

分子研レターズ

VOL.

83

March 2021

ISSN 0385-0560

●巻頭言

私なりの分子科学研究の楽しさと 分子科学研究所への期待

榊 茂好 [京都大学触媒・電池元素戦略ユニット 特任教授]

●レターズ

若手研究者育成で思うこと

渡辺 芳人 [総合研究大学院大学 理事]

●分子科学の最先端

見えてきた柔らかな物質系の 電子状態の特徴

解良 聡 [光分子科学研究領域 教授]

話題提供

化学にも浸透し始めたプレプリントサーバー

林 和弘 [文部科学省 科学技術・学術政策研究所 上席研究官]

学術会議

岡本 裕巳 [分子科学研究所 研究総主幹/教授]

共同利用研究ハイライト

ペリレン有機半導体の開発と有機太陽電池への応用

高橋 雅樹 [静岡大学工学部 教授]

温度変化によるBi単結晶のトポロジカル相転移

大坪 嘉之 [大阪大学大学院生命機能研究科/理学研究科 助教]

巻頭言

01 私なりの分子科学研究の楽しさと
分子科学研究所への期待

● 榊 茂好 [京都大学触媒・電池元素戦略ユニット 特任教授]

レターズ

02 若手研究者育成で思うこと

● 渡辺 芳人 [総合研究大学院大学 理事]

分子科学の最先端

04 見えてきた柔らかな物質系の電子状態の特徴

● 解良 聡 [光分子科学研究領域 教授]

IMSニュース

- 8 分子研研究会のオンライン開催
 9 受賞者の声——藤田 誠、南谷 英美、倉持 光、下出 敦夫、三輪 邦之、三橋 隆章
 13 事業報告
 14 国際研究協力事業報告

IMSカフェ

- 15 話題提供——化学にも浸透し始めたプレプリントサーバー
 17 話題提供——学術会議
 18 分子研出身者の今——久保園 芳博、永田 央、十代 健、山本 薫
 23 分子研出身者の今 受賞報告——福井 賢一、武田 俊太郎
 26 分子研を去るにあたり——Nguyen Thanh Phuc、塚本 寿夫、森 俊文
 29 外国人研究職員の印象記
 30 アウトリーチ活動 オンライン市民公開講座 驚きの発見
 31 新人自己紹介

共同利用・共同研究

- 33 共同利用研究ハイライト
 ペリレン有機半導体の開発と有機太陽電池への応用 高橋 雅樹 [静岡大学工学部 教授]
 温度変化によるBi単結晶のトポロジカル相転移 大坪 嘉之 [大阪大学大学院生命機能研究科/理学研究科 助教]
 36 施設だより——電子ビーム描画装置について
 37 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

- 39 運営に関わって——北浦 守、波田 雅彦、内藤 俊雄

分子研技術課

- 42 明大寺地区ヘリウム液化機の休止と再開 浅田 瑞枝 [技術課]

大学院教育

- 44 コラム——米国シアトル Neoleukin Therapeuticsでのインターンシップ
 三本 齊也 [総合研究大学院大学 5年一貫制博士課程4年]
 46 修了学生及び学位論文名

各種一覧

- 34 木村 克美 名誉教授逝去

連載

- 25 覧古考新26
 28 覧古考新27
 32 覧古考新28

私なりの分子科学研究の楽しさと 分子科学研究所への期待

榊 茂好 京都大学触媒・電池元素戦略ユニット 特任教授



巻頭言を書く機会を頂き大変光栄であるが、多少緊張しながら書き始めている。分子科学研究所は1975年に設立されたから、設立以来もうじき半世紀である。人間なら油の乗り切った壮年期と言える。私事で恐縮であるが、当時、助手になりたての私は研究生生活を始めてから「分子科学」と言う言葉に接して新鮮な印象を感じたものである。不勉強で「分子科学」と言う言葉を知らなかった私は分子を化学や物理という分野で見るのではなく自然科学全体の中で捉えることの意義、自然科学の視点から研究することの重要性に今更ながら気がつき、以来、「分子科学」と言う言葉が常に頭のどこかにあったような気がする。

私は電子状態理論に基づく理論化学・計算化学分野の研究をして来たので、視点が限定的になりがちなことをお許し頂き、当時を振り返ってみたい。分子研が設立された頃から80年代の理論化学では理論開発と共に計算化学研究が始まっていたが、研究対象は数原子から数十原子程度の孤立分子が中心であった。モデル系の計算が多かったが、分子の微視的理解が得られ、また、想像するしか無かった遷移状態構造が理論計算から求められ (potential 面の鞍部でしかないが)、モデル系で

あったにしても分子と化学反応の理解に貢献できたと考えている。最近の化学ではフラレン、カーボンナノチューブなどのナノスケール分子と共に、光合成系、超分子、多孔性配位高分子錯体、金属微粒子や半導体などの複合系・大規模系が新しい研究対象として登場している。応用的な側面の強い研究対象も多いが、いずれも新しい分子科学的理解が必要とされる化学事象が数多く含まれている。例えば、燃料電池は実用化と普及を目指して研究が活発に行われているが、重要な過程の一つ、「電位存在下、電極と溶液の界面で起きるプロトン移動とカップルした電子移動」は分子科学的理解も理論的解明もなされていない。これらは分子科学と物性物理、固体電子論などの境界領域の研究対象でもあり、分子科学は周辺分野との一層の融合・共同研究が必要とされていると言える。個人的には固体電子論が研究対象としてきた物質の研究に分子科学的な立場からのアプローチが必要ではないか、と感じている。いずれにせよ、新しい魅力的に見える研究対象が次々に誕生し、また、応用を目指して様々な物質群が研究の対象となっているが、それらの分子科学研究には尽きせぬ楽しさがある。分子科学研究所にも本質に直

結する化学事象の基礎的・基盤的な理解と普遍的な法則性を見出す研究を今後も一層進められることを期待している。

最後に、分子科学研究所のもう一つの忘れてはならない使命に触れたい。分子研が誕生したところから十数年間、共同研究が盛んで、分子構造総合討論会 (現在の分子科学討論会の前進) での研究発表の相当件数が分子研との共同研究であった。私自身も助手、助教授時代、分子研が無かったら研究が困難であった。昨今は基礎化学分野でポストが減少し、研究環境も劣化しているが、その中で活動している研究者を共同研究機関として支えるようなことも分子研に期待したい。分子研がわが国はもとより世界の分子科学研究者にとり無くてはならない存在であり続け、その重要性が一層大きくなることを期待している。

さかき・しげよし
京都大学工学研究科燃料化学専攻出身 (1974年工博)。1975年から熊本大学工学部工業化学科助手、助教授、教授を経て、2002年から京都大学工学研究科分子工学専攻教授、2010年に定年退職し、同福井謙一記念研究センターリサーチフェローなどを経て、2020年から同触媒・電池元素戦略ユニットにお世話になっています。遷移金属元素を含む複合電子系の構造、電子状態、反応過程に興味を持ち、その理論化学研究を行って来ました。

渡辺 芳人 総合研究大学院大学 理事

若手研究者育成で思うこと



わたなべ・よしひと

同じ所にじっとしていることが出来ず、若い頃はおおよそ五年ごとに移動を繰り返す（東北大 4.5 年→筑波大学 5 年→ミシガン大学 + プリンストン大学 5 年→慶応大学 + 化学技術研究所（現 産総研）3.5 年→京都大学 4 年→分子研 7.5 年）。さすがに、名大では移動もままならず、併任期間を入れると 18 年間で過ごす。統合バイオの設立に尽力するも、完成時点で岡崎を去る。岐阜大と名大の統合に尽力するも、東海国立大学機構設立時点で総研大に移動。総研大のリフォームに最後の力を尽くすも、……完成後……？

「分子研の皆さん、お久しぶり。古巣に帰ってきました」

まさに、こんな感じで川合所長、青野先生、そして魚住先生と顔を合わせたのは、一年前（2020 年）の二月、三月のことでした。そうです、総研大の運営会議や評議会で、学長補佐という同僚の立場での再開です。4 月からは、中村幸男理事の後任として総務など総研大の裏方を担当する事になりました。

僕が分子研・総研大を離れたのが 2001 年ですから、おおよそ 20 年の時を経たことになります。分子研のみならず、お隣の基生研や生理研の先生も定年などでかなりの入れ替わりがあり、統合バイオサイエンス研究センターも生命創成探求センターとなるなど、浦島太郎状態というのが正直な感想です。

さて、僕が総研大で今関わっている仕事の中心は、第 4 期中期目標期間に向けた総研大全体の見直しです。その中でも、一研究科構想の具体化が大きな課題です。一研究科構想に至るまで

の議論は多々あったと思いますが、名古屋大学に 18 年間在職した経験から、少し角度の異なる議論をしてみたいと思います。

分子研を含めた全国共同利用研究所にとっては、それぞれの研究領域のコミュニティに対する研究活動支援（機器利用や共同研究、シンポジウム開催など）も重要ですが、当該領域の学術研究を発展させるという重要なミッションを抱えています。一方で、そこに総研大生を迎え入れることによって、若手研究者を育成するという人材育成も非常に重要なミッションとなっています。総研大生が分子研の皆さんの研究に参画し、世界の最先端を切り開く研究現場に身を置き、主体的に研究に参加することが出来るという環境は、実に贅沢な事だと思います。まあ、学生の段階で、そんなことに気がつく人は少ないでしょうが……。

本題は、ここからです。

PI である教授や准教授の皆さんは、自分の研究分野で世界を牽引する成果

を上げることが期待されています。その研究に参画する大学院生は、PI の皆さんから研究の背景や意義を学び、問題意識を共有し、研究に打ち込みます。学位を取得した時点では、その分野の未解決研究課題に精通していますので、それらの課題に取り組み、さらにその研究分野を発展させることが期待されているという「錯覚」に囚われていることが多いはずです。

僕のこの議論、「え？『錯覚』ですか？」と聞き返したくなる方も人は多いはずです。『錯覚』ではないでしょう。彼らは、我々の分野を益々発展させる重要な人材です」というご意見の方も、結構多いのではないかと思います。しかし、「我々の分野を益々発展させる」のは、現在 PI である皆さんの役割であって、研究室の博士課程学生やポスドクが背負うべきミッションではありません。彼らには、そうした研究に参画して培われた研究者としての能力を使って、新たな分野を切り開いてもらいたいとは思いませんか。

1990年代に入って、学術情報のデジタル化や情報を取り扱うコンピューターの高速化が加速度的に進みました。その結果、学術誌のインパクト・ファクター（IF）や、論文の被引用数、それらを参考にした様々なランキングなどが始まりました。科学技術・学術政策研究所（NISTEP）によるScience Map 2008では、そうしたデータを駆使し、「日本発の研究はオーソドックスな研究分野では競争力を発揮しているが、Hot Research Areasの競争力は欧米に比して非常に弱い」ことを指摘していました。残念ながら、十数年を経過した現在もこの指摘は生きています。この弱さは、何に由来しているのでしょうか。それを考えるときに好例と思えるのが、Peter ShultzとRichard Lernerらが牽引したCatalytic Antibody研究でしょう。詳しい紹介は省略しますが、「化学反応の遷移状態に類似する構造を有する化合物（図1参照）を認識するモノクローナル抗体を作成すれば、その抗原認識部位がその化学反応を触媒する」酵素として働くというものです。

Shultz氏のインタビュー記事を読んだことがあります。彼は化学者ですが、「Caltechで生化学や生理学の講

義を通じて、抗原抗体反応や抗体による抗原認識機構などを学んでいたので、Catalytic Antibodyというアイディアに行き着いた」というような話をしています。化学関連科目だけを学んでいたのでは、こんなアイディアは出てこなかったということです。何か思いがけないことを発想するとき、それを支える知識が潜在的に頭の中にあるということでしょうか。

さて、一研究科構想に戻しましょう。現在の総研大の講義実態を見ると、例えば機能分子科学専攻や構造分子科学専攻の学生さんが、基生研や生理研で行われている分子生物学関連の講義を受講しているのでしょうか。あるいは、分子研の先生は、他専攻の興味ある講義を受講するように学生を仕向けているのでしょうか。答えは、概ね「No」なのではないでしょうか。「それは、学生本人が考えること」という逃げ道を見つける先生もいるかも知れませんが、教育とはそういうものではありません。新たな分野に挑戦しようという意識の博士を育てようとするれば、強制はしませんが、他分野の講義も受講するように「仕向ける」事も必要になります。その際、学生指導がPIである個々の先生の「若手研究者育成に

ついついの考え方に依存している」というのは、賢い大学運営・学生指導とはいえません。制度的に、異分野にも興味を持つ研究者を育てる仕掛けが必要です。現在議論されている一研究科構想では、人文系と理工系の壁を取り払い、一研究科・一専攻とし、その下に各基盤機関が単独のコースとして繋がります。研究に関しては、各コースを構成する基盤機関がこれまでと同じように責任主体として実施しますが、講義に関しては、複数のコースが共通で開講する「共通科目（・・・）科学コース群（仮称）」が設定されます。詳細な提案内容は、専攻長を通じて皆さんの手元に届いているでしょうから割愛しますが、総研大の学生にとっては、他の基盤機関の先生が担当する講義を受講することがこれまで以上に簡単になりますし、推奨されることとなります。コロナ禍でWebを使った講義が一般的になったことも、受講のし易さを後押ししています。もちろん、全ての受講生が同じ時間帯にWeb講義を受講するのか、あるいは、録画された映像を受講するのか、後者の場合、学生の理解を助けるためのTAは配置するのか等、技術的な議論は必要ですが、コンセプトは理解頂けるでしょうか。

もちろん、総研大の卒業生が全員、異分野に挑戦する研究者になることを考えている訳ではありません。周辺分野をある程度学んだ上で、あえて、現在の分野で研究を進めようとする学生がいても何の問題もありません。要は、広く世界を知った上で、自ら航海するべき方向を決めて欲しい、決めることが出来る研究者に育って欲しいということです。

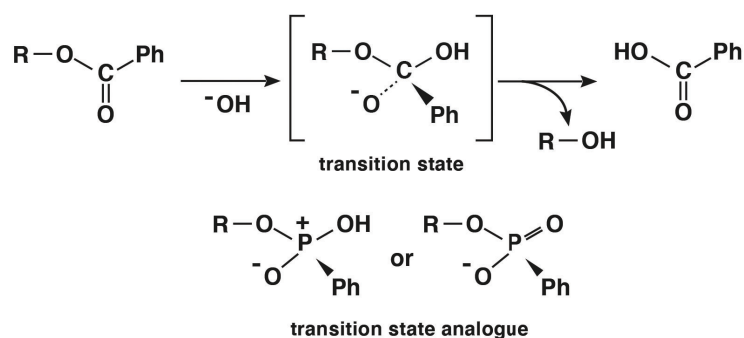


図1 加水分解反応の遷移状態をリン酸化化合物で再現。

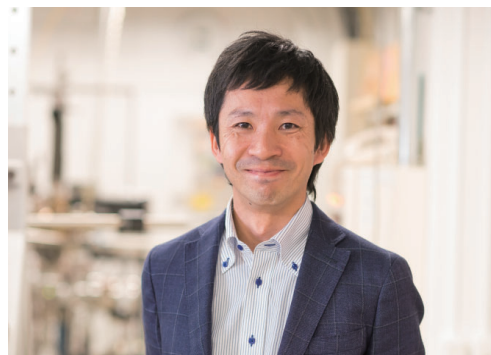
見えてきた柔らかな物質系の電子状態の特徴

解良 聡 光分子科学研究領域 教授

けら・さとし

1972年新潟生まれ。2001年千葉大学大学院自然科学研究科修了（博士（理学）取得）、2003年ブルツブルグ大学博士研究員、2014年4月より現職。2018年より極端紫外光研究施設 UVSOR 施設長。詳しくは分子研インタビュー*。

*) https://www.ims.ac.jp/research/interview/kera_highlight.html



分子材料の本質を知る

情報化社会、エネルギー・環境問題から、既存の無機材料を駆使するだけでは解決困難な課題が人類に突きつけられている。一方で、分子の半導体機能を活用する有機エレクトロニクスはこの20年で飛躍的に進歩し、日常的に恩恵を授かる時代になった。その他にも、機能性分子群の特性を利用した様々なソフトデバイスの研究が賑わいを見せ、多彩な構造の分子化合物が日夜合成され、材料開発・製品設計に展開されている。しかし基礎学術的な視点に立つと、分子の特徴を理解したうえでデバイス開発を進めているとは

言い難い。多くの研究者が様々な角度からアプローチしているが、粗い近似に押し込んで現象を理解したつもりになっている状況であると思う。半導体機能ひとつをとっても、物性の発現機構や原理、その制御のための量子論的な中身が未だ明確でなく、基幹学理としての適切なガイドラインが構築されぬまま手探り状態の（力技での）応用研究が続けられていることを意味している。「分子の中の電子の気持ちを理解しよう！」グループのホームページに掲げている目標である。ことさら擬人化しているのは、真の特徴を理解することの難しさ、それだけシステムが

複雑で非自明であることを物語る。

我々は有機分子の多彩な機能性の起源について、様々な表面分析法を駆使して研究を進めている。特に光電子分光法は電子状態（電子構造）を計測する上で極めて強力な道具で、「分子の状態を可能な限り維持したまま、その中の電子の姿」を評価できる。ただ「真の姿」は非自明であるため、最近では「計測」そのものについて量子論に踏み込んだ検討が必要で、新たな展開を見せつつある。我々が観測している光電子スペクトルは分子材料のどういう状態を観測しているのだろうか、という問いである。言い換えれば分子を介した計測法の深化が物理学の発展にも資するのである。

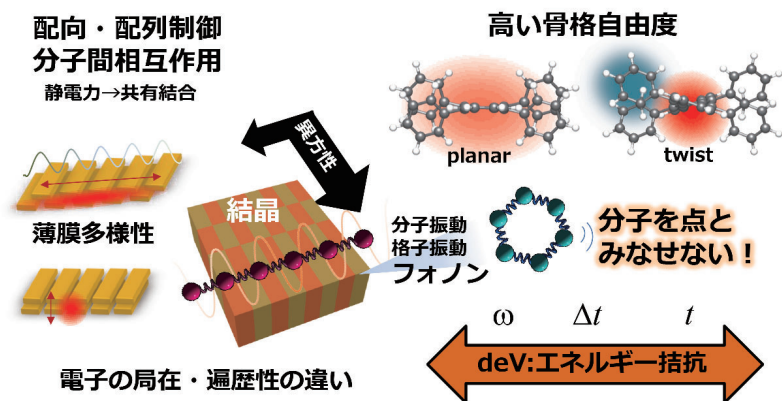


図1 有機半導体の特徴は柔らかな構造に加え、分子を構成する原子周期と電子周期の不一致にある。分子結晶の格子点における分子の形を露わに考えると、電荷への応答が時空間に階層的に進むため、ダイナミックな変形を考慮しないとイケないことに気づく。

どこまで姿は見えてきているか

分子材料の機能・物性制御の力ぎはボトムアップ法における構造制御にあるだろう。しかし構造の単位である原子配置を精密に決めるだけではその機能や物性の理解には至らない。分子骨格は柔らかく、固体においては階層的なフォノン（格子振動と分子振動）によるダイナミックな形状変化を示すため、原子構造と電子構造の相関を真に評価する必要がある。つまり分子配向・

配列制御技術とその計測評価が重要で、光電子分光法から何某かの有益な物理情報を得るためには、少なくとも数ミクロンの均質な試料サイズが求められる。さもなければ微細な量子情報は不均一性の中に埋もれてしまう。この計測の未発展が、分子材料において電子物性の議論が遅々として進まない主たる要因である。一方で、分子材料の諸物性を議論していると無機物で培われてきた一般認識との乖離が見られる。例えば電荷輸送特性は、隣接分子間の軌道の重なり（移動積分 t ）で記述される。室温で熱励起されたフォノンは軌道の重なりを時々刻々変化させるために、移動積分 t も時間で変動する。最近の研究から、こうした物質群は t とその相互作用である動的揺らぎ幅 Δt 、フォノンエネルギー ω 、が全てeV程度のオーダーで拮抗する「電荷-フォノン協奏系」であることを見出しつつある（図1）。これは t に

対して動的揺らぎ Δt が十分小さいことを仮定する摂動論の破綻、つまり既存の伝導機構モデルの不十分さを意味する。従来の固体電子論は電荷とフォノン（格子振動や周期的な分子振動）のみ、あるいはホッピング理論は電荷と分子内振動のみを考慮した説明で協奏物質系の特徴を表現していない。分子固体は共有結合系である堅い単分子が、ファンデルワールス(vdW)結合で柔らかく結合した集合体であり、エネルギーの大きく異なる分子内結合（共有結合）と分子間結合（vdW結合）の共存が階層性と協奏性の起源である。実際にこの特徴に由来すると考えられる現象が報告されている。例えば、有機半導体の巨大ゼーベック係数^[1]、有機無機ペロブスカイトでのフォノンの異常ソフト化、異常非弾性散乱長^[2]である。分子材料の特徴を露わにするには、異なる階層性を量子論的に対等に扱い説明するモデルを構築す

べきで、若手理論家らによってその突破口が開かれようとしている^[3]。

モデル試料の製作と精密計測

我々のグループでは半導体機能をもつ分子群の配向薄膜に着目し、角度分解光電子分光（ARPES）実験を駆使して電子状態を精密に評価してきた。 π 電子積層系の有機結晶は、分子系としては比較的大きな移動積分 t をもつが、それでも計測は容易ではない。図2は高伝導半導体として知られるルブレン分子のバルク単結晶を試料とし、超精密計測によるエネルギーと運動量の分散関係の測定に成功した例である。高周波の分子内振動が電子系の波動性に結合することで電子バンドを大きく変調させると同時に、低周波の分子間振動が電子バンドと結合し有効質量を重くする階層的相互作用を初めて見出した^[4]。余談であるが、2008年に有機単結晶のエネルギー分散関係の計測

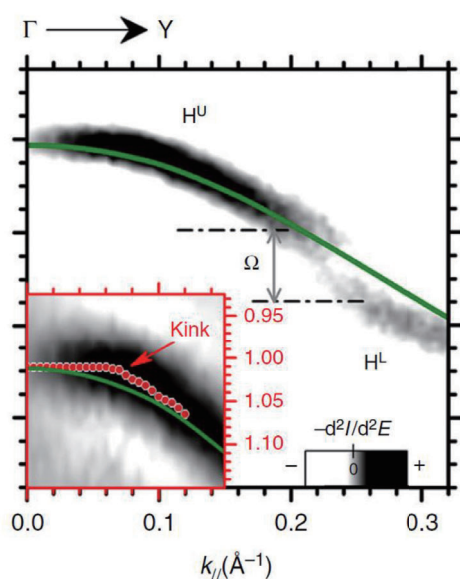


図2 ルブレン単結晶の高分解能ARPESによるHOMO由来のエネルギーバンド分散関係。フォノン結合による有効質量の増加とC-C伸縮振動由来のバンド再構築現象が見られる。温度依存性が次なる重要な計測ミッションである。文献4より引用。

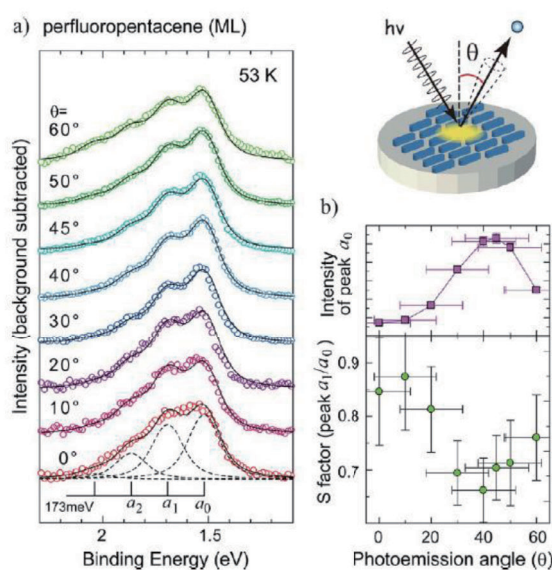


図3 フッ化ペンタセン単層膜の高分解能ARPESによるHOMO由来の振動結合状態。光電子の角度依存性を見ると、振動結合由来のサテライトバンドの相対強度が変化し、Condon近似の破綻を示唆する。文献6より引用。

に世界で初めて成功して^[5]、電子フォノン結合の精密計測を実証するまでに試行錯誤が重ねられ実に8年を要している。一方、基板表面を利用することで π 電子離散系の単分子層薄膜（二次元結晶）を作製することができる。高分解能角度分解光電子スペクトルにおいて、振電バンド強度が運動量依存を示すデータ取得に成功した。図3はフッ化ペンタセン分子のHOMOの超高分解能計測の結果である^[6]。いずれも分子振動が強く電荷に結合した結果を示すが、詳細には物理モデルとしてイオン化における瞬間近似の破たんを示唆しており、電荷の動きに対して原子核の動きを分離して議論できないことを意味する。つまりBorn-Oppenheimer 近似が成立しない協奏系である。これらの先駆的計測は極めて高品質な分子超薄膜の作製技術に依存しており、不均一性が高い試料系では一般的な光電子分光では観測自体が不可能で、他者の追従を見ない高度な計測例として国際的に評価されている。関連する話題は総説をご覧ください^[7-10]。

計測のパラダイムシフト

分子材料の電子状態は集合構造に敏感で、その多様で複雑な状況から物性・機能との関連付けは容易ではないことを述べた。無機固体で培われた従来理論の概念を打破し、分子固体に適用可能な学理を構築するためには、新たな視点の導入が必須であろう。ここで分子形状の基準として電子波動関数「オービタル」に注目し、機能の新たな評価指標を斬新に構築する。弱相互作用の表現で登場するvdW力を、波動関数の裾形状の変化として実験的に検出する作業ともいえる。分子固体では周辺環境の弱い電子間相互作用と強い電子-フォノン相互作用により、電子局在性が緩やかに変調されている。この僅かな（しかし分子の特徴づけとその物性にとっては重要な）違いは、従来のような電子のエネルギーと運動量の分散関係（つまり電子構造）の視点のみでは明示できない。電子雲の広がりやを起点とする階層的分子形状の視点で検討すべきである。こうした緩く遍歴的な電子は、輸送や変換過程において軽元素で構成された質量の大きな分子特有にフォノン（格子振動と分子

振動）の影響を強く受ける。この強い電子-フォノン相互作用は、フォノンエネルギーの広い分布に伴い時空間に大きな階層性を持つためダイナミックな準粒子的描像が不可欠である。つまり機能を司る量子構造体の単位としての「分子の形」は自明ではない。

ごく最近になり、系統的に試料探査できる配列分子システムの構築技術と、次世代型光電子分光装置である光電子運動量顕微鏡(photoelectron momentum microscope: PMM)による電子状態計測法の開発によって、冒頭の2つの命題の解決の道筋がついてきた。装置開発とその応用研究はドイツとオーストリアを中心に進んでおり、気付けば周回遅れの感が否めない。それでも遅ればせながらPMM装置が2020年2月分子科学研究所のUVSOR施設に導入されたことにより、今後は電子状態の全空間俯瞰計測が可能となり、新規研究が加速度的に進むだろう^[11]。図4は立ち上げ中の装置の性能評価のために取得したテスト結果である。Au(111)表面上のコロネン分子は整合性の高い単層膜を形成する^[12]。金との相互作用は比較的小さ

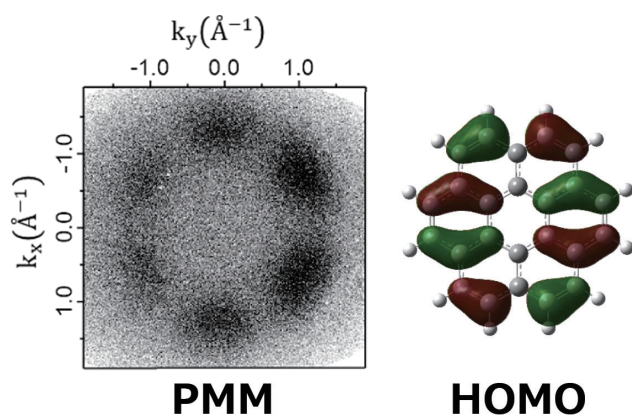


図4 コロネン単層膜の光電子運動量顕微鏡によるHOMO由来の電子運動量マップ。文献[13]と比べてSN比が物足りないが、既存のARPESに比して極めて高効率な運動量分布計測が実現している。Seeing is believingで、犬と猫の顔を見分けられる精度であるが初めて分子軌道（波動関数）の形状を簡単に“見る”方法を実現したといえる。準粒子波動関数の議論など、放射光の波長可変性や偏光特性を活用した新奇計測が始まろうとしている。

く、吸着サイトの不均一性がdeV程度に抑えられているため、気相で観測されてきたものと類似した振電相互作用によるサブバンドが分離して検出される^[13]。ブルツブルグ大学のグループがこの系について波数分解光電子顕微鏡装置を用いて前述の角度依存性の実験を検証した^[13]。UVSORの装置性能はまだ最適化されておらず、データ質にはまだ改善の余地があるものの、その威力たるや想像に難くない。

おわりに

柔らかな物質系は、高い自由度による電子状態の多様性に期待が集まる。数多の合成グループが生み出した美しい構造体が機能評価を手招いている。弱相互作用による材料群には、人類が未だ想像しえない埋もれた新機能の発掘が期待できる。例えば、太陽光発電は非常に有効な技術として期待されているが、その材料開発競争は熾烈を極める。最近、有機無機ハイブリッド構

造のペロプスカイト型化合物が示す特性に注目が集まっている。この物質は「ハイブリッド」ならではの興味深い物性を示す。一般的には、結晶試料の計測では真空中におけるin-situ劈開で清浄な結晶面を得て光電子分光実験を実施するが、ペロプスカイト物質系はまるで「豆腐」のごとく柔らかで、実はこの作業が容易ではない。人間スケールでは感覚がつかみにくく、ロボットアームを用いる真空中の作業は手探りで難しいのである。事実、多くの研究グループがARPES計測に挑戦していたであろうが、これまで成功していなかった理由のひとつと思われる。我々は分子材料で培った長年の経験とノウハウの蓄積があり、2018年以降電子構造評価に成功している^[14,15,16]。

前世紀の半導体産業の基盤となったバンドエンジニアリングを引き継ぎ、配列制御分子を活用することで、軌道や電子スピンの真の姿を計測し、無機物の単なる代替ではない分子特有の機

能を評価するための技術として、分子オービトロニクス時代が見えつつある。分子ならではの階層形状の量子概念を元にエンジニアリングが進めば、新たな価値の市場創出に繋げる道筋を示すことも可能だろう。反面、こうした場で述べることは適切ではないかもしれないが、分子材料の電子状態計測は、15～20年前は我が国が世界をリードしていた分野である。基盤技術の開発停滞と研究者の枯渇は重大で、瞬く間に周回遅れとなってしまった。そればかりではなく我が国における材料物性の計測分野の存続の危機感すら感じる。その要因と対策を真摯に検討すべきであると考え。

最後に、これらの着想視点と研究成果は、多くの学生や共同研究者の方々と議論の上に成り立っている。また科研費やその他の競争的資金の支援による実験設備の整備無しでは達しえない。この場を借りてお礼申し上げますとともに、今後の展開にご期待戴きたい。

参考文献

- [1] H. Kojima, et. al., *Appl. Phys. Exp.* **8**, 121301 (2015).
- [2] H. Zhu et. al., *Science*, **353**, 1409 (2016).
- [3] H. Ishii, et. al., *Phys. Rev.* **B 98**, 235422 (2018).
- [4] F. Bussolotti, et. al., *Nat. Commun.* **8**, 173 (2017).
- [5] S. Machida, et. al., *Phys. Rev. Lett.* **104**, 156401 (2010).
- [6] S. Kera et. al., *J. Phys. Chem.* **C 117**, 22428 (2013).
- [7] S. Kera and N. Ueno, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **204**, 2 (2015).
- [8] Y. Nakayama, S. Kera, N. Ueno, *J. Mater. Chem.* **C 8**, 9090 (2020).
- [9] J-P. Yang, et. al., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **50**, 423002 (2017).
- [10] S. Kera, H. Yamane, N. Ueno, *Prog. Surf. Sci.* **84**, 135 (2009).
- [11] F. Matsui et. al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **59**, 067001 (2020).
- [12] H. Yamane and N. Kosugi, *J. Phys. Chem.* **C 122**, 26472 (2018).
- [13] M. Graus et. al., *Phys. Rev. Lett.* **117**, 147601 (2016).
- [14] J-P. Yang, et. al., *Solar RRL*, **2**, 1800132 (2018).
- [15] J-P. Yang, et. al., *Appl. Phys. Exp.* **13**, 011009 (2020).
- [16] J-P. Yang, et. al., *Phys. Rev.* **B 102**, 245101 (2020).

分子研研究会のオンライン開催

2020年7月10日に、立命館大学の越山友美先生のもと、分子研研究会「錯体化学に基づく分子の構造変換設計と機能制御」がオンラインで開催されました。私は所内対応者としてこの研究会をサポートさせて頂きました。様々な討論会や研究会がオンラインで開催されるようになって久しいですが、当時はそのような事例は少なく、また分子研研究会としては初のオンライン開催だったということもあり、手探りながらも慎重に準備を進めました。本研究会ではZoomを用いて口頭発表を行ったのですが、例えば、講演者の皆様には事前接続チェックをして頂き、万が一通信が途切れてしまった場合に備え予備のPCあるいは通信環境が準備できるか、を確認するなど、問題が起

こった際に早急に復旧できるよう準備を整えました。研究会本番では一度だけ通信が途切れるハプニングがありましたが、講演者の先生が迅速に対応してくださったおかげで、数分後には復旧して発表を続けて頂くことができました。

本研究会ではRemoを用いたポスター発表も行われました。Remoでは講演者を含めた最大6人が一つのポスターテーブルに集まり、カメラとマイクを用いてリアルタイムでの発表/聴講が可能です。RemoではZoomよりも高いPC・通信環境が要求されるようで、ポスターテーブルのうちいくつかでは、ポスターは見えるものの講演者のカメラ映像と声が途切れ途切れで聞き取れない……ということがありまし

た。一方で、聴講者は自由にポスターを拡大/縮小してみる事ができる(データの細部まで確認できる)、落ち着いた環境でポスター発表に参加できる(暑く混雑したポスター会場で汗をかきながら発表/聴講する必要がない)、等、オンラインポスター発表会ならではのメリットと今後の大きな可能性を感じました。

今回の研究会では270名からの参加登録がありました。多数の方々に参加して頂け、後々のオンライン研究会・討論会の開催につながるよい手応えを感じました。

最後に、本研究会のオンラインでの開催をお認めくださった関係者の皆様に厚く御礼申し上げます。

(草本 哲郎 記)

訃報 木村 克美 名誉教授逝去

木村先生、岡崎、分子研 阿知波 洋次(首都大学東京 名誉教授)

既に皆様ご存じのことと思われそうですが、令和2年10月21日に木村克美先生がお亡くなりになりました。木村先生は現役を退かれた後、生まれ育った故郷でもある岡崎でお暮しでしたが、比較的最近、宇治市に転居され、その後もお元気で老後の生活をお過ごしのことと、聞いておりました。誠に残念です。この場をお借りして、心からご冥福をお祈りさせていただきます。筆者と木村先生との出会いは、一人の卒研究生とその指導教官として、かれこれ半世紀前の札幌まで遡ることとなります。当時、木村先生は、北大附置研の一つであった応用電気研究所に若くして阪大より教授として着任し、マイクロ秒フラッシュ法による短寿命化学種の分子分光学的研究を進めていました。と同時に、当時世界的にも開発されて間もない真空紫外光を用いた光電子分光による分子の電子状態の研究も木村研究室の大きなテーマの一つでありました。北大時代の短寿命化学種と光電子分光という二つの研究キーワードは、その後、先生が開設間もない分子研に転任した後、新しい研究室の主要なテーマとして見事に融合し、レーザー多光子光電子分光法として開発、発展していくことになります。その後の木村先生のご活躍は皆様ご存知の通りです。岡崎の地を語る時の先生の誇らしげな顔、テニスコート上の楽しげな姿、また、夜遅くまで灯る先生の居室。いずれも分子研における大変充実した先生の研究生活を物語るものであったと懐かしく思い出されます。これからは、どうぞ、ゆっくりお休みください。

藤田誠卓越教授のクラリベイト・アナリティクス引用栄誉賞ご受賞によせて

南谷英美准教授に第一回日本表面真空学会若手女性研究者優秀賞

倉持光准教授に第13回分子科学会奨励賞および2020年度分子科学奨励森野基金研究助成

下出敦夫助教に第15回日本物理学会若手奨励賞

三輪邦之特任助教に第15回日本物理学会若手奨励賞

藤田誠卓越教授と三橋隆章特任助教に文科省ナノテクノロジープラットフォーム令和2年度「秀でた利用成果」優秀賞

藤田誠卓越教授のクラリベイト・アナリティクス引用栄誉賞ご受賞によせて



藤田誠卓越教授が2020年クラリベイト・アナリティクス引用栄誉賞を受賞されました。藤田先生が長年続けて来られた独創的な取り組みが、多くの研究者を魅了する一大研究分野へと発展したことの一つの現れであると感じております。私は、このような多大な業績を挙げられた藤田先生を偉大な先達として仰ぎ見るばかりであり、今回の受賞についてコメントする立場には到底無いと感じられた為、当初、本稿の執筆を辞退させていただくことを考えたものの、分子研レターズ編集委員から、分子研・藤田グループの近況報告などを踏まえた記事を、との依頼

をいただいた為、藤田先生の近年の分子研におけるご活動を紹介することで、受賞のお祝いに代えさせていただきたいと存じます。

藤田先生は、1997年から2年間、助教授として分子研に在籍され、その後、名古屋大学、東京大学へと研究の場を移してこられましたが、2018年4月に分子研に卓越教授（東京大学と兼任）として戻られました。その後は、分子研と東京大学を頻繁に行き来し、分子研におかれましても、東京大学における研究とは異なる課題を設定し、活発な研究活動を展開されております。

また、藤田グループでは、大学共同利用機関である分子研が備えている外部研究者向けの宿泊施設など、恵まれた環境を活かし、共同研究も活発に行っております。これまでに多くの共同研究者が、比較的長期に渡り藤田グループに滞在してきました。現在（2020年度）は、COVID-19感染拡大の影響から下火になってしまったものの、

2019年度だけでも、国内からは大阪大学から博士課程の学生1名（計約5ヶ月滞在）および、東京農工大学から修士課程の学生1名（計約4ヶ月滞在）が共同研究に訪れました。また、海外からは、オランダのトゥウェンテ大学からインターンシップ生が1名（約6ヶ月滞在）、アメリカ合衆国のホワイトヘッド研究所（マサチューセッツ工科大学の外郭の研究所）から博士研究員1名（約1ヶ月滞在）、オーストリアのグラーツ大学からの博士研究員1名（約1ヶ月滞在）が訪れ、実習や共同研究を実施いたしました。

藤田先生は、通常の定年である65歳を数年後に迎えられますが、その後も、卓越教授として分子研においても東京大学においても研究を継続される予定です。今後も、現役の研究者として画期的な成果を発信し続けると確信しております。

（特別研究部門 三橋 隆章 記）

南谷英美准教授に第一回日本表面真空学会若手女性研究者優秀賞

この11月に「表面界面における量子多体効果の理論研究」の業績に対して、第一回日本表面真空学会若手女性研究者優秀賞をいただきました。まず、ご推薦いただいた分子科学研究所所長川合眞紀先生に御礼申し上げます。

対象となった業績にはいくつかの研究テーマが含まれています。私は量子多体効果の不思議さとそれを記述する理論に興味を持ち、博士課程の頃から研究を続けてきました。当初は、スピンと金属の伝導電子が結びついて伝導特性に得意な振る舞いをもたらす近藤効果の研究をしていました。理論研究なので研究対象を広げる際の障壁も少なく、その後、電子フォノン相互作用や層状物質の物性などの研究を始め、最近は自身の研究テーマも、かなりダイバーシティの様相を示しています。様々な対象について表面を基軸として

研究を進めた理由は、高度な実験技術が発達しており理論で予測される物性が計測できる可能性が高いこと、またその計測結果が非常にビジュアル的で「百聞は一見に如かず」であることを分野の研究者との出会いやディスカッションを経て実感したからです。

表面に興味を持つきっかけとなった恩師の笠井秀明先生、長らく共同研究を続けさせていただいている高木紀明先生、荒船竜一先生、渡邊聡先生に特に感謝を申し上げます。ありがたいことに、研究者としてのキャリアをスタートしてから多くの方から助言をいただき、新しいことに取り組める機会と環境をいただけたことが今回の受賞につながったのだと思います。

今回いただいた賞は学会への若手女性研究者の参加・活躍を促進し、ダイバーシティ・インクルーシブの精神に則った研究活動環境を早期実現する



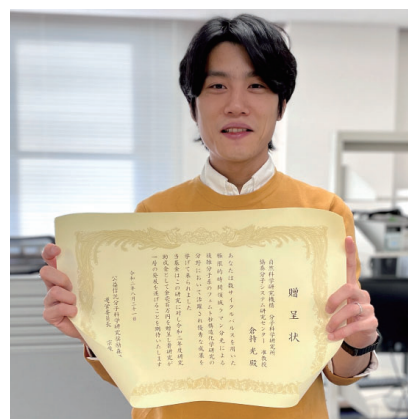
ために設けられた賞です。実のところ、私は普段、女性研究者であることをほとんど意識しないのですが、それも大変恵まれた環境にあるからなのでしょう。受賞を機に、あらためて周りの方々に感謝し、より一層研究に励み、新たな研究を展開するべく精進していく所存です。

(南谷 英美 記)

倉持光准教授に第13回分子科学会奨励賞および2020年度分子科学奨励森野基金研究助成

この度、「数サイクルパルスを用いた極限分光計測による複雑分子系のフェムト秒構造化学研究」、「数サイクルパルスを用いた極限的時間領域ラマン分光による複雑分子系のフェムト秒構造化学研究」の業績に対して、それぞれ第13回分子科学会奨励賞、2020年度分子科学奨励森野基金研究助成をいただきました。受賞・助成対象となった研究をともに進めて参りました理化学研究所の田原太平主任研究員、兵庫県立大の竹内佐年教授を始めとする多くの共同研究者の方々、そして森野基金研究助成にご推薦いただいた埼玉大学の山口祥一教授に深く御礼申し上げます。

さて、受賞の対象となった業績はいずれも、極短パルス光を使い分子のコヒーレントな振動を直接時間領域で誘起・観測しながら複雑分子のフェムト秒構造ダイナミクスを追跡する、という研究です（詳細については拙著の総説、分光研究, 66, 5, 155 (2017)、分子研レターズ前号などをご参照いただけますと幸いです）。分子科学会奨励賞、分子科学奨励森野基金研究助成はいずれも現在分子科学研究の最先端で活躍し、輝いている多くの諸先輩方が過去に受賞されていたものでしたので、分子科学研究に携わる若手(?)として一つの目標であり憧れの賞でし



郵送での受賞となりました。
(分子科学会奨励賞の授賞式は来年に延期。)

た。今回ようやくその目標が実現し、これらの賞を受賞することができたこと、感無量です。また、分子科学、特

に振動分光を生業として研究を行ってきた人間としては故森野米三先生の名前を冠する助成金の受給者となれたことを大変光栄に思います。

ちなみにですが、過去に遡って調べてみますと、どちらの賞も2016年か

らずっと、分子研が連続して受賞者を輩出しているようです。この良き流れに続くことが出来て誇らしく感じるとともに、分子科学研究の本流としての、分子研のプレゼンスを示す一助となれたのではないかと考えております。今後も賞の名に

恥じぬよう、またこれまでに同賞を受賞された諸先輩方に負けない先端的な研究を展開できるよう、より一層の精進を重ねてまいります。

(倉持 光 記)

下出敦夫助教に第15回日本物理学会若手奨励賞（領域8）

このたび、第15回日本物理学会若手奨励賞（領域8）を受賞いたしました。本賞は「将来の物理学をになう優秀な若手研究者の研究を奨励し、日本物理学会をより活性化するため」に2007年に設けられたものです。特に2010年からは近藤美登子さまから日本物理学会にいただいた1,000万円のご寄付をもとに賞状が贈られております。このことはより周知されるべきだと考えておりますので、まずここに記したいと思っております。ご推薦いただきました分子科学研究所客員教授でもある京都大学の柳瀬陽一教授、共同研究者、審査委員のみなさまに心よりお礼申し上げます。

受賞対象となった研究は「結晶における多極子の定式化と交差相関応答の

理論的研究」です。多極子とは、古くは19世紀に確立した電磁気学に現れる概念で、よく知られた電気分極や磁化を一般化したものです。領域8、すなわち強相関電子系分野においては、2000年前後から原子における多極子が注目を集めており、最近では複数の原子からなるクラスターへの拡張がなされているところでした。一方の交差相関応答の例としては、電場によって磁化が現れる電気磁気効果が挙げられます。本研究は、多極子を結晶全体という極限まで拡張し、電気磁気効果を含むさまざまな交差相関応答との間に定量的な関係を見出したというものです。

「多極子を結晶全体という極限まで拡張」することには原理的な困難があり

ますが、上述の電気分極や磁化に対しては解決法が知られています。本研究でもこの手法を応用していますが、これは弱相関電子系という意味で領域8とは真逆の領域4、すなわち半導体・メゾスコピック系・量子輸送分野の手法です。また、「さまざまな交差相関応答」は領域3、すなわち磁性・磁気共鳴分野に属するものがほとんどです。私はこれまで既存の分野にとらわれないことを最も重視して研究を進めてきましたが、このたびの受賞でそのような部分も評価していただけたのであれば大変光栄です。今後はさらに分野を広げ、それらを繋げながら新しい概念を提案していきたいと考えております。

(下出 敦夫 記)

三輪邦之特任助教に第15回日本物理学会若手奨励賞（領域9）

この度、「ナノスケール分子系における光物性および輸送特性に関する理論研究」というテーマで、第15回日本物理学会若手奨励賞をいただきました。本賞は、将来の物理学をになう優秀な若手研究者の研究を奨励し、学会を活性化するために設けられたものです。受賞にあたり、共同研究者の皆様、特に本賞にご推薦いただいた理化学研究所の金有洙主任研究員に厚く御礼申し上げます。

受賞の対象となった業績は、分子と金属ナノ構造からなる系の光学応答や量子輸送に関する理論研究です。私は特に、金属ナノ構造の局在表面プラズモンと分子の相互作用、および、表面吸着分子系や分子接合系における光電変換に興味を持ち、理論モデルの構築や非平衡グリーン関数法を用いたダイナミクス解析を行ってきました。詳細については、解説記事（分光研究64, 457 (2015)や固体物理55, 149

(2020)など）をご参照いただければ幸いです。

これらの業績は、私が大阪大学の学生であった時から、理化学研究所およびカリフォルニア大学の博士研究員であった時までに行った研究に基づいていただきました。恩師の笠井秀明先生（現大阪大学名誉教授）と坂上護博士（現株式会社E-STAGE）には、多くのご指導を賜り、研究内容だけでな

く研究に対する向き合い方も学ばせていただきました。単一分子の電界発光や光学応答を調べる研究に関して、長らく共同研究をさせていただいている、理化学研究所の金有洙主任研究員、今田裕研究員、今井みやび研究員、木村謙介研究員には、理論と実験で力をあわせて研究を発展させていく楽しさを教えていただきました。カリフォルニ

ア大学ではMichael Galperin教授に、分子接合系でのダイナミクスを解析する理論手法を開発する機会をいただくとともに、アメリカ式の研究スタイルの一端を学ばせていただきました。これまで研究を続けられたのは、皆様の支えがあったからであり、心より感謝しております。

また今回の若手奨励賞では、分子研

から3名も受賞者が選出され、本所の研究レベルの高さを改めて感じております。10月より現職に着任し、本所の素晴らしい研究環境のなか、より一層研究に励んでまいります。

(三輪 邦之 記)

藤田誠卓越教授と三橋隆章特任助教に 文科省 ナノテクノロジープラットフォーム令和2年度「秀でた利用成果」優秀賞

この度、文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム令和2年度「秀でた利用成果」優秀賞を受賞致しましたのでご報告させていただきます。本賞は、文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム事業の利用課題の内、特に秀でた成果を選定し顕彰するものです。今回は、本事業の一環として分子研とGraz大学（オーストリア）の間で実施された共同研究の内容を評価していただきました。そのため、分子研から藤田誠卓越教授と私（三橋）、Graz大学からWolfgang Kroutil教授と服部弘博士の計4名で受賞致しました。

藤田グループでは、藤田卓越教授が開発した分子の構造解析手法である「結晶スポンジ法（CS法; Crystalline Sponge Method）」を用いた支援を、ナノテクノロジープラットフォーム事業として行っており、今回受賞した成果も、このCS法を用いた支援によるものです。CS法を用いることで、結晶化しない化合物であっても、最も信頼性の高い構造解析手法とも言われるX線結晶構造解析（通常は解析対象物の結晶化が必要）によって解析することが可能になることから、CS法は、アカデミアのみならず産業界からも注目を集めています。

一方、今回CS法によって解析した化合物は、服部博士とKroutil教授のご専門である「酵素を用いた物質生産研究」の過程で得られたものです。酵素を用いた物質生産は、化学合成では困難な反応を容易に達成できる場合があることや、環境調和型の方法論であることから、今後ますます重要になる分野とされます。こうした取り組みの中で得られた化合物の構造を確定することができずに困っているという連絡を、服部博士とKroutil教授から受けたことが本共同研究の始まりでした。両氏の研究内容を拝見すると、CS法以外の方

法で解析対象物の構造を確定させるには、多大な労力が必要であることが容易に推察されました。そこで、CS法を用いて構造解析を行ったところ、速やかに解析対象物の構造を確認することができ、今回の受賞につながりました。

最後に、ナノテクノロジープラットフォーム事業では、横山利彦先生をはじめ、関係者の方々に大変お世話になっております。こうした多くの方からのご支援がなければ、今回の受賞もあり得ないものでした。この場をお借りして厚く御礼申し上げます。

(三橋 隆章 記)



12/9秀でた利用成果表彰式・発表会@東京ビッグサイト。
(リモートで参加したため、右から3番目のロボット画面に写っているのが筆者。)

Next Generation Spectro-Microscopy and Micro-Spectroscopy Workshop

報告：極端紫外光研究施設 大東 琢治・松井 文彦

ミクロ・ナノの眼で原子構造や物性を司る電子の振る舞いを明らかにしたい、という物質科学・材料開発の共通の課題を背景に、近年高分解能分光計測と顕微イメージングの融合が進展しています。UVSORでは走査型透過X線顕微鏡 (Scanning Transmission X-ray Microscope; STXM) と光電子運動量顕微鏡 (Photoelectron Momentum Microscope; PMM) を先端計測実験ステーションとして整備しました。現在、STXMはUVSORの高需要の看板ステーションとして稼働中ですが、R&Dに積極的な拠点としても業界に認知されつつあります。PMMも海外の研究施設での同種の導入計画が目白押しの中で、UVSORが先陣を切りアジア初号機を立ち上げました。そこで2020年10月28日から2日間に渡り、表題の国際研究会を開催し、装置・手法開発の最先端動向を議論しました。

今年は従来型の国際会議が軒並み中止・延期になりましたが、Zoomによるオンライン開催とすることで、逆に国境を越え、第一線で活躍する10名の研究者を招待講演者としてラインアップすることができました。各々が海外拠点にて口コミで宣伝してくれたおかげで、参加登録者135名の半数が海外からとなり、13の国と地域同時中継が実現しました。東アジア地域の時差を想定してプログラムを組みましたが、有難いことに東は深夜の米国Ohio、西は早朝の英国Oxfordからも参加がありました。大学・研究所はもちろん、分析会社・装置メーカーなどの多数の聴講がありました。

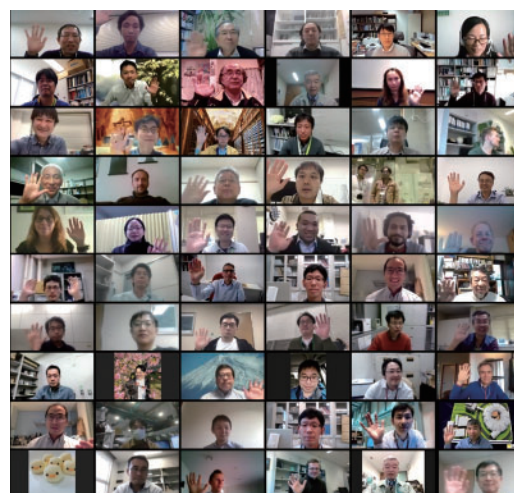
STXM関連では大東 (UVSOR) が高次光除去技術開発によるLiの顕微分光観察事例とともにはやぶさ2帰還試料

の施設横断大気非暴露分析プロジェクトの取り組みを、Jongwoo Lim氏 (ソウル大) がLiイオン電池のオペランド観察を、Huang-Wei Shiu氏 (台湾放射光施設) が新規軟X線STXM計画を、Lijuan Zhang氏 (上海放射光施設) がナノバブルの化学状態の研究を紹介しました。PMM関連では、松井 (UVSOR) が新実験ステーションの到達点と展望を、Michael Man氏 (OIST) がレーザーと飛行時間型PMMによるサブピコ秒の時間分解価電子励起ダイナミクス計測を、Tzu-Hung Chuang氏 (台湾放射光施設) が軟X線の偏光の特色を活用した新PMMステーション計画を、Michael Altman氏 (香港科技大) が光電子顕微鏡によるグラフェン成長の実時間観察を、Wen-Xin Tang氏 (重慶大) がスピン分解電子顕微鏡による磁性ナノ構造解析を紹介しました。STXMは材料化学・生命・宇宙科学、PMMは表面・分子化学・物性物理学を得意な対象とします。両者とも元素選択的な軟X線分光を取り入れ、それぞれ特色あるイメージング手法に発展していますが、分解能向上・光学系の炭素污染防治・放射線損傷など共通する課題の取り組みについても両者のユーザー間で共有が進みました。さらに顕微イメージング技術とその利用研究に加えて、両者を結び関連技術として、佐藤宇史氏 (東北大) に顕微光電子分光による原子層制御したトポロジカルヘテロ構造の新規物性研究を、増田卓也氏 (NIMS) に環境X線光電子顕微鏡の固液界面測定への展開を、石黒志氏 (東北大) にX線タイコグ

ラフィーCTとX線吸収分光との組み合わせによる触媒微粒子の3次元構造可視化技術を紹介していただきました。

オンラインならではの企画として、写真撮影 (スクリーンショット) やUVSORのVRツアーを行いました。ちょっとした盲点であったのは、講演と並行してZOOMのチャット機能を利用した全体あるいは個人間での議論が交わされ、盛り上がっていた点です。そこで主催者が2日間の充実した内容とチャットの議論をまとめ、皆で俯瞰した後、各地で予定されている国際会議の情報共有を行いました。参加者には組織委員を務める方が多く揃い、それぞれが開催準備状況を報告しがてら本研究会での感想を寄せてくれる展開となり、参加者の一体感を創出することができたのでは、と感じました。最後にこの分野のレジエンドである尾嶋正治 東大名誉教授にclosingの辞をいただきました。やはり次回は直に集まってビールを飲み交わしたい、というお話に皆さん、頷かれていたのでは、と思います。

主催者の都合で、開催時期がUVSOR運転休止時期に限られてしまうという事情がありました。平日午後であったた



研究会参加者の集合写真

め、授業や会議の忙しい合間に参加していただいた国内の大学の方々も多くあった、とのこと。また参加者には録画・録音を控えていただくようお願いしました。要旨集は事前に公開したのですが、それでも聞き逃した講演を再度聴講したいという要望も多く寄せられました。講

演資料中には著作権に配慮すべき引用図表なども多々あります。今後オンライン化が定着すると、こうした引用の作法のコンセンサスについても再確認が必要となるかと思います。

本研究会を開催するにあたり、様々な方からご助言をいただきました。

また素敵なデザインのウェブページ [<https://sites.google.com/ims.ac.jp/uvssor-ws2020/home>] や要旨集を研究力強化戦略室の永園さんに作成いただきました。この場をお借りして御礼申し上げます。

国際研究協力事業報告

二国間共同研究シンポジウム

報告：計算科学研究センター 教授 江原 正博

令和2年8月20-21日に二国間共同研究（日本－ノルウェー）のシンポジウム「Japan-Norway Bilateral Symposium from Fundamental Chemistry to Porous Materials: Theory and Experiment」を開催しました。このシンポジウムは、JSPS二国間交流事業共同研究プログラム「錯体超分子構造体の理論化学」の一環として開催したものです。当初、本年6月にノルウェーのオスロ大学にて、JSPSノルウェー同窓会と合同開催する予定でしたが、コロナ禍の影響のため、オンライン（Zoom）で開催することになりました。

本共同研究事業では、錯体超分子構造体であるMetal-Organic-Framework (MOF) や Metal-Macrocyclic-Framework (MMF) の構造と機能に関して、理論と実験が共同で国際研究を推進しています。昨年度は、7月18日に分子研でオープンセミナーを開催し、8月22日にオスロ大学を訪問してシンポジウムを開催しており、本共同研究を進めるとともに、学術交流を行っています。これらの国際研究交流をさらに進め、理論と実験の新しい国際ネットワークの形成を目指しています。

今回のシンポジウムでは、実験と理論の双方からこの分野で最先端の研究を推進している9名の研究者（日本7名、ノルウェー2名）から発表がありました。化学結合から超分子構造体、表面触媒など幅広い研究課題に関する最新の結果が報告され、活発な議論がなされました。参加国は日本、ノルウェー、フィンランドの3ヶ国で、6～7時間の時差がありますので、シンポジウムは2日間の日程をとり、両日とも15:30～18:30の時間帯で実施しました。国内外から著名な研究者の参加があり、特に理論化学分野では、オスロ大学・Hylleraasセンター長 Trygve Helgaker 教授、ヘルシンキ大学の Pekka Pyykkö 教授にもご参加いただき、活発な議論が行われました。欧州側では外出制限もあり、自宅から接続する方もおられ、質疑の際に音声が届くこともありましたが、日本側ではネットワークの大きな接続障害もなく、無事にシンポジウムを開催することができました。

昨年度に現地開催で実施したシンポジウムでは、共同研究の議論と研究交流



Hylleraas センターの展示：計算量子力学のパイオニア

ができました。今回のオンライン開催でも、現地開催と異なり、時間的な負担も少なく、共同研究や研究交流をさらに進めることができました。本国際交流事業は、来年度まで延長することを申請中で、来年度にはコロナ禍の情勢が改善していることを期待しています。今回の経験に基づいて来年度以降もシンポジウムを開催して共同研究および研究交流をさらに深めること、そして、今後さらに二国間の学術交流が進展することを期待しています。その一環としてオスロ大からも分子研、京大、理研との共同研究を進める予算申請がノルウェー研究評議会に対して行われており、本国際研究交流を一層発展させていきたいと考えています。

話題提供

化学にも浸透し始めたプレプリントサーバー

林 和弘 文科省 科学技術・学術政策研究所 (NISTEP) 科学技術予測センター 上席研究官

化学者の多くがその研究成果をJACSやAngewandte、あるいはBCSJなどに代表される査読付きジャーナルに投稿して、原著論文として世に問う。そして、その積み重ねが化学を発展させてきた。この仕組みは遡ること17世紀に学会の誕生とほぼ同時に生まれた学術ジャーナルというメディアを350年以上かけて改良してきたものと言え、現在は電子ジャーナルとして、研究活動に不可欠な存在となっている。有機合成化学を専攻し、日本化学会で電子ジャーナルの開発と運営を行った後に、現在科学のデジタルトランスフォーメーション（オープンサイエンス）の政策づくりと実践に携わる筆者から、2020年に入って論文出版の仕組みに“プレプリント”が重要な役目を果たし、個々の化学者の行動にも影響を与えようとしていることを紹介したい。

まず、一旦少し間口を広げて、化学に限らない科学者の多くが査読ジャーナルの原著論文を研究成果公開の最重要メディアとして扱う中、一部の分野や化学でも、研究者によってはその草稿段階の原稿（プレプリント）を、親しい仲間などに共有して広く意見を求めることを行ってきた。そうすることで査読者だけでは気づきにくい点を改良し、あるいは、ライバルには自分の成果の先取権を訴えることができる。

Webを生み出した高エネルギー物理の研究者コミュニティにおいては、このプレプリントをインターネットサーバー上で広く共有する試みを1991年より行ってきた。arXivと現在呼ばれ

ている老舗のプレプリントサーバーには、約30年間の間に160万本を超えてプレプリントが蓄積されており、今や、この分野の研究者は、朝起きたらまずarXivをチェックすることが日課となり、また、博士課程の学生はプレプリントの段階でジャーナルに投稿しつつも、ポスドクや就職等の活動を行っているという。

このプレプリントを積極的に活用した研究生態と言えるものは、しばらくは物理やその近縁の領域で広がっているにすぎなかったが、2013年になって、生命科学系のプレプリントサーバーBioRxivが立ち上がることで新たな展開を迎え、さまざまな分野のプレプリントサーバーが立ち上がった。そして、2019年に医学系のMedRxivが立ち上がり、不測の事態ながらもCOVID-19によって迅速な研究成果公開の要求が高まることでにわかに注目を浴びており、毎週多数のCOVID-19に関するプレプリントが登録されている。あるいは、人工知能等の情報系では、“日進月歩”どころではなく、“日進日歩”で研究が進むこともあるため、ときに数ヶ月以上を要する査読のプロセスは適用できず、プレプリントの共有・公開と引用を中心に研究が進んでいる。筆者は、研究論文を執筆したらまずはプレプリントサーバーで公開する“プレプリントファースト”と呼べる文化が分野を問わず根付く可能性を探っている。

その一方、少なくとも化学においては、プレプリントは査読付きジャーナルを置き換えるものではなく、査読付

きジャーナルだけではできないサービスや価値を提供する付加的なメディアであると考えている。従って、良く議論されているプレプリントの質の問題も、化学においては、プレプリントの段階では多少のリスクを負って化学者自身の見識で判断して早く利用するものであり、また、その後査読済み原著論文となることでこれまで通りの質の担保が行われ、広い読者に一定の信頼とともに読まれ、産業等社会へも応用されていくものと考えている。

さて、化学には現在ChemRxivというプレプリントサーバーが存在する。2017年8月に米国化学会(ACS)主導でβ版として立ち上がり、2020年現在、英国王立化学協会(RSC)、ドイツ化学会(GDCh)、中国化学会(CCS)、そして日本化学会(CSJ)が運営に参画している。2020年11月23日現在、6,743論文が登録され、13,559,920の閲覧数と3,551,471回のダウンロードがある。また、ChemRxivにおいてもCOVID-19関連のプレプリント登録数が増えており、プレプリントの加速要因となっている。

このようにChemRxivの登録数はまだ多いとは言えないが、それでも大変おもしろいことに、ChemRxivに登録されたプレプリントのうちの相当数が、その後、JACS, Angewandte等のハイインパクトジャーナルに掲載されることが分かっている。軽々に論ずることはできないが、化学者がハイインパクトジャーナルに載せたいと思うような良い成果を得たときに、先取権を

確実に取り、あるいは、万が一にでも査読者にアイデアを盗まれるなど不利な扱いを受けないようにするために先にプレプリントを公開しておくという、自衛策のような文脈が見え隠れするのは筆者だけであろうか。あるいは、現在ChemRxivにプレプリントを登録すると、そのまま、提携しているジャーナルを選択する画面を経て、投稿が速やかに完了して査読に入る。このように、プレプリントを公開しても著作権の問題はなく、これまで通りジャーナルに投稿ができる。実は、かつてはJACSやAngewandteはプレプリントとして公開したものを公知のものとして受け付けなかったが、冒頭紹介した情勢を踏まえて方針を変更した。つまり、これはと思う良い研究成果が得られて論文を執筆した後は、先取権獲得や査読者以外からの幅広いフィードバックのためにプレプリントを登録して、そのまま出したいと思うジャーナルにも投稿するという研究者にとって便利なプレプリントファーストのサービスが化学でもほぼ確立されているのである。ほかにも、Natureやその系列誌、例えばNature Chemistryに投稿すると、そのプレプリントを別途登録するように促されるようになっている。日本化学会の英文誌はまだプレプリントに対して明確な姿勢を示して

いないが、ChemRxivの運営にも関わっているため、時間の問題であろう。

なお、今すぐに化学でも広く一般的にプレプリントファーストになるとは思っていない。今後の研究活動を考える上で、プレプリントを一つのツールとして考慮する必要が化学分野においても出てきたというのが、2021年のこの記事で伝えたいことになる。例えば、プレプリントを公開するということは、着想を早く公にすることになるため、ライバル研究室の方が人海戦術で着想を発展させやすい場合など、化学者個々人の研究キャリア形成の観点からは、プレプリントとして公開しないほうが良い場合もあり得るからである。あるいは、知財獲得の関係でプレプリント公開を戦略的に止める場合もあるだろう。そして、化学の中でもやはり物理化学、化学情報、あるいは化学寄りの生命科学系の中でも“ドライな”研究領域においてプレプリントが浸透していることが分かっている。つまり、この記事を読まれている研究者それぞれの背景にある研究成果公開と評価の文化、および、個々の研究成果の特性を踏まえた上で、自身の成果をより早く、より良く認めてもらうためのツールとしてプレプリントを活用する時代に入ったとするのが妥当であろう。そして、プレプリントが浸透する分野に

おいては、迅速な成果共有によって研究が加速されることは構造的に間違いない。そうすると、研究の新たな着想を早く得るためにもプレプリントの活用は必須となる。したがって、これから化学者のキャリアを積み重ねる特に若手研究者は、プレプリントというメディアもあることを前提に自身の研究戦略を立てることを強く勧める次第である。

* ChemRxivのより詳しい解説については、東大の生長さんの記事 (<http://hdl.handle.net/2261/00079906>) が大変参考になる。また、プレプリントの可能性自身に興味を持たれた方は、拙稿 (<https://doi.org/10.15108/stih.00205>) を参考いただければ幸いである。

はやし・かずひろ

東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程中退。ITスキルを活かして1995年より日本化学会の英文誌の電子ジャーナル化に先駆的に携わり、日本化学会のスタッフとして2005年にはオープンアクセス対応も実現。IUPAC、日本学術会議、文部科学省の委員等を通じて日本発の情報発信強化の活動に従事。2012年より文部科学省科学技術政策研究所(当時)において政策研究に取り組む。現在、オープンサイエンスに関する政策作りと実践に向けて、UNESCO、OECD、G7科学技術大臣会合のオープンサイエンスの専門家委員として国際的な活動に携わる一方、日本学術会議特任連携会員や内閣府研究データ基盤整備と国際展開WGの副主査を務めるなど国内においても幅広く活動している。



学術会議

岡本 裕巳 分子科学研究所 研究総主幹／教授

日本学術会議の会員候補者の内6名が、内閣総理大臣の任命拒否を受けた件が、問題となっている。私はたまたまこの問題が起きた先日10月1日から会員となった（それ以前は連携会員）。最初の総会に出席した当日にこのような問題が起き、当事者の端くれとなってしまうことに大変驚き、また大きな危惧を抱くことになった。既に問題が想定以上に大きく報じられており、読者の皆さんも状況の概要はご存知かとも思うが、この機会に学術会議がどのような組織で、どのような活動をしているかを含め、状況をご説明しようと思う。

日本学術会議では主に4つの役割、政府に対する政策提言、国際的な活動、科学者ネットワーク構築、科学の役割についての世論啓発、を使命として活動しており、学術に関する数々の提言・報告の発表、一般公開を含む様々なシンポジウムやフォーラムの開催等を行う。例えば過去3年間では85の提言や23の報告などが発表・公開されている。分子研に関連するものとしては例えば、学術会議化学委員会と分子研、日本化学会で毎年共催している所長招聘会議（2020年度は6月に「光り輝く博士課程卒業生」と題してWebシンポジウムを開催）がある。一部の政治家らによる、活動実態がないなどという批判は当たらない。学術会議は独立して職務を行うこととされ、また経費は国庫負担と定められている。他のどの国のアカデミーも割合の多少はあるが国庫負担をしており、また日本学術会議の国庫負担金額は、例えば米英独と比

して遥かに少ない。

学術会議は会員210名（現在6名欠員）と連携会員約2000名から構成され、会員は任期6年で3年毎に半数の105名が入れ替わる。再任はない（連携会員は再任可）。会員・連携会員は、次期の新規会員・連携会員の候補者を推薦することができ、選考委員会等を経て最終候補者リストが決まる。この手続からして、自分の後任の推薦はできても、後任を決めることは、ほぼ不可能である。候補者は「優れた研究または業績がある科学者」であることが求められている。その選定に政治が関与することは、本来あってはならないであろう。また会員等に面識がなくても、優れた研究成果を学会等に発表して会員等の目に留まれば、推薦される可能性は十分あり、選考プロセスが閉鎖的であるという批判もあたらない（分野にも依るかも知れないが）。政権は会員が国家公務員であることを殊更に強調するが、「特別国家公務員」であって、給与は出ない。会議出席で手当は出るが、年1-2回程度出ると予算はなくなり、あとはボランティアである。また会員の所属の分布について、政権は私立大学や民間が少ないと批判するが、例えば私の属する化学委員会では、委員は東北大1、東大1、阪大1、広島大1、九大2、分子研1、私立大3、民間企業1であり、「優れた研究・業績がある科学者」を前提とすれば、十分広く分布していると個人的には考える。40代以下の若手は少ないが、確実に在職しており、また会員ではないが学術会議内に「若手アカデミー」が組織されており、「提言」の発表等も行っている。

以上のように、現政権等が行っている主張・批判は、ほとんど（場合により意図的な）誤りであったり、印象操作を狙ったりしたものと私には映る。学術会議が軍事技術等に関する研究に関する慎重な姿勢を示したことをもって、学問の自由を阻害しているなどという議論をすり替えた主張もその一つであろう。この点に関しては、他にも例えば、生命倫理に関する基準など、学術界である程度の方針を示す意義・必要のあることは確実に存在し、政権から独立した組織がそうした活動を行うのは理にかなっていると私は考える。これらは学問の自由の阻害とは方向の異なる議論であろう。今回の任命拒否は全て人文社会科学系の研究者が対象であったが、理科系の分野でも将来このようなことを政権が狙ってくる可能性も考えられ、警戒して対応を考える必要を感じる。政権が学術会議の独立性を無視して干渉するような行為を許しておく、その延長上には某国で起きているような、学問にとどまらず思想や創作の自由が全く無い状況が来たることを危惧する。一方で、学術会議の存在形態について、変革の議論を行う意義がないとは考えていない。より社会貢献に意味のある運営体制を模索する必要はあるだろう。しかしその場合でも、独立性は保つことが重要で、またそのような議論は学術界から出てくるべきもので、政権からの圧力を受けるべきものではない。



分子科学研究所での2年間の思い出



久保園 芳博

(岡山大学異分野基礎科学研究所 教授)

くぼぞの・よしひろ／1991年 九州大学大学院理学研究科博士後期課程化学専攻修了（理学博士）。日本学術振興会特別研究員を経て、岡山大学理学部助手、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所流動部門助手、岡山大学理学部助教授を経て、現在 岡山大学異分野基礎科学研究所教授。専門は物性物理化学、界面物性学。

私が、分子科学研究所の流動部門の助手として分子科学研究所で研究活動を行ったのは、2001年4月から2003年3月の2年間です。2000年当時、私はC₆₀を始めとする炭素系物質の超伝導体合成研究と、金属を含有したフラレン（金属内包フラレン）の生成ならびに物性評価の研究を岡山大学の理学部化学科（所属は大学院自然科学研究科）で行っていました。当時はSPRING-8や高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所のPhoton Factoryを使って、自分たちで合成した試料の構造の研究をEXAFSや粉末X線回折によって実施していました。したがって、全国共同利用施設である大型放射光施設を使った研究を行ってはいましたが、分子研の放射光施設であるUVSORを使った研究は実施しておらず、分子研は縁遠い研究施設でした。

一方、岡山大学の理学部化学科には、当時、分子研OBの先生方も何人か籍をされており、分子研時代の研究の思い出話をよく伺っていました。たとえば、星間分子の研究者である川口建太郎先生は、分子研で技官と助手として勤務され、国立天文台の野辺山宇宙電波観測所で助教授を務められた後に、岡山大学に教授として赴任されていましたし、分子動力学を使った水やクラスレート・ハイドレートの理論化

学研究者である田中秀樹先生は、分子研で博士研究員を経験されており、京大から岡山大の教授として赴任された直後でした。したがって、それらの先生方から伺ったお話で、「分子研は研究費が潤沢にあって恵まれた研究所であるらしい」と時々思いを寄せることはあっても、現実には自分が行けるとは思ってはいませんでした。

はっきりとは覚えていませんが、1999年ごろに、分子研の宇理須恒雄先生が岡山大学を来訪されて、界面科学流動部門への助手ポストの2年間の異動について打診をされました。その際、岡山大学理学部化学科の先生方と理学部の執行部の先生方が、この申し出を好意的に捉えて、私がポストと一緒に2年間分子研に異動することが問題なく決まりました。たぶん、分子研へのポストごとの異動がスムーズにいったのは、宇理須先生が明確にその意義を説明されたことと、前例として、1995年ごろに2年間、化学科の2名の先生方が分子研の錯体化学研究部門に異動され研究活動を行われていたことが積極的に評価されていたのだらうと思います。

私は当時助手でしたが、岡山大学理学部化学科の4年生と大学院生と一緒に研究活動を行っていたので、分子研赴任後は、軸足を分子研に置きながら、

月に1回程度、岡山大の方にも出張して研究活動を行いました。具体的な研究活動としては、これまでの試料作製を中心にした研究スタイルを少し変化させて、電界効果トランジスタ（FET）研究を開始しました。また、宇理須先生の指導を仰ぎながら、当時UVSOR内にあった真空装置を利用して走査型トンネル顕微鏡（STM）を立ち上げていきました。とくに、分子研についてきてくれた学生の1名は総研大の博士課程の学生となって、金属内包フラレンやC₆₀を使ったナノスケールの構造科学研究を、我々と一緒に進めてくれました。また、私はFETについては、全くの素人でしたが、宇理須先生からS.M. Sze著の「半導体デバイス」を読むように勧められて、それを基礎にしてFET研究の基礎を学んでいくことができました。分子研での2年間は、それまでの研究スタイルを転換させていく大きな契機になっていると思います。実際に私は、10年ごとに研究のテーマを修正しており、STMやFETといった新規な研究領域に入れたのも分子研での研究活動を契機にしています。

分子研での印象として今でも覚えていることは、第一に、宇理須先生が私や私と一緒に来てくれた学生や、時々分子研を訪ねて来てくれる岡山大の研究室の学生に非常に暖かく接してくだ

さったことです。また、宇理須先生の研究展開上のフットワークの軽さには感銘を受けました。宇理須先生は、その時期、それまでの表面物理化学の研究を生物科学方面に大きくシフトさせておられたように記憶しています。第二に、当時助教授の見附孝一郎先生と金属内包フラーレンの分子分光学研究を進められたことです。このお二人をはじめとして当時在籍されていた助手の方や事務の方々には色々な場面で助けて頂きました。また、当時理論系の教授を務められていた永瀬茂先生のグループともフラーレンの研究関係のお話をよくさせて頂きました。これも楽しい思い出です。

分子研から岡山大に帰ってきてからは、分子研は少し縁遠くなっていますが、最近になってUVSORの松

井文彦先生とのご縁で、光電子ホログラフィーの研究で分子研を訪ねることが増えてきました（といっても今年は新型コロナの関係で行けてはいませんが）。UVSORの松井先生が立ち上げておられる装置についても、いろいろ教えて頂くこともあって、私たちの作ったトポロジカル絶縁体や、二次元層状超伝導物質の角度分解光電子分光や光電子ホログラフィー研究を更に進めていけたらという思いに駆られております。また、先祖返りで分子研に行くことが多くなってきた矢先に、このような新型コロナウイルスの感染拡大の状況になっていますが、近いうちにまた頻繁にお伺いして、物質開発の方面から光電子研究のお手伝いをできたらと思っております。

私は、家族と一緒に竜美ヶ丘の宿舎

に住んでいましたので、今でも時々岡崎の話をすることがあります。岡崎滞在時は、岐阜から豊橋の範囲のいろいろな地域を巡ることができました。一度は、岡崎についてきてくれた学生達と一緒に、関が原の西軍と東軍の陣地後を回ったりもしました。この文章を書きながらそういった楽しい思い出が少しずつよみがえっております。およそ20年を経て、分子研で活躍される先生方の陣容も大きく変わっていますが、分子研が分子科学研究のメッカであることは全く変わっていないと思います。私の研究活動に大きな影響を与えて頂いた分子研の今後の益々の発展を祈念しております。



分子研出身者が中堅私立大学で教えるということ



永田 央

(名城大学理工学部応用化学科 教授)

ながた・とし／1987年京都大学理学部卒、1992年京都大学博士（理学）。1990年京都大学理学部助手、1995年日本学術振興会海外特別研究員（コロラド州立大学）、1998年分子科学研究所分子物質開発研究センター助教授、1999年総合研究大学院大学数物科学研究科助教授併任、2002年分子科学研究所分子スケールナノサイエンスセンター助教授に配置換え、2013年より現職。専門分野：有機化学、錯体化学、光化学。

分子研を卒業して、もうすぐ8年になります。現在は、名古屋市の名城大学で、有機化学の担当教員として勤務しております。分子研には15年も在籍していて、楽しい思い出がたくさん残っていますが（苦しいこともあったのでしょけどあまり覚えていません）、もはや記憶の彼方に霞みつつあります。今回は、卒業に至った経緯と、現職に

異動してからの様子を、ご報告させていただきたいと思います。

名城大学理工学部で、有機化学の教員を募集していることを知ったのは、2011年の9月でした。この時点で、分子研の助教授／准教授としての在籍期間は14年目に入っていて、転出に向けて努力しなければ、という圧を感じていたところでした。私立大学だと教

育の負担が重いことは当然知っていましたが、私はもともと教育職には興味がなかったので、すぐに詳しい話を聞かせてもらうことにしました。すると、1年半後の2013年4月に新しく「応用化学科」を立ち上げるので、新しく有機化学分野の教員が必要になる、ということでした。新しい組織をゼロから立ち上げるのは面白そうだ、と感じて、

すぐに応募しました。思い返せば、私は分子研に着任した時も、「新しい組織のメンバー」として採用されていました（実は最初に大学教員に採用された時も、それに近い位置付けでした）。そういう巡り合わせなのかもしれません。

採用の内定をいただいたのは2011年12月でした。改組に伴う人事のため、着任まで1年以上の時間がありました。このため、グループメンバーの卒業・転出や、プライベートの引越しなど、余裕を持って進めることができませんでした。普通だと、12月に内定をいただいたとして、着任までの3ヶ月間でばたばたと進めないといけなところですよ。ラッキーだったと思っています。

着任して最初に驚いたのが、とにかく人が多いことです。講義が始まると、キャンパスにわちゃわちゃ学生がいます。当たり前のことなのですが、人口密度の極端に低い分子研のキャンパスに慣れていると、目が回りそうになります。大学に来たんだなあ！と実感します。夏休みや春休みになると、学生数がめっきり減るため、キャンパスは閑散とします。ある意味ほっとする反面、物足りない気持ちにもなります。早く学生が来ないかな、と感じます。

私が担当しているのは、学部1～2年生の「有機化学」の講義・演習と、2～3年生の有機化学実験です（実験は他の教員との共同担当です）。中堅私立大学の一般的な特徴ですが、入学者の学力差が大きく、そのまま上位国立大学の化学科で通用しそうな学生もいれば、高校で「化学」を履修しなかった学生もいます。学力上位の学生でもモチベーションを保てる内容でありつつ、化学の基礎学力が低い学生にも現実的な達成目標を示す、という難しいかじ取りをしなくてはなりません。うまくできているかどうかは、正直自信があ

りません。毎年試行錯誤を続けています。

着任する時に、坂東俊治先生（分子研OB）から「まあ、研究はね、半分は諦めてください」と言われました。それを聞いた私は、「つまり、残り半分は諦めなくていい、ということだな」と勝手に解釈しました。実際のところ、分子研の時とは違い、「自分で実験をする」のはさすがに不可能になりました。そもそも、老眼が進行して、TLCのスポットやフラスコの中身があまりちゃんと見えなかったりします。しかし、毎年4年生が研究室に配属されてきますから、何かしらテーマを与えて研究はしないといけません。そもそも、学生に対しては、1年生の時から「卒業研究ってのはね、世界で誰もやってないことをやるんだよ」と言い聞かせています。だから、「世界で誰もやってない」テーマを毎年5～6個考えることになります。学生に、1年間の卒業研究を通じて「世界で誰も知らなかったことに近づいた」と実感してもらうこと。これが、現職での研究の第一目標だと考えています。

異動したのを機会に、研究の方向も少し見直しました。現状では、卒業生のうち大学院に進学するのは3割前後です。研究室ごと、また学年ごとのばらつきもあります。従って、基本的には「1年計画」でテーマを出すことになります。そこで、あまり長手数の有機合成にチャレンジするのはやめて、なるべく反応評価で勝負しようとしています。研究テーマは、基本的には

分子研の時と同じく「光成型反応を人工的に再現する」ことです。ずっとやりたかった「水の酸化」「二酸化炭素の還元」にも、ようやく手をつけることができました。目標がわかりやすいテーマの方が、学生に興味を持ってもらいやすい、という意味もあります。

研究である以上は、成果を上げなくてははいけません。ここが私は相変わらず下手で、すぐに風呂敷を広げすぎてしまい、收拾がつかなくなります。うまく着地させることが、なかなかできないのです。分子研時代から、ちっとも進歩していません。学生に学会発表させるのが精一杯で、論文が出せていません。もう少し頑張らないといけませんね。

分子研出身者であるにも関わらず、「研究者」としての存在感がまるでないのは、まことに汗顔の至りであります。しかし、分子研で過ごした濃密な時間と、多くの方と出会って得た経験から、次世代の学生に何かしら伝えられるものがあればと思います。今後も、分子研が日本・世界の分子科学研究の核となり、人事交流を通して日本中の若者たちに影響を与える存在であることを祈念しつつ、筆を置きます。



永田研究室（名城大学理工学部応用化学科）のメンバー。



ブラウン運動から水とエタノールの混合に迫りたい



十代 健

(日本大学文理学部物理学科 教授)

じゅうだい・けん／2001年慶應義塾大学大学院理工学研究科化学専攻後期博士課程修了、博士(理学)。ウルム大学(独)にてアレクサンダー・フォン・フンボルト財団博士研究員、日本学術振興会海外特別研究員を経て2004年より分子科学研究所西グループ助手(のち助教)。2011年日本大学文理学部物理生命システム科学科准教授(2014年より物理学科、2016年教授)で現在に至る。

分子研から日本大学に異動したのは、東日本大震災の直後であり、もう10年が経とうとしています。今年はコロナ禍にも見舞われ、ずっと余裕もなく走り続けているのですが、少し立ち止まって振り返ってみようと思います。

まず、異動した文理学部を少し紹介します。人文系の哲学科や英文学科、社会系の心理学科や体育学科、さらに物理学科もある理学系など18の学科が集まった学部であり、定員は1学年1900人に上ります。いわば、一つの学部で、中規模大学といえます。リベラルアーツ学部ともいえますが、現在で文理学部という名称は、日本大学だけしか残っておらず、歴史・由緒ある学部かもしれません。

さて、その文理学部ですが、前身が高等師範科、つまり、教員養成学校であり、今でも、教員養成に力を入れています。東京都の高校教員の採用者の出身大学を調べるとトップは東京学芸大学で、2番目が日本大学、その日本大学の6割程度が文理学部の出身者です。文理学部出身の教員がかなり多くの中学や高校で教鞭をとっているのです。

そんなこともつゆ知らずに文理学部に着任し、研究室運営をしていると、卒業生の中から割合ポツポツと理科教員になっていくのです。ただ、研

究室の中の優秀な学生が理科の教師として巣立っていくと心強く思うのですが、優秀でもない学生も教員に成り上がっているのです。そんな現実を目のあたりにして、日本の科学教育の危機的な状況を感じています。生徒の理科離れ・理工系離れが問題視されていますが、それを防ぐ理科教員が、十分に物理や化学を理解せずに教壇に立っているのです。そんな問題意識を感じてからは、学生が少しでも良い教員になれるようにと、学部の組織である教職センターの運営など、雑務にも動んでいます。いつか、文理学部を巣立った教師に教わった生徒が分子科学の道を志してもらいたいと期待しています。

分子科学の話題となったので、今年のオンライン開催となった分子科学討論会の裏話もここで少し語っておきます。コロナ第1波の真っただ中だったと思いますが、阪大の水野操さんから分子科学討論会をオンラインで実施するから手伝ってとのメールが届き、当時、遠隔講義で疲弊して思考停止の自分は遠い将来の9月の学会なら楽勝だろうと二つ返事で了解したのでした。集められたのは、北河康隆さん(阪大)・安池智一さん(放送大)・根岸雄一さん(東京理科大)・松本剛昭さん(静岡大)・石内俊一さん(東工大)・迫田憲治さん(大阪市立大)の面々でした。

コロナ禍で分子科学の学生の発表の機会を奪ってはいけないという使命感の元、了解の返事をしたものの、遠隔授業は非常に大変で、昼夜問わず、休日返上で、フィードバックという名のものとメール返信地獄に陥り、とてもオンライン学会構想を手伝えるはずもなく、その間は特に水野さんと北河さんにはご迷惑をお掛けしたと思います。阪大のお二人のご尽力で骨格が出来上がる頃、いつもより遅い夏休みを迎えることとなり、しっかりと手伝える時間が取れるようになりました。その後の大変さは、筆舌に尽くし難く書きませんが、分子科学に対する情熱、その情熱を学生にも繋ぎたいとの思いの詰まったメンバーだったと振り返ります。

さて、ここまで10年経っても研究が全然進んでいない言い訳を述べることもできたので、最後に、現在、興味を持っている研究テーマの話をしたいと思います。

ある日、教員養成の盛んな大学の教員として、原子・分子の存在を学生に実感してもらいたいと考え、通常の光学顕微鏡でブラウン運動を観測しようと思い立ちました。最初はチョークの粉を水に懸濁させプレパラートとカバーガラスで挟み、手元にあった光学顕微鏡にセットしただけなのですが、すごく簡単にブラウン運動の不規則な

ランダムな動きが観測でき、原子・分子は見えないのだが、微粒子に分子が衝突した痕跡が顕微鏡を通じて肉眼で観測できることに、しみじみと感動を覚えました。そんな折に、分子研での恩師の西信之先生のお話、水とエタノールはミクロ分子レベルでは混ざっていない、分子の混合に関する興味が、頭を過りました。ブラウン運動を顕微鏡で眺めながら、水とエタノールの混合様式をブラウン運動から解明できないかと思いたったのです。早速、単分散のコロイド溶液を注文することから開始し、実験を始めたのですが、ブラウン運動は確率過程であるという壁にぶち当たります。つまり、結論を引き出

すためには、統計学的に十分な実験データ数が必要だったのです。

そんなとき、九大の関谷研から古川一輝さん（現・有明高専）が助手として赴任してくれ、膨大な実験とデータ解析を開始してくれました。そこで判明したのが、純水中でのブラウン運動は従来のストークス・アインシュタインの理論予測通りにブラウン運動の変位を示すのだが、水とエタノールの混合系では、特にエタノール濃度が低い領域で、理論予測より変位が大きいものでした。コロイド粒子の周りに溶媒和して流体力学半径が大きくなったとすれば、ブラウン運動の変位は小さくなるはずで、実際の変位は逆に大きくな

るものでした。何か異常なことが起こっていることを示唆する結果でした。少なくとも、実験で使用したコロイド粒子の直径1 μm 程度のサイズで水とエタノールの混合系に不均一性が存在することを意味します。

現在も、この水とエタノール混合系でのブラウン運動の異常性について、原因追及をしているところです。まだまだ道半ばですが、千葉大の西川・森田研から蒔田諭さんが着任し、また、研究室に動的光散乱法の装置が入るなど、ブラウン運動から水とエタノールの混合状態の解明を目指し研究をしています。



クワン、なんだか怪しい匂いがする



山本 薫

（岡山理科大学理学部応用物理学科 准教授）

やまもと・かおる／1999年より分子科学研究所分子集団研究系助手。2007年改編により物質分子科学研究領域助教。2013年4月、岡山理科大学理学部応用物理学科へ准教授として異動。

長居した分子研を出所して現在私は岡山県にある岡山理科大学という私立大に勤務しています。中高の理・数の教員を非常に多く輩出しているので西日本出身の方ならその名をご存じの方も多いと思いますが、東日本ではなじみが薄いかもしれません。学会などに参加すると大学名をよく岡山大と読み間違いされてしまいます。たしか一昨年の分子科学会でも間違えられました。岡山大とではネームバリューが違うの

で仕方ない。実際、キャンパスはすぐ近くですしバス路線も同じなので非関係者にとっては似たようなものでしょう。仮にみなさんが、「今日は岡山理大に行くはずだったのに、岡山大に来てしまった！」とやらかしてしまっても、歩いて来れますから慌てなくて大丈夫です。ただし、理大（岡山の人はこちら呼びます）のキャンパスは岡山大の裏山にあるので、夏場なら一汗かかなければならないことは覚悟してください。岡山市には高い建物があまりないので、山の上のこのキャンパスは市内のあちこちからもよく見えます。なのでもし

岡山大に用事がある際には、うちを目印にすれば便利でしょう。ついでに理大にも寄って行って頂ければ嬉しいのです。

岡山理科大学が開学したのは東京オリンピック開催と丁度同じ1964年だそうです。高度経済成長に沸くなかで、私立、それも地方都市にありながら数学と化学の理学部2学科でスタートしたというのですから創業者がいかに基礎研究を重視していたかが伝わってきます。このように研究重視で建学されたためだからでしょう、うちの大学は私学としては珍しくヘリウム液化機を

もっており、所属している応用物理学科でも盛んに利用されてきたそうです。私も期待していたのですが、こちらは着任後すぐに廃止されてしまいました。残念です。経営状況の厳しい折、仕方ない。大事に運んできたPPMSは手放しました。お世話になった薬師先生に譲っていただいた高価な装置でしたが使えないのでは意味がないので。今後も日本財政は悪化の一途でしょうし、ヘリウムに頼らない研究を指向しなさい、という修行なのでしょう。

実際、分子研にいた時のように研究することはできません。どこも似たような状況でしょうが、大学教員、自由な時間はあまりありません。まずはゼミに所属している沢山の学部生全員に卒論発表させることがミッションです。キャンパスの標高のせいだと思われるのですが、難しい研究をさせると学生が山を登って来られなくなる事象が発生します。もちろん遭難者を出さないことが何より大切で、通信が途絶えるような事態は避けなければなりません。遭難予備軍のメンバーでも無理なく登ってこられるようにテーマの重量調整を行ったうえで十分な休息を与えます。ヘリウムの代わりという訳では

ないですが、大学には専任スタッフのいる機械工作室があるので、職業スキルのトレーニングも兼ねてゼミの学生にはとりあえず装置作りを経験させるようにしています。一部の学生は理大の坂をすいすい登り、私自身が使えない3D-CADなども習得していく一方で、坂道に弱い学生の場合、アルミ板1枚作ってずり落ちていくこともありました。ただ、今のところどの学生も最後はなんとか踏みとどまって脱落することなく卒業に至っています。ほとんどのゼミ生が学部で卒業していく状況なので、継続して研究を進める難しさを感じていますが、ありがたいことにここ数年は優秀な学生が院に残ってくれていたこともあり、微小単結晶の電気分極を測定する装置や誘電率の低温測定系などが完成し、充実しつつあるところです。

そうそう、冒頭では岡山理科大学のことなどみなさんはご存じないでしょうと書きましたが、そういえば岡山理大といえば加計学園問題でマスコミを賑わした日本一有名な大学なのでした。2年間近く国会を空転させ、現在まで続く追求ブームを巻き起こしたあの大学こそがうちの大学です。最盛期はキャンパス上空を報道ヘリが舞い、国会議員がアポ無しでやってくる、と何故か事前に警戒警報が発令されるなど山の上は大騒ぎでした。娘の友達の小学生（県外）などは私がそこの職員と聞くなり、私をククンと嗅ぎ回ってから「なんだか怪しい匂いがする」と、したり顔で笑ってみせたのでした。それが笑いのネタで通用する程、当時はうちの学園が注目されていたのです。山本浩史さんからこの作文の依頼を受けさせた際はこのネタで引っ張る気まんまんだったのに、人の噂も七十五日、コロナ蔓延の今となっては忘れかけられた出来事です。一体あれは何だったのでしょうか。都市部の有名大学なら不祥事があっても志願者に影響は出ないでしょうが田舎では影響大です。まったく迷惑な話です。その後、一旦落ち込んだ受験者数は回復してきたのですが、もともと物理がしたいという学生は少なくなっているので、戻った場所は学生数確保に悩む通常の一地方私立大の日常でした。院まで協力してくれた学生も来春は卒業なので研究室も人不足が深刻ですが、また有為な学生を探して協力し、風変わりな電気分極物質の探索が行えればと期待しています。

分子研出身者の今■受賞報告



福井 賢一 大阪大学教授に日本表面真空学会の学会賞

日本表面真空学会は、2018年に日本表面科学会と日本真空学会が合併し、両学会の学術領域をカバーする公益社団法人として発足しました。この度、新学会として2回目となる学会賞を受賞（「走査プローブ顕微鏡による機

能材料表面における化学プロセスの微視的解明」）させて頂きました。コロナ禍の中、受賞式（事前に送られた盾を持った写真を投影）や受賞記念講演もオンラインでの実施でしたが、学生の頃から参加してきた学会であり、大変

光栄で喜ばしい受賞でした。

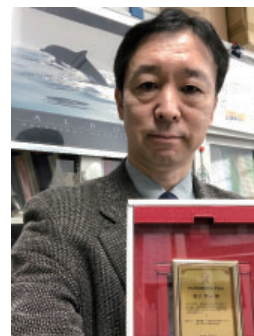
私の最初の研究活動は、金属単結晶を巧みに化学修飾してメタノールの選択的酸化反応を目指すものでした（選択性90%の触媒サイクルを達成）。触媒サイクル中にも修飾構造が保たれる

かが気になり、博士課程でSTMを作製して研究を始めます。助手として着任直後の1995年に、力検出で原子が見える非接触AFM (NC-AFM) が発表され、同手法により、光触媒となるTiO₂表面のAFMによる原子分解能像の取得や、分散して吸着した小分子の画像化に成功しました。さらに、外部からの光刺激にตอบสนองして（水酸基などの）官能基の出し入れができる三脚型分子一つを針とする表面化学種識別の概念を実証しました。

電気化学は、電極電位によってバルク溶液とのポテンシャル差を制御して酸化・還元が起こせること、電気二重層では多数の分子やイオンの局所構造によりポテンシャルの揺らぎが生じることから、局所計測との整合性が極めて良好だと考えていました。そのタイミングでFM-AFM（現在NC-AFMの一般的な名称）により界面の溶液分子

の情報が得られることが示され、電気二重層の局所構造を解析するEC-FM-AFMの開発に着手したのが2007年です。これを用いて、電極と接する電解液中の水分子の水素結合ネットワークの強さが電極電位や電解質の種類により変わること、また、イオンのみから構成されるイオン液体電解液の電気二重層についても理解が進みました。これら電気二重層の分子描像には、分子動力学 (MD) 計算による界面分子のダイナミクスの評価が強力なツールとなりました。

今回の受賞対象からは外れますが、3極系電気化学セルを備えて電気化学界面の光電子による空間分解的解析が可能なScanning EC-XPSや、深紫外のevanescent光により電極界面近傍の電子状態解析が可能なEC-ATR-FUVなど、電気化学界面のOperando観測手法の開発に力を入れています。後者に



福井 賢一（ふくい・けんいち）

1994年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了（博士（理学））。同年より同研究科助手、講師を経て、2002年より東京工業大学大学院理工学研究科助教授、2008年より大阪大学大学院基礎工学研究科教授。2019年より分子科学研究所光子科学研究領域客員教授（兼務）。

については、UVSORを利用した研究を進める計画です。実用的な電気化学デバイス界面の分子描像を得るための研究をさらに発展させて行きたいと思います。

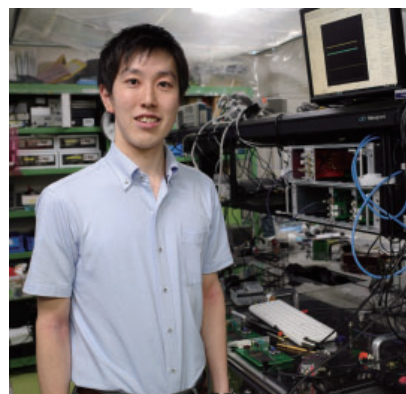


武田 俊太郎 東京大学准教授に文部科学省 令和2年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞

2020年4月、文部科学省より令和2年度科学技術分野の文部科学大臣表彰・若手科学者賞を受賞いたしました。本受賞は、「量子テレポーテーションを用いた光量子コンピュータの研究」に関する業績を評価していただいたものです。業績の大半は、2017年に分子研から転出した後の研究によるものです。しかし、これらの業績に辿り着いたのは、分子研における研究経験や分子研装置開発室の支えがあったからこそです。この場を借りて、大森教授をはじめとする大森グループの皆様、装置開発室の皆様、ならびに分子研時代の生活を支えて下さった全ての皆様に感謝

申し上げます。

私は分子研から転出後、東京大学大学院工学系研究科で光を用いた量子コンピュータの研究に取り組んでおります。量子コンピュータは現在、超伝導回路、イオン、半導体、光など様々な方式で開発が進められています。私は特に光の量子コンピュータのポテンシャルに着目し、それを実用化につながるアプローチを模索しました。こうして、最小規模の光回路でどれほど大規模な計算でも実行できる新型の光量子コンピュータのアイデアに辿り着き、その部分的な原理実証を達成したことが、今回の受賞につながりました。



武田 俊太郎（たけだ・しゅんたろう）

2014年に東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻博士課程を修了。同年に分子科学研究所光子科学研究領域特任助教に着任し、2016年より同助教。2017年より東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻助教および特任講師の職を経て、2019年10月より准教授。

この光量子コンピュータのアイデアには、分子研大森グループで複雑な実験装置を日夜作り上げていた経験が活かれています。大森グループでは原子集団の捕獲・冷却装置やパルスレーザー、データ取得装置まで、動作の時間スケールが異なる様々な装置を精密に時間同期させて動かすシステムを開発してありました。この経験を光量子コンピュータの世界へ持ち込んだ時、光をどのよ

うに制御し、時間同期すれば効率良く計算が実行できるかという私なりの感覚に結び付いたのです。さらに、東大での実験では、共同利用機関として分子研の装置開発室にお世話になりました。特に、豊田様には本実験に必要な同期信号発生装置の開発にご協力いただき、この装置が実験において大いに活躍しました。

私は、2019年10月に独立した研究

室を主宰する機会を頂き、現在、4人の研究室メンバーで新しい実験の立ち上げを行っております。今後も、分子研での貴重な経験を糧に、私にしかできない学術領域の開拓を目指してまいりますので、ご指導ご鞭撻のほどよろしくお願いいたします。

覧古考新26 | 2003年

分子研の研究棟に入ってすぐ左手の101号室は、私にとって思い出の深い部屋である。100m²位の小さい部屋で、岡崎コンファレンスや研究会が開かれ、何度この部屋を訪れたかは数えきれない。部屋には、筆記台付きの椅子が乱雑に置かれていて、演者の息遣いが感じられるほど近くに座ることもできた。演者のすぐそばで、新しい発見の発表を聞いたときの興奮はひと塩であった。演者への質問も近くからできるので、丁々発止のスピード感のある質疑があったように思う。それは、講演会という感じではなくて、ふつうのゼミと言ってよい雰囲気、演者・出席者の気持ちが一体となって、明日からの研究に勇気を持って立ち向かおうという高揚感を共有することもあった。その上、分子研のメンバーの中には、興味のある発表を適宜選択して出席する人も多くあって、101号室の人数は時によって増減するという面白い現象もあった。それは、ある意味では演者の評価につながると考えることもできた。立ち見の人が大勢現れるということになれば、その発表は皆の関心をひきつける何かがあるということであった。ともかく、この部屋での発表は大学のわれわれにとって励みになったものである。

分子研の4半世紀は、私の研究キャリアの2/3以上と重なる。分子研は、目標を同じくする大学のわれわれにとって、立ちふさがり鏡のような存在であった。この鏡に映るわれわれの姿が、分子研に埋没してしまわないよう、また、独自の映像が見えるよう力を尽したものであった。101号室は分子研と大学の接点で、もっといえば、勝負の場であったとも言える。

分子研レターズ No.47「巻頭言：研究棟101号室」(2003年)

土屋 莊次(分子科学研究所研究顧問、東京大学名誉教授)



Nguyen Thanh Phuc

京都大学工学研究科分子工学専攻 講師
(前 理論・計算分子科学研究領域 助教)



分子研での研究生活と感謝

ゲン タン フク／2014年3月東京大学大学院理学系研究科物理学専攻博士後期課程修了、2014年4月～2016年3月理化学研究所創発物性科学研究センター特別研究員、2016年4月～2017年3月同上基礎科学特別研究員、2017年4月～2020年8月分子科学研究所理論・計算分子科学研究領域助教、2020年9月より現職。

2017年4月より2020年8月まで、分子科学研究所理論・計算分子科学研究領域石崎グループの助教としてお世話になりました。3年4か月の間、川合所長、石崎教授をはじめとする数多くの先生方、石崎グループの皆様、山田さん（旧秘書）と赤羽さん（現秘書）などの分子研に携わる職員の皆様の支えにより、充実した研究生活を送ることができました。誠にありがとうございました。

理学系研究科物理学専攻で卒業した私は、分子研に移る前に、分子に関わる研究をする機会がほとんどありませんでした。

原子物理や物性物理の研究を行ってきた私は分子科学の研究を始めたときに、様々な困難と直面しましたが、川合所長と石崎教授の激励をはじめ、石崎グループの皆様方が、研究から事務的な部分まで、本当に温かく、様々な面で支えてくださいました。こうした支えがあって、私は分子系における量子ダイナミクスの制御という研究テーマに励むことができました。そして、この研究の業績は評価されて2020年の第9回自然科学研究機構若手研究者賞を受賞しました。深く感謝しております。

私は2020年8月末に岡崎を離れまして、現在京都大学工学研究科分子工学専攻におります。分子研にいた時と違って、今は研究だけに集中することができなく、授業などの教育活動も担当しています。分子研で培った多くの経験を活かして、今後も研究活動を精力的に進めていきたいと考えております。今後とも何卒宜しくお願い申し上げます。

塚本 寿夫

神戸大学大学院理学研究科生物学専攻 准教授
(前 生命・錯体分子科学研究領域 助教)

オーファン助教の延長戦

つかもと・ひさお／2006年に京都大学大学院理学研究科生物科学専攻で博士号を取得後、大阪市立大学・Oregon Health & Science Universityで博士研究員、分子科学研究所で特任助教・助教として勤務した後、2020年6月から現職。2017年10月から2021年3月まで、さきがけ「光操作」領域研究者。京都・大阪・神戸の「三部」を制覇(?)できてうれしいです。



9年近く（も）お世話になりました分子研から2020年5月いっぱいまで転出しまして、6月に神戸大学大学院理学研究科生物学専攻に着任しました。

異動後しばらくはラボ立ち上げなどに専念していましたが、10月から講義や実習の担当がはじまり、大学教員としての仕事の洗礼を日々受けています。

私は2011年に（旧）古谷グループの特任助教として着任した後、2014年に助教に採用していただいて、光受容タンパク質やイオンチャネルの分光

解析や機能特性の解明に取り組みました。特任助教から助教に採用された際には、「6年ルール」をどう運用するかが議論となり、特任助教採用期間の半分を加算することに（私の場合は）なりました。ところが、私の力不足で「6年ルール」期間内に転出することができず、2018年10月に古谷先生が名古屋工業大学に異動されてからは、「延長戦」を「オーファン」状態で過ごしました。古谷先生が転出された際には、どうしたものかと思いましたが、川合所長からは「いい研究して、いいところに転出したらいんじゃない」と温かい(?)言葉を頂戴し、秋山先生には「今攻めなくていつ攻めるのですか?」と激励(?)され、自分なりに踏ん張りまして、幸運なことに神戸大

学に採用していただきました。

分子研にいた頃は「どうやって転出しようか」と考える毎日でしたが、いざ転出すると、授業や会議で一日が終わることも多く、研究に専念した分子研での日々を懐かしんだりします。また、生理研の久保義弘先生、基生研の上野直人先生・酒井祐輔博士（現大阪市立大学）、総研大の蟻川謙太郎先生と共同研究できたのは、分子研・総研大にいたおかげと思っています。

分子研では、古谷先生に研究指導や論文作成などで、言葉で言い尽くせないほどお世話になるとともに数え切れぬご迷惑をおかけしました。古谷先生が異動された後は、川合所長から機会ごとに発破をかけられ、秋山グループの皆様にはラボミーティングに快く

加えて頂き、難しさのあるオーファン生活を刺激的なものにして頂きました。また、技術課の繁政先生・内山係長には何かと目をかけていただき、真夏に実験棟屋上の芝刈りをお手伝いしたのはいい思い出です。古谷グループの皆さんには本当にお世話になり、とくに古谷先生異動後も私の研究を支援していただいた本村さんと稲葉さんにはお礼の言葉もありません。またオーファン助教になった私の会計処理や出張手続きなどをしていただいた、清水さん・増田さん・萩原さんに深くお礼申し上げます。お礼だけで規定字数になりましたが、分子研のこれまで以上の発展を祈っております。

森 俊文

九州大学 先端物質化学研究所 准教授
(前 理論・計算分子科学研究領域 助教)

分子研での平和な日々と激動の2020年

もり・としふみ／2005年3月京都大学理学部卒業、2010年3月京都大学大学院理学研究科博士後期課程修了、博士(理学)。Stanford大学、Wisconsin大学Madison校での博士研究員、日本学術振興会海外特別研究員を経て2013年11月より分子科学研究所・助教。2020年10月より九州大学先端物質化学研究所准教授(現職)。九州大学大学院総理工学府(物質理工学専攻)を兼任。



2013年12月、分子研への着任は、久々となる日本での生活にワクワクと懐かしさを感じながらのスタートでした。同時に、研究所にいくからにはきちんとした成果を出さねばという気負いもあったと記憶しています。始まってしまえば、学生の出入りが少なく時間の流れがゆっくりに感じられるので、着実に上がっていく子供たちの学齢を見ては過ぎてしまった時間に時折焦りを覚えるということを繰り返す日々でした。

研究の方は、着任前年に一大決心を

して研究分野を大きく変えたため、実績ゼロからのスタートでしたが、その分果敢に(無謀にも?)タンパク質のフォールディングや酵素反応など古典的な研究テーマに挑むことができ、ダイナミクスという切り口から自分の色を出した研究を展開できたかと思っています。さらに着任早々に秋山教授らと時計タンパク質に関する共同研究を始める機会にも恵まれたことで、実験データを理解するのに悪戦苦闘しながらも、楽しく刺激的な時間を過ごせました。これらの研究をかなり自由にや

らせていただけたことを斉藤教授には深く感謝していますし、またそういう文化が根付く分子研の環境は、今の時代改めて貴重だと感じます。

研究以外では、飲み会、テニス、卓球、優勝も経験できたソフトボール大会と、思い返すととても充実していたと改めて思います。また、分子研のコンパクトな環境のおかげで気づけば顔見知りが増え、自分の研究では直接関わることがなかった多くの若手研究者の仲間ができたことが強く印象に残っています。加えて官舎住まいだったおかげで、

子供や家族を通して、分子研以外にも基生研や生理研の研究者の方々とも知り合え、本当に人との出会いに恵まれた日々でした。研究者としてはそろそろ出て次のステップに進みたいと思いつつ、岡崎での生活は公私ともにとても充実した日々だったので、出所できたことはとても喜ばしいことですが、岡崎を去ることに寂しさも感じています。

2020年からは一転して新型コロナの世界的大流行で、どこも大混乱に陥っています。そんな中9月末にひっそり

と分子研を去り、九州大学先端物質化学研究所へとやってきました。新天地では、新たな研究室を立ち上げる機会に恵まれ、ずっと使われていなかった部屋の改修からスタートし、文字通りゼロから研究室を作り上げている日々です。私がいる筑紫キャンパスは九州大学のメインキャンパスではないため、学生も少なく静かであり、分子研と似た環境です。新天地ではまだ居心地の悪さを感じますが、また充実した日々を過ごせるよう、今後とも一歩ずつ進んでいきたいと思います。

最後になりましたが、大峯、川合両所長をはじめ、斉藤教授、秋山教授、秘書の千葉さんおよび斉藤グループの皆さんには大変お世話になりました。また、理論フロアの皆様や様々な活動を通してお世話になった多くの皆様には、名前を挙げきれませんが深く感謝しております。どうもありがとうございました。

覧古考新27 | 1998年

数年前、つつじの季節にカナダNRCの研究者が訪ねてきた。彼は、研究棟のわれわれの部屋からの眺めに飽くことなく見とれていた。オタワの夏はとくに美しいが、その地に住む人からの称賛である。この称賛は赤松先生に負うところが大きいと思う。先生は環境整備に大変気を使っておられた。実験棟の化粧タイルを選ぶのに多数の見本をとりよせ、旧図書館前でためつすがめつしておられたお姿が思い出される。長い時間保存されるものには贅沢と誇られる程金を使えといっておられたように思える。貧困な環境に馴染むことは恐ろしい。いとも容易に同化し、やがては精神の高揚まで失われてしまう。

.....

先生は、基礎研究といえども社会的ニーズと無関係ではありえないという主張をお持ちで、このニーズを先見的に見通すことが基礎科学を担う者に課せられた重大な責務であると考えておられたようである。早くからエネルギー問題に関心を寄せられ、分子科学研究所が特別研究の一課題としてこれをとりあげたことを誇りにしておられた。「昨今は猫も杓子もエネルギーを口にする」と後年苦々しげに言っておられたのを記憶している。次の時代の社会的ニーズは何とお考えだったのだろうか。一度先生からゆっくりとお考えをきかせていただきたく思っていたのに残念である。

.....

赤松先生、長倉先生と共に過ぎた分子科学研究所の創設期は終わった。先生方の築かれた土台の上に研究所の飛躍が始まろうとしている。しかし折にふれ「創設期」の精神を省み、そこから多くの教訓を再び学びとりたいものである。

分子研レターズ No.19「赤松秀雄先生とともに過ぎた6年間」(1988年)

廣田 榮治 (分子科学研究所教授)



Okazaki through the eyes of a Frenchy

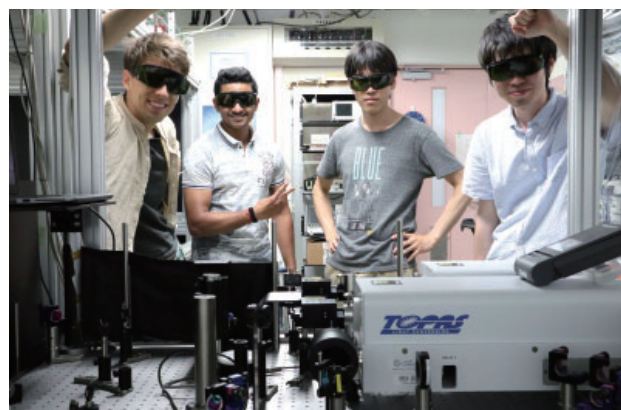
Sylvain DE LESELEUC (Assistant Professor)

Department of Photo-Molecular Science

It has now been more than one year and a half since I arrived in Okazaki in March 2019 to work in the group of Prof. Ohmori. This was my second time moving to Japan after a one-year stay in 2015 for my master thesis on quantum teleportation of light at the University of Tokyo. I deeply enjoyed this first experience of a lifestyle in Japan. In between, I had been living in Paris and completed my PhD thesis on building a rudimentary quantum machine of a few tens of qubits (quantum bits) made of individual atoms trapped in optical tweezers. As you might have guessed, I specialize in the field of quantum and atomic physics and I love to build and run experiments. So, when I learnt that Prof. Ohmori was starting a new experiment in this field at IMS, I did not hesitate much before jumping in the plane to come back to Japan.

Moving in was made frankly easy by the administration here. I remember having more trouble when I previously moved back to France, my own country!, than in Japan despite being unable to read the obscure administrative documents. What I expected to be complex procedures to get a visa or a health insurance card were turned into simple formalities with the help of the administration at the Institute and our group secretary. Many thanks to them!

At work, things got in motion immediately. The other team members were already here or arrived at the same time, and we quickly learnt to appreciate each other. The working conditions are ideal with everything an experimentalist needs to build stuff: reliable infrastructure (not a single power, air-conditioning or IT failure since I arrived), a renovated mechanical workshop, a helpful crew of mechanics, electronics or laser experts, and an efficient purchase section. With colleagues and students from various depart-



The leftmost person is the author.

ments, we also started a weekly one-hour Python discussion club: everybody from beginner to experts is welcome to join us.

After spending quite a few years in scientific campuses exiled in the middle of the countryside, I really appreciate to be located in a city center. Our buildings are just a five-minute walk away from the train station and its street of restaurants, izakaya and karaoke: perfect to celebrate the various lab events or to simply break the routine by having a lunch outside with colleagues. To clear the head after a working day, I enjoy joining the IMS badminton club, or have a tennis game (or even a futsal) on the campus court.

For the week-end, after days in the darkness of a lab, I just want to go outside and explore the region around Okazaki. On its east side, the city gives place to wooded hills where the Oto river, running through Okazaki, take its source at the Kuragari gorge: a perfect spot to chill during the summer. On the south side, within an hour you can hit the ocean and its beaches either at the Chita or Tahara peninsula that encloses the Mikawa bay. Of course, jumping in the Shinkansen or the highway quickly bring you anywhere in the Chubu (Central Japan) area from the National park of Ise-Shima to the Japanese Alps. I cannot list all the places that I want to visit, but I hope to find the time to enjoy them.

アウトリーチ活動

オンライン市民公開講座 驚きの発見

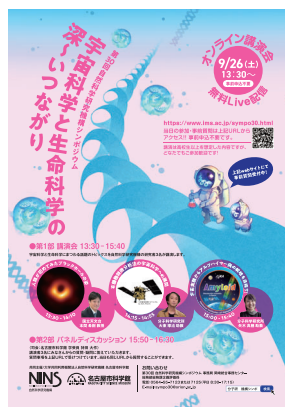
市民向け公開講座として、分子研では年4回分子科学フォーラムを、自然科学研究機構は機構シンポジウムを開催しています。機構シンポジウムは機構本部と各研究所が持ち回りで企画を行っているのですが、2020年9月開催分は分子研が担当でした。どちらもまだコロナがなかった2019年から準備を進めていました。講演者、開催日を決め、告知準備を進めているところにコロナが広がり始めました。その頃はすべて中止の方向で動いていましたが、4月頃からZoom等のweb会議が当たり前となり、開催計画中の講演会をすべてwebで開催することに決めました。

とは言え、Zoomも始めたばかりで、ベストな配信方法も分かりません。2020年9月開催の機構シンポジウムは展示ブース制作会社が「配信もやります！」とのことでしたのでお願いしました。ところが……、制作会社も初めてのことでリハーサルは悲惨なものでした。各地にいる3名の講演者と司会者をZoomでつなぎ、1つの動画にして配信することにしたのですが、トラブル続きで当日のリハーサルでもまたトラブル……。その場にいるのも怖いくらいでしたが、本番は大過なく終わりました。無事終わった喜びと想定外の参加者数（本サイト累計約1800人、ニコニコ動画約18000人で機構シンポで過去最高）で終わったときはスタッフ一同で拍手！司会進行役を名古屋市科学館の学芸員にお願いしたことで、進行は大変スムーズ、最後のパネルディスカッションも上手にまとめてくださり、参加者も講演者も満足度の高いシンポジウムとなりました。

このシンポジウムはどなたでもお気軽にご参加いただけることを第一に考え、事前申込不要としました。アンケート結果でこれが思いのほか好評でしたので、12月開催の市民公開講座も事前申込不要、YouTubeライブ配信としました。予算の制約により、台本まで自前で作成し配信まで行いましたが、トラブルなく無事ライブ配信を行えました。また、機構シンポジウムのノウハウが活かされ、フォーラムでも過去最高の参加者数（累計527名、常時250～260名）となりました。

これらの講演会のアンケート結果で驚いたことは、どちらもオンライン講演会が良いとの回答が8割前後で、視聴者も大学生や社会人等、これまで参加が少なかった若い層が7-8割を占めたことです。また、資料がよく見えて良かった、科学のセミナーをもっと聞きたい等のコメントもあり、web講演会のニーズがあることが分かりました。

告知方法をもっと開拓していけば、オンライン講演会により多くの集客が見込めそうです。つまり、この機会は、全国に分子研の名を広める大きなチャンス（学生に対しても）です！全国への告知は簡単ではありませんが、地道に告知先の開拓を続けていきたいと思います。最後になりますが、ご協力いただきました講演者をはじめ、関係者の皆様に心より感謝申し上げます。（広報室 記）



告知ポスターのデザインは今まで以上に力を入れました。
(左) 機構シンポジウムポスター (右) 分子科学フォーラム

ご参考まで—広報活動一覧

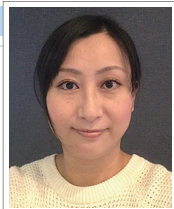
ポスター・チラシ配布（全国（SHS校、分野が近い大学・高専、大学生協、科学館）岡崎市（公共施設、中学校、高校等ほか））
東岡崎駅看板、新聞掲載（全国紙には掲載が難しく、地方版に掲載）
メールマガジン配信（分子研約500件、自然科学研究機構約1100件ほか）
フェイスブック広告（若い層に情報が届きやすい）
科学イベントサイトに登録、ニコニコ動画での告知



2020年7月1日着任

内 田 真理子

うちだ・まりこ

機器センター
事務支援員

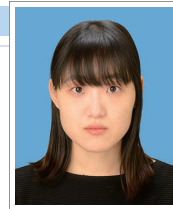
2020年7月より大学連携研究設備ネットワークの業務を担当させていただいております。学生時代や企業でも少しだけですが研究に携わっていた事があり、機器利用に関わる業務に就かせていただけて嬉しく思っております。

事務についてはほとんど未経験ですが、周りの方々にサポートいただきながら取り組んでいます。

今後とも精進して参りますので、どうぞよろしくお願いいたします。

2020年8月16日着任

NAM, Dayeon

生命創成探究センター
創成研究領域 特任研究員

2020年に北海道大学大学院総合化学院で博士（理学）を取得後、8月より青野グループの特任研究員としてお世話になっております。博士課程在籍時DNAタンパク質におけるヘム結合の機能解析を、主に分光学で行ってまいりました。現在でも関連する研究を行いながらも、生体内で鉄以外の役割もタンパク質の構造及び機能の研究を行い、研究所に貢献したいと思います。よろしくお願い致します。

2020年10月1日着任

三 輪 邦 之

みわ・くにゆき

理論・計算分子科学研究領域
理論分子科学第一研究部門 特任助教

2014年に大阪大学で学位を取得後、理化学研究所、カリフォルニア大学、ノースウエスタン大学で研究員として勤務し、2020年10月に南谷グループの特任助教に着任しました。光とナノ物質の相互作用、開放量子系でのダイナミクスに興味を持ち、単一分子分光やプラズモニクスに関する理論研究を行ってきました。分子研ではこれまでの経験も生かしつつ、新しい研究展開にも挑戦したく思います。どうぞよろしくお願いいたします。

2020年10月7日着任

VISOOTSAT, Akasit

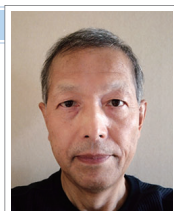
生命・錯体分子科学研究領域
生体分子機能研究部門 特任研究員

I received my Ph.D. degree from the Department of Functional Molecular Science, School of Physical Sciences, SOKENDAI, in September 2020 under the supervision of Prof. IINO. From October, I continuously worked in the same group as a postdoctoral fellow. My theme research is engineering the molecular motor proteins and observing their motion behaviors based on single-molecule imaging analysis. I am enjoying doing research here as the completeness of the facilities and research environment of IMS.

2020年11月1日着任

菅 沼 光 二

すがぬま・こうじ

装置開発室
技術支援員

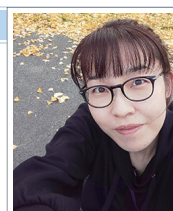
2020年11月1日より装置開発室の技術支援員としてお世話になっております。岡崎市で生まれ岡崎市で育った私ですが、この度こちらの機構で働く事が出来る様になるとは夢にも思いませんでした。

25年程、プラスチック射出成形金型の設計製作に携わってきました、その経験を生かしお役に立てられるよう業務に邁進していきたいと思いますのでどうぞよろしくお願い致します。

2020年11月16日着任

中 貝 梢

なかがい・こずえ

生命・錯体分子科学研究領域
錯体物性研究部門 研究支援員

2020年11月より草本グループの研究支援員としてお世話になっております。高校3年間を過ごしたこの東岡崎駅界隈に再び戻ってくることができ、懐かしさと嬉しさでいっぱいです。大学卒業後しばらく離れていた有機合成の世界に再び飛び込むチャンスにいただけたことに感謝しながら、早くグループのお役に立てるように努力し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。



2020年12月1日着任

岡崎圭一

おかざき・けいいち

計算科学研究センター
准教授

2020年12月1日付けで、計算科学研究センターの准教授に着任しました。2016年に特任准教授（若手独立フェロー）として分子研に来ましたが、さらにお世話になることになりました。専門は生物物理で、分子シミュレーションを始めとした理論・計算手法で、生体分子マシンの機能発現ダイナミクスの研究をしています。共同研究等を通じて研究の幅を広げたいと思いますので、よろしくお願いいたします。

覧古考新28 | 1995年

分子研の特徴の一つも組織が比較的小さいことだと思います。小さな組織には、運営上の小回りが利くことのほかにも、構成員のお互いがいろいろな面で融通しあいながら仕事をできること、構成員同士の密接なコミュニケーションが可能なことなどの長所があると思います。そして、分子研はこれらの長所を活かしながら発展してきたと思います。ところが私が在籍していた間に、これらの長所を活かそうという雰囲気が失われてきたような気がします。たとえば、他のグループの研究に対する関心の低下、共通利用の施設や装置を大切に融通しあって使おうという意識の低下などが感じられます。これらの原因は、分子研の組織が大きくなってきたことなののでしょうか。それとも、所員の世代が変わってきたことなののでしょうか。

人の入れ替わりが激しい分子研では、私のように8年半もいると古株になってしまいます。10年もたたないうちに構成メンバーがほとんど入れ替わってしまうのですから、20年30年勤続の教官が珍しくない大学とは違って、分子研は本質的に変化してゆくものだと思います。伝統や慣習にとらわれることなく、新しい手法で新しい分野に切り込んでゆけることは、分子研が世界の一流の座に居続けるためにはきわめて重要なことだと思います。しかし同時に、せっかくの良い伝統や慣習があつと言う間に失われる可能性もあるように思えます。先人たちが築いてきたものを越えて進んで行くためには、良いものは守ってゆくという努力を他の組織以上にしなければならないと思います。変わりながらも良いものは守ってゆくという姿勢が、今後の分子研発展の一つの鍵になるのではないのでしょうか。

分子研レターズ No.33「分子研を去るにあたり：変わりゆく分子研によせて」（1995年）

高柳 正夫（東京農工大学助教授）

共同利用研究ハイライト

ペリレン有機半導体の開発と有機太陽電池への応用

高橋 雅樹 静岡大学工学部 教授

1. はじめに

ペリレン類は、有機半導体開発の黎明期から注目されてきた最もシンプルで実力のある色素化合物である。Tangや平本等の有機薄膜太陽電池の先駆的開発研究において、アクセプタ材料として活用された歴史から(図1aの1と2)^[1,2]、多くの研究者がその誘導体開発に尽力してきた。このような理由で筆者の研究室でも、研究テーマの一つとして、この化合物群の合成研究に取り組んでいる。本稿では、共同利用研究制度を利用して、筆者の培ってきた合成技術が平本研究グループとの共同研究を通じて有機太陽電池の応用研究に発展した経緯とその成果について紹介する。

2. ペリレン誘導体の合成

ペリレン誘導体の中でも、構造の両末端をイミド基で置換したペリレンジイミド(PDI)は、化学的安定性に優れたバンド伝導性を示すn型有機半導体の最有力候補として認知されてきた。有機太陽電池としては、非フラーレンアクセプタ(NFA)として利用され、そ

の機能性には高い信頼がある。このようなPDIに構造修飾を施せば、より高性能な有機半導体を開発できると思われるが、実際はそれほど簡単ではない。ペリレンの平面的な構造は過剰な自己凝集を引き起すため、その溶解性が著しく悪いというのが、この化合物への一般常識である。ペリレン骨格の修飾には、まず官能基を導入する反応活性点の位置・数に関する制御が基本となるが、この具体化が意外と難しい。始めにペリレン環の臭素化を実行するのが一般的なアプローチだが、分離困難な二臭素化物の位置異性体が混合物として生成してしまう。ペリレン環の一方所だけを効率良く臭素化できれば、誘導体合成を完全制御できるのだが、そのような合成法は文献調査を重ねても全く見つからない。あれこれ調査のうえ探し出した文献^[3]を参考に、使い勝手の良い合成中間体として筆者が日頃利用していたペリレンエステル体に対して臭素化してみたところ、目的とした一臭素化物(図1aの3)が83%もの高収率で生成した^[4]。さらに反応条

件を探索すると93%にも改善され、ペリレン誘導化への手応えと自信を得た。

3. 有機太陽電池への応用研究

この合成技術のデモンストレーションとして、複雑な化学修飾を行ったPDI合成を実行した。未知のペリレンを合成できる興味は尽きないが、一方で、継続へのモチベーションが必要となった。有機太陽電池への応用研究を実施するための共同研究先を探し求めたところ、筆者の浜松からほど近い岡崎の分子研に、この分野で第一人者の平本昌宏教授がおられることが分かった。直談判のすえ、平本先生と同グループの伊澤誠一郎先生の寛大なご理解とご協力をいただき、独自合成のPDI(図1aの4)で有機太陽電池を作製・性能評価を実施したところ、過去最高に近い開放電圧値(V_{OC})との秀でた発電性能が観測された(図1b)^[5]。PDIの構造修飾がLUMO準位を引き上げて高いデバイス性能をもたらしたことを目の当たりにし、有機合成技術がエネルギーデバイス開発に大きな効力を発揮し得

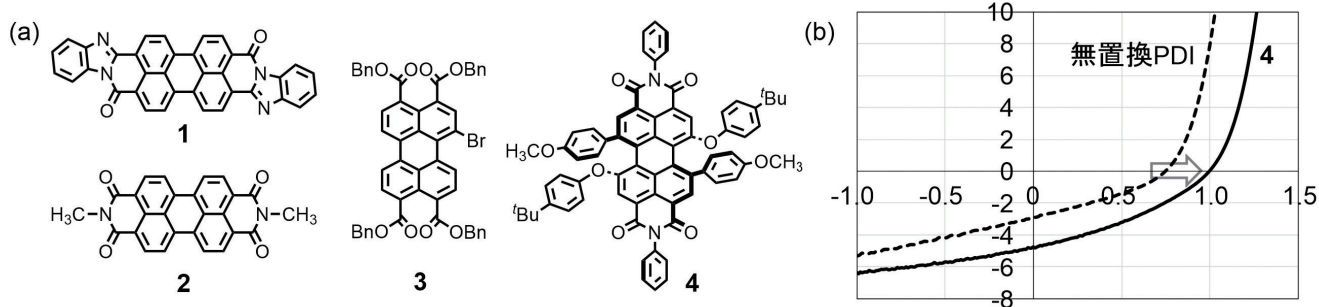


図1 ペリレン有機半導体の分子構造と有機太陽電池デバイスの性能評価結果。

ることを実感した。このような顛末を経て、独自合成技術を活用したペリレン有機半導体の共同開発を進め、その成果として、2件の特許を共同出願するに至っている^[6,7]。

4. おわりに

上記の共同研究成果については、分子研と静岡大での同時プレスリリース(2019年10月19日付)にて広くアピールを行い、科学新聞で報道されるなど良い反響をいただいた。ペリレン

は筆者等に実り多き研究展開をもたらただけでなく、よき共同研究者との出会いという、実に大きな喜びを与えてくれた。最後に、筆者からの突然のお願いを快く引き受けてくださった平本先生・伊澤先生には心よりお礼申し上げますとともに、特許共同出願に際して、産学連携係の担当者様には大変お世話になりましたこと、この場を借りてお礼申し上げます。



たかはし・まさき

1997年に千葉大学大学院自然科学研究科にて博士(理学)取得後、Stanford大学博士研究員を経て、1998年分子科学研究所で日本学術振興会特別研究員、1999年静岡大学工学部助手、2007年同助教、2009年同准教授、2015年より現職。専門は有機光化学。

参考文献

- [1] C.W. Tang, *App. Phys. Lett.* **48**, 183-185 (1986).
- [2] M. Hiramoto, et al., *App. Phys. Lett.* **58**, 1062-1064 (1991).
- [3] K. Tanemura, et al., *Chem. Lett.* **32**, 932-933 (2003).
- [4] M. Takahashi, et al. *J. Org. Chem.* **83**, 624-631 (2018).
- [5] K. Fujimoto, S. Izawa, M. Hiramoto, M. Takahashi, et al., *ChemPlusChem* **85**, 285-293 (2020).
- [6] 特願2020-115744 (高橋, 平本, 伊澤, 藤本)
- [7] 特願2020-115747 (高橋, 平本, 伊澤, 藤本)

共同利用研究ハイライト

温度変化によるBi単結晶のトポロジカル相転移

大坪 嘉之 大阪大学大学院生命機能研究科/理学研究科 助教

結晶内部(バルク)は絶縁体である一方で、バルク電子状態の対称性により保護された金属的な電子状態がその端(表面・エッジ)に現れるトポロジカル絶縁体をはじめとしたトポロジカル物質に関する研究は近年の物性物理学における重要なテーマの1つである^[1]。トポロジカル表面状態(TSS)はバルク電子状態の対称性により保護されるため、表面の局所的な欠陥等に対しては鈍感である一方で、外場(磁場・圧力等)によりバルク結晶全体の電子状態を変化させることにより生成/消滅が可能である^[2]。この性質から、TSSはスウィ

チング可能でありながら堅牢な新規伝導チャンネルの候補としても注目を集めている。

本研究では我々にとってもっとも身近な相転移の制御パラメータである温度を利用したトポロジカル相転移の可能性をビスマス(Bi)単結晶を用いて検証した。Biは大きなスピン軌道相互作用を持ち、多くのトポロジカル物質の構成元素として用いられている^[3]。一方その単結晶のトポロジカル相については現在も議論が続いている。Biに10%程度のアンチモン(Sb)を混ぜたBi_{1-x}Sb_x (x ~ 0.1)合金は初めて実験

的に観測された3次元トポロジカル絶縁体である^[1, 4]が、Bi単結晶は理論計算によれば通常の半金属であるとされていた^[1, 4]。しかしその表面電子状態を角度分解光電子分光(ARPES)により詳細に観測すると、その分散はむしろトポロジカル物質(トポロジカル半金属)の特徴を示すことが明らかになった^[5]。このように理論計算と実験の結果がずれ、検証が困難になっている1つの原因は、Bi単結晶が通常半金属とトポロジカル半金属の境界付近に位置する物質であり、20 meVに満たない小さなバルク直接ギャップの反転によ

リトポロジカル相転移を起こす物質である点にある。この特徴は逆の観点からは利点とも言え、Bi単結晶はトポロジカル相転移点を挟んだ横断的研究を容易に行える物質と考えることもできる。20 meV というエネルギー幅は室温でのフェルミ分布関数の広がりよりも小さく、温度変化によるわずかな格子歪みや電子格子相互作用の変化等^[6]による変調で十分にバルクバンドの反転は可能であるため、Bi単結晶における温度を利用したトポロジカル相転移の制御は十分に期待できる現象であった。

図1(a, b) は実際にBi単結晶の(111)清浄面について、温度を掃引しながらその表面電子状態をARPESにより測定した結果である。濃色部分が光電子強度に対応しており、低温(30 K)と高温(400 K)のどちらでも明瞭なバンド分散が観測できている。さらに、低温側では $\bar{M}$ 点の近傍で束縛エネルギーの浅い側のバンド(S1)がほぼ平坦に分散し、上に凸な下側バンド(点線)とは離れているのに対し、高温では下向きの直線的な分散を示し、その下端が下側バンド(点線)と接してディラック点を作るような分散の様子の変化が明瞭に観測された。これは図1(c)に模式的に示したような低温のトポロジカル半金属相から高温の通常半金属相への相転移において予想される表面バンドの振る舞いと一致しており、温度変化によりBi単結晶がトポロジカル相転移した様子を捉えたものと解釈できる。一見するとディラック点がある「方」の相が通常半金属であるというのは奇妙に映るかもしれないが、これはS1, S2両表面バンドが表面ブリルアンゾーン内の別の点($\bar{\Gamma}$)でも縮退しているためである(こちらについては顕著な温度変化はない)。表面バンドが1か所で縮退し、連続的にバルク価電子帯と

伝導帯を繋ぐトポロジカル絶縁体・半金属相(図1(c)上側)と、2か所で縮退してバルク価電子帯・伝導帯を接続する連続的な表面バンドが無い通常絶縁体・半金属相(図1(c)下側)との違いであるとみれば今回の結果は矛盾なく理解することができる。

本研究では以上のように温度によるトポロジカル相転移を示唆する表面電子状態の変化を追跡することができた^[7]。この電子状態変化の起源について表面原子構造・電子格子相互作用などの可能性を踏まえてさらなる検証を進めている。

最後に、共同研究者各位にお礼申し上げます。特に本研究は分子科学研究所のナノテクノロジープラットフォーム事業の支援を受け、田中清尚准教授・

出田真一郎助教、山根宏之助教(当時)との共同研究により可能になったものであり、また大阪大学の木村真一教授には多くのご指導をいただきました。ここに感謝いたします。



おつば・よしゆき
1984年生。2012年京都大学大学院理学研究科博士後期課程修了、博士(理学)。
Synchrotron SOLEIL 研究員を経て2014年より現職。主に角度分解光電子分光を利用し、トポロジカル物質等の低次元電子状態に関する研究を行っている。

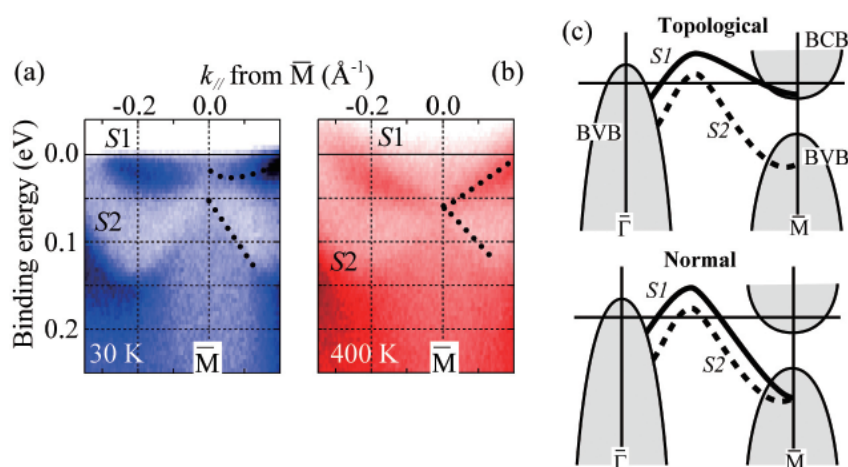


図1 (a, b) ARPESで観測したBi(111)単結晶清浄面のバンド構造^[7]。(a) 30 K, (b) 400 K。
(c) Bi単結晶のトポロジカル半金属相および通常半金属相におけるバンド構造の予想図。

参考文献

- [1] L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. B* **76**, 045302 (2007).
- [2] S.-Y. Xu et al., *Nature Phys.* **8**, 616 (2012).
- [3] H. Zhang et al., *Nature Phys.* **5**, 438 (2009) 等.
- [4] D. Hsieh et al., *Nature* **452**, 970 (2008).
- [5] Y. Ohtsubo et al., *New J. Phys.* **15**, 033041 (2013) and S. Ito et al., *Phys. Rev. Lett.* **117**, 236402 (2016).
- [6] I. Garate, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 046402 (2013).
- [7] Y. Ohtsubo et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **52**, 254002 (2019).

施設だより

電子ビーム描画装置について

装置開発室 石川 晶子（技術支援員）

今回紹介する電子ビーム描画装置（ELS-G100 エリオニクス社製）は、基板上に塗布した電子線レジストに対して、PC上で作成した任意パターンを電子ビームにより露光するためのリソグラフィー装置である。装置開発室のリソグラフィー装置と言えば、超高圧水銀灯を用いるマスクアライナー装置、2013年度からは405 nm LEDを光源とするマスクレス露光装置を保有しているが、さらなる微細化の要望に対応する為、本装置を導入するに至った。

本装置はポイントビーム型の電子線描画装置であり、大電流と最高100 kVの加速電圧により、最小2 nm以下のビームが安定して得られ、市販レジストにナノスケールの微細パターンを描画することが可能である。ただし、細く絞った電子線を走査してパターンを順番に描いていく為、一度に走査できる領域が限られ、その領域（フィールド）は100 kVの時に最大1000 μm であり、これを超える大面積パターンの描画をする際は、試料ステージの

位置制御を利用したステップアンドリピート方式のつなぎ描画を行う。ステージ位置制御の為、XY軸に読み取り分解能0.3 nmのレーザー干渉計を用いることで、高精度のつなぎ精度を実現しており、1000 μm フィールド使用時のつなぎ精度は ± 25 nmである。またZ軸にはレーザーハイトセンサーを搭載しており、試料の種類にもよるが読み取り分解能0.1 μm で高さを制御しながら描画することができる。それから、あらかじめ基板上に作製したマークを読み取ることで、重ね合わせ描画にも対応しており、1000 μm フィールドを重ね合わせする際の精度は、 ± 35 nmである。描画パターンの設計には、付属のCADソフトを備えているが、その他にDXF・GDS IIに対応しており、これらの事前に用意した設計ファイルを付属のCADソフトで変換することにより、描画用データとして使用する。BMP形式の画像ファイルの取り扱いも可能である。また、作製した試料を観察する際は、SEMモードでおこな

う。OSはWindowsで、描画・SEM観察などの基本的な操作は、ほぼマウスのみで行うことができ、ユーザーが使いやすいというのも特徴である。

本装置の設置場所だが、2019年度の附属3棟施設改修において、改修と同時に恒温恒湿クリーンルームを共同研究棟C棟1階に新設し、ドラフトを始め電子ビーム描画装置や分散していたフォトリソグラフィーの関連施設が1か所に集約された。これにより同一のクリーンルーム内にて、基板洗浄、レジスト塗布、電子線描画、現像等を行うことができる。

現在、装置開発室ではクリーンルームの維持管理を数人で行っており、温度・差圧・クリーン度などを遠隔で監視できるシステムを構築中で、合理的に管理ができるクリーンルームを目指している。他の装置も含め、今後とも装置開発室をご利用いただければ幸いです。



電子ビーム描画装置（ELS-G100）外観。

主な仕様

電子銃	ZrO/W 熱電界放射型
最大加速電圧	100kV
最小電子ビーム径	Φ1.8nm (加速電圧 100kV 時)
描画最小線幅	6nm (加速電圧 100kV 時)
ビーム電流強度	20 pA~100nA
描画フィールドサイズ	最大 1000μm x 1000μm (加速電圧 100kV 時) 最小 100μm x 100μm (")
ビームポジション	最大 1,000,000 x 1,000,000 (20bit DAC)
ビーム位置決め分解能	0.1nm (□100μm フィールド使用時)
試料サイズ	小片 □5~40mm (t = 0.78mmまで) 定型ウエハ φ2~6 インチ (t = 0.25~0.78mm) マスク □1.5~5 インチ (t = 0.5~4.0mm)

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

分子科学研究所はいうまでもなく大学共同利用機関であり、すなわち共同利用は研究活動との2本柱として研究所の基幹的な役割です。しかし2020年度はコロナ禍のために、その共同利用のアクティビティーは壊滅的な打撃を受けました。特に年度上半期では計画されていた協力研究は実施したくとも県境を跨いだ移動の自粛が強く要請され誰も分子研を訪れることがままならない。研究会も従来のように岡崎に集まっての対面での発表・討論は全く実施不可能な状況でした。そもそもCOVIDは年度当初には全く未知の感染症として自らが感染するリスクや感染源として感染を広げるリスクを警戒するがゆえに全世界のあらゆるアクティビティーが先例のないほど抑制的となっていました。現在でも全世界のほとんどの学会・国際会議が中止になっています。岡崎3研究所としても研究所内に感染者が確認されれば、状況によっては研究所建物の一時的閉鎖もあり得る状況でした（今も警戒は怠っていません）。本稿執筆段階（10月下旬）には国内の状況は少しずつ動き始めていますが、世界的には未だ解決の方向は見えていない状況です。

その苦境の中においても、分子科学研究所としては、特にUVSORが全国に類を見ない独自のスペックを有する光源施設であることからいち早く所外からの共同利用の受け入れへの対応を開始しました。現在はその来所者に対する健康チェックなどの手法を研究所全体に拡張展開することで、少しずつではありますが所外研究者との協力研究も進められるようになってきました。一方、参加者が一堂に会しての研究集会は未だに無理です。そのかわりに分子研としてはZoomなどを活用したon-webでの研究会を推奨しており十分な数のアカウントを契約しました。所外からの研究会開催希望に関しては所内対応教員が分子研契約アカウントの利用対応をすることになっています。このweb会議システムは協力研究の遂行上もとても便利です。筆者自身も協力研究相手と複数サイト同時に会して、実際の化学反応のフラスコ画像をリアルタイムで共有して反応液の色などを見たり、スペクトルデータを画面共有したり、と電話やメールではできない臨場感のある議論を持つことができました。

共同利用全体としては今年度前期の申請採択課題に関しては、実施期間を後期まで延長可としました。また2020年6月に募集した年度下半期の共同利用は先例のない低調な応募状況で、追加募集を呼びかけました。On-webでのアクティビティーと合わせて、共同利用のアクティビティーを維持・再生するために暗中模索の現況です。一方で悪い事ばかりではありません。実際

に研究会のon-web開催は、遠隔地であったりスケジュールが詰まっていたりの問題で岡崎でのon-site出席が叶わない研究者の部分的参加も可能となる利点があり、必ずしもマイナス面ばかりではないようです。今尚コロナ禍の真っ只中ですが、分子研共同利用としては転んでもタダでは起きない心意気に対応していこうと思っています。

別件ですが、自然科学研究機構としてNOUSという共同研究統合システムを導入し運用を始めました。分子研の共同利用についても、このNOUS経由での申込・審査・報告が進められています。でも2020年度のレターズ上でのお知らせは、やはりどうしてもコロナ対応ですね。

来年度の共同利用はコロナ遺産(?)のon-web利用も含めて、従来以上の活況が戻ってくることを祈っています。

(魚住泰広 記)

共同利用研究の実施状況（採択件数）について

種 別	平成26年度	平成27年度	平成28年度	平成29年度	平成30年度	令和元年度	令和2年度 (1月7日現在)
課題研究	1	2	2	1	2	2	2
協力研究	64	62	82	73	45	37	50
自己資金による共同研究等*	224	253	318	361	347	357	209
協力研究（ナノプラット）	63	64	67	71	90	78	45
分子研研究会	6	11	6	10	10	7	3
若手研究活動支援	2	1	1	2	1	2	1
岡崎コンファレンス	1	1	3	0	1	2	0
計	361	394	479	518	496	485	310

*平成25年度以降、集計開始。令和2年度後期分は集計途中。

分子研研究会

開 催 日 時	研 究 会 名	提 案 代 表 者	参加人数
2020年10月28日～29日	Next Generation Spectro-Microscopy and Micro-Spectroscopy Workshop	大東 琢治（分子科学研究所極端紫外光研究施設）	136名
2020年12月4日～5日	ナノ空間で光が織りなす分子操作・化学反応制御の新展開	南本 大穂（北海道大学大学院理学研究院）	75名

運営に関わって

北浦 守

山形大学理学部
教授UVSOR ユーザーとして
期待すること

きたうら・まもる / 1997年福井大学大学院工学研究科博士後期課程修了、福井工業高等専門学校講師・准教授、山形大学理学部准教授を経て2015年より現職。物性物理学および材料科学の研究に従事し、最近バルクや表面における極微量の格子欠陥や不純物の構造を赤外からガンマ線にわたる幅広い波長範囲の光を使って調べている。UVSOR施設で実験することが良い意味での息抜きになっている。



あまり記憶が定かでないのですが、UVSORシンポジウムの利用者懇談会の総会において、利用者懇談会の世話人の中から一名がUVSOR運営委員会に出席することになり、その最初の任を私が担う事になったと思います。当初、私の任期は利用者懇談会世話人の任期である2016年4月から2018年3月までとと思っていましたが、分子研の慣習に従って2016年4月から2020年3月までの2期4年間にわたって務めることになりました。任期途中で施設長が交代したことやUVSOR施設を取り巻く情勢が劇的に変わっていることもあって、私自身の施設との関わり方が次第に変化していきました。その任を退いた現在でも利用者懇談会の世話人として施設運営に微力ながら携わっています。

元々、ユーザーの意見を施設運営に反映させることが私の使命だったように記憶しています。毎年、ユーザーとしてシンポジウムに出席したときには思いつくまま意見を述べてきましたので、運営委員会でも後先を考えずに気楽に意見を述べていたように思います。第1期目は、6本のアンジュレータービームラインを基軸にしたUVSOR-III計画もほぼ完成形を迎えつつあり安定期へと移行しようとしているちょうどそんな時期でした。その一方で、ベンディングビームラインは次第に老朽化し、ビームラインによってはユーザー数が次第に減っていった時期でもありました。手を加えればまだまだ活躍できるビームラインもありましたので、

共同利用研究施設としての存在意義を主張して継続した設備整備をお願いしました。施設スタッフの努力によってほぼすべてのビームラインがマイナーチェンジを繰り返しつつ現在でも稼働しており、一昔前と比べてユーザーの利便性ははるかに向上したように感じます。汎用装置と同じように、多くの方に分析ツールとして使っていただけるよう、現状のUVSOR施設利用を機器センター利用と包括的に連携させるような取り組みを期待したいと思います。そのためには、施設とユーザーが協力して、利用事例を積極的に配信したり、測定代行や技術指導などの技術支援を可能な範囲でおこなったり、まだまだできることはあると思います。

第1期目と第2期目の間には施設長が交代し、新しい門出に立ち会うことができました。新しい施設長とは比較的年齢が近いこともあって施設の風通しが益々良くなった気がしました。第1期目はどちらかというと施設に意見する立場でしたが、次第に施設の運営にも深く携わるようになりました。今思えば「ミイラ取りがミイラになった」そんな言葉があてはまるように思います。第2期目のあたりから、東北放射光計画が現実味を帯び、放射光施設のあり方も議論されることが多くなりました。役割のすみわけとか、施設間の連携とか、そんな文言が至るところで見られましたが、UVSOR施設を取り巻く現状はそうなっていません。むしろ、より厳しい状況に置かれているように感じます。ただ、幸か不幸かはわか

りませんが、この現状が改めて施設の存在意義を考えるいい機会になっているのは間違いありません。本来なら、シンポジウムの機会を利用して対面で意見交換を行えるとよかったのですが、コロナ禍ではこうした活動が限られますので、残念でなりません。

先代の施設長が何かのインタビューにおいて「研究者間での競争は好きではありません。人と同じことをするのも好きではありません。」とこたえられていました。これはUVSOR施設の今後を考える上で大切なヒントを与えてくれているように思います。小型放射光リングのUVSOR施設ですが、ユニークな装置を開発して独自性の高い研究成果を現在にいたるまで数多く公表しています。2020年からはじまる次期計画において現状維持の解はありえませんが、例えば、放射光と共存する形で新たな光源や測定技術を開拓し、その相乗効果によって放射光や他の光源では到達困難な波長域でのサイエンスを開拓するのが一つの解と思われます。また、研究成果の波及効果が強く求められる現状ではそのニーズを下支えするユーザーコミュニティが不可欠ですし、将来を担う人材の育成も決してないがしろにはできませんので、施設とユーザー間での連携・協力も益々必要になると思います。そのためには、現状の課題研究や協力研究の利用枠拡大や縛りの緩和・撤廃など多くのユーザーが施設と積極的に共同研究を展開できるサポートをお願いしたいと思います。

運営に関わって

波田 雅彦

東京都立大学
大学院理学研究科
化学専攻・教授計算科学研究センターの運営
委員を去るにあたっての雑感

はだ・まさひこ／京都大学大学院工学研究科石油化学専攻博士後期課程を修了後、日立製作所生産技術研究所に勤務、京都大学工学部合成化学科助手、合成・生物化学専攻助教授を経て現職となる。専門は量子化学・電子状態理論、特に、重原子化合物のNMR化学シフトなど電磁気物性についての相対論及びQEDと電子相関を考慮した高精度計算。



私は、2003-2004の2年間と2012-2019の8年間、合計10年間に渡って運営委員を務めてきた。センターの運営委員としての一番骨の折れる作業は、年度ごとに提出される利用申請のratingである。日本の計算化学の研究テーマを隅々まで知ることができ、私にとって極めて意義深い年度末恒例行事であった。最近の利用申請では、「計算化学をたしなむ実験研究者」からの申請比率が増加している。残念なことに、これらの申請の中にはDFTの適用範囲の誤解や研究計画の不備が多々見られる。最先端の高度研究だけを支援するか、計算化学の裾野まで含めた幅広い研究者を支援するか、センターの選択は重要である。現在のセンターは前者に力点を置きたいと願いつつ、後者にも手を差し伸べているのだと思う。私もその路線でよいと思う。もし後者に力点を置くなら、センターの利用者を対象とした講習会を実施したり初心者用の解説冊子を作ったりする施策も必要であろう。

さて、話を過去に向けたい。私の大学院生時代、計算科学研究センターは分子科学研究所の附属施設（電子計算機センター）であった。私のユーザーIDはCから始まるので、センター設立後から3年目の申請者を意味する。同年代の多くの大学院生達がセンターに集まった。私も計算機利用のために頻繁にセンターに出張した。学生であった私にとって「センター」の非日常性

と「研究所」という重々しい雰囲気がとても魅力的であり、京大の研究室よりも心休まる場所であった。更に貴重な事は、その当時にセンター利用に来ておられた若手～中堅の先生方と交流できたことである。インターネットが無かったので誰もがセンターへ来ないと計算が出来なかった。そんな先生方と学生たちが計算処理を待ちながらセンター内にたむろした。「君はどんな計算をしているのかね」と問われてやや緊張気味に答えることもあった。たわいのない雑談も一杯した。研究者ごとの異なる研究スタイルがあることを目で見て知った。固有名詞を出すと、西本吉助先生がMT (Magnetic Tape) の操作で苦心しておられるのを見て、学生達が寄って集って指導して、その後に食事を奢ってもらったりもした。諸熊奎治先生には沢山のお小言と共に励ましの言葉を頂戴した。長嶋雲兵先生には何度も夜食のラーメンに連れて行ってもらった。多くの楽しい時間を過ごした。インターネットの発達でそういう世界が消失したのはつくづく残念である。勿論、今からインターネット以前の石器時代に戻ろうなどと云うつもりは全くない。

さて現在の話に戻る。計算科学研究センター内には利用者は全く居ない。そもそも、端末室が無く、計算機の利用者が「来る」ことは想定されていない。前述のようなノスタルジーを持つ私にとっては残念である。確かに、多

くの学会や講習会などのイベントが開催され、分子研／センターが研究者交流の機会を作る事に努力されていることが感じとれる。一方、その為にスタッフの負担が随分大きくなったように感じる。巷に溢れるSNSは好まないが、スタッフのお膳立てを必要とせず、自発的に発生し永続する新たなコミュニケーションスタイルが必要であろう。今年のコロナ禍で強く思うようになった。今年は会議・講習会は殆どオンライン開催であった。現状のオンライン会議のソフトは洗練されているとは言いがたい。「手を挙げる」ボタンを押して発言するなど愚である。5G～6Gの世界では私には全く想像できない臨場感のあるオンラインコミュニケーションの手段が完成するだろう。そして、その頃には学会出張などという言葉は死語になるに違いない。そういう手段をセンターがいち早く取り入れて、新しいセンターのコミュニティ形態が形成されることを望んでいる。只、私の様に時々センターに来て計算やデスクワークに集中したい変わり者がいることも忘れないで欲しい（最近センターに来てネットワークの制限のために図書館のオンラインジャーナルすら使えず、私の居場所はもはや存在しないように思える。）。

運営に関わって

内藤 俊雄

愛媛大学大学院
理工学研究科環境
機能科学専攻・教授

分子研と大学は運命共同体

ないとう・としお／東京大学大学院理学系研究科化学専攻修士課程修了（1990年）後、東邦大学理学部化学科助手（1990年）、同講師（1995年）、北海道大学大学院理学研究科化学専攻講師（1996年）、同助教授（2001年）を経て2011年から現職。途中（1995年）、博士（理学）（東京大学）を取得。専門は固体物理化学、電子物性化学、特に光と不對電子が絡んだ協同現象。最近は光子を溜めて長期間保存し、好きな時に発光させられる物質の開発という夢を追いかけている。



分子研の客員助教授（分子集団研究系）を2003年4月－2005年3月まで、機器センター運営委員会の委員を2018年3月－2020年3月まで、分子研がキーステーションとなっている大学連携研究設備ネットワーク協議会の委員（四国地区代表幹事）を2015年4月－2019年3月まで拝命した。つまり、所々抜けているが、この約20年間分子研の運営のいくつかの側面を垣間見てきた。もちろんその間時代も変わり、所長以下運営組織のメンバーも入れ替わって来たので、一貫して何かを議論することは難しいが、敢えて振り返ってみたい。客員助教授として初めて分子研の教授会に参加させて頂いた頃、私は北大に居た。ほぼ毎月1回札幌から飛行機で片道5時間ほどかけて現在と同じ2階の会議室に通い、2時間程度の会議が終わるとすぐに（旧）名古屋空港（小牧）に向かった。そんな私の慌ただしい関わり方とは正反対に、分子研内の雰囲気には余裕が感じられた。私が分子研に滞在する時間はほとんどなかったが、客員助教授ということで居室を頂き、予算（旅費の他に研究費）まで付けて頂いた。初めて中から見た分子研の教授会は、それまで私が2つの大学で経験したそれらとはかなり違って見えた。形式的な、あるいは無駄な議論は一切無く、議長（当時は茅所長から中村所長へ移行する時期）が温和な口調で淡々と進めていったのに感銘を受けた。紳士的で知的な

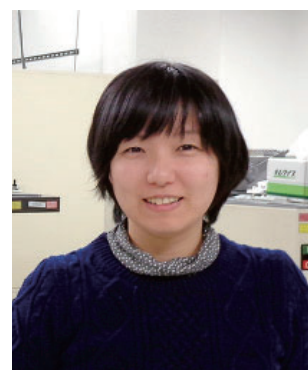
集団である以上に、研究のための会議であることを全員が認識していると感じた。その後8年ぶりに今度は機器センター運営委員として松山から片道5時間ほどかけてこの会議室に通うようになったときは、研究棟が改築され、だいぶ綺麗になっていた。それ以上に印象に残ったのが、建物のあちこちで見かけた、総合研究大学院大学や地元の高校生向けなどの各種イベントのポスターである。以前とは異なり、我々大学の人間が取り組んでいるような業務が目立って増えてきたように感じた。そして時期を同じくして研究所というより共同利用施設という側面が、分子研の会議や広報誌の中で色濃く表れ始めた。分子研の運営に関わることになった3つ目の組織（大学連携研究設備ネットワーク協議会；以下、設備NW協議会）もまさにそれである。この設備NW協議会では、分子研が代表で取ってきた予算を基に、全国に分散する大学の大型研究装置の共同利用やリユースなどを効率的に促進するための方策を話し合っている。メンバー内で年1回装置の修理やアップグレード、利用者講習会開催などに必要な予算の申請書を出し合い、それを互いに審査して、予算を配分している。必然的に設備NW協議会メンバーのほとんどは所外の者であり、会議室と議長の所属が分子研だというだけで、議論している内容はあくまでも別組織のような印象さえ受けた。しかしこの設備NW協議会が分子

研主導で立ち上がって以来、関係者の献身的なご尽力により、所内の設備はもちろん全国の大学の共同利用設備の維持と更新に分子研は多大な貢献を果たしている。全国の国立大学間の協体制度として始まったこの設備NW協議会は、私立大学も包括して拡大の方向にあり、この先の持続可能な在り方を見据える転換期にも差し掛かっている。文科省からの設備NW協議会への予算は年々縮小傾向にあるため、分子研の持ち出しが徐々に増えている。現在の分子研の予算規模は私が客員助教授をやっていた15年前とは違い、この負担は確実に研究所を圧迫している。こうして今日の分子研は、国内外の分子科学の研究を先導するという本来の使命に加え、大学院大学としての高等教育および地元の高校生などへの啓蒙活動と、所内と全国の大学の大型研究設備をどうやって維持し、更新していくかを考えて政府に働きかけ、可能な具体策から実行に移していくという、とてつもなく広範で重たい責任を負わされている。仮にこの状況を時代の流れに翻弄されていると見れば、それは大学も同じであろう。大事なことはそれぞれの本来の役割や使命を思い起こし、それを維持するための“副業”をいかに精査し、合理化するかであろう。その妙案は誰もなかなか思いつかないが、諦めずに設備NW協議会のように分子研と大学で協力し、英知を絞って行くしかない。

明大寺地区ヘリウム液化機の 休止と再開

技術課 浅田 瑞枝

あさだ・みずえ／名古屋大学理学研究科で博士（理学）を取得後、分子科学研究所電子物性研究部門の特任助教として着任、2019年3月に分子科学研究所技術課の技術職員として採用され、現在に至る。



はじめに

2019年度後期に極低温棟、装置開発棟、レーザーセンター棟（現：共同研究棟A、B、C棟）の改修工事が行われ、極低温棟にある液化機L280を半年間休止させることになりました。一般的に、液化設備が休止になると液体ヘリウム供給を停止せざるを得ず、低温実験の継続が困難になってしまいます。しかし今回の工事ではガス回収設備を稼働することができたため、山手地区液化室から液体ヘリウムを供給し回収ガスを戻すかたちで改修工事期間中の供給サービスを維持できました。以下では、その詳細をご紹介します。

液化機の休止

液化機のある部屋は壁面を取り払う工事となるので、粉塵除けのために液化機と周辺機器をブルーシートで覆いまし

た（図1）。また、液体ヘリウム貯槽（容量4,000L）は完全に空にして常温に戻し、外部から空気が侵入しないように大気圧よりやや加圧した状態で配管を閉じました。ヘリウムガス回収設備（ガスホルダー、長尺カードル、回収圧縮機）の周辺は大がかりな工事はありませんでしたが、棟全体が停電するため、向かいにあるエネルギーセンターから仮設電線を引いて圧縮機の電源を確保しました。

工事中の液体ヘリウム供給

改修工事期間中は、山手地区液化室のご協力により、ほぼ例年通りの量を供給し（2019年度10-3月の供給量：22,135L、前年同期間比104%）、ユーザーへの供給制限を設けず乗り切ることができました。

工事期間中のヘリウムと容器の動きを図2に示します。PCによる持出返却シ

ステムが使えず少し不便になってしまいましたが、ユーザー側の操作はおおむね通常通りでした。ユーザーが液体ヘリウム容器（ベッセル）を持ち出して返却した後、寒剤担当者が残量を計測し、満量からの差分を使用量として記録しました。重量計を使えないため、振動液面計を使用しています。使用したベッセルは、トラックで山手地区へ輸送して充填しました。

蒸発したヘリウムガスは、ガスホルダーを経由して長尺カードルに圧縮し貯蔵されます。その後、ガスは可搬式の組みカードル（ガスボンベ7m³×12本組×4基：液換算でおよそ500L分）に移送してユニック車で山手へ輸送後、回収して液化されます。この明大寺-山手地区間のヘリウム輸送については、明大寺の液化機更新時（2009-2011年）の経験が生かされています。当時も明大



図1 工事準備中の液化機と周辺機器。

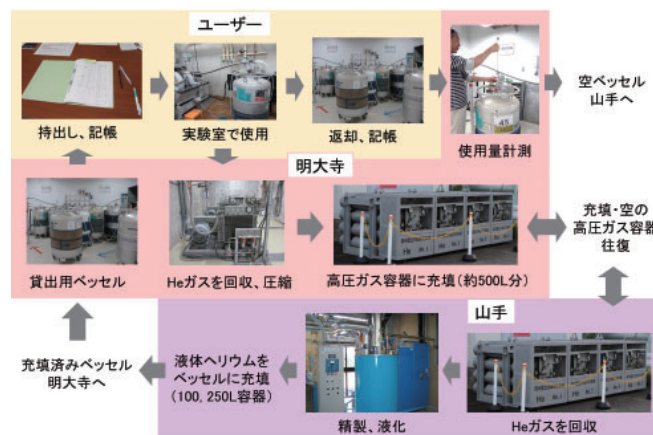


図2 工事期間中のヘリウム輸送経路。

寺地区の液化設備更新にかかる約2年間、同様に山手地区から明大寺地区へ液体ヘリウムを供給していたとのことで、そのとき使用した組みカードルと接続配管等を整備して再利用しました。

ヘリウムガス回収配管の更新

図3は回収配管のおおまかな配置図です。各棟の実験室から回収されたヘリウムガスは、渡り廊下1階天井の配管から装置開発棟を経由して地下の共同溝を通り、極低温棟の回収設備に集められます。分子研のヘリウム回収配管は大気圧より低くなっているため、配管がわずかでも開放されると配管に空気が流入し、回収液化設備に悪影響を及ぼす危険性があります。ヘリウム回収配管の更新作業は改修工事期間の後半に計画されており、建屋作業中も回収配管を撤去せず生かしながら工事をする必要がありました。工事が行われる装置開発棟と極低温棟を通過する重要な配管は建物の室内や廊下を縦横に通過しているため、建屋工事の際は気を付けて作業していただきました。

回収配管の撤去前に、図3中の青で示すラインをバイパスとして接続しました。使用した仮設配管は塩化ビニール製の透明チューブで、金属製に比べて見た目は頼りないですが、約2か月の仮設期間中は漏れあるいは大きな純度低下もなく使

用できました(図4)。

古い実験室のヘリウム回収配管は銅パイプに塗装したものが使われていましたが、ヘリウムトランスファーなどで低温のガスが大量に流れると塗装がボロボロに剥がれ錆びてしまい非常に見た目が悪く、また、時代の流れから銅配管の施工にかかるコストが相対的に高くなったため、すべてステンレス配管に交換となりました。材質の変更により配管の熱伝導率が悪くなりますが、低温実験やヘリウム回収への影響はほとんどないと思われます。

液化機の復旧

工事完了後の4月上旬、液化運転再開に向けて貯槽の予冷を始めました。ヘリウムの液化運転には、ガスを冷却するために液体ヘリウムが貯槽に溜まっている必要があります。貯槽は干上がっていて常温のため、蒸発分を見越した大量の液体ヘリウムが必要でした。この時期、ちょうど所外から液体ヘリウムを頂く出来事があったため^[1]、ありがたく使わせていただき、2日間かけて1,130Lを貯槽へ逆トランスファーしました。トランスファーした液体ヘリウムはほとんどが予冷時に蒸発して回収ガスホルダーへ流れ

ましたが、ようやく130Lほど液体が貯まったところで液化運転を開始しました。貯槽から液を取り出すトランスファータブには、逆流による圧力振動を軽減するための逆止弁が取り付けられているので、逆トランスファーの際に一度貯槽から抜いて逆止弁を外しました(図5)。

液化運転再開時は、長期停止の影響で屋外冷却塔の循環ポンプにロックがかかってしまい解除のためハンマーで叩いたり、液化途中で中圧タンクのガスが足りなくなり急遽純ガスを追加したり、などドタバタしましたが、深刻な故障はなく無事に明大寺地区での液体ヘリウム供給を再開できました。

おわりに

液体ヘリウム供給サービスの維持にあたっては、山手地区液化担当者、改修工事関係者の方々をはじめとする多くの皆様のご協力が不可欠でした。皆様に厚くお礼申し上げます。特に山手地区液化担当の方々には、液化設備をフル稼働して液化していただきました。その節は本当にお世話になりました。

[1] 浅田瑞枝, 高山敬史「産学ヘリウムリサイクルに貢献」 分子研レターズ 82, p55, Sep 2020

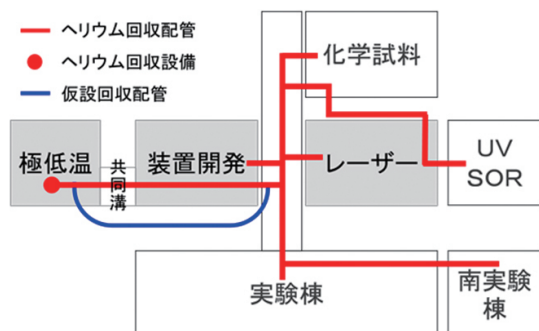


図3 主なヘリウム回収配管配置図。
灰色が改修工事の範囲。各棟内の分岐は省略しています。



図4 装置開発棟入口の仮設配管繋ぎ込み。



図5 貯槽のトランスファータブ。
液が溜まった後でもう一度抜いて取り付けました。

米国シアトル Neoleukin Therapeutics でのインターンシップ

三本 齊也

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

みつもと・まさや

古賀グループで創薬標的タンパク質である、Gタンパク質共役受容体を状態選択的に安定化するためのタンパク質構造のゼロからの合理デザインに取り組んでいます。主に応用的なタンパク質の合理デザインに興味を持っています。



タンパク質は酵素反応により、ある分子を別の分子に変換する、別の分子にくっついて機能を発揮するなど、自然界に数多く存在する分子の中でも特別な機能を持つ生命分子です。偶然にも学部の特典でこの特別な分子、タンパク質をゼロからデザインする(!)研究室である分子研の古賀グループの存在を知り、タンパク質デザイン業界に飛び込んでみることにしました。ただ、私が入学したころはまだタンパク質デザインの黎明期で、タンパク質の構造を創り出すだけでも難しく、実用に足る機能を持つタンパク質を創ることはまだまだ非常に難しい、という時期にありました。そのような中、2019年1月にNatureに投稿された論文、“De novo design of potent and selective mimics of IL-2 and IL-15”を読み、私は衝撃を受けました。内容は私達の身体の中で機能するIL-2というタンパク質を計算機を使って再デザインすることで、超熱安定で、注射しても元のIL-2に対する免疫反応を引き起こさず、望まない副反応を起こさないIL-2模倣タンパク質を合理設計したというものでした。タンパク質デザインが世の中を変える、新時代の幕開けを感じました。論文が発

表された翌日、彼らが開発した技術を元に、Neoleukin Therapeuticsという会社を立ち上げたことを知りました。当初、会社公式ホームページには創作者5人の顔画像と名前が載っているのみで、ほとんど何も情報がありませんでしたが、何か関われる機会はないものかと気にかけていました。5月頃ホームページが更新され、偶然にもインターンの募集が出ていることを発見しました。おそらく現地のワシントン大学の学生向けのプログラムだったのですが、この機を逃してはならないと思い、人生で初めての就職活動でしたが、海外で就職活動に使われるresume、cover letterなどを全てホームページなどを参照しながら一人で用意して、Zoomで採用面接に臨みました。現地レベルの英会話能力を持ち合わせていなかった私の面接内容はボロボロだったと思いますが、役員の方々のご厚意で採用していただくことができました。

ビザが出国2日前に届いたことも大変でしたが、現地に到着し、大変だったのは部屋探しでした。到着して実際の業務が始まるまでに部屋を契約すべく、100件程度の物件に電話をかけたのですが、当初の予定では半年の滞在予定であったため、そのような短い期

間での契約を行ってくださる貸主は3件程度しかありませんでした。その上、ようやく見つけた貸主に500ドル程度の費用を支払い、契約にあたりいつまでかかるのかわからないバックグラウンドチェックを受ける必要がありました。待っている間、いつ入居できるのか、ホテル代はどのくらいになるのかなどとても不安に思っていたことをよく覚えています。最終的にその物件の契約はキャンセルし、会社の方にサポートしていただき、スムーズに入居先を見つけることができました。内見や銀行口座の契約に同行して下さったTom、勤務日初日に部屋に居候させていただいたLuis、入居までの期間ホテルを借りて下さったDaniel、部屋を探して下さったAnnaに心より感謝申し上げます。これを読まれている海外渡航を目指されている方々には、渡航前に現地の貸主の方々とメールなどでよく相談されてから渡航されることをおすすめします。

Neoleukin Therapeuticsでの研究生活はとても楽しいものでした。現地で英語で生活することの困難は多々ありましたが、外国人である私にとっても親切にしてくださったみなさまのおかげで充実した研究生生活を送ることがで

きました。医薬品候補となるタンパク質を計算機で設計し、活性を評価して進化分子工学で改善するまでの一連の流れを学べたことはとても有意義なものでした。また、実際に医薬品を創出するまでの道のりについても、とても色々なことを学ばせていただきました。

シアトルは雨がよく降りますが、雨と言っても日本で言う小雨がちよくちよく降るくらいで、傘を差さずに外を出歩いててもびしょ濡れになったりすることはありません。冬は霧がかかったようになる日もあり、幻想的な風景に朝から心が踊ったことを覚えています。夏のシアトルは他の季節とは打って変わって安定した気候カラッとしていて気候もよく、少し外に出て散歩するだけでも気分が高揚します。港からフェリーに乗れるのですが、フェリーからの眺めは絶景で風も気持ちよく、小旅行をするにはとてもおすすめです。着いた先のBainbridge Islandも自然が豊かな島で、眺めや現地のおいしいレストランを楽しめます。気になる食生

活についてですが、現地の食生活も日本人に優しいもので、現地ではラーメンやお寿司が人気でたくさんお店があり、また宇和島屋という日本人向けスーパーなどもあります。クラムチャウダー、ピザ、ハンバーガーなどアメリカらしいおいしい料理の他にも、本格的な四川料理やバルバコア、タイカレーなどの国際色豊かな食事もあります。

3月頃、会社と古賀先生のご厚意でビザを延長していただくことができ、シアトルでの生活が継続できることを喜んでいました。しかし、新型コロナウイルスが流行りだしてから、シアトルを取り巻く状況が一変してしまいました。特に5月ごろまでは飲食店はどこも閉まっており、街は閑散としていて、道行く人々も気が立っている様子でした。休日にはおいしいレストラン探しを楽しみにしていたのですが、それも叶わなくなってしまい、部屋にこもりきりで本当に気が塞いでいました。そのような中、新型コロナウイルスとヒトの膜タンパク質のACE2の複合体

構造を見たDanielからの発案で、ヒトACE2を模倣した、囷タンパク質を合理設計するプロジェクトが始まりました。みんながデザインしたタンパク質に対してNuria、Renan、Jorgenをはじめとする方々が生化学実験と進化分子工学実験に取り組み、驚くべきスピードで研究開発が進み、最終的に論文がScienceに掲載されました。このような先進的な研究に携われたことについてDanielをはじめとする皆様に心より感謝申し上げます。パンデミックの渦中で、まさに問題の解決のためにタンパク質デザインを応用する研究に携われたことはとても貴重な経験ができたと思っております。

本当に親切にいただき、Neoluekinの方々には心より感謝しております。今後の大学院生活では産業での経験を活かしつつ、アカデミアならではの自由な発想を持って今後のタンパク質デザインに取り組んでいければと思っています。



夏のシアトルの海辺です。見晴らしもよく、散歩をしているだけでも気持ちがいいので休日や退勤後に意味もなくこのあたりでぶらつくのが好きでした。

2020年度9月総合研究大学院大学修了学生及び学位論文名

専攻	氏名	博士論文名	付記する専攻分野	授与年月日
構造分子科学	NAWAZ, Haq	Anion arrangement and H ⁺ conductivity in layered perovskite-type oxyhydrides Ba ₂ MHO ₃ (M = Sc, Y)	理 学	2020. 9.29
機能分子科学	VISOOTSAT, Akasit	Single-molecule analysis and engineering of chitinase A from <i>Serratia marcescens</i>	理 学	2020. 9.29

総合研究大学院大学2020年度(10月入学)新入生紹介

専攻	氏名	所 属	研究テーマ
構造分子科学	MALATONG, Ruttapol	協奏分子システム研究センター	Development of spintronic devices using molecular motor
	URBAN, Adrian Joe	協奏分子システム研究センター	Study on chiral-induced spin selectivity in organometallic materials
機能分子科学	ZHANG, Kaili	生命・錯体分子科学研究領域	Development of Single Atom Transition Metal Catalysts for Organic Molecular Transformations

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125回	2020年10月23日	恋愛下手?それじゃ科学は伝わらない~何が人をその気にさせるのか~	小林 隆司 (国立研究開発法人物質材料研究機構 広報室室長)
第126回	2020年12月4日	科学が進めば単位が変わる~究極の基準を求めて~	臼田 孝 (国立研究開発法人産業技術総合研究所 理事)
第127回	2021年2月5日	ラジカル——奇数個の電子をもつ分子が示すユニークな機能	草本 哲郎 (自然科学研究機構分子科学研究所 准教授)

■分子研コロキウム

回	開催日時	講演題目	講演者
第948回	2020年12月16日	「プラズモンの化学のその先へ」 "Beyond Plasmonic Chemistry"	三澤 弘明 特任教授 (北海道大学 電子科学研究所)
第947回	2020年11月25日	革新的イオニクス材料創成と全固体電池の実現—リチウム系を中心に—	菅野 了次 教授 (東京工業大学 科学技術創成研究院)
第946回	2020年11月6日	Where Science and Venture Capital Meet	Mr. Ken Hood, FusionX Ventures
		Supramolecular Polymerization: Its Significance and Applications	相田 卓三 教授 (東京大学大学院工学系研究科)
第945回	2020年10月7日	Scanning Tunneling Spectroscopy of Molecules on Insulating Layers and Superconducting Substrates	Prof. Katharina Franke (Freie Universität Berlin)
第944回	2020年9月2日	Controlling Single-Molecule Motion at Surfaces	Leonhard Grill 教授 (University of Graz, Austria)

各種一覧

■出前授業開催一覧（職場体験はコロナ感染防止のため受け入れ中止）

受 入 日	受 入 学 校 名	担 当 講 師
2020年9月25日	岡崎市立岩津中学校	松井 文彦 主任研究員・林 憲志 技術職員・片柳 英樹 助手
2020年10月6日	岡崎市立南中学校	豊田 朋範 技術職員・片柳 英樹 助手
2020年11月10日～11日	岡崎市立美川中学校	鈴木 敏泰 チームリーダー
2020年11月17日	岡崎市立福岡中学校	松井 文彦 主任研究員・林 憲志 技術職員・片柳 英樹 助手
2020年11月19日	岡崎市立甲山中学校	豊田 朋範 技術職員・片柳 英樹 助手
2020年12月4日	岡崎市立六ツ美北中学校	湊 丈俊 主任研究員

■人事異動（2020年6月2日～2020年11月1日）

異動年月日	氏 名	区 分	異 動 後 の 所 属・ 職 名	現（旧）の 所 属・ 職 名	備 考
2020/ 6/ 8	ZHANG, Yichi	辞 職	中国：Shanxi University associate professor	光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 特任研究員	
2020/ 6/19	南 慎太郎	辞 職	Neoleukin Therapeutics Visiting Scientist	生命創成探究センター創成研究領域 特任研究員	
2020/ 6/30	山 田 一 斗	辞 職		光分子科学研究領域光分子科学第三研究部門 特任研究員	
2020/ 7/ 1	内 田 真理子	採 用	機器センター 事務支援員		
2020/ 8/16	NAM, Dayeon	採 用	生命創成探究センター創成研究領域 特任研究員	北海道大学大学院理学研究院 学術研究員	
2020/ 8/17	YANG, Jimpeng	退 職		光分子科学研究領域光分子科学第三研究部門 研究員	
2020/ 8/31	NGUYEN, Thanh Phuc	辞 職	京都大学大学院工学研究科 講師	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第二研究部門 助教	
2020/ 9/ 1	野 島 達 也	採 用	生命・錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 特任研究員	中国・東南大学生物電子学国家重点実験室 副研究員	
2020/ 9/30	森 俊 文	辞 職	九州大学先端物質化学研究所 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	
2020/ 9/30	青 山 正 樹	辞 職	名城大学 技術職員	技術課付 班長	
2020/ 9/30	矢 崎 稔 子	辞 職	技術課（岡崎情報ネットワーク管理室） 特任専門員	研究力強化戦略室 技術支援員	
2020/10/ 1	牧 田 誠 二	昇 任	技術課光技術班 極端紫外光技術一係長	技術課光技術班 極端紫外光技術一係 主任	
2020/10/ 1	牧 田 誠 二	命 ずる	技術課 技術専門職員	（技術課光技術班 極端紫外光技術一係長）	
2020/10/ 1	三 輪 邦 之	採 用	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 特任助教	米国・Northwestern University Department of Chemistry Postdoctoral Fellow	
2020/10/ 1	MAHMOOD, Md Iqbal	所 変 属 更	理論・計算分子科学研究領域 特任研究員	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第二研究部門 特任研究員	
2020/10/ 1	矢 崎 稔 子	採 用	技術課（岡崎情報ネットワーク管理室） 特任専門員	研究力強化戦略室 技術支援員	
2020/10/ 1	堀 米 利 夫	採 用	極端紫外光研究施設 技術支援員		
2020/10/ 7	VISOOTSAT, Akasit	新 採 用	生命・錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 特任研究員		
2020/10/16	SALEHI DERAKHTANJANI, Elham	所 変 属 更	極端紫外光研究施設電子ビーム制御研究部門 特任研究員	極端紫外光研究施設 特任研究員	
2020/10/31	武 田 公 利	辞 職		生命・錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 特任研究員	
2020/10/31	長谷川 久	辞 職		機器センター 特任専門員	
2020/11/ 1	菅 沼 光 二	採 用	装置開発室 技術支援員		

編集後記

分子研レターズ第83号を最後までお読みいただきありがとうございました。発行にあたり、ご多忙にもかかわらず原稿を執筆くださった著者の皆様に編集委員一同、厚く御礼申し上げます。

今号も研究会の開催、事業報告、数多くの受賞、出身者の近況報告、そして共同研究ハイライトなど分子研における現在のアクティビティを余すことなく紹介できたのではないかと思います。一方、多くの記事が新型コロナの蔓延によって研究・教育活動が大きな影響を受けた現状を伝えていきます。厳しい状況の中でも、試行錯誤しながら難局に立ち向かう著者の皆様には敬服の念に堪えません。日本での新型コロナ感染の第一報から1年が経過した現在においても一向に収束する気配が見えず、新しい研究・教育のあり方を構築することが求められています。今号で紹介した記事が、分子科学コミュニティに携わる皆様のこれからの活動の一助となれば幸いです。

最後になりましたが、分子研レターズの編集委員として分子研の動向をわかりやすくお伝えするよう努力する所存です。今後とも分子研に対する皆様の温かいご支援・ご期待、ご指導ご鞭撻の程、どうぞよろしくお願い申し上げます。

編集担当 向山 厚

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. 83

分子研レターズ

発行日 2021年3月(年2回発行)

発行 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構

分子科学研究所

分子研レターズ編集委員会

〒444-8585

愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38

編集 山 本 浩 史(委員長)

向 山 厚(編集担当)

石 崎 章 仁

大 塚 尚 哉

大 友 章 裕

奥 村 久 士

岡 本 裕 巳

繁 政 英 治

杉 本 敏 樹

松 井 文 彦

原 田 美 幸(以下広報室)

鈴 木 さとみ

中 村 理 枝

デザイン 原 田 美 幸

印刷 株式会社コームラ

本誌記載記事の無断転載を禁じます。
文責は著者に帰属します。

