



分子研：3年+4か月、そして今



中島 洋

(大阪公立大学理学研究科 教授)

なかじま・ひろし / 1996年総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程修了、博士(理学)。北陸先端科学技術大学院大学助教を経て、2003年1-4月分子科学研究所助教。2003年5月より名古屋大学理学研究科助教/准教授。2015年4月より大阪市立大学理学研究科教授。組織改組のため、2022年4月より現職。

私が分子研でお世話になったのは、1993年4月から1996年3月までの総研大生としての3年間、また2012年1月から4月までの助教としての4か月間です。期間も短く、かなり以前のことで、細部に関する記憶は、ほとんど残っていません。ですが、私の研究に関する取り組み方の基本は、この期間に形成されたといって過言ではなく、分子研で研究生活を送れたことを今も幸運だったと思います。この稿では、学生として感じたことについて簡単に回想するとともに、当時の経験と現在に至る職歴との関係、さらには現在の研究や教育との関係について述べたいと思います。

修士課程修了後、他大学への進学を考えていた私は、同時期に開学された総合研究大学院大学に興味もち、数物科学研究科に入学しました。分子研では、錯体化学研究施設の田中晃二先生の研究グループに所属し、金属錯体を触媒に用いる二酸化炭素の電気化学的固定研究に従事しました。修士課程まで二次元層間化合物を扱い、物性を平均値として取り扱うことに慣れていた私にとって、触媒反応の中間体を一つずつ単離し、丹念に同定する研究プロセスは、当初戸惑うことが多く、研究手法や研究の進め方などすべてを一から理解し直す必要がありました。ただ一度身についてしまえば、過去と現在の経験が1+1を超えて、相乗効果を生み出す感覚を受け、その後の研究生活において研究分野を変更することへ

の抵抗感を引き下げてくれました。実際、博士課程修了後に助教として採用された北陸先端大学院大学では、青野重利先生(現 生命創成探究センター教授)のもと、化学を基盤とする金属タンパク質の機能解析に従事し、当初は研究分野の変更や研究手法の習得にかなりの時間を費やしたのですが、そのことを問題なく受け入れることができたのは、分子研での最初の経験が大きいと言えます。

さて、話を分子研の3年間に戻すと、実験施設の研究グループが目まぐるしく入れ替わる中、大瀧仁志先生、中村晃先生、成田吉徳先生、高橋保先生、塩谷光彦先生(東京大学)、田中健太郎先生(名古屋大学)、柘植清志先生(富山大学)、長尾宏隆先生(上智大学)、栗原正人先生(山形大学)、王子田彰夫先生(九州大学)、小江誠司先生(九州大学)、杉本秀樹先生(大阪大学)、まだまだ書き切れていないのですが、当時、そして現在もご活躍の方々との一つで知り合い、研究に関する相談や討論ができたのは、その後の研究経歴において大きな財産となりました。また、当時の流動部門、磯部清先生、中沢浩先生、西岡訓孝先生、廣津昌和先生とは、この時よりおよそ20年を経て、大阪市立大学にて再びご一緒させていただくことになりました。日本の大学では、小講座制にもとづき、研究グループ内で問題を解決しようとする傾向がみられますが、研究グルー

プ間の垣根が低く、グループを超えた研究交流を盛んにできる点は、分子研の美点の一つでしょう。後述しますが、この4月に誕生した大阪公立大学の理学研究科でも、この考えを取り入れた研究組織づくりを現在、目指しています。

分子研での博士課程を終えた後、7年弱の北陸先端大学院大学助教を経て、2003年1月より再び、青野研究グループ助教として分子研に足を踏み入れる機会を得ました。わずか4か月の在職期間であったため、研究職員として分子研を考える機会は、ほとんどなかったのですが、それでも研究グループ間の垣根の低さは健在だと感じました。真偽のほどは、定かではありませんが、研究者の出入りの激しい分子研でも、半年足らずで離職する人は私が初めてだと、当時同じ部門にいらっしまった先生から伺いました。その後、名古屋大学理学研究科の渡辺芳人教授(現分子研所長)の研究室にて助教/准教授として研究する機会をいただきました。実は、それまで私が所属した研究室/グループは、いずれも構成人員が10名未満であり、比較的好き勝手な行動を許していただけていました。渡辺研究室で初めて大規模な研究室に所属することとなったのですが、職階に見合った行動がとれず、渡辺先生に随分迷惑をおかけしたことを反省しております。私個人としては、11年余りの間に、これまでとは異なる研究の進め

方、研究組織のまとめ方を存分に勉強させていただきました。

2015年4月より大阪市立大学理学研究科物質分子系専攻教授を拝命し、引き続き研究と教育活動に従事しています。これまでの研究経歴をもとに研究テーマを設定し、近赤外光の利用をキーワードに、純粋な金属錯体化学、生体分子と合成分子とのハイブリッド分子、生体分子の機能改変と幅広い展開を目指しています。本専攻は、研究室当たりの学生配属人数が少なく、また大学院への進学を希望しない学生もある程度いることから、研究の継続性をどう維持するかが、目下の悩みどころ

です。2022年度からは、大阪府立・市立大学が合併し、大阪公立大学となりました。今のところ、学生総数では、東大、阪大に次ぐ3番目の規模を誇る総合公立大学とのことですが、実際には、今後の18歳人口の減少を視野に入れた大学規模の縮小が念頭にあることは明らかです。理学研究科、物質分子系専攻としては、今後の生き残りをかけ、府・市立大組織の単純な加算ではない組織の形態と運営が求められています。物的リソースの限られる地方公立大学にあって、有望な若手研究者をいかに呼び込み、輩出するのが組織づくりの主題の一つであり、その仕組

みづくりのヒントが、私の経験した分子研にあると考えています。

以上、私の分子研時代の回想とその後、さらに近況について述べました。繰り返しになりますが、今に至る研究者としての広範な人的つながり、研究者としての在り様は、分子研から始まっており、これからも変わることはないでしょう。いま分子研でご活躍の方々も他の研究・教育機関では得難いものを手にしてらっしゃると拝察する次第です。分子研がこれからも研究者にとって、素晴らしい研究拠点として発展し続けることを祈念しております。



分子研出身者としての雑感



山田 陽一

(理化学研究所 環境資源科学研究センター チームリーダー)

やまだ・よういち / 1999年東京大学大学院薬学系研究科修了(博士(薬学))。帝京大学薬学部助手、スクリプス研究所リサーチアソシエイト、分子研助手/助教、理化学研究所副チームリーダーを経て、2018年より現職。専門は触媒化学、有機合成化学。趣味はゴルフ (HP 12.4)、スキー (SAJ2級)、ビールIndia Pale Ale (IPA) を飲むこと。

私は2003年10月から2007年9月までの4年間、魚住泰広教授の研究室で助手(2007年4月に職名変更で助教)として分子研に在籍していました。2007年10月から2018年3月まで理化学研究所の魚住チームの副チームリーダーとして魚住先生と一緒に研究をしていたので、分子研には15年くらいお世話になっていました。かつては数ヶ月に一度は分子研に伺い、そのたびに2時間に1本しか豊橋駅に止まらない新幹線ひかり号に悲しんだりしていました。2018年にチームリーダー

として研究室を主宰し、2019年に無期雇用研究職員になりました。40歳で任期制職員が多数いる問題云々と不安定な研究者に関して報道されていましたが、私はそれを地で行ってたわけです。

さて、私が分子研に助手として着任したときは魚住研がまだ明大寺地区にあり、山手地区開所とともに2004年4月から5月にかけて山手地区に研究室引っ越しをしました。研究室の引っ越しというのはこんなにも大変なものかと思ったものです。でもおかげでラボの仕組みを理解しました。そして、

2007年に理研に異動するときには3チームで一緒に使用する研究室の立ち上げを一から(厳密に言うと前のラボからのスクラップアンドビルドだったのでマイナスから)行い(半年かかりました)、ラボの設計やら導線やらラボ作りしましたし、2013年に理研内の別の建物へ引っ越しをしてまた研究室立ち上げ(4ヶ月かかりました)をしてと、ラボ立ち上げ屋として過ごしている感があります。

分子研の魚住研での4年間は楽しかったという思いです。いまだに岡崎の生

活は良い思い出です。雑用を気にすることなく研究ができ、「山ちゃん、暇だよね。だから実験してればいいよ。」という魚住教授の言葉で、学生とディスカッションしつつ、有機化学実験を自らすることができたのです。“Yoichi M. A. Yamada, and Yasuhiro Uozumi”という著者2名だけという論文が複数あるというのが分子研での私の研究自慢です(って2016.9の分子研レターズにも書きました。そして、魚住先生も北大触媒センター助手時代に Yasuhiro Uozumi, and Tamio Hayashi”という著者2名の論文があるわけですが)。土曜日午前中の抄録会の後には「日本晴れ」というラーメン屋さんでラボのみんなで行き、「とんこつ+替え玉+餃子」を食べたり、深夜に数名でラーメン横綱に行き、入れ放題のネギをどっさりトッピングしたラーメンを食べたり、教授がいないときに研究室員と焼き鳥屋に行き、教授がボトルキープした富乃宝山を空けたり、魚が旨い飲み屋で教授とわちゃわちゃ話をしたり、なんか良い思い出が食い物関係ばかりというのがなんと魚住研っぽいですね。

今もあるのでしょうか、当時助手会(後の若手会)というのがあり、助手や博士研究員が集まり、夕方に研究発表・ディスカッションをして、夜に飲み会を行うという若手にとって大事な会がありました。水滸伝の梁山泊みたいなものです。中村宏樹所長も飲み会に参加して下さり、悪態をつく我々若手の相手をして下さりました。助手や博士研究員は任期制でしかも内部昇進が(原則)ないので所内人事の憂いが無いため、ある意味所長が怖くなく、それが故に所長に平気な顔をして色々言えたのです。所長もそれに対して(きっと怒っていらっしやったことではし

が)話を聞いてくださったのでした。逆にいえば、風通しが良い風土だったとも言えます。実に良い時代でした。

当時助教だった先生でそのように思われる方々もいらっしやることでしょうが、分子研に居た時には分子研への帰属意識はありませんでした。任期制教員として「〇〇年〇月にクビ」と記載されている辞令をもらい、しかも昇進が(原則)できない分子研の教員としては、ただひたすら分子研を出て行くしか無いわけで、逆に出て行くための歯の食いしばりが研究のドライビングフォース(駆動原理)でさえありました。任期制というのは身分の不安定であるばかりではなく、精神も不安定になるものでしょう(私だけ?)。無期雇用研究者になった今でさえ、任期満了を迎えクビになり海外に異動して海外で暮らしている…という悪夢を見て、寝汗びっしょりでガバッと起きることが未だにあるのです。制度に関する意見はここでは述べません。この紙面を越えることです。意見もありません。ただ任期制はかくも辛いものだけということを知っていてほしいのです。結局、その気持ちを分子研時代、理研時代を通じて、ボスだった魚住教授は最終理解して下さっていたことが、とにかく私にとって助けとなった訳で、研究室主宰者となった今、このことを心の片隅に置きながら研究室の若い研究者と研究を進めることが大事だと思っています。

分子科学研究所は大学共同利用機関法人ということで、全国の研究者に様々な形でサポートをして下さるということがとても大きいと考えています。何か研究で困ったことがあれば、共同利用機

関としてこっちを向いて丁寧に助けてくれることに独自性があると思います。この共同利用機関としての更なる拡充、そして欲を言えば(UVSOR等の)測定系が判る実験系教員の拡充を陰ながら期待しています。ハードからソフトへと円滑に繋がるのが、研究の専門性がますます高くなった今こそ(私には)大事であると考えています。共同利用機器としてかつて分子研にあった920 MHz NMRの測定では、化学が判る教員がいて、化学が判るスタッフさんが測定のオペレーションをして下さり、共同研究利用として私自身助けられました。あの機器は月曜日から翌月曜日まで1週間フルに稼働していた記憶があります。多くの外部研究者は助けられたことでしょう。ここでのポイントは、分子研教員・スタッフさんがしっかりと外のユーザーに向いていて、寄り添ってくれていたことです。だから研究が進んだのだと思っているのです。

分子研出身者は数多く、「棒を投げれば分子研出身者に当たる」とは蓋し名言です。会ったところで別に便宜が図られるわけでもないですが、分子研という「梁山泊(研究者の楽園という意味)」のようなところから野に放たれた分子研OBOGに出会うとなんか嬉しくなるものです。そしてコロナ禍もほぼ去った今、分子研で共同研究を進めます。引き続き宜しくお願い致します。

Summary

Preparation of a m-Phenol Sulfonic Acid-Formaldehyde Resin Catalyst PAFR II

c1ccc(O)c(S(=O)(=O)N)c1 + HCHO $\xrightarrow[2 \text{ mol equiv.}]{2 \text{ M H}_2\text{SO}_4, \text{aq}, 120^\circ\text{C}, 24 \text{ h}}$ c1ccc(O)c(S(=O)(=O)N)c1 $\xrightarrow[2 \text{ H}_2\text{O}]{\text{ion exchange}}$ c1ccc(O)c(S(=O)(=O)N)c1 **Sulfur loading: 11 wt%**

Batch Esterification without Removal of H₂O

R^1COOH + HOR^2 $\xrightarrow[90^\circ\text{C}, 15 \text{ h}]{\text{catalyst 2 (0.5 mol\%})}$ R^1COOR^2 + H_2O **Reused nine times without significant loss of its catalytic activity**

Flow Esterification of Various Carboxylic Acids and Alcohols

R^1OH + HO-C(=O)-R^2 $\xrightarrow[90^\circ\text{C}, 20 \mu\text{L/min}]{\text{catalyst 2 (2.2 mmol), flow reaction}}$ R^1OC(=O)R^2 **Up to 98% yield in flow reaction Running time Over 180 hours**

Org. Lett. 22, 160-163 (2020)



ご無沙汰しています



三浦 伸一

(金沢大学理工研究域数物科学系 教授)

みうら・しんいち / 1995年京都大学理学研究科博士後期課程修了、博士(理学)。1995年ペンシルバニア大学博士研究員、1996年東京工業大学総合理工学研究科助手、2002年岡崎国立共同研究機構計算科学研究センター助手、2007年金沢大学自然科学研究科助教授を経て、2014年より現職。

分子研レターズの寄稿依頼をいただき、分子研時代のことを懐かしく思い出しました。分子研の計算科学研究センターに助手として着任したのは2002年の7月で、その後、2006年末までお世話になりましたので、4年半ほど岡崎にいたことになりました。実は実家が比較的近くでコンファレンスセンターの目の前の高校に通っていたために土地勘は十分あり、生活に関する問題はありませんでした。その頃は私の上司の岡崎進先生やセンター長であった平田文男先生を中心にNAREGIプロジェクトが推進されており、後の京プロジェクトへとつながる重要な仕事をされておりました。私はプロジェクトにはあまりコミットしておらず誠に申し訳ありませんでしたが、研究に注力する時間をいただき感謝しております。その頃のことなど思い出しつつ、現在につながる話などさせていただければと思います。

当時は前任地の東工大時代から始めた経路積分法に基づく量子シミュレーション手法の開発に集中していました。大きな目標は極低温下の量子凝縮系で生起する分子プロセスの解明にあります。超流動状態にあるナノサイズのヘリウム液滴の内部(あるいは表面)に分子系を捕捉し分光学的に測定することが可能になり、多くの研究者から関心を持たれていました。この実験手

法はしばしばHElium Nano-Droplet Isolation (HENDI) 分光法と呼ばれます。このHENDI分光実験から、ナノ液滴内の分子ダイナミクスは様々な“奇妙な”振る舞いを示すということが明らかになってきました。極めて印象的な例としてOCS分子の回転運動をあげることができます。液滴に捕捉されたこの線形分子の赤外スペクトルはあたかも真空中で自由回転しているような振る舞いを示すのです。つまり液滴内に溶媒和した分子は、周りのヘリウム原子と相互作用しているにもかかわらず、“有効的に”媒体から摩擦を受けずに運動していることとなります。超流動ヘリウムは巨視的には粘性率ゼロで特徴づけられますが、実験は微視的なレベルでも超流動性が分子のダイナミクスに劇的な変化を与えることを明確に示しています。

東工大時代に曲がりなりにも自分で開発した方法で超流動状態のシミュレーションを実現できるようになったので、分子研では上述のOCS分子をドープした超流動ヘリウムクラスターのシミュレーションを実現しようと準備をすすめていました。分子をひとつ加えるだけだから簡単だと思われるかもしれませんが、分子を剛体としてモデル化し経路積分法で量子化するというあまり標準的ではない問題が含まれていましたので、その実現手法の検討

から始める必要がありました。実現にまつわる諸問題を解決して計算を実施することにより、実験で見られた特異な回転ダイナミクスはヘリウム原子が従うボーズ統計の直接的な帰結であることを示しました。また回転ダイナミクスのクラスターサイズ依存性を調べてみると、クラスターが超流動性を発現する領域(粒子数10程度)で分子の量子力学的な回転ゆらぎが定性的に大きく変化し、その後サイズの増大と共にナノ液滴領域の極限へその性質がゆっくりと収束していくことがわかりました。このあたりは分子研から新任地の金沢大学に移った頃に行った研究です。

上述のヘリウムとともに液体水素はかねてから超流動性を示す可能性が指摘されていますが、未だ明確な解は得られていません。ひとつの候補としてクラスター状態にある水素が考えられてきましたが、これまで基底状態の構造についてすら理論的なコンセンサスが得られていませんでした。金沢に移ってから量子多体系の基底状態を計算する手法である変分経路積分分子動力学法を新たに開発しましたので(開発の動機はヘリウムナノ液滴にあるのですが割愛)、その方法でパラ水素クラスターの計算を行いました。その結果、基底状態でのクラスターの構造はどろどろと液体のように溶けた状態ではな

く比較的リジットであることを明らかにしました。レプリカ交換法の考え方をを用いて方法を拡張し注意深く調べたので、構造に関する問題はこれだけりがついたと思っているのですが、今でも新しい計算の報告などあり、すっきり解決したという状況ではありません。今は超流動性の発現について完全な決着をつけるべく、方法論の改良を進めているところです。ヘリウムや水素クラスター内の分子過程については未解決の問題がたくさん残されています。実験のグループとの対話も定期的に行っているのですが、なかなか思うようには進みません。取り組んでみたい問題は山積みですので、大らかな気持ち

で取り組んでいきたいと考えています。量子シミュレーションに関する研究課題以外にも、金沢に移ってから以前から関心のあったタンパク質の折りたたみ問題にチャレンジしようと、自分なりに問題を分割し少しずつ進めています。もともと学生時代は生体高分子の理論・計算の研究室に所属していて、折りたたみ問題については大いに興味はあったので、その時の夢を実現するべく努力しています。まずは拡張アンサンブル法に関する手法の開発を行い、ごく簡単な粗視化モデルに対して熱力学的な折りたたみ転移の性質を調べました。現在は小さなタンパク質の全原子モデルに研究を進めているところで

す。やってみると確かに色々難しい問題があり、一筋縄ではいかないものだなあと実感しているところですが、こちらも問題を少しずつ解決し前進しています。将来的には分子進化や人工タンパク質の設計の問題も視野に入れて研究を進められたらと考えています。分子研時代から最近までの研究の一部を駆け足で概観しましたが、金沢に来てから分子研に伺うのは数年に1回程度となりご無沙汰しておりますが、分子研が分子科学研究の世界の大きな中心のひとつであることは変わっていないことと思います。皆さんのこれからの益々のご発展を祈念しつつ、拙稿の締めくくりといたします。

分子研出身者の今 ■ 受賞報告



佃達哉 東京大学教授に第12回分子科学会賞

この度、「化学修飾金属超原子の分子科学」に関する研究業績に対して、分子科学会より第12回分子科学会賞を授与していただきました。学生の時から今日に至るまで研究者として育てていただいた分子科学会から、このような映えある賞をいただいたことは、大変光栄なことですし、今後の活動の大きな励みにもなっています。受賞対象となった研究は、私が准教授として分子研でお世話になっていた時期(2000-07年)に開始したもので、ゼロからの挑戦を辛抱強く後押ししていただいた当時の茅幸二、中村宏樹所長や分子研の先輩・同僚・スタッフの皆様に厚くお礼申し上げます。また、私を研究の道に引き入れて下さった恩師の近藤保先生にも改めて感謝の気持ちをお伝え

したく存じます。

研究内容は、一言で言ってしまうと、有機配位子や高分子で修飾された金属クラスターを原子・分子精度で化学的に合成し、その幾何・電子構造と特異的な安定性・触媒性能・光学特性の相関を明らかにする、というものです。特にこだわっているのは、各論に陥らないように「超原子(原子様の離散的電子構造を持つ貨幣金属原子の集合体)」という統一的概念に基づいて構造と物性の相関の理解を目指していることと、気相光電子分光法を用いて電子親和力などの基礎物性値を決定していることです。究極的な目標は、原子・分子を自由自在に配列することでナノスケールの新しい人工元素を作り出す錬金術の開発です。研究を開始して20

年の時を経た今、開始当時には想像もつかない景色を目の当たりにできていることにコーンしています。これも、これまで一緒にやってくれたスタッフや学生が脈々と積み上げてくれた蓄積と、彼ら彼女らが時々引き当てた予想外の発見がもたらす大きな飛躍のおかげです。夢は大きく持っておくもんだな、というのが実感です。

定年をはっきりと意識する年頃になりましたが、残りの時間で、自分の感性を信じて、自分の才能を使い切りたいと思っています。具体的には、超原子が部分的に融着してできた擬似的な分子群(超分子と区別するために「超原子分子」と名付けました)を合成し、その結合論や物性論を構築することを目指しています。さらに、一般的な化