

分子研レターズ

VOL.

87

March 2023

ISSN 0385-0560

●巻頭言

「結合活性化」と「元素戦略」

茶谷 直人 [大阪大学環境安全研究管理センター 特任教授
大阪大学 名誉教授]

●レターズ

分子研の苦悩

高田 彰二
[京都大学大学院理学研究科 教授]

●分子科学の最先端

ゼロからの
新規タンパク質デザイン

古賀 信康 大阪大学 蛋白質研究所 (IPR) 教授

共同利用研究ハイライト

実験と計算の協奏解析による揺らぎを持つ巨大複合体の溶液構造解析

杉山 正明 [京都大学複合原子力科学研究所 教授]

金属酵素や金属触媒が反応活性種を生成するうえでその配位環境はどんな役割をもつのか？

藤井 浩 [奈良女子大学研究院自然科学系 教授]

細胞内のヘム濃度を感知するタンパク質の構造機能相関

澤井 仁美 [長崎大学大学院工学研究科 准教授]

巻頭言

01 「結合活性化」と「元素戦略」

●茶谷 直人 [大阪大学環境安全研究管理センター 特任教授・大阪大学 名誉教授]

レターズ

02 分子研の苦悩

●高田 彰二 [京都大学大学院理学研究科 教授]

分子科学の最先端

04 ゼロからの新規タンパク質のデザイン

●古賀 信康 [大阪大学 蛋白質研究所 (IPR) 教授]

IMSニュース

- 8 分子研研究会開催報告 UVSOR-IIIにおける多様な量子ビームの発生と先端利用に関する研究会
 8 はやぶさ2帰還試料の多機関連携分析
 10 事業報告
 13 受賞者の声——瀬川 泰知、伊澤 誠一郎、米田 勇祐、古池 美彦、中村 永研
 16 齋藤 修二 名誉教授逝去

IMSカフェ

- 17 New Lab研究室紹介——中村 彰彦
 19 分子研出身者の今——光武 亜代理、吉田 将己
 23 分子研を去るにあたり
 26 外国人研究職員の印象記
 27 新人自己紹介
 29 アウトリーチ活動

共同利用・共同研究

- 30 共同利用研究ハイライト
実験と計算の協奏解析による揺らぎを持つ巨大複合体の溶液構造解析 杉山 正明 [京都大学複合原子力科学研究所 教授]
金属酵素や金属触媒が反応活性種を生成するうえでその配位環境はどんな役割をもつのか？
 藤井 浩 [奈良女子大学大学院自然科学系 教授]
細胞内のヘム濃度を感知するタンパク質の構造機能相関 澤井 仁美 [長崎大学大学院工学研究科 准教授]
 34 施設だより——高性能分子シミュレータの更新
 36 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

- 37 運営に関わって——組頭 広志、日原 岳彦

分子研技術推進部

- 39 極低温業務の効率化を目指して

大学院教育

- 42 総研大ニュース
 43 コラム
 44 受賞者の声
 45 イベントレポート
 45 修了学生及び学位論文名
 46 各種一覧

「結合活性化」と「元素戦略」

茶谷 直人 大阪大学環境安全研究管理センター 特任教授
大阪大学 名誉教授



資源の枯渇・偏在リスク、産出国による資源の取り込みなどの危機感から化学分野を中心に2004年に「元素戦略」の重要性、必要性が世界に先駆けて提唱された。これは、当時、世界のレアアース生産の97%を占めほぼ世界唯一の供給国であった中国による「2010年のレアアース危機」よりも早くにその重要性が指摘されていたのは、驚くべき先見の明である。さらに、国の動きも迅速で、文科省、JST、経産省を中心とした幾つかのプロジェクトを経て、2012年から文科省「元素戦略プロジェクト（研究拠点形成型）」がスタートし、2022年3月に終了した。磁性材料、触媒・電池材料、電子材料、構造材料の4拠点を中心に、減量、代替、循環、規制、新機能の5つのキーワードのもと、幾つかの革新的材料の創製に成功してきた。ここでは、紙面の関係で得られた成果の詳細は述べないが、複数元素を組み合わせることで希少元素や有害元素を代替でき、実用化も含め目覚ましい研究成果を上げてきた。しかし、基本的には既存の技術をベースにしたプロジェクトが中心であり、5つのキーワードのうち金属元素の減量、代替、規制を中心に進められてきた。多様な元素の高度利用、新機能創成、元素の再循環という元素戦略の基本理念に立ち返り、「元素戦略」をさらに発展させる必要があるのは言うまでもない。

私が今まで取り組んできた「結合活

性化」と「元素戦略」を重ね合わせてみると多様な元素の高度利用という観点からは、炭素元素の有効利用が以前のプロジェクトには含まれていなかった。最近、「脱炭素」と言う言葉から炭素（有機化合物）が悪者扱いされているが、これは明らかに誤用である。われわれ人類は、炭素（有機化合物）から多大な恩恵を受けており、社会の持続的発展には、炭素の高度利用が欠かせない。実際、ノーベル財団は、2010年のノーベル化学賞（クロスカプリング）のプレスリリースで、“Carbon-based (organic) chemistry is the basis of life and is responsible for numerous fascinating natural phenomena…”と述べている。「脱炭素」ではなく、正確には「脱化石燃料」と言うべきである。「化石資源」を燃料に用いるのではなく、「炭素資源」として有効利用する必要がある。その一つの方策が、私が長年取り組んできた「結合活性化」である。「結合活性化」とは、今まで反応に積極的に利用されてこなかった反応性の低い結合を利用した反応開発のことである。石油、石炭、メタンなどの「化石資源」をたんに燃料として用いるのではなく、今まで知られていない高度な機能をもった物質に変換することで「化石資源」を有効に利用する。さらには、再生可能な植物由来のバイオマス原料であるセルロースやリグニンの有効利用、高分子の分解・再利用、太陽光や電気エネルギーを駆使した二酸化炭素、窒素の利用、これらすべ

て結合活性化の技術が必要である。結合活性化をさらに進化させ、元素間の結合や元素の空間配置を自在に操る革新的合成法を開発し、さらに元素間結合の自在切断による元素循環、突出した機能を有する新物質の創出の基盤を確立することが必要である。その結果、「材料の超高機能化」「触媒の超高効率化」「元素循環の確立」を通じて、持続可能で強靱な社会の構築に寄与できる。

現在、日本学術会議化学委員会を中心に「元素戦略」の重要性を訴えている。上で述べたように全元素を高度活用するだけでなく、新物質の多様な物性の先端計測による斬新な機能の発掘、元素データベースの構築、元素科学のDXの牽引などを統合的に機能させる必要がある。そのためにも、国が主導して、学術の振興はもとより、世界情勢、地政学的分析、資源枯渇、資源偏在リスク、地球温暖化、エネルギー問題、経済安全保障問題などに基づく国家としての元素戦略の立案とシンクタンク機能も担う「元素戦略推進本部」を速やかに設置し、真に持続可能な社会の構築につなげるために戦略的に取り組む必要がある。

ちゃたに・なおと
1984年大阪大学大学院工学研究科博士後期課程修了（工学博士）、1984年大阪大学産業科学研究助手、1989年大阪大学工学部助手、助教授を経て、2003年大阪大学大学院工学研究科教授。1975年に入学して以来、47年間お世話になった大阪大学を2022年3月に定年退職、大阪大学名誉教授。現在は、大阪大学環境安全研究管理センターの特任教授。現役時代は、「結合活性化」を基軸とする新しい触媒反応の開発に取り組んできましたが、現在は日本学術会議化学委員会委員長として慣れない（向いていない）仕事に取り組んでいます。

高田 彰二 京都大学大学院理学研究科 教授

分子研の苦悩



たかだ しょうじ

1988年京大理卒、1990年同化学専攻修士修了、1991年～1995年岡崎国立共同研究機構 技官（分子研）、総合研究大学院大学博士（理学）。1995年～1998年学振研究員（イリノイ大学化学科）、1998年～2001年神戸大理・化学講師、助教授、2007年～2013年京大理・生物物理学教室准教授を経て、2013年より同教授。

思いがけず「レターズ」の執筆依頼をいただきました。分子研は極めて高い研究レベルを維持し、アクティブな若手研究者を集め、適切に運営されていると考えていますので、特に書くことを思いつきませんでした。お断りしようと思ったのですが、締切りまで日があるから2ページくらいなんとかできると安請け合いました。しかし気が付くとあっという間に締切りが来ますね。うーん、困りました！私は、1991年に総研大2期生として分子研に行き、途中で技官になり、合計5年間、中村宏樹元所長の研究室で研究者としての基礎を学ばせていただき、学位を取得しました。その後、イリノイ大学のポスドク、神戸大学を経て、2007年に京都大学に着任し現在に至っています。その間、分子研の客員准教授および運営会議委員も務めました。

個人的には、分子研時代を含めて研究者駆け出しのころは不安定な将来像のなかで必死に走り続けていたのに対して、京大着任以降は落ち着いて教育

研究に従事できていると感じています。ただし、今の日本では同じ大学で齢を重ねると徐々にいろいろな役職を経験するもので、私も2020年に教育担当の理事補という重い役職を拝命しました。

さまざまな委員会に参加する中で、京大の不名誉な記録を知ることになりました。女性教員比率です。規模の近い旧七帝大と比較すると、過去5年間連続で最下位を続けています。比率自体は年々増加しているのですが、その傾きは小さく、他の6大学に及びません。2021年時点で、トップの大阪大が20.2%に対して京大は13.2%です。言い訳もないことはありません。比較した大学の中で京大の理系教員比率がやや高いのです。ちなみに、国立大学の女性教員比率の平均は18.3%、そのうち理工系大学の平均は11.6%です。しかしそれを踏まえても、これまで京大が他大学と比べて男女共同参画に積極的でなかったというのは妥当な批判だろうと考えています。

そんな京大も、第四期中期計画

（2022－2027年度）では初めて女性教員比率の数値目標を入れることになりました。20%（2027年度末）です。これまでのペースではまったく不可能な数値目標です。当然、この達成に向けて各部局が急ピッチでさまざまな取組を開始しました。理学研究科でも、女性限定公募をはじめいくつかの具体的な女性教員増加に向けた方策がとられ、実際この1年間にかなりの数の女性教員の採用が実現しています。ご周知のとおり大学教員の女性限定公募はいまや多くの大学で行われており、東工大が8部局で教授または准教授ポストに女性限定公募を行ったことは、2022年夏の大きなニュースとなりました。

そんな折に「レターズ」執筆依頼を受けましたので、分子研の女性教員比率を見ました。私がここで書くまでもないと思いますが、2020年4月時点で、分子研の女性研究者は11名（所長や研究員を含めています。厳密に言うと、前パラグラフの大学の統計は教員比率であって研究員を含みませ

ん。研究員を除くと分子研の数字はさらに厳しくなります)、比率10%とことです。これは自然科学研究機構が第三期中期計画(2022年3月終了)に掲げた13%を下回っていました。女性教授がいないことも課題です。自然科学研究機構は第四期中期計画(2022-2027年度)として17%を数値目標に掲げています。これは、分子研の規模だと18-19名の女性研究者ということになるのでしょうか。

分子研を含む岡崎3研究所は、保育施設の設置、育児休業の制度、アカデミックアシスタント制度など女性研究者の環境整備に努力をされてきたと理解しています。また分子研では近年、女性准教授、助教を相当数採用されてきたことも理解できます。しかし、流動性の高い分子研の特徴を反映して、女性教員(所長も含む)の転出も進みます。リガンドが結合しているタンパク質のポピュレーションが結合速度定数 k_{on} と解離速度定数 k_{off} の比に依存するのと同じように、漸近的な女性教員比率は年度ごとの採用数と一人当たりの転出率の比で決まります。女性研究者の母数が限られている現状を考えると、転出率を低くすることも必要なことのように思います。

男性研究者の配偶者は研究者とは限らないが、女性研究者の配偶者は研究者である確率が高い、という統計があります。夫婦ともに研究者である場合、職場選びをどのように進めるでしょうか。夫婦が同じ領域・分野の研究者である場合、まずは同じ研究室あるいは同じ職場で働ける可能性を模索するかもしれません。それがかなわない場合、

あるいは夫婦が異なる領域・分野の研究者である場合(あるいは民間企業や官公庁で働く場合)、職場を大都市圏(主に首都圏)にするというのが第一選択になります。単純に大都市圏には職場候補の数が多いからです。一旦その大都市圏に夫婦の職場が決まったら、その後その大都市圏から移動するのは容易ではありません。私自身、夫婦が異なる領域の研究者である場合に該当しますが、イリノイ大学でのポストドクから帰国する際に、首都圏または関西圏を主ターゲットとして職場探しを行いました。幸いにして関西圏に職場を得ると、その後はずっと関西圏で生活するということになりました。

ここに分子研の苦悩があります。岡崎にある分子研に、高い業績を挙げつつある女性教授を数多く迎えることは可能でしょうか。女性の准教授・助教の人数を増やすことは可能であっても教授については難しい、というのが現状の示すところではないでしょうか。一方で、分子研には設立当初からの大方針である内部昇任禁止の制度があります。当時の日本においてこの仕組みは画期的であり、分子研の研究活動を高いレベルに維持することに寄与し、我が国の研究者の流動性を高めることにも貢献してきたことに疑問の余地はありません。過去の「レターズ」でも何度となくこの制度の意義が述べられてきました。一方で、これは昭和の時代に男性教授陣が決めた制度であることも事実です。過去の成功に縛られるな、というのは良く耳にする言葉です。折角着任した女性准教授や助教がステップアップするため岡崎を離れ

るしかないということに繋がっているのも事実です。令和の時代に直面する男女共同参画へのアクションプランとしては、あらゆる制約を除いて議論することが必要なのかもしれません。

私は学部生向けの講義で酵素反応について教えています。触媒作用をもつ酸性あるいは塩基性のアミノ酸側鎖は、しばしば酵素の中ではやや窪んだポケットに位置して、それ自身として不安定な状況にあります。講義では、リゾチームの触媒部位のグルタミン酸を例にとり、中性の水溶液中では脱プロトン化しているグルタミン酸が酵素の窪んだ位置に置かれたためにプロトン化していること、そのプロトンは不安定で離れやすい状態であること、その不安定さがこのプロトンの高い化学反応活性につながっていることを解説します。最後に蛇足として、人間も不安定で不満足な状態のほうがアクティブだってことがありますよね、と言ってこの話を終えます。言いながら、京大に来て15年安定した生活を送る私に高い活性があるか自問しています。

分子研の人事は流動性が高く、その結果、高い活性を維持しているのかもしれませんが。同時に、教員の生活は不安定なものになりがちで、クオリティ・オブ・ライフを下げる場合もあります。これは女性教員比率向上とは相反するでしょう。分子研の高い活性と男女共同参画の推進は、どのように両立できるのでしょうか。

ゼロからの新規タンパク質デザイン

古賀 信康 大阪大学 蛋白質研究所 (IPR) 教授
生命創成探究センター 生命分子創成グループ 教授 (兼務)
分子科学研究所 協奏分子システム研究センター 教授 (兼務)



2006年、神戸大学・自然科学研究科にて博士号 (理学) 取得。同年、神戸大学・理学部・特別研究員。
2007年、京都大学・理学研究科・特別研究員。
2007年7月より、ワシントン大学・生化学科・日本学術振興会海外特別研究員。
2009年7月より、ワシントン大学・生化学科・特別研究員。
2014年4月より、分子科学研究所・協奏分子システム研究センター・准教授。
2018年4月より、生命創成探究センター・生命分子創成グループ・准教授を経て、2022年10月より現職。

タンパク質分子は、ほどけた紐のような状態からアミノ酸配列に指定された立体構造に折り畳むことで機能を発揮しています。また、タンパク質の配列空間は天文学的に広いです。例えば100残基のタンパク質のアミノ酸配列パターンの総数は 20^{100} ($\sim 10^{130}$)通り考えることができますが、地球上に存在する1,000万の生物種が、それぞれ10万種類の遺伝子を持つとしたときのアミノ酸配列パターンの総数は 10^{12} 通りしかなく、前述の 10^{130} 通りは圧倒的に大きい数と理解することができます。古賀グループでは、この広大な配列空間の中から、新規タンパク質を創り出すための合理設計手法を開発してきました。特に、

主鎖を含めてゼロからタンパク質を創り出すこと、もうひとつは自然界のタンパク質を改造することの2つのアプローチで研究を行ってきました。紙面の都合上、本稿では前者に絞って記します。

整合する局所および非局所相互作用に関するデザインルール

自然界のタンパク質構造を観察すると、タンパク質が発現する機能は、複雑で多様なタンパク質構造が生み出していることが分かります。そのため私達の望む機能を持つタンパク質を創るためには、タンパク質構造を自在に設計する技術の構築が重要となります。ノーベル賞をとったAnfinsen

は「タンパク質は自由エネルギー最小に対応する立体構造に折りたたむ」というタンパク質熱力学原理を提唱しました (Anfinsen, C. B. *Science* **181**, 223-230, 1973)。これをタンパク質折り畳み第1原理とすると、郷は第2原理である整合性原理を提唱しました (Go, N. *Annu. Rev. Biophys. Bioeng.* **12**, 183-210, 1983)。これは「折り畳み後のタンパク質構造は、自由エネルギー最小であることに加えて、アミノ酸配列上近い残基間に働く局所相互作用と、遠い残基間に働く非局所相互作用が、矛盾なく天然構造を安定化するように設計されている」というものです。私達は、この原理を満たすようなタンパク質を設計するためには、どうすれば良いか

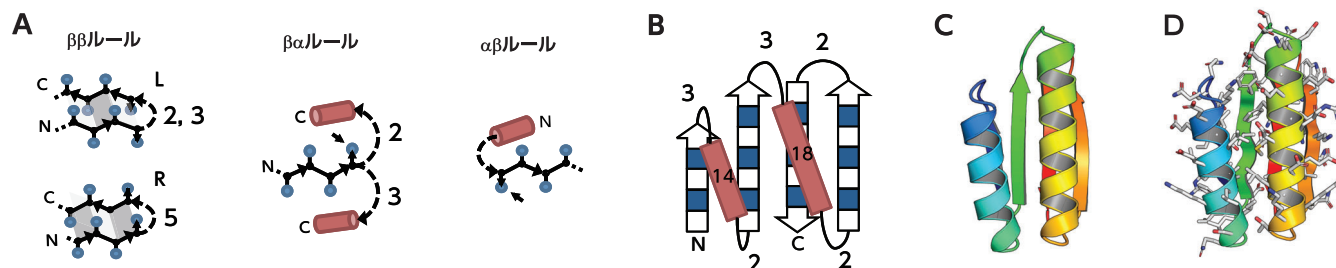


図1 デザインルールを用いた構造設計。

A) 整合する局所および非局所構造に関するデザインルール。B) 主鎖構造設計図:N, CはN, C末端、四角はストランド残基、細長い長方形はヘリックス、曲線はループを表す。赤の四角はヘリックス、白と青の四角はストランド、黒はループを示す。数字はルールで決めたヘリックスとループの長さを表す。青の四角は側鎖が紙面手前に、白の四角は側鎖が紙面奥にあることを示す。C) 設計図を基に構築された主鎖構造。D) 設計されたタンパク質構造。Cで設計された主鎖構造をもとに、これを安定にするような側鎖構造を構築する。

と考へ研究を進め、その結果、整合する局所および非局所構造に関するデザインルールを発見しました (図1A) [1]。このデザインルールは、連続する2次構造が形成する非局所構造と辻褄の合う局所主鎖構造 (α ヘリックスや β ストランドの長さおよびループの長さや形状) を記述するものです。一般的に、タンパク質がどのような立体構造に折り畳むのかは、アミノ酸配列、言い換えると側鎖の並びに着目されがちです。しかし、これらのルールは、タンパク質がどのような構造に折り畳むのかは、側鎖 (アミノ酸配列) の詳細というよりも、局所主鎖構造が重要であることを意味しています。私達は、これらデザインルールを使って、様々な $\alpha\beta$ 型

タンパク質の主鎖構造設計図を描き (図1B)、この設計図をもとに主鎖構造を構築し (図1C)、この主鎖構造を安定にするような側鎖構造を設計したところ (図1D)、4本 β ストランドからなる様々なトポロジー (2次構造の3次元空間上の配置と、ループによるこれら2次構造のつなぎ方) の $\alpha\beta$ 型タンパク質構造について原子レベルの正確さで主鎖を含めてゼロから構造を設計することに成功しました (図2) (Koga, N. et al. *Nature* **491**, 222-227, 2012; Lin, Y.-R. et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **112**, E5478-E5485, 2015)。

疎水性コアがほぼバリンでも折りたたみ超安定なデザインタンパク質

興味深いことに、我々がデザインしたタンパク質は自然界のタンパク質とは異なって、殆どのが100°Cでも変性しない超安定な構造を形成していました (図2)。そこで、なぜこれら人工設計タンパク質が極めて高い安定性を示すのかその理由に迫りました [2]。タンパク質構造の安定性は、

タンパク質構造内部の様々な疎水性アミノ酸残基によるジグソーパズルのように密な側鎖パッキングが重要であることが、これまでの多くの研究で示されています。実際、私達がタンパク質を人工設計する際にも、このような密な疎水性側鎖パッキングを持つようにタンパク質を設計していました。しかしながら一方で、私達が発見したデザインルールは、様々な疎水性アミノ酸残基による疎水性パッキングというよりも局所主鎖構造の重要性を示唆しています。そこで、タンパク質構造内部の疎水性アミノ酸残基の大半をサイズの小さい残基 (バリン) に置換し、疎水性パッキングをゆるめたときに、折り畳みおよび安定性がどのように変化するのかを調べました。驚いたことに、疎水性アミノ酸の88%がバリンになるよう置換した人工設計タンパク質でも、設計した構造への折り畳み能を示し、加えて変性温度が100°C以上の高い熱安定性を持つことが判明しました (図3)。すなわち、デザインタンパク質の高い熱安定性は、疎水性アミノ酸残基によるパッキングというよりも、ルールを用いて設計した主鎖構造に起因することが本研究により示されました。

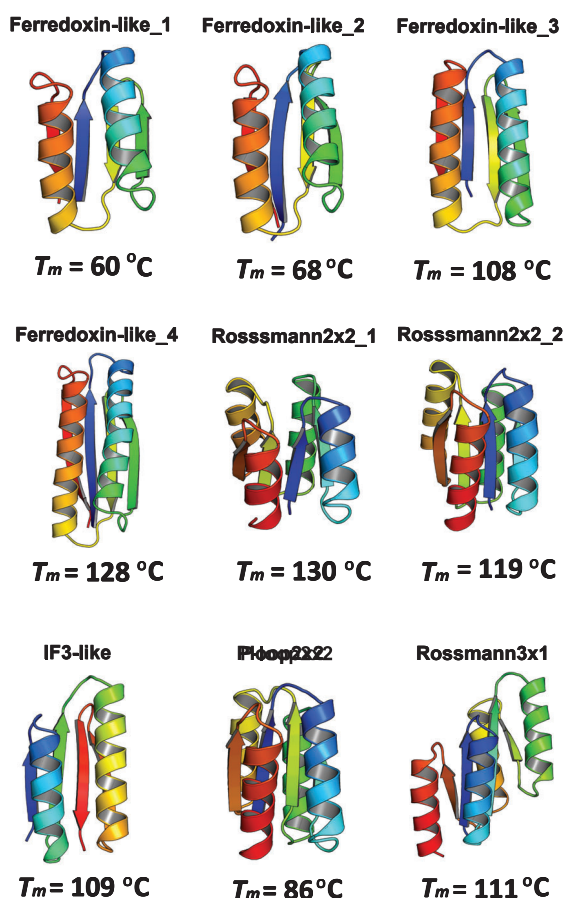


図2 ゼロからデザインした様々な $\alpha\beta$ 型タンパク質。デザインしたタンパク質の名前、計算機構造、安定性 (変性温度 T_m) を示す。変性温度は、室温から170°Cまで温度を上昇させながら円偏光二色性を測定し求めた。

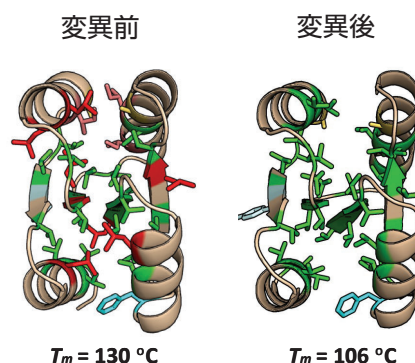


図3 構造内部の疎水性パッキングを壊しても超安定に折りたたむデザインタンパク質。赤、ピンク、緑の残基それぞれ、ロイシン、イソロイシン、バリンを示す。デザインルールを用いて設計したタンパク質 (左) はロイシンとイソロイシンを全てバリンに変異させても、折り畳み能を示し超安定であった (右)。

設計図通りに折り畳まない

デザインタンパク質

次に私達は、デザインルールがより大きく複雑なタンパク質構造のデザインにも適用できるか、5本および6本の β ストランドからなる100残基以上のサイズの $\alpha\beta$ 型タンパク質構造の人工設計に挑戦しました^[3]。しかし、実験で決定された構造は、計算機で設計した構造と異なり、内部のストランドの並びが入れ替わったトポロジーに折り畳んでいました (図4A)。なぜ、デザインしたトポロジーに折り畳まないのか、この問題を解決するために様々な仮説を立て研究を行ったところ、

デザインルールを用いて作成した設計図をもとに構築したタンパク質は、数個の連続する2次構造において整合性原理を満たしていても、全体構造という観点から整合性原理を満たしておらず主鎖構造の歪みが生じているのではないかという仮説にたどりつきました。そこでこの仮説をもとに、折り畳みシミュレーションを行ったところ、デザインに用いた設計図は、ストランドの並びが入れ替わったトポロジーの実験構造から復元した設計図と比べて、「 β シート形成度」および「両末端ヘリックス間のパッキング度」が低いことを明らかにしました (図4B)。さら

に、ストランドの長さを短くすることや、 β ストランド間の相対的な位置を調整することで、主鎖構造の歪みを抑えながら、 β シート形成および両末端ヘリックス間のパッキング度合いを高められることを明らかにしました (図4C)。次に私達は、これらの発見を基に「 β シート形成度」および「両末端ヘリックス間パッキング度」が高くなるような、主鎖構造歪みの低い主鎖構造設計図を描き、これら設計図を基にタンパク質を設計したところ、5本および6本ストランドからなる大きく複雑な $\alpha\beta$ 型タンパク質のデザインに成功しました (図3D)。

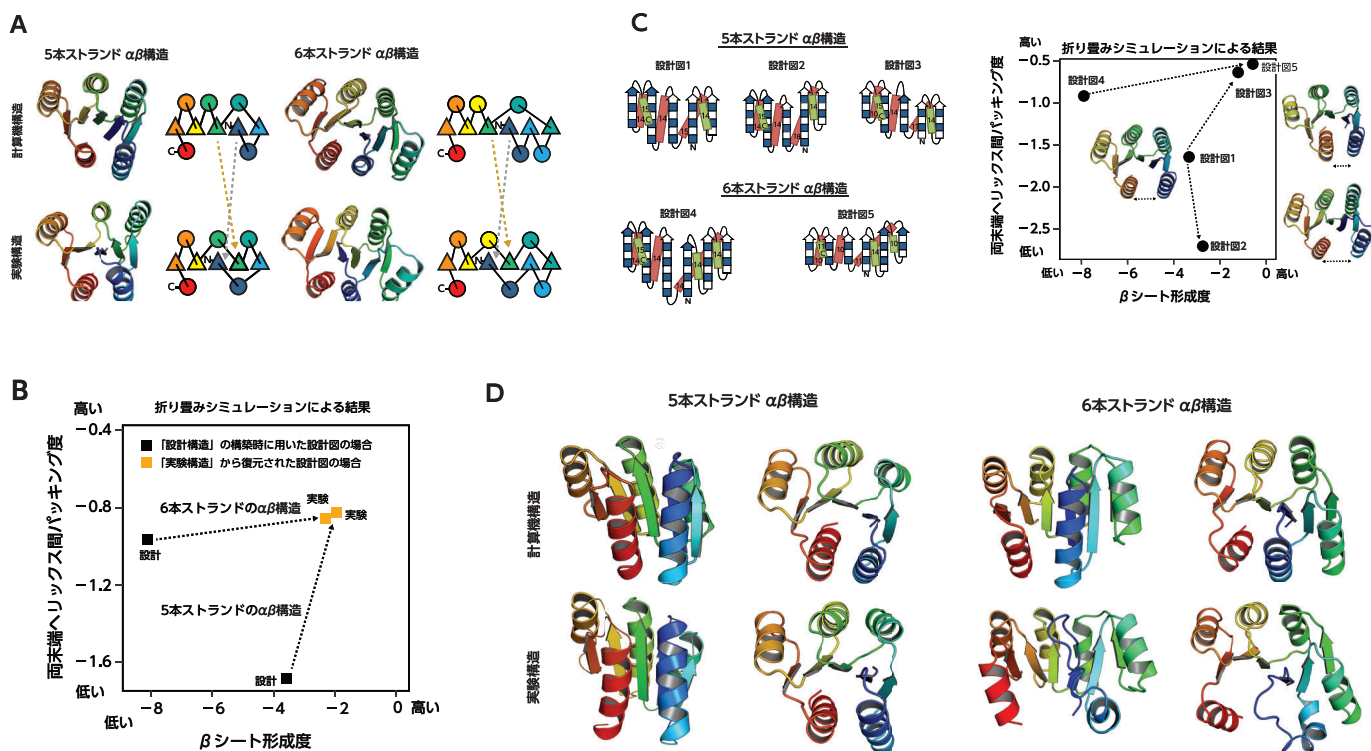


図4 5本および6本ストランドからなる $\alpha\beta$ 型タンパク質構造のデザイン。

A. 構造の右側の絵に、 β ストランドおよび α ヘリックスの3次元的な配置および、それらがどのようにループで連結されているのかを模式的に示した。N, Cはアミノ酸配列のN, C末端を表し、三角は β ストランド、丸は α ヘリックス、直線はループを表す。計算機で設計した構造と比べて、実験構造では青と緑のストランドの位置が入れ替わっていることがわかる。B. 折り畳みシミュレーションで明らかにした主鎖構造歪み。設計構造を構築するために用いた設計図と、実験構造から復元した設計図をもとに折り畳みシミュレーションを行ったときの、「 β シート形成度」と「両末端ヘリックス間パッキング度」を示す。右上にいくほど、主鎖構造の歪み無く、 β シートと両末端ヘリックス間パッキングが形成されることを表す。C. 5本および6本ストランドの $\alpha\beta$ 型タンパク質の様々な主鎖構造設計図と、 β シート形成度および両末端ヘリックス間パッキング度の関係。ストランドの長さが短いほど β シート形成度が高くなる (設計図4から5の変化に対応)。また、 β ストランド間の相対的な位置を変えることで、 β シートの曲率が変わり、両末端ヘリックス間距離が変わり、ヘリックス間のパッキング度が変化する (設計図1から2の変化に対応、または1から3の変化に対応)。D. Cの設計図3と設計図5を用いて、デザインした5本および6本ストランドの $\alpha\beta$ 型タンパク質。計算機構造 (上) と実験構造 (下)。

自然界で未発見のタンパク質トポロジー

さらに私達は、自然界で発見されていない新規トポロジーについての研究を行いました^[4]。タンパク質構造は年間1万個以上のペースで決定され続け、現在では20万個以上の構造が蛋白質構造データベース (PDB) に登録されています。しかしながら近年、トポロジーという観点からは、新規トポロジーが発見されることは極めて稀であることが知られています。そこで、自然は物理化学的に折り畳み可能なトポロジーを全て探索し尽くしたのか、それとも自然が探索していないトポロジーはまだ多数存在しているのかについて研究を行いました。まず、物理化学的に折り畳み可能なトポロジーを見

分けるルールを考え、これらを用いて現在のPDBには存在しないが物理化学的には折り畳み可能と考えられる4本ストランドからなる β シートを持つ $\alpha\beta$ 型トポロジーを8種類予測しました。続いて、これら予測したトポロジーを持つタンパク質を実際にデザインできるかどうか調べました。その結果、私達はこれら全ての新規トポロジーを持つタンパク質のデザインに成功しました (図5)。この結果は、物理化学的に折り畳み可能なトポロジーを見分けるルールの妥当性を示しています。そこで、5-8本ストランドからなる β シートを持つ新規 $\alpha\beta$ 型トポロジーを予測したところ、約1万個もの新規トポロジーが存在することが予測されました。

自然界に存在する $\alpha\beta$ 型トポロジーは約400個程度であることを踏まえると、自然は物理化学的に折り畳み可能なトポロジーの殆どを発見しておらず、未踏の広大なタンパク質構造空間が存在することを本研究は示唆しています。

まとめ

これまでに新規タンパク質を創り出すための合理設計手法を開発し、広大な配列空間を探索することで、自然界に存在しない構造およびトポロジーを持つタンパク質をデザインしてきました。本稿では $\alpha\beta$ 型タンパク質のデザインについて紹介しましたが、All- α 型タンパク質のデザイン^[5]やこれらを用いたタンパク質の動的機能の制御^[6]にも成功しています。今後は、特定の構造に折り畳むだけでなく、機能するタンパク質の創出に挑戦したいと考えています。

謝辞

上記の研究は、研究を主体的に進めたグループのメンバーはもちろんのこと、研究を直接または間接的にサポートしたグループのメンバー、共同研究者の皆様方、さらには分子科学研究所の皆様方のおかげで実現することができました。ここに深く感謝いたします。

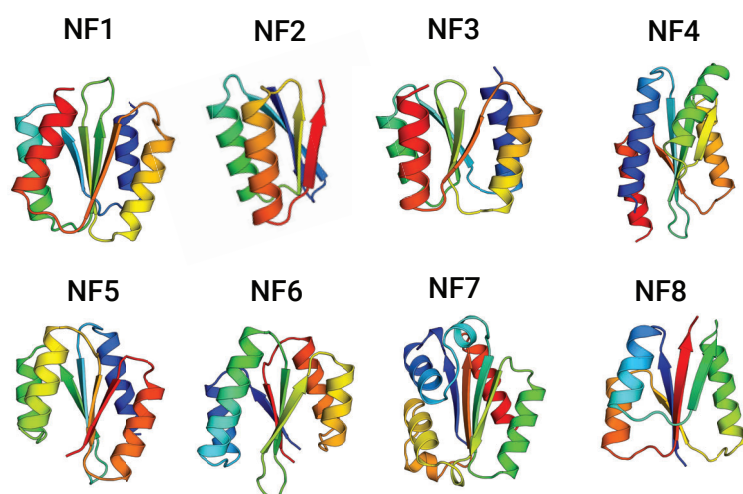


図5 新規トポロジーを持つ8個のデザインしたタンパク質。

参考文献

- [1] R. Koga, N. Koga, Consistency principle for protein design, *Biophys. Physicobiol.*, **16**, 304-309 (2019).
- [2] R. Koga, M. Yamamoto, T. Kosugi, N. Kobayashi, T. Sugiki, T. Fujiwara, N. Koga, Robust folding of a de novo designed ideal protein even with most of the core mutated to valine, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **117**, 31149-31156 (2020).
- [3] N. Koga, R. Koga, G. Liu, J. Castellanos, G. T. Montelione, D. Baker, Role of backbone strain in de novo design of complex α/β protein structures, *Nat. Commun.*, **12**, 3921 (2021).
- [4] S. Minami, N. Kobayashi, T. Sugiki, T. Nagashima, T. Fujiwara, R. Koga, G. Chikenji, N. Koga, Exploration of novel $\alpha\beta$ -protein folds through de novo design, doi: 10.1101/2021.08.06.455475, *bioRxiv* (2021).
- [5] K. Sakuma, N. Kobayashi, T. Sugiki, T. Nagashima, T. Fujiwara, K. Suzuki, N. Kobayashi, T. Murata, T. Kosugi, R. Koga, N. Koga, Design of complicated all- α protein structures, doi: 10.1101/2021.07.14.449347, *bioRxiv* (2021).
- [6] M. Mitsumoto, K. Sugaya, K. Kazama, R. Nakano, T. Kosugi, Takeshi Murata, Nobuyasu Koga, State-targeting stabilization of adenosine A2A receptor by fusing a custom-made de novo designed α -helical protein, *Int. J. Mol. Sci.*, **22**, 12906 (2021).

分子研研究会開催報告 UVSOR-IIIにおける多様な量子ビームの発生と 先端利用に関する研究会

UVSORシンポジウム2022及び第5回次期施設建設検討会と連続の日程で2022年11月28日（月）に標記研究会を開催しました。UVSORでは、1982年の建設当初から光源開発に特化したビームラインを設け、アンジュレータを用いた自由電子レーザーや特殊な波面構造を持つ光渦、超短パルスレーザーを用いたコヒーレント放射光や超短パルスガンマ線の開発が行われてきました。これまでは光源開発が研究の中心でありましたが、最近ではビームライン（BL）1Uにおいて極端紫外光からガンマ線に至る幅広い波長域で、原子のコヒーレント制御、円偏光照射による生体分子のキラリティ発現、原子核物理、ガンマ線から発生する電子の反粒子である陽電子を用いた材料分析などといった独自性の高い利用研究が行われています。

本研究会では、光源開発者と利用者、利用者同士の情報交換を促すことで、BL1Uで進行中の研究を促進するとともに新しい研究アイデアが創出

されることを期待し、UVSOR職員やユーザーの方々にご講演いただきました。また、NewSUBARU放射光施設からもガンマ線BLについてご講演いただきました。研究会のプログラムは末尾に書かれている通りです。参加登録は、現地とオンライン合わせて39名でした。いずれの講演においても活発な議論が行われ、今後の展開に大きな期待を抱かせるものとなりました。最後に、研究会開催にあたってサポートして頂いた方々に深く感謝致します。

- ・ UVSOR光源開発ビームラインの歴史（広島大学／分子研：加藤政博）
- ・ 自由電子レーザーの開発と利用・今後の展開（京都大学：全炳俊）
- ・ UVSORでのコヒーレント高次高調波光源の開発（秋田高専：坂本文人）
- ・ タンデムアンジュレータによるアト秒制御ダブルパルスの発生と原子分子実験への応用（SAGA-LS：金安達夫）
- ・ 放射光の時空間構造の制御とその利用の可能性（広島大学／分子研：加藤政博）



- ・ 紫外円偏光照射による有機物分子のキラリティの発現に関する研究（核融合研：小林政弘）
- ・ UVSOR-IIIにおけるガンマ線源の開発と利用及び今後の展開（分子研：平義隆）
- ・ ニュースバルγ線ビームラインBL01の現状（兵庫県立大学：橋本智）
- ・ ガンマ線を用いた原子核物理実験とその応用（京都大学：大垣英明）
- ・ 偏光検出コンプトンカメラの開発と応用（東京大学：島添健次）
- ・ 陽電子消滅法の基礎とパルスγ線誘起陽電子発生装置への期待（千葉大学：藤浪真紀）
- ・ 原子空孔を見て発光材料への不純物添加効果を探る（山形大学：北浦守）

敬称略

（平 義隆 記）

はやぶさ2 帰還試料の多機関連携分析

小型惑星探査機はやぶさ2が小惑星リュウグウにて採取した5.4 gの小石を携えたサンプルカプセルは、6年間にわたる旅を終えて、2020年末に無事に地球への帰還を果たしました。ここで得られた試料は、地球上の大気・物質による汚染や、大気圏通過時の加熱を受けていないので、地球上に存在する最も純粋な地球

外物質と言えます。僕が参加するPhase 2キュレーション高知チームは、リーダーの伊藤元雄博士（JAMSTEC高知コア研究所）を中心に、当のはやぶさ2が出発する前から、帰還した試料をどのように扱うか議論を重ね、分析技術の開発に取り組んできました。そして実際に試料を分析した最初の成果が、Nature

Astronomy誌に掲載されました^[1]。

リュウグウ試料と従来の地球外試料、つまり隕石との大きな違いは、先述のように、リュウグウ試料は地球上の物質に汚染されていないことです。この特徴を活用するためには、非汚染状態を維持する環境を整えなければなりません。そこで本研究の前提として、JAXA、

SPring-8、JAMSTEC、UVSOR、国立極地研究所と言った国内の各研究機関において、試料の大気非曝露状態を維持したまま試料を搬送し、受け入れから試料加工や分析までを行う手法を開発しました^[2]。まずJAXAより配分されたリュウグウ粒子に対して、SPring-8でX線CTによる非破壊3次元構造観察を行いました。その結果に基づき、皆で議論を繰り返し、最も分析して面白そうな場所をFIBにより、およそ25 μm 四方、厚さ200 nmの超薄切片を各試料から切り出して、分析を進めました。

UVSORでは、走査型透過X線顕微鏡(STXM)を用いて、有機物の2次元化学状態分析を行いました。特徴的だった結果として、炭素K吸収端近傍のX線吸収スペクトルにおいて、287.5 eVのピークが顕著であったことが挙げられます(Fig.1参照)。このピークは脂肪族炭化水素の存在を示唆しています。この分布は、JAMSTECでの超高分解能透過電子顕微鏡(TEM)による観察との比較対応から、含水ケイ酸塩鉱物と混在していることがわかりました。この組織は、有機物が水の存在下で鉱物と反応したことを示す、世界で初めての直接的な証拠となります。また脂肪族炭化水素は熱に弱く、30℃以上で分解するという報告から、リュウグウはそれ以下の温度しか経ていないものと考えられます。これは、はやぶさ2帰還試料が大気圏突入時に加熱を経ておらず、また地球上の物質で汚



Phase 2チームの分析メンバー。赤い矢印が執筆者。左隣がリーダーの伊藤元雄博士

染されていない、そして長年の議論に基づいて有機物分析に最適化したSTXMの分析条件がマッチしたために、発見につながった成果です。

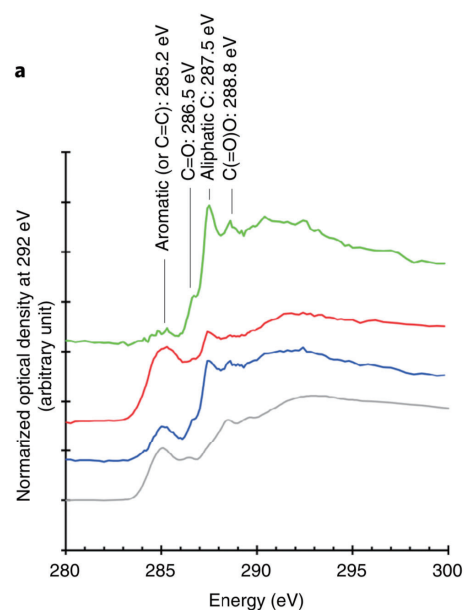
続いてJAMSTECにて、超高分解度2次イオン質量分析(NanoSIMS)によって同位体分析を行ったところ、水素と窒素は地球上のものと比べて重い同位体成分に富んでいることがわかりました。この傾向は、太陽系外縁由来と言われていた宇宙塵と良い一致を示すだけでなく、彗星に近い傾向も見られます。これより、リュウグウの粒子は熱の影響をあまり受けていないことを示唆しています。我々は、小惑星リュウグウは太陽系外縁部で形成後、現在の位置まで移動してきたものと考えています。

以上の結果から、含水ケイ酸塩鉱物が、水や有機物の“ゆりかご”となって、地球や他の天体に運ばれた可能性が考えられる、と結論づけました。本研究の成果は数々のメディアに取り上げて戴いた上に、我々のリュウグウ試料の電子顕微鏡イメージは華々しく掲載誌の表紙となりましたので、ぜひともご照覧あれ。本研究において難しかったのは、各実験のスケジュール調整でした。JAXAでの試料配分の日程から測定、加工にかかる日数を勘案して、タイトにスケジュール調整をしなければなりません。特に放射光施設であるSPring-8とUVSORは、いつでも自由に使える装置ではなく、課題採択時にビームタイムが割り当てられます。今回は、試料が帰還した直後、試料分配が決定する前にビームタイムの日程を押さえておく必要

がありました。ここでのスケジュール調整に、2015年に各分析機関の間で交わっていた連携協定が非常に役立つことになりました。今後、この研究で開発されたような多機関連携分析技術は、このようなサンプルリターン計画のみならず、様々な多角的分析のスタンダードになっていくであろうと考えています。BL4Uはもう僕の手を離れますが、引き続き柔軟な運営のビームラインであることを望んでいます。

そして、リュウグウ試料の分析は、これで終わりではありません。我々のチームだけでも既に3本の論文が出版され^[1,3,4]、2022年12月現在では2本が受理、1本が再査読中です。今後も引き続き、研究成果にご注目下さい。

(大東 琢治(高エネルギー加速器研究機構)記)



リュウグウ切片の炭素吸収端でのX線吸収スペクトル

Material from: M. Ito, et al., *Nat. Astron.*, **6**, (2022), 1163-1171

参考文献

- [1] M. Ito, et al., *Nat. Astron.*, **6**, (2022), 1163-1171. DOI: 10.1038/s41550-022-01745-5
- [2] M. Ito, et al., *Earth Planets Space*, **72**, (2020), 133.
- [3] M-C. Liu, et al., *Nat. Astron.*, **6**, (2022), 1172-1177. DOI: 10.1038/s41550-022-01762-4
- [4] R. Greenwood, et al., *Nat. Astron.*, (2022) DOI: 10.1038/s41550-022-01824-7

放射光60周年・UVSOR 40周年

報告：物質分子科学研究領域 横山 利彦（日本放射光学会 会長）

日本放射光学会は1989年に設立された会員数1200名程度の学会で、放射光科学の発展を念頭に、国内の放射光施設の連携、放射光利用者の拡大、国際協力（特にアジア・オセアニア地域の連携強化）、放射光技術者の育成などを目的とした団体です。2023年は、1963年に東京大学原子核研究所の電子シンクロトロンが本邦初のシンクロトロン光共同利用を始めて60周年、また、分子研極端紫外光研究施設UVSORが1983年に稼働を始めて40周年にあたります。本稿では我が国とUVSORにおける放射光科学のこれまでの発展を踏まえて近い将来の放射光科学に関する個人的な期待をつづろうと思います。なお、当方は2021年10月より2年間の任期で日本放射光学会長を務めているところですが、分子研に赴任してからは20年以上の歳月が経ており、UVSORの所属であったことはないものの、長くUVSORユーザーとしてお世話になっていて、どちらの立場で書いているのか混乱がありますが、その点をご容赦いただければ幸いです。

我が国でのシンクロトロン放射光の利用は、1963年に東大核研での真空紫外光利用に始まり、1975年には東大核研・物性研に放射光専用光源SOR-RINGが誕生しました。SOR-RINGは世界で初めて放射光利用専用に設計・建設された光源であり、紫外～軟X線領域まで利用が展開されました。その後1983年には硬X線が利用可能なPhoton Factory（PF、つくば）が完成、共同利用を開始し、ここに極めて幅広い分野にわたる放射光利用がスタートしたと言えます。さらに1997

年には世界最大の放射光施設SPring-8（西播磨）が完成し共用が始まり、現在もNanoTerasuが仙台に建設中で、X線自由電子レーザーSACLA（西播磨）を含めると、我が国で稼働中の放射光施設は11を数えるまでに拡大しました。これらは、順に、1983年PF、1984年UVSOR、1997年SPring-8、1997年PF Advanced Ring、1997年HiSOR、1999年立命館大SR、2000年New Subaru、2006年SagaLS、2012年SACLA、2013年あいちSR、建設中のNanoTerasuの計11施設です。

現在、放射光は、物理学・化学・工学から地学・宇宙科学・農学・薬学・生命科学・生理学さらには歴史学・建築・美術・犯罪捜査に至るまで極めて広い学術・行政・産業分野で活用されており、基礎・応用研究の不可欠な道具として認識されるようになりました。放射光利用者は国内に何万人を数えます。先述の放射光学会会員数がその数10分の1に過ぎないことは、むしろ、放射光が放射光プロパーでない幅広い層の研究者に活用されていることを示すものでしょう。特に、最近の放射光の用途として注目すべきひとつは実用システム・デバイスの動作下での3次元イメージングなどが挙げられますが、このような先端放射光技術開発のおかげで、放射光利用はますます広い領域に拡大するものと期待します。個人的な観点では、やはりエネルギー問題と地球温暖化が解決すべき大きな社会問題だと思います。私が子供の頃は、科学技術の発展によってもたらされてしまった公害が大変大きな社会問題でしたが、当時の公害は我が国の科学技術によって概ね克服でき、美しい河川や清浄な大

気が戻ってきました。近い将来、エネルギー問題や地球温暖化を克服し、さらに調和のとれた安全安心社会を構築するため、放射光科学が貢献できることを期待する次第です。

さて、放射光科学が我が国において大きな発展を遂げてきたのは喜ばしい限りですが、現状でたくさん問題を抱えていることも事実です。そのひとつは多くの放射光施設の老朽化でしょう。PF、UVSORは1980年代、SPring-8、HiSORも1990年代に建設されたものであり、産業利用が中心のSagaLSやあいちSRが比較的最近に稼働を始めたことを考えると、特に学術研究目的の放射光施設の老朽化が大きな問題になってきたと言えます。次に、人材不足が挙げられます。これは我が国の少子高齢化が原因であることに疑いの余地はありませんが、放射光施設での光源やビームラインの建設に従事する技術職員数は全く十分とは言えず、また、ビームラインサイエンティストと称される研究職員も大学院博士課程進学率が低迷する現状を反映して十分な数が集まりにくくなっていると思います。物質材料科学や生命科学などを専攻する学生数に比べて、装置製作・施設建設に長期間を要し、なかなか論文が書けない放射光科学分野を専攻する学生さんはさらに減少傾向にあるような気もしてなりません。

分子研UVSORは40年にわたって我が国の紫外～軟X線領域の放射光科学を支えてきました。複数回のアップグレードにより、老朽化対策を施したのみならず高輝度化が実現されました。2機の高エネルギー分解・高角度分解紫外光電子分光は利用の競争率も高く

秀でた成果が量産され、最近導入された運動量光電子顕微鏡も角度分解紫外光電子分光の革新的発展として今後の幅広い展開と大きな成果が期待できるでしょう。一方で、UVSORに限らず低エネルギー放射光施設は高真空下での利用が一般的であり、硬X線利用と比べてどうしても利用者の専門知識と経験が高く要求され、利用される学術分野が高真空下の計測が普通である固体物理学分野等に限定される傾向があります。実際、UVSORでも角度分解紫外光電子分光等が主要エンドステーションとして活用されています。しかしながら、この10年間には、我が国初の軟X線透過顕微鏡が導入され、化学・生命科学・環境科学・宇宙科学・薬学・生理学・農学など極めて広い学術分野に研究が展開され、学術のみならず産

業応用にも大いに活躍しています。また、化学反応追跡等を目的としたオペランド計測（時間分解）軟X線吸収分光ビームラインも整備され、有機化学や生物化学への新規展開がますます期待できる状況です。

建設以来長い年月を経た我が国の放射光施設はそれぞれ次期計画をもっており、UVSORも何度か研究会を開催しながらその大綱と詳細を策定中です。ここでも広い学術分野、特に化学や生命科学分野へのデータサイエンスを含めた革新的展開が謳われており、放射光科学、特に低エネルギー放射光の今後の発展方向性ともよく合致していると思います。しかしながら、次期計画の実現はまだまだ将来構想段階とも思われ、当面は、現施設において新規導入分野の優れた成果を輩出し、そのご

利益を放射光科学分野外の多くの研究者さらには研究者以外の方々に広く認識してもらうことも重要と考えます。また、化学・生命科学等の分野への展開が十分実行できるよう、人材配置と人材育成も抜本的に検討する必要がありますように感じます。特に化学・生命科学等の分野に明るいビームラインサイエンティストや放射光関連データサイエンティストはそもそも既存人材が十分ではなく、率先した人材育成が不可欠と思えます。

末筆に、分子研UVSORにおける新たな低エネルギー放射光施設の建設、紫外～軟X線を利用する放射光科学の広い分野へのより深い浸透、さらにはこれによる学術・科学技術・産業応上の革新的成果を期待して、本稿としたいと思います。

UVSOR シンポジウム 2022 および第5 回次期施設建設検討会

報告：光分子科学研究領域 解良 聡

表題の2つの研究会を11月26日ー27日に開催しました。定例のUVSOR シンポジウム2020は、ハイブリッド開催により3年ぶりに対面での議論が実現しました。やはり講演時間外での些細な時間ではあっても、関係者間の談話はとても有意義で、こうした対面会議の重要性を改めて感じました。UVSOR利用者の皆様に最新の研究成果を公表していただくとともに、施設からはビームラインの開発状況や将来展望を紹介し、より有効にUVSORを運営・活用できるよう、施設と利用者間の意見交換の場を設けました。オンライン含めて参加者は60名弱、招待講演3件（平原氏：東工大、高谷氏：帝京科学大、上梶氏：JASRI）、口頭講

演10件、及びポスター28件が発表され、UVSOR利用者懇談会より、優秀学生発表賞が杉原弘基氏（大阪大学）および三田愛也氏（名古屋大学）の2名に授与されました。

UVSORでは、基本設備の老朽化を鑑みて今後10年程度以降の持続的な研究施設環境の構築を目指して、2019年から次期施設建設検討会を開催してきました。翌日午後に開催した第5回検討会では、UVSOR次期計画の進捗を紹介すると共に、建設中の次期放射光施設NanoTerasuおよび近隣のあいちシンクロトロン光センターの方々もお招きし、我が国の施設間連携を意識した情報交換を行いました。「NanoTerasuの現状」についてPhoSICの山根氏よ



り工事進捗や今後の予定をご紹介いただき、多くの新たな試みもあり、一個人としても非常に興味深く拝聴しました。次いで「あいちSRの現状」について岡島副所長、「あいちSRの将来計画」について國枝所長からご紹介いただきました。最後に総合討論として相互連携について、学術研究と民間利用の2つの視点で議論しました。あいちSRは設立から10年が過ぎ、社会的課題を踏

まえて今後の高度化展開が議論されており、設備開発においてUVSORで培ってきた経験が生かされる機会があれば御協力したいと存じます。また放射光の産業利用が我が国の特徴ですが、大学等と民間利用では施設への要望が顕著に異なり、オールジャパンとしての効果的運用に向けて、施設間連携の重要性を再認識いたしました。

UVSOR次期施設では、放射光に加えて小型レーザーをはじめとして広く長波長帯を網羅する先端光源を提供し、現行のUVSORの特徴である量子ビーム開発とその利用法の研究や分子機能・材料物性計測の展開を更に推し進めると共に、誰もが「光」を自在に活用で

きる先端計測科学支援環境を提供し、複雑系・不均一系の融合学理の開拓を目指します。先端計測としては、回折限界光の特徴を生かしたマルチビーム・マルチモーダル・時空間ダイナミクスの計測手法の開発により、非平衡現象や複雑物質系の光科学に挑むとともに、新しい量子ビーム源として放射光の時間構造に着目した研究を進めます。また長い歴史において未だ「光」を自在に活用できていない化学・バイオ分野ユーザー等への技術的な利用障壁を排除し、新鮮で斬新な視点による計測利用を開拓することが最大の課題です。光源制御と分光計測を専門家とする研究者と技術者集団による計測支援はも

ろんのこと、URAをはじめとした支援員の数的強化による抜本的な体制改善が必須であり、相談窓口から計測・解析支援までを一元化した協力研究環境を整備したいと考えています。

来年度は設立40周年です。今後は次期施設設備デザインレポートの策定、次世代を担う若手研究者へ向けた啓蒙活動、さらには技術者の確保へ向けた学生への広報なども検討しています。計画実現に向けては多くの困難課題が山積しますが、可能なことはすべからず検証し、一步一步進めていけたらと考えます。引き続き多方面からのご協力をお願いいたします。

文科省ナノテクノロジープラットフォーム

報告：物質分子科学研究領域 横山 利彦

平成24年度に始動した文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム事業は、大成功の事後評価を受けて令和3年度で完了した。ここではその実施概要を報告する。本事業は、ナノテク関連の最先端研究設備とその活用ノウハウを有する国内25機関が、緊密に連携してナノテク研究基盤（プラットフォーム）を構築することにより、産学官の多様な共用を促進し、利用者に問題解決への最短アプローチを提供するとともに、産学官連携や異分野融合の推進を目的とした。プラットフォームは、微細構造解析、微細加工、分子・物質合成の3つが構築され、分子研は分子・物質合成の代表機関と実施機関を務めた。利用者の成果が新しい利用者呼び、全国から多くの先端研究者が自ら集う先端ナノテク分子・物質合成拠点

を形成し、支援者と利用者双方の若手を育成できる環境を構築することを目指した事業を展開した。分子・物質合成プラットフォームの実施機関は、千歳科技大、東北大（平成24～29年度）、NIMS、JAIST、信州大、名大、名工大、分子研、阪大、NAIST及び九大であり、これらの機関が共同して業務を行った。

分子研は、代表機関としてプラットフォーム全体の運営に係わる業務を行う一方、実施機関として、機器センター利用を中心に、放射光利用、装置開発室利用、機能性分子システム創製プログラムを実施して研究支援を行った。10年間で実施された成果公開支援件数は分子・物質合成プラットフォーム総数5,675件のうち分子研実施が1,384件、成果公開支援日数は総数98,436日のうち分子研26,399日、論文発表

数は総数2,707報のうち分子研1,020報、学会発表数は総数7,620件のうち分子研2,559件を数え、研究支援は量的に大成功を収めたと言える。また、毎年6件程度選出される秀でた成果表彰は、分子・物質合成プラットフォームから19件（令和4年度分を加えると22件）あり、そのうち分子研実施支援から6件（同7件）の受賞があった。分子研支援の秀でた成果は、H26「内包フラーレン分子錯体ESR」（京大・筑波大、機器セ）、H27「危険ドラッグ合成」（科警研、櫻井G東林）、H28「神経変性疾患発症タンパク質ミスフォールディング」（慶応大、秋山G）、H29「合成カンナビノイド位置異性体識別」（石川県科捜研、櫻井G東林）、R02「スピロケタール網羅的短工程合成と結晶スポンジ法構造決定」（オーストリア

Graz大、藤田G)、R03「無機系キラル結晶キラル誘起スピン選択性」(大阪府大、東邦大、放送大、装置開発・山本G)、R04「六方晶 Ba_2H_3X ($X=Cl, Br, I$) のヒドリド導電特性」(京大、小林G)であった。質的な成果も大変優れていると評価された(いずれも題目は簡略化した)。

本事業は令和3年度からマテリアル先端リサーチインフラ事業(令和3年

～12年度)として発展的に継承され、共用に加えてデータベース構築とデータサイエンスへの展開が目的に加わった。分子研は「マテリアルの高度循環領域」スポーク機関と「横断技術領域(物質・材料合成プロセス)」責任機関として貢献することとなった。引き続き、利用者の方々の多くのご利用と支援者の方々の成果輩出への貢献を期待したく、よろしくお願い申し上げます。



受賞者の声

瀬川泰知准教授に宇部興産学術振興財団第62回学術奨励賞

伊澤誠一郎助教に2022年度分子科学研究奨励森野基金研究助成

米田勇祐助教に日本生物物理学会若手奨励賞

古池美彦助教にSPRUC 2022 Young Scientist Awardおよび日本生物物理学会若手奨励賞

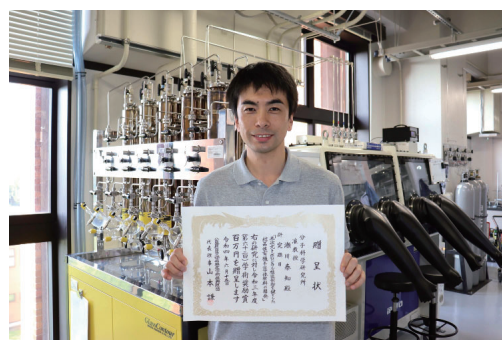
中村永研技術職員に第10回日本放射光学会功労報賞

瀬川泰知准教授に宇部興産学術振興財団第62回学術奨励賞

このたび、公益財団法人宇部興産学術振興財団(2022年8月よりUBE学術振興財団に改称)第62回学術奨励賞を受賞いたしました。本奨励賞は有機化学、無機化学、高分子化学、機械・計測制御・システム、電気・電子、医学を含む幅広い自然科学分野の優れた独創的研究をしている若手研究者に贈呈される歴史ある賞です。私が今回提案した研究課題である「3次元トポロジカル構造制御を鍵とした結晶性有機半導体材料の開発」は、3次元的な広がりをもつ有機分子の設計・合成をも

とに新たな有機半導体材料物質を開発することを目的としたものです。研究を進めていくうちにたくさんの方の困難にぶつかっていますが、このように将来性を評価して支援していただける機会は非常にありがたく、明日の研究の推進力となります。

最後になりますが、一緒に研究を進めている瀬川グループのメンバー、NMRや質量分析装置のサポートをいただいている機器センターのみなさま、量子化学計算でいつもお世話になって



いる計算科学研究センターにこの場を借りて感謝申し上げます。

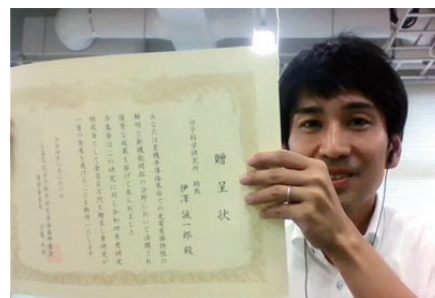
(瀬川 泰知 記)

伊澤誠一郎助教に2022年度分子科学研究奨励森野基金研究助成

このたび、「有機半導体界面での光電変換特性の解明と新機能開拓」という研究題目で、2022年度分子科学研究奨励森野基金研究助成を受賞しました。本賞は故森野米三先生の寄付により始められた基金で、分子科学分野の若手研究者の発展を期待して、助成金が交付されるものです。

まず本賞に関しまして、ご推薦頂きました千葉大学工学研究科の石井久夫先生に深く感謝の意を表します。8月31日の本賞の研究助成金贈呈式に付随して、10分程度の短い講演を行いました。私がこれまで行ってきた有機太陽電池の発電原理の解明に関する研究や、最近行っている光電変換を利用した新たな光機能である光アップコンバージョンや有機

EL素子の研究などを手短かに発表しました。残念ながらオンライン開催でしたが、分子科学分野の大御所の先生方から様々なご意見を頂き、非常に励みになりました。特にこれらの私の研究の中心概念である電荷移動(CT)状態のスピン制御について、分子研の名誉教授でいらっしゃる岩田末廣先生からCT状態のエネルギーの縮退に関する研究を55年前の博士論文で発表しているというコメントを頂きました。その研究は長倉三郎先生の研究室で行われた研究で、私の恩師である橋本和仁先生も長倉先生の研究室の出身であることから、長倉先生が創設に関わられた分子研でCT状態の研究をして、森野基金まで頂けたこと大変感銘



を受けました。先生方の先見の明に感謝するとともに、様々な歴史を感じることができ、とても刺激になった1日でした。

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、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)

米田勇祐助教に日本生物物理学会若手奨励賞

この度、「励起子電荷分離混成が酸素発生型光合成を駆動する」という研究題目で日本生物物理学会若手奨励賞をいただきました。この若手奨励賞は生物物理学の発展に貢献する若手会員に対して将来への期待を表明するために設立された賞で、書類審査による一次選考と、口頭発表を審査する二次選考によって、特に優秀な発表を行った5人以内の講演者に授与されます。

生物物理学会は自分が学生のころから参加してきた最も思い入れのある学会の一つでした。毎年参加者が1000人を超える比較的規模の大きな学会で、多様なバックグラウンドの人たちの発表を聞けるほか、自分のメインピックの一つである光合成の分光・ダイナミクスに関する研究でも、常に最新の議論が行われてきました。そういった

活気のある本学会の若手奨励賞は、これまでも尊敬する方々が受賞されているのを拝見するにつけ、いつかは自分も受賞できればいいなと思っていました。

今回の選考過程では、二次選考の口頭発表において、隣の研究室の古池さんを含む10人が審査対象となりました。古池さんは最近いい論文を出し続けておられたので、「これは厳しい戦いになるな……」と内心焦っていました。発表当日を迎えるまですごく緊張していましたが、秋山先生には「二人一緒にとれるといいなあ!」と温かい言葉をかけていただきました。最終的には写真の通り分子研から二人同時に受賞することができて、ものすごく嬉しかったです。

最後に、今回の受賞内容は主にカリ

左から7番目が筆者。
4番目が同時受賞した古池助教。



フォルニア大学バークレー校でのポストドク時代に行った研究成果によるものです(Nature Communications 13 (2022) 2275)。本研究を共に進めてきたFlemingグループの皆さん、Iwaiさんにこの場を借りて感謝いたします。そして次は分子研倉持グループでの研究でもいい成果が残せるように、これらからも頑張って研究を行っていきたいと思います。

(米田 勇祐 記)

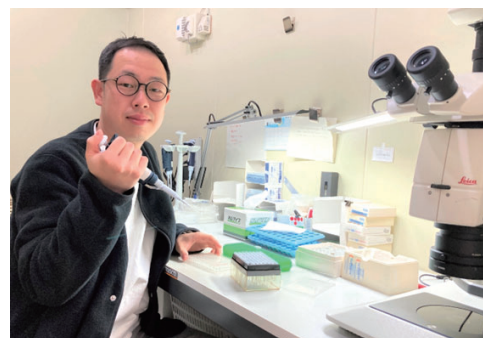
古池美彦助教に SPRUC 2022 Young Scientist Award および日本生物物理学会若手奨励賞

このたび、大型放射光施設 SPring-8 のユーザー共同体 (SPRUC) の SPRUC 2022 Young Scientist Award および日本生物物理学会の若手奨励賞を受賞いたしました。

SPRUC Young Scientist Award は、SPring-8 の利用・解析法の開発あるいは、SPring-8 を活用した成果創出に寄与した若手研究者に与えられる賞です。私はシアノバクテリア概日時計のメカニズムに迫るため、時計タンパク質 KaiC の結晶構造解析を SPring-8 で進めてきました。ビームラインの皆様のご協力のおかげで、その原子構造を解明することができました。9月26日に SPring-8 で行われた授賞講演では、本研究の意義を改めて説明させていただくとともに、SPring-8 で積み重ねられてきたこれまでの構造生物学の素晴らしい成果なしには本研究が実現しえなかったことをお伝えしました。お世話になった先生方からも温かいお言葉や

ご助言をいただくことができ、大変貴重な機会を与えていただきました。そして本賞に関し、ご推薦いただきました高エネルギー加速器研究機構の足立伸一先生に深く感謝申し上げます。

9月28日から函館にて開催された日本生物物理学会年会では、若手奨励賞選考会が実施されました。書類選考により招待された同世代の講演者と一緒に、同じ壇上で互いの研究の意義や魅力を伝え合うのは新鮮な経験でした。英語で簡潔にアピールすることが求められており、時計タンパク質 KaiC の仕組みを説明するプレゼンテーションを何度も練習して臨みました。終わった後には、みんな安堵した表情で互いの健闘を称え合いました。選考会の後も、様々な先生方と研究内容についての議論をさせていただくことができ、有意義な学会参加となりました。授賞式では分子研・倉持グループの米



田さんと同時受賞となったことがアナウンスされ、また分子研の先生方にお声をたくさんかけていただきまして、忘れられない日となりました。

最後になりますが、これまでご指導いただいた秋山修志教授、向山厚助教、一緒に作業をしていただいた研究室の皆様、共同研究をさせていただいた先生方、支えてくれた家族に感謝いたします。賞の名に恥じぬように、今後とも精進いたします。

(古池 美彦 記)

中村永研技術職員に第10回日本放射光学会功労報賞

このたび、第10回日本放射光学会功労報賞をいただきました。「UVSOR」と「あいちSR」という2つの放射光施設にて働かせていただけたことが受賞につながりました。「UVSOR」は、建設当初の第二世代光源から2度にわたって高度化され、加速エネルギー 1 GeV 以下の放射光源では、世界で最も高い輝度を誇るようになりました。この高輝度化に伴い、放射光を取り出すビームラインも、初期の偏向電磁石光源だけの時代から、現在のアンジュレータ光源が主流へと大幅に更新されてきました。その中で、放射光利用が手

探りだった黎明期から現在に至るまで、ビームライン担当者としてのユーザー対応とビームライン技術開発及び真空技術開発に関われたことに感謝いたします。また「あいちSR」では、放射光の初点に立ち会う機会を得ました。また、真空紫外・軟X線ビームライン BL7U の立ち上げにも参加させていただきました。このような機会を与えていただきました「あいちSR」の皆様、特に、竹田美和・あいちSR前所長、並びに名古屋大学SRセンター高島圭史教授にお礼申し上げます。最後に、この場をお借りして、ご



第36回日本放射光学会年会授賞式にて。

推薦いただいた皆様並びに分子研の皆様に心よりお礼申し上げます。

(中村 永研 記)

齋藤修二先生 ～マイクロ波分光、星間分子～

高野 秀路（日本大学工学部 総合教育 物理学教室）



古希のお祝いの時の齋藤先生
(2009年3月5日、富山大学 小林かおり氏提供)

齋藤修二先生が、8月31日に逝去されました。先生は分子研で助教授をされ、名古屋大学理学部に移られ、そして再び分子研に教授として戻られました。1999年に分子研を定年退職されたあとは、福井大学遠赤外領域開発研究センターに移られました。

先生は、不安定分子の回転スペクトルの専門家として、分子構造の研究に大きな足跡を残され、国際的にリードされました。さらに、日本の電波天文学の発展の初期から、星間分子に強い関心をお持ちでした。宇宙電波観測の関係者からの絶大な信頼を得て、天体からの未同定スペクトル線についての重要なアドバイスをされ、実験室で星間関連の分子の実験を行い、また、自ら電波望遠鏡を用いた観測をされました。

さらに、東京大学の山本智さんらと共同で、富士山頂にサブミリ波帯の電波望遠鏡を設置され、492 GHzにスペクトル線を持つ中性炭素原子の分布の観測を実現されました。この望遠鏡の開発は、現在稼働しているアタカマ大型ミリ波サブミリ波干渉計（アルマ望遠鏡）に日本が参画するに当たっての、サブミリ波受信機などの技術面での基礎にもつながりました。先生は、1991年に仁科記念賞、2000年に紫綬褒章、などを受賞され、天文、物理、化学の間の学際的な分野で高い評価を受けられました。福井大学をご定年後は、お会いする機会は減りましたが、研究に関心を持ち続けていらっしゃいました。

齋藤先生と私の縁は、私が大学の学部生のころにさかのぼります。宇宙誕生から生命の進化までの、いわゆる物質の進化に関心があったため、学部友人らとともに、分子研を訪問させていただきました。その際、先生が実験されているところにお邪魔して、お話を伺いました。関連の研究会でもしばしばお姿を拝見し、星間分子関係の物理化学側の代表的な存在でした。

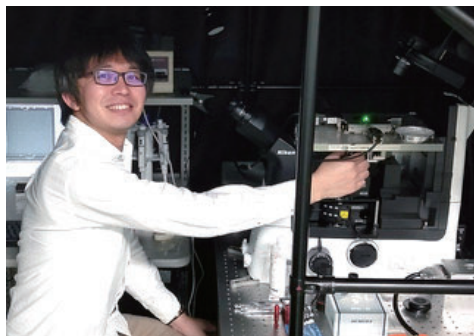
その後、1988年から名古屋大学の大学院生として、1991年から分子研でご指導をいただき、大変お世話になりました。先生から教えていただいたことを改めて振り返ると、色々な雑用がある中で研究に集中すること、頑固なまでに自分の道を進むこと、実験などで見通しがつかない時はあっさり諦め、別の方法を探ること、などが挙げられます。自分の状況を振り返るとなかなか実行できておらず、現在でも心すべきこととして、身が引き締まる感じがしております。

研究室外でのいくつかの思い出としては、名古屋大学のときに、ハワイのマウナケア山にあるJCMTサブミリ波望遠鏡と一緒に観測に行ったこと、また、分子研の研究室の遠足で、下見も兼ねて富士山に登ったことが挙げられます。先生は、山歩きがお好きでしたので、山は慣れていたと思います。ただ、マウナケア山は大変なだらかなため、車で4200 mの山頂まで登れ、ほとんど山登りをする必要はありませんでした。さすがに富士山では、皆それなりに苦労していましたが、先生はお元気に登られ、健脚なところを発揮されていました。先生、これからは、どうぞ安らかに休んでください。

New Lab

研究室紹介

中村 彰彦

特別研究部門（生命・錯体分子科学研究領域）
准教授（クロスアポイントメント）

分子研での研究展望と展開について

なかむら・あきひこ

2014年 東京大学大学院農学生命科学研究科 博士（農学）取得
日本学術振興会PD（4月-12月）

2015年 岡崎バイオサイエンスセンター助教

2018年 分子科学研究所 生命・錯体領域助教

2020年 静岡大学農学部テニュアトラック准教授（文科省卓越研究員）

2022年8月より、クロスアポイントメント准教授として着任いたしました。分子研と静岡大学農学部で25:75の勤務割合となっております。最長5年の任期の予定です。分子研滞在時は山手2号館4階東の飯野Gに場所を借りて研究をおこなっております。

プロフィールにも書かせていただいている通り、2015年1月から2019年12月までのちょうど5年間、生命・錯体分子科学領域の飯野Gで助教として勤務させていただいておりました。当時からご活躍の先生方には、改めましてよろしくお願いたします。またそれ以降に新たに分子研に着任された先生方には、初めましてよろしくお願いたします。

私は微生物の生産する植物細胞壁分解酵素（セルラーゼ）の構造機能解析で農学の学位を取得しました。分子研勤務時には光学顕微鏡を用いてセルラーゼや甲殻類外骨格分解酵素（キチナーゼ）の1分子計測をおこなっております。これら酵素の基質である、植物細胞壁の主要構成成分のセルロース（ β -1,4結合のグルコースポリマー）や甲殻類外骨格の主要構成成分のキチン（ β -1,4結合のNアセチルグルコサミンポリマー）は、どちらも生物の構造を

支える糖質であり、水に不溶性の結晶構造を形成します。すなわちその分解反応は液体と固体の界面での不均一反応となります。さらに完全な結晶領域では分子鎖同士の相互作用が強固であり、酵素分子の活性中心に分子鎖を結合することが非常に難しいという物理的制約が存在します。よって反応液中には未吸着酵素、吸着しているが反応していない酵素、実際に分解反応をおこなっている酵素が混在している状態となっており、全ての平均をとってしまふバルク計測では詳細な解析が難しいという問題があります。そこで分解反応を固体触媒上での化学反応の解析と同様に、酵素での固体分解解析（触媒が可溶性で基質が不溶性なので関係性が逆ですが）でも、反応の詳細な解析には1分子計測が必須であるということを知りました。

クロスアポイントメント教員としての研究では、このような経緯を活かしたプラスチック分解酵素の改良などをおこなっていく計画です。特に現在ポリエチレンテレフタレート（PET）分解酵素の高活性化と耐熱化が世界中で進められています。これはプラスチック廃棄物による環境汚染問題が注目を集めるようになったことに端を発して

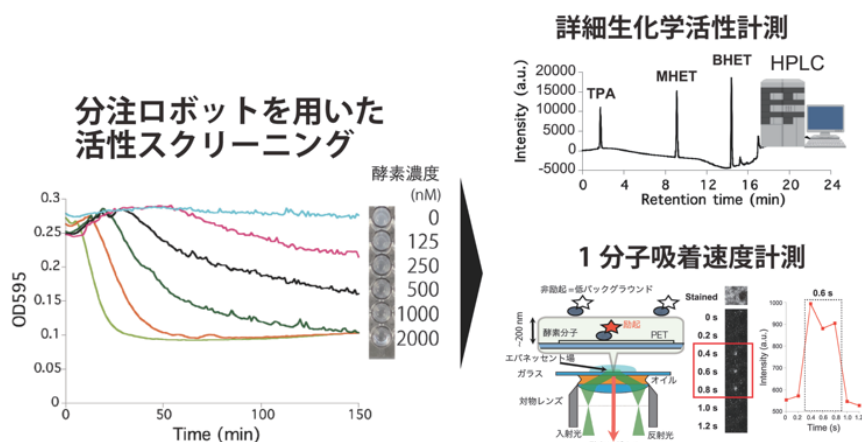
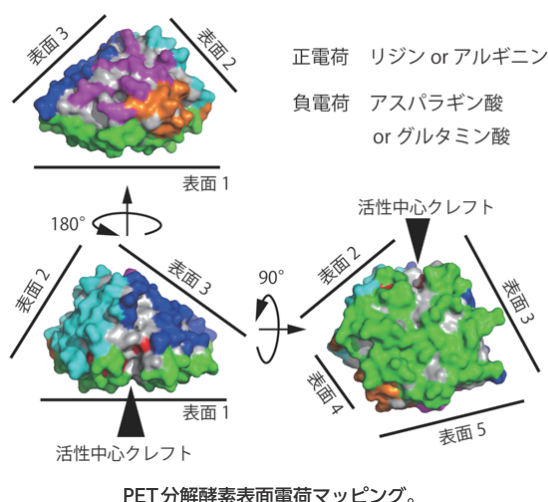
おり、使い捨てプラスチック製品に頼っている現代の生活が続く限り解決すべき問題です。現在報告されている多くの研究では、ランダム変異導入やAIを用いた活性向上変異の予測などを用いて高機能変異体の創出が行われています。しかし全ての可能性を拾い尽くすことは難しく、これまでに報告のないコンセプトの変異体は探索されない可能性が高いと言えます。私の研究計画では、セルロースやキチンの分解を参考とし、PETへの吸着力を高めることで分解活性を上げることを目指します。固体の分解ではまず基質表面への酵素の吸着親和性を上げることが重要です。吸着親和性は吸着速度と吸着時間の延長により達成できます。現在までにメタゲノム由来PET分解酵素PET2をテンプレートとして表面電荷を正に変えることで、負に帯電しているPETへの吸着速度を向上させることができています。そこでまず酵素表面に露出しているアミノ酸残基を正または負に変化させ、分注ロボットを用いたスクリーニングにより活性を向上または低下させる酵素表面の電荷マッピングの解析を行います。電荷の改変のみでは吸着時間の延長は難しいため、PETへの吸着時間の延長を達成するためにPETへ

の親和性の高い吸着ドメインの開発も行っています。変異体ライブラリーの作成及び簡易スクリーニングによる候補タンパク質の存在は確認できているので、PET酵素との融合に適した吸着ドメインのチューニングとして速度論的なパラメーターを含めた吸着能スクリーニングが必要です。そこでマイクロ流路を用いた流れのある状態での吸着タンパクの選別を行います。吸着反応及び洗浄の流速と時間を調整することで吸着速度定数と脱着速度定数のバランスが異なる変異体の選出を行い

ます。作成したドメインの吸着速度定数と脱着速度定数の決定は1分子計測により行い、どのバランスの吸着ドメインとの組み合わせでPET分解活性が向上するのか解明します。

今回の着任に関しては、出戻りのような感があり、人材流動を促進するという分子研の流儀に若干合わないような気がしておりました。しかし一度外に出たことで分子研の良さを再認識することができ、こうして再度分子研に身分を持てたことは大変ありがたいことです。特に充実した共通機器がよく

整備された状態で気軽に使用でき、また先端機器を用いた様々な器具の作成も依頼できる環境は地方大学ではまずあり得ません。最近やっと研究環境が落ち着き、分子研での実験にも少しずつ研究室の学生を連れてきています。大学とは違った分子研の環境を生かした成果を出してもらいたいと思います。学生の発表を通じて今まで分子研と縁のなかった教員への広報活動もおこなっていきたいと思います。これからしばらくの間ですが、よろしくお願いいたします。



活性スクリーニングとキャラクター化の流れ。



分子研時代の思い出、これまでと、近況



光武 亜代理

(明治大学理工学部物理学科 准教授)

みつたけ・あより／1999年9月総合研究大学院大学博士課程修了、博士（理学）、1999年10月より分子科学研究所博士研究員、2001年より慶應義塾大学理工学部物理学科助手・助教・専任講師（期間中2006年1年間米国スク립ス研究所訪問研究員（サバティカル）、2013年から2017年の3年半JST さきがけ研究員（兼任））を経て、2018年4月より現職。
（専門）生物物理学、計算化学、計算物理学、分子シミュレーション

もう20年以上前になりますが、分子研には、1996年4月から2001年3月まで受託生、総研大生、博士研究員として、理論系の岡本研究室に5年程度在籍しました。当時のこと、その後、近況などを気軽に書きます。

物理学科に在籍していた私は学部4年生の時、生物物理に関係した研究をしたいと考え、タンパク質のMCシミュレーションでサンプリング手法の開発をされていた岡本先生のいる研究室に所属しました。岡本先生が分子研に移動されて1年後、博士前期課程2年生のときに受託生として分子研理論系での生活が始まりました。大学院時代から家から授業料や仕送りをもらわず生活していたので、学振（DC2）が決まるまでは、奨学金はもらっていましたが家庭教師や大学の非常勤TAと研究の両立をしていました（DC2採択年から分子研の総研大生へのRAの制度ができました。利用はできませんでしたが、昔から総研大には学生をサポートする良い制度があります）。分子研は学生が少なかったですが、北川研に在籍していた1つ下の学年の女子学生さんとは、入学して1年半経った頃に知り合い、夜研究室によく遊びに行きました。おかげで彼女とは今も親友です。分子研ではソフトボールが盛んで、その思い出もたくさんあります（詳しくは岡本先生のホームページをご参照く

ださい）。大会の1ヶ月前から始まる練習の際、天気の良い日にはグラウンドで青空を眺めていたことを思い出します。また、私は理論の平田研究室の準メンバーでもあり、土日はテニスをしたり冬はスキー合宿に同行したりして楽しみました。

分子研には最先端の設備があり、よく研究会も開催されていたので、国内外の多くの研究者と知り合いになりました。のちにサバティカルでお世話になるCharles L Brooks教授（茶理）とも知り合いました。また、平田研におられた丸山博士や、名古屋大学の吉田さんとも現在共同研究をしています。分子研の研究者はみんな熱心で、研究のことを熱く語っていたのが印象的でした。岡本先生からはオリジナリティーのある研究をすることの重要性を教わりました。研究に関しては、拡張アンサンブル法に関する研究を進めました。分子研での博士研究員生活を終えて慶應義塾大学に移動する時には、拡張アンサンブル法に関してオリジナリティーの高い仕事もできました（詳しくは分子シミュレーション学会会誌（“アンサンブル”16(1),1-6(2014))に掲載）。季節や時間を感じないほど集中して研究ができる環境がある一方で、地方の大学といった感じで多くのイベントもあり、充実した時間を過ごしました。

慶應義塾大学に移動してからは、理論研という大講座のスタッフとなり、研究所とは違って教育業務も増えて忙しい日々が続きました。各教員は独立して研究していたこともあり、全てを自分でやらなければいけないので、独身時代には毎日大学に9時から夜中12時ぐらいまでいました。同僚の高野教授が高分子で開発していた緩和モード解析という解析手法をタンパク質系に応用する研究を始めたのがこの頃です（これに関しても、先ほど紹介した分子シミュレーション学会の同記事に記載）。1年間、サバティカルでサンディエゴのスク립ス研究所・茶理研に留学する機会もいただきました。茶理研にも多くのポスドクの方がいて、良い経験ができました。

人生で大きく生活が変化したのは子供が生まれてからです。私は学会の男女参画に携わることが多かったので、事前情報もあり多少覚悟もできていたつもりでしたが、実際に子供が生まれてからの状況は想像を大きく超えていてドタバタでした。娘は1月末に生まれましたが、運良く認可保育所に4月から入れました（大学の保育園を利用する機会はなかったですが、現在多くの大学に保育園ができてよかったと思います。任期付の方も利用でき、知り合いも何人か利用しています）。大学での第一優先はとにかく教育で、できる

だけ同僚や学生に迷惑をかけないようにしました。また、影でいろいろ調整してくれていたであろう周囲の方との「報連相」を大切にしました。

子供が生まれた後の大きな変化は研究時間です。生まれる前は時間が無限にあって、1週間にどれくらい研究ができるかなど考えたこともありませんでした。しかし子供が生まれてからは、自由にできる時間は週5日（とくに0歳の時は土曜日預けるのが難しい）、9時から4時半（4コマ分）で計20コマ分しかなく、そのうちの半分以上授業やゼミなどを行うと、自分が研究できるコマ数がどれくらい残るか考えました。家事も含めると自分が動いている時間は、独身の時より多いのですが、研究に関する時間は足りなくて、時間内にいかに効率よく仕事をするかを考えました。子供が3,4歳になるぐらいまでは特に大変だったと思います。でも、子供の笑顔が掃除機で吸うかのようにストレスを吸収してくれました。

子供が小さいときにJSTさがけに採択されました。さがけでは多くの構造生物学の研究者と知りあえ、今でも共同研究をしています。年に2回成果報告会があって、その1ヶ月ぐらい前から夫のお母さんに関西から来てもらい、自分は夜中に研究室にもどって研究をしました。このとき分子研時代の感覚がもどってワクワクしたのを覚えています。本当に分子研では研究漬けだったので、研究をするときは分子研時代の感覚を思い出します。自分にとって若い頃、時間を忘れて教育・研究に没頭した時期というのは大切で、とても楽しくかつ自分の基盤にもなる経験でした。一方で子供が生まれてからは、外圧がかかることによってやっとな「効率」というものを考えることができたと思います。

慶應義塾大学在籍中にたくさん公募に応募し、縁あって明治大学に自分の研究室を持てることになりました。異動してからは教育業務も増え、加えて大学業務、研究室の運営、外部の仕事などで、より忙しくなっています。同僚はしっかりとした自分の考えを持っていて良い人が多く、色々と助けてくれて大変感謝しています。人数が少ないのでみんなで頑張っていこうという感じでしょうか。明大の学生はバラエティに富んでおり、とても面白いです。研究室には4年生3名、博士前期課程2年が1名、博士後期課程1年が1名いますが、みんなで研究室を支えています。企業・アカデミックどちらの分野でもいいので、将来社会で活躍してもらいたいと思っています（研究室に関しても、分子シミュレーション学会会誌（“アンサンブル” ,22(4), 350 (2020)) に研究室紹介の記事を記載）。

2022年は本当にいろいろな大学業務、学会の仕事、その他降ってくる仕事などがあり、研究をしようとするとストレスになるので、自分で研究することを一旦諦めました。いまま土日のどちらかは大学にいきますし、締め切り間際は夫に任せて夜遅くまで仕事をすることもあります。9時から19時ぐらいのコアタイムは変わらないです。結構頑張ってきたなと過去を振り返ったりもしました。私大で教育、雑務がありながら（国公立大も同じかもしれませんが）、学会等の仕事もして、子育てして、研究もしてきたので、十分頑張ってきたのではと思います。一方、実は少し心に余裕ができた部分もあり、家のことに時間をとったりもしています。自身の研究室なので、授業以外は割と時間を自由にでき、平日の学校行事や夏休みや冬休み期間の時間の調整もしやすいです。子供は小6で中

学生になれば見向きもしてもらえなくなるのではと思っているので、今を大切にしてなるべく一緒にいようと思っています。です。今なぜ忙しいのか、少し分からなくなっているところもあります。今後、もっと落ち着けば研究時間ができるのか、誰かに聞いてみたいところです。

後半は子育てのことばかりでしたが、多くの人に支えてもらってこれまで歩んできました。この中でも研究に没頭できた分子研時代は大切な時間で、自分の基盤になっていると感じます。研究分野の発展がわかる世代になってきたので、実験技術、計算能力や技術が大幅に発展し、最近の新しいことについていくのに必死な反面、ワクワクすることも多いです。今後、これまで開発した化学物理を基礎とした方法論などを駆使して、創薬に関連した系で計算機を使って予測ができるような研究をしたい、自分の地盤をしっかり築いて時間を見つけて地道に良い研究をしていきたい、と思っています。



分子研で学んだことと近況



吉田 将己

(関西学院大学生命環境学部環境応用化学科 講師)

よしだ・まさき / 2013年九州大学大学院理学府化学専攻博士後期課程修了、博士(理学)。2013年分子科学研究所博士研究員、2014年北海道大学大学院理学研究院化学部門助教を経て、2022年より現職。

2011年から2013年まで、生命・錯体分子科学研究領域の正岡グループにて特別共同利用研究員、博士研究員としてお世話になっていた吉田です。今回、大塚先生にお声掛けいただき、「分子研出身者の今」を執筆させていただくことになりました。第一線でご活躍されている錚々たる先生方がこのコラムをご執筆されている中で、まだ経験が浅く研究者として身を立てるために悪戦苦闘している最中の私のような若輩者には分不相応ではないかとも迷ったのですが、分子研には大変お世話になりましたので、分子研での思い出と近況について簡単にご報告させていただきます。

私は博士後期課程2年だった2011年に、所属研究室(九州大学・酒井 健先生の研究室)の助教であった正岡重行先生(現・大阪大学教授)が分子研の准教授としてご栄転された際に、正岡先生の研究テーマを担当していたことから一緒に特別共同利用研究員として分子研に移りました。分子研では、准教授の正岡先生と新しくご着任された助教の近藤美欧先生(現・大阪大学准教授)にご指導いただきました。正岡グループは主な研究テーマとして人工光合成を研究している無機・錯体化学系の研究室であり、その中で私はルテニウム触媒を用いた水の酸化の研究を行っていました。一方、分子研は研究室間の垣根の低さがよく特徴として挙げられますが、正岡グループも櫻

井英博先生(現・大阪大学教授)や永田 央先生(現・名城大学教授)のグループと毎週英語での合同セミナーを開催していました。また、村橋哲郎先生(現・東京工業大学教授)のグループとも合同セミナーをしていましたし、魚住泰広先生のグループともよく交流させていたっていました。こうした交流の中で、それまでの無機化学とは違う有機化学(特に有機金属化学)の視点や知識を学ばせていただいたことは大きな刺激になりましたし、その後の研究でも役に立っています。

そのような中で、私の研究はというと(今考えると目標の高さに対して「自分だけの触媒で達成したい」に固執しすぎていたため)まったく上手くいっていませんでした。いよいよ学位申請に臨まないといけない2012年の秋になり、「分子研に来てから成果ゼロではいけない」と手持ちの化合物から半ば無理やりひねり出した研究が、今考えると自分の大きな転換点の一つだったように感じます。具体的には、ルテニウム触媒を使っている中でたまたま単離できたRu-O-Ru骨格をもつ失活生成物を掘り下げたという研究です(*Angew. Chem. Int. Ed.*, **2014**, *53*, 11519.)。この錯体は化学酸化しようとも電解酸化しようとも一切の触媒活性を示さない、触媒の観点から見れば箸にも棒にも掛からない錯体なのですが、逆に言えば安定に多電子酸化還元できる

と言い換えることもできます。そこで、その安定性を利用して高酸化状態や低酸化状態を単離・結晶化し、固体物理の専門家の中村敏和先生にも多大なご助力をいただきながらRu-O-Ru骨格内における電荷の非局在化を詳細に調べることで、何とか論文にまとめることができました。ニッチな成果なので被引用数はなかなか伸びていませんが、後述するような理由もあり今でも非常に思い入れのある論文です。正岡先生に近藤先生、その際には大変ご迷惑をお掛けいたしました但本当にありがとうございました。

その後、ご縁があって北海道大学の加藤昌子先生の研究室に助教として着任し、加藤先生が関西学院大学にご転任された現在も、関学大の講師として引き続き加藤先生とともに研究をさせていただいています。分子研時代から一転し、北大・関学大では主に刺激応答性を示す分子結晶の研究に従事しています。人工光合成と刺激応答性結晶とでは必要な知識や実験技術から研究のモチベーション・興味の対象まで大きく違います。加藤先生や准教授の小林厚志先生の手厚いバックアップや、優秀な学生さんたちの日々の頑張りのお陰で何とか研究を進めてきましたが、特に当初はその差に非常に戸惑い「この分野で一体何をすればいいのか分からない」と悩みました。そうした中で役に立ったのが、前述の分子研

でのRu-O-Ru二核錯体の研究をした経験です。一つの化合物と向き合い、いろいろな分野の視点から徹底的にデータを精査したり過去の研究をサーベイしたりして「何が面白いのか？」と考えた分子研での経験が身についていたお陰で、何とか途切れずに成果を出すことができ、その中から「もしかしたら自分の研究はこういうものなのか？」のようなものがおぼろげながらも見え始めているような気がします。

最後に、北大着任後の研究のうち、分子研での垣根の低い交流で学んだ視点からの着想が特に色濃い成果を2つほどご紹介いたします。まず1つ目は、メタノール蒸気の吸脱着によって色とスピン状態とを変化させるニッケル(II)錯体です (*Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, 56, 2345.). もともとこの錯体は思いがけず取れたものだったのですが、前述のRu-O-Ru錯体の研究の時に中村先生に磁性のことをご指導いただいた経験から「磁性を測定すれば面白いのでは？」と思いつき、その方針でまとめることができました。2つ目は、ビフェ

ニル配位子を有するメタラサイクル型の強発光性白金(II)錯体です (*Chem. Eur. J.*, **2020**, 26, 5449.). この錯体は従来は嫌気条件下で禁水試薬を用いないと合成できないようなものでしたが、有機ボロン酸のトランスメタル化を利用することで空気下でも簡単に合成できるようになりました。この着想は、完全に分子研時代の有機化学系の研究室との交流から得られたものです。その他にも、分子研時代の後輩とコラボレーションして私の論文の表紙イラストを制作してもらったりと (*Dalton*

Trans., **2021**, 50, 8696; *Adv. Opt. Mater.*, **2022**, 10, 2102614.), 分子研時代の経験や人脈は今でも私の研究の大事な一部を構成しています。

とはいえ、私はまだまだ任期付きの身分であり、生きていくために早急に次の職を探さないといけません。分子研でお世話になった先生方・皆さまと次にお会いした時に「吉田も頑張っているな」と思っていただけのように引き続きしっかり精進してまいりますので、今後ともご指導ご鞭撻のほどどうぞよろしくお願い申し上げます。



ラボのメンバー。1列目左から2番目が筆者。

湊 丈俊 主任研究員

さんのへまち

三戸町ふるさと応援大使

2021年10月より、生まれ故郷である青森県三戸町のふるさと応援大使を拝命しております。ふるさと応援大使と聞くと、芸能人などが担う役割のようにも感じるかも知れませんが、三戸町のふるさと応援大使は、私の他に、三戸町にゆかりのある俳優、騎手（私の同級生の武士沢友治氏）、自衛官（元ブルーインパルス飛行隊長）、会社役員、テレビ局アナウンサー／リポーター、学習アドバイザー、落語家、医師、りんごを普及させる会の会長などが任命されており、各自がそれぞれの活動の中で町をPRしております。以前より私は、故郷に何らかの形で貢献したいと思っておりましたので、ご依頼を快諾させて頂きました。三戸町は、「11ぴきのねこ」の作者である馬場のぼる氏の出生地として知られていますが、私にとっては、夏は虫取り、冬は雪遊びが楽しめる自然や、おいしいりんごジュース（図1）があり、お互いを大切にする町です。この記事を通じて、三戸町の名前を憶えて頂ければ幸いです。実は、分子研に勤務している方の中には、私以外にも三戸町にゆかりのある方がいますので、是非探してみてください……。 (湊 丈俊 記)



図1 三戸町のりんごとりんごジュース。



分子研を去るにあたり

南谷 英美

大阪大学産業科学研究所 教授
(前 理論・計算分子科学研究領域 准教授)

分子研の思い出

みなみに・えみ／分子科学研究所では准教授として2019年4月から2022年8月までお世話になりました。9月からは大阪大学産業科学研究所ナノ機能予測研究分野の教授となりました。メンバーが他に誰も居ない0からのスタートなので新しい研究室立ち上げのための準備に追われています。



この「分子研を去るにあたり」の原稿を書いているのは、大阪に異動してきてはや3ヶ月経ったことです。自宅の引っ越しは終えたものの、まだ研究室の大量の計算機と本は岡崎から動かせておらず、大阪と岡崎を行ったり来たりしています。

分子研に准教授としてお世話になったのは2019年4月からの3年半です。皆様のおかげで大変楽しく充実した日々を送れました。私がもっぱら研究していたテーマは、磁性不純物における量子多体効果といった固体物理の分野でしたので、実は着任するまで分子研とはあまりご縁がありませんでした。数少ない接点が、前所長の川合眞紀先生です。川合先生が所長に就任された年に、表面科学分野の若手研究会で分子研に伺い、全体的に余裕のある雰囲気、漂っている良い場所だなと思ったことを覚えています。

准教授の公募が出たのを見て、周り

に分子研はどんなところなのかを聞いてみた所、「准教授の楽園」という答えが返ってきました。楽園にはぜひ行きたいものですから、思い切って応募しました。着任が決まり、分野もずれている自分が受け入れてもらえるのだろうかとおっかなびっくり分子研で暮らし始めたのですが、そうした心配は杞憂でした。当時の理論領域の主幹、斉藤先生を始め、周囲の先生は皆温かく、また教授・准教授の区別なくざっくばらんに話す風通しの良い文化もあり、すぐにホームとして寛いで研究に集中できるようになりました。

分子研での生活は、まさしく楽園でした。研究以外の業務は最低限でしたし、ほとんどの日々を研究して過ごしました。着任して1年を過ぎた頃、コロナ禍が始まってからは、仕事場所を家中心にして引きこもって研究していました。頻繁にあった出張も全て消え、世の中がしんと静まりかえった中

での生活は、内向型の自分には意外に合っていたのかもしれませんが。時間や手間のかかる研究に一層集中することができ、第一原理計算を用いた電子フォノン相互作用の精密解析による半導体の中のジュール熱発生機構の解明などに取り組みました。また、分子研で石崎先生を始めとする様々な先生と話す中で、乱れた複雑な系にも興味を持ち、新しいテーマとして、トポロジカルデータ解析をもちいたアモルファス物性の研究をはじめました。分子研で始めた研究を、大阪大学にてさらに展開していく所存です。

最後になりますが、お世話になった分子研の皆様に御礼申し上げます。とくに、助教の下出さん、理論秘書室の赤羽さん、千葉さん、増田さんには研究室生活を支えていただきありがとうございました。この場を借りて、深く感謝を申し上げます。今後とも引き続きよろしく願いいたします。

小坂谷 貴典

京都大学大学院理学研究科化学専攻 准教授
(前 物質分子科学研究領域 助教)

分子研での4年間

こいたや・たかのり／2013年に東京大学大学院理学系研究科化学専攻で博士号(理学)を取得後、2013年4月より東京大学物性研究所 特任研究員に着任。2016年9月より東京大学大学院総合文化研究科 助教を経て、2018年6月より分子科学研究所物質分子科学研究領域 助教。2022年8月より現職。



私は2018年6月から2022年7月までの約4年間横山グループにお世話になりました。着任前は東京大学の駒場キャンパスに勤めており、若い学生さんが非常に多い環境でしたので、大学と比べると分子研は非常に落ち着いた雰囲気だなという第一印象を持ったことを覚えております。研究の面では、所属グループの設備だけでなく共用施設もとても充実しており、着任当初は非常に恵まれた環境に大変驚きました。

もともと超高真空中のきれいな環境で固体表面における分子吸着や反応を研究していたのですが、その発展として気相が存在する準大気圧条件下での触媒反応のオペランド分光研究も分子研に着任

する前から始めておりました。横山先生と前任の高木さんがSPring-8で最新の大気圧光電子分光システムを構築して研究を行っていることは当時折に触れて聞く機会があり、興味を持っていたところ、幸い助教として採用していただけることになり、グループの一員としてさまざまな実験に参加できることになりました。並行して分子研内でも装置の新規立ち上げを進めておりましたので、分子研と放射光施設を行ったり来たりするまあまあ忙しい生活でしたが、今思えば貴重な経験ができたと思っています。特に雑用が少なく研究に専念できた期間を持てたことはとても有り難いことだったと、再び大学に戻った今では感じております。

横山先生には自由にテーマを選ばせていただき、自分なりに考えながら研究を進めることを許していただきました。一から主体的に研究ができたことは非常に得難い経験でした。大変感謝しております。また、横山グループ助教の山本さんにはUVSORのユーザーサポートやSPring-8での実験などで大変お世話になりました。お礼申し上げます。

最後となりますが、記事を執筆するにあたり簡単に振り返ってみるだけでも、分子研在籍中は本当に多くの方々にサポートいただきましたことを思い出します。この場をお借りして皆様に感謝申し上げます。ありがとうございました。

村木 則文

慶應義塾大学理工学部化学科 准教授
(前 生命・錯体分子科学研究領域 助教)

分子研での9年を振り返って

むらき・のりふみ／2010年5月 東京大学大学院博士課程修了。博士(学術)取得。学術振興会特別研究員(SPD)を経て、2013年6月より分子科学研究所特任助教。2016年5月より助教。2022年9月より慶應義塾大学理工学部化学科 准教授(有期)。



右端が筆者。

分子研で金属タンパク質の結晶構造解析の経験者を募集しているという話を聞き、2013年、当時面識のなかった青野重利教授の研究室に特任助教として加わりました。当初は4年ぐらいで転出するつもりだったのですが、結果的に9年もお世話になりました。当

時は31歳でしたので、30代のほとんどを分子研で過ごしたことになります。この間、結婚や子育てなど私生活面も大きく変化しました。

2016年度からは助教に採用していただきました。(6年を目処に転出を推奨するものであっても) 任期無し助教と

して研究に取り組めたことは、ハイリスク・ハイリターンな蛋白質結晶構造解析の研究者として大変ありがたいものでした。実際に、着任当初から始めた光センサー型転写因子の研究ではMITのグループに先を越されて悔しい思いをしました。しかし、その後に始めた一酸化炭素

生合成酵素の研究では海外勢に先駆けて成果を報告できました。当時は研究室のスタッフも少なく、青野先生と二人で刑事ドラマ『相棒』のように一酸化炭素生合成機構の謎解きをしたことを覚えています。この研究では、奥村久士先生や内山進先生の研究グループと所内共同研究ができたことも大きな糧でした。分子研には、構造情報を基盤とした動的な解析（シミュレーションや一分子観察等）を得意とする研究グループが多いことが強みだと思います。構造生物化学分野のコ

ラボレーションがさらに活発化することを願っています。

研究手法は変わらないものの、青野先生の紹介により生物無機化学分野のコミュニティに加わるが増えました。渡辺所長をはじめ、生物無機化学者には分子研と接点のある方が少なくなく、多くの知己を得ることができました。この原稿を書いている今も生物無機化学の国際学会に参加しており、講演や座長であたふたとしております。そして、現在のポストを得たのも、

当分野での縁あってのことです。異動して3ヶ月が経ち、たくさんの学部生が行き交う大学のキャンパスにも慣れ、分子研の広々とした研究環境を懐かしんでおります。

“懐かしむ”と書いておいて矛盾するのですが、実のところ、すでに共同利用という形で分子研にお世話になっています。青野先生、研究員の南さん、東田さん、秘書の中根さん、大変お世話になりました。そして、ひきつづきよろしくお願いいたします。

谷中 冴子 九州大学大学院薬学研究院 講師
(前 生命・錯体分子科学研究領域 助教)

九州にて実感する大学共同利用機関のありがたさ

やなか・さえこ／2008年3月東京大学工学部卒業。2013年東京大学大学院新領域創成科学研究科博士課程修了後、2015年6月まで日本学術振興会特別研究員。その後、分子研の特任助教、助教を経て、2022年9月より九州大学大学院薬学研究院の講師に就任。

2015年7月より2017年10月まで生命錯体領域、生体分子機能研究部門（加藤G）の特任助教を務めた後、2017年11月から2022年8月まで同グループの助教を務めました。分子研を去って外から岡崎の研究所を眺めると、岡崎は大学共同利用機関法人として先端技術を提供する素晴らしい拠点であると改めて実感します。先端技術の開発・活用はサイエンスのフロンティアを走るには欠かせないものです。先細りする日本のアカデミアにおいて、大学共同利用機関法人の役割は今後一層重要になるのではないかと考えております。九大に異動してまだ数ヶ月ですが、九州大学のラボメンバーが岡崎の様々な共同利用機器の存在を知り、すでに外部ユーザーとして積極的に岡崎を活用しております。特にコロナ禍の影響もあり、ここ数年、自分が担当してきた装置群への遠隔・自動計測の

システム導入が進んできました。九州にいても利用可能な便利な遠隔計測システムに大変助けられております。こうしたシステムが今後どんどん導入されていくことに1ユーザーとして期待しています。

所属していた加藤Gに目を向けると、加藤Gは特に外に開かれた大学共同利用機関法人の研究室らしい研究室であったように思います。加藤晃一教授は名古屋市立大学大学院に研究室を持ち、ExCELLSの研究活動もあり、研究室には外部の共同研究者が常時出入りしておりました。そうした中で自分も自然と組織や人のネットワークの中で協働的に研究活動するということを学び、皆で協力することで起こるシナジー効果を経験しました。

奇しくも現在私が所属している九州大学大学院薬学研究院は小講座制のスタイルを維持する組織であり、教授、

准教授（講師）、助教が一つのユニットとして協力しながら教育、研究室運営、研究活動に取り組んでおります。近年、助教や准教授がPIとなり、「独立して」研究室を運営することがトレンドとなっており、自身も一時期は早く「独立する」ことにこだわった就職活動を行っておりました。一方、往々にして、小規模ワンオペ研究室となると、予算も人員も十分に無い中での苦しい研究室運営となるというネガティブな側面の話も聞きます。人口も経済も縮小する日本におけるサステナブルな組織のあり方について考えられます。

いずれにしても自分の研究もキャリアもまだまだ道半ばです。これまでお世話になった多くの皆様に深く感謝するとともに、今後も共同利用にお世話になりながら、より一層精進していきたいと思っております。



The most precious memories of my life

Pei Zhao (Research Assistant Professor)

Theoretical and Computational Molecular Science

It has been four years since I came to Japan in October of 2018 and worked at Institute for Molecular Science (IMS). When I finished my PhD course at Xi'an Jiaotong University, China, in 2018 and faced a number of choices, I was so happy to receive the job offer from Prof. Masahiro Ehara to work at IMS as a postdoctoral researcher. I thought it was a great opportunity to enrich my research experience and to improve myself, so I started my new research at IMS. Actually, I had a short internship at the group of Prof. Ehara during my PhD period, and IMS is really a peaceful place to do research.

During my PhD study, I mainly worked on theoretical studies of fullerenes in terms of their geometric and electronic structures as well as their chemical activities. Since I joined the group of Prof. Ehara, I have learned more knowledge about other materials, such as carbon nanotubes, zeolites, and metal clusters. We focused on the unique electronic structures of these materials to disclose the catalytic activity and optical properties. Research in a new field is not easy, and I am so grateful that Prof. Ehara can always find time to discuss with me even though he is very busy. These discussions are indeed helpful to solve the problems effectively and proceed my research smoothly. It is also great that I can have access to many other computational packages and have a deeper understanding for density functional theory calculations. I believe the research experience at IMS will be very beneficial to my future carrier.

I also have great experience in my life at Okazaki. It is always wonderful for me to see different cultures



and beautiful landscapes. The cherry blossoming and the red maple leaves impressed me a lot. I also enjoyed the beautiful Otogawa river fireworks display and the delicious Japanese food. At the third year since I came to Japan, my husband and I have our first child. We were so excited to know this news, but it was tough to go through the whole pregnancy during the covid-19 pandemic. Also, my husband is working at Kyoto University, so I need to take care of myself. Fortunately, many people kindly helped me when I had trouble. Finally, our baby girl came to the world safely. I felt so happy when I saw her face. I would like to express my gratitude to Prof. Ehara, Sugimoto-san, and Nagasono-san for their support during my pregnancy. Now, my daughter is one year old, and we can walk around Otogawa river and nearby parks to enjoy our time in holidays. As she grows up, we will travel more places in Japan and make our beautiful memories. It is not easy to take care of a baby, but it becomes less stressful because of the help of many people. I believe these years at IMS would be the most precious memories of my life, and I will always keep it in mind.



NEW STAFF

新人自己紹介

2022年7月1日着任

布 能 謙

ふのう・けん

理論・計算分子科学研究領域

理論分子科学第二研究部門 特任助教



2016年に東京大学で博士（理学）を取得後、北京大学、理化学研究所での特別研究員を経て、2022年7月より石崎グループの特任助教としてお世話になっております。今までは理論物理の中でも、非平衡統計力学と量子情報に関する研究を行ってきました。分子研では生物や分子について徐々に学び、境界領域における面白い現象を調べたいと考えています。よろしくお願い致します。

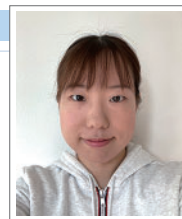
2022年7月1日着任

谷 浦 愛 子

たにうら・あいこ

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



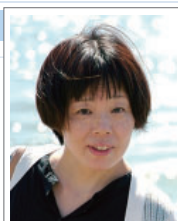
2022年7月より、秋山グループの技術支援員としてお世話になっております。以前は食品関係の会社に勤務しており、産後1年半ぶりの社会復帰です。まだまだ不慣れでご迷惑をおかけしている事も多々ございますが、少しでも早く皆様のお役に立てるよう努めて参ります。どうぞ、宜しく願い致します。

2022年7月1日着任

杉 浦 咲 枝

すげうら・さきえ

国立大学法人総合研究大学院大学 次世代研究者挑戦的研究プロジェクト推進室 事務支援員



主に語学に携わる仕事をしてきました。数学者になるという意思がある息子をもっており、研究者、教授の方々がいらっしゃる研究所や、どんなフィールドに就職ができるかに興味がありました。本大学には、色々な学生支援や、次世代研究者挑戦的研究プログラムがあることを知り、研究者が活躍しやすい環境づくりに参加できていることをうれしく思います。どうぞよろしくお願い致します。

2022年8月1日着任

中 村 彰 彦

なかむら・あきひこ

生命・錯体分子科学研究領域 特別研究部門
クロスアポイントメント准教授

分子科学研究所と静岡大学のクロスアポイントメント(25:75)で最長5年間お世話になります。2019年12月まで生命・錯体分子科学研究領域で助教をさせていただいており、外に出てみて分子研の研究環境のありがたさがわかりました。この環境を生かしプラスチック分解酵素の改良と開発を進めていきたいと思いますので、これからよろしくお願い致します。

2022年8月1日着任

YAN, Yaming

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



I am a postdoctoral research associate working on theoretical molecular science, and interested in the field of condensed phase quantum dynamics--developing new theoretical methods as well as applying them in photosynthetic light-harvesting complexes and organic semiconducting materials. Before joining IMS in August 2022, I worked as a postdoctoral research associate for two years at Institute of Chinese Academy of Sciences (ICCAS), where I also completed my Ph. D. training.

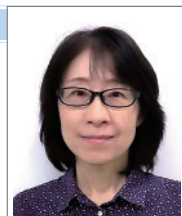
2022年9月1日着任

大 原 さとみ

おおはら・さとみ

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9月より秋山グループでお世話になっております。9年前、名古屋大学医学系研究科で疫学調査に参加したことがきっかけで、研究に携わるようになりました。

歳を重ねた者にとって、新しいことを覚えていく日常は喜びであり、とても励みになっています。不慣れな私にお付き合いいただき、ご指導くださっているみなさま、いつもありがとうございます。



2022年9月26日着任

CHAKRABORTY, Ipsita

メゾスコピック計測研究センター
繊維計測研究部門 特任研究員

After completing my PhD from Muroran Institute of Technology in September 2021 with MEXT scholarship, I joined Okamoto group in IMS. My research caters towards the development of an optical microscope to analyze chemical, biological or photonic samples using the principles of circular dichroism.

2022年10月1日着任

藤川 武 敏

ふじかわ・たけとし

研究力強化戦略室
特命専門員

企業研究所の（株）豊田中央研究所で、エンジン燃焼解析関係の研究に27年間、知財・広報関係の業務に6年間従事後、（公財）豊田理化学研究所へ7年間出向し、事務全般の仕事に携わりました。この間、分子研の皆様とは多くの接点がありましたが、このたび縁あってこちらで勤務させて頂くことになりました。これまでの経験を活かしつつ、微力ながら皆様にお役に立てればと思っています。

2022年10月1日着任

丸 山 莉 央

まるやま・りお

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10月から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。

無機化学の分野に携わることが多かったため有機合成については素人ではありますが、研究室の皆様のお力を頂きながら実験を行っております。少しでも研究のお手伝いができるよう、安全第一で業務に取り組ませていただきます。どうぞよろしくお願い致します。

2022年11月1日着任

萩 原 健 太

はぎわら・けんた

極端紫外光研究施設
光物性測定器開発研究部門 IMSフェロー

ドイツでトポロジカル物質の研究で博士の学位を取得後、11月より松井グループにてお世話になっております。これまでの光電子分光、光電子運動量顕微鏡の経験を、UVSORでの研究発展に生かしていきたいです。所内外のみなさまとの議論や共同研究等も楽しみにしています。初めてのことで、戸惑うことも多いですが、精一杯やっていこうと思います。どうぞよろしくお願い致します。

2022年11月1日着任

西 岡 稚 子

にしおか・わかこ

光分子科学研究領域
光分子科学第二研究部門 事務支援員

11月より大森研究室で事務支援員としてお世話になっております。大学時代は光について学び、卒業後の就職先では、光を扱う製品開発に携わっておりました。その後しばらく子育てに専念しておりましたが、またこうして学んできた分野に関われる機会をいただけたことに感謝しております。周りの皆様にご指導いただきながら、一日でも早く皆様のお役に立てるよう努力してまいりますので、どうぞよろしくお願い致します。

2022年11月1日着任

山 本 優里佳

やまもと・ゆりか

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11月より秋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。

今まで経験したことのない事ばかりで勉強の日々を送っていますが、温かいご指導に感謝しています。

皆さんのお役に立てるよう頑張りますので宜しくお願い致します。



2022年11月1日着任

蜂須賀 円

はちすか・まどか

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11月より、秋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。数年振りの実験業務で緊張や不安もありますが、グループの皆様に温かくご指導頂きまして、作業にも少しずつ慣れることができております。ご指導頂きましたことを活かし、お役に立てるよう努めて参ります。どうぞ宜しくお願い致します。

アウトリーチ活動

第133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133回分子科学フォーラム（YouTube Liveによるオンライン開催）では、相模中央化学研究所の田中陵二先生に「物質科学とその美の源流をさぐる」と題してご講演いただきました。色材と鉱物、つまり、美しい色と、綺麗な形に対する憧れから、これらを手に入れたい、作り出したい、という素直な探究心が芽生え、ここから化学・物質科学が誕生したのであり、暗記科目とみなされがちな化学は、実は「物質の質感を伴うモノの学問」と捉えることができると述べられました。また、ご講演では、色材と鉱物について、古代からの天然物利用、および人工合成の歴史をわかりやすく解説いただきました。さらに田中先生ご自身が過去の合成方法を再体験されたことや、柔らかい結晶（柔軟性結晶）のお話など、興味が尽きませんでした。ご視聴の皆様からは、左右水晶の見分け方から、研究で印象に残った出来事、さらに結晶学、鉱物学の現状と将来性など、様々なご質問・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疑しました。

第134回分子科学フォーラムについて

2022年12月9日に行われた第134回分子科学フォーラム（YouTube Liveによるオンライン開催）では、学習院大学の田崎晴明先生に「ミクロとマクロを結ぶ科学：小さくてあまり面白いものがあるが、たくさん集まると新しい面白い性質が勝手に生まれてくるという話」と題してご講演いただきました。ご講演ではまず、一見平らな大地が、実は平らではないなど、この世界が私たちの直感で捉えられる通りにはできていない、ということからお話を始められました。物質が連続したものではなく、原子・分子といった粒々でできていることも、元々直感では捉えられないもので、そういった「小さくてあまり面白いもの」から、「新しい面白い性質」が生まれてくること、特にその典型である相転移（イジング模型）について、実際に数式を紐解きながら説明されました。さらに、相転移点付近でイジング模型にフラクタル構造が現れることを示され、元々そうなるように作ったわけではないのに、単純な模型から複雑な現象が現れるのは、ある種の数学的奇跡であると述べられました。ご視聴の皆様には、イジング模型で水の相転移なども説明できるか、熱力学は統計力学の基礎になっているのか等、様々なご質問・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疑しました。

(広報室 記)

共同利用研究ハイライト

実験と計算の協奏解析による揺らぎを持つ巨大複合体の溶液構造解析

杉山 正明 京都大学複合原子力科学研究所 教授

溶液散乱（小角散乱）は、文字通り溶液中の生体高分子の構造解析手法の一つであるが、分解能の点からは、X線結晶回折・NMR・クライオ電顕などと比べると一歩譲ることとなる。そこで、溶液散乱を用いた研究では「試料が溶液中に存在している」事に着目し、構造的に揺らいでいる状態≒Nativeに近い状態の構造解析を目指すこととなる。本稿では、著者のグループ（京都大学複合原子力科学研究所）、加藤晃一教授のグループ（ExCELLS）、河野秀俊博士のグループ（QST）、A.Martel・L.Porcar両博士（ラウエ・ランジュバン研究所（ILL）、フランス）と共同で行った溶液散乱実験・計算機解析の協奏による時計タンパク質が作る巨大複合体の構造・ダイナミクス研究を紹介する^[1]。

シアノバクテリアは3つのタンパク質KaiA、KaiB、KaiCがATP存在下において24時間周期で解離会合を繰り返す概日時計を持っている^[2]。今回の研究対象は、3つのタンパク質が会合したABC複合体である。このABC複合体の構造は、2017年にクライオ電顕によって初めて報告された^[3]。それによると最大のABC複合体は12個のKaiA、6個のKaiB、6個のKaiCからなる巨大複合体であり、円筒状のBC複合体（図(a)黄色・灰色）^[4,5]をベースに、円筒上部のKaiB6量体リング（図(a)黄色）の外周を12個のKaiAがシャンパーハット状に取り囲んでいるものであった。提示された構造では、KaiAの2つのドメインの内、KaiBに結合しているC端ドメインの配置は判明しているが（図(a)水色・ピンク）、12個のN端ドメインの配置は不明である。これはN端ドメ

インが揺らいでいる事が原因であると推定されるが、このような揺らぎを含んだ構造の解析は、現時点でもクライオ電顕を用いても困難な課題である。本研究では、この構造揺らぎを含んだA₁₂B₆C₆の全長構造の解明に取り組んだ。

まず溶液散乱実験では、溶液中の不要物をサイズ排除クロマトグラフィーにより除去し、溶出溶液を直接測定することで目的分子の散乱を高精度で取得する「SEC-SAS」法を適用した。近年、生物用SAXS装置ではSEC-SA<X>Sは必須となっているが、本研究ではSEC-SA<N>Sも用いている^[6]。SAXS散乱データはタンパク質複合体の全体構造を反映している（図(b)上）。一方、本研究のSANSでは、KaiBとKaiCは内部の水素の75%を重水素化し、非重水素化KaiAとで構成される複合体試料を調製し、100%重水溶媒中で測定を行った（図(b)下）。この場合、中性子散乱における

同位体効果から複合体中のKaiB、KaiCからの散乱は観測されず、KaiAからの散乱のみが観測される。つまり、この測定法＝逆転コントラスト同調SANS（iCM-SANS）法^[7]では、N端ドメインを含むKaiAの配置情報のみを得ることができる。

解析では、計算機モデリング、SAXS・SANS散乱データ、分子動力学（MD）シミュレーションを用いている。まず、計算機モデリングでは、クライオ構造を基にKaiAのN端ドメインの存在可能な全ての位置を探索し、2,000万個のKaiAのN端ドメインを含む全長構造モデルを作成した。次に、各構造モデルのSAXS曲線と実験SAXS曲線（全体構造を反映）を比較し、実験データを反映する3構造群（A,B,C,構造群、計8,600構造）を抽出した。更に抽出した構造のSANS曲線と実験SANS曲線（KaiA構造のみを反映）の比較を行い、A構造群に属する250個の構造のみが実験結果

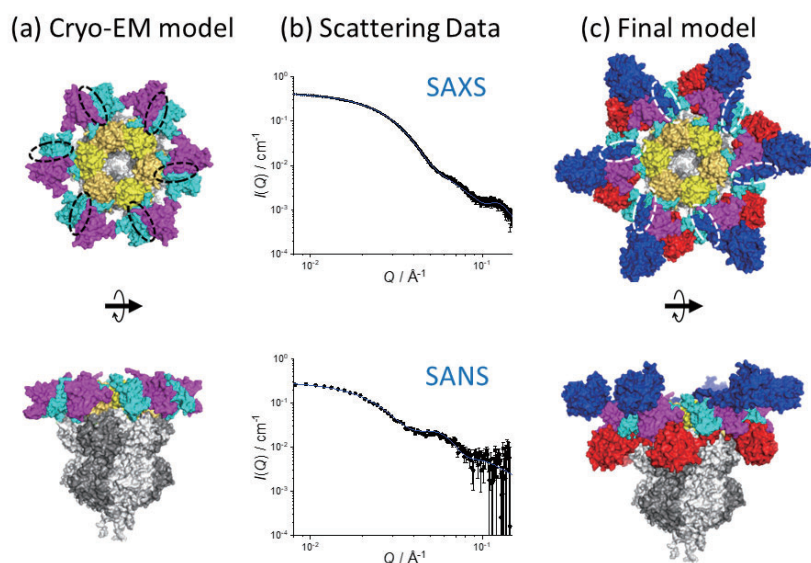


図 (a) クライオ電顕により明らかにされたA₁₂B₆C₆構造。KaiAのC端ドメイン（水色・ピンク）、KaiB（黄色）、KaiC（灰色）。黒点線領域はKaiCとの相互作用部位。(b) 上：SAXS、下：SANS。黒点は実験データ、青線は最終構造より求められた散乱曲線。(c) 最終安定解。KaiAのN端ドメイン（赤色・青色）。白点線領域はKaiAのリンカー領域。

を反映していることを明らかにした。ただし、この構造は散乱データを反映しているがエネルギー的安定性は不明であり最終解とはできない。そこで、対称性の検討により250個の構造を8つのサブ構造群に分類し、各サブ構造群に対しMDシミュレーションを行った。その結果、長期的安定性を示した1つのサブ構造群を最終安定解として採用した。

図(c)に示すように最終安定構造では、2種類のKaiAのN端ドメインの配置が存在する。1つの配置(赤)は隣り合うKaiAのC端間であり、KaiAのリング構造の安定化に寄与していることが推察された。もう一つ位置(青)では、白点線で示したリンカー部分が2つのKaiAのC

端間に存在するKaiCに対する相互作用部位を覆っている(図(a)黒点線、(c)白点線領域)。この遮蔽によりこの部位にKaiCが結合することを防ぎ、複合体の構造安定化に寄与していると考えられる。

以上に示したように、(1)2種類の溶液散乱を用いることで、複合体の全体・部分構造の情報を取得し、(2)結晶構造解析・クライオ電顕などの原子レベルの構造情報を基に計算機を用いて構造モデルを構築し、(3)上記データとMDシミュレーションにより、揺らぎを含んだ大型複合体の構造解析に成功した。本研究により今後の統合的構造解析への一つの道標を示せたと考えている。



すぎやま・まさあき
京都大学理学研究科物理学第2専攻博士後期課程
単位取得退学。
京都大学博士(理学)
九州大学理学部物理学科 助手
京都大学原子炉実験所* 准教授
京都大学原子炉実験所* 教授(現職)
*: 2018年より京都大学複合原子力科学研究所
に名称変更。

参考文献

- [1] Y. Yunoki, A. Matsumoto, et al., *Commun. Biol.* **5** (2022) 184.
- [2] T. Kondo, et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **90** (1993) 5672.
- [3] J. Snijder, et al., *Science* **355** (2017) 1181.
- [4] M. Sugiyama, et al., *Sci. Rep.* **6** (2016) 35567.
- [5] R. Tseng, et al., *Science* **355** (2017) 1174.
- [6] N. T. Johansen, et al., *Acta Cryst.* **D74** (2018) 1178.
- [7] M. Sugiyama, et al., *J. Appl. Cryst.* **47** (2014) 430.

共同利用研究ハイライト

金属酵素や金属触媒が反応活性種を生成するうえでその配位環境はどんな役割をもつのか？

藤井 浩 奈良女子大学大学院自然科学系 教授

生体内にはたくさんの金属酵素があり、それぞれ生命を維持するための必須の反応を担っている。生体内の遷移金属イオンは体重70kgの人でも最も多い鉄でさえ5g程度しかなく、銅やニッケルなどにいたっては数十mgしかない。こんなわずかな金属イオンでも70kgもある我々の体の生命活動を支えられるのは、個々の金属酵素の機能が非常に優れている(少量でも大量の反応ができる)ためである。実際、自然界の酵素は位置選択性、立体選択性、触媒効率などさまざまな面で優れていて、その機能は我々化学者が作り

出した触媒を遙かに凌駕している。金属触媒の反応も生体内の酵素の反応と共通する点が多々あるため、金属酵素の機能や仕組みを解明する研究は触媒開発の面からも有用であると考えている。私の研究室では、生体内の金属酵素がいかんして優れた機能を獲得しているのかを活性部位のモデル錯体や変異体酵素を用いて電子構造の立場から解明する研究を行っている。ここでは、最近論文として報告した末端酸化剤の活性化機構に関する研究成果を紹介する。

金属酵素や金属触媒の反応の多くは、活性反応中間体を作る過程と活性反応

中間体が反応する過程に大きく分けることができる(図1)。活性反応中間体は名前の通り高い反応性を有しているため、その反応は速く、通常の実験中では検出できない。したがって、金属酵素や金属触媒の反応効率は、活性反応中間体を生成する過程に依存している。つまり金属酵素や金属触媒の効率は、いかに速く活性反応中間体を生成するかにかかっている。活性反応中間体を生成する過程は、まず酵素や触媒の金属イオンと酸化剤(末端酸化剤)の反応から始まる(図1)。金属イオンに配位した酸化剤は、酸化剤自身の結

合を切断することにより活性反応中間体を生成する。活性反応中間体は、酸化剤の結合開裂反応から高い反応性を獲得しているのである。では金属酵素は、いかにしてこの反応過程を加速しているのでしょうか？私たちはこの疑問に答えるため、末端酸化剤として次亜塩素酸イオンを用いて活性反応中間体生成過程の研究を行った。次亜塩素酸イオンは、洗濯や掃除で使う漂白剤の主成分であり、また私たちの体内の白血球内でも合成されて、体内に侵入した細菌を撃退するために使われる酸化剤である。

ヘム（鉄ポルフィリン錯体）が次亜塩素酸イオンによって活性化される過程を種々の分光法を用いて研究した結果、次亜塩素酸イオンが鉄イオンに結合した錯体（ヘムが活性化される直前の状態）を世界で初めて捉えることに成功した。この状態をさらに詳しく研究した結果、次亜塩素酸イオンが結合を切断して活性反応中間体を生成する速度は、金属イオンに結合するその他の分子（配位子）の電子的な効果によって決定されることを明らかにした。この効果はすでに「push効果」として知られていたが、我々の研究は「push効果」の中身をも明らかにした。これまでの多くの研究者は、「push効果」を配位子からの金属イオンを介した酸化

剤への電子供与と捉えていた。しかし、私たちの分光学的研究は、「push効果」は酸化剤から金属イオンの電子の流れを配位子からの電子供与が堰きとめていることであることを示した（図2）。つまり電子の流れが逆であるということを示した。酸化剤は金属イオンに結合することにより活性化されている（結合が切れやすくなっている）と考えられていたが、実際はその逆であり、不活性化されていた（結合が切れにくくなっていた）のである。では、どうして結合が切れにくくなったにもかかわらず、活性反応中間体をより速く生成できるのでしょうか？酸化剤自身が結合を切る反応は、結合開裂反応であるためエネルギー的に不利な反応であり、酸化剤単独では自発的に起こりにくい反応である。しかし酸化剤が金属イオンと結合すると、酸化剤の結合が切断した後の状態が切断する前の状態より安定となり、エネルギー的に有利な反応となるため自発的に素早く起こると考えられる。酸化剤の結合の切れ方にも反応にとって良い切れ方と悪い切れ方がある。これまでに、酸化剤がどのような切れ方をするかが議論になることが多々あった。酸化剤の切れ方はもちろん自然（エネルギー）が決めているはずである。私たちはこの考え方に基づいて、酸化剤の結合の

切れ方を予測する新しい考え方も提案した。

ここで記した研究は、分子科学研究所の施設利用の制度を活用させていただいた成果である。私が所属するような規模の小さな大学では運営経費の削減で大型研究機器の更新がほとんど不可能な状態になっている。こうした状況は他の多くの大学でも直面している問題であると考えます。分子科学研究所の共同利用施設の存在は、多くの研究者に研究を継続する機会を提供し、日本の研究のすそ野を広げるために大きく貢献していると考えます。今後もこうした制度の存続を切望する。また、外部の研究者がすぐに公開機器を活用できるのは、それらを支えるスタッフの力があるからである。機器を購入、設置するだけでは外部ユーザーが利用することは不可能である。それらが、維持、管理されているから成り立っていると考えます。今後もこの体制が維持されることを望む。毎回分子研を訪問すると、多くの方にお世話になっている。特に今回の研究では、機器センターの藤原さん、伊木さん、上田さん、岡野さん、長尾さん、高山さん、兵藤さんにお世話になりました。この場をお借りして御礼申し上げます。

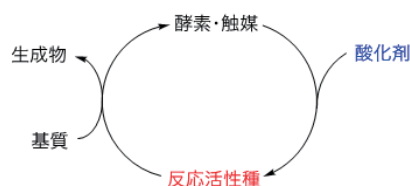


図1. 金属酵素や金属触媒の反応機構。

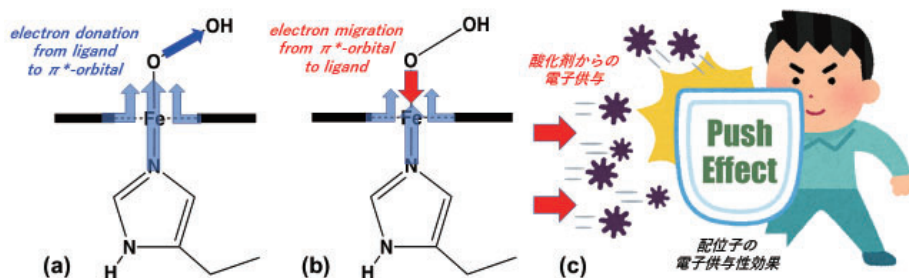


図2. Push効果とは？ (a)これまで多くの研究者が考えるpush効果の電子の流れ。金属イオンに結合する配位子が酸化剤の空軌道に電子を押し込むことで酸化剤の結合が切断する。分子軌道計算をしてもこんな軌道はない！ (b)我々の研究から提案するpush効果の電子の流れ。配位子からの電子は金属イオンの電子密度を増加し、酸化剤からの電子の流れを食い止めている。(c)我々が提案するpush効果のイメージ図。

参考文献

- [1] Z. Cong, S. Yanagisawa, T. Kurahashi, T. Ogura, S. Nakashima, and H. Fujii, *J. Am. Chem. Soc.*, **2012**, *134*, 20617-20620.
- [2] S. Yokota and H. Fujii, *J. Am. Chem. Soc.*, **2018**, *140*, 5127-5137.
- [3] S. Yokota, Y. Suzuki, S. Yanagisawa, T. Ogura, S. Nozawa, M. Hada, H. Fujii, *ACS Catalysis*, **2022**, *12*, 10857-10871.



ふじい・ひろし

1990年京都大学大学院工学研究科分子工学専攻で学位取得後、北海道大学理学部化学科助手、ミネソタ大学化学科博士研究員、山形県テクノリス財団生物ラジカル研究所主任研究員を経て、1998年より分子科学研究所助教授。2001年より岡崎総合バイオサイエンスセンター助教授。2014年より現職。

共同利用研究ハイライト

細胞内のヘム濃度を感知するタンパク質の構造機能相関

澤井 仁美 長崎大学大学院工学研究科 准教授

すべての生物は「鉄」を利用して生命を維持している。たとえば、ヒトが呼吸をして肺に取り込んだ酸素を運ぶ赤血球中のヘモグロビンには、鉄がヘム（ポルフィリン鉄錯体）の形で多量に含まれており、その中心鉄に酸素分子を結合させて全身に供給している。また、遺伝子合成や物質代謝など生命維持に不可欠な生理機能を担う酵素は、鉄を活性中心に含んでいるため、生物は鉄がないと遺伝情報を保持することができない。バクテリアの場合、正常に増殖するためには1細胞あたり 10^{-6} M（ヒトの 10^{12} 倍）程度の鉄が必要となるため、鉄源となるヘム鉄を積極的に獲得する方法を進化させている。動物に感染する病原菌（ペスト菌・コレラ菌・ジフテリア菌など）や腸内細菌（乳酸菌・ビフィズス菌など）は、ヘムの生成遺伝子を欠損したヘム栄養要求生物（heme auxotroph）であるため、動物の血液や腸管に住み着いて赤血球中のヘモグロビンからヘムを奪取して鉄栄養として利用できる独自のシステムを進化的に獲得している^[1]。しかし、このようなバクテリアのヘム獲得システムでは、1個の赤血球を壊すと10億分子以上のヘムが放出されるので、菌体内に多量のヘムが流入し、鉄

源として利用されないヘムは菌体内に遊離してしまう。遊離のヘムは、活性酸素種を発生させる「細胞毒」となるため、菌体内のヘム濃度を感知して一定の濃度に調節するタンパク質が存在している。しかし、どのようにしてヘムを感知しているのか、ヘムを感知した情報をどのように伝達し菌体内のヘム濃度を調節しているのかなど、詳細な分子メカニズムは未解明であった。

本研究では、新生児の敗血症・髄膜炎・肺炎、さらには乳牛に乳房炎をもたらす酪農経済に影響を及ぼすアガラクチア菌 *Streptococcus agalactiae* におけるヘム濃度センサータンパク質PefRの構造機能相関を解明し、細胞内のヘム濃度を感知する分子メカニズムについて研究した^[2]。菌体の生存に必要なヘム濃度では、PefRはヘムエクスポーター遺伝子の上流に結合してその発現を抑制している。宿主の血中から菌体内にヘムが流入して菌体内のヘム濃度が上昇すると、PefRは遊離ヘムを感知（結合）し、ヘムエクスポーター遺伝子の上流から解離する。これをスイッチにして、ヘムエクスポーターの発現が促進し、余剰なヘムが菌体外へと排出される。つまり、PefRはヘムをエフェクターとするリプレッサー型の転写調

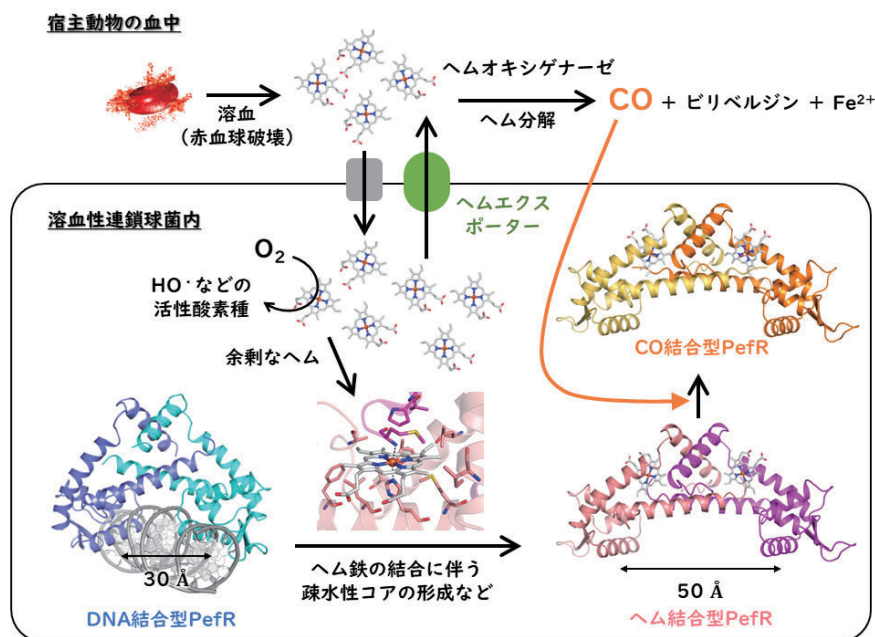
節因子として機能している。PefRがヘムを結合して標的DNAから解離する分子メカニズムを理解するために「DNA結合型」「ヘム結合型」などの各状態におけるPefRを用いて単結晶を調製し、X線結晶構造解析により立体構造を決定した（図1）。PefRは二量体を形成しており、ヘムはN末端の主鎖窒素ともう一方のサブユニットに存在するHis114による6配位構造をとって結合していた。この結合により、ヘムの周辺の疎水性アミノ酸側鎖の配向が変化することで、DNA結合ドメイン間の距離や配向が変化して標的DNAに結合できない構造に変化することを明らかにした。さらに、標的DNAから解離したヘム結合型PefRのヘム鉄には、マッコウクジラのみオグロビンと同程度の結合親和性で一酸化炭素COが結合することも見出した。哺乳類の体内において、COはヘム分解酵素（ヘムオキシゲナーゼ）による酸素添加反応の副産物として生じる分子であるが、神経細胞保護や抗炎症作用に関与するシグナル分子として機能している。一方で、バクテリアの菌体内にCOが存在すると死滅や休眠を招いてしまうため、バクテリアはCOを発生させずにヘムを分解する独自の酵素を有していること

が知られている^[3]。したがって、ヘムを感知（結合）して標的DNAから解離したPefRは細胞質中に遊離しており、ヘム分解産物であるCOが菌体内に入ってきた時にCOを安定に結合して捕捉する役割も担える可能性を提案した。

本稿の内容は、兵庫県立大学大学院

理学研究科の城 宜嗣先生の研究室で助教をしていた頃の研究成果です。この研究は、所属研究室だけでなく、生命・錯体分子科学研究領域の青野 重利先生との「共同利用研究」により精力的に進めることができました。城先生、青野先生をはじめ、多くの共同研究者の

先生方と学生さん達に心から感謝申し上げます。私は十数年前に青野先生の研究室の博士研究員だった経緯もあり、本研究では共同利用研究として色々な実験装置を使用させていただきました。所内に理解のある共同研究者がいる場合は円滑に共同利用研究を進められると思いますが、そうでない場合はどこに何を持ち掛ければよいのか少し不安な感じもします。共同利用研究の素晴らしさや利用方法がもっと広く知れ渡り、たくさんの研究者が分子研を訪れ、より多くの輝かしい研究成果が分子研から発信されるように期待するとともに、私も継続的に利用させていただきたいと考えております。今後もよろしくお願い申し上げます。



X線結晶構造解析により明らかにしたDNA結合型・ヘム結合型・CO結合型のPefRの立体構造をそれぞれ青色と水色、ピンク色とマゼンタ色、黄色とオレンジ色のリボン図で描いている。DNA領域とヘムは灰色で示している。PefRが菌体内で遊離している余剰なヘムを結合すると、ヘム周辺の構造変化をトリガーとしてDNA結合部位の距離や配向が変化してDNAに結合できない構造に変化する。ヘムを結合したPefRはCOを安定に結合する性質も備えていることも明らかにした。

参考文献

- [1] T. A. Rouault (2004) *Science* **305**, 1577-1578.
- [2] M. Nishinaga, H. Sugimoto, Y. Nishitani, S. Nagai, S. Nagatoishi, N. Muraki, T. Tosha, K. Tsumoto, S. Aono, Y. Shiro, H. Sawai (2021) *Commun. Biol.* **4**, 467.
- [3] A. Wilks, M. Ikeda-Saito (2014) *Acc. Chem. Res.* **47**, 2291-2298.



さわい・ひとみ

博士（理学）を取得後、2006年より分子科学研究所にて博士研究員、日本学術振興会特別研究員、特任助教、2013年より兵庫県立大学大学院生命理学研究科にて助教、2022年5月より長崎大学大学院工学研究科の准教授として着任。生体内の鉄の動態と機能について、鉄イオンの感知・輸送・貯蔵・利用に関わる種々のタンパク質が相互に働く仕組みを、分子にとどまらず細胞組織のレベルでも解明することを目指して研究を展開している。

施設だより

高性能分子シミュレータの更新

計算科学研究センター 岩橋 建輔

最初にお詫びしなければならないのは、2022年12月1日に予定していた高性能分子シミュレータの運用開始が2023年2月上旬となってしまいました

た。運用再開を待たれていたユーザーの方々には心からお詫び申し上げます（写真1）。

今回の調達ではこれまでにない問題

に直面しました。既設の冷却塔を再利用するか同じ場所に作り直す工事を行うため、異例の2か月の運用停止期間を設けました。また、物不足による納期が遅れ

る場合の想定も入札前に初めて行いました。一方、既存の大容量ストレージの老朽化のため、2か月しか再リースできない状態のため、納期の遅れが運用停止期間の増大に直結してしまいました。また、次世代のCPUやGPUの導入も時期的に不可能となりました。

新システムの概要ですが、運用期間は6年で、CPUはAMD 7763を採用し、通常の演算ノード804台、大容量メモリ搭載ノード14台、NVIDIA Tesla A100をノード当たり8台搭載したGPUノード16台を導入しました。CPUのコア数は旧システムの約2.6倍の106,752コア、共有ストレージの容量は14.8 PBとなっています。また、ノード間接続はInfiniBandとなっています。共有ストレージのI/Oの負荷を少なくするため、ローカルの一時保存領域として1.5 TBのNVMe SSDストレージを初めて導入しました。

CPUはAMD製のCPUが導入されましたが、入札前の段階ではIntel製のCPUと互角で最後まで我々でもどちらになるか予測できませんでした。これまでの仕様書ではCPUの性能の指標として1秒間あたりの浮動小数演算数(FLOPS)が用いられていましたが、この指標を使うとAVX512命令のあるIntel製のCPUが明らかに優位になるた

め、それぞれのCPUに最適化された分子動力学シミュレーションプログラムGromacsのベンチマーク結果を性能の指標としました。しかし、CPUが高性能でも消費電力が多ければ設備の問題で導入できませんし、電気代に直結するため、省電力のシステムであることも重要視しました。その結果、電力面で優位なAMD製のCPUで空調設備を使わない完全密閉型の水冷式システムとなりました。

今回の更新で時間がかかることが予想されたのはユーザーのデータの移行でした。今回は前回の移行時と比べて、ファイル数は10倍、容量は3倍という状態でした。2017年10月からの5年間の増加をグラフにしたものが図1と図2です。大容量ストレージで使われているLustreファイルシステムは多くの細かいファイルを扱うのが苦手であるため、運用停止後、各ユーザーのデータをアーカイブ化して高速にデータを転送することで、移行に要する時間の短縮を図りました。

計算科学研究センターの利用者数は1200人弱、グループ数は約280グループで、それぞれ過去最大を更新しています。これはすぐに使える豊富なライブラ

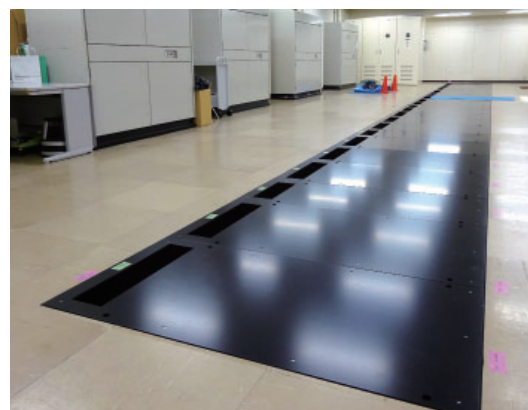


写真1 2022年11月現在、架台のみで演算ノードは未設置。

リアプリケーションがあるのと使いやすいという点が分子科学コミュニティに認められているためと思っています。計算科学研究センターではユーザー目線に立ち、システム運用、ユーザーサポート、アプリケーション導入を行ってまいりますので、今後とも計算科学研究センターの利用をお願いします。

最後に高騰する電気代への対応についてです。4月にはキロワット時間あたりの単価が20円台でしたが11月には27円台になり、今後さらに高くなりそうです。新システムは旧システムと比べて電力が6%ほど減る見込みですが、電力単価がさらに上がった場合は来年度以降一部ノードの停止も検討せざるを得ない状況となっていますので、電力単価が下がるのを願うばかりです。

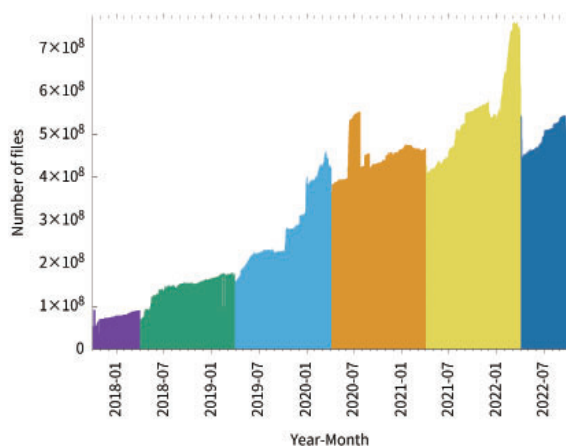


図1 過去5年間の全ユーザーのファイル数。

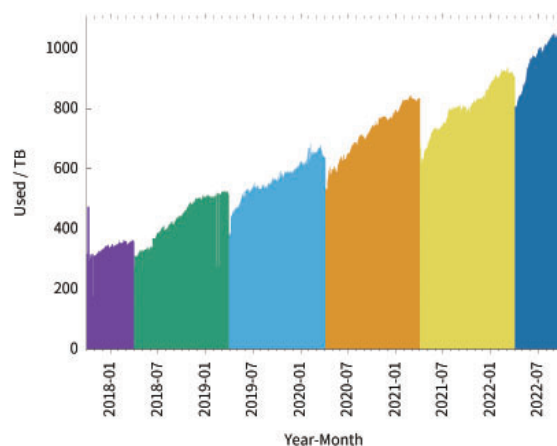


図2 過去5年間の全ユーザーのファイル容量。

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

共同利用は大学共同利用機関である分子科学研究所にとって基幹的なアクティビティである。この研究所の柱とも言うべき共同利用は、昨今のコロナ禍において遅滞を余儀なくされてきた。移動や対面の自粛は従来のスタイルによる共同研究や研究集会が遂行できないことを意味し、on-siteでの共同実験や対面での議論の場は壊滅的な打撃を受けた。しかしこの3年間（2020-2022年度）においても、共同利用を提供する我々分子研サイドとしては決して歩みを止めずに共同利用の内容充実に努めてきたつもりである。すなわちUVSORでは汎用性のある先端利用、先端的顕微分析手法の共同利用提供、また結晶スポンジ法による分子構造解析などに代表される分子研ならではの世界的にも優位性のある共同利用が展開されつつあり、またクロスアポイント教員が先導する共同利用の新展開も実りつつある。さらにNMRプラットフォームの共同利用展開も開始された。この間、on-webによる研究会実施のプラットフォームの提供も定着し、新たな研究会や情報交換のスタイルが定着した。これらの展開によってコロナ禍にあってもなんとか全国共同利用の活動を死守し維持してきた3年間であった。また共同利用の変革と連動してコロキウム、大学院入試、所内会議など研究所内の多くの活動が大きな変化を遂げた。

2022年後半からようやく国内外の旅行を含めた様々な活動制限が緩和され漸くポスト・コロナ、ウィズ・コロナの生活の形が見えてきた。2023年度には、コロナ禍において確立したon-webでの活動と、従来のon-siteの共同利用が両立共存することになりそうである。両方の「いいとこ取り」をしてコロナ以前のアクティビティを越える活発な共同利用を実現していきたい。

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 (12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	47
協力研究（マテリアル） ^(注3)	57	64	81	69	44	66	36
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	5
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	93

（注1）課題研究・協力研究の通年課題は前期と後期の2区分として、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、2022年度以降は「協力研究（マテリアル先端リサーチインフラ）」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8月31日	森野ディスカッション	宗像 利明（公益信託分子科学奨励森野基金）	144名
2022年9月26日～27日	金属酸化物表面と薄膜の構造化学	大西 洋（神戸大学大学院理学研究科）	33名
2022年9月28日～29日	イオン液体の構造と物性予測のデータ解析技術	阿部 洋（防衛大学校機能材料工学科）	67名
2022年11月8日	軟X線共鳴散乱・反射率 ソフトマテリアル・ソフトマターのナノ～メソスケール構造解析	荒木 暢（Diamond Light Source, Physical Science）	78名
2022年11月28日	UVSOR-IIIにおける多様な量子ビームの発生と先端利用に関する研究会	平 義隆（分子科学研究所 極端紫外光研究施設）	39名

若手研究会等

開 催 日 時	研 究 会 名	提 案 代 表 者	参加人数
2022年8月3日～5日	第20回 ESR 夏の学校：ESR 装置の基礎と原理・生体応用	平野 弘樹（神奈川大学大学院理学研究科理学専攻）	70名

運営に関わって

組頭 広志

東北大学
多元物質科学研究所
教授

所変われば、品(運営)変わる

くみがしら・ひろし/東北大学理研究科物理学専攻で博士の学位を修得後、東京大学工学系研究科応用化学専攻 助手・講師・准教授、KEK 物質構造科学研究所 教授、を経て2018年から東北大学多元物質科学研究所 教授。専門は、酸化物の表面・界面物性。



2018年度から2021年度までの4年間、UVSOR 運営委員を仰せつかりました。ちょうど2018年度の4月に、高エネルギー加速器研究機構 (KEK) のPFから東北大学の多元物質科学研究所に異動したのですが、諸事情あって東北大とKEKのクロスアポイントを行っておりました。そのため、東北大ではなく、KEK-PFの所属としてこの委員会に参加したことになります。私は、2001年から約10年、ユーザーという立場でPFに常駐して研究を行った後、2011年からはKEKのスタッフとして働いておりました。現在は、再びユーザーとして、PFをはじめとする放射光施設を利用しております。そのため、放射光施設の運営は外と中から見てよく知っているという自負があったのですが、施設が変わると随分運営が違うことを知る良い勉強になりました。まさに、「所変われば品(運営)変わる」です。

とくに驚いたのが、UVSORでは課題の評価を、ビームライン担当者を含む審査委員で決定しているということでした。外部レフェリーが課題審査で評点をつけ、それにしたがってほぼ機械的に配分時間が決まるPFやSPring-8の運営が「基本」だと思っていた私にとっては、PFと同じ全国共同利用施設で違う運営をしていることに驚きを感じたことを覚えています(知らなかっただけですが)。このUVSORの方式ですと、BL担当者がユーザーの実験状況

などを熟知しているのも、非常にきめ細やかな運営が出来ているのだと思います。一方で、固定ユーザーが多くなるという欠点もあります。異論はあると思いますが、ざっくりというと、書面審査という公平性やユーザーの入れ替えという点では、SPring-8 > PF > UVSORで、実際の実験におけるきめ細やかな配慮という点ではUVSOR > PF > SPring-8という感じでしょうか？なお、近年の申請数(競争率)の増加により、UVSORでも2023年度から外部審査委員会が組織されるようになるということです。

どのような運営や組織形態も一長一短です。どのような形が良いとは言えません。UVSORは光源性能的に2度にわたるアップグレードを行い、低エネルギー光源としては世界トップレベルの性能を誇っています。さらには、走査型透過 X 線顕微鏡や光電子運動量顕微鏡など新しい放射光計測技術の開発も積極的行われています。近くにあいちシンクロトロンがあり、また、かなり似たエネルギー領域のHiSORが稼働している中で、どのように施設としての独自性を指しているのか興味がありましたが、この点ではかなり戦略的に測定手法開発に投資を行い、うまくいっているという印象でした。

一方で、気になった点としては、比較的新規のユーザーへの広がりがないということと、情報発信が少ないとい

う点です。これに関しては、論文登録などがシステム化されていないという事務的な問題によるところも多々あるかと思います。光源もエンドステーションも世界レベルのものが整備され、今後もさまざま更新計画が進んでいる状況を鑑みますと、今後は情報発信が重要なのではと感じた次第です。これはやはり施設スタッフなどが積極的に「UVSOR発」の成果を発信し、国内外の新規ユーザーの獲得に努めていくことが重要かと思います。せっかく最新鋭機がそろっているのに少しもったいない気がしました。

最後に、2019年度末から新型コロナウイルス禍のため、岡崎に行く機会がなくなったのが残念でした。ようやく、運営委員の仕事にも慣れてきて、なんとなくUVSORの運営状況や今後の方向性などがわかりかけてきたところで、ほとんど気の利いた発言などをできないうちに終わってしまって申し訳なく思っております。オンライン会議は確かに便利なのですが、やはり意見を述べるのに少しハードルがあります。今後は、ハイブリッド会議などが主流になるかと思いますが、やはり共同利用施設は、人と人が会って情報交換する場ですので、何回に一回は対面をするようにしていただけると良いかと思います。

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

日原 岳彦

名古屋工業大学
教授

若手の研究を支える機器センター

ひはら・たけひこ／1995年3月東北大学工学研究科博士後期課程を修了し、博士（工学）を取得。東北大学金属材料研究所とPhilipps-Universität Marburg（ドイツ）を博士研究員として彷徨した後、2000年4月に助手として名古屋工業大学に採用。2003年に准教授、2012年から現職。電子機器の解体と改変が得意で、ナノ粒子の気相合成と装置開発、その磁性と触媒機能に興味を持つ。



2018年度から4年間、分子科学研究所機器センター運営委員を勤めさせて頂きました。業務としては、年1回の運営委員会の出席と臨時の書面審議、分子研機器センター申請課題の審査です。

分子科学研究所機器センターは、所内研究者のための共通基盤的機器整備・管理業務の他、全国の共同利用研究を推進する各種共同利用事業の代表機関としての業務を担当し、国の礎となる重要なミッションを担っています。私が外部運営委員を担当した時期には、大学連携研究設備ネットワーク（設備 NW）事業の主体機関、及びその事務局と、自然科学研究機構大学間連携推進機構（NICA）の分子研対応部課の複数業務をおこないつつながら、2021年度に終了した文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム事業の「分子・物質合成プラットフォーム」代表機関として、同プラットフォームに属する実施機関を纏める重責を担っていました。このような多忙を極める各種業務を、横山機器センター長を中心に、僅か20名程の大変少ない職員の方々に遂行している状況は、外部運営委員の立場から見たとき、非常に効率の良い運営に深い感銘を受けるとともに、全国の研究者、特に若手の研究を支えていることを改めて認識し、感謝の念に堪えませんでした。国の財政事情から、全般的に研究機関からの人員削減がおこなわれる傾向が続いていますが、分子科学研究所機器センターのような全国的に重要な業務を

おこなっているところには、人件費の厚い予算配分を強く望みます。

さて、外部運営委員の業務についてですが、2020年3月頃に始まった新型コロナウイルス感染予防のため、第12回機器センター運営委員会から、外部委員はzoomを使用したweb会議での参加になり、移動の負担は軽減されましたが、分子研の職員の方とコミュニケーションを取りづらくなったことは少々残念に思いました。また、オンライン会議は、相手の気配が感じられないため、人数が増えれば増えるほど参加意識が薄れます。また、発言のタイミングをとるのも慣れが必要で、遠慮して誰も話さないことが頻繁に生じます。そのため、自由な発想で討論するのが意外にやりにくく感じました。

分子研機器センター申請課題の審査で感じたことは、課題の重要性を書面で伝えるのは、申請者の研究者は一样に上手で、この点では日本の研究者の質の高さを反映しており、大変素晴らしいと感じたのですが、逆に、どのような測定をおこない、どのような結果が予想されるかという具体的なことを、文章として正確に表現するのは難しいものであるということを実感しました。不思議なことに、年長の申請者ほど、具体的な表現を避け、抽象的あるいは包括的に実験内容を記述する傾向があり、測定の実現性や安全性、測定結果が研究の進捗に与える影響を考

察するのが困難で、何度か追加情報を要請して再審査をおこなわせて頂きました。恐らく、年長の研究者は知識と経験が豊富で、実験内容を記述するとき、あらゆる可能性を考慮しながら一般化して表現しようとするのではないかと思います。自分も年長研究者の年齢層にいるため、自らを反省する良い機会でした。

機器センターの業務として、2021年度から前述のナノテクノロジープラットフォームに代わる文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ事業が10年間の予定でスタートしました。共用設備の利用だけでなく、その測定データを構造化して国の共有財産として登録し、物質・材料・デバイスの開発に有効活用されることになっています。この事業では、分子研はスポーク機関として参画するとともに、前事業の「分子・物質合成プラットフォーム」を意識した物質・合成横断技術領域の要としての役割を担います。計算科学研究所センターと連携して、測定データの新しい活用方を全国に向けて発信し、測定データの収集・蓄積を後押しして頂きたいと思います。短い期間でしたが、機器センターの運営に参加できたことに感謝いたします。貴センター、ならびに職員の皆様の、今後のご活躍とご発展を祈念しております。



極低温業務の効率化を目指して

機器分析ユニット 高山 敬史

たかやま・たかし／東京大学低温センター（現・低温科学研究センター）の技官として採用され、そこで数年間ヘリウム液化業務全般の修行を行い、平成2年に岡崎に赴任いたしました。液化業務はかれこれ東大時代を含めて40年以上の実務経験を身に着け、「蛇口を捻れば水道水が出てくる」が如く、液体ヘリウムも簡便に使うことができるを理念に、日頃より取り扱い易さを追求しながら努力しています。

1.はじめに

極低温の業務を遂行する上で、更なる効率化を目指して便利な装置を製作しましたので、この紙面をお借りしていくつか紹介します。

2.液体ヘリウム容器ベーキング装置

この装置は2021年3月東北大学総合技術研究会において、東大物性研の清水さんらが発表した内容を参考に製作しました^[1]。技術研究会とは技術系職員のための研究会で、分子研技術課（現・技術推進部）が発祥の地となっています。この研究会では日常業務の紹介や失敗談など現場の業務により近い発表内容が多いため、非常に参考になる話題が尽きない研究会です。

さて、液体ヘリウム容器は長期間使用していると回収配管が負圧であるため空気が混入して次第に内部が汚染されてしまいます。そこで、定期的に容器内部を温めて不純物（主に空気成分）

や水分を取り除かないと、液体ヘリウムトランスファー時にこれらが低温装置に入り込み悪影響を及ぼします。今回紹介する装置は効率的に容器に蓄積した不純物を除去する装置となっています。

製作したベーキング装置は、熱伝導のよい銅パイプの内部にカートリッジヒーターと温度測定用の熱電対を内蔵し、上部にはスウェジロックユニオンティーを接続して、分岐した配管はリード線の導入口とページ用ガスとしての乾燥空気送風口を兼ねています。使用した継ぎ手から取り出すヒーター用電線と熱電対用リード線導入部は、樹脂接着剤で固めて密閉させました。熱電対を使用した温度制御には、(株)チノーのデジタル指示調節計を用いることで、銅パイプを希望の温度に変更できます。銅パイプ内部に内蔵した昇温用カートリッジヒーターはAC電源で加熱され、交流電源であるスライダックを操作す

ることで加熱パワーを自在に変化できるのが特徴です。図1にベーキング装置システム構成図と表1に機器パーツリストを掲載しました。

この装置の操作手順を説明いたします。液体ヘリウム容器に液が残っている状態で、希望温度に設定した銅パイプをトランスファーチューブ差込口よりゆっくりと挿入すると、その際に蒸発したヘリウムガスが容器ヘッドにあるガス回収口より回収配管に送られます。次に、昇温が進みデジタル指示調節計の温度表示が80K付近（個体空気が溶け出す温度）になったところで、上部ユニオンティーの乾燥空気送風口よりエアーを送り込みます。送られた空気は銅パイプを通してヒーターで加熱され、さらに液体ヘリウム容器を昇温しながら容器ヘッドのガス回収口より、今度は、大気へ放出されます。設定した希望温度になるまで放置することで完璧なベーキングが終了すると

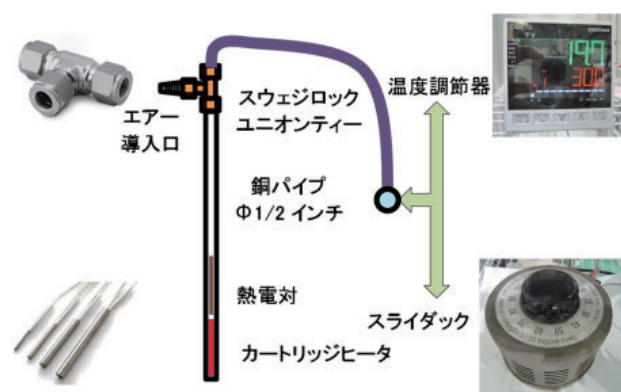


図1 ヘリウム容器ベーキング装置

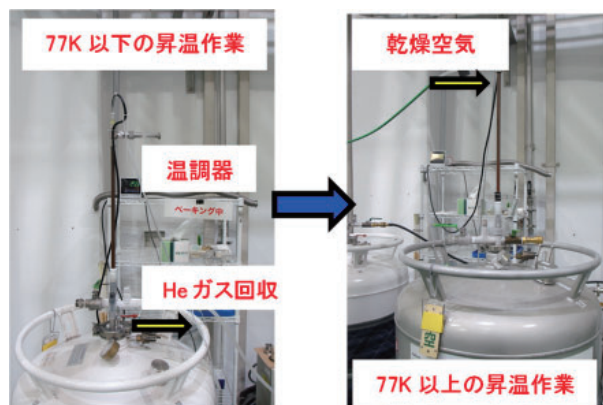


写真1 ベーキング手順

いった過程となります。写真1は実際の作業の様子をイメージしたものです。

通常、液体ヘリウム容器を昇温するには、容器内部に残った液体ヘリウムを逆トランスファーで容器が空になるまで回収配管へ全量回収して、次に、自然に昇温するまである程度放置して、最終段階として室温状態の乾燥空気で容器内部をパージする方法が主流となっていました。しかし、この旧来の操作手順では容器の昇温再生が終了するまで最低でも3～4日の工程を要してしまいます。ところが、今回製作した装置は、最短で1～1.5日という驚異的なスピードで容器の昇温再生ができてしまう優れものとなります。この装置は、業務の効率化に大いに貢献するものであり、今では手放せないグッズとなっています。

次に、このベーキング装置を運用してから気が付いた思わぬ副産物について紹介します。稀ではありますが年に数回あるかどうかという頻度で、液体ヘリウム容器を固体空気でブロック（閉塞）させる人為的ミスが起きます。ブロックを解消するには従来、温めた銅パイプを容器注入口より挿入して閉塞物を溶かす方法が一般的でしたが、この方法では固形物が溶け出した瞬間液体ヘリウム容器の内圧上昇分が一気に開放され、大量のヘリウムガスが大気へ放出してしまいます。この放出ガスは非常に冷たいため、皮膚に晒されると凍傷を負ってしまう危険もあります。しかし、当該装置を使うことで、閉塞物除去から容器昇温再生という一連の

作業において、容器を回収配管に接続してガスを回収したままで行うことができます。すなわち、再生完了までは一切、外部にヘリウムガスを漏洩させずに済むのです。ガス損失ゼロはもちろん凍傷のリスク回避ができるのは嬉しい誤算でした。

3. 蒸発ヘリウムガス加温器

インターネット検索すると様々な商品を見つけることができます。熱交換器用の部材も例外ではありません。従来、液体ヘリウムトランスファー時に蒸発したガスの加温法として、バケツに水を貯めておき、その中にコイル状の銅パイプを通してガスを温める手法が主流でした。しかしこの方法には、いつの間にかバケツの水が蒸発していたり銅パイプの太さに制限があったりして、何かしらの欠点がありました。今でも現役で使用しているユーザーの方には頭が下がる一方です。

今回使用した熱交換器はネット検索で見つけた商品で、外径1インチのステンレス管に同じくステンレス製のフィンがらせん状に巻き付けられた部材となっています。加工オプションとしてステンレス管の端部に、真空機器では標準のNW25フランジを採用しています。このフランジを採用した理由は配管施工のブ

ス管を使用しました。フィンチューブの使用本数と長さは、蒸発ガス回収量の大小をみて決めました。同様に市販されている熱交換器には窒素ガス蒸発器がありますが、簡単に改造できないデメリットと値段も高いのがネックでした。部品構成として、今回はフィンチューブ全体をアングルで囲って架台としました。架台の下部には、移動用のキャスターもついています。更に液体ヘリウム充填時に付着した霜が解けることを想定し、滴下した水滴を受けるステンレスバットも備わっています。この装置の最大の利点は、簡単にパーツの最小単位までばらすことができ実験室の仕様に応じて変幻自在に作り変えることができる点です。写真2は製作した小型の加温器となります。これは、実際に協奏分子・山本グループの実験室に設置された超電導マグネットへの液体ヘリウム充填用に使用されており、大変好評なようです。

4. 初期予冷時ヘリウムガス回収装置

NMRなど超電導マグネットを使用する実験装置はヘリウム冷凍機がついていない限り、数か月に1度は定期的に液体ヘリウムを補充しなければなりません。充填の際に使用するトランスファーチューブは、液体ヘリウムの移

表1 機器パーツ構成表

カートリッジ ヒーター	AC100V 500W 10φ L: 150mm
熱電対	Kタイプ
温調器	(株)チノー DB670

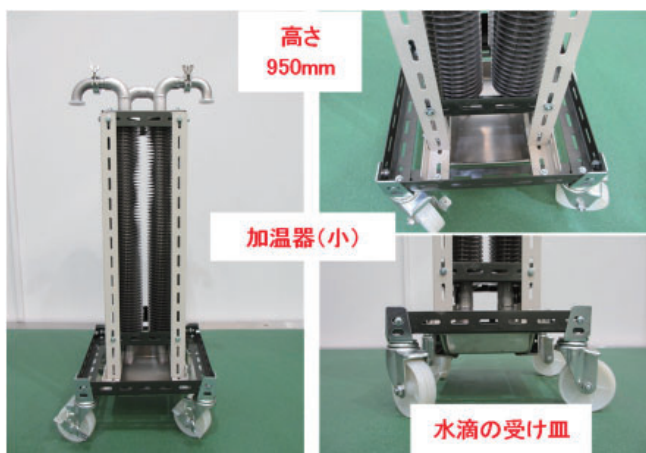


写真2 ヘリウムガス回収加温器

送初期、室温状態にあるためそのままでは温かいヘリウムガスが実験装置内に送られてしまうため、最悪マグネットがクエンチする可能性が考えられます。そこで、チューブを完全に冷却するまで液体ヘリウムを流し続けなければなりません。以前は、その予冷に使用して蒸発したヘリウムガスを大気に放出しており、抜本的な改善が必要でした。そこで、今回、冷却に使用したヘリウムガスを放出させずに回収する装置を製作しました。

図2は回収装置のイメージ図となり、部品構成は以下となります。トランスファーチューブ先端より排出されるガスの状態を目視できるよう装置本体には透明なアクリルパイプ（肉厚2 mm）を用いています。パイプ上部には各種トランスファーチューブの外径に合わせてダイナミックシール^[2]を取り付けて、パイプとの接続にはシリコンチューブを使用しました。トランスファーチューブのサイズによってダイナミックシールを簡単に交換できるのが特徴です。アクリルパイプ下部には樹脂製の逆止弁が接続され、パイプ内部の圧力が発生した時のみヘリウムガ

スが回収配管へ流れる仕組みです。逆止弁を用いることで、トランスファーチューブの抜き差しが簡素化され、煩わしいバルブ操作をすることなく予冷時の蒸発ガスを自動的に回収配管へ送ることができます。また、逆止弁の先端部には樹脂製のタケノコを使用しているので、簡単に回収チューブとつなぐことができます。今回、樹脂製の逆止弁とタケノコを用いた理由として、NMR近傍で使うこの装置そのものが超電導マグネットの強磁場に影響されないよう配慮した結果です。唯一、逆止弁内部のスプリングだけは金属製となりますがスプリングによる磁場への影響はほとんどないものと思われます。

実際この装置を製作して何回か試運転を行いました。今まで大気に放出していたヘリウムガスはほぼ100%回収できるようになりました。また、旧来の移送管予冷方法では冷却の最終段階でトランスファーチューブの先端に霜が付着して相手側装置の液注入口にチューブが差し込めないという事態に陥りましたが、この回収装置を使うことによりチューブ先端部への霜の付着は一切起きなくなりました。透明なア

クリルパイプ越しに冷却状態が確認でき、予冷完了のタイミングも分かりやすく、当初懸念された、アクリルパイプの凍結による破損事故も今のところ起きていません。実際にアクリルパイプを液体窒素に漬けて耐寒テストを行いましたが、よほどの物理的衝撃が加わらない限りパイプが破損しないのは実証済みです。

5. まとめ

本紹介では、極低温業務に携わる中で仕事の効率化を目指して種々な便利グッズを開発しました。昨今、ヘリウムガスの入手が困難な状況が続いていますが、ヘリウムガス回収率を向上させることにより貴重な資源を守ることにはもちろん、ガス損失を最小限に抑えることで中長期的に低温実験が持続可能となります。ただし上記は、ヘリウムユーザー皆さま方の力をお借りしないと実現できませんので、今後とも極低温業務へのご理解およびご協力のほど、よろしくお願い申し上げます。

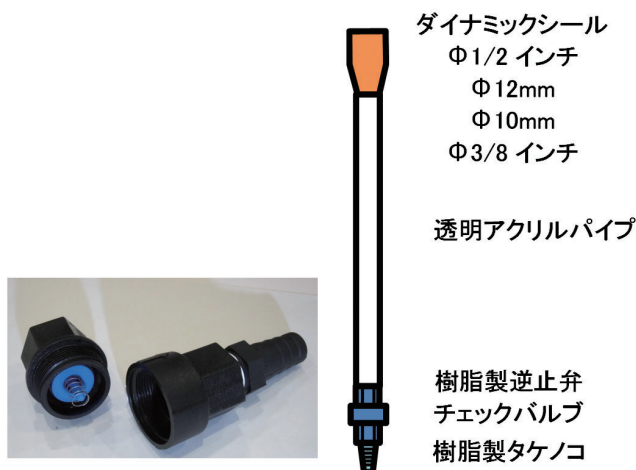


図2 初期予冷時回収装置

参考文献

- [1] 清水（野村）未来 他 液体ヘリウム容器用自動昇温装置の製作 東北大学技術研究会2021報告集（2021）.
- [2] 加藤清則 他 ダイナミックシール 高エネルギー物理学研究所1986報告集（1986）.

総研大組織改編と分子科学コースの設置

総研大は2023年4月より、これまでの6研究科（文化科学研究科、物理科学研究科、高エネルギー加速器科学研究科、複合科学研究科、生命科学研究科、先導科学研究科）20専攻の体制から、先端学術院のもとで20コースを設置する体制へ移行します。それにもなつて、物理科学研究科の中で、分子科学研究所を基盤機関としていた構造分子科学専攻と機能分子科学専攻の2専攻は、「分子科学コース」へと統合されます（図1）。

総研大は、大学共同利用機関に専攻をおくことによって、先端研究や大型プロジェクト研究の現場を活用し、特定の分野に集中した研究者集団を教授

陣とする高度な専門教育と研究指導を特色としています。今回の改組は、総研大が持つこのような特色を活かしながらも、研究科／専攻の壁を取り払うことにより、教員・学生の所属に捉われず複数の基盤機関で研究を実施する共同指導制度による柔軟な学位プログラムの実施など、分野の垣根を超えた学位プログラムを実施することにより、複数の分野が関連する複合領域、新分野創成や異分野融合の原動力となる可能性を秘めた研究者人材の育成を目指すものです。

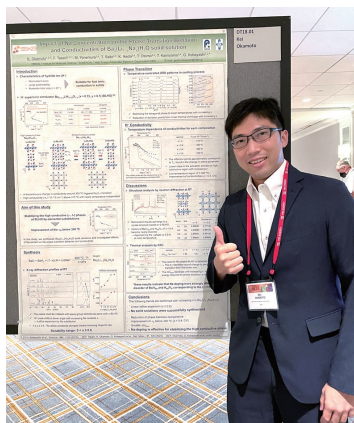
教学運営における学生教育の実質的な部分は、各コースに設置されるコース委員会（従来の専攻委員会に相当）

が責任をもって実施することになります。学位授与に関しては、コース委員会において実施した学位審査の結果を、領域教育会議（文化科学、数理情報科学、物理科学、生命科学の4領域が設置される）において審議・議決することになる予定です。運営体制においては、これまでは役員と各研究科長が構成員となっていた運営会議に、研究科長に代わって各コースのコース長が構成員となることにより、現場での意見がよりダイレクトに大学執行部と共有されることで、よりスムーズな運営が期待されます。

（青野 重利 記）



図1 先端学術院 20 コースの構成（総研大ホームページから転載）



国際学会 (23rd International Conference on Solid State Ionics) への参加

岡本 啓

総合研究大学院大学物理科学研究科構造分子科学専攻
5年一貫制博士課程5年

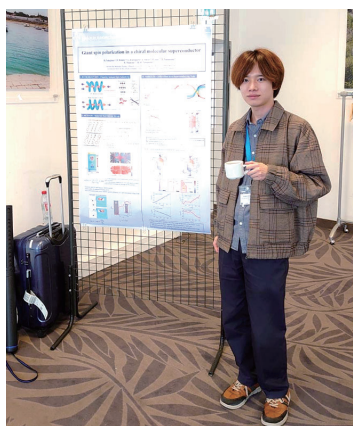
おかもと・けい

愛知教育大学教育学部中等教育教員養成課程を卒業後、2018年4月に総合研究大学院大学物理科学研究科構造分子科学専攻へ入学。小林グループにて、ヒドリドイオン導電体の物質探索およびヒドリド超イオン導電相の低温安定化に取り組んでいる。

2022年7月17日から22日かけて米国ボストンにて開催された国際学会「23rd International Conference on Solid State Ionics」に参加させていただき、ポスター発表をして参りました。私は小林グループにて水素の陰イオンであるヒドリドイオン(H^-)が酸化物イオン(O^{2-})の骨格構造内に共存した酸水素化物という物質群に着目して H^- 導電体の開発を行なっています。最近、我々は構造相転移に伴って300°C以上の温度域で超イオン導電性を発現する H^- 導電体 $Ba_{1.75}LiH_{2.7}O_{0.9}$ の開発に成功しており、この学会では $Ba_{1.75}LiH_{2.7}O_{0.9}$ のLiの一部をNa

置換することによる超イオン導電相の低温安定化について報告いたしました。2019年にコロナ禍が始まって以来、海外での発表ができておらず、この学会が海外で参加できた初めての国際学会となりました。現地に赴いて発表することで対面での議論を深めることができ、オンラインでの発表以上に人間味を感じる、とても有意義な発表となりました。オンラインで交流できることは多くのメリットがありますが、インターネットを利用したコミュニケーションツールが発展した現在でも僅かな仕草や空気感といった対面で得られる情報が人間同士のコミュニケー

ションにおいて重要であると感じました。今回、質疑の時間に質問することはできませんでしたが、セッション後に海外の研究者に質問することができ、ネイティブの方の英語に苦戦しながらも拙い英語で質問や議論ができたことが少なからず自信につながったように思います。今後もより良い成果報告ができるよう、精進して参ります。最後に、今回の国際学会への参加にあたって、旅費と参加費の御支援賜りました新学術領域研究「ハイドロジェノミクス」の関係者の皆様方にこの場を借りて厚く御礼申し上げます。



ISCOM2022, under corona-free situation

中島 良太

総合研究大学院大学物理科学研究科構造分子科学専攻
博士後期課程3年

Ryota Nakajima

I joined Prof. Yamamoto group as a Ph.D. student in April, 2020. My research activity is basically devoted to superconducting spintronics by using chiral molecular conductors.

The 14th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets (ISCOM2022) was held in person in Le Pouliguen, France, from

September 25 to 30, 2022. ISCOM is a long-running series of conferences in the field of conducting, magnetic and dielectric molecular crystals, which began in 1995 (Mittelberg ,

Austria) and had been held every two years until 2019 (Tomar, Portugal). The symposium is a forum for comprehensive and interdisciplinary discussion on the most recent

developments in the chemistry, physics, materials science, and technology of crystalline molecular solids.

ISCOM2021 was postponed for a year due to Covid-19 restrictions, then this was held for the first time in three years. This symposium had fewer participants than the previous one. I made a poster presentation entitled “Giant spin polarization in a chiral molecular superconductor”, where spin accumulation emerging in an antiparallel pair created by

CISS effect was discovered with a high polarization rate (see my poster above). I’m convinced that such research will open up new avenues for chiral spintronics.

Face-to-face symposium brings together worldwide senior and young scientists for frank discussions. This conference provided the participants with significant opportunities to exchange information and idea. And I thank SOKENDAI and IMS for their enormous financial support.

By the way, Shinkansen was halted

due to a strong typhoon on the day of departure and I couldn't reach Haneda Airport. I had to change my flight and was not sure if I would be able to arrive there before the day of my presentation. After being stuck at Toyohashi station for more than six hours, I managed to book a new flight for another day and finally made it in time for my presentation session (even though I was two days behind schedule). It could have been worse, but luckily, I avoided “the perfect storm”.

受賞者の声

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

In memory of graduation and the Sokendai Prize

I believe a person's greatness lies in believing in the unseen, seeking the unseen, and creating the unseen. And this is what I hope to do using my life.

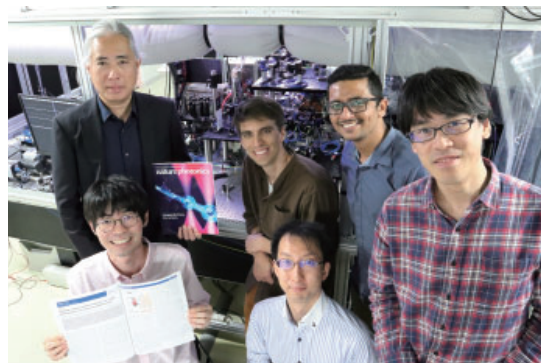
In the spring of 2017, packing my personal belongings and also my mother into the little cube car and crossing the Kanmon Straits, I headed for Aichi from the countryside of Kyushu to do my Ph.D. in IMS. It was just like the scene at the beginning of the Ghibli movie Totoro which I now feel nostalgic to remember that day.

In IMS as a Ph.D. student, I spent five and a half years observing and controlling ultrafast interaction between two single Rydberg atoms. I wrote my thesis on this topic and am grateful that the work was honored with the SOKENDAI prize. You may say that it doesn't worth taking such a long time to do this research, but I think the study deserves it, and I like my work very much.

Actually, I was not an excellent student from the beginning. I didn't know much about physics and also the experiment. I always feel very grateful to Ohmori sensei for accepting me as his student. There is nothing good about me from what you can see. But maybe Ohmori sensei has found something invisible that is not too bad inside me.

Currently, I am continuing to work with the apparatus I constructed during my Ph.D. When I designed it, I tried my best to make it a nice machine that could work for the next decades. I think this is one of the ways to show my gratitude to my sensei. At some point, I will leave IMS, and I believe the apparatus will keep on running even after I leave, which is still an unseen future event.

I hope to use some part of my life to catch what is still unseen, just like the catcher in the lab. I also wish to be someone who can find out some unseen brilliant things inside you and also inside me. Sometimes I wonder whether I would choose to go to Ph.D. in IMS if I could go back to 2017. The answer will definitely be yes. I will climb the hill passing through the path where the Sakura starts blooming and knocking on the door of Ohmori sensei, saying hi to him in a small voice.



E V E N T R E P O R T

総研大アジア冬の学校2022

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 平 義隆

総研大「アジア冬の学校」が、2022年12月21日(水)に分子科学研究所研究棟2階において開催されました。アジア冬の学校は、物理科学研究科内の5専攻で行っている研究・教育活動をアジア諸国の大学院生及び若手研究者の育成に広く供するために2004年度に始まりました。新型コロナウイルス感染拡大の影響により、2020年と2021年は開催が中止されたため、3年ぶりの開催となりました。アジア全域か

ら参加者を募り、今年度はインターンシップ生(IIPA:分子研アジア国際インターンシッププログラム)4名、マレーシアのマラヤ大学から2名、総研大生13名、広島大学1名、講演者2名、若手研究者を含めた教職員5名の計27名で実施されました。今年度のテーマは、作年度に引き続き「Challenges for New Frontiers in Molecular Science: From Basic to Advanced Researches」とし、参加者による

フラッシュトークおよびポスター発表、斉藤真司教授と熊谷崇准教授による講義が行われました。講義やポスター発表、休憩時間においても活発な議論が行われ、インターンシップ生や総研大生、参加者にとって有意義な国際交流の場になったと思います。本事業にご協力いただきました関係者の皆様にこの場をお借りして深く御礼申し上げます。



2022年9月総合研究大学院大学修了学生及び学位論文名

専攻	氏名	博士論文名	付記する専攻分野	授与年月日
機能分子科学	周(鳥居) 諭来	光ピンセット配列中の冷却リユードベリ原子を用いた超高速量子ダイナミクスの研究	理学	2022.9.28
	Damien Stephane SIMON	Disassembly Mechanism of Circadian Clock Proteins in Cyanobacteria	理学	2022.9.28

各種一覧

■分子科学フォーラム

回	開催日時	講演題目	講演者
第133回	2022年9月30日	物質科学とその美の源流をさぐる	田中 陵二（（公財）相模中央化学研究所）
第134回	2022年12月9日	ミクロとマクロを結ぶ科学：小さくてあまり面白くないものがすごくたくさん集まると新しい面白い性質が勝手に生まれてくるという話	田崎 晴明（学習院大学理学部物理学科 教授）
第135回	2023年2月3日	化学と幾何学 - 多面体の定理を活用したものづくり	藤田 誠（分子科学研究所 卓越教授、東京大学 卓越教授）

■分子研コロキウム

回	開催日時	講演題目	講演者
第960回	2023年1月13日	エネルギー応答型精密Ir錯体触媒が拓くバイオマス資源とCO ₂ の還元	斎藤 進 教授（名古屋大学学際統合物質科学研究機構（IRCCS））
第961回	2023年2月10日	固体の真空状態を破壊する一固体の高次高調波発生の物理	田中耕一郎 教授（京都大学大学院理学研究科）

■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
2022/ 6/16	山西 絢 介	採用	メゾスコピック計測研究センター繊細計測研究部門 特任助教（分子科学研究所特別研究員）	日本学術振興会 特別研究員 PD	
2022/ 6/30	金 澤 悠 紀	辞職	森六ホールディングス株式会社	計算科学研究センター 特任研究員	
2022/ 7/ 1	布 能 謙	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 特任助教（分子科学研究所特別研究員）	理化学研究所開拓研究本部 研究員	
2022/ 7/ 1	田 中 亮	採用	光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 技術支援員		
2022/ 7/ 1	ZHAO, Pei	配置換	理論・計算分子科学研究領域計算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）	計算科学研究センター 特任研究員	
2022/ 7/15	KEYA, Jakia Jannat	辞職	アメリカ：University of Michigan Research Investigator	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/ 7/31	小坂谷 貴 典	辞職	京都大学大学院理学研究科 准教授	物質分子科学研究領域電子構造研究部門 助教	
2022/ 8/ 1	中 村 彰 彦	採用	特別研究部門 准教授（クロスアポイントメント）	静岡大学農学部応用生命学科 准教授	
2022/ 8/ 1	YAN, Yaming	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 特任研究員	中国：University of Chinese Academy of Sciences Institute of Chemistry Postdoctoral research associate	
2022/ 8/ 1	久保田 亜紀子	所属変更	機器センター 技術支援員	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 技術支援員	
2022/ 8/ 1	今 井 弓 子	所属変更	機器センター 技術支援員	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 技術支援員	
2022/ 8/31	南 谷 英 美	辞職	大阪大学産業科学研究所 教授	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 准教授	
2022/ 8/31	谷 中 冴 子	辞職	九州大学大学院薬学研究院 講師	生命・錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 助教	
2022/ 9/ 1	大 原 さとみ	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		
2022/ 9/ 1	南 谷 英 美	兼任嘱託	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（兼任）	（大阪大学産業科学研究所 教授）	
2022/ 9/ 1	谷 中 冴 子	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）	（九州大学大学院薬学研究院 講師）	
2022/ 9/ 1	神 谷 美 穂	所属変更	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	物質分子科学研究領域分子機能研究部門 事務支援員	
2022/ 9/ 1	増 田 道 子	所属変更	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第二研究部門 事務支援員	特別研究部門 事務支援員	
2022/ 9/26	CHAKRABORTY, Ipsita	採用	メゾスコピック計測研究センター繊細計測研究部門 特任研究員	室蘭工業大学大学院工学研究科 博士研究員	
2022/ 9/30	古 賀 信 康	辞職	大阪大学蛋白質研究所附属蛋白質先端データ科学研究センター 教授	生命創成探究センター創成研究領域 准教授	

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/ 9/30	陳 佳 卓	退 職		特別研究部門 特任専門員	
2022/ 9/30	赤 羽 厚 子	辞 職		理論・計算分子科学研究領域 事務支援員	
2022/ 9/30	岡 本 裕 巳	併 任 解 除	(メゾスコピック計測研究センター 繊細計測研究部門 教授)	研究総主幹	
2022/10/ 1	山 本 浩 史	併 任	研究総主幹	(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 教授)	
2022/10/ 1	古 賀 信 康	兼 任 委 嘱	協奏分子システム研究センター階層 分子システム解析 教授 (兼任)	大阪大学蛋白質研究所附属蛋白質先 端データ科学研究センター 教授	
2022/10/ 1	周 諭 来	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		
2022/10/ 1	藤 川 武 敏	採 用	研究力強化戦略室 特命専門員		
2022/10/15	川 本 美奈子	辞 職	光分子科学研究領域光分子科学第二 研究部門 特任専門員	光分子科学研究領域光分子科学第二 研究部門 技術支援員	
2022/10/16	川 本 美奈子	採 用	光分子科学研究領域光分子科学第二 研究部門 特任専門員	光分子科学研究領域光分子科学第二 研究部門 技術支援員	
2022/11/ 1	萩 原 健 太	採 用	極端紫外光研究施設光物性測定器開発 研究部門 特任研究員 (IMS フェロー)	ドイツ：University of Duisburg- EssenFakultat für Physik 大学院生	
2022/11/ 1	西 岡 稚 子	採 用	光分子科学研究領域光分子科学第二 研究部門 事務支援員		
2022/11/ 1	山 本 優里佳	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		
2022/11/ 1	東 田 怜	配 置 換、 名称付与	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)	生命創成探究センター 創成研究領 域 特任研究員	
2022/11/ 1	NAM, Dayeon	配 置 換、 名称付与	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)	生命創成探究センター 創成研究領 域 特任研究員	
2022/11/ 1	野 川 京 子	配 置 換	技術推進部 (SD 担当) 特任専門員	研究力強化戦略室 特任専門員	
2022/11/ 1	野 村 恵美子	職名変更、 所属変更	研究力強化戦略室 (所長秘書) 特 命専門員	メゾスコピック計測研究センター繊 細計測研究部門 事務支援員	
2022/11/ 1	伊 藤 敦 子	所 属 変 更	メゾスコピック計測研究センター繊 細計測研究部門 事務支援員	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 事務支援員	

<出身者の消息> 岩野 薫 1989 年 4 月 分子科学研究所 理論分子科学系・IMS フェロー
1990 年 6 月 同 助手
1993 年 7 月 高エネルギー物理学研究所 放射光実験施設・助手
1997 年 4 月 高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所・助手 (助教)
2011 年 7 月 同 研究機関講師
2022 年 8 月 同 講師
2023 年 1 月 27 日 逝去 享年 61

編集後記

まず初めに、本号の発行にあたりご多忙の中原稿を執筆してくださった著者の皆様に厚く御礼申し上げます。本号で初めて分子研レターズの編集担当をさせていただきました。分子研レターズを最初から最後までしっかりと読み込んだのは初めてでしたが、非常に読みやすく、読み終えてから原稿のチェックをするために読んでいたことを思い出しました。自分の仕事を忘れて読み進めてしまったのは、著者の皆様の文章校正力によるものと思い、自分も皆様のような文章校正力を身につけたいものだと思いました。

さて、記事を読んで感じたことは、対面・オンラインの学会・研究会が増えてきたなということでした。実際、私自身も今年度はオンラインの学会に参加させていただきました。おおよそ三年ぶりのオンラインでの学会参加で、学会参加者と直に交流して、変わらない活気・熱気を感じることができました。やはり対面での学会参加は良いなと感じました。ただ、公共交通機関を利用するのも久しぶりということもあり、移動だけで疲れてしまったり、飛行機の乗り方を忘れていたり、三年のブランクを感じたりもしていました。

本号も読みごたえのあるものにできたと感じております。分子研レターズの編集委員として、次号以降も分子研内外の動向をわかりやすくお伝えできるよう努めて参ります。皆様のご指導ご鞭撻をお願い申し上げます。

編集担当 伊藤 暁

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 87 分子研と研究者をつなぐ VOL. 87 分子研レターズ

発行日 2023年3月（年2回発行）

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

愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38

編集 山本浩史（委員長）

伊藤 暁（編集担当）

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

松井文彦

原田美幸（以下広報室）

鈴木さとみ

中村理枝

デザイン 原田美幸

印刷 株式会社コームラ

本誌記載記事の無断転載を禁じます。
文責は著者に帰属します。

