

分子研レターズ

VOL. **86**
September
ISSN 0385-0560

●分子科学の最先端

新しいフェーズに入った 有機太陽電池

平本 昌宏 [物質分子科学研究領域 教授]

●巻頭言

イノベーションの風景と 分子科学への期待

長我部 信行 [株式会社日立製作所 コネクティブインダストリーズ事業統括本部
事業戦略統括本部 副統括本部長]

●レターズ

おかげさまで

長谷川 淳也 [北海道大学触媒科学研究所 教授]

共同利用研究ハイライト

パラジウム触媒を用いる含八員環分子の新規合成反応開発 村上 慧 [関西学院大学理学部 准教授]

光電子運動量顕微鏡を利用した高移動度有機半導体の分子軌道トモグラフィー 山田 洋一 [筑波大学 准教授]

巻頭言

01 イノベーションの風景と分子科学への期待

●長我部 信行 [(株)日立製作所 コネクティブインダストリーズ事業統括本部 事業戦略統括本部 副統括本部長]

レターズ

02 おかげさまで

●長谷川 淳也 [北海道大学触媒科学研究所 教授]

渡辺 芳人 所長就任

04 分子研の皆さん、お久しぶり

分子科学の最先端

05 新しいフェーズに入った有機太陽電池

●平本 昌宏 [物質分子科学研究領域 教授]

IMSニュース

9 各種賞のご紹介

10 分子科学研究所所長招聘会議「日本の人材育成を考える」

11 事業報告

13 受賞者の声——瀬川 泰知、湊 丈俊、奥村 慎太郎、伊澤 誠一郎、豊田 朋範

IMSカフェ

17 New Lab研究室紹介——松井 文彦、大西 洋

21 分子研出身者の今——中島 洋、山田 陽一、三浦 伸一

25 分子研出身者の今 受賞報告——佃 達哉、根岸 雄一

27 アウトリーチ活動

28 分子研を去るにあたり

31 外国人研究職員の印象記

32 新人自己紹介

共同利用・共同研究

38 共同利用研究ハイライト

パラジウム触媒を用いる含八員環分子の新規合成反応開発 村上 慧 [関西学院大学理学部 准教授]

光電子運動量顕微鏡を利用した高移動度有機半導体の分子軌道トモグラフィー 山田 洋一 [筑波大学 准教授]

42 施設だより——軟X線XAFSによる有機マグネシウム化合物の構造解析

電子スピン共鳴装置 Bruker E580

等温滴定型カロリーメーター MicroCal PEAQ-ITC

フルカラー3Dプリンター

ORION2022における認証と端末セキュリティ

48 共同利用・共同研究に関わる各種お知らせ

分子科学コミュニティだより

50 運営に関わって——奥田 太一、古川 貢

分子研技術推進部

52 新しくなったクリーンルームの紹介

大学院教育

55 イベントレポート

57 修了学生及び学位論文名

58 各種一覧

イノベーションの風景と 分子科学への期待

長我部 信行

(株)日立製作所 コネクティブインダストリーズ事業統括本部
事業戦略統括本部 副統括本部長



科学技術がイノベーションの視点で語られる事が多くなっています。科学技術の基本計画も昨年閣議決定された第6期から科学技術・イノベーション基本計画となりました。筆者は1980年から企業研究所に属し、40年以上色々な立場でイノベーションに向き合ってきましたが、その間、イノベーションを生み出すエコシステムは変遷を続けてきました。

筆者が企業に入った1980年代は企業研究所に研究者を集め、発明によって新製品やサービスを生み出す、いわゆる中央研究所モデルが日本では全盛期でした。基礎研究ただ乗り批判を受けて、純粋基礎研究も企業で行われていた時代です。この時代、グローバルにはスタートアップがリスクを許容できる資金を得て、イノベーションを起こす起業家モデルがイノベーションを牽引するようになっていました。近年では、いろいろなイノベーションエコシステムが複合化して動いている時代と言えると思います。

さて、現在私たちがイノベーションによって解決しなければならない課題は複雑で複合的なものである事は皆

さんご存じの通りです。課題解決には一定の経済合理性が必要であり、従ってイノベーションによって地球環境や人々のウェルビーイング、社会の安全・安心といった課題は解決していく必要があります。この解決には社会実装を見据えた幅広い知識や異分野の融合が必要であり、そのために大学の改革や環境整備を進めようとしている事は皆様ご案内の通りです。

こうした複雑で複合的な課題を良く理解して、新たな技術と事業モデルで解決する努力は継続するべきですが、現在の多くの課題は本質的に大きなブレークスルーが現れないと解決不可能に見える課題が多く存在します。こうした大きなブレークスルーを生み出すのは基礎科学的発見で、歴史はまさにこれを証明してきました。また、新たな時代のイノベーションを生み出すために、これまでのイノベーションエコシステムとは異なる基礎科学、エンジニアリング、事業モデル、社会モデルが連携する新たなエコシステムも生み出す必要があるように思います。

2022年は「持続的な発展のための国際基礎科学年」として、昨年12月

国連で決議された年となります。主催者のホームページには次のように書かれています(仮訳: <https://www.iybssd2022.org/en/about-us/>より)。「技術の応用は容易く認識できるが、基礎的な好奇心に基づく研究は、なかなか理解されない。しかし基礎科学は、イノベーションを起こす主要な技術の進歩の基盤となると同時に、未来の研究者を養成し、未来に良い影響を与える決定に参画する人々を育むのである」と。

分子科学は広範囲にわたる持続的発展の鍵となる技術開発に必要なサイエンスを提供できる分野です。今後ともこの使命に向けて分子研が発展される事を願っています。

おさかべ・のぶゆき

1980年から約20年間、企業研究所にて物理をバックグラウンドとして電子波干渉の基礎物理と材料・デバイス計測研究に従事。その後2つの企業内研究所にて11年間所長を経験、2014年から事業部門で事業経営、事業戦略を担当、現在に至る。JST未来社会創造事業共通基盤領域運営統括、産業競争力懇談会(COCN)実行委員。

長谷川 淳也 北海道大学触媒科学研究所 教授

おかげさまで



はせがわじゅんや

1993年 京都大学工学部合成化学科卒業
 1995年 京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻修士課程修了
 1998年 京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻博士後期課程修了
 1997年 日本学術振興会特別研究員
 1999年 ルンド大学理論化学科博士研究員
 1999年 京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻助教
 2008年 京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻講師
 2011年 京都大学福井謙一記念研究センター准教授
 2012年 北海道大学触媒化学研究センター教授
 2015年 北海道大学触媒科学研究所教授

最近、表情が明るいですねと言って頂くことができました。令和3年度をもって所属する北海道大学触媒科学研究所の所長を退任し、肩の荷を下ろして晴れやかな気分だったからでしょうか。小さな研究所とは言え、附置研究所、共同利用・共同研究拠点としての機能を維持し、向上するためには自身の想像を超える労力と精神力が必要でした。パフォーマンスの悪いシングルCPUは4年間の耐用期間が近づき、そろそろ限界をむかえつつありました。計算科学研究センターの計算機もそろそろ更新時期をむかえるとのことで、こちらもご苦労さまでしたと感情移入しています。

さて、分子科学研究所、計算科学研究センターの大型計算機とのかかわりを振り返りますと、修士課程の学生であった頃、S820からSX-3へのリプレイスがなされた頃に遡ります。当時、中辻研究室で開発されていたSAC-CIプログラムを使って、より大規模な分子系に精度の高い励起状態計算を展開する研究を進めていました。S820の

コアメモリは数百メガバイトでしたので、SAC-CIプログラムが使用するメモリを低減するためのアルゴリズム開発に取り組んでいました。SX-3へのリプレイスによって、主記憶が2ギガバイトにまで拡張されたときの驚きを鮮明に覚えています。今となってはノートPCでも当然装備されているくらい、むしろ小さいくらいの主記憶の容量でしたが、応用できる対象がポルフィリンにまで広がりました。計算機の発展のおかげさまで、当時ab initio励起状態計算で最大規模の計算であった長嶋雲兵先生のCI計算を超えたと、素直に嬉しく感じたことが思い出されます。

また、当時は並列処理の黎明期でもありました。青柳睦先生が分子研にいらっしゃった頃ですが、計算機センターで開催された研究会でお会いした折の会話で、数百並列計算を目指して分子軌道計算プログラムを開発していると伺いました。ワクワクする高揚感を感じたことをよく覚えています。当時の中辻研究室ではプログラム開発

のための外部資金に採択され、光通信で接続された5機のIBM-RS6000が導入されました。Parallel Virtual Machineという並列計算用のソフトウェアを使ってデータ通信することが可能になりました。マニュアルに掲載されていたサンプルを使用して、子機から親機に向けた「Hello」というメッセージが返ってきたときは、素朴に感動しました。今から思えば「長谷川のおもちゃ」と呼ばれる程、図々しく使わせてもらいましたが、不遜にも当時の中辻研究室の先生方にはお礼を申し上げていなかったことに恥じ入るばかりです。他方で、プログラム開発があまり評価を受けない時代でもありました。柏木浩先生が当時、プログラム開発は学位授与に相応する価値があると主張されていたことに痛く同感していました。Parallel Virtual Machineで動的に負荷分散して積分変換するプログラムを開発してポルフィリン類の計算を行い、意気揚々と分子科学討論会に乗り込んだのですが、ポスター発表では閑古鳥でした。しかしながら、開

発したプログラムでクロロフィル二量体のSAC-CI計算までこぎつけることができたのは（そして学位を取れたのは）、先端的な研究環境に加えて、時代を先駆ける風を届けて頂いた分子研の先生方のおかげでした。

指導的な立場になってからは、量子化学スクールや分子シミュレーションスクールなど分子研が提供している教育面でのアクティビティを活用させて頂いています。大学院での教育は対象とする学生層、あるいは他授業との接続性を考えて、授業内容を調整せざるをえない部分がありますが、分子研から提供される教育機会は、大学院講義の水準あるいは研究室でカバーできる領域を超えて提供されるものであり、計算科学を専門とする学生にとってとても有益です。また、学生から新たなソフトウェアを試してみたいという声が上がった時は、まずは分子研の計算機センターで試してみるようにアドバイスしています。それが可能であるソフトウェアライブラリーは世界的に見渡しても極めて秀逸な水準にあり、しかも無償で利用できることは研究者あるいは教育者として非常にありがたい存在です。こちらも分子研のおかげで学生の高い研修が実現しています。

このように振り返ってみますと、私は学生時代から現在に至るまで分子研の研究者、大型計算機、教育イベントから有形、無形の力添えを得て計算科学者、研究室主宰者としての研究者人生を歩ませて頂き、まさに大学共同利用機関としての分子研の機能を活用させて頂いたことがよく分かりました。

そして、現在は、附置研究所に生業を得て、文部科学省が認定する共同利用・共同研究拠点の運営にも携わっています。大学共同利用機関である分子研とは提供するサービスの規模と水準はかなり違いますが、「大学の枠を越えて全国の当該分野の研究者の共同利用に供する」という目的には共通する部分があります。私が所属する北海道大学触媒科学研究所では昨年度までは触媒科学研究拠点として、今年度からは触媒科学計測共同研究拠点として共同利用・共同研究拠点事業に参画しています。触媒拠点では、共同研究を通して触媒研究に関する知識、情報、技術を提供し、研究者コミュニティの研究に寄与すること、国内外の研究者の招へいやシンポジウムの開催を通して国内外の研究者交流を促し頭脳循環に寄与すること、海外の主要研究拠点において国際シンポジウムを開催し、国内における優れた研究成果を情報発信することなどの活動を実施しており、触媒学会をはじめとする研究者コミュニティに寄り添った拠点活動が特徴です。

ところで、拠点活動の主担当としての責任は、予想をはるかに超えていました。第三期中期計画期間から、拠点の評価が絶対評価から相対評価に変わったためです。すなわち、前回の評価でA評価を受け、同様の水準で拠点活動を実施したとしても、油断すれば次の評価ではB評価になりうるということです。従って、ある一定数の拠点がB評価やC評価を受けることになります。拠点の評価が落ちれば、評価結果が学内で独り歩きして、研究所のアクティビティが低落したものと誤解を

受けかねません。当然ながら、担当者は必死になります。「過剰なサービスは不要である。日々の研究に励みなさい。」という拠点評価コメントを夢で見たことがあります。

それにしても附置研究所や大学共同利用機関における研究者は、研究が最大のミッションであることは論を待たないでしょう。拠点活動に研究者が疲弊するようでは本末転倒です。拠点となる研究機関に優れた研究成果があがってこそ共同研究への動機と駆動力になり、拠点事業を成功させる原点になるものと思います。そのような研究活動への高揚感、研究者の魅力、研究成果を発信する研究機関のキラキラ感は、次代を担う学生や若手研究者が研究者を志す動機へとつながらないでしょうか。私が研究者としての進路を歩んできた背景には、出身研究室はもちろんですが、分子研や近隣の研究者の影響が大きかったと振り返っています。勝算があったわけでもない向こう見ずなだけだった若輩を夢中にし続ける魅力があったということでしょうか。

計算科学研究センターの大型計算機の更新には、毎回、関係者の方々の甚大な労力を伴っていると伺っています。末尾ながら、関係各位のご尽力に思いをはせ、心から感謝申し上げます。年度が明けて、管理業務の電子メールの数は減衰し、研究者としての時間と感情が少しずつ回復してきました。次は、どのような計算機が入るのかなというトキメキを感じ、ユーザの一人として楽しみにしております。



渡辺 芳人 所長就任 分子研の皆さん、お久しぶり

(分子研レターズ編集委員会からご挨拶をお願いしました)

2022年4月、およそ20年ぶりに分子研の一員として岡崎に舞い戻ってきました。最初に驚いたのは、研究棟の共通スペースに洗練されたテーブルや椅子が配置され、ちょっとした癒やし空間が提供されている事です。見た瞬間、大塚元所長の仕業だと分かりました。また、建物内のあちこちがオープンスペースに改装され、仕事や研究のスタイルがかなり変化している事を予感させてくれました。一人で小部屋に籠もってコツコツと実験をするスタイルから、色んな人たちとアイデアを議論し、お互いに刺激し合いながら新しいものを作り上げていくための仕掛けなんだと思います。

分子研の多くの研究グループは少人数で構成されており、様々な研究課題をグループ内で同時進行的に推進する事は難しい環境となっています。従って、共同研究推進は必須となりますね。その際、同じ問題意識、あるいは同じような研究課題を共有する研究者との相補的な関係の共同研究は、無理のない、オーソドックスな組み合わせでしょう。それは、それで良いと思います。一方で、このタイプの共同研究では、「誰も思いつかないような研究」のアイデアや具体的な提案が出てくる素地は少ないと思います。

来年度の概算要求に向けて、生理研では「磁気共鳴生体・分子計測コア

(仮称)」というプランを検討しています(執筆時点)。例えば、MRIによる小動物の脳内イメージングによる認知の素過程解明などが興味の一つだと思います。しかし、生理研の方々はMRIのユーザーではありますが、測定装置のプロブ、そして測定対象(多くの場合プロトン)の感度を向上させる化学プロブの開発まで行うという発想は(多分)ないでしょう。スピンの緩和時間を短くするための常磁性物質を開発するには、 ^{19}F でターゲット分子を標識するなど他のアイディアを含めて合成グループの経験が不可欠であり、磁性の研究グループの知恵も必要になります。そして、EPRやSQUID測定等、分子研研究者の出番です。

さて、主役のNMRですが、生体膜中にトラップされた蛋白質や情報伝達分子など全体として難溶性サンプルの構造情報を求めて、固体NMR測定をおこなった経験者は、生理研の中にはほとんどいらっしゃらないでしょう。あるいは、細胞全部をNMRで測定し、その中で研究対象となっている蛋白質や機能性分子の構造をin-cell NMRという測定手法で決定する事もそう簡単ではないでしょう。一方で、分子研のPIの皆さんの知恵と技術を集めれば、この部分の研究は分子研が受け持つ事が可能だと思われます。そこに、蛋白質構造やイオンチャネルなどの理論研究をしているグループが加われば、議論・考察はさらに深まり、新たな研究課題が見えてくるかも知れませんね。いや

いやどうして、分光系の皆さんが、細胞内の膜蛋白質の揺らぎや周辺環境の差異による機能発現の違いを見つけ出すかも知れません。

そうです。生理研の「磁気共鳴生体イメージングコア(仮称)」は、分子研が共同研究のパートナーに相応しい研究課題なんです。

皆さん、如何ですか。この議論、単に夢想だと思いませんか、それとも、ちょっと中身が気になる代物ですか。ご自分のストライクゾーンの研究はどんどん推し進めて頂くとして、ちょっと軸足を生き物に移した研究に参画出来るような気がしませんか。

こうしたブレインストーミングからWPIなどの提案は生まれてくるんだと僕は思います。

わたなべ・よしひと

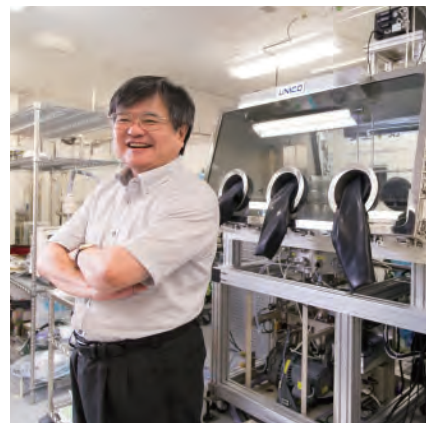
1976年 東北大学 理学部化学科 卒業
1982年 筑波大学化学研究科 博士課程 修了
1982年 米国ミシガン大学化学科 博士研究員
1984年 米国ミシガン大学化学科 上級研究員
1985年 米国プリンストン大学化学科 主任研究員
1987年 慶應大学医学部 助手
1989年 通産省工業技術院化学技術研究所 主任研究員
1990年 京都大学工学部 助教授
1994年 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所 教授
2002年 名古屋大学大学院理学研究科 教授
2006年 名古屋大学物質科学国際研究センター 教授
2009年 名古屋大学研究・国際 企画関係担当 副総長
2012年 名古屋大学国際・広報・社会連携関係 担当理事・副総長(併任)
2019年 名古屋大学審議役
2020年 国立大学法人総合研究大学院大学理事
2022年 現職

新しいフェーズに入った有機太陽電池

平本 昌宏 物質分子科学研究領域 教授

ひらもと・まさひろ

1958年広島生まれ。1984年大阪大学大学院基礎工学研究科化学系博士課程中退。1984年分子科学研究所文部技官。1988年大阪大学工学部助手、1997年准教授を経て、2008年より現職。専門は有機半導体の光電物性と太陽電池、デバイス応用。



1. 背景と動機

エネルギー問題の解決は科学者の責務です。特に、我が国において、エネルギー資源がない状況は、明治維新から現在に至るまで全く変わっておらず、先の大戦のような、悲劇的で大きな歴史の転換は、常にエネルギーをめぐる起こっています。以上の考えから、未来に備えるため、私は、次世代太陽電池の有力候補である、有機太陽電池の研究を行ってきました。

有機太陽電池は、テレビやスマホのディスプレイとして世の中に出ている有機ELの太陽電池版です。有機太陽電池は、軽量なフレキシブルシートで、印刷によって大量安価に作れ、屋根、壁、窓にはりつけたり、自動車にペンキのように塗って使うなど、これまでのシリコン太陽電池とはちがった全く新しい使い方ができます(図1)。

私は、有機太陽電池のブレンド接合(1991年)(図2(a))^[1]とタンデム接合(1990年)^[2]のコンセプトを世界に先がけて提案し、これらの接合によって効率が向上し、現在、社会実装に必要な効率20%近くに達しています^[3,4]。

しかし、ドナー性とアクセプター性の分子をブレンドする方法は、光生

成した電子とホールを取り出すナノスケールのルート形成が難しいという、本質的な問題を初めからはらんでいました(図2(a)のように電子と正孔の行方が阻まれてしまう)。私は、ブレンド接合のコンセプトの発明者として、この問題を根本的に解決する方法を見出さなければならないという、一種の責任感を持ちつづけてきました。

一方、近年、キャリア再結合の抑止が、有機太陽電池の性能を決める鍵としてクローズアップされてきました。また、有機半導体が超高速移動度を示すようになり、有機太陽電池のこれまでの原理が刷新される可能性も生じてきました。ここでは、これらに関係した最近の成果と今後の展望を述べたいと思います。

2. 水平接合

電子とホールを、基板に対して水平方向に取り出す「水平接合」(図2(b))という新しいコンセプトによって、ブレンド接合を超える方法を示しました。この場合、ホールと電子を、ミリメートルスケールのマクロな水平距離で輸送する

必要がありますが、 π スタッキングの連なる水平方向に対して、超高速移動度を示す有機半導体を用いることで、これが可能になりました。

具体的には、高速移動度を示す、C8-BTBT(ホール移動度: $43 \text{ cm}^2/\text{Vs}$)^[5]とPTCDI-C8(電子移動度: $1.7 \text{ cm}^2/\text{Vs}$)^[6](図2(b))を積層したセルを作製し、水平距離0.14 mmで、わずか5分子層(厚さ10 nm)から成る水平交互接合(図2(c)(d))^[7]、および、1.8 cmという従来の常識では不可能な長さの水平セル(図2(e))^[8]の太陽電池動作に成功しました。可能な水平距離はトラップ誘起再結合(次節)によって決まります。

水平接合セルでは、水平方向に光電



図1 半透明な有機太陽電池を窓に設置したビル。

流を取り出すため、垂直方向の膜厚を限りなく厚くでき、多様な吸収波長域を持つ有機半導体の積層することで、太陽光スペクトル全体をフル活用して、本質的な効率向上が望めます^[9]。

3. キャリア再結合

3.1. アップコンバージョン

アップコンバージョン(UC)は長波長光を短波長光に変換する技術で、太陽電池における赤外光の有効利用や近赤外イメージングに使われます。今回、有機太陽電池の動作機構を利用した、新しい原理のUCを実現しました^[10]。発光層として3重項消滅材料として知られるルブレンドナー(D)、受光層として近赤外光を吸収するノンフラーレンアクセプター(A)を用い、D/A界面をもつ2層膜を作製しました。目に見えない近赤外LED光を、2%程度の量子効率で、目視可能な黄色の高輝度発光に変換するフレキシブル薄膜を実現できました(図3(a))。原理は、まず近赤外光照射によって生じた励起子をD/A界面で電荷分離して、スピン

がランダムな自由キャリアを生成します(有機太陽電池過程)。それらが再結合する時、1重項と3重項の励起子が25%と75%の割合で生成するため、3重項消滅によってルブレン中に生じた、励起1重項状態(S1)からの短波長変換光が観測されます(アップコンバージョン過程)(図3(c))。本原理は、全固体で、有害な重原子による項間交差が不必要という利点を持ちます。

本原理の途中に現れる自由キャリアを、外部電極から注入して有機ELに展開すると、UC過程によって駆動電圧を半分にできます。その結果、乾電池1本分(1.5 V)の世界最小電圧で、高輝度発光できる有機ELを開発できました(図3(b))^[11]。

3.2. 再結合の抑止

太陽電池においては、光電流と光電圧の両方を大きくしていく必要があります。現在、光電流は25 mA/cm²に達し、無機太陽電池のレベルに迫っており、光電圧の増大が今後の効

率向上の鍵を握っています。

図4に、これまでに報告された有機太陽電池の開放端電圧(V_{oc})と、ドナーとアクセプター分子のCT(電荷移動)状態のエネルギー(バンドギャップと考えて良い)の関係を示します^[12]。私たちは、超高速移動度を示すC8-BTBTとPTCDI-C8(図2(b))を積層したセルが、太陽電池の熱力学的限界値(ショックレー・クエーサー(SQ)限界)(実線)に達する V_{oc} を示すことを見出しました(図4、赤2重丸)^[13]。これまでの有機太陽電池の V_{oc} (全てのクロス)は、すべてSQ限界より0.5 V以上小さく、これは分子振動にエネルギーが散逸する無輻射再結合によるロスです。今回の有機半導体は長鎖アルキルを有し、ファスナー効果によって分子振動が抑制されて高速移動度を示しますが、同時に、分子振動による無輻射再結合も抑制されて光電圧が増大したと言えます。

輻射再結合(発光)と無輻射再結合(熱失活)は競合していることから、高性能EL用のよく光る分子は、無輻

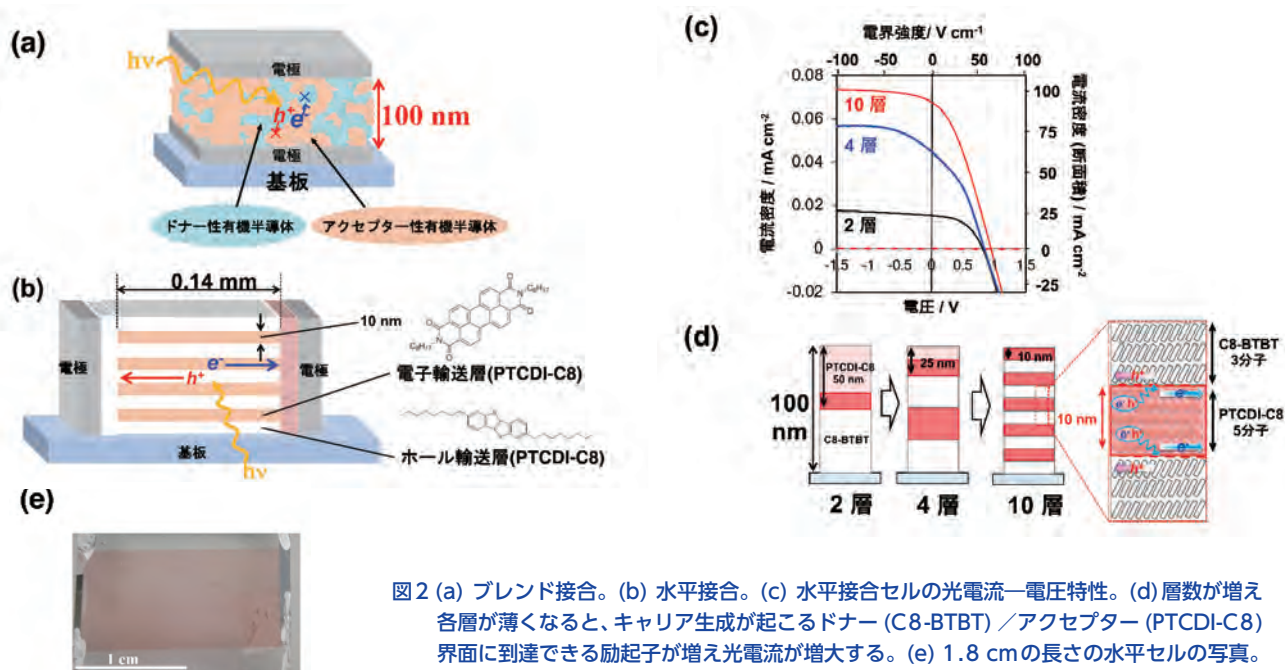


図2 (a) ブレンド接合。(b) 水平接合。(c) 水平接合セルの光電流-電圧特性。(d) 層数が増え各層が薄くなると、キャリア生成が起こるドナー(C8-BTBT)/アクセプター(PTCDI-C8)界面に到達できる励起子が増え光電流が増大する。(e) 1.8 cmの長さの水平セルの写真。

射再結合が少ない、すなわち、太陽電池としても高性能である、ということになります。「高性能太陽電池は高性能ELとなる」は真理と言えます。

無機太陽電池の歴史は、再結合によるキャリア消失との戦いと言っても過言ではありません。有機太陽電池も、ようやくそのレベルに到達し、再結合を抑止することが今後の課題となります。無輻射再結合は、分子内だけでなく、 π スタッキングを形成する、分子間の振動への失活によっても起こります。これらの、分子を単位とする分子固体に特有な再結合の抑止には、これまでにない解決方法が必要です。振動スペクトルは、分子科学者にとって身近なものです、それが今後の有機太陽電池の性能に直結してくることにある種の感動を覚えます。

さらに、分子欠陥などに由来する、

キャリアのトラップを介したトラップ誘起再結合^[14]も再結合の大きな原因です。無機半導体の欠陥は、ダングリングボンド（未結合手）が主な由来です。しかし、有機半導体は、分子の集合体で個々の分子の結合はクローズしており、分子間に結合がないため、ダングリングボンドは無く、分子固体におけるトラップ性分子欠陥の本性は不明なままです。分子空孔、分子間分子等が可能性として考えられますが^[15]、このような分野は、全く未開であることを強調したいと思います。

4. キャリア生成

超高速移動度を示す有機半導体は、キャリア生成においてもこれまでにない性能を示します。私たちは、バンド伝導性のルブレ単結晶表面上に、ルブレを低速蒸着 (3×10^{-3} nm/s)

することでホモエピ成長させ、同時に、開口率1000分の1の回転板を用いた 10^{-9} nm/s に達

する超低速蒸着技術（図5(a)）によって、1 ppmまでアクセプターを極微量ドーピングし、Hall効果測定によって、ドーピングルブレ単結晶の自由ホール濃度を直接観測することに成功しました^[16]。ルブレ単結晶は、非常に大きいドーピング効率（ドーパント100個に対して生成する自由キャリアの個数）（表1）を示しました。無機アクセプタードーパント (MoO_3O_9) の場合、室温でのドーピング効率37%が観測されました。これは、アクセプター準位から51 meVの活性化エネルギーで自由なホールが価電子帯に生成していることを意味しています。また、マイナスイオン化したアクセプター分子の周りを、非局在化半径4 nmでホールが周囲していることに相当し、室温でも解離するワニエ励起子的であることが分かります（図5(b)）^[4,15]。有機アクセプター (F4-TCNQ) においても活性化エネルギー9 meVが観測され、シリコン (Si) 中のホウ素 (B) の45 meVよりも小さく、シリコンを上回る能力です（表1）^[17]。従来のホッピング伝導蒸着薄膜へのドーピング効率は数%と小さいので、バンド伝導単

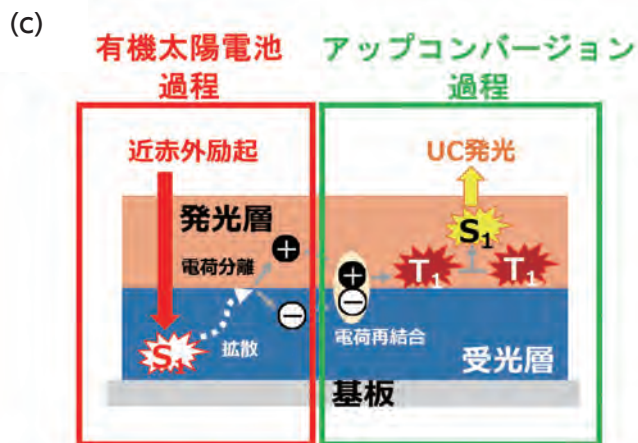
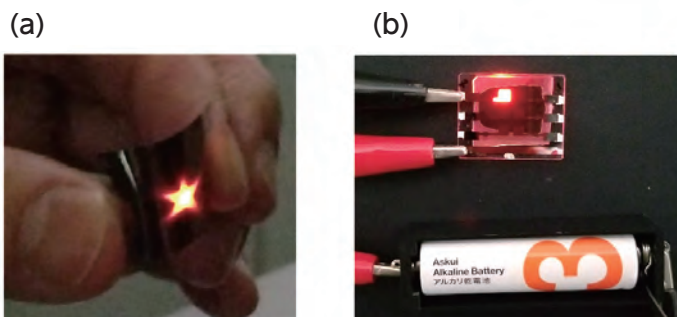


図3 (a) 近赤外光をアップコンバージョンして可視化。(b) 乾電池1本で駆動できる高輝度ELセル。(c) アップコンバージョンの動作原理。

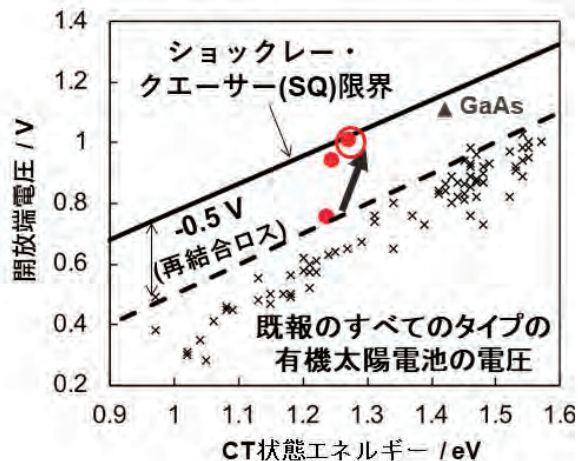


図4 開放端電圧とCT状態エネルギーとの関係。

結晶では、ドーパントのマイナス電荷の周りのホール軌道が非局在化している可能性を考えています (図5 (b))。将来的には、電子、ホール双方を非局在化させることで (図5 (c))、光によるキャリア生成においても励起子フリーな光電流発生が実現できるかもしれません。

5. 分子科学者の夢

分子科学者は、分子を使って太陽エネルギーを変換する夢を諦めることがないと思います。この夢が、有機太陽電池の息の長い効率向上の推進力になっており、時間がかかっても社会実装されると思います。また、未開拓の新しい学問領域が多く射程に入ってきており、私自身が挑戦したかったのですが、若い科学者にさらに前に進んでいただくことを期待しております。在任最終年度に、本稿をまとめる機会を与えていただき、感謝しております。

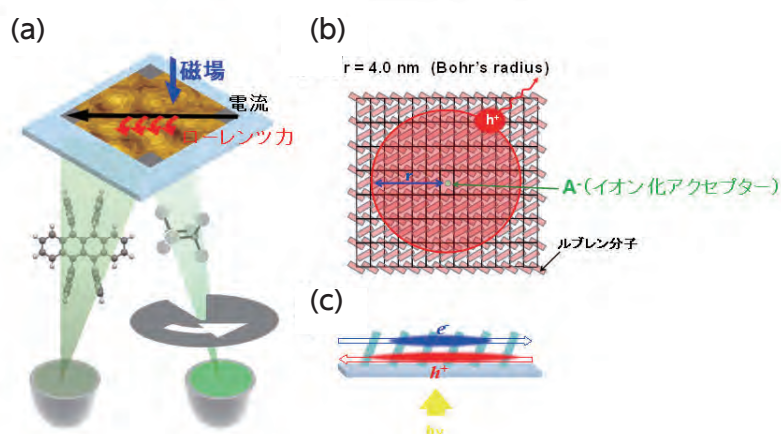


図5 (a)回転円板シャッターを用いた超低温蒸着によるドーピングルブレ単結晶の作製とHall効果測定。(b)ホールが非局在化してワニ型励起子を形成し、シリコンに匹敵するドーピング効率が得られる。(c)ホール、電子両方を非局在化させることで、励起子フリーな光電流発生が実現する可能性がある。

アクセプター	ドーピング効率/%	活性化エネルギー/meV
Fe_2Cl_6	8	144
Mo_3O_9	37	51
F4-TCNQ	82	9
B in Si		45

表1 ルブレ単結晶へ10 ppmドーピングしたアクセプターのドーピング効率と活性化エネルギー。

参考文献

- [1] M. Hiramoto et al., *Appl. Phys. Lett.*, **58**, 1062 (1991).
- [2] M. Hiramoto et al., *Chem. Lett.*, 327 (1990).
- [3] L. Meng et al., *Science*, **361** 1094 (2018).
- [4] "Organic Solar Cells – Energetic and Nanostructural Design", A Book, Eds: M. Hiramoto, S. Izawa, Springer Nature Singapore Pte Ltd. (2021).
- [5] K. Takimiya et al., *Adv. Mater.*, **23**, 4347 (2011).
- [6] R. J. Chesterfield et al., *J. Phys. Chem. B*, **108**, 19281 (2004).
- [7] M. Kikuchi, S. Izawa, M. Hiramoto et al., *ACS Appl. Energy Mater.*, **2**, 2087 (2019).
- [8] Jaseela P. I., S. Izawa, M. Hiramoto et al., *Appl. Phys. Exp.*, **14**, 094001 (2021).
- [9] Jaseela P. I., S. Izawa, M. Hiramoto et al., *Appl. Phys. Exp.*, **14**, 101003 (2021).
- [10] S. Izawa, M. Hiramoto, *Nat. Photonics*, **15**, 895 (2021).
- [11] S. Izawa, M. Morimoto, S. Naka, M. Hiramoto, *Adv. Optical Mater.*, 2101710 (2022).
- [12] J. Benduhn, K. Vandewal et al., *Nat. Energy*, **2**, 17053 (2017).
- [13] S. Izawa, N. Shintaku, M. Kikuchi, M. Hiramoto, *Appl. Phys. Lett.*, **115**, 153301 (2019).
- [14] N. Shintaku, M. Hiramoto, S. Izawa, *Org. Electron.*, **55**, 69 (2018).
- [15] M. Hiramoto, M. Kikuchi, S. Izawa, *Adv. Mater.*, **30**, 1801236 (2018) (Invited Progress Report).
- [16] C. Ohashi, S. Izawa, M. Hiramoto et al., *Adv. Mater.*, **29**, 1605619 (2017).
- [17] 平本、第68回春季応用物理学会17p-Z23-2 (2021).

各種賞のご紹介

アジアで初めて米国化学会「歴史的化学論文大賞
(Citation for Chemical Breakthrough Awards)」を受賞

2001年にノーベル化学賞を受賞した野依良治 東海国立大学機構名古屋大学特別教授らの不斉触媒反応に関する論文（研究機関は東海国立大学機構名古屋大学、自然科学研究機構 分子科学研究所、高砂香料工業株式会社）

が、2021年米国化学会「歴史的化学論文大賞」に選出されました。この賞は、18世紀の後半から今日に至る自然科学研究における膨大な数の論文の中から、人類の発展に著しく貢献した歴史的な化学論文が選定され、その研

究が行われた研究機関を顕彰するもので、米国化学会が2006年に設立した極めて特色ある賞です。

同顕彰の中で、アジアの研究機関が受賞対象となるのは今回が初めてのことです。

受賞35年前を振り返って 北村 雅人 名古屋大学名誉教授

1987年9月1日に発表された「 β ケトエステルの触媒的不斉水素化」に関する野依先生の論文が、米国化学会「歴史的化学論文大賞」にアジアで初めて選出され、光学異性の発見やワクチンの開発で知られるパストールや DNAの二重らせん構造を発見したワトソン・クリックと肩を並べたとのこと、とても嬉しく思います。

この研究は、当時から不斉水素化触媒として知られていたBINAP-Ruジアセタト錯体を開発された分子研の故高谷秀正先生、共同研究先の高砂香料（株）、そして野依研の本拠地名古屋大学理学部との密接連携のもと実施されました。私は名古屋大学農学部の後藤藤俊夫先生の研究室で全合成に携わり、縁があって野依研の助手に採用していただきました。金属錯体の合成経験は全くなく、分子研に足繁く通い、高谷先生や助手の方々に基礎の基礎から錯体合成技術を教えていただきました。彼らの教えに従い様々なBINAP遷移金属錯体を合成し、オレフィンやケトンの不斉水素化を黙々とスクリーニングしていました。高谷錯体はオレフィンの不斉水素化に有効でしたが、残念なことにケトンには不向きでした。反応性・選択性が出ない状況下、粘り強く様々な酸、塩基、塩などを加えて試していたところ、1986年12月に、ケトンに強い酸を加えてやると高谷錯体の反応性が著しく向上し、ほぼ鏡像的に純粋なアルコールが得られることを見出しました。感動の一瞬です。この翌年の春に、大熊毅君（現北海道大学教授）が博士後期課程の学生としてやってきて、私のグループに入ってくれました。彼の実験量は莫大で、瞬く間に、一般性の調査や反応条件の最適化を実施し、半年後に米国化学会誌に投稿しすぐに受理され発表されました。電子投稿のない当時としては、極めて短期間で発表に至ったと思います。野依先生49歳、大熊君25歳、私31歳の元気一杯の研究室でした。大熊君と屋台のラーメンで腹ごしらえして、研究室泊まり込みで実験し続けていた頃が今のこのように思いだされます。光陰矢の如しです。日本国の化学が益々、発展することを心より祈っています。



米国化学会「歴史的化学論文大賞」の楯。
分子科学研究所の玄関に掛けています。

日本化学会「長倉三郎賞」

科学技術振興機構（JST）理事長 橋本 和仁

令和3（2021）年度、公益社団法人日本化学会に新たに「長倉三郎賞」が設立されました。本賞は令和2（2020）年4月に逝去された元分子科学研究所長で名誉教授の長倉三郎先生のご

遺志により、ご遺族から日本化学会になされた4億円を超える多額のご寄付をもとに設立されたものです。令和4（2022）年4月には第1回受賞者である北海道大学大学院の前田理教授に対

し、正賞として長倉先生の肖像レリーフ（写真）が入った表彰盾、および副賞として1,000万円が授与されました。今後、日本化学会では毎年1名以内の受賞者を選定し、本賞を授与していく

ことを発表しています。

長倉先生は、まだ「分子科学」という言葉が世の中で使われていなかったころから化学と物理学との境界領域において、「分子」に着目した新たな学問分野を創設することを模索されていました。そして先生は赤松秀雄先生、ならびに井口洋夫先生らとともに約15年間にわたって同志たちの先頭に立ち、分子科学研究所設立のために奔走されたのです。また、分子科学研究所の設立後はそれまでわが国にはなかったレベルにて、国内外に開かれるとともに高い流動性を持った研究所を目指され、人事における完全公募制や助手の任期制の導入、また助手・助教授の内部昇格の禁止など、現在まで継承されているさまざまな制度の確立を主導されました。

長倉先生を知る人は、異口同音に先生のことを、「怖い、厳しい先生だっ

た」と表現されます。筆者も先生の怖い姿を何度も目にしており、現在でも先生のことが頭に浮かぶと背筋が伸びる思いがします。ディスカッションの際、詰めの甘いことを口にすると「激しい雷」が落ちました。また、時流に流された研究を嫌い、常に独創性を求められていました。先生は他人だけでなく、ご自身をも極めて厳しく律しておられ、まさに「古武士」という表現が当てはまる方でした。そして、次世代を担う若手へのご期待には並々ならぬものがありました。

長倉先生と直接お話しする機会を持ったことのある研究者は少なくなりつつあります。長倉先生はこよなく分子科学研究所を愛し、そして分子科学の将来の発展を願っておられました。分子科学に関わりをお持ちの皆さまには、ぜひとも先生の思いを心に期し、そして後世にも伝えていただきたいと



思います。「長倉三郎賞」が、わが国の若手化学者の目標の一つとなり、先生が望まれていた独創性のある研究が次々と生まれてくる一助となることを期待してやみません。併せて筆者は門弟の一人として、長倉三郎先生のお名前が長く後世まで伝えられていくことを心より願っております。

分子科学研究所所長招聘会議「日本の人材育成を考える」

例年5月下旬から6月上旬の時期に、分子科学研究所所長招聘会議を、日本学術会議化学委員会・化学企画分科会、日本化学会と協力して行っています。過去2年は、COVID-19感染拡大の影響のため、全面オンラインで開催されてきましたが、今年度は、対面とオンラインのハイブリッド方式で初めて開催されました。2022年6月7日午後、分子研研究棟201号室をメイン会場として行い、「日本の人材育成を考える」をテーマとしました。一昨年度には「光り輝く博士課程卒業生」、昨年度は「広がる化学系博士人材の未来」をテーマとしており、その流れで再度、我が国

における、特に化学系における博士課程人材の育成について議論を深めようと企画されたものです。

日本の科学技術の低下を防ぐためにも優秀な博士人材の確保は喫緊の課題となっていますが、今まで経済的な支援を含む様々な施策がなされてきたにも関わらず、諸外国の傾向に反して、日本では博士課程の進学率は上がっていない現実があります。博士人材の層を厚くするためには何が必要なのか。これまでの博士課程学生支援を総括するとともに、欧米



との博士人材育成の違い、企業における博士人材の役割、日本特有の就職システムなどをトピックとし、それぞれに経験のある講演者を招聘して、どこに問題があるのかを議論するプログラムが組まれました。

つい最近帰国した若手研究者からの欧州と日本での博士に対する認識の差に関する話題提供は大変興味深く、また企業の研究者からは、現在、少なくとも化学系企業では、如何に博士人材が求められているかが実感を持って語られました。一方で、大学で先端的な研究を推進している現場からは、現在の新卒の就職活動

の状況を大きく変える必要があるという認識が述べられ、早急なアクションの必要性を感じさせるものでした。

今回は初めて対面とオンラインのハイブリッド開催となりました。講演者等関係者と、所内の参加者以外は、数名を除き殆どがオンラインでの参加でしたが、総参加者は約130名で、昨年

同様、広い職域・地域・年齢層からの参加があり、活発な議論が行われました。ハイブリッド開催特有の技術的な問題点も明らかになりましたが、今後解決できればと思います。この形式は、来年度以降も採用する価値はあるだろうと感じています。

(岡本 裕巳 記)

事業報告

文科省マテリアル先端リサーチインフラ事業

報告：物質分子科学研究領域 横山 利彦

SOCIETY5.0やSDGsの実現、希少資源代替・循環技術の革新による資源の海外依存を解消するため、今世紀において我が国は調和のとれた科学技術革新を一層推進する必要があります。革新的な新機能物質材料を創製し早期の社会実装を達成しなければなりません。我が国の科学研究力を研究論文数の視点で見ると、2000年代前半をピークに横ばいとなっており、これは大学院生をはじめとする研究者人口の減少が一要因でしょう。このような現況において、2021年度から文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ(Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology in Japan, ARIM)事業が始動しました。最先端装置の共用、高度専門技術者による技術支援に加え、新たにリモート・自動化・ハイスループット対応型の先端設備を導入し、装置利用に伴い創出されるマテリアルデータを、利活用しやすいよう構造化した上で提供することが目的です。この事業は物質・材料研究機構(NIMS)をセンター拠点として、全国25の大学・研究機関がそれぞれに重要技術領域を担います。各領域

に強みを持つ先端設備群を提供するハブ機関と、特徴的な装置・技術を持つスポーク機関からなるハブ&スポーク体制を形成し、利用者の方々の研究開発のパートナーとして貢献します。本事業は、2012年度から10年にわたり実施してきたナノテクノロジープラットフォームにより培ってきた技術基盤を十分に活かしつつ、データ収集・利活用という新しい視点を加え、これからの10年、新しい取組みに挑んでいくものです。

分子科学研究所は7つの重要技術領域のうち「マテリアルの高度循環のための技術」領域のスポーク機関となり、ハブのNIMS、スポークの名古屋工業大学、電気通信大学とともに、マテリアル高度循環を主な支援対象としながら、共用促進・マテリアルデータ創出を担っていくことになりました。ハブ・スポーク機関が有する種々の先端機器の共用を通じて、代替材料や再生材料由来の物質合成、材料削減に資する触媒

反応の可視化などマテリアル循環に関わる支援をするとともに、創出されたデータを効率よく収集・蓄積・構造化し、その利活用を図ることで、持続可能なマテリアルのデータ駆動型研究開発に貢献します。これまで構築してきた基盤研究インフラ(最先端機器共用と高度専門技術支援)とものづくり支援の経験を活かし、分子科学研究所機器センター等の先端機器共用を継続的に実施し、計算科学研究センターとの連携を通して機器共用から創出されたマテリアルデータを収集し利活用を行います。



触媒・電池元素戦略プロジェクト

報告：計算科学研究センター 江原 正博

近年、エネルギー・資源問題や国家エネルギー安全保障などへの対応が求められ、その科学技術面からの重要な対策の一つに元素戦略があります。現代社会に不可欠な自動車触媒や二次電池において、白金族元素やリチウムが用いられていますが、白金族元素は産出量が少なく、年間使用量は産出量を上回っています。また、リチウムは地球上の存在分布が偏るという地政学的なリスクがあり、存在量も電気自動車を中心となる時代には枯渇することが予測されます。したがって、白金族元素やリチウム使用の低減化はわが国のエネルギー・資源問題解決のみならず、地球規模での資源問題、エネルギー問題を解決し、持続的社會を実現するために、極めて重要な課題と言えます。

このような社会情勢の中、文部科学省による元素戦略プロジェクト＜研究拠点形成型＞が2012年度～2021年度の10年間にわたり実施されました。元素戦略プロジェクトは、磁石材料、触媒・電池材料、電子材料、構造材料の4領域から構成され、触媒・電池材料領域は京都大学に研究拠点を置いて推進されました。本プロジェクトの特色は、各領域が材料創製グループ、解析評価グループ、電子論グループの3

グループで構成され、特に電子論グループが理論計算によって全体の研究活動を先導することが期待されていたことです。触媒・電池材料領域での電子論グループの活動は、分子科学研究所が連携機関として参画して中心的な役割を担いました。触媒・電池材料に関わる様々な元素戦略研究が行われましたが、プロジェクトの中心課題は、貴金属の使用を低減した高性能な自動車排ガス浄化触媒およびナトリウムイオン電池の開発となりました。代表的な自動車触媒材料の研究結果としては、貴金属低減触媒であるRhナノシートやSr-Ti系酸素貯蔵材料、また、貴金属フリー触媒であるタンデム型触媒の開発があります。今後、自動車業界では電動化が急速に進むと考えられますが、一方で低温活性に優れた排ガス浄化触媒が重要となり、これらの触媒開発の進展と社会実装が期待されます。一方、ナトリウムイオン電池材料としては、高電圧を示す鉄系ナトリウムイオン電池正極材料、高濃度電解液、高容量の黒リン負極材料などが開発されました。これらはナトリウムイオン電池を構成する材料としての実用化が期待されます。

本プロジェクトの特色であった理論

計算先導による研究推進の重要な成果としては、これまで実験と理論の交流が少なかった触媒・電池の材料開発分野に共同研究が進展したことです。触媒・電池材料は複雑系であり、プロジェクト開始当初は理論的手法が必ずしも確立していませんでした。電子論グループでは、これらの複雑系を研究するための理論開発から開始し、実験と協力して具体的な研究課題に取り組んできました。その結果、これらの複雑系の理論研究が飛躍的に進展し、触媒・電池の研究分野に物理化学に基づく新しい学理や開発指針が得られました。プロジェクトの完了時期には、実験・理論の共同研究・共同開発が日常的に実施されるようになりました。今後、実験・理論の協働によって、これらの研究分野が益々発展することを期待しています。



瀬川泰知准教授に Chemist Award BCA および Thieme Chemistry Journals Award

湊 丈俊主任研究員に令和3年度(第11回) RIEC Award 本賞

奥村慎太郎助教に2021年度有機合成化学協会富士フィルム研究企画賞

伊澤誠一郎助教に第11回自然科学研究機構若手研究者賞および第10回エヌエフ基金研究開発奨励賞優秀賞

豊田朋範技術職員に日本化学会化学技術有功賞

瀬川泰知准教授に Chemist Award BCA および Thieme Chemistry Journals Award

このたび、「湾曲した芳香族炭化水素の合成と性質解明」に関する研究成果について、2021年度のChemist Award BCAをいただきました。Chemist Award BCAはMSD生命科学財団が日本の有機合成化学分野における若手研究者を表彰する賞です。授賞式は2021年12月4日に東京で行われ、山本尚先生から記念品を贈呈いただきました。私はこれまで、芳香族炭化水素にひずみをもたせて湾曲させる合成手法の開発と、その方法を用いて合成した様々な湾曲分子の性質解明研究を行ってきました。輪っか状、筒状、結び目状、メビウスの輪など、形がキレイでかっこいいがまだ誰も作ったこ

とがない分子を作りたいという単純な動機で進めてきた研究が、このように評価いただけたことを大変うれしく思います。

また、これら有機合成に関する研究成果について、Thieme Chemistry Journals Awardをいただきました。Thieme Chemistry Journals Awardは、独立した若手研究者にドイツの出版社Thieme Chemistryから贈られる賞です。有機化学の関連分野から新進気鋭の若手研究者をSynthesis, Synlett, Synfactsのeditorが選出します。賞状の中央にはBenjamin List先生(2021年ノーベル化学賞)のサインがあります。公式な授賞式はあり

ありませんでしたが、Synlett, Synfactsのeditorである魚住先生と記念写真を撮っていただき受賞の実感が湧きました。

最後に、ともに研究を進めてきた学生・研究員のみなさん、伊丹健一郎先生、共同研究していただいたたくさんの先生方に感謝いたします。また一連の研究において合成経路の妥当性や分子の構造・性質予測のために計算科学は必須であり、そのほとんど全てを計算科学研究センターの共同利用によって円滑に行うことができました。この場を借りて御礼申し上げます。

(瀬川 泰知 記)



(左) Chemist Award BCA授賞式。

(右) Thieme Chemistry Journals Award。

湊 丈俊主任研究員に令和3年度(第11回) RIEC Award本賞

令和4年(西暦2022年)2月17日に、RIEC Awardの授賞式がオンラインで行われ、一般財団法人電気通信工学振興会の中尾光之理事長、東北大学電気通信研究所所長兼RIEC Award受賞委員会委員長の塩入諭教授から、「移動用電源となる蓄電池の電極/電解液界面制御による設計指針開発」の業績に対して、令和3年度(第11回) RIEC Award本賞の賞状などを授与して頂きました。RIEC Awardは東北大学 電気通信研究所 (Research Institute of Electrical Communication (RIEC)) が、財団法人電気通信工学振興会のもとに創設した賞となります。電気情報通信分野の学術研究の発展に顕著な貢献があり、将来にわたり、当該分野の発展に寄与することが期待される優秀な若手研究者を顕彰することで、当該分野の発展を図ることを目的としております。

近年、エネルギー技術への興味は高まっておりますが、移動用電源となる蓄電池は、より重要性が注目され、更なる性能向上が強く求められております。今回の受賞は、蓄電池の電極と電解液の接する場である界面における物性や反応機構を、走査プローブ顕微鏡

などの新しい測定手法を用いて解明し、その結果を用いて蓄電池の性能を向上させる新しい法則を構築した成果が評価されました。受賞対象となった成果にはNEDOのRISINGおよびRISING2プロジェクトで行った成果が含まれております。

今回の授賞式は、直前まで東北大学(宮城県仙台市)での開催を予定しておりましたが、COVID-19の蔓延防止の為、最終的にはオンラインでの開催となりました。オンラインでの開催にも

関わらず、東北大内には素晴らしい授賞式会場が設置されました。授賞式で直接賞状を受け取ることは出来ませんでしたが、ディスプレイからでも分かる会場の雰囲気からRIEC Awardの重みを感じることが出来ました。

今回の受賞は、共同研究者の皆様の協力無くしてはあり得ませんでした。関係者の皆様に深く感謝を示したいと思います。今後、更に発展した成果を得るために、分子研から新たな挑戦を続けていきます。(湊 丈俊 記)



図. 2022年2月17日に行われたオンライン授賞式の様子。(左上) 湊丈俊主任研究員、(右上) 東北大学電気通信研究所所長兼RIEC Award受賞委員会委員長の塩入諭教授、(左下) RIEC Award本賞を湊主任研究員と同時に受賞した東北大学多田隼建二郎准教授、(右下) RIEC Award 東北大学学生賞の受賞者である東北大学宮原大輝氏(現在は電気通信大学助教)。※本画像データは東北大学電気通信研究所より提供された。

奥村慎太郎助教に2021年度有機合成化学協会富士フィルム研究企画賞

この度、2021年度有機合成化学協会富士フィルム研究企画賞を受賞いたしました。本研究企画賞は有機合成化学分野における萌芽的な研究企画に対して、有機合成化学協会が主体となって、賛同企業の寄付をもとに、その企業名を冠した助成金が贈られるものです。

本研究企画賞は30-39歳の若手研究者による“優れた研究の芽”に対してなされるのが特徴で、2021年度は全国から21件の研究企画が選ばれております。今回、私は「二酸化炭素による活性化を利用したカルボニル化合物の光触媒的極性転換」と題した研究企画に

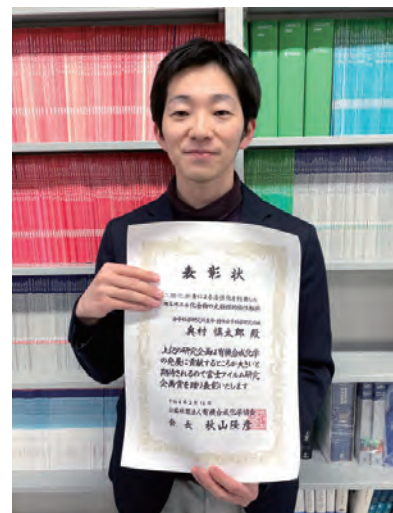
関して、富士フィルム株式会社様から本賞を頂きました。アルデヒドやケトンといったカルボニル化合物は今日の有機分子変換の中心的役割を担っており、その変換反応は創薬、農薬、材料開発や天然物合成など様々な分野で利用されています。カルボニル炭素は求

電子的であるため、その分子変換は主に Grignard 反応や Wittig 反応に代表される求核剤との反応です。一方、私は、求電子的なカルボニル炭素を求核的に変換（極性転換）することができれば、直接は反応しない求電子剤との反応が進行するのではないかと考え、研究を行っています。本研究が発展すれば、カルボニル化合物を求核剤として利用する新たな化学を切り開くことが期待されます。本研究企画では、私たちの最近の研究成果（*Org. Lett.* **2021**, *23*, 7194.）に基づき、光触媒と二酸化炭素を用いた新たなカルボニル炭素の極性転換手法を提案し、現在研究に取

り組んでいます。“優れた研究の芽”として評価していただいた本研究企画を、しっかりと成果にできるよう、今後も研究に邁進したいと思います。

最後になりましたが、本研究企画賞の受賞に際して、日頃ご指導いただいております魚住泰広教授に感謝申し上げます。また本研究の実験を進めてくれている高橋輝気院生、鳥居薫技術支援員をはじめとする魚住グループのメンバーにこの場を借りて感謝いたします。

（奥村 慎太郎 記）



伊澤誠一郎助教に第11回自然科学研究機構若手研究者賞および第10回エヌエフ基金研究開発奨励賞優秀賞

このたび、有機半導体の界面で起こる光エネルギー変換に関する研究で、第11回自然科学研究機構若手研究者賞、また第10回エヌエフ基金研究開発奨励賞優秀賞を受賞しました。

まず自然科学研究機構若手研究者賞に関しまして、ご推薦頂きました川合前所長（現自然科学研究機構長）に深く感謝の意を表します。本賞は機構内の若手研究者に与えられるものですが、授賞式に付随して7月16日に受賞記念講演会が開催されました。この講演会は、高校生から大学院生程度の学生向けに研究をPRするイベントで、自然科学研究機構内の各研究所から受賞者一人ずつ登壇しました。実は講演会に先立って、渡辺芳人所長と国立天文台の渡部潤一教授の前で一度発表練習をする機会も設けて頂いておりました。正直なところ高校生向けのイベントでの講演は初めての機会だったので、先生方のご意見は大変参考になりました。

先生方にはお忙しい中大変ありがとうございました。高校生にも伝わるようにするには、自分の研究をどう噛み砕けばいいかなど、自分の研究をもう一度見つめ直すとてもいい機会になりました。各研究所の先生方の講演はとても面白く、当日はハイブリット開催となりましたが、500人程度がオンラインで視聴し、また配信時には様々なコメントも書き込まれ大変盛況だったようです。このような大変素晴らしい機会を準備して頂きました機構本部の広報の皆様、ありがとうございました。

またエヌエフ基金研究開発奨励賞に関しても受賞者の講演会が開かれ、様々な分野の先生方の話を聞くことができました。本受賞に関しては、もうすぐで実用化ができそうな技術を開発されている先生の話もあり、大変刺激を受けました。

最後になりますが、これまでご指導いただきました上司の平本昌宏教授と、



自然科学研究機構若手研究者賞授賞式にて

本研究の測定にご協力いただきました機器センターの上田正さんに感謝の意を表します。今後もより良い研究成果を上げられるよう頑張ります。

（伊澤 誠一郎 記）

豊田朋範技術職員に日本化学会化学技術有功賞

日本化学会化学技術有功賞といえば、「専門分野に秀でた技術職員が日本化学会から授与される賞で、筆者には無縁」と思っていました。そんな賞が授与されると知った時は、まさに青天の霹靂でした。

受賞業績である「分子科学研究を推進する光誘起力顕微鏡用演算装置の開発および制御システムの構築」は、研究の立ち上げに必要な新規装置の開発や、C棟クリーンルームの風量制御の開発にゼロから携わる機会を得られた幸運があります。なかなか無茶な仕様だったり、導入間もないLoRa(Long Range)無線通信技術をいきなり投入する必要に迫られたり、時に回路CADで頭を捻り、時に実験棟5階の片隅でサンプル相手に悪戦苦闘しましたが、それらも今は懐かしいとさえ思います。

分子研入職以来、四半世紀を優に過ぎて、年齢は新人研究者を上回るよ

うになりましたが、絶え間ない技術の研鑽が必要だと実感しています。そして現場の声を聴き、足を運ぶことも大切にしたいところです。ともすればオンライン万能に陥りがちな昨今、「人とのつながりは足で稼ぐ」ことはオンラインでは難しい、無形の財産だと思います。

今回の受賞は筆者1人の成果ではなく、多くの方々のご理解ご協力があったからこそです。頭でっかちではんだ付けもままならなかった時代から辛抱強く指導いただいた吉田久史氏・元技術班長と内山功一氏。10年来の共同開発で苦楽と研鑽を共にしている岩手大学技術部の千葉寿氏、藤崎聡美氏、古舘守通氏。岩手大学との前例のない共同開発を忍耐強く見守り、支援いただいた山本浩史・装置開発室長、鈴井光一・前技術課長、繁政英治・技術推



進部長。機関を超えた技術職員のチームGo-You.のメンバーであり、筆者のプレゼンを根本から変えた修行美恵氏(九州工業大学)、奥村由香氏(大阪大学)、一條肇氏(東北大学)。同じ建屋で切磋琢磨する装置開発室の皆様。様々な事務手続きでお世話になっている装置開発室の現・前秘書の稲垣いつ子氏と浦野宏子氏、受付の皆様、国際研究協力課の皆様。その他、多くの皆様に「ありがとうございます！」

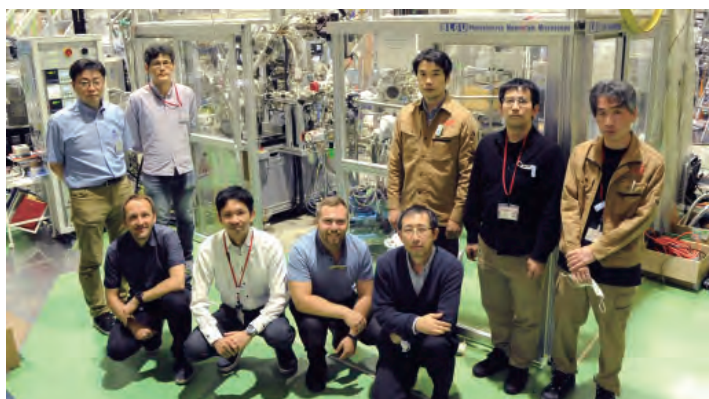
(豊田 朋範 記)

New Lab

研究室紹介

松井 文彦 極端紫外光研究施設 教授

吾唯足るを知らず ——電子スピンを観る装置を創りたい



まつい・ふみひこ

1995年 東京大学理学部化学科卒業

2000年 同大学大学院理学研究科博士後期課程修了、博士（理学）

2000年 奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科助手、07年助教

2011年 チューリッヒ大学物理学科客員研究員

2013年 奈良先端大准教授

2018年 分子科学研究所主任研究員

2021年 分子科学研究所・総合研究大学院大学教授

最前列右が筆者

2018年4月に主任研究員として分子研極端紫外光研究施設に着任し、UVSORの一員に加えていただき、スタッフの皆さんと全く新しい概念の光電子運動量顕微鏡を立ち上げてきました^[1]。この度、研究室を主宰する機会を頂き、21年末に再スタートを切りました。まずは岡崎に来るきっかけを作っていた小杉信博前施設長と菅滋正大阪大学名誉教授、応援し続けていただいた川合眞紀前所長、そして分子研の皆様にお礼申し上げます。

これまでを振り返ると、装置造りの苦労が色々と思い出されます。卒論はAuger電子分光*の制御電源の製作でした。プリアンプの電位変調用の絶縁コイルが入手できず困っていたところ、当時太田俊明教授の研究室の横山利彦講師に「試料に変調をかければ絶縁が不要」とアドバイスをもらい、いざ回路を組んでみるとさっぱりスペクトルが取れません。しばし悩み、原因を特定し、さらにコンデンサーで絶縁コイルを代用することを思いつきました。

秋葉原のガード下に通い、電源を組み上げ、横山さんに報告に行くと、よくぞこの安価な回路で正規品並みのスペクトルを取った、ということで合格点をもらい、無事卒業できました。以後そのような繰り返しでアカデミックに残る自信が形成されていった気がします。

学位取得後、奈良先端大の大門寛先生に助手として採用していただきました。信州の精密加工業者が初めての出張先となりました。表示型分析器、通称大門アナライザーの心臓部分の切削の依頼のため、加工手順の説明用に何枚もスケッチを手描きしたことを思い出します。表示型分析器は試料から飛び出した電子の角度分布を一度にスクリーンに投影するユニークなエネルギー分析器です。原子配列の立体写真撮影やフェルミ面の運動量空間での原子軌道配列の可視化など、この分析器ならではの解析法^[2]の開拓に携わりました。そんな中で自分の創案だといえるのが回折分光法です。例えば磁性

Ni薄膜から飛び出したAuger電子の角度分布には原子構造を反映した回折模様が得られますが、分析を工夫すると回折強度と励起原子の位置とを一対一対応させることができます。そうして原子位置ごとに分離した情報と放射光によるX線吸収分光法とを組み合わせ、原子各層別の磁気構造を可視化しました^[3]。表面の原子軌道と薄膜内部のスピンとのバランスを崩すと磁性の向きがガラッと変わる機構を解明しました。

その後、各所の放射光施設でビームラインの整備や立ち上げに参加しました。その成功も失敗も、みな現在UVSORでの光電子運動量顕微鏡の開発につながっていることを実感します。大門先生の元上司であった菅先生に、UVSORに光電子運動量顕微鏡を導入するにあたり、装置造りの経験者を探している、と誘われました。光電子運動量顕微鏡は表示型分析器に電子顕微鏡を組み合わせたような装置です。このチャンスは誰にも渡せない、と意気込んで岡崎にやってきました。ドイツ語で書かれた特許を読み込

*電子線やX線で内殻準位を励起し生成された内殻空孔を埋める二次過程として放出されるのがAuger（オージェ）電子です。Auger電子分光法は表面の組成や化学状態を調べる手法です。

み、開発者のTuscheさんやSPECS社を足繁く訪ねるところから始まり、無事装置の立ち上げにこぎつけました。これまで取り組んできた表示型分析器との違いは、電子顕微鏡をフル活用することで、表面を顕微 (microscope) 観察し、1 μm 径の領域を選んで3次元運動量 (momentum) 空間の電子状態が計測できる点です。図1は昇進後に測定した第一号の成果です^[4]。グラファイトの電子構造は6回対称だというのが「常識」ですが、顕微機能で局所的に観察すると最表面の積層の終端によって鏡面对称の2つのドメインが存在することがわかります。従来の測定では両方の積算を見ていたのですが、光電子運動量顕微鏡を使うとグラファイトの単原子層ステップの境界が見えてくるのです。

さて、洛西・龍安寺の知足の蹲踞をモチーフとして、物性科学の計測法開拓における着想を具象化 (図2) してみました。深淵な手水鉢には物性の不思議さが湛えられ、笕から注がれるstimulationによって水面が波立っています。蹲踞の四方には禅語「吾唯足を知るuncertainty principle」をなぞるようにエネルギー (平衡) と時間 (遷移)、位置 (局在) と運動量 (遍歴) が対置されています。私の場合、笕 (beamline) から注がれる放射光を駆使し、いかに物性の妙を掬い取るか、柄杓 (detector) に独自性を追求し、手法開発を行ってきました。隣り合う軸を組み合わせれば、顕微分光法 $E \times r$ や回折ダイナミクス法 $t \times k$ など新たなアプローチが生まれます。実際、回折分光法 $E \times k$ を創案する過程でこの図を作りました。この図でブレインストーミングしてみるのも楽しいものです。対角にMomentum $\times$ Microscopeの関係が潜んでいますね。

先に原子層分解の磁気構造の研究に

ついて触れましたが、相転移・相分離におけるせめぎ合いの物理を解き明かすには光電子運動量顕微鏡でスピンの世界を可視化するのが一番です。スピンは電子同士の相互作用を規定する基本物理量の一つで、磁性や超伝導にとどまらず、分子の対掌性や量子情報の分野にも顔を出します。現在、光電子運動量顕微鏡で電子のスピンを実・逆

空間で可視化する仕掛けを構築していますが、これが完成するとスピノ科学のフロンティアが切り拓かれます。五十にして天命を知るはずが、未だ吾唯足るも知りません。良い装置を創り出すと、想定していない応用が果てしなく展開できると信じ、まだまだ突っ走っていきます。この大仕事、乞うご期待。

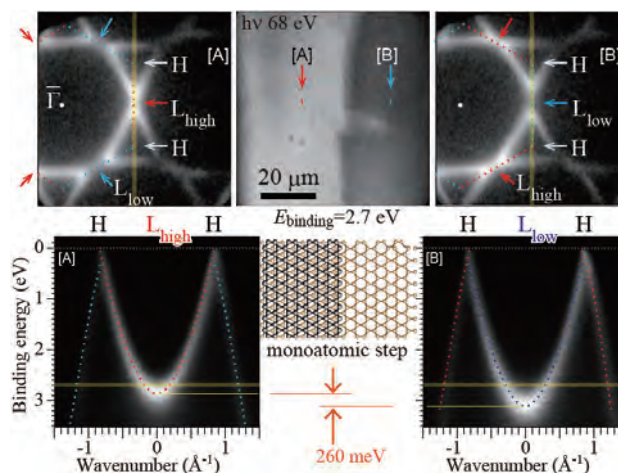


図1 光電子運動量顕微鏡で観たグラファイト表面の電子状態と顕微像。価電子帯の等エネルギー断面 (上段左右) は表面垂直軸Γ点を中心に3回対称となる。領域[A]と[B]とはHLHの価電子帯分散 (下段左右) で底のエネルギーの異なる放物線状バンドが現れる。L点2.7 eVでの顕微像 (上段中) では両者にコントラストが生じ単原子層ステップを可視化できる。この対称性の破れからグラファイトを劈開するエネルギーを算出できる。

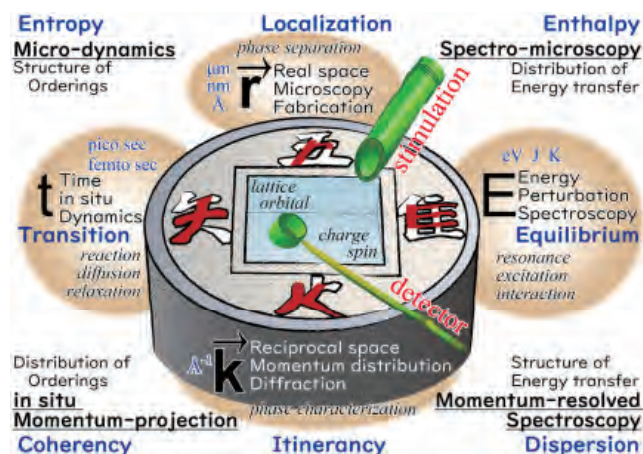


図2 物性計測における知足の蹲踞。対角の $r \times k$ や tE は「色即是空Fourier transform」の関係になっている。

[1] F. Matsui et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **59**, 067001 (2020).

[2] 松井文彦・松下智裕・大門寛「光電子分光詳論」丸善出版 (2020).

[3] F. Matsui et al., *Phys. Rev. Lett.* **100**, 207201 (2008).

[4] F. Matsui and S. Suga, *Phys. Rev. B* **105**, 235126 (2022).

自己紹介および 今後分子研で展開したい研究について

おおにし・ひろし

1987 年東京大学大学院理学系研究科化学専攻修士課程修了（指導教員：岩澤康裕教授）、1993 年博士（理学）。1989～1996 年東京大学大学院理学系研究科助手、1996 年同講師、1997～1999 年同助教授、1999～2004 年（財）神奈川科学技術アカデミー極限表面反応プロジェクト研究室長、2004 年より神戸大学大学院理学研究科教授。



「有限の厚さをもつ固液界面のオペランド分子科学研究」を実施するクロスアポイントメント教員として2021年11月に着任しました。任期は2026年10月までの5年間で、クロスアポイントメントの比率は分子科学研究所25に対して神戸大学75です。分子科学研究所が大学共同利用機関であることを活かして、所内外のたくさんの方々と協働したいと思っております。どうかご支援をお願いいたします。

気体と固体が接する界面でおきる化学反応の研究（Gerhald Ertl, 2007年）にノーベル化学賞が授与されてから15年が経過しました。二つの物質が接触する場所である界面の研究を新しいステージに導くことが求められています。界面が有限の厚さ（0.001–1 μm ）をもつことを明確に意識して、ひとつひとつの分子（サイズ0.001 μm ）を見ていく分子論的な研究と、より大きな空間スケール（0.01–1 μm ）で界面の両側を見る連続体的な研究を統合していくことが重要です（図）。

自分自身の研究を含めて、これまでにおこなわれてきた研究の多くは、分子論的界面または連続体的界面のどちらか片方に焦点をあてて深掘りするものでした。有限の厚さをもつ界面の研究を進めるこ

とで新しいステージをひらくことが目標です。

具体的には（1）太陽光と水を使って水素をつくる光触媒と（2）低摩擦を実現する潤滑油をターゲットに選んで研究をはじめました。分子科学研究所が保有する世界最先端の計測評価技術を活用し、界面が機能を発揮している状態での計測評価（これをオペランド計測といいます）を進めつつあります。

光触媒は50年ほど前に日本で発明された技術であり（本多健一・藤嶋昭, 1971）、持続可能なエネルギー供給と炭素循環をめざす高性能な光触媒を日本の研究者が次々に見出してきました。水を分解して水素ガス（ H_2 ）をつくる収率や、二酸化炭素（ CO_2 ）を水で還元して一酸化炭素（ CO ）を作る収率は50年前には考えられなかったほど高くなりました。しかし「どうして収率を高くすることができたのか？」がわかっていないので、より収率の高い光触媒を設計するための指針がありません。試行錯誤に頼って開発をすすめるを得ない状況が続いています。

試行錯誤に頼る事情は潤滑油でも同じです。蒸気圧の低い有機溶媒（長鎖の炭化水素など）にごく微量の添加剤（濃度100 ppmのカルボン酸など）を

加えると、低摩擦の状態を長く維持できる潤滑油になることは1960年代から知られています（Frank Bowden・David Tabor）。微生物などによって自然に分解される性質を商用潤滑油に付与するために、炭化水素を別の化合物（エステルなど）に置き換えることが現在求められています。しかし「微量の添加剤がどのように界面をカバーして摩擦をやわらげているのか？」がわからないので、生分解性潤滑油に有効な添加剤の分子設計が進みません。

水と光触媒が接する界面や、潤滑油と固体が接する界面をオペランド計測する方法を工夫してこれらの問いに答えています。問いに答えることで社会実装可能な高性能光触媒や生分解性潤滑油の開発をサポートすることも当然狙いますが、その一方で「ここには未発見のおもしろいサイエンスがある」という直感に駆られて研究を進めています。これらの界面が機能を発揮するしくみを専門家でない方々に納得していただくレベルで説明する。新しいサイエンスを掘り出す出発点はここにあると信じています。

このような研究を進めていくためには、国内外の大学などに属する研究者だけでなく、企業で開発研究を進める方々と尻をたたいたり、たたかれたりする協働が

必要です。多才な教員職員に加えて最先端の実験室機器とUVSORをあわせもつ大学共同利用機関である分子科学研究所が、協働を広げていくうえで予想以上に有利な立ち位置にあることが着任から半年のあいだにわかってきました。装置開発室にはすでに何度もお世話になりました。まず自分が分子科学研究所を使いまくる。さらに、分子科学研究所に縁の薄いセクター（分子科学の周辺領域や企業）の研究者と技術者が分子科学研究所を使うチャンスをつくる。ここにも注力していきます。

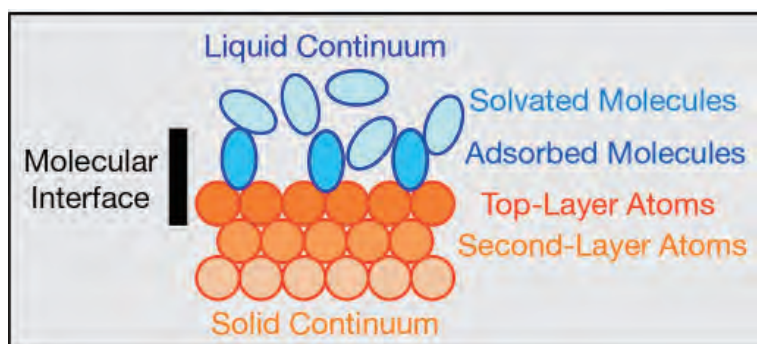


図 有限の厚さをもつ固体－液体界面。



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一緒に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ゃ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いていた。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、暇だよな。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に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とも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と言えたのです。所長もそれに対して(きっと怒っていらしかったことでしょう

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ゃることでしょうが、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。意見ありません。ただ任期制はかくも辛いものだ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終始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)

Reaction scheme showing the preparation of PAFR II from m-phenol and formaldehyde, followed by ion exchange to yield the catalyst.

Batch Esterification without Removal of H₂O
Reaction scheme showing the esterification of a carboxylic acid with an alcohol using catalyst 2 (0.5 mol%), 80 °C, 18 h, yielding H₂O.

Flow Esterification of Various Carboxylic Acids and Alcohols
Reaction scheme showing the esterification of a carboxylic acid with an alcohol using catalyst 2 (0.2 mmol), flow reaction, 80 °C, 20 min.

Key results:
Sulfur loading: 11 wt%
Reused nine times without significant loss of its catalytic activity
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す。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て。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になります。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う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。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、このような栄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。

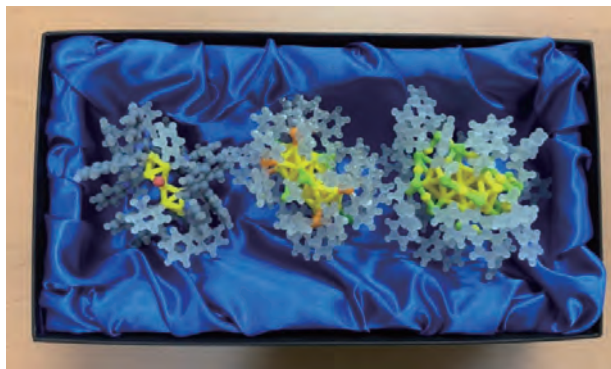
研究内容は、一言で言ってしまうと、有機配位子や高分子で修飾された金属クラスターを原子・分子精度で化学的に合成し、その幾何・電子構造と特異的な安定性・触媒性能・光学特性の相関を明らかにする、というものです。特にこだわっているのは、各論に陥らないように「超原子(原子様の離散的電子構造を持つ貨幣金属原子の集合体)」という統一的概念に基づいて構造と物性の相関の理解を目指していることと、気相光電子分光法を用いて電子親和力などの基礎物性値を決定していることです。究極的な目標は、原子・分子を自由自在に配列することでナノスケールの新しい人工元素を作り出す錬金術の開発です。研究を開始して20

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、水素と空気が

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。そこで私たちは、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歳の大会に到達致しました（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）





大東 琢治

物質構造科学研究所放射光実験施設 准教授
 極端紫外光研究施設 電子ビーム制御部門 准教授 (クロスアポイントメント)
 (前 極端紫外光研究施設 電子ビーム制御部門 助教)

岡崎生活10年半、その先へ

おおひがし・たくじ／筑波大学で博士号取得後、東北大学、SPRING-8、立命館大学、分子研に続いてKEKへ。
 専門はX線光学。座右の銘は「なせばなる」。好きな映画は『未来世紀ブラジル』。

この2月に、10年半お世話になった分子研を辞して、高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所に異動することとなりました。UVSORで遣り残したことがないと言えば嘘になりますが、新しいことに挑戦する時機に巡り合いました。これでSPRING-8、立命館大学、UVSORに続いて、放射光渡世も4箇所めとなります。元が筑波大の出身ですので、つくばに移住することに何の抵抗もありませんでしたが、早くも八丁味噌が恋しくなっているあたり、すっかり岡崎の地に染まっていたようです。

UVSORでは2011に着任して以来、走査型透過X線顕微鏡 (STXM) ビームラインの責任者を務めていました。ひっきりなしにやってくる数多くのユーザーの相手をしつつ、合間を縫うようにビームラインの発展に血道を上げるのが日常の業務でした。いまさら振り返ってみれば色々と犠牲にはしてきましたが、結果として、海外から名指しで利用しに来るユーザーが増えたので、胸を張って世界を向こうに戦える装置になったと言っても罰は当たらないでしょう。ビームライン担当者冥利に尽きるというものです。

なにしろSTXMは分野を問わず、節操なく多種多様なユーザーを受け入れ

てきました。それはX線光学というマイクロスポットな分野に棲んでいた僕にとって、奔放な発想と、その研究者との出会いは常に刺激的で、ユーザー対応は自らの焦点深度を深める糧となりました。そしてその極め付けが、はやぶさ2帰還試料の分析でした。惑星科学など何も知らない僕が関与しているものかと疑問はありましたが、それまで着々と先行して開発を進めていた大気非曝露分析手法が分析チームの方向性に見事に合致しました。結果として数年にわたり、施設間縦断分析の開発をリードしていくことになったので、まあ分からないものです。そしてこの研究に関わったお陰で、知ったような顔をして講演をするチャンスを頂いたり、少なからずメディアにも取り上げて戴きました。あまつさえ酪酊して一

升瓶を抱えた姿をNHKで放映されたのは良い思い出です (写真)。

そんなこんなで10年長、僕の分子研での活動を支えてくれた (i.e. 好きにやらせてもらいました) 上司であった加藤政博先生、小杉先生、解良先生をはじめ、字義通りの面倒を見て下さった技術職員やUVSOR事務の皆様、多くの方々にお世話になり、お陰で分子研で愉しく過ごすことができました。居心地の良さに四年半延長してしまいましたが。この場をお借りして改めてお礼申し上げます。今後は分子研で培った知見を礎に、高エネ研でより一層、活躍して行こうと思います。そして立場こそ変わりますが、これからも分子研、そしてUVSORの行き先を応援して行きたい所存です。



廣部 大地

静岡大学理学部物理学科 テニユアトラック助教
(前 協奏分子システム研究センター 助教)

分子研での思い出

ひろべ・だいち／2013年東北大学理学部卒、2018年同大学大学院理学研究科後期博士課程修了・博士（理学）、2018年4月より分子科学研究所・助教、2020年10月よりJSTさきがけ研究員（兼任）（「トポロジカル材料科学と革新的機能創出」領域）、2022年4月より現職。



最前列右が筆者。

2018年4月より4年間お世話になった分子研を去り、2022年4月より静岡大学理学部物理学科に着任いたしました。研究室を立ち上げる必要があるため、研究環境の整備で忙しい毎日をご過ごしています。

博士後期課程の最終年度、当時の指導教官に山本浩史先生の研究室をご紹介いただきました。当時の私は無機スピントロニクスしか携わったことがなく、「分子」研という名前を聞いて戦々恐々としておりました。しかし、この考えは山本先生とお会いして大きく変わりました。山本先生は化学のご出身でありながら、現代物理学の造詣も深く、化学と物理の学際的研究で更に一旗揚げようとされていました。「スピントロニクスの物理で、山本先生の目指す科学に貢献しよう」という思いを胸に、助教公募への応募を決心しました。

山本先生の研究方針の一つは、キラ

リティを利用したスピントロニクス効果です。私の前任である須田理行先生（現京都大学大学院）が「キラル分子スピントロニクス」で成果を挙げられ、分子研を華々しく卒業されたことは記憶に新しいかと思います。固体物理をバックボーンとする私は、どうにかして「キラル結晶スピントロニクス」とでも言うべき現象を見つけようと、山本先生および学生と一丸となり取り組みました。紆余曲折がありましたが、山本先生の直観と激励、学生の根気強い実験、私のスピントロニクスの知識が噛み合い、キラル結晶スピントロニクスの萌芽的成果を得ることができました。その集大成が論文出版されるのもそろそろですので、今しばらくお待ちください。

今後は静岡大学教員という立場で分子研を利用させて頂こうと考えております。スピントロニクスの基礎物理実験はしばしば、極限環境（低温や高磁場など）が

必要となります。そのような研究設備を備えた研究機関は限られており、それゆえ学生時代のポスト応募先はたいへん限定的でした。しかし分子研に着任後、これほど恵まれた研究環境が外部利用に広く開かれていることを認識し、たいへん驚きました。そして、「いつもは地方大学でデバイス作製と予備実験をすすめ、最新鋭の機器が必要な場合に共同利用機関を訪れる」という選択肢もここ数年で考えるようになりました。時宜を得て静岡大学の公募があり、応募を決めた次第です。分子研での経験がなければ、この選択肢は思い浮かばなかったはずです。この点でも私は分子研に深く感謝しております。さいごに、川合元所長、秋山センター長をはじめ、ご指導いただいた山本先生、山本先生が室長を務める装置開発室の皆さま、日々の研究生生活をともに過ごした山本Gの皆さまに改めて感謝申し上げ、筆を擱かせていただきます。

矢木 真穂

名古屋市立大学 大学院薬学研究科 講師
(前 生命・錯体分子科学研究領域 助教)

分子研での共同研究

やぎ・まほ／2010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）。日本学術振興会特別研究員、英国ケンブリッジ大学博士研究員を経て、2014年4月より自然科学研究機構岡崎統合バイオサイエンスセンター特任助教、2015年10月より分子科学研究所助教、2018年4月より生命創成探究センター助教。2022年4月より現職。



2014年4月から2022年3月までの8年間にわたり、分子科学研究所には大

変お世話になりました。今回改めて振り返ると、なんだかあつという間の8年間

のように感じますが、多くの共同研究に恵まれ、とても充実した研究生生活を送る

ことができました。大峯 巖所長、川合 眞紀所長をはじめ、多くの先生方や研究員の皆様、事務センターの皆様、研究力強化戦略室の皆様、機器センターの皆様には、長年にわたり大変お世話になりました。また、加藤晃一教授、谷中冴子博士をはじめ、加藤グループの皆様には多大なるご協力とご支援をいただき、深く感謝しております。この場を借りて感謝申し上げます。

私は学生の頃から、アルツハイマー病の発症に関わるアミロイド β タンパク質の構造研究を行っておりますが、この“アミロイド β タンパク質”を基軸に、分子研内において多くの共同研究を行う機会を得ることができました。私は溶液NMRが専門でしたが、西村勝之先生のご指導のもと初めて固体NMR解析に

挑戦し、溶液NMRではアプローチが困難な巨大な脂質膜に結合したアミロイド β の構造を決めることができました。奥村久士先生、伊藤暁博士には分子動力学シミュレーションを行っていただき、膜界面におけるアミロイド β の構造変化の様子など、NMRから得られたスナップショット構造だけではわからないようなダイナミックな描像を捉えることができました。岡本裕巳先生、成島哲也博士、山西絢介博士とはアミロイド β をモデル系とした顕微鏡開発を、藤田 誠先生とは球状錯体の中に閉じ込めたアミロイド β の構造解析を、また、内橋貴之先生、Christian Ganser博士 (ExCELLS) とはアミロイド線維伸長の高速AFM観察など、それぞれ共同研究を展開するに至っています。この8年間に、同じ研究

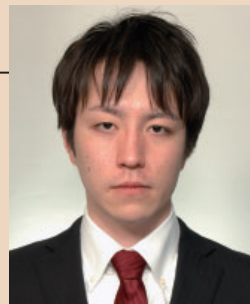
所の様々な分野の研究者と一緒に実験したり気軽にディスカッションができる環境を思う存分享受することができたのは、大変幸せなことだと感じています。

また、分子研は、留学生の受け入れや国際交流の機会にも恵まれており、多くの貴重な経験を得ることができました。さらに、岡崎統合バイオサイエンスセンターや生命創成探究センターのメンバーとして、様々な新しいテーマに挑戦できたのも、私にとって大きな財産となっています。基生研や生理研の先生方や所外の研究者との異分野交流の機会も多く、研究視野が広がったように感じます。今後も分子研で培った経験やネットワークを活かして、研究を進めていきたいと考えております。今後ともよろしくお願い申し上げます。

藤本 将輝 名古屋大学シンクロトロン光研究センター 特任助教 (前 極端紫外光研究施設 助教)

UVSOR を去るにあたり

ふじもと・まさき / 2010年東京理科大学理工学部卒業、2016年大阪大学大学院理学研究科博士後期課程修了、博士(理学)。2016年分子科学研究所助教、2021年名古屋大学とのクロスアポイントメントを経て、2022年より現職。



2016年4月から2022年3月まで極端紫外光研究施設の加速器グループで助教としてお世話になりました。分子研の大型実験装置であるUVSORで光源加速器の運用や放射光の新奇な性質の探究に携わらせていただきました。

UVSORは光源開発用と称した、アンジュレータと呼ばれる周期磁場装置から出てくる光を直接見る事ができるビームラインがあり、私は主にここで実験を行っていました。放射光をはじめて肉眼で見たときの感動は、今でも忘れられません。私が着任した頃にはアンジュレータで発生する光渦の研究が進められていましたが、この光渦

の正体は何なのかを直感的に“観る”実験に夢中になりました。

一方、光源加速器の古さから手動での運転制御が多かったり、また老朽化によるトラブルも度々ありました。これらは共同利用設備としての安定した運用にとっては好ましくありませんが、それでも加速器の研究開発に参加する身としては、またとない経験を多く積ませていただきました。加速器に冷却水を送る水冷チラーが故障したときに、ドライアイスを使って水を冷やしながらビーム入射を行ったのは良い思い出です。

今春からは、名古屋大学シンクロトロン光研究センターに籍を移し、県内にあ

るもうひとつの放射光施設であるあいちSRの運用と開発を行っています。あいちSRはうってかわって国内で最も新しい放射光源のひとつであり、やはりすべてが洗練されています。一方で、試行錯誤の足跡が連綿と刻まれたUVSORの加速器を見ていますと、これからいい加速器に育てていかなければならないと感じています。UVSORで得た経験を温故知新としつつ、新しい環境で光源開発の一翼を担っていききたいと思います。

最後に、加藤政博先生をはじめUVSOR関係者の皆さまにおかれましては長い間ご指導ご鞭撻をたまわり、誠にありがとうございました。



Okazaki and IMS: a place to refresh and rising above

Jakia Jannat Keya (Postdoctoral Researcher)

Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science

I came to Okazaki in April, 2021 and joined IMS when the covid-19 pandemic was prevailing not only in Japan but also all over the world. After completing my job contract at Hokkaido university where I completed my Ph.D. and started my career as a postdoc, it was quite uncertain to move outside Japan due to covid situation. Thanks to Prof. Ryota Iino and IMS for selecting me to start my second job in Okazaki.

In my Ph.D. and postdoctoral research at Hokkaido University, I studied the construction of molecular swarm robot based on biomolecular motor protein system. This results helped me to think about the function of motor protein at the molecular level for the development of efficient molecular machine. In the annual meeting of biophysical society of Japan and other symposiums, I got the opportunity to attend Prof. Iino's talk on designing biomolecular machines and investigate their functions using high speed and high time resolution single molecule techniques. Therefore, I eagerly applied for the postdoctoral position when I saw the opening from his lab. I was happy to join Prof. Iino's lab (Molecular Machine Designing Lab) located at Yamate campus of IMS. Here, I started my research work on engineering motor protein kinesin-1 with synthetic polymer to create hybrid motor protein. The beautiful and peaceful environment of the lab and institute helped me to focus on my research work without worrying about rest of the world. I got all the facilities to explore my interest for single molecule study. Everyday discussion with Prof. Iino and other lab members greatly helped me to organize my research plan and execute it properly for which I could establish the hybrid motor protein research in a very short time.

I would like to express my gratitude to Prof. Iino and Assist. Prof. Akihiro Otomo for their generous support in my research work. Dr. Otomo's friendly behavior always helped me to feel comfortable doing my research in the lab. I would like to thank the technical assistants making the protein purification work smooth for me. I am also grateful to

the secretary Ms. Kaori Nakane for her kind cooperation not only in the administrative process but also to settle down in Okazaki. Nevertheless, also the people from administration of IMS were very supportive for any kind of assistance related to job, visa extension, getting family visa and so on.

When I was missing the mesmerizing beauty and chilling cold weather of Hokkaido, on the other hand, I became happy to see the tropical weather of Okazaki which is similar to Bangladesh, my home country. Especially during the rainy season, whenever I saw the sparkle of thunder, the rainbow and heard the sound of rain, reminded me the rainy day of my country. Although due to covid it was quite difficult to travel outside of Okazaki, I enjoyed the lively environment of here. There are several cafes, park and big shopping mall near the faculty house where I used to live. I could go to those places by walking after lab and weekend for refreshment and daily purchase. I sometimes also visited Otagawa river side and Okazaki castle, a place to feel the culture and history of Japan. I enjoyed the cherry blossom festival there with my husband whom I met after two years of covid was one of the best memories.

I believe the valuable research experience in IMS will help me to enhance my research career in future. If I have the chance I would like to come here again for research and enjoy the serenity of Japan.





NEW STAFF

新人自己紹介

2021年11月15日着任

松井 文彦

まつい・ふみひこ

極端紫外光研究施設
光物性測定器開発研究部門 教授

2018年に主任研究員に着任、2021年11月に職位が変わりました。本号の編集担当をし、まるでマッチポンプで恐縮ですが、研究に関する詳細は研究室紹介をご覧ください。古寺巡りが趣味で白鳳仏が特に好きです。時代が切り替わる当時の最新技術による名品の瑞々しさに憧れます。そのような装置開発をライフワークにしたいと夢見ます。今後とも末永くどうぞよろしくお願い致します。

2021年12月1日着任

三輪 邦之

みわ・くにゆき

理論・計算分子科学研究領域
理論分子科学第二研究部門 助教

2021年12月1日付けで、石崎グループの助教に着任しました。光とナノ物質の相互作用、開放量子系でのダイナミクスに興味を持ち、単一分子分光やプラズモニクスに関する理論研究を行ってきました。これまでの経験を生かし、新たな研究を展開していきたいと思ひます。どうぞよろしくお願い致します。

2021年12月1日着任

CHAUHAN, Vikas Singh

光分子科学研究領域
光分子科学第二研究部門 特任研究員

I have completed my PhD under the supervision of Dr. Raghavan K. Easwaran from Indian Institute of Technology, Patna India in August 2021. My area of Research was Quantum Optics (Theory and Experiment). After my PhD, I joined Prof. Kenji Ohmori's group at IMS, NINS, Japan. Here, I am part of the **Ultrafast Quantum Simulators and Computers with Ultracold Rydberg Atoms** project. Here, we use the ultrafast coherent control technique with attosecond precision developed by Prof. Ohmori and his group in the past and apply it to a completely different object like ultracold Rydberg atoms to develop a new type of Rydberg quantum simulators and computers.

2022年2月1日着任

大東 琢治

おおひがし・たくじ

極端紫外光研究施設電子ビーム制御部門
准教授（クロスアポイントメント）

このたびに在職11年目の新人となりました（同誌の“分子研を去るにあたり”を参照のこと）。在籍した10年半のあいだ、心血注いで運営してきたビームラインを、今後の発展の期待とともに後任に託せるよう、もう1年貢献したいと思います。

2022年2月16日着任

大貫 隼

おおぬき・じゅん

理論・計算分子科学研究領域
計算分子科学研究部門 助教

2019年に早稲田大学で博士（理学）を取得後、同大学での次席研究員を経て、2022年2月より岡崎グループの助教に着任いたしました。計算生物物理学を専門としており、蛋白質分子の物性やダイナミクスから機能が発現する機構について主に分子動力学計算を用い研究しています。分子研内外での研究交流を活かし、既存の枠にとらわれない新しいアイデアを生み出せるよう邁進いたします。

2022年3月1日着任

高谷 光

たかや・ひかる

特別研究部門 教授（兼任）



2019年12月より京都大学とのクロスアポイントメント准教授として分子研に在籍をさせて頂き、UVSORを中心に研究を進めさせて頂いていました。本年4月より帝京科学大学生命環境学部生命学科に教授として異動しましたので、兼任教授として継続して分子研でお世話になることになりました。本学での立上げが落ち着きましたら、大学院進学予定の4年生と一緒に分子研に滞在・実験をしたく思っています。どうぞ宜しくお願いを致します。



2022年4月1日着任

湯 之 也

TANG, Zhiye

理論・計算分子科学研究領域
理論分子科学第一研究部門 助教

2016年に米国カリフォルニア州州立大学リバーサイド校にてPh.D.を取得後、名古屋大学、東京大学を経て2022年度に分子研に着任しました。これまでは、分子動力学手法を用いて生体系及び合成高分子系における熱力学、動力学、工学などの性質に関する研究を行ってきました。分子研では、様々な系に現れるダイナミクスの不均一性の解明とその理論の構築を目指して研究を展開したいと思います。どうぞよろしくお願いいたします。

2022年4月1日着任

小 林 稜 平

こばやし・りょうへい

理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学部門
日本学術振興会 特別研究員(PD)

2021年3月に東京大学工学系研究科応用化学専攻で博士(工学)の学位を取得し、同大学の特任研究員を経て、2022年4月より日本学術振興会特別研究員として岡崎グループに着任しました。東京大学時代は酵素1分子の動きを顕微鏡で観察することで酵素の反応機構を解明する研究を行っていました。岡崎グループでは分野を変えて計算科学を学び、タンパク質が持つ反応制御機構の起源を解明する研究に取り組みたいと思います。

2022年4月1日着任

小 泉 愛

こいずみ・あい

理論・計算分子科学研究領域
理論分子科学第一研究部門 特任研究員

2022年3月に東北大学大学院理学研究科化学専攻で博士(理学)を取得し、同年4月より斎藤グループに着任しました。学生時代には、分子動力学シミュレーションプログラムの開発とそれを用いた解析から液液界面で起こる相間移動触媒反応の反応解析を行ってきました。今後はこれまでの経験を活かしながら植物の光合成における光防御機構の解明に取り組みます。よろしくお願いいたします。

2022年4月1日着任

高 橋 翔 太

たかはし・しょうた

物質分子科学研究領域 電子構造研究部門
日本学術振興会 特別研究員(PD)

2020年3月に京都大学大学院理学研究科で博士(理学)の学位を取得し、民間企業での就業経験を経て、2021年より杉本グループで研究活動を行っております。学生時代には、超高速非線形分光を駆使して光と物質が混成した特異な量子状態のダイナミクスを調べる研究を行ってきました。本年度からは日本学術振興会特別研究員PDとしてさらに気を引き締めて研究に邁進してまいります。どうぞよろしくお願いいたします。

2022年4月1日着任

原 島 崇 徳

はらしま・たかのり

生命・錯体分子科学研究領域
生体分子機能研究部門 特任研究員(IMSフェロー)

2022年3月に東京工業大学大学院で博士(理学)の学位取得後、同年4月より飯野グループの特任研究員に着任いたしました。これまではプローブ顕微鏡を用いた生体分子の単一分子観察を専門として研究を行ってきました。今後は自身の一分子計測の技術・経験を活かしつつ、DNAやタンパク質による人工分子モーターの設計に取り組みます。どうぞよろしくお願いいたします。

2022年4月1日着任

松 本 浩 輔

まつもと・こうすけ

生命・錯体分子科学研究領域
生体分子機能研究部門 特任研究員

本年3月に東京工業大学物質理工学院応用化学系にて博士(工学)を取得し、4月から分子科学研究所飯野グループの博士研究員として着任致しました。学生時代には、液晶を用いた光機能性材料の創製をテーマに研究を行ってきました。素晴らしい環境で研究できることに感謝しながら、自身にとって新たなフィールドである1分子イメージングに邁進致します。どうぞ宜しくお願い致します。



NEW STAFF

新人自己紹介

2022年4月1日着任

佐藤 啓文

さとう・ひろふみ

理論・計算分子科学研究領域

理論・計算分子科学研究部門 客員教授



1996年に京都大学理学研究科で学位取得後に分子研助手、故信定君らと飲み歩きました。2002年より京都大学工学研究科へ異動、現在同教授および福井謙一記念研究センター長を務めています。2006年度に客員研究部門助教授兼任の他、各種委員等で断続的にお世話になっていますが、こんなにも長く岡崎詣が無くなってしまったのは初めてです。任期中に天ころ、味噌煮込を頂きたいところです。

2022年4月1日着任

吉田 紀生

よしだ・のりお

理論・計算分子科学研究域

理論・計算分子科学研究部門 客員教授



分子科学研究所・助教、九州大学大学院理学研究科・准教授を経て、2022年3月より名古屋大学大学院情報学研究科で研究を行っています。専門は液体の統計力学理論による溶液内化学・生物過程の理論研究です。助教として勤務させて頂いて以来、10年ぶりの分子研です。多くの方との交流し共同研究の契機とさせて頂ければと思っています。どうぞよろしくお願いいたします。

2022年4月1日着任

野口 博司

のぐち・ひろし

理論・計算分子科学研究領域

理論・計算分子科学研究部門 客員准教授



名古屋大学で学位取得後、2000年から3年間、博士研究員として分子研に在籍していました。その後、ドイツのユーリッヒ研究センターでの研究員を経て、現在は東京大学物性研究所で准教授を務めています。専門はソフトマター・生物物理で、最近では生体膜と曲率誘導タンパク質との相互作用などを理論、シミュレーションを用いて研究しています。どうぞよろしくお願い致します。

2022年4月1日着任

間瀬 一彦

ませ・かずひこ

光分子科学研究領域

光分子科学第四研究部門 客員教授



1992年4月から1999年7月まで分子研極端紫外光科学研究部門助手を務め、1999年8月から高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所に勤務していたのですが、久しぶりに帰ってきました。専門は放射光を利用した表面研究と、非蒸発型ゲッター (NEG) の開発です。極端紫外光研究施設 UVSOR をより良くするために尽力したいと思います。どうぞよろしくお願い致します。

2022年4月1日着任

福原 武

ふくはら・たけし

光分子科学研究領域

光分子科学第四研究部門 客員准教授



2009年に京都大学で博士(理学)を取得し、東京大学、マックスプランク量子光学研究所での博士研究員を経て、2014年から理化学研究所で新しい研究室を立ち上げました。現在は量子コンピュータ研究センターにチームリーダーとして所属し、レーザー冷却などで極低温まで冷やされた原子気体を用いて、固体物性を研究する量子シミュレーションに取り組んでいます。冷却原子を用いた究極的な量子制御技術を開発し、新たな量子多体研究を切り拓いていきたいと思っています。

2022年4月1日着任

中山 泰生

なかやま・やすお

光分子科学研究領域

光分子科学第四研究部門 客員准教授



東京理科大学理工学部で准教授を務めております。専門は有機材料の物性計測で、専ら「つくる」より「はかる」方を生業にしています。分子研とのご縁は2007年にUVSOR施設利用を採択いただいてから今年で15年となり、この間、UVSORのみならず協力研究などでも大変お世話になってまいりました。微力ながら客員として少しでも貢献できれば幸いです。よろしくお願い致します。



2022年4月1日着任

秋元 郁子

あきもと・いくこ

物質分子科学研究領域

物質分子科学研究部門 客員准教授



専門は光物性研究で、半導体や絶縁体の発光過程、光キャリアの物性などについて実験研究しています。分子研には、90年代後半にUVSOR学生ユーザーとして、近年は電子スピン共鳴装置の共同利用で、お世話になっています。半導体中に光生成した電子と正孔のスピン間相互作用の基礎物理を明らかにする研究をしています。微力ながらお役に立てることがあれば幸いです。よろしくお願いします。

2022年4月1日着任

尾坂 格

おさか・いたる

物質分子科学研究領域

物質分子科学研究部門 客員教授



広島大学での助教、理化学研究所での上級研究員を経て、2016年より広島大学大学院先進理工系科学研究科の教授を務めております。有機薄膜太陽電池などの有機デバイスの高性能化を目指して、新しい高分子系有機半導体材料の開発に取り組んでいます。皆様との交流や共同研究を通じて、分子研の運営や研究に少しでも貢献できれば幸いです。どうぞよろしくお願いいたします。

2022年4月1日着任

神谷 由紀子

かみや・ゆきこ

生命・錯体分子科学研究領域

生命・錯体分子科学研究部門 客員准教授



名古屋市立大学にて学位を取得した後、博士研究員・特任助教として2008年から2011年まで分子研に在籍しておりました。その後、名古屋大学にて助教・講師を経て、現在は准教授として務めています。人工核酸を研究対象として、材料や医薬品に関連する機能性核酸のデザインに取り組んでいます。分子研の先生方との交流・共同研究を通じて、新たな展開を拓くことができれば幸甚に存じます。どうぞよろしくお願いいたします。

2022年4月1日着任

稲井 直人

いない・なおと

計算科学研究センター

特任研究員



2022年3月に名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻で博士（理学）を取得し、4月から江原グループの特任研究員として着任しました。学生の頃は量子化学計算を用いて有機分子の電子励起状態からの緩和過程を研究していました。光機能分子や量子コンピュータなどの複雑な電子状態の研究にも取り組んでいけたらと思います。どうぞよろしくお願いいたします。

2022年4月1日着任

藤田 浩正

ふじた・ひろまさ

研究力強化戦略室

特任専門員



3月に事務センターを定年退職し、4月から特任専門員として研究力強化戦略室でお世話になっております。一時的に学振、名工大、核融合研での勤務で抜けておりますが、昭和60年から平成、令和と約30年に亘り岡崎の事務で勤務してきました。歳をとった新人ですが、これまでの経験や知識を生かして研究所の皆様の役に立てればと思っておりますので、よろしくお願いいたします。

2022年4月1日着任

鈴木 規子

すずき・のりこ

協奏分子システム研究センター

階層分子システム解析研究部門 技術支援員



2022年4月より、古賀グループの技術支援員としてお世話になっております。以前は、生理学研究所の技術支援員としてマウスのお世話や簡単な実験などを担当していました。こちらでは、主に大腸菌を使った実験を教わっています。初めてのことも多いですが、丁寧にご指導いただき少しずつ仕事を覚えているところです。

どうぞよろしくお願いいたします。



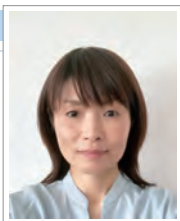
NEW STAFF

新人自己紹介

2022年4月1日着任

原 田 晋 子

はらだ・くにこ

生命・錯体分子科学研究領域
錯体触媒研究部門 技術支援員

2022年4月より、榎山グループの技術支援員としてお世話になっており、実験データの入力を担当させていただいています。化学分野にプランクがありますが、榎山先生をはじめ、研究室の方のサポートを頂きながら業務を行っております。少しでも早くグループのお役に立てるよう業務を行って参ります。今後とも宜しくお願い致します。

2022年4月1日着任

船 木 弓 子

ふなき・ゆみこ

機器センター
事務支援員

2022年4月より、機器センター・事務支援員としてお世話になります。文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ・スポーク機関を担当させていただきます。所外利用者の皆様、所内の皆様、スムーズにご利用頂けるよう努めて参ります。新しくなった研究棟3階オープンスペースで、日々精進して参りますので、どうぞ宜しくお願い致します。

2022年4月8日着任

柿 沼 秀 哉

かきぬま・しゅうや

生命・錯体分子科学研究領域
錯体触媒研究部門 技術支援員

2022年3月に東邦大学大学院 理学研究科 化学専攻 博士前期課程修了し、4月より榎山グループの技術支援員としてお世話になっております。専門は構造有機化学・超分子化学で、環状ポリアミンを部分構造に持つ多環式クリプタンドの合成を研究しておりました。これまで培ってきた知識を活かして、少しでも研究をサポートしていきたいと思っております。よろしくお願いいたします。

2022年4月16日着任

MAHMOOD, Md Iqbal

計算科学研究センター
特任研究員

I achieved a Ph.D. degree from Chiba University in 2013 on a computational study on the structural stability of membrane protein. Then I started work as a researcher in the field of theoretical and computational molecular science at Tokyo University. I worked with the Okazaki group from February 2018 to January 2021 at Institute for Molecular Science and moved to Nagoya University. Recently, I have joined Okazaki group again at Institute for Molecular Science/Research Center for Computational Science as a postdoctoral fellow in April 2022. Here my research focuses on dynamin protein assembly on the membrane. We investigate the protein conformational changes and how it is responsible for constriction and scission of the membrane.

2022年5月1日着任

賀 来 美 恵

かく・みえ

機器センター
特任研究員

東京薬科大学にて博士（薬学）の学位取得後、海洋バイオテクノロジー研究所や産業技術総合研究所及び理化学研究所等にて海洋天然物化学をはじめ、ケミカルバイオロジー及びNMRによる構造生物学に関する研究に携わってきました。分子科学研究所では文部科学省のプロジェクト業務を担当します。研究所内外の方々の有益な交流に微力を尽くす所存です。何卒よろしくお願いいたします。

2022年5月1日着任

太 田 康 仁

おおた・やすひと

機器センター
特任研究員

2006年に中部大学にて博士号を取得しました。2009年より名古屋工業大学の知財活用部門、2017年からは中部大学研究推進企画室にて研究成果を社会実装するための支援業務に従事してまいりました。2022年5月より機器センターの特任研究員として「文部科学省 マテリアル先端リサーチインフラ」の実務を担当することになりました。どうぞよろしくお願いいたします。



2022年5月1日着任

枚 本 泰 伸

すぎもと・やすのぶ

極端紫外光研究施設

特任専門員



5月よりUVSORにてお世話になっております。学位を取得後、ポスドクなどを経て名古屋大学とあいちシンクロトロン光センターで生体試料のX線小角散乱に携わってきました。分子研では、これまで縁のなかった紫外域や軟X線を扱った測定に戸惑いながらも皆様のお力をお借りして仕事に取り組んでおります、どうぞよろしくお願いいたします。

2022年6月14日着任

Shuyi Liu

メゾスコピック計測研究センター

広帯域相関計測解析研究部門

日本学術振興会 外国人特別研究員



Dr. Shuyi Liu obtained his doctoral degree in physics at Fritz-Haber Institute of the Max-Planck Society, Germany in 2019. After his doctoral study, he worked as a postdoc researcher at the same group for almost three years. He focused on studying light matter interaction and ultrafast dynamics at atomic scale and surface physics/chemistry by scanning probe microscopy. Now, he joined Institute for Molecular Science started from June of 2022 by the support of JSPS postdoctoral fellowship.

2022年6月16日着任

山 西 絢 介

やまにし・じゅんすけ

メゾスコピック計測研究センター

繊維計測研究部門 特任助教



大阪大学大学院工学研究科精密科学・応用物理学専攻博士課程を修了し、岡本グループに着任しました。これまでは主に、光誘起力顕微鏡法の確立とそれを用いたイメージングを行ってきました。着任後もナノ光学における光圧を利用した新規のアプリケーションの実現に取り組んでいきたいと思っています。何卒宜しくお願いします。

共同利用研究ハイライト

パラジウム触媒を用いる 含八員環分子の新規合成反応開発

村上 慧 関西学院大学理学部 准教授

パラジウム触媒を用いるカップリング反応は現代有機化学における最重要反応であり、数多くの研究がなされてきた。鈴木-宮浦反応に代表される有機ハロゲン化物と有機金属化合物のカップリングを用いれば、望む“ほぼ全ての”分子を合成可能である。しかし唯一の欠点として、反応を行うにあたり、対応する有機ハロゲン化物と有機金属化合物の両方を調製する必要がある。これが難しい場合には、カップリング反応を行うことができず、目的の分子も得ることができない。無敵のように思える鈴木-宮浦クロスカップリングでも、足元の原料合成に難所が待っていることは少なくない。

このような背景の中、近年では炭素-水素 (C-H) 結合を直接変換する手法に注目が集まっている。本手法では有機金属化合物の等価体として、C-H 結合を変換するものであり、カップリングパートナーとなる有機金属化合物の事前調製が必要ない。この手法を用いれば、官能基化されていない炭化水素分子を直接反応させることができる。なおC-H結合変換にはこのほかにも様々な形式がある。本内容では有機金属化合物の等価体として、炭化水素のC-H結合を用いる反応に焦点を絞っている。

我々は近年、クロロフェニレンに対して、パラジウム触媒を作用させると環化を伴うカップリング反応が進行し、対応する二量化体を与えることを明らかにしている (図1中式1)^[1]。本手法では、クロロフェニレンの炭素-塩素 (C-Cl) 結合部位が、もう一分子のクロロフェニレンのC-H結合部位

とカップリングし、対応する環化生成物に至る。モノハロゲン化分子を用いて、環化反応を行う珍しい形式の反応であった。

さらに研究を続けたところ、クロロフェナントレンを基質として用いた場合には、六員環ではなく、八員環によって繋がれたフェナントレン二量化体が得られるということが明らかになった (図1中式2)。本手法は様々な基質に対して反応が可能であり、数多くの含八員環分子を合成することができた。

さて、ここまで開発した手法は二量化であり、同一の分子同士を繋ぎ合わせることはできない。本手法をさらに展開していくには異なる基質を反応させるクロスカップリング手法が求められる。この実現には類似の反応性をもつ基質を見分け、的確にカップリングする必要がある。振り返ってみても、論理的にこの高難易度反応を実現するのは不可能で、偶然の発見が導いてくれたことは疑いない。このブレイクスルーの始まりは、二量化反応の反応機構解析であった。これを行っていた時、偶然にもビフェニレンをクロロフェナントレンと反応させた場合、高選択的にクロスカップリング反応が進行することを発見した (図1中式3)^[2]。二量化反応と同一の条件ながら、クロスカップリング生成物が選択的に得られてくる。本手法に興味をもった我々は、反応適用範囲の検討を行った。ビフェニレンは様々なクロロフェナントレン誘導体と選択的に反応することがわかった。詳細な反応機構は現在研究中である。

本クロスカップリング反応では、ク

ロロフェナントレンが二量化する条件にもかかわらず、二量化体はほぼ見られない。すなわち、複数のクロロ基を有するフェナントレン誘導体に対して、二量化副反応を心配せず、クロスカップリング反応を行うことができることを意味する。実際、クロロ基を二つ有するトリフェニレンに対して、反応を行ったところ、連続クロスカップリングが速やかに進行し、八員環を二つ有する生成物を良好な収率で得ることができた (図1中式4)^[2]。

この結果に気をよくした我々はさらに三つのクロロ基を有するトリフェニレンに対して、反応を行った。その結果、3連続クロスカップリングが進行し、八員環を三つ有する生成物が得られてきた (図1中式5)^[2]。本生成物は、過去に報告された如何なる手法を用いても合成が難しいと (個人的に) 思っている。特に、鈴木-宮浦カップリングを適用する場合には、トリクロロトリフェニレンに対して、さらに3つのボリル基の導入が必要であり、合成上現実的ではない。C-H結合を変換する利点をよく表現できた一例である。

さて、これらの反応で得られた生成物や反応機構解明の鍵となる中間体であるが、分子研瀬川准教授との共同研究によって、構造を解明することができた。得られたいくつもの分子のX線結晶構造解析を瀬川先生に行っていたが、美しい分子の構造を目にすることができた。もちろん研究を形にすることができたのは、結晶構造以外にも反応機構や分子の性質に至るまで、日々議論いただいたおかげである。共同研究のお願いを快く引き受けて下さった

瀬川准教授に厚く御礼申し上げます。

最後になるが、一緒に研究を行った学生や研究員の方々の不断的努力に感謝申し上げますとともに、本研究を遂行するにあたり、ご指導いただいた伊丹健一郎教授には心より御礼申し上げます。



むらかみ・けい

2012年京都大学大学院工学研究科博士後期課程修了。その後、日本学術振興会特別研究員、京都大学白眉センター特定助教、名古屋大学物質科学国際研究センター助教、名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所特任准教授を経て、2020年より現職。

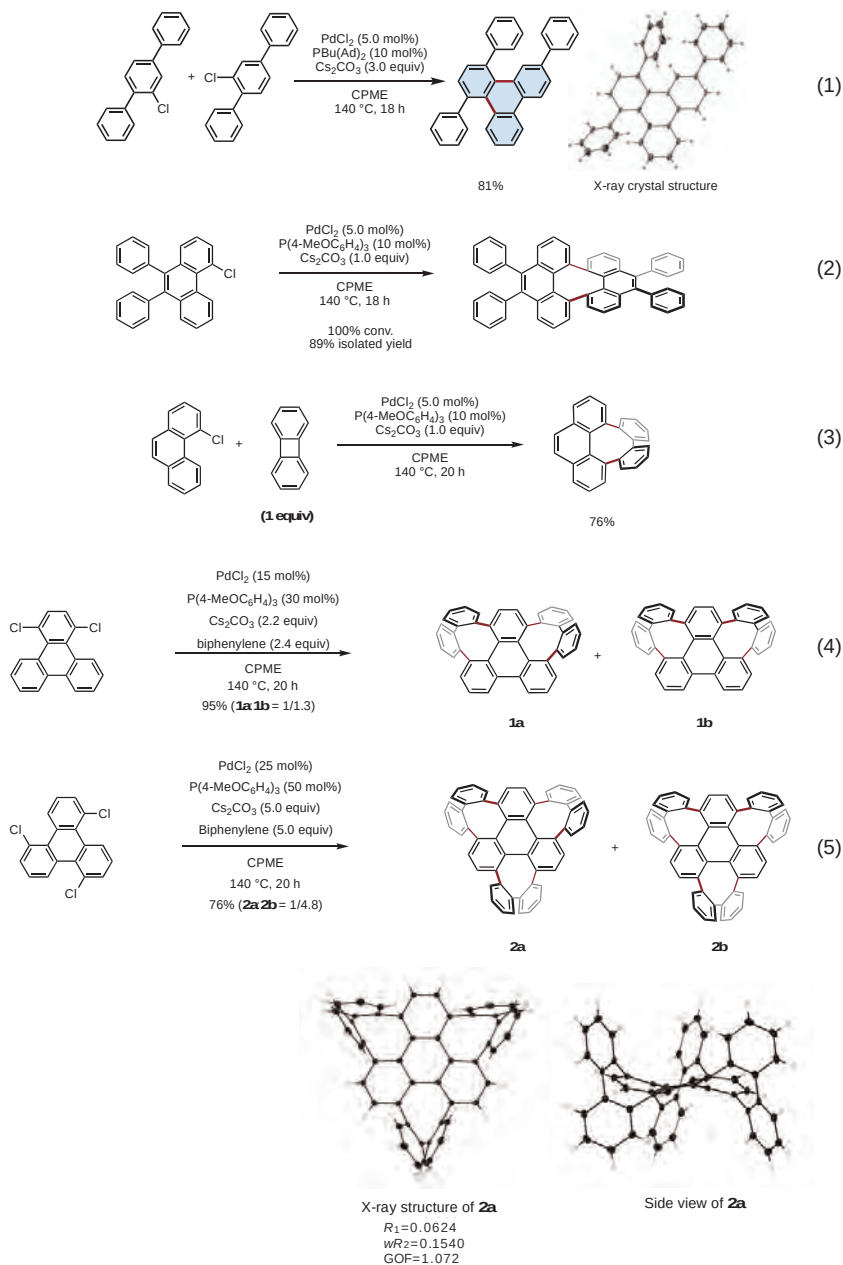


図 1 環化カップリング反応。

参考文献

- [1] Y. Koga, T. Kaneda, Y. Saito, K. Murakami, K. Itami, *Science* **2018**, 359, 435–439.
 [2] S. Matsubara, Y. Koga, Y. Segawa, K. Murakami, K. Itami, *Nat. Catal.* **2020**, 3, 710–718.

共同利用研究ハイライト

光電子運動量顕微鏡を利用した高移動度有機半導体の分子軌道トモグラフィー

山田 洋一 筑波大学 准教授

はじめに

PiceneやBTBT, BTANCなど、ペンタセンのようなモデル分子にやや近いシンプルな形状ながら、ジグザグ構造の導入や異種元素の導入の効果により、高移動度を示す薄膜が作製可能となる実用的有機電界効果トランジスタ (OFET) 材料分子 (図1) が注目されてきている。このような分子群では10 Vs/cmを超える移動度も実現されている一方、これらのキャリア輸送のメカニズムが十分に理解されているとは言いがたい。特にBTBT系の材料では、HOMOにくわえて、HOMO-1 やさらに低いエネルギーの軌道の混成も伝導に強く関与することがごく最近示唆されている^[1]。このような、高移動度分子材料の「薄膜に特有な」電子状態の解明のためには、(1)よく規定された薄膜を作製し、(2)その電子状態を軌道のエネルギーおよび空間分布の両者の観点で実験的に研究することが重要である。

このような研究に、我々は通常走査トンネル顕微鏡を用いているが、プローブ顕微鏡はあくまで局所計測であるが故に、有機薄膜中の分子軌道の平均情報を得ているとは言いがたいことや、軌道エネルギーの定量計測が困難であるといった特有の本質的な問題がある。一方、光電子トモグラフィーでは、薄膜中の分子軌道のエネルギーと空間分布の平均情報を得るための非常に有力な手法であり、プローブ顕微鏡と相補的である。これまで、光電子トモグラフィーはモデル分子に適用されてきたが、我々は、STMで分子の配列構造を十分に規定した実用分子膜に光電子

トモグラフィーを適用することで、その伝導機構と電子状態の関係を理解することを目指している。

実験

このような研究のために、UVSORのBL6Uにインストールされた光電子運動量顕微鏡^[2]は非常に強力である。我々は解良先生のグループとの「協力研究」において、松井先生のご協力の下で本装置を使用させていただいているが、このような機会は非常に貴重であり有用である。本項では、協力研究の成果で、すでに論文化したpicene薄膜の結果^[3]を報告するが、この一部は光電子運動量顕微鏡導入以前にBL6Uに設置されていたAcceptance-cone-tunable electron spectrometer (ACTES)^[4]により取得された結果であ

る。

結果・考察

平均情報を得る光電子トモグラフィーの効率的な解析のためには、平均的な構造がよく揃っている計測対象が望まれる。しかし、やや複雑な形状の実用分子膜では、この要請が満たされない場合が多い。我々は、Ag(110)単結晶表面のような異方的な表面上でしばしば一軸配向分子膜が実現できることに注目し、実用的な有機半導体材料のモデル膜を作製してきた。これまでにpiceneやDNNT, Dph-BTBTなどの分子の配向膜が作製できており、協力研究ではこれらの分子の光電子トモグラフィーを行ってきた。

図2にpiceneの配向膜のSTM像を示す。膜は(a)示すように、全体的に

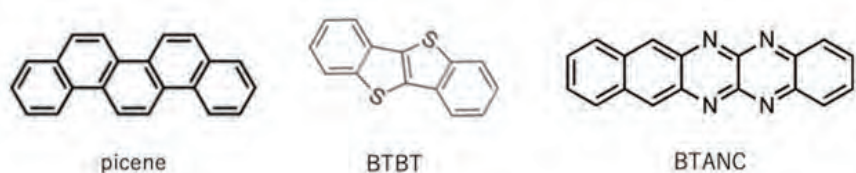


図1 picene, BTBT, BTANCの分子構造式。

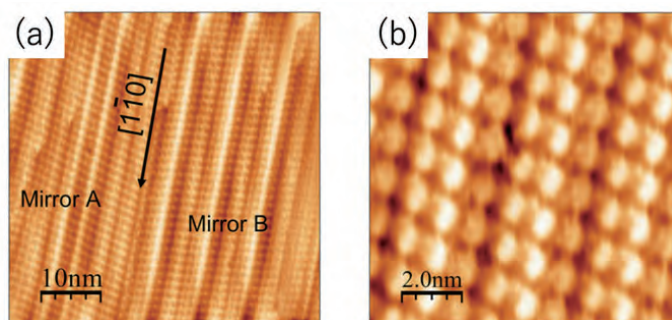


図2 (a) picene/Ag(110)一軸配向膜の広範囲のSTM像と(b)その拡大像。

[1-10]方向に沿った一次元的な列状の構造をとっており、その中で個々のpicene分子は、(b)に示すように分子長軸が列の方向にほぼ沿っていることがわかる。層の構造から、約5層程度の多層膜であることがわかり、一軸配向の多層膜が作製できたと言える。このように膜中での分子のおよその配向はSTMで決定できる一方で、図2(b)でも見られるが、STMで観察できる個々の分子配向にはややばらつきがあり、平均情報の決定は困難である。

図3(a)にpicene/Ag(110)の配向膜のUPSスペクトルを示す。piceneではHOMO, HOMO-1, HOMO-2がエネルギー的に近く、ブロードなピークとなるが、三つのガウシアン成分でフィッティングすることができる。それぞれのガウシアン成分の位置で取得した光電子の運動量マップを図3 (b-d) に示す。それぞれ、

HOMO, HOMO-1, HOMO-2に対応すると思われる。これらの特徴的なパターンを再現するように、さまざまな分子配向モデルに対して光電子運動量分布のシミュレーションを行うことで、薄膜中の分子配向を決定することができた。図3 (e-g) は、piceneを表面に平行に配置した薄膜モデルの光電子の運動量分布のシミュレーション結果である。ここでは、分子の長軸が[1-10]方向から11° 傾いた2ドメインが存在するモデルにおいて、実験をうまく再現できた。光電子運動量マップは分子配向に敏感であるため、数度の精度で薄膜中の分子配向を決定できた。

Piceneはモデル分子であり、その分子軌道もよく知られており、薄膜中の分子軌道が孤立分子から大きく変化していないため、この例のような解析が可能であった。しかし、例えばより実用的なDph-BTBTでは、強い分子間相

互作用のため、分子軌道形状やエネルギーが明らかに変化している。このような場合の詳細な解析には、より高分解での光電子の運動量分布計測が求められるが、光電子運動量顕微鏡はこのような用途に非常に有用であるといえる。



やまだ・よういち

2004年 筑波大学工学研究科にて博士（工学）取得後、ベルリン自由大学、日本原子力研究開発機構発機構でのポスドクを経て2008年筑波大学助教、2013年同講師、2018年より現職。専門は有機薄膜の表面科学。

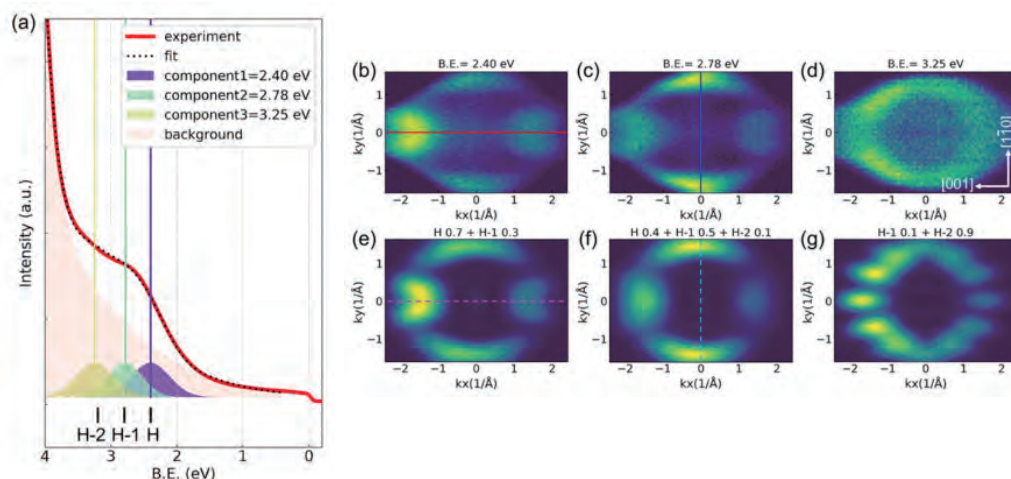


図3 (a) picene/Ag(110)のUPSスペクトル。UPSスペクトルは紫、緑、黄色で示すガウス関数 (component 1-3) とバックグラウンド成分によりフィッティングした。(b-d) (a)のフィッティングに用いたガウス関数のピークトップのエネルギーでの光電子運動量マップ。(e-g) (a)の各ガウス関数のピークトップのエネルギーにおける他のガウス関数の存在割合に基づき、それぞれに対応する分子軌道からの光電子放出を足し合わせて作成した光電子運動量マップのシミュレーション。

参考文献

- [1] C. P. Yu, et al., *J. Am. Chem. Soc.* **144**, 11159 (2022)
- [2] F. Matsui, et al., *Jpn. J. Appl. Phys.*, **59**, 067001 (2020)
- [3] M. Iwasawa, et al., *J. Phys. Chem. Lett.* **13**, 1512 (2022)
- [4] H. Yamane, et al., *Rev. Sci. Instrum.* **90**, 093102 (2019)

施設だより

軟X線XAFSによる有機マグネシウム化合物の構造解析

特別研究部門／光分子科学第三研究部門 高谷 光

2019年度より京大とのクロスアポイントメントで分子研に籍を置いて以来、UVSORにて軟X線XAFSによる反応性有機金属分子の構造解析に取り組んできました。表題にある有機マグネシウム種の分析については、主たる共同研究者として伊藤肇先生（北大）が代表をされているJST CREST「革新的反応」領域の「レドックスメカノケミストリーによる固体有機合成化学」課題に加えて頂いてから、長坂将成先生はじめUVSORの諸先生方の協力を得て、主にBL2AとBL3Uで研究を行ってきました。その成果が最近Nature Communications誌の2021年のダウンロード数Top25論文^[1,2]に選出されましたので紙面をお借りして簡単にご紹介させて頂けたらと思います。

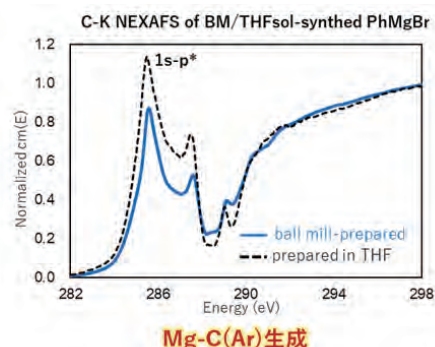
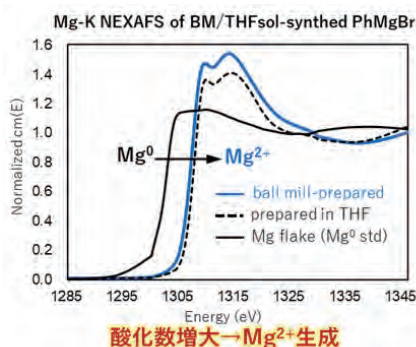
有機マグネシウムという馴染みのない印象を受けるかもしれませんが、有機化学で最も有名な人名反応であるGrignard（グリニャール）反応に用いる反応剤と言えば、一度は聞いたことがある方も多いと思います。Grignard反応は1900年に発見された有機分子の炭素骨格を延伸・拡張する反応ですが、その有用性がすぐに認められ1912年にノーベル化学賞を受けています。以来100年以上もの間、産学両分野において用いられ、有機合成化学における価値や重要性は高まりこそすれ衰える兆しはありません。しかしながら、意外なことに反応活性種や、詳細な反応機構については未解明の部分が多く残されています。

Grignard反応は、エーテル性の有機溶媒中にて金属マグネシウムとハロ

ゲン化アルキル／芳香族分子を反応させて調製した有機マグネシウム種を用いて、有機溶媒中（溶液中）で行います。この方法では、濃度の決まった均一溶液として有機マグネシウム反応剤が得られるため、反応操作が簡便であるというメリットがありますが、溶液状態の有機マグネシウム試薬は空気中の水分や酸素に非常に敏感なため、反応操作にはいささかの熟練が必要であり、操作を誤ると発火性のエーテル溶媒に火が付くなどの危険性もあります。伊藤CRESTでは、ボールミル装置を利用したメカノケミカル条件下での固相有機反応について様々な検討を行っていますが、この過程で、溶媒を用いずに固相反応によって金属マグネシウムとハロゲン化物から有機マグネシウム種を調製できることを見出しました^[3]。メカノケミカル固相反応によって得られる粉末固体／粘稠なガム状液体の有機マグネシウム種は、空気中で取り扱えるほど安定ですが、反応性は維持しており、カルボニル化合物などの求電子反応剤を共存・反応させると、固相条件でGrignard反応が進行します。このことは、“Grignard反応はエーテル溶媒中で行う”という発見以

来120年間、有機化学者の間で共有されてきた常識を覆しただけでなく、有機溶媒に溶けない難溶性のハロゲン化物から有機マグネシウム種を調製できること、発火性・毒性のため工場での使用が難しいエーテル溶媒を使用せずにGrignard反応が行える等、有機合成化学における革新的な知見と言えます。

従来型のGrignard反応は液相系反応であるため、これまで有機マグネシウム種の構造・反応性研究は、主に溶液NMRを用いて行われてきたのですが、メカノケミカル条件で調製した粉末固体／ガム状液体の試料では、溶液NMRを利用できません。そこで、我々は試料の状態を選ばない軟X線XAFSに着目し、BL2AおよびBL3Uにて、それぞれMg-KおよびC-K端測定を行いました。測定は、軟X線XAFSで良く用いられる銅製の試料板に、粉末／ガム状の有機マグネシウム種を塗布して全電子収量法と蛍光法で行いましたが、C-K端では銅もしくは表面の汚れに由来すると考えられるアーティファクトを除くために、O₃処理したインジウム薄膜に、グローブボックス内（Ar雰囲気）で試料を塗布して測定を行いました。尚、UVSORでは封じ切りの試料



搬送装置が使えないため、グローブボックスのある実験室からUVSORまではArを満たした2重のジップロック中に試料板を密封して輸送し、ロードへの取付をN₂/Arを満たしたグローブバック中で行い、さらに光学系への挿入時にはチャンバー/グローブバックの両方でN₂/Arフローしながら試料が大気に暴露されない工夫をしました。XASF測定は、PD/SSD/光電子収量を用いて、ビームラインのスタンダード条件にて行いましたが、試料塗布をしていない

In表面のXAFSを参照スペクトルとしてベースライン処理を行うことで良好なMg-K/C-K端XAFSを得ることに成功しました。下図に示す様に、メカノケミカル条件で固相条件で調製した試料と、液相調製したGrignard反応剤をグローブボックス中にて蒸発乾固させて得られた粉末試料のスペクトルが良好一致を示し、両条件でほぼ同一の2価有機マグネシウム種が生成していることを明らかにしました。精密な分子構造については、CRESTメンバーであ

る前田理教授およびJian Julong助教らのAFIR解析からMgを複数個含む多量体構造であることが解ってきています。現在、上記計算から得られた分子構造を用いてMg-K端EXAFSのFEFFフィッティングを行っています。精密な分子構造の決定にあと一步のところまで来ています。結果と機会に恵まれるようでしたら、また本紙面上で続報としてご紹介させて頂けたらと思っています。

参考文献

[1] 論文プレスリリース: www.ims.ac.jp/news/2021/11/211118.html

[2] <https://www.nature.com/collections/gagdjjgcgj2021>

[3] R. Takahashi, A. Hu, P. Gao, Y. Gao, Y. Pang, T. Seo, J. Jiang, S. Maeda, H. Takaya, K. Kubota, H. Ito,* "Mechanochemical Synthesis of Magnesium-based Carbon Nucleophiles in Air and Their Use in Organic Synthesis", *Nature Commun.* **12**, 6691 (2021) DOI:10.1038/s41467-021-26962-w.

施設だより	新装置紹介 「電子スピン共鳴装置 Bruker E580」 機器センター 中村 敏和
-------	--

文部科学省「マテリアル先端リサーチインフラ (ARIM)」事業の支援により、2022年2月に電子スピン共鳴装置 (ESR: Electron Spin Resonance) Bruker E580が導入されました。これで機器センターのESRは4台稼働体制になります。E580はCW (Continuous Wave, 連続波) 測定とパルス測定の双方が可能です。現状での周波数帯は、X-band (9.5 GHz) のみになります。既存のCW/パルス分光器 Bruker E680のようにケーブルをつなぎ替えたりボタン操作を行ったりする必要が無いので、ユーザーの負担が減ります。まだ、E580では任意波形発生器 (AWG) やレーザーなどオプション類が整備出来ていないので、光誘起

時間分解測定などの特殊測定には対応していません。ただ、E680のオプション類が共用出来ますので、将来的な移行や拡張に関しては柔軟な対応が可能となります。一番ニーズの多い低温測定に関しては、現在他の分光器のクライオスタットを併用する形で行っておりますが、2022年度中にE580専用のクライオスタットCW測定用 (ESR900型) とパルス測定用 (CF935型) を導入致します。また、低温測定に便利な矩形型共振器も導入予定にしています。

主な仕様は下記の通りです。

【電磁石】磁極の直径は200 mm、磁極間隔は56 mm、最大発生磁場は1.48 T

【ESR分光器】周波数帯X-band (9.2

GHz~9.9 GHz)、CWマイクロ波の最大出力は150 mW、変調周波数は80 Hz~200 kHzで設定可能、パルスTWTアンプ1kW、マイクロ波チャンネルは4チャンネル、磁場設定分解能は5 μ G

【X-band CW用共振器】円筒形共振器。最大試料管径は10 mm、Q値16000 (無負荷時)、光照射実験用の開口部あり

【X-band CW/パルス用共振器】最大試料管径は5 mm、Q値4000 (無負荷時)、デッドタイムは80 ns以下、光照射実験用の開口部あり

【テスラメーター】絶対精度は0.5 μ T、デジタル分解能は0.1 μ T、測定磁場範囲は1.5 kG~15 kG

【測定及び解析PC】LINUX CentOS英

語版、計測・解析ソフトウェアBruker Xepr搭載。また、遠隔操作機能ソフト Team Viewerがインストールされています

電子スピン共鳴は、不対電子を直接観測する分光法です。ラジカル分子や遷移金属イオンなどの電子状態や電子軌道・化学反応・分子構造・光励起状態を調べることが出来ます。通常の測定法である定常法に加えて、パルス法では電子スピンの緩和時間を調べることも出来ます。ESR測定では、強度、 g 値（共鳴磁場）、線幅、スペクトル形状が主に得られる情報量です。強度から電子スピンの数や濃度を見積もることが可能で、スピン状態（基底状態や励起状態に関する情報）や電子状態（磁性、伝導性）、化学反応状態、応用目的では半導体のキャリア濃度、材料の劣化（欠損数）を知ることが出来ます。 g 値から観測しているスピン種の起源の同定が可能となります。線幅や緩和時間は電子スピンのダイナミクスを反映しており、励起スピンの遍歴性（電荷分離状態なのか束縛三重項状態なのか）など動的挙動を理解出来るユニー

クな物理量で物性物理や応用物理では貴重な情報です。磁気双極子相互作用を含む場合、スペクトル形状は、束縛三重項状態でのスピン間距離や分布に関する情報を含有しています。分子構造やタンパク質の構造など、合成化学や生物物理分野での応用に有効な実験手法です。ESR測定で分かることの詳細は、分子研レターズ81号（2020年）42ページ (https://www.ims.ac.jp/publications/letters81/81_18.pdf) にも書いてありますので、ご参照下さい。

分子研の各ESR装置は共同利用機器

として、また文部科学省「マテリアル先端リサーチインフラ（ARIM）」事業の支援設備として公開されています。産官学を含めての利用が可能です。E580分光器のCW測定は施設利用が可能です。パルス測定は原則としてパワーユーザーの利用のみになっていますが、我々スタッフがサポート致しますので、まずは『どのような対象に対し、どういう測定を希望されるか』を、お問い合わせ頂ければと思います。機器センターホームページ (<http://ic.ims.ac.jp/tebiki.html>) をご参照下さい。



施設だより

新装置紹介

「等温滴定型カロリーメーター MicroCal PEAQ-ITC」

機器センター 長尾 春代

共同利用機器として、マルバーン・パナリティカル社製のMicroCal PEAQ-ITCを2021年12月に導入しました（図1）。これまで共同利用されてきたiTC200の後継機種です。同様に所内・所外の方にご利用いただけます。老朽化していたiTC200では煩雑で長時間かかっていた測定が、簡単に短時間で行えるようになりました。

等温滴定型カロリーメーターとは

等温滴定型カロリーメーター (Isothermal Titration Calorimeter) は溶液中の生体分子間の相互作用を解析できる高感度な測定ツールです。温度一定下で2種の分子が混ざり合っていく時の微小な熱変化を測定し、熱力学的パラメータを取得します。ラベル化や固定化が不要でリアルタイムに測定でき、分子

量のサイズに制限もありません。

測定例

タンパク質等の生体高分子とリガンドとの相互作用解析がよく行われています。装置内部に固定されたセル内へタンパク質溶液を充填し、リガンド溶液を一定間隔で数十回に分けて数 μL ずつ滴下していきます（図2）。滴下する

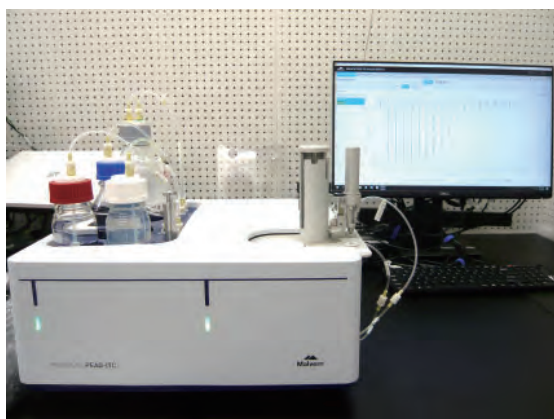


図1 マルバーン・パナリティカル社製のMicroCal PEAQ-ITC

PEAQ-ITC システムの略図

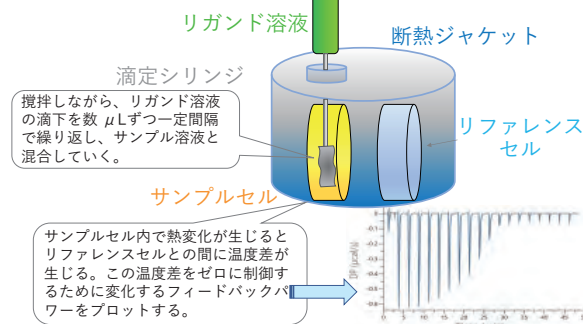


図2

毎に発生する発熱量または吸熱量をプロットしてシグモイド型のサーモグラムを描かせ、熱力学的パラメータ（解離定数 (K_D)、結合モル比 (n)、エンタルピー変化 (ΔH)、エントロピー変化 (ΔS)）を取得します。これらのパラメータから結合比や結合の種類、構造の変化に関する情報を得ることができます。

必要な試料量や測定準備

測定1回分に必要な試料量はセル側 350 μL 、リガンド側 65 μL です。試料濃度の目安はセル側 K_D の5～10倍、リガンド側 K_D の50～100倍、 K_D がわからない場合はセル側 10 μM 、リガンド側 100 μM から始めます。最適な濃度はまずは一度試してみないとわからないのですが、既報を参考にして濃度調整するのが近道です。

また、試料調製ではセル側とリガンド側の溶媒組成を一致させておく必要があります。溶媒同士のミスマッチで混合熱等が強く検出されてしまうと、肝心の相互作用による微小な熱変化を正しく測定できないことが多々あります。

PEAQ-ITCでは使用性が向上

旧機種の iTC200と比較して大きく

改善された点は3つです。①操作説明がムービーになり、②洗浄操作がセミオート化、③データ解析が簡単になりました。

①操作説明がムービーになり、初めてのユーザーでも久しぶりな方でも、操作ボタンをクリックする度に現れるムービーで確認しながら躊躇なく進めることができます。初心者への最初のハードルとなるセルへの試料充填もスムーズになり、貴重な試料のロスが減りました。

②洗浄がセミオート化され、洗浄時間が短くなりました。ポンプ周りのモジュールの改良により洗剤を使用した自動洗浄ができるようになっています。

画面の指示に従ってボタンをクリックしたら10分程待つだけです。十分な洗浄が簡易に行えるようになり、測定の安定性や装置の保守性も向上しています。ただし、セルは断熱ジャケット内に固定され、取り出して洗えないことには変わりありません。セル内から試料を除去できなくなってしまうと高額な修理費用・長期の修理期間がかかりますのでご注意ください。

③データ解析が簡単になりました。フィッティング条件等をリストから選択していくと、熱力学的パラメータや論文用の図等が自動で表示されます(図3)。

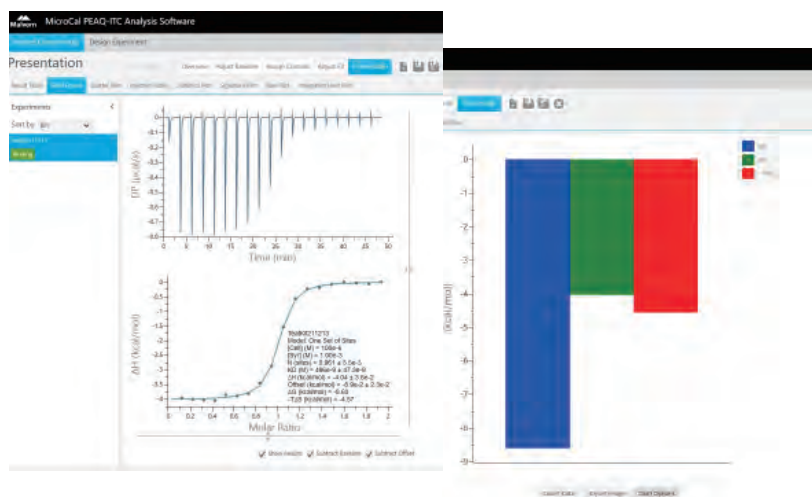


図3

ご利用お待ちしております

前述の測定例の他にも様々な試料を測定できます。殆どの試料溶媒には緩衝液が使われていますが、100%メタノールに溶解させた合成高分子の測定

実績もあります。ご興味を持たれましたら機器センターまでご連絡をお願いします。

施設だより

新装置紹介

「フルカラー 3D プリンター」

技術推進部 松尾 純一

はじめに

装置開発室では2016年^{*1}より3Dプリンターを使った機械部品やタンパク質のような分子模型の製作を行っています。その3Dプリンターを使用する依頼の件数は昨年度で139件と増加傾向にあり、依頼内容も年々高度化しています。例えば機械部品の出力依頼であれば、当初は金属加工を行う前の形状確認用で強度や精度は重視されていませんでしたが、最近は実用されることが多く強度や精度が求められるようになりました。また、分子模型の製作依頼では当初、数十残基の小さなタンパク質を単色のリボンモデルで製作するといったものが、現在では数万残基の巨大タンパク質複合体の表面形状に側鎖の分子を表現したフルカラー模型などが依頼されるようになりました。そのような状況を受け装置開発室にフルカラーで複雑な造形に対応した3Dプ

リンター、ミマキエンジニアリング社製3DUJ-2207(図.1)を2021年度に導入しました。以下に特徴などを説明します。

造形方式

このプリンターはUV硬化インクジェット方式を採用しており、UV硬化樹脂をヘッドから噴射し1層ごとにUV-LEDランプにて硬化させて積み重ねることで立体物を造形します。積層ピッチは標準で28 μm 、プリント解像度は1200 dpiです。使用するUV硬化樹脂(インク)はモデル材インクとサポート材インクの2種類があります。モデル材インクはCyan、Magenta、Yellow、Black、Clear、Whiteの6色があり、この中でWhiteとClearの



図1 3DUJ-2207

どちらかで基本形状が作られます。そして、その上にCyan、Magenta、Yellow、Blackの透明樹脂を重ねることで着色が行われます(図.3)。この仕組みのおかげで透明もしくは半透明な造形が可能となるため、図.4のような結晶面を表現した結晶模型などが製作可能です。

一方、サポート材インクは造形物の



図2 造形中の様子

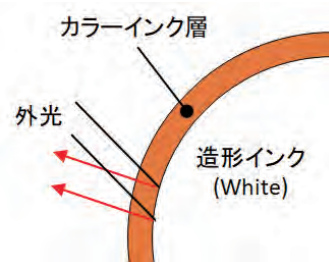
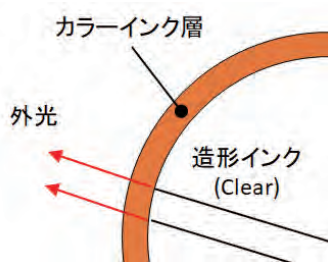


図3 着色イメージ

下面や横面に付与され造形物の支持材として出力されます（図.5左）。造形後は不要となりますので手である程度取り除いた後、超音波洗浄などを行うことできれいに取り除きます。

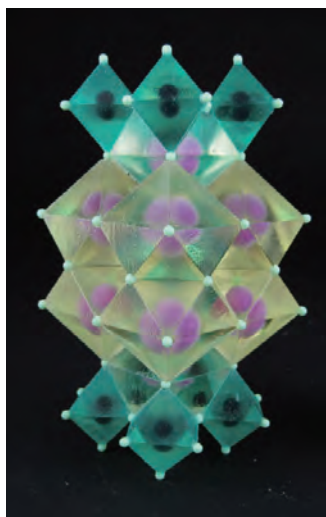


図4 結晶模型

造形サイズ

造形領域は縦203mm×横203mm×高さ76mmです。ただ、サポートの大きさも含まれますので造形物自体の大きさは縦200mm×横200mm×高さ70mm程度になります。それよりも大きなものを製作する場合には分割して出力したものを組み合わせます（図.5）。

おわりに

ミマキエンジニアリング社製のフルカラー3Dプリンター3DUJ-2207を導入しました。研究対象の分子やタンパク質の大型化が進む昨今、CGでは解りにくいそれらの長大で複雑な形状を模型にして考察するなど、今後分子科学研究を多角的にすすめる場面で活躍する造形物の製作に貢献していきます。

*1 https://www.ims.ac.jp/publications/letters74/74_20.pdf



図5 72 mm×86 mm×59 mmと72 mm×79 mm×42 mmのパーツを組み合わせ、89 mm×76 mm×86 mmの模型を作成

ネットワーク

ORION2022における認証と端末セキュリティ

計算科学研究センター／岡崎情報ネットワーク管理室 大野 人侍

岡崎情報ネットワーク管理室が整備・運用する岡崎3機関ネットワークシステムORION2022が本年度より運用開始しました。ORION2022はSINET6との接続が100Gbpsとなりネットワーク上での共同利用・研究により寄与する事ができるようになった他、無線ネットワークが最新規格であるWi-Fi6に対応するなど多数の特徴があります。その中で今回は、影響の大きい認証と端末セキュリティについて紹介します。

はじめに、認証と端末セキュリティの導入背景について簡単な説明をします。近年、DXやクラウドファーストが推進される中、COVID-19パンデミッ

ク対応策としてリモートワークの導入が急速に進みました。多くの組織で業務のデジタル化やクラウド化が急務となり、場所にとらわれないシステム利用環境の構築や、サイバー空間へのより強い依存が生まれ、さらにはゼロトラストへの対応（後述）という課題の解決も必要となりました。

サイバー空間への依存が高まった時、重要なのは認証と端末セキュリティです。認証は、「サイバー空間における「あなたは誰か」」を証明する事です。インターネットショッピングや実店舗での電子決済など、本当に「あなた自身」が行っているのかを検証するためには、本人確認性（否認防止性）の高い

認証が必須であり、ID/PWのみに頼る従来の認証が如何に危ういかわかります。そのため、ORION2022ではID/PWより確実に強固なMFA（Multi-Factor Authentication）と呼ばれる認証方式を採用しました。これは、スマートフォン上のOTPソフトウェアトークンとFIDOハードウェアトークンを使用する方式で、いずれも、ID/PWという「本人のみが知っている」（記憶）とトークンという「本人だけが持っている」（所有）を組み合わせ強固な本人認証が行えます。特に、FIDOは標準として、Windows HelloやTouch/Face IDなども認証に使用でき便利です。クラウドサービスを中心に認証がMFAに

移行している中での導入となります。

しかし、MFAの導入だけで安全・安心と言えるでしょうか。リモートワークしている端末やGoogle Workspaceの通信は暗号化されており、また、必ずしも岡崎3機関ネットワークORIONを経由しないため、岡崎に設置されているセキュリティ機器では守れません。そこで、「全てを信用せず、必要な時に必要な認証を行いその結果に基づき情報資産を使用させる。」というゼロトラストという考えが出てきます。そもそも情報を処理する端末が脆弱なら、サービス側のセキュリティや認証がしっかりと管理されていても、端末からインシデントが発生してしまいます。「安全な端末で本人確認性の高い認証で認証したユーザにサービスを

利用してもらう。」という事が大切となります。

端末セキュリティを担保するためにFortiEDRとFortiClientという2つのソフトウェアを導入しました。FortiEDRは、これまで岡崎3機関内で配布していたセキュリティソフト ESET に替わるもので「軽い動作」「インシデント発生時など管理者の情報収集作業の補助機能の充実」という特徴があり、巨大なパターンファイルに依存しない機械学習型検知システムによって、端末に負担をかけず、未知の攻撃にも対応できる可能性が期待できます。次にVPNを行うFortiClientですが、付加機能として端末にインストールされているソフトウェアの脆弱性を検知し修正方法をアドバイスしてくれる機能も付い

ています。この2つのソフトウェアは、FortiEDRが端末の外部からの脅威に対応し、FortiClientは端末内部の脅威に対応するという相補的な関係にありますので、分子研所内の端末には是非、2つのソフトウェアの導入を行ってください。

ここまで、導入背景と認証と端末セキュリティに関する簡単な紹介をさせていただきました。本稿がORION2022の認証と端末セキュリティの利用について理解の一助になれば幸いです。

最後に、岡崎情報ネットワーク管理室では、ポータルサイト“<https://info.oico.orion.ac.jp/>”で各種情報を発信しています。是非、ご活用ください。

共同利用・共同研究に関わる各種お知らせ

共同研究専門委員会よりお知らせ

共同利用研究の実施状況（採択件数）について

種 別	2016年度	2017年度	2018年度	2019年度	2020年度	2021年度	2022年度 (5月31日現在)
課題研究	4	2	4	2	2	2	4
協力研究	82	73	45	37	53	47	36
協力研究（マテリアル） ^(注3)	57	64	81	69	44	66	10
協力研究 (NMRプラットフォーム) ^(注4)	-	-	-	-	-	3	-
分子研研究会	7	9	10	7	4	4	1
若手研究活動支援	1	2	1	2	1	2	1
岡崎コンファレンス	3	0	1	2	0	0	0
計	147	150	142	119	104	124	52

(注1) 課題研究・協力研究の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2) 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3) 2021年度まで「協力研究（ナノテクノロジープラットフォーム）」の件数。

(注4) 協力研究（NMRプラットフォーム）は2021年7月1日から2022年3月31日まで実施。

分子研研究会

開 催 日 時	研 究 会 名	提 案 代 表 者	参加人数
2022年2月28日～3月1日	アト秒レーザー科学研究施設（ALFA）計画の現状と展望	山内 薫（東京大学大学院理学系研究科）	96名
2022年3月8日	エネルギー科学の最前線：階層横断的な理解に向けて	中村 敏和（分子科学研究所）	192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9月7日, 9月9日, 11月8日～11月17日	キラル物質に特有なスピン輸送現象の探究	鈴木 裕太（東京大学大学院理学系研究科）	11名

運営会議よりお知らせ

分子科学研究所では、分子科学分野コミュニティに開かれた運営を行っていくため、所長の下に、所内10名、所外10名の委員からなる運営会議が設置されています。所外委員は、関連学会（分子科学会、日本化学会、日本物理学会、錯体化学会、日本放射光学会、日本生物物理学会）から推薦を受けた委員による学会等連絡会議において選考されます。所外委員には1期2年の任期で原則2期4年をお願いしており、2022年度は下記のとおり半数が交代になりました。

運営会議では、研究教育職員の人事および共同利用・共同研究等の研究所を運営する上で重要な事項を審議します。また、運営会議は、自然科学研究機構・機関長選考委員会（所長選考委員会）からの依頼を受け、次期所長候補者の選考も行います。人事および共同利用・共同研究等の審議のため、運営会議の下に人事選考部会と共同研究専門委員会が置かれています。運営会議委員により構成される人事選考部会（所内および所外各5名の合計10名）で審議・決定された事項は運営会議での決定事項として扱われるため、改めて審議する必要がありません。一方、運営会議委員以外も委員となり得る共同研究専門委員会（所内6名、所外6名の合計12名）での審議事項については、従来、運営会議においても審議しておりました。しかし、迅速かつ効率的な運用を図るため、共同利用研究の採否は電子メールによる審議・承認へと2018年度に変更されました。2022年度の運営会議長、人事選考部会長、共同研究専門委員長については、所内教授の秋山（継続）、石崎（新規）、魚住（継続）が務めております。また、運営会議所外委員の村越教授には運営会議副議長をお願いしております。

2022年度～2025年度運営会議 所外委員（新規） *印は人事選考部会委員（以下同様）

岩佐 義宏 東京大学大学院工学系研究科 教授
高橋 聡 東北大学多元物質科学研究所 教授
唯 美津木 名古屋大学大学院理学研究科 教授
真船 文隆 東京大学大学院総合文化研究科 教授
*吉澤 一成 九州大学先端物質化学研究所 教授

2020年度～2023年度運営会議 所外委員（2期目）

*秋吉 一成 京都大学大学院工学研究科 教授
*忍久保 洋 名古屋大学大学院工学研究科 教授
*芳賀 正明 中央大学理工学部 名誉教授
*福井 賢一 大阪大学大学院基礎工学研究科 教授
村越 敬 北海道大学理学研究院 教授

以下は退任された運営会議所外委員の方々です。これまでの多大なご支援、ご協力に感謝いたします。今後ともよろしくお願いいたします。

2018年度～2021年度運営会議 所外委員

*鹿野田一司 東京大学大学院工学系研究科 教授（分子研レターズ70号で執筆：レターズ欄）
袖岡 幹子 理化学研究所・袖岡有機合成化学研究室 主任研究員
谷村 吉隆 京都大学大学院理学研究科 教授（分子研レターズ65号で執筆：レターズ欄）
*中井 浩巳 早稲田大学理工学術院 教授
藤井 正明 東京工業大学科学技術創成研究院 教授（分子研レターズ65号で執筆：関連学協会等の動き）

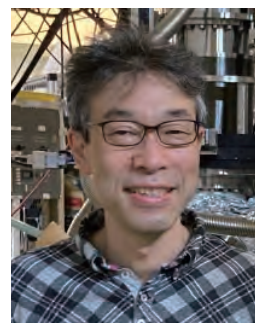
運営に関わって

奥田 太一

広島大学放射光
科学研究センター
教授

UV(Hi)SOR のふり見て

おくだ・たいち／大阪大学基礎工学研究科博士課程物理専攻終了後、理化学研究所表面工学研究室基礎科学特別研究員、その後東大物性研軌道放射放射性研究施設つくば分室助手・助教、その間文科省在外研究員制度にてスイスチューリヒ大学物理研究所に1年滞在しSLSでスピン分解光電子分光装置の立ち上げに参加、2009年より広島大学放射光科学研究センター准教授を経て現職。専門は表面界面電子状態のスピン・角度分解光電子分光による研究およびその装置開発。



どういう経緯で私にお声がかかったのかはわかりませんが、2018年度から2021年度まで2期4年間にわたりUVSORの運営委員を務めさせていただく機会をいただきました。実は私は学生の頃は田無のSOR-ringとKEK-PFを利用し、その後PFの物性研つくば分室、さらにHiSORに職を得たため、所属施設とエネルギー的にオーバーラップの大きいUVSORを利用する必要性があまりなかったこともあり、UVSORで実際に実験をしたことは一度もありません。そのためユーザー目線でのUVSOR運営に対する注文や提言などは期待されていなかったのではと思いますが、UVSORと似たエネルギー領域のHiSORでのアクティビティがUVSOR運営のヒントになるのでは？ということで抜擢されたのかもしれません。ということで本来はUVSOR運営に活かすことのできるようなHiSOR運営における良い点を見つけて提言をすべきだったのかもしれませんが、思い返してみると運営員会ではUVSORの運営においてHiSORと違う点を見つけては、それがなぜなのかということに興味を持ち、HiSORの運営にも活かさないかというような観点からの質問ばかりしていて、ほとんど気の利いた提言などはできなかったように思います。今更ながら反省しております。着任当初は、東岡崎の駅からも近く閑静な住宅街の中にある恵まれた立地の分子研へ2、3度は伺うことができたが、その後はCOVID-19の影響でオンラインでの開催が任期満了まで続いたため、東岡崎駅周りの食事処などを十分楽しむことな

どができなかったことは少し心残りです。

さて、上述したようにUVSORはエネルギー領域はHiSORと似通っており、目指すサイエンスも自ずとオーバーラップする部分も多いわけですが、光源性能的には2度のアップグレードに成功し、低エネルギー光源として世界的にみてもトップレベルの性能を誇り、HiSORとは比べ物にならないくらいの高水準な放射光を得ることができるようになっています。特別大型の予算を使わずに近場にあるあいちシンクロトロンともうまく共存しつつ首尾よくアップグレードされたやり方はHiSORでも大いに参考にしたいところです。また直線部も充実しておりHiSORの2本に対し、UVSORには6本ものアンジュレータビームラインがあり、放射光リングや挿入光源をオペレートする技術職員の数も多く、大変充実した研究環境に思えます。加えてFEL実験や光渦の生成など新しい光源技術の開発も積極的に行われており、素晴らしい成果をあげられています。

このようにわれわれHiSORのスタッフから見ると非常に羨ましい研究環境を有しているのですが、やや不思議なのはUVSORのユーザーは割と昔ながらの固定客が多く、あまり新規ユーザーの広がりが無いように見える点です。またUVSORとHiSORの両方にまたがって利用するユーザーも少ないように思われます。よく言えば住み分けがうまくできているとも言えますが、逆に言うと日本にいる真空紫外光ユーザーを取り合った結果にも見えます。新規ユーザーを増やすことは我々HiSORにとっても課題ですが、施設スタッフが積極的に共同研究

を持ちかけることなどをきっかけとして潜在放射光ユーザーを新規開拓していく努力が必要かもしれません。

またHiSORに比べるとUVSORは海外からのユーザーが少ない印象も受けます。これも私から見ると大変不思議であり、もったいないに思われます。われわれHiSORにも言えることですが、VUVを得意とする低エネルギー光源は世界的に見ても希少になってきていますので、よい成果を上げ真空紫外光の有用性を積極的に国際会議などでアピールしてビームラインの宣伝を行ったり、英語ウェブページの充実を図りリソースを積極的に発信することで海外ユーザーの増加は難しくないのではないのでしょうか？(HiSORの海外ユーザーに聞くと、研究に必要な時間や旅費は大したハードルではないと言います。加えて観光の面でも日本に来たいという外国人は意外に多いようです)

一方で、UVSORでは若い施設長を中心として次期計画実現に向けた活動を着々と進められており、また国内初の装置の導入や実験方法の独自の工夫などを積極的に行うなど、魅力的な低エネルギー光源施設へと着実な進化を続けられており、HiSORとしても大いに見習いたいところです。今後はこれを機会に両施設の交流を深め、低エネルギー光源として良い意味でUVSORはHiSORのふり見て、HiSORはUVSORのふり見て、お互いに切磋琢磨し各施設が独自の得意分野を発展させ、両施設がますます発展していくことを願っています。

最後になりましたが、4年間どうもありがとうございました。

運営に関わって

古川 貢

新潟大学 研究推進機構
共用設備基盤センター
准教授

研究設備で繋がる分子研と大学

ふるかわ こう／大阪市立大学大学院理学研究科物質分子科学専攻後期博士課程修了(2001年)、分子科学研究所 助教を経て、2012年より現職。専門は物理化学、磁気共鳴(特に電子スピン共鳴)、特に機能性物質のメカニズム解明研究を展開。近年は、機能性物質に加え新潟県産コシヒカリなどの植物性食品もターゲットとしている。



分子科学研究2019-2021年度に客員准教授、2018-2021年度(2期、4年)に機器センター運営委員を務めさせていただきました。私が助教として分子研に在籍していた時期から9年が経過しましたが、立場を変え、違った角度から分子研に関わらせていただけたことをとてもうれしく、感謝しています。私にとって分子研は、大学の日常の業務から解放され、落ち着いた雰囲気の中で研究に没頭できる“特別な空間(組織)”です。客員准教授として採択していただき、この“特別な空間”を発展させるために、微力ながら尽力させていただけるのは身の引き締まる思いでした。在任期間は、コロナ禍の真っ只中で、世界的にオンライン会議が普及し、出張や会議のあり方が少し変わる時期でもあり、すべての教授会がオンラインで開催されました。大学を離れられなくとも教授会には参加は叶うのですが、特別な雰囲気を存分に味わうことができず残念でした。しかしながら、オンライン会議とはいえ、参加する皆様が分子研の将来を考え、真摯に議論している教授会の雰囲気はとても刺激になりました。

一方、機器センターは助教在籍時からお世話になっており、発展のための恩返しはやぶさかではありません。特に、機器センターで展開しているナノテクノロジープラットフォーム事業や大学連携研究設備NWは、大学の研究を支援する重要な役割を担っており、私の機器センター運営委員としての仕

事は、①大学からの利用者の審査、②利用の意見を機器センターに反映させることだったと思っています。審査という点では、2021年度で、約15件程度の施設利用の審査を行いました。最初にも述べましたが、コロナ禍という事情を考えると、かなり多い数字と思われるかもしれません。コロナ禍の状況下であっても、分子研で研究をする研究者が多くいたことを示しており、共同利用機関としての役割を果たしていることの表れと言えるでしょう。この役割を果たすためには、最先端の研究設備とそれらを管理・運用する技術職員を併せて整備できていることがポイントだと思います。使ったことが無い設備を他機関に利用しに行くのは、利用する側からすれば精神的なハードルがあります。設備のことがよくわからないから、躊躇してしまうという話はよく聞きます。それらを埋めてくれる技術職員の方の存在は頼もしく重要です。大学では、最先端研究設備を導入するための予算確保は難しい問題です。大学におけるすべての研究を支援することを想定すると、広範な研究分野の設備を導入する必要があります。利用者数が限られた先端的な研究設備に大きな予算を割くことが困難になります。この状況の中で先端設備を活用した研究を展開していくためには、分子研のような共同利用機関で研究を遂行することを検討するしかありません。一利用者としては、様々な研究に対応できるように、特殊なオプションを含めた先端設

備の継続的に整備してほしいと思います。

現在、分子研の機器センターでは利用料金を徴収することなく最先端研究設備を利用することができる上に、旅費まで支給されており、利用者にとっても手厚く、ありがたい仕組みです。それにも拘わらず、大学の研究者と設備の話をする際に、「大学連携研究設備ネットワーク」や分子研の話をして知らない研究者も少なからず存在します。これをいかに周知し、裾野を広げていくかが、大学と分子研とをつなぐ私のような存在の課題だと痛感しています。ただ、利用者が急増した場合に、設備を維持し、老朽化した設備を更新し、技術職員の協力を得つつこの仕組みを維持できるのか?という予算規模の問題はあるとは思いますが、もし問題が出てきた場合には、是非とも最先端設備、優秀な技術職員を併せた“特別な空間”を維持・発展することを最優先させた運営に努めていただきたいと思います。

規模は異なれ、分子研と同じ思想を持った組織が増えることが、科学の発展につながると信じています。機器センターの運営をモデルとして、大学における大型・中型設備の管理・運用を行うセンターを運営していき、分子研と共に分子科学研究の発展に貢献できればと思います。



新しくなったクリーンルームの紹介

装置開発ユニット 高田 紀子

たかだ・のりこ／東京農工大学大学院 農学研究科 応用生命化学専攻 修士課程を修了後、民間企業を経て、2009年2月より現職。リソグラフィによる微細加工とクリーンルームの管理を担当しています。大学では糖鎖の研究を、民間企業ではカーボンナノチューブの表面処理や分析業務を行っていました。青森県出身。

リソグラフィは半導体デバイスの製造プロセスとして発展してきた技術の一つで、レジストを塗布した基板上に、光や電子線を使ってマイクロ・ナノレベルの微細なパターンを描画します。分子科学研究所では、金属薄膜の成膜と組み合わせることによる微細な電極パターンや、PDMS（ポリジメチルシロキサン：シリコン系のポリマー）樹脂で成型することによるマイクロ流路等を製作しています（図1 (a) (b)）。最近では、溶液中で金属を溶かすウェットエッチングという手法を使って、金属箔に数十～数百マイクロメートルの大きさの貫通形状をパターンニングするといった製作例も増えてきました（図1 (c)）。蒸着用マスクや光学実験用スリットとして使用されています。できるだけ均一な寸法精度で貫通形状を仕上げるために、金属箔の両面にレジストパターンをアライメントしながら製作する等の工夫を行っています。製作依頼に関しては所内から受けることが多いですが、所外からでも、文部科学

省のマテリアル先端リサーチインフラ事業を通して、主に施設利用として利用することが可能です。

クリーンルーム内には、ホワイトの照明の部屋（広さ約120 m²）とイエローの照明の部屋（広さ約80 m²）とがあり（図2）、クリーン度はクラス100（粒径 $\geq 0.5 \mu\text{m}$ の粒子数が100個/ft³（米国連邦規格209D））以下を維持しています。このクリーンルームは、2019年度の施設改修に伴い新たに設置されたもので、これまで別々の部屋に分散していたリソグラフィ関連設備が1か所に集約されました。サンプルをクリーンルームの外に持ち出すことなく製作作業を完了できるため（例外もありますが）、作業性がとても良くなりました。クリーンルーム内には、電子ビーム描画装置やマスクレス露光装置、スパッタ装置等のリソグラフィ関連設備や、段差計やマイクロスコプ等の観察・測定装置が並んでいます。これらを使って、研究者からの製作依頼を受けて実験に使用するデバイスの

製作や、自身で製作される方への技術的サポートを行っています。それに加え、クリーン度の維持と、安全で使いやすい実験環境の整備も重要な業務の一つとして担っています。

ここでは、新たに設置されたクリーンルーム（「新クリーンルーム」と呼ばせていただきます）の特徴と、これまでの変遷についてご紹介したいと思います。

新クリーンルームの大きな特徴の一つに、クリーンルーム内の気流の方式が「水平層流方式」に基づいていることが挙げられます。図3に示すように、クリーン度クラス100を達成するには、気流を乱流ではなく一方向に揃える「単一方向流」にする必要があるといわれています。単一方向流の方式には「垂直層流方式」と「水平層流方式」の2種類がありますが、天井全面に敷き詰めたフィルタから床下全面に向けて気流を作る「垂直層流方式」のクリーンルームを多く見かける一方で、新クリーンルームでは、壁一面にフィルタを並

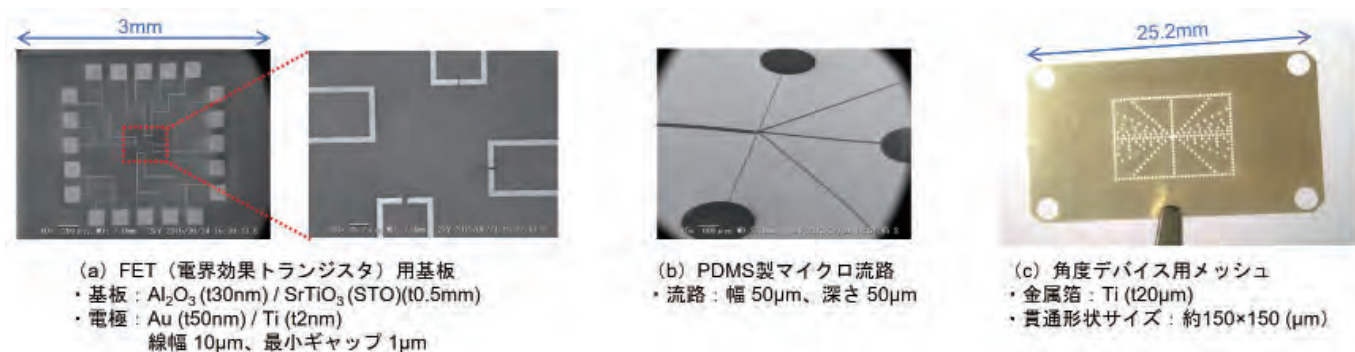


図1 製作例

べ、そこから水平一方向にクリーンルーム内に気流を作る「水平層流方式」を採用しました。そうすることで、「垂直層流方式」と比較して、施工コストやランニングコストを抑えることが可能となります。ただし、「水平層流方式」では、上流の発塵が下流に影響を及ぼすことがありますので、クリーンルーム内の設備や機器の配置には注意が必要です。

新クリーンルームのもう一つの特徴が、同じ装置開発ユニットのメンバーにより、自前で管理の遠隔化を図っていることです（図4）。例えば、クリーンルーム内外の差圧をリアルタイムでモニタするシステムを構築し、屋外との間に設置している粗塵フィルタの交換時期の目安にしています。安全面では、閉鎖空間における事故の早期発見のため、危険な試薬を扱う可能性があるドラフトチャンバーの近くに緊急ボタンとカメラを設置し、スタッフの居室から確認できるようにしています。他にも色々ありますが、中でも

私が特に便利だと感じていることを二つ紹介します。一つは、ガスボンベの残量が少なくなるとランプと音声で通知するシステムが構築されたことです。そうすることで、居室にいながらガスボンベの交換時期を知ることができるようになりました。もう一つは、金属薄膜を成膜するスパッタ装置にカメラを設置することで、現在セットされているターゲットの種類とチャンバー内の真空度を居室から確認できるようになったことです。クリーンルームに入るにはどうしてもクリーンウェアに着替える必要がありますので、居室にいながら確認できるというのはそれだけで時間短縮につながり、非常に助かっています。装置開発ユニットには、電子回路やプログラミング、機械加工やCADに長けたメンバーが揃っているからこそ実現できたのだと実感しています。

装置開発ユニットの職員が配属されている装置開発室は歴史がとても長く、1975年、分子科学研究所の設

立と同時に設置されました。もともとは機械加工と電子回路を主としており、現在でも機械加工だけで年間250件程度の製作依頼に対応するため、工作室では旋盤やフライス盤等の工作機械が休むことなく動いています。そんな装置開発室がリソグラフィに関わり始めたのは、私の採用からおおよそ1年後の2010年頃でした。当時、装置開発室長を兼任されていた宇理須恒雄教授の研究グループでは、リソグラフィを使って細胞パターンニング用の基板を試作していましたが、形状や製作プロセスの試行錯誤を繰り返す中で技術的な支援が必要になったことがきっかけでした。空調も付いていない小さなクリーンブースの中で、汗だくで作業していたことが懐かしく思い出されます。この技術支援を通じて、私はリソグラフィの基礎の基礎を教わり身につけることができました。2010年度末で宇理須教授が退官され、リソグラフィ関連設備が装置開発室に移管されました。2013年度には空調機付きの少し大き



図2 クリーンルームの写真

気流方式	単一方向流方式		非単一方向流方式
	垂直層流方式 Vertical Laminar Airflow Clean Room	水平層流方式 Horizontal Laminar Airflow Clean Room	乱流方式 Turbulent Airflow Clean Room
清浄度	ISOクラス3~5 (クラス1~100)	ISOクラス5(クラス100)	ISOクラス6~8 (クラス1,000~100,000)
稼働時の清浄度	作業者からの影響は少ない	上流の発塵が下流に影響する	作業者からの影響がある
ランニングコスト	高	中	低
レイアウト変更	容易	困難	容易
製造装置のメンテナンス	ルーム内又はリターンスペースから行う	ルーム内又はリターンスペースから行う	ルーム内から行う
将来の増設	困難	困難	やや困難
高精度空調	ルーム全体制御のためやや不均衡有	上流の発熱が下流に影響する	不均衡有
気流の流れ			

図3 クリーンルーム内における気流の方式
(日本エアテック（株）カタログより参照）

いクリーンルームが旧化学試料棟に設置され、間もなくして、現在の主要装置の一つであるマスクレス露光装置が導入されました。クリーンルームの引越に関しては、当時技術課長であった鈴木光一氏に大変お世話になりました。また、新しい設備や機器の選定に関しては、現在の装置開発室長である山本浩史教授に多くのご助言をいただいています。その後、2015年度にスパッタ装置が、2018年度には電子ビーム描画装置が新たに導入され現在に至ります。リソグラフィを主業務とするメンバーも、私を含め3名に増えました。新クリーンルームは、これまでのものより何倍も広くクリーン度も飛躍的に向上したので、維持管理だけでも作業量がとても多いですし、私1人で

は気づかないことも多々あります。それぞれのメンバーが自分の仕事としてクリーンルームやリソグラフィに愛着をもち、よりよくしていこうという思いがしっかりとあることがとても心強く、私一人で行うよりも格段に良いクリーンルームが維持できていると感じます。実際、今のクリーンルームで製作するサンプルは、これまでよりもゴミの付着が少なくとてもきれいで、環境による影響は大きいと実感しているところです。

全国の大学や研究機関にも同じようなクリーンルームはたくさんあり、設置されている設備や機器がより充実しているところも多く存在します。そのような中で私たちの特徴は何かと考えたとき、リソグラフィだけでなく、機

械加工や電子回路等多方面からサポートできる点が挙げられると思います。リソグラフィだけでは基本的に基板しか製作できませんが、例えば、それを保持するためのホルダーや、成型したPDMS樹脂を指定の大きさにくり抜くためのポンチ等は機械加工により製作することができます。リソグラフィの工程においても、ドリルによる穴あけ加工を組み合わせることで、基板のオモテ面とウラ面にアライメントさせたレジストパターンの製作が可能になる等、加工の自由度が大きく広がります。このような装置開発室の特徴を活かしながら、これからも研究に役立つデバイス製作に貢献していく所存です。



図4 クリーンルーム内の状況をリアルタイムでモニタしている
上2段：各箇所に設置されたカメラの画像
下左：差圧・温度・湿度、下中：パーティクル量、下右：ノイズ

E V E N T R E P O R T

オープンキャンパス2022（大学院説明会・体験入学説明会）

担当教員 2022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 瀬川泰知

令和4年6月4日（土）、Zoomを用いたオンライン形式で分子研オープンキャンパスを開催しました。COVID-19の影響で令和2年度からオンラインで行っており、今年度は現地開催も不可能ではない情勢ではありましたが、オンライン化によって入学を検討する参加者の割合が増えたこと、全国どこからでも参加できるメリットが大きいことから、今年もオンラインとしました。

まずは周知が必要と考え、分子研Twitterの活用や所員へのretweetのお願い、ポータルサイト（chemstation.com、tayo.jp）への出稿などを通じて広報活動を1ヶ月間行い

ました。結果として、北は北大から南は九大まで、過去2年間を上回る34名の参加登録がありました。が、登録時のアンケート「分子研オープンキャンパスを知った経緯」への回答は「分子研HP」「分子研の先生の講義」「所属研究室のスタッフから」がほとんどであり、短期的な広報だけではなく長期的に認知度を上げていく必要があると感じました。

当日は午前10時に開始し、所長と大学院委員長による分子研・総研大の説明ののち研究室紹介を各5分で行いました。事前に撮影した5分動画の提出もOKとしましたが、リアルタイムでの説明を選択される先

生方が多く、ライブ感のある研究室紹介となりました。

午後はブレイクアウトルームを使用したラボツアーを行いました。前回参加者の「質問時間がもっと欲しかった」との意見を参考に、5研究室並列の3回制（1研究室50分）、かつ希望する学生がいれば追加対応可、としました。「ブレイクアウトルーム内ではカメラON」をお願いしたこともあり、実際に研究室見学に来たような臨場感があったかと。説明時間後に残って質問をしていた学生が見受けられたので、目当ての研究室が明確にある学生にとっては良かったと思う一方で、登録時の「興



E V E N T R E P O R T

味のある研究室」で分野をまたがって多数選択する学生が予想よりも多かったため、最大3研究室にしか参加できない今回の形式には改善の余地があったかもしれません。

オープンキャンパス参加者のうち見学・体験入学申込者は6名(7月1日現在)でした。見学をもっと気

軽にできるように、日程と行程が決まったラボツアーをあらかじめ設定しておくなど、今後さらに検討する余地はあるかと思います。

不慣れな進行でいろいろとバタバタしてしまいましたが、参加された先生方のご協力により大きな問題なく進行できました。また総研大担当

秘書の田中さんには準備から当日の配信まで全てサポートいただきました。ポスターやスライドは広報の原田さんに作成いただきました。この場を借りて御礼申し上げます。

分子科学研究所体験入学

担当教員 2022年度担当教員

総合研究大学院大学 物理科学研究科 機能分子科学専攻 准教授 南谷英美

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に体験入学を実施しています。2019年度までは、例年8月に参加者に一斉に体験入学をしてもらう形式でしたが、2020年度からは、新型コロナウイルス感染症対策のため、体験入学説明会はオンラインで開催し、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。昨年度(2021年度)の参加者は合計

33名でした(うち1名は2回参加されています)。2022年度も、オンラインでの説明会開催と、通年の個別受け入れの方式を継続しています。今年度の募集要項につきましては、Webページ上で公開しております(<https://www.ims.ac.jp/education/event.html>)。

また、6月4日に開催されたオンラインでのオープンキャンパスでも第1回の体験入学説明会を行いました。通年での体験入学という柔軟性

の高い方式を活かし、各自が自分の好きな時期に分子研を訪問できることで、興味や関心を持つ学生さんが増えればと思います。小林玄器先生と奥村久士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12月および3月総合研究大学院大学修了学生及び学位論文名

専攻	氏名	博士論文名	付記する専攻分野	授与年月日
構造分子科学	佐久間航也	Theoretical and experimental studies for de novo design of "difficult-to-describe" all- α protein structures	理 学	2021.12.31
	三本 斉也	State-selective stabilization of adenosine A _{2A} receptor by de novo design of protein structures	理 学	2022.3.24
	宮澤 和久	クマムシ特有の分泌型熱安定性タンパク質の分子動力学シミュレーション	理 学	2022.3.24
機能分子科学	新見 涼子	両親媒性ポリマー担持銀、パラジウム触媒を用いた環境調和性の高い水中有機分子変換反応の開発：カルボニル選択的水素化反応、Cyanide-free シアノ化反応、ニトリルの水和反応	理 学	2022.3.24

総合研究大学院大学2022年度(4月入学)新入生紹介

専攻	氏名	所 属	研究テーマ
構造分子科学	西野 史	光分子科学研究領域	スピン分解光電子運動量顕微鏡を用いたキラリティ誘導スピン選択性の原理解明
	楠本 恵子	物質分子科学研究領域	H- インターカレーション材料の創製と物性・機能開拓
	廣田 宗士	生命・錯体分子科学研究領域	高い結晶性を有する三次元有機共有結合構造体の合成
	渡邊 幸佑	生命・錯体分子科学研究領域	三次元 π 共役構造をもつ有機構造体の合成
	吉田 瑠	生命・錯体分子科学研究領域	キラリティをもつ三次元等方性有機構造体の合成
	大多和克紀	生命創成探究センター	分子動力学シミュレーションによる病気の原因物質研究
機能分子科学	望月 達人	物質分子科学研究領域	ナノ近接場非線形分光法による界面分子計測
	吉澤 龍	物質分子科学研究領域	非線形分光計測による界面接合プロセスの原子レベル学理構築と高度化
	金 成翔	物質分子科学研究領域	非線形分光法による電気化学ナノ界面機能化学の研究
	服部 修佑	生命・錯体分子科学研究領域	新規光触媒の創製研究

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132回	2022年6月10日	量子コンピュータ～開発者が明かすしくみと可能性～	武田 俊太郎 准教授（東京大学）

■分子研コロキウム

回	開催日時	講演題目	講演者
第956回	2022年6月28日	Quantum Technology at 100 Billionths of a Degree Above Absolute Zero	Prof. Dana Anderson (JILA fellow/UC Boulder ColdQuanta, Inc. CTO(Founder and the first CEO))
第957回	2022年7月12日	金属-有機構造体 (MOF) の融解とガラス化、およびその機能	堀毛 悟史 准教授（京都大学）
第958回	2022年8月1日	Dynamic and thermodynamic performance bounds for collective motor-driven transport	Assoc. Prof. David Sivak (Simon Fraser University)
第959回	2022年8月2日	臨界現象とスケリング：切り紙の伸長から滴の融合・分離まで	奥村 剛 教授（お茶の水女子大学）

■人事異動（2021年11月2日～2022年6月1日）

異動年月日	氏名	区分	異動後の所属・職名	現（旧）の所属・職名	備考
2021/11/16	松井 文彦	昇任	極端紫外光研究施設光物性測定器開発研究部門 教授	極端紫外光研究施設電子ビーム制御研究部門 主任研究員	
2021/11/30	三輪 邦之	辞職	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第二研究部門 助教	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 特任助教	
2021/12/1	三輪 邦之	採用	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第二研究部門 助教	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 特任助教	
2021/12/1	近藤 直範	昇任	技術推進部光技術ユニット 主任技術員	技術推進部光技術ユニット 技術員	
2021/12/1	手島 史綱	昇任	技術推進部光技術ユニット 主任技術員	技術推進部光技術ユニット 技術員	
2021/12/1	上田 正	昇任	技術推進部機器分析ユニット 主任技術員	技術推進部機器分析ユニット 技術員	
2021/12/1	CHAUHAN, Vikas Singh	採用	光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 特任研究員		
2021/12/1	YOUSSEF, Hassan Ahmed Esraa	採用	生命創成探究センター極限環境生命探査室 技術支援員		
2021/12/15	近藤 直子	辞職		技術推進部 事務支援員	
2022/1/31	大東 琢治	辞職	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光実験施設 准教授	極端紫外光研究施設電子ビーム制御研究部門 助教	
2022/2/1	大東 琢治	採用	極端紫外光研究施設電子ビーム制御研究部門 准教授（クロスアポイントメント）	（高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光実験施設 准教授）	
2022/2/16	大貫 隼	採用	理論・計算分子科学研究領域計算分子科学研究部門 助教	早稲田大学理工学術院総合研究所 次席研究員	
2022/2/16	大貫 隼	勤命	計算科学研究センター 助教	（分子科学研究所理論・計算分子科学研究領域計算分子科学研究部門 助教）	
2022/2/28	高谷 光	退職	京都大学産官学連携本部 特定研究員	特別研究部門 准教授（クロスアポイントメント）	
2022/3/31	藤本 将輝	辞職	東海国立大学機構名古屋大学シンクロトロン光研究センター 特任助教	極端紫外光研究施設光源加速器開発研究部門 助教	
2022/3/31	廣部 大地	辞職	静岡大学学術院理学領域 助教	協奏分子システム研究センター機能分子システム創成研究部門 助教	
2022/3/31	成島 哲也	辞職	文部科学省 初等中等教育局 教科書調査官	メゾスコピック計測研究センター繊細計測研究部門 助教	
2022/3/31	矢木 真穂	辞職	名古屋市立大学大学院薬学研究科 講師	生命創成探究センター創成研究領域 助教	
2022/3/1	高谷 光	兼委	特別研究部門 准教授（兼任）	（京都大学産官学連携本部 特定研究員）	
2022/3/31	川合 真紀	任満	自然科学研究機構長	分子科学研究所長	

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
2022/ 3/31	齊 藤 真 司	併 任 終 了	(理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 教授)	理論・計算分子科学研究領域 研究主幹	
2022/ 3/31	高 谷 光	兼 任 終 了	(京都大学産官学連携本部 特定研究員)	特別研究部門 准教授 (兼任)	
2022/ 3/31	森 寛 敏	客 員 終 了	(中央大学理工学部応用科学科 教授)	理論・計算分子科学研究領域理論・計算分子科学研究部門 客員教授	
2022/ 3/31	柳 瀬 陽 一	客 員 終 了	(京都大学大学院理学研究科 教授)	理論・計算分子科学研究領域理論・計算分子科学研究部門 客員教授	
2022/ 3/31	東 雅 大	客 員 終 了	(京都大学大学院工学研究科 准教授)	理論・計算分子科学研究領域理論・計算分子科学研究部門 客員准教授	
2022/ 3/31	福 井 賢 一	客 員 終 了	(大阪大学大学院基礎工学研究科 教授)	光分子科学研究領域光分子科学第四研究部門 客員教授	
2022/ 3/31	島 田 賢 也	客 員 終 了	(広島大学放射光科学研究センター 教授)	光分子科学研究領域光分子科学第四研究部門 客員教授	
2022/ 3/31	香 月 浩 之	客 員 終 了	(奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科 准教授)	光分子科学研究領域光分子科学第四研究部門 客員准教授	
2022/ 3/31	岸 根 順一郎	客 員 終 了	(放送大学教養学部 教授)	物質分子科学研究領域物質分子科学研究部門 客員教授	
2022/ 3/31	古 川 貢	客 員 終 了	(新潟大学研究推進機構共用設備基盤センター 准教授)	物質分子科学研究領域物質分子科学研究部門 客員准教授	
2022/ 3/31	大 島 勇 吾	客 員 終 了	(理化学研究所加藤分子物性研究室 専任研究員)	物質分子科学研究領域物質分子科学研究部門 客員准教授	
2022/ 3/31	渡 邊 力 也	客 員 終 了	(理化学研究所開拓研究本部 主任研究員)	生命・錯体分子科学研究領域生命・錯体分子科学研究部門 客員教授	
2022/ 3/31	國 見 昌 哉	退 職	東京理科大学理学部第一部物理学科 助教	光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 特任研究員	
2022/ 3/31	谷 本 勝 一	退 職	日本学術振興会 特別研究員 PD	理論・計算分子科学研究領域計算分子科学研究部門 特任研究員 (IMS フェロー)	
2022/ 3/31	JO, Ju-Yeon	退 職		理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第二研究部門 特任研究員	
2022/ 3/31	水 野 麻 人	退 職	日本学術振興会 特別研究員 (PD)	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	
2022/ 3/31	斎 藤 晃	退 職	日本学術振興会 特別研究員 (PD)	物質分子科学研究領域電子構造研究部門 特任研究員	
2022/ 3/31	福 井 豊	退 職	総合研究大学院大学 URA 職員	研究力強化戦略室 特任専門員	
2022/ 3/31	船 木 弓 子	退 職	機器センター 事務支援員	機器センター 特任専門員	
2022/ 3/31	高 橋 翔 太	退 職	日本学術振興会 特別研究員 (PD)	物質分子科学研究領域電子構造研究部門 特任専門員	
2022/ 3/31	磯 貝 知 世	辞 職		生命創成探究センター 特任専門員	
2022/ 3/31	金 澤 悠 紀	退 職	計算科学研究センター 特任研究員	計算科学研究センター 研究員	
2022/ 3/31	吉 田 久 史	退 職		技術推進部装置開発ユニット 再雇用職員	
2022/ 3/31	萩 原 久 代	退 職		光分子科学研究領域光分子科学第三研究部門 事務支援員	
2022/ 4/ 1	渡 辺 芳 人	任 命	分子科学研究所長	総合研究大学院大学 理事	
2022/ 4/ 1	TANG, Zhiye	採 用	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 助教	東京大学大学院新領域創成科学研究科 特任助教	
2022/ 4/ 1	石 崎 章 仁	併 任	理論・計算分子科学研究領域 研究主幹	(理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第二研究部門 教授)	
2022/ 4/ 1	佐 藤 啓 文	客 員 委 嘱	理論・計算分子科学研究領域理論・計算分子科学研究部門 客員教授	(京都大学大学院工学研究科 教授)	
2022/ 4/ 1	吉 田 紀 生	客 員 委 嘱	理論・計算分子科学研究領域理論・計算分子科学研究部門 客員教授	(東海国立大学機構名古屋大学大学院情報学研究科 教授)	
2022/ 4/ 1	野 口 博 司	客 員 委 嘱	理論・計算分子科学研究領域理論・計算分子科学研究部門 客員准教授	(東京大学物性研究所 准教授)	
2022/ 4/ 1	間 瀬 一 彦	客 員 委 嘱	光分子科学研究領域光分子科学第四研究部門 客員教授	(高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 教授)	

各種一覧

異動年月日	氏 名	区 分	異 動 後 の 所 属・ 職 名	現 (旧) の 所 属・ 職 名	備 考
2022/ 4/ 1	福 原 武	客 員 嘱 託	光分子科学研究領域光分子科学第四研究部門 客員准教授	(理化学研究所量子コンピュータ研究センター量子多体ダイナミクス研究ユニット ユニットリーダー)	
2022/ 4/ 1	中 山 泰 生	客 員 嘱 託	光分子科学研究領域光分子科学第四研究部門 客員准教授	(東京理科大学理工学部先端化学科准教授)	
2022/ 4/ 1	田 中 耕一郎	客 員 嘱 託	物質分子科学研究領域物質分子科学研究部門 客員教授	(京都大学大学院理学研究科 教授)	
2022/ 4/ 1	秋 元 郁 子	客 員 嘱 託	物質分子科学研究領域物質分子科学研究部門 客員准教授	(和歌山大学システム工学部 准教授)	
2022/ 4/ 1	尾 坂 格	客 員 嘱 託	物質分子科学研究領域物質分子科学研究部門 客員教授	(広島大学大学院先進理工系科学研究科 教授)	
2022/ 4/ 1	神 谷 由紀子	客 員 嘱 託	生命・錯体分子科学研究領域生命・錯体分子科学研究部門 客員准教授	(名古屋大学大学院工学研究科 准教授)	
2022/ 4/ 1	高 谷 光	兼 任 嘱 託	特別研究部門 教授 (兼任)	(帝京科学大学生命環境学部生命科学科 教授)	
2022/ 4/ 1	矢 木 真 穂	兼 任 嘱 託	生命・錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 准教授 (兼任)	(名古屋市立大学大学院薬学研究科 講師)	
2022/ 4/ 1	原 島 崇 徳	採 用	生命・錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 特任研究員 (IMS フェロー)		
2022/ 4/ 1	小 泉 愛	採 用	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 特任研究員		
2022/ 4/ 1	松 本 浩 輔	採 用	生命・錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 特任研究員		
2022/ 4/ 1	稲 井 直 人	採 用	計算科学研究センター 特任研究員		
2022/ 4/ 1	金 澤 悠 紀	採 用	計算科学研究センター 特任研究員	計算科学研究センター 研究員	
2022/ 4/ 1	藤 田 浩 正	採 用	研究力強化戦略室 特任専門員	岡崎統合事務センター財務部財務課長	
2022/ 4/ 1	高 橋 翔 太	採 用	物質分子科学研究領域電子構造研究部門 研究員	(生命創成探究センター (研究戦略室) 特任准教授 (研究連携コーディネータ))	
2022/ 4/ 1	斎 藤 晃	採 用	物質分子科学研究領域電子構造研究部門 研究員	(日本学術振興会 特別研究員 (PD))	
2022/ 4/ 1	鈴 木 規 子	採 用	協奏分子システム研究センター階層分子システム解析研究部門 技術支援員	(日本学術振興会 特別研究員 (PD))	
2022/ 4/ 1	栗 田 佳 子	採 用	機器センター 事務支援員		
2022/ 4/ 1	船 木 弓 子	採 用	機器センター 事務支援員		
2022/ 4/ 1	石 田 千 城	配 置 換	計算科学研究センター 助手	理論・計算分子科学研究領域計算分子科学研究部門 助教	
2022/ 4/ 1	ZHAO, Pei	配 置 換	計算科学研究センター 特任研究員	理論・計算分子科学研究領域計算分子科学研究部門 特任研究員	
2022/ 4/ 1	中 本 圭 一	配 置 換	機器センター 特任研究員	機器センター 特任専門員	
2022/ 4/ 8	藤 本 將 輝	兼 任 嘱 託	極端紫外光研究施設電子ビーム制御研究部門 助教 (兼任)	(東海国立大学機構名古屋大学シンクロトロン光研究センター 特任助教)	
2022/ 4/15	和 田 琴 恵	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 技術支援員	
2022/ 4/16	MAHMOOD, Md Iqbal	採 用	計算科学研究センター 特任研究員		
2022/ 4/16	新 見 涼 子	採 用	生命・錯体分子科学研究領域錯体触媒研究部門 技術支援員		
2022/ 5/ 1	賀 来 美 恵	採 用	機器センター 特任研究員		
2022/ 5/ 1	太 田 康 仁	採 用	機器センター 特任研究員	理化学研究所 放射光研究センター 研究員	
2022/ 5/ 1	杵 本 泰 伸	採 用	極端紫外光研究施設 特任専門員	中部大学 非常勤・コーディネータ	
2022/ 5/ 1	富 田 隆 文	配 置 換	光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 特任研究員 (特別研究員/特任助教)	光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 特任助教 (分子科学研究所特別研究員)	

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
2022/ 5/ 1	吉 田 瑠	採用	生命・錯体分子科学研究領域錯体物性研究部門 研究支援員		
2022/ 5/31	小 林 玄 器	辞職	国立研究開発法人理化学研究所開拓研究本部 主任研究員	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 准教授	
2022/ 6/ 1	小 林 玄 器	兼委任嘱	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 教授（兼任）	（国立研究開発法人理化学研究所開拓研究本部 主任研究員）	
2022/ 6/ 1	金 安 達 夫	兼委任嘱	極端紫外光研究施設 准教授（兼任）	（公益財団法人佐賀県産業振興機構九州シンクロトロン光研究センター副主任研究員）	

編集後記

5号ぶりに分子研レターズ編集を担当させていただきました。担当の役得として、本誌を一足先に手に取り、元気をいただいています。本号では分子研が研究機関として「歴史的科学論文大賞」受賞の嬉しいニュースをはじめ、出身者や所員の皆様のご活躍の記事で満載にできました。ご多忙中、貴重なお時間を割いていただいた著者の皆様にまずは御礼申し上げます。

コロナ禍も3年目に突入し、マスク・画面越しの交流が日常になり、加えて昨今の国内外の不条理な情勢が研究活動にも暗い影を落としています。地下の実験ホールで殻に閉じこもれば、世の中の悲惨な現実も意識から遠のいてしまう危うさがあるので、昼休憩には同僚と話の花を咲かせ、世間からずれていないか、世間がずれてきていないか、確認する毎日です。UVSORでの共同利用者も徐々に増え、活気が戻ってきました。研究で世の不条理を少しでも解消できれば、と思います。

分子研レターズ、是非早晩に2件目の「歴史的科学論文大賞」受賞記事を！と願っています。どうぞ皆様のご支援、ご鞭撻の程よろしくお願いします。

編集担当 松井 文彦

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. 86

分子研レターズ

発行日 2022年9月（年2回発行）

発行 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構
分子科学研究所
分子研レターズ編集委員会
〒444-8585

愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38

編集 山本浩史（委員長）

松井文彦（編集担当）

伊藤 暁

江原 正博

大塚 尚哉

大友 章裕

岡本 裕巳

繁政 英治

長坂 将成

西村 勝之

古池 美彦

原田 美幸（以下広報室）

鈴木 さとみ

中村 理枝

デザイン 原田 美幸

印刷 株式会社コームラ

本誌記載記事の無断転載を禁じます。

文責は著者に帰属します。

分子研で学ぶ 学生募集

国立大学法人 総合研究大学院大学

分子科学研究所（愛知県岡崎市）には、国立大学法人 総合研究大学院大学の分子科学コースが置かれており、大学院教育を行っています。

分子科学は「物理」「化学」「生物」「情報」等、多岐に渡る分野と密接に関連しています。様々な分野で最先端の分子科学を切り拓こうとする研究者が一堂に会する分子研で、きっとあなたのやりたい科学が見つかるはず。世界を変える知と技術を生み出す研究者になるためのトレーニングを分子研で積みませんか？

■ 大学院生として分子研で研究するためには以下の二つの選択枠があります

① 国立大学法人 総合研究大学院大学へ入学する

分子科学研究所の教授・准教授・助教が総研大の教員を担当し、大学院教育をおこなっています。博士課程からの編入希望者の受入実績も豊富です。また、研究室配属は入学者の希望が最優先されます。

② 特別共同利用研究員

国、公、私立大学の大学院学生を「特別共同利用研究員」として受け入れ、研究指導を行っています。全国から毎年 20 名程度の学生を受け入れています。

■ 充実した支援制度

全総研大生に経済的支援を行っています（85 万円以上／年）。

また、特に優秀と認められた学生には特別支援制度があります（最大 230 万円／年）。



**参加申込
受付中**

**分子科学研究所
体験入学**

体験入学受け入れ日程：2023 年 3 月 24 日まで
体験入学受入推奨期間：8 月、9 月、2 月、3 月

申込締切：2023 年 2 月 17 日

体験入学参加受付中です。
充実した環境・設備が整った
研究所の研究室を見てみませんか？
旅費の補助があります。



体験入学の申込は左記
QRコードからアクセス

