルフィド結合の切断に伴って、ループIV, VIIが不規則構造として揺らぎ、SOD1の構造的なコアであるβ-barrel領域が溶媒側に露出した形状になることが示唆された(図B)。このような内部構造の露出がSOD1分子間の異常な相互作用につながり、線維状に凝集する原因になると考えられる(図C)。現在は、本課題で得られた未成熟型SOD1の構造的な特徴を利用することで、SOD1のミスフォールド過程をターゲットとしたSOD1-ALSの新たな予防・治療法の開発に挑んでいる。

### 3. おわりに

本研究において、CD、及び、SAXSを用いた実験は、分子科学研究所の秋

山修志教授、向山厚助教との協力研究として行なったものである。特に、SAXSについては、装置の扱い方や測定手法はもちろんのこと、サンプル調製に関する指導から、具体的なデータ解析に至るまで、手取り足取りのお世話になった。単なる装置利用に留まらず、有効かつ友好的な共同研究として大いに勉強させて頂いた。共同利用システムの多大な恩恵を受けたことに感謝するとともに、同システムのさらなる発展を期待する。

### 参考文献

- [1] Rosen et al. *Nature* **1993** 362 59.
- [2] Furukawa et al. *J Biol Chem* **2008** 283 24167.
- [3] Furukawa et al. *J Biol Chem* **2016** 291 4144.



ふるかわ・よしあき

2002年京都大学大学院工学研究科分子工学専攻修了、博士(工学)取得。米国ノースウェスタン大学でのポスドク(海外学振など)、理研・脳科学総合研究センターでの研究員(基礎特研など)を経て、2010年4月より現職。  
 専門: 生物無機化学、タンパク質化学  
 趣味: クワガタ飼育

平成27年度の文部科学省学術審議会  
の資料に以下のことが記されている。

1) 政府の研究開発投資の伸びが停滞している中、我が国の科学技術イノベーションの基盤的な力が急激に弱まっている。こうした中で、研究開発投資の効果を最大化し、最先端の研究現場において研究成果を持続的に創出し、複雑化する新たな学問領域などに対応していくためには、研究設備・機器の共有化を更に促進していくことは不可欠である。

2) 競争的研究費の改革と連携し、第5期科学技術基本計画期間において共用体制の集中的改革を進めていく必要がある。

- ・国費で購入する研究設備・機器はもとより、公共財であり、それらを内外に開放し、複数の研究者等が利用できるようにすること（共用）により、効果的・効率的に使用することを原則とする。
- ・研究設備・機器の管理の単位を研究室から研究組織（同一の研究戦略を共有する組織）に移行し、安定的かつ戦略的に共用体制の運営を行う。
- ・共助分担（研究設備・機器をシェア（共用）し、研究者全員で費用を負担（分担）する）の考え方下、研究組織全体で研究設備・機器を維持、更新する。
- ・国、大学及び研究機関等、研究者の役割分担、連携の下、新しい研究設備・機器共用システムを構築する。

おりしも本年4月にセンター長に就任したものの「長」としての如何なる経験もなく、かつて自身の研究上の必要性も無かったことから機器センター

の利用もない。右も左もわからぬ状態から始まったこともあるので、こうした文部科学省の整備政策の一環において、分子研の機器センターの位置づけはどのような状況かについて述べたい。

分子科学研究所では、平成19年から「大学連携研究設備ネットワーク」事業の代表機関としての責務を任されている。化学系附置研究所及び機器分析センター会議と分子科学研究所が全国の大学を結集し、老朽化した研究設備の更新や復活再生及び相互利用・共同利用による化学研究分野の活性化を目指して開始されたものである。その後、平成22年度から化学系に限定せず、さらに公立私立大学や民間企業からの利用も可能になり現在に至る（詳しくは<http://chem-eqnet.ims.ac.jp>）。インターネットを利用した予約・課金システムを構築し、全国の参画大学から相互利用に供された設備が登録・運用されており、現在、189機関からの総登録機器1,500台弱（うち予約システムで利用可能な登録設備489台）、開始からの累計利用実績は全国で55万件、利用者数1万人程度の規模で運用されている。今年度はさらに「ユーザーにとってより利用しやすいシステム」「参画大学がより運用しやすいシステム」を目指してシステム改修作業を開始した。本事業は、少ない研究費でも高いレベルの研究を可能にし、若手研究者の育成と院生の教育に大きな効果が期待できるというものであるが果たして現実はどうであろうか。本事業の意義を再確認しつつ、今後もユーザーの要望と実態の相違に注視して運用していく必要がある。このような形態のもと共用利用を促進していくためには、新たに幅広い視野を持つマネージャー雇用や、

専門知識を有するオペレータ雇用が重要であることが見えつつある。大学等における質の高い教育研究を支える重要な基盤要素として、既存の人材育成システムで良いのか、あるいは根本的には技術職員の社会的位置づけを問われているのである。我が国において最重要資源は人材である。豊かな社会を持続するために、真摯に人材育成を柱として国家戦略を立てるべきと考えるのは私だけではあるまい。

一方で、平成24年度から始まった「文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム」事業がある。ナノテクノロジーに関する最先端の研究設備とその活用のノウハウを有する機関が密に連携して、全国的な設備共有体制を構築するものである。科学技術の基本となる3つのプラットフォーム（微細構造解析、微細加工、分子物質合成）から構成されており、分子研は分子・物質合成プラットフォームの代表機関と実施機関を務めている。全国11の実施機関が最先端研究設備と計測ノウハウを提供し、公的機関のみならず中小企業まで幅広く利用されている（詳しくは<http://nanonet.mext.go.jp>）。平成27年度からは機器センターがナノプラットフォームの事業運営も統括して行い、事業の融合により多くの先端機器も利用可能となった。

このように資産の有効活用と社会貢献を目的とした全国規模の共有設備運用システムが分子研のもとで複数機能している。2事業と機器センター、目的を共有した3つの柱となる事業をいかにしてリンクさせ、より効果的に運用するかを考える必要がある。前センター長（横山教授）には引き続き上記事業二つに関しての指揮をとっていただき、機器センターと密な運用体制を築いている。しかし、

やはり絶対数不足という人材問題は顕在化しており、また純粋な業務負担増や業務内容の拡張が求められることにより、個々の装置管理等を専門としてきた技術職員には戸惑いも見受けられる。全国規模でシステム化されることによる効率的な運用や広報効果による潜在ユーザーの発掘など、冒頭に記載された理念に通じるものは準備できている。今後は全国規模で動向を見極めつつ適切なバックアップが必須であるが、国内の各機関で整備された先端装置を何の障壁も無く相互利用できるユーザー環境を整えば、それはまさに研究者の桃源郷であろう。かつて設立当初の分子研機器センターはわが国の科学技術萌芽期において重要な位置づけであった。全国の共同利用機関各所において、共有システムのもと今後ますますの利用拡大と大きな成果があがることを期待したいが、同時に人材育成（配置）と先端設備の維持確保が可能な環境の実現を期待したい。現実的に一実施機関としての機器センターの運用状況は、その他機関とおそらく同様に困難な状況を映

し出している。機器センターにはそれでも年間200件程度の所外利用グループがあり、共同利用機関としての責務は十分に果たしているが、保有する半数程度の装置が導入から15年以上を経過したものであり、大多数機器がメーカー保守期限の切れた状態という極めて厳しい現実がある。日常的に老朽化による不具合やトラブルが頻発するようになっており、貧困財政を更に圧迫している。昨年度発生した重篤な故障により透過型電子顕微鏡JEM-3100FEFは修理費が捻出できずに利用停止が決定され、平成16年に大型設備として導入された920MHzNMRは国際的な競争力は無くなりもはや維持費が高むだけの設備になりつつあり、今年度をもって運用を停止する予定である。予算措置も厳しい状況の中、やむを得ない判断と考えている。所外ユーザーからの要望にも表れているように（各年度の「機器センターたより」を参照）、地方大学の疲弊度はさらに厳しいようである。分子研機器センターにおける汎用機器の更新と拡張を求める声が日々多数寄

せられており、忸怩たる思いである。ユーザーの声を拾いつつ、共同利用機関として最適な方法論を考えてみるものの、容易いものは無いように思える。例えば潤沢な寒剤供給の元に優位性を発揮している電子スピン共鳴ESR装置群は老朽化しているものの、所外ユーザーの利用率が高く、設備更新の要望も高い機器である。こうした分子研の強みや技術職員の専門性を生かせる分野について選択を行い、設備増強を検討していきたい。

機器センターの技術職員は、研究員・技術支援員等を含めて現在9名が各種機器、液体窒素・ヘリウム等の寒剤供給装置の維持管理を担当している。また前述の事業における代表機関業務などから、マネージャーやコーディネーターを含めた事務支援員8名で膨大な作業をこなしている。各所から忌憚なきご意見をいただくとともに、可能な限り要望にお応えできるよう最適解を模索しながら運営を進めていきたい。



機器センターを取り巻く環境：全国ネットワーク展開

## 共同利用・共同研究に関わる各種お知らせ

### 運営会議よりお知らせ

分子科学研究所は広く分子科学分野コミュニティに開かれた運営を行うために、所内11名、所外10名のメンバーからなる運営会議を所長の下に設置しています。そこでは研究教育職員の人事、共同利用・共同研究等の研究所を運営する上で重要な事項について審議します。人事選考部会と共同研究専門委員会が運営会議の下に置かれています。また、運営会議は自然科学研究機構・機関長選考委員会（所長選考委員会）からの依頼を受けて、次期所長候補者の選考も行います（平成27年度の運営会議メンバーには、今回の川合所長の推薦に当たって大変お世話になりました）。所外10名の候補は、関連学会（分子科学会、日本化学会、日本物理学会、錯体化学会、日本放射光学会、日本生物物理学会）から推薦を受けたメンバーが参加する学会等連絡会議において選考されます。所外の方には1期2年の任期で原則2期4年をお願いすることになっており、本年度、以下のとおり半数が交代になりました。\*印は人事選考部会のメンバー（運営会議の中から所内5名、所外5名）です。人事選考部会で審議決定したことは運営会議で改めて審議する必要がないことになっています。一方、共同研究専門委員会（運営会議メンバー以外も委員となる）で審議したことは運営会議でさらに審議することになっています（これに関しては、改正の余地があるかどうか、運営会議で議論になっているところです）。運営会議長、人事選考部会長、共同研究専門委員長は、それぞれ所内教授の岡本（継続）、山本（新規）、青野（継続）が務めます。また、所外の有賀教授には、新たに運営会議副議長をお願いすることになりました。

#### 平成28年度～平成31年度運営会議所外メンバー（新規） \*印は人事選考部会のメンバー（以下同様）

- \*有賀哲也 京都大学大学院理学研究科教授・副学長
- 米田忠弘 東北大学多元物質科学研究所教授
- 高原 淳 九州大学先導物質科学研究所教授
- \*西原 寛 東京大学大学院理学系研究科教授
- \*山口茂弘 名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所教授

以下は今年度より2期目を務められる方々です。

#### 平成26年度～平成29年度運営会議所外メンバー（継続）

- 大西 洋 神戸大学大学院理学研究科教授
- 鈴木 啓介 東京工業大学大学院理工学研究科教授
- 高田 彰二 京都大学大学院理学研究科教授（分子研レターズ66号で執筆）
- \*田原 太平 理化学研究所主任研究員（分子研レターズ69号で執筆）
- \*森 初果 東京大学物性研究所教授

以下は退任された運営会議所外メンバーの方々です。これまでの多大なご支援、ご協力に感謝致します。ありがとうございました。今後ともよろしく願いたします。

#### 平成24年度～平成27年度運営会議所外メンバー（退任）

- 朝倉 清高 北海道大学触媒化学研究センター教授
- \*神取 秀樹 名古屋工業大学大学院工学研究科教授（分子研レターズ64号で執筆）
- 河野 裕彦 東北大学大学院理学研究科教授（分子研レターズ64号で執筆）
- \*寺崎 亨 九州大学大学院理学研究院教授
- \*水谷 泰久 大阪大学大学院理学研究科教授（分子研レターズ74号で執筆）

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、若手研究会等、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22年度から平成28年度前期分（平成28年6月18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。また、下表にある「特別協力研究」とは、共同利用研究の予算ではなく、自前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がこれにあたります。特別協力研究により共同研究の芽を見出すことができれば、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。

分子科学研究所では共同利用研究の枠組みを利用して、熊本地震により被災し、研究活動に支障を生じている研究者の支援を実施しています。通常の協力研究に準じて申請を受付けています。また、施設利用の枠での随時受付でも対応しておりますが、通常の施設利用の枠に収まらないものについても、施設長・センター長（例えば、機器センター所有の共同利用装置を優先的に利用したい場合は機器センター長）を所内対応者とする協力研究として受付けています。研究支援の内容については、可能な限り柔軟に対応していますので、ご要望等がある場合には、申請の際に所内対応者、あるいは共同研究専門委員会委員長にご相談下さい。また、分子研計算科学研究センター、分子研ナノプラットフォーム実施機関としての支援も実施しています。これらの詳細については、分子研ホームページ ([https://www.ims.ac.jp/news/2016/04/20\\_3447.html](https://www.ims.ac.jp/news/2016/04/20_3447.html)) をご参照下さい。

共同利用研究の実施状況（採択件数）について

種 別	平成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	平成28年度 (6月18日現在)
課題研究	0	1	1	2	1	2	2
協力研究	122	108	123	64	64	62	31
特別協力研究*				167	224	129	—
協力研究（ナノプラット）	—	—	—	51	63	64	24
分子研研究会	6	4	10	10	6	11	2
若手研究会等	1	1	1	1	2	1	1
岡崎コンファレンス	—	—	1	1	1	1	1
計	129	114	136	296	361	270	61

\*平成25年度より、集計開始。平成27年度分は、後期分が未集計。

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28年2月11日～12日	高輝度・高強度赤外光源の現状と展望	全 炳俊(京都大学エネルギー理工学研究所)	45名
平成28年2月23日～26日	Japan-China Joint Symposium on Functional Supramolecular Architectures	前田 大光(立命館大学薬学部)	58名
平成28年3月5日～6日	金属錯体の非対称配位圏設計と異方集積化が拓く新物質創成科学	塩谷光彦(東京大学大学院理学系研究科)	38名
平成28年3月9日～10日	触媒の分子科学：理論と実験のインタープレイ最前線	長谷川淳也(北海道大学触媒科学研究所)	35名
平成28年6月27日～28日	超機能分子の創成：合成、計測、数理が織りなす社会実装分子の戦略的設計と開発	上野 隆史(東京工業大学大学院生命理工学研究科)	29名

若手研究会等

開催日時	研究会名	提案代表者	参加人数
平成28年6月26日	第56回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会	水野 雄太(東京大学大学院総合文化研究科)	17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28年1月14日～17日	テンソルネットワーク：アルゴリズムと応用	鹿野 豊(分子科学研究所)	56名

## 運営に関わって

## 朝倉 清高

北海道大学触媒科学研究所  
所長

あさくら・きよたか／経歴

2015年10月 - 現在 北海道大学触媒科学研究所 所長  
 2014年4月 - 2015年9月 北海道大学 触媒化学研究センター センター長  
 1999年4月 - 現在 北海道大学 触媒化学研究センター 教授  
 1994年5月 - 1999年3月 東京大学理学部スペクトル化学研究センター 助教授  
 1992年10月 - 1994年5月 東京大学理学部化学教室 講師  
 1993年3月 - 1994年4月 フリッツハーバ研究所 アレクサンダー・ホンフンボルト奨学生  
 1984年9月 - 1992年9月 東京大学理学部化学 助手  
 委員歴  
 2015年5月 - 現在 日本表面科学会 副会長  
 2015年4月 - 現在 表面科学会東北北海道支部 支部長



2012～2015年 運営委員を務めました。分子科学研究所には、学生時代からお世話になってきました。化学分野における大学共同研究の拠点として、日本の学術を支えてこられている分子科学研究所の運営に少しでも関わることができ、様々なことを学ぶことができました。ありがとうございます。

現在、小生は北海道大学触媒科学研究所（旧触媒化学研究センター）で所長をやっておりますが、触媒科学研究所は、分子科学研究所同様、全国の大学の共同利用・共同研究拠点として触媒分野で活動しています。両者は、内部昇格の禁止、完全公募など多くの類似した人事制度を持っています。触媒科学研究所は、1943年に創設された触媒研究所にその起源があります。その後のいろいろな事情から1989年に触媒化学研究センターとして再出発することになりましたが、その際に故井口洋夫先生をはじめとして多くの先生方にお世話になりました。その運営や人事は分子科学研究所を1つの模範としたと聞いております。今回の運営委員として、多くのことを学び、研究所の運営にも生かせればと思っております。

さて、お引き受けする直前まで、高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所の運営会議委員をしていただきました。同じ大学共同利用機関ですので、人事・共同利用など共通点は多く、両者とも如何にしてコミュニティからのニーズや意見を吸い上げるかに腐心されていると感じました。しかし、両

者の運営委員会の雰囲気は随分と違った印象を持ちました。一つに、会議が、紙媒体（分子研）か電子媒体（物構研）かということにあったように思います。重いファイルに綴じられた紙媒体は、スマートにインターネットにつながり、次々と資料が現れる電子媒体より、前近代的で非効率に見えます。いずれは、分子研も電子媒体のペーパーレス化することでしょう。しかし、この両者を比べ、委員の“参加する”心持はずいぶんとちがったように思います。紙媒体がどっしりと机上にあるときと、資料がスクリーン上に映写されるときとで、前者の方が参加形態が能動的に思えるのです。ぱらぱら読みや紙に直接書き込み、紙をばらして重ねることもできるなど考えるためのアクションがとれます。映像はきれいですし、鮮明ですが、どうしても受動的になってしまうように思えます。テレビが普及してもなかなか新聞がなくなるのにも似ていて、考えて能動的に意見を言うには、紙媒体の方が良いように思えます。おそらく、そういうことを言うこと自身、古い人間なのかもしれません。電子教科書が普及し、それに育てられた若人が現れる40年後には、必然的に電子媒体で議論するのが当たり前になり、人間も進化しているものと思いますが、それだけではない面もあるように思いますので、電子化されるときに参考にしていただければと思います。

さて、運営委員会で今も思い出さ

れる議論の1つは、女性研究者増加についてです。分子研でもいろんな方策で、増やそうとされていますが、本質的な問題は博士課程の女性研究者が少ないことにあるというご意見がありました。これは大学人の責任として今も心に強く残っています。女性の人たちにも理工系に飛び込んできてもらえる環境を整えないといけないのだと思います。“りけじょ”という言葉がありますが、なんか特別な人たちのように一般の人たちに思われているのかもしれないといけないということだと思います。

最後に 分子科学研究所に望むことは、大学共同利用機関として、大学に所属する共同利用・共同研究拠点のリーダーとしての役割を積極的に果たしていただくことと思います。大学が法人化され、12年がたちますが、2004年を境に日本の研究力が下がっていることは、統計が示しているところであり、個人間の競争・大学間の競争が激化しています。適度で公平な競争は人々の活動に活力を与えるという良い面もありますが、過度な競争は、無駄な消耗戦を行い、ゆとりと人間らしさを奪い、真の活力や創造性を失わせる面もあります。共同利用・共同研究の本質は、仲間内の無駄な競争でなく、互いに知恵と力を合わせて、新しいものをともに作る共創であることだと思います。今、日本は未曾有の財政難に陥っています。ここで、少ないパイを

力づくでとりあい、1%の勝ち組を作って、99%の人たちがのたれ死ぬような愚はやめて、大多数の人たちの力を合わせ、全国の大学がともに助け合い、新しい学術を共創し、社会のイノベー

ションへとつなげる努力こそが必要と思います。そのための大学間をつなげる役割が共同利用・共同研究拠点活動であり、その中核である分子科学研究所をはじめとする自然科学研究機構や

高エネルギー加速器研究機構などの共同利用法人が先頭に立って、新しい日本の科学技術を協奏・共創していただければと思います。4年間本当にありがとうございました。

## 運営に関わって

### 寺 亨

九州大学大学院理学研究院・教授

てらさき・あきら / 1992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。分子会合体のフェムト秒レーザー分光に従事。同年、東京大学理学部助手。1997年豊田工業大学受託客員助手（常勤）、1998年同助教授、2006年同教授。質量分析法とレーザー分光に基づき、原子分子クラスターの物性・反応性を研究。2010年より現職。放射光によるX線分光も実験手段に加え、金属クラスターの電子状態、磁性、光学特性など基礎物性研究を推進中。



2012年4月から4年間、運営会議委員の一人に加えていただきました。九州大学に赴任してまだ1年ほどの時期で、学内の事さえままならない状況のときでした。当時の所長・大峯巖先生から電話を頂き、人事選考部会委員までを依頼されたときには、正直なところ、大変なことになったと直感しました。一方で、学外の組織の運営に関することはなかなかできない経験ですので、貴重な機会を頂いたとの思いも持ちました。

就任当時、それまでの分子研との関わりを振り返って見たときに、多くの外部委員が過去に何らかの形で分子研に在籍されていたのに対して、自分自身は所属経験がありませんでしたので、純粹に外部の立場でした。ただ、大学院で研究の世界に入って以降、長倉研ご出身の小林孝嘉先生、井口研でいらした近藤保先生に長年にわたってお世話になっていましたので、分子研をずっと身近に感じていました。

実際に運営の場を覗くと、比較的小規模な組織のメリットを生かして機動力を発揮した運営で、所長の主導のもと、新しいセンターの設立や若手人材の登用システムなど先端的な企画を打ち出して、何か大胆な展開を予期させる雰囲気を感じました。世の中の情勢に応じて素早く

行動を起こすこの機動力が、分子研の活力の源になっているのだと思います。大学共同利用機関としては、所内の方々在国内の多くの研究者と連携関係を築く努力をされ、外部機関との協力研究を数多く実施しており、その役割を十分に果たしていると思いました。申請された課題を可能な限り採択して応じる姿勢を是非とも継続して、分子科学分野の発展に広く貢献を続けていただきたいと思います。また、外部委員を加えた運営であるがために公正さが保たれ、求心力を強く維持しているのだと感じました。これは継続すべき運営スタイルだと思います。

外部との接点のもう一つに、研究会開催の公募があります。運営に携わった折角の機会を利用して、自分自身でも分子研研究会を一度開催させていただきました。他の国際会議支援事業との共催という変則的な形をお認めくださり、柔軟な考え方で対応してくださいました。そのお蔭で、もともと二国間の企画だった会議を多国間に拡張することができて充実した討論となった上に、幸い所内からの参加者にも好評を頂き、大変有難く思いました。ただ、一つ申し訳なく感じたのが、所内対応を引き受けてくださった先生に、会場のアレンジから予算の管理・執行まで、

多大なご負担をかけることになったことでした。ここでは、外部の主催者が直接対応できる部分を増やすなど、所内の負担を軽減する改善策が検討されても良いのではないかと思います。

人事の面では、新陳代謝の早さに驚かされました。これは、所内の方々が大きな成果を上げて次々と栄転されてゆくからにはほかならず、分子研のアクティビティの高さを示す象徴的な一面です。この勢いを是非とも保っていただきたいと思います。内部昇進を認めていないことや、若手独立フェローなどの取り組みのもとに、分子研で育った研究者が全国に散らばって国内全体を盛り上げてゆく、そのような人材流動の拠点となる展開が望ましいと思います。

分子研の運営に携わった経験が今後の自分に大きくプラスになることは間違いなく、この貴重な機会を頂いたことに感謝いたします。今後、新しく就任された所長・川合眞紀先生のもとで、日本ばかりでなく世界の分子科学研究を牽引する中核組織として、さらに大胆なプロジェクトにも挑戦して、ますます発展を遂げることを期待します。自分自身も将来にわたって分子研にお世話になることと思います。今後ともどうぞよろしく願いいたします。

## 錯体化学75周年に向けて 北川 進 錯体化学会 会長

金属を含むあらゆる物質・分子の合成、構造、物性、機能、反応などを扱う錯体化学は、合成化学、材料化学、触媒化学、生化学、医学、薬学などの広範な研究分野と深く関わりながら、「分子科学の発展」に大きく寄与してきた。母体となる組織としては現在、「錯体化学会」があり、正会員数716名、名誉会員数26名、学生会員数170名、法人会員数11社から成る総会員数923名の大きな学会へと成長を遂げている（平成28年6月現在）。その歴史を辿ると、昭和17（1942）年に錯塩化学の研究者が集まり、錯塩化学討論会（研究会）を開催し、第二次世界大戦による中断を挟んで、昭和26（1951）年から錯塩化学研究会主催の錯塩化学討論会が復活した。その後、平成元（1989）年に錯塩化学討論会を錯体化学討論会に名称を変更し、平成14（2002）年に錯体化学研究会を錯体化学会に改組し、現在に至っている。このような錯体化学をベースとした大きな学会は、世界的に見ても非常に珍しく、日本が当該分野を世界的にリードしてきた証しとも言える。本学会は、第10回錯体化学国際会議（International Conference on Coordination Chemistry, ICC）を1967年に東京・日光で、第30回を1994年に京都で主催し、第43回大会を2018年に仙台で主催することになっている。さらに、関連分野の国際会議（アジア錯体化学国際会議、生物無機化学国際会議、多孔性錯体国際会議など）を数多く開催すると共に、中国、韓国、アメリカ、ドイツ、フランス、カナダ

などと定期的に二国間国際会議を開催し、国際的にも錯体化学の発展に大きく貢献してきた。その結果、国内外の関連学会や政府関連の賞を多くの錯体化学者が受賞するに至っている。加えて、錯体化学会が世界で活躍している錯体化学研究者に錯体化学会国際賞ならびに錯体化学会国際奨励賞を授与し、錯体化学の世界的発展・人材育成に大きく貢献している。

このような我が国における錯体化学の歴史の中で、分子科学研究所の存在は、絶大であった。昭和59（1984）年4月に「錯体化学実験施設」が研究所内に発足し、「錯体触媒研究部門（専任）」と「錯体合成研究部門（流動）」が設けられた。さらに、昭和61（1986）年には、「配位結合部門（客員）」が、平成元（1989）年には「錯体物性研究部門（専任）」が追加され、錯体化学分野の研究は分子科学研究所を拠点として、大きく発展を遂げた。これまでに、施設長として、斎藤一夫教授（初代1984～1986年度）、廣田榮治教授（1987年度つなぎで担当）、大瀧仁志教授（1988～1992年度）、中村 晃教授（1993～1994年度）、田中晃二教授（1995～2006年度）らが分子科学研究所の運営に深く関わるとともに、全国の大学における錯体化学分野から、2006年度までに教授26名、准教授（助教授）26名、助教（助手）17名が流動および客員研究員として分子科学研究所に赴任した。その後、2007年の分子科学研究所内の大幅な改組に伴い、当初の錯体化学研究所構想の母体組織である「錯体化学

実験施設」はなくなったが、「生命・錯体分子科学研究領域」を通じて、広い意味の分子科学の一大分野としてますますその重要度を増している（1984年度の発足から今日に至るまで、専任教員は、教授13名、准教授（助教授）7名、助教（助手）25名）。分子科学研究所は、共同研究場所はもとより、岡崎コンファレンスや分子研研究会などを通じて、全国の錯体化学を志す若手研究者の集いの場所になっており、今後高い活動維持に不可欠な場所と認識している。

今後、錯体化学は周期表の殆どの元素を対象として多様な結合や構造を持つ物質を創製し（合成）、構造を決定し、反応性や物性を明らかにし続けて行くであろう。そして、ナノ、メゾ、マクロサイズ領域、秒からフェムト秒までの時間軸に着目した物質の距離と時間の次元を背景とする研究もますます展開されると考えられる。この学問の対象と方向は分子科学の中心学問のひとつとしてますます拡大していくものと思われる。錯体化学研究所構想時代を知るものからすると、錯体化学と分子科学は今や単なる補完の関係ではなく研究者が相互に行き来する十字路に立って運命をともにしつつ活発な研究および社会活動を進めていく事が望まれているように思える。分子科学という言葉の定義は人それぞれであろうが、（現在の分子研がそうであるように）放射光科学や生物物理学なども包含した広い意味での分子科学として捉えれば、錯体化学もまたその一員であることは

明白であろう。

我が国の錯体化学は来年で75周年を迎える。現在、錯体化学会は、DIEP (Discovery-Internationality-

Encouragement-Publicity) をスローガンに掲げ、国際化と若手研究者の育成に総力をあげて取り組んでいるところであるが、その拠点として分子科学研

究所は将来的にもなくてはならない存在である。錯体化学会へのますますのご理解とご支援をお願い申し上げます。

## 関連学協会等との連携

# 物性科学連携研究体 山本 浩史 分子科学研究所 教授

日本学術会議では、各学術分野が必要とする大型研究計画を網羅し、我が国の大型計画のあり方について一定の指針を与えることを目的として、「学術の大型計画に関するマスタープラン」を定期的にとりまとめている。従来、物性科学分野では、研究室単位の「小規模研究」が主体であったが、近年は様々な分野に跨る研究者・概念・手法・計測設備を組織化して、総合力で取り組む戦略性が不可欠となってきており、研究の「大型化」への対応が急務である。このような背景のもと、物性科学関連研究機関である分子科学研究所、理化学研究所・創発物性

科学研究センター、東京大学・物性研究所、京都大学・化学研究所、東北大学・金属材料研究所が危機感を共有し、以下に述べる「物性科学連携研究体」構想を立ち上げて、第22期学術の大型研究計画として2014年に提案した。幸いこの提案は学術会議の審査において「重点大型研究計画」として認められたが、その後予算化はされず、2016年の第23期におけるマスタープラン更新作業へと進むことになった。第22期における代表機関は理化学研究所であったが、このような影響の大きい取り組みは、大学共同利用機関である分子科学研究所が中心となって取り組むことが、

大学間連携やコミュニティへの波及効果をより速やかにするとの判断から、第23期においては代表機関を分子科学研究所に変更した。我が国の物性科学分野における国際的優位を保つためには、総合的な物性科学推進の方法論を確立し、それを若手育成過程に取り込んでいくという戦略的取り組みが必要であり、物性科学連携研究体構想（以下、本計画）は、そのための強力な推進母体となることが期待される。

現在、本計画については学術会議の検討分科会において審査中であるが、ここではその概略について紹介したい。本計画は、化学・物理・材料工学分野



の多様なコミュニティが連携し、物性科学の戦略的な連携研究体制を整えることと、そこで推進される研究を通じたトップ研究人材の育成・交流を目的としている。これらの施策によって、専門分野の異なるトップ研究所間の連携研究が促進され、異分野融合・シナジー効果を最大化することが可能となるため、物性科学を基盤とする新しい融合学術分野が創成されると期待される。具体的には、物性科学の戦略的な連携研究として、(1) 卓抜機能物質、(2) 創発量子物性、(3) 省・創エネルギー原理、の3研究項目を取り上げて、これら重要物性科学研究における戦略的方法論の確立を目指す。また、こうした目的を達成するためには、先端計測機器の開発や、計算科学による物質デザインも欠かせない。そのため、研究を推進するために不可欠な研究手法・設備群として、本計画では (I) 特殊環境下の物質合成・反応制御、(II) 先端

量子ビーム計測、(III) 多次元時空間プローブ、の3つを5研究所の連携と相補により重点的に推進するほか、計算科学コンソーシアム等との連携研究を行う。

さらに将来のトップ研究人材育成および人材交流を推進するため、5研究所に連携研究部門／領域を設置する予定である。これら連携研究室では、多様な研究基盤を持つ若手人材の育成・ネットワーク構築を行い、戦略的連携研究の中核を担うほか、諸大学からの兼務者をクロスアポイントメントで誘致するなど、中核研究機関で培ったポテンシャルが、我が国の学術基盤の強化に資することを目指す。本計画ではとりわけ若手トップ研究リーダーの育成に主要な力点を置いているが、このような俯瞰力を持ったトップ研究人材の育成は、我が国が物質科学分野において今後も世界的リーダーシップをとり続けるために、研究所群の極めて重要な

使命であると考えている。

少々堅苦しい紹介となったが、我が国のイノベーションの源泉として、基礎的な物性科学研究の推進と、それらを分野横断的に俯瞰できる人材の育成は欠かせないものと考えられる。イノベーション自体は社会的価値の創造であり、基礎科学研究そのものが直ちに結びつくわけではないが、1つの分野に閉じこもらない多様な視点を持った研究者が育ち、社会と接点を持って行動していくことにより、基礎学術的知見の意外な利用価値が見出されたり、逆に実用の視点から新たな科学の地平が切り拓かれたりすることが、益々活発になっていくことが期待されている。社会に強いインパクトを持ちうる、真に重要な学術の創成を物質科学において実現することこそが、本計画の目的である。

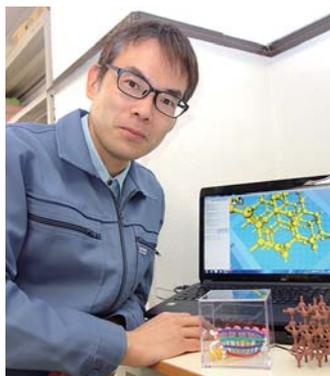
## 覧古考新05 | 1985年

研究の将来の予測は大変難しいことです。一応は各部門の研究プロジェクトが毎年の研究所要覧や Annual Review に詳しく公表されているので、それらが順調に進み所期の成果を収められれば大変豊かな学問的果実となるに違いありません。しかし、この研究所のように純粋科学を追求する場では、研究はダイナミックな研究者の創意によるところが大切で、研究の途中で新しい方法が発見されたり、初めの計画とは別の方向に発展して大きい成果を得られることもありえます。そのような点を考え、私は公表されている計画の部分はフレキシブルなものとして読むべきだと考えます。これは決して公表されている計画に魅力が乏しいと言っているわけではありません。ただ、研究所員の方々の創造的な知的活動をできるだけ発揚していただきたいと考えてのことです。

来るべき年代の分子科学研究所の姿について私の予想できることは、研究所がますます世界に開かれた特色ある研究所として、海外の研究者にも共同利用の枠を広げて、世界の分子科学者の交流の一つの重要なセンターに発展してゆく必然性があると思うことです。それと同時に、今後分子科学における大きい新しい進歩は分子科学研究所から生まれるか、そうでなくても研究所が深くそれに関与することが予想されます。それがどういう内容であるかは恐らく誰にも予想困難かと思いますが。

分子科学研究所創設十年の歩み「分子科学研究所の十周年に際して」(1985年)

小谷正雄 (東京大学名誉教授)



## 分子研における 3Dプリンタの活用

機器開発技術班 主任 近藤 聖彦

1996年11月入所。分子研装置開発室で機械加工、機械設計に携わる。  
2002～2003年人事交流にて名古屋大学理学部 装置開発室勤務。  
2004年分子研技術課に異動、現在に至る。

### 1. はじめに

筆者が3Dプリンタ造形技術に興味を持つようになったのは、機械設計時に3Dプリンタを使用して、設計中の機械部品を試作し、その試作部品を組み立てることができれば、ディスプレイ上ではわからない動作などについて簡単に理解でき、設計に役立つと思うようになってからである。このような気持ちを持ちながらも実行に移すことができずにいた際に、技術課において3Dプリンタ造形技術を育成するプロジェクトが立ち上がった。技術課の三部署から3Dプリンタに興味のある五人が集まり、私もメンバーの一人として参加することになった。

技術育成の教材として、機械部品の造形をテーマにすることもできたが、メンバーそれぞれの専門、得意分野が異なるため、共通のテーマとして、所内で要望が高いタンパク質模型を造形することに決めた。ただし、集まったメンバーは、タンパク質模型の製作について深い知識と経験がなかったため、オリジナルのタンパク質構造データを作成することから開始した。

### 2. FDM方式と造形条件

我々が使用した3Dプリンタはノズルから射出される溶けた樹脂を積み重ねて造形物をつくる熱溶解積層(Fused Deposition Modeling: FDM)方式である。この方式の3Dプリンタの広告などでは簡単に欲しい造形物が得られる

かのように宣伝されていることもあり、当初はすぐに造形できるであろうと思いきや、実際に使用してみると想像をはるかに超え、難しいことがわかった。これは、工作機械の操作の仕方を熟知していても、適切な加工条件を用いないと欲しい加工物ができないことと同じで、造形条件がわからないと全く形にならないことを痛感した。

造形条件には、3Dプリンタのヘッド速度、ヘッド温度、造形物の充填率、サポート形状など多く存在する。その中でも重要なのはサポート形状に関する条件である。3D模型を造形する場合、高さ方向にも空間が存在することになる。例えば、アーチ形状の橋を造形することを考えてみると、アーチ下部分に空間が存在することは理解していただけだと思う。この形状を忠実に積層していくと、橋となる筐体部分は、溶けた樹脂で積層するため、アーチ下部分に空間があることから重力の影響で垂れ下がってしまう。これを防ぐためにサポートと呼ばれる支柱のような構造体をこの空間部分に、橋の筐体部分と一緒に積層する。ただし、このサポートは積層時には重要な役割を担うが、終了すると不要になり、除去することになる。このとき、サポートを頑丈に造形していると除去時に造形物も破壊してしまうなどハブニングが起これば模型製作に失敗することがある。そのため、サポートをどのような形状にするか、どの程度の充填率で積層するか

などの設定は造形条件のキーポイントとなる。

特に我々が製作したいタンパク質模型は曲線と曲線が入り組んだ形状となっているので、サポートの設定を十分に考慮しないと造形がうまくいかない。この適切な条件設定を知るには、色々と試作して経験を積む必要がある。我々はいくつもの壁にぶちあたるたびに、造形条件のノウハウを積み上げ、オリジナルの模型を手始めに、比較的入り組んだ形状のタンパク質模型の造形条件を確立することができるようになった。

### 3. 造形データ作成技術の重要性

タンパク質模型の造形が一通りできるようになると、様々な造形要望が増えるようになった。例えば、カラー造形、さらに複雑な構造、タンパク質以外の分子模型、実験装置に使用する機械部品の試作模型などである。このような模型製作に応えるには我々が所有しているFDM方式の3Dプリンタだけでは、造形が困難である。これらの多種多様化する要望に応えるには、石膏粉末造形、インクジェット方式造形、光学方式造形などの3Dプリンタが向いているが、それぞれ一長一短があり万能でないため、要望に適した3Dプリンタを使い分けるとよいだろう。しかし、これらの機種を全て導入することは、購入費、設置場所、維持費など課題が多い。また、3Dプリンタの技術動向は年々変

化しているため、たとえこれらの機種を導入したとしても、おそらく数年で時代遅れになると思う。

そこで、「受託造形出力サービス」を利用する方法がある。様々な最新の機種を用意したサービス会社が多く存在し、費用は多少かかるが望む模型製作は可能となる。ただし、現在は成熟していない会社が多く、出力サービスを依頼する場合は、注意が必要となる。言うまでもないが、最終製品を想定した3次元物体データのみを渡して、出力サービスを依頼すると、完成した造形物がイメージしていた形と違うなどトラブルが発生し、再び造形依頼を行うことになる。そういった事例を体験した。つまり3Dプリンタの業界もまだ過渡期であるといえる。なるべく依頼先とは密な事前打ち合わせを行うとよいが、経験をもとに部分的なリモデリングなど修正を加え、サポート位置なども細かく設定したような最終版データを渡すほうが有効である。このようにFDM方式を使いこなすにしても、受託出力サービスを利用するにしても、エラーが発生しない造形データ作成技術は重要な位置づけである。まして研究者からの多くの要望に応えるためには、3Dプリンタに関する技術的ノウハウ

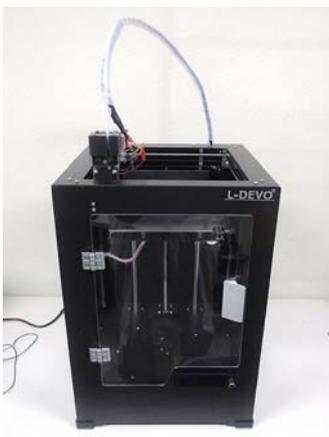
を積み上げて、技能を高めていくことが3D造形で研究支援を行う技術職員には必要だと思う。

#### 4. 分子研における3Dプリンタの活用に向けて

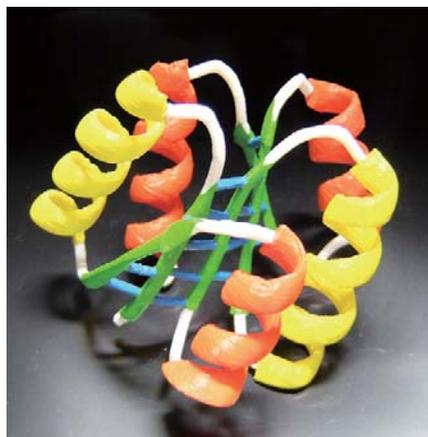
3D造形技術に関わって一年程度であるが、研究を推進する際に、問題解決手段のツールの一つとして、3Dプリンタを活用して頂きたいと思うようになった。このためには、分子研の3Dプリンタでは何ができるか、携わっている技術職員はどんな技術を持ち合わせているかを、多くの人々に知ってもらうことが先決と考える。このとき、分子研の3Dプリンタ技術はこれといって特徴がない、という評価にならないよう日々技術向上に努めていきたい。もう一つの活用促進として、我々技術職員は研究者の研究内容にも多少深く入りこんで、研究者と協働する気持ちを持つことも重要ではないかと思う。今でもタンパク質など生体分子の模型製作に多く取り組んでいるが、筆者のように機械加工を主体に仕事をしていると、化学や生命科学の分野はなかなか馴染めない。ところが、今回3Dプリンタのプロジェクトのメンバーに化学しかも生体分子に少し詳しい人物がいた

のでタンパク質造形は比較的スムーズに進められ、依頼した側もイメージ通りの物が短時間で得られたと思う。さらに、製作を依頼する側も、話が通じると、我々を頼もしい技術職員とってくれるのではないだろうか。このように、技術職員は研究者と距離を縮める意識で技術支援を行うことで、前述した外部の出力サービスでは得ることが難しい「分子研ならではの3D造形技術」として備えるべき技術の差別化ができ、単なる受託製作にとどまらない深みのあるコンサルタントとしても活用してもらえるとと思う。

最後に、筆者が3Dプリンタと関わるようになった技術課のプロジェクトは、3Dプリンタの技術蓄積のみならず、技術者間や研究者とのコミュニケーションも活発にした。これによって、今後3Dプリンタのニーズが多方面から増えれば技術者の経験値も上がり、「共同利用」としても発展するという好循環が生み出される。さらに、これらが分子科学コミュニティへの貢献となれば、技術課で立ち上げたプロジェクトの意義は大きいと感じたため、今後も継続していければよいと考えている。



使用したFDM方式の3Dプリンタ



3D造形したタンパク質模型



3D造形した部品を組立て製作した曲げ機構

## COLUMN

## 先端研究指向コースを活用した海外短期留学

伊東 貴宏

総合研究大学院大学物理科学研究科構造分子科学専攻  
5年一貫制博士課程4年

名古屋大学理学部化学科を卒業後、平成24年に総合研究大学院大学物理科学研究科構造分子科学専攻へ入学。生命・錯体分子科学研究領域正岡グループにて、錯体触媒ユニットを用いた物質変換反応場の開拓に関する研究に取り組んでいる。



Davies 研究室のメンバーとの集合写真。  
左前から写真に写っている2人目が筆者、右前から3人目が Davies 教授。

平成28年1月4日からおよそ3ヵ月間、米国エモリー大学のHuw M. L. Davies教授のもとで共同研究させていただきました。Davies教授はRh(II)パドルホイール型錯体について触媒設計から触媒機構の解明まで長年にわたって精力的に研究を行われており、私の研究活動において得られたRh(II)パドルホイール型錯体をユニットとする超分子構造体の反応性を調査するのに最も適した研究室であると考えたため、ここに行くことを決めました。渡航前に、Davies教授とはエモリー大学のビデオ会議システムを通して共同研究の内容に関してディスカッションを行いました。また、留学の詳細な日程や現地滞在に必要な手続き等について、Davies教授や秘書の方、大学の事務の方と自分で連絡を取りながら準備を進めました。宿泊先に関しては、先方に探してもらってはいたのですが、一年以上滞りしない場合は賃貸アパートを契約するのは難しいらしく、最終的にエモリー大学近辺のホテルを利用することにしました。エモリー大学はジョージア州アトランタに位置しており、そこで

の気温は岡崎と変わらないか、少し寒いくらいで雨はほとんど降らず、比較的住みやすい環境でした。出発前は分子研とエモリー大学間には何のつながりもないだろうと思っていたのですが、かつて分子研にて理論化学・計算化学の発展に多大な功績を残されました諸熊奎治先生も、分子研でご活躍後、エモリー大学で教鞭を執られていたことを後になって知り驚きました。

アメリカに留学する際には渡航ビザが必要だったのですが、私の場合は準備が結構ぎりぎりになってしまいました。留学直前にハワイでの国際学会があり、ハワイに行く前にビザが発行されたパスポートが手元にないと、計画した日に留学に向けて出発できないという状況でしたが何とか間に合いました。今後留学を考えている方は早め早めに準備を始められることを強くおすすめします。航空券も予約が早ければ早いほど安く購入することができます。

アメリカでのライフスタイルは、海外留学直前に参加したハワイでの国際学会で何となくイメージできていたため、面食らうようなことはほとんどあ

りませんでした。ただ、英語に関してはネイティブの方の話すスピードがノンネイティブの方の比ではなく、ついていくのが大変でした。自分の知っている話題なら断片的に聞き取るだけでも大体話していることは理解できるのですが、知らない話題を出されるとお手上げで、何度か聞き直してようやく少し理解できるといった感じでした。こうして最初は言語の壁を感じてはいたものの、毎日接しているうちに2~3週間も経つと耳が慣れて来ました。帰国する頃には、当初は聞き取れなかったスーパーマーケットやファストフード店の店員さんが言っていることが聞き取れるようになり、3ヵ月という短い期間でも確かな成長を実感しました。

滞在先での研究生活は日本にいるときと大差はなく、朝から晩まで実験に明け暮れましたが、実験前には安全講習を受ける必要があったり、有機合成には欠かせない核磁気共鳴装置(NMR)も研修期間中は一日に使用できる時間数と時間帯が定められていたり、安全管理や装置の取り扱いに厳しい印象を受けました。研究室では、学生やボ

スドクの方々との交流を通して、彼らから様々なノウハウを学びました。時には、彼らが私に対して「こういう化合物が生成物としてできているとしたら、NMRのピークはどんな感じで出ると思う？」などといった質問をされることもあり、私をお客さんとしてではなく、研究室の一員として接してもらえたことが嬉しかったです。また、私からも新入生に対して機器の使い方を教えてあげることで、少しはギブアンドテイクの関係になれたのかなと思います。他には、滞在先の研究室はCCHF (Center for Selective C-H Functionalization) というC-H結合の選択的官能基化に向けた共同研究ネットワークに参入しており、週に一度、いくつかの研究室とビデオ会議を通してディスカッションを行っていました。新しいことを始めるには、このように分野の異なる専門家の意見が聞ける機

会を積極的に設けることが研究の発展には重要だと感じました。また、二か月に一回程度、月末に化学科全体での懇親会のようなものがあり、他の研究室と交流を深められる場合は、私たちのところで言うハッピーアワーに近いものを感じました。

アメリカでの3か月間はあっというまでしたが、辛かったことも、楽しかったことも、全部含めて私にとって貴重な経験となりました。総研大のコース別教育プログラムは少数精鋭な環境であるからこそできる他大学院にはないカリキュラムだと思います。留学する機会は社会人になってしまうとなかなか得られないものだと思いますので、時間に比較的余裕のある学生のうちに積極的に挑戦することをお勧めします。日本の研究レベルは世界的に見ても非常に高いとは思いますが、国外に出て世界トップレベルの研究環境を肌で感

じることは大いに刺激になると思います。最後に、今回の短期留学で大変お世話になりましたDavies教授を始めDavies研究室の皆様、大学院係や総研大基盤総括係の皆様、正岡先生、そして私の家族にこの場を借りて厚く御礼申し上げます。

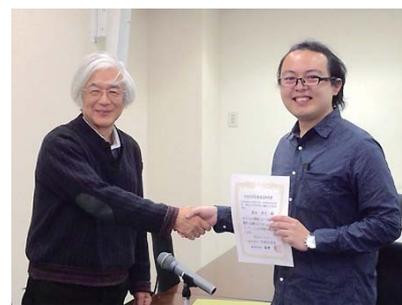
## 受賞者の声

### 榎本 孝文 (物理科学研究科 構造分子科学専攻 5年一貫性博士課程3年) 平成27年度日本化学会東海支部長賞

平成27年度の総合研究大学院大学 修士同等論文審査発表会にて「Near-infrared Light Induced Electron Transfer Reaction Using Highly Photostable Distorted Phthalocyanine (歪んだフタロシアニン化合物を用いた近赤外光誘起電子移動反応)」というタイトルで発表を行いました。その結果、本発表成果を平成27年度日本化学会東海支部長賞として推薦頂き、本賞を頂くことになりました。本賞は化学を学ぶ大学院生等の勉学奨励の一助として、修士(相当)過程の修了時に成績優秀な学生を顕彰するものです。発表会では、ご出

席なされた先生方から活発な議論をいただき、非常に有意義な時間を過ごさせていただきました。

今回の受賞の対象となった研究は、可視光よりもエネルギーの低い近赤外光を駆動力として、光誘起電子移動反応(光のエネルギーを電気化学的なポテンシャルへと変換する反応)を達成したというものです。近赤外光は地上まで届く太陽光エネルギーの40%以上を占めることから、人工光合成をはじめとする光-化学エネルギー変換の重要なターゲットの一つでした。今後は近赤外光で創り出した電気化学的なポテンシャルを利用し、貯蔵可能な化学



授賞式にて 大峯前所長と 右が筆者

エネルギーにまで変換することを目指し、研究を更に進めていきたいと考えております。

今回、このような栄誉ある賞をいただき、大変嬉しく思っております。本研究を実施するにあたり、多くのご支援とご指導を賜りました正岡重行准教授、近藤美欧助教をはじめとする研究室の皆様へ深く感謝いたします。

E V E N T R E P O R T

## 分子研シンポジウム2016

**担当教員** 2016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 田中 清尚

平成28年5月27日に岡崎コンファレンスセンター大会議室において分子研シンポジウム2016が開催されました。このシンポジウムは土曜日のオープンキャンパスに連動する企画として、平成19年から始まり今年が10回目になります。昨年に引き続き、シンポジウムを金曜日の午後、オープンキャンパスは土曜日全日開催という日程となりました。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ており、ご講演いただいた講師と講演題目は以下のとおりです（講演順に記載）。伊藤 孝寛先生（名古屋大学准教授）「材料の機能性と電子状態の関係：角度分解光電子分光によるフェルミオロジー」、小澤 岳昌先生（東京大学教授）「生体分子を観る・操作する光分析科学」、神谷 由紀子先生（名古屋大学准教授）「人

工核酸によるRNA干渉機構の理解と制御」、古川 貢先生（新潟大学准教授）「アドバンスドESRによる機能性メカニズムの解明」。参加登録者は所外41名で、当日は所内参加者を含めて多くの聴衆が集まりました。総研大への進学や共同研究を促すことを意図して、各講師の先生には分子研との関わりや接点について触れて頂きました。各講師のお話には随所で分子研や総研大への愛着が感じ取られ、我々にとっても大いに励まされるものでした。また講演会の後には大会議室においてシンポジウム参加者と所内の学生、研究者の交流を深めるための懇親会が行われました。今年は参加していただいたPIの先生方の簡単な自己紹介の時間を設け、講演していただいた先生を含めて参加者と教員が直接交流する貴重な機会となったと思います。



例年懇親会は職員会館で行われていましたが、講演会と同じ岡崎コンファレンスセンター内の大会議室で開催することで移動をスムーズにすることができました。また今年は懇親会のために所内の先生方からの寄付を募りご支援いただいたことで盛大な懇親会になりました。今回のシンポジウムを通じて参加者の皆さんには分子科学の多様性ととも、その基礎を支えている分子研の存在意義を感じ取って頂けたものと思います。お忙しい中、ご講演いただいた講師の先生方、そしてご協力いただきましたPIの先生方、スタッフの方々にこの場をお借りして厚くお礼申し上げます。

## 分子研オープンキャンパス2016

**担当教員** 2016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

2016年5月28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2016が開催されました。本事業は、他大学の学部学生、大学院生および若手研究者らに分子研の研究環境や設備、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ます。9時30分より、川合所長による分子研の概要説明、山本教授による総研大の概要説明が行われた後、9名の分子研PI（飯野、奥村、正岡、楢山、古賀、小林、田中、平等、

加藤（発表順、敬称略）による研究室紹介が行われました。昼食の後、13時から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いました。本年度の参加者は61名であり、その内訳は、学部学生42名、大学院生11名、大学教員6名、中学教諭1名、民間企業1名でした。昨年度の参加者は64名であり今年度はやや減少しましたが、筆者の研究室には15名を超える参加者が見学に来てく



れました。これは、研究室紹介を行った効果の現れだと考えられます。分子研PIの皆様には来年度以降も是非、研究室紹介に積極的にご協力頂ければ幸いです。最後に、本事業にご協力頂いた全ての関係者の皆様はこの場を借りて厚く御礼申し上げます。

平成28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	岡村 将也	Development of New Transition Metal Complexes Designed for Water Oxidation	理 学	H28. 3.24
	GAO, Jia	Studies on Crystalline Structures of Two-dimensional Covalent Organic Frameworks	理 学	H28. 3.24
機能分子科学	ZHU, Tong	Structural basis of the molecular mechanisms underlying intracellular quality control of glycoproteins mediated by their glucosylation	理 学	H28. 3.24

総合研究大学院大学平成28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	白男川 貴史	理論・計算分子科学研究領域	光機能分子の励起ダイナミクスに関する理論的研究
	山内 仁喬	理論・計算分子科学研究領域	タンパク質の分子動力学シミュレーション
	山口 拓真	光分子科学研究領域	光電子分光法による有機半導体材料の物性評価
	松井 千紘	生命・錯体分子科学研究領域	異種金属多核錯体の合理的合成と触媒機能評価
	中村 建五	協奏分子システム研究センター	ATP加水分解酵素のデザイン
	山本 真実	協奏分子システム研究センター	タンパク質分子構造安定性の制御
機能分子科学	藤瀬 光香	光分子科学研究領域	極端紫外光領域における光化学反応ダイナミクス
	JONGWOHAN, Chanantida	生命・錯体分子科学研究領域	The development of the reaction for 2, 4- or 2,4,4-substituted homoallylic amines synthesis vis [1,3]-sigmatropic rearrangement.
	中嶋 史雄	生命・錯体分子科学研究領域	ハロゲン結合供与体触媒の設計・開発
	渡辺 拓	生命・錯体分子科学研究領域	ハロゲン結合を鍵とする鋳型重合を活用した疎水性反応場の開発
	飯田 龍也	岡崎統合バイオサイエンスセンター	分子モータータンパク質のエネルギー変換機構の解明

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109回	平成28年6月3日	化学分析で読み解く古代人の食生活	米田 穰 (東京大学総合研究博物館・教授)
第110回	平成28年9月9日	クモ糸から始まる素材革命	菅原 潤一 (Spiber 株式会社・取締役兼執行役)

■分子研コロキウム

回	開催日時	講演題目	講演者
第883回	平成28年2月19日	Technology and applications of high-power femtosecond longwave lasers	Prof. Andrius Baltuška (Vienna University of Technology, Austria)
第884回	平成28年3月1日	Implementation of the quantum Ising model in large arrays of individual Rydberg atoms	Dr. Antoine Browaeys (Institut d'Optique, CNRS, France)
第885回	平成28年3月1日	Hot Rydberg Atoms	Prof. Robert Löw (University of Stuttgart, Germany)
第886回	平成28年3月3日	The Chirality Induced Spin Selectivity (CISS) Effect-From Spintronics to Electron Transfer in Biology	Prof. Ron Naaman (Department of Chemical Physics, Weizmann Institute of Science, Israel)
第887回	平成28年3月30日	Electronic Excited State Relaxation in Complex Systems: Two Stories of Harmony between Theory and Experiment	Prof. Peter Rossky (Rice University)
第888回	平成28年5月20日	Chiral Polytopic Ligands as Tools for the Synthesis of Metallo-Polymers. Application to Asymmetric Catalysis	Prof. Stéphane Bellemin-Laponnaz (Strasbourg University)
第889回	平成28年6月15日	Theoretical aspects of the molecular dynamics and spectroscopy involving in electronically excited states	Prof. Chaoyuan Zhu (National Chiao-Tung University, Taiwan)
第890回	平成28年7月15日	放射光2次元光電子分光による構造・電子状態の3D解析	大門 寛 (奈良先端科学技術大学院大学 物質創成科学研究科・教授)

■人事異動 (平成27年11月2日~平成28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
27.11.30	小野 純一	退職		理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 研究員 (IMS フェロー)	
27.12.1	野田 一平	新規採用	機器センター 研究員		
27.12.31	江東 林	退職	北陸先端科学技術大学院大学マテリアルサイエンス研究科 教授	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 准教授	
27.12.31	後藤 振一郎	退職	京都大学	協奏分子システム研究センター階層分子システム解析研究部門 技術支援員	
27.12.31	住田 明日香	退職		生命・錯体分子科学研究領域生体分子情報研究部門 技術支援員	
28.1.1	江東 林	兼任	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 教授 (兼任)	(北陸先端科学技術大学院大学マテリアルサイエンス研究科 教授)	
28.1.1	加藤 隆士	出向	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 特任専門員	日本電気株式会社 第一官公ソリューション事業部 シニアマネージャー	
28.1.15	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	
28.2.29	西山 嘉男	退職	金沢大学理工研究域	光分子科学研究領域光分子科学第一研究部門 特任助教	
28.2.29	黒田 康弘	退職	一般財団法人 東海技術センター	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	
28.3.1	鈴木 達哉	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 特任研究員		
28.3.31	大峯 巖	任期満了退職		分子科学研究所長	
28.3.31	横山 利彦	併任終了	(物質分子科学研究領域電子構造研究部門 教授)	機器センター長	
28.3.31	天能 精一郎	客員終了	(神戸大学大学院システム情報学研究科 教授)	理論・計算分子科学研究領域理論・計算分子科学研究部門 客員教授	
28.3.31	高田 彰二	客員終了	(京都大学大学院理学研究科 教授)	理論・計算分子科学研究領域理論・計算分子科学研究部門 客員教授	

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
28. 3.31	杉本 学	客員了	(熊本大学大学院自然科学研究科 准教授)	理論・計算分子科学研究領域理論・計算分子科学研究部門 客員准教授	
28. 3.31	竹延 大志	客員了	(早稲田大学先進理工学部 応用物理学科 教授)	物質分子科学研究領域物質分子科学研究部門 客員教授	
28. 3.31	中西 尚志	客員了	(物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 主幹研究員)	物質分子科学研究領域物質分子科学研究部門 客員准教授	
28. 3.31	根岸 雄一	客員了	(東京理科大学理学部第一部応用化学科 准教授)	物質分子科学研究領域物質分子科学研究部門 客員准教授	
28. 3.31	加藤 昌子	客員了	(北海道大学大学院理学研究院化学部門 教授)	生命・錯体分子科学研究領域生命・錯体分子科学研究部門 客員教授	
28. 3.31	依光 英樹	客員了	(京都大学大学院理学研究科化学専攻 教授)	生命・錯体分子科学研究領域生命・錯体分子科学研究部門 客員教授	
28. 3.31	上久保 裕生	客員了	(奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科 准教授)	生命・錯体分子科学研究領域生命・錯体分子科学研究部門 客員准教授	
28. 3.31	高塚 和夫	兼任了	(東京大学 大学院総合文化研究科 教授)	理論・計算分子科学研究領域理論・計算分子科学研究部門 教授(兼任)	
28. 3.31	倉重 佑輝	辞職	神戸大学システム情報学研究科 准教授	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 助教	
28. 3.31	SOMMER, Christian	辞職		光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 助教	
28. 3.31	石崎 章仁	辞職	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第二研究部門 教授	協奏分子システム研究センター階層分子システム解析研究部門 特任准教授(若手独立フェロー)	
28. 3.31	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	
28. 3.31	河津 励	退職	横浜国立大学 特任准教授	理論・計算分子科学研究領域(横浜国立大学生命ナノシステム科学研究科勤務) 特任研究員	
28. 3.31	岡安 竜馬 ダヴィッド	退職	Karlsruhe Institute of Technology Postdoc	理論・計算分子科学研究領域(名古屋大学大学院情報科学研究科勤務) 特任研究員	
28. 3.31	西澤 宏晃	退職	日本学術振興会 特別研究員	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 特任研究員	
28. 3.31	西村 好史	退職	早稲田大学理工学研究所 次席研究員	理論・計算分子科学研究領域(早稲田大学先進理工学部化学・生命化学科勤務) 特任研究員	
28. 3.31	RUIZ BARRAGAN, Sergio	退職		理論・計算分子科学研究領域(日本原子力研究開発機構システム計算科学センター勤務) 特任研究員	
28. 3.31	石谷 隆広	退職		計算科学研究センター 特任専門員	
28. 3.31	堀米 利夫	退職	研究力強化戦略室 特任専門員(URA 職員)	研究力強化戦略室 特任専門員	
28. 3.31	永園 尚代	退職	研究力強化戦略室 特任専門員(URA 職員)	研究力強化戦略室 特任専門員	
28. 3.31	金子 靖	退職		機器センター 特任専門員	
28. 3.31	後藤 悠	退職		光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 研究員	
28. 3.31	HUANG, Ning	退職	北陸先端科学技術大学院大学 研究員	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 研究員	
28. 3.31	TIAN, Yukui	退職		物質分子科学研究領域分子機能研究部門 研究員(IMS フェロー)	
28. 3.31	藤橋 裕太	退職	シンガポール Nanyang Technological University Research Fellow	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	
28. 3.31	山上 由希子	退職		光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 技術支援員	
28. 3.31	杉戸 正治	退職	友光測範株式会社 短時間契約職員 技術支援員	技術課 技術支援員	
28. 3.31	森川 美枝子	退職		理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 事務支援員	
28. 3.31	中根 淳子	退職		研究力強化戦略室 事務支援員	
28. 4. 1	川合 眞紀	任命	分子科学研究所長	東京大学大学院新領域創成科学研究科教授兼理化学研究所理事長特別補佐	
28. 4. 1	大峯 巖	称号与付	分子科学研究所 名誉教授	分子科学研究所長	

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
28. 4. 1	石崎章仁	採用	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第二研究部門 教授	協奏分子システム研究センター階層分子システム解析研究部門 特任准教授(若手独立フェロー)	
28. 4. 1	藤本将輝	採用	極端紫外光研究施設光源加速器開発研究部門 助教	大阪大学産業科学研究所 特任助教	
28. 4. 1	伊澤誠一郎	採用	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 助教	日本学術振興会特別研究員	
28. 4. 1	解良聡	併任	機器センター長	光分子科学研究領域光分子科学第三研究部門 教授	
28. 4. 1	横山利彦	併任	機器センター 教授	物質分子科学研究領域電子構造研究部門 教授	
28. 4. 1	重田育照	客員嘱	理論・計算分子科学研究領域理論・計算分子科学研究部門 客員教授	筑波大学大学院数理物質系物理学域 教授	
28. 4. 1	永田勇樹	客員嘱	理論・計算分子科学研究領域理論・計算分子科学研究部門 客員准教授	ドイツ: Max-Planck Institute for Polymer Research Group Leader (equivalent to W1)	
28. 4. 1	加藤毅	客員嘱	理論・計算分子科学研究領域理論・計算分子科学研究部門 客員准教授	東京大学大学院理学系研究科 化学専攻 准教授	
28. 4. 1	岸本哲夫	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	電気通信大学情報理工学研究科 先進理工学専攻・電気通信大学フォトネットワークイノベーションセンター 准教授	
28. 4. 1	中村雅一	客員嘱	物質分子科学研究領域物質分子科学研究部門 客員教授	奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科物質創成科学専攻 教授	
28. 4. 1	吉川浩史	客員嘱	物質分子科学研究領域物質分子科学研究部門 客員准教授	関西学院大学理工学部先進エネルギーナノ工学科 准教授	
28. 4. 1	田嶋尚也	客員嘱	物質分子科学研究領域物質分子科学研究部門 客員准教授	東邦大学理学部 准教授	
28. 4. 1	生越専介	客員嘱	生命・錯体分子科学研究領域生命・錯体分子科学研究部門 客員教授	大阪大学大学院工学研究科 教授	
28. 4. 1	荘司長三	客員嘱	生命・錯体分子科学研究領域生命・錯体分子科学研究部門 客員准教授	名古屋大学大学院理学研究科 准教授	
28. 4. 1	當舎武彦	客員嘱	生命・錯体分子科学研究領域生命・錯体分子科学研究部門 客員准教授	理化学研究所放射光科学総合研究センター 専任研究員	
28. 4. 1	手島史綱	配置換	技術課光技術班 極端紫外光技術一係 主任	技術課光技術班 極端紫外光技術二係 主任	
28. 4. 1	矢野隆行	配置換	技術課光技術班 極端紫外光技術二係 主任	技術課機器開発技術班 機器開発技術一係 主任	
28. 4. 1	藤田貴敏	採用	理論・計算分子科学研究領域 特任准教授(若手独立フェロー)	京都大学大学院理学研究科 特定研究員	
28. 4. 1	浅田瑞枝	採用	物質分子科学研究領域電子物性研究部門 特任助教(分子科学研究所特別研究員)		
28. 4. 1	福田真悟	採用	生命・錯体分子科学研究領域生命・錯体分子科学研究部門 特任研究員		
28. 4. 1	木村幸代	採用	技術課機器開発技術班 特任専門員		
28. 4. 1	小杉優太	採用	技術課機器開発技術班 特任専門員		
28. 4. 1	遠山遊	採用	機器センター 特任専門員		
28. 4. 1	稲垣裕一	採用	技術課(極端紫外光研究施設) 特任専門員		
28. 4. 1	堀米利夫	採用	研究力強化戦略室 特任専門員	分子科学研究所研究力強化戦略室 特任専門員	
28. 4. 1	永園尚代	採用	研究力強化戦略室 特任専門員	分子科学研究所研究力強化戦略室 特任専門員	
28. 4. 1	川口玄太	採用	協奏分子システム研究センター機能分子システム創成研究部門 研究員		
28. 4. 1	兵藤由美子	採用	機器センター 事務支援員		
28. 4. 1	福富幸代	所変	技術課 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	
28. 4. 1	加藤真悠子	職変	協奏分子システム研究センター階層分子システム解析研究部門 事務支援員	協奏分子システム研究センター階層分子システム解析研究部門 技術支援員	

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
28. 4. 1	鈴木 小百合	所変 属更	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 事務支援員	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 技術支援員	
28. 4. 1	SECHRIST, Jeremiah S	所変 属更	生理学研究所 研究支援員	分子科学研究所 研究支援員	
28. 4. 1	河合 文啓	採用	岡崎統合バイオサイエンスセンター生命動秩序形成研究領域 研究員	横浜市立大学大学院 特任助教	
28. 4. 1	ZHU, Tong	採用	岡崎統合バイオサイエンスセンター生命動秩序形成研究領域 研究員	名古屋市立大学 研究員	
28. 4. 1	大西 和恵	所変 属更	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	岡崎統合バイオサイエンスセンター事務支援員	
28. 4.27	LE, Quang Khai	採用	光分子科学研究領域光分子科学第一研究部門 研究員		
28. 4.30	福田 良一	辞職	京都大学学際融合教育研究推進センター 特定准教授	理論・計算分子科学研究領域計算分子科学研究部門 助教	
28. 4.30	村木 則文	辞職	生命・錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 助教	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(分子科学研究所特別研究員)	
28. 4.30	近藤 直子	退職		理論・計算分子科学研究領域 事務支援員	
28. 5. 1	村木 則文	採用	生命・錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 助教	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(分子科学研究所特別研究員)	
28. 5. 1	村木 則文	命ずる	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 助教	分子科学研究所生命・錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 助教	
28. 5. 1	浅岡 結子	採用	技術課(所長秘書室) 事務支援員		
28. 5. 1	磯野 裕貴子	所変 属更	技術課(生体分子機能研究部門) 技術支援員	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 技術支援員	
28. 5. 1	WEN, Hsin-I	採用	岡崎統合バイオサイエンスセンター生命動秩序形成研究領域 研究員		
28. 5.31	武田 俊太郎	辞職	光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 助教	光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 特任助教(分子科学研究所特別研究員)	
28. 5.31	山本 浩司	辞職	東京工業大学物質理工学院応用化学系 高田研究室 特任助教	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	
28. 5.31	甲斐 憲子	辞職		生命・錯体分子科学研究領域錯体触媒研究部門 技術支援員	
28. 6. 1	岡崎 圭一	採用	理論・計算分子科学研究領域 特任准教授(若手独立フェロー)	マックスプランク生物物理学研究所理論生物物理部門 博士研究員	
28. 6. 1	武田 俊太郎	採用	光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 助教	光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 特任助教(分子科学研究所特別研究員)	
28. 6. 1	Anggi Eka Putra	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		
28. 6. 1	村田 了介	採用	協奏分子システム研究センター機能分子システム創成研究部門 技術支援員		
28. 6. 1	山上 由希子	採用	光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 事務支援員		

## 編集後記

4月から川合眞紀新所長を迎え、分子研の体制も新しくなりました。分子研レターズも、今号より編集委員長が小杉信博教授から山本浩史教授に交代となりました。新体制での最初の編集担当を務めることとなりましたが、既に前編集委員長が様々な体制を整備されていたため、執筆候補者を選定する編集会議もスムーズに行われました。私も2回目の編集担当ということもあり、63号を担当したときのような初々しさはなくなりましたが、山本編集委員長の指揮の下、入稿されてくる原稿について落ち着いて編集作業を進めることができました。一番最初に原稿を読むことができるという編集担当の特権を堪能する余裕すらあった気がします。今回は、査読や校正について、編集委員の皆様にも分担して頂くことになりました。各分野の専門的な視点からの査読や校正に助けて頂きつつ、編集委員長、編集担当、広報室の鈴木さんと3人で集まって、原稿の入稿状況を確認したり、記事が読みやすい表現となっているかどうか議論したりしました。学会等の学術団体において予算削減のため紙媒体での学会誌が廃止されたり、科学系の商業誌が廃刊されるという状況ではありますが、分子研レターズは冊子体で関係者に郵送されるなど恵まれた状況にあります。このような恵まれた状況を維持するためにも、紙面は充実したものとなるように編集委員として心がけたいと思います。

編集担当 古谷 祐詞

## 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. 74

# 分子研レターズ

発行日 平成28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

山本浩史（委員長）

古谷祐詞（編集担当）

岡本裕巳

奥村久士

大迫隆男

加藤晃一

繁政英治

西村勝之

平等拓範

柳井毅

小杉信博（史料担当）

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

