

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、こちら問題も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。

定年も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

学で取り扱う物質や現象を、全て超原子に置き換えて実現し、新しい階層での物質化学を開拓したいです。夢は大きい方がいいんです。研究以外の部分では、日本の分子科学研究のコミュニティーが今

後ますます多様化し、世界に向けて活力を発揮できるよう、高校生や大学学部生へのアウトリーチ活動や、大学院学生や若手研究者の育成支援などで恩返しができるように思います。



合成した超原子分子の例



佃 達哉 (つくだ・たつや)

1994年東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程修了(博士(理学))。1994年理化学研究所・基礎科学特別研究員。1994年東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻・助手。2000年分子科学研究所・助教授。2007年分子科学研究所・准教授。2007年北海道大学触媒化学研究センター・教授。2011年より現職。最近では、合成した金属クラスターの模型(縮尺1/4000万)を3Dプリンターで作成し、眺め暮らしています。

分子研出身者の今 ■ 受賞報告



根岸雄一 東京理科大学教授に日本化学会学術賞

2021年3月に日本化学会学術賞を受賞致しました。この賞は、化学の基礎または応用分野において先導的・開拓的な研究業績をあげた者に与えられる賞であり、今回私は、「金属クラスターの構造制御とエネルギー・環境触媒への応用」に関する研究を評価して頂き本賞を受賞致しました。

私は、金属クラスターについては、慶應義塾大学での学生時代から研究を開始しています。ただその時には、茅幸二先生(元分子研所長)と中嶋敦先生(現慶大教授)の研究室に所属していましたので、気相に孤立した金属クラスターに関して研究を行っていました。その後、博士課程の途中に、佃達哉先生(現東大教授)に助手として採用していただき、そのことがきっかけとなり、液相合成が可能な金属クラスターへと研究対象を変えました。この時の研究では、一連のチオ

ラート保護金クラスターを精密かつ系統的に単離することに世界で初めて成功し、それにより、日本化学会進歩賞を受賞させて頂いています。2008年に東京理科大学に異動してからは、分子研にて培った知識と技術を活かしつつ、受賞の対象となった金属クラスターの構造制御とエネルギー・環境触媒への応用について研究を行っています。

エネルギー・環境問題が深刻化する中、クリーンで再生可能な水素をエネルギー源とした社会へと移行することが強く期待されています。そのような水素社会を実現するためには、太陽光と水から水素を製造する水分解光触媒と、水素と空気か

ら電気を生み出す燃料電池を今よりもさらに高機能化させる必要があります。実際に反応を進行させる、担体上に担持された金属クラスター(担持金属クラスター)の化学組成や構成原子数を精密に制御することはそれら材料の高機能化に極めて有効です。そこで私達は、金属クラスターの化学組成と幾何構造を厳密に制御する技術を複数確立するとともに、



50歳の誕生日を研究室の学部4年生に祝ってもらっている様子

得られた金属クラスターを用いることで担持金属クラスターについても原子精度で制御する技術を確認しました。得られた材料を用いることで、各材料における担持金属クラスターの構成原子数/化学組成と材料機能の相関についても原子精度にて明らかにしました。これらの研究を通して、水分解光触媒と燃料電池を今後さらに高機能化させる上での明確な設計指針を得ることに成功しました。

さて、東京理科大学に移動してから既に14年の月日が経過し、私も今年の6月で50歳の大台に到達致しました（写

真）。残りの研究者人生では、これまでの研究をさらに発展させ、新たな実用材料の創製に取り組みたいと考えています。そうした研究を通して、分子科学分野のさらなる発展と実社会の改善に大きく貢献したいと考えています。



根岸 雄一（ねぎし・ゆういち）

2001年慶應義塾大学大学院理工学研究科博士課程中退。慶應義塾大学助手、分子科学研究所助手・助教、東京理科大学講師、准教授を経て、2017年より現職。文部科学省研究振興局学術調査官（2013～2015年）、分子科学研究所客員准教授（2014～2016年）、大学院総合化学研究科研究科長（2018～2019年）、分子科学会運営委員（2020年～現在）、ナノ学会理事（2021年～現在）。

アウトリーチ活動

第132回分子科学フォーラムについて

2022年6月10日に行われた第132回分子科学フォーラム（YouTube Liveによるオンライン開催）では、東京大学の武田俊太郎先生に「量子コンピュータ～開発者が明かすしくみと可能性～」と題してご講演いただきました。「量子コンピュータ」は連日のようにニュースでも取り上げられ、何だか凄そうなのですが、その仕組みや能力といった実態は、よくわからない印象でした。ご講演ではまず、そろばんからスーパーコンピュータまで、従来の「計算する機械」は全て古典的な物理現象で計算を行っていて、古典的な計算機の高性能化は原理的限界に近付いていること、それに対して、量子コンピュータは量子論的な波の重ね合わせと干渉という全く別種の物理現象を用いて、その限界を超えようとするものであることを説明されました。量子コンピュータは、全ての計算が高速なのではなく、いくつかの、しかしとても重要な問題についての計算が、劇的に速いのだそうです。そして、量子論的な物理現象を用いた計算を実現するには何か「量子」が必要であり、その選択によって実装技術に大きな違いがあることや、武田先生の研究されている、量子として光を用いる方式についても、実際の研究現場の写真を交えて解説していただきました。現状の量子コンピュータは、言わば「1+1」も間違えてしまうレベルで、その計算結果が役に立つようになるのはまだ先とのことですが、ご講演を聞いて、人の生活のあらゆる面にコンピュータが関わる現代において、その開発には大きな意義と必要性があることが実感できました。ご視聴の皆様には、光方式のメリットや、日本の強みなど、様々な観点からのご質問・コメントを多数、チャット欄にいただき、これを元に司会が代わって質問をいたしました。ご視聴の方々の量子コンピュータへの関心の高さがうかがえました。また今回は、ライブ開催の翌日から期間限定で見逃し配信を行い、当日ご参加いただけなかった方々にも多数ご視聴いただきました。

（広報室 記）

市民公開講座 第132回 分子科学フォーラム
量子コンピュータが創る
未来

オンライン講演会
事前申込 不要
YouTube Live 配信

市民公開講座
(参加無料)
2022年
6月10日
16:00

新進気鋭の
量子コンピュータ研究者
武田 俊太郎
東京大学 大学院工学系研究科 准教授

量子コンピュータ
～開発者が明かすしくみと可能性～

次世代のコンピュータとして注目される量子コンピュータ。2019年にはGoogleがスーパーコンピュータで1分かかる計算を、量子コンピュータが分秒で解いたと発表。話題に拍子がかかった。本講座では、量子コンピュータのしくみと可能性、量子コンピュータが分秒で解いたと発表された計算の仕組みを詳しく解説します。また、私たちがどう使うのか、その可能性を明らかにし、私たちの生活にどのような影響があるかを詳しく解説します。また、私たちがどう使うのか、その可能性を明らかにし、私たちの生活にどのような影響があるかを詳しく解説します。

実際に開発している光量子コンピュータの仕組みを詳しく解説し、最先端の研究開発現場を覗いていただきます。

主催 大学食料料産学連携推進 分子科学研究所
共催 産学連携推進センター

分子科学研究所
〒113-8671 東京都文京区本郷3-1-1
TEL 03-5841-7282 Mail: fsci@u-tokyo.ac.jp

分子科学フォーラム 開催中
分子科学研究所 主催
分子科学フォーラム 開催中
分子科学研究所 主催
分子科学フォーラム 開催中
分子科学研究所 主催