

# 分子研レターズ

VOL. **85**  
March  
ISSN 0385-0560

●巻頭言

## 共同利用機関の近未来

加藤 昌子 [関西学院大学 教授]

●レターズ

## 藤井のタワゴト

### Science knows no country!?

藤井 正明 [東京工業大学 教授]

●分子科学の最先端

## 電解質の電位を測る： 気体存在下の光電子分光

横山 利彦 [物質分子科学研究領域 教授]

### 共同利用研究ハイライト

非酸化物系複合アニオン化合物における低温ヒドリド伝導  
陰山 洋 [京都大学大学院工学研究科 教授]

生方 宏樹 [京都大学大学院工学研究科 博士後期課程]

カリウムチャネルの $K^+$  vs.  $Na^+$ 選択性

老木 成稔 [福井大学高エネルギー医学研究センター 特命教授]

in situ局所分光によって明らかとなった分子と超  
分子との衝突機構に基づく超分子反応

沼田 宗典 [京都府立大学大学院生命環境科学研究科 准教授]

## 巻頭言

## 01 共同利用機関の近未来

● 加藤 昌子 [関西学院大学 教授]

## レターズ

## 02 藤井のタワゴト——Science knows no country !?

● 藤井 正明 [東京工業大学 教授]

## 分子科学の最先端

## 05 電解質の電位を測る：気体存在下の光電子分光

● 横山 利彦 [物質分子科学研究領域 教授]

## IMSニュース

9 はやぶさ 2 帰還試料分析顛末記

10 受賞者の声——川合 眞紀、大森 賢治、平本 昌宏、平 義隆、小坂谷 貴典

14 事業報告

## IMSカフェ

15 New Lab研究室紹介——熊谷 崇

17 分子研出身者の今——田代 基慶、櫻井 英博、柴富 一孝

21 分子研出身者の今 受賞報告——郭 磊、全 炳俊、長谷川 友里

24 外国人研究職員の印象記

25 研究所コラム 分子科学研究所 外国人運営顧問 (2017–2020年) Benjamin List 教授の2021年ノーベル化学賞受賞に寄せて

26 アウトリーチ活動

28 新人自己紹介

## 共同利用・共同研究

29 共同利用研究ハイライト

**in situ局所分光によって明らかとなった分子と超分子との衝突機構に基づく超分子反応**

沼田 宗典 [京都府立大学大学院 准教授]

**非酸化物系複合アニオン化合物における低温ヒドリド伝導**

生方 宏樹 [京都大学大学院 博士後期課程二回生] 陰山 洋 [京都大学大学院 教授]

**カリウムチャネルのK<sup>+</sup> vs. Na<sup>+</sup>選択性**

老木 成稔 [福井大学 特命教授]

34 共同利用・共同研究に関わる各種お知らせ

36 機器センターユーザーアンケートについて

## 分子科学コミュニティだより

37 運営に関わって——松谷 晃宏

38 関連学協会等との連携

## 分子研技術推進部

41 UVSOR BL1U真空紫外光実験ビームラインのブランチャ化について

## 大学院教育

43 ニュース

43 受賞者の声——大石 峻也、加藤 雅之、Lee Jihyun、海田 新悟、三本 齊也

46 イベントレポート

46 修了学生及び学位論文名

47 各種一覧

# 共同利用機関の近未来

加藤 昌子 関西学院大学 教授



広くて制御された装置が並び整然とした実験室、機械が作動している静音とともに、時折動いているのは実験ロボット。人は制御室にいるのか気配はない。ガラス器具や化学薬品が所狭しと並んでいるのが当たり前の化学実験室も、近未来にはこんな感じになるのではと勝手に想像する。そう言えば、40年前の分子研の実験室は、大学の研究室に比べて人口密度が極端に低かった。

1980年夏、修士学生であった私は分子研（当時の関連領域、伊藤翼先生の研究室）で実験をする機会を得た。実験棟の数スパンの実験室に1～2人でのびのび実験できた。分子研の設立初期の頃で、当時の大学の研究室にはまだ配備されていなかった最新のX線回折装置や核磁気共鳴装置などが使えた。また、国内外から分子科学に関連する様々な分野の研究者が集まってきており、多くの刺激を受けることができた。分子研は、大学共同利用機関としてまさにCenter of Excellenceの役割を果たしてきた。技官として奉職し、学生時代と合わせて約5年間、1985年まで分子研にお世話になった。分子科学研究所は私にとって化学研究者としてのスタート地点である。ちなみに、この年、1985年5月に分子科学研究所では10周年記念行事が行わ

れた。これと前後して私は岡崎の地で一人娘を出産したことで、人生にとっても重要な転換点の一つとなった。

その後、各地の大学で単結晶X線回折装置などの実験室系の大型装置の配備が進み、身近に測定できるようになった。そうすると、装置の維持更新やより効果的な利用の観点から、国公立大学の附置研究所の共同利用も求められるようになり、分子研設立から35年経過した2010年、全国約100の研究所が共同利用・共同研究拠点（共共拠点）として認定された。岡崎の共同利用機関は別格であるが、共共拠点のロールモデルとなった。共同利用機関が増えれば種々の汎用の装置が利用しやすくなり、特に地方の研究者にとってはありがたいことである。一方で、共共拠点に認定された各研究所には、共同利用実績と特色ある研究の成果が求められる。そのような中で、元祖の国立共同研究機関である分子研には突出した立ち位置を維持することがますます期待される。

共同利用機関は、当然ながら、装置の利用のみではなく、国内外からの研究者が集まり議論できる場としても重要である。新型コロナのおかげで今や遠隔会議がすっかり定着し、リアルな空間は特に必要なくなった。現状では、「実際に会わないと触れられない

機微があるよね」と言いつつ、時々の対面会議を楽しむことになるが、更に進化した仮想空間ではそれも不要になるかもしれない。一方、AIの時代、ディープラーニングを駆使した物質の機能・構造探索やAIロボットが担う高効率実験など、進化は日進月歩である。共同利用機関では、スーパーコンピュータの利用がすでにそうであるように、世界中どこからでもアクセスできる測定装置類が設置されるのであろうか。そうすると突出した研究には研究者のセンスがますます重要になる。若い研究者の発想に期待している。

かとう・まさこ

1981年名古屋大学院理学研究科博士前期課程修了、分子科学研究所文部技官着任、1985年京都大学理学部文部技官を経て、1988年奈良女子大学理学部助手、1996年同助教授、2006年北海道大学大学院理学研究院教授、2021年関西学院大学生命環境学部教授、北海道大学名誉教授、現在に至る。この間、2006～2010年分子科学研究所運営会議委員、2014～2017年分子科学研究所客員教授。専門：錯体化学、光化学。

**藤井 正明** 東京工業大学 科学技術創成研究院 化学生命科学研究所 教授

## 藤井のタワゴト—— Science knows no country !?



ふじい・まさあき

1982年東北大・理・化卒、1985年同学大学院中退、同年同学理学部助手、1988年学位取得、同年日米共同研究派遣研究員（Cornell 大）、1993年早稲田大理工・助教授、1997年分子研・教授、1999年同研究所分子制御レーザー開発センター長、2003年より現職、2014年日本化学会学術賞、2015年日本分光学会賞、2018年分子科学会賞、2019年 Humboldt 賞受賞。  
[専門] 分子分光、レーザー分光とその応用。

私の所属する東工大・化学生命科学研究所<sup>1</sup>の建物はコンクリート打ちっぱなしの外壁に著名な科学者たちの言葉が刻まれている。これはキャンパスの建物耐震改修の時に外壁も手が加わって刻み込まれたのだが、当初は不評芬々であった。「資源研（化生研の旧名）でノーベル賞の研究をされた白川先生のお言葉が無い」とか、「化学と関係なくない？」などの悪評で、気合を入れて作られた建築の先生を大変落胆させたようである。

写真に写っている“Science knows no country.”も御多分に洩れず「フランス人であるパスツールが英語で言うわけ無かるう！」と文句を言われた言葉である。ただ、言葉そのものはさすが大先生で「科学は国家を知らない。なぜなら、知識は人類のものであり、世界を照らす松明だからである。」<sup>2</sup>

と続く、印象深い言葉である。近年、国際共同研究や国際共著論文など国を超えて研究の広がり的重要性が言われているだけにこの言葉は心に響く。この言葉が彫り込まれているから、というわけではないが、東工大も国際共同研究の拠点形成

を目指し、World Research Hub Initiatives<sup>3</sup>という国際共同研究を推進する組織を作り、今年度まで6年間のプロジェクトを進めてきた。このプロジェクトの面白いところは、単に海外招聘旅費を出して共同研究をするのではなく、本学特任教授という身分を用意し、こちら側の人間になって頂いて国際共同研究の拠点形成をするとい



う点である。私もこの中のサテライトラボ・生体分子分光ハブ<sup>4</sup>という国際拠点の一部に加えて頂き、国際共同研究を進めている。特任教授をお願いしたのは分子クラスター研究でよく知られた方々で、Otto Dopferさん（TU Berlin）、Anne Zehnacker-Rentienさん（CNRS/U Paris-Saclay）、Christophe Jouvetさん（U. Aix-

<sup>1</sup> 正確には科学技術創成研究院・化学生命科学研究所

<sup>2</sup> 英語ですみませんが……、no country, because knowledge belongs to humanity, and is the torch which illuminates the world. だそうです。

<sup>3</sup> <https://www.wrhi.iir.titech.ac.jp>

<sup>4</sup> [https://www.wrhi.iir.titech.ac.jp/satellite/satellite\\_fujii/](https://www.wrhi.iir.titech.ac.jp/satellite/satellite_fujii/)

Marseille)、Gilles Grégoireさん (CNRS/U Paris-Saclay)、James M. Lisyさん (U. Illinois)、Sotiris Xantheasさん (PNNL/U Washington)、Mattanjah de Vriesさん (UC Santa Barbara) という「7名の侍」ならぬ7人の教授である。コロナ前は皆さん年1、2回は滞在してご自身の教授室に陣取り、共同研究に専念して下さった。どなたも気心がしれた仲間であり、朝から夕方まで議論を戦わせ、分担しての共著でがんばり、夕方に一段落すると、ビール/ワイン/日本酒を楽しみながら夕食を共にするという、まるで合宿のような楽しい日々を送ることができた。こちらが先方の拠点に出かけた時も同様で、まさしく“Science knows no country!”である。こちらから先方に訪問する方も学振の研究拠点事業でサポートして頂けることになったので、これで完璧、と思っていたらコロナ禍である。この楽しい日々がコロナで失った大切なものの一つであり、パンデミックが1日も早く終息することを願う次第である。

もっとも、コロナ禍でネット利用が一気に進んだのはポジティブな点であろう。私の国際共同研究もほぼ毎週Zoomで打ち合わせをする生活になった。独仏とは夕方、米国西海岸とは朝にじっくり討論でき、週6回の国際打ち合わせのおかげで国際共同研究はどんどん進み、国際共著を順調に発表できている。これは先方との信頼関係が確立しているのおかげでありがたい限りである。

ただ、このネット環境だけで新たな知己を増やすことは難しく、ましてや共同研究は夢のまた夢である。海外との交信さえ確保すれば国際共同研究が進むと勘違いしている人もいるようだが、日本人同士でさえ相手との信頼関係がなければ共同研究は不可能だ。信頼関係の確立は、サイエンスだけではなく世間話や冗談の一つも言い、食事を共にして盃を交わし、できたら家族ぐるみで交流するという段階を踏んで行くものである。直接顔を合わせることもやはり不可欠で、その頻度の差が国際交流の差に現れていると思う。そういえば、私の日仏共同研究の始まりは助手のときに恩師・故伊藤光男先生（元分子研所長、東北大学名誉教授）とU. Paris-SudのLahmani先生との日仏共同研究でパリ大に派遣されたことであり、当時若手研究員だったJouvetさんや大学院生だったZehnackerさんと知り合いになったことが元になっている。また、Dopferさんとのdeepな交流は彼のsupervisorであったMüller-Dethlefs先生が伊藤先生を訪ねてきたことが始まりだ。信頼関係があるボス同士の交流の中で派遣されると先方も「身内」扱いしてくれるので一気に友人関係になれるというのが私の経験なので、海外と交流をお持ちの先生方は交流が再開され次第、若手研究者や大学院生を海外の先生方の元に派遣し、ご自身の信頼関係を若手に引き継いで広げてくれたらと良いと思う。ジョン・レノンじゃないが、やっぱり“no country”

は素晴らしい。

“no country”を無邪気に言えない気がかりな点が2つある。日本の論文数・インパクトの減少と安全保障問題である。前者は豊田康長鈴木鹿医療科学大学長<sup>5</sup>が相当前から警鐘を鳴らしていたが事態は一層悪化し、主要国の中で唯一論文数が停滞し、なんと人口あたり論文数では主要16カ国最下位、韓国の半分である。質の指標になるトップ10%の世界に占める割合では75位という衝撃の現状である。<sup>6</sup>国際共同研究は楽しいからやるのだが、我々研究者の楽しさとは自分に無い発想や実験、解釈、つまり相補性による刺激が重要な部分である。これにはある程度研究レベルが近いことが必須と思うが、このままで将来は大丈夫なのか、と思わざるを得ない。この原因は引用した書籍で豊田学長先生が徹底的に分析されているが、不正確を承知でざっくり考えるに資金不足と人不足（研究に有効な時間も含めて）であろう。人不足も要は金がないからなので詰まるところ資金に行き着く。1980年代、特にバブル期は欧米から「基礎研究タダ乗り論」<sup>7</sup>で責められて基礎研究への研究費が大きく拡充されたが、国債残高を問題視する財政破綻論<sup>8</sup>から始まって小泉改革以降の新自由主義と基礎的財政収支改善で緊縮財政になり、科研費など競争的資金は充実したが大局的には日本の研究を支える資金が減ってきた。限られた資金の中で最大の効率を求めて文科省官僚、大学首脳部、そして研究者は必死に最適解

<sup>5</sup> 三重大医学部名誉教授、元独立行政法人国立大学財務・経営センター理事長、現鈴木鹿医療科学大学学長

<sup>6</sup> 「科学立国の危機」豊田康長著、p.168-170、図表 2-20、21、p. 183 図表 2-27

<sup>7</sup> 日経 XTECH、電子産業史、<https://xtech.nikkei.com/dm/article/COLUMN/20080807/156200/>

<sup>8</sup> 1995年村山内閣武村正義蔵相発言に端を発する。

を探し、結果、資金を成果の期待できるところに集中させる、いわゆる選択と集中に行き着く。これは短期的には目立った成果が上がるが、中堅以下の研究者層・研究機関を細らせ裾野の広がりが無くなる。さらに校費のように目的を限定しない資金が大幅に減る結果、誰の審査も必要とせず、自分の興味本意で行う「役に立たない」研究<sup>9</sup>が非常にやりにくくなった。こういったGoal-orientedではなくCuriosity-driven研究の大切さはノーベル賞の栄誉に輝くHänsch教授や本学大隅良典栄誉教授も述べており<sup>10</sup>、これが独創的な研究を生む源泉ではないかと思われる。つまり、大局的には金がなくなって量が下がり、その中で最善の努力をした結果、質も低下した可能性がある。

逆に考えると、この元になっている緊縮財政から財政拡大に転じると回復する可能性はある。そもそも緊縮財政の根拠である「国の借金で破綻する」論は、通貨発行権を持つ国家が自国通貨建の国債を発行して破綻するはずがないことを考えたら馬鹿馬鹿しい妄想であり、<sup>11</sup>この誤りは財務省自身が認めている。<sup>12</sup>政治家にもこの事実が知られて来つつあり、現政権が新自由主義からの脱却を唱えているので、国

際的に高いレベルの研究者が現役で頑張っているうちに財政拡大と科学技術への積極財政支出が実現することを願っている。

第2点の安全保障、特に経済安全保障に対する注意喚起は各大学に回覧されており説明は不要かもしれない。私が無関心でいられないと強く感じたのは、世界のどの国でも防衛不可能な極超音速兵器が開発され核搭載含めた配備に向かいつつあること、日本の材料技術がこれに必須の重要な役割をしていることが、つい最近行われた衆議院選挙やその前の自民党総裁選挙で知られるようになったためである。<sup>13</sup>米国では自国テクノロジーが他国に使われ、この極めて危険な兵器が開発されたことが報道されている。<sup>14</sup>この兵器の出現は米国による核の傘を無効化可能であり、我が国の安全保障の深刻な危機になる可能性があるが、それが科学技術の流出によって現実化したとなると只事ではない。私のように純然たる理学研究は軍事技術と一見無関係のようだが波長可変レーザーなど安全保障貿易管理に関係する技術を確かに使っているので無視できなくなっている。特に、軍民両用技術について人民や会社に情報提供を強制でき、号令一下で全人民を動員できる<sup>15</sup>非民

主義国家に対して用心するのは誠に自然なことだが、旧ソ連と西側諸国のように人的交流が遮断されているわけではないので困ってしまう。研究者であり高等教育に携わるものとしては引き受けた学生やコンタクトしてきた相手には最善を尽くして自分の知識を提供する。これは本能のようなもので安全保障に関してはSecurity clearanceを制定し、ビザなどこちらがタッチしないレベルでどうかしてほしいというのが本音であるが、現状はそのようではない。

こんなことを考えると“no country”という国際交流は価値観を同じくする自由主義国家間でだけ成立するのかもしれない、「人類は一つ」のような単純な“no country”は“Imagin”の歌詞の一部のように“dreamer”かもしれない。ともあれ、パスツール大先生は「科学と平和が、無知と戦争に勝利することを、私は確信している。」<sup>16</sup>という言葉も残されており、私も当面この言葉を信じ、コロナ禍の終息を願いながら定年までのあと2年余り、全力で国際交流を進めていきたい。

私のタワゴトにお付き合いいただき、最後までお読みいただいたことに感謝申し上げます。

<sup>9</sup> 伊藤光男先生は所長在任時に言い得て妙の「道楽」と言われましたが非難轟々でした。

<sup>10</sup> Theodor W. Hänsch の 2005 年ノーベル賞講演での漫画スライド (57 枚目) 参照 <https://www.nobelprize.org/uploads/2018/06/hansch-slides.pdf> 大岡山通信 (池上彰) 日経 2017 年 5 月 15 日、「ノーベル賞、日本から出なくなる」大隅良典氏、日経 2017 年 9 月 30 日など

<sup>11</sup> 「財政赤字の神話—MMT と国民のための経済の誕生」ステファニー・ケルトン著、土方奈美訳、早川書房、2020、国内だと藤井聡、中野剛志、三橋貴明などの論客がネットでヒットする。正確には「変動相場制を取る国家が自国通貨建の国債で破綻することはあり得ない」である。

<sup>12</sup> 外国格付け会社宛意見書要旨 [https://www.mof.go.jp/about\\_mof/other/other/rating/p140430.htm](https://www.mof.go.jp/about_mof/other/other/rating/p140430.htm)

<sup>13</sup> 「美しく、強く、成長する国へ」第 3 章経済安全保障の強化、高市早苗著、ワック 2021；令和 3 年版防衛白書第 1 部第 3 章 <https://www.mod.go.jp/j/publication/wp/wp2021/html/n130101000.html>

<sup>14</sup> The Washington Post, [https://www.washingtonpost.com/national-security/china-hypersonic-missiles-american-technology/2021/04/07/37a6b9be-96fd-11eb-b28d-bfa7bb5cb2a5\\_story.html](https://www.washingtonpost.com/national-security/china-hypersonic-missiles-american-technology/2021/04/07/37a6b9be-96fd-11eb-b28d-bfa7bb5cb2a5_story.html)

<sup>15</sup> たとえば脚注 13 の p.78-80、会社法や国家情報法；「経済安全保障リスク」平井宏治著、育鵬社 2021

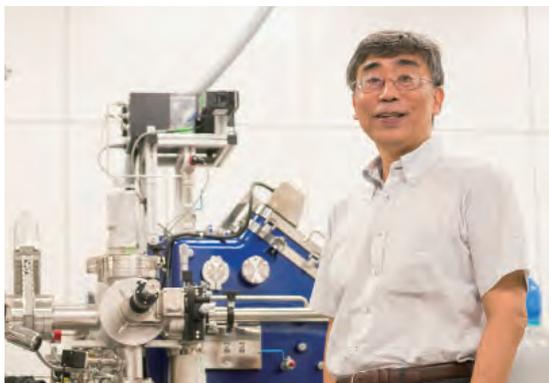
<sup>16</sup> 再び英語ですみません。“I am convinced that science and peace will win ignorance and war.”

# 電解質の電位を測る： 気体存在下の光電子分光

横山 利彦 物質分子科学研究領域 教授

よこやま・としひこ

1960年、大阪府吹田市生まれ。東大卒。広島大、東大を経て2002年着任。2021年12月現在、研究主幹、機器センター長、総合研究大学院大学物理科学研究科構造分子科学専攻長、日本放射光学会会長。専門はシンクロトロン放射光を利用したX線吸収・光電子分光などの方法論開発。



2002年1月に分子研に着任以来、もうすぐ20年となりました。この年月は、生まれてから高校卒業まで、あるいは、修士に入学してから助教授を終えるまでの期間よりも長く、年齢とともに時間が経つのが早くなることをしみじみ実感しています。着任後の前半は、表面の磁性研究を展開し、当時の助教の中川剛志君（現・九大准教授）を中心に、分子研放射光施設のUVSORやレーザーを用いて、新しい磁気顕微鏡の発明など、数は少ないものの質の高い成果が挙げられたと思います。2011年度になって、ひょんなことから岩澤康裕先生が主導する固体高分子形燃料電池（以下PEFCと略）の放射光解析プロジェクトに仲間入りすることになりました。SPring-8にX線吸収分光を中心とした燃料電池専用のビームラインを建設し、PEFCの実用化で懸案の劣化被毒機構を詳細に解析するといった新エネルギー開発機構（NEDO）のプロジェクトでした。PEFCは、既にトヨタ・ミライやホンダ・クラリティで市販中ですが、1台当たり40 gもの白金が使われていて、一般大衆車の実用化には白金使用量を少なくとも1/10にする必要があります、高性能化と長寿命化の飛躍的開発が必須

の課題になっています。SPring-8のビームラインは、宇留賀朋哉さんや唯美津木さんらにより世界最先端X線吸収分光ステーションとしてでき上がりつつあり、X線吸収分光はこれ以上の設備を導入する必要がなさそうでした。そこで、当時急速に発展しつつあった硬X線光電子分光設備を設計・導入することとしました。本稿では、当時助教の高木康多君が中心となって行ってきた気体雰囲気下での硬X線光電子分光法の開発とそれを用いたPEFCの硫黄による劣化・被毒機構追跡、特に本稿では、タイトルにある通り、電解質の電位計測に焦点を当てて説明したいと思います。

21世紀に入って以降、SPring-8では世界に先駆けて硬X線光電子分光の開発が行われていました（硬X線は波長0.3 nm程度以下の高エネルギーX線）。光電子分光とは、試料にX線を照射し、光電効果により飛び出す光電子の運動エネルギーを精密に計測する方法であり、化学分野でも、試料中の各元素の化学状態を知るための有効な分析手法に挙げられています。硬X線を用いると、電子が運動エネルギーを失わずに進める距離（平均自由行程）が大きく、通常の軟X線（波長1 nm

程度以上の低エネルギーX線）を用いる場合と比べて、固体試料内部の電子も計測することができます。軟X線では表面近傍情報を得る手段であった光電子分光が、固体の内部の電子状態をより正しく知る手段として認識されるようになりました。一方、光電子分光は電子の運動エネルギーを精密に観測するため、通常高真空中で測定を行う必要があります。しかし、硬X線を用いると、気体中での平均自由行程も伸長するので、飛躍的に高い圧力下でも光電子分光測定ができるようになります。2012年当時、大気圧下光電子分光測定ができる装置は世界に存在せず、まずはこの装置の開発を進めました。

図1に導入した光電子分光器 Scienta Omicron R4000Hipp-2を示します。X線が照射されることにより試料から光電子が放出され、電子は半球型電子エネルギー分析器でその運動エネルギーが計測されます。試料は大気圧(10<sup>5</sup> Pa)下にあり、分析器の真空度は10<sup>-5</sup> Pa程度です。電子の飛行経路に窓はなく、たくさんのポンプで仕切りのない空間において100億倍もの圧力差を実現しています。電子分光器の先端は円錐状(front corn)になっていて、円錐の頂点に30 μmの

穴が開いています (図2)。この円錐と穴の作成は装置開発室と機器センターのマイクロ加工技術のおかげで仕上がりました。光電子スペクトルの測定は建設したSPring-8 BL36XUで行い、X線のエネルギーは7.94 keV (波長0.156 nm)、X線スポットは20  $\mu\text{m} \times 20 \mu\text{m}$  に集光されています。試料と電子分光器先端の距離は図2(d)のように60  $\mu\text{m}$  であり、X線のマイクロ集光が必須です。高輝度X線のマイクロ集光はSPring-8のおかげで初めて達成できたものです。図3に測定した金単結晶の光電子スペクトル(Au 4f)を示します。縦軸は観測した光電子強度、横軸は電子の結合エネルギーで、運動エネルギーから変換されるものです。圧力を1 Paから大気圧 $10^5$  Paまで上昇させると光電子強度が急激に減少しますが、 $10^5$  Paにおいても図3(a)の下段図や図3(c)でわかるようにきちんと光電子スペクトルが観測できています。このデータは世界初の完全大気圧下光電子スペクトルです。

なお、図3(b)は圧力と光電子強度の対数プロットですが、この直線性と直線の傾きから、測定中の圧力が正しく計測されていることが示せます。この傍証は、本当に大気圧下で測定できたことを示すために必要なデータでした。以上の、世界初の大気圧光電子分光観測についての詳細は、参考文献[1,2]を参照ください。

完成したこの光電子分光装置を用いて燃料電池の研究を進めたわけですが、一連の研究で私が最も注目したのは電解質電位の計測でした。電解質は、電池の正極と負極の間に位置し、負極で生成した陽イオンを正極に輸送する媒体です。PEFCの電解質はナフィオンと呼ばれるベンゼンスルホン酸基をたくさん含んだ固体高分子で、水も大量に含有されていて、負極で生じたプロトン正極に輸送します。電池の正極・負極・電解質はそれぞれ電位が異なり、正極と電解質の電位差が正極での電池反応を決定し、各電位は電池反応を理解する上で大変重要な変数です。しか

しながら、電極電位はテスターで簡単に測定できますが、電解質電位はそう簡単に測定できません。固体高分子と水からなる電解質ナフィオンはややわかりにくいので、イメージとして鉛蓄電池のような液体電解質(希硫酸)を思い浮かべましょう。電解質希硫酸にテスターを挿入して電位を測定しようとしても、テスターと電解質の界面に電気二重層が生成し、その結果大きな電位差も生まれ、電解質電位は全く計測できません。なお、電気二重層とは、電極側にたとえば正電荷の層、そのすぐ外側(電解質側)に逆の電荷(この場合負電荷)の層が並んだもので、大きな電位差を生み出します。

光電子分光では、テスター電極を試料に直接挿入する必要がなく、光電子の運動エネルギーを通して試料中の各化学種の電位を観測することが可能です。動作中の電池の光電子分光測定は気体存在下での計測が必須であるため実験が困難でしたが、今回開発した光電子分光装置を用いれば容易に電解質

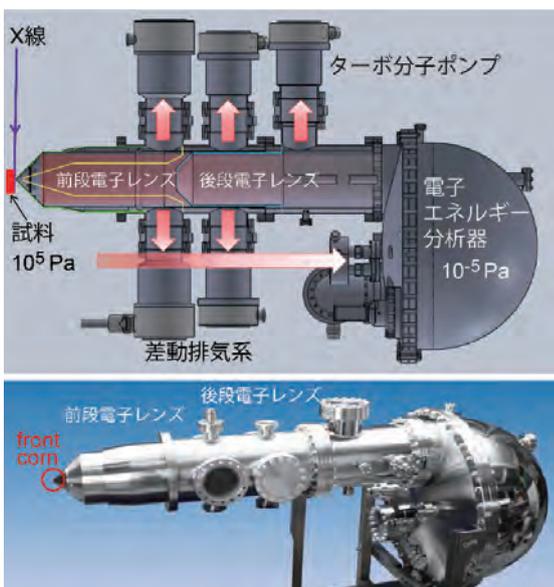


図1 気体雰囲気下光電子分光器Scienta Omicron Hipp-2。全長は1.5 mほど。たくさんのターボ分子ポンプの差動排気により、仕切り窓無しで試料 $10^5$  Pa、分析器 $10^{-5}$  Paの圧力差を実現する。

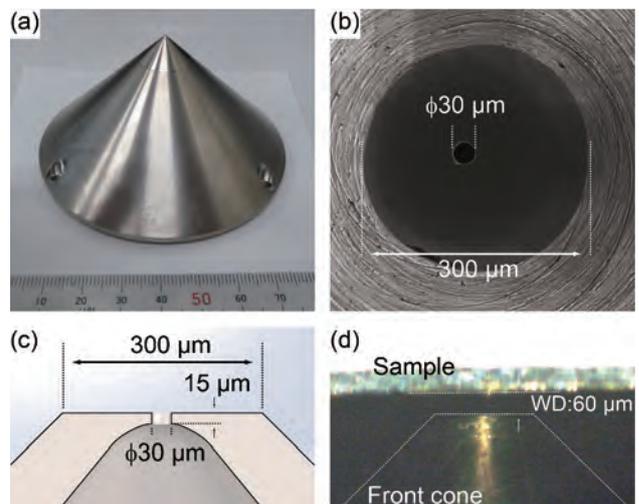


図2 光電子分光器先端front corn部。先端に電子の通る直径30  $\mu\text{m}$ の穴が開いている。試料と分光器先端の距離はわずか60  $\mu\text{m}$  であり、X線を20  $\mu\text{m}$  まで就航して試料に照射している。

電位を測定することができます。図4にPEFC（電極は正負極ともPt/C、正極を接地）中の各元素の電位を示しました。横軸は電池の正負極間電位差で、燃料電池車で言うと、アクセルを踏むとこの電位差が小さくなり、ブレーキを踏むと電位差は大きくなるような変数です。白金Ptと炭素Cは正負電極、酸素Oは液体のH<sub>2</sub>Oで電解質、フッ素Fもナフィオンで電解質にあります。見事に電解質電位が観測できたと言えます。たとえば、電位差1.2 Vのとき（図4(d)）、電解質電位は正負極電位の中間にあります（教科書によくあるポンチ絵が実測されました）が、0.2 Vのとき（図4(c)）は、電解質電位が正負極電位よりも高い電位に位置し、正負極とも同じ向きの電気二重層が形成されていることがわかります。

電解質電位がわかったことで興味深い新しい情報が得られました。図5は、電極としてPt/CまたはPt<sub>3</sub>Co/Cを用い（ミライではPt<sub>3</sub>Co/Cが使われています）、新品と劣化試験後の硫黄被毒の様子を検討した結果です。図5(a)(b)はそれぞれ負極・正極のS 1s光電子スペクトルで、強いS<sup>6+</sup>はナフィオン sulfonate 基ですが、S<sup>2-</sup>、S<sup>0</sup>ピークは本来あるべきではない不純物に相当します。図5(c)～(f)に各硫黄化学種の電位を示しました（いずれも正極接地）。この図から、S<sup>2-</sup>は電極と同電位、すなわちS<sup>2-</sup>は電極Ptに吸着していることがわかり、正極で観測されたS<sup>4+</sup>は電解質と同電位、すなわち電解質に溶解した亜硫酸イオンSO<sub>3</sub><sup>2-</sup>であることがわかりました。これらの結果は、光電子分光法により各化学種の電位を計測することで、各化学種が電極に吸着しているか電解質に溶解しているかが極めて明かに判別できることを示しています。気体雰囲気

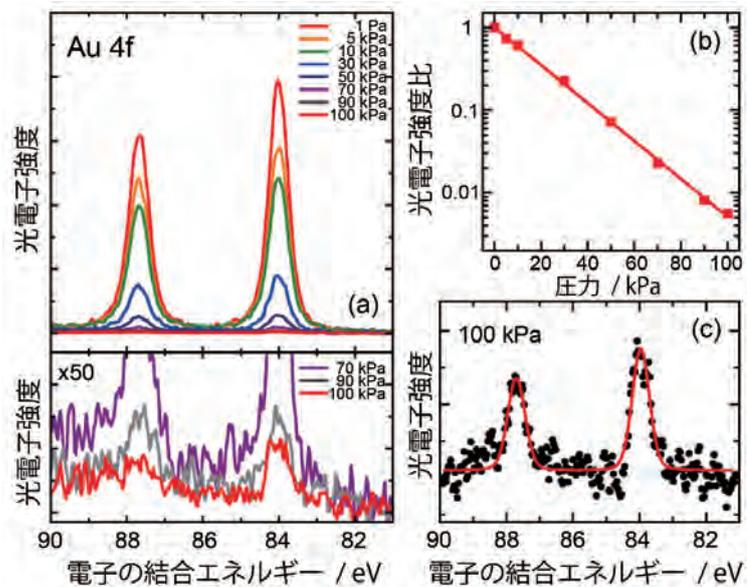


図3(a) 金単結晶Au(111)のAu 4f光電子スペクトルの圧力依存性（気体は空気）。X線エネルギーは7.94 keV。下段は50倍の拡大図。(b) 圧力と光電子強度の片対数プロット。直線性と傾きから圧力測定が正しいことが示される。(c) 別途測定した1気圧(10<sup>5</sup> Pa)でのAu 4f光電子スペクトル。世界初の大気圧光電子スペクトルである。

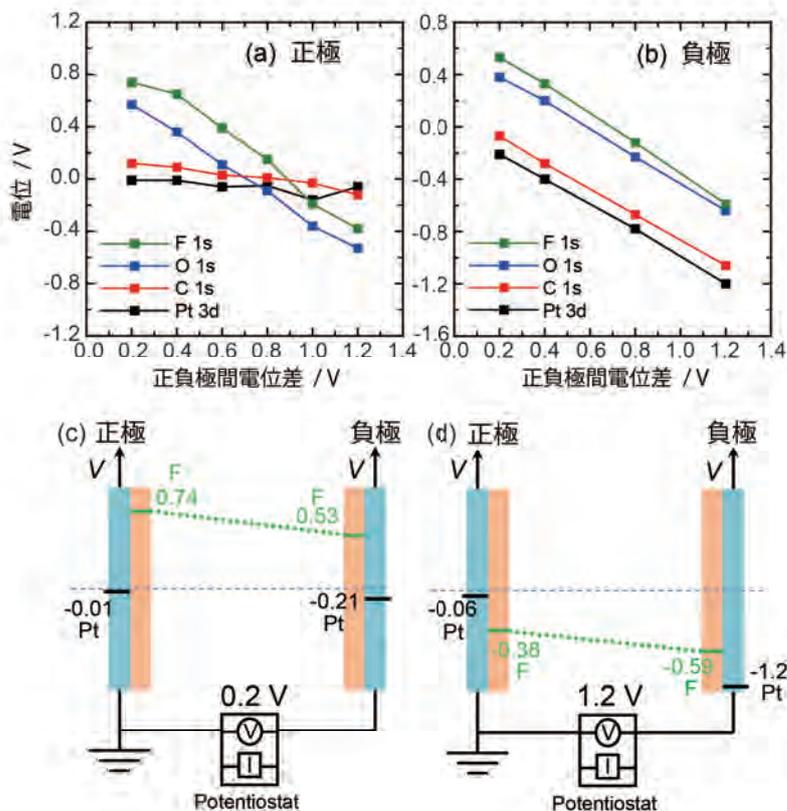


図4 (a,b) 動作中の固体高分子燃料電池における各元素の電位の正負極電位差依存性。Pt, Cは電極、O, Fは電解質。(a) 正極。(b) 負極。(c,d) 電極・電解質電位の概略図。正負極電位差は(c)のとき0.2 V、(d)のとき1.2 V。

下の動作中の電池の光電子分光測定から得られる新たな情報源として燃料電池に限らず一般的に活用できる手法といえそうです。また、図5(a)での負極におけるPt/CとPt<sub>3</sub>Co/C電極を比較すると、劣化試験後のPt/CのS<sup>2-</sup>吸着量は著しく大きく、Pt<sub>3</sub>Co/Cではそれほどでないことが観測されており、Pt<sub>3</sub>Co/Cの方が負極の硫黄被毒

に対して耐性が優れていることを示しています。以上の結果の詳細は参考文献[3-6]を参照ください。

本稿の一連の研究成果は、研究室の高木康多助教（現JASRI主幹研究員）、Heng Wang博士、中村高大博士、Yu Liwei博士、Suwilai Chaveanghong博士、電通大・岩澤康裕教授、JASRI・宇留賀朋哉博士、

名大・唯美津木教授らとの共同研究であり、研究費はNEDO燃料電池プロジェクトや歴代所長（茅幸二元所長、中村宏樹元所長、大峰巖前所長、川合真紀所長）にお世話になりました。また、分子研・装置開発室や機器センターの方々から装置製作にあたって支援を受けました。末筆ながら皆様に心より感謝申し上げます。

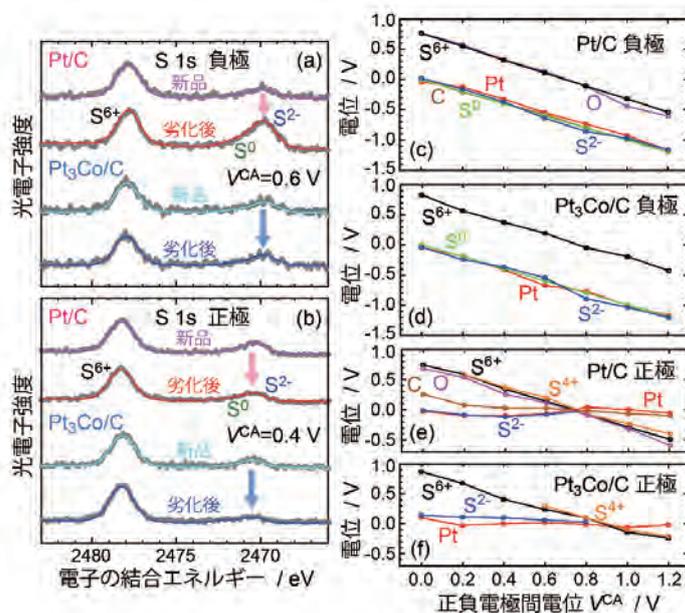


図5 (a,b) Pt/C, Pt<sub>3</sub>Co/C正負極電極の劣化試験前後のS 1s光電子スペクトル。(a) 負極、正負間電極電位差0.6 V のとき、(b) 正極、正負間電極電位差0.4 V のとき。Pt/Cでは劣化後にS<sup>2-</sup>が強く、Pt<sub>3</sub>Co/Cでは増加が顕著ではない。Pt<sub>3</sub>Co/Cの方が硫黄被毒体制に優れているといえる。  
(c-f) 動作中の固体高分子形燃料電池における各硫黄化学種の電位の正負間電極電位差依存性。(c) Pt/C負極、(d) Pt<sub>3</sub>Co/C負極、(e) Pt/C正極、(f) Pt<sub>3</sub>Co/C正極。S<sup>2-</sup>、S<sup>0</sup>は電極PtまたはCに吸着し、S<sup>4+</sup>はSO<sub>3</sub><sup>2-</sup>として電解質に溶解していることが明確にわかる。

## 参考文献

- [1] Y. Takagi, T. Nakamura, L. Yu, S. Chaveanghong, O. Sekizawa, T. Sakata, T. Uruga, M. Tada, Y. Iwasawa, and T. Yokoyama, *Appl. Phys. Exp.* **2017**, 10, 076603.
- [2] Y. Takagi, T. Uruga, M. Tada, Y. Iwasawa and T. Yokoyama, *Acc. Chem. Res.* **2018**, 51, 719-727.
- [3] L. Yu, Y. Takagi, T. Nakamura, O. Sekizawa, T. Sakata, T. Uruga, M. Tada, Y. Iwasawa, G. Samjeské, and T. Yokoyama, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, 19, 30798-30803.
- [4] L. Yu, Y. Takagi, T. Nakamura, T. Sakata, T. Uruga, M. Tada, Y. Iwasawa, S. Masaoka, and T. Yokoyama, *J. Phys. Chem. C*, **2019**, 123, 603-611.
- [5] S. Chaveanghong, T. Nakamura, Y. Takagi, B. Cagnon, T. Uruga, M. Tada, Y. Iwasawa, and T. Yokoyama, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2021**, 23, 3866-3873.
- [6] T. Nakamura, Y. Takagi, S. Chaveanghong, T. Uruga, M. Tada, Y. Iwasawa, and T. Yokoyama, *J. Phys. Chem. C* **2020**, 124, 17520-17527.

## はやぶさ2帰還試料分析顛末記

2020年年末、はやぶさ2はサンプルカプセルをオーストラリアのウーメラ砂漠に帰還させ、当初の0.1 gという予想を大きく上回る5.4 gものリュウグウの岩石試料を持ち帰り、そのサンプルリターンミッションは大成功の裡に完了しました。回収されたリュウグウ試料は、JAXAでの初期記載を経て、その一部が6+2の分析チームに配分されました。僕はそのひとつである、Phase2高知キュレーションチーム(Ph2K)に所属しています。Ph2Kは8月末より、UVSORにある走査型透過軟X線顕微鏡(STXM)を用いて、リュウグウ試料に含有される有機物の顕微分析を行いました。この研究も、普段から対応している、数多の共同利用研究の中の一案件であることに違いはないのですが、それでも世間の注目度の高さ、貴重さ、そして人類にとって未知の試料であることによる緊張と高揚感は、格別なものと言わざるを得ませんでした。

Ph2K(当初は輸送検討チームという名称で、分析に携わることはまだ決まっていませんでした)は、はやぶさ

2が地球を出発する前より、リュウグウからどのような試料が帰ってくるかを推測、検討し、如何に分析するかという議論と、技術開発を進めていました。リュウグウから持ち帰る試料は従来の隕石とは異なり、大気をはじめとする地球上の物質に汚染されていません。その状態を可能な限り維持し、最大限の情報を取得することが最重要課題です。そこで、試料を大気に曝すことなく安全に輸送し、全国に点在する先鋭的な装置で分析する方法を確立する必要がありました。その集大成が、多機関横断型分析技術の構築と、そのプロトコルの策定です。

UVSORのSTXMでは、この話以前から、別の目的で大気非曝露での試料分析システムの開発を行っていました。そのような事情もあり、STXMの大気非曝露装置が起点となって、Ph2Kは多機関横断型分析技術の開発を推進しました。特に入念に行ったのは、作業中の様々なリスクを低くするためのリハーサルと、装置のブラッシュアップでした。それでも本番になると、何かしら起きるんですけれどね。

そして過日のマシンタイムにおいて、分析の深度を深めるにつれ、開発してきた分析技術の有効性を示す成果が姿を現わしつつあります。我々が開発した分析手法は、今後のサンプルリターン科学を推進する上での指標となることでしょう。

輸送検討チーム時代から足掛け8年の活動を続けてきたPh2Kですが、顧みれば、よくぞ総勢20名ものチームが、一丸となって研究を進めてきたのだと思います。個人的にその原因は、各々の好奇心の強さと、機会あれば消費過多になる酒精のためかと分析しています。とは言え、8年間長の期間にも及ぶに到り、そんなチームも時の流れからは逃れられません。冠婚葬祭があれば、雇用期限を迎え、義務雑務の増加に辟易し、コロナ禍で計画は変更され、否応なく老眼は進行し、細かい作業に難儀します。かく言う僕も、高エネルギー加速器研究機構へ転出することとなりました。分子研で過ごした10年の最後に、思い出にひときり巨大な楔を打ち付けた研究となりました。(大東 琢治 記)



BL4U実験ハッチ内でのPhase2高知メンバーらと(右から3番目が筆者)



リュウグウの岩石

川合眞紀所長が文化功労者に選出

大森賢治教授の紫綬褒章受章に寄せて

平本昌宏教授に応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会業績賞

平 義隆准教授に第64回放射線化学討論会優秀賞

小坂谷貴典助教に2021年度日本表面真空学会誌賞

## 川合眞紀所長が文化功労者に選出

川合眞紀所長が令和3年度文化功労者として文部科学大臣より顕彰されました。文化人の最高の栄誉は文化勲章ですが、「勲章には特権は伴わない」という憲法の規程があるために文化の貢献者に年金を支給して報いたいという趣旨で制定されたのが文化功労者の制度です。文化勲章受章者は原則として、前年度までに文化功労者として顕彰を受けた者の中から選ばれますので、文化功労者は文化勲章と同等の栄誉と言えます。理科系の科学者の顕彰は年に一人か二人で、顕彰のない年も多い中で選ばれたことは大変名誉なことです。また、江崎先生以前のノーベル賞受賞者は、全員が先に文化勲章を受章していましたので、日本でノーベル賞に値する評価を得たということで、誠におめでたく、心からお祝い申し上げます。

文化功労者の制度が始まった1951年の受賞者に数学者の高木貞治先生がいらっしゃいます（高木貞治先生は1940年に文化勲章を受章されており、1960年には勲一等旭日大綬章を受章されています）が、川合先生は高木貞治先生のお孫さんで、祖父と孫が共に顕彰されたのは初めてだと思います。川合先生のお父上の高木佐知夫先生も含めて、3代続いて東大の名誉教

授になられていることも特筆され、誠に素晴らしい家系です。このように見えてくると、川合先生は能力と親の七光りに恵まれて、順風満帆の科学者人生を歩まれたように思われるかと思いますが、ご苦労もされていた時代の思い出を記したいと思います。

川合先生は東大理学部化学科の田丸研究室で大学院の研究をされていました。私は一つ下の学年で、物理化学の朽津研究室で近藤保助手の指導を受けていました。近藤先生は田丸研から朽津研に移ってこられたため、川合先生とは旧知の仲で、私の隣の机に居た近藤先生の所に川合先生が良く談笑しに来られていました。私はその後、物性研の村田先生の所で表面研究を始め、田無にできた放射光施設で博士論文研究をしていました。当時和光の理研にいらした藤間先生にDVX $\alpha$ の計算を教えていただくことになり、田無から和光までバイクで通っていたことがあります。その時には川合先生が特別研究員として和光の理研に居らしたので、川合先生に机を貸してもらっていました。博士号を取得してもアカデミックな職に就くのは今でも難しい事ですが、当時はオイルショックもあってさらに難しく、川合先生も博士号取得



後に、しばらく有期の職を転々とするというご苦労をされている最中でした。川合先生も私も明日への不安を感じながらの日々でしたが、川合先生が務めて明るく頑張られていたので私も励まされていました。

川合先生が1985年5月に理研に研究員として採用された後の活躍は目覚ましく、特に「走査トンネル顕微鏡を用いた単分子化学反応の実現」などで世界をリードされてきました。顕彰の時には「表面科学者」として紹介されており、私も含めた表面科学者の誇りになっています。今後もさらに飛躍していただけて、私たちを牽引していただきたいと思います。

（豊田理化学研究所 大門 寛 記）

## 大森賢治教授の紫綬褒章受章に寄せて

令和3年度秋の褒章にて、大森教授が紫綬褒章を受章されました。紫綬褒章とは、科学技術分野における発明・発見や、学術及びスポーツ・芸術文化分野における優れた業績を挙げた方に贈られる国の表彰であり、今回大森教授は「量子物理学研究」における功績を認められ、晴れて受章となりました。心よりお祝い申し上げます。

大森教授のご経歴につきましては、分子研ホームページ等に掲載されておりますので、ここでは簡潔に紹介します。1992年に東京大学大学院にて博士（工学）を取得後、東北大学での助手・助教授を経て2003年から現在まで分子研教授として、分子科学から量子力学まで広範囲にわたる学際的な領域、いわゆるAMO (atom, molecule, optics) 分野を牽引する研究者としてご活躍をされています。その業績は日本、海外を問わず高く評価されており、フンボルト賞（ドイツ）、文部科学大臣

表彰・科学技術賞など様々な受賞経歴を経て、今回紫綬褒章受章に至りました。

大森教授の御業績について簡単に紹介しますと、アト秒 ( $10^{-18}$ 秒) の精度でタイミング制御された超短パルスレーザーパルスを利用し、波動関数の示す干渉効果を利用して物質の波動関数を高精度に制御する技術を確立され、気相分子から固体まで様々な量子系を対象にその技術を応用してこられました。さらに、大森教授の量子世界に対する探究心は止まることを知らず、現在も文部科学省の光・量子飛躍フラッグシッププログラム (Q-LEAP) の枠組みにおいて、新たな量子系プラットフォームとして冷却原子の多体量子状態を利用した量子情報処理システムの実現に取り掛かっておられます。

ちなみに、紫綬褒章は2002年以降スポーツ選手にも対象範囲が広げられ、今回の褒章では東京オリンピック・パラリンピックで金メダルを獲得された



77名の選手にも紫綬褒章が贈られました。そして、オリンピックで金メダルを複数回授与した選手には複数回の紫綬褒章の授与が行われるそうです。大森教授には、科学者としてはおそらく前例のない紫綬褒章複数回受賞を目指し、今後も量子科学技術の発展に尽力していただきたいと陰ながら祈念しております。

(奈良先端科学技術大学院大学  
香月 浩之 記)

## 平本昌宏教授に応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会業績賞

このたび、「応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会業績賞」を受賞しました。選考理由を以下にそのまま記します。

「受賞者である平本昌宏氏は、有機分子・バイオエレクトロニクス (M&BE) 関連分野の黎明期から有機半導体の物理をベースにした研究を続けられており、有機薄膜太陽電池の研究において注目を集める業績を上げ、国内のみならず世界を牽引している。その内容は、有機薄膜太陽電池の構造制御 (特にタンデム型セルおよびバルクヘテロ接合)、有機光電変換素子の光電流増倍

現象、有機半導体の超高純度化と精密ドーピングなど、いずれも有機半導体の学術的基盤形成に貢献するのみならず、応用面でも新展開に結びつくものであり、学術的および社会的意義の高いものと評価される。さらに平本氏は、M&BE分科会の関係する学術活動に多大な貢献をなすのみならず、多くの後進の育成にも尽力され、平本氏の下で研鑽を積んだ研究者が多くの機関で活躍するとともに、学会活動でも多大な貢献をなしている。」

私は、分子研の研究技官として坂田忠良先生の薫陶を受けたのち、1988



年、30才の時に有機半導体分野に入りました。当時、Ching W. Tang教

授の、有機ELと有機太陽電池の論文が出た直後で、この分野は、電器メーカー、大学が入り乱れての大盛り上がり状態で、大変な熱気にあふれていました。私の科学者としての研究の方向は、それによって決まりました。それ以来、新しいアイデアに基づく成果を追い求めて、上ばかりを見つめて突っ走っているうちに、あっという間に30年が経ち、いつまでも初心者で若い

もりでいたのが、研究生の終わり1年前の年齢となっており、全てがあまりにも早く過ぎ去り、“一炊の夢”のように感じています。個人のなせることは、あまりにも少なく、今からが面白いのに!!!、とも思います。思えば、有機半導体は、分子研所長であられた井口洋夫先生が生み出され、私は、亡くなられた関一彦先生に目をかけていただきました。不思議な縁です。1人

の科学者として、分子科学研究所という研究の場を与えられたことは、なんという運の良さだろうと思ひ、感謝しております。私も最後まで頑張りますが、幸いにも、将来性のある若い研究者が力強く育ちつつあるのを見て、我が国の将来は明るいとも思っております。

(平本 昌宏 記)

## 平 義隆准教授に第64回放射線化学討論会優秀賞

2021年9月にオンラインで開催された第64回放射線化学討論会における発表について優秀賞(一般)を受賞しました。優秀賞は学生の部と一般の部に分けられていて、40歳未満の発表者が対象でした。発表題目は、「UVSOR-IIIにおけるガンマ線誘起陽電子消滅分光法の開発」です。この研究は、私が博士課程在籍時に特別共同利用研究員として分子研に滞在していた時からずっと開発を進めてきた計測技術です。産総研在籍時に一時途絶えていましたが、2018年頃から再開して徐々に開発を進め、2020年に分子研に移ることで加速度的に開発が進み今回の受賞に繋がったと思っております。サポートして頂いた皆様に深く感謝いたします。

UVSOR-IIIを含む放射光施設の一般

的な光の発生には、電子ビームを磁場で曲げる方法が用いられています。磁場を発生する方法には、N極とS極が1組の偏向電磁石やN極とS極が周期的に入れ替わるアンジュレータがあります。私の研究では、電子蓄積リングを周回する電子ビームにレーザーを当てて、波長の短い光であるガンマ線を発生しています。磁場を用いる方法に比べてさらに4桁波長の短い光を発生することができます。UVSOR-IIIではこのガンマ線を用いて、陽電子による材料分析を行っています。陽電子は電子の反粒子であり、普段身の回りには存在していません。しかし、ガンマ線を材料に照射すると、対生成と呼ばれる現象によって材料内部で陽電子が発生します。この陽電子はナノメートルの欠



陥に捕獲される性質があり、陽電子の消滅時刻などを測定することで欠陥に関する情報が分かります。現在、この計測技術は施設利用で外部のユーザーが利用可能です。今後も計測技術の開発を進めることで更なる利用の拡大を目指していきます。

(平 義隆 記)

## 小坂谷貴典助教に2021年度日本表面真空学会会誌賞

この度、2021年度日本表面真空学会会誌賞を受賞いたしました。この会誌賞は、学会誌に掲載された原著論文以外の記事を対象として、会員の啓蒙に特に大きく貢献したと認められる著者に年一回授与されるも

のです。受賞対象となった論文は、2019年度にe-Journal of Surface Science and Nanotechnologyに掲載された「Surface Chemistry of Carbon Dioxide on Copper Model Catalysts Studied by Ambient-

Pressure X-ray Photoelectron Spectroscopy」というタイトルの総説記事です。

この論文では、雰囲気光電子分光法(AP-XPS)の概論と、SPring-8東京大学放射光アウトステーション物質科学

ビームラインBL07LSUに設置された軟X線AP-XPS装置を用いて得られた一連の研究成果に関して記述しております。私は2013年のこの装置の立ち上げから以後の改良まで一貫して携わっており、今回賞をいただけたことは非常にうれしく思っております。この装置最大の特徴は気相が存在する準大気圧条件下で光電子分光測定ができることで、これによって固気界面で進行する不均一触媒反応をその場でリアルタイムXPS測定が可能となります。触媒反応場をダイレクトに分光測定する手法はオペランド分光とも呼ばれておりますが、そのような手法は触媒研究において今後ますます重要になってくると思われま。

本論文では二酸化炭素の触媒転換反応を扱っており、カーボンニュートラルの実現とも密接に関わっております。触媒表面反応機構を分光的に明らかにすることを目指しておりますが、触媒反応は多数のプロセスが関わる複雑系のため、一つの実験手法だけでは到底理解することはできません。そのため、今後はHAXPESやオペランド赤外分光など複数の実験手法を駆使して、二酸化炭素の表面化学の更なる理解を目指してゆきたいと思っております。

この論文の共著者である東北大学国際放射光イノベーション・スマート研究センターの山本達先生、東京大学物性研究所の松田巖先生および吉信淳先生には多大なるご支援とご指導を賜り



ました。この場をお借りして感謝申し上げます。また、松田研、吉信研の研究室の方々、あるいはBL07LSUのビームラインスタッフの方々にも様々な場面でご協力いただきました。ありがとうございました。

(小坂谷 貴典 記)

## 第三回 UVSOR 次期放射光施設建設検討会

報告：極端紫外光研究施設 平 義隆

2021年8月20日午後に標記検討会をオンラインで開催した。UVSORは、1983年のファーストライト以降40年近く経過し、装置と建物の老朽化が問題となっている。UVSORでは、次期放射光施設建設に向けた検討会を分子研内で開催しており、今回は、次世代の電子加速技術と光源技術に焦点を当て、専門家の先生方に講演して頂く機会を設けた。所内だけでなく、UVSORと連携しているHiSORとKEKの職員を含む計40名が参加し、活発な議論が行われた。

放射光を利用するためには、蓄積リングで電子ビームを周回し、偏向電磁石や周期磁石列(アンジュレータ)を用いて放射光を発生するのが一般的である。装置全体は、電子蓄積リングの他に、それに電子ビームを入射する入射器と呼ばれる加速器も含めて構成される。従来の入射器では、高周波電場により電子を加速する事が行われているが、はるかに短い距離で同等の電子エネルギーまで加速できるレーザー航跡

場加速や誘電体加速の開発が行われている。レーザー航跡場加速は、世界中複数のグループで開発が行われており、エネルギーや電荷量など独立に開発されている内の個々の最良値は、高周波加速と同等の性能が出ている。最新の開発状況に関する講演を拝聴し、将来、蓄積リングへの入射器がレーザー航跡場加速や誘電体加速に置き換わる可能性を感じ、今後の研究開発を注視する必要性を認識した。

一般的に蓄積リングを周回する電子ビームのパルス幅は数100ピコ秒であり、フェムト秒領域の高速現象を観測するには不向きである。その問題点を克服するハイブリッド型リングの提案についての講演があり、入射器で生成されるフェムト秒領域の電子ビームを蓄積リングに入射し1回だけ周回して放射光を発生するというものであった。しかも多数周回する電子ビームとの同時周回も可能であり、通常のピコ秒放射光と同時にフェムト秒の放射光も利用できるという事であった。ハイブ

リッド型リングは、放射光利用の多様性向上を期待できる内容であった。

次期UVSOR-IV電子蓄積リングの現状の設計に関する講演では、最新技術を取り入れることで電子エネルギー1GeVのリングにより真空紫外域で回折限界に迫る性能を達成でき、アンジュレータ放射の輝度を現状より1桁向上する事が可能であることが示された。また、偏光変調型紫外光・軟X線を発生できる分割型アンジュレータに関する講演では、偏光放射光利用の幅広い可能性が示され、次期計画においてその導入を積極的に検討する必要性を感じた。

次期放射光施設では、放射光に加えてレーザー光源もユーザーに供給し、利用目的に合わせて最適な光源を選択し利用できるよう整備し、利便性と多様性を重視した高度研究環境をユーザーに提供できる施設の建設を目指しています。引き続き皆様の変わらぬご協力を賜りたく、よろしくお願いいたします。





## 先端的ナノ顕微分光によって 極微物理化学のフロンティアを切り開く

くまがい・たかし

2011年 京都大学大学院理学研究科化学専攻 博士後期課程修了 (理学博士)

2011年 日本学術振興会 海外特別研究員 (フリッツ・ハーバー研究所)

2013年 フリッツ・ハーバー研究所 グループリーダー

2016年 科学技術振興機構 さきがけ研究者 兼務 (2020年まで)

2020年 分子科学研究所 准教授 (兼任) (2021年3月まで)

2020年 北海道大学 客員准教授

2021年 分子科学研究所 准教授・総合研究大学院大学 准教授

2021年4月1日付でメゾスコピック計測研究センターに着任しました。こちらへ来る前はドイツのベルリンにあるFritz-Haber Institute (FHI) にいましたので、2019年から始まったコロナ禍の影響が直撃する中での異動となりました。世界的に状況(生活様式)が一変する中、着任と研究室の立ち上げにあたり川合所長、メゾスコピック計測研究センター長の岡本先生、人事選考部会長(当時)の秋山先生、技術推進部の繁政部長と内山主任をはじめとする分子研の皆様、FHI DirectorのMartin Wolf先生をはじめとするFHIの皆様から多大なご協力とご支援をいただいたことに感謝しています。お陰さまでこの研究室紹介を執筆している2021年12月までに明大寺地区の実験棟地下に新しい(素晴らしい)実験室と装置を立ち上げることができました。私と同じく2021年4月1日付けで着任した西田純助教と始めた私たちのグループは先端的なナノ顕微分光や可視・赤外領域の非線形分光の開発と時空間極限における光と物質の相互作用の解明をテーマとしています。現在は私の専門(走査プローブ顕微鏡)と西田さんの専門(超高速赤外分光)とを融合させ、新しい研究をどのように

展開していくかを考え、所内外の人たちと議論を交わす日々を楽しく過ごしているところです。着任のタイミングで研究所からのスタートアップ資金に加え、科研費帰国発展研究とJST創発的研究支援事業に採択していただくことができ、超高速・超広帯域レーザーシステムと走査プローブ顕微鏡とを組み合わせた先端的なナノ分光を実現できる装置を幸先よく導入することができました。これから装置やソフトウェアに工夫を加え、可視から赤外の幅広い波長域において時間分解・多次元・多変数のナノ顕微分光を実装していく予定です。また、分子研の有する放射光施設(UVSOR)を利用した新しい計測法の開発にも着手しています。やりたいことはたくさんありますが、しばらくは先端計測を基軸とした自分の研究の在り方をよく考え、試行錯誤する時期であると位置づけています。

さて、分子の多様性に起因する自然現象は非常に多岐にわたります。分子に含まれる元素や分子構造をわずかに変えるだけで発現する物性や反応が大きく変わることによって化学の面白さを見出す人も多いのではないのでしょうか。一方で、このような多様性の裏には普遍的な原理が隠されているはずで分

子の生み出す繊細で複雑な現象、そして生体に見られるような美しく統合された分子システムにおける機能発現のメカニズム(謎)を系統的に理解し、演繹的な考え方を与えるのが物理化学です。化学現象の根底には私たちの目には見えない量子力学が支配する電子や原子核の構造と運動があり、私たちが実際に目にする物質の巨視的な性質は統計力学によって微視的な物理法則を基に記述しています。私は化学の原理を物理学的な手法によって追究する物理化学という学問に魅せられ、計測による実験から自分なりの理解を得ようと研究を続けてきました。

これまでに行ってきた研究の一つは走査プローブ顕微鏡の先端計測を応用した一分子計測です。分子の構造と動力学(ダイナミクス)の理解において一分子計測はその根源的な部分を観察します。一分子計測では、例えば、多数の分子をアンサンブル平均(巨視的な応答)として観測する場合には隠されてしまう微視的な現象をはっきりと見ることができます。溶液中の反応を例にとってみれば、個々の分子は絶えず揺動する溶媒分子によってそれぞれ異なる周辺環境と相互作用しています。そのため反応に寄与する特定の

分子の構造とダイナミクスを詳細に知るためには一分子レベルの計測が必要です。私は最も単純な元素である水素が含まれる化学現象について興味を持ち、特に水素結合の構造とダイナミクスを一分子計測のアプローチによって調べました。水素結合は私たちにとって身近な分子である水や生体機能の根源を司るDNAなどにおいて重要な役割を担っており、「付かず離れず」と形容できる中間的な相互作用の強さが特徴です。また、最も軽い元素である水素を介して形成される水素結合では核の量子効果（トンネル効果やゼロ点振動）とポテンシャルエネルギー面の非調和性とその構造とダイナミクスに影響を及ぼします。これらの繊細かつ複雑な水素結合を走査プローブ顕微鏡によって一分子レベルで直接観察するという研究を博士の学生からポストドクの期間に発展させました。水素のリレー反応や水素の量子ダイナミクスを可視化した実験、一分子を「押しして」分子内の水素を動かす実験などが代表的な成果です（参考文献1-4）。これらは自立した研究者になるための基礎を確立する期間に自分なりに考えて行った研究で、これらの成果がGerhard Ertl Young Investigator Awardという表面科学分野の若手研究者に対する国際的な賞の受賞対象になったことはその後のキャリアにおいての自信につながりました（Gerhard Ertlは過去にFHIのDirectorを務められ、2007年のノーベル化学賞を受賞された方です）。

私は2013年4月からFHIでResearch Group Leaderとして研究室を主宰する立場で研究を行っていました。国際的なグループを率いながら新しくはじめたのが走査プローブ顕微鏡とレーザー分光とを組み合わせた極微分光の研究です。ここでの極微は $10^{-9}$  m (ナ

ノメートル)の空間スケールを意味しており、それは物質の構成単位である分子のサイズです。光と物質の相互作用には自然科学において普遍的な重要性があり、そのメカニズムを理解することは物質の成り立ちを解明する分光学、光触媒や光電（エネルギー）変換デバイスなどの技術的な応用に不可欠です。極限的な空間スケールにまで閉じ込めた光と物質（分子）との相互作用を理解し、それを応用した技術へと発展させることを目指した研究を行いました。極微空間に光を閉じ込めて操るプラズモニクスの技術とレーザー光学系を組み込むことのできる走査プローブ顕微鏡とを合わせた先端的な装置を作り上げました。この開発は日本企業（ユニソク）とFHIとの産官連携によって行い、世界に二つとない装置を完成させることができました。この装置によってナノスケールの光と物質の相互作用や超高分解能・超高感度の極微分光などについて成果をあげることができました（参考文献5-8）。主宰者（PI）としての研究をFHIというドイツを代表する研究機関で、そして素晴らしい仲間とともに実施できたことは幸運であったと思います。FHIでの研究がドイツ物理学会の権威あるGaede Prizeの受賞対象となり、現地の学術界から評価していただいたことは誇りに思っています（Wolfgang Gaedeは真空工学の先駆者で近代の表面科学の礎を築いた方です）。加えて、日本表面真空学会の国際的な賞であるHeinrich Rohrer Medalの受賞対象にもなったことも嬉しく思っていま

す（Heinrich Rohrerは走査トンネル顕微鏡の開発者の一人で1986年のノーベル物理学賞を受賞された方です）。また、FHIでの研究期間に北川宏先生（京都大学）が総括を務めていたJSTさきがけの「革新的触媒の科学と創製」に参画することができ、異分野の方々との交流を通して研究に対する考え方を広げることができたと思います。

今後の研究構想ですが、超高速・超広帯域・多次元・多変数極微分光を基軸として高度な物質機能の解明に取り組んでいきたいと考えています。化学現象の根源は電子と原子核の運動、そしてそれらの相互作用にあります。光はこれらの自由度に働きかけることができますが、極限的時空間に閉じ込められた光と物質がどのように相互作用するのかはまだよく理解されていません。そこでは光と物質が混ざり合った量子状態が形成されるかもしれません。先端的なナノ顕微分光によって未開の分野へ挑戦し、物理化学の教科書に新しいページを刻むことのできるような研究を分子研で展開していきたいと考えています。

コロナ禍によって国際的な活動が厳しく制限される中、分子研とFHIは2021年4月より国際研究協力協定を締結しました。物理化学の分野において日独においてそれぞれ中核的な役割を担っている両機関の関係発展を通して、将来の国際的な研究・教育協力にも貢献していくことができればと考えています。

1. *J. Am. Chem. Soc.* **139**, 12681–12687 (2017).
2. *Nature Chemistry* **8**, 935–940 (2016).
3. *Nature Chemistry* **6**, 41–46 (2014).
4. *Nature Materials* **11**, 167–172 (2012).

5. *Nano Lett.* **19**, 5725–5731 (2019).
6. *Nano Lett.* **19**, 3597–3602 (2019).
7. *Nano Lett.* **18**, 152–157 (2018).
8. *Phys. Rev. Lett.* **121**, 226802 (2018).



## 分子研での研究と生活を振り返って



### 田代 基慶

(東洋大学理工学部 教授)

たしろ・もとみち / 2002年京都大学大学院にて博士(理学)取得。マックスプランク研究所、カリフォルニア大学デービス校、エモリー大学、京都大学福井謙一記念研究センターでのポストドク生活を経て2009年から2014年まで分子科学研究所特任助教。神戸の理研・計算科学研究機構(現計算科学研究センター)で研究員として2年間過ごした後に2016年より現所属。

2つ持つ分子を作り出すことができます。そのような分子の状態は光電子スペクトルやオージェ電子スペクトルでどのように見えるのか、実験測定データには分子に関わるどのような情報が隠れているかなどについて江原教授や東北大・上田潔教授らと共に取り組みました。X線自由電子レーザーだけでなく、放射光実験でも内殻二重空孔を持つ分子を検出できることが分かるなど、関連する実験結果が世界各地で始めた時期でもあり、非常にスピード感のある研究だったことが印象的です。

江原グループでは「分子の精密分光による素粒子(ニュートリノ)パラメータ決定」に関わる研究も行いました。これは岡山大のグループ(笹尾昇、吉村太彦教授ら)が将来構想として考えている実験に関係しています。原子や分子が励起状態にある場合、素粒子の「弱い相互作用」を考慮すると、ニュートリノ2つと光子1つが同時に放出される非常に強度の弱い過程が存在します。この際に放出される光のスペクトル形状を調べることで、ニュートリノ質量や反ニュートリノが存在するかどうかなどについて知ることが出来るのです。分子研での研究ではヨウ素分子が使用されることを想定し、電子・振動励起状態の理論計算によって測定結果が素粒子パラメータにどのように依存するのか予想しようとしていました。私自身は学部・修士では物理(主に素粒

子・宇宙分野)をやっていて、博士から物理化学に転向した経緯があるのですが、まさか分子研で再び素粒子に関わる課題を行うことになるとは思いませんでした。共同研究相手の岡山大・笹尾教授は私が学部一回生の時の電磁気の先生でもあり、大学院時代は隣の素粒子実験グループに居られた方ですが、こちらも一緒に研究を行うことになるとは夢にも思いませんでした。

研究以外の面では、岡崎に来てから登山に関わる活動を始めました。分子研に来る2-3年前から山登りを始め、立山や穂高などの一般登山道をテント持参で歩いていました。しかし、より難しい場所にも行きたいと思うようになり「岡崎山岳会」という地元の山岳会に入会したのです。ここではロッククライミングやボルダリング、アイスクライミング、沢登り、冬山登山、山スキーなど山に関わる多くの活動について学びました。また、研究所ではあまり交流することのない岡崎や豊田など地元の人達と話すことは新鮮な体験でした。岡崎での生活を振り返ると良い印象が多いのですが、大部分は山関連の活動や会の人たちとの交流によるものだったような気がします。岡崎を離れて7年になりますが、未だに年に数回はクライミングなどで岡崎の人達と交流があります。ここのメンバーと大晦日に甲斐駒ヶ岳山頂直下にある標高差1000m以上の氷瀑を2日くらい

分子研には2009年から5年弱、理論・計算分子科学研究領域の江原グループで特任助教として在籍していました。既に7年前のことで記憶も微妙に薄れつつありますが、分子研レター「分子研を去るにあたり」を書かずに分子研を出てしまったのが多少心残りでしたので、この機会に当時の研究や生活、近況などについて書いてみたいと思います。

分子研に来る直前までは「低エネルギー電子と分子との衝突過程」の理論計算に取り組んでいたのですが、そのサブ課題には「X線による分子内殻電子の電離過程」も含まれていました。その縁もあり、江原グループでは「分子に内殻空孔が同時に2つ存在する状態」に関する研究を主に行いました。通常の放射光の場合、X線の光子が分子に当たって内殻空孔が1つできたとしてもオージェ崩壊等ですぐに埋まってしまうため、内殻空孔が同時に2つ存在する状態というのは実現困難と考えられていました。しかし、2010年前後に世界各地で稼働を開始したX線自由電子レーザーであれば1つ目の内殻空孔が埋まる前に追加の内殻電離を起こすことが可能であり、内殻空孔を

かけて延々とアイスクライミングで登り続けたこと、フランス Mont Blanc (4810m) にTrois Monts route というアイスクライミング混じりのルートから登ったことなどは印象に残る体験でした。自分が岡崎を去って以降、分子研からこちらの会に参加した人の話は自分の知る限りでは残念ながら居ないようです。分子研所属の皆さんで、山に関心のあるかたは一度見学に行ってみては如何でしょうか（普通のハイキングもやっているはずです）。

現所属の東洋大学理工学部・応用化学科は2016年に着任しました。これまで働いてきた研究所とは全く異なり、教育中心の私立大学となります。着任からしばらくは雰囲気・文化の違いなどに大変戸惑いました。分子研レター

で紹介される多くの大学とは異なり大学院進学率は10%程度であり、学生の多くは数学・英語・パソコン操作を苦手としています（理論や計算で分子化学をやるのはなかなか大変です）。ここで私は数学や基礎化学の講義、化学実験や卒業研究などを担当しています。学生の研究室配属は基本的に4年生からなのですが、最初の4カ月程度は基礎知識を付けるための勉強と就活で終了してしまいます。実質的に卒業研究に割ける時間は半年程度となってしまうので、論文に結びつくようなテーマはなかなか難しいのが現状です。それでも学生の興味に応じて生体膜や高分子複合材料の分子動力学シミュレーション、深層学習による分子生成、量子化学計算を用いた星間分子の化学反

応シミュレーションなど様々なテーマを行って貰っていますが、これまで全く触ったことの無い話題を扱って喜んでいるのを見ると、こちらも嬉しくなります。

今から振り返ると分子研時代は授業や会議が全くなく100%研究に集中できた貴重な期間でした。そのような機会を与えて下さった江原教授には感謝しています。小杉信博教授(当時)には昼食・コーヒーを飲みながらの雑談などで大変お世話になりました。分子研在籍時の最後の1-2年では色々とお心配して頂き本当に感謝しています。他にも多くの方々にお世話になりました。分子研が今後も素晴らしい研究拠点として発展し続けることを願っています。



## 余裕について感じていること



### 櫻井 英博

(大阪大学大学院工学研究科応用化学専攻 教授)

さくらい・ひでひろ / 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)。東京大学助手、日本学術振興会海外特別研究員(ウィスコンシン大学)、大阪大学講師/助教授を経て、2003年-2014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(協奏分子システム研究センター) 助教授/准教授。2014年4月より現職。専門は有機化学。

分子研から大阪大学に異動したのは2014年4月ですが、その後もしばらく総研大生の学位審査や、また2018,19年度で客員教授をさせていただいたこともあり、頻りに訪問する機会がありましたので、正直、もう8年も経つのかとびっくりしています。特に、阪大異動後もしばらくの間自宅は岐阜県にあって、そこから大阪まで通っており、普段の生活は中京圏でしたので、ますます変化の感覚がなかったのかもしれませんが。実際、阪大より分子研の方がはるかに近かったの

で、呼ばればホイホイ来所していました(笑)。ちょうどコロナ渦の第1波が始まった2020年3月に大阪に引っ越し、その後出張も極端に減ったこともあり、ようやく最近、岡崎までの「遠さ」を感じるようになりました。

この2年は、ちょうど持ち回りの専攻長のタイミングになってしまい、通常とは異なる対応を迫られることも多く、また工学研究科の国際交流委員長も拝命しており、こちらも非常に難しい舵取りを任されています(というか

むしろ何もできないもどかしさ、という方が正しい表現でしょうか)。そんな中でも、分子研は早くから共同利用での滞在研究を認めていただき、研究室のスタッフ、大学院生は頻りに分子研設備を利用させていただいております。このように、外部ユーザーとして分子研を利用していると、改めて自身の分子研在籍当時との違い、特に「余裕」に対する感覚が変わってきたことを実感しています。

分子研准教授の10年は、よく言われ

るように、研究者としては天国の時代でした。大学と比較すれば潤沢な研究費と場所をいただき、また最も重要なのは、さまざまな雑事から解放され、ほぼ全ての時間を研究活動に充てられたことです。有機合成化学をバックグラウンドとして研究してきた身としては、分子研で見聞きすることが新鮮かつエキサイティングで、その後の研究の方向性に大きな影響を与えています。また海外交流も含めた対外活動も自由にさせていただき、何にも縛られない「余裕」があったと思います。一方で、当時の実際の研究活動そのものを振り返ってみると、実はせっかくの分子研のリソースを使いこなしていなかった、と感じています。それは自分自身や助教、ポスドクの人たちのプロモーションであったり、大学と比べると豊富とは言えないマンパワー（やはり合成研究は多少マンパワーが必要なこともある）などで、テーマ設定を思いっきり振り切る「余裕」があまりなかったのかな、と反省するところもあります。その点では、今の大学では、毎年志向もモチベーションもバラバラの学生が一定数オートマチックに研究室に配属されてくるシステムなので、逆にテーマ設定に関して言えば、かなりの「余裕」でリスクも取りやすく、振り幅広く設定することができているように思います。その結果、研究室自前の機器や装置では全く研究が成り立たないため、必然的に他の研究室や、分子研をはじめとした様々な機関にお邪魔して、実験を進めることになりました。間違いなく専攻内では最も学生の出張、あるいは他研究室での実験機会の多い研究室で、結果として共同研究の数も非常に多くなっています。そういった風土は分子研時代に培われてきたものだと思いますが、大所帯の研究室になったが故、という部分も間違いなくあります。

話は変わりますが、私が阪大に異動し

た年に、当専攻に国際英語コースが開設されました。設置審申請関連の大変な作業はほぼ終わっていたのですが、実際の始動に関する貢献を期待されました（実はこのために阪大に採用されたのかもしれませんが……）。意外にも、英語で講義することに関してはほとんど抵抗もなく引き受けていただき、これは本当に助かったのですが、最大の問題は、できたばかりで知名度も実績もないプログラムにどれほどの学生が応募してくれるかでした。特に、初年度から幸いなことに国費留学生特別枠に採択されたのはいいのですが、採択後から募集締め切りまで1ヶ月もない非常にタイトなスケジュールにはいきません。ここで、分子研時代からのネットワークを最大限活用しました（笑）。ものすごい数のメールを送り、また急遽強行軍でアジア諸国を回ってプロモートすることで、何とか様になる競争倍率になる程度の受験者を確認しました。このプログラムも7年が経過し、特に思い入れのある1期生、2期生の博士学位取得を見届けました（写真はその学位授与式の写真です。私が学位をとったわけではありませんが、なぜかとても嬉しそ

うとされています）。ようやく軌道に乗ってきた感じで、特に私が頑張っただけでも毎年15-20名程度入学してくるようになりました。また彼らは博士課程進学率が圧倒的に高く、問題となっている博士課程充足率の向上に大いに貢献しており、工学研究科の他の英語コースに比べても、順調にマネージされていると自負しています。最近はやや濫造とも言える博士課程学生に対するサポート体制がありますので、私費留学生にとって、博士課程については非常に進学しやすい状況にはなっていますが、相変わらず修士課程に関してはサポートが貧弱なままです。ただし、博士課程に進学予定の学生については修士課程2年からのサポート付きのプログラムもあり、大学も少しずつは環境を良くしようと努力しています。

改めて振り返ってみると、いまだに自分の行動が分子研時代を基準にしていることが多いことに気付かされます。これからも分子研には、信頼感のある共同利用機関として、若手研究者の憧れとして、ますます情報を発信してもらいたいと思います。



2021年9月期学位授与式（一列目右が筆者）。国際英語コース2期生などが参列。



## 分子研の思い出と近況



## 柴富 一孝

(豊橋技術科学大学 エレクトロニクス先端融合研究所 教授)

しばとみ・かずたか / 2001年名古屋市立大学大学院薬学研究科博士後期課程修了、博士(薬学)。2001年分子科学研究所博士研究員、2002年シカゴ大学化学科リサーチアソシエイト、2013年豊橋技術科学大学工学部 助手、2007年豊橋技術科学大学大学院工学研究科 助教、2013年同准教授を経て2021年より現職。

[専門] 有機合成化学 [趣味] バドミントン

分子研を出てから約20年が経つ。本稿では、当時の思い出と近況を併せて綴らせていただく。なにぶん昔のことなので若干の記憶違いと拙文をご容赦いただきたい。

おおよそ20年前、筆者が名古屋市立大学の大学院学生であった時に、当時の指導教官の魚住泰広教授から分子研に転出されることを告げられた。D2であった筆者に選択の余地はなく、名市大に在籍したまま岡崎に転居して分子研で研究を続けることになった。初めて分子研を訪れて驚いたのは実験室に何もなかったことである。今思えば当たり前前のことであるが、当時の大学、少なくとも筆者がいた大学では講座は引き継がれていくことが多く、転出もしくは退官する教授が実験室を空っぽにしていくことなど見たことがなかった。そこで、筆者を含めて4人の大学院学生とともに研究室の立ち上げを始めた。魚住先生の指導のもと、実験台の上にアングルを組み、ガスラインを整備するなどの慣れない作業を進めていった。この経験は将来役に立つことになった。魚住研が移籍してすぐに、所内の化学系研究室が集まって歓迎会が催された。所内で行われた簡単なパーティーであったが、他研究室の教員と気軽にビールを飲みながら談話できる雰囲気新鮮であった。教員、研究員、学生まで、皆が研究を楽しんでいることを

強く感じた。この会で隣の研究室を主宰されていた田中晃二先生から、若いうちに分子研で経験を積めることはとても良い経験になる、と声をかけていただいたことをよく覚えている。その他にも、セミナー室にTVを持ち込んで皆でサッカーの日韓W杯を観戦したことや、当時所長であった中村宏樹先生とバドミントンをしたことなどが思い出深い。中村先生は近隣の社会人バドミントンチームに所属しており、筆者も中学校から長年嗜んでいたことから、本格的に汗を流した。遊んでばかりいたわけではなく、研究に関しても様々な思い出がある。一番の思い出は論文が採択された時の喜びである。D3の1月の時点で学位取得に必要な最後の論文がアクセプトされていない状況であったが、2月にJACSにアクセプトされた。夕方、研究室のメンバーと食事に出かけていた時に、魚住先生から携帯電話に「論文がアクセプトされたぞ」と連絡いただいたことを良く覚えている。正規年数で学位を取得するためにはギリギリのタイミングであった。オーバードクターを覚悟してJACSにチャレンジしていた経緯もあり、喜びも入であった。

学位取得後は1年間ほど魚住研で研究員として仕事をさせてもらい、その後、魚住先生の紹介でシカゴ大学の山本尚先生の研究室でポスドクとして採

用していただいた。ちょうど山本先生が名古屋大学からシカゴ大学に移籍されるタイミングであった。分子研への移動時と同じく、アメリカで研究室の立ち上げをお手伝いすることになった。この時は先の経験が非常に役に立った。シカゴで一年半過ごしたのち、2003年の12月に豊橋技術科学大学で岩佐精二先生の研究室で助教(当時は助手)のポストをいただけることになり帰国した。2013年からは同大学の環境・生命工学系(現応用化学・生命工学系)の准教授として研究室を主宰させていただき、2021年7月に現職の本学エレクトロニクス先端融合研究所の教授を拝命した。これまでの応用化学・生命工学系も兼任しており、引き続き化学の研究と教育に従事している。豊橋では岩佐先生のご厚意で赴任当初から自身の研究テーマで研究を行うことができた。魚住研で学んだ遷移金属錯体の化学と山本研で学んだルイス酸の化学の他に、ハロゲン化合物の合成と反応に興味を持ち、一貫して研究を行ってきた。特に、第三級ハロゲン化合物のS<sub>N</sub>2反応に関する研究は長く続いている。単純な反応であるが意外と研究されておらず、まだまだ研究の余地があると思っている。最近では、この反応を利用して複雑な分子を単工程で合成することに成功しており、さらなる応用展開を鋭意研究している。教科

書に記載されているような単純な反応や現象には往々にして重要な課題が隠れており、新たな発見が得られれば波及効果が大きい。これは魚住研究室で学んだことであり、今も銘肝している。本学は高等専門学校（高専）からの編入生が多くを占める特殊な大学である。規模の小さい大学であるが、高専生主体であるが故か研究への意欲の高い学生が多い。これは本学の大きな強みで

ある。折しも本稿の執筆中に、新たに筆者の研究室に配属された3人のB3学生が挨拶に訪れてくれた。それぞれ高専で理論化学、天然物化学、有機合成化学を専攻しており、皆大学での研究に意欲を燃やしている様子で非常に頼もしく思った。先述の通り筆者は7月からエレクトロニクス先端融合研究所に移籍しており、これを機に異分野融合研究も展開しつつある。気持ちを新

たに、学生諸君と共に未踏へのチャレンジを続けていきたい。

以上、筆者の分子研時代の思い出と近況を雑駁に綴らせていただいた。分子研で学んだ経験を十分に活かしている自信はないが、日々楽しみながら研究と教育に邁進している。最後に、恩師である魚住泰広先生と山本尚先生に心からの感謝を述べて報告を結ばせていただく。



研究室の集合写真（一列目左が筆者）

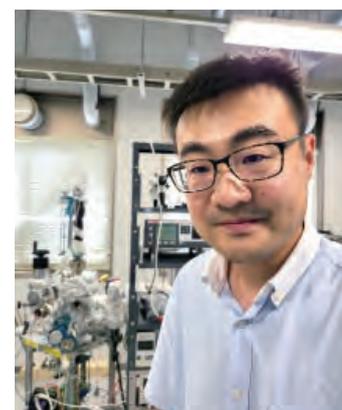


## 郭 磊 名古屋大学助教に2021年度加速器学会奨励賞

日本加速器学会は2004年に設立され、当時から主として若手研究者を対象とし、加速器の物理および技術に関する優れた研究に対して授与する奨励賞が設置されております。私は「半永久的に再利用可能な光陰極基板の開発および高性能光陰極の基礎研究」に関する業績を評価していただき、2021年度（第17回）の加速器学会奨励賞を受賞させていただきました。コロナ

禍で、事前に賞状を郵送していただき、受賞式や受賞記念講演もオンラインでの実施でしたが、大学院生の頃から参加してきた学会で、大変光栄な受賞でした。

私は最初に陰極の研究に触れるのは、卒業研究としてスカンジウム・タングステン陰極の電子放出特性を調べたことがあったからです。当時では、加速器や電子顕微鏡などの応用を考えず、



物性研究に近い形でした。その後、大学院生として来日し、広島大学で粒子加速器を体系的に学ぶことができました。さらに、UVSORで高性能光陰極の研究を行いながら、実物の加速器に触れることもできました。研究の重心は熱陰極から光陰極へ変わったが、陰極の研究に一筋でやってきました。

2018年（UVSOR在職）から米国のロスアラモス国立研究所のチームと協力し、炭素系材料を用いた新規な電子源の開発に取り組んでおり、加速器と電子顕微鏡の核心部分の革命的な性能向上を試みています。その成果の一つは今回受賞された業績で、グラフェンの良好な導電性および化学的に不活性で安定な表面が、良好な光陰極の形

成および再利用可能な基板として機能することが実証できました。先端的な加速器および電子顕微鏡でより強い競争力を持つための技術的な課題の1つをクリアすることができました。さらに、グラフェンコーティングによる化学的に活性な物質に晒される電極などの表面の保護、加熱による容易な清浄表面の再生、腐食や劣化などの抑制、長寿命化へも期待されます。

これらの業績では、XPSを用いて基板上の光陰極の残留物を定量的に評価し、ARPESでグラフェンの結晶状態を確認することが重要で、UVSORのBL6Uビームラインを利用して大切なデータを取れました。BL6Uの研究者たちのサポートはないとこの研究は成

り立たないと言えます。この場を借りて、松井先生をはじめとする皆様、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を申し上げます。

私は今、名古屋大学で新世代の研究員を育てるとともに、新しい光陰極の開発を行っております。今後も、UVSORでの貴重な経験を活かして加速器における材料工学の研究に幅広く取り組みたいと思います。

（郭 磊 記）

#### 郭 磊 (GUO Lei)

2017年に広島大学大学院先端物質科学研究科量子物質専攻博士課程(理学)を修了。同年に分子科学研究所極端紫外光研究施設博士研究員を経て、2019年より名古屋大学シンクロトロン光研究センターおよび名古屋大学工学部マテリアル工学科材料デザイン工学専攻助教に着任。



## 全 炳俊 京都大学助教に日本物理学会若手奨励賞、 日本赤外線学会研究奨励賞、日本加速器学会奨励賞

2021年3月に日本物理学会若手奨励賞を、同6月に日本赤外線学会研究奨励賞を、また同6月に日本加速器学会奨励賞を受賞いたしました。これらの賞は私が継続して実施してきた中赤外自由電子レーザー（FEL）開発とその利用に関するものです。それぞれ受賞理由は少しずつ異なっており、日本物理学会若手奨励賞は博士課程時代に開発した高周波位相・振幅制御・空洞離調による電子ビーム運動エネルギー安定化と2018年頃から研究している電子ビームの位相制御によるFEL発振効率の向上に関する一連の成果が受賞理由となりました。日本赤外線学会研究奨励賞の受賞理由は『中赤外FELの高性能化とその利用推進』であり、前述のFEL発振効率向上に加え、2020年度に達成したFELの世界最高変換効

率達成と分子研退職後に実施してきた共同利用・共同研究拠点（共共拠点）事業を通じての利用研究推進が受賞につながりました。この共共拠点事業では外部ユーザーにFELを使って頂いております。ユーザーとの共同利用実施にあたり、分子研在職時にUVSORにて国内外の研究者と共同利用共同研究を実施したことが大いに役に立ちました。精力的に共共拠点事業を実施してきた結果、FEL装置のユーザーグループ数は年15グループ程度まで拡大し、筆者の所属するエネ研全体では毎年約100件の課題申請がある状況となっています。最後の日本加速器学会奨励賞の受賞理由は『常伝導加速器を用いた共振型赤外自由電子レーザーの引き出し効率向上に関する研



究』であり、前述の位相制御によるFEL発振効率向上とFELの世界最高変換効率達成が対象となりました。

現在、筆者の研究対象としている中赤外FELは波長3.4～26 μmにて連続的に波長可変な大強度光源として利用可能になっているのですが、更なる中赤外FELの高効率化・高性能化による極短パルス大強度中赤外レーザーの発生とそれを用いた強光子場実験への応

用を目指して研究開発を進めています。もし、波長可変大強度中赤外光源を用いた研究に関してアイデアがある方が居られましたら、気兼ねせずにご連絡頂ければと思います。

また、今回の受賞とは外れますが、毎年、分子研にはUVSORでのガンマ

線を利用した同位体識別断層撮影技術開発に関する実験などで年に数週間滞在しております。分子研内で見かけたら声を掛けてやって頂ければ喜ばます。今後ともどうぞよろしくお願いいたします。

(全 炳俊 記)

### 全 炳俊 (ぜん へいしゅん)

2009年に京都大学大学院エネルギー科学研究科エネルギー変換科学専攻博士課程を修了。同年4月に分子科学研究所極端紫外光研究施設(UVSOR)電子ビーム制御研究部門の助教に着任。2011年7月より現職。



## 長谷川友里 立命館大学助教に Excellent Presentation Award

このたび、13<sup>th</sup> International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices '21 (ALC21)において、「Resonant photoemission spectroscopy of highly oriented coronene monolayer using photoelectron momentum microscope」というタイトルで発表し、Excellent Presentation Awardを受賞しました。ALCは表面真空学界のマイクロビーム部門主催によるもので、新規材料およびデバイスの評価を主なテーマとしたものです。コロナウイルスの影響により、開催が22年に延期され、来年度のプレ会議としてオ

ンライン開催されました。

本課題はUVSOR-IIIにおける光電子運動量顕微鏡(PMM)の立ち上げと同時に始められたものです。PMMは現在各国の研究施設に導入されつつありますが、アジアではUVSOR-IIIのBL6Uが最初の拠点です。とくに放射光施設に導入され運用された例は多くなく、軟X線領域の放射光と組み合わせた実験が可能であることが魅力となっています。BL6UにPMMが導入されてから稼働までに、松井教授ならびにUVSORの技術スタッフの方々による整備が進められ、現在もデータの質の向上並びに装置改良が進められています。

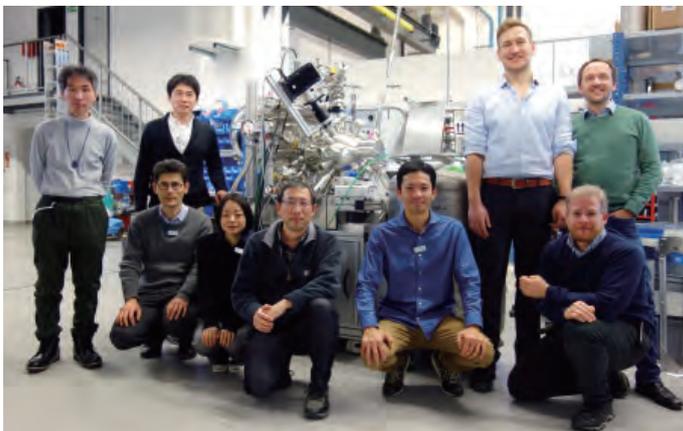
今回の発表は、高配向有機薄膜の

光電子運動量マップの取得、および共鳴光電子分光の結果を議論したもので、解良教授、松井教授のご指導のもと進められました。本研究はデモンストレーション的な部分もあります。放射光は強い光を使うことのできる一方で、分子の化学変化を引き起こしてしまうこともあり、安定してデータを取得するには工夫が必要です。放射光PMMでの有機薄膜計測の方法を最適化することで、今後、より広い範囲の研究者に利用してもらうことが期待できます。本研究についても議論の可能なデータを取得することができるようになります。まだ課題がいくつか残されていますが、その矢先にこのような賞をいただくことができ非常にエンカレッジとなりました。今後、よりよい研究成果としてまとめられるよう頑張っていきたいと思います。

(長谷川 友里 記)

### 長谷川 友里 (はせがわ ゆり)

2015-2017年度 JSPS 特別研究員 (DC1)、2018年3月筑波大学数理物質科学研究科博士後期課程修了、博士(工学)取得、2018年度原子力研究機構原子力科学研究所 博士研究員、2019-2020年度自然科学研究機構分子科学研究所(解良グループ) 博士研究員、2021年度より立命館大学理工学部物理科学科助教、JSPS 海外特別研究員。



前列左から3番目が筆者



## Impression on Okazaki and IMS

Elham Salehi (Researcher)

UVSOR Synchrotron Facility



It has almost been more than 2 years since I moved to Japan in September of 2019 to work at the Institute for Molecular Science as a researcher in the group of Prof. Masahiro Katoh in UVSOR synchrotron facility. Since my PhD duration I have worked on Free-electron Laser (FEL) in simulation, I was always interested to have an experimental experience in light sources; there is no synchrotron facility in my country yet. I was more than grateful to Prof. Katoh for giving me the chance to join his research group for two months in 2017. It was my first experimental experience in a synchrotron facility. So, I used this chance to learn about synchrotron radiation and expand my knowledge on light sources. In my first time visit to Japan, I found that the life in Okazaki is calm, and I really liked it.

Again, after two years, I have received a great opportunity from Prof. Katoh to develop my scientific career as a postdoctoral researcher at UVSOR, IMS. My research here is focused on wave form control of  $\gamma$ -ray photons from inverse Compton scattering to have narrow band gamma ray photons. In addition, I started to work on a lattice design for future plan of UVSOR. I have not been so familiar with the lattice design of synchrotron. However, with the help of Prof. Katoh and other members of the group, I have learned a lot about beam dynamics and readily started to design a new lattice for UVSOR-IV. I am proud that I was able to do lattice design for UVSOR-IV successfully. The climate and the cooperation with my colleagues are great.

I would like to express my gratitude to my colleagues and group secretaries for their support, especially Dr. Masaki Fujimoto has helped me not only in the lab, when necessary, but also with the many little things which arise with the life in Japan. I am glad to join the group of Prof. Katoh and working in a good research environment. I believe that the research experience in UVSOR will enhance my careers.

Besides my work at IMS, I have also been able to have valuable experiences in my life in Japan. It may not be necessary to explain but I came to Japan with my daughter. I am too glad that she can have a good experience of a lifestyle in Japan, and she could learn Japanese language well as her second language; support of Mishima elementary school teachers is admirable. During our life in Okazaki, we have tried to experience Japan and its culture. We enjoy Sakura tree blossoming and various festivals in Okazaki and visited some places nearby. Unfortunately, due to the global pandemic of Covid-19, we stopped traveling around Japan. So, we mostly prefer walking around Otogawa river and Okazaki castle to enjoy our time at weekends. In between my second child was born, and I expected living in Japan would be too tough with two kids. Now, I feel the managing of my life with kids is not difficult. So, I would like to thank the UVSOR group members, secretaries and the IMS staffs for their help and kindness. I am sure I will keep unforgettable memories of pleasant days in IMS and Okazaki.

## 分子科学研究所 外国人運営顧問 (2017-2020年) Benjamin List 教授の 2021年ノーベル化学賞受賞に寄せて

蕎麦@茶の子 (岡崎)

分子科学研究所の最も最近の外国人運営顧問を務められた Benjamin List 教授 (Max Planck 石炭研究所ディレクター) が、同氏が世界を牽引し発展させてきた「Development of Asymmetric Organocatalysis」において2021年のノーベル化学賞を受賞されました。運営顧問を務めていただいた研究所の一員として、また個人的友人として多くの接点を持つ List 教授の受賞は大変嬉しく、また近縁の研究分野に身を置く者として大いに元気付けられるものでした。ここに心からの祝意を表したいと思います。

さて、とはいえ彼は日本語で書かれたこの駄文を読むこともないでしょうから、ここからは個人的な付き合いも含め、彼と分子研との接点について記してみたいと思います。Ben と初めて会ったのはいつのことか、正確には思い出せませんが、たぶんどこかの国際学会で面識があり、また Max Planck 石炭研究所に筆者が招かれた時にも (当時の Manfred Reetz 研究所長のホストによる) もちろん会っている。そして決定的に近くなったのは、ドイツの出版社が刊行している有機合成化学の国際学術誌の編集委員として一緒に仕事をするようになったことによります。今もまだ継続中のこの関係はすでに十数年に及び、必ず年に一度は合宿形式の編集会議で数日間を共に過ごしてきました。一緒にイタリア、スペイン、フランス、クロアチア、などなど楽しく旅をしてきました。一度はこの編集会議を日本に誘致して金沢で合宿、観光、能登の寿司屋でグルメ三昧。そんな中で Ben を親しい友人として、そして信頼できる一流の人間として付き合いってきました。

さて時を経て2017年。当時、生命・錯体領域の主幹であった私は外国人研究者による領域の点検評価を受けるべく Ben を招くこととしました。領域の点検評価という、そこそこしんどい面倒な仕事を、すでに有名人であり超多忙な Ben ですが、快く引き受けてくれました。もともと日本が大好きな Ben ですからね。しかし多忙ゆえになかなか日程が確定できず、これまで超多忙な川合所長との日程調整は結構大変でした。川合所長からも「魚ちゃん、こういうことはもう少し早めに調整してよ」と言われるほどギリギリの調整。でもちゃんと点検評価は無事に実行されました。2017年11月のことです。そして、Ben がまとめた点検評価が極めて的確で真摯な内容であり、その書きぶりも川合所長が深く首肯するものであったことから「魚ちゃん、来年も来てもらって」「ついでに研究所全体の国際諮問委員も頼むわ」となって2018年11月の再度の点検評価、そして2019年12月には他の運営顧問の先生方とともに研究所全体の Advisory Council 会議へと、3年に亘って分子研の評価に携わっていただくことになりました。その間、本当にとっても真剣に評価をしてくださいましたし、美味しいメシも随分一緒に行きました。その節は本当にお世話になりました。Ben が岡崎に来ると必ず行きたがる蕎麦屋での写真を載せときます。また行こう！

かつての恩師に「一流は一流を呼ぶが、二流は三流を呼ぶ」と言われたことがあります。基本的には人事選考に際して肝に銘じている言葉です。自分自身が一流かどうかは全く自信はないものの、せめて二流に堕ちないために、最初2017年の点検評価に際しては自分よりも数ランク格上の研究者を招こうと考えていました。幸いにも「ちょっと面倒な仕事だけど来てよ。メシ奢るよ！」と言える相手の一人に Ben がおり、迷いなく彼に声をかけました。そんな Ben の名がノーベル賞発表の web 実況で呼ばれた時は「おおお〜〜〜！！」と、しばし呆然。本当に嬉しかった。研究所としても諮問する相手が一流であることは、研究所が一流であるために必須の条件です。その意味でも一点の曇りもなく良い受賞でした。

そんな「仲間」がノーベル賞の荣誉に浴するかどうかは結果論ではあるけれど、せめてそんなレベルの一流の仲間を次の世代の分子研の運営顧問に招くことは本当に重要です。研究所を担う次の世代の皆さんも是非とも意識して良い仲間とのネットワークを作ってください。

一昨年、Ben が重いのにわざわざドイツから運んできた木箱に入った立派そうなドイツワインはますます抜栓のタイミングに悩みます。そんな Ben と最近2年ほどはコロナ禍で web 会議でモニター越しに会うだけですが、一応来年はイタリアで会う予定が組んであります。今からすでにワクワクしてます。

Ben, おめでとう。また一緒に飲もう！

(魚住 泰広 記)



アウトリーチ活動

分子科学研究所一般公開2021開催報告

10/23(土)に分子科学研究所一般公開2021「見えない世界見放題!!分子研プライムで生配信」をオンラインで開催しました。一般公開では初のオンライン開催です。岡崎コンファレンスセンター中会議室にスタジオを設営し、10時から16時の6時間、ノンストップでライブ配信を行いました。事前に作成した動画を流し、YouTubeとニコニコ動画のチャットの質問に答えていく形式です。その他、講演会、若手研究者座談会、プチサイエンスショーをライブで行いました。リハーサルを入念に行ったため、ほぼトラブルなく時間通りに進み、無事配信を終えることが出来ました。また、2チャンネルで配信したため、総視聴者数は約30,000人と多くの方にご視聴いただき、全国へアピールすることが出来たのではないかと思います。その後、分子研公式YouTubeにアーカイブ動画をアップしていますが、SNS等での告知効果もあり再生回数が一般公開当日の2倍(12月1日時点)となっています。広報として大変貴重な財産を得ることが出来ました。下記に運営する上で取り入れて良かった点についてまとめました。皆様のご参考になれば幸いです。

最後になりますが、ご尽力いただきました中村敏和チームリーダー、技術職員の皆様、ご協力下さった皆様にご心より感謝いたします。

1. スタジオからの配信は配信会社に依頼した。カメラアングルからマイクの音量、画面構成等こちらの要望にも応えていただき、満足いく配信が出来た。
2. 時間通りに進めるために司会はプロの司会者をお願いした(配信会社より数名紹介していただき、その中から選定)。司会者との打ち合わせは事前にZoomで1回と当日開始前に行ったのみであったが、事前にシナリオを読み込んで下さり想像以上の進行の良さ・リアクションの良さで、番組を盛り上げつつ滞りなく進行してくれた。
3. YouTubeおよびニコニコ動画のチャット対応に質問対応2名と運営側コメント入力1名を配置した。チャットの質問はslackで司会者とMCに送り、質問にほぼ回答することが出来た。また、運営側からコメント(今から始まりますよ等)を適宜入れることで、視聴者への呼びかけを行うことが出来た。
4. リハーサルを入念に行った。計3回行ったが、うち2回は会場を通しリハを行ったため、各担当者がやるべきことをしっ



写真1 当日の様子(左:MCを務めた中村敏和チームリーダー、右:司会者の荒井未玖さん)。



写真2 前日のリハーサルの模様。

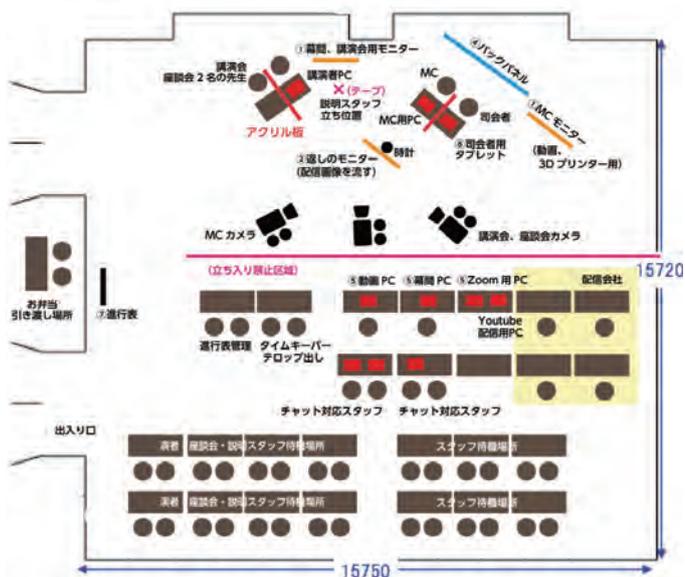


図1 スタジオ配置図(多少の変更あり)。



当日の様子は分子研公式YouTubeもしくはこちらよりご覧いただけます。

かり把握できた。また前日には、本番と同様のスタジオを作り、進行方法、カメラアングル、マイクの音量、画面構成等を配信会社と最終調整を行ったため、当日はスムーズにそして満足いく画面を配信することが出来た（写真2）。

5. 会場の配置図とシナリオを作成（図1）。運営スタッフと共有することで、当日の流れ、各自の業務内容を把握することが容易となった。

（広報室 記）

## 分子科学フォーラム129回・130回開催報告

第129回分子科学フォーラムでは、「宇宙の中のミクロ、ミクロの中の宇宙 ～はやぶさ2帰還試料のナノ有機物分析～」と題して分子科学研究所極端紫外光研究施設の大東琢治助教による講演が行われました。本フォーラムは、2021年10月23日にオンラインで行われた分子科学研究所一般公開の中で、特別企画としてライブ配信されました。小惑星探査機はやぶさ2のサンプルリターンが成功し、目標を大幅に上回る5g以上の試料「小惑星リュウグウの砂」が得られたことは今年大きなニュースになりました。大東助教は分子研の放射光施設UVSORに設置された走査型透過軟X線顕微鏡（STXM）を用いて、この砂に含まれる有機物の分布や種類などについて分析を行っています。STXMは「平たく言えばとても細かいものが見えるレントゲン」とのことですが、小さな砂粒のレントゲン撮影は、普通にイメージする天文学とは少し違うものにも感じられます。しかし隕石のような地球外の物質の分析は、光や電波の観測とは別種の「ミクロの中の宇宙」とのコミュニケーションであり、はやぶさ2帰還試料は、起源もわからず変質している地上で拾った隕石に比べて、とても貴重な、場所がわかっているパズルのピースであると述べられました。具体的な分析結果については今後発表されるとのことです。今回のオンライン一般公開はYouTube Liveとニコニコ生放送でライブ配信され、累計3万명에迫る方々にご視聴いただきました。講演配信中のチャット欄には、沢山のご質問、コメントをいただき、これを一般公開の司会陣が読み上げる形で、活発な質疑が行われました。

2021年12月3日に行われた第130回分子科学フォーラム（YouTube Liveによるオンライン開催）では、大阪大学栄誉教授の正岡重行先生に「人工光合成への挑戦 ～空気や水から価値ある分子を～」と題してご講演いただきました。人工光合成ができるようになれば、地球上に沢山ある水と、邪魔者の二酸化炭素から、うまくいけばエネルギーを獲得しつつ、私たちの生活の役に立つ「価値ある分子」を作り出せるようになります。太陽光のエネルギーは、典型的な化学結合のエネルギーより小さいので、そのままでは化学反応を起こせませんが、植物は光合成という大変巧妙な仕掛けにより、これを実現しています。近年、光合成の仕組みは解明されつつありますが、人の技術で容易にまねできないものであることもわかってきました。正岡先生は、この精緻な、天然の光合成メカニズムのエッセンスを取り入れて、「鉄五核錯体」と呼ばれる金属錯体を設計・合成されました。この錯体を触媒として、人工光合成の鍵を握る、水からの酸素発生を、天然を上回る効率で達成されました。さらに水中での二酸化炭素を還元して価値ある分子に変換する研究にも挑戦され、錯体の自己組織化で反応場を作り出す、洗練された分子設計により、これを実現されました。人は化石燃料を使うことで大気中の二酸化炭素を増やす一方でしたが、人工光合成が実用化すれば、これを資源として活用する、人工の炭素循環が実現できます。正岡先生はこれを目指し、人工光合成への挑戦を続けています。ご視聴の皆様には、人工光合成の将来展望から、鉄五核錯体の合成条件まで、沢山のご質問・コメントをチャット欄にいただき、これを司会者が読み上げ質問をいたしました。ご視聴の方々の人工光合成への期待と関心の高さがうかがえました。

（広報室 記）

## 出前授業報告

岡崎3機関では、岡崎市内の全ての市立中学校（20校）で、それぞれ1年に1回「サイエンスセミナー」と称した出前授業を実施しています。今年度は新型コロナウイルス感染拡大の影響で実施件数が減り、分子科学研究所では2校担当することになりました。しかしその後、岡崎市が新たに「SINET（学術情報ネットワーク）」を活用したサイエンスセミナーを実施できることとなり、加えて2校の、計4校の担当となりました。SINET活用の授業では、現地での講師の実演と、ウェブ会議ソフトを用いた研究施設からの生中継を組み合わせた授業などを予定しています。

（広報室 記）



NEW STAFF

## 新人自己紹介

2021年6月16日着任

## 石川 裕子

いしかわ・ゆうこ

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 事務支援員

2021年6月より山本グループの事務支援員としてお世話になっております。約7年ぶりの仕事復帰となりますが、以前は主に営業職として企業で勤務しておりました。研究所での勤務は初めてのため、研究者の皆さんが熱心に実験や議論をされる姿が大変興味深く、新鮮に感じながら毎日を楽しんでいます。皆様のお役に立てるよう努めてまいりますので、どうぞよろしくお願いいたします。

2021年9月1日着任

## 水野 麻人

みずの・あさと

生命・錯体分子科学研究領域  
錯体物性研究部門 特任研究員

2018年に名古屋大学理学研究科物質理学専攻で博士（理学）の学位取得後、名古屋大学での博士研究員、ドイツのカーlsruエ工科大学での博士研究員、フンボルトフェローを経て、2021年9月より草本グループの特任研究員としてお世話になっております。これまで主に、有機ラジカルを基盤とする固体物性開拓を行ってまいりました。どうぞよろしくお願いいたします。

2021年10月1日着任

## 壬生 託人

みぶ・たくと

生命・錯体分子科学研究領域  
錯体物性研究部門 特任専門員

2021年9月に近畿大学大学院総合理工学研究科理学専攻で、博士（理学）を早期取得後、錯体物性研究部門 草本グループに特任専門員として着任しました。過去に、有機電解合成、双安定性を示す磁性金属錯体の合成・物性調査を専門としておりました。分子研ではこれらの経験を駆使し、開殻電子系の新規物性探求という課題を進行しながら、様々な知見を吸収したいと考えています。よろしくお願いいたします。

2021年10月5日着任

## 陳 佳卓

特別研究部門  
特任専門員

I finished my Ph.D. course from the University of Tokyo under the supervision of Prof. Makoto Fujita. From October 2021, I continued to work in the same group at IMS. My research aims to apply the crystalline sponge method to genome mining.

2021年10月11日着任

## 吉田 莉菜

よしだ・りな

分子科学研究所／総合研究大学院大学  
事務支援員

しばらく前職の関係で日本を離れておりましたが、こうして日本に、そして地元である岡崎市に戻ってこられたのはとてもうれしく思います。分子研に来ると、研究をしていた大学時代が蘇り、毎日とても懐かしく感じ、事務職ではありますが、こうして違った角度から携われて幸いです。まだまだ慣れないことばかりですが、是非皆さまどうぞよろしくお願いいたします。ちなみに……「趣味：旅行 好きな飲み物：クラフトビール」です。おすすめクラフトビールがありましたら是非教えてください!!

2021年11月1日着任

## 大西 洋

おおにし・ひろし

物質分子科学研究領域 特別研究部門  
教授（クロスアポイントメント）

「有限の厚さをもつ固液界面のオペランド分子科学研究」を実施するため着任しました。分子科学研究所と神戸大学とのクロスアポイントメント（比率25:75）で任期は2026年10月までの5年間です。運営会議委員として2014年度から3年のあいだ共同研究を担当しておりました。分子科学研究所から給与をいただくのは初めてです。着任時58歳の新人なので物覚えが悪いかもしれませんが、ご指導をよろしくお願いいたします。

共同利用研究ハイライト

# in situ局所分光によって明らかとなった分子と超分子との衝突機構に基づく超分子反応

沼田 宗典 京都府立大学大学院 生命環境科学研究科 准教授

マイクロフロー空間を流通する溶液はフラスコ内の溶液よりも粘性の影響が顕著となる。粘性は溶液内部に発生する摩擦であり、この粘性作用により放物線状の流速分布を持つハーゲン・ポアズイユ流れとなる。粘性の分子論的起原は流線間を縦断する分子同士の衝突であり溶液を動かすことで発生する。これはフラスコ内の溶液をマイクロ空間に通すと分子同士の衝突を強制的に誘発できることを意味する<sup>[1]</sup>。筆者らは、マイクロ流体中での超分子重合では、配向が固定した超分子ポリマーの末端と熱拡散するモノマー分子との選択的な分子衝突が誘発されることを見出した(図1)<sup>[2,3]</sup>。これは溶液運動そのものを駆動力とする新たな分子間力の発生機構である。マイクロ流体のマクロな運動が分子レベルの精密な分子集積化のエネルギーへと濃縮・変換される機構の解明は、微小エネルギーを使う新たな分子集積システムの開発に直結する。本稿では、岡本裕巳先生、成島哲也先生との共同研究の下に実施したフロー空間内のin situ局所分光測定を鍵として、衝突機構による超分子重合のメカニズムを解明することができたのでその成果について紹介する。

[Tetrakis(4-sulfonatophenyl)porphyrin (TPPS)]はプロトン化によってJ会合体を形成するポルフィリン分子である<sup>[4,5]</sup>。まず、バイアル管を用いてTPPSモノマーから所定の方法により超分子ファイバーを調製した。UV-Visスペクトル測定により会合率は20-40%程度と見積もられ、溶液中では超分子ファイバーと未反応モノマーが熱力学平衡下に共存していることが

解る。この溶液にさらに超音波を照射し、平均ファイバー長が590 nmと780 nmの2種類の超分子ファイバーを含む溶液を調製した。なお、反応場となるマイクロ空間は、一定の光路長を持つガラス製のマイクロチャンネルを独自にデザインした。これを装置開発室のご協力の下に作製して実験に用いた。

熱力学平衡にある2種類の溶液をそれぞれマイクロチャンネルに流速5, 10, 50, 100  $\mu\text{L}/\text{min}$ で導入した。流出溶液のUV-Vis測定により重合率を見積もった結果、マイクロフロー空間に導入した溶液はいずれも重合度が上昇していた。さらに、重合度は流速の上昇に伴い顕著に増加することも明らかとなっている。流速の上昇は隣接した流線間の速度差を広げるため、流線を縦断して起こる分子衝突のエネルギーも流速の上昇により大きくなると考えられる。観察された流速と重合率との明確な相関関係は、超分子ファイバー末端とモノマーとの反応が、分子衝突

を駆動力として進行していることを強く示唆する。さらに、同じ流速下では長いファイバーの重合度が短いファイバーよりも高くなることが明らかとなった。これは、超分子ファイバーの配向度もまた重合反応を促進する要因であることを示唆する。

次に、超分子ファイバーの配向度と重合率との関係を明らかとするために、in situにおける直線偏光(LD)分光測定を実施した。図2aに示すように、流線に対して平行な偏光と垂直な偏光を交互に照射しながら、流れ方向に約3 mmスキャンしてデータを取得した。流線に対して平行に照射された偏光と垂直に照射された偏光の吸光度の差( $\Delta A = A_{\parallel} - A_{\perp}$ )をイメージ化した結果を図2b,cに示す。青い領域では $\Delta A = 0$ であり、ファイバーがランダム配向していることを示している。一方、赤い領域はファイバーが流線方向に配向していることを表す。スキャンした全領域の $\Delta A$ 値を平均化し、この値を流速に対してプロットした結果が図

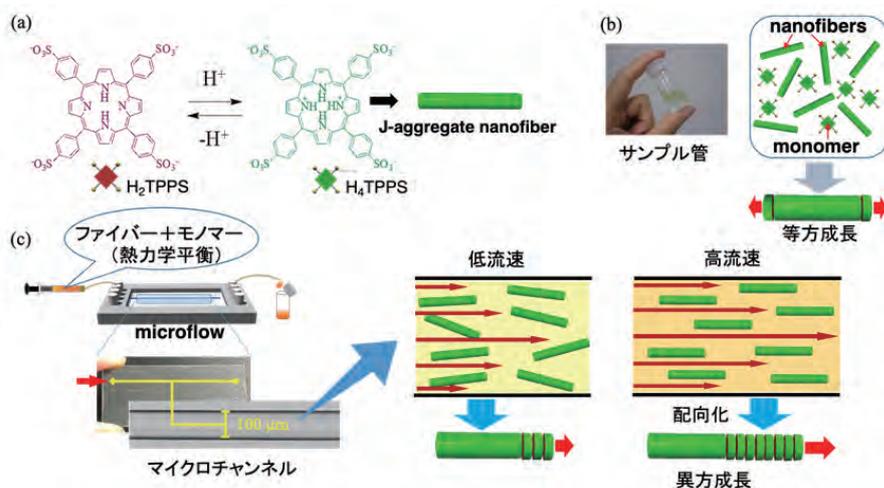


図1 (a,b) TPPSポルフィリンの構造とサンプル管内におけるJ会合体形成の模式図。(c) マイクロフロー空間内における超分子ファイバーの配向化と配向度依存したJ会合体の成長。

2dである。このプロットから、高流速域において超分子ファイバーは高度に配向していることがよく解る。また、ファイバー長が長いほど、流速変化の影響を受けやすいことも明らかとなった。以上の結果を統合して考察すると、流線を縦断するモノマー分子の衝突エネルギーとファイバーの配向化の両方が超分子成長を促進する要因であると言える。つまり、マイクロフロー空間では通常の化学反応と同様に、立体因子と衝突エネルギー・頻度因子の相乗効果によって分子から超分子への効率的な変換が達成されている。

この超分子-分子間の衝突機構は分子構造には依存しない。例えば、ペリレ

ンビスイミド誘導体をモノマーとした超分子重合では、反応性が異なるモノマーが超分子ポリマー末端に選択的に反応することでブロック構造が創製できる(図3)<sup>[3]</sup>。従来、超分子化学では分子の自発的な会合が強調され、化学反応の様に分子同士を積極的に衝突させ反応させる試みはなされてこなかった。本系では超分子の運動を抑制し、分子運動のみを活性化することで、超分子の特定の位置に分子を衝突させることができた。こうした能動的な分子会合機構により超分子構造の枠組みが大きく拡張できるはずである。



ぬまた・むねのり

2000年 九州大学大学院工学研究科博士課程修了。その後、産業技術融合領域研究所研究員、JST 科学技術振興機構SORST研究員、九州大学大学院工学研究院特任助教、立命館大学総合理工学研究機構准教授を経て2008年より現職。分子研には九大時代からお世話になってきました。本学に着任以来、非平衡系での分子集積化学を探究してきましたが、この数年の分子研での共同研究を通してようやく1つの解が得られました。計算機センターや装置開発室(マイクロチャンネルの作製)にもサポートしていただいた成果であり分子研には感謝しています。

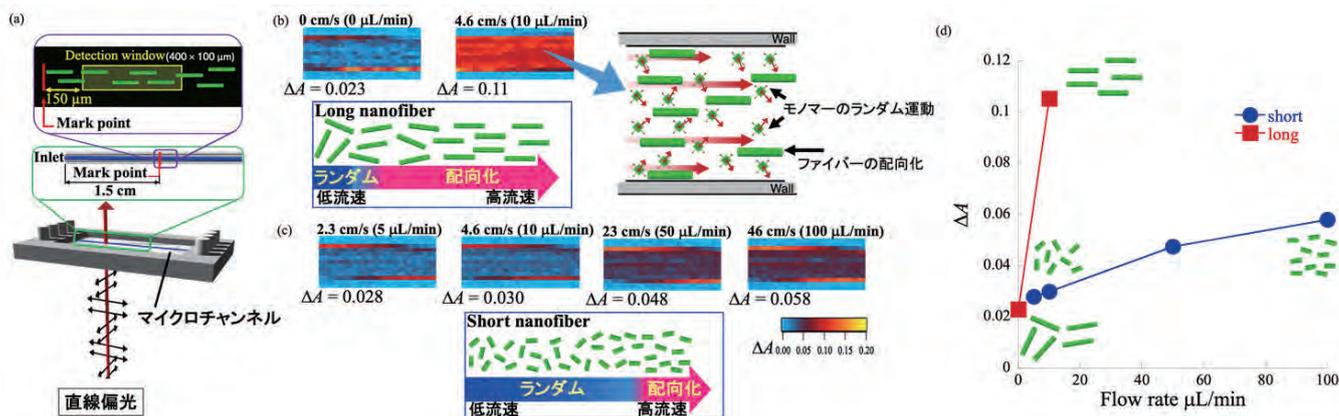


図2 (a) in situ直線偏光(LD)測定の概略図。(b,c)マイクロチャンネル内のLDイメージ[(b) long nanofiber, (c) short nanofiber]。(d) 流速変化に対する超分子ファイバーの配向度のプロット<sup>[2]</sup>。

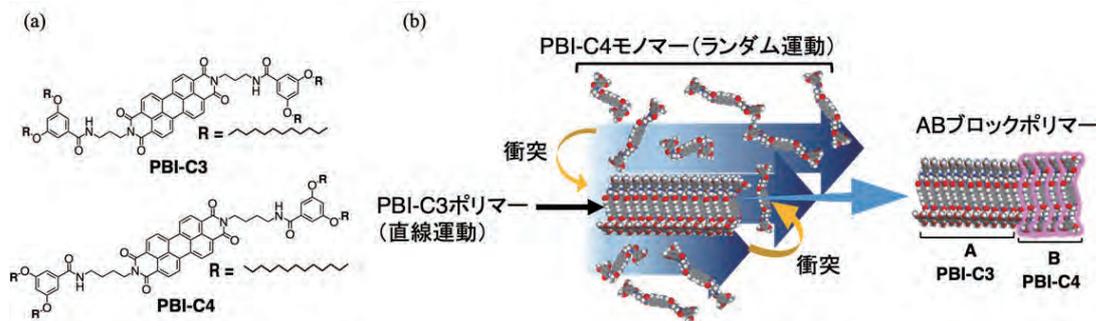


図3 (a)ペリレンビスイミド(PBI)誘導体の構造。(b)超分子-分子間に発生する衝突エネルギーを駆動力とした異方的超分子成長とABブロック超分子の創製<sup>[3]</sup>。

参考文献

- [1] M. Numata, *Chem. Asian J.* **10**, 2574-2588 (2015) (FOCUS REVIEW).
- [2] C. Kanzaki, et al., *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **94**, 579 (2021).
- [3] S. Matoba, et al., *J. Am. Chem. Soc.* **143**, 8731 (2021).
- [4] R. F. Pasternack, et al., *J. Am. Chem. Soc.* **94**, 4511 (1972).
- [5] S. M. Vlaming, et al., *J. Phys. Chem B.* **113**, 2273 (2009).

# 非酸化物系複合アニオン化合物における低温ヒドリド伝導

生方 宏樹 京都大学大学院工学研究科 博士後期課程二回生 陰山 洋 京都大学大学院工学研究科 教授

ヒドリドイオン ( $H^-$ ) 伝導は、2016年に分子科学研究所の小林玄器准教授らの酸水素化物に関する先駆的な研究<sup>[1]</sup>が報告されて以降、様々な酸水素化物が報告され、酸水素化物の有望な機能の1つとして注目を集めている。陰山研究室では、酸水素化物の新物質合成<sup>[2]</sup>、酸水素化物の様々な触媒反応<sup>[3]</sup>、磁性<sup>[4]</sup>、金属絶縁体転移<sup>[5]</sup>、酸水素化物を前駆体として用いる低温トポケミカル（アニオン交換）<sup>[6,7]</sup>など酸化物中のヒドリドの性質を活かした機能物性開拓を進めている。ヒドリドイオン ( $H^-$ ) 伝導に関しては、陰山研の元学生の竹入史隆君が博士号を取得後に小林研究室の助教に着任したのを機（2018年）に、陰山研で得られた酸水素化物のヒドリドイオン伝導に関する小林研との共同研究がナノテクノロジープラットフォーム事業の支援を受けて始まった。修士課程に所属し、のちに博士後期課程に進学する筆者の一人（生方）が主体となって共同研究を進め、これまでに希土類酸水素化物のヒドリドイオン伝導に関する論文を報告している<sup>[8]</sup>。

陰山研では、複合アニオン化合物を中心テーマとして、文科省の新学術領域研究（2016-2021）の支援を受けながら、領域代表として複合アニオン化合物の新しい世界を切り拓いている。2021年3月には、世界初の複合アニオンの教科書として「複合アニオン化合物の科学」が丸善より出版され、本年は翻訳版「Mixed Anion Compounds」がRSCより出版されることが決定している。国際的にも日本学術振興会の研究拠点形成事業（Core-

to-Core）に「エネルギー変換を目指した複合アニオン国際研究拠点」（2020-2025）に採択され、国際共同研究を通じてネットワークの形成を進めている。これらの研究では、酸化物に異種アニオンを加えた酸化物ベースの複合アニオン化合物が主流であるが、新しい潮流として、酸化物イオンを含まない複合アニオン化合物の研究も始めている。本稿では、低温領域でも優れたヒドリドイオン伝導を示す水素化物ハライド  $Ba_2H_3X$  ( $X = Cl, Br, I$ )<sup>[9]</sup>について紹介する。

ヒドリド ( $H^-$ ) を含む酸化物（酸水素化物）は、 $H^-$ の高い反応性、高い分極率、卑な酸化還元電位等に由来するユニークな機能を示す。特にヒドリドイオン伝導は近年注目を集めており、これまで酸水素化物系を中心に研究されてきたが、高いイオン伝導度を実現するためには300°C以上の高温を要し、電気化学デバイス等の応用に向けた大きな障害となっていた。イオン伝

導体における性能向上の一般的な指針として、キャリア伝導の障壁を低減するためのソフトな（電荷密度の小さい）イオンの導入が挙げられる。筆者らは、ハードな（電荷密度の大きい）酸化物イオンを含む酸水素化物に代わって、ソフトなハロゲン化物イオンを含む水素化ハロゲン化物  $Ba_2H_3X$  ソフトなハロゲン化物イオン ( $Cl, Br, I$ ) に注目した。

$Ba_2H_3X$ のイオン伝導特性を評価するために生方は、粉末試料を合成し、分子研に出張し、電気化学インピーダンス測定を行ったところ、従来の酸水素化物系と比較して、300°C以下の低温でも高いイオン伝導度（図1；例えば  $X = I$ では、200°Cで1.4 mS/cm）が得られた。このデータを論文にまとめるにあたって、実験条件の最適化や再現性の確認等を計画していたが、直後に緊急事態宣言が発令され、実験を行えたのは9か月後だった。これは痛手ではあったが、逆にこのような状況

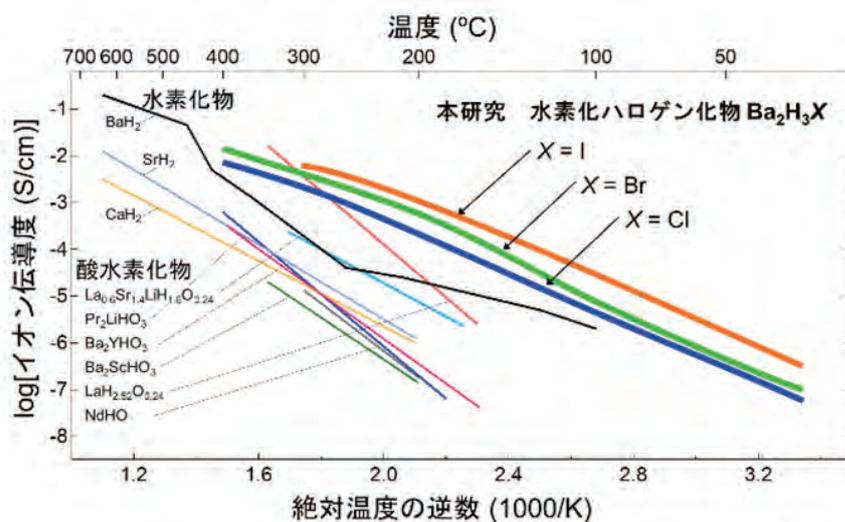


図1  $Ba_2H_3X$ の $H^-$ イオン伝導度の温度依存性。これまでに報告された $H^-$ イオン伝導体の伝導度と比較。

になり、実験ができない期間に、研究の意義について深く考える習慣がついたのは博士後期課程の生方にとって大きな収穫であった。また、ZOOMも利用しながら、頻りに議論したため、想定実験に加えて、イオン輸率算出のための直流分極測定などの追加実験もスムーズに行うことができた。

上述したように、本物質での優れたヒドライドイオン伝導は、ヒドライドイオンを酸化物イオンと組み合わせる（つまり酸水素化物）代わりにソフトな非酸素アニオンと組み合わせることが重

要であると考えられる。つまり、従来の酸化物を基軸にした複合アニオン化合物だけでなく、非酸化物系の複合アニオン化合物にも新たなフロンティアが大きく広がっていることを予感させる成果である。

実験ができない間、同物質が優れた伝導度の起源を考えるなかで、BaH<sub>2</sub>高温相との構造の類似点に気づいた（図2）。つまり、Ba<sub>2</sub>H<sub>3</sub>Xでは、H<sup>-</sup>とX<sup>-</sup>が秩序した構造と見なすことができる。重要なことは、450°Cで構造相転移を起こすためH<sup>-</sup>伝導を大きく阻害される

BaH<sub>2</sub>とは異なり、Ba<sub>2</sub>H<sub>3</sub>Xでは低温でも六方晶構造が保たれる。イオン伝導材料では一般に「無秩序の導入により高温相を安定化する」という戦略が取られていたが、本研究ではアニオンを秩序化させることで高温相を安定化したという点で興味深い。

最後に、共同研究のお願いを快く引き受けて下さり、設備・機器を使用させて頂くとともに様々なご助言を頂いた小林准教授、竹入助教をはじめ、小林研究室の皆様には厚く御礼申し上げます。

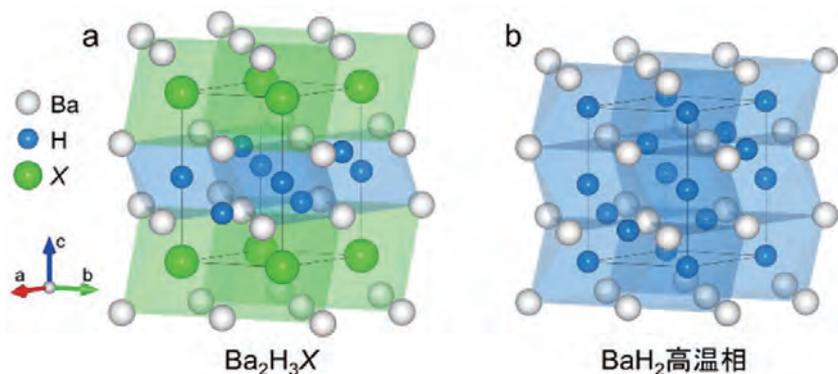


図2 a) Ba<sub>2</sub>H<sub>3</sub>X (X = Cl, Br, I)の結晶構造。b) BaH<sub>2</sub>高温相の結晶構造。VESTA<sup>[10]</sup>により描画。



かげやま・ひろし  
1998年より東京大学物性研究所助手、2003年より京都大学理学研究科准教授、2010年より京都大学工学研究科教授。2021年より、JST さきがけ「未来材料」の総括。

参考文献

[1] G. Kobayashi, et al., *Science* **351**, 1314–1317 (2016).  
 [2] Y. Kobayashi, et al., *Nat. Mater.* **11**, 507–511 (2012).  
 [3] Y. Kobayashi, et al., *J. Am. Chem. Soc.* **139**, 18240–18246 (2017).  
 [4] C. Tassel, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **126**, 10545–10548 (2014).  
 [5] T. Yamamoto, et al., *Nat. Commun.* **8**, 1217 (2017).  
 [6] T. Yajima, et al., *Nat. Chem.* **7**, 1017–1023 (2015).  
 [7] N. Masuda, et al., *J. Am. Chem. Soc.* **137**, 15315–15321 (2015).  
 [8] H. Ubukata, et al., *Chem. Mater.* **31**, 7360–7366 (2019).  
 [9] H. Ubukata, et al., *Sci. Adv.* **7**, eabf7883 (2021).  
 [10] K. Momma, et al., *J. Appl. Cryst.* **44**, 1272–1276 (2011).



うぶかた・ひろき  
2018年3月に群馬工業高等専門学校専攻科を卒業、2018年4月から京都大学大学院工学研究科修士課程に進学、その後2020年3月に同修士課程を卒業。現在、京都大学大学院工学研究科博士課程に在学中。研究内容は、ヒドライド化合物を主軸とした複合アニオン化合物の合成および物性評価。

老木 成稔 福井大学 高エネルギー医学研究センター 特命教授

カリウムチャンネル (Kチャンネル) はほとんど全ての生物種の細胞膜に存在し、細胞の電気活動の基礎となっている。Kチャンネルは $K^+$ よりイオン半径の小さい $Na^+$ を1/1000しか透過させないといわれてきた。このことで、細胞膜を隔てて存在する $Na^+$ の内向き大きな電気化学勾配下でも外向きの $K^+$ を流すことができ、細胞内負の膜電位 (静止膜電位) を生み出している。

Kチャンネルの $K^+$ 選択性はそれが発見された当初から様々な物理化学的解釈が提案されてきた。そしてKチャンネルの結晶構造がイオンチャンネルとして初めて解かれて以来 (Doyle et al. 1998)、イオン選択性機構に関する研究は大きく進展した。ただ20数年前の構造決定直後の興奮冷めやらぬ時期にチャンネル研究者が思い描いたよりもはるかにその解明に時間がかかってしまった。その理由はチャンネルの特性にある。チャンネルを流れる電流は単一チャンネル電流記録法によって測定され、多くのKチャンネルでは毎秒1000万個の $K^+$ を流す。このように速い透過過程の中で $Na^+$ を選択しており、その機構は結晶構造で議論される平衡論からはほど遠いものであった<sup>[1]</sup>。

一方、Kチャンネルの構造を使ったイオン選択性機構の研究は実験・理論・計算が密接に絡み合ったものとなった。しかし「 $Na^+$ は実質的に流れない」という過去の実験結果を踏まえ、ここでも $Na^+$ の動的な振る舞いについてほとんど検討されてこなかった。そもそも $Na^+$ はKチャンネルを透過しないのか？ 私達はKチャンネルを $Na^+$ がわずかに流れるという間接的実験結果を得、 $Na^+$

透過が測定可能であると考えた。そして単一Kチャンネルを流れる $Na^+$ を測定することに初めて成功した<sup>[2]</sup>。 $Na^+$ のイオン流束は $K^+$ の1/80であった。これは従来の値と異なり、選択性機構を考え直す必要がある。

Kチャンネルの立体構造をもとにイオン透過経路を見てみよう (図1)。Kチャンネルはホモ4量体であり、その回転対称軸上にイオン透過路がある。 $\alpha$ ヘリックス束 (図1右上) であるチャンネル構造は、ねじれを解除する大きな構造変化でゲートが開く<sup>[3]</sup>。この結果開口部が大きく開いた空洞 (直径10 Å) が出現する (図1左上)。 $K^+$ は水和されたままこの空洞に入っていき<sup>[4]</sup>。そして空洞の最も奥に小さな穴が開いている。この穴は細胞外まで一定の太さ (直径3 Å) で10数Å続く。これを選択性フィルタと呼ぶ。選択性フィルタの内

壁を構成するのは各サブユニットからの4本のストランドであり、主鎖のカルボニル酸素が中心軸を向いている (図1下)。 $K^+$ は選択性フィルタに入る前に脱水和する必要があるが、フィルタ内ではカルボニル酸素がイオンを溶媒和する。フィルタには複数個の $K^+$ が入ることができるが、細いフィルタ内ではイオンも水も追い越せない。これを一列 (single-file) 透過と呼ぶ<sup>[5]</sup>。

この透過路を流れるイオンの軌跡を全原子分子動力学 (MD) シミュレーションで辿った。ただKチャンネルを流れる $Na^+$ の軌跡をMDシミュレーションで研究したものはほとんどなかった。 $Na^+$ の透過は $K^+$ の1/1000以下であると考えられており、あえて $Na^+$ 透過のシミュレーションは行われなかったのである。私達は $K^+$ と $Na^+$ の透過を数 $\mu$ 秒間行い、 $Na^+$ の流束が $K^+$ の1/40

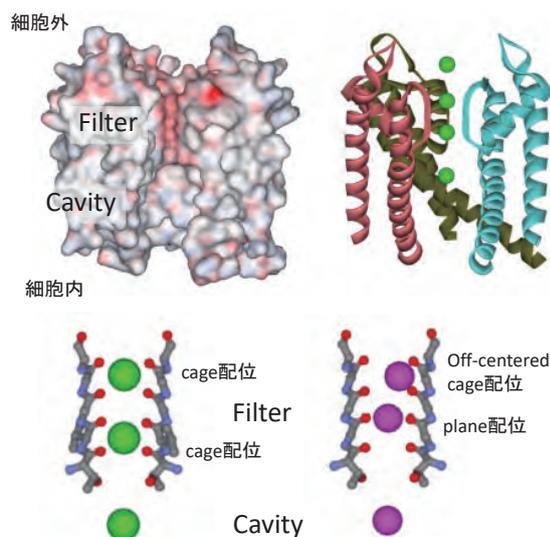


図1 カリウムチャンネル (KcsA) の立体構造 (開ゲート構造)。左: 4量体の手前の一つを外した表面図。下部に広い空間 (中心空洞) があり、その上に細い選択性フィルタがある。内壁はカルボニル酸素のため電気陰性度が高い。右: 各サブユニットのヘリックス構造とフィルタを裏打ちするストランド。下: 対角サブユニットの選択性フィルタ構造とイオン。フィルタのカルボニル酸素と配位された $K^+$  (cage、緑) と $Na^+$  (planeとoff-center cage、赤)。

であることを明らかにした。これは実験値に相当する。

イオン透過の各ステップ（空洞・フィルタ入口・フィルタ内）を順に詳細に比較した。フィルタに入る際にNa<sup>+</sup>は脱水和のためにK<sup>+</sup>に比べ大きな障壁を越えなければならない。この過程でNa<sup>+</sup>はほとんど排除される。しかし一旦フィルタ内に入ってしまうとNa<sup>+</sup>はむしろK<sup>+</sup>よりもフィルタに親和性が高い。フィルタ構造はK<sup>+</sup>とNa<sup>+</sup>というわずかに0.3 Åの半径の差をどのように区別しているのだろうか。K<sup>+</sup>は8個のカルボニル酸素で溶媒和される（図1

下左）。これをcage配位と呼ぶ。一方、わずかに半径の小さいNa<sup>+</sup>は4個のカルボニル酸素平面に配位する（plane配位、図1下右）。そして今回、Na<sup>+</sup>はcage内にも存在し<sup>[6]</sup>、このとき中心からずれて（off-center）配位することが明らかになった<sup>[2]</sup>。K<sup>+</sup>はフィルタ内にある4個のcage部位に複数個のK<sup>+</sup>が占有して速やかに飛び移る。一方、サイズの小さなNa<sup>+</sup>はplane配位とcage配位をとることで連続した曲がりくねった経路となり、引っ掛かりながらゆっくりと流れるのである<sup>[2]</sup>。

カリウムチャンネルのイオン選択性過

程を詳細に見ると、巧妙に設計されたフィルタ構造が単純な原理をうまく適合させることによって、スループットとしてのイオン選択性を実現させていることが明らかになった。

本研究は長年にわたって分子研のスーパーコンピュータを利用させていただくことで実現した。斉藤真司先生ほか関係者の皆様に深く感謝します。



おいき・しげとし

1986年 京都大学大学院医学研究科博士課程修了、医学博士。京都大学医学部助手。1986-1989年米国ロッシュ分子生物学研究所、コーネル大学医学部研究員。1993年 岡崎生理学研究所助教授。1998年 福井大学教授。2019年福井大学特命教授。イオンチャンネル研究のために長年実験法として使ってきた脂質平面膜法が新しく生まれ変わりつつあり、産みの苦しみに立ち会っています。

#### 参考文献

- [1] Oiki, S., *J. Physiol.* **593**: 2553-2573, 2015.
- [2] Mita, K. et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **118**: e2017168118, 2021.
- [3] Shimizu, H. et al., *Cell* **132**: 67-78, 2008.
- [4] Sumikama, T. and Oiki, S., *J. Am. Chem. Soc.* **138**: 10284-10292, 2016.
- [5] Sumikama, T. and Oiki, S., *J. Physiol. Sci.* **69**: 919-930, 2019.
- [6] Phongphanphanee, S., et al., *Pure Appl. Chem.*, **86**: 97-104, 2014.

## 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

大学共同利用機関として共同利用は個々の研究活動と並んで分子科学研究所の基幹的な活動である。2020年度初頭からのコロナ禍によってon-siteでの共同実験や対面での議論の場は壊滅的なまでに縮小せざるを得ない状況に陥り分子研共同利用のアクティビティーは大きな打撃を受けた。実際に、比較的柔軟に実施できる自己資金（外部資金等）による共同研究は大きく減少することはなかったものの、半年単位での計画を立案・申請する必要のある、つまり本研究所の本丸とも言える分子研共同利用については十分なアクティビティーを示したとはいえない状況であった。特に国内外の学会やシンポジウムが軒並み中止を余儀なくされる状況において、分子研研究会の開催に関わる共同利用は大きく打撃を受けた。

この苦しい2年間（2020-2021年度）においても、共同利用を提供する我々分子研サイドとしては決して歩みを止めずに共同利用の内容充実に向けてきたつもりである。すなわちUVSORでは汎用性のある先端利用、先端的顕微分析手法の共同利用提供、また結晶スポンジ法による分子構造解析などに代表される分子研ならではの世界的にも優位性のある共同利用が展開されつつあり、またクロスアポイント教員が先導する共同利用の新展開も実りつつある。さらに加藤晃一教授を中心としたNMRプラットフォームの共同利用展開も開始された。コロナ感染が一定の落ち着きを見せつつある（本稿2021年12月現在）来期以降には共同利用が大渋滞となる素地は十分に整いつつあると自負している。

研究会に関しては国内外・各大学などでのリモート会議環境が整いつつある現状においてon-lineでの研究会開催支援の方法を、さらに高度に確立していく必要がある。特に小さなセミナーから年会サイズのマンモス学会まで、ほぼ全ての学術集会が

対面実施されない状況下においては、若手研究者がそのプレゼンスを「見える化」する場が限定的であり、若手研究者育成を眼目の一つとする分子研にとっては望ましい状況ではない。特にコロナ状況下で初めて独立PIとなった若手准教授にとっては研究会の立案・主催の経験も乏しく、また先輩研究者が研究会を開催する様子を「門前の小僧」として見る機会さえ失われている。この点は来年度以降において新所長の下で一定のテコ入れが必要であると考えている。

ワクチンの普及もあり、ポスト・コロナ、ウィズ・コロナの日々も近づきつつある。協力研究や研究会で多くの関連領域研究者が岡崎の地を活発に行き来する日々が再び日常となることを祈ってやまない。(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27年度	平成28年度	平成29年度	平成30年度	令和元年度 (平成31年度)	令和2年度	令和3年度 (10月31日現在)
課題研究	4	4	2	4	2	2	2
協力研究	62	82	73	45	37	53	44
自己資金による共同研究等*	253	318	361	347	357	447	257
協力研究（ナノプラット）	64	57	64	81	69	44	60
協力研究(NMRプラットフォーム)							3
分子研研究会	11	7	9	10	7	4	2
若手研究活動支援	1	1	2	1	2	1	2
岡崎コンファレンス	1	3	0	1	2	0	0
計	396	472	511	489	476	551	370

(注1) \*平成25年度以降、集計開始。令和3年度分は10月31日までの実績。  
(注2) 通年課題は前期と後期の2期分として、1課題を2として年度計に表す。  
(注3) 新型コロナウイルスの影響により研究期間を延長した前期課題は後期の件数に計上しない。  
(注4) 協力研究（NMRプラットフォーム）は2021年7月1日から開始。

### 分子研研究会

開催日時	研究会名	提案代表者	参加人数
2021年8月31日	森野ディスカッション	宗像 利明（大阪大学 大学院理学研究科）	141名

### 若手研究会等

開催日時	研究会名	提案代表者	参加人数
2021年8月16日～19日	第60回分子科学若手の会夏の学校	時田 司（学習院大学 大学院自然科学研究科）	92名

## 機器センターユーザーアンケートについて

改めて言うまでもなく、分子研の大きなミッションとして「共同利用・共同研究の推進」があります。全国の大学や研究所等の研究者に施設の設備は公開され、分子科学コミュニティの研究に寄与しています。機器センターでは、物性計測・化学分析・分光測定に供する汎用測定装置等を維持・管理しています。また機器センターでは、「大学連携研究設備ネットワーク」「ナノテクノロジープラットフォーム事業」、そして令和2年度からデータ構造化と機器共用を目的とする「マテリアル先端リサーチインフラプログラム」が始まっています。これらの事業を通じ、多くの共同利用が行われ、令和2年度は、所外169件1892日(民間等の利用も含む)、所内2057日の実績があります。

コミュニティの意見を運営に反映させるため、機器センターでは共同研究専門委員会、機器センター運営委員会を行い、現状及び将来計画に対する意見を伺っています。加えて、『施設利用者の生の声を取り入れる』ため、実際に利用された所内外の方々にアンケート調査を毎年行っています。この結果を受け、設備の整備・オプションなどの高度化、また機種更新や新規導入を検討しています。実際、オペランド走査型プローブ顕微鏡システム、MALDI-TOF 型質量分析装置、オペランド多目的X線回折装置、熱分析装置(示差走査熱量計・差動型示差熱天秤)などが、機器センターの運営経費や所長裁量経費で整備・更新されています。

アンケート内容は、「施設利用の回数」「分子研機器センターの施設利用を選んだ理由」「申請・事務手続きの簡便さ」「予約システム」「寒剤供給体制」「機器の満足度」「期待する設備等」「その他要望」など多岐にわたっています。人的サービスやシステムに関しては高い評価を得ています。「期待する設備等」「その他要望」では、電子スピン共鳴装置、SQUID磁束計、単結晶X線回折装置、物理物性測定システム、ピコ秒レーザーなどの更新や高度化の希望が多く上がっています。またこれらの装置を運転するために、ヘリウム液化装置の安定的運用も重要です。これらの装置は高額なのですぐにはご要望にはお応え出来ませんが、概算要求なども行い、早期の更新に繋がるよう尽力しています。また、マテリアル先端リサーチインフラの支援で、以前から要望の多かったパルス/CW電子スピン共鳴装置が、この2021年度に整備される予定です。

各年のアンケート結果の詳細は「機器センターたより」の『交流』部分にあります。<http://ic.ims.ac.jp/tayori.html>

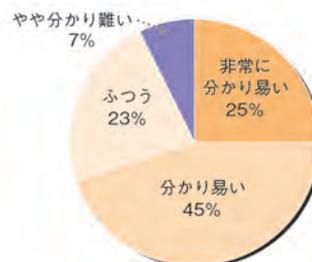
「機器センターたより」は、機器センターの設備のスペックを含めた紹介や利用方法も詳しく載っている実用的な冊子ですので、是非一読頂ければ幸いです。

(中村 敏和 記)

Q2. 当センターの施設利用を利用した理由を2つまで選んでください。



Q3. 申請・事務手続きは分かり易かったですか？



「機器センターたより」No.13 2021 7. 交流 の「所外利用者アンケート報告」より一部抜粋

運営に関わって

## 松谷 晃宏

東京工業大学 オープン  
ファシリティセンター  
マイクロプロセス部門長/  
主任技術専門員

## 科学・技術と研究

まつたに・あきひろ／東京都立西高等学校、防衛大学校理工学専攻卒業後、東京工業大学精密工学研究所文部技官を経て現職。「極微光デバイス製作のための反応性イオンビームエッチングに関する研究」で博士（工学）取得。研究分野はプラズマプロセス技術、ナノ・マイクロ科学、応用物理一般、ヴァイオリン演奏の科学。趣味はヴァイオリンとヴィオラの演奏、太陽黒点観測、妻に珈琲を淹れること。令和2年度科学技術分野の文部科学大臣表彰研究支援賞受賞。



分子研装置開発室の皆様とは、微細加工に関する技術サロン会や研究会にお誘いいただいた10年程前からのお付き合いになります。その縁でしょうか、運営委員としても2019年度から2年間お世話になりました。運営委員会では、筆者のような他機関の職員を構成員として参加させるという懐の深さにまず感動し、議事内容もたいへん勉強になりました。思うことをストレートに発言しても許容していただける雰囲気にもたいへん感謝しております。「技官、教官、事務官は三本足の鼎である」という空気が分子研のパワーの源泉なのだと思えました。

ところで、恥ずかしながら、私は分子研の皆様と関わって初めて「鼎」という文字を知りました。言葉の意味は大切ですから、手元の広辞苑（第4版）で調べてみました。

【鼎】食物を煮るのに用いる金属製または土製の容器。普通は三足。

つまり、分子研では、「研究」をよく煮込むために、教員、技術職員、事務職員の三本足でしっかり支えましょうということだと思います。研究成果がこぼれないように、どれが欠けてもいけないし、しかも足の長さが揃っている必要があるということと理解しました。素晴らしい考え方だと思います。

せっかく辞書を開きましたので、科学や研究に関する言葉も改めて確認してみました。科学や技術は、英語

ではscience、technologyです。手元のLongmanの辞書では、-istはsomeone who is employed in (the stated work)ですから、これらを職業とする人はscientist、technologistとなります。物理学者はphysicist、化学者はchemist、経済学者はeconomist、心理学者はpsychologistです。「科学」、「技術」、「研究」の意味を広辞苑で確認してみると

【科学】①観察や実験など経験的手続きによって実証された法則的・体系的知識。また、個別の専門分野に分かれた学問の総称。物理学・化学・生物学などの自然科学が科学の典型であるとされるが、経済学・法学などの社会科学、心理学・言語学などの人間科学もある。

【科学者】科学（特に自然科学）を研究する人。

【技術】②科学を実地に応用して自然の事物を改変・加工し、人間生活に役立てるわざ。

【技術者】技術2を職業とする人。

【研究】よく調べ考えて真理をきわめること、

というふうに載っています。【研究者】という単語は載っていませんでした。大辞林でも同様です。すなわち、「研究」は、科学者や技術者に限らず、誰にとっても共通の重要な態度や行為で、科学者も技術者も日々「研究」を怠らず努力することが大切ということでしょう。

筆者は、工学という分野の科学者、技術者であると心得て、日々「研究」を怠らず努力するという気持ちで仕事をしています。一方、辞書には載ってなくても、一する人という意味で研究者という単語は使われています。日本では研究者番号を持つ者は研究者ですから、筆者も研究者に分類されることになります。

さて、「鼎」の三本足の、教員、技術職員、事務職員は、-erで括れば、それぞれteacher, engineer, officerとなり、researcherは研究員となるでしょう。しかし、「自然」からみれば、科学者、技術者、教員、技術職員、研究者、研究支援者のような分け方には特に意味はなく、「自然科学の研究」では科学者も技術者もその本質は同じであり対等な立場です。教員、技術職員、事務職員の三者を、プロの科学者、プロの技術者、プロの事務担当者として認識すれば、研究の遂行に対して三者は互い対等に取り組む関係です。足の長さが揃っていると議論は時に白熱するかもしれませんが、相互理解の下で協調して研究に当たれば、「研究」のスピードは増し、さらに進展するでしょう。これこそ「研究」を支える「鼎」の真の姿で、その姿に自然の女神は微笑むのだと思います。

そこで、筆者からの提言です。装置開発室の「研究者にとって一番身近な技術者集団となる」というミッション

に、発展形として「科学者とともに研究する技術者」という気持ちも加えてはいかがでしょうか。分子研の装置開発室がこの先駆者となれば、我が国の

大学でもプロの科学者とプロの技術者が共同で研究を遂行するという考え方が当たり前になり、我が国の研究力向上という点でもよりよい結果を望める

ものと思います。

装置開発室の今後の益々のご活躍を期待しております。

## 関連学協会等との連携

# 学術変革領域「デジタル有機合成」と分子研との連携強化の重要性

大嶋 孝志 九州大学大学院薬学研究院 主幹教授・副研究院長

実験科学と情報科学の異分野融合によって、有機合成に破壊的イノベーションを起こすことを目的とする、学術変革領域研究(A)「デジタル有機合成」が2021年9月に発足しました。本稿では、本領域研究の立ち上げに至った経緯や領域研究の概要を紹介するとともに、本領域研究の推進における異分野融合の重要性、さらに、共同・共有設備の活用と連携強化について書かせていただきます。

有機合成化学は、入手容易かつ安価な有機原料から超付加価値を有する高次複雑系分子を創成する、まさに現代の錬金術「モノづくり」を支える学術基盤です。数多くのノーベル賞受賞が示しますように、野依良治先生(当時、名古屋大)・故高谷秀正先生(分子研、後に京都大)のBINAP、鈴木章先生(北海道大)・故根岸英一先生(米国パデュュー大)のカップリング反応を代表例として、汎用性の高い分子や反応を創り出してきました。この20年余りを振り返りますと、本分野は、テクノロジーの進歩に伴う装置および機器分析の高速化・高性能化と呼応し合う

形で発展してきたと言っても過言ではありません。例えば、Gaussianプログラムによる量子化学計算は、有機合成反応を考察するうえで必要不可欠な解析手法になりました。また、フロー合成(コンピューター制御のシリンジポンプシステムが、流路に化合物溶液を流し、流れの中で合成を進めていく合成)は、昨今、産学を問わず、創薬研究の新たな有機合成手法として活用され始めています。

現在、有機合成化学の分野には、デジタル化という大きな変革の波が押し寄せています。この新たな波を予兆するかのように、第24期日本学術会議において「化学とAI」が重要テーマとして取り上げられ、2018年、2019年の分子科学研究所所長招聘会議<sup>[1, 2]</sup>、さらに、2019年の分子研研究会<sup>[3]</sup>において活発な議論が交わされました。これらの議論は、化学委員会化学企画分科会において取りまとめられ、2020年7月の提言「化学・情報科学の融合による新化学創成に向けて」において公表されています<sup>[4]</sup>。

日本の有機合成化学が今後も世界を

リードし続けるためには、有機合成に破壊的イノベーションを起こすデジタル有機合成(実験科学と情報科学の異分野融合)の基盤を世界に先んじて構築することが急務です。また、企業およびアカデミアの研究の現場でも、労働者人口・学生数の減少、働き方改革などに伴う労働環境の変化、コロナ禍等での研究・教育活動の制限などの様々な問題に直面し、今「研究環境の変革」に取り組みないと手遅れになるという強い危機感があります。このような社会情勢により、学術変革領域への応募に向けた機運が一気に高まり、本領域の発足に至りました。本領域研究では、革新反応・革新分子創出の超加速化を実現することを目的として、有機合成の多様性に対応した独自のデジタル化プラットフォーム(PF)の構築を行います(詳細は領域HPを御覧ください <https://digi-tos.jp>)。

現在すでに様々な分野で人工知能(AI)の技術が検討・活用され、特に生命科学や材料科学などの分野で大きな成果を挙げています。有機合成化学の分野でも、反応条件最適化や合成経路

探索などへの機械学習 (ML) の利用が進められているものの、残念ながらその利用はいまだ限定的です。その主要因は、①MLには大量の実験データが必要であること (特に深層学習 (DL))、②データの精度が実験者の技量に大きく左右されること、といったデータの量と質の問題の他に、③有機合成の多様性に現在のMLの手法・特徴量が十分に対応できていないことです。それに対し私たちは、新学術領域「反応集積化」でフロー反応に出会い・学び、続いて「中分子戦略」で中分子合成にフロー反応を活用すべく様々な検討を行ってきました。これらの領域研究の中で、フロー反応がMLに親和性が高いことを認識し、実際に、MLを利用することで、僅かなデータから極めて効率的に反応条件最適化が可能であることを経験しました。これが本異分野融合領域を立ち上げる礎となっています。

本領域は、A01班 (AI支援による反応制御の深化)、A02班 (AI支援による合成手法の深化)、A03班 (有機合成を支援するAI手法の深化) の3班集体としてしました。A01班は革新的な選択性の高度制御 (逆転) 法の開発 (原石発掘)・機構解明とその応用を目的とし、主にバッチ反応の検討を行います (多様なデータの大量収集)。A02班はデバイスの深化による有機合成の自動化を推進します。テクノロジーをサイエンスに昇華する新学理の創出とその応用を目的とし、主にフロー反応の検討を行います (高品質データの大量収集)。A03班は有機合成のためのAI手法の深化を目的とし、A01班とA02班の研究支援を行うとともに、分野融合による情報科学の新学理の創出を目指します。

今回の原稿が皆様のお手元に届く頃には、公募研究が締め切られているかもしれませんが、本領

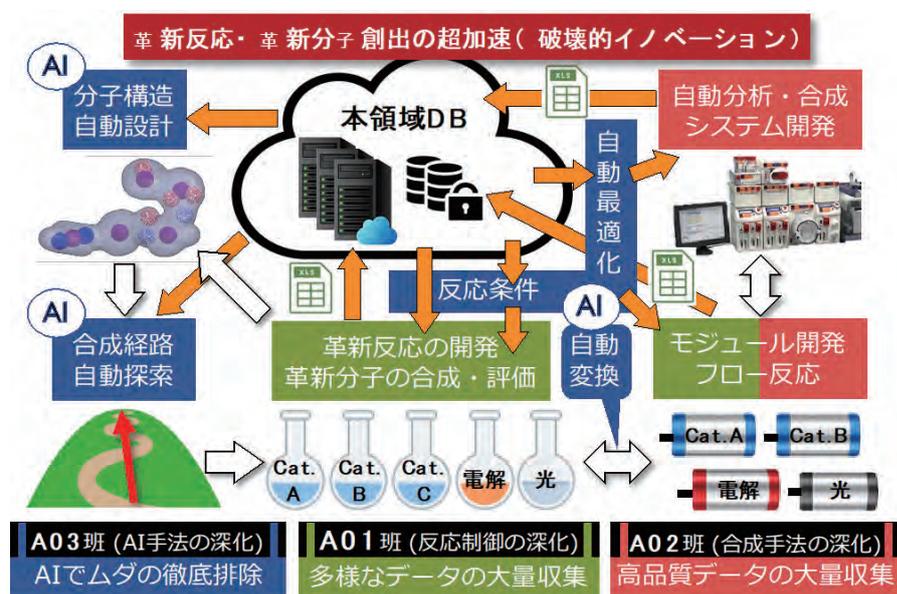
域研究で取り組む「有機合成の多様性に対応した独自のデジタル化プラットフォーム (PF) の構築」には、日本全国各地から、独自の触媒および反応開発に取り組む研究者、有機合成化学に関わる情報科学および計算科学分野の研究者、さらに、フロー反応に代表される合成反応装置の基盤技術を有する研究者の参画と協同が必要不可欠です。以下に、本領域研究で特に重要と考えている3つの課題を説明します。

1つ目は、データ駆動型有機合成反応開発に向けたデータ提供です。現在、論文に掲載する実験データは膨大な実験データの一部にすぎず、主観的な見解によって多くのデータがネガティブデータとして各々の研究組織のレガシーとなっています。しかし、このようにネガティブデータに分類された実験データは、後々の研究のきっかけになることも多く、失敗を繰り返さないという意味以上の大きな価値を有しています。本領域研究のA01班およびA02班に参画いただく研究者の皆様には、従来であれば論文掲載に至らないであろうネガティブデータ、研究室の秘宝データを供出いただき、領域独自

のデジタル化PFを一緒に構築していただきたいと考えています。

2つ目は、バッチ反応からフロー反応への展開をシームレスに繋ぐ有機合成反応のシステム構築です。フロー型の合成装置は、インライン分析装置と組み合わせることで、機械学習に必要な実験データを正確かつ迅速に集積できるという大きなメリットがあります。一方、多様な各種バッチ式の有機合成反応は、フロー反応に対する親和性に大きな違いがあり、実際にフロー化できた反応の種類は極めて限定的です。この問題の解決に向けて、本研究領域では、AI支援によるバッチ反応のフロー反応への変換法の開発を計画しています。その際に鍵となるのが、均一系触媒の固相担持化です。触媒の固相担持化の基盤技術を有する研究グループの参画は、固相担持触媒の適応範囲を飛躍的に広げ、A01班からA02班への橋渡し研究となるため、極めて重要だと考えています。

3つ目は、有機合成化学分野でのAI利用を日常化する情報科学手法の開発です。PFの構築には、有機合成の多様性に対応するAI手法の開発が欠かせま



せん。また、有機化学反応の定量化には、計算科学と機械学習の融合も重要であり、両分野に跨がる研究グループからの参画も大歓迎です。

本領域研究では、インライン分析装置を連結したフロー反応装置とMLのための情報集積を一括で行うことができるワンストップ型のサポート拠点を全国各所に形成します。これは、機械学習に必要な反応データ収集を班員に大きな負担をかけることなく実施するためです。特に、A02班の計画班として

分子科学研究所の榎山博士、機器センターリーダーの鈴木敏泰博士、榎山グループ助教の大塚博士に参加いただいています。同所は「ナノプラットフォーム分子・物質合成」の代表機関として有機合成支援の実績があり、また、共同利用機関として自動精製装置などの汎用機器から触媒反応スクリーニング装置といった先端機器まで整備されています。同所の設備利用ならびにサポート拠点の整備・形成により、公募班メンバーの負担なく多様なデータを円滑

に収集できると考えています。

以上のように、本領域研究は、有機化学の大型協同プロジェクトとして、これまでに類の無い試みです。本領域による異分野融合研究への取り組みは、真に有機合成の変革に繋がるものです。有機的な連携が今後ますます進むよう、連携強化に努めてまいりたいと思っています。今後とも何卒よろしくお願いいたします。

[1] 「化学の近未来：化学とAI・大学の質保証」

[https://www.ims.ac.jp/research/seminar/2018/04/12\\_3942.html](https://www.ims.ac.jp/research/seminar/2018/04/12_3942.html)

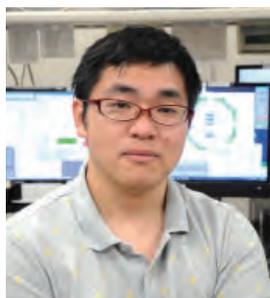
[2] 「化学の近未来：化学と情報科学との融合」

[https://www.ims.ac.jp/research/seminar/2019/04/02\\_4299.html](https://www.ims.ac.jp/research/seminar/2019/04/02_4299.html)

[3] 「化学・情報科学の融合による新化学創成に向けて」

[https://www.ims.ac.jp/research/seminar/2019/04/01\\_4295.html](https://www.ims.ac.jp/research/seminar/2019/04/01_4295.html)

[4] <https://www.scj.go.jp/ja/info/kohyo/pdf/kohyo-24-t292-1.pdf>



光技術ユニット 太田 紘志

## UVSOR BL1U真空紫外光 実験ビームラインの ブランチ化について

おおた ひろし/分子研のある岡崎市出身。博士後期課程修了後、民間企業を経て、学生時代から縁のあったUVSOR施設の加速器グループの技術職員として着任しました。現在は、学生時代の経験を基にビームラインの設計・開発と電子シンクロトロン機の運転・維持を行っています。趣味はネコ吸いとトレイルランニングに加え、日本各地の温泉を巡っております。

紫外線という単語は、日焼けや殺菌という言葉と共によく耳にしますが、真空紫外光（しんくうしがいこう）という言葉をご存じでしょうか？真空紫外光はVUV (Vacuum Ultraviolet) と表記され、波長 $\lambda$ が200 nmから10 nm程度の光のことです（図1）。この波長域になると、物質に非常に吸収されやすく、空気を構成する分子でさえも真空紫外光を猛烈に吸収し始めます。したがって、空気を排除した真空容器の中になければ利用が難しいため、真空紫外光という名前が付けられています。

一方で、物質に吸収されやすいという性質は、真空紫外光と物質との相互作用が大きいことを意味します。真空紫外光を物質に照射することにより、物質を構成する原子や分子内の電子をたたき出すことが出来ます。この現象は、光電効果と呼ばれていますが、その際飛び出してくる電子のスピードを精密に計測すると、物質内の電子がどのような状態に在ったのかを窺い知ることができるのです。このような実験方法は、光電子分光法と呼ばれ、その理論的解釈により、アインシュタインがノーベル物理学賞を受賞しています。光電子分光法は、材料開発研究における極めて強力な分析手段として広く利用されており、非常に多くの研究成果が得られています。最近でも、2016年のノーベル物理学賞の対象となったトポロジカル物質相とも関連が強く、既存の

物質では見られなかった新奇な機能の発現機構も、光電子分光法により得られた知見により確認することが可能となっています。

このように現在の科学技術を支える真空紫外光ですが、この波長域をカバーする強力な連続光を発生させることは困難です。私の所属するUVSOR施設では、シンクロトロンと呼ばれる加速器を利用し、電子を光速の99.9%以上の速度で周回させることによって、赤外線～真空紫外光～X線までの広い波長範囲を含む光、シンクロトロン光を発生させています。シンクロトロン光は、そのまま実験に使われるのではなく、鏡を利用して光を集めて、必要な波長の光だけを選別して実験試料に照射します。この光の加工と輸送を行うための装置は、実験を行う観測装置と区別して、我々の業界ではビームライン (BL) と呼んでいます。

私が担当するビームライン1U（以後、BL1U）も真空紫外光を利用することができるよう設計されており、様々な実験に利用されていますが、使い勝手などを改善するための改装計画が2020年度の初めに立ち上がりました。利用者からの主な要求としては、観測装置の移設と、実験別に光を振り分けて利用するブランチ化（一つの光源を基に複数に分岐）です。二種類の前置集光鏡を一つの真空容器（第0鏡室、図2参照）に組み込むことで、回折格子分光器を通した単

色光を利用する分光ブランチと分光器を利用しない集光ブランチの整備を行いました。図2(a)に改装前後のBL1Uの配置図を示します。改装前（図2(a)下）は、実験条件ごとに分光器室と第二鏡の移動・設置が必要でしたが、BL全体の再設計を行うことで解決を図りました（図2(a)上）。このブランチ化は、私にとって非常に挑戦的な技術課題であり、新たに検討・設計すべき事柄が多数ありました。

ブランチ化の1つ目の課題は、光の振り分け機構です。改装後の配置を見ていただくと分かるように、空間的な制約から、二つのブランチを大きくずらした場所に設置する必要がありました。通常、光の振り分けは、振り分ける鏡の反射角度の調整によって行われますが、BL1Uにおいてこの方式を採用するには、2つの問題がありました。第一に、2つのブランチに振り分ける際の反射角度の違いが大きすぎるため、一枚の鏡で振り分けられるような設計が不可能であること、第二に、鏡の位置調整機構の製作費用が高額となることでした。そこで、これらを解決するために、図2(b)のように第0鏡室内に反射角度の異なる二枚の鏡を設置する方法を採用しました。これにより、二枚の鏡を切り替えることで光の振り分けを可能にし、実験目的に合致した光の選択が可能になりました。この機構を選択したことにより、1) 振り分け鏡

室とその位置微調整機構が不要となった、2) 2枚の鏡を同じ架台に統合したことにより1台の位置微調整機構で済む、3) 同じ光軸上に2つの鏡の中心を一致させたのでブランジの切り替えが簡素にできる、等々多くの利点があります。この光の振り分け方式をタンデムミラー方式と呼んでいますが、基本的には他の施設を含め、採用例は無いと思います。

ブランジ化2つ目の課題は、鏡の新規設計です。真空紫外光を有効に利用するためには、しっかりと集光しなければなりません。物質に吸収されやすいという特性から、可視光のようなレンズを用いた集光はできません。真空紫外光の集光には、点光源からの光を一点に集める機能を持たせた特殊な凹面を持つ反射鏡を用います。そのような機能を有する凹面形状の一つにトロイダル面と呼ばれるものがあります。身近なトロイダル面の例としては、自転車のタイヤ内面の形状が上げられます。トロイダル面鏡は、直交する二軸（水平方向と鉛直方向）の曲率が異なる非球面鏡であり、それぞれの曲率は、光の入射角度、光源から鏡までの距離、鏡から集光点までの距離をパラメータとして決定されます。

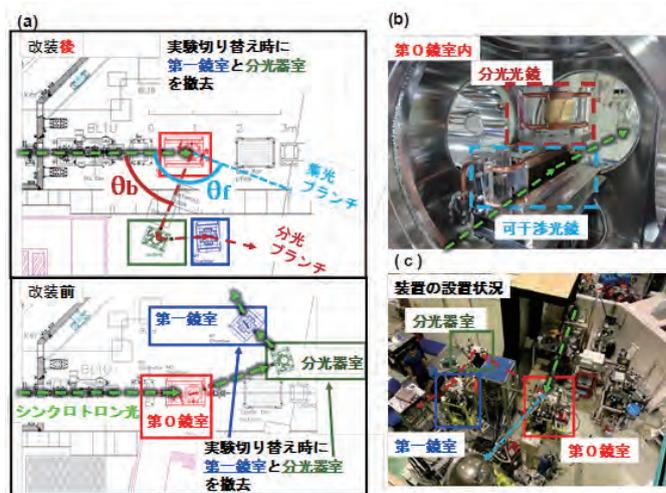
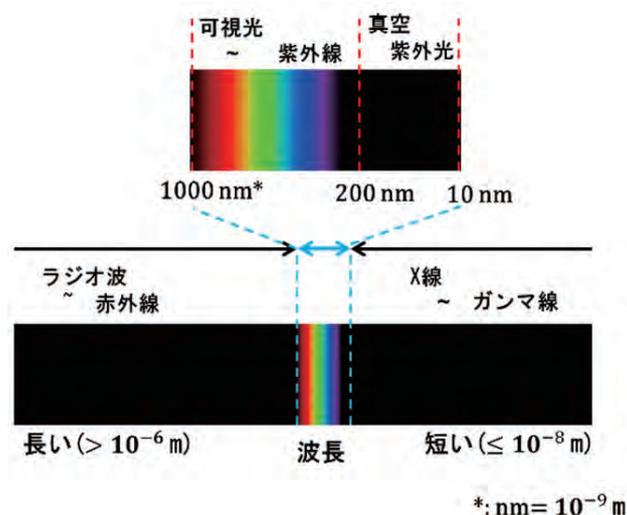
真空紫外光では、鏡に対する入射角

度によって鏡面の反射率が大きく変化するため、入射角ごとに反射率のシミュレーションを行う必要があります。その結果、集光ブランジの反射鏡には、改装前の比較的入射角度の浅い可干渉光鏡をそのまま利用できることが分かりました。そのため、今回は、分光ブランジ用の集光鏡のみを設計製作することになりました。真空紫外光より短い波長域においては、シンクロトロン光の入射角と反射光がなす角度 $\theta_f$  (図2(a)上) が $180^\circ$ に近い角度でしか高い反射率が得られません。分光ブランジのなす角度 $\theta_b$  (図2(a)上) のように小さい場合には、反射率のために利用できる波長域に大きな制限が掛かります。今回の場合、使用するユーザーへの事前の聞き取り調査により、 $\lambda=40$  nmまでの光が使用できれば十分との回答をいただいていたので、反射率のシミュレーションの結果から、角度 $\theta_b=68^\circ$  を選択しました。これにより、 $\lambda=40$  nmより短波長の真空紫外光の利用は絶望的となりますが、この選択のメリットとして、分光器では選別できない高次回折光と呼ばれる不要な光(欲しい波長の分数倍の短い波長の光)を抑制するフィルターとして働くことが期待されます。実験データに含まれる高

次回折光による偽物の信号が低減されるので、誤ったデータ解釈に繋がるリスクが減ることが期待されます。

以上のような技術課題について、UVSOR職員や外部のユーザーさんの助けやアドバイスをいただいたお陰で、特に大きなトラブルも無くBL1Uブランジ化を実現することができました。現在、世界初の実験手法の開発などに使われ、徐々にデータがスタートしております。今回のBL1Uの改装では、設計段階で妥協したことや運用を始めてから発生した問題などもありましたが、ビームラインの真空容器や前置集光鏡の設計・製作に携わり、それらを実際に使用するという非常に貴重な経験を積むことができました。この経験を糧とし、今後の業務において、難易度の高い案件に出会った際には、より良い仕事に繋がりたいと思います。

最後になりましたが、前置集光鏡の設計の際にご助言を頂いた佐賀県立九州シンクロトロン光研究センターの金安副主任研究員、広島大学の高口准教授、UVSOR職員の皆様、第一鏡室を製作いただいた真空光学株式会社様、分光光集光鏡を製作いただいたシグマ光機株式会社様に、この場を借りてお礼申し上げます。



## 総研大ニュース

## 「SOKENDAI特別研究員（挑戦型）制度による次世代研究者の支援・育成の推進」プロジェクト

博士後期課程学生は、我が国の科学技術・イノベーションの将来を担う存在ですが、近年、「博士課程に進学すると生活の経済的見通しが立たない」「博士課程修了後の就職が心配である」等の理由により、博士後期課程への進学者数及び進学率がいずれも減少傾向にあるなど、危機的な状況が指摘されています。このような状況を打破するため、博士後期課程学生による挑戦的・融合的な研究を支援し、優秀な博士人材が様々なキャリアで活躍できるよう研究力向上や研究者能力開発を促す事業として、2021年度から科学技術振興機構（JST）による「次

世代研究者挑戦的研究プログラム」事業が新たに発足しました。

本事業に対し、総研大から「SOKENDAI特別研究員（挑戦型）制度による次世代研究者の支援・育成の推進」というプロジェクト題目で申請していたものが採択され、2021年10月から支援が始まりました。本プロジェクトでは、総研大における大学院教育課程を基盤として「SOKENDAI研究派遣プログラム」「国際共同学位プログラム」「学内共同研究指導」「キャリア開発支援プログラム」等の取組を組織的に実施することにより、博士人材を支援・育成

することを目指しています。10月には全学を対象とした公募を実施し、10名が支援対象者として採択されています。支援対象者には、月額19万円の研究奨励費（生活費相当額）の他、研究費（40万円/年）が支給されます。今後は、標準修了年限に達した採択者の後を埋める形で、新規支援対象者を公募する予定です。公募の詳細については、総研大ホームページでアナウンスされる予定ですので、そちらを参照して下さい。URL (<https://www.soken.ac.jp/>)

（青野 重利 記）

### 受賞者の声

#### 大石 峻也

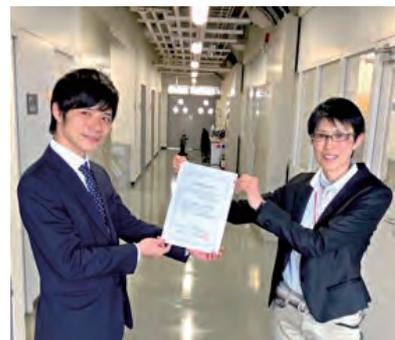
（総合研究大学院大学 物理科学研究科 機能分子科学専攻 5年一貫制博士課程3年）

#### 日本化学会東海支部長賞

2021年1月27日に行われた修士学位取得資格者認定審査にて、「三中心四電子ハロゲン結合を活用する高活性ハロニウム錯体触媒の創成」というタイトルで発表し、日本化学会東海支部長賞を受賞しました。本賞は、化学を学ぶ大学生・大学院生の勉学奨励の一助として、成績優秀な学生を顕彰するものです。修士課程に相当する2年間の研究活動を、このような形で評価して頂き、大変嬉しく思います。

今回の発表では、ハロニウムの形成する三中心四電子ハロゲン結合を触媒機能の創出へと繋げた結果

について報告しました。金属を用いない有機分子触媒は環境調和性に優れるとされ、近年、精力的に開発が進められています。しかし、水素結合のような弱い非共有結合性相互作用を活用する有機分子触媒では、一般に多くの触媒量が必要とされてきました。本研究では、ピリジル系配位子とハロニウムから成るハロニウム錯体触媒がピリジンに対する向山Mannich型反応において非常に高い触媒活性を示し、わずか0.05 mol%にまで触媒量を低減できることを見出しました。本結果は効率的な触媒反応の実現に向けた新たな触媒デザ



インの礎となると考えています。

本賞を頂いたことを励みとして、今後も引き続き研究に全力で取り組んでいきます。最後に、常日頃から研究生活を支えてくださっている榎山儀恵准教授をはじめとする研究室の皆様、心より御礼申し上げます。

受賞者の声

加藤 雅之

(総合研究大学院大学 物理科学研究科 機能分子科学専攻 5年一貫制博士課程3年)

第24回ヨウ素学会シンポジウム優秀ポスター賞

令和3年9月10日にオンライン開催された第24回ヨウ素学会シンポジウムにて、「中性ヨウ素とヨードニウムを基盤とするハイブリッド型ハロゲン結合供与体触媒の創成」という題目で発表を行い、優秀ポスター賞を受賞しました。発表には、ヨウ素を研究対象とする多くの方々に参加していただき、活発な議論をすることができました。

私は、化学的性質の異なる2種類のヨウ素原子を活用することで、高活性な非金属錯体触媒の開発を試みています。今回の受賞は、これまで

に得られた研究成果に対するものです。開発した触媒は、医薬品や天然物の重要骨格である含窒素複素芳香環状化合物を与える有機化学反応を、これまでない低触媒量で促進することができます。また、NMR測定や単結晶X線構造解析を活用し、2種類のヨウ素を鍵とする新たな反応機構を提案することができました。今後は、これまでの成果をさらに発展させて、未だ達成されていない高立体選択的な触媒開発に取り組んでいきたいと考えています。

今回の受賞に際し、多くのご支援



とご鞭撻を賜りました榎山儀恵准教授と大塚尚哉助教、藤波武博士をはじめとする研究室の皆様へ深く感謝いたします。今後とも、本受賞を励みに、研究に邁進してまいります。

Lee Ji Hyun

(総合研究大学院大学 物理科学研究科 機能分子科学専攻 博士課程 (2018年3年次編入学) (現 特別研究員))

2021, The 7<sup>th</sup> SOKENDAI Award

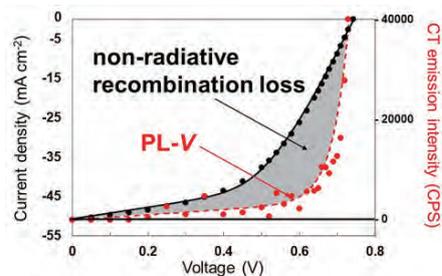
On 28th September, I received the 7th SOKENDAI Award, and Ph.D. degree for my doctoral thesis "Study of Charge Recombination in Organic Solar Cells". This is a study on the charge separation and recombination mechanism of organic solar cells (OSCs).

Global energy demand is increasing. Under these circumstances, following thermal and nuclear power generation, photovoltaic power generation system is attracting attention as a next generation energy source. I wanted to contribute to the energy supply by using solar cells, and SOKENDAI gave me an opportunity to study organic solar cells.

In photoconversion process of OSCs, charge transfer (CT) state is formed at electron donor and electron acceptor interface by hole on the donor molecule and electron on the acceptor molecule.

Then, it goes through the process of separating into free charges or losing energy by recombination. In particular, non-radiative recombination has been pointed out as one of the reasons of the decrease in photoconversion efficiency of OSCs. Through my research, I proposed a method to predict the ideal characteristics of organic solar cells by 'PL-V' measurement. As a result, it was obtained that the efficiency of the OSCs would increase by about 40% compared to the present when non-radiative recombination eliminates. This result made it possible to trace the non-radiative recombination, which is disabled to measure, and has the significance of suggesting a new method to increase the efficiency of OSCs.

My research theme is still unknown as an early stage of research. However, the results of the research contribute to the



supply of low-cost and efficient solar cells. I hope that in the future, solar power will be fully developed and fewer and fewer people will not be able to enjoy happiness due to lack of energy.

Last but not least, I am proud to receive the 7th SOKENDAI Award. I deeply appreciate Professor Masahiro Hiramoto for his passionate guidance, discussions and advice. Furthermore, I am greatly grateful to Dr. Seiichiro Izawa for his research guidance and professional discussion. With this in mind, I will dedicate myself harder in the future.

## 受賞者の声

### 海田 新悟

(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2年)

#### 第59回日本生物物理学会年会学生発表賞

2021年11月にオンライン開催された第59回日本生物物理学会年会にて「バンドル様相互作用面を用いない多様な回転対称複合体の設計」という題で発表を行い、学生発表賞を頂きました。

本研究は単量体タンパク質に変異を導入することにより、新規複合体の創成を目指したものです。計算機を用いて複合体界面を設計し、発現・精製および生化学実験を行ったところ、設計通りの複合体の形成が示唆されました。将来的には、複合体形成の仕組みを理解し、有益な機能を

もつ人工タンパク質複合体の設計に繋がると考えています。

複合体設計について研究を始めて1年半、まだまだ分からないことだらけではありますが、このような形で研究への評価をいただくことができ大変光栄に存じます。天然タンパク質複合体の複雑で機能的な構造には未だに驚嘆するばかりですが、この研究を通してその形成原理の一端に迫って行きたいと考えております。

この度の受賞は古賀信康准教授をはじめとする先生がたの丁寧なご指導、各種計測を行っていただいた方々



の多大なご助力、研究に集中することのできる充実した環境があつてのものであります。この場をお借りしまして、本研究に関わる全ての方に改めて感謝いたします。

### 三本 斉也

(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5年)

#### 第59回日本生物物理学会年会学生発表賞

この度は第59回日本生物物理学会にて発表を行い、学生発表賞を受賞いたしました。このような賞を受賞することができ、とても光栄に思っています。

受賞対象となった研究の内容は、重要な創薬標的ながら不安定であり、様々な状態を行き来するGPCRという膜タンパク質をターゲットに、GPCRの不安定さの原因となる部分構造を超安定な構造に作り変えることで、GPCRを狙った状態で安定化することに成功した、というものです。本研究の内容はInternational Journal of Molecular Sciencesのタンパク質のデザインに関する特集号にて掲載されました。興味のある

方はお読みくださると嬉しいです。

また、学会では上記発表以外にも、GPCRの専門家の方が集うシンポジウムでの口頭発表もさせていただきました。普段はタンパク質デザインの研究として発表することが多く、GPCR研究者に囲まれて発表するのは初めての経験でした。そのため、いつもとは異なる観点から質問を受け、とても貴重な経験をすることができました。発表の機会を与えてくださりましたオーガナイザーの先生方に感謝申し上げます。

学生発表賞の受賞に加え、シンポジウムでの口頭発表、さらには論文発表と、これらのとても貴重で学びの多い経験は、共同研究者の千葉大



学 村田グループのみなさま、そしてご指導いただきました古賀グループのみなさまのご助力がなければ得られませんでした。この場を借りて心より感謝申し上げます。

受賞を励みに引き続き研究に努めて参ります。

E V E N T R E P O R T

## 分子科学研究所体験入学

**担当教員** 2021年度担当教員  
総合研究大学院大学 物理科学研究科 構造分子科学専攻 准教授 奥村 久士

分子研では他大学等の学生さんに分子研の研究環境を知ってもらい、総研大入学への関心を高めてもらうため、例年8月に体験入学を実施してきました。体験入学では2泊3日の日程で他大学等の学生さんに来所してもらい、希望する研究室での研究を体験してもらっていました。夕食時には参加者全員で集まってパーティーを開催し、最終日には体験入学の成果報告会も開いていました。

しかし、昨今の新型コロナウイルス感染症の拡大によって今まで通り実施できなくなり、昨年からの活動方法を大きく見直さざるを得ない状況

となりました。今年は昨年と同様にオンラインで体験入学説明会を開催し、学生さんの受け入れは一年を通じて個別に行っています。体験入学説明会は年に2回行うことし、1回目は2021年6月5日に分子研オープンキャンパスと合わせて行いました。この説明会への参加者は29名でした。その後、分子研体験入学に参加された学生さんは2021年11月現在26名です（オンライン体験1名を含む。実際に分子研を訪れて体験入学を行った学生さんは25名です）。

体験入学の各参加者の来所日程が

異なるため、以前のように参加者同士の交流がないのは残念ですが、各自が自分の好きな時期に分子研を訪問できるというメリットも感じています。制約が多い中での総研大広報活動ですが、少しでも分子研に興味を持つ学生さんが増え、総研大入学者確保につながればと思います。

昨年度担当された小林玄器先生にはコロナ禍での本事業の実施方法について教えていただきました。また総研大担当の田中景さんには準備を含め大変お世話になりました。本事業にご協力くださいました関係者の皆様に、深く感謝いたします。

### 2021年度9月総合研究大学院大学修了学生及び学位論文名

専攻	氏名	博士論文名	付記する専攻分野	授与年月日
機能分子科学	Mahroof KALATHINGAL	Theoretical Studies on Structure, Dynamics, and Membrane Insertion of Polytheonamide B	理学	2021. 9.28
	Methanee HIRANYAKORN	Characterization of conformational dynamics of Lys48-linked ubiquitin chains as design frameworks for creating allosterically controllable multidomain proteins	理学	2021. 9.28
	Ji-Hyun Lee	Study of Charge Recombination in Organic Solar Cells	理学	2021. 9.28

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129回	2021年10月23日	宇宙の中のミクロ、ミクロの中の宇宙～はやぶさ2帰還試料のナノ有機物分析～	大東琢治 助教 (分子科学研究所)
第130回	2021年12月3日	人工光合成への挑戦～空気や水から価値ある分子を～	正岡 重行 栄誉教授 (大阪大学大学院工学研究科)
第131回	2022年1月28日	ウエルビーイング経営の本質～データが明かす新たな人・組織・社会と幸せ～	矢野 和男 (株式会社 日立製作所フェロー、株式会社 ハピネスプラネット 代表取締役 CEO)

■分子研コロキウム

回	開催日時	講演題目	講演者
第953回	2021年8月17日	ファンデルワールス積層による原子層の自在配列と量子輸送現象	町田友樹 教授 (東京大学生産技術研究所)
第954回	2021年12月9日	非平面 $\pi$ 共役分子がもたらす特異な光物性	宮島 大吾 博士 (理化学研究所 創発物性科学研究センター ユニットリーダー)
第955回	2022年1月18日	特異な電子構造と安定性をあわせもつ新奇 $\pi$ 電子系の創成	深澤 愛子教授 (京都大学高等研究院)

■人事異動 (2021年6月2日～2021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
2021/6/16	石川 裕子	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 事務支援員		
2021/6/30	牧田 誠二	併任解除	(技術推進部機器分析ユニット 技師)	技術推進部機器分析ユニット長	
2021/6/30	鈴木 愛	辞職		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 事務支援員	
2021/6/30	JAUNET USAGE JAUNET-LAHARY, Titouan Teddy	退職		計算科学研究センター 特任研究員	
2021/6/30	SEETAHA, Supaphorn	辞職		生命創成探究センター創成研究領域特任研究員 (ExCELLS フェロー)	
2021/7/1	牧田 誠二	配置換	技術推進部光技術ユニット 技師	技術推進部機器分析ユニット 技師	
2021/7/1	繁政 英治	併任	技術推進部機器分析ユニット長	(技術推進部 特任専門員)	
2021/7/1	神谷 美穂	所属変更	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 事務支援員	研究力強化戦略室 事務支援員	
2021/7/1	横田 光代	所属変更	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 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	
2021/7/31	大原 三佳	辞職	物質・材料研究機構統合型材料開発・情報基盤部門材料データプラットフォームセンターデータサービスチーム 研究業務員	機器センター 特任研究員	
2021/8/1	殖栗 敦	採用	社会連携研究部門 特任専門員	東芝エネルギーシステムズ株式会社	
2021/9/1	水野 麻人	採用	生命・錯体分子科学研究領域錯体物性研究部門 特任研究員	ドイツ：アレクサンダー・フォン・フンボルト財団 Research Fellow	
2021/9/30	OUYANG, Dongyan	辞職		協奏分子システム研究センター階層分子システム解析研究部門 特任研究員	
2021/9/30	佐藤 匡史	辞職	株式会社アグロデザイン・スタジオ シニア研究員	生命創成探究センター(研究連携推進室) 特任准教授 (クロスアポイントメント)	
2021/10/1	壬生 託人	採用	生命・錯体分子科学研究領域錯体物性研究部門 特任専門員		
2021/10/5	CHEN, Jiazhuo	採用	特別研究部門 特任専門員		
2021/10/16	藤波 武	退職		生命・錯体分子科学研究領域錯体触媒研究部門 特任研究員	
2021/10/31	市井 智章	辞職	理化学研究所 研究員	社会連携研究部門 特任研究員	
2021/10/31	磯野 裕貴子	辞職	錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 特任専門員	生命・錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 技術支援員	
2021/11/1	大西 洋	採用	特別研究部門 教授 (クロスアポイントメント)	(神戸大学大学院理学研究科 教授)	
2021/11/1	磯野 裕貴子	採用	生命・錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 特任専門員	錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 定年制移行短時間契約職員 技術支援員	
2021/11/1	横田 光代	所属変更	研究力強化戦略室 事務支援員	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 事務支援員	

## 編集後記

学生の頃、研究室に定期的に届く分子研レターズをばらばらとめくり、「あれ、〇〇先生も△△先生も分子研OBだったのか」「分子研のこの装置、実験に使えるかな」などと考えていたことを思い出しながら、85号の編集を担当しておりました。当時はその数年後に自分が編集委員になるとは全く想像しておりませんでした。そのようなことで馴染みのあった分子研レターズ、読者の皆様楽しんでいただけるよう努めてまいります。

さて、加藤昌子先生の巻頭言にはじまり、今号も盛りだくさんの内容となっております。編集にあたり毎号驚かされるのは、在職者、総研大生、出身者の方たちの受賞報告の多さです。分子科学に関するあらゆる分野で、シニアから学生まで各世代がその成果を表彰されているのをみると、分子研にはやはり素晴らしい人材が集まり、また輩出してきたのだと思う一方、私ももっと頑張らねばと活性化されます。

私事で言いますと、ポスドクとして着任したのが2020年ですので、分子研に来てからずっとラボ以外の方々とはほとんど対面交流ができていない状況です。実はレターズ編集委員の方々とも画面越しでしかお会いしたことがありません。今年こそは状況が改善し、分子研のユニークな方々と研究でもそれ以外でも交流したいなあと願っております。

編集担当 大友 章裕

### 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. 85

分子研レターズ

発行日 2022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）

大友章裕（編集担当）

石崎章仁

大塚尚哉

奥村久士

岡本裕巳

繁政英治

杉本敏樹

松井文彦

向山厚

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。

